

Prosjekt- og masteroppgaver innen modellering av halvledermaterialer ved FFI

FFI har i dag en betydelig aktivitet innen fremstilling av halvledere. På teorisiden studerer vi ladningsbæredynamikk både i bulk materialer, heterostrukturer og nanostrukturer. Med utgangspunkt i førsteprinsipp (*ab initio*) beregning av de elektroniske egenskapene utvikler vi numeriske verktøy som skal operere på forskjellige tids- og lengdeskalaer. Det er her av stor betydning at metodene som velges kompletterer hverandre når det gjelder sterke og svake sider. Foruten oppgaven med å komme fram til en god beskrivelse av selve fysikken, må vi også arbeide med forskjellige numeriske teknikker – spesielt Monte Carlo (MC) metoder og ligningsløser implementert med endelig element (*finite element*) eller endelig differens (*finite difference*) metodene.

Vi søker etter motiverte kandidater som er interessert i prosjekt-, master- eller evt. doktorgradsarbeid innen de områdene som beskrives nedenfor.

Forutsetninger: Interesse for teori og numeriske metoder, god skriftlig og muntlig fremstillingsevne, kjennskap til faststoffysikk.

Sommerjobber: FFI har tidligere utlyst sommerjobber for 2013. De som ønsker seg sommerjobb innen dette fagområdet kan henvende seg til kontaktpersonene nedenfor før søknaden sendes inn. Pga saksbehandlingen er den ordinære søknadsfristen satt til 1.mars, men den kan i noen tilfeller fravikes hvis der foreligger god begrunnelse. Les mer på:

<http://www.ffi.no/no/Om-ffi/Karriere/Sider/Sommerjobb.aspx>

Bemerkninger: FFI holder til på Kjeller ved Lillestrøm. Det finnes rimelige hybler i umiddelbar nærhet av instituttet som leies ut for kortere eller lengre tid. Oppgavene kan utføres mens kandidaten oppholder seg ved NTNU. Det er muligheter for å tilpasse oppgavene til søkerens faglige bakgrunn og interesser, samt at flere studenter kan jobbe sammen i et team.

Vi tilbyr oppgaver innen følgende områder:

Oppgave 1: *Kvantekorrigerede Monte Carlo teknikker*

Hvordan behandler vi en elektronisk eller optoelektronisk komponent hvor noen områder oppfører seg klassisk og andre kvantemekanisk, og hvor hvert område ville ha vært en utfordring å mestre i seg selv? Disse problemstillingene møter vi faktisk ofte, selv i komponenter som ikke virker særlig eksotiske. Spørsmålet om vi skal velge en ren klassisk eller en ren kvantemekanisk metode ender da ofte med et ja takk til begge deler.

I reversforspente dioder f.eks, kan der oppstå så høye elektriske felter i pn overgangen at to kolliderende elektroner akselereres betydelig av E-feltet i det lille tidsrommet kollisjonen varer (intracollisional field effect). Samtidig kan et elektron i valensbåndet ved posisjonen x , hvis E-feltet er sterkt, delvis overlape i energi med tilstander i ledningsbåndet i posisjonen $x+dx$, og tunnelere dit, noe som vil generere ekstra elektron-hullpar. Ladningsbæregenerasjon kan også skje ved støt-ionisasjon, som er en helt annen prosess. Denne er enkel å forstå kvalitativt, men den er ikke så enkel å hankses med når det skal regnes kvantitativt og med bakgrunn i reelle *ab-initio* båndstrukturer.

I andre elektroniske og optoelektroniske komponenter kan vi ha kvantisering på tvers eller på langs av transportretningen i deler av komponenten, mens andre deler er semiklassiske. I det teknologisk viktige, men problematiske overgangsområdet hvor semiklassisk transportteori begynner å svikte og bølgeegenskapene til ladningsbærerne blir sentrale er det ønskelig å kunne behandle blandete kvante/klassiske effekter på en enhetlig måte.

Kvantekorrigerer er en teknikk med røtter tilbake til 1960 tallet som kan bidra til å utvide gyldighetsområdet for semiklassisk simulering. Her tar man utgangspunkt i kvantetransportteori og finner analogier som kan overføres til det semiklassiske området, slik at man kan bruke partikkelbildet videre med de effektive teknikkene som allerede er utviklet der.

I denne oppgaven skal man prøve ut forskjellige kvantekorrigerede MC teknikker som er utviklet i de senere årene. Hovedtemaet i oppgaven blir å lage en ny versjon av et eksisterende MC ladningsbærertransport-program for bruk i mikrostrukturer med kvantisering.

(1-2 studenter)

Oppgave 2: Generasjons- og rekombinasjonsmekanismer i lavgaps halvledere

Generasjons- og rekombinasjonsmekanismene i en halvleder bestemmer hvor fort populasjonene i valens- og ledningsbåndene normaliseres til likevektsverdien etter en forstyrrelse. Selv om mekanismene i utgangspunktet er kjente, hersker det fortsatt stor usikkerhet om det innbyrdes styrkeforholdet mellom dem både for 2D og 3D systemer.

Da det ikke er mulig å få noe entydig svar på disse spørsmålene ved eksperimentelle metoder, vil teoretiske beregninger spille en helt avgjørende rolle.

Foruten direkte bånd til bånd rekombinasjon finnes det svært viktige sammensatte rekombinasjonsmekanismer hvor ladningsbærer-ladningsbærer vekselvirkning, ladningsbærer-fononvekselvirkning eller ladningsbærer-fellenivå vekselvirkning er involvert.

I oppgaven vil det bli lagt størst vekt på prosesser som involverer ladningsbærer-ladningsbærer vekselvirkning, da særlig med tanke på å forstå de ulike typene av Auger rekombinasjon.

Auger rekombinasjon og støt-ionisasjon er gjensidig inverse prosesser, hvor støt-ionisasjon utgjør generasjonsmekanismen og Auger blir den motsvarende rekombinasjonsmekanismen. Begge er sentrale for å kunne beskrive egenskapene til halvledere med lavt båndgap, da terskelenergien for både støt-ionisasjon og Auger rekombinasjon bestemmes av båndgapet og minker med dette.

Beregning av denne kategorien materialparametre er ganske omfattende, men resultatene vil til gjengjeld ha en ganske vid anvendelse.

(2 studenter)

Oppgave 3: Simulering av ladningsbærertransport med *ab-initio* båndmodeller

Beregning av materialeegenskaper og båndstrukturer bør helst gjøres ut fra fundamentale fysiske konstanter, ved hjelp av såkalte førsteprensipp eller *ab initio* metoder. Disse metodene er svært regnekrevende, mens perturbasjonsmetoder som $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ går raskere, men blir mindre eksakte for store

k. Felles for begge er at de kun gjelder nær likevekt, og at de heller ikke uten videre gir analytiske uttrykk for båndstrukturen som er lette å inkorporere i annen modellering.

MC simulering er en god måte for å finne ut hva som skjer med et materiale utenfor likevekt. Hvis numeriske båndmodeller benyttes, vil hverken båndstruktur eller spredninger foreligge på analytisk form, men vil være lagret på et "gitter" i **k**-rommet. Nå har det vist seg at når man skal benytte seg av numeriske båndmodeller, så kan regnetiden for den etterfølgende MC simuleringen øke dramatisk hvis algoritmene for å operere i dette diskrete **k**-rommet ikke er effektive nok. De aller fleste MC programmer opererer derfor med forenklete analytiske båndmodeller og spredninger, som ikke alltid gir et realistisk bilde av de prosessene som foregår i materialer som eksisterer langt ut av likevekt. Analytiske båndmodeller er dessuten svært lite fleksible og kan vanskelig takle en endring i materialtype eller i legeringsgraden x (som f.eks. i $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$), mekanisk tøyning i materialet eller store endringer i gittertemperatur, da dette påvirker båndmodellen svært mye i forhold til utgangspunktet. Dette kan i praksis bety at MC modellen ikke kan nyttiggjøre seg resultatene fra førsteprinsippmetoder eller andre numeriske båndmodeller. Den mangler derfor en mer generell fullbåndsbeskrivelse av de elektroniske energitilstandene.

MC programmet som nå er under utvikling på FFI kan i dag kjøre med og beregne spredninger ut fra både analytiske båndmodeller og numeriske **k**·**p** modeller. Oppgaven vil derfor gå ut på å ta et steg videre, å lage nye effektive algoritmer som muliggjør en tettere integrering av den foreliggende MC koden med førsteprinsippmetoder. I første omgang vil dette gjelde integrering med ab-initio pseudopotensialprogrammer.

(1-2 studenter)

Oppgave 4: Modellering av elektrooptiske komponenter

Studier av elektrooptiske komponenter og laserbaserte pump-probe forsøk er viktige fremtidige anvendelsesområder for MC simulering. Oppgaven består av et sett valgbare temaer hvor man skal utarbeide mer spesifikke komponentmodeller. Det er aktuelt å gjennomføre pump-probe simuleringer på lavgaps halvledere (InAs, InSb, $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$) og halvlederstrukturer. Dette har også relevans for generering av THz-stråling med femtosekundlasere, hvor MC programmet skal kunne beregne strålingsfeltet fra akselererte ladningsbærere ved samtidig påtrykk av ultrakorte laserpulser og et ytre elektrisk felt.

Innen 2D komponenter vil vi ta for oss elektron-elektron spredning, som har særlig relevans for kvantekaskade-lasere.

Et annet sentralt tema som vi arbeider mye med er ultrafølsomme avalanche fotodioder (APD's), som gjør det mulig å detektere svake signaler bestående av kun en eller noen få fotoner.

Diodemodellering innebærer at man må studere elektroner og hull samtidig, dvs at komponenten er bipolar, med en pn overgang. Dette har tradisjonelt ikke vært et aktuelt område for MC simulering tidligere, da MC studier av små og raske unipolare transistorer fått størst oppmerksomhet. Diodemodellering er derfor et lite utforsket område når det gjelder MC algoritmer og metoder.

I bipolare komponenter må man også ta hensyn til et variabelt partikkeltall, dvs at partiklene som man studerer både kan skapes og destrueres ved generasjon og rekombinasjon. I en APD skapes de

aktive "signal-partiklene (elektron-hullpar) ved optisk eksitasjon og påfølgende signalforsterkende støt-ionisasjon, godt hjulpet av høye påtrykte elektriske felter, mens de destrueres via forskjellige rekombinasjonsmekanismer.

Når det gjelder APD's, så ligger utfordringen i at komponenten ikke er liten, men at den faktisk kan være svært stor, samtidig som det kun er noen få aktive interne elektroner som forårsaker et signal på utgangen. I en stor komponent er der nødvendigvis også mange passive elektroner (og hull) som kun skaper støy ved sine bevegelser og som ikke deltar i å formidle det optisk genererte signalet. Vi har her en situasjon hvor de mange ødelegger for de få. Hvordan kan vi da bevare signalet fra noen få ladningsbærere, og hvordan klarer vi å simulere dette?

I en simulering må alle partikler tas med, og vi utvikler derfor modeller som opererer med to kategorier av ladningsbærere, passive bakgrunns-ladningsbærere og aktive signal-ladningsbærere. Den førstnevnte kategorien behandles i det tradisjonelle MC superpartikkelbildet, hvor en superpartikkel representerer en viss mengde ladningsbærere, mens signal-ladningsbærerne behandles mer detaljert som enkelt-elektroner og hull. Disse to ensemblene vil utveksle partikler. Oppgaven kan defineres innenfor en videreutvikling av denne metoden for ladningsbærer-simulering.

Et viktig arbeidsområde innen komponentmodellering er utvikling av effektive Poisson-ligningsløser i 3D som er egnet for bruk sammen med de teknikkene vi har skissert ovenfor. Oppgaver er mulige også her.

(2 studenter)

Oppgave 5: Strålepropagasjon i halvlederstrukturer

Intens, kortpulset laserbelysning av materialer gir opphav til mange spesielle fenomener som vil være av stor interesse for fremtidig teknologi, men som vanligvis ikke tas hensyn til i tilgjengelig programvare for strålepropagasjon. På samme måte som korte optiske testpulser i ps området tidligere har gitt oss en god forståelse av den ladningsbæredynamikken som i dag dominerer i raske transistorer, så forventer vi at fs pulser skal hjelpe oss med å beherske et domene hvor koherenseffekter blir viktige. For å håndtere disse vekselvirkningene trenger vi en presis kvantekinetisk formulering. Mye av de tidligere analysene av kortpulseksperimenter har blitt utført ved hjelp av et sett ligninger kalt Semiconductor Bloch Equations (SBE). Trass i en viss suksess, så er det nødvendig å gå lengre enn standard SBE for å forklare mange eksperimenter.

Ved å ta utgangspunkt i en standard beskrivelse av det elektromagnetiske feltet via FDTD (*Finite Difference Time Domain*) ligninger som i sin tur kobles sammen med ligninger for båndtilstander, båndfylling (Pauli prinsippet) og eksitoner, kan man likevel komme et godt stykke på vei, i alle fall for studier av lengre pulser. Hvis dette gjøres med utgangspunkt i de metodene vi har nevnt i forbindelse med oppgavene ovenfor, vil modellen vil være velegnet som en første, grunnleggende beskrivelse av bl a halvlederlasere og optisk eksiterte halvledere.

Utfordringen blir å gjøre videre konsistente, hierarkiske utvidelser som er forenlige med det deltaljeringsnivået som trengs i mer kompliserte tilfeller. Oppgaven vil bestå i å etablere en grunnleggende plattform som kan brukes innen feltet halvlederoptikk, men som også har potensial i

seg til å inkorporere formuleringer for høyere ordens effekter, slik som f eks vekselvirkningen mellom eksitoner.

(1-2 studenter)

Kontaktpersoner:

Trond Brudevoll

Telefon: 63 80 73 00

Trond.Brudevoll@FFI.no

Asta Storebø

Telefon: 63 80 72 94

asta-katrine.storebo@ffi.no