

Prosjekt- og masteroppgaver innen modellering av halvledermaterialer ved FFI

Virkemåte og ytelse til de fleste elektroniske og optoelektroniske komponenter bestemmes av ladningsbærerdyamikken i ulike halvledermaterialer, og denne vil være forskjellig i bulk materialer, heterostrukturer og nanostrukturer. Modellering av alt dette krever ikke bare en god beskrivelse av selve fysikken, men medfører også mye arbeid innen forskjellige numeriske teknikker – spesielt Monte Carlo (MC) metoder og ulike typer ligningsløsere.

Vi søker etter motiverte kandidater som er interessert i prosjekt- eller mastergradsarbeid innen de feltene som beskrives nedenfor.

Forutsetninger: Interesse for teori og numeriske metoder og god skriftlig fremstillingsevne. For noen av oppgavene kreves det i tillegg gode kunnskaper i faststoffysikk.

Sommerjobber: FFI har tidligere utlyst sommerjobber for 2014. De som ønsker seg sommerjobb i forbindelse med prosjekt/mastergradsoppgaven kan henvende seg til kontaktpersonene nedenfor før søknaden sendes inn. Pga saksbehandlingen er den ordinære søknadsfristen satt til 1.mars. 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 godt utføres mens kandidaten oppholder seg ved sitt studiested. Det er muligheter for å tilpasse temaene til søkerens faglige bakgrunn og interesser, samt at flere studenter kan jobbe sammen i et team. Se også <http://www.ffi.no/no/Om-ffi/Karriere/Sider/Master--og-doktorgradsoppgaver.aspx>

Opgave 1: Modellering av elektrooptiske komponenter

Elektrooptiske komponenter har i den senere tid blitt et meget aktuelt anvendelsesområde for MC simulering. Oppgaven består av et sett valgbare emner hvor man skal utarbeide mer spesifikke komponentmodeller eller "applikasjoner". En av utfordringene vil bli å fase inn bruken av en helt ny numerisk kinetisk modell som er under utvikling. Denne benytter seg av utdata fra en ekstern programvare som beregner båndstrukturen direkte uten å gå veien om eksperimentelt fastlagte parametre eller en analytisk representasjon av de elektroniske tilstandene.

a) *Avalanche fotodioder:*

Ultrafølsomme avalanche fotodioder (APD's), gjør det mulig å detektere svake signaler bestående av kun ett 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 ikke tidligere vært gjenstand for særlig mye MC simulering, da studier av små og raske unipolare transistorer har blitt prioritert. Diodemodellering er derfor lite utforsket med 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, forårsaket av

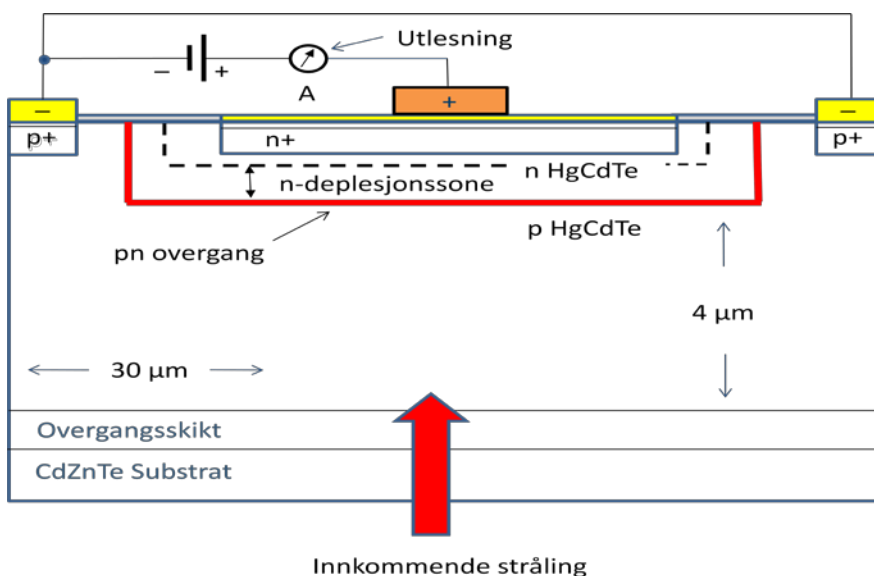
høye påtrykte elektriske felter, mens de destrueres via forskjellige rekombinasjonsmekanismer.

For denne typen optoelektronikk så ligger utfordringen i at komponenten ikke er liten, men at den faktisk kan være svært stor (se Figur 1 og 2), samtidig som det kun er noen få aktive interne elektroner og hull som forårsaker et lesbart 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 bidrar på noen spesielt fordelaktig måte i å formidle det optisk genererte signalet. Hvordan kan vi da bevare signalet fra noen få ladningsbærere, og hvordan klarer vi å simulere dette?

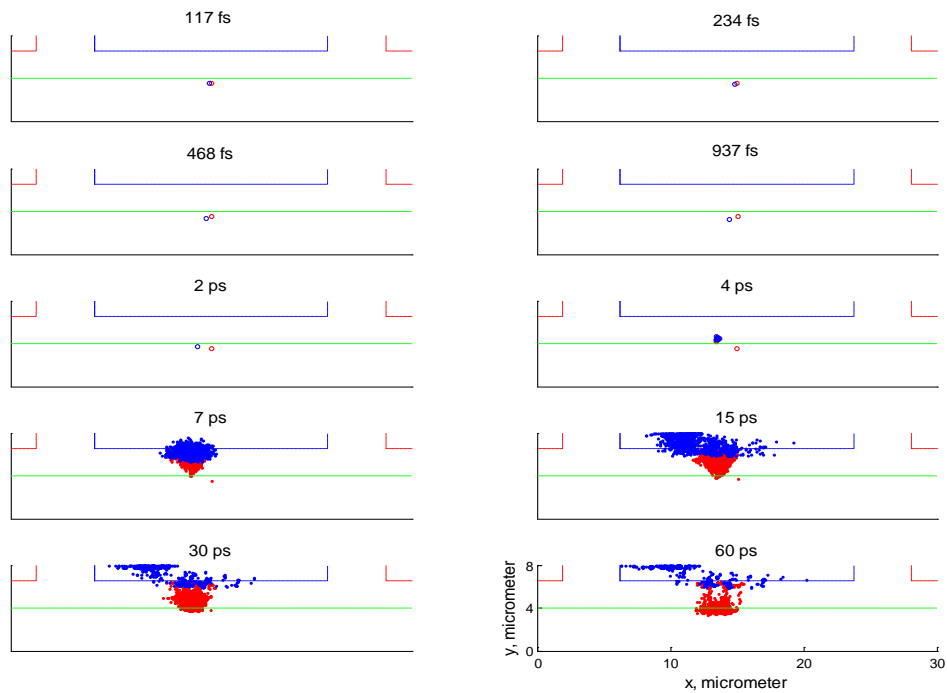
I en slik simulering må alle partikler tas med, og vi utvikler derfor modeller som opererer med to kategorier av ladningsbærere, passive bakgrunns-ladningsbærere og aktive signal-ladningsbærere. Den førstnevnte kategorien behandles i det tradisjonelle MC superpartikkelbildet, hvor en superpartikkel representerer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

Ved sterk belysning av APD'en er det nok å bruke en representasjon kun basert på superpartikler. En APD som gir et brukbart og stabilt signal fra puls til puls ved sterk belysning kan imidlertid oppvise helt andre sider ved svak belysning når kun noen få fotoner treffer overflaten, og derfor er en nøyaktig analyse av dette tilfellet spesielt viktig.

Opgaven kan defineres innenfor utvikling av metoder for å håndtere svake signaler i en bakgrunn av mange frie ladningsbærere eller innenfor design av APD'er.



Figur 1. Eksempel på komponentsimulering: APD diode



Figur 2 . Partikkel-plott av elektroner (blå) og hull (røde) i APD'en ovenfor. Et foton skaper et initielt elektron-hullpar, som så multipliserer seg opp til et lesbart signal ved akselerasjon i et sterkt E-felt inne i depleksjonssonen.

b) *Generasjon av THz-stråling ved hjelp av ultrakorte laserpulser:*

Simuleringsmodellen skal kunne beregne strålingsfeltet fra akselererte ladningsbærere ved påtrykk av ultrakorte laserpulser og et ytre elektrisk felt. Et viktig poeng med oppgaven er å studere hvordan en gruppe lasereksiterte elektroner og hull beveger seg i en bakgrunn av inndopede ladningsbærere ved ulike dopekonsentrasjoner, dvs såkalt ambipolar ladningstransport. Her utsettes ladningsbærerne for krefter både fra påtrykte spenninger, strålingsfeltet, fononer, og andre ladningsbærere. Vekselvirkningen mellom ulike grupper av ladningsbærere har under visse omstendigheter vist seg å føre til overraskende resultater som vil kunne ha konsekvenser for vår forståelse av bipolare elektrooptiske komponenter generelt.

c) *Laserbaserte pump-probe forsøk:*

Det skal gjennomføres pump-probe simuleringer på lavgaps halvledere (InAs , InSb , $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$) for å studere energiutvekslingen innen forskjellige bånd og mellom forskjellige bånd, og mellom ulike typer fononer som alle bringes langt ut av likevekt. På grunnlag av dette kan man ekstrahere relaksasjonstider for de ulike prosessene som foregår i de eksiterte materialene.

d) *Ladningsbærertransport i magnetiske og elektriske felter:*

Her skal vi studere generelle transportegenskaper og utlede parametre som karakteriserer ladningstransporten ved ulike styrker av elektriske og magnetiske felter. Dette er parametre som en gjerne sammenligner med eksperimentelle måleresultater. Noen av simuleringene vil

bli utført i bulk, dvs i et homogent materiale som er likt overalt. Andre simuleringer vil bli gjort med realistiske kontakter og overflater. Mye av dette går på nøyaktigheten av den fysiske modellen som for tiden er implementert og avvik vil kunne medføre at man går inn og endrer på sentrale deler av koden.

Oppgave 2: Utvikling av ligningsløserere:

Innen komponentmodellering må man ha tilgang til Poisson-ligningsløserere i 2D og 3D som er egnet for de formålene som vi har skissert ovenfor. Hvis ligningsløseren skal brukes i et MC program, bør den ikke representere et tidssluk selv om den kalles ofte. Når man kjører en strikt MC rutine, så må nemlig tidssteget være så kort at alle spredninger av partiklene kan overvåkes.

Derved aktualiseres også behovet for parallellisering, og det i enda større grad når løsningen skjer i 3D.

Ofte kan en greie seg med å beregne det elektriske feltet i 2D, og så anta at feltbildet er uendret langs z-retningen. Dette har tidligere vært en god tilnærming for elektroniske komponenter, fordi de har vært bygd med 2D symmetri. Når de elektroniske komponentene kommer ned i nano-området, har det imidlertid blitt nødvendig å modifisere geometrien slik at en får bedre kontroll på ladningsbærerne. Her brytes da gjerne 2D symmetrien. Dessuten får man ved så små dimensjoner også et behov for å modellere omgivelsene rundt komponenten, og da må man bruke 3D løserere.

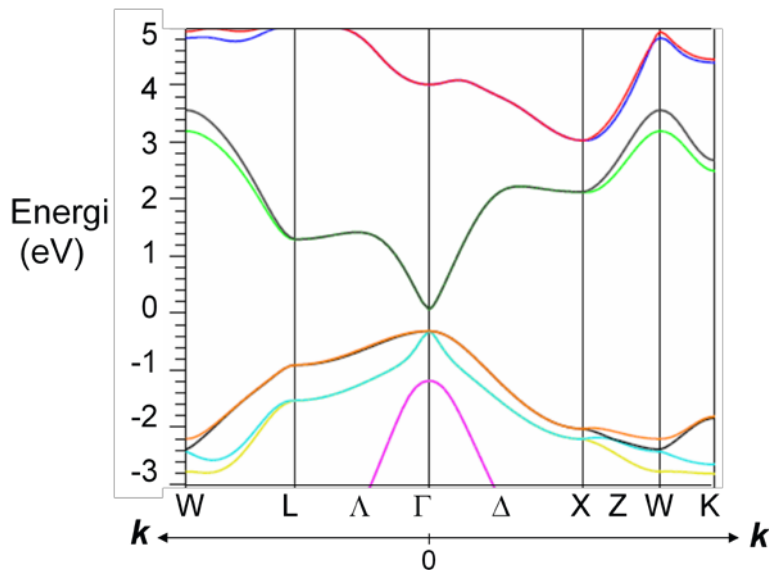
For elektrooptiske komponenter har bruk av 2D løserere vært en heller dårlig approksimasjon fordi den optiske strålen som oftest kommer inn på en måte som bryter 2D symmetrien.

Andre krav man kan stille er at løseren skal kunne håndtere interne elektroder og ikke bare elektroder på overflaten, samt at mer kompliserte grensebetingelser skal kunne spesifiseres. Dessuten vil påtrykte spenninger fra elektroder og optisk induert ladningsbærergenerasjon føre til ikke-lineariteter forårsaket av frie ladningsbærere, kollektive bevegelser av elektrongassen (plasmoner), etc.

Det er ønskelig at løserne er konkurransedyktige også som frittstående koder. Denne oppgaven stiller mindre krav til kunnskaper i halvlederfysikk, men krever til gjengjeld gode kunnskaper innen data og numeriske metoder.

Oppgave 3: Ladningsbærertransport basert på *ab-initio* båndmodeller

Beregning av materialeegenskaper og båndstrukturer bør helst gjøres ut fra fundamentale fysiske konstanter, ved hjelp av såkalte førsteprinsipp eller *ab-initio* metoder, se Figur 3. Disse metodene er svært regnekrevende, mens perturbasjonsmetoder som $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ går raskere, men blir mindre eksakte for store \mathbf{k} . Felles for begge er at de lettest lar seg formulere for situasjoner nær likevekt, og at de ikke uten videre gir analytiske uttrykk for båndstrukturen som er lette å inkorporere i annen modellering.



Figur 3. Båndstruktur for materialet $\text{Hg}_{0.72}\text{Cd}_{0.28}\text{Te}$ ved 300 K

MC simulering er en god måte for å finne ut hva som skjer med et materiale utenfor likevekt. Hvis numeriske båndmodeller benyttes, så vil hverken båndstruktur eller spredninger foreligge på analytisk form, men vil være lagret på et "gitter" i k -rommet. 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 koder for semiklassisk ladningstransport opererer derfor med forenklede 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. Derfor kan MC koder som er avhengig av en ren analytisk båndbeskrivelse vanskelig nyttiggjøre seg resultatene fra førsteprinsippmetoder eller andre numeriske båndmodeller.

MC programmet som nå er under utvikling på FFI kan i dag kjøre med og beregne spredninger ut fra både analytiske og numeriske båndmodeller ved at det foreligger i to separate versjoner; en analytisk versjon og en såkalt fullbånds versjon.

Opgaven vil gå ut på å ta et steg videre med fullbånds versjonen; dvs å lage algoritmer som muliggjør en bedre tilpasning av MC koden til førsteprinsipp-metoder. Vi er allerede i gang med en tilpasning til empiriske og *ab-initio* pseudopotensialprogrammer. Her gjør riktignok den mere primitive, empiriske formen det lettere å få til den midlingen som trengs for å beskrive halvlederlegeringer. Elektron-fonon spredning lar seg også lett beskrive ved bruk av empiriske pseudopotensialer. Målsetningen er imidlertid å få til et bedre og mer generelt sett av algoritmer som ikke er fastlåst til bestemte kategorier av førsteprinsippmetoder, og som gir en bedre beskrivelse av fonodynamikken og av teknisk viktige halvlederlegeringer enn det empiriske pseudopotensialer kan gi.

En annen viktig utfordring er å håndtere ladningsbærer-ladningsbærer vekselvirkningene og generasjons-rekombinasjons prosesser når båndene ikke lenger er paraboliske.

Mange av emnene som inngår her vil også bli berørt i forbindelse med de andre mastergradsarbeidene. Den som velger denne oppgaven vil imidlertid få hovedansvaret for hvordan tingene håndteres internt i MC modellen.

Oppgave 4: 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. I reversforspente dioder f eks, kan det 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. Ladningsbærrer generasjon 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 båndstrukturer.

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.

Det vil 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 rekombinasjon 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.

Selv om vi med Augerrekombinasjon først og fremst tenker på rene, innbyrdes ladningsbærervekselvirkninger, viser det seg at utsendelse av virtuelle fononer også spiller en betydelig rolle i disse prosessene. Det anslås en feilmargin i ladningsbærerlevetidene på ca 30% hvis utsendelse av virtuelle fononer utelates.

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

Det er etablert en foreløpig programvare for denne typen beregninger, basert på **kp** båndstrukturmodeller. Oppgaven består i å videreutvikle denne programvaren til å kunne benytte førsteprinsipp metoder, ta hensyn til virtuelle fononer og inkludere nye elementer som tunnelering mellom valens og ledningsbånd.

Oppgave 5: Modellering av elektroniske komponenter med kvantisering

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 elektroniske 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.

Vi skal prøve ut metoder som kan bidra til å utvide gyldighetsområdet for semiklassisk MC simulering av ladningstransport til å omfatte mikrostrukturer med kvantisering. Her tar vi utgangspunkt i kvantetransportteori og finner analogier som kan overføres til det semiklassiske området, slik at vi kan bruke partikkelbildet videre med de effektive teknikkene som allerede er etablert i forbindelse med vår eksisterende programvare.

Kontaktpersoner:

Trond Brudevoll

Asta Storebø

Telefon: 63 80 73 00

Telefon: 63 80 72 94

Trond.Brudevoll@FFI.no

asta-katrine.storebo@ffi.no