



**Richiesta per borsa di studio da attivare ai sensi di quanto disposto dal D.M. n. 1061 del 10/08/2021**

Il sottoscritto Auf der Maur Matthias, qualifica associato, afferente al Dipartimento di Ingegneria Elettronica, Interno 7781, email auf.der.maur@ing.uniroma2.it

**CHIEDE**

L'attivazione di una borsa di studio di dottorato ai sensi di quanto disposto dal D.M. n. 1061 del 10/08/2021. A tal fine comunica quanto segue:

La borsa sarà attivata sul seguente corso di dottorato accreditato per il XXXVII ciclo: Dottorato di Ricerca in Ingegneria Elettronica

Area per la quale si presenta la richiesta (selezionare solo una delle due):

Innovazione

Green

Tipologia di cofinanziamento (pari ad euro 8000 una tantum):

Nome dell'Ente finanziatore pubblico o privato: \_\_\_\_\_

Persona di Riferimento: \_\_\_\_\_ Telefono \_\_\_\_\_

Email \_\_\_\_\_

Fondi di ricerca dipartimentali

Progetto di Ricerca (massimo 10.000 battute complessive spazi inclusi) che comprenda

Descrizione del Progetto:

Il progetto si concentra sullo sviluppo e l'impiego di modelli di simulazione numerica per dispositivi optoelettronici con particolare attenzione alle tecnologie del fotovoltaico. Le celle fotovoltaiche attualmente rappresentano la tecnologia di maggiore interesse per il raggiungimento degli obiettivi dell'Unione Europea nella la transizione a fonti rinnovabili dell'energia elettrica. Perciò la ricerca sia di base che applicata nel campo del fotovoltaico gode di grande interesse. Questo comprende l'aumento dell'efficienza delle diverse tecnologie esistenti, ma soprattutto lo sviluppo e il miglioramento di tecnologie della cosiddetta 3° generazione in termini dell'impatto ambientale e dell'abbattimento del costo dell'energia elettrica prodotta.

La simulazione numerica basata su modelli fisici del trasporto di carica e dell'interazione luce-materia ha un impatto importantissimo nello sviluppo tecnologico e nell'ottimizzazione di dispositivi optoelettronici in generale. Non solo permette di migliorare la conoscenza dei processi fisici e chimici nei dispositivi e di abbattere i tempi di sviluppo, evitando il processo empirico di "trial and error" eseguendo almeno parte dello sviluppo tecnologico "in silicio", ma ha anche un ruolo fondamentale nella ricerca di nuove architetture di dispositivi, nuovi materiali e nuove tecnologie.

La precisa modellizzazione numerica di dispositivi fotovoltaici di ultima generazione, come ad esempio le celle ibride organiche/inorganiche a perovskite, le celle tandem e a multigiunzione o le celle a eterostruttura e multi-quantum well, richiede la combinazione di modelli classici e quantistici ed in



alcuni casi anche di modelli atomistici. Quindi, è necessario un approccio multiscala in quanto il comportamento di tali dispositivi dipende in modo critico da processi su scala nanometrica. Ad esempio, l'efficienza di estrazione dei portatori fotogenerati nel caso di interfacce tra diversi materiali dipende dai processi microscopici del trasporto elettronico attraverso queste interfacce. Lo scopo principale del progetto è quindi di sviluppare un tool di simulazione TCAD che permette di simulare ed ottimizzare celle solari di ultima generazione a livello di dispositivo, includendo gli effetti su scala quantistica o atomistica.

Il lavoro si baserà su un software TCAD esistente, tiberCAD, che è predisposto per lo sviluppo di modelli simulativi multiscala e multifisica. La componente centrale del software è un simulatore di trasporto classico basato sul modello di drift-diffusion, che sarà da accoppiare a modelli di trasporto e di struttura elettronica quantistici ed atomistici. Grande attenzione sarà dedicata all'efficienza numerica del codice, ottimizzata tramite programmazione parallela su GPU e HPC. Il software sviluppato sarà poi applicato a celle solari di ultima generazione, in particolare celle a perovskite, celle a eterointerfaccia silicio/silicio amorfo, e a celle a multi-quantum well InGaN/GaN. Inoltre, gli stessi approcci simulativi saranno applicabili anche ad altri contesti quali LED e transistori ultra-scalati.

#### Obiettivi formativi:

Lo studente sarà formato in primo luogo nell'ambito del calcolo scientifico e della programmazione di software scientifico, utilizzando multipli linguaggi di programmazione. Acquisirà conoscenza approfondita nella teoria del trasporto elettronico a vari livelli, e nella simulazione numerica. Inoltre, sarà formato nella disseminazione di risultati scientifici, e avrà la possibilità di integrarsi in collaborazioni nazionali ed internazionali. Inoltre, durante il periodo in impresa sarà confrontato con lo sviluppo di software e con la simulazione TCAD orientata all'utente.

#### Attività previste:

L'attività principale sarà l'accoppiamento di un modello quantistico di trasporto elettronico basato su funzioni di Green non-equilibrio (NEGF), implementato nella libreria libNEGF, con il software di simulazione di dispositivi di tipo TCAD tiberCAD. Questo include l'ottimizzazione di libNEGF su HPC e la definizione ed implementazione di un "application programming interface" (API) efficiente e funzionale nell'ambiente tiberCAD. L'ottimizzazione di solutori lineari e ad autovalori con l'utilizzo di GPU e tecniche di machine learning (ML) aiuterà a rendere il software efficiente e fruibile all'ottimizzazione di dispositivi con tempi di simulazione ragionevoli. ML sarà impiegato ad esempio per la costruzione di preconditionatori, che sono fondamentali per i solutori iterativi.

Il software sviluppato sarà poi applicato a dispositivi realistici, come celle solari di ultima generazione (e.g. Silicon Heterojunctions basate su interfacce a-Si/c-Si, Multi Quantum Wells (MQW), materiali organici), sfruttando collaborazioni scientifici esistenti.

#### Attinenza del progetto all'area indicata:

Le celle solari come fornitore di energia elettrica green hanno un ruolo fondamentale nella transizione della produzione di energia elettrica verso un uso possibilmente esclusivo di fonti rinnovabili ed a sempre più basso impatto ambientale. Insieme alla ricerca di base la simulazione numerica può contribuire enormemente al miglioramento dell'impatto ambientale delle tecnologie attuali e quelle future, aiutando ad esempio nella scelta dei materiali più promettenti. Inoltre, i modelli simulativi che verranno sviluppati con principale interesse nel fotovoltaico saranno utilizzabili anche in



altri ambienti, come ad esempio per le applicazioni di “lighting” basati su LED, dove il miglioramento dell’efficienza può comportare un aumento del risparmio energetico, oppure in ambito delle batterie e accumulatori, che avranno un ruolo sempre più fondamentale sia per la generazione di energia elettrica da fonti rinnovabili, sia per la transizione alla mobilità elettrica, e quindi richiedono particolare attenzione nello sviluppo di tecnologie green.

Risultati attesi:

Il percorso di dottorato sarà valutato secondo i criteri di ammissibilità condivisi con il collegio di dottorato di Ingegneria Elettronica, che specificano le soglie di produzione scientifica per l’ammissione agli anni successivi e all’esame finale per il conseguimento del titolo di dottore di ricerca (almeno due pubblicazioni su riviste internazionali peer reviewed con almeno un lavoro a primo nome da parte del dottorando). Il risultato principale del progetto sarà un software funzionale ed efficiente con integrazione multiscala di specifico interesse per la simulazione di celle solari, pronto all'utilizzo della comunità scientifica e dell’industria impegnata nello sviluppo di tecnologia fotovoltaica avanzata. La funzionalità e l’efficacia del software sviluppato verrà dimostrato in tre contesti: (1) simulazione di una cella solare al silicio con interfaccia Si/Si amorfo, usando anche modelli atomistici, (2) simulazione di un dispositivo a perovskite con transport layer, includendo l’iniezione di carica attraverso le interfacce anche con stati di trappola, usando modelli a massa efficace; (3) estrazione di carica in una cella solare InGaN/GaN a multi-quantum well. I risultati verranno confrontati con dati sperimentali in letteratura, e presentati a conferenze internazionali del settore e in riviste scientifiche. I modelli sviluppati verranno inoltre messi a disposizione della comunità scientifica e del mondo produttivo attraverso l’impresa coinvolta, TiberLAB s.r.l., previa accordi specifici con l’Università.

Azienda pubblica o privata coinvolta nazionale o straniera in cui si prevede di far svolgere il periodo obbligatorio da 6 a 12 mesi previsto dal Decreto Ministeriale:

TiberLAB s.r.l., costituita nel 2008 come spin-off universitaria, fornisce software di simulazione specializzata per dispositivi elettronici, per uso di ricerca e di sviluppo, e supporto di simulazione. Tutor aziendale sarà il Dr. Fabio Sacconi.

**Firma**