



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 pone come obiettivo l'ulteriore sviluppo e il miglioramento di un software di simulazione di trasporto di carica con modelli semi-classici per dispositivi optoelettronici e termoelettrici. In termini di applicazioni concreti il progetto si concentrerà sul campo del fotovoltaico e del termoelettrico. 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, mentre dispositivi termoelettrici sono di grande interesse per il recupero dell'energia persa in calore.

La modellizzazione e la simulazione numerica hanno un ruolo di grande rilievo nello sviluppo e nella ricerca di queste tecnologie, perché permettono una migliore comprensione dei processi fisici alla base del loro funzionamento, e consentono di ottimizzare i dispositivi o di sviluppare nuovi concetti. Infatti, 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 elettronici in generale, e viene usata da decenni con successo. Per le imprese che operano nel campo dello sviluppo e della produzione di dispositivi elettronici, l'utilizzo di software di simulazione come i TCAD riesce ad 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.



Diverse tra le tecnologie fotovoltaiche di 3° generazione richiedono modelli simulativi più complessi di quelli che tipicamente sono implementati in software TCAD che sono stati sviluppati per la simulazione di semiconduttori inorganici “classici” come il silicio, il germanio, i III-V o i nitrucci. Da un lato, la gamma di materiali di interesse si sposta da quest’ultimi materiali verso materiali organici e sistemi ibridi, anche elettrochimici, che necessitano altri modelli di simulazione. Dall’altro lato, spesso il trasporto di carica non interessa più solo elettroni e lacune, ma anche altri specie cariche come gli ioni in elettroliti o difetti in materiali come la perovskite, che devono essere considerate per una precisa modellizzazione numerica dei dispositivi. Nel caso di dispositivi termoelettrici, deve essere integrato nel modello anche il trasporto di calore, che è legato in modo stretto al trasporto di carica. Lo scopo principale del progetto è di sviluppare un tool di simulazione TCAD che permette di simulare ed ottimizzare celle solari di ultima generazione e generatori termoelettrici a livello di dispositivo, includendo tutti i principali effetti a un livello semi-classico.

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 stazionario, che in modo limitato può descrivere un numero arbitrario di portatori di carica. Durante il progetto questo codice sarà migliorato ed esteso in modo da poter simulare un’ampia gamma di dispositivi e materiali, in particolare elettrochimici e ibridi ed elettrotermici. Questo richiede l’implementazione di modelli opportuni di accoppiamento tra sistemi chimici come elettroliti a materiali semiconduttori, l’implementazione generalizzata della conservazione di massa, il corretto accoppiamento tra il trasporto termico e quello di carica in presenza di multipli portatori, l’estensione del codice al caso tempo-dipendente, e infine il miglioramento della robustezza numerica del codice e dei solutori. Il software sviluppato sarà poi applicato a celle solari di ultima generazione, in particolare celle a perovskite e dye sensitized solar cells, e a dispositivi termoelettrici. Inoltre, i modelli sviluppati saranno applicabili anche ad altri contesti come ad esempio generatori piezoelettrici e dispositivi elettrochimici come i light electrochemical cells.

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 semi-classico a livello di drift-diffusion, dell’accoppiamento elettro-termico, e negli approcci numerici per la soluzione di questi sistemi di equazioni. Inoltre, sarà formato nella disseminazione di risultati scientifici, e avrà la possibilità di integrarsi in collaborazioni nazionali ed internazionali. Durante il periodo in impresa utilizzerà il software per dispositivi realistici e potrà acquisire conoscenza nello sviluppo tecnologico di dispositivi.

Attività previste:

L’attività sarà concentrata su cinque parti: (1) il completamento e miglioramento del codice drift-diffusion a multi-particelle per renderlo funzionale per i dispositivi di interesse; (2) l’implementazione di un solutore tempo-dipendente, necessario in particolare per la simulazione di celle solari a perovskite; (3) l’estensione dell’accoppiamento con il modello termico; (4) il miglioramento numerico del codice in termini di stabilità e robustezza ed efficienza; (5) l’applicazione del software a dispositivi di interesse per il fotovoltaico, in particolare celle di tipo dye solar cell (DSC) e la generazione termoelettrica.

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. La ricerca nel campo del termoelettrico invece possibilmente porterà alla possibilità di recuperare una grande quantità di energia dissipata in calore, che attualmente non è fruibile a causa della bassa differenza di temperatura. La simulazione numerica è fondamentale per l'ottimizzazione di dispositivi e lo sviluppo di nuove tecnologie, sia a livello di ricerca che industriale, e quindi può essere determinante per il miglioramento dell'impatto ambientale delle tecnologie attuali e quelle future. Inoltre, i modelli simulativi che verranno sviluppati con principale interesse nel fotovoltaico saranno utilizzabili anche in altri ambienti, come ad esempio per i generatori di energia piezoelettrici, dispositivi elettrochimici per la produzione di idrogeno, il fotovoltaico semitrasparente per l'integrazione in edifici, ma anche in ambito delle batterie e accumulatori, di grande rilievo sia per la generazione di energia elettrica da fonti rinnovabili, sia per la transizione alla mobilità elettrica.

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 che riesce a descrivere una vasta gamma di dispositivi utili alla generazione di energia elettrica come celle solari e termoelettrici, pronto all'utilizzo della comunità scientifica e dell'industria impegnata nello sviluppo di queste tecnologie. In particolare, verrà dimostrato (1) la simulazione di celle DSC realistici con diversi elettroliti, in collaborazione con la impresa G+Lyte, (2) la possibilità di simulare dispositivi a perovskite includendo gli effetti a transiente lento degli ioni mobili, anche in 2D e 3D, e (3) la possibilità di simulare effetti termoelettrici anche in sistemi contenenti un numero arbitrario di portatori. Utilizzando il software, lo studente sarà in grado di eseguire simulazioni di dispositivi realistici, in particolare durante il periodo in impresa, che come risultato porteranno al miglioramento degli stessi o al miglioramento delle conoscenze del loro funzionamento.

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:

G+Lyte è una start-up company fondata nel 2019, situata in Amiens, Francia. Si occupa di tecnologia per il fotovoltaico, in particolar modo di sviluppo di elettroliti per le celle DSC con maggiore efficienza e stabilità.

Firma