

## Simulationsmodelle für Zukunftstechnologien

**W**ie werden Solarzellen durch Nanotechnologie effizienter und kostengünstiger? Wie können LEDs ihre Aufgabe in Beleuchtungssystemen erfüllen, zumal sie schon jetzt fünfmal energieeffizienter sind als heutige Energiesparlampen? Wie kann man mit Nanotechnologien in elektronischen oder photonischen Bauelementen neue Eigenschaften kreieren?

**E**s sind Fragen wie diese, die im Fachgebiet CEP (Computational Electronics and Photonics) erforscht werden. Die Photonik ist eine Disziplin, die sich mit der Erzeugung, Kontrolle, sowie Detektion von Licht, also den Photonen, beschäftigt.

**D**iese Fragen werden jedoch nicht in einem Labor, sondern mit Hilfe von Computersimulationen bearbeitet. Vorteil dieser Methode ist, dass neue Prinzipien oder Ideen ohne den Einfluss von Störfaktoren, die im Experiment auftreten können, erforscht werden. Die Nanotechnologie erfordert oftmals die Kontrolle und Charakterisierung von Materialien und Strukturen im Nanometer oder Sub-Nanometer Bereich, was eine extreme Herausforderung an die experimentellen Aufbauten stellt. Die physikbasierte Computersimulation erlaubt es parallel dazu, das charakteristische Verhalten von Bauelementen oder Systemen zu berechnen, bevor sie realisiert werden. Dieses geschieht mit dem Ziel, das Potential zu evaluieren, sowie ein detailliertes Verständnis zu entwickeln, zum Zwecke einer Optimierung der Technologie für verschiedene Anwendungen. Dafür werden sogenannte Multi-Physik Simulationsmodelle entwickelt, die die mechanischen, elektrischen, optischen und thermischen Eigenschaften des Systems beschreiben. Die zugrunde liegenden Gleichungen werden dann mit mehrdimensionalen numerischen Methoden in Computerprogrammen implementiert, unter Einbeziehung der Kopplung der verschiedenen physikalischen Prozesse. Die Hauptforschungsaktivitäten der CEP Gruppe liegen deshalb in der Entwicklung von Simulationsmodellen, sowie dem Design und der Analyse von optoelektronischen Bauelementen und

Systemen. Insbesondere letzteres macht die Gruppe zu einem idealen Partner von experimentell orientierten Gruppen in der akademischen sowie industriellen Forschung, um gemeinsam an spannenden Fragen zu forschen.

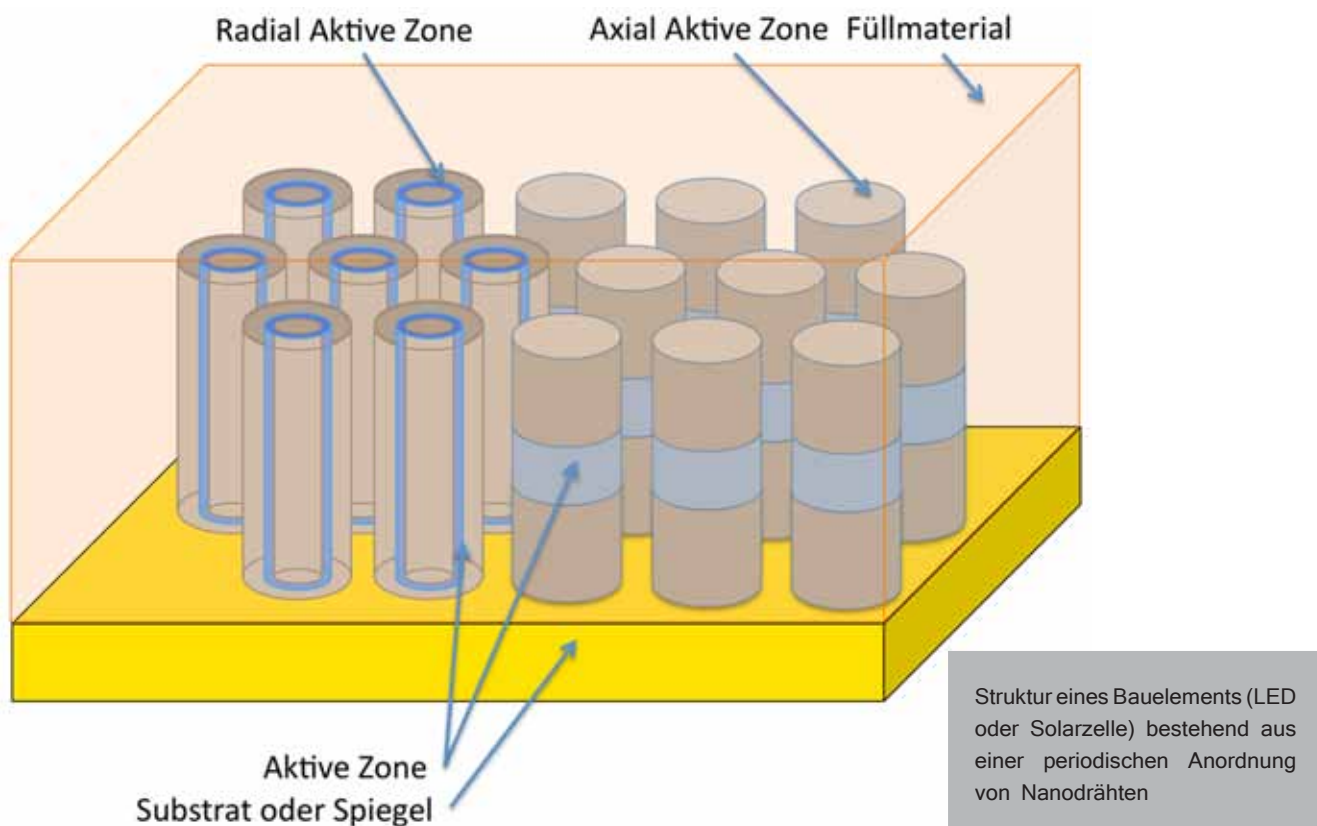
**E**ine dieser Fragestellungen dreht sich um die Verwendung von Halbleiter-Nanodrähten als aktives Element in Licht-emittierenden Dioden (LED) oder Solarzellen. Nanodrähte sind Säulen, die nur wenige zehn Nanometer dick sind (das menschliche Haar ist etwa tausendmal so dick), und etwa 5 Mikrometer hoch. In den letzten Jahren ist es gelungen, grossflächig Millionen von Nanodrähten im Abstand von nur wenigen Nanometern selbstorganisiert, mit nur wenigen Defekten, auf kostengünstige Substrate aufzuwachsen. Das eröffnet die Möglichkeit, relativ teure aber hochperformante Materialien (wie Indium-Phosphid oder Gallium-Nitrid) auf z.B. Silizium zu integrieren, und somit leistungsfähige Bauelemente mit wesentlich weniger Verbrauch kostbarer Materialien herzustellen. Darüber hinaus lassen sich durch die kleinen Abmessungen im Nanometer-Bereich quantenmechanische Effekte zur Kontrolle der Licht-Materie Wechselwirkung nutzen. Im Fachgebiet Computational Electronics and Photonics werden dazu Modelle entwickelt.

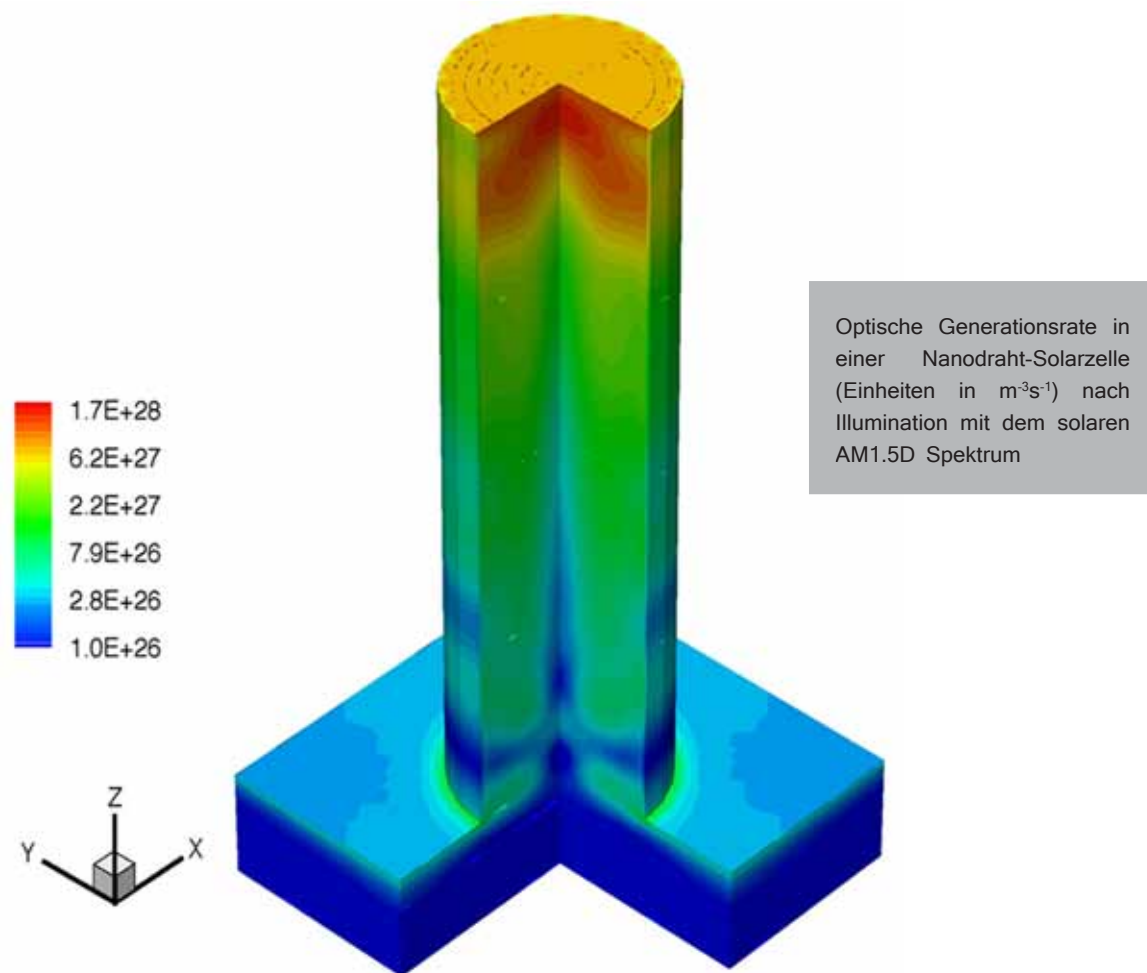
**I**m Bereich der Solarzellen ist es ein Ziel, hochabsorbierende III-V Halbleiter in Nanodrähten zu verwenden, um damit höchste Effizienzen bei moderaten Kosten zu erzielen. Diese Entwicklung wird durch die 3. Generation von Solarzellen vorgezeichnet, und Nano-Strukturen sollen zur Realisierung eine Hauptrolle spielen. Eine Hauptfragestellung ist dabei, zu klären, ob relativ wenig Material, das durch den ‚Wald‘ an Nanodrähten gebildet wird, die Sonnenstrahlung vollständig einfangen kann. Dazu wurden in der CEP Gruppe umfangreiche, dreidimensionale elektro-optische Modellrechnungen durchgeführt. Das Hauptergebnis war verblüffend und ermutigend zugleich: es konnte gezeigt werden, dass 90% der breitbandigen Leistung

der Sonneneinstrahlung mit einer Oberflächenbedeckung von nur 20% absorbiert werden kann. Dieses Phänomen erklärt sich durch einen optischen Konzentrationseffekt der Nano-Drähte (ähnlich wie in einer Antenne), und durch die Rechnungen kann gezeigt werden, dass nur bei richtiger Wahl des Drahtdurchmessers sowie -Abstandes mit geringem Materialeinsatz sehr gute Effizienzen erzielt werden können. Die Nanodrähte fungieren dann als integrierte Sonnen-Konzentratoren und aktive Solarzellen zugleich. Diese Ergebnisse der Berechnungen sind direkt in die technologische Umsetzung bei Partnern eingeflossen, und in der Tat haben Messungen Effizienzwerte gezeigt, die sich weltweit an der Spitze befinden. In der Zukunft arbeiten wir an Nanodraht-Solarzellen Konzepten mit einer Kombination verschiedener Materialien (Multi-Junction Zellen), um das Sonnenlicht noch besser nutzen zu können.

LEDs benötigen bei gleicher Leuchtintensität nur etwa ein Viertel der Energie, die Energiesparleuchten verbrauchen, und ein Zwanzigstel der Energie, die Glühlampen benötigen. Aus diesem Grund bilden sie die Zukunftstechnologie für energieeffiziente Beleuchtung. Die maximale Effizienz für blaue LEDs ergibt sich jedoch bei relativ kleinen Stromdichten; der Grund dafür ist in

den Eigenschaften des Materialsystems Gallium-Nitrid (GaN) zu suchen, aber im Detail noch nicht bekannt. Wir sind aktiv an der aktuellen Forschung auf diesem Gebiet beteiligt. Nanodrähte bieten eine alternative Möglichkeit, die LED am maximalen Effizienzpunkt zu betreiben. Durch den Bau von dreidimensionalen LEDs kann die Fläche der aktiven Zone gegenüber der Chipgrundfläche vervielfacht werden. Dabei wird die aktive (also leuchtende) Fläche an den Seitenflächen der Nanodrähte angebracht. Dadurch kann bei gleicher Chip-Grundfläche die LED bei kleineren Stromdichten betrieben werden, und wird so effizienter. Wir haben dieses Konzept sowohl elektronisch als auch optisch untersucht. Um eine effiziente Strominjektion entlang der gesamten Höhe in die sehr dünnen Nanodrähte zu gewährleisten, muss die Kontaktgeometrie sowie die Dotierung entsprechend gewählt werden. Dazu wurden detaillierte Simulationen basierend auf mikroskopischen Drift-Diffusions- sowie gekoppelten Quanten-Transport-Rechnungen durchgeführt, um die orts aufgelöste strahlende Rekombination in den Quanten-Trögen der aktiven Zone zu analysieren. Ein zweiter Teil der Arbeit beschäftigt sich mit der Lichtauskopplung aus den Seitenflächen der Nano-Drähte. Hier wurden aufwendige,





dreidimensionale elektromagnetische Rechnungen durchgeführt, um die optisch Auskopplungseffizienz zu studieren. Insbesondere die Photonen, die am unteren Ende der Drähte erzeugt werden, sowie diejenigen, die sich horizontal ausbreiten, haben im Vergleich zu einer planaren LED eine geringere Wahrscheinlichkeit, zur (in der Vertikalen gemessenen) Ausgangsleistung beizutragen. Es wurde erforscht, inwieweit Effekte der Nanophotonik, wie photonische Kristalle oder plasmonische (metalloptische) Effekte verwendet werden können. Als Hauptergebnis konnten auch hier Konfigurationen gefunden werden, bei denen die Nanodraht-LED seinem planaren Counterpart in punkto Gesamt-Effizienz überlegen ist. In der Zukunft werden wir studieren, welche neuen Anwendungen sich aus der Nanodraht-Architektur und den damit verbundenen Eigenschaften des Licht-Emitters ergeben.

Die beschriebenen Beispiele sind nur zwei Technologien aus der Optoelektronik, bei denen die Nanotechnologie Lösungen für wissenschaftliche Fragestellungen bietet. Unsere Computermodelle sind so entwickelt worden, dass sie universell für

Fragestellungen im Bereich der Photonik und Optoelektronik einsetzbar sind. Nanostrukturen bieten im allgemeinen die Möglichkeit, für Elektronen und Photonen die Zustandsdichte, also die Anzahl der besetzungsfähigen Energien pro Volumen, zu modifizieren. In der Photonik führt dieses zu photonischen Kristallen mit Energie-Bandlücken und stark modifizierten Gruppengeschwindigkeiten (‚langsameres Licht‘), oder Resonatoren mit sehr hohen Güten. Dieses kann in Lasern, Wellenleitern, LEDs oder Solarzellen neue Funktionen oder Effekte verursachen, wie z.B. die Kontrolle der Phase des Lichts. Zukünftige integrierte optische Schaltungen für die ultraschnelle energieeffiziente Informationsübertragung erfordern diese Technologie. Die Modifikation der elektronischen Zustandsdichte in mit Nanostrukturen erzeugt quantenmechanische Effekte, und ermöglicht z.B. eine verbesserte Licht-Materie Wechselwirkung, oder die Realisierung von Höchstfrequenztransistoren.

Wir sind in zahlreichen Projekten tätig, wo unsere Modelle im Bereich des Designs und in der Analyse von Solarzellen und LEDs

sowie Lasern und Photosensoren, die in den Bereichen Photovoltaik, Kommunikation, Beleuchtung, Medizintechnik und Sensorik zum Einsatz kommen. Die fortschreitende Verbesserung der Rechenleistung

von Supercomputern erlaubt es uns, die Simulations-Modelle immer realitätsnäher zu programmieren, und die Vorhersagekraft der Simulationen stetig zu verbessern.

## Prof. Dr. Bernd Witzigmann

Nach seinem Physikstudium in Ulm promovierte Prof. Dr. Bernd Witzigmann im Jahr 2000 in Technischen Wissenschaften an der ETH Zürich (mit Auszeichnung) zum Thema Simulation von Halbleiterlasern (Doktorvater: Prof. W. Fichtner). Es folgte eine Industrietätigkeit an den Bell Laboratories, Lucent, in Murray Hill, USA, mit den Schwerpunkten Optische Kommunikation und Physikalische Modellierung. 2001 übernahm er die Leitung der Entwicklung von Kommunikationslasern bei Agere Systems (später: Ortel, a Division of Emcore) in Los Angeles und folgte 2004 dem Ruf an die ETH Zürich als Assistenzprofessor für Computergestützte Optoelektronik. Seit November 2008 leitet er als Professor das Fachgebiet Theorie der Elektrotechnik und Photonik der Universität Kassel. Er ist ‚Senior Member‘ der IEEE, ‚Member‘ bei SPIE, Stellvertretender Sprecher des CINSaT, Organisator der SPIE Photonics West Konferenz ‚Physics and Simulation of Optoelectronic Devices‘, Gutachter in zahlreichen Gremien (wissenschaftl. Zeitschriften, Förderinstitutionen), sowie Editor und assoz. Editor für mehrere internationale Zeitschriften. Er hat ca. 150 referierte wissenschaftliche Publikationen als Autor oder Ko-Autor verfasst, und 20 einladende Vorträge bei internationalen Konferenzen gegeben. Seine Forschungsinteressen liegen im Bereich der computerbasierten Modellierung von elektronischen und photonischen Bauelementen und Systemen, den Nanowissenschaften und deren technologischer Anwendung, numerischen Methoden für Multi-Physik und Multi-Skalen Modellierung, Licht-Materie Wechselwirkung, sowie der Quantenelektrodynamik.

