Projekt 4.2: Badania teoretyczne struktury krystalicznej, elektronowej struktury pasmowej oraz defektów punktowych w złożonych materiałach tlenkowych dla optoelektroniki

Promotor(zy): Prof. dr hab. Yaroslav Zhydachevskyy, dr hab. Yuriy Hizhnyi (promotor pomocniczy)

Instytut: Instytut Fizyki PAN

Jednostka organizacyjna: ON4.1

Strona www grupy: https://www.ifpan.edu.pl/en/institute/scientific-divisions/division-of-physics-and-technology-of-wide-band-gap-semiconductor-nanostructures/on4-1-group-of-high-pressure-spectroscopy.html

Tło:
Głównym celem projektu jest zbadanie struktury krystalicznej, struktury pasm elektronowych oraz poziomów energetycznych domieszek jonowych i innych defektów punktowych w nowych materiałach tlenkowych przeznaczonych do zastosowań w optoelektronice, z wykorzystaniem metod obliczeniowych, w tym technik uczenia maszynowego (ML).

Cel projektu:
W ramach proponowanego projektu planuje się wykorzystanie nowoczesnych metod obliczeniowych struktury elektronowej opartych na mechanice kwantowej, zaimplementowanych w różnych pakietach oprogramowania i uruchamianych na zasobach obliczeniowych krajowych centrów danych (superkomputerów), a także algorytmów uczenia maszynowego, w celu zbadania struktury krystalicznej, struktury pasm elektronowych oraz właściwości elektronowych defektów punktowych w nowych, złożonych materiałach tlenkowych przeznaczonych do zastosowań optoelektronicznych. W szczególności zoptymalizowane geometrie atomowe roztworów krystalicznych i kryształów z defektami punktowymi zostaną przeanalizowane przy użyciu modułu CASTEP programu Biovia Materials Studio, który wykorzystuje metodę pseudopotencjału fali płaskiej opartą na teorii funkcjonalnej gęstości (DFT). Szczegółowe struktury pasmowe, skorygowane wartości przerwy energetycznej, stałe optyczne i inne parametry związane ze strukturą elektronową zostaną również obliczone przy użyciu metody FP-LAPW, która jest dostępna w pakiecie oprogramowania Wien2k. Zarówno CASTEP, jak i Wien2k zostaną wykorzystane do obliczenia energii tworzenia i energii przejścia ładunku defektów. Stany wzbudzone jonów luminescencyjnych w badanych kryształach tlenkowych zostaną przeanalizowane obliczeniowo przy użyciu możliwości pakietu chemii kwantowej Gaussian.
Projekt będzie uzupełnieniem już realizowanych przedsięwzięć badawczych prowadzonych przez Instytut Fizyki Polskiej Akademii Nauk, w tym tych realizowanych we współpracy i z wykorzystaniem infrastruktury Wrocławskiego Centrum Sieciowo-Superkomputerowego (WCSS) oraz Akademickiego Centrum Komputerowego Cyfronet AGH, a także stworzy podstawę do ubiegania się o nowe projekty finansowane przez instytucje krajowe i międzynarodowe.

Wymagania:
- Zainteresowanie i doświadczenie w stosowaniu obliczeń w zadaniach związanych z inżynierią materiałową i fizyką.
- Tytuł magistra z fizyki, chemii lub informatyki.
- Umiejętności w zakresie programowania, technologii informacyjnych, inżynierii oprogramowania, sieci neuronowych itp.
- Wystarczająca znajomość języka angielskiego.

- Wysoka motywacja, umiejętność pracy w zespole oraz zdolność do rozwiązywania problemów.

Finansowanie:
Ustawowe stypendium doktoranckie (około 3168 PLN/miesiąc w latach 1-2, 4881 PLN/miesiąc w latach 3-4) z możliwością przejścia w przyszłości na finansowanie z projektu.

Kontakt: zhydach@ifpan.edu.pl