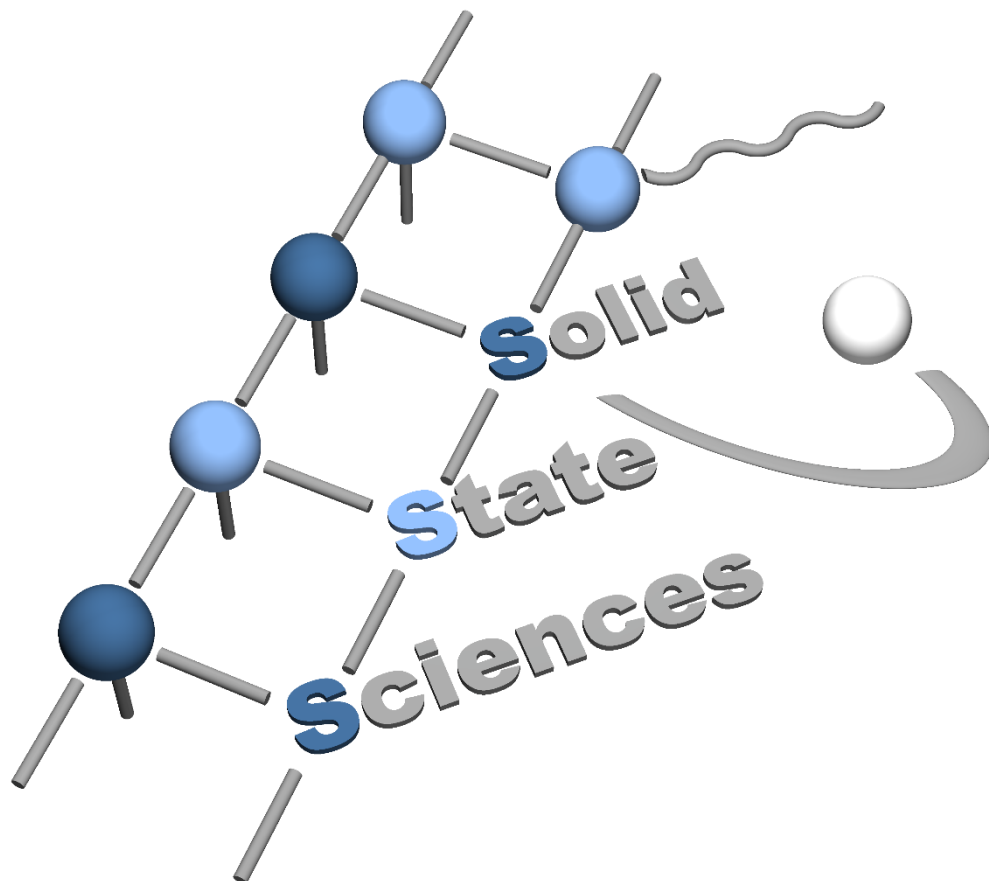


THESISONDERWERPEN 2020-2021



Vakgroep Vastestofwetenschappen

Krijgslaan 281 gebouw S1

<http://www.solid.ugent.be>

tel. 09.264.43.42

alle onderwerpen online beschikbaar

<https://www.ugent.be/we/solidstatesciences/en/education/theses>

Inhoud

COCOON	3
1. Monte Carlo modellering van gas transport en dunne film depositie in complexe structuren	3
2. In situ meettechnieken voor een beter begrip van atomaire laag depositie: een big data approach	5
3. Aanbrengen van functionele coatings op poeders met behulp van atomaire laag depositie	6
4. Atomaire laag depositie van kobalt voor toepassingen in de halfgeleiderindustrie	7
5. Selectoren : cruciale componenten voor next-gen geheugentechnologie	8
6. Modifieren van oppervlakeigenschappen voor laboratorium-op-een-chip apparaten	9
7. Dunne film vaste stof batterijen	10
8. Atomaire laag depositie van functionele coatings voor lithium-ion batterijen	11
9. Protection of lithium anodes by atomic layer deposition of metal oxides	12
10. Atomic layer deposition of metal sulphides for energy applications	13
11. Oppervlakfysica van elektrodes voor groene waterstof productie.....	14
DISC	16
12. Far infrared spectroscopy of thin film chalcogenides for emerging memory technologies	16
13. A combined theoretical/experimental study of the stability of 2D metal-organic frameworks to design efficient photocat	17
14. Impact van defecten op SiC vermogenscomponenten: een deep-level transient spectroscopy studie	20
DRAFT	22
15. Korrelgroei tijdens dunne-laagdepositie: een zoektocht naar een exponent.....	22
16. Depositie van reactieve metalen	23
DYNAMAT	25
17. Biaxiale nanomagnetten als bouwsteen voor gebalanceerde half-adders.....	25
18. Meerschalgige modellering van magnetisch artificieel spinijs	26
19. Manipuleren van spingolven met spin-gepolariseerde stromen	27
20. Nanomagnetische realisatie van Brownse motoren.....	28
21. Modellering van magnetische dynamica in de medische beeldvormingstechniek "magnetic nanoparticle imaging (MPI)"	29
EMR	31
22. Determining transition metal ion concentration and valence state in lead silicate glasses using paramagnetic R. spectro.....	31
23. Electron paramagnetic resonance (EPR) spectroscopy studies of plasma-induced radicals in pre-electrospinning	32
LUMILAB	34
24. Nabij-infrarood emitterende luminescente materialen voor medische beeldvormingstoepassingen	34
25. Thermally stimulated luminescence for defect characterization in composites	36
26. Small and sensitive: multiple protection strategies for light emitting quantum dots	37
27. Quantum mechanical view on ultrafast scintillators.....	39
28. Lanthanide networks in luminescent materials: insights from Monte-Carlo simulations	40
29. Optical spectroscopy of metastable states in persistent phosphors	41
30. Microscopic investigation of redox processes in luminescent materials	42
31. Gallium nitride illuminated	43

COCOON

CONFORMAL COATING OF NANOMATERIALS

COCOON

PROMOTOREN : Website : www.cocoon.ugent.be



Prof. Christophe Detavernier



Prof. Dr. Jolien Dendooven

Modaliteiten thesisonderwerpen CoCooN

Voor alle aangeboden thesis onderwerpen geldt:

- Mobiliteitsmogelijkheden : gezien de industriële relevantie van dunne film depositie en de bestaande contacten tussen de onderzoeksgroep en bedrijven/onderzoeksinstituten die in dit domein actief zijn, kan er desgewenst en in onderling overleg getracht worden om een bedrijfsstage bij dit thesisonderwerp te definiëren, maar dit is uiteraard geen verplichting.
- Mogelijkheid tot opname in de Educatieve Master : Op dit moment is er geen expliciet educatief aspect voorzien. In geval van sterke interesse voor een specifiek onderwerp kan in onderling overleg worden bekeken of/hoe een educatief aspect in het thesisonderwerp ingepast kan worden.

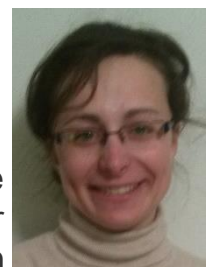
1. Monte Carlo modellering van gas transport en dunne film depositie in complexe structuren

Groep: CoCooN

Promotor: Christophe Detavernier en Jolien Dendooven

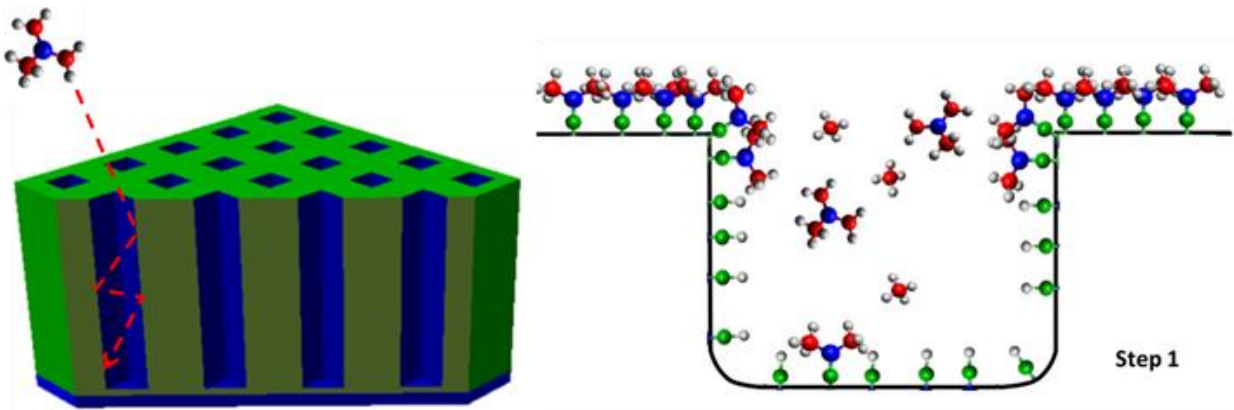
Begeleiding: Véronique Cremers

Context: Atomaire laag depositie (ALD) is een dunne film depositie techniek die niet meer weg te denken is in de proces schema's voor de fabricage van moderne microprocessors en geheugencellen, en de toepassingen van ALD in de micro-elektronica en daarbuiten zullen de komende decennia enkel toenemen. De kracht van de techniek ligt in zijn uitstekende conformaliteit, waardoor dunne coatings van slechts enkele atoomlagen dik gelijkvormig kunnen afgezet worden op complexe 3D gestructureerde substraten. Dit maakt van ALD de ultieme coating methode voor de nanotechnologie,



bijvoorbeeld in de nano-elektronica, voor het maken van vastestofbatterijen of voor het aanbrengen van actieve of beschermende coatings op sensoren.

De COCOON onderzoeksgroep heeft de voorbije jaren bijgedragen tot een beter begrip van de conformaliteit van ALD via experimenten en simulaties. Via een 3D Monte Carlo model kon inzicht verkregen worden in de invloed van procesparameters op de conformaliteit van ALD coatings in eenvoudige structuren, zoals een rechthoekige holte of op een rechthoekige pilaar. Verschillende onderzoeksvragen dienen echter nog beantwoord te worden. Bepaalde experimentele resultaten zijn tot op heden onbegrepen en kunnen niet verklaard worden aan de hand van het simulatiemodel, wat vraagt om een uitbreiding van de Monte Carlo code zodat meer complexe geometrieën, depositie parameters en reactiestappen in rekening gebracht kunnen worden.



Links: Schematische voorstelling van gas transport in een 3D rooster van rechte holtes.

Rechts: Schematische weergave van oppervlakreacties die resulteren in dunne film groei tijdens ALD.

Jouw bijdrage: Dit thesisonderwerp biedt de student verschillende mogelijkheden. Een eerste mogelijkheid is het uitbreiden van de Monte Carlo code, bijvoorbeeld om de modellering van gas transport en depositie in meer complexe structuren mogelijk te maken, of om gas transport op reactor niveau in rekening te brengen. Een ander mogelijk doel is om de bestaande code uit te bouwen tot meer gebruiksvriendelijke software, zodat op een eenvoudige manier voor zeer diverse processen en structuren de procesparameters kunnen worden geoptimaliseerd. Afhankelijk van de interesses van de student en het verloop van het thesisproject kan de nadruk in deze scriptie gelegd worden op programmeren en modellering aangevuld met beperkt experimenteel werk, of kan er gestreefd worden naar een mix van simulaties en een meer uitgebreide experimentele studie (in een vernieuwd S1 gebouw – de renovatie activiteiten zullen afgerond zijn tegen de start van academiejaar 2020-2021!).

2. In situ meettechnieken voor een beter begrip van atomaire laag depositie: een big data approach

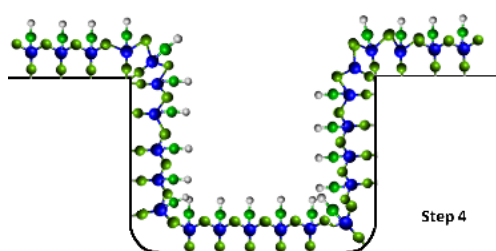
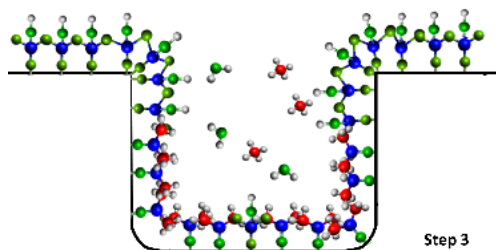
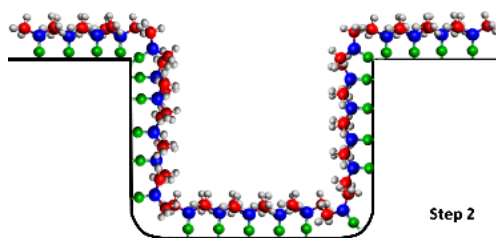
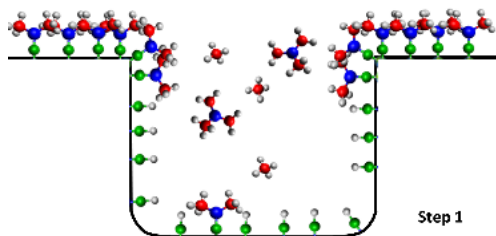
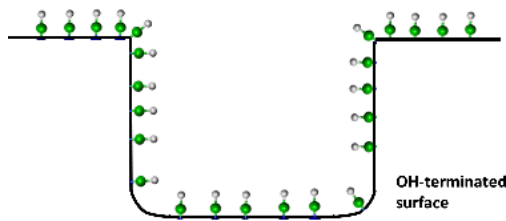
Groep: [CoCooN](#)

Promotor: [Christophe Detavernier](#) en [Jolien Dendooven](#)

Begeleiding: [Andreas Werbrouck](#)



Atomaire laag depositie (ALD) is een techniek die toelaat om atoomlaag per atoomlaag dunne lagen af te zetten. Hierbij maakt ALD gebruik van



gecontroleerde reacties tussen een moleculaire damp en het oppervlak dat gecoat moet worden. Dit zorgt ervoor dat ALD, naast vlakke substraten, ook probleemloos ingewikkelde 3D-oppervlakken kan coaten. Deze unieke eigenschappen (atomaire diktecontrole, coaten van 3D substraten) maken de techniek bijzonder geschikt voor (onder andere) toepassingen in de halfgeleiderindustrie en speelt de techniek een cruciale rol in de steeds verdergaande miniaturisering van componenten.

Voor het ontwikkelen en optimaliseren van nieuwe processen is het relevant om te onderzoeken welke gasvormige reactieproducten tijdens verschillende ALD-processen vrijkomen. Er bestaan verschillende technieken om de gassen in de reactor te karakteriseren: bij *in-situ* massaspectrometrie (MS) worden de gasmoleculen onder een elektronenbundel geïoniseerd en gefragmenteerd, waarna de massa van de fragmenten bepaald wordt, om zo tot een unieke *fingerprint* van de molecules die als gas aanwezig zijn te komen. Bij *in-situ* atomaire emissiespectroscopie (AES - Gencoa Optix) wordt er lokaal een plasma gemaakt van het gas. Aan de hand van het optische emissiespectrum van dit plasma kunnen daarna de aanwezige atomen en ionen geïdentificeerd worden.

Onlangs werd binnen onze groep een nieuwe manier ontwikkeld om *in situ* massaspectra op te meten (Werbrouck *et al.*, in voorbereiding). Massaspectrometrie werd eerder al gebruikt voor het bepalen van het massaspectrum van reactieproducten, maar onze nieuwe methodiek laat toe om veel van de beperkingen die traditioneel gelden te omzeilen en een volledig beeld te krijgen van de relevante reactieproducten. De AES-metingen leveren complementaire informatie en het gebruik van deze techniek is nieuw binnen de groep en de ALD-gemeenschap in het algemeen.

De grote hoeveelheid data die *in situ* gegenereerd wordt, zorgt ervoor dat het efficiënt verwerken van de data een must is: een stevige basiskennis Python (of een andere programmeertaal) en de wil om ook op dit vlak bij te leren is een absolute minimumvereiste, doorheen het jaar wordt verwacht dat je samen met de begeleider de nodige tools ontwikkelt voor het combineren en interpreteren van je data.

Tijdens deze thesis zal de student ervaring opdoen met ALD, *in-situ* technieken zoals optische emissiespectroscopie, massaspectrometrie, automatische dataverwerking en visualisatie. Dit project focust op een beter fundamenteel begrip van processen die cruciaal zijn voor de halfgeleiderindustrie.

3. Aanbrengen van functionele coatings op poeders met behulp van atomaire laag depositie

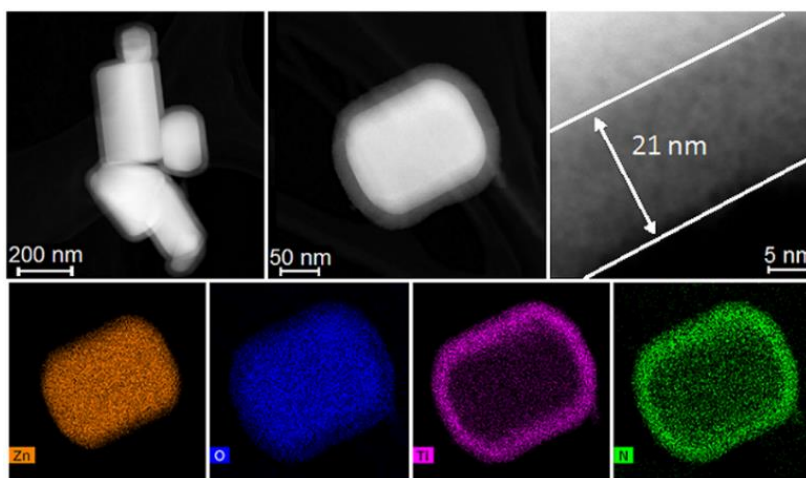
Groep: CoCooN

Promotor: Christophe Detavernier en Jolien Dendooven

Begeleiding: Geert Rampelberg



Atomaire laag depositie (ALD) is een nanotechnologie voor het aanbrengen van functionele dunne coatings op 3D oppervlakken. De grootste commerciële doorbraak van deze technologie gebeurde ongeveer 10 jaar geleden binnen het domein van de micro-elektronica, waar het onontbeerlijk bleek voor de verdere miniaturisatie van transistoren. Naast dit belangrijke succesverhaal werd ALD de laatste jaren ook geïntroduceerd in de zonnecellenindustrie, voor het verbeteren van de efficiëntie van zonnecellen, en werd sterke vooruitgang geboekt in de ontwikkeling van ALD voor flexibele substraten, zoals flexibele elektronica. Dankzij de mogelijkheid tot het coaten van 3D oppervlakken blijkt ALD eveneens de technologie bij uitstek voor de functionalisering van poeders en partikels. Mogelijke toepassingen zijn te vinden in LED verlichting, Li-ion batterijen, katalysatoren, farmaceutica,... Internationaal is de race ingezet naar het commercialiseren van ALD voor poedertechnologie! CoCooN was één van de eerste onderzoeksgroepen wereldwijd die er met succes in slaagde om ALD op poeders toe te passen. Sinds enkele jaren worden via verschillende projecten nieuwe toepassingsgebieden onderzocht. Met de bouw van een nieuw toestel komen nieuwe mogelijkheden binnen bereik, wat uiteraard veel extra onderzoek vereist.



ZnO nanopoeder, gecoat met 21 nm TiN m.b.v. plasma-geassisteerde ALD.

4. Atomaire laag depositie van kobalt voor toepassingen in de halfgeleiderindustrie
Groep: CoCooN Promotor: Christophe Detavernier en Jolien Dendooven

Begeleiding: Matthias Minjauw en Ji-Yu Feng



Context: Atomaire laag depositie (Engels: atomic layer deposition, ALD) is onmisbaar voor de prestaties van talrijke elektronische producten. Zonder ALD zouden smartphones bijvoorbeeld niet zo klein en krachtig gemaakt kunnen worden. De drijfveer van de halfgeleiderindustrie is de “Wet van Moore”. Deze stelt dat het aantal transistoren op een microchip elke 2 jaar verdubbelt, wat ervoor zorgt dat deze chips tegelijk goedkoper en sneller worden. Technisch gezien wordt dit bereikt door de transistoren en elektronische circuits op deze chips steeds compacter te maken, wat innovaties in technologie en materialen vergt. ALD is een van deze innovaties, en het is intussen een miljardenindustrie geworden.

ALD is een techniek waarmee ultradunne laagjes van anorganische materialen (0.1 nm – 10 nm) kunnen aangebracht worden op complexe oppervlakken met een uitstekende controle over de laagdikte en kwaliteit. Tot nu toe heeft vooral ALD van metaaloxides (typisch elektrische isolatoren) haar toepassing gevonden in de halfgeleiderindustrie, terwijl de metallische geleiders nog worden geproduceerd met meer traditionele methodes. De meest gebruikte geleider is momenteel koper, maar er wordt verwacht dat de prestaties van koper geleiders met afmetingen beneden de 10 nm onvoldoende zullen zijn, waardoor er aan gedacht wordt om voor die afmetingen het koper te vervangen door kobalt. Deze context verklaart de sterk groeiende interesse in ALD van kobalt.

Doelstelling van deze thesis: De onderzoeksgroep COCOON is op internationaal niveau bekend omwille van haar uitgebreide infrastructuur en expertise die toelaat om de oppervlakfysica van ALD-processen te ontrafelen en dunne film eigenschappen in detail te bestuderen. In deze omgeving zal deze thesis focussen op de ontwikkeling van kobalt ALD voor nano-elektronica toepassingen, en kan de betrokken student(e) ervaring opdoen in state-of-the-art materiaalonderzoek. Deze ervaring vormt een ideale opstap naar een PhD in deze onderzoekcontext.



ALD is onmisbaar geworden in de moderne elektronica

5. Selectoren : cruciale componenten voor next-gen geheugentechnologie

Groep: CoCooN Promotor: Christophe Detavernier

Begeleiding: Jonas Keukelier en Karl Opsomer



Si-gebaseerd “FLASH” geheugen vormt momenteel het niet-vluchtige geheugen bij uitstek door zijn lage productiekost en hoge dichtheid, en is alom aanwezig in PC's (solid state drives), smartphones, USB sticks, tablets,... Om aan de exponentieel toenemende vraag aan geheugenopslag tegemoet te komen en omdat verdere schaling van deze techniek steeds moeilijker wordt, is het noodzakelijk om naar alternatieven te kijken die zowel snel, compact als energiezuinig zijn. Momenteel verricht men o.a. onderzoek naar geheugens gebaseerd op magnetisme (MRAM), kristallisatie van een amorfe laag (PCM) en het groeien/verbreken van een geleidend filament (CBRAM), elk met hun specifieke voor- en nadelen. Eén voordeel van deze nieuwe technieken is dat de eenvoudige structuur toelaat om deze in te bouwen in zogenaamde “3D crossbar arrays”. Hierbij worden meerdere lagen van geheugencellen (de blauwe cellen in de figuur) boven elkaar geplaatst om zo, via de 3^e dimensie de totale opslag capaciteit per oppervlakte-eenheid sterk te vergroten. Om vervolgens een specifieke cel uit te lezen in deze array zonder invloed te ondervinden van de omringende geheugencellen dienen we echter een specifieke selectie component toe te voegen aan iedere cel. Deze component heet een “selector”.

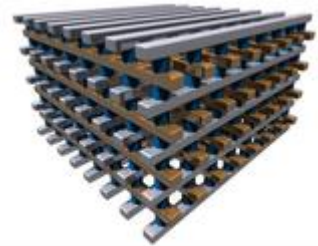


fig. 2 Voorbeeld van een 3D crossbar array

Selectoren dienen een zeer specifiek IV gedrag te vertonen en moeten bovendien compatibel zijn met de geheugencellen waarmee ze gepaard zullen worden. Chalcogenide materialen (Se, S en Te houdende materialen) vertonen een dergelijk gedrag en zijn compatibel met de meeste nieuwe geheugentechnologieën. Het verschijnsel wordt Ovonic Threshold Switching of OTS genoemd. Het exacte mechanisme dat aan de basis ligt van dit gedrag wordt echter nog niet begrepen.

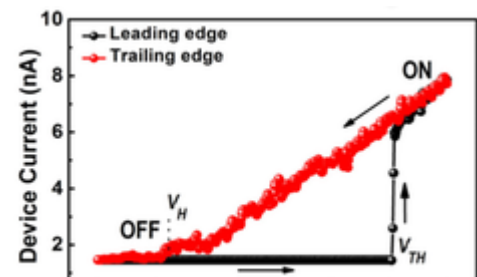


fig. 3 IV gedrag van een selector

In deze thesis zullen we een aantal prototypes selector cellen maken op basis van GeSe_x en hun gedrag analyseren met behulp van elektrische metingen. Deze metingen kunnen zowel gebeuren bij kamertemperatuur, wat informatie oplevert over de prestaties van het materiaal onder standaard gebruiksomstandigheden, alsook bij cryogene temperaturen, wat fundamenteel inzicht oplevert in het onderliggende mechanisme dat verantwoordelijk is voor het OTS fenomeen. Naar gelang de vooruitgang van het project kunnen we de materialen aanpassen door bijvoorbeeld dopanten toe te voegen en te onderzoeken hoe deze de elektrische prestaties beïnvloeden (bij cryogene temperaturen).

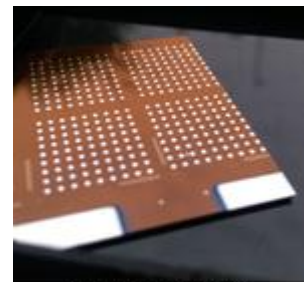
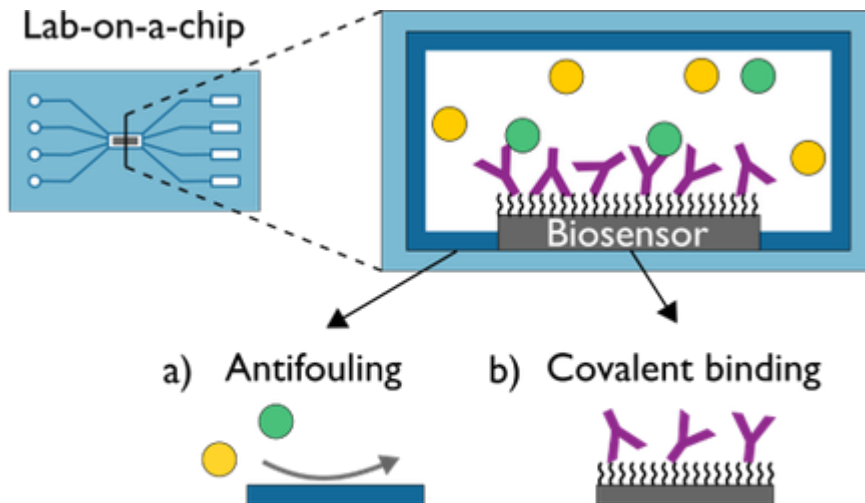


fig. 4 Prototype selector cellen

6. Modificeren van oppervlakeigenschappen voor laboratorium-op-een-chip apparaten

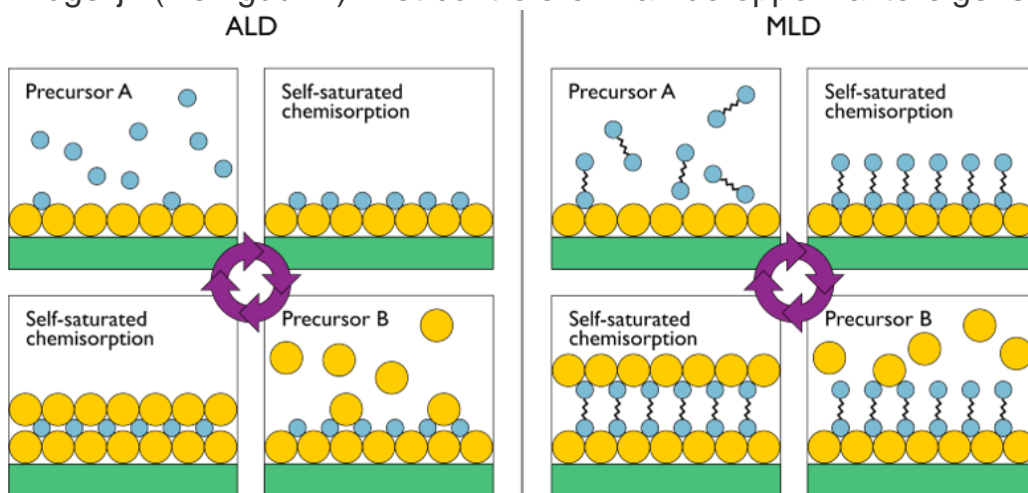
Groep: CoCooN Promotor: Christophe Detavernier en Jolien Dendooven

Begeleiding: Sofie Vandenbroucke



Figuur 1: Schematische weergave van een micorfluidisch kanaal in een LOC.

Gebruiksvriendelijke, slimme elektronica hebben het potentieel om de gezondheidszorg aanzienlijk te verbeteren. Laboratorium-op-een-chip apparaten (LOC's) bijvoorbeeld kunnen ziekte-indicators snel en vroegtijdig opsporen op elke gewenste locatie en tijdstip, wat de herstel- en overlevingskansen van de patiënt aanzienlijk verhoogt. In vergelijking met conventionele laboratoriumtechnieken zijn LOC's compacter, sneller, goedkoper en hebben ze veel kleinere analyt-volumes nodig, wat de miniaturisatie van medische technologieën mogelijk maakt. Een LOC bestaat uit meerdere biosensoren geïntegreerd in een microfluidisch platform. Hierdoor is automatische en in-flow detectie van het analyt in microfluidische kanalen mogelijk (zie figuur 1). Het controleren van de oppervlakte-eigenschappen



Figuur 2: Het principe van atomaire laag depositie (ALD, links) om inorganische films te creëren. Organische en hybride organisch-inorganische films kunnen gemaakt worden via zijn moleculaire tegenhanger genaamd moleculaire laag depositie (MLD, rechts).

in dit platform is essentieel om te kunnen interageren met biologische moleculen. (a) Enerzijds zijn er anti-fouling lagen nodig op de kanaalwanden om het verlies van analyt-moleculen te voorkomen. (b) Anderzijds moeten biologische receptoren covalent en plaats specifiek gebonden worden in de biosensor gebieden.

De bio-functionaliserings van oppervlakken wordt momenteel verwezenlijkt via vloeistof-gebaseerde depositietechnieken. Dit leidt tot dikke, niet-conforme en niet-uniforme lagen op micro-gestructureerde 3D oppervlakken. In deze masterproef wordt daarom een gas-gebaseerde depositie techniek genaamd “moleculaire laag depositie” onderzocht (MLD, figuur 2) om aan deze eisen te voldoen. Geïnspireerd door de eigenschappen van bestaande anti-fouling lagen, zullen vergelijkbare structuren worden opgebouwd in een vacuümkamer met perfecte controle over de laagdikte. De groei van de lagen zal onderzocht worden met *in situ* infrarood spectroscopie en ellipsometrie en de films zullen verder gekarakteriseerd worden met behulp van o.a. x-stralen reflectie en diffractie. In nauwe samenwerking met de afdeling Life Science Technologies in imec (Leuven) kunnen de biologische eigenschappen van deze films onderzocht worden door antilichamen of andere biologische receptoren aan deze lagen te binden en dit te volgen via o.a. fluorescentiemicroscopie en toxiciteitstesten.

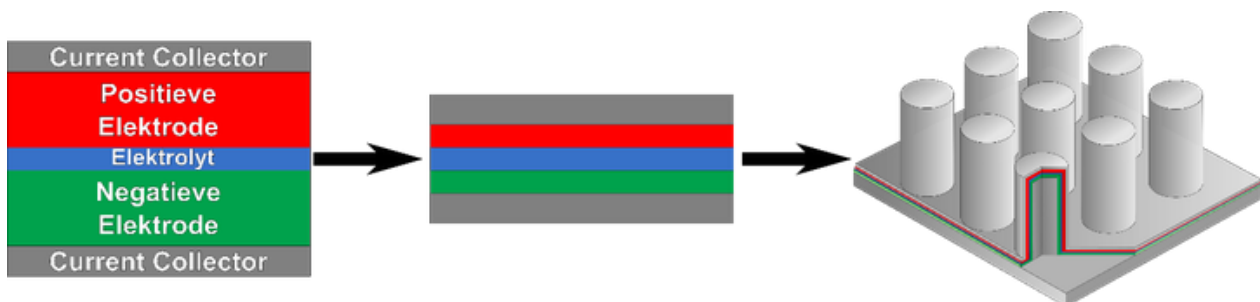
7. Dunne film vaste stof batterijen

Groep: [CoCooN](#) Promotor: [Christophe Detavernier](#) en [Jolien Dendooven](#)

Begeleiding: [Andreas Werbrouck](#) en [Arpan Dhara](#)



Een van de volgende exponenten van de wet van Moore is het *Internet of Things* (IoT). Sensoren worden steeds kleiner, performanter en vooral alomtegenwoordig. *Energy harvesting* (d.i. energiewinning uit bv. omgevingslicht, thermische of mechanische bronnen) en vooral de opslag van die energie vormt een bijzondere uitdaging, zeker in het geval van bv. implanteerbare sensoren voor medische toepassingen.



Een veelbelovende batterijarchitectuur die hierop een antwoord kan bieden is de *3D dunne film vaste-stof batterij*, waarbij de batterijcomponenten (positieve elektrode, elektrolyt en negatieve elektrode) als dunne lagen worden afgezet bovenop een 3D structuur van micropilaren (zie bovenstaande figuur). Deze batterijarchitectuur is niet alleen compatibel met microelectronica processen zodat een *on-chip batterij* tot de mogelijkheden behoort, ze is ook veel veiliger dan de huidige batterijtechnologie en laat hogere energie- en vermogensdichtheden (en dus snellere laadtijden) toe.

Atomaire laag depositie (ALD) is een depositietechniek waarbij atoomlaag-per-atoomlaag filmen kunnen gegroeid worden. Niet enkel vlakke substraten kunnen zo gecoat worden, maar ook complexe 3D structuren kunnen volledig conform bedekt worden met een ultradun (0.1nm-100nm) laagje materiaal. ALD is een cruciale depositietechniek die de ontwikkeling van 3D vaste-stof batterijen mogelijk maakt, aangezien dit type batterijen zeer hoge eisen stellen aan de gedeponeerde materialen. Het kleinste defect in bv. de elektrolyetlaag kan aanleiding geven tot een kortsluiting en falen van de batterij in kwestie.

Binnen de onderzoeksgroep COCOON (*conformal coating of nanomaterials*) werd de voorbije jaren sterk geïnvesteerd om onderzoek naar batterijmaterialen mogelijk te maken. Zo is onlangs een unieke gloveboxcluster in gebruik genomen waarbij verschillende dunnefilmtechnieken gecombineerd kunnen worden met de (elektrochemische) karakterisering van het materiaal zonder de samples aan de lucht bloot te stellen. Ook de elektrochemische metingen zelf werden geautomatiseerd, zodat tientallen cellen op verschillende temperaturen gekarakteriseerd kunnen worden. Verder werd infrastructuur en expertise ontwikkeld om ALD processen voor relevante batterijmaterialen *in-situ* te bestuderen met spectroscopische ellipsometrie en massaspectrometrie, en de gegroeide lagen structureel te karakteriseren met X-stralen-reflectie, -diffractie (tijdens annealing en/of oxidatie) en -fluorescentie.

In deze thesis zullen een aantal nieuwe ALD processen voor lithium-houdende batterijmaterialen ontwikkeld en bestudeerd worden: het is de bedoeling om, voortbouwend op bestaande kennis rond thermische ALD processen, nieuwe thermische en plasma-versterkte ALD processen te ontwikkelen voor de depositie van elektrolyet- en elektrodematerialen. In combinatie met eerder binnen de groep ontwikkelde materialen kan dan ultiem een (3D) solid state batterij gefabriceerd en getest worden. Op die manier brengt de thesis inzicht en praktische ervaring rond batterijtechnologie, depositietechnieken en dunne-film karakterisering. Deze ervaring vormt een ideale opstap naar een PhD in deze onderzoekcontext.

8. Atomaire laag depositie van functionele coatings voor lithium-ion batterijen

Groep: [CoCooN](#) Promotor: [Christophe Detavernier](#) en [Jolien Dendooven](#)

Begeleiding: [Lowie Henderick](#)

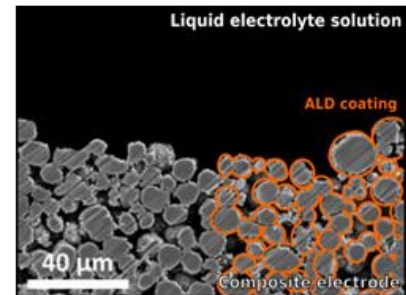
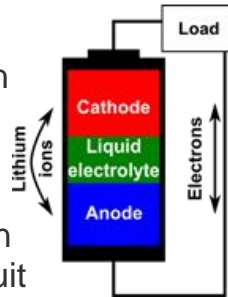
Context: Lithium-ion batterijen vertegenwoordigen de meest prominente vorm van energieopslag. Ze zijn overal rondom ons aanwezig, van kleine batterijen in smartphones tot grote batterijen in elektrische voertuigen en in grid-storage energieopslag bij bv. een windmolenpark.

Echter, sinds de uitvinding van de lithium-ion batterij, waarvoor in 2019 de nobelprijs werd toegekend, zijn er inherent geen grote technologische stappen voorwaarts gemaakt, en is de levensduur en opslagcapaciteit nagenoeg hetzelfde gebleven, terwijl de vraag naar efficiëntere energieopslag enkel stijgt met de technificatie van



de hedendaagse maatschappij. Een batterijelektrode (anode of kathode) bestaat uit een mengsel van actief materiaal (bv. een lithium cobalt oxide of LiCoO_2), een elektronische geleider zoals carbon black, en een zogenaamde binder. Het aanbrengen van een ultra-dunne coating rond het elektrodemateriaal kan de stabiliteit en de levensduur van de batterij verlengen, of zelfs zorgen voor een meer efficiënte werking, in de zin dat we meer energie op een snellere manier kunnen opslaan.

Doelstelling De complexe vorm van het elektrode oppervlak sluit het gebruik van line-of-sight depositietechnieken uit. Atomaire laag depositie (ALD), een depositietechniek die precursoren uit de gasfase laat chemisorberen aan



het oppervlak, kan gebruikt worden om extreem dunne, conformele coatings uniform over het volledige elektrodeoppervlak af te zetten. De doelstelling van dit project betreft het gebruik van deze ALD techniek om beschermende- of functionele coatings met een hoge elektronische en ionaire geleidbaarheid af te zetten op batterij elektrodes. In dit project zullen ALD processen onderzocht worden om verschillende fosfaatcoatings te deponeren. De gegroeide lagen zullen gekarakteriseerd worden met X-stralen reflectie, diffractie en fluorescentie. Vervolgens zullen de coatings functioneel geëvalueerd worden in een Argon-gevulde handschoenkast, waarbij het effect van de coating op het laden/ontladen van het onderliggende elektrodemateriaal onderzocht zal worden. De coating zal hierbij eerst gekarakteriseerd worden op een vlakke testelektrode, waarbij zowel de ionaire als elektronische geleidbaarheid in detail onderzocht kunnen worden. Een materiaal met goede karakteristieken kan dan vervolgens gedeponerd worden op een relevante poeder-elektrode. Op die manier brengt de thesis inzicht in depositietechnieken, dunne-film karakterisering, materiaalfysica en batterijtechnologie. Deze ervaring vormt een ideale opstap naar een PhD in deze onderzoekcontext.

9. [Protection of lithium anodes by atomic layer deposition of metal oxides](#)

Group: [CoCooN](#) Promotors: [Christophe Detavernier](#) and [Jolien Dendooven](#)

Supervisors: [Bo Zhao](#) and [Andreas Werbrouck](#)

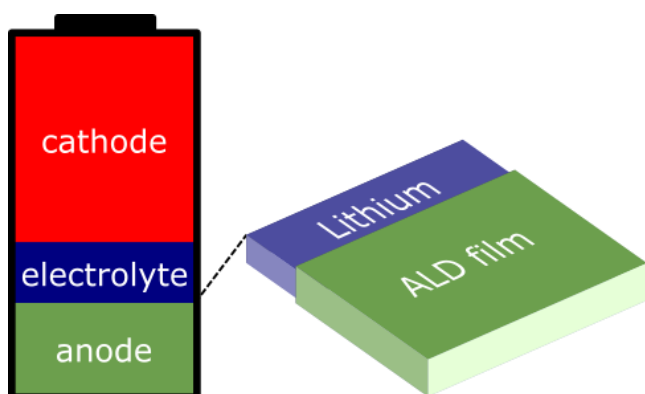
Challenge: Nowadays, lithium-ion batteries (LIBs) represent the most prominent form of electrical energy storage. They are present everywhere around us, from the battery in our smartphones up to the large-scale batteries in electric vehicles and in grid storage farms. However, since their invention (which was awarded the 2019 Nobel



prize for chemistry), they have essentially not progressed much in terms of energy capacity and lifetime. At the same time, the continued electrification of our society demands greatly more efficient energy storage.

Driven by the search for more energy in the battery, pure metallic lithium is considered as a potential next-generation anode. Currently, the anode is constructed of graphite, which has a capacity of only 372mAh/g. Lithium is a promising substitute with a high theoretical capacity (3860 mAh/g, more than 10x that of graphite) and a very low potential (-3.04V vs. standard hydrogen electrode) to maximize cell voltage (and thus power). However, the extreme reactivity of a pure lithium surface can induce side reactions, reducing the performance and lifetime of batteries employing lithium metal as anodes. Moreover, during electrochemical cycling the lithium often forms dendrites, which can cause a short-circuit between the electrodes and result in cell failure. One promising solution to these issues is the application of thin protection layers to stabilize the lithium metal surface.

Goals: Selected metal oxides can offer high corrosion resistance, outstanding thermal stability, and favourable chemical inertness towards Li. Based on these merits, selected metal oxides are interesting candidates as the protective layer on the surface of lithium metal. Atomic layer deposition (ALD), which is based on self-limiting chemical reactions between gaseous precursors and a solid surface, offers an ideal method for thin film preparation in view of the layer-by-layer growth mode and atomic-level control over the thickness.



In this project, ALD process will be developed for the deposition of oxide- or phosphate films on metallic Lithium substrates. These films will, amongst others, be characterised using X-ray based techniques such as fluorescence (XRF), diffraction (XRD), reflection (XRR) and x-ray photo-electron spectroscopy (XPS). The battery electrodes will be characterised functionally in a protected glovebox environment. Of course, the input of the student is valued and the research direction can be modified based on interesting proposals/discoveries.

In this way, this project gives the student a solid background in thin film deposition and characterisation, materials research and battery technology.

10. Atomic layer deposition of metal sulphides for energy applications

Group: [CoCooN](#) Promoters: [Christophe Detavernier](#) and [Jolien Dendooven](#)

Supervisor: [Femi Mathew](#)

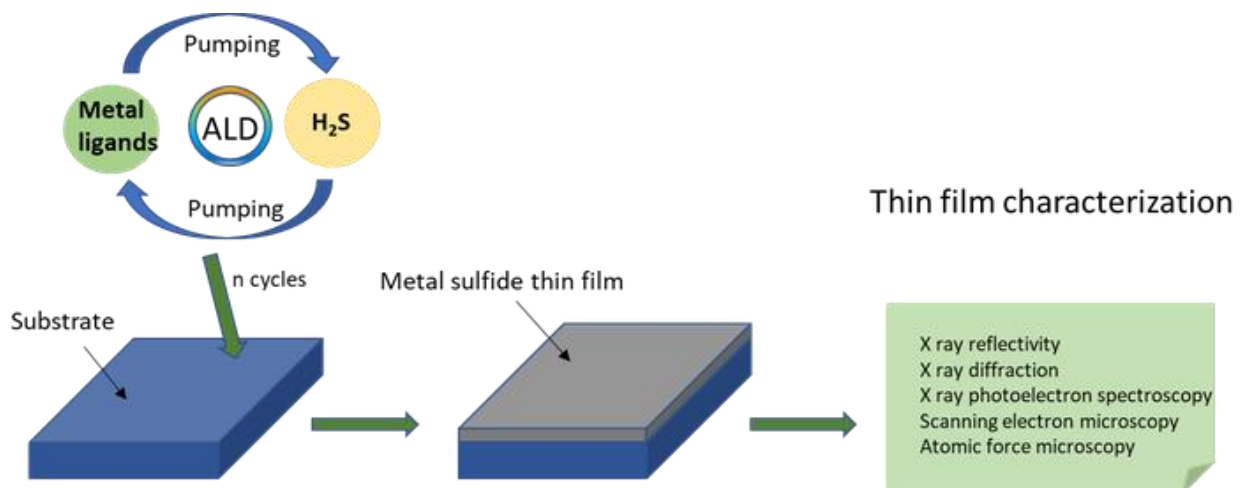
The current demand for energy efficient materials motivates researchers to increasingly focus on metal sulphides. Metal sulphides belong to the class of metal chalcogenides, and offer tunable chemical, electronic and optical properties. These materials are excellent electrocatalysts in hydrogen evolution reactions owing to their unique properties. Also, metal sulphides can serve as electrodes



and electrolytes in Li ion batteries. In order to explore the prospects offered by these fascinating materials it is essential to have scalable and well-controlled deposition of thin sulphide coatings via suitable methods.

Atomic layer deposition (ALD) is a powerful technique used for depositing ultrathin films with high level of conformality and precise control over the thickness and composition. Moreover, the crystallinity, roughness and impurity levels of the material can be accurately controlled. While ALD of metal oxides is rather well established, ALD of metal sulphides needs to be explored more, as it can pave the way to the development of novel energy devices.

In this thesis, we aim to deposit thin films of metal sulphides using atomic layer deposition. The obtained thin films can be characterized by means of x-ray reflectivity, x-ray diffraction and x-ray photoelectron spectroscopy techniques to determine their thickness, crystallinity and composition, respectively. The surface morphology can be investigated using scanning electron microscopy and atomic force microscopy techniques. Finally, functional properties of the deposited films will be explored in energy conversion or energy storage devices.

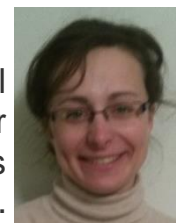


11. Oppervlakkfysica van elektrodes voor groene waterstof productie

Groep: [CoCooN](#) Promotor: [Jolien Dendooven](#) en [Christophe Detavernier](#)

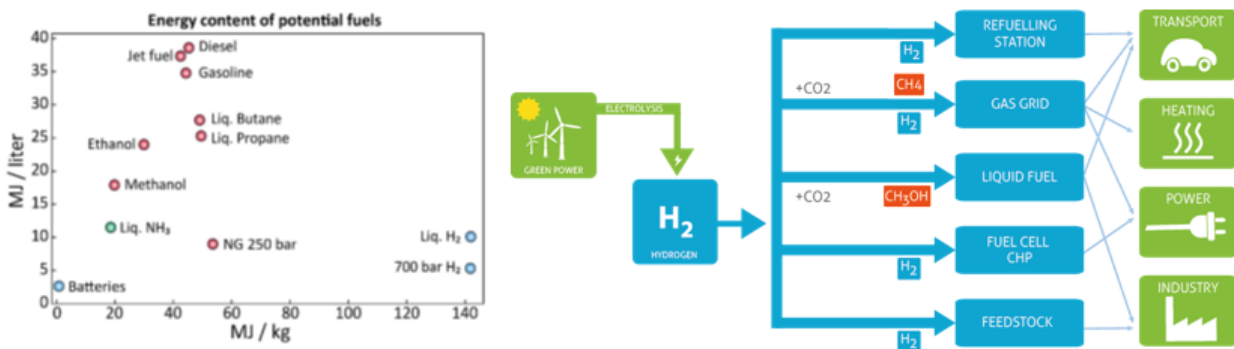
Begeleiding: [Véronique Cremers](#)

Context: Het is evident dat hernieuwbare elektriciteit een hoofdrol zal spelen in de transitie naar een CO₂ neutraal energiesysteem. Hierdoor klinkt de vraag naar een oplossing voor het probleem van onbalans tussen productie en afname van elektriciteit steeds luider. Batterijtechnologie vormt een deel van de oplossing, maar is anderzijds moeilijk inzetbaar voor de zware transportsector (luchtvaart, scheepvaart en zwaar wegtransport), voor lange termijn energieopslag over de seizoenen heen en voor energietransport over grote afstanden. Wereldwijd is de vraag van de industrie



duidelijk: er is nood aan een duurzame oplossing voor de omzetting van elektriciteit in synthetische brandstoffen, omwille van hun hoge energiedichtheid (zie figuur).

Hoewel er reeds technologie voor handen is die het splitsen van water in zuurstof en waterstof, als energiedrager, mogelijk maakt via een elektrochemisch proces, is deze vooralsnog te duur om in competitie te gaan met processen gebaseerd op fossiele brandstoffen. De sleutel ligt bij de ontdekking en ontwikkeling van nieuwe processen, materialen en technologieën. Aangezien elektrochemische reacties zich afspelen aan de interfaces tussen het elektrolyt en de elektrode is het belangrijk om de oppervlakfysica van elektrodes te begrijpen en te kunnen controleren op atomaire schaal. De COCOON onderzoeksgroep speelt hierop in door atoomlaagdepositie (ALD) in te zetten voor het vervaardigen van dunne lagen met atomair precieze controle over de eigenschappen van het oppervlak.



Jouw bijdrage: In deze thesis is het de bedoeling om door middel van ALD metallische nanodeeltjes af te zetten op elektrodeoppervlakken en de impact van de samenstelling, vorm, grootte en oppervlakdensiteit van de nanodeeltjes op de elektrochemische omzetting van water systematisch te bestuderen. Hiertoe zal je gebruik maken van een wereldwijd uniek oppervlak-karakteriseringsplatform dat door de COCOON onderzoeksgroep werd ontwikkeld en geïnstalleerd is in het vernieuwde S1 gebouw (de renovaties zullen afgerond zijn tegen de start van het academiejaar 2020-2021!). Deze thesis zal je dus hands-on ervaring geven met het deponeren van materialen, het analyseren van de oppervlakfysica, en het functioneel karakteriseren van deze materialen voor het elektrochemisch splitsen van water. Deze ervaring vormt een ideale opstap naar een PhD in deze onderzoekcontext.

DISC

DEFECTS IN SEMICONDUCTORS

DISC

PROMOTOREN

website: www.disc.ugent.be



Prof. Henk Vrielinck

12. [Far infrared spectroscopy of thin film chalcogenides for emerging memory technologies](#)

Groep: [DiSC](#) Promotor: [Prof. Henk Vrielinck](#)

Begeleiding: [Dr. Samira Khelifi](#)

Context: Chalcogenides are materials that contain one of the elements S, Se and/or Te. These materials find applications in several areas like thin film solar cells, optical components and (emerging) memory technologies. For the latter, Ge-Sb-Te is a well-known material that has been used in the past in rewritable optical disks. Nowadays, Ge-Sb-Te (and several modifications) is used in phase change resistive memories (PCM) [1]. Some chalcogenides show “volatile” threshold switching [2] (i.e. conducting for a voltage above a certain threshold and non-conductive at lower voltage) rather than “non-volatile” memory switching. These materials are of high interest for a selector element, which is placed in series with the memory element to enable integration in dense memory arrays. The characterization of the structure of these materials is of key importance to understand their properties, and to optimize the performance of these materials as memory or selector element.

Goal: In this thesis, the aim is to explore Fourier Transform Infrared Spectroscopy in the Far Infrared (FIR-FTIR) to study the occurrence of specific bonds in thin film chalcogenides. In a first step, different stacks containing these materials will be characterized and compared, and the modelling for data extraction will be optimized. From this study, the optimal stack and measurement conditions will be selected. In a next step, different chalcogenide films will be analysed in order to link the

occurrence/absence of bonds to composition and post deposition treatments. In order to gain further insight in the material, there is the possibility to submit the samples for complementary analysis like Raman spectroscopy at imec.

The thesis is in collaboration with imec. The purpose is to interact with the materials researchers to define and setup the different stacks to be studied, and to get access to complementary analysis techniques, if needed.

Educatieve master: Dit onderwerp wordt niet aangeboden in de educatieve master.

Mobiliteit: Dit onderwerp biedt geen directe mogelijkheden voor mobiliteit.

[1] D. Lencer, M. Salanga, and M. Wuttig, "Design Rules for Phase-Change Materials in Data Storage Applications," *Adv. Mater.*, vol. 23, no. 18, pp. 2030–2058, 2011.

[2] A. Velea et al., "Te-based chalcogenide materials for selector applications," *Scientific Reports*, vol. 7, no. 1, p. 8103–, 2017.

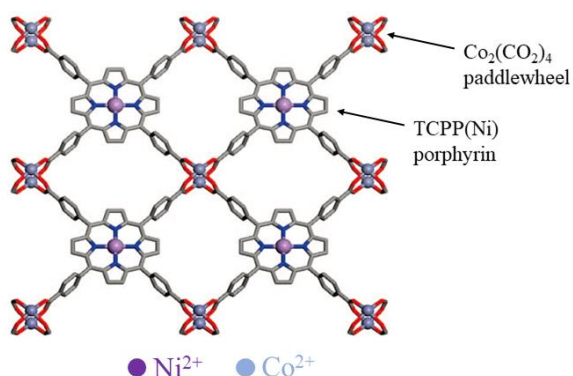
13. A combined theoretical/experimental study of the stability of 2D metal-organic frameworks to design efficient photocatalysts

Onderzoeksgroepen: [DiSC](#) and [EMR](#) in collaboration with Center for Molecular Modeling (CMM)

Promotoren: [Prof. Veronique Van Speybroeck](#), [Prof. Henk Vrielinck](#)

Begeleiding: [ir. Alexander Hoffman](#), [M. Sci. Chen Hui](#), [Dr. Samira Khelifi](#)

Context: Reduction of CO₂ greenhouse gas emission remains an urgent environmental and societal problem. Technologies for efficient selective capture of CO₂ upon production, for storing and eventually converting it into high-value chemicals need to be developed. In all these technologies, porous solid materials like metal-organic frameworks (MOFs) may present solutions. MOFs are constructed of metal-inorganic nodes connected by organic linkers or struts to form a porous crystalline 2D or 3D lattice. Depending on the chemistry of their building blocks and the size and shape of their pores, they may selectively capture specific gases from mixtures, or catalyze certain reactions. This thesis project focuses on a porphyrin-based MOF (Co-TCPP(Ni), see Figure 1), which can catalyze the reduction reaction of CO₂ to HCOO⁻.



This thesis project focuses on a porphyrin-based MOF (Co-TCPP(Ni), see Figure 1), which can catalyze the reduction reaction of CO₂ to HCOO⁻.

Fig 1: structure of the Co-TCPP(Ni) (TCCP = Tetrakis(4-carboxyphenyl)porphyrin) 2D MOF

This MOF forms 2D layered structures.

Layer-by-layer deposition approaches are currently being investigated to construct a 3D MOF from these building blocks [1], which is a highly nontrivial task. Establishing the success of synthesis requires thorough characterization of the

material. Next to X-ray diffraction, the vibrational spectrum revealed through infrared absorption spectroscopy and Raman scattering provides a wealth of information on the structure of the synthesized material. Both the characteristic vibrations of organic functional groups in the mid-infrared and the metal-ligand vibrations in the far-infrared provide insight in the molecular interactions within the 2D layers, but they are also crucial to understand the stability of the 3D MOF variants. By characterizing these vibrations, it is possible to determine how different layers are interacting with each other and how they are connected. Especially for the low frequency modes, the interpretation of these highly cooperative modes is not always obvious from experiment alone and first-principles modeling becomes indispensable. For this reason, this master thesis will follow a combined experimental and computational approach. In view of the photocatalytic activity (this means that the catalyst is only active when it is in a photo-excited state), attention will also be spent on the optical absorption spectrum of the catalyst in the visible range.

Goal: In this thesis subject, both experimental and computational techniques will be applied to study the structural properties of a porphyrin-based 2D MOF via vibrational spectroscopy. A thorough characterization of the specific vibrational fingerprint regions will lead to a better understanding of the connection between the building blocks, possible defects, and the framework dynamics. Specifically for 2D MOFs, the interaction between different layers has to be investigated with an eye toward the construction of 3D MOF variants.

From the experimental point of view, samples will be characterized with X-ray diffraction (XRD), infrared-visible optical absorption spectroscopy and Raman scattering. The XRD pattern provides an easy quality check for the crystallinity of nanoporous materials and also allows to determine their crystal structure. To obtain a deeper insight in the structural properties of the examined materials, optical absorption spectra will be recorded extending from the far-IR over the mid-IR to the near-IR and visible region. Each of these regions offer specific information on the material under study (see Figure 2). The far-IR region, containing vibrations which extend over the complete framework, will be of interest for the characterization of flexibility and the detection of shear vibrational modes in the 2D MOF. Next, the mid-IR region contains fingerprint vibrations of molecular building blocks, which can be used to detect and characterize defects. Furthermore, the near-IR and visible region can be measured to reveal electronic transitions, which will help to understand the photocatalytic performance of the material. Moreover, Raman scattering experiments will allow to characterize complementary vibrational fingerprints, which are not measured via IR due to selection rules.

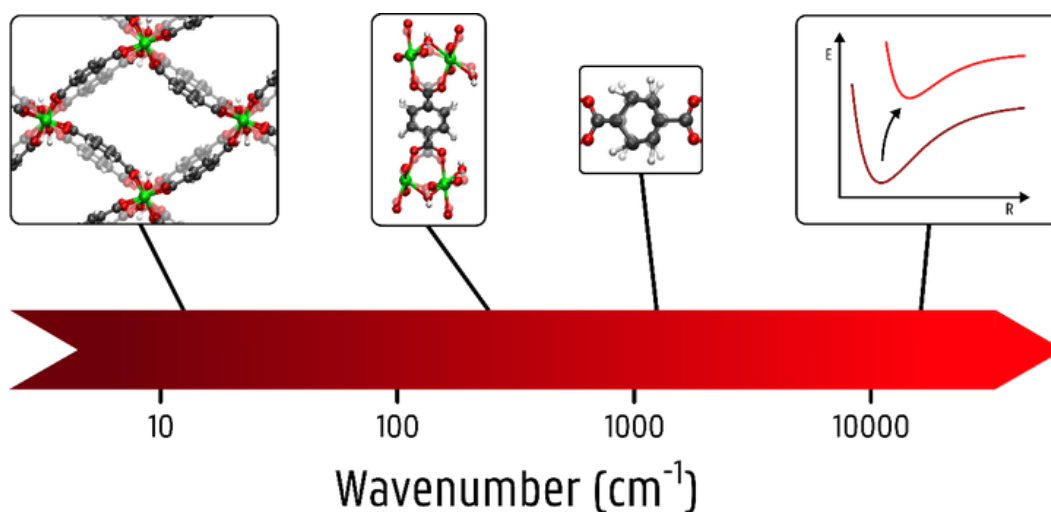


Figure 2: Different types of excitations within the MOF MIL-53(Al) from the far-IR to the visible region. Vibrational modes are reproduced from Ref. [2].

To obtain molecular-level insight in these spectra, the structure and vibrational modes of the material can be determined via computational modelling. Using quantum mechanical calculations based on density functional theory (DFT), one can compute the geometric and electronic structure of these materials. As a result, we can compute several observables such as the XRD pattern as well as the IR and Raman spectra and compare them with the experimental results. The theoretical vibrational spectra will be determined via two independent approaches [2]. The most common strategy starts from a static picture, in which the potential energy surface around equilibrium is approximated through a set of harmonic oscillators. However, to allow for a true comparison with experiments, it is essential to model this material at the real operating conditions. These conditions can be introduced via molecular dynamics (MD) simulations, which take temperature effects and anharmonicities into account by integrating the Newton equations of motions over time. This comes at the cost of an increased computational load. Finally, to theoretically characterize the electronic transitions, time-dependent DFT (TD-DFT) calculations will be performed. Given the complexity of these calculations, the system size will necessarily have to be reduced.

This thesis comprises both experiments and computational modeling. Depending on the interest of the student, the focus can be shifted towards one or the other. The materials will be synthesized at COMOC (Center for Ordered Materials, Organometallics and Catalysis, UGent, prof. P. Van Der Voort), hence this research will be performed in close collaboration with this research group.

Educatieve master: Dit onderwerp wordt niet aangeboden in de educatieve master.

Mobiliteit: Dit onderwerp biedt geen directe mogelijkheden voor mobiliteit.

[1] M. C. So, S. Jin, H.-J. Son, G. P. Wiederrecht, O. K. Farha, J. T. Hupp, Layer-by-layer fabrication of oriented porous thin films based on porphyrin-containing metal-organic frameworks, *JACS* 135, p. 15698-15701 (2013)

[2] A. E. J. Hoffman, L. Vanduyfhuys, I. Nevjestic, J. Wieme, S. M. J. Rogge, H. Depauw, P. Van Der Voort, H. Vrielinck, V. Van Speybroeck, Elucidating the vibrational fingerprint of the flexible metal-organic framework MIL-53(Al) using a combined experimental/computational approach, *J. Phys. Chem. C* 122, p. 2734-2746 (2018)

14. Impact van defecten op SiC vermogenscomponenten: een deep-level transient spectroscopy studieGroep: DiSCPromotoren: Henk Vrielinck en Eddy SimoenBegeleiding: Jan Lettens en Samira Khelifi

Probleemstelling: De globale jaarlijkse vraag naar elektrische energie groeit 2.1%, dit is ongeveer dubbel zo snel als de globale totale energievraag [1]. Efficiënte energieomzetting wordt bijgevolg steeds belangrijker. De vermogenstransistor, in zijn functie van elektronische schakelaar, is een sleutelcomponent bij het transport van elektrische energie. Vermogenstransistoren worden ontworpen om in hun AAN toestand (ON) hoge stromen te voeren met minimaal verlies (serieweerstand) en om in UIT toestand (OFF) hoge spanningen te blokkeren (tot honderden V of zelfs kV). Halfgeleiders met een grote verboden zone (band gap) (zoals GaN, AlN, Ga₂O₃, diamant, ...) zijn hier in principe beter voor geschikt dan Si [2], maar zelfs na enkele decennia onderzoek is men er, tot vrij recent, niet in geslaagd om een economisch haalbaar alternatief voor Si voor te stellen. In de sterk groeiende markt van elektrisch aangedreven voertuigen, waar hoge eisen aan de vermogenstransistoren worden gesteld, heeft SiC (band gap ~ 3 eV) toch een plaatsje weten te veroveren [3], (al is dat voorlopig nog aan een 50 maal hogere kostprijs dan Si). Voor een grote doorbraak dient de kwaliteit van de componenten echter nog te verbeteren: de mobiliteit van de ladingsdragers in de inversielaag van de transistoren is verre van optimaal, wat tot grote verliezen in ON toestand leidt. Defecten aan en nabij het grensvlak tussen SiC en het poortoxide in de transistor worden hiervoor verantwoordelijk gehouden. De voorbije decennia zijn er dan ook inspanningen geleverd om de aard en oorzaak van deze defecten te achterhalen.

Hun precieze aard en oorsprong, en ook de manier waarop ze met ladingsdragers interageren, worden echter nog steeds niet volledig begrepen. Dit bemoeilijkt de optimalisatie van SiC vermogenscomponenten. Verschillende electronicabedrijven proberen – in een wedloop om deze markt te veroveren – een oplossing te vinden voor dit probleem, wat de huidige golf van onderzoek naar defecten aan SiC/oxide oppervlakken verklaart. Een fysisch-chemisch model dat onlangs ter verklaring van magnetische resonantie-experimenten werd voorgesteld is in fig. 1 weergegeven.

Doel: Deze masterthesis wil bijdragen tot een beter begrip van de impact van defecten op SiC elektronische vermogenscomponenten. Daartoe zullen temperatuursafhankelijke capaciteit – spanningsmetingen (C-V) en Deep Level Transient Spectroscopy (DLTS) experimenten uitgevoerd worden op metaal-oxide-halfgeleider (MOS) condensatoren (CAPs) en veldeffecttransistoren (FETs). Meting van C-V profielen, en in het bijzonder de hysteresis tussen oplopende en neergaande spanning [4], levert eenvoudig toegankelijke informatie over vangst van ladingsdragers in en nabij het SiC/oxide scheidingsvlak. Bij DLTS wordt de trage tijdsafhankelijkheid (ms schaal) van de ac capaciteit van een CAP of FET geanalyseerd, die optreedt ten gevolge van emissie van ladingsdragers uit vallen (traps). Deze werden gevuld in een voorafgaande spanningspuls van depletie naar

accumulatie. DLTS levert spectroscopische informatie over deze traps, namelijk hun energiedistributie ten opzichte van de band gap van de halfgeleider en hun vangstefficiëntie. Een complete en consistente interpretatie van de experimenten houdt echter veel uitdagingen in, omdat er lokaal hoge concentraties aan vallen aanwezig zijn en hun ruimtelijke noch energetische distributie gekend zijn. Daarom zal modellering van de onderzochte elektronische componenten ook een voorname rol spelen in dit onderzoek.

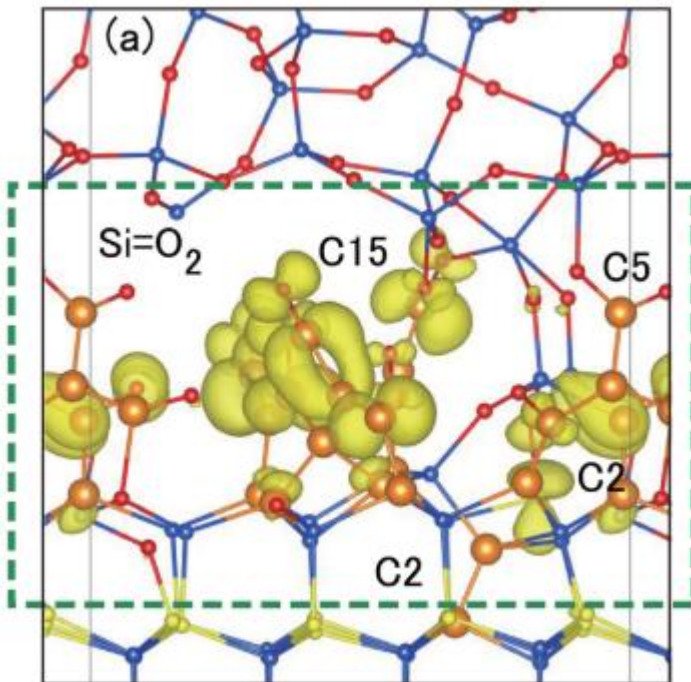


Fig. 1: Koolstofcluster (C-cluster) model voor oppervlaktoestanden voorgesteld ter verklaring van magnetische resonantie-experimenten [4]. Blauwe atomen stellen Si voor, geel/oranje C en rood O. Orbitalen voor ongepaarde elektronen (die met magnetische resonantie worden gedetecteerd) staan in lichtgeel aangegeven.

Dit thesisonderzoek maakt deel uit van een internationale samenwerking van ON-Semiconductor België met verscheidene universiteiten in Europa over de karakterisering van oppervlakdefecten in SiC met elektrische en magnetische resonantie spectroscopische technieken.

[1] <https://www.iea.org/reports/world-energy-outlook-2019/electricity>

[2] B. J. Baliga, IEEE Electron Device Lett. 10, 455–457 (1989).

[3] <https://www.mordorintelligence.com/industry-reports/silicon-carbide-power-semiconductor-market>

[4] Y. Kagoyama et al., J. Appl. Phys. 125, article no. 065302 (2019).

[5] F. Triedl et al., J. Vac. Sci. Technol. B 37(3), article no. 032903 (2019).

Educatieve master: Dit onderwerp wordt niet als thesis aangeboden in de educatieve master.

Mobiliteit: In samenspraak met promotoren en begeleiders kan worden nagegaan of een deel van het experimentele werk in ON-Semiconductor België (Oudenaarde) kan worden uitgevoerd.

DRAFT

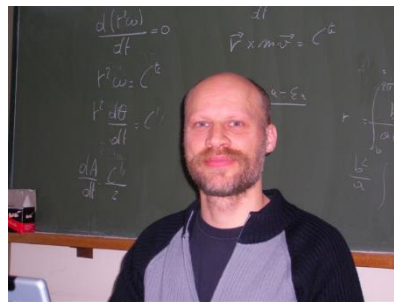
DEDICATED REASEARCH ON ADVANCED FILMS AND TARGETS

DRAFT

PROMOTOR :

Prof. Diederik Depla

Website: www.draft.ugent.be



15. Korrelgroei tijdens dunne-laagdepositie: een zoektocht naar een exponent

Groep: [DRAFT](#)

Info en promotor: [prof. Diederik Depla](#)

Begeleiding: [Dulmaa Altangerel](#)

Trefwoorden: *Dunne lagen, magnetron sputterdepositie, korrelgrootte, groeimechanismen*

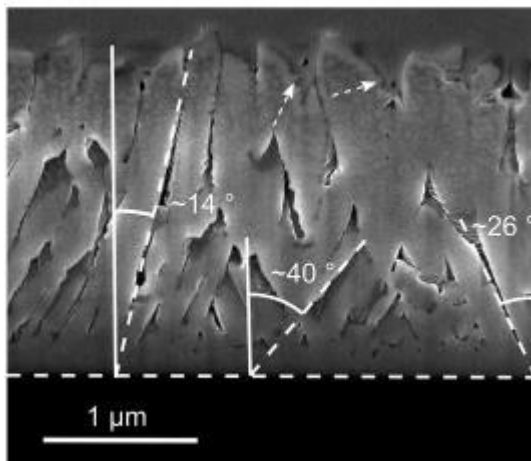
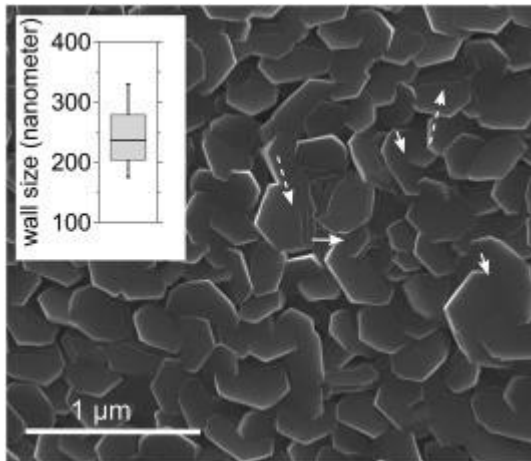


Situering In de hedendaagse wereld zijn dunne lagen of coatings technologisch onmisbaar geworden. De voornaamste reden hiervoor is het belang van het oppervlak bij de interactie tussen een materiaal en zijn omgeving. Er bestaan verschillende depositietechnieken voor het aanbrengen van zulke lagen met elk hun voor- en nadelen. Magnetron sputterdepositie neemt hier onbetwist een prominente positie in. Deze techniek is gebaseerd op een magnetisch geassisteerde gasontlading. De gevormde ionen in het plasma bombarderen de kathode of target waardoor atomen uit de target worden losgeslagen. Deze 'gesputterde' atomen propageren vervolgens naar het substraat en condenseren tot een dunne laag.

Probleemstelling De eigenschappen van dunne lagen worden niet alleen door de materiaalkeuze maar ook door hun opbouw bepaald. Dunne lagen afgezet door middel van magnetron sputterdepositie zijn meestal samengesteld uit kristallijne korrels. Verschillende eigenschappen van dergelijke dunne lagen zoals hardheid en elektrische geleidbaarheid worden bepaald door de aanwezige korrels, en de korrelgrootte. Daarnaast speelt ook de laagdikte een cruciale rol betreffende de laageigenschappen.

Om de laageigenschappen te modelleren is echter onvoldoende om de relatie met de korrelgrootte en laagdikte te kennen, maar is ook nodig om de relatie tussen

beide parameters te kennen. De korrelgrootte neemt in de meeste gevallen toe met de laagdikte, en wordt beschreven aan de hand van een machtsrelatie. Tal van modellen beschrijven de afhankelijkheid, maar over de waarde van de exponent is er vaak nog discussie.



Doel In dit thesisvoorstel onderzoeken we de relatie tussen de laagdikte en korrelgrootte voor verschillende materialen, en variëren we per materiaal de depositieomstandigheden. Door metingen van de energieflex en de materiaalflux tijdens de depositie kunnen de depositieomstandigheden naar een algemene groeiparameter vertaald worden. De energie van de aankomende atomen op de groeiende laag spelen een belangrijke rol in de laagvorming. Deze energie is echter niet eenvoudig te meten, en bijgevolg zal het transport van de gesputterde lagen doorheen de vacuümkamer gesimuleerd worden. Dit kan door middel van een code ontwikkeld binnen de onderzoeksgroep. De korrelgrootte zal door middel van X-stralendiffractie opgemeten worden. Afhankelijk van de interesse van de student kunnen ook bepaalde laageigenschappen opgemeten worden, en de relatie met de gemeten korrelgrootte onderzocht worden.

Voor wie ? We zoeken een enthousiaste student met zin voor experimenteel (en computationeel) onderzoekswerk. We geven jou, naast een plaats en een bureau, fijne collega's en een leuke omgeving om te werken rondom en met verschillende onderzoekers. Samen met je begeleiders en promotoren werk je toe naar een vernieuwend en volwaardig werkstuk.

16. Depositie van reactieve metalen

Groep: [DRAFT](#)

Info en promotor: [prof. Diederik Depla](#) Begeleiding: [Dulmaa Altangerel](#)

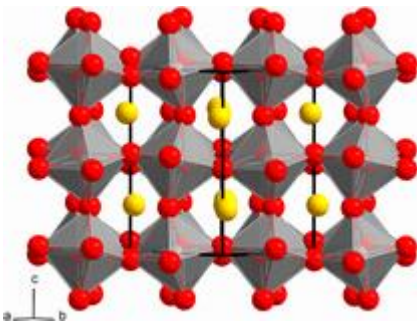
Trefwoorden: *Dunne lagen, magnetron sputterdepositie, reactieve materialen*



Situering In de hedendaagse wereld zijn dunne lagen of coatings technologisch onmisbaar geworden. De voornaamste reden hiervoor is het belang van het oppervlak bij de interactie tussen een materiaal en zijn omgeving. Er bestaan

verschillende depositietechnieken voor het aanbrengen van zulke lagen met elk hun voor- en nadelen. Magnetron sputterdepositie neemt hier onbetwist een prominente positie in. Deze techniek is gebaseerd op een magnetisch geassisteerde gasontlading. De gevormde ionen in het plasma bombarderen de kathode of target waardoor atomen uit de target worden losgeslagen. Deze ‘gesputterde’ atomen propageren vervolgens naar het substraat en condenseren tot een dunne laag.

Probleemstelling Metalen zoals lithium of calcium zijn aanwezig in tal van technologisch belangrijke materialen en/of toepassingen. Voorbeelden zijn Li-ion batterijen, piezoelektrische materialen ((bijv. CaTiO_3) en mechanoluminescente materialen (bijv. $\text{Ca}_2\text{Nb}_2\text{O}_8$). Ondanks hun breed toepassingsgebied zijn het aantal studies over de depositie van deze metalen door middel van magnetron sputterdepositie zeer beperkt. De oorzaak hiervan is de reactiviteit van deze metalen met water en zuurstof. Dit vraagt om speciale maatregelen om deze metalen als target te gebruiken in een magnetronontlading.



Doel De onderzoeksgroep ontwikkelde een veilige methode om reactieve metalen zoals lithium en calcium als targetmateriaal te gebruiken. Dit opent de mogelijkheid om op fundamenteel de groei van deze lagen van dichterbij te bestuderen. In dit thesisvoorstel onderzoeken we de relatie de depositieomstandigheden en laageigenschappen. Door metingen van de energieflex en de materiaalflux tijdens de depositie kunnen de depositieomstandigheden naar een algemene groeiparameter vertaald worden. De oxidatie door blootstelling aan lucht vormt ook een research topic. Het is ook mogelijk om via sputterdepositie rechtstreeks oxiden af te zetten. Hiervoor wordt zuurstof als reactief gas aan de gasontlading toegevoegd. Dit heeft vaak een sterke invloed op het depositieproces. De impact kan niet alleen experimenteel opgemeten worden, maar ook worden gesimuleerd door middel van een code ontwikkeld binnen de onderzoeksgroep. In een latere fase van het thesisonderwerp zal de vorming van complexe verbindingen zoals CaTiO_3 bestudeerd worden door Ca/Ti multilagen in een oxidatieve omgeving te laten reageren.

Voor wie ? We zoeken een enthousiaste student met zin voor experimenteel (en computationeel) onderzoekswerk. We geven jou, naast een plaats en een bureau, fijne collega's en een leuke omgeving om te werken rondom en met verschillende onderzoekers. Samen met je begeleiders en promotoren werk je toe naar een vernieuwend en volwaardig werkstuk.

DYNAMAT

DYNAMICS OF FUNCTIONAL NANO MATERIALS

DYNAMAT

PROMOTOR:



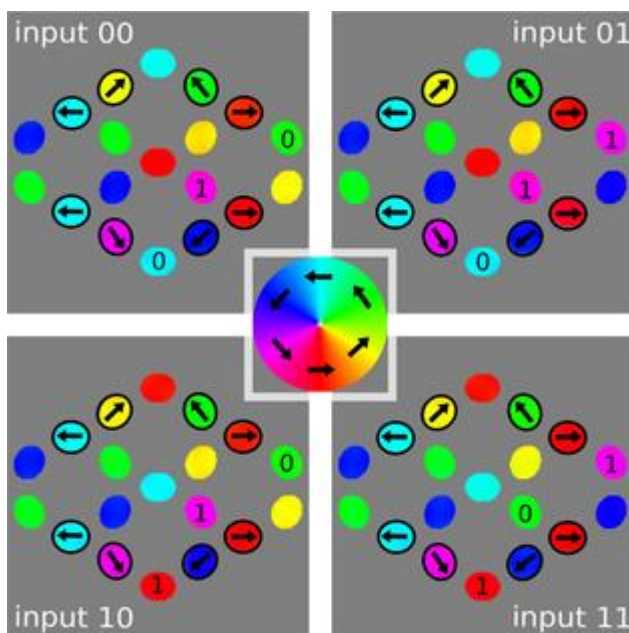
Website: <http://dynamat.ugent.be>

Prof. Bartel Van Waeyenberge

17. Biaxiale nanomagneten als bouwsteen voor gebalanceerde half-adders

Promotoren en begeleider: [Bartel Van Waeyenberge](#), [Jonathan Leliaert](#) en [Pieter Gypens](#)

Probleemstelling: Sommige problemen zijn zeer moeilijk op te lossen met klassieke computers. Een bekend



voorbeeld is het ontbinden van een getal in zijn priemfactoren. Conventionele digitale elektronica is namelijk niet ontworpen om de input (de priemfactoren) te bepalen wanneer de output (het getal) gekend is.

Een fysisch systeem dat zulke problemen wel kan oplossen, is nanomagnetische logica. In tegenstelling tot conventionele elektronica, is er geen beperking die stelt dat de informatie van input naar output moet propageren. De informatie, die vervat zit in de magnetisatie van kleine magnetische eilandjes, propageert doorheen heel het systeem via de magnetostatische lange-dracht interactie. De oplossing van een probleem wordt dan gegeven door de evenwichtstoestand van het fysisch systeem. Door de magnetische eilandjes in een specifieke configuratie te plaatsen, kan op die manier een computationeel probleem opgelost worden (bijvoorbeeld een logische AND operatie).

Echter, zelfs wanneer individuele logische poorten correct werken, is het mogelijk dat circuits bestaande uit zulke poorten niet naar de juiste oplossing convergeren. Om dit te vermijden moeten “gebalanceerde” poorten gebruikt worden waarbij alle input-output combinaties dezelfde (grondtoestand) energie hebben. In onze groep werd de eerste gebalanceerde nanomagnetsiche logische NAND poort ontwikkeld (zie figuur).

Een essentiële logische poort om complexere berekeningen te kunnen uitvoeren (zoals een vermenig-vuldiging van twee getallen), is een *half-adder* die 2 bits als input heeft én 2 bits als output heeft. Uniaxiale nanomagneten die de standaard zijn in nanomagnetsiche logica, vervatten slechts 1 bit. Daarom lijken biaxiale nanomagneten, die 4 evenwichtstoestanden hebben en dus 2 bits bevatten, een betere keuze om gebalanceerde *half adders* te bouwen die tot op heden niet bestaan.

Doelstelling: In deze thesis zul je aan de hand van micromagnetsiche simulaties en netwerk-theorie een design voor een (gebalanceerde) *half adder* ontwikkelen. Bij dit onderzoek naar magnetisatiedynamica op de nanoschaal zul je het softwarepakket MuMax3 gebruiken, dat geoptimaliseerd is om simulaties op grafische kaarten te laten lopen.

In een tweede stap zul je de ontwikkelde poorten combineren tot een logisch circuit om een moeilijk probleem, zoals een ontbinding in priemfactoren, “in hardware” op te lossen. Deze aanpak heeft het voordeel dat ze niet afhankelijk is van software-algoritmes waarvan bekend is dat ze zeer inefficiënt worden naarmate het te ontbinden getal groter wordt, maar dat de berekening uitgevoerd wordt door een relaxatie naar de grondtoestand van het systeem.

Dit onderwerp kan ook opgenomen worden binnen de educatieve master. Aan dit onderwerp is geen mobiliteitsaspect verbonden.

18. [Meerschalgige modellering van magnetisch artificieel spinijs](#)

Groep: [DyNaMat](#)

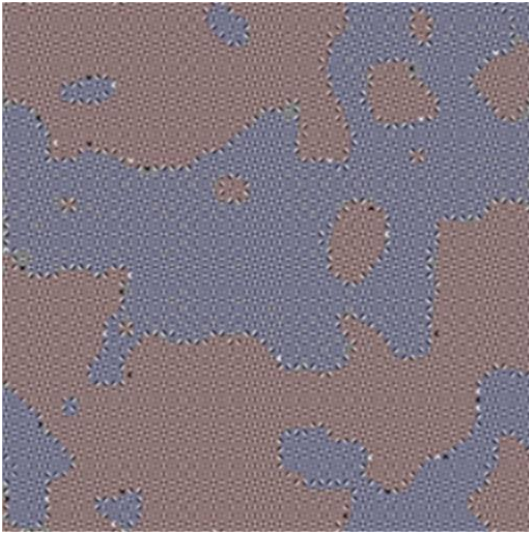
Promotoren en begeleider: [Bartel Van Waeyenberge](#), [Jonathan Leliaert](#) en [Pieter Gypens](#)



Probleemstelling: “Spinijs” is een gefrustreerde magnetische structuur, gevormd door een geordend rooster van nanomagneten, waarin de geometrie ervoor zorgt dat niet elke interactie kan geminimaliseerd worden. De grondtoestand wordt gekarakteriseerd door een orde waarin op elk kruispunt van 4 magneten telkens 2 magnetische spins naar binnen en 2 naar buiten wijzen. De frustratie zorgt ervoor dat de grondtoestand ontaard is, waardoor echte samples typisch verschillende domeinen van verschillende toestanden vertonen (zie figuur).

In thermisch actief spin-ijs is de temperatuur hoog genoeg om de magnetisatie van de individuele nanomagneten van richting te laten wisselen. Deze individuele events

vertalen zich op een hoger niveau tot interessante dynamica doorheen het gehele spin-ijs, zoals de beweging van de domeinen.



Ondanks de experimentele realisatie van deze systemen is de beweging van deze domeinen nog nooit direct geobserveerd, noch was er een geschikte simulatiemethode om deze thermisch gedreven dynamica te onderzoeken. Daardoor is het nog steeds een open vraag hoe deze domeinen zich dynamisch gedragen en hoe deze dynamica afhangt van precieze eigenschappen van het rooster, zoals de configuratie van de eilandjes, i.e. de rooster-topologie.

Doelstelling: Het doel van deze thesis is de meerschalgige dynamica in thermisch evenwicht te onderzoeken.

Concreet wordt vertrokken vanuit de dynamica van individuele nanomagneten en de interactie met hun directe naburen, aan de hand van low-level micromagnetische simulaties. Onze groep staat hierin wereldwijd aan de top door de ontwikkeling van een micromagnetisch softwarepakket, MuMax3, dat geoptimaliseerd is om simulaties op grafische kaarten te laten draaien, en onlangs uitgebreid werd met de unieke mogelijkheid om grootschalige simulaties met thermische fluctuaties uit te voeren.

De verworven resultaten zullen dan aangewend worden om een eenvoudiger higher-level model op te stellen om de dynamica van een volledig spin-ijs te onderzoeken. De nadruk van dit onderzoek zal liggen op de beweging van de verschillende domeinen doorheen het spin-ijs.

Deze approach zal dan uitgebreid worden naar verschillende roosters, om de invloed van de rooster-topologie op de dynamica van de domeinen te onderzoeken.

Dit onderwerp kan ook opgenomen worden binnen de educatieve master. Aan dit onderwerp is geen mobiliteitsaspect verbonden.

19. [Manipuleren van spingolven met spin-gepolariseerde stromen](#)

Groep: [DyNaMat](#)

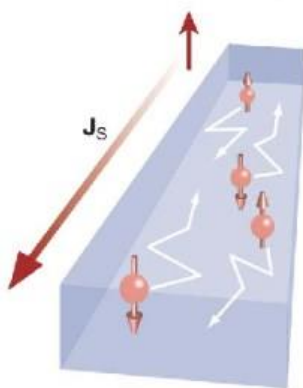
Promotor en begeleider: [Bartel Van Waeyenberge](#) en [Jeroen Mulkers](#)

Beschrijving: De magnetisatie in ferromagnetische materialen is het resultaat van het collectieve gedrag van de intrinsieke impulsmoment of spins van de elektronen. Tot nu toe wordt deze enkel in ICT toepassingen gebruikt voor het opslaan van data. Nu de CMOS technologie zijn limieten bereikt, is er is een groeiende interesse voor alternatieve technologieën voor data verwerking. Hiervoor bieden de spins in ferromagnetische

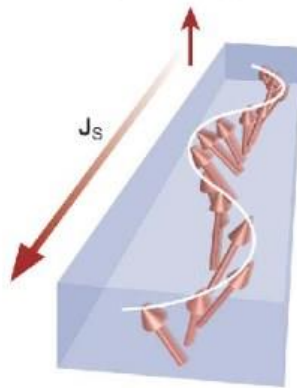
materialen unieke mogelijkheden. In de spintronica bestudeert men hoe de spin van het elektron gebruikt kan worden in praktische toepassing, terwijl men in de magnonica de voortplanting van spingolven (voortbewegende verstoringen in de magnetische orde, zie figuur) bestudeert. De combinatie van deze twee onderzoeksdomeinen biedt nieuwe mogelijkheden aangezien spin-gepolariseerde stromen en spingolven elkaar beïnvloeden.

In dit project zal de student micromagnetische simulaties uitvoeren om na te gaan hoe spin-gepolariseerde stromen de voortbeweging van spingolven beïnvloedt, en hoe dat deze manipulatie van spin golven gebruikt kan worden voor de ontwikkeling van spintronische/magnonische toepassingen. Hiervoor kan de student gebruik maken van ons micromagnetisch software pakket [mumax3](#). De student zal eerst bestuderen hoe de voortbewegingsrichting van de spingolfpakketjes gemanipuleerd kan worden met een constante en uniforme spin-gepolariseerde elektrische stroom. Vervolgens kan de complexiteit van de simulaties worden opgedreven door niet-uniforme stromen of wisselstromen te beschouwen. Tenslotte, kan er worden nagegaan hoe de spin-gepolariseerde stromen worden beïnvloed door spingolven, of men kan trachten een toepassingsconcepten te bedenken op basis van de verworven kennis.

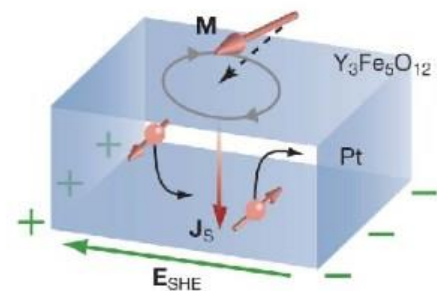
a Conduction-electron spin current



b Spin-wave spin current



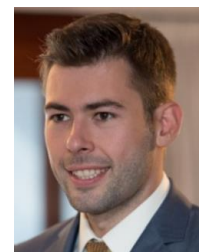
c Inverse spin-Hall effect



Dit onderwerp kan ook opgenomen worden binnen de educatieve master. Aan dit onderwerp is geen mobiliteitsaspect verbonden.

20. [Nanomagnetische realisatie van Brownse motoren](#)

Groep: [DyNaMat](#) Promotoren en begeleiding: [Bartel Van Waeyenberge](#) en [Jonathan Leliaert](#)



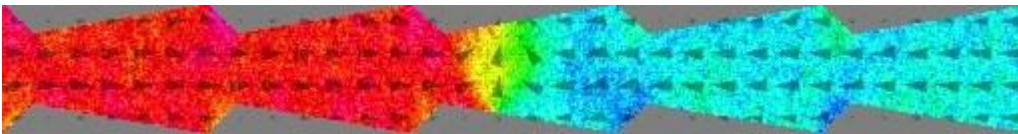
Probleemstelling: Onze fysische intuïtie, gevormd door onze observaties op de macroschaal, volstaat niet altijd om gedrag op de nanoschaal te begrijpen omdat dit gedrag niet enkel bepaald wordt door deterministische wetten, maar vooral door de willekeur van thermische- en kwantumfluctuaties. Op deze schaal zijn de krachten die een proces in de juiste richting drijven namelijk minuscule in vergelijking met de willekeurige krachten die de omgeving erop uitoefent. Toch vinden gerichte processen op de nanoschaal constant plaats in biologische systemen, bv. in het menselijk lichaam waar cellen materiaal verplaatsen, eiwitten vormen, enz...

Systemen die in staat zijn om energie te halen uit hun omgevingsruis worden Brownse motoren genoemd. Ze werken door de willekeurige krachten die ze niet nodig hebben te filteren ten voordele van de krachten die nuttig gebruikt kunnen worden. Om niet tegen de

tweede wet van de thermodynamica te zondigen kan dit natuurlijk niet zonder externe energietoevoer.

Toch zijn zo'n systemen grootteordes efficiënter in het gebruik van deze extern toegevoegde energie in vergelijking met hun tegenhangers die die energie volledig gebruiken om tegen de willekeur te vechten.

Het idee achter deze thesis is om dit principe toe te passen op de beweging van magnetische structuren door een dunne film. Zo'n structuren worden gezien als veelbelovende kandidaten om data voor te stellen in toekomstige informatietechnologie zoals geheugenapplicaties. De meeste huidige implementaties van zulke systemen negeren de thermische fluctuaties op de nanoschaal volledig en leggen extreem sterke elektrische stromen aan om de data voort te bewegen, waardoor het potentieel om de energie-efficiëntie van deze systemen te verhogen nog zeer groot is.



Doelstelling: Het doel van deze thesis, op het snijpunt tussen fundamentele fysica en technologische toepassingen, is om een magnetische implementatie van een Brownse motor te onderzoeken om de beweging van data in een geheugen efficiënter dan ooit te voren te maken.

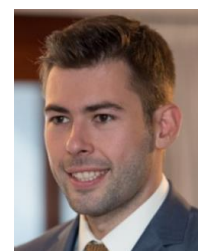
Concreet zul je vertrekken van de "klassieke" beweging van een magnetische structuur doorheen een dunne film waarbij thermische fluctuaties verwaarloosd worden. In een tweede stap zullen we een zaagtandpotentiaal verwezenlijken door middel van lokale variaties in de materiaalparameters. Het zwaartepunt van de thesis zal liggen in het onderzoek naar welke combinatie van deze potentiaal, thermische fluctuaties en elektrische stroom het efficiëntste transport van de informatie oplevert.

In de context van deze thesis zul je deze dynamica onderzoeken aan de hand van micromagnetische simulaties die een zeer grote rekenkracht vergen en daarom op grafische kaarten worden gedraaid. Hiertoe zul je het micromagnetische softwarepakket, [MuMax3](#), gebruiken dat binnen onze groep ontwikkeld werd en onlangs uitgebreid werd met de mogelijkheid om thermische fluctuaties mee te nemen in grootschalige berekeningen.

Dit onderwerp kan ook opgenomen worden binnen de educatieve master. Aan dit onderwerp is geen mobiliteitsaspect verbonden.

21. Modellering van magnetische dynamica in de medische beeldvormingstechniek "magnetic nanoparticle imaging (MPI)"

Groep: [DyNaMat](#) Promotoren en begeleiders: [prof. Bartel Van Waeyenberge](#), [dr. Jonathan Leliaert](#) en [dr. Annelies Coene](#) (vakgroep Electrical Energy, Metals, Mechanical Constructions & Systems)



Probleemstelling: Recent werd een nieuwe beeldvormingstechniek ontwikkeld, genaamd Magnetic Particle Imaging (MPI), die toelaat om zeer nauwkeurig de locatie van magnetische nanodeeltjes te bepalen ([videoclip](#))

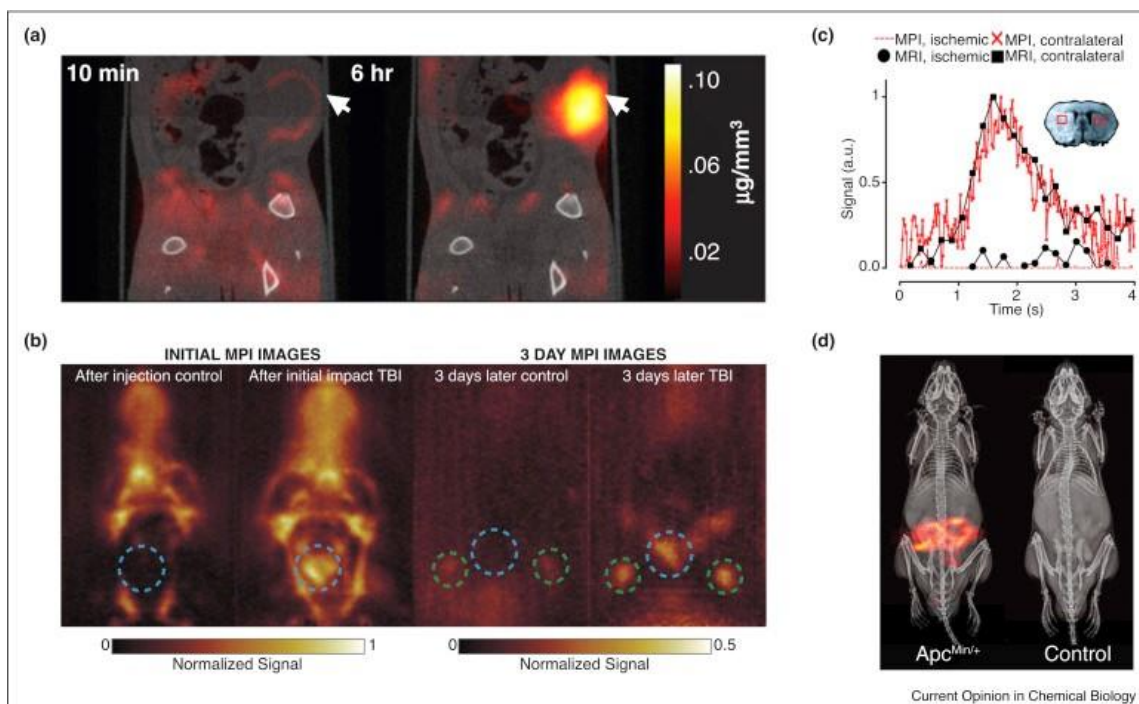
size: 21.85MB). De techniek ondersteunt biomedische toepassingen zoals geneesmiddelenafgifte, waarbij de nanodeeltjes lokaal een geneesmiddel loslaten, en magnetische hyperthermie, waarbij de nanodeeltjes lokaal het weefsel opwarmen om zo bijvoorbeeld tumoren te vernietigen.

Voordat een beeld gemaakt kan worden is het noodzakelijk dat het toestel gekalibreerd wordt door het opmeten van een 'systeemfunctie'. Dit houdt in dat voor een gekende hoeveelheid nanodeeltjes hun magnetische respons op een specifiek magnetisch veld opgemeten wordt. Deze kalibratie is enkel geldig voor die specifieke soort van nanodeeltjes en gelijkaardige concentraties aan deeltjes. Daarnaast wordt de magnetische dynamica van de deeltjes in een biologische omgeving beïnvloedt door tal van factoren zoals immobilisatie in cellen, cluster- of ketenvorming met daaruitvolgende interacties tussen de deeltjes, wat zal resulteren in een andere respons dan opgemeten bij de kalibratie. Dit zorgt voor artefacten en onnauwkeurigheden in de beelden.

Doelstelling: Het doel van deze thesis is om door middel van numerieke simulaties de magnetische dynamica van de nanodeeltjes in MPI te gaan modelleren. Hierbij zullen we gebruik maken van een computationeel intensieve bottom-up approach die vertrekt vanuit de magnetische dynamica op de nanoschaal. Door de wisselwerking tussen verschillende effecten ontstaat een complex gedrag dat we proberen te begrijpen. In een eerste fase wordt de systeemfunctie gemodelleerd waarbij we uitgaan van ideale geïsoleerde nanodeeltjes. In een volgende fase wordt gefocust op de impact van cluster- en ketenvorming en in een laatste fase wordt de link gelegd tussen een experimenteel opgemeten systeemfunctie en haar gemodelleerde equivalent.

Dit onderwerp kan ook opgenomen worden binnen de educatieve master.

Dit onderwerp biedt eventueel ook de mogelijkheid tot internationale mobiliteit (4 weken) door het experimenteel gaan opmeten van systeemfuncties in het PTB in Berlijn.



EMR

ELECTRON MAGNETIC RESONANCE

EMR

PROMOTOREN : <http://www.emr.ugent.be>



Prof. Freddy Callens



Prof. Henk Vrielinck

22. Determining transition metal ion concentration and valence state in lead silicate glasses using paramagnetic resonance spectroscopy

Promotors: [Freddy Callens](#) (EMR) en [Kim Verbeke](#) (Faculty of Engineering and Architecture, Dept. of Materials, Textiles and Chemical Engineering)

Begeleiding: [Henk Vrielinck](#) (DiSC-EMR) en [Inge Bellemans](#) (Faculty of Engineering and Architecture, Dept. of Materials, Textiles and Chemical Engineering)

Spent industrial and automotive catalysts and electronic scrap are becoming an important resource of precious metals, e.g. gold, silver, platinum, palladium, and rhodium. Umicore is a global materials technology and recycling group. It generates precious metals from complex waste streams and industrial by-products. These metals are separated from each other by a combination of pyro-, hydro- and electrometallurgical processes. Within the pyrometallurgical processes, molten phases at high temperatures (500-1600°C) are encountered: metal alloys, slags (mixture of metal-oxide compounds) and mattes (mixture of metal-sulfide compounds). Liquid slags play a crucial role in modern pyrometallurgical processes during the production and recycling of many metals. The properties of this molten metal oxide phase have a large impact on the overall efficiency and kinetics of these processes. In particular, the valence state of the iron (Fe^{2+} or Fe^{3+}) in the slag is of interest, because it influences the distribution of elements between alloy and oxide phases.

Recently, we have shown that electron microscopy (energy dispersive X-ray spectroscopy, SEM-EDX) and electron paramagnetic resonance (EPR) present a promising combination for determining the iron oxidation state concentrations in model systems for slags containing high concentrations of heavy metals, in particular Pb [1]. The aim of this master thesis is to

consolidate and to extend the conclusions of this previous study. EPR measurements will be performed on lead silicate glass pieces containing various concentrations of Fe^{3+} (without Fe^{2+} , the glasses change color with Fe^{3+} concentration, see Figure 1) and on fine powders of this material in two microwave frequency bands. These glasses are model systems for slags and are obtained by quenching liquid mixtures of PbO , SiO_2 and Fe_xO_y from their liquid phase. Various characteristics directly measured on the spectra (total intensity, spectral line width, intensity ratio of certain resonance lines) will be evaluated for their ability to determine the Fe^{3+} concentration in a reliable and robust way. The added value of advanced simulations of these spectra in the determination of concentration will also be assessed. Simulations of EPR spectra for glasses with considerable Fe^{3+} concentrations present various challenges, due to the wide variety of nearest environments of the Fe^{3+} ions in the glass and the interactions between them.



Figure 1 : Lead silicate glasses with a $\text{PbO}/\text{Fe}_2\text{O}_3$ weight ratio of 70/30 and increasing Fe^{3+} concentration (0 – 7 weight%), taken from [1].

This thesis is performed mainly in the Electron Magnetic Resonance group of the Department of Solid State Sciences (Faculty of Sciences), in close collaboration with the Sustainable Materials Science research group of the Faculty of Engineering and Architecture.

[1] V. Cnockaert et al. J. Non-Crystalline Solids (2020), accepted for publication

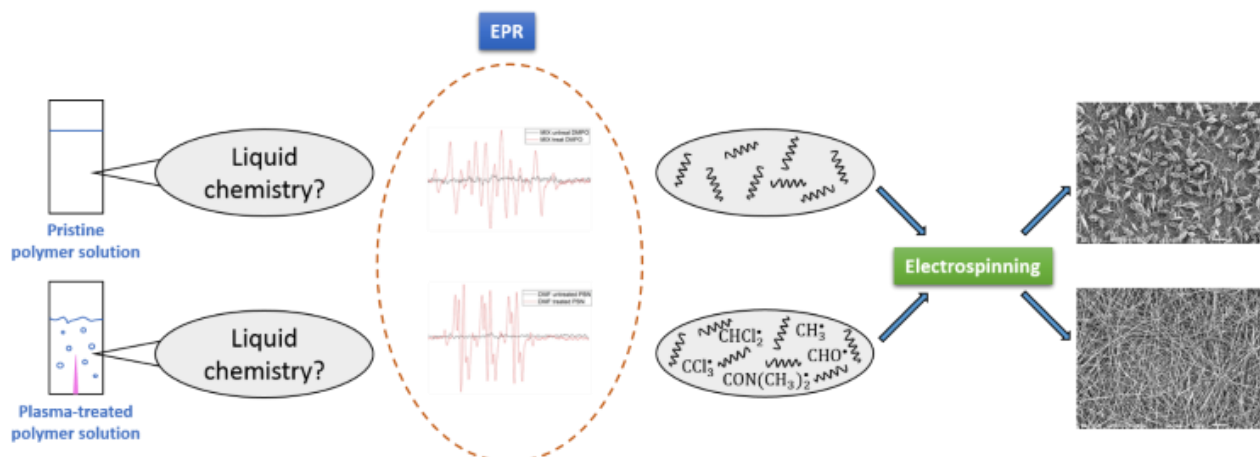
Educatieve master: Dit onderwerp wordt niet aangeboden in het kader van de educatieve master.
Mobiliteit: Dit onderwerp biedt geen directe faciliteiten voor mobiliteit

23. [Electron paramagnetic resonance \(EPR\) spectroscopy studies of plasma-induced radicals in pre-electrospinning polymeric solutions](#)

Groep: [EMR](#) Promotoren en begeleiding: [prof. Freddy Callens](#) en [prof. Nathalie De Geyter](#) Keywords : plasma technology, liquid treatment, electrospinning, EPR.

Problem setting : The aim of this master research is the use of plasma technology for the modification of pre-electrospinning polymeric solutions. Electrospinning, an electrostatic nanofiber fabrication technique, has gained more interest in recent years due to its versatility and potential for applications in diverse fields including tissue engineering, biosensors, filtration, wound dressings, drug delivery and enzyme immobilization. A great challenge in electrospinning is preparing a suitable polymer solution, because the morphology of the resultant nanofibers is highly affected by the polymer solution properties such as polymer concentration, surface tension, viscosity and conductivity. To improve the electrospinnability of polymeric solutions, non-thermal plasmas generated inside and/or above the solutions will be

used in this research. The plasma-induced liquid chemistry will be studied in detail using electron paramagnetic resonance (EPR) spectroscopy.



Goal of the research:

Within this master thesis, we will use a non-thermal plasma jet generated inside and/or on top of polymeric solutions to affect the electrospinnability of the solutions. The influence of plasma treatments on the solution physical characteristics including viscosity, surface tension and conductivity will be analyzed. Moreover, to investigate the characteristics of the plasma itself, optical emission spectroscopy (OES) will be applied. A large part of the research will also be devoted to unravelling which radicals are present in the plasma-treated solutions making use of EPR spectroscopy. Additionally, the stability of the plasma treatment effects can be evaluated with respect to time (aging study) making use of the above-mentioned techniques. Electrospinning of the plasma-treated solutions and subsequent scanning electron microscopy (SEM) measurements on the created nanofibers will also be carried out.

Opmerking : Geen mogelijkheden tot mobiliteit of opname in de Educatieve Master Fysica en Sterrenkunde.

LUMILAB

LUMINESCENTIE LAB

LUMILAB

Website : <http://lumilab.ugent.be/>

PROMOTOREN :



Prof. Dirk Poelman



Prof. Philippe Smet

24. Nabij-infrarood emitterende luminescente materialen voor medische beeldvormingstoepassingen

Groep: [Lumilab](#)

Promotoren: [Prof. Dirk Poelman](#)

Begeleiding: [Jiaren Du](#), [Dirk Poelman](#)

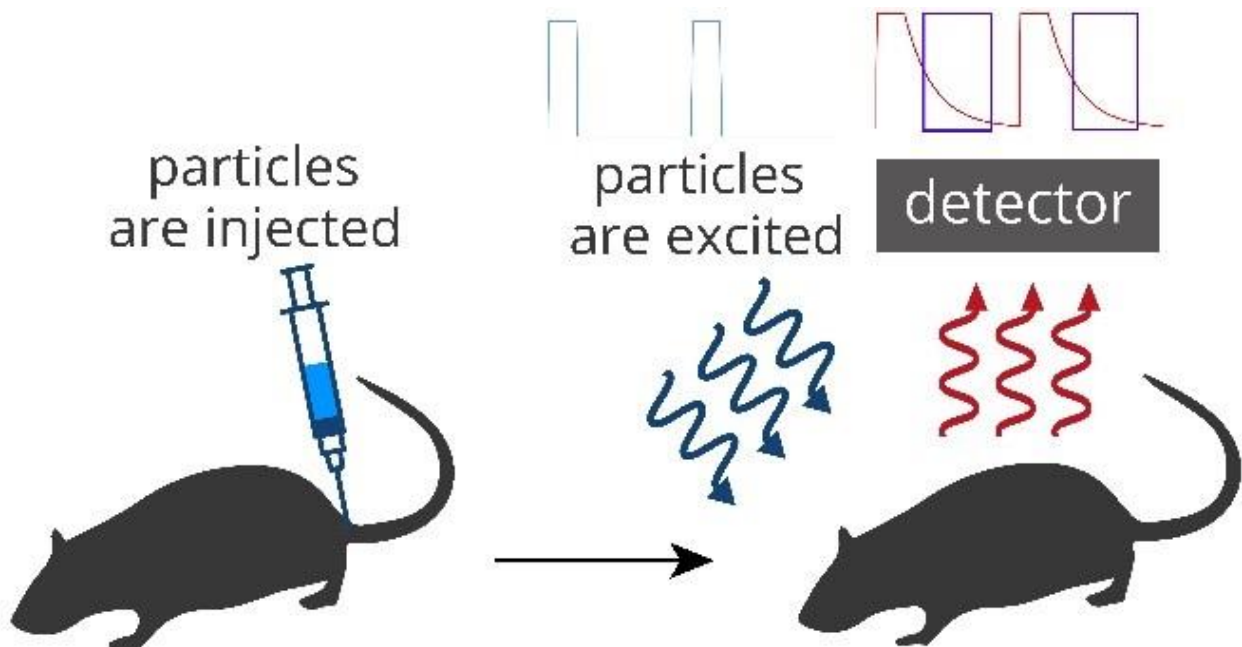
Projectbeschrijving: Veel van de huidige beeldvormingstechnieken in de medische wereld (CT, PET, SPECT) maken gebruik van ioniserende straling die potentieel gevaarlijk is voor de patiënt.

Daarom zijn een aantal optische beeldvormingstechnieken ontwikkeld, die gebruik maken van fluorescente 'tracers' die licht emitteren in het nabije infrarood, in een golflengtegebied waarvoor weefsels grotendeels transparant zijn. Dergelijke technieken kennen een beperkte toepasbaarheid, omdat bij het belichten autofluorescentie van de weefsels zelf optreedt, hetgeen een nauwkeurige detectie bemoeilijkt.

In het thesisproject ga je luminescente materialen onderzoeken die kunnen geëxciteerd worden in het nabije infrarood en ook emitteren in het nabije infrarood (bij iets langere golflengte). Dergelijke luminescente materialen hebben een veel langere vervaltijd (orde 100 μ s) vergeleken met de vervaltijd van de autofluorescentie én van de klassieke fluorescente tracers (orde ns), wat het



mogelijk maakt om ‘time-gated’ de emissie op te meten gedurende de tijd dat de autofluorescentie al vervallen is, maar de luminescentie van de deeltjes nog niet (zie figuur). Deze techniek biedt een enorm potentieel als gevoelige, goedkope, en veilige techniek voor het volgen van bloedstromen, gelabelde cellen, geneesmiddelen, ...



In de masterproef onderzoek je Nd (neodymium) gedoteerde oxides, die excitatie- en emissiespectra bezitten die hen perfect geschikt maken voor bio-imaging. Door magnetische ionen in de deeltjes in te bouwen, maak je ze geschikt voor zowel optische als magnetische (MRI) beeldvorming. Voor excitatie gebruik je een geavanceerde afstembare gepulste laser (OPO: optical parametric oscillator), terwijl je voor de detectie van de emissie een InGaAs array detector gebruikt. Door laser-ablatie optimaliseer je de afmetingen van de nanodeeltjes voor medische toepassingen.

Dit onderzoek gebeurt in nauwe samenwerking met de farmacie, waar de nanodeeltjes worden gefunctionaliseerd voor *in vitro* en – uiteindelijk – *in vivo* testen.

Mobiliteitscomponent: geen

Educatieve component: Dit thesisonderwerp heeft potentieel een grote maatschappelijke impact en is daarom zeer geschikt om – in een meer algemene context geplaatst – in enkele lessen voor het secundair onderwijs te worden voorgesteld. Bijgevolg is dit thesisonderwerp perfect in te passen in een thesis voor de educatieve master.

25. Thermally stimulated luminescence for defect characterization in composites

Onderzoeksgroepen: Lumilab en Mechanics of Materials and Structures

Promotoren: Prof. Mathias Kersemans en Prof. Philippe Smet

Begeleiding: Saeid Hedayatrasa en Florian Cougnon



LumiLab

Over the past 30 years, composite materials have taken a strong position in aerospace, automotive industry or wind energy, as they exhibit some unique properties such as a high specific stiffness and strength, good fatigue durability, and high resistance against corrosion. A counter side of composite materials is that these materials are prone to defects. Therefore, reliable inspection techniques are essential in order to evaluate the structural health of large composite structures.

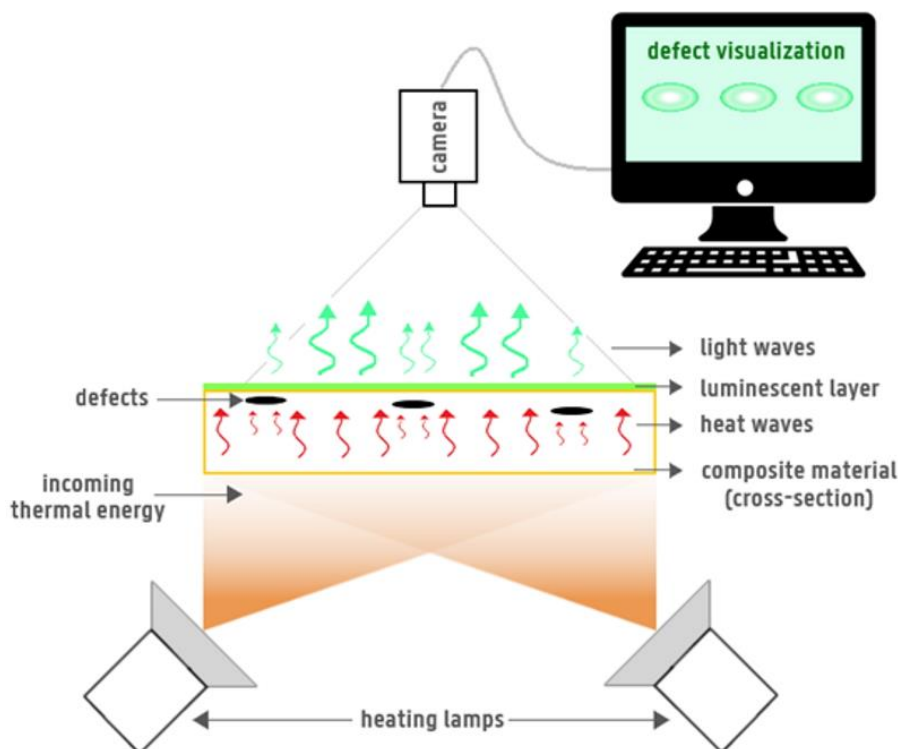


Figure 1: Schematic representation of the setup for defect inspection by means of thermally stimulated luminescence at the composite surface.

The UGent-MMS group has acquired a leading status in the field of non-destructive testing of composites by means of infrared thermographic defect inspection. The working principle of infrared thermography is based on the anomalous heat wave

transport through a composite when defects are present. Heat is mostly externally delivered to the composite structure by means of radiation of high-power flash lamps. Inspection and analysis of the surface temperature by means of a thermographic camera allows to visualize and characterize the size and location of the defects.

Although this inspection technique is very promising, necessity of a sensitive thermographic camera requires large investment costs. One way to omit this large cost, is by the application of a (thermo)-luminescent layer on top of the composite. The luminescent layer consists of BaSiON particles suspended in an epoxy matrix which allows to convert heat into luminescent light emission. Internal defects deteriorate the heat wave propagation through the composite. Therefore, on a local scale, the light activation within the luminescent layer is also affected by the presence of the defects. This difference in emitted light intensity can be easily observed by means of a conventional low-cost camera in the visual spectrum, and consequently allows for defect visualization.

In this thesis, the feasibility of this approach is evaluated for the first time. At first instance, it is up to the student to grasp the benefits, drawbacks and limitations of this technique. In a later stage, the student will focus on the analysis of the time-dependency of the luminescent behaviour in order to retrieve spatial information on the defect distributions within the sample. This is done by comparison of the obtained results with conventional defect inspections by means of infrared thermography.

In conclusion, this research concerns a topic which has a major relevance with regard to today's challenges in industry and is the result from an interplay between the fields of material science, and solid-state physics. For this challenging project, we are looking for a student with a dedicated enthusiasm for experimental physics and a natural interest to theoretical concepts.

Opmerkingen:

- Dit thesisonderwerp kan ook opgenomen worden in het kader van de Educatieve Master Fysica en Sterrenkunde.
- Aan dit onderwerp is geen mobiliteitsaspect verbonden. Er kan met de promotoren wel overlegd worden over gerelateerde stage-activiteiten en/of vakken aan andere universiteiten.

26. Small and sensitive: multiple protection strategies for light emitting quantum dots

Onderzoeksgroepen: [Lumilab](#) en [CoCoon](#)

Promotoren: [Prof. Philippe Smet](#) en [Prof. Christophe Detavernier](#)

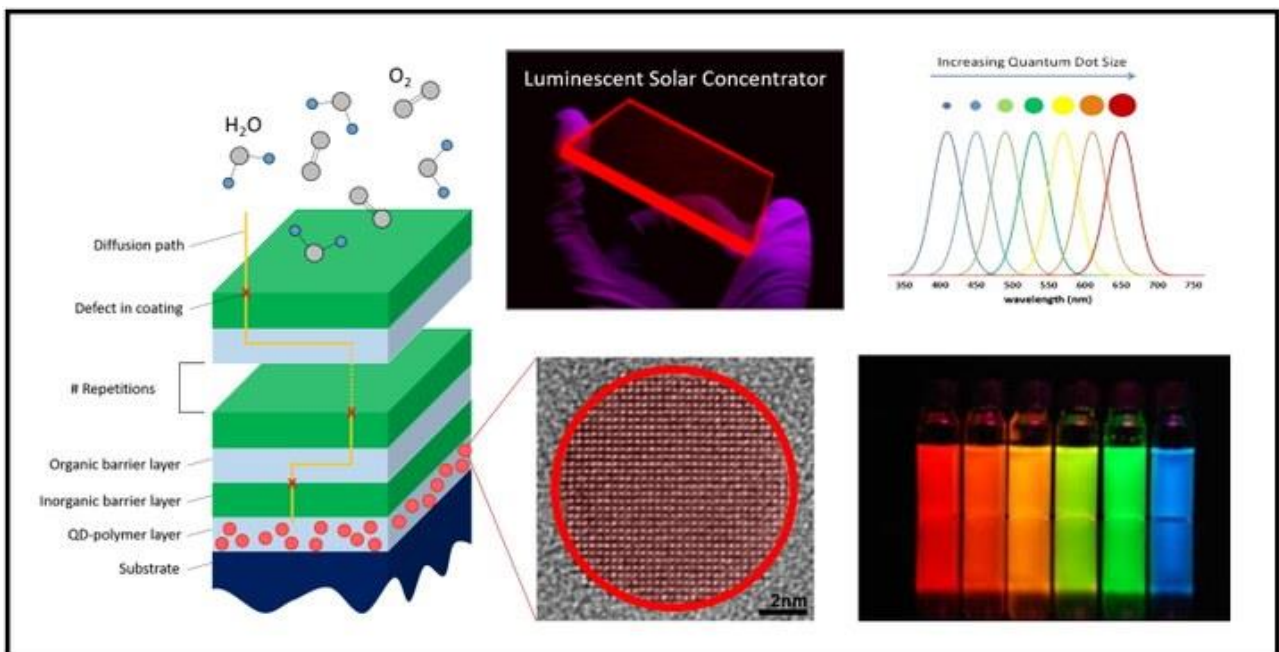
Begeleiding: [Robin Petit](#)

Quantum dots (QD) or semiconductor nanocrystals are steadily taking over the lighting industry. Due to their many advantageous properties over other current technologies, they are quickly becoming potential candidates for applications such as Luminescent Solar Concentrators (LSC), lasers and light-emitting diodes (LED). It is envisioned their importance will only continue to grow.



Despite their promising opto-electronic properties, QD are highly sensitive to their immediate environment. Possible unwanted reactions can lead to a decrease in the QD optical performance over time and efforts to make the QD more stable are deemed necessary. Their use in applications often requires the QD to be embedded in a host matrix (polymer thin film). Furthermore, to shield the QD from their surroundings (oxygen and water diffusion) an inorganic barrier is grown. One of the most promising techniques used for this is atomic layer deposition (ALD). In this way, the QD luminescent properties are safeguarded, ensuring a long device lifetime.

A further advancement is the use of a multilayer barrier. Here the barrier consists of alternating organic and inorganic layers, preventing crack propagation throughout the structure while increasing the path length for diffusion. Within this Master Thesis this type of barrier is developed and investigated.



Initially, the deposition of both the organic and inorganic (single) layers is performed and the resulting thin films are characterized. The most suitable polymers will be selected and cast into thin films using spin coating, while ALD will be used to grow the inorganic layers (Al_2O_3 , TiO_2 , ZnO). The successful incorporation of the QD into the polymer thin film strongly depends on the polymer backbone and the QD surface chemistry and will be evaluated. The QD are provided through a partnership with the Department of Chemistry (WE06) (no QD synthesis is required during this Master Thesis). Different techniques are applicable for the structural, morphological or otherwise optical characterization of the thin films: fourier transform infrared spectroscopy, ellipsometry, UV-Vis spectroscopy, X-ray reflectivity, X-ray photoelectron spectroscopy, scanning electron microscopy, transmission electron microscopy and many more. Careful data-analysis will be key in obtaining the most information out of these complementary techniques.

Eventually the transition to a multilayer barrier is made. You will propose and realize specific compositions depending on the desired properties of the resulting stack. A comparison of the barrier performance between a single barrier and the multilayer barrier is envisioned based on degradation studies of the QD optical performance. Depending on the properties of the organic and inorganic layers and the number of QD-polymer layers different devices can be developed and investigated.

Opmerkingen:

- Dit thesisonderwerp kan ook opgenomen worden in het kader van de Educatieve Master Fysica en Sterrenkunde.
- Aan dit onderwerp is geen mobiliteitsaspect verbonden. Er kan met de promotoren wel overlegd worden over gerelateerde stage-activiteiten en/of vakken aan andere universiteiten.

27. Quantum mechanical view on ultrafast scintillators

Groep: [Lumilab](#) Promotor: [dr. Jonas Joos](#) Supervision: [dr. Jonas Joos](#)

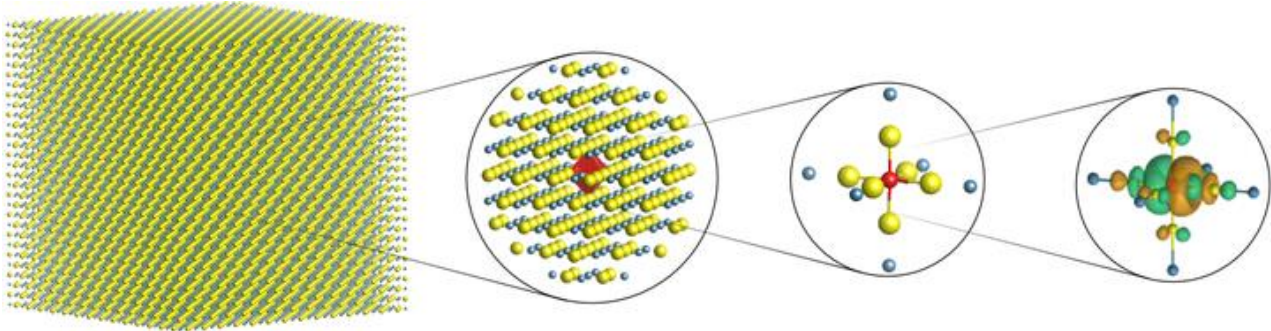
Scintillator crystals are essential building blocks of radiation detectors that are used in e.g. positron emission tomography (PET), or high-energy physics experiments. They emit visible light following an excitation process caused by the absorption of high-energy X-ray or gamma photons in a process called radioluminescence. A crucial parameter that determines their performance is the characteristic lifetime of the emitting state: the faster a scintillator decays, the better the timing resolution of the detector. For this reason, scintillators based on luminescent impurities with a nanosecond spin- and parity-allowed decay such as trivalent cerium (Ce^{3+}) are currently hot topic.



A recently proposed strategy to further improve the timing of Ce^{3+} based scintillators is to deliberately convert a part of the luminescent Ce^{3+} ions to their tetravalent counterpart, Ce^{4+} . It has been empirically verified that this indeed decreases the excited state lifetime, but unfortunately also leads to a lowering of the scintillator yield, i.e. the number of emitted photons per MeV of incident radiation. The underlying quenching mechanism is unclear, but is found to depend highly on the $\text{Ce}^{3+}/\text{Ce}^{4+}$ ratio. Accurately assessing this ratio is in fact another important practical issue, as this requires expensive experimental facilities such as a synchrotron.

In this thesis, Ce doped garnet scintillators will be theoretically investigated to explain the quenching mechanism. Additionally it is the goal to find a methodology to assess the amount of Ce^{4+} from optical spectroscopy, as a low-cost alternative for the synchrotron measurements, by calculating how Ce^{4+} induces new absorption bands. To achieve this, state-of-the-art quantum mechanical techniques based on wave function theory are addressed using a high-performance computer. As Ce is a genuine multivalent heavy element with 4f valence electrons, special relativistic effects are important and will be accurately accounted for via relativistic

Hamiltonians. Although this project is predominantly theoretical, experimental facilities are readily available that allow to confront theoretical results with experiment, thus increasing the impact of new findings.



Opmerkingen:

- Dit thesisonderwerp kan ook opgenomen worden in het kader van de Educatieve Master Fysica en Sterrenkunde.
- Aan dit onderwerp is geen mobiliteitsaspect verbonden. Er kan met de promotoren wel overlegd worden over gerelateerde stage-activiteiten en/of vakken aan andere universiteiten.

28. Lanthanide networks in luminescent materials: insights from Monte-Carlo simulations

Groep: [Lumilab](#) Promotor: dr. Jonas Joos, prof. dr. Philippe Smet

Supervision: dr. Jonas Joos

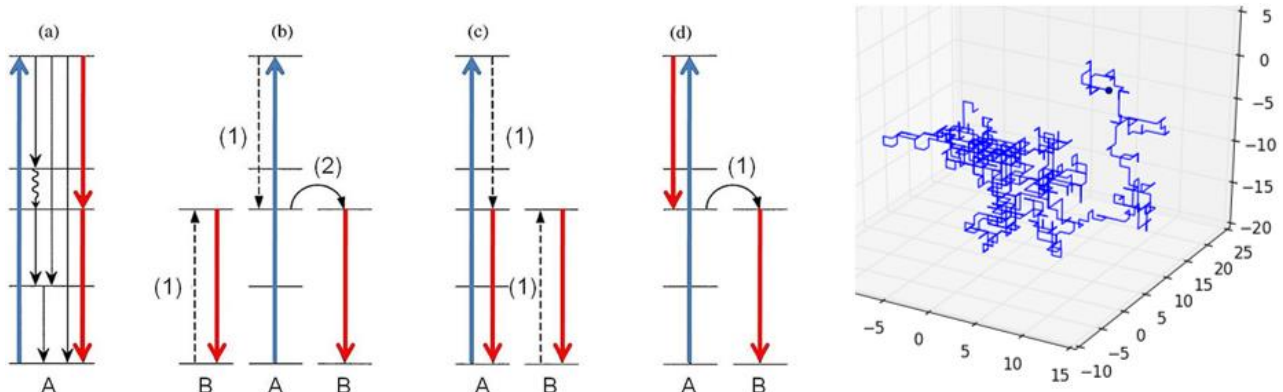
Luminescent materials, also known as phosphors, have very interesting properties for a variety of applications. They are typically composed of an inorganic crystal, which is doped by luminescence activators, often lanthanide (4f series) ions. Traditional application domains are medical imaging and LED-based lighting. To date, many questions remain on the precise physical processes responsible for their particular luminescent behavior, and a combination of theory and experiment is often needed to gain a deeper understanding.



Here, processes related to the interaction within networks of lanthanide ions inside the crystalline matrix are studied by means of Monte-Carlo simulations. Two distinct mechanisms exist for lanthanide ions to interact. Firstly, they can resonantly transfer energy which can give rise phenomena such as quantum cutting where a UV photon is converted in two infrared photons (see Figure), or upconversion, the opposite effect. However exotic, these phenomena have been proposed to improve the efficiency of solar cells or concentrators, potentially having a significant societal impact. Secondly, charge carriers can be exchanged between lanthanide ions. Such electron transfers can induce energy storage which lies at the origin of afterglow phosphors, or medical imaging plates depending on the details of the interaction. Although the basics of these phenomena are roughly understood, important knowledge gaps remain. These pertain mainly to the type and range of the

interactions. As a consequence, materials are usually developed and optimized in a trial-and-error fashion.

In this thesis, these knowledge gaps are considered via kinetic Monte-Carlo (MC) simulations, using effective expressions for the atomic-scale interactions in order to investigate what kind of phenomena emerge on a macroscopic scale. Although this project is predominantly theoretical, experimental facilities are readily available that allow to confront theoretical results with experiment, thus increasing the impact of new findings.



Opmerkingen:

- Dit thesisonderwerp kan ook opgenomen worden in het kader van de Educatieve Master Fysica en Sterrenkunde.
- Aan dit onderwerp is geen mobiliteitsaspect verbonden. Er kan met de promotoren wel overlegd worden over gerelateerde stage-activiteiten en/of vakken aan andere universiteiten.

29. Optical spectroscopy of metastable states in persistent phosphors

Groep: [Lumilab](#) Promotor: [prof. dr. Philippe Smet](#), [dr. Jonas Joos](#)

Supervision: [David Van der Heggen](#), [Dirk Poelman](#)



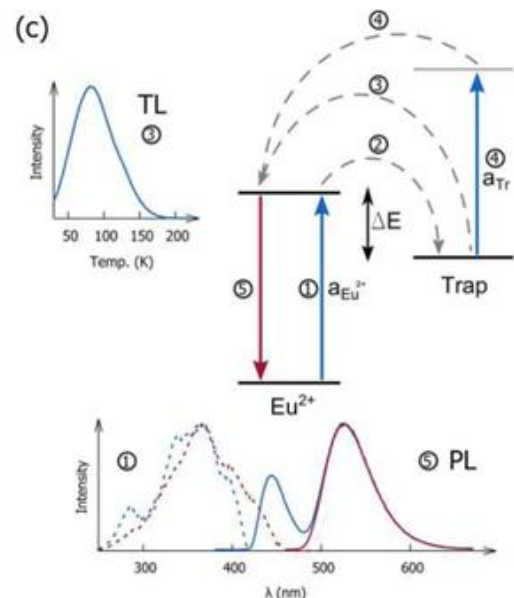
Persistent phosphors are luminescent materials that possess the ability to store energy inside them. Room temperature is typically sufficient to slowly release the stored energy, giving rise to the well-known “glow-in-the-dark” effect. The mechanism behind this energy storage is an electron transfer from the luminescent ion to a so-called trapping defect. The current state-of-the-art phosphors operate at only 1.6% of their maximal capacity so there is still a lot of room for improvement. Nevertheless, during the past two decades of research, only moderate improvements on these materials’ storage capacity have been achieved.

Recently our group has been able to identify the mechanism that limits the performance of these phosphors. The culprits are optically active trapping defects that absorb the excitation light which leads to an increased emptying of filled traps.

This mechanism is known as optically stimulated luminescence by excitation light and is clearly an unwanted effect.

The goal of this thesis is to identify the chemical nature and optical signature of these unwanted defects. This will be accomplished by combining several optical characterization techniques such as diffuse reflectance, optically stimulated luminescence and thermoluminescence. To this end, new state-of-the-art equipment such as a high performance spectrophotometer and a high power OPO laser are available. The information collected during optical characterization can be used as input to synthesize our own, optimized persistent phosphors in-house.

The results from this thesis should allow to accelerate further improvements of the persistent phosphors' performance. Such a targeted approach is bound to be more successful than the current trial-and-error approach and promises that more demanding applications such as theranostics or glow-in-the-dark road markings are finally within reach!



Opmerkingen:

- Dit thesisonderwerp kan ook opgenomen worden in het kader van de Educatieve Master Fysica en Sterrenkunde.
- Aan dit onderwerp is geen mobiliteitsaspect verbonden. Er kan met de promotoren wel overlegd worden over gerelateerde stage-activiteiten en/of vakken aan andere universiteiten.

30. Microscopic investigation of redox processes in luminescent materials

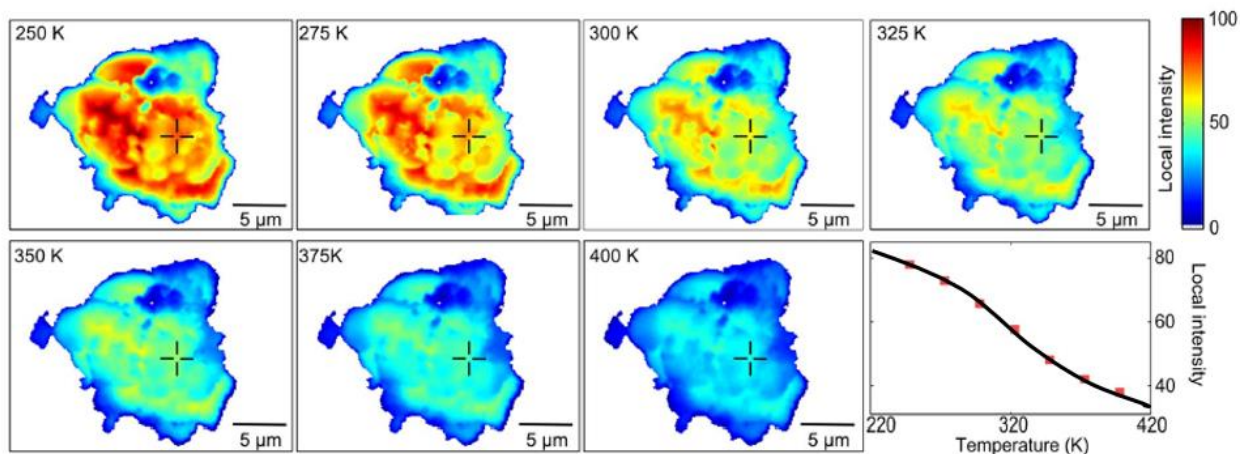
Groep: [Lumilab](#) Promotoren: [prof. dr. Philippe Smet](#) en [prof. dr. Dirk Poelman](#) Begeleiding: [Lisa Martin](#) en [David Van der Heggen](#)

Luminescent materials emit light that is not generated thermally, as in an incandescent lamp. These materials, also known as phosphors, are ubiquitous for modern lighting and display applications, such as LEDs.



Most photo and electroluminescent materials, such as LED phosphors, also show light emission when they are exposed to ionizing radiation. In case of electrons, the process is called cathodoluminescence (CL). Inside a scanning electron microscope (SEM), high-resolution imaging can be combined with the analysis of the CL emission spectrum on a microscopic level, opening new possibilities to study luminescent materials on a nanometer scale. This in contrast to standard luminescence spectroscopy where macroscopic averages are measured. The underlying processes are then blurred and difficult to model.

In this master thesis, you will be trained to work independently with an electron microscope, equipped with elemental analysis (EDX, energy-dispersive X-ray spectroscopy), temperature stage and luminescence spectrometer (CL detection). By combining these techniques, it is possible to correlate local variations in luminescent properties to variations in chemical composition and particle morphology. You will apply these techniques to gain improved understanding of the energy transfer phenomena between lanthanide dopants. The goal is to look at a specific and emerging class of luminescent materials, with metastable charge transfer states. They enable energy storage or can induce new emission bands, but the details of these mechanisms are far from clear. As impurities or local variations in dopant concentrations are expected to play an important role, it is a good strategy to investigate these materials on unexplored spatial dimensions in order to gain more insight in the emission mechanism.



(Figure: mapping of CL emission intensity of a phosphor particle at different temperatures. For each pixel, the influence of temperature can be investigated, and used to model the thermal quenching behaviour)

Opmerkingen:

Dit thesisonderwerp kan ook opgenomen worden in het kader van de Educatieve Master Fysica en Sterrenkunde.

Aan dit onderwerp is geen mobiliteitsaspect verbonden. Er kan met de promotoren wel overlegd worden over gerelateerde stage-activiteiten en/of vakken aan andere universiteiten.

31. Gallium nitride illuminated

Promotoren: Prof. [Benoit Bakeroot](#) (CMST, ELIS), Prof. [Dirk Poelman](#) (Lumilab, Vastestofwetenschappen) Begeleiding: Prof. [Benoit Bakeroot](#), [Lisa Martin](#)



Probleemstelling: It is estimated that more than sixty percent of the electricity produced worldwide passes through one or more semiconductor devices (mostly in voltage convertors). The efficiency at which the electronic circuit – and, thus, the devices – convert electrical energy has an enormous impact on the worldwide consumption of electricity. Up to this date, the majority of these devices are still made of silicon. Yet, a radical improvement of the conversion efficiency can only be achieved when using other semiconductors. From a theoretical point of view, wide band gap semiconductors are much more suited for high voltage applications. Both silicon carbide (SiC) and gallium nitride (GaN) have good credentials: both have a band gap well above 3.0 eV which results in critical electric fields about ten times that of silicon, both have high mobilities and saturation velocities, and both have a relatively good thermal conductivity. Of course, besides these theoretical considerations there are economical ones and the technology to make devices in those semiconductors must be cost-effective. GaN-on-Si is a very promising technology as one can grow GaN on large silicon wafers (8 inch). Unfortunately, one of the main challenges for the technology remains the reduction of the number of defects in the GaN.

Doel: After the student gets acquainted with gallium nitride and its most important properties, a commercial software tool (Synopsys' Technology Computer Aided Design or TCAD) will be introduced. This TCAD tool numerically solves the Poisson and drift-diffusion equations using finite-element methods and enables a further study of GaN devices. The research group CMST (Prof. B. Bakeroot) has a long-standing experience in simulating semiconductor devices and will guide this part of the thesis. Another important part of this thesis consists of both photoluminescence and cathodoluminescence measurements in electron microscope. The samples are provide by Imec through CMST, which is an Imec associated lab. The luminescence measurements take place in the Sterre (S1) under the supervision of Prof. D. Poelman (Lumilab, Faculty of Sciences). The goal is to study the defects in the gallium nitride samples and to extract as much as possible the electrical properties. A final stage in the thesis would then be to couple back the experimental findings to the TCAD simulations in order to get a better insight in the working principles of the GaN devices.

Mobiliteitscomponent: geen

Educatieve component: Ja; dit onderwerp kan voorgesteld worden in een lessenpakket over ontwikkelingen in de elektronica