

Використання інноваційних методів комп'ютерного симулювання мікро та наноструктур

Вінницький національний технічний університет

Анотація.

Комп'ютерне симулювання мікро та наноструктур є одним з основних способів дослідження даних елементів сучасної мікро та наноелектроніки. В даній роботі представлений метод симуляції таких фізичних величин як зонні структури таких матеріалів як кремній, германій, та арсенід галію, також продемонстровані їх графіки електричного потенціалу. Також проведене порівняння отриманих значень моделювання з актуальними науковими дослідженнями.

Ключові слова: *Арсенід галій, кремній, германій, комп'ютерна симуляція, мікро та наноелектроніка*

Abstract.

Computer simulation of micro and nanostructures is one of the main ways of studying these elements of modern micro and nanoelectronics. This work presents a method of simulating such physical quantities as the band structures of materials such as silicon, germanium, and gallium arsenide, and also demonstrates their electrical potential graphs. A comparison of the obtained modeling values with current scientific research was also carried out.

Keywords: Gallium arsenide, silicon, germanium, computer simulation, micro and nanoelectronics

Вступ

Тверде тіло складається із системи частинок – ядер та електронів. При цьому якщо ми маємо справу з монокристалом, то негативні електрони (особливо це відноситься до валентних) знаходяться в періодичному потенційному полі позитивних іонів кристалічної решітки. Тоді завдання вивчення поведінки носіїв заряду в кристалі зводиться до розгляду впливу періодичного поля ґрат на рух (стан) електронів. З точки зору дослідження новітніх сполук для виготовлення напівпровідникових елементів є важливим мати сучасні методи дослідження саме елементарних частинок та їх характеристик.

Аналіз

Для проведення дослідження були знайдені та проаналізовані застосунки компанії Nanoacademic technologies [1]. Даною компанією були зроблені такі застосунки для аналізу різного типу сполук таких як:

- NanoDCAL
- RESCU
- QTCAD

NanoDCAL: пропонує надійні та потужні функції моделювання квантового транспорту для моделювання наноструктур або нанопристроїв. Це атомно-орбітальна реалізація NEGF-DFT. Він обчислює гамільтоніан матеріалів і пристроїв із перших принципів (тобто без зовнішніх параметрів) за допомогою теорії функціоналу густини (DFT) і моделює явища квантового переносу в рамках формалізму нерівноважної функції Гріна Келдиша (NEGF). NanoDCAL містить великий набір методів для розрахунку важливих транспортних властивостей ваших матеріалів. NanoDCAL використовувався в сотнях рецензованих статей у таких різноманітних областях, як молекулярна електроніка, нанотрубки, топологічні ізолятори, батареї, магнітні тунельні переходи, межі металевих зерен (кристаліти) тощо. [2]

RESCU: RESCU (Real space Electronic Structure Calculator) Калькулятор електронної структури реального простору – це потужний розв'язувач теорії функціоналу густини (DFT) і DFPT (теорії

збурень) на основі MATLAB. Він може передбачати електронну структуру та похідні властивості об'ємних матеріалів, поверхонь матеріалів і молекул. RESCU розраховує щільність основного стану на основі числових атомних орбіталей, плоских хвиль або реальних просторових сіток або їх комбінації. Написаний з метою вирішення систем, що містять до кількох десятків тисяч атомів, RESCU ретельно розпаралелізовано та використовує такі бібліотеки, як MPI, ScaLAPACK і CUBLAS. Він містить багато найсучасніших інструментів аналізу, таких як щільність станів (DOS), прогнозована щільність станів (PDOS), локальна щільність станів (LDOS, PLDOS), фононна та зонна структура кінцевого зміщення. [3]

QTCAD: (Quantum-Technology Computer-Aided-Design) — це симулятор кінцевих елементів (FEM), який використовується для прогнозування продуктивності спін-кубітних пристроїв перед їх виготовленням. Симуляції QTCAD® можуть значно заощадити як час, так і гроші, оскільки вони дозволяють користувачам досліджувати багато сценаріїв проектування перед їх впровадженням у лабораторії. Нелінійний вирішувач Пуассона QTCAD може передбачити потенціал конфайнменту квантових точок у напівпровідникових наноструктурах під розділеними затворами. QTCAD розроблений для конвергенції при температурах нижче Кельвіна в багатьох практичних спін-кубітних конструкціях. Зближення при низьких температурах, як відомо, є складним за допомогою іншого доступного програмного забезпечення TCAD. [4]

Крім того всі ці застосунки можна використовувати разом за допомогою розробленої цією ж фірмою компанією збірною програмою Device Studio. В рамках дослідження було проведено аналіз діаграм зонних структур та зібрання молекулярних структур таких елементів як кремній, германій та арсенід галій. Діаграми енергетичних рівнів продемонстровані на рисунку 1. Тоді як молекули даних матеріалів продемонстровані на рисунку 2

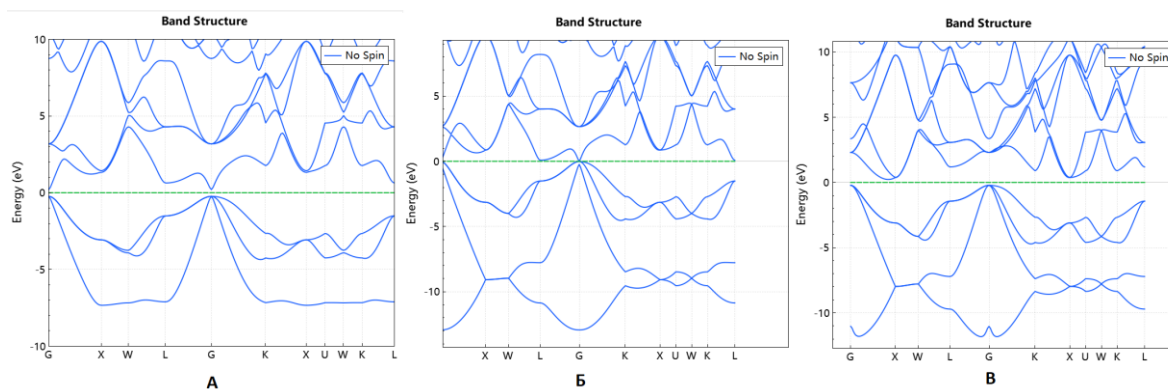


Рисунок 1: Діаграми зонних структур для а) арсенід галію, б) германію, в) кремнію

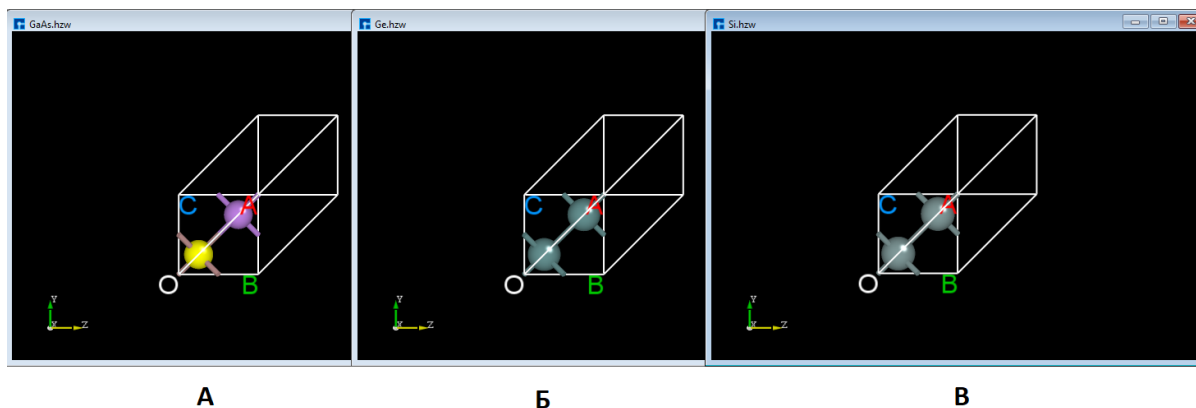


Рисунок 2: Зображення молекул для а) арсенід галію, б) германію, в) кремнію

Для порівняння отриманих результатів звернемося до навчального посібника «Волоконно оптичні системи перетворювання інформації» авторів Осадчук В.С. та Осадчук О.В. [2]. Діаграми зонних структур з даного посібника представлені на рисунку 3.

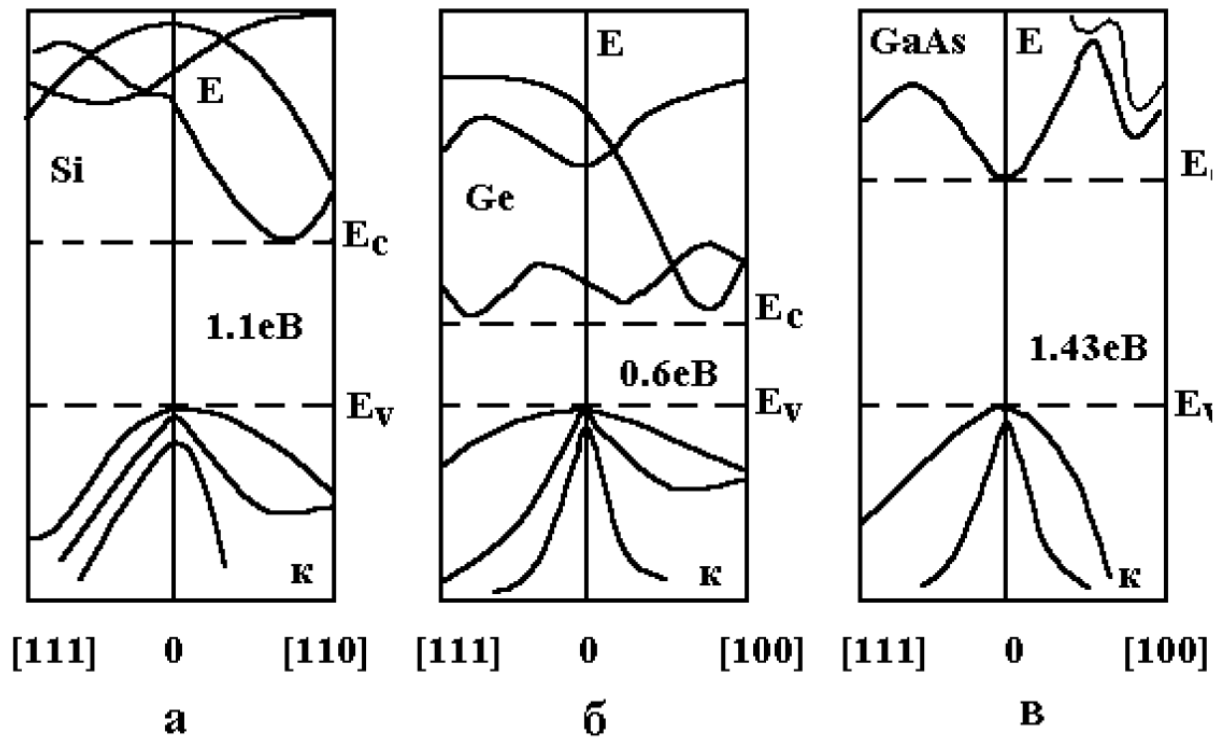


Рисунок 3: Діаграми зонних структур для порівняння а) арсенід галію, б) германію, в) кремнію

Як ми бачимо дані діаграми збігаються з тими що були одержані мною в рамках проведення експерименту в програмному застосунку Device Studio і є підставою для подальшого продовження проведення експерименту по дослідженню напівпровідникових сполук.

Також в рамках експерименту було досліджено ефективний потенціал арсенід галію, програма дозволяє демонструвати значення даної величини як у вигляді 3D діаграмі - рисунок 4, 2D діаграмі – рисунок 5 та 1D діаграмі – рисунок 6.

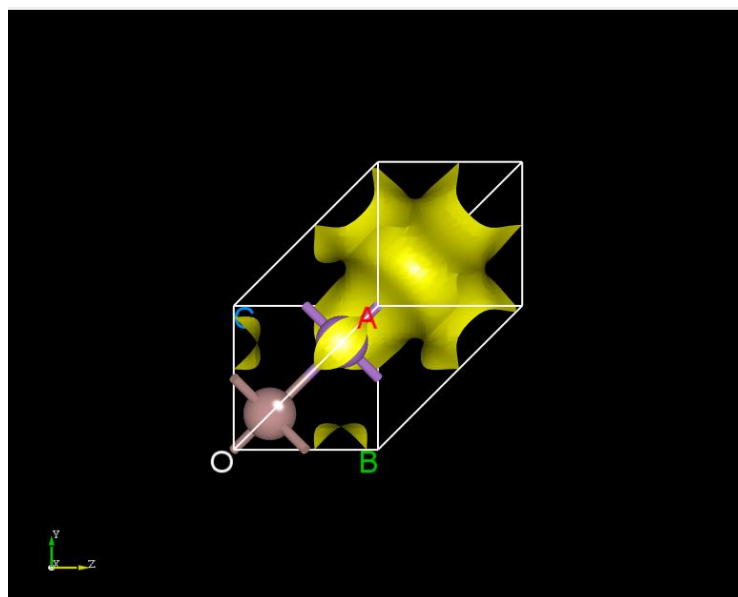


Рисунок 4: 3D діаграма ефективного потенціалу арсенід галію

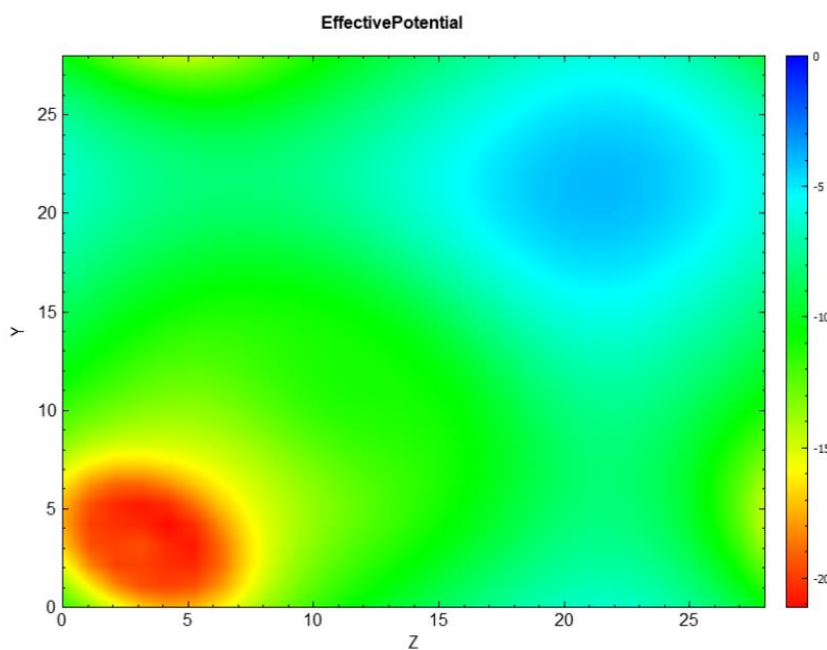


Рисунок 5: 2D діаграма ефективного потенціалу арсенід галію

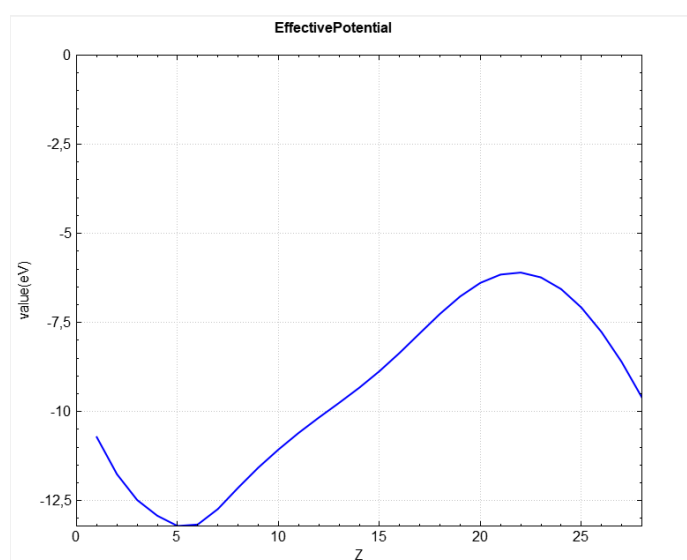


Рисунок 6: 1D діаграма ефективного потенціалу арсенід галію

Крім того за допомогою даної програми було зібрано кристал з р-п переходом на основі кремнію для його подальшого аналізу та впровадження в рукопис дисертаційного дослідження. Зображення кристалу та його параметрів зображені на рисунках 7 та 8.

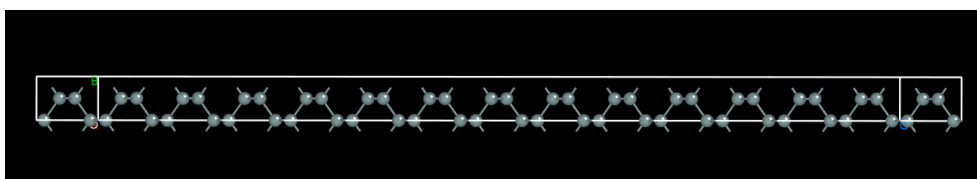


Рисунок 7: Зображення кристалу з р-п переходом на основі кремнію

Left Electrode		
Electron temperature	<input type="text" value="100"/>	K ▾
Electrode voltage	<input type="text" value="0"/>	V ▾
k-points(n3)	<input type="text" value="100"/>	

Right Electrode		
Electron temperature	<input type="text" value="100"/>	K ▾
Electrode voltage	<input type="text" value="0"/>	V ▾
k-points(n3)	<input type="text" value="100"/>	

Рисунок 8: Вхідні параметри кристалу з р-п переходом на основі кремнію

Висновки

В даній роботі був представлений метод симуляції таких фізичних величин як зонні структури таких матеріалів як кремній, германій, та арсенід галію, також продемонстровано їх графіки електричного потенціалу за допомогою застосунків розроблених компанією Nanoacademic technologies Також проведено порівняння отриманих значень моделювання з актуальними науковими дослідженнями і зібрано кристал на основі кремнію

СПИСОК ВИКОРИСТАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ

1. Nanoacademic technologies [Електронний ресурс] : [Веб-сайт]. – Електронні дані.– Режим доступу: <https://nanoacademic.com/> (дата звернення 05.11.2023) – Назва з екрана.
2. NanoDCAL [Електронний ресурс] :[Веб-сайт]. – Електронні дані.– Режим доступу: <https://nanoacademic.com/solutions/nanodcal/> (дата звернення 05.11.2023) – Назва з екрана.
3. RESCU [Електронний ресурс] : [Веб-сайт]. – Електронні дані.– Режим доступу: <https://nanoacademic.com/solutions/rescu/> (дата звернення 05.11.2023) – Назва з екрана.
4. QTCAD [Електронний ресурс] : [Веб-сайт]. – Електронні дані.– Режим доступу: <https://nanoacademic.com/solutions/qtcad/> (дата звернення 05.11.2023) – Назва з екрана.
5. Осадчук В. С. Волоконно-оптичні системи передачі [Текст] : навчальний посібник / В. С. Осадчук, О. В. Осадчук. — Вінниця : ВНТУ, 2005. — 225 с.

Ільчук Дмитро Русланович – асистент кафедри інформаційних радіоелектронних технологій і систем, Вінницький національний технічний університет, м. Вінниця, e-mail: demabels@gmail.com

Пастушенко Олександр Леонідович – асистент кафедри інформаційних радіоелектронних технологій і систем, Вінницький національний технічний університет, м. Вінниця, e-mail: mr.waildcat@ukr.net

Ilchuk Dmytro Ruslanovych - assistant of the Department of Information Radio Electronic Technologies and Systems, Vinnytsia National Technical University, Vinnytsia, e-mail: demabels@gmail.com

Pastushenko Oleksandr Leonidovych – assistant of the Department of Information Radio Electronic Technologies and Systems, Vinnytsia National Technical University, Vinnytsia, e-mail: mr.waildcat@ukr.net