

ІНФОРМАЦІЙНІ ТЕХНОЛОГІЇ МОДЕЛЮВАННЯ НАПІВПРОВІДНИКОВИХ СТРУКТУР

Лашко Е. І., Стрілкова Т. О.

Харківський національний університет радіоелектроніки, каф. МЕЕПІ,
м. Харків, Україна

e-mail: eduard.lashko@nure.ua, tetiana.strilkova@nure.ua

The work is dedicated to the study of the application of information technologies for modeling donor-acceptor semiconductor structures for the development of materials for photodetectors, lasers, and high-speed electronics. It presents the capabilities of Mathcad and GaussView 6 for analyzing the spatial structure of semiconductors, electronic levels, and energy characteristics. The study also explores spatial and energy structures of semiconductors used in optoelectronics, providing valuable insights for the design and improvement of optoelectronic devices.

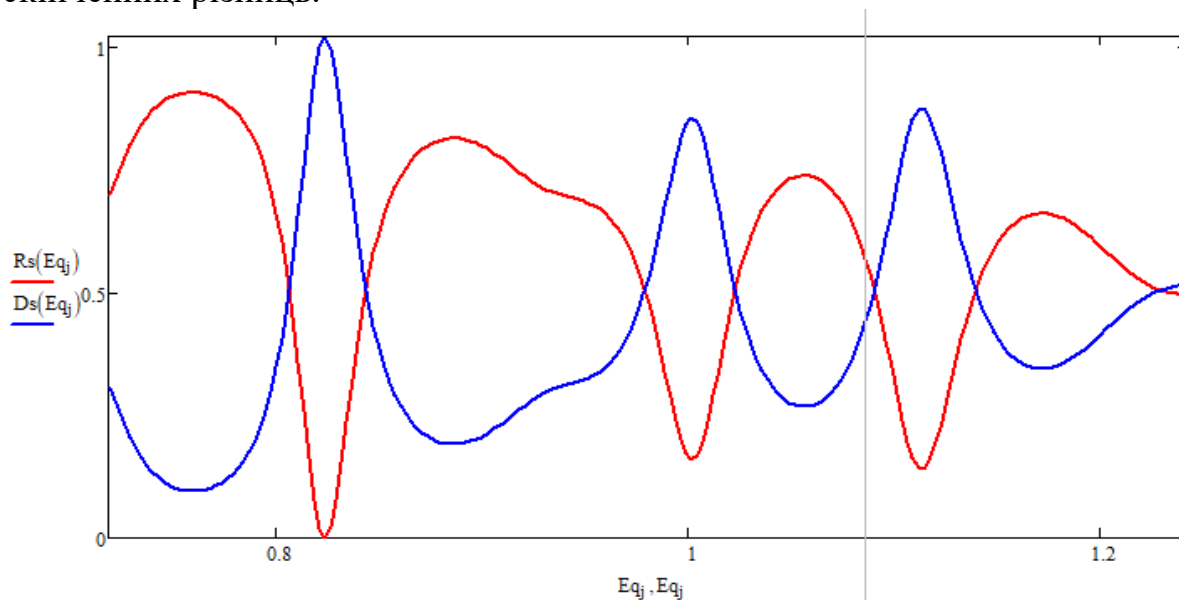
У сучасній мікроелектроніці процес моделювання структури донорно-акцепторних напівпровідників відіграє ключову роль у розробці нових матеріалів, наприклад для фоточутливих датчиків, лазерних систем і високошвидкісної електроніки. Використання програмного забезпечення Mathcad та GaussView 6 [1] дозволяє ефективно аналізувати просторову структуру напівпровідників, їх електронні рівні та енергетичні характеристики.

Інформаційні методи моделювання дозволяють провести аналіз електронної структури, визначити енергетичних рівнів та їх взаємодію у процесах поглинання й випромінювання світла. Зокрема, у Mathcad є можливість дослідити багат шарові бар'єрні структури, а в GaussView 6 проведено квантово-хімічні розрахунки для напівпровідникових сполук [2]. Метою роботи є дослідити та застосувати можливості інформаційних технологій при моделюванні напівпровідникових структур.

Основні етапи моделювання напівпровідникових структур включають в себе: побудову фізичної моделі матеріалу, вибір відповідних методів чисельного аналізу, проведення розрахунків електронної структури, визначення зонної структури та енергетичних рівнів, а також аналіз взаємодії носіїв заряду з потенціальними бар'єрами. На першому етапі формуються математичні вирази, щодо опису властивостей багат шарових напівпровідникових структур. Далі, використовуючи чисельні методи, зокрема метод передавальної матриці та метод скінченних різниць, проводиться аналіз розподілу хвильових функцій і визначаються ймовірності тунелювання носіїв заряду.

В доповіді представлені результати моделювання моделі багат шарової структури напівпровідника за допомогою Mathcad. В запропонованій моделі багат шарової структури кожен шар описується

власною висотою потенціального бар'єру та шириною. Проведено чисельний розрахунок коефіцієнта прозорості через багатошаровий бар'єр методом передавальної матриці дозволяє оцінити ефективність тунелювання носіїв заряду. Результати представлені на рисунку 1. Аналіз зонної структури передбачає визначення власних енергетичних рівнів у потенціальних ямах за допомогою розв'язку рівняння Шредінгера методом скінченних різниць.

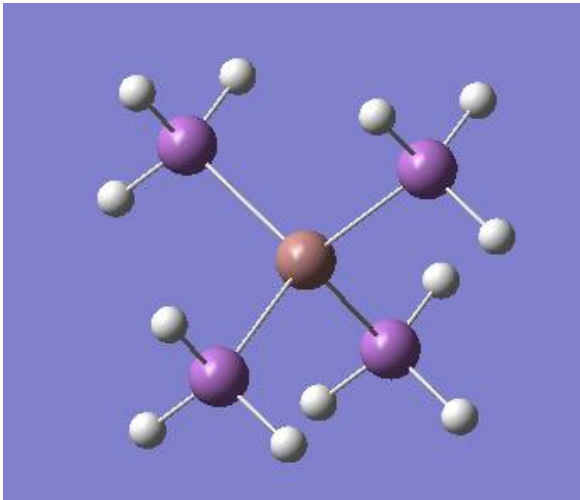


Рисунк 1 – Залежність коефіцієнта прозорості ($D_s(E_{qj})$) та відбиття ($R_s(E_{qj})$) від енергії тунелюючої частинки (E_{qj})

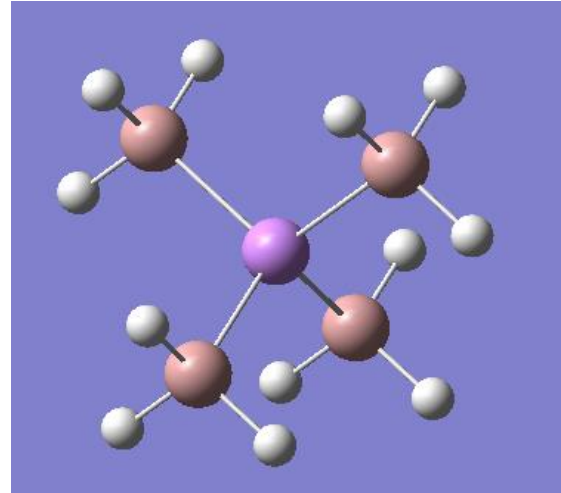
У процесі моделювання досліджено вплив легування та товщини шарів на електронні властивості донорно-акцепторних напівпровідників. Аналіз тунельних ефектів при зміні геометрії бар'єрів показав, що варіація товщини бар'єрів змінює електронні рівні в матеріалі, що впливає на здатність до тунелювання. Це дає можливість створювати напівпровідникові матеріали з покращеними характеристиками для таких пристроїв, як тунельні діоди та квантові каскадні лазери.

Результати, отримані за допомогою Mathcad, підтвердили важливість точного налаштування параметрів для підвищення ефективності оптоелектронних пристроїв на основі цих матеріалів.

Проведено дослідження побудови структури напівпровідників з використанням програмного забезпечення GaussView 6. Дослідження структури напівпровідників проведено для групи $A_{III}B_V$, зокрема GaAs та InSb. Було проведено розрахунки енергетичних характеристик напівпровідникових структур. GaAs має ширшу заборонену зону (~ 1.42 eV), що дозволяє використовувати його у лазерах, світлодіодах та ВЧ-електроніці. InSb, маючи вузьку зону провідності (~ 0.17 eV), ефективний у детекторах інфрачервоного випромінювання. Результати моделювання представлені на рисунку 2.



а)



б)

Рисунок 2 – а) побудована в GaussView атомна структура InSb; б) GaAs

Використання GaussView 6 дозволило визначити електронні рівні атомів In і Sb, а також Ga і As, що є критично важливим для прогнозування електронних властивостей матеріалів. Було розраховано граничну довжину хвилі для GaAs, яка становить приблизно 870 нм, що підтверджує його ефективність застосування у ближньому інфрачервоному діапазоні. Результати моделювання впливу геометричних параметрів структури на її електронні властивості та енергетичні характеристики напівпровідникових структур дозволяють адаптувати матеріали до вимог сучасних технологій, таких як оптоелектроніка та лазерні системи.

Висновки. Використання інформаційних технологій дозволяє проводити важливі дослідження при розробці нових матеріалів для мікроелектроніки та оптоелектроніки та мають перспективи для подальших наукових досліджень та практичного застосування.

Список використаних джерел

1. GaussView 6 User Manual. URL: <https://gaussian.com/wp-content/uploads/dl/gv6.pdf> (дата звернення: 28.02.2025).
2. Yu, P. Y., Cardona, M. Fundamentals of Semiconductors: Physics and Materials Properties. – Springer, 2010. – 782 с.
3. Моделювання приладів мікро- і наноелектроніки / за ред. В.І. Федорова. – Київ: НТУУ "КПІ", 2019. – 200 с.
4. Tsu, R. Superlattice to Nanoelectronics. – Elsevier, 2011. – 284 с.
5. Harrison, P. Quantum Wells, Wires and Dots. – Wiley, 2016. – 472 с.