

РЕЦЕНЗИЯ НА СТАТЬЮ

Авторы: Улзи Уянга

Название статьи: Самосогласованная формулировка метода неравновесных функций Грина на основе метода конечных элементов для моделирования квантового баллистического переноса.

1. Актуальность темы:

В данной работе мы разрабатываем вычислительную стратегию для анализа квантового транспорта в наномасштабе в баллистических условиях путем интеграции формализма транспорта на основе функции Грина с методом пространственной дискретизации, подходящим для электростатического моделирования. Предложенный метод использует подход неравновесной функции Грина (NEGF) для описания поведения носителей заряда на квантовом уровне, в то время как для решения уравнения Пуассона используется численная схема на основе сетки, а именно метод конечных элементов. Эта гибридная формулировка позволяет точно обрабатывать сложные геометрические формы устройств и естественным образом включает электростатические граничные условия без введения искусственных ограничений. Область моделирования основана на двухзатворном полевом транзисторе металл-оксид-полупроводник (MOSFET), выбранном для представления современных транзисторных структур. Ключевые электронные свойства, включая запаздывающую функцию Грина, локальную плотность носителей заряда, распределение электростатического потенциала и энергетически разрешенную передачу, вычисляются самосогласованно. Для достижения сходимости между профилями заряда и потенциала используется метод Ньютона-Рафсона. Численные результаты демонстрируют, как распределение потенциала и характеристики квантового транспорта изменяются в процессе итераций и при различных условиях смещения. В частности, спектр пропускания и интегрированные функции Ферми позволяют понять явления квантового туннелирования и инжекции носителей заряда в устройствах с коротким каналом. Эти результаты подчеркивают важность сопряженного электростатического и транспортного моделирования для прогнозирования поведения устройств квантового масштаба и поддерживают дальнейшее развитие инструментов моделирования для полупроводниковых технологий следующего поколения.

2. Научная новизна, значимость работы.

В данном исследовании представлена комплексная модель, которая интегрирует формализм неравновесной функции Грина (NEGF) с методом конечных элементов (МКЭ) для получения самосогласованного решения для моделирования наноразмерных устройств. Для вычисления запаздывающей функции Грина используется подход с несвязанным модовым пространством, который затем используется для оценки электронной плотности. Полученная электронная плотность затем подставляется в уравнение Пуассона для определения распределения электростатического потенциала. Нелинейное уравнение Пуассона решается с использованием итерационной схемы Ньютона-Рафсона, при этом вычислительная область дискретизируется с помощью кусочно-линейных элементов в рамках МКЭ. Ключевые величины, полученные в результате моделирования, включают пространственное распределение электронной плотности, интегрированные уровни Ферми и спектр пропускания. Полученные результаты демонстрируют отклонения от ожидаемого физического поведения, что указывает на ограничения существующего подхода к моделированию. Эти расхождения предполагают необходимость дальнейшего усовершенствования модели. Дальнейшая работа будет сосредоточена на повышении точности модели за счет оптимизации граничных условий, пересмотра параметров материала и внедрения более надежных численных схем для улучшения сходимости и точности прогнозирования.

Логичность и последовательность изложения материала.

Присутствует

3. Проведение анализа по заявленной проблематике

Приведен

4. Статистическая обработка материалов (эксперимент)

Да

5. Исполнение методов научного познания

Да

6. Цитируемость научных источников

Да

7. Научный стиль изложения, терминология

Присутствует

8. Соответствие правилам оформления

Да

9. Замечания рецензента (если есть)

Нет

Рекомендации к опубликованию (подчеркнуть)		
<u>Публиковать безусловно</u>	Публиковать после доработки/устранения замечаний	Отклонить (обосновать)

Рецензент Сагитов Рамиль Фаргатович,



Ученая степень Кандидат технических наук, доцент

Должность Заместитель директора, главный научный сотрудник

Место работы ООО «Научно-исследовательский проектный институт «Промышленное и гражданское строительство»

Подпись Сагитова Р.Ф. заверяю



Е.В. Харабрин

