



รายงานวิจัยฉบับสมบูรณ์

การใช้คอมพิวเตอร์ เพื่อศึกษาความเป็นไปได้ของการเกิดปรากฏการณ์ควอนตัม
คอนไฟน์เมนต์ในหลอดควอนตัมของแหล่งกำเนิดแสงชนิดสารกึ่งตัวนำ
A computer simulation search for the quantum confined Stark effect in a
semiconductor light source with the quantum well.

โดย ดร.กัทร อัยรักษ์ มหาวิทยาลัยสงขลานครินทร์
รศ.บุญเหลือ พงศ์ดารา มหาวิทยาลัยสงขลานครินทร์ (นักวิจัยพี่เลี้ยง)

รายงานวิจัยฉบับสมบูรณ์

โครงการ: การใช้คอมพิวเตอร์ เพื่อศึกษาความเป็นไปได้ของการเกิดปรากฏการณ์
ควอนตัมคอนไฟน์สตาร์ก ในหลุมควอนตัมของแหล่งกำเนิดแสงชนิดสารกึ่งตัวนำ

โดย ดร.ภัทร อัยรักษ์ มหาวิทยาลัยสงขลานครินทร์
รศ.บุญเหลือ พงศ์คารา มหาวิทยาลัยสงขลานครินทร์ (นักวิจัยพี่เลี้ยง)

สนับสนุนโดยสำนักงานกองทุนสนับสนุนการวิจัย

(ความเห็นในรายงานนี้เป็นของผู้วิจัย สกว.ไม่จำเป็นต้องเห็นด้วยเสมอไป)

กิตติกรรมประกาศ

งานวิจัยชิ้นนี้สำเร็จได้โดยการสนับสนุนจากหลายฝ่าย โดยเฉพาะอย่างยิ่งสำนักงานกองทุนสนับสนุนการวิจัยซึ่งสนับสนุนทุนวิจัยอย่างพอเพียงและต่อเนื่อง นอกจากนี้ยังได้รับการสนับสนุนทางวิชาการจาก Dr. D.W.E. Allsopp อาจารย์จากภาควิชา Electronic & Electrical Engineering University of Bath สหราชอาณาจักรและ Dr. A.J. Vickers อาจารย์จากภาควิชา Electronic Systems Engineering University of Essex สหราชอาณาจักร นอกจากนี้ ผู้ที่ขาดมิได้ในงานวิจัยชิ้นนี้คือ รศ.บุญเหลือ พงศ์ดารา นักวิจัยพี่เลี้ยงและผู้สนับสนุนการขอทุนครั้งนี้ ผู้วิจัยรู้สึกซาบซึ้งในความช่วยเหลือของทุกท่านเป็นอย่างสูง

ภัทร อัยรักษ์

สารบัญ

	หน้า
กิตติกรรมประกาศ	a
สารบัญ	b
Abstract	1
บทคัดย่อ	2
บทนำ	3
วิธีการทดลอง	5
ผลการทดลอง	6
บทวิจารณ์	14
เอกสารอ้างอิง	16
Output จากโครงการวิจัยที่ได้รับทุนจาก สกว.	17
ภาคผนวก ก. การใช้งานโปรแกรมพร้อม Screen Shots ตัวอย่าง	18
ภาคผนวก ข. โครงสร้างของแฟ้มข้อมูล Input และ Output	21
ภาคผนวก ค. Class และ Main Program สำหรับโปรแกรมบน UNIX	23
ภาคผนวก ง. Class และ Main Program สำหรับโปรแกรมบน PC	36
ภาคผนวก จ. ผลงานในการประชุมวิชาการ	46
ภาคผนวก ฉ. Manuscript	49

Abstract

Project Code: PDF/26/2544

Project Title: A computer simulation search for the quantum confined Stark effect in a semiconductor light source with the quantum well.

Investigator: Dr. Pattara Aiyarak, Prince of Songkla University

E-mail Address: apattara@ratree.psu.ac.th

Project Period: 1 July 2001 – 31 December 2003

A computer modeling was created in order to find a suitable structure for semiconductor light emitters. The model was designed to cope with an ability to solve drift-diffusion and Schrödinger equations self-consistently; therefore, the semiconductor devices with quantum wells can be simulated. The main aim of this work is to find a suitable structure for a semiconductor light source which has the ability to emit the multi-wavelength light using the quantum confined Stark effect. There are two programs on this work. The self-consistent model was run on the Sun Workstation using UNIX system because of its better performance and another model was able to solve only the drift-diffusion problem and created on Visual C++ platform which runs on a general personal computer. However, the object-oriented programming style was used on both programs. However, the later model is easier to use because of the nature of the Visual C++ application. Possible structures of the multi-wavelength light emitters were simulated and a suitable structure was found and discussed. The structure is an AlGaAs system with a single quantum well.

Keywords: quantum confined Stark's effect, multiple wavelength light emitter, simulation, self-consistence

บทคัดย่อ

รหัสโครงการ: PDF/26/2544

โครงการ: การใช้คอมพิวเตอร์ เพื่อศึกษาความเป็นไปได้ของการเกิดปรากฏการณ์ควอนตัมคอนไฟน์เมนต์ในหลุมควอนตัมของแหล่งกำเนิดแสงชนิดสารกึ่งตัวนำ

นักวิจัย: ดร.ภัทร อัยรักษ์ มหาวิทยาลัยสงขลานครินทร์

E-mail Address: apattara@ratree.psu.ac.th

ระยะเวลาโครงการ: 1 กรกฎาคม 2544 – 31 ธันวาคม 2546

โปรแกรมคอมพิวเตอร์เพื่อหาโครงสร้างที่เหมาะสมของแหล่งกำเนิดแสงชนิดสารกึ่งตัวนำถูกเขียนขึ้นเพื่อหาผลเฉลยแบบ self-consistent ระหว่างสมการ drift-diffusion และ Schrödinger โปรแกรมดังกล่าวจึงสามารถหาผลเฉลยของโครงสร้างของสารกึ่งตัวนำที่มีหลุมควอนตัมอยู่ภายในได้ วัตถุประสงค์หลักของงานวิจัยนี้คือการหาโครงสร้างที่เหมาะสมสำหรับแหล่งกำเนิดแสงชนิดสารกึ่งตัวนำที่สามารถเปล่งแสงได้หลายความยาวคลื่นโดยใช้หลักการของปรากฏการณ์ควอนตัมคอนไฟน์เมนต์ โปรแกรมที่ได้มีสองรูปแบบคือโปรแกรมที่สามารถแก้ปัญหาแบบ self-consistent ได้ซึ่งเป็นโปรแกรมที่เขียนบน Sun Workstation ที่ใช้ UNIX เป็นระบบปฏิบัติการเนื่องจากความสามารถที่สูง และเหมาะสมกว่า และอีกโปรแกรมหนึ่งคือโปรแกรมที่แก้ปัญหาเฉพาะสมการ drift-diffusion ซึ่งเขียนโดยใช้ Visual C++ และทำงานบนเครื่องคอมพิวเตอร์ส่วนบุคคลทั่วไปซึ่งใช้งานง่ายสำหรับบุคคลทั่วไป อย่างไรก็ตามทั้งสองโปรแกรมใช้การโปรแกรมแบบเชิงวัตถุ (object oriented programming) เพื่อความง่ายและสะดวกในการแก้ไขภายหลัง ผลเฉลยของโครงสร้างของแหล่งกำเนิดแสงที่น่าจะเป็นไปได้หลายโครงสร้าง ซึ่งทั้งหมดเป็นโครงสร้างของ AlGaAs ที่มีหลุมควอนตัมอยู่ภายในได้ถูกนำมาวิเคราะห์ และโครงสร้างที่เหมาะสมที่สุดได้ถูกเลือกขึ้นมาเพื่อศึกษาต่อไป

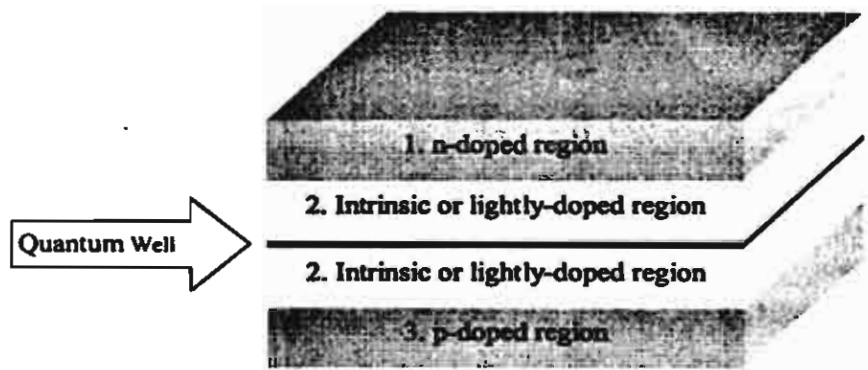
คำหลัก: quantum confined Stark's effect, multiple wavelength light emitter, simulation, self-consistence

บทนำ

การพัฒนาแหล่งกำเนิดแสงที่สามารถเปล่งแสงได้หลายความยาวคลื่นเป็นสิ่งที่จำเป็นในการเพิ่มความเร็วในการสื่อสาร ซึ่งการเพิ่มความเร็วดังกล่าวอาศัยหลักการส่งสัญญาณแสงหลายความยาวคลื่นในเวลาเดียวกัน (Wavelength Division Multiplexing, WDM) การศึกษาความเป็นไปได้ของการเกิดปรากฏการณ์ควอนตัมคอนไฟน์เมนต์ในหลุมควอนตัมของแหล่งกำเนิดแสงชนิดสารกึ่งตัวนำ นำไปสู่การสร้างแหล่งกำเนิดแสงชนิดสารกึ่งตัวนำชนิดใหม่ที่สามารถนำมาประยุกต์ใช้ได้กับการสื่อสารแบบ WDM การทดลองสร้างและการทดสอบสิ่งประดิษฐ์สารกึ่งตัวนำชนิดดังกล่าวจำเป็นอย่างยิ่งที่จะต้องใช้เครื่องมือที่มีราคาสูง การใช้คอมพิวเตอร์เพื่อช่วยในการศึกษาจึงเป็นทางออกหนึ่งในการศึกษา นอกจากนี้โปรแกรมที่ถูกเขียนขึ้นเพื่อทดสอบสามารถนำไปใช้ศึกษาสิ่งประดิษฐ์สารกึ่งตัวนำอื่นๆ ได้

โปรแกรมสามารถแบ่งอย่างคร่าวๆ ได้สองส่วนคือส่วนที่หนึ่งเป็นส่วนที่เรียกว่า Drift-Diffusion Model ซึ่งเป็นแบบจำลองเพื่อใช้ในการศึกษาการเคลื่อนที่ของอิเล็กตรอน และโฮลของ Bulk Material ซึ่ง Drift-Diffusion Model นี้คือการหาผลเฉลยของสมการ Poisson และ Continuity Equations สำหรับส่วนที่สองคือ Quantum Model โดยในส่วนนี้เป็นการหาผลเฉลยของสมการ Schrödinger เพื่อศึกษาการเคลื่อนที่ของอิเล็กตรอน และโฮลในหลุมควอนตัม เมื่อนำโปรแกรมสองส่วนนี้มารวมกันก็จะสามารถศึกษาระดับพลังงาน และการเคลื่อนที่ของของสิ่งประดิษฐ์สารกึ่งตัวนำที่มีหลุมควอนตัมอยู่ภายในได้

โครงสร้างของแหล่งกำเนิดแสงชนิดสารกึ่งตัวนำที่จะนำมาทดสอบนี้ประกอบขึ้นจาก $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ และ GaAs หลายชั้นประกอบกันโดยมีหลุมควอนตัมอยู่ตรงกลาง ความพิเศษของโครงสร้างนี้คือการมีกำแพงศักย์กั้นระหว่างสารกึ่งตัวนำชนิด n และหลุมควอนตัม โดยเมื่อแหล่งกำเนิดแสงถูกไบแอสตาม โวลจากสารกึ่งตัวนำชนิด p จะเคลื่อนที่เข้ามายังหลุมควอนตัมในขณะที่อิเล็กตรอนจากสารกึ่งตัวนำชนิด n ไม่สามารถเคลื่อนที่เข้ามายังหลุมควอนตัมได้เนื่องจากมีกำแพงศักย์กั้นอยู่ โดยในช่วงนี้จะยังไม่มีแสงออกมา จนกระทั่งสารกึ่งตัวนำชนิด n ได้รับพลังงานโดยการจ่ายสนามไฟฟ้าแบบตั้งฉากกับแนวของโครงสร้างเพื่อทำให้อุณหภูมิของอิเล็กตรอนสูงขึ้น จนสามารถเอาชนะกำแพงศักย์ และเคลื่อนที่เข้าไปยังหลุมควอนตัมและเปล่งแสงออกมาได้ ในส่วนของการเปลี่ยนความยาวคลื่นสามารถทำได้โดยการปรับขนาดของการไบแอสตามเพื่อทำให้มีสนามไฟฟ้าตกคร่อมบนหลุมควอนตัมขนาดต่างๆ กัน เป็นผลให้ความยาวคลื่นที่ได้ต่างกัน ซึ่งเกิดจากปรากฏการณ์ควอนตัมคอนไฟน์เมนต์



ภาพที่ 1: โครงสร้างที่นำมาศึกษา

ภาพที่ 1 แสดงโครงสร้างของสิ่งประดิษฐ์สารกึ่งตัวนำที่ต้องการนำมาศึกษา โดยเปลี่ยนค่าความหนา การเจือสาร และชนิดของสารแต่ละชั้น โดยกำหนดให้สารแต่ละชั้นคือ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ เนื่องจากสิ่งประดิษฐ์ที่สร้างมาจากสารกึ่งตัวนำดังกล่าว สามารถสร้างได้ง่าย

วิธีการทดลอง

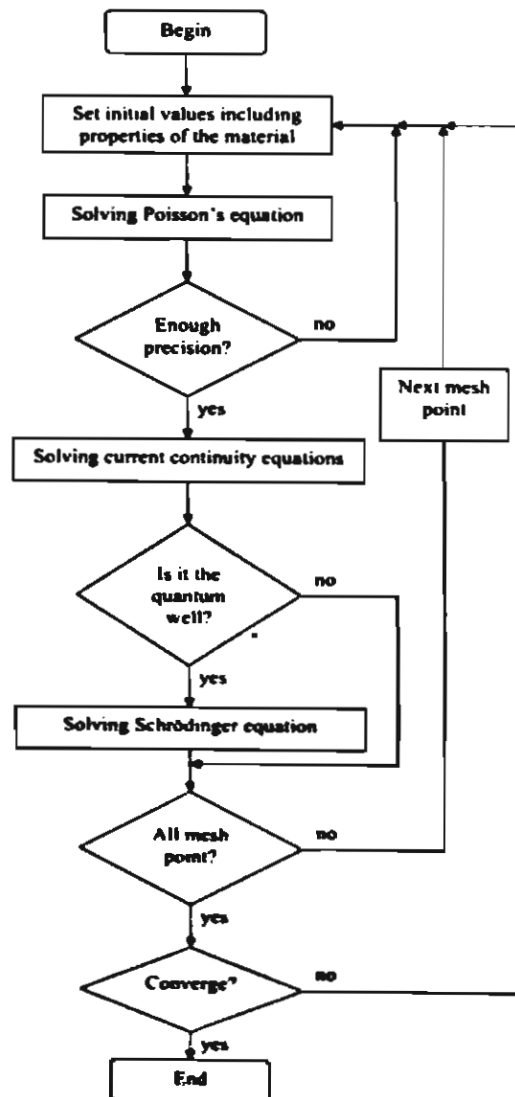
1. ออกแบบโครงสร้างของโปรแกรมโดยสร้าง Flowcharts ของระบบทั้งหมด
2. ออกแบบและสร้างโปรแกรมย่อยต่างๆ ตามรูปแบบของ Flowcharts ที่ได้ออกแบบในข้อ 1.
3. นำโปรแกรมย่อยทั้งหมดมาทดสอบการทำงานเพื่อก่อนที่จะนำโปรแกรมย่อยทั้งหมดมารวมกัน
4. ทดสอบโปรแกรมที่ได้โดยทำแบบจำลองอุปกรณ์อิเล็กทรอนิกส์พื้นฐาน เช่น ไดโอด และ ทรานซิสเตอร์ เพื่อทดสอบการทำงานของโปรแกรม
5. ทำแบบจำลองของอุปกรณ์ที่ต้องการศึกษาความเป็นไปได้ในการเกิด ปรากฏการณ์ควอนตัมคอนไฟน์สตาร์ก

ผลการทดลอง

โปรแกรมได้ถูกเขียนขึ้นด้วย Visual C++ ซึ่งถูกแบ่งออกเป็นสองส่วนคือ Drift-Diffusion Model และ Quantum Model ซึ่ง Drift-Diffusion Model เป็นการแก้สมการ Poisson และ Continuity ส่วน Quantum Model เป็นการแก้สมการ Schrödinger ซึ่งในการหาผลเฉลยที่มีความซับซ้อนไม่สามารถทำได้โดยวิธีการวิเคราะห์ ซึ่งการหาผลเฉลยวิธีหนึ่งคือการนำคอมพิวเตอร์เข้ามาช่วย การแก้สมการจะใช้ระเบียบวิธี Finite Difference ซึ่งในการหาอนุพันธ์ของสมการใดๆ สามารถทำได้ดังสมการ

$$\frac{\partial f}{\partial x} = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{f\left(x + \frac{h}{2}\right) - f\left(x - \frac{h}{2}\right)}{h} \quad (1)$$

Flowchart ของโปรแกรมที่เกิดจากการนำเอาทั้งสอง Models มารวมกันสามารถแสดงได้ย่อกว่าๆ ดังนี้



ภาพที่ 2 แสดง Flowchart ของโปรแกรม

สมการปัวซอง (Poisson's Equation)

สมการปัวซอง (Poisson's Equation) ใช้ในการแก้ปัญหาของสิ่งประดิษฐ์สารกึ่งตัวนำซึ่งเป็นสมการแสดงความสัมพันธ์ระหว่างประจุและสนามไฟฟ้าจากสมการที่ (2) แสดงให้เห็นถึงความสัมพันธ์ระหว่างสนามไฟฟ้า (Electric Field) และความหนาแน่นของประจุไฟฟ้า (Electric Charge Density) สามารถเขียนเป็นสมการได้ว่า^[1]

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{D} = \rho(x, y, z) \quad (2)$$

สมการที่ (2) เรียกว่า สมการปัวซองในสามมิติ โดยที่ $\vec{D}$ คือ เวกเตอร์การกระจัด และ $\rho(x, y, z)$ คือ ผลรวมของความหนาแน่นของประจุไฟฟ้า อย่างไรก็ตามแต่สำหรับในที่นี้จะแสดงตัวอย่างวิธีการหาผลเฉลยเฉพาะสมการปัวซองในหนึ่งมิติ ความสัมพันธ์ระหว่าง $\vec{D}$ และสนามไฟฟ้า $\vec{E}$ สามารถเขียนได้ตามสมการที่ (3)

$$\vec{D} = \epsilon \vec{E} \quad (3)$$

ค่าของ ϵ ตามสมการ (3) คือ ค่าคงที่ไดอิเล็กตริก (Permittivity) ของสาร ในกรณีของสารกึ่งตัวนำชนิดนี้ ค่าความหนาแน่นของประจุไฟฟ้าเขียนเป็นสมการได้ว่า

$$\rho = q(p - n + N_D - N_A) \quad (4)$$

โดยที่ q คือขนาดของประจุไฟฟ้า p และ n คือค่าความหนาแน่นของประจุโฮลและอิเล็กตรอน ค่า N_D และ N_A คือผลรวมของอะตอมผู้ให้ (Donor) และอะตอมผู้รับ (Acceptor) ต่อตารางเซนติเมตรแล้วแทนสมการ (3) และสมการ (4) ลงในสมการ (2) สามารถเขียนใหม่ได้ว่า

$$\vec{\nabla} \cdot \epsilon \vec{E} = q(p - n + N_D - N_A) \quad (5)$$

ซึ่ง สนามไฟฟ้า $\vec{E}$ สามารถเขียนในรูป ศักย์ไฟฟ้า ϕ เขียนเป็นสมการได้ว่า

$$\vec{E} = -\vec{\nabla} \phi \quad (6)$$

แทนสมการ (6) ลงใน สมการ (5) จะได้ความสัมพันธ์ว่า

$$\vec{\nabla} \cdot (\epsilon \vec{\nabla} \phi) = \epsilon \nabla^2 \phi + \vec{\nabla} \epsilon \cdot \vec{\nabla} \phi = q(n - p + N_A - N_D) \quad (7)$$

สมการความต่อเนื่อง (Continuity Equations)

สมการความต่อเนื่องเป็นสมการที่สามารถแสดงลักษณะการเปลี่ยนแปลงของจำนวนพาหะนำประจุในบริเวณใดบริเวณหนึ่งของก้อนสารกึ่งตัวนำได้และสามารถเขียนสมการแสดงความสัมพันธ์ได้ว่า

$$\vec{\nabla} \times \vec{H} = \frac{\partial \vec{D}}{\partial t} + \vec{J}_{cond} \quad (8)$$

โดยที่ $\vec{H}$ คือ สนามแม่เหล็ก และ $\vec{J}_{cond}$ คือความหนาแน่นของกระแสตัวนำ จะนำตัวดำเนินการ $\vec{\nabla} \cdot$ ลงในสมการ (8) และแทนสมการ (2) ลงใน สมการ (8) เช่นกัน ซึ่งสามารถเขียนสมการแสดงความสัมพันธ์ได้ว่า

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{\nabla} \times \vec{H} = \frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \vec{J}_{cond} = 0 \quad (9)$$

ค่าความหนาแน่นของกระแสตัวนำสามารถเขียนให้อยู่ในรูปองค์ประกอบของ $\vec{J}_p$ ซึ่งก็คือความหนาแน่นของกระแสตัวนำในโฮล และในรูปองค์ประกอบของ $\vec{J}_n$ ซึ่งก็คือความหนาแน่นของกระแสตัวนำในอิเล็กตรอน ประจุทั้งหมดในสารกึ่งตัวนำยกเว้นอิเล็กตรอนและโฮลอิสระ ถูกสมมุติให้ ไม่มีการเปลี่ยนแปลงตามเวลา ดังนั้น สมการ (9) สามารถเขียนใหม่ได้ว่า

$$\vec{\nabla} \cdot (\vec{J}_p + \vec{J}_n) + \frac{\partial}{\partial t} (p - n) = 0 \quad (10)$$

สมการที่ (10) สามารถเขียนสมการความต่อเนื่องได้เป็น 2 สมการ โดยที่ กำหนดให้ปริมาณ R คือค่าคงที่ค่าหนึ่ง ดังนั้นสมการที่ (10) สามารถเขียนให้อยู่ในรูปของ R ได้ว่า

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{J}_n - q \frac{\partial n}{\partial t} = qR \quad (11)$$

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{J}_p - q \frac{\partial p}{\partial t} = -qR \quad (12)$$

ซึ่งปริมาณ R คือฟังก์ชันที่เป็นผลรวมของปริมาณสุทธิที่เกิดจากการเกิดขึ้นใหม่ (Generation) และการรวมตัว (Recombination) ระหว่างอิเล็กตรอนและโฮล กำหนดให้ค่า R มีค่าเป็นบวกเมื่อมีการเกิดขึ้นใหม่ (Generation) ระหว่างอิเล็กตรอนและโฮล และค่า R มีค่าเป็นลบ ก็ต่อเมื่อการเกิดการรวมตัว (Recombination) ระหว่างอิเล็กตรอนและโฮล

สมการการไหลของกระแส (Current Density Equations)

สมการความหนาแน่นของกระแสของอิเล็กตรอนและโฮล ประกอบด้วยค่าความหนาแน่นของกระแสอันเนื่องมาจากสนามไฟฟ้า กล่าวคือ การที่เราให้สนามไฟฟ้า E และสนามไฟฟ้านี้จะออกแรงกระทำบนอิเล็กตรอน และโฮลทำให้เกิดการเคลื่อนที่ของพาหะประจุในสนามไฟฟ้า และความหนาแน่นของกระแสอันเนื่องมาจากเกิดการแพร่เนื่องจากความแตกต่างกันของความหนาแน่นประจุ ซึ่งสามารถอธิบายได้โดยใช้สมการที่ (13)

$$\vec{J}_n = -q\mu_n \vec{\nabla} \Psi_n + qD_n \vec{\nabla} n \quad (13)$$

$$\vec{J}_p = -q\mu_p \vec{\nabla} \Psi_p - qD_p \vec{\nabla} p \quad (14)$$

โดยที่ μ_n และ μ_p คือสภาพความคล่องตัว (Mobility) ของอิเล็กตรอนและโฮล D_n และ D_p คือค่าสัมประสิทธิ์ของการแพร่ (Diffusion Coefficients) ของอิเล็กตรอนและโฮล

สำหรับค่า Ψ_n และ Ψ_p คือศักย์ไฟฟ้า (Electrostatic Potentials) ของอิเล็กตรอนและโฮล ซึ่งเขียนเป็นสมการได้ว่า^[2]

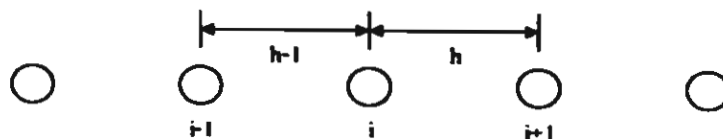
$$\Psi_n = \phi + \frac{\chi - \chi_s}{q} + \frac{k_s T}{q} \ln \left(\frac{N_c}{N_v} \right) \quad (15)$$

$$\Psi_p = \phi + \frac{\chi - \chi_s}{q} + \left(\frac{E_g - E_v}{q} \right) + \frac{k_s T}{q} \ln \left(\frac{N_v}{N_c} \right) \quad (16)$$

โดยที่ χ คือค่าสภาพอ่อนไหวทางไฟฟ้าของอิเล็กตรอน (Electron Affinity), E_g คือช่องว่างของแถบพลังงาน (Energy Bandgap), k_s คือคงที่ของโบสมานด์ N_c และ N_v คือ ความหนาแน่นสถานะยังผล (Effective Density of States) ในแถบการนำและแถบวาเลนซ์ และตัวห้อย r คือค่าดัชนีที่แสดงถึงตัวแปรที่ใช้อ้างอิงของสาร (Reference Material)^[3]

ระเบียบวิธี Discretization

สมการทางฟิสิกส์ปริมาณส่วนใหญ่จะเป็นฟังก์ชันที่มีความต่อเนื่องการใช้สมการทางคณิตศาสตร์สำหรับหาค่าระหว่างจุดต่อจุดมีความจำเป็นเป็นอย่างมากในการออกแบบสิ่งประดิษฐ์สารกึ่งตัวนำซึ่งจะส่งผลให้หาค่าตัวแปรต่างๆ ได้ง่าย และทุกๆ จุดบนสิ่งประดิษฐ์มีความต่อเนื่องกันในที่นี้แสดงแค่หนึ่งมิติ คือเฉพาะแกน X เท่านั้น ดังภาพที่ 3 สามารถช่วยให้การคำนวณค่าตัวแปรต่างๆ มีความแม่นยำมากยิ่งขึ้นอันได้แก่ ค่าความหนาแน่นของโฮลและอิเล็กตรอน ศักย์ไฟฟ้า เป็นต้น



ภาพที่ 3: แสดงการกำหนดจุดในสิ่งประดิษฐ์สารกึ่งตัวนำใน 1 มิติ

สำหรับ Quantum Model การหาระดับพลังงานของหลุมควอนตัมชนิดสี่เหลี่ยมสามารถหาได้จากการแก้สมการ Schrödinger ซึ่งระดับพลังงานสามารถหาได้จากสมการ^[4]

$$E_n = -\Delta E_c (1 - \alpha_n^2) \quad (17)$$

โดยที่ α_n หาได้จากสมการ

$$\gamma \alpha_n = (n-1)\pi + 2 \cos^{-1} \alpha_n \quad (18)$$

ซึ่ง

$$\gamma = \sqrt{\frac{2m\Delta E_c L_z^2}{\hbar^2}} \quad (19)$$

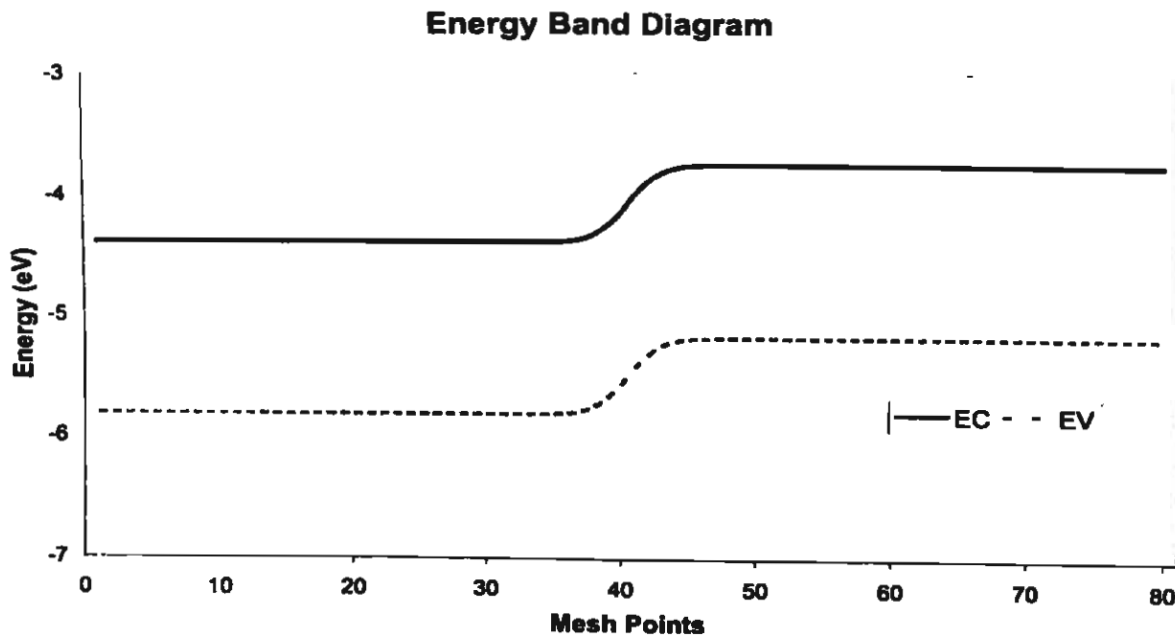
และ Electron Concentration ใน 2 มิติ (2DEG) หาได้จากสมการ

$$n_{2DEG} = \sum_n \frac{mk_B T}{\pi \hbar^2} \ln \left[1 + e^{\frac{E_{FV} - E_n}{k_B T}} \right] |\Psi_n(z)|^2 \quad (20)$$

และในทำนองเดียวกัน

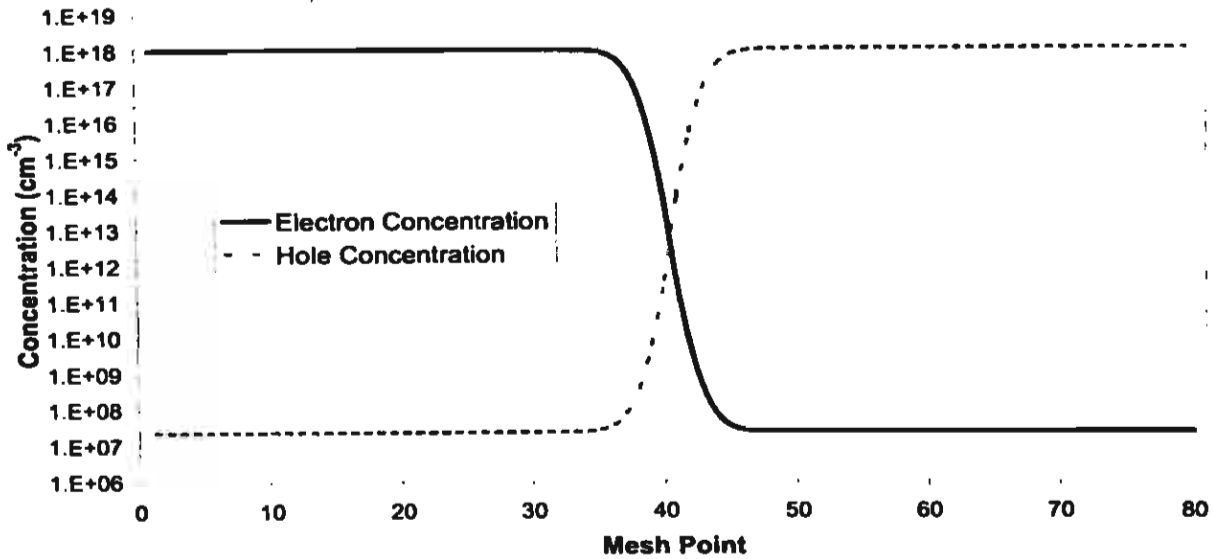
$$p_{2DHG} = \sum_n \frac{mk_B T}{\pi \hbar^2} \ln \left[1 + e^{\frac{E_n - E_{FP}}{k_B T}} \right] |\Psi_n(z)|^2 \quad (21)$$

การนำ Drift-Diffusion Model มาทดสอบการทำงานโดยการนำ Diode ซึ่งเป็นอุปกรณ์สารกึ่งตัวนำพื้นฐานมาทดสอบ โดย Diode ที่นำมาทดสอบคือ GaAs p-n junction และมี Doping Concentration เท่ากับ 10^{18} cm^{-3} ทั้งด้าน p และ n ผลเฉลยที่ได้ดังแสดงในภาพที่ 3-4 คือ Energy Band Diagram และ Doping Concentrations



ภาพที่ 3: แสดงค่า E_c และ E_v ซึ่งเป็นผลเฉลยจากไดโอดชนิด p-n Junction

Carrier Concentration



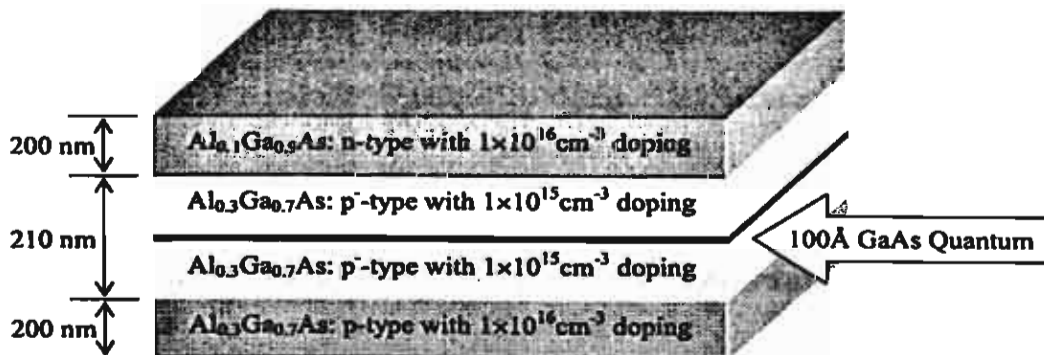
ภาพที่ 4: แสดงค่าความหนาแน่นของอิเล็กตรอนและโฮล
ซึ่งเป็นผลเฉลยจากไดโอดชนิด p-n Junction

โดยที่ในกรณีนี้ 1 Mesh Point มีค่าเท่ากับ 5×10^{-7} cm และจากการคำนวณหา Depletion Region โดยสมการ

$$w_0 = x_n + x_p = \left[\frac{2\epsilon}{q} \left(\frac{N_A + N_D}{N_A N_D} \right) V_b \right]^{1/2} \quad (22)$$

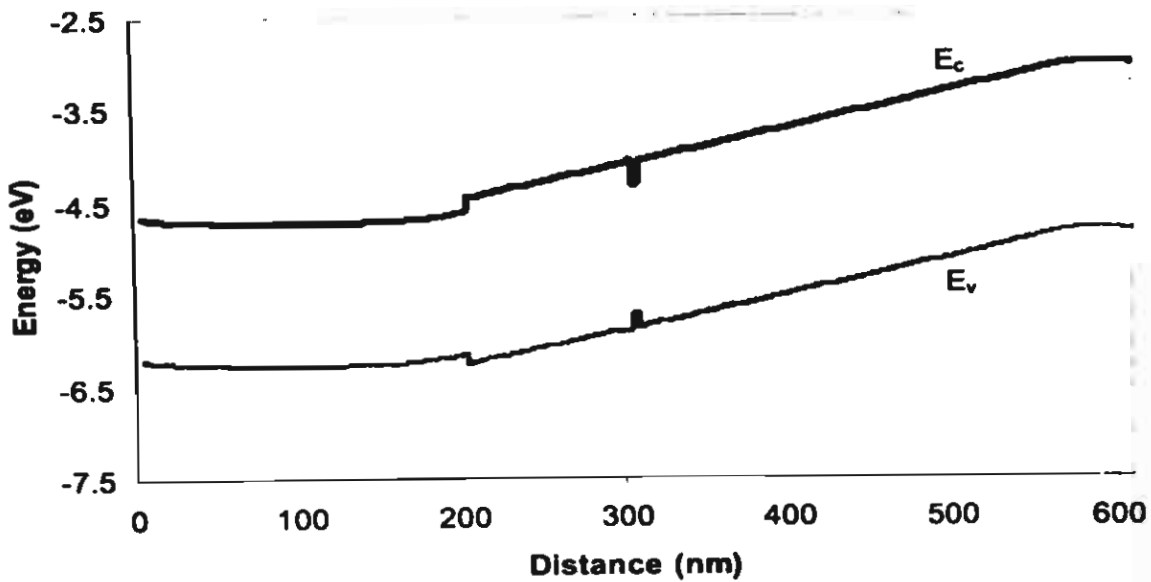
จะได้ว่าค่า Depletion Region มีค่าเท่ากับ 4.30×10^{-5} cm และจากการคำนวณจาก Energy Band Diagram พบว่าค่า Depletion Region มีค่าเท่ากับ $4.0 \pm 0.5 \times 10^{-5}$ cm ซึ่งค่าที่ได้ตรงกับที่คำนวณได้จากสมการ

ส่วนตัวอย่างการจำลองแบบของสิ่งประดิษฐ์สารกึ่งตัวนำซึ่งมีหลุมควอนตัมด้วยจะทดสอบโดยโครงสร้างดังภาพที่ 5

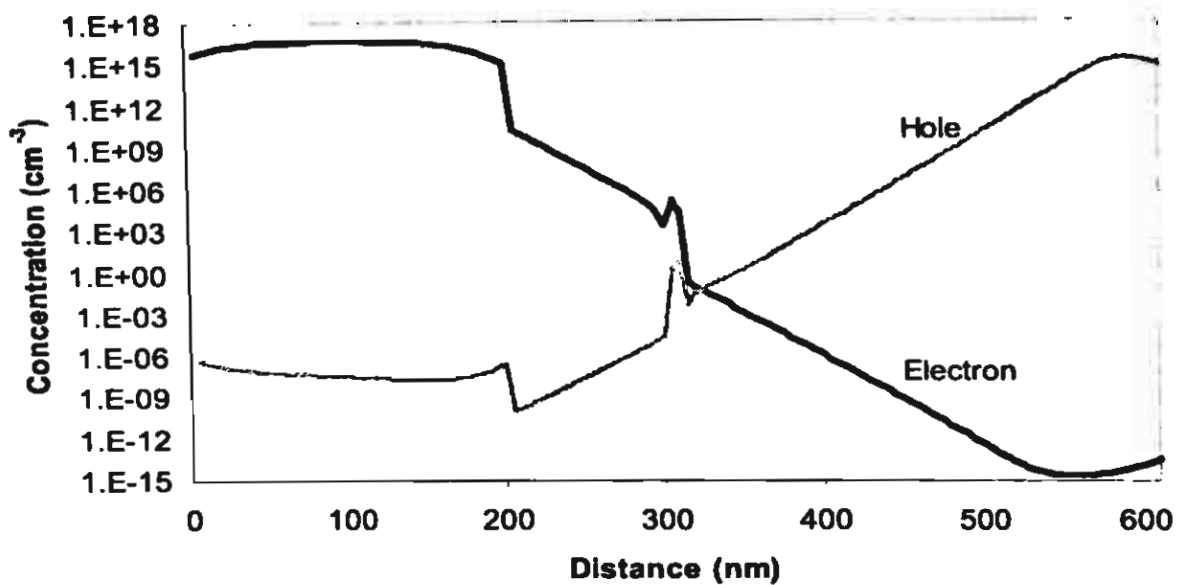


ภาพที่ 5 แสดงโครงสร้างของสิ่งประดิษฐ์สารกึ่งตัวนำซึ่งมีหลุมควอนตัม

ผลเฉลยในกรณี Equilibrium แสดงในภาพที่ 5-6 คือ Energy Band Diagram และ Doping Concentrations ของสิ่งประดิษฐ์สารกึ่งตัวนำซึ่งมีหลุมควอนตัมอยู่ภายใน

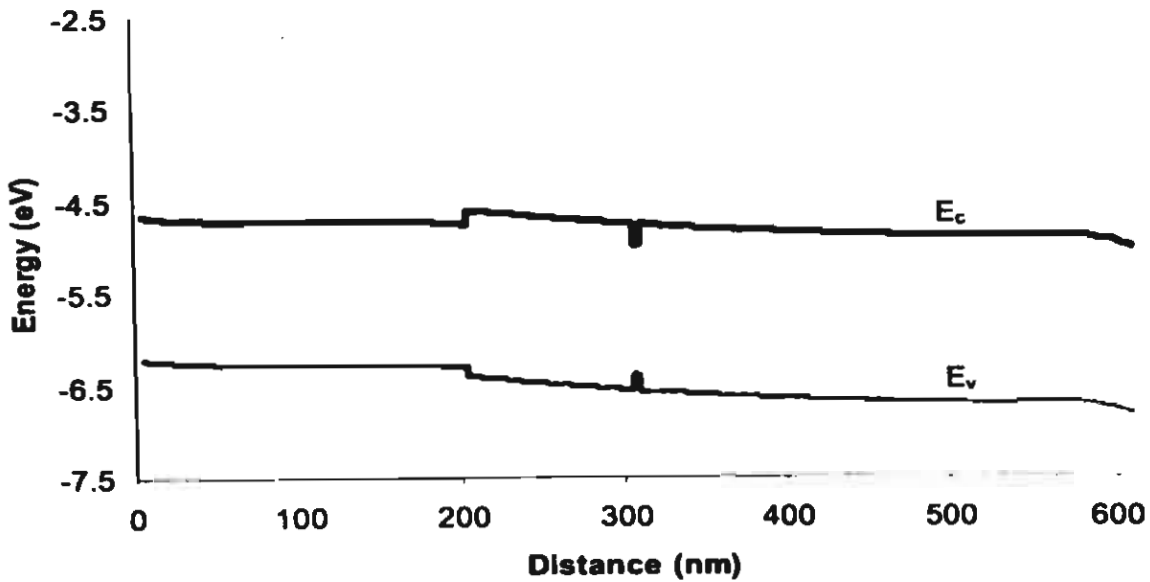


ภาพที่ 5: แสดงค่า E_c และ E_v ซึ่งเป็นผลเฉลยในกรณี Equilibrium จากสิ่งประดิษฐ์สารกึ่งตัวนำซึ่งมีหลุมควอนตัมอยู่ภายใน

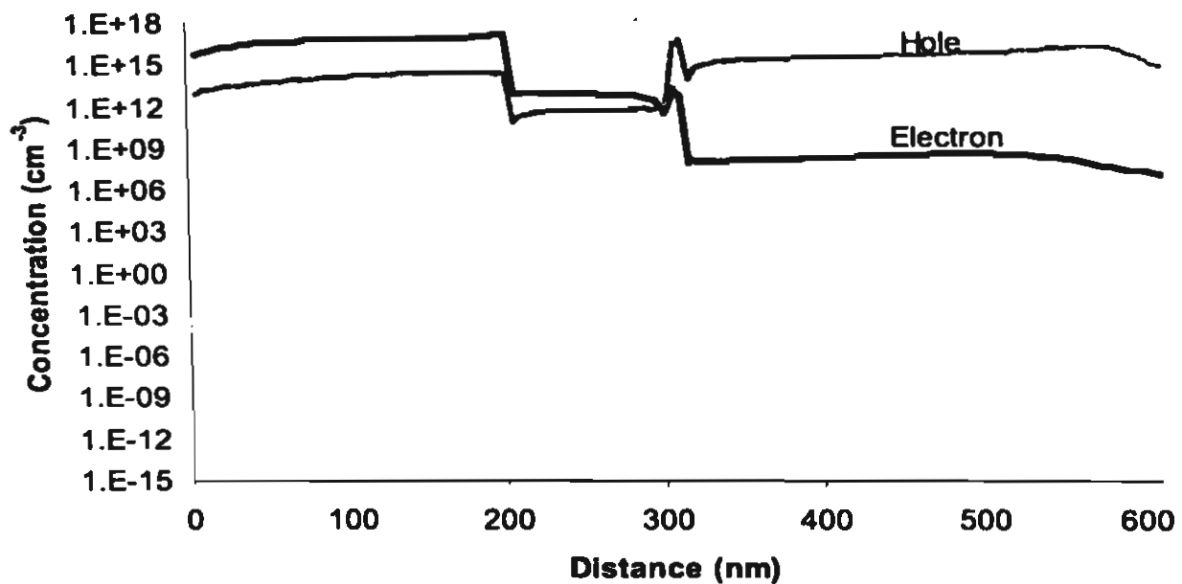


ภาพที่ 6: แสดงค่าความหนาแน่นของอิเล็กตรอนและโฮล ซึ่งเป็นผลเฉลยในกรณี Equilibrium จากสิ่งประดิษฐ์สารกึ่งตัวนำซึ่งมีหลุมควอนตัมอยู่ภายใน

และผลเฉลยในกรณีที่มีการไบแอสตรงขนาด 2 V แสดงในภาพที่ 7-8



ภาพที่ 7: แสดงค่า E_c และ E_v ซึ่งเป็นผลเฉลยในกรณี 2 Volt. Forward Bias จากสิ่งประดิษฐ์สารกึ่งตัวนำซึ่งมีหลุมควอนตัมอยู่ภายใน



ภาพที่ 8: แสดงค่าความหนาแน่นของอิเล็กตรอนและโฮล ซึ่งเป็นผลเฉลยในกรณี 2 Volt. Forward Bias จากสิ่งประดิษฐ์สารกึ่งตัวนำซึ่งมีหลุมควอนตัมอยู่ภายใน

บทวิจารณ์

สรุปผลการทดลอง

ผลการทดสอบโปรแกรมดังที่ได้แสดงไปในหัวข้อผลการทดลอง แสดงให้เห็นถึงความสามารถในการหาผลเฉลยของโปรแกรม โดยโปรแกรมสามารถทำงานได้ดี และมีเสถียรภาพสูงเมื่อทำการหาผลเฉลยในส่วนของสิ่งประดิษฐ์สารกึ่งตัวนำที่ไม่มีหลุมควอนตัม หรือไม่มีความจำเป็นในการใช้สมการ Schrödinger ในการหาผลเฉลย อย่างไรก็ตาม ความเร็วในการหาผลเฉลยยังไม่สูง หากโปรแกรมทำงานบนเครื่องคอมพิวเตอร์ที่มีความเร็วหรือมีความจุของหน่วยความจำต่ำ นอกจากนี้หากต้องการหาผลเฉลยในกรณี Steady-State ก็มีการไบแอสด้วยความต่างศักย์ค่าต่างๆ จะทำให้เวลาในการหาผลเฉลยสูงขึ้น อย่างไรก็ตามหากต้องการหาผลเฉลยในกรณีที่โครงสร้างไม่ซับซ้อนก็สามารถหาได้ในระยะเวลาอันรวดเร็ว

การแก้ปัญหาในเรื่องเวลาในการหาผลเฉลย สามารถทำได้โดยเปลี่ยน ชนิดของเครื่องคอมพิวเตอร์ โดยเปลี่ยนมาเป็นเครื่องคอมพิวเตอร์ชนิด Workstation โดยในที่นี้จะใช้เครื่อง Sun Workstation ซึ่งทำงานบนระบบปฏิบัติการ UNIX ซึ่งทำให้ความเร็วในการหาผลเฉลยเร็วขึ้น อย่างไรก็ตามหากโครงสร้างมีความซับซ้อนสูง ระยะเวลาในการหาผลเฉลยก็นานขึ้น แต่เนื่องจากธรรมชาติของเครื่อง Workstation ซึ่งทำงานตลอดเวลา ทำให้สามารถทิ้งโปรแกรมให้หาผลเฉลยได้เป็นเวลานาน

สำหรับการหาผลเฉลยในกรณีที่ต้องใช้การแก้สมการ Schrödinger เข้าร่วมกับสมการ Drift-Diffusion โปรแกรมสามารถหาผลเฉลยได้เกือบทุกกรณี อย่างไรก็ตามเนื่องจากปัญหาการลู่เข้า (Convergence) ของผลเฉลยบางกรณี โดยเฉพาะอย่างยิ่งในกรณี Steady-State โปรแกรมใช้เวลาในการหาผลเฉลยนานมาก หรือในบางครั้งก็ไม่สามารถหาผลเฉลยได้เลย เนื่องจากผลเฉลยไม่ลู่เข้าหาคำตอบ

อย่างไรก็ตามโปรแกรมสามารถใช้งานได้ดีในระดับหนึ่ง โดยเฉพาะหากไม่ต้องการหาผลเฉลยจากโครงสร้างที่ซับซ้อนมากและไม่มีจำเป็นต้องใช้สมการ Schrödinger ในการหาผลเฉลย โปรแกรมซึ่งทำงานบนเครื่องคอมพิวเตอร์ส่วนบุคคล จะใช้งานได้ง่ายและเหมาะสำหรับผู้ที่ต้องการหาผลเฉลยที่ไม่ซับซ้อนมากนัก และไม่มีความรู้ในการแก้ไขโปรแกรม เนื่องจากตัวโปรแกรมเป็น Graphical User Interface (GUI) ซึ่งใช้งานได้ง่าย

ข้อเสนอแนะ

เนื่องจากโปรแกรมไม่สามารถแก้ปัญหา Self-Consistence ได้ทุกกรณี และความเร็วในการหาผลเฉลยที่ซับซ้อนยังไม่สูงมาก ทำให้การแก้ปัญหาดังกล่าวเป็นสิ่งที่ควรปรับปรุง อย่างไรก็ตามเนื่องจากธรรมชาติของปัญหา ทำให้บางปัญหาไม่สามารถหาผลเฉลยได้

ในส่วนของโปรแกรมที่เป็น GUI ผู้ใช้ยังจำเป็นต้องเขียนแฟ้มโครงสร้างเองซึ่งอาจทำให้มีความผิดพลาดได้ง่าย หากสามารถพัฒนาโปรแกรมในส่วนของการสร้างแฟ้มโครงสร้างให้ทำงานได้ง่ายขึ้น จะเป็นประโยชน์สำหรับผู้ใช้นอกจากส่วนของแฟ้มโครงสร้างแล้ว ในส่วนของผลเฉลย

ณ ปัจจุบันยังจำเป็นต้องใช้โปรแกรมประเภท Spreadsheet เข้าช่วยในการสร้างกราฟ ซึ่งหากโปรแกรมที่เขียนขึ้นสามารถสร้างกราฟได้โดยตรง จะทำให้ง่ายในการใช้งานมากขึ้น หากโปรแกรมมีความสมบูรณ์เพียงพอ ผู้วิจัยคาดว่าจะสามารถเผยแพร่ได้ทั้งในระดับประเทศ และนานาชาติ เพื่อใช้ทั้งในการเรียนการสอน และงานวิจัยทางสิ่งประดิษฐ์สารกึ่งตัวนำ

นอกจากการพัฒนาในส่วนที่กล่าวถึงแล้วการทำให้โปรแกรมสามารถแก้ปัญหาโครงสร้างเป็นโครงสร้างหลายมิติได้ จะทำให้สามารถแก้ปัญหาโครงสร้างที่ซับซ้อนขึ้นได้ รวมถึงสามารถหาผลเฉลยของสิ่งประดิษฐ์สารกึ่งตัวนำที่มีส่วนประกอบของจุด หรือเส้นควอนตัม (Quantum Dot or Quantum Line) ได้

เอกสารอ้างอิง

- [1] S. M. Sze, *Physics of Semiconductor Devices*, 2nd edition, John Wiley & Sons, Inc., USA, 1981.
- [2] H. Chan and T. Shieh, "A Three-Dimensional Semiconductor Device Simulator for GaAs/AlGaAs Heterojunction Bipolar Transistor Analysis", *IEEE Transactions on Electron Devices*, **38** (11), pp. 2427-2432, 1991.
- [3] K Yang, J. R. East, and G. I. Haddad, "Numerical Modeling of Abrupt Heterojunctions using Thermionic-field Emission Boundary Condition", *Solid-State Electronics*, **36** (3), pp. 321-330, 1993.
- [4] A. M. Cruz Serra and H. Abreu Santos, "A one-dimensional, self-consistent numerical solution of Schrodinger and Poisson equations", *Journal of Applied Physics*, **70**, pp. 2734-2738, 1991.

Output จากโครงการวิจัยที่ได้รับทุนจาก สกว.

- ผลงานตีพิมพ์ในวารสารวิชาการนานาชาติ

P. Aiyarak, A. J. Vickers and P. Boonlua, "A Computational Search for the Optimized Structure of a Novel Light Emitter", Journal of Physics D: Applied Physics. (อยู่ในช่วงปรับปรุง Manuscript กับผู้เขียนในต่างประเทศเพื่อเตรียมส่ง)

- การนำผลงานไปใช้ประโยชน์

เชิงพาณิชย์

โครงการนี้มีศักยภาพมากในเชิงพาณิชย์หากโปรแกรมได้รับการปรับปรุงให้ดีขึ้นในการใช้งานและสามารถรองรับชนิดของสารกึ่งตัวนำได้มากขึ้น รวมทั้งสามารถเพิ่มเติม (Upgrade) ข้อมูลชนิดของสารกึ่งตัวนำ นอกจากนี้หากสามารถแก้ปัญหาการลู่เข้า (convergence) ของผลเฉลยในทุกกรณีในการแก้สมการแบบ self-consistence ของสมการ drift-diffusion และ Schrödinger ซึ่งหากได้รับการปรับปรุงดังกล่าวแล้วจะทำให้สามารถทำนายได้ในอุตสาหกรรมที่เกี่ยวข้องกับการออกแบบสิ่งประดิษฐ์สารกึ่งตัวนำ

เชิงสาธารณะ

ในภาพรวมสามารถนำโปรแกรมที่ได้ไปออกแบบสิ่งประดิษฐ์สารกึ่งตัวนำใหม่ๆ ซึ่งทำให้เกิดความร่วมมือกันเป็นเครือข่ายได้ ทั้งในองค์กรเอกชน และองค์กรของรัฐ

เชิงวิชาการ

ทำให้การเรียนการสอนในเรื่องสารกึ่งตัวนำ และสิ่งประดิษฐ์สารกึ่งตัวนำทำได้ง่ายขึ้น โดยนักศึกษาสามารถใช้โปรแกรมเพื่อศึกษาชนิดของสิ่งประดิษฐ์สารกึ่งตัวนำต่างๆ ได้ และสามารถนำมาใช้เป็นเครื่องมือในการวิจัยเพื่อออกแบบสิ่งประดิษฐ์สารกึ่งตัวนำต่างๆ ได้

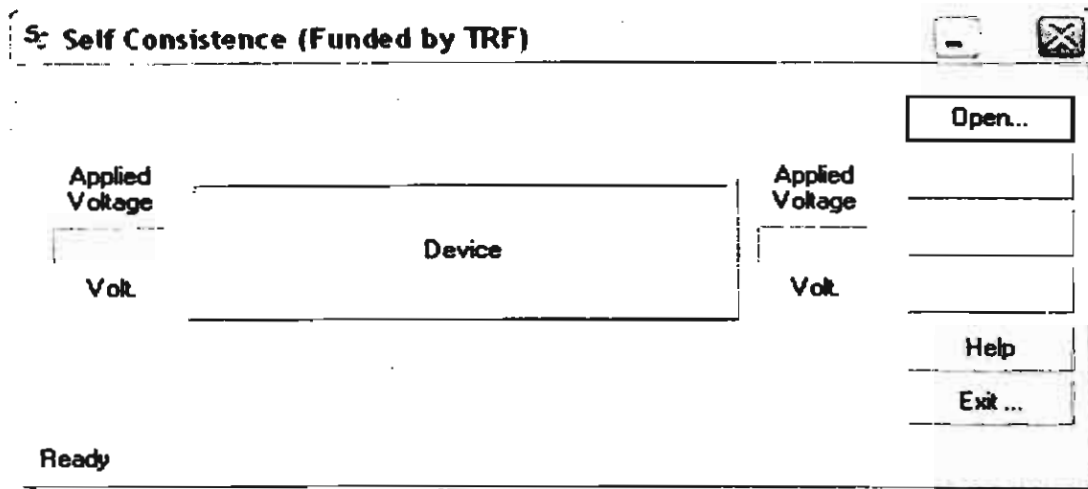
- อื่นๆ

งานประชุมวิชาการ วิทยาศาสตร์และเทคโนโลยีแห่งประเทศไทย (วทท.) ครั้งที่ 28 พ.ศ. 2545 ณ กรุงเทพมหานคร

ภาคผนวก ก.

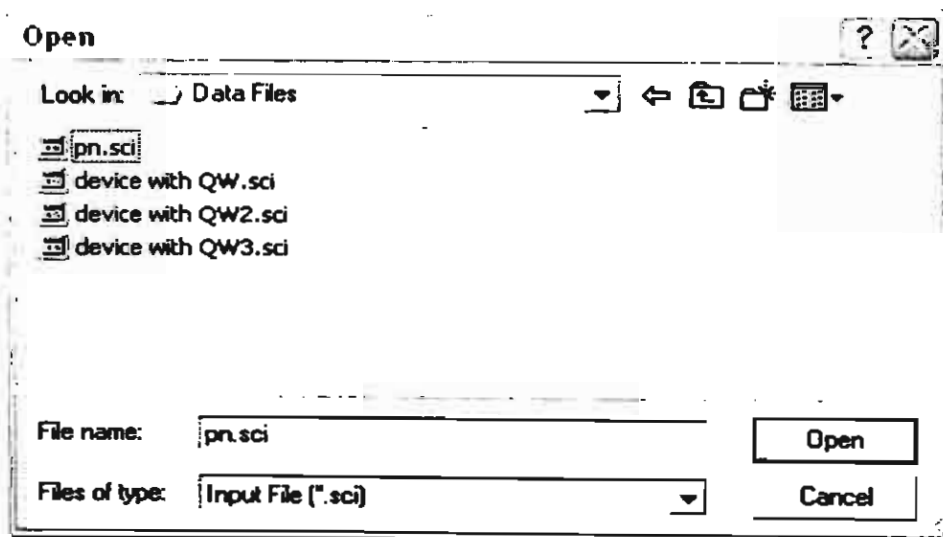
การใช้งานโปรแกรมพร้อม Screen Shots ตัวอย่าง

ตัวอย่างของ Screen Shots ซึ่งเป็นส่วนของการจำลองแบบซึ่งทำงานบนเครื่องคอมพิวเตอร์ส่วนบุคคลทั่วไปซึ่งโปรแกรมจะปรากฏขึ้นมาดังภาพที่ ก(1) ผู้ใช้จะต้องทำการเรียกแฟ้มที่เก็บโครงสร้างของสิ่งประดิษฐ์สารกึ่งตัวนำซึ่งมีรูปแบบดังภาคผนวก ข.



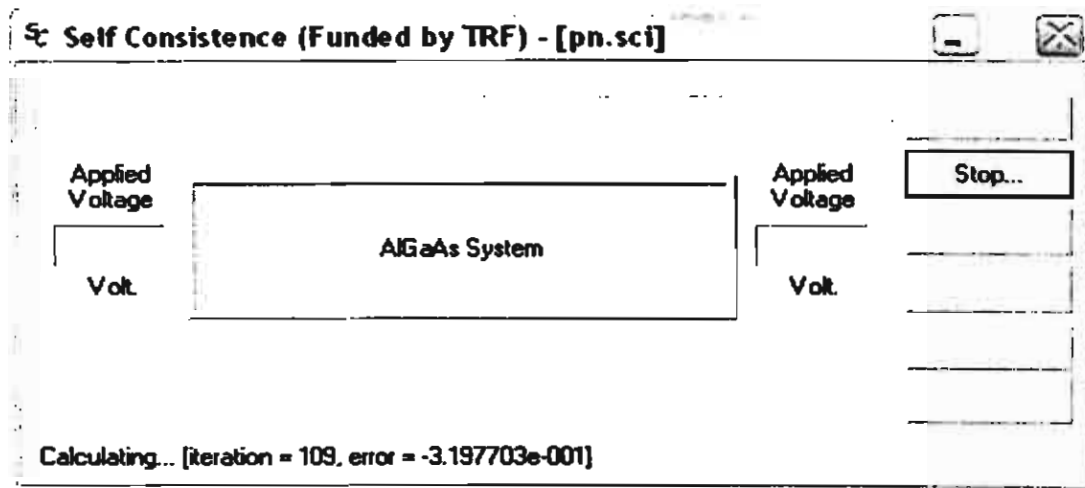
ภาพ ก(1): ภาพแสดง Screen Shot ของโปรแกรม

หลังจากกดปุ่ม Open... แล้วจะปรากฏ dialog box สำหรับเลือกแฟ้มเก็บโครงสร้างของสิ่งประดิษฐ์สารกึ่งตัวนำ ดังในภาพที่ ก(2)



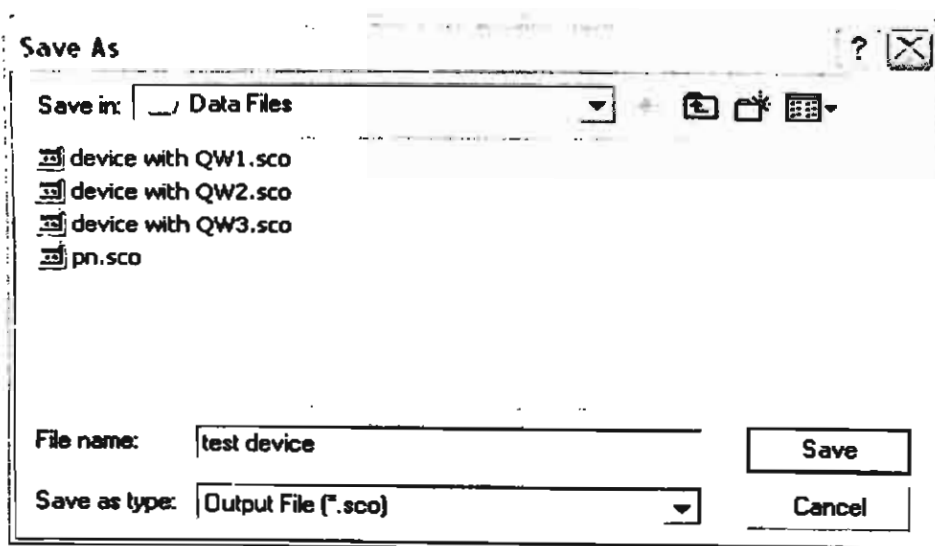
ภาพ ก(2): ภาพแสดง Screen Shot ของ Open Dialog

หลังจากเลือกเพิ่มเก็บโครงสร้างของสิ่งประดิษฐ์สารกึ่งตัวนำแล้ว ให้กดปุ่ม Calculate ซึ่งจะทำให้ตัวโปรแกรมเริ่มการทำงานดังจะเห็นได้จาก Status Bar ด้านล่างแสดงจำนวน Iteration หรือจำนวนรวมในการคำนวณ และค่า Error ซึ่งเป็นค่าความแตกต่างระหว่างผลเฉลยใน Iteration ก่อนหน้า ดังแสดงในภาพ ก(3) หากค่า Error ที่ได้มีค่าต่ำแสดงให้เห็นว่าผลเฉลยที่ได้เริ่มมีค่าคงที่ ซึ่งค่า Error ที่รับได้ควรมีค่าต่ำกว่า 1×10^{-5} และหากค่าของผลเฉลยถึงจุดที่ไม่เปลี่ยนแปลงมากผู้ใช้สามารถกดปุ่ม Stop... เพื่อหยุดการทำงาน



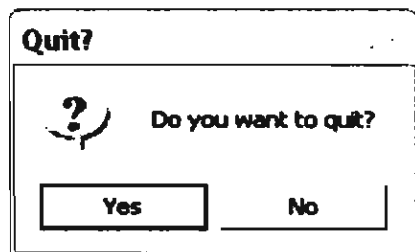
ภาพ ก(3): ภาพแสดง Screen Shot ของ Open Dialog

เมื่อโปรแกรมหยุดการทำงานหลังผู้ใช้กดปุ่ม Stop... ผู้ใช้สามารถบันทึกผลเฉลยที่ได้ลงในแฟ้มโดยการกดปุ่ม Save... ซึ่งโปรแกรมจะแสดง Dialog Save เพื่อผู้ใช้สามารถบันทึกผลเฉลยที่ต้องการลงในแฟ้มในชื่อที่ผู้ต้องการดังภาพ ก(4)



ภาพ ก(4): ภาพแสดง Screen Shot ของ Save Dialog

หากผู้ใช้ต้องการจบการทำงานสามารถทำได้โดยการกดปุ่ม Exit... ซึ่งจะได้ Dialog ยืนยันการจบการทำงานของโปรแกรม ดังภาพ ก(5) หากต้องการจบการทำงานให้กดปุ่ม Yes หรือหากต้องการกลับไปทำงานต่อให้กด No โปรแกรมจะกลับไปยัง Dialog หลักซึ่งผู้ใช้สามารถทำการคำนวณหาผลเฉลยต่อไปได้



ภาพ ก(5): ภาพแสดง Screen Shot ของการยืนยันการจบการทำงาน

ภาคผนวก ข.

โครงสร้างของแฟ้มข้อมูล Input และ Output

Input File

แฟ้มที่เป็น Input File จะเป็นแฟ้มที่มีนามสกุล sci ซึ่งรูปแบบของแฟ้มประกอบด้วยสองบรรทัดแรกคือ

```
#Do not change this line or the program won't work.
```

```
#position x_right(cm) x_left(cm) temperature(K) doping(cm-3) QW(y/n) material composite1 composite2
```

หลังจากนั้นเป็นโครงสร้างของสิ่งประดิษฐ์สารกึ่งตัวนำซึ่งประกอบด้วยข้อมูลตามลำดับดังนี้

- ตำแหน่งของสาร ซึ่งแบ่งเป็น Mesh Point
- ระยะห่างระหว่าง Mesh Point เมื่อเทียบกับ Mesh Point ถัดไป (หน่วย cm)
- ระยะห่างระหว่าง Mesh Point เมื่อเทียบกับ Mesh Point ก่อนหน้าไป (หน่วย cm)
- อุณหภูมิ (หน่วย K)
- Doping (หน่วย cm^{-3}) ซึ่งหากเป็นชนิด n จะมีค่าเป็นบวก และลบหากเป็นชนิด p
- QW (หากจุดดังกล่าวเป็น Quantum Well ให้ใส่ y)
- ชนิดของสารกึ่งตัวนำ (โปรแกรมรองรับเพียง AlGaAs ในขณะนี้แต่สามารถเพิ่มเติมได้ในอนาคต)
- ค่าคงที่อื่นๆ ตัวที่ 1 ซึ่งในกรณีนี้คือค่า x ใน $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$
- ค่าคงที่อื่นๆ ตัวที่ 2 ซึ่งเพื่อไว้ในอนาคต (หากไม่มีให้ใส่ 0.0 ห้ามทิ้งว่างไว้)

ตัวอย่าง Input File

```
#Do not change this line or the program won't work.
```

```
#position x_right(cm) x_left(cm) temperature(K) doping(cm-3) QW(y/n) material composite1 composite2
```

```
1 5e-7 5e-7 300 1e18 n AlGaAs 0.0 0.0
2 5e-7 5e-7 300 1e18 n AlGaAs 0.0 0.0
3 5e-7 5e-7 300 1e18 n AlGaAs 0.0 0.0
4 5e-7 5e-7 300 1e18 n AlGaAs 0.0 0.0
5 5e-7 5e-7 300 1e18 n AlGaAs 0.0 0.0
6 5e-7 5e-7 300 1e18 n AlGaAs 0.0 0.0
7 5e-7 5e-7 300 1e18 n AlGaAs 0.0 0.0
8 5e-7 5e-7 300 1e18 n AlGaAs 0.0 0.0
9 5e-7 5e-7 300 -1e18 n AlGaAs 0.0 0.0
10 5e-7 5e-7 300 -1e18 n AlGaAs 0.0 0.0
11 5e-7 5e-7 300 -1e18 n AlGaAs 0.0 0.0
12 5e-7 5e-7 300 -1e18 n AlGaAs 0.0 0.0
13 5e-7 5e-7 300 -1e18 n AlGaAs 0.0 0.0
14 5e-7 5e-7 300 -1e18 n AlGaAs 0.0 0.0
15 5e-7 5e-7 300 -1e18 n AlGaAs 0.0 0.0
16 5e-7 5e-7 300 -1e18 n AlGaAs 0.0 0.0
```

Output File

ผลเฉลยที่ได้สามารถบันทึกลงในแฟ้มนามสกุล sco ซึ่งประกอบด้วยองค์ประกอบดังนี้

- ตำแหน่งของ Mesh Point
- Conduction Energy (EC)
- Valence Energy (EV)
- ความหนาแน่นของอิเล็กตรอน
- ความหนาแน่นของโฮล
- ระยะห่างเมื่อเทียบกับ Mesh Point ถัดไป
- ศักย์ ณ Mesh Point นั้นๆ

ตัวอย่าง Output File

#position	Ec	Ev	n	p	x_right	potential
0	-4.772553	-6.194953	1.00E+18	3.39E-06	5.00E-09	7.03E-01
1	-4.760746	-6.183146	6.35E+17	5.33E-06	5.00E-09	6.91E-01
2	-4.748921	-6.171321	4.03E+17	8.40E-06	5.00E-09	6.79E-01
3	-4.737069	-6.159469	2.55E+17	1.33E-05	5.00E-09	6.67E-01
4	-4.72518	-6.14758	1.62E+17	2.09E-05	5.00E-09	6.55E-01
5	-4.713247	-6.135647	1.02E+17	3.31E-05	5.00E-09	6.43E-01
6	-4.701262	-6.123662	6.44E+16	5.25E-05	5.00E-09	6.31E-01
7	-4.689216	-6.111616	4.05E+16	8.35E-05	5.00E-09	6.19E-01
8	-4.677102	-6.099502	2.54E+16	1.33E-04	5.00E-09	6.07E-01
9	-4.664912	-6.087312	1.59E+16	2.13E-04	5.00E-09	5.95E-01
10	-4.652641	-6.075041	9.93E+15	3.41E-04	5.00E-09	5.83E-01
11	-4.640282	-6.062682	6.17E+15	5.48E-04	5.00E-09	5.70E-01
12	-4.627828	-6.050228	3.82E+15	8.85E-04	5.00E-09	5.58E-01
13	-4.615274	-6.037674	2.36E+15	1.43E-03	5.00E-09	5.45E-01
14	-4.602614	-6.025014	1.45E+15	2.33E-03	5.00E-09	5.33E-01
15	-4.589844	-6.012244	8.87E+14	3.82E-03	5.00E-09	5.20E-01
16	-4.576958	-5.999358	5.41E+14	6.26E-03	5.00E-09	5.07E-01
17	-4.563954	-5.986354	3.28E+14	1.03E-02	5.00E-09	4.94E-01
18	-4.550828	-5.973228	1.98E+14	1.71E-02	5.00E-09	4.81E-01
19	-4.537576	-5.959976	1.19E+14	2.85E-02	5.00E-09	4.68E-01
20	-4.524196	-5.946596	7.10E+13	4.77E-02	5.00E-09	4.54E-01

ภาคผนวก ค.

Class และ Main Program สำหรับโปรแกรมพ UNIX

● Class header (material.h)

```
// header file for the object "material" //

class material {

protected :                // list of protected variables

    double phi;              // potential
    double field;            // electric field
    double U;                // special variable for electrons
    double V;                // special variable for holes
    double n;                // electron concentration
    double p;                // hole concentration

    double density;          // density of the material
    double phi0;             // initial potential
    double phi_applied;      // applied potential
    double ni;               // ni of the material
    double q;                // electron charge
    double eps;              // material permittivity
    double Eg;               // material bandgap
    double chi;              // electron affinity of the material
    double VT;               // kT/q
    double Temperature;      //
    double x_right;          // hi,j
    double x_left;           // hi-1,j
    double y_top;            // ki,j
    double y_bottom;         // ki,j-1
    double Nc;               // effective density of states in conduction band
    double Nv;               // effective density of states in valence band
    double Tp;               // hole lifetime
    double Tn;               // electron lifetime
    double Dn;               // electron diffusion coefficient
    double Dp;               // hole diffusion coefficient

public :                     // list of public functions

    material();              // default constructor
    material(double density_p, double phi_applied_p = 0,
              double ni_p = 5915256.5520340,
              double eps_p = 1.16644e-12, double Eg_p = 0,
              double chi_p = 0, double Nc_p = 1, double Nv_p = 1,
              double Temperature_p = 300, double q_p = 1.6e-19,
              double VT_p = 0.026, double x_right_p = 5e-7,
              double x_left_p = 5e-7, double y_top_p = 5e-7,
              double y_bottom_p = 5e-7, double Tp_p = 1e-8,
              double Tn_p = 1e-8, double Dp_p = 10.4,
              double Dn_p = 221); // main constructor
    ~material() {}           // destructor

    double potential() { return phi; } // return potential
    double u() { return U; }           // return U
    double v() { return V; }           // return V
    double EG() { return Eg; }          // return Eg
    double CHI() { return chi; }        // return chi
    double ret_n() { return n; }        // return n
    double ret_p() { return p; }        // return p
    double ret_Ni() { return ni; }      // return ni
    double ret_VT() { return VT; }      // return VT
    double ret_Dn() { return Dn; }      // return Dn
    double ret_Dp() { return Dp; }      // return Dp
    double ret_Field() { return field; } // return field
    double ret_Fermi_leveln(double px); // return electron quasi-fermi
    double ret_Fermi_levelp(double px); // return electron quasi-fermi

    // calculate phi from the neighbour's objects
    double cal_phi(material &pi, material &mi, material &jp,
                   material &jm, double error_limit = 1e-7,
                   int m = 1000);
};
```

```

// calculate U from the neighbour's objects
material cal_U(material &ip1, material &im1, material &jp1,
               material &jm1);

// calculate V from the neighbour's objects
material cal_V(material &ip1, material &im1, material &jp1,
               material &jm1);

// calculate the electron density in the quantum well
material cal_qwn(double Efermi, double size, double perc);

// calculate the hole density in the quantum well
material cal_qwp(double Efermi, double size, double perc);

// calculate field from the neighbour's objects
material cal_field(material &ip1, material &im1, material &jp1,
                  material &jm1);

material setDensity(double denst);           // set material density
material setAppliedVolt(double phi_appl);    // set the applied voltage
material set_Diffusivity();                  // set Dn an Dp
material set_time(double tau);               // set lifetime
material set_step(double size1, double size2); // set step sizes
material operator-(const material &input);    // declare equal sign
friend ostream &operator<<(ostream &stream,
                           const material &output); // declare output
};

```

● Class implementation (material.cpp)

```

#include <iostream.h>
#include <math.h>
#include <std.lib.h>
#include "material.h"

material::material() { // method for default constructor

    phi = 0;
    field = 0;
    phi0 = 0;
    phi_applied = 0;
    V = 0;
    E = 0;
    p = 0;
    density = 0;
    ni = 0;
    T = 0;
    eps = 0;
    Eg = 0;
    chi = 0;
    VT = 0;
    Temperature = 0;
    x_right = 0;
    x_left = 0;
    y_top = 0;
    y_bottom = 0;
    Nv = 0;
    Nd = 0;
    qn = 0;
    qh = 0;
    qd = 0;
    qv = 0;
    Tp = 0;
    Tn = 0;

}

// method for constructor
material::material(double density_p, double phi_applied_p, double ni_p,
                  double eps_p, double Eg_p, double chi_p, double Nd_p,
                  double Nv_p, double Temperature_p, double q_p, double VT_p,
                  double x_right_p, double x_left_p, double y_top_p,
                  double y_bottom_p, double Tp_p, double Tn_p, double Dp_p,
                  double Dn_p) {

    double temp;

```

```

density      = density_p;
phi_applied  = phi_applied_p;
ni           = ni_p;
q            = q_p;
eps          = eps_p;
Eg           = Eg_p;
chi          = chi_p;
VT           = VT_p;
Temperature  = Temperature_p;
x_right      = x_right_p;
x_left       = x_left_p;
y_top        = y_top_p;
y_bottom     = y_bottom_p;
Nc           = Nc_p;
Nv           = Nv_p;
Tp           = Tp_p;
Tn           = Tn_p;
Dn           = Dn_p;
Dp           = Dp_p;

if (density < 0) {
    temp = fabs(density) / (2 * ni);
    phi0 = -log(temp + sqrt((temp*temp) + 1));
}
else {
    temp = density / (2 * ni);
    phi0 = log(temp + sqrt((temp*temp) + 1));
}

phi = phi_applied + phi0*VT;
U   = exp(-phi_applied/VT);
V   = exp(phi_applied/VT);
n = ni * Nc * U * exp(phi/VT)*exp(chi/q/VT);
p = ni * Nv * V * exp(-phi/VT)*exp(-(chi+Eg)/q/VT);
}

// method for calculating the potential
double material::cal_phi(material& ipl, material& iml, material& jpl,
                        material& jml, double error_limit, int m) {

    double y, dy, dxeps, dyeps;
    double aij, aiplj, aimlj, aijpl, aijml;
    double F, f;
    double G1, G2;

    if (m <= 0) {
        cout << "It's not funny" << m << ", set 'm' again.\n";
        exit(1);
    }

    dxeps = ipl.eps/x_right/2-iml.eps/x_left/2-eps*(1/x_right-1/x_left)/2;
    dyeps = jpl.eps/y_top/2-jml.eps/y_bottom/2-eps*(1/y_top-1/y_bottom)/2;
    aiplj = eps*2. / (x_right + x_left) / x_right+dxeps/x_right/2;
    aimlj = eps*2. / (x_right + x_left) / x_left-dxeps/x_left/2;
    aijpl = eps*2. / (y_top + y_bottom) / y_top+dyeps/y_top/2;
    aijml = eps*2. / (y_top + y_bottom) / y_bottom-dyeps/y_bottom/2;
    aij = aiplj + aimlj + aijpl + aijml;

    f = -q*density;
    F = aiplj*ipl.phi + aimlj*iml.phi + aijpl*jpl.phi + aijml*jml.phi - f;
    G1 = q*ni*(Nc*U*exp(phi/VT)*exp(chi/VT/q)
            -Nv*V*exp(-phi/VT)*exp(-(chi+Eg)/q/VT));
    y = aij*phi + G1 - F;

    while ((fabs(y) > error_limit) && (m > 0)) {
        m--;
        G2 = q * ni * (Nc*U/VT*exp(phi/VT)*exp(chi/VT)
                    + Nv*V/VT*exp(-phi/VT)*exp(-(chi+Eg)/q/VT));
        dy = aij + G2;
        phi -= y/dy;
        G1 = q*ni*(Nc*U*exp(phi/VT)*exp(chi/VT/q)
                - Nv*V*exp(-phi/VT)*exp(-(chi+Eg)/q/VT));
        y = aij*phi + G1 - F;
    }

    if (m < 0) {

```

```

    cout << "dy = " << dy << "\n";
    cout << "1/dy = " << 1/dy << "\n";
    cout << "Function is not convergent, exit program.\n";
    exit(1);
}

n = ni*Nc * U * exp(phi/VT)*exp(chi/q/VT);
p = ni* Nv * V * exp(-phi/VT)*exp(-(chi+Eg)/q/VT);

return phi;
}

// method for calculating U
material material::cal_U(material& ipl, material& iml, material& jpl,
                        material& jml) {

    double aij, aiplj, aimlj, aijpl, aijml;
    double cnhp, cnhm, cnkp, cnkm, bnhp, enhp, xnhp, bnhm, xnhm;
    double bnkp, xnkp, bnkm, xnkml;
    double F, f, G, r;

    cnhp = 2*Dn*Nc / (x_right + x_left) / x_right;
    xnhp = (phi - ipl.phi) / VT + (chi - ipl.chi) / q / VT;
    bnhp = fabs(xnhp) < 1e-10 ? 1-0.5*xnhp : xnhp / (exp(xnhp) - 1);
    enhp = exp((phi+chi/q)/VT);
    aiplj = cnhp * bnhp;

    cnhm = 2*Dn*Nc / (x_right + x_left) / x_left;
    xnhm = (phi - iml.phi) / VT + (chi - iml.chi) / q / VT;
    bnhm = fabs(xnhm) < 1e-10 ? 1-0.5*xnhm : xnhm / (exp(xnhm) - 1);
    aimlj = cnhm * bnhm;

    cnkp = 2*Dn*Nc / (y_top + y_bottom) / y_top;
    xnkp = (phi - jpl.phi) / VT + (chi - jpl.chi) / q / VT;
    bnkp = fabs(xnkp) < 1e-10 ? 1-0.5*xnkp : xnkp / (exp(xnkp) - 1);
    aijpl = cnkp * bnkp;

    cnkm = 2*Dn*Nc / (y_top + y_bottom) / y_bottom;
    xnkml = (phi - jml.phi) / VT + (chi - jml.chi) / q / VT;
    bnkml = fabs(xnkml) < 1e-10 ? 1-0.5*xnkml : xnkml / (exp(xnkml) - 1);
    aijml = cnkm * bnkml;

    aij = aiplj + aimlj + aijpl + aijml;

    r = 1.0 / (Tn*ni*( Nv*V*exp(-phi/VT)*exp(-chi/q/VT)+1)
              + Tp*ni*(Nc*U*exp(phi/VT)*exp(chi/VT/q)+1));
    G = ni * V * r/enhp;
    f = -ni * r/enhp;
    F = aiplj*ipl.U + aimlj*iml.U + aijpl*jpl.U + aijml*jml.U - f;

    U = F / (aij+G);

    n = ni* Nc * U * exp(phi/VT)*exp(chi/q/VT);

    return U;
}

// method for calculating the V
material material::cal_V(material& ipl, material& iml, material& jpl,
                        material& jml) {

    double aij, aiplj, aimlj, aijpl, aijml;
    double cphp, cphm, cpkp, cpkm, bphp, ephp, xphp, bphm, xphm;
    double bpkp, xpkp, bpkml, xpkml;
    double F, f, G, r;

    cphp = 2*Dp*Nv / (x_right + x_left) / x_right;
    xphp = (ipl.phi - phi) / VT + (ipl.chi - chi) / q / VT + (ipl.Eg - Eg) / q / VT;
    bphp = fabs(xphp) < 1e-10 ? 1+0.5*xphp : xphp / (exp(xphp) - 1);
    ephp = exp(-(phi+chi/q+Eg/q)/VT);
    aiplj = cphp * bphp;

    cphm = 2*Dp*Nv / (x_right + x_left) / x_left;
    xphm = (iml.phi - phi) / VT + (iml.chi - chi) / q / VT + (iml.Eg - Eg) / q / VT;
    bphm = fabs(xphm) < 1e-10 ? 1+0.5*xphm : xphm / (exp(xphm) - 1);
    aimlj = cphm * bphm;

```