



Semiconductor materials

半导体材料 研究设计解决方案

全功能材料设计及性质预测平台MedeA



Semiconductor
materials

关于源资科技

源资信息科技（上海）有限公司于公元2008年5月在上海交通大学产学研合作的白猫科技园区内正式成立，并隶属于上海张江国家自主创新示范区的长宁分园。公司已于2015年通过ISO9001质量体系认证，于2018年荣获

“高新技术企业称号”，于2020年荣获“专精特新中小企业称号”。

公司以协助国内材料、化工、医药等领域的事业发展为宗旨，以创新的理念，为材料模拟、制药研发、临床试验设计及信息和质量管理等各个领域提供连贯整合性平台解决方案。自成立之日起，公司积极组织参与材料相关领域的各种学术交流活动，以技术培训班、研讨会、在线教育、展会报告等多种方式，不断将世界范围内更新的理念，更优秀的解决方案引进中国。公司成立至今，受到了教育、学术和企业界人士的广泛肯定和赞赏。

公司于2013年9月1日正式取得Materials Design®公司VASP及MedeA软件的独家代理权。公司将为国内材料信息学这个新兴领域的科研工作者提供最大的支持和最优质的服务，帮助科研工作者们只专注于科学研究。

关于Materials Design®

Materials Design®公司由材料科学领域的知名带头人Paul Saxe博士创建于1998年，总部位于美国，并在欧洲和澳大利亚设有分公司，能够给予用户全球化的视角和快速响应的服务。

Materials Design®公司致力于将计算材料科学与实验中获得的结构数据库整合成一个全功能材料设计与性质预测平台，结合学术界中最权威的第一性原理、分子动力学、蒙特卡洛和半经验量化这几种计算方法为解决材料设计、化工生产、工业应用、基础研究等几大领域中实际存在的科学与工程问题提供了便利。目前，致力于推动计算材料科学的公司不多，Materials Design®公司作为其中之一，利用强大的数据库与计算模拟方法，帮助提升已有材料的国际竞争力，同时探索和开发新材料。Materials Design®公司旨在与全球范围内学术及工业界紧密合作，共同为人类的未来生活提供更好的材料。

The Gateway to Atom-Scale Simulation ▶▶▶

半导体材料研究设计解决方案

MedeA是一个全功能材料设计及性质预测平台软件，其中包含数据库，建模工具，多尺度计算引擎，多种理化性质预测工具等模块。



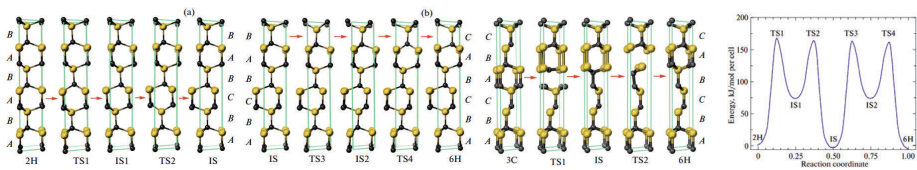
晶圆芯片、
光伏材料、
半导体发光、
半导体探测、
半导体传感

半导体材料构效关系研究：掺杂缺陷
复合半导体、异质
结界面、有机半导
体材料

界面间电子交换、
电子性质、力学性
质、声子性质、反应
物-表面相互作用、反
应和扩散，基态相图

MedeA在半导体材料中的应用案例：SiC和GaN

SiC相转变研究

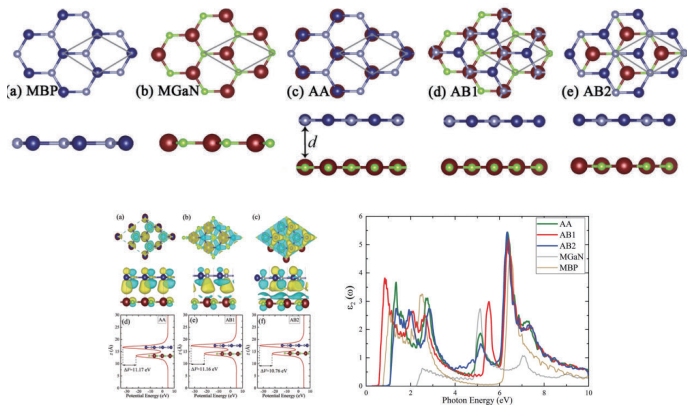


MedeA VASP：优化了SiC-2H、SiC-3C及SiC-6H等不同结构。

MedeA VASP + MedeA TSS：分析SiC-2H→SiC-6H相转变过程，2H→6H转变中有三个极小值，中间最小值（IS）是由于两个链接位点改变形成，位点改变不是同时进行，而是轮流改变。

*参考文献：S.A. Kukushkin, et al. Physics of the Solid State. 2019, 61(8), 1389-1393

新型单层氮化镓和磷化硼异质结电子性质及光学性质研究



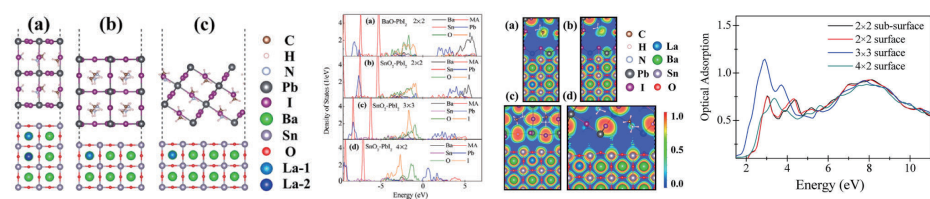
MedeA Interfaces Builder：构建MGaN(单层氮化镓)/MBP(磷化硼)不同异质结构型，AA、AB1及AB2。

MedeA VASP：优化MGaN/MBP及异质结构型AA，AB1及AB2，并进一步分析其电子性质及光学性质。三种异质结结构中，AA和AB1是间接带隙半导体，而AB2构型是直接带隙，其中MBP层为主导带结构；光谱分析发现在紫外光范围内，异质结构型具有显著光吸收特性，在基于紫外光谱的光电应用中具有广阔前景。

*参考文献：A. Mogulkoc, et al. Phys. Chem. Chem. Phys. 2018,20, 28124-28134

MedeA在半导体材料中的应用案例：太阳能电池

CH₃NH₃PbI₃与BaSnO₃钙钛矿界面结构、电子和光学性质

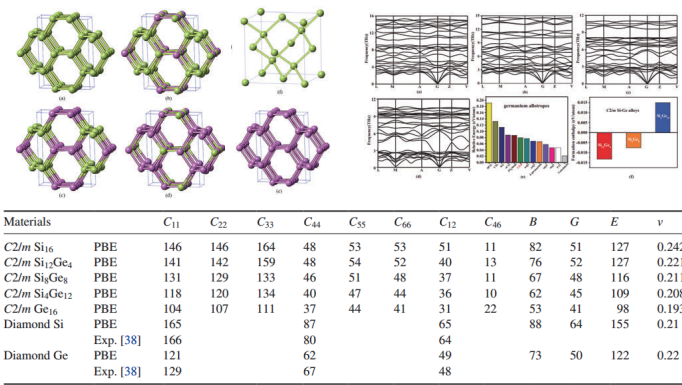


MedeA Interfaces Builder：构建CH₃NH₃PbI₃/BaSnO₃界面。

MedeA VASP：优化CH₃NH₃PbI₃/BaSnO₃界面结构，分析电子局域函数，研究钙钛矿与BaSnO₃间的相互作用，并进一步分析La掺杂后对光学性质的影响。对于(2x2) slab界面，表层和次表层掺杂对其吸收光谱影响不大；相比之下，(3x3) slab界面光吸收强度最强，(4x2) slab界面光吸收强度最低。

*参考文献：Yao Guo, et al. J. Phys. Chem. C 2019, 123, 16075-16082

硅锗C2/m相物理性质研究



MedeA VASP：计算硅锗同素异形体C2/m相结构：Si₁₂Ge₄(Si_{0.7}Ge_{0.25})、Si₈Ge₈ (Si_{0.5}Ge_{0.5})及Si₄Ge₁₂ (Si_{0.25}Ge_{0.75})，并分析能带结构等，考察稳定性及电子性质。

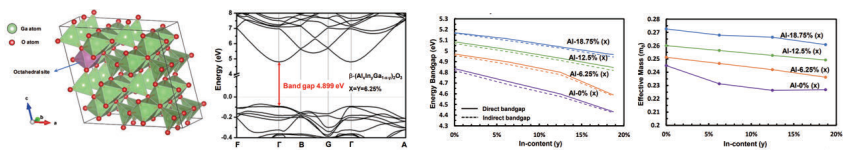
MedeA VASP + MedeA MT：预测C2/m 相Si₁₂Ge₄、Si₈Ge₈ 及Si₄Ge₁₂结构力学性质，考察稳定性。

MedeA VASP + MedeA Phonon：预测C2/m相Si₁₂Ge₄、Si₈Ge₈ 及Si₄Ge₁₂结构声子性质，考察稳定性。

*参考文献：Yanxing Song, et al. J. Phys.: Condens. Matter 31(2019) 255703

MedeA在半导体材料中的应用案例：光电半导体

• 用于紫外线光电探测器的单斜 $(\text{Al}_x\text{In}_y\text{Ga}_{1-x-y})_2\text{O}_3$ 研究

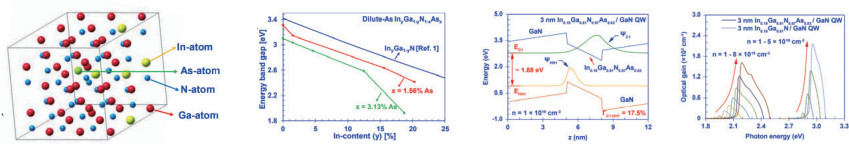


MedeA-VASP：优化Al和 In 含量为 0%至 18.75%的 β -Ga₂O₃结构，研究 β -(Al_xIn_yGa_{1-x-y})₂O₃合金带隙与Al/In含量的关系。合金带隙对应波长在240-280nm 区域，在实现晶格匹配的深紫外光电探测器拥有巨大应用潜力。

MedeA-Electronics：计算不同方向上合金电子的平均有效质量，研究表明Al和In 原子能显著调节 β -Ga₂O₃的电子有效质量。对于探索紫外光电探测器设备的灵敏度具有重要意义。

*参考文献：Xiaoli Liu and Chee-Keong Tan, 2019 IEEE Photonics Conference (IPC)

• InGaAs 量子阱在红光发射激光器的应用



MedeA-VASP：对In、As含量分别约20%和3%的稀As-InGaAs半导体能带结构和光学性能进行DFT计算。将微量As杂质掺入InGaN (In-20%) 体系可以使其发射波长发生明显红移，且保留直接带隙半导体特征。此外，采用纤锌矿半导体的自洽6带k·p形式评估30 Å 的In_{0.19}Ga_{0.81}N_{0.97}As_{0.03}能带排列，光学增益特性和自发发射率特性，并与常规In_{0.19}Ga_{0.81}N /GaN QW体系进行比较。研究表明稀As-InGaAs可作为未来红光二极管激光器的有源区材料。

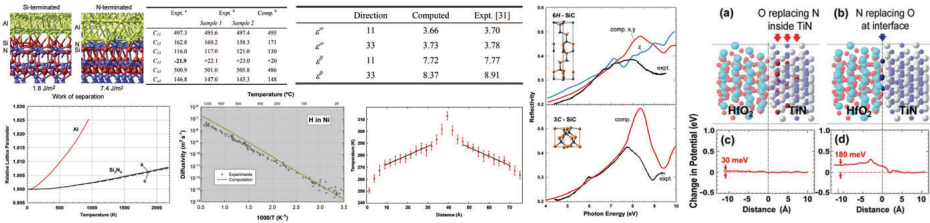
*参考文献：Damir Borovac, et al., 2018 IEEE Photonics Conference (IPC)



源资科技-VASP&MedeA在中国的官方代理商
中国地区只授权一家，可提供正规授权函
关注VASP&MedeA官方公众号
回复“试用”，填写表单，申请MedeA试用
联系邮箱support@tri-ibitech.com

MedeA在半导体领域中的应用案例：微电子材料

◎ 微电子材料机械、热和电子性质的原子尺度预测



MedeA VASP: 研究Al/Si₃N₄界面强度，通过材料计算提供实验方法不易获得的界面性质；计算氧化铝的弹性系数；研究材料介电特性，理论预测和实验数据具有一致性；计算3C-SiC和6H-SiC两种晶型的反射率、光学性质。

MedeA Interface Builder: 创建高k介电材料HfO₂与金属栅极材料TiN界面模型。结合MedeA VASP计算当O原子取代TiN层内的N原子时和当N原子取代金属氧化物界面处的O原子时静电势变化。

MedeA Phonon: 计算一系列不同晶格参数的声子色散关系。由声子态密度获得作为温度函数的振动自由能（焓和熵）所需的所有信息。将自由能最低的晶格参数作为温度的函数，得到固体的热膨胀系数。

MedeA Transition State Search (TSS): 研究半导体工艺制造过程，原子在固体中的扩散路径、能垒和扩散系数。计算H在Ni中的扩散，质量扩散系数，与大量实验数据结论一致，表明从头计算方法的准确性。

MedeA Forcefields: 提供先进力场数据库，包括有机分子、聚合物力场、半导体力场。通过具有可调参数的解析数学表达式即力场来描述原子间相互作用。

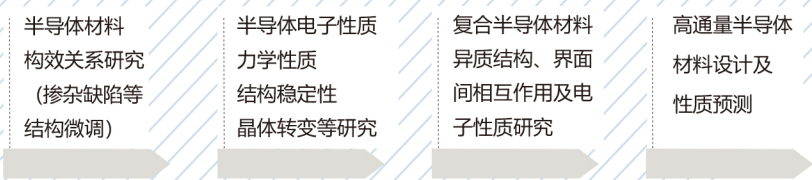
MedeA LAMMPS + Thermal Conductivity: 使用非平衡分子动力学，从温度梯度和热通量得到结晶聚乙烯的热导率。

***参考文献:** 11th. Int. Conf. on Thermal, Mechanical and Multiphysics Simulation and Experiments in Micro-Electronics and Micro-Systems, EuroSimE 2010



进入源资科技-B站视频空间，
观看所有教学视频！
方法1：登录哔哩哔哩网站或APP，搜索源资科技；
方法2：扫描左侧二维码直接观看。

半导体材料研究设计解决方案



源资信息科技(上海)有限公司
电话: +86-21-32504385
网址: www.tri-ibiotech.com
邮箱: support@tri-ibiotech.com

上海总公司
地址: 上海市长宁区天山路18号701室
重庆办事处
地址: 重庆市渝中区石油路大坪时代天街
B馆3栋2803

北京分公司
地址: 北京市顺义区安泰大街融慧园15-3
南京维保中心
地址: 南京市玄武区珠江路699号
东鼎大厦C座401

