Задачи на автомат 2020

**Требования к проектам:** Программы должны работать под Windows 7 в базовой конфигурации, а также под Windows 10. «Дружественный» и понятный интерфейс. Желательно чтобы программа запускалась одним файлом – без привлечения библиотек и языков, которые нужно предварительно устанавливать на компьютер. Но возможно использование бесплатных сервисов, таких как Java и т.д. Будут дополнительные консультации по физике и по используемым формулам.

**Задача 1. Оптические свойства кубического полярного кристалла**

Проект легкий, выполняется **одним человеком**.

По задаваемым изменяемым параметрам надо посчитать зависимость от частоты (в обратных сантиметрах) реальной и мнимой части диэлектрической проницаемости, реальной и мнимой части показателя преломления, коэффициента поглощения (в обратных сантиметрах), амплитуду коэффициента отражения в квадрате (отражение по интенсивности) и изменение фазы при отражении, а также пропускание и оптическую плотность плёнки.

Работаем в системе СГС.

Частота плазмона с волновым вектором много меньшим волнового вектора Ферми равна: ,где *N* – объёмная концентрация носителей заряда, *e* – заряд электрона (4.8\*10‑10 ед. СГС), c -скорость света в СГС – 2.998·1010 см/с, *m\** – эффективная масса,  - диэлектрическая проницаемость для частот много больше фононных (но меньше оптических частот) – меняется от 1 до 100.

Задаётся –

1) концентрация носителей заряда в см-3 (задаётся в пределах от нуля до 5 на 1022);

2) масса носителей заряда в массах свободного электрона - программа умножает введенное число на 9.1\*10-28 (это масса электрона в граммах);

3)  - диэлектрическая проницаемость для частот много больше фононных, безразмерный параметр, задаётся от 1 до 100;

4) – частота продольного фонона (в обратных сантиметрах);

5) – частота поперечного фонона (в обратных сантиметрах);

6) - затухание фононов (в обратных сантиметрах) - хоть это и не физично, допускается вводить и ОТРИЦАТЕЛЬНЫЕ значения;

7) - затухание плазмонов (в обратных сантиметрах) - хоть это и не физично, допускается вводить и ОТРИЦАТЕЛЬНЫЕ значения;

8) толщина плёнки d (в сантиметрах) – пределы от 0 до 10-3 см (это для расчёта пропускания плёнок). Удобнее вводить в нанометрах, тогда программа должна умножать введённое число на 10-7.

После этого программа считает частоту плазмона (выдает на экран в обратных сантиметрах). и реальную и мнимую части диэлектрической проницаемости в заданных пределах от частоты (в обратных сантиметрах). На графике частот должны быть метки с частотами , ,

Показатель преломления , программа считает реальную и мнимую части показателя преломления. Коэффициент поглощения (в обратных сантиметрах) от волнового числа фотона (в обратных сантиметрах), , программа считает его в заданных пределах изменения частоты. Считаем комплексный коэффициент отражения (амплитуда с учетом фазы)

Также нужно считать квадрат модуля коэффициента отражения по амплитуде – коэффициент отражения по интенсивности.

Также нужно считать пропускание плёнки (без учёта интерференции):

И оптическую плотность плёнки:

Программа в пределах заданных частот от 0 до 1000 см-1 (или меньше – по желанию) должна строить **9 графиков**:

1) реальная часть диэлектрической проницаемости ;

2) мнимая часть диэлектрической проницаемости ;

3) реальная часть показателя преломления *n(ω)*;

4) мнимая часть показателя преломления *k(ω)*;

5) коэффициент отражения по интенсивности R(ω);

6) фазу коэффициента отражения по амплитуде ;

7) коэффициент поглощения (в обратных сантиметрах) ;

8) пропускание плёнки T(ω);

9) оптическую плотность плёнки A(ω) в заданных пределах.

Все графики рисуются разными цветами с автонормировкой, тем же цветом показаны значения пределов изменения функции. Можно строить как все графики, так и отдельно выбранные. Дополнительная опция (если возможно) – мышкой можно цеплять и двигать частоты и

Программа **должна** уметь сохранять выбранный график в ASCII кодах – 2 колонки читаемые Ecell, Origin и т.д.

**Задача 2. Оптические свойства полупроводника, содержащего свободные и связанные заряды**

Проект легкий, выполняется **одним человеком**. Формулы похожи на проект 1.

По задаваемым изменяемым параметрам надо посчитать зависимость от частоты (в обратных сантиметрах) реальной и мнимой части диэлектрической проницаемости, реальной и мнимой части показателя преломления, коэффициента поглощения (в обратных сантиметрах), амплитуду коэффициента отражения в квадрате (отражение по интенсивности), изменение фазы при отражении, пропускание плёнки и её оптическую плотность.

Работаем в системе СГС.

Задаётся –

1) концентрация свободных носителей заряда N0 в см-3 (задаётся в пределах от нуля до 5 на 1022);

2) масса свободных носителей заряда m0 в массах свободного электрона - программа умножает введенное число на 9.1\*10-28 (это масса электрона в граммах);

3) затухание свободного заряда (в обратных сантиметрах) - , хоть это и не физично, допускается вводить и ОТРИЦАТЕЛЬНЫЕ значения;

4) - диэлектрическая проницаемость для частот много больше фононных;

5) пределы изменения частот от 0 до 5000 см-1 (или меньше – по желанию);

6) количество мод связанных зарядов K (число K меняется от 1 до 6);

7) толщина плёнки d (в сантиметрах) – пределы от 0 до 10-3 см (это для расчёта пропускания плёнок). Удобнее вводить в нанометрах, тогда программа должна умножать введённое число на 10-7.

После этого для каждой *i*-той моды связанного заряда задаются следующие параметры:

*i*1) концентрация свободных носителей заряда Ni в см-3 (задаётся в пределах от нуля до 1023);

*i*2) масса связанного носителя заряда mi в массах свободного электрона - программа умножает введенное число на 9.1\*10-28 (это масса электрона в граммах), в этом случае масса может меняться от 1 до 200 000, так как это ион;

*i*3) *ei* – эффективный заряд в зарядах электрона, меняется от 0 до 4, программа сама умножает это число на заряд электрона в СГС (4.8\*10-10 ед. СГС);

*i*4) частота колебаний связанного заряда (в обратных сантиметрах) – *ωi*;

*i*5) затухание колебаний связанного заряда (в обратных сантиметрах) - , хоть это и не физично, допускается вводить и ОТРИЦАТЕЛЬНЫЕ значения.

В начале программа считает ВСЕ плазменные частоты , все параметры заданы, *i* меняется от 0 до K, программа выдаёт частоты в обратных сантиметрах, c -скорость света в СГС – 2.998·1010 см/с.

Потом считается диэлектрическая проницаемость от частоты:

После этого программа считает реальную и мнимую части показателя преломления

Коэффициент поглощения (в обратных сантиметрах) от волнового числа фотона (в обратных сантиметрах), программа считает его в заданных пределах. Считаем комплексный коэффициент отражения (амплитуда с учетом фазы)

Также нужно считать квадрат модуля коэффициента отражения по амплитуде – коэффициент отражения по интенсивности.

Также нужно считать пропускание плёнки: (без учёта интерференции):

И оптическую плотность плёнки:

Программа в пределах заданных частот от 0 до 5000 см-1 (или меньше – по желанию) должна строить **7 графиков**:

1) реальная часть показателя преломления *n(ω)*;

2) мнимая часть показателя преломления *k(ω)*;

3) коэффициент отражения по интенсивности R(ω);

4) фазу коэффициента отражения по амплитуде ;

5) коэффициент поглощения (в обратных сантиметрах) ;

6) пропускание плёнки T(ω);

7) оптическую плотность плёнки A(ω) в заданных пределах.

Все графики рисуются разными цветами с автонормировкой, тем же цветом показаны значения пределов изменения функции. Можно строить как все графики, так и отдельно выбранные.

Программа **должна** уметь сохранять выбранный график в ASCII кодах – 2 колонки читаемые Ecell, Origin и т.д.

**Задача 3.** **Удельная проводимость от температуры.**

Проект большой – можно выполнять командой из **двух или трёх человек**. Так как задача важная и интересная, можно дать **двум командам**.

**Часть первая – подвижность.**

Сначала находим аналитическое выражение для температурной зависимости подвижности для электронов и дырок для кремния, германия и арсенида галлия.

**Это отдельная программа – результаты её будут использоваться второй командой -**

Итак, надо найти зависимость проводимости от температуры.

Про зависимость подвижности от температуры можно почитать здесь.

Для кремния – <http://www.ioffe.ru/SVA/NSM/Semicond/Si/electric.html#Basic>

Для германия - <http://www.ioffe.ru/SVA/NSM/Semicond/Ge/electric.html#Basic>

Для арсенида галлия - <http://www.ioffe.ru/SVA/NSM/Semicond/GaAs/electric.html#Basic>

В общем виде -

<http://dssp.petrsu.ru/p/tutorial/ftt/Part10/part10.10.htm>

<http://foez.narod.ru/19.htm>

Будем упрощённо описывать зависимость подвижности от температуры такой моделью.

 (3.1)

 (3.2)

Собственно цель задачи – найти (подогнать к известим из ссылок выше экспериментальным данным) 4 константы – по 2 для электронов и для дырок. Легко убедиться что, например, для дырок это константы Cp, T0 p\_phonon и T0p, но не все они независимые (обычно студенты константу C принимают за единицу). То есть по формулам вычисляем подвижность для материалов с различными Nd и Na, выводим график от температуры и сравниваем с известными литературными данными для кремния, германия и арсенида галлия и подгоняем константы. Проблема конечно заключается в том, что концентрации заряженных доноров и акцепторов Nd- и Na+, сами зависят от температуры.

В итоге, с подогнанными **правильными** константами программа строит графики подвижностей для электронов и для дырок от температуры. Строим всё в несистемных единицах - то есть в единицах [см2/(Вольт·секунда]. Нужна опция сохранения графиков в ASCII кодах в виде двух столбцов. В интерфейсе также должна быть опция – выбор нужного материала – кремний, германий или арсенид галлия.

Программа должна считать и строить графики зависимостей подвижности от температуры и демонстрировать что это всё неплохо совпадает с экспериментом. То есть данные из ссылок выше надо оцифровать – чтобы выводить на графики.

**Но можно воспользоваться УЖЕ найденными вашими предшественниками шестью константами для этих материалов из файлов! Но обратите внимание что они привожят подвижность в СИ - [метр2/(Вольт·секунда].**

**Часть вторая - находим концентрацию свободных электронов и дырок** (решение этой задачи я демонстрировал на лекциях) а потом и **проводимость** от температуры.

Удельная проводимость это произведение концентрации (в кубическом сантиметре) на заряд электрона (в СГС - 4.8\*10-10 ед. СГС) и на подвижность – и сумма всего этого для электронов и дырок.

В интерфейсе также должна быть опция – выбор нужного материала – кремний, германий или арсенид галлия. Параметры полупроводника – запрещённая зона *Eg*, эффективные массы плотности состояний в долинах для дырок и для электронов также берутся из ссылок выше. Положение уровня донора *Ed*, концентрация доноров Nd0, положение уровня акцептора *Ea*, концентрация акцепторов Na0, температура T (или диапазон температур) – вводятся в меню.

Программа переводит все в единицы в СГС.

Все энергии отсчитывает от потолка валентной зоны, только энергия донора вниз от дна зоны проводимости.

Сначала находим эффективную плотность состояний для электронов и дырок.



Положение уровня Ферми в квазинейтральном объёме находим из электронейтральности:

 

Доля заряженных доноров определяется положением уровня Ферми

.

Доля заряженных акцепторов определяется положением уровня Ферми

.

Положение уровня Ферми находится из уравнения

Зная положение уровня Ферми находим концентрации свободных электронов и дырок а также концентрацию **заряженных** доноров и акцепторов. Потом, из формул 3.1 и 3.2 с учётом знания констант (полученных командой 1) и концентраций **заряженных** доноров и акцепторов Nd- и Na+, вычисляется подвижность.

Потом вычисляется проводимость как:



Программа вычисляет и рисует графики от температуры для концентрации электронов и дырок, концентрации заряженных доноров и акцепторов, подвижность электронов и дырок, а главное – **удельная проводимость**!

Опция - графики зависимости подвижности от температуры можно сохранять в ASCII кодах. Пример показывал на лекциях –но там в программе были ошибки.

**Задача 4.** **Построение кривых Ирвинга**

Проект большой – можно выполнять командой из **двух или трёх человек**. Так как задача важная и интересная, можно дать **двум командам**. Одна делает для материалов n-типа, другая для материалов p-типа.

Все формулы те же, что и в проекте 3.

Подвижность от температуры – задача совпадает с проектом 3!

Во второй части – ФИКСИРУЕМ ТЕМПЕРАТУРУ. Изменяем только концентрацию примеси – в одном случае доноров, в другом акцепторов.

Границы изменений концентраций – от 1010 до 1020 в кубическом сантиметре.

Опции – выводить как проводимость σ от концентрации, так и удельное сопротивление ρ=1/σ в несистемных единицах Ом\*см. Графики зависимости от концентрации можно сохранять в ASCII кодах.

**Задача 5.** **Статистика электронов и дырок в кремнии общем случае (в том числе и для вырожденного полупроводника)**

Проект можно выполнять командой из **двух человек**.

Для простоты берём кремний, содержащий только доноры (n-тип).

Вводятся параметры кремния – запрещённая зона *Eg*, эффективные массы плотности состояний в долинах для электронов – все данные для кремния есть в методичке и на сайте <http://www.ioffe.ru/SVA/NSM/Semicond/Si/electric.html#Basic> ), положение уровня донора *Ed*, концентрация доноров Nd0 (задаётся от 1015 до 1022 на кубический сантиметр), начальная температура T.

Программа переводит все в единицы СГС (или в СИ по желанию).

Все энергии отсчитывает от потолка валентной зоны, только энергия донора вниз от дна зоны проводимости.

Количество электронов в зоне проводимости определяется выражением:

. (5.1)

,

здесь  – вероятность заполнения электроном состояния с заданной энергией *ε* (число заполнения), *μ* – электрохимический потенциал, называемый также уровень Ферми (обозначается также *εf*).

.

m\* это и есть масса эффективной плотности состояний для электронов (из справочника берём).

Доля заряженных доноров определяется положением уровня Ферми

. (5.2)

Положение уровня Ферми находится из уравнения электронейтральности

. (5.3)

Здесь как видите акцепторов нет, а концентрацией дырок пренебрегаем.

Итак, задача сводится к тому, чтобы подогнать уровень Ферми так, чтобы выполнялось уравнение 5.3. Концентрацию свободных электронов и заряженных доноров считать по выражениям 5.1 и 5.2. Интеграл 5.1 скорее всего придётся брать числено.

Итак, сначала посчитали для заданной температуры. В итоге программа должна считать и строить графики зависимостей положения Ферми и концентрации электронов от температуры – в пределах от 10K до 1200 K. Идея заключается в том, чтобы продемонстрировать, что при некоторой высокой концентрации мелкого донора, уровень Ферми может подняться выше дна зоны проводимости, то есть кремний станет вырожденным.

**Задача 6** **Иллюстрация пиннинга уровне Ферми поверхностными состояниями.**

Проект непростой (до этого давал такую задачу, на автомат ребята нарабатывали, но конечного продукта – то есть демонстрации на лекции не получилось).

Можно делать командой из **2-3 человек**.

Вводятся параметры полупроводника – запрещённая зона *Eg*, диэлектрическая проницаемость ε, эффективные массы плотности состояний в долинах для дырок и для электронов, положение уровня донора *Ed*, концентрация доноров Nd0, температура T.

Вводятся плотность поверхностных акцепторов Nas и их положение уровня энергии Eas.

Вводится внешнее поле Eout в вольтах на метр.

Программа переводит все в единицы СГС (или в СИ по желанию).

Все энергии отсчитывает от потолка валентной зоны, только энергия донора вниз от дна зоны проводимости.

Сначала находим эффективную плотность состояний для электронов и дырок.



Положение уровня Ферми в квазинейтральном объёме находим из электронейтральности:

 

Доля заряженных доноров определяется положением уровня Ферми

.

Положение уровня Ферми находится из уравнения

Находим изгиб зон когда нет внешнего поля условие – заряд поверхностных акцепторов равен заряду ОПЗ.

 - это количество заряженных поверхностных акцепторов, поле, создаваемое ими . Глубина ОПЗ при обеднении , поверхностный заряд ОПЗ . Изгиб зон  ищем из равенства .

Если есть внешнее поле Eout, то уравнение:



Программа должна находить положение уровня Ферми в квазинейтральном объёме, изгибы зон  при нулевом и при заданном внешнем поле и строить зонные диаграммы с изгибами. Плоские зоны + парабола с шириной  и высотой .

**Обязательно понадобятся консультации по физике процесса изгиба зон!**

**По всем задачам –**

Нужны консультации – звоните или пишите. Первая версия программы должны быть готова к середине декабря (или раньше!!!) – надо будет опробовать правильность и качество графики.

Успехов!

Володин.