

## Задачи на автомат 2024

**Требования к проектам:** Программы должны работать под Windows 10 или выше (11). «Дружественный» и понятный интерфейс, инструкция по пользованию, актуальные контакты разработчиков. Необходимо, чтобы программа запускалась одним файлом – без привлечения библиотек и языков, которые нужно предварительно устанавливать на компьютер, таких как Java и т.д. Будут дополнительные консультации по физике и по используемым формулам.

### Задача 1. Фононы в линейной двухатомной цепочке с визуализацией дисперсии и колебаний атомов с учётом фазы.

Проект легкий, поэтому главное, чтобы был красивый удобный интерфейс, красивая реализация анимации атомных колебаний, которая запускалась бы с любого компьютера. Возможно выполнение 1-2 студентами.

Задаётся линейная цепочка из 2-х атомов, жесткости пружинок и массы атомов. Расстояние между атомами –  $a$ , значит период составляет  $2a$ . Программа находит собственные частоты от волнового вектора (строит дисперсию в пределах первой зоны Бриллюэна – то есть от  $-\frac{\pi}{2a}$  до  $+\frac{\pi}{2a}$ , это потому, что период  $2a$ ) и собственные векторы. Программа должна визуализировать волну колебаний – анимация смещений атомов от времени. Пользователь задаёт волновое число (от  $-\frac{\pi}{2a}$  до  $+\frac{\pi}{2a}$ , должна быть опция волновое число строго равно нулю - центр зоны Бриллюэна) и моду – оптическая или акустическая, продольная или поперечная. Почти все формулы и решения даны в презентации лекции и в учебном пособии (страницы 38 и 39), но необходимо ещё учесть разную жёсткость пружинок, поэтому даю нужные формулы. Рассмотрим линейную цепочку. Если количество атомов в ячейке 2, период цепочки составляет уже  $2a$ .

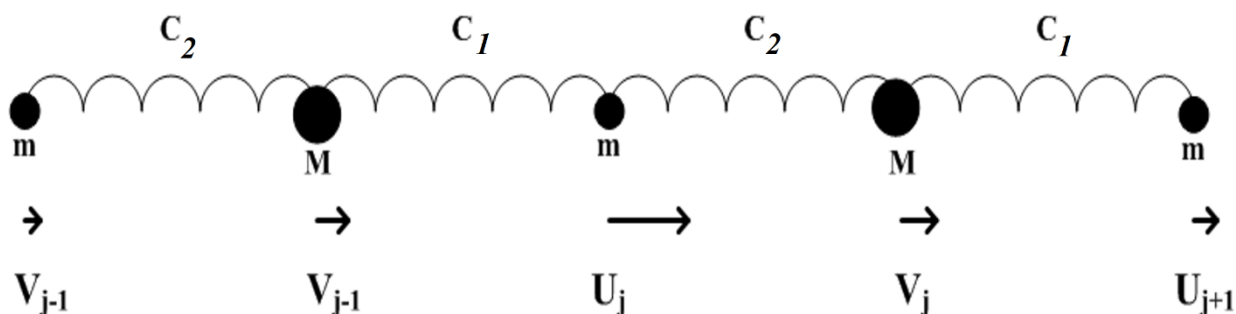


Рис. 1.1. Модель линейной цепочки, состоящей из двух атомов с разной массой и с разными жёсткостями пружинок.

Если, как показано на рис. 1.1, массы атомов и жесткости пружинок различаются, то уравнение движения разбивается на систему из двух уравнений. Тогда ускорения атомов:

$$\begin{aligned} \ddot{u}_j &= \frac{1}{m} (C_2(v_j - u_j) + C_1(v_{j-1} - u_j)), \\ \ddot{v}_j &= \frac{1}{M} (C_1(u_{j+1} - v_j) + C_2(u_j - v_j)). \end{aligned} \quad (1.1)$$

Здесь  $j$  – номер атома, жесткости пружинок –  $C_1$  и  $C_2$ , массы атомов составляют соответственно –  $m$  и  $M$ , длина пружинки в положении равновесия –  $a$ . Решение ищем в виде бегущих волн:

$$u_j = u_0 \cdot e^{i(jk2a - \omega t)} \text{ и } v_j = v_0 \cdot e^{i(jk2a - \omega t)}.$$

Система имеет ненулевое решение, если детерминант матрицы

$$\begin{vmatrix} C_1 + C_2 - m\omega^2 & C_2 + C_1 \cdot e^{-ik2a} \\ C_2 + C_1 \cdot e^{ik2a} & C_1 + C_2 - M\omega^2 \end{vmatrix}$$

равен нулю. Из равенства нулю детерминанта получается дисперсионное соотношение – зависимость частоты от волнового числа. В данном случае уравнение получается биквадратное:

$$\omega^4 - \frac{m+M}{mM} (C_1 + C_2) \cdot \omega^2 + \frac{4}{mM} C_1 \cdot C_2 \cdot \sin^2 k a$$

существует два решения:

$$\omega^2 = \frac{C_1+C_2}{mM} \cdot \left( \frac{m+M}{2} \pm \sqrt{\frac{(M+m)^2}{4} - \frac{4C_1 \cdot C_2}{(C_1+C_2)^2} Mm \cdot \sin^2 k a} \right). \quad (1.2)$$

В учебном пособии через косинус – можно проверить что обе формулы правильные. Там формула для одинаковой жёсткости.

Это собственные значения матрицы, их два. Найдём её собственные векторы. Отношение

$$\frac{v_0}{u_0} = - \frac{C_1+C_2-m\omega^2}{C_2+C_1 \cdot e^{-ik2a}}. \quad (1.3)$$

Как видно, это комплексное число, значит фазы колебаний лёгкого ( $m$ ) и тяжелого ( $M$ ) атомов отличаются! Нужно, чтобы программа находила 2 собственные частоты и соответствующие своему собственному значению (частоте) 2 набора собственных векторов – отношение амплитуд и сдвиг фаз. Обратите внимание, что в некоторых точках дисперсии значение амплитуды для отдельного (лёгкого или тяжёлого) атома может обращаться в ноль! Тогда в формуле 1.3 будет деление на ноль! Это нужно учесть.

Пользователь может задавать массы атомов и жёсткости пружинок, привожу требования из прошлых заданий:

- Жесткость  $C$  ( $10^3 \frac{\text{эрг}}{\text{см}^2}$ ) - такие единицы выбраны, потому что, если рассчитывать этот коэффициент, как  $C = \frac{[\text{энергия}]}{[\text{длина}^2]}$ , где за энергию возьмем энергию химической связи (порядка 10эВ), а длина – расстояние между атомами (1А), то получим, что жесткость должна быть порядка:

$$C = \frac{[\text{энергия}]}{[\text{длина}^2]} = \frac{1,6 \cdot 10^{-12} \text{эрг}}{(10^{-8} \text{см})^2} = 1,6 \cdot 10^4 \frac{\text{эрг}}{\text{см}^2}$$

- Расстояние между атомами в ангстремах

Массы атомов в единицах масс протона.

Пользователь выбирает моду – акустическая или оптическая, тип колебаний – продольные или поперечные (это для анимации). По умолчанию на экране нужно отображать колебания 12 атомов – 6 тяжёлых и 6 лёгких. Сделать опцию – увеличить количество показываемых атомов. Пусть ещё в отдельном окне отображается частота колебаний в Герцах. Возможная проблема в визуализации – это то, что для акустических мод в центре зоны Бриллюэна частота колебаний стремится к нулю, и на картинке атомы почти не движутся! Возможно сделать масштабирование по частоте? Программа должна показывать в какой точке дисперсии ищется решение – частота и собственные векторы.

Надо сделать очень хорошее наглядное представление, обязательно краткая понятная инструкция к программе – на какие кнопки нажимать, чтобы увидеть фононы разных веток – оптические или акустические, поперечные или продольные. **Должна быть красивая анимация – как движутся атомы.**

В общем задача на поиск собственных значений и собственных (комплексных!) векторов в матрице 2 на 2 и на красивую визуализацию этого решения в виде анимации колебаний. Примеры прошлых решений могу дать.

## Задача 2. Фононы в модели Китинга.

Проект на 2-х человек.

В модели Китинга (всю физику и формулу постараюсь объяснить – файлы выслать) находится энергия от смещения атомов кремния. Задаешь решетку кремния, константы жесткости «пружинок» и массы атомов. Составляется динамическая матрица. Программа должна находить собственные частоты и смещения атомов (собственные векторы) матрицы 6 на 6 в зависимости от задаваемого руками волнового вектора (то есть строить дисперсию). Программа должна визуализировать дисперсию в заданной плоскости. Пользователь задаёт плоскость и пределы волновых чисел и моду – оптическая (какая – продольная или одна из 2-х поперечных) или акустическая (какая). Сделать опцию вывода нескольких мод.

Демонстрацию я показывал. Там ошибка есть в одном месте. Надо сделать без ошибки.

## Задача 3. Одномерное уравнение Шрёдингера для конечного набора дельта-ям. Нахождение собственных значений энергии и волновых функций.

Уравнение Шрёдингера в одномерном случае –

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{\delta^2}{\delta x^2} + U(x) \right] \cdot \psi(x) = E \cdot \psi(x)$$

Так как все равно будем считать в «попугаях», то примем постоянную Планка за единицу, а массу за половинку:

$$\left[ -\frac{\delta^2}{\delta x^2} + U(x) \right] \cdot \psi(x) = E \cdot \psi(x)$$

Задаем количество дельта ям – N (до 5 включительно), их амплитуды A1, A2, A3, A4, A5 и расстояние между ними D1, D2, D3, D4. По умолчанию амплитуды равны и расстояния тоже. Но амплитуды можно сделать как отрицательные (ямы) так и положительные (барьеры).

Собственные значения ищем только отрицательные, значит решением являются растущие и спадающие экспоненты.

$$\psi_i(x) = C p_i \cdot e^{\alpha x} + C m_i \cdot e^{-\alpha x}$$

Где  $\alpha = \sqrt{-E}$ , напоминаю, что E отрицательное.

Слева от самой левой ямы (область 0) экспонента должна быть только растущей и справа от самой правой ямы (область N) экспонента должна быть только спадающей. То есть:

$$\begin{aligned} \psi_0(x) &= e^{\alpha x} \\ \psi_N(x) &= C_N \cdot e^{-\alpha x} \end{aligned}$$

В принципе, задачу можно решать перебором. Стартуем с какой-то энергии E. Значит  $\alpha$  известен, решение в области 0 известно. Константы  $C p_1$  и  $C m_2$  находим из граничных условий. Первое – сама функция непрерывна. Второе – ее производная терпит разрыв (так как яму дельта-функция). То есть разница производной функции слева и справа равна минус амплитуде, для первой ямы то есть A1.

$$\frac{\delta \psi_0(x)}{\delta x} - \frac{\delta \psi_1(x)}{\delta x} = A1, \quad \psi_0(x) - \psi_1(x) = 0, \quad \text{в точке } x=0$$

При этом обратите внимание что функция  $\psi_1(x)$ , содержит уже 2 экспоненты, 2 неизвестные константы.

То есть все нормально, 2 граничных условия – 2 уравнения и 2 константы определяем. Так последовательно идем до крайней правой ямы, а там всего одна константа! То есть если из граничных условий константа при растущей экспоненте не зануляется, значит энергия неправильная.

Тут ваше искусство как правильно выбрать шаг, чтобы не мельчить, но и не проскочить решение.

Программа должна уметь строить само расположение ям, строить уровни энергии и волновые функции - пометать разным цветом уровень энергии и соответствующую ему волновую функцию. Должна быть опция – строй квадрат волновой функции. Должна быть автонормировка, чтобы удобно было смотреть. Должна быть опция сохранения конфигурации ям – чтобы каждый раз не набивать. А также опция – задай количество ям от 1 до 5 одинаковой глубины и на одинаковом расстоянии (это уже было по умолчанию).

#### **Задача 4. Одномерное уравнение Шрёдингера для периодического набора дельта-ям. Нахождение собственных значений энергии и волновых функций.**

Уравнение Шрёдингера в одномерном случае –

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{\delta^2}{\delta x^2} + U(x) \right] \cdot \psi(x) = E \cdot \psi(x)$$

Задаем расстояние между дельта ямами – а, и их амплитуда аV. Тогда уравнение Шрёдингера для периодического набора дельта-ям:

$$\frac{\delta^2 \psi(x)}{\delta x^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left[ E - aV \sum_{n=-\infty}^{n=+\infty} \delta(x - an) \right] \cdot \psi(x) = 0$$

В точках, где расположены дельта-ямы волновая функция терпит скачок производной.

Найдем скачок производной в точке  $x=0$ :  $\frac{2m}{\hbar^2} aV \cdot \psi(0) = \beta^2 a \cdot \psi(0)$ , где  $\beta^2 = \frac{2mV}{\hbar^2}$

В первом промежутке  $0 < x < a$  решением являются экспоненты:

$$\psi(x) = A \cdot e^{i\alpha x} + B \cdot e^{-i\alpha x} \quad \text{где } \alpha^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

По теореме Блоха  $\psi(a) = \psi(0) \cdot e^{ika}$

Тогда, первое условие на константы А и В:

$$A \cdot e^{i\alpha a} + B \cdot e^{-i\alpha a} = (A + B) \cdot e^{ika}$$

Второе условие из скачка производной:

$$i\alpha A - i\alpha B - e^{-ika} (i\alpha A e^{i\alpha a} - i\alpha B e^{-i\alpha a}) = \beta^2 a \cdot (A + B)$$

Получаем систему 2 уравнения - 2 неизвестных.

$$\begin{aligned} A(1 - e^{-i\alpha(k-\alpha)}) + B(1 - e^{-i\alpha(k+\alpha)}) &= 0 \\ A(-\beta^2 a + i\alpha(1 - e^{-i\alpha(k-\alpha)})) + B(-\beta^2 a - i\alpha(1 - e^{-i\alpha(k+\alpha)})) &= 0 \end{aligned}$$

Система имеет решение, если детерминант матрицы равен нулю. Отсюда в неявном виде дисперсионное соотношение:

$$\cos(ka) = \frac{\beta^2}{2\alpha} \sin(\alpha a) + \cos(\alpha a)$$

Так как все равно будем считать в «попугаях», то примем постоянную Планка за единицу, а массу за половинку, тогда:

$$\cos(ka) = \frac{V}{2\sqrt{E}} \sin(\sqrt{E}a) + \cos(\sqrt{E}a)$$

Ваша задача из этого неявного выражения построить дисперсию – зависимость E от k.

Волновое число k надо брать в пределах от  $-\pi/a$  до  $+\pi/a$ . Учтите, что энергия может быть и отрицательной, в случае отрицательных значений V будет одна разрешенная зона со

значениями энергии меньше нуля. Программа сама должна находить разрешенные собственные значения  $E$ , рисовать дисперсионные кривые.

Пользователь может менять значения  $a$  и  $V$ . Программа должна уметь строить и волновые функции. Должна быть опция – строй квадрат волновой функции, реальную часть либо мнимую часть. Должна быть автонормировка, чтобы удобно было смотреть. Волновых функций бесконечно много – поэтому должна быть опция – мышкой выбираешь на дисперсионной кривой точку, программа строит для нее волновую функцию.

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

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

Вводятся параметры кремния – запрещённая зона  $E_g$ , 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  $E_d$ , концентрация доноров  $N_{d0}$  (задаётся от  $10^{15}$  до  $10^{22}$  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:

$$n = \int_{\varepsilon_c}^{\infty} f(\varepsilon) \cdot g(\varepsilon) d\varepsilon. \quad (5.1)$$

$$f(\varepsilon) = \frac{1}{1 + e^{\frac{\varepsilon - \mu}{kT}}},$$

здесь  $0 \leq f(\varepsilon) \leq 1$  – вероятность заполнения электроном состояния с заданной энергией  $\varepsilon$  (число заполнения),  $\mu$  – электрохимический потенциал, называемый также уровень Ферми (обозначается также  $\varepsilon_f$ ).

$$g(\varepsilon) = \frac{\sqrt{(2m_{\square}^*)^3}}{2\pi^2\hbar^3} \sqrt{\varepsilon - \varepsilon_c} = 4\pi \frac{\sqrt{(2m_{\square}^*)^3}}{\hbar^3} \sqrt{\varepsilon - \varepsilon_c}.$$

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

Доля заряженных доноров определяется положением уровня Ферми

$$N_d^+ = N_{d0} \frac{1}{1 + e^{\frac{E_g - E_d - \mu}{kT}}}. \quad (5.2)$$

Положение уровня Ферми находится из уравнения электронейтральности

$$N_d^+ + p = n. \quad (5.3)$$

Здесь как видите акцепторов нет, концентрация дырок  $p$ .

Для кремния -

$$N_c = 2,51 \cdot 10^{19} \left( \frac{m_c}{m_0} \right)^{3/2} \left( \frac{T}{300} \right)^{3/2} \cdot \text{см}^{-3}$$

$$p = N_v \cdot e^{\frac{-\mu}{kT}}.$$

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 численно.

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 10К до 1200 К. 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 Изгиб зон полупроводника при обеднении.

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

Вводятся параметры полупроводника (по умолчанию это кремний – данные дам, и можно также пользоваться ссылками из задачи 4) – запрещённая зона  $E_g$ , диэлектрическая проницаемость  $\epsilon$ , эффективные массы плотности состояний в долинах для дырок и для электронов, положение уровня донора  $E_d$ , концентрация доноров  $N_{d0}$ , температура  $T$ . Вводятся плотность поверхностных акцепторов  $N_{as}$  и их положение уровня энергии  $E_{as}$ . Вводится внешнее поле  $U_{out}$  в вольтах.

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.

$$N_{C(V)} = 2,51 \cdot 10^{19} \left( \frac{m_{C(V)}}{m_0} \right)^{3/2} \left( \frac{T}{300} \right)^{3/2} \cdot \text{см}^{-3}$$

Положение уровня Ферми в квазинейтральном объёме находим из электронейтральности:

$$n = N_C \cdot e^{\frac{\mu - E_g}{kT}} \quad p = N_V \cdot e^{\frac{-\mu}{kT}}$$

Доля заряженных доноров определяется положением уровня Ферми

$$N_d^+ = N_{d0} \frac{1}{1 + e^{\frac{E_g - E_d - \mu}{kT}}}$$

Положение уровня Ферми находится из уравнения  $N_d^+ + p = n$

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

$$N_{as}^+ = N_{as} \frac{1}{1 + e^{\frac{E_{as} + \phi_s - \mu}{kT}}} - \text{это количество заряженных поверхностных акцепторов, поле,}$$

создаваемое ими  $E_{as\max}^+$ . Глубина ОПЗ при обеднении  $W = \sqrt{\frac{\epsilon \phi_s}{2\pi e^2 N_d}}$ , поверхностный

заряд ОПЗ  $N_{d0} W e$ . Изгиб зон  $\phi_s$  ищем из равенства  $\sqrt{\frac{\epsilon \phi_s N_{d0}}{2\pi e^2}} = N_{as} \frac{1}{1 + e^{\frac{E_{as} + \phi_s - \mu}{kT}}}$ .

Если есть внешний потенциал  $U_{out}$ , то глубина ОПЗ при обеднении:

$$W = \sqrt{\frac{\epsilon(\phi_s + U_{out})}{2\pi e^2 N_d}}$$

Программа должна находить положение уровня Ферми в квазинейтральном объёме, изгибы зон  $\phi_s$  без внешнего потенциала. И глубину ОПЗ при нулевом и при заданном внешнем потенциале и строить зонные диаграммы с изгибами.

**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. Все задачи (включая 6) можно будет сделать после изучения теории до лекции 10 – диод Шоттки. Успехов!

Володин.

10 октября 2024 г.