

4 APLIKACJA WEBOWA

Przedstawione dotychczas zagadnienia zostały zebrane i zautomatyzowane pod względem obliczeniowym do postaci aplikacji webowej, tak aby finalnie możliwe było zasymulowanie charakterystyki prądowo-napięciowej dla zadanych półprzewodnikowych struktur planarnych. Typ aplikacji został wybrany głównie w oparciu o elastyczność, można z niej korzystać ze smartfona, tabletu, laptopa, czy każdego innego urządzenia, które zapewnia komunikację siecią lub inicjowanie serwera lokalnego. Co więcej, aplikacja ta umieszczona na zewnętrznym serwerze nie będzie korzystała z zasobów obliczeniowych klienta, zapewniając tym samym swobodę działania podczas oczekiwania na wyniki. Aplikacja niestety nie jest jeszcze przystosowana do otwierania w oknach o małej rozdzielczości a więc nie koniecznie będzie ona poprawnie wyglądać w niewielkich wyświetlaczach.

Aplikacja głównej mierze została napisana w języku Python (v.3.9.7). U swoich podstaw wykorzystuje framework Django. Do tego korzysta z wielu pakietów wspierających obliczenia, m.in. za wizualizację danych odpowiada pakiet Plotly (v.5.3.1). Lista wszystkich wykorzystanych Pythonowych pakietów znajduje się w pliku *requirements.txt* w głównym katalogu aplikacji. Za interfejs odpowiada oczywiście strona WWW napisana w języku HTML5 i otwierana w przeglądarce internetowej, wspierana od strony wizualnej poprzez wykorzystanie języka CSS. Przy tym całą dynamikę oraz interakcję z warstwą Pythona zapewniają kody napisane w języku JavaScript, z dołączoną biblioteką jQuery (v3.6.0). Aplikacja choć jest ukończona, to wciąż zawiera elementy, które można usprawnić czy zoptymalizować a przede wszystkim jej kod należy jeszcze oczyścić i dołączyć do niego adekwatne komentarze. Cały kod źródłowy aplikacji dostępny jest na platformie GitHub, pod adresem [1].

4.1 URUCHOMIENIE APLIKACJI

W przypadku gdy aplikacja jest zdeponowana na zewnętrznym serwerze sieciowym, wystarczy wejść na odpowiednią stronę WWW, wykorzystując przeglądarkę internetową.

Aplikację można uruchomić także lokalnie, bez dostępu do internetu. Wymagana jest tu jednak obecność Pythona i pakietu na urządzeniu, z którego uruchamia się aplikację. Przykładowa procedura w nowszych systemach operacyjnych Windows może wyglądać tak:

I. Uruchomienie powłoki systemowej PowerShell:

```
C : \WINDOWS\system32 >
```

II. Przejście do głównego katalogu aplikacji:

```
C : \WINDOWS\system32 > cd ~
```

```
C : \Users\User >
```

```
C : \Users\User > cd application
```

```
C : \Users\User\application >
```

III. Aktywacja wirtualnego środowiska venv:

```
C : \Users\User\application > venv/scripts/activate
```

```
(venv) C : \Users\User\application >
```

IV. Uruchomienie lokalnego serwera:

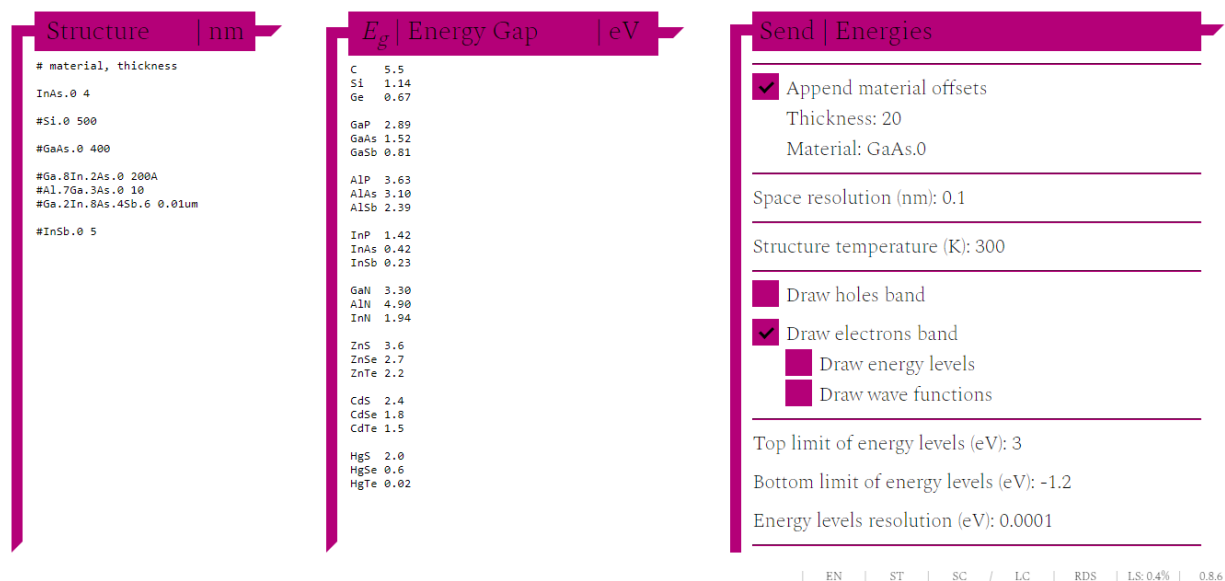
```
(venv) C : \Users\User\application > py manage.py runserver
```

V. Postępowanie według dalszych instrukcji, otwarcie przeglądarki i przejście na wskazany adres.

4.2 OBSŁUGA APLIKACJI

Okno aplikacji zawiera trzy mniejsze okna oraz pasek ustawień. Wymiary każdego okna da się regulować kursorem po najechnaniu na jego krawędź, funkcję tę można rozpoznać po zmianie kursora. Co więcej odkrywają się wtedy odpowiednie przyciski pozwalające na ukrycie okna. Pasek ustawień jest ogólnie niewidoczny, uaktywnia się dopiero po najechnaniu na dolną krawędź okna aplikacji.

Wszelkie zmiany wprowadzone przez użytkownika nie nikną a są zapisywane w lokalnej bazie danych przeglądarki internetowej, w której działa aplikacja. Dlatego należy uważać podczas czyszczenia danych przeglądarki, gdyż wszystkie istotne parametry czy podana struktura kryształu może bezpowrotnie zniknąć. Co więcej, każda przeglądarka korzysta z własnej bazy danych a więc zmiany w aplikacji wprowadzone na jednej przeglądarce nie będą widoczne na innej.



Rysunek 4.1. Widok domyślny okna aplikacji.

4.3 OBSŁUGA APLIKACJI. PASEK USTAWIENÍ GLOBALNYCH

Po najechnaniu kursorem na dolną krawędź okna aplikacji odsłania się pasek ustawień globalnych aplikacji. Składają się na niego przyciski, z których część jest nieaktywna i pełni jedynie informacyjną rolę. Widać tam kolejno inicjały, których opis pokazuje się po utrzymaniu kursora dostatecznie długo nad przyciskiem, są to kolejno:

- EN* - język aplikacji, aktualnie tylko jeden do wyboru
- ST* - zmienia motyw/kolorystykę aplikacji, trzy różne do wyboru
- SC* - zapisuje na urządzeniu plik zawierający podają przez użytkownika strukturę kryształu oraz właściwości materiałowe
- LC* - daje możliwość wczytania tego zapisanego pliku, po czym następuje nadpisanie podanej struktury kryształu oraz właściwości materiału zawartością pliku
- RDS* - przywracane są ustawienia standardowe aplikacji
- LS : 0.4%* - zużycie pamięci lokalnej bazy danych przeglądarki, maksymalny rozmiar to zwykle około 5-10 MB
- 0.8.6* - wersja aplikacji

4.4 OBSŁUGA APLIKACJI. OKNO DEFINIUJĄCE STRUKTURĘ PLANARNĄ

Nad paskiem ustawień widoczne są trzy okna, z których to po lewej stronie odpowiada za definiowanie przez użytkownika struktury kryształu planarnego. Na okno składa się z pasek tytułowy oraz pole tekstowe.

Pasek można zwinąć poprzez podwójne kliknięcie na niego a po jego prawej stronie oddzielona jest symbolem „|” jednostka długości, w której definiowane są poszczególne warstwy kryształu. Po najechaniu na nią kursorem rozwija się pasek, z którego można wybrać interesującą użytkownika jednostkę (Å, nm, µm).

W polu tekstowym obowiązuje pewna konwencja co do definiowania warstw kryształu:

- W jednym wierszu można zadać maksymalnie jedną warstwę materiałową
- Zadana warstwa materiału powinna zaczynać się wraz z początkiem wiersza
- Symbol # zapoczątkowuje komentarz, który kończy się wraz z końcem wiersza
- Kolejne wiersze to kolejne warstwy od podłoża kryształu
- Warstwę materiału zadaje się poprzez podanie jej materiału i grubości oddzielonej spacją
- Jednostka grubości warstwy materiału jest ustalona na pasku tytułowym okna
- Jednostkę grubości warstwy materiału można nadpisać, podając np. 3Å, 10nm, 1µm, ...
- Materiałem warstwy może być pierwiastek, związek czy stop półprzewodnikowy
- Materiałem warstwy może być stop półprzewodnikowy co najwyżej czteroskładnikowy
- Elementy materiału warstwy definiuje się z użyciem stosunków ilościowych np.:
 - Si.0 (od Si_{1.0} czy Si)
 - AlAs.0 (od AlAs_{1.0} czy AlAs)
 - Si.2C.8 (od Si_{0.2}C_{0.8})
 - Al.4Ga.6As.0 (od Al_{0.4}Ga_{0.6}As)
 - Al.5Ga.3In.2As.0 (od Al_{0.5}Ga_{0.3}In_{0.2}As)

o $\text{Al}_{0.6}\text{Ga}_{0.4}\text{As}_{0.3}\text{Sb}_{0.7}$ (od $\text{Al}_{0.6}\text{Ga}_{0.4}\text{As}_{0.3}\text{Sb}_{0.7}$)

Strukturę kryształu można też wczytać z pliku poprzez podwójne kliknięcie kursorem na pole tekstowe.

4.5 OBSŁUGA APLIKACJI. OKNO WŁAŚCIWOŚCI MATERIAŁOWYCH

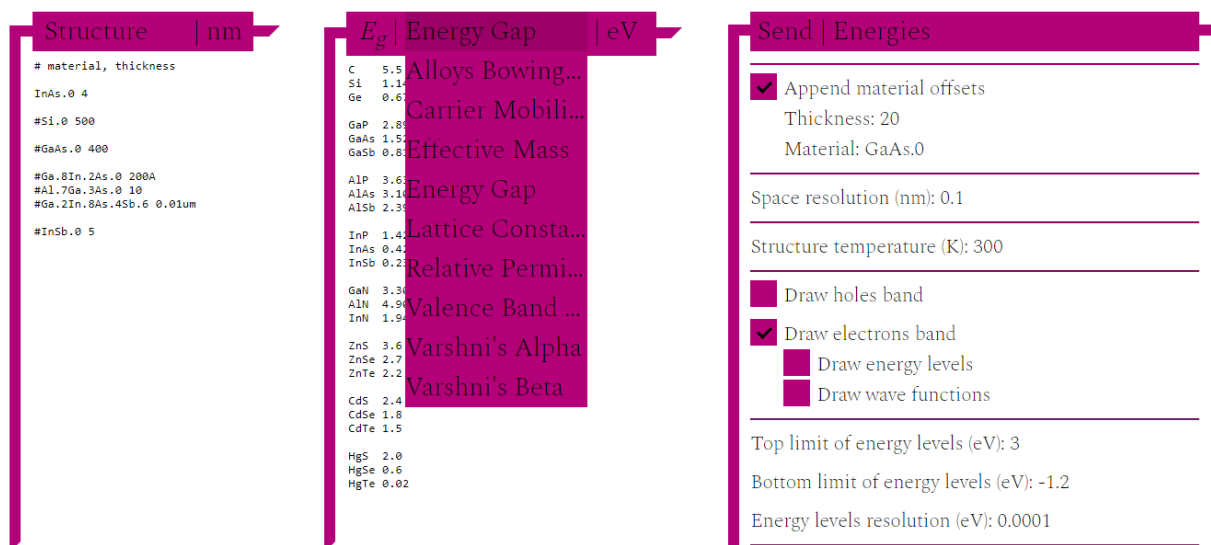
Obok okna definiującego strukturę kryształu, po środku znajduje się okno zawierające właściwości materiałów. Podobnie jak poprzednie okno, składa się ono z pola tekstowego oraz paska tytułowego.

W środkowej części paska tytułowego widnieje nazwa wielkości, którą użytkownik zadaje dla poszczególnych materiałów w polu tekstowym. Z lewej strony pokazany jest symbol tej wielkości a po prawej stronie jednostka, oddzielone są one symbolami „|”. Po najechaniu kursorem na nazwę właściwości materiałowej rozwija się lista innych możliwych do wyboru wielkości. Wszystkie je można oczywiście przeglądać oraz edytować.

W polu tekstowym okna właściwości materiałowych panuje podobna konwencja co w polu tekstowym okna definiującego strukturę kryształu:

- W jednym wierszu można zadać maksymalnie jedną wartość dla jednego materiału
- Najpierw podawany jest materiał a dalej wartość oddzielona od materiału spacją
- Symbol # zaczyna komentarz

Ta konwencja w polu tekstowym nie występuje jednak dla wszystkich wielkości, dla niektórych obowiązuje szyk JSON. Na końcu można przytoczyć jeszcze jedno podobieństwo; dwukrotne kliknięcie na pole tekstowe daje możliwość wczytania pliku tekstowego nadpisującego pole.

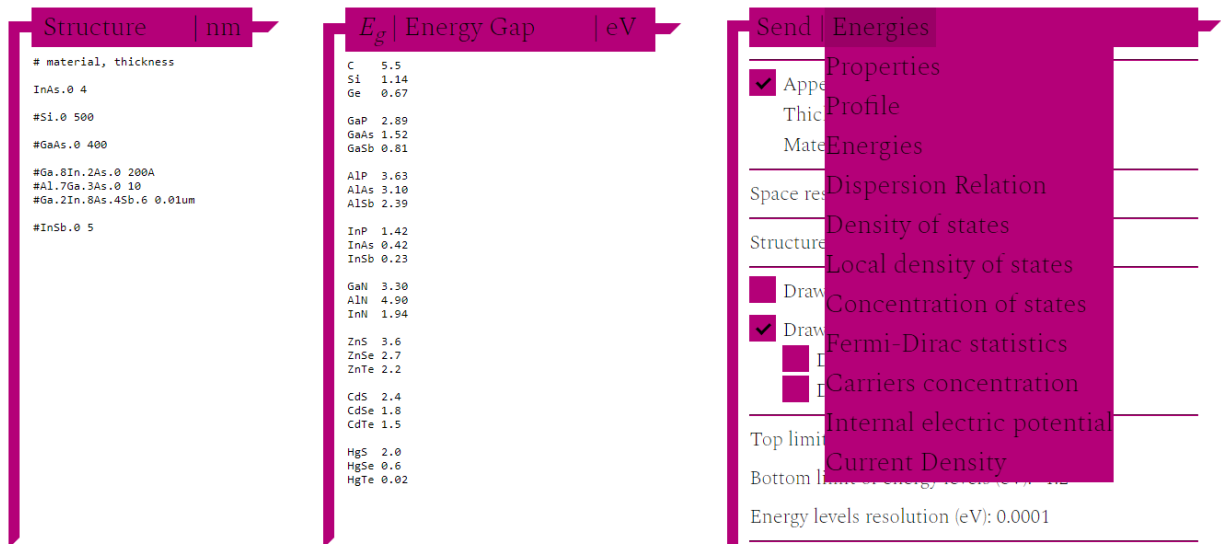


Rysunek 4.2. Widok aplikacji z rozwiniętą listą wielkości w oknie właściwości materiałowych.

4.6 OBSŁUGA APLIKACJI. OKNO GENEROWANIA WYKRESÓW

Ostatnie już okno, po prawej stronie, odpowiada za generowanie wybranych zależności występujących w kryształach zadanych w pierwszym oknie, na podstawie właściwości materiałowych z okna środkowego. Warto tu od razu zaznaczyć, że wszystkie materiały zadane w oknie definiującym kryształ powinny mieć przypisane wartości dla wszystkich wielkości z rozwijanej listy paska tytułowego środkowego okna właściwości materiałowych, w innym przypadku grozi to potencjalnym pojawieniem się błędów w aplikacji, czasem niewidocznych dla użytkownika, nie tylko przy próbie wygenerowania charakterystyki prądowo-napięciowej.

Tak jak w dwóch poprzednich oknach, tak i w tym występuje pasek tytułowy. Składa się na niego przycisk „Send” oraz oddzielona symbolem „|” nazwa zależności, która ma zostać wygenerowana w postaci wykresu, po kliknięciu kursorem na przycisku „Send”. Jest wiele typów zależności możliwych do wygenerowania, interesujący typ wybiera się z listy rozwijanej po najechaniu kursorem na nazwę. Przy generowaniu jakiejś zależności, należy wybrać parametry pokazane pod



Rysunek 4.3. Widok aplikacji z rozwiniętą listą typów w oknie generowania zależności.

paskiem tytułowym okna. Przy czym zaleca się pewną praktykę; generowanie zależności powinno zacząć się od pierwszej zakładki *Properties*, i przechodzić przez kolejne, aż do wybranej. Przy tym w każdej zakładce należy dostrajać parametry tak aby uzyskiwać zadowalające wyniki, inaczej często pojawiają się komplikacje. Parametry do regulowania w jednej zakładce dziedziczone są na kolejną.

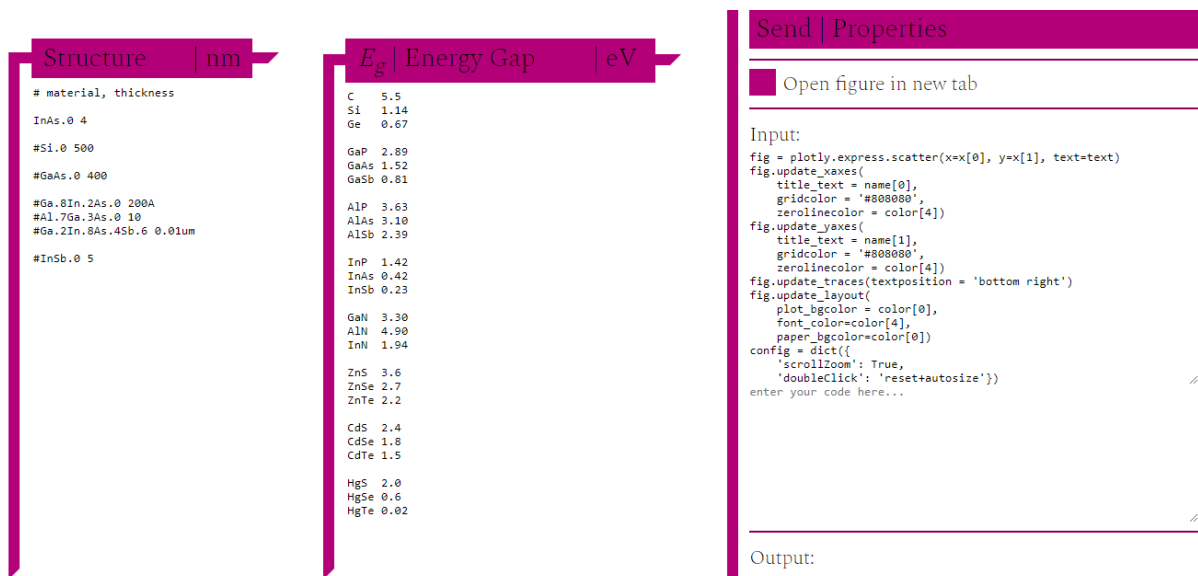
4.6.1 Properties

Pierwsza zakładka ma na celu wizualizację danych ze środkowego okna aplikacji. Pojawiają się tu opcje do zaznaczenia, jak *W-axis*: itd., z których każdą można wybrać wedle uznania. Na końcu widać opcję *Open figure in new tab*; gdy jest ona odznaczona, wygenerowany wykres widoczny będzie w tym samym oknie aplikacji, po zaznaczeniu wykres pokaże się w nowej karcie przeglądarki.

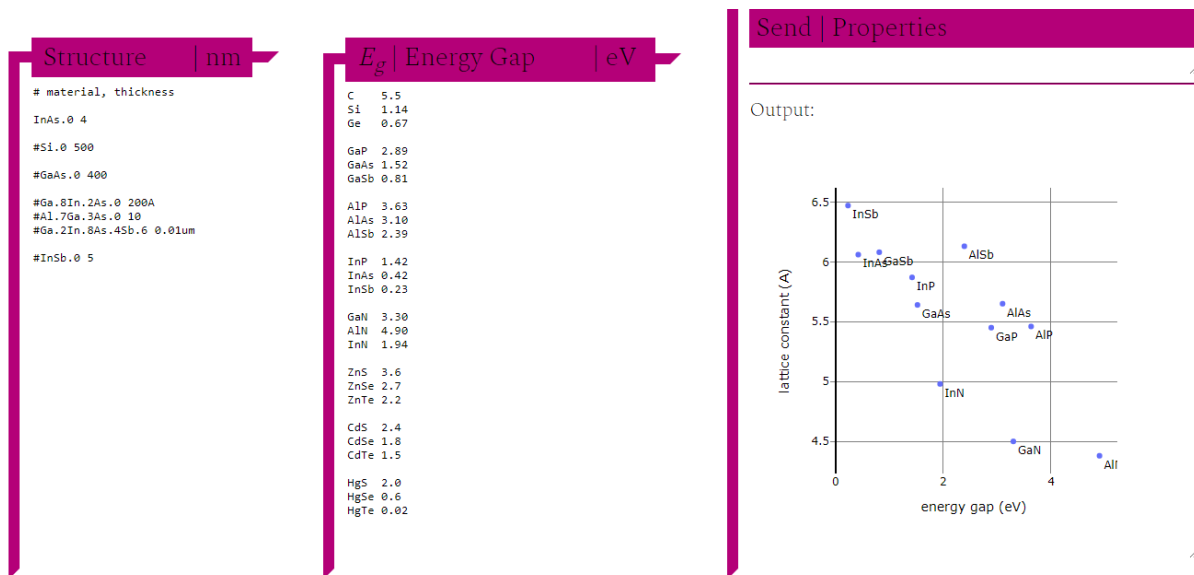


Rysunek 4.4. Widok aplikacji z zakładką *Properties*.

Przed wygenerowanym wykresem widnieje sekcja *Input*:. Znajduje się tam kod odpowiedzialny za wykres. Nadpisując go, można dostosować wykres wedle własnego upodobania. Na końcu zawsze



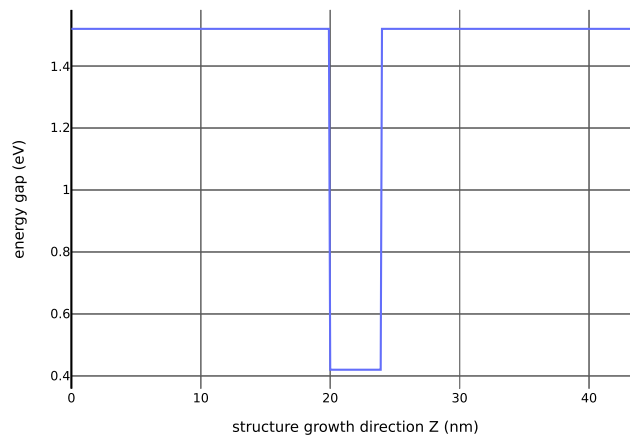
Rysunek 4.5. Widok aplikacji z zakładką *Properties* po wygenerowaniu wykresu z widoczną sekcją *Input*:.
pokazywane są wykresy.



Rysunek 4.6. Widok aplikacji z zakładką *Properties* z widocznym wygenerowanym wykresem.

4.6.2 Profile

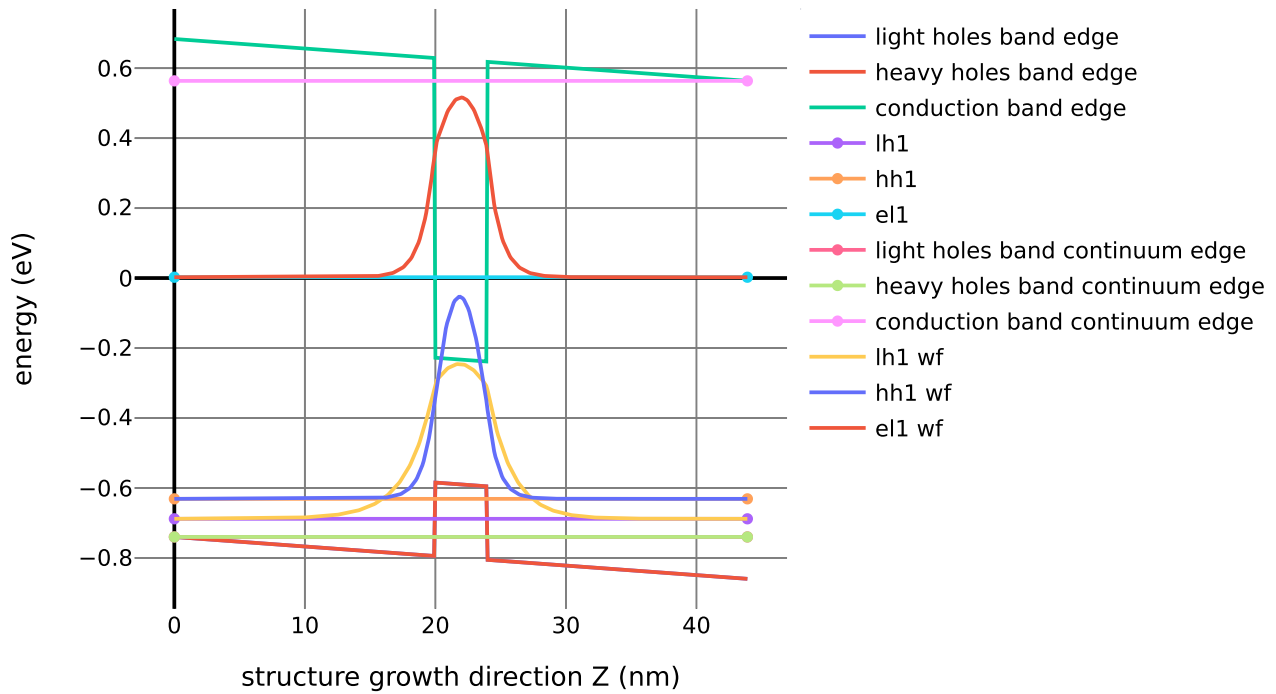
Ta oraz kolejne zakładki wykorzystują już wszystkie okna aplikacji. Pierwszą opcją jest tu *Append material offsets* - dołącza ona na końcu i na początku struktury planarnej, zadanej w pierwszym oknie, wybrany materiał tak, że cały kryształ traktowany jest jako lity. Dlatego należy wybrać stosunkowo duże długości tego przyłączanego materiału. Kolejną opcją jest *Space resolution*:, tyczy się ona kroku siatki długości kryształu, na której generowany jest profil przedstawiony równaniem 3.2. Interesujący parametr wybiera się rozwijaną opcją *Property*:-



Rysunek 4.7. Przykładowy profil energii przerwy wzbronionej w dla GaAs/InAs/GaAs.

4.6.3 Energies

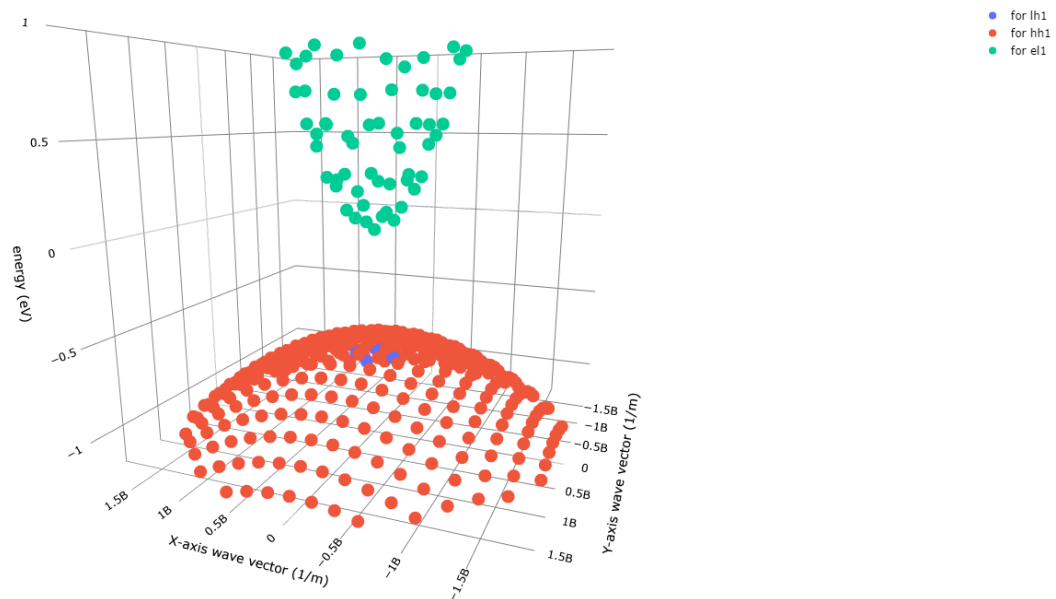
W zakładce *Energies* generowane są wykresy przedstawiające profil energetyczny kryształu wraz z ewentualnymi skwantowanymi poziomami energetycznymi i funkcjami falowymi stanów związanych w cienkiej warstwie. Wyznaczone są one metodą Martina-Deana. Wśród opcje jest *Crystal temperature (K)*.; zmienia ona energię przerwy energetycznej E_g zgodnie z równaniem 2.3. Dalsza opcja dotyczy wyboru interesującego zakres energii z określoną rozdzielczością, na którym mają zostać wyznaczone ewentualne poziomy energetyczne. W przedostatniej opcji określany jest potencjał przyłożonego do kryształu jednorodnego pola elektrycznego, wpływa on na energię potencjalną nośników i na poziomy energetyczne, jak to pokazuje równanie 3.12. Ostatnia opcja ustala wektor falowy k_{xy} nośników, co zwiększa ich energię o nowe człony, zgodnie z relacją 3.13.



Rysunek 4.8. Przykładowy profil energetyczny kryształu w temperaturze 300 K z przyłożonym polem elektrycznym.

4.6.4 Dispersion Relation

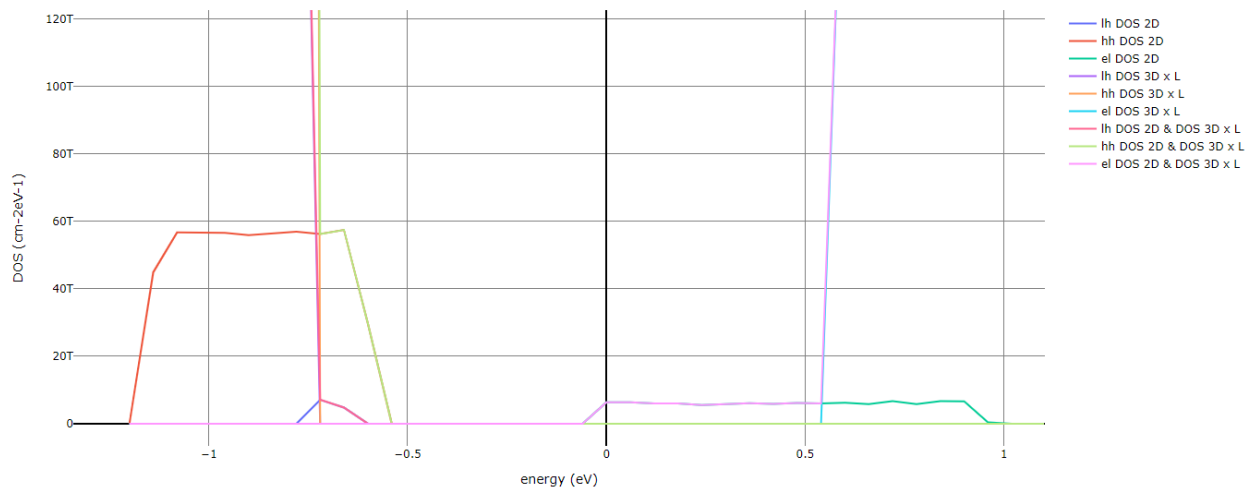
W zakładce *Dispersion Relation* generowane są wykresy w oparciu o równanie 3.13, dla stanów związanych. Nową opcją jest tu ta określająca siatkę wektorów k_x oraz k_y . Bardzo ważne jest tu ustalenie odpowiedniego zakresu tych parametrów, tak aby „paraboloidy” na wykresie nie były w żaden sposób ograniczone, oprócz ograniczenia energetycznego. Przy tym należy ustalać jedną granicę wektora falowego po stronie ujemniej a drugą po dodatniej, ze względu na zastosowaną metodę numeryczną.



Rysunek 4.9. Przykładowy relacja dyspersji.

4.6.5 Density of states

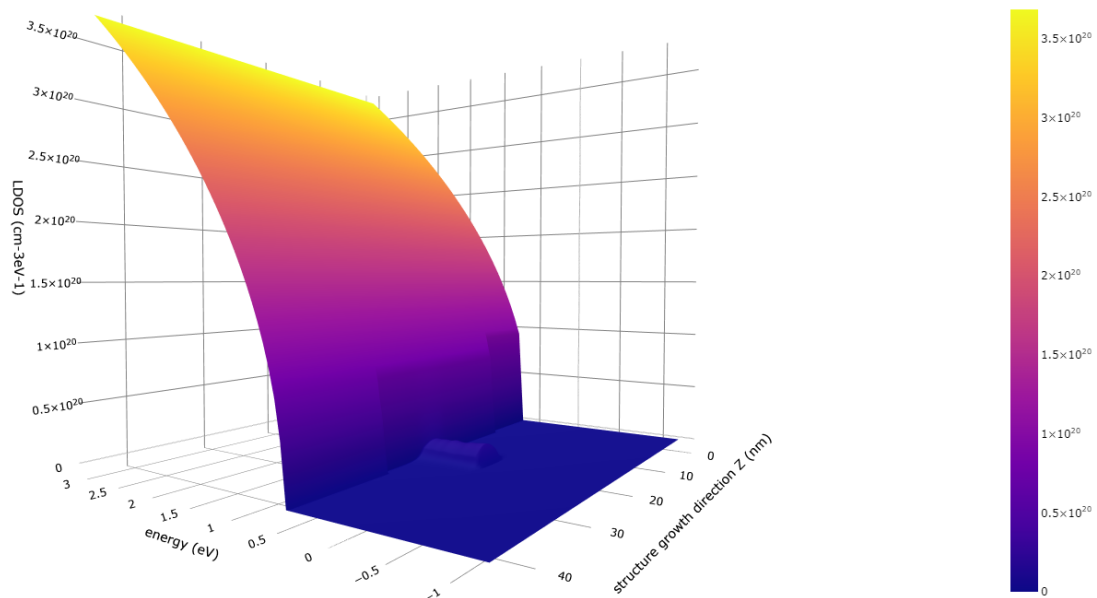
Kolejna zakładka dotyczy się wyznaczenia gęstości stanów w kryształach w oparciu o równania 3.23 i 3.28. Podejście numeryczne pociąga za sobą występowanie niedokładnych wartości, dlatego należy dobierać parametry $DOSu$ w opcjach tak, by wygenerowany wykres przypominał jak najbardziej też z podejścia analitycznego.



Rysunek 4.10. Przykładowe gęstości stanów dla stanów związanych i stanów continuum.

4.6.6 Local density of states

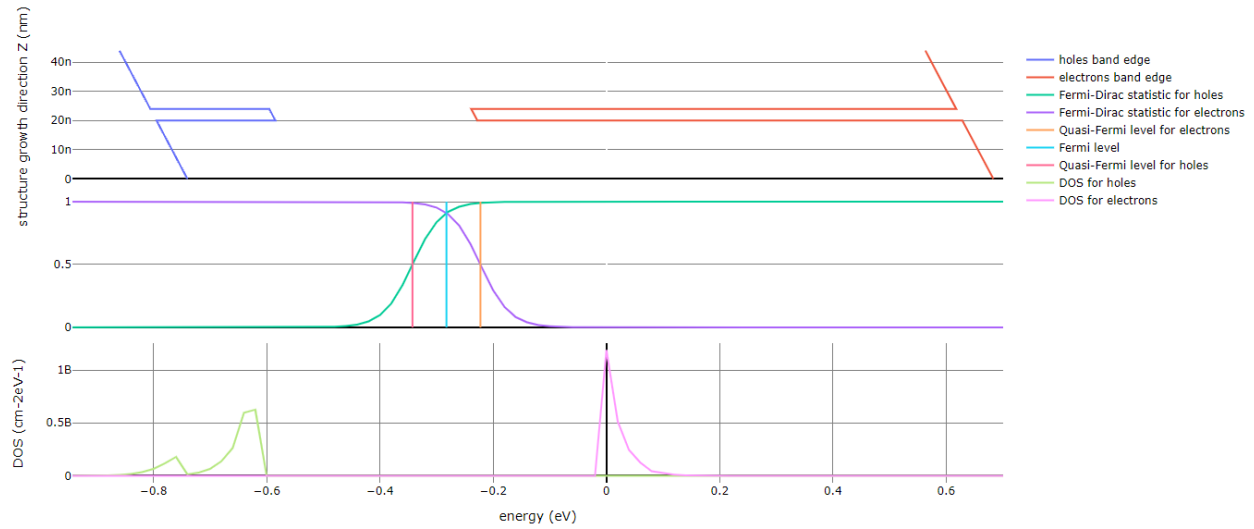
Kolejna zakładka jest bardzo podobna do poprzedniej tyle, że generowana są przez nią lokalne gęstości stanów, jak to opisuje równanie 3.28 i 3.30.



Rysunek 4.11. Przykładowe lokalne gęstości stanów elektronowych.

4.6.7 Fermi-Dirac statistics

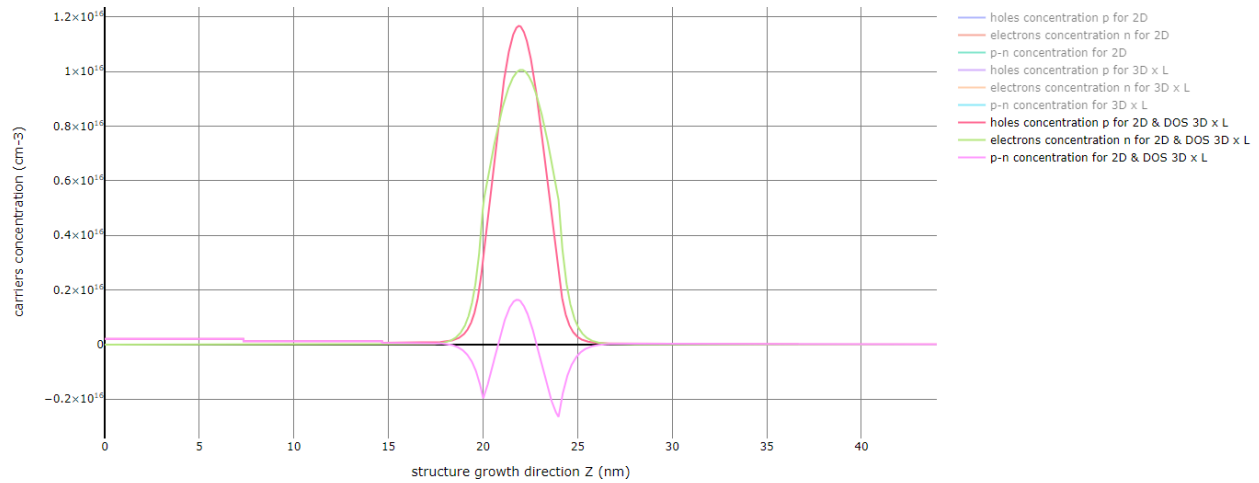
Zakładka *Fermi-Dirac statistics* ma za zadanie generować ustalać quasi-poziomy Fermiego w kryształach jedną z dwóch metod. Odbyna się to w oparciu o równanie 3.36 oraz 3.37, przy czym statystyki Fermiego-Diraca generowane są ze wzoru 3.33.



Rysunek 4.12. Przykładowe krawędzie pasm nośników, statystyki FermiegoDiraca oraz faktyczne obsadzenie stanów w kryształ w zewnętrznym polu elektrycznym.

4.6.8 Carriers concentration

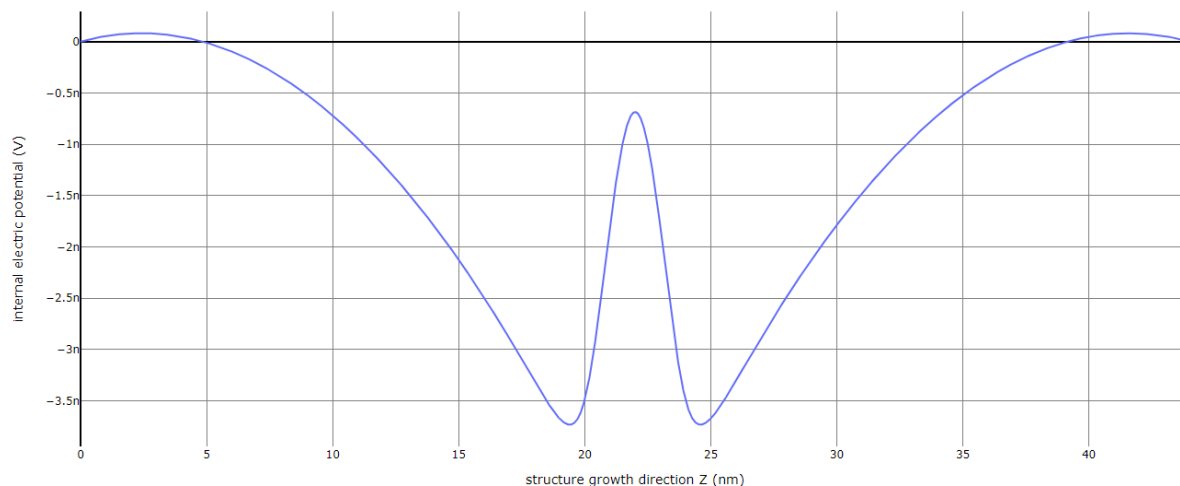
Ta zakładka ma odpowiadać za generowanie lokalnych koncentracji nośników w kryształ. Obliczenia przeprowadzane są w oparciu o relację 3.38.



Rysunek 4.13. Przykładowe lokalne koncentracje nośników w kryształ z przyłożonym polem elektrycznym.

4.6.9 Internal electric potential

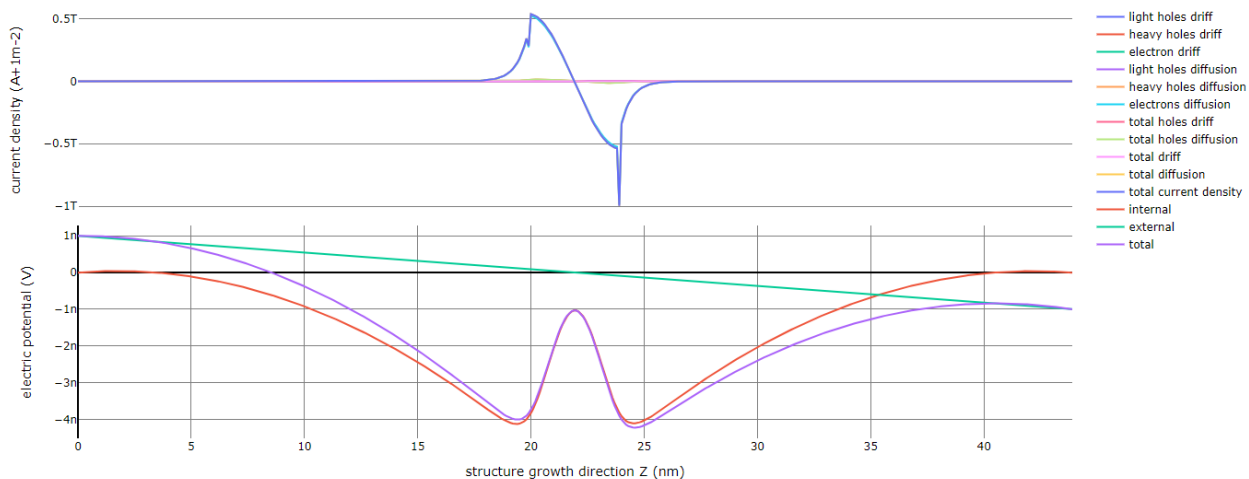
Przedostatnia zakładka *Internal electric potential* umożliwia wygenerowanie charakterystyki potencjału elektrycznego pochodzącego od nośników w kryształ. Realizowane jest to w oparciu o równanie 3.39 przy czym, ze względu na zachowanie ciągłości należy ustalać jednakowe warunki brzegowe w równaniu Poissona i dla zewnętrznego pola elektrycznego.



Rysunek 4.14. Przykładowy rozkład potencjału elektrycznego pochodzącego od nośników w kryształach.

4.6.10 Current density

Ostatnia zakładka dotyczy generowania charakterystyk prądowych w kryształach. Opiera się to na równaniu 3.67. Po zaznaczeniu opcji *Append electric potential graph* zostanie dodana ustalona już wcześniej charakterystyka napięciowa a cały wykres przybierze format charakterystyki prądowo-napięciowej kryształu.



Rysunek 4.15. Przykładowa charakterystyka prądowo-napięciowa.