Задачи на автомат 2021

Требования к проектам: Программы должны работать 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 студентом.

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:

$$\Omega_p=rac{e}{c}\sqrt{rac{4\pi N}{m*\cdot arepsilon_{\infty}}}$$
 где $N-$ объёмная концентрация носителей заряда, $e-$ заряд электрона

 $(4.8*10^{-10}~{\rm eg.~C\Gamma C})$, с -скорость света в СГС $-2.998\cdot10^{10}~{\rm cm/c}$, m*- эффективная масса, ε_{∞} - диэлектрическая проницаемость для частот много больше фононных (но меньше оптических частот) — меняется от 1 до 100.

$$\varepsilon_{total}(\omega) = \varepsilon_{\infty} \left(1 + \frac{\omega_{LO}^2 - \omega_{TO}^2}{\omega_{TO}^2 - \omega^2 - i\omega\Gamma_1} - \frac{\Omega_p^2}{\omega^2 + i\omega\Gamma_0}\right)$$

Задаётся –

- 1) концентрация носителей заряда в см $^{-3}$ (задаётся в пределах от нуля до 5 на 10^{22});
- 2) масса носителей заряда в массах свободного электрона программа умножает введенное число на $9.1*10^{-28}$ (это масса электрона в граммах);
- 3) ε_{∞} диэлектрическая проницаемость для частот много больше фононных, безразмерный параметр, задаётся от 1 до 100;
- 4) ω_{LO} частота продольного фонона (в обратных сантиметрах);
- 5) ω_{TO} частота поперечного фонона (в обратных сантиметрах);
- 6) Γ_1 затухание фононов (в обратных сантиметрах) хоть это и не физично, допускается вводить и ОТРИЦАТЕЛЬНЫЕ значения;
- 7) Γ_0 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 ω (в обратных сантиметрах). На графике частот должны быть метки с частотами ω_{TO} , ω_{LO} , Ω_p

Показатель преломления $N(\omega)=\sqrt{arepsilon_{total}(\omega)}=n(\omega)+ik(\omega)$, программа считает реальную и мнимую части показателя преломления. Коэффициент поглощения (в

обратных сантиметрах) от волнового числа фотона (в обратных сантиметрах), $\alpha(\omega) =$ $4\pi k\omega$, программа считает его в заданных пределах изменения частоты. Считаем комплексный коэффициент отражения (амплитуда с учетом фазы)

$$r(\omega) = \frac{1 - N(\omega)}{1 + N(\omega)} = r_A(\omega) \cdot e^{i\varphi(\omega)}$$

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

$$R(\omega) = r(\omega)r^*(\omega) = r_A^2(\omega)$$

 $R(\omega)=r(\omega)r^*(\omega)=r_A^2(\omega)$ Также нужно считать пропускание плёнки (без учёта интерференции):

$$T(\omega) = \frac{(1 - R(\omega))^2 \cdot e^{-\alpha(\omega)d}}{1 - R(\omega)^2 \cdot e^{-2\alpha(\omega)d}}$$

И оптическую плотность плёнки:

$$A(\omega) = -\ln (T(\omega))$$

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

- 1) реальная часть диэлектрической проницаемости $Re(\varepsilon_{total}(\omega));$
- 2) мнимая часть диэлектрической проницаемости $Im(\varepsilon_{total}(\omega));$
- 3) реальная часть показателя преломления $n(\omega)$;
- 4) мнимая часть показателя преломления $k(\omega)$;
- 5) коэффициент отражения по интенсивности R(ω);
- 6) фазу коэффициента отражения по амплитуде $\varphi(\omega)$;
- 7) коэффициент поглощения (в обратных сантиметрах) $\alpha(\omega)$;
- 8) пропускание плёнки Т(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 ω_{TO} и ω_{LO}

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, но так как требуется хороший удобный интерфейс и сравнение с экспериментом, то выполняется одним или двумя студентами. 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 (без учёта интерференции и с учётом её).

Работаем в системе СГС.

Программа должна читать экспериментальный спектр (2 столбца в ASCII кодах – первый это частота в обратных сантиметрах, второй это оптическая плотность), пример спектра есть. Это нужно для сравнения расчётов с экспериментом.

Залаётся –

- 1) концентрация свободных носителей заряда N_0 в см⁻³ (задаётся в пределах от нуля до 5 на 10^{22} по умолчанию пусть будет 10^{10}), лучше, чтобы можно было редактировать степень отдельно;
- 2) масса свободных носителей заряда m_0 в массах свободного электрона программа умножает введенное число на $9.1*10^{-28}$ (это масса электрона в граммах);
- 3) затухание колебаний свободного заряда (в обратных сантиметрах) Γ_0 , хоть это и не физично, допускается вводить и ОТРИЦАТЕЛЬНЫЕ значения;
- 4) ε_{∞} диэлектрическая проницаемость для частот много больше фононных (меняется в диапазоне от 0 до 100, по умолчанию равно 2);
- 5) пределы изменения частот от 5 до 5000 см^{-1} (должна быть опция ввести пределы меньше по желанию);
- 6) количество мод связанных зарядов К (число К 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} .
- 8) вводится комплексный показатель преломления среды за плёнкой N_m , $N_m = n + ik$ по умолчанию $N_m = 1 + i * 0$. При этом считаем, что ЭМ-волна падает на систему плёнка-подложка (или плёнка-воздух) из воздуха, то есть комплексный показатель воздуха по умолчанию всегда $N_{air} = 1 + i * 0$.

После этого для каждой i-той моды связанного заряда задаются следующие параметры: i1) концентрация свободных носителей заряда N_i в см⁻³ (задаётся в пределах от нуля до 10^{23});

- i2) масса связанного носителя заряда m_i в атомных единицах масс программа умножает введенное число на $1.66*10^{-24}$ (это а.е.м. в граммах), в этом случае масса может меняться от 1 до 200, так как это ион;
- i3) e_i эффективный заряд в зарядах электрона, меняется от 0 до 4, программа сама умножает это число на заряд электрона в СГС (e=4.8*10⁻¹⁰ ед. СГС);
- i4) частота колебаний связанного заряда (<u>в обратных сантиметрах</u>) $1/\lambda_i$ (обозначаем как v_i);
- i5) затухание колебаний связанного заряда (в обратных сантиметрах) Γ_i , хоть это и не физично, допускается вводить и ОТРИЦАТЕЛЬНЫЕ значения.

Примечание — исторически сложилось, что в колебательной спектроскопии частота измеряется в обратных сантиметрах, это просто обратная длина волны — $1/\lambda$. Поэтому, когда считаем плазменную частоту, то делим её на скорость света и на 2π (так как плазменная частота обычно измеряется в радианах в секунду, а нам нужна $1/\lambda$).

В начале программа считает плазменную частоту свободных электронов $\Omega_{p0} = \frac{e}{2\pi c} \sqrt{\frac{4\pi N_0}{m_0 \cdot \varepsilon_\infty}}$, все параметры заданы, i меняется от 0 до K, программа выдаёт частоты в обратных сантиметрах, c -скорость света в $C\Gamma C - 2.998 \cdot 10^{10}$ см/c.

Потом программа считает ВСЕ плазменные частоты для связанных зарядов -

 $\Omega_{pi} = \frac{e_i}{2\pi c} \sqrt{\frac{4\pi N_i}{3 \cdot m_i \cdot \varepsilon_\infty}}$, все параметры заданы, i меняется от 1 до K, программа выдаёт частоты в обратных сантиметрах, с -скорость света в СГС $-2.998 \cdot 10^{10}$ см/с. Примечание - под корнем в плазменной частоте стоит 1/3 вследствие усреднения дипольного момента по телесному углу.

Общее замечание – не забыть, что в программу мы вводим массу свободного заряда в массах свободного электрона, а массу связанного – в атомных единицах масс.

<u>Примечание</u> — хотя программа будет выдавать частоты в обратных сантиметрах, обозначать далее в формулах мы их будем как частоту — ν .

Потом считается диэлектрическая проницаемость от частоты:

$$\varepsilon(\nu) = \varepsilon_{\infty} \left(1 - \frac{\Omega_{p0}^2}{\nu^2 + i\nu\Gamma_0} + \sum_{i=1}^K \frac{\Omega_{pi}^2}{\nu_i^2 - \nu^2 - i\nu\Gamma_i}\right)$$

После этого программа считает реальную и мнимую части показателя преломления

$$N(v) = \sqrt{\varepsilon(v)} = n(v) + ik(v)$$

Коэффициент поглощения (в обратных сантиметрах) от волнового числа фотона (в обратных сантиметрах), $\alpha(\omega)=4\pi k \nu$ программа считает его в заданных пределах. Сначала считаем оптическую плотность плёнки (без учёта интерференции, что справедливо для тонких плёнок). Это безразмерная величина:

$$D(v) = \alpha(v)d$$

Теперь считаем пропускание по интенсивности системы плёнка-подложка с учётом интерференции. Задача схожа с задачами 1.21 и 3.34 из задачника Меледин-Черкасский 2 часть, 4 семестр $\Phi\Phi$).

Сначала считаем **комплексные** коэффициенты отражения по амплитуде (с учетом фазы) от границ раздела воздух-плёнка r_{12} и плёнка-среда r_{23} :

$$r_{12}(\nu) = \frac{N_{air} - N(\nu)}{N_{air} + N(\nu)} = |r_{12}(\nu)| \cdot e^{i\varphi_{12}(\nu)}$$

$$r_{23}(\nu) = \frac{N(\nu) - N_m}{N(\nu) + N_m} = |r_{23}(\nu)| \cdot e^{i\varphi_{23}(\nu)}$$

Коэффициент отражения по интенсивности равен квадрату модуля коэффициента отражения по амплитуде:

$$R_{12}(\nu) = r_{12}(\nu) \cdot r_{12}(\nu)^* = |r_{12}(\nu)|^2$$

$$R_{23}(v) = r_{23}(v) \cdot r_{23}(v)^* = |r_{23}(v)|^2$$

Теперь можно рассчитать пропускание плёнки: (с учётом интерференции):

$$T(\nu) = \frac{(1 - R_{12}(\nu)) \cdot (1 - R_{23}(\nu)) \cdot e^{-\alpha(\nu)d}}{1 + R_{12}(\nu) \cdot R_{23}(\nu) + 2 \cdot \sqrt{R_{12}(\nu) \cdot R_{23}(\nu)} \cdot e^{-2\alpha(\nu)d} \cdot \cos(\Delta \cdot \nu)}$$

Где $\Delta \cdot \nu$ это набег фаз, $\Delta = 2d \cdot n(\nu)$.

И оптическую плотность плёнки (с учётом интерференции):

$$A(v) = -\ln (T(v))$$

Программа в пределах заданных частот от 5 до 5000 см⁻¹ (или меньше – по желанию) должна строить с возможностью выбора **9 графиков**:

- 1) реальная часть показателя преломления n(v);
- 2) мнимая часть показателя преломления k(v);
- 3) коэффициент отражения по интенсивности $R_{12}(v)$ (это для анализа отражения от полубесконечной среды);
- 4) фазу коэффициента отражения по амплитуде $\varphi_{12}(\nu)$;
- 5) коэффициент поглощения (в обратных сантиметрах) $\alpha(\nu)$;
- 6) оптическую плотность плёнки (без учёта интерференции) D(v).
- 6) пропускание плёнки T(v);
- 7) оптическую плотность плёнки (с учётом интерференции) А(у).
- 9) экспортированный экспериментальный спектр.

Все графики рисуются разными цветами с автонормировкой (или без – должна быть опция), 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 человек.

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.

$$\mu_n(T) = \frac{C_n}{\left(\frac{T}{T_{0n-phonon}}\right)^{3/2} + \left(N_d^+ + N_a^-\right)\left(\frac{T_{0n}}{T}\right)^{3/2}}$$
(3.1)

$$\mu_{n}(T) = \frac{C_{n}}{\left(\frac{T}{T_{0n_{-}phonon}}\right)^{3/2} + \left(N_{d}^{+} + N_{a}^{-}\right)\left(\frac{T_{0n}}{T}\right)^{3/2}}$$

$$\mu_{p}(T) = \frac{C_{p}}{\left(\frac{T}{T_{0p_{-}phonon}}\right)^{3/2} + \left(N_{a}^{-} + N_{d}^{+}\right)\left(\frac{T_{0p}}{T}\right)^{3/2}}$$
(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 C_p , T_{0p} phonon и T_{0p} , но не все они независимые (обычно студенты константу С принимают за единицу). То есть по формулам вычисляем подвижность для материалов с различными N_d и N_a , 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 N_d^- и N_a^+ , 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 приводят 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 E_g , эффективные массы плотности состояний в долинах для дырок и для электронов также берутся из ссылок выше. Положение уровня донора E_d , концентрация доноров N_{d0} , положение уровня акцептора E_a , концентрация акцепторов N_{a0} , 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.

$$N_{C(V)} = 2.51 \cdot 10^{19} \left(\frac{m_{c(v)}}{m_0} \right)^{3/2} \left(\frac{T}{300} \right)^{3/2} \cdot cm^{-3}$$

Положение уровня Ферми в квазинейтральном объёме находим из электронейтральности:

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

Доля заряженных доноров определяется положением уровня Ферми

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

Доля заряженных акцепторов определяется положением уровня Ферми

$$N_a^- = N_a \frac{1}{1 + e^{\frac{\varepsilon_a - \mu}{kT}}}.$$

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

Зная положение уровня Ферми находим концентрации свободных электронов и дырок а также концентрацию <u>заряженных</u> доноров и акцепторов. Потом, из формул 3.1 и 3.2 с учётом знания констант (полученных командой 1) и концентраций <u>заряженных</u> доноров и акцепторов N_d^- и N_a^+ , вычисляется подвижность.

Потом вычисляется проводимость как:

$$\sigma = e(n \cdot \mu_e + p \cdot \mu_p)$$

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 <u>двух человек</u>. Так как задача важная и интересная, можно дать <u>двум командам</u>. 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 10^{10} до 10^{20} 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 (п-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:

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

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

здесь $0 \le f(\varepsilon) \le 1$ — вероятность заполнения электроном состояния с заданной энергией ε (число заполнения), μ — электрохимический потенциал, называемый также уровень Ферми (обозначается также ε_f).

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

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

Доля заряженных доноров определяется положением уровня Ферми

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

Положение уровня Ферми находится из уравнения электронейтральности

$$N_d^+ = n.$$
 (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 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 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 **1-2 человек**.

Вводятся параметры полупроводника — запрещённая зона E_g , диэлектрическая проницаемость ε , 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 E_{out} 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.

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

Положение уровня Ферми в квазинейтральном объёме находим из электронейтральности:

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

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.

$$N_{as}^{+} = N_{as} \frac{1}{1 + e^{\frac{E_{as} + \varphi_s - \mu}{kT}}}$$
 - это количество заряженных поверхностных

акцепторов, поле, создаваемое ими $E_{
m max} = 4\pi e N_{as}^+$. Глубина ОПЗ при обеднении

$$W=\sqrt{rac{arepsilon arphi_s}{2\pi e^2 N_d}}$$
 , поверхностный заряд ОПЗ $N_{d0}We$. Изгиб зон $arphi_s$ ищем из $\sqrt{rac{arepsilon arphi_s N_{d0}}{2\pi e^2}}=N_{as}rac{1}{1+e^{rac{E_{as}+arphi_s-\mu}{kT}}}$.

Если есть внешнее поле E_{out}, то уравнение:

$$\sqrt{\frac{\varepsilon\varphi_s N_{d0}}{2\pi e^2}} = N_{as} \frac{1}{1 + e^{\frac{E_{as} + \varphi_s - \mu}{kT}}} + \frac{E_{out}}{4\pi e}$$

Программа должна находить положение уровня Ферми в квазинейтральном объёме,

изгибы зон φ_s при нулевом и при заданном внешнем поле и строить зонные диаграммы

с изгибами. Плоские зоны + парабола с шириной W и высотой $^{\varphi_s}$. 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.

13 октября 2013 г.