

НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ «МЭИ»

«УТВЕРЖДАЮ»

Проректор по научной работе

Драгунов В.К.

« 16 » июня 2015 г.

Программа аспирантуры

Направление 16.06.01 Физико-технические науки и технологии

Направленность (специальность) 01.04.10 Физика полупроводников

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА

дисциплины по выбору

«Физика кристаллических и неупорядоченных полупроводников»

Индекс дисциплины по учебному плану: Б1.В.ДВ.1.1

Всего: 108 часов

Семестр 1, в том числе

6 часов – контактная работа,
84 часа – самостоятельная работа,
18 часов – контроль

Программа составлена на основе федерального государственного образовательного стандарта высшего образования (уровень подготовки кадров высшей квалификации) по направлению подготовки 16.06.01 Физико-технологические науки и технологии, утвержденного приказом министерства образования и науки РФ от 30 июля 2014 № 882, и паспорта специальности 01.04.10 Физика полупроводников, номенклатуры специальностей научных работников, утвержденной приказом Минобрнауки России от 25 февраля 2009 г. № 59.

ЦЕЛИ И ЗАДАЧИ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Целью изучения дисциплины является формирование научной основы для изучения особенностей физики материалов, у которых отсутствует дальний порядок в расположении атомов (аморфных, стеклообразных и нанокристаллических полупроводников), для последующего применения полученных знаний при конструировании и исследовании приборов на основе этих материалов.

Задачами дисциплины являются:

- освоение способности учитывать особенности физики неупорядоченного конденсированного состояния вещества, атомной и электронной структуры неупорядоченных полупроводников,
- освоение методов исследования и моделирования структуры и свойств различных классов неупорядоченных полупроводников, а также методов управления свойствами этих материалов;
- развитие способности эффективно использовать особенности свойств и эффекты, наблюдающиеся в неупорядоченных полупроводниках, при последующих разработках и исследованиях приборов и устройств на основе этих материалов.

В процессе освоения дисциплины **формируются следующие компетенции:**

- способность к критическому анализу и оценке современных научных достижений, генерированию новых идей при решении исследовательских и практических задач, в том числе в междисциплинарных областях (УК-1);
- способность самостоятельно выполнять физико-технические научные исследования для оптимизации параметров объектов и процессов с использованием стандартных и специально разработанных инструментальных и программных средств (ОПК-3);
- способность анализировать состояние научной проблемы путем подбора, изучения и анализа литературных и патентных источников (ПК-2);
- способность самостоятельно ставить конкретные задачи научных исследований в области физики полупроводников и решать их с помощью современной аппаратуры и информационных технологий с использованием новейшего отечественного и зарубежного опыта (ПК-3).

ПЛАНИРУЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ОБРАЗОВАНИЯ, ФОРМИРУЕМЫЕ В РЕЗУЛЬТАТЕ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

В результате освоения дисциплины обучающийся должен демонстрировать следующие результаты образования:

знать:

- классификацию твердых тел с точки зрения атомной структуры и зонной теории, особенности электронной структуры, электрических, оптических и фотоэлектрических свойств кристаллических, неупорядоченных и аморфных материалов с использованием изучения и анализа литературных и патентных источников (ПК-2);

уметь:

- критически анализировать и оценивать современные научные достижения в области физики кристаллических и неупорядоченных полупроводников (УК-1);
- рассчитывать параметры и характеристики кристаллических и неупорядоченных полупроводников с использованием стандартных и специально разработанных инструментальных и программных средств (ОПК-3);
- анализировать состояние научной проблемы путем подбора, изучения и анализа литературных и патентных источников (ПК-2);
- применять методы расчета и моделирования атомной структуры кристаллических и неупорядоченных полупроводников (ПК-3);
- собирать, обрабатывать, анализировать и систематизировать научно-техническую информацию новейшего отечественного и зарубежного опыта по кристаллическим и неупорядоченным полупроводникам с помощью современной аппаратуры и информационных технологий (ПК-3);

владеть:

- приемами и методами оценки параметров и характеристик кристаллических и неупорядоченных полупроводниковых структур с использованием стандартных и специально разработанных инструментальных и программных средств (ОПК-3);
- навыками работы с информационными базами данных и поиска информации о свойствах неупорядоченных полупроводников (ПК-2).

КРАТКОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАЗДЕЛОВ ДИСЦИПЛИНЫ

1. Основные понятия

Классификация полупроводниковых материалов. Основные свойства и конкретика применений. История и перспективы развития. Полупроводниковые структуры.

2. Зонная теория кристаллических полупроводников

Зонная теория кристаллических твердых тел. Адиабатическое приближение. Приближение сильно связанных и почти свободных электронов. Функция Блоха. Зоны Бриллюэна. Поведение электрона у экстремумов энергетических зон. Запрещенные зоны энергий. Квазиволновой вектор. Зонная структура реальных полупроводников. Теория энергетических уровней примесных атомов в кристаллической решетке

3. Статистика электронов и дырок

Плотность квантовых состояний в сферических энергетических зонах. Граничные условия Кармана-Борна. Статистика Ферми-Дирака и Больцмана. Определение концентрации электронов и дырок в собственном, донорном, акцепторном и частично компенсированном полупроводниках в невырожденном случае.

Случай вырожденного полупроводника. Определение концентрации носителей заряда и температурной зависимости в реальных полупроводниках. Время жизни неравновесных носителей заряда. Теория Шокли-Рида. Ловушки и центры прилипания. Диффузия и дрейф неравновесных носителей заряда. Соотношение Эйнштейна.

4. Определение и классификация неупорядоченных материалов

Аморфные и стеклообразные полупроводники. Определения. Стабильные, метастабильные и нестабильные состояния. Отличительные

признаки стеклообразного состояния. Критерии стеклообразования. Гидрированные аморфные полупроводники.

5 Атомная структура некристаллических полупроводников

Атомная структура материалов. Понятие ближнего, среднего и дальнего порядка в расположении атомов. Геометрические и энергетические характеристики упорядочения. Модели среднего порядка. Методы исследования атомной структуры неупорядоченных полупроводников. Моделирование атомной структуры некристаллических полупроводников.

6. Электронная структура и дефекты в неупорядоченных полупроводниках

Электронная структура неупорядоченных полупроводников. Плотность состояний. Локализованные состояния – определения и природа. Строение энергетических зон. Модели Губанова, Коуэна-Фриче-Овшинского, Мотта-Дэвиса. Запрещенная зона подвижности. Фиксация уровня Ферми. Дефекты в неупорядоченных полупроводниках. Гипотеза Андерсона. Модель $D^+ - D^-$ центров. Модель пар с переменной валентностью. Квазимолекулярные дефекты.

7. Методы управления свойствами неупорядоченных полупроводников

Легирование некристаллических полупроводников. Химическая модификация свойств пленок халькогенидных стеклообразных полупроводников. Инверсия знака проводимости в объемных халькогенидных стеклообразных полупроводниках. Структурная модификация свойств некристаллических полупроводников. Четыре уровня структурной модификации.

8. Электрофизические свойства некристаллических полупроводников

Механизмы переноса носителей заряда. Механизмы электрической проводимости. Прыжковая проводимость. Дрейфовая подвижность носителей заряда.

Спектры оптического поглощения некристаллических материалов.
Правило Урбаха.

Нестационарные процессы. Определение дрейфовой подвижности по измерениям времени пролета. Дисперсионный перенос.

Влияние внешних воздействий на свойства некристаллических полупроводников. Метастабильные состояния.

ОЦЕНОЧНЫЕ СРЕДСТВА ДЛЯ КОНТРОЛЯ ОСВОЕНИЯ РЕЗУЛЬТАТОВ ОБРАЗОВАНИЯ ПО ДИСЦИПЛИНЕ

Промежуточная аттестация по итогам освоения дисциплины: 1 семестр – дифференцированный зачет.

Вопросы для самоконтроля и для проведения зачета

1. Дайте определение некристаллических материалов со структурной точки зрения. Какой экспериментальный метод позволяет разделить некристаллические материалы и кристаллы?
2. Дайте определение некристаллических полупроводников, основанное на потенциальной энергии носителей заряда.
3. Перечислите уровни стабильности термодинамически неравновесных систем.
4. Что такое метастабильные и стабильные вещества (поясните на зависимости энергии системы от обобщенной координаты)?
5. Что такое квазистабильные и нестабильные вещества (поясните на зависимости энергии системы от обобщенной координаты)?
6. Назовите отличительные признаки стеклообразного состояния.
7. Перечислите качественные критерии стеклообразования.
8. Изобразите распределение электронов по орбиталям для изолированного атома селена и атома селена, образующего химические связи.
9. Изобразите распределение электронов по орбиталям для изолированного атома мышьяка и атома мышьяка, образующего химические связи.

10. Изобразите распределение электронов по орбиталям для атома кремния, образующего химические связи.

11. Изобразите распределение электронов по орбиталям для изолированного атома серы и атома серы, образующего химические связи.

12. Рассчитайте величину количественного критерия стеклообразования для материала $As_{30}Se_{70}$. Является ли этот материал стеклообразующим? (0,65 да)

13. Рассчитайте величину количественного критерия стеклообразования для материала $Si_{60}S_{40}$. Является ли этот материал стеклообразующим? (0,33 нет)

14. Рассчитайте величину количественного критерия стеклообразования для материала $Si_{30}Se_{70}$. Является ли этот материал стеклообразующим? (0,5185 да)

15. Рассчитайте величину количественного критерия стеклообразования для материала $Ge_{10}Te_{90}$. Является ли этот материал стеклообразующим? (0,62 да)

16. Какие особенности материалов необходимо учитывать при синтезе халькогенидных стеклообразных полупроводников?

17. Чем обусловлено требование малых скоростей нагрева ампулы при синтезе халькогенидных стеклообразных полупроводников?

18. Дайте определение атомной структуры объекта.

19. Какие атомы входят в область ближнего порядка в полупроводниковых материалах?

20. Какими параметрами характеризуется ближний порядок в расположении атомов?

21. В чем суть и в чем основной недостаток микрокристаллитной модели строения неупорядоченного материала?

22. Определите понятие двугранного угла как характеристики атомной структуры материала.

23. Какие характеристики атомной структуры необходимы и достаточны для определения некристаллического состояния твердого тела?
24. Назовите прямые методы исследования атомной структуры некристаллических полупроводников.
25. Что представляет собой функция радиального распределения атомов (ФРРА)?
26. Что является исходными данными для расчета ближнего порядка в расположении атомов в методе рентгеноспектрального структурного анализа (EXAFS)?
27. Какие участки функции радиального распределения атомов лишены физического смысла и почему?
28. Какие характеристики ближнего порядка можно определить из функции радиального распределения атомов и как их определить?
29. Первые два пика функции радиального распределения атомов расположены при 2,30 Å и 3,25 Å. Чему равен угол связи в материале? (90)
30. Первые два пика функции радиального распределения атомов расположены при 2,10 Å и 3,64 Å. Чему равен угол связи в материале? (120)
31. Первые два пика функции радиального распределения атомов расположены при 2,35 Å и 3,05 Å. Чему равен угол связи в материале? (81)
32. Первые два пика функции радиального распределения атомов расположены при 2,35 Å и 3,84 Å. Чему равен угол связи в материале? (109)
33. В чем различие между двумя методами колебательной спектроскопии: методом инфракрасного поглощения и методом комбинационного рассеяния?
34. В чем заключается метод сравнительного анализа при интерпретации колебательных спектров?
35. Какую информацию о структуре позволяют получить методы колебательной спектроскопии?
36. Какие два типа элементарных ячеек были получены в физической модели атомной структуры аморфного кремния (модель Полка)?

37. Перечислите методы компьютерного моделирования атомной структуры неупорядоченных систем.

38. Что такое «периодические граничные условия» при моделировании атомной структуры?

39. Как оценивается вероятность существования каждой новой конфигурации атомов при моделировании атомной структуры методом Монте-Карло?

40. Назовите основные этапы создания модели атомной структуры градиентным методом.

41. Какие составляющие полной энергии системы учитываются при проведении релаксации модели атомной структуры двухкоординированных некристаллических материалов?

42. Перечислите модели строения молекул некристаллического селена и назовите их основные отличия.

43. Какие методы используются для определения соотношения между кольцевыми и цепочечными молекулами и для определения степени полимеризации цепочечных молекул стеклообразного селен?

44. Что такое «химическая неупорядоченность» в многокомпонентных некристаллических материалах?

45. Какой метод позволяет оценить соотношение гетерополярных и гомополярных связей в стеклообразных халькогенидах мышьяка?

46. Изменяются ли и как первое координационное число и радиус первой координационной сферы в гидrogenизированном аморфном кремнии при увеличении содержания водорода?

47. Дайте определение локализованных состояний, предложенное Андерсоном.

48. Дайте определение локализованных состояний, предложенное Н. Моттом.

49. Изобразите зависимость плотности состояний от энергии в некристаллическом полупроводнике по модели Губанова.

50. Изобразите зависимость плотности состояний от энергии в некристаллическом полупроводнике по модели КФО (Коуэн, Фриче, Овшинский).

51. Смысл и цель введения понятия щели подвижности носителей заряда в модели Коуэна, Фриче, Овшинского для некристаллических полупроводников.

52. Изобразите зависимость плотности состояний от энергии в некристаллическом полупроводнике по модели Мотта и Дэвиса.

53. Дайте определения локализованных состояний, предложенные Андерсоном и Н. Моттом.

54. Изобразите зависимость плотности состояний от энергии в некристаллическом полупроводнике по модели Губанова.

55. Изобразите зависимость плотности состояний от энергии в некристаллическом полупроводнике по модели КФО (Коуэн, Фриче, Овшинский).

56. Смысл и цель введения понятия щели подвижности носителей заряда в модели Коуэна, Фриче, Овшинского для некристаллических полупроводников.

57. Изобразите зависимость плотности состояний от энергии в некристаллическом полупроводнике по модели Мотта и Дэвиса.

58. Какова физическая природа зоны с высокой плотностью локализованных состояний вблизи середины щели подвижности в некристаллическом полупроводнике по модели Мотта и Дэвиса.

59. Может ли концентрация дефектов в некристаллическом твердом теле равняться равновесной концентрации? Обоснуйте Ваш ответ.

60. Что такое «корреляционная энергия Хаббарда»?

61. Какой знак и почему имеет корреляционная энергия Хаббарда в халькогенидных стеклообразных полупроводниках в соответствии с гипотезой Андерсона?

62. На примере конфигурационной диаграммы, иллюстрирующей переходы электрона между валентной зоной и D^+ центром в ХСП, покажите причину возникновения и величину сдвига Стокса в этих материалах.

63. Какой координацией обладают дефекты с минимальной энергией на атомах халькогена. Обладают ли эти дефекты электрическим зарядом? Если да, то каким?

64. Изменяется ли число ковалентных связей при образовании пары с переменной валентностью (ППВ)? Обоснуйте ответ.

65. На какую величину изменяется энергия при образовании пары с переменной валентностью (C_3^+ и C_1^-) из двух нейтральных центров?

66. В чем отличие модели взаимодействующих пар с переменной валентностью (ВППВ) от модели пар с переменной валентностью (ППВ)?

67. Обладают ли квазимолекулярные дефекты электрическим зарядом и дипольным моментом? Обоснуйте ответ.

68. Какова координация и электрический заряд дефектов с минимальной энергией на атомах элементов V группы?

69. Какова координация и электрический заряд дефектов с минимальной энергией на атомах элементов IV группы?

70. Почему добавление в аморфный кремний водорода резко снижает плотность локализованных состояний в запрещенной зоне материала?

71. Какие механизмы электропроводности могут реализовываться в некристаллических полупроводниках? При каком механизме наблюдается наибольшая подвижность носителей заряда и почему?

72. В чем отличие энергии активации проводимости при переносе заряда по нелокализованным состояниям и по локализованным состояниям в хвостах зон?

73. В чем заключается механизм электропроводности с переменной длиной прыжка и какова в этом случае зависимость проводимости от температуры?

74. Различаются ли (если да, то чем) частотные зависимости электропроводности при различных механизмах проводимости в некристаллических полупроводниках?

75. Какую информацию можно получить из сравнения температурных зависимостей электропроводности и термоЭДС некристаллического полупроводника?

76. Информацию о каких параметрах некристаллического полупроводника и как можно получить из результатов эксперимента по времяпролетной методике (time of flight experiment) при разных температурах?

77. Назовите причины слабой чувствительности к примесям халькогенидных стеклообразных полупроводников и аморфного кремния.

78. Изобразите зависимость энергии активации электропроводности гидрогенизированного аморфного кремния от концентрации фосфора.

79. Изобразите зависимость энергии активации электропроводности гидрогенизированного аморфного кремния от концентрации бора.

80. В чем заключается метод химической модификации свойств пленок халькогенидных стеклообразных полупроводников? Изменяется ли при этом (если да, то как) вид температурной зависимости электропроводности материала?

81. Что является причиной инверсии знака проводимости в объемных ХСП при введении в них висмута?

82. В чем заключается метод структурной модификации свойств некристаллических полупроводников и какова его физическая основа?

83. Назовите четыре уровня структурной модификации свойств некристаллических полупроводников. При каком из уровней наблюдаются наиболее существенные изменения большинства свойств?

84. Какие свойства изменяются при проведении структурной модификации на уровне среднего порядка? Какие три фактора необходимо

учитывать при определении эффективности структурной модификации на уровне среднего порядка?

85. Чем ограничена область применимости второго уровня структурной модификации?

86. Рассчитайте величину критерия эффективности структурной модификации (КЭСМ) для материала состава SiS_2 (электроотрицательность кремния $-1,8$, серы $-2,5$, металлизацией связей пренебречь).

87. Рассчитайте величину критерия эффективности структурной модификации (КЭСМ) для материала состава As_2Se_3 (электроотрицательность мышьяка $-2,0$, селена $-2,4$, металлизацией связей пренебречь).

88. Рассчитайте величину критерия эффективности структурной модификации (КЭСМ) для материала состава GeSe_2 (электроотрицательность германия $-1,8$, селена $-2,4$, металлизацией связей пренебречь).

89. Рассчитайте величину критерия эффективности структурной модификации (КЭСМ) для материала состава As_2S_3 (электроотрицательность мышьяка $-2,0$, серы $-2,5$, металлизацией связей пренебречь).

90. Чем определяется выбор воздействующего фактора при структурной модификации на уровне подсистемы дефектов?

91. Изобразите спектральную зависимость коэффициента оптического поглощения некристаллического полупроводника. В чем её основные отличия от аналогичной зависимости для монокристалла?

92. Какие возможности существуют для определения оптической ширины запрещенной зоны некристаллического полупроводника?

93. Изобразите и кратко объясните зависимости фотопроводимости некристаллического полупроводника от интенсивности светового потока и от длины волны излучения.

94. Изобразите и кратко объясните зависимости фотопроводимости некристаллических полупроводников от температуры.

95. Что такое квантовый выход? Как и почему его величина зависит от напряженности электрического поля?

96. Изобразите и кратко объясните изменения спектральной зависимости оптического пропускания под действием излучения и отжига.

97. Чем объясняется увеличение фотоиндуцированных изменений свойств ХСП с уменьшением критерия эффективности структурной модификации?

98. Изобразите и кратко объясните диаграмму реверсивных изменений оптического пропускания пленки ХСП под действием излучения при разных температурах.

99. Проиллюстрируйте эффект фотостимулированного изменения скорости травления ХСП в щелочном травителе и в бихромате калия (хромпике).

100. Каковы необходимые условия для существования в материале эффекта фотостимулированного изменения свойств?

101. В чем заключается конфигурационная модель, используемая для объяснения фотоиндуцированных изменений свойств ХСП?

102. В чем заключается и как объясняется эффект фотостимулированной диффузии металла в ХСП?

Критерии оценки за освоение дисциплины определены в Инструктивном письме И-23 от 14 мая 2012 г.

РЕКОМЕНДУЕМАЯ ЛИТЕРАТУРА

Основная литература:

1. Шалимова К.В. /Физика полупроводников. СПб.: издательство Лань. 2010. 384 с. ISBN 978-5-8114-09228-8.

2. Попов А.И. Физика и технология неупорядоченных полупроводников. Учебное пособие. – М.: Издательский дом МЭИ, 2008. ISBN 978-5-383-00231-5.

3. Ансельм А.И. Введение в теорию полупроводников. СПб. : изд-во Лань., 2008., 615 с. ISBN 978-5-8114-0762-0

Дополнительная литература:

4. Popov A. Disordered Semiconductors: Physics and Applications. Textbook. – Pan Stanford Publishing, 2011. ISBN 978-981-4241-76-2, 978-981-4241-82-3.