



شبیه‌سازی افزاره‌های نیم‌رسانا

Simulation of Semiconductor Devices

مقطع درس: تحصیلات تکمیلی

شماره درس: 1121002

تعداد واحد: 3 (نظری)

پیش‌نیاز: -

هدف: آشنایی با روش‌های نظری و شبیه‌سازی محاسبه خواص مواد و عملکرد افزاره‌های نیم‌رسانا در ابعاد نانو و اتمی

سرفصل مطالب درس: در این درس مطالبی به شرح زیر مورد بحث قرار می‌گیرند.

مروری بر نظریه کوآنتومی، تابع موج و معادله شرودینگر، اصل عدم قطعیت، معادله شرودینگر برای چاه پتانسیل تک بعدی، پدیده تونل-زنی کوآنتوم مکانیکی، مقادیر ویژه و توابع ویژه برای معادله شرودینگر. نمایش دیراک (bra-ket)، حل تحلیلی معادله شرودینگر برای اتم تک الکترونی هیدروژن، مروری بر اوربیتالهای اتمی و ساختار الکترونی عناصر جدول تناوبی.

معرفی و مرور روش‌های شبیه‌سازی در ابعاد نانومتری و اتمی، روش‌های شبیه‌سازی خواص مواد در ابعاد Hartree, (Hartree-Fock and Thomas-Fermi)، محاسبه نیروهای بین اتمی و پیدا کردن ساختار اتمی با مینیمم انرژی، ماهیت پیوندهای شیمیایی بین اتم‌های همسان و غیر همسان روش‌های حل معادله شرودینگر در سیستم‌های بس ذره‌ای، الکترون‌ها بعنوان ذرات همسان، تقارن تابع موج سیستم‌های بس ذره‌ای، اصل انحصار پائولی، نوارهای انرژی تقریب Hartree-Fock، بررسی اتم هلیوم، بسط تابع موج روی توابع پایه متفاوت، تابع موج تخت، مدارهای اسلاتر، توابع گوسی، اربیتال‌های عددی.

نظریه تابع چگالی DFT، قضیه Hohenberg-Kohn، معادلات Kohn-Sham برای سیستم‌های بس ذره‌ای، تابع انرژی Exchange-Correlation محاسبه نیروهای بین اتمی در DFT، مقایسه DFT با روش Hartree-Fock، کاربردهای عملی، محاسبه آرایش اتمی و خواص الکترونی ساختارهای نانو

پیاده‌سازی‌های مختلف DFT، نرم‌افزارهای کاربردی و کاربردهای آنها، پیاده‌سازی بر اساس توابع پایه موج تخت مانند ABINIT و Quantum Espresso، پیاده‌سازی بر اساس اوربیتال‌های عددی مانند SIESTA، مثال‌هایی از کاربردها مانند: بررسی لایه‌ی عایق گیت در ترانزیستورهای نانومتری، بررسی خواص و کاربردهای مواد دوبعدی و تک‌بعدی بعنوان حسگر و

منابع:

[1] ABC of DFT, Kieron Burke, 2007, <http://dft.uci.edu/doc/g1.pdf>.

[2] Electronic Structure Basic Theory and Practical Methods, Richard M. Martin, Cambridge University Press, 2010.

[3] Quantum Mechanics, Amit Goswami, 1997.

[4] Solid State Physics, N. Ashcroft and N. Mermin, New York, 1976.

[5] <http://icmab.es>

[6] <http://www.quantum-espresso.org>

[7] www.abinit.org