به نام ایزد دانا

**(طرح درس شبیه سازی افزاره های نیمه رسانا)** تاریخ به‌روز رسانی: **۹۷/۱۱/۲۳**

دانشکده .. مهندسی برق و کامپیوتر..... نیمسال دوم سال تحصیلی ..۹۸-۹۷....

| | | | |
|---|---|---|---|
| نام درس | فارسی: **شبیه سازی افزاره های نیمه رسانا** | تعداد واحد: نظری.۳.. عملی... | مقطع: کارشناسی□ کارشناسی ارشد■ دکتری■ |
| | لاتین: Simulation of Semiconductor Devices | پیش‌نیازها و هم‌نیازها: **الکترونیک کوانتومی** | |
| مدرس/مدرسین: **عبدالله عباسی** | | شماره تلفن اتاق: **۳۱۵۳۳۰۶۸** | |
| پست الکترونیکی: a_abbasi@semnan.ac.ir | | منزلگاه اینترنتی: http://aabbasi.profile.semnan.ac.ir | |
| برنامه تدریس در هفته و شماره کلاس: **یک‌شنبه ساعت ۱۷:۰۰ تا ۱۹:۰۰ کلاس شماره**<br>**دوشنبه ساعت ۱۱:۳۰ تا ۱۲:۳۰ کلاس شماره** | | | |
| اهداف درس: **آشنایی با روش های نظری و شبیه سازی خواص مواد و عملکرد افزاره های نیمه رسانا در ابعاد نانو و اتمی.** | | | |
| امکانات آموزشی مورد نیاز: | | | |

| نحوه ارزشیابی | فعالیت‌های کلاسی و آموزشی<br>هفت تکلیف هفتگی با سه پروژه کامپیوتری<br>تحلیل افزاره با SILVACO TCAD | ارزشیابی مستمر(کوئیز)<br>هفت کوییز دوهفته در میان | امتحان میان‌ترم | امتحان پایان‌ترم |
|---|---|---|---|---|
| درصد نمره | ٪۲۰ | ٪۱۰ | ٪۲۰ | ٪۵۰ |

منابع و مآخذ درس


1- A. V. Krasheninnikov, Introduction to Electronic Structure Calculations, Lecture Notes, University of Helsinki.
2- R. M. Martin, Electronic Structure Basic Theory a Practical Methods, Cambridge University Press, 2010.
3- C. Kittel, Introduction to Solid State Physics, Wiley, 2000.
4- N. Ashcroft and N. Mermin, Solid State Physics, Cengage Learning, 2000.
5- M. C. Payne et al., Iterative Minimization Techniques for Ab Initio Total Energy Calculations: Molecular Dynamics and Conjugate Gradient, Rev. Mod. Phys., Vol. 64, pp. 1045-1092, 1992.
6- J. M. Soler et al., The SIESTA Method for Ab Initio Order N Material Simulation, J. Phys.: Cond. Matter, Vol, 14, pp. 2745-2779,2002.

## بودجه‌بندی درس

| شماره هفته آموزشی | مبحث | توضیحات |
|---|---|---|
| ۱ | مروری بر نظریه کوانتومی: تابع موج و معادله شرودینگر، اصل عدم قطعیت | |
| ۲ | معادله شرودینگر برای چاه پتانسیل تک بعدی | |
| ۳ | پدیده تونل زنی کوانتوم مکانیکی | |
| ٤ | مقادیر ویژه و توابع ویژه برای معادله شرودینگر، نمایش دیراک (bra-ket) | |
| ٥ | حل تحلیلی معادله شرودینگر برای اتم تک الکترونی هیدروژن | |
| ٦ | مروری بر اوربیتال های اتمی و ساختار الکترونی عناصر جدول تناوبی | |
| ۷ | معرفی و مرور روش های شبیه سازی در ابعاد نانو متری و اتمی: روش های شبیه سازی خواص مواد در ابعاد اتمی (Hartree Fock, Carlo Quantum Monte)، محاسبه نیروهای بین اتمی و پیدا کردن ساختار اتمی با مینیمم انرژی، ماهیت پیوندهای شیمیایی بین اتم های همسان و غیر همسان. | |
| ۸ | روشهای حل معادله شرودینگر در سیستم های بس ذره ای: الکترون ها به عنوان ذرات همسان، تقارن تابع موج سیستم های بس ذره ای، 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، اربیتال های عددی. | |
| ۹ | نظریه تابع چگالی: قضیه Hohenberg- Kohn معادلات Kohn- Sham برای سیستم ای بس ذره ای، تابع انرژی Exchange-Correlation، محاسبه نیروهای بین اتمی در DFT، مقایسه DFT با روش HF، کاربردهای عملی، محاسبه آرایش اتمی و خواص الکترونی ساختارهای نانو | |
| ۱۰ | پیاده سازی مختلف DFT | |
| ۱۱ | نرم افزارهای کاربردی و کاربردها: پیاده سازی بر اساس موج های تخت (ABINIT, Quantum-Espresso)، پیاده سازی بر اساس اربیتال های عددی(SIESTA)، سیستم های پایه سیلیسیومی (بلور سیلیسیوم، نانو ذرات سیلیسیومی، سطوح تماس و مواد نو در فناوری CMOS) | |
| ۱۲ | مواد ارگانیکی (مولکول های آلی با کاربرد در الکترونیک به عنوان مثال مولکول های : CnHn, CnH2n, CnH2n+2)، | |
| ۱۳ | سیستم های پایه کربنی (بررسی ساختار و خواص الکترونیکی نانو لوله های کربنی، گرافین) | |
| ۱٤ | آشنایی با کمپانی SILVACO | |
| ۱٥ | آشنایی با Silvaco-Atlas | |
| ۱٦ | آشنایی با Silvaco-Athena | |