

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ТОМСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ (НИ ТГУ)

Физический факультет

УТВЕРЖДЕНО:
Декан
С. Н. Филимонов

Оценочные материалы по дисциплине

Материаловедение и технологии полупроводников

по направлению подготовки

03.04.02 Физика

Направленность (профиль) подготовки:
Фундаментальная и прикладная физика

Форма обучения
Очная

Квалификация
Магистр

Год приема
2025

СОГЛАСОВАНО:
Руководитель ОП
С.Н. Филимонов

Председатель УМК
О.М. Сюсина

Томск – 2025

1. Компетенции и индикаторы их достижения, проверяемые данными оценочными материалами

Целью освоения дисциплины является формирование следующих компетенций:

ПК-1 Способен самостоятельно ставить конкретные задачи научных исследований в области физики и решать их с помощью современной аппаратуры и информационных технологий с использованием новейшего российского и зарубежного опыта.

Результатами освоения дисциплины являются следующие индикаторы достижения компетенций:

ИПК-1.1 Знает основные стратегии исследований в выбранной области физики, критерии эффективности, ограничения применимости

ИПК-1.2 Умеет выделять и систематизировать основные цели исследований в выбранной области физики, извлекать информацию из различных источников, включая периодическую печать и электронные коммуникации, представлять её в понятном виде и эффективно использовать

2. Оценочные материалы текущего контроля и критерии оценивания

Элементы текущего контроля:

- тесты;
- контрольная работа;
- аналитический обзор;

Пример

Тест (ИОПК-2.2.)

1. Начав с параболической плотности состояний в трехмерном объемном полупроводнике, объясните фундаментальную физическую причину квантового ограничения и наложение граничных условий, которые приводят к его преобразованию в ступенчатую функцию для двумерной квантовой ямы и в набор дискретных атомоподобных энергетических уровней для нульмерной квантовой точки. Затем обсудите, как это резкое изменение плотности состояний непосредственно приводит к значительному усилению кулоновского взаимодействия и значительному увеличению энергии связи экситона.

2. Подробно опишите, как теория возмущений $k \cdot p$ в сочетании с приближением огибающей функции служит основой для расчета сложных зонных структур полупроводниковых наноструктур, явно учитывая смешивание различных валентных зон в центре зоны Бриллюэна, и объясните, почему точное моделирование этого смешивания зон критически важно для прогнозирования правил оптического отбора и поляризационно-зависимого поглощения в квантовой яме.

3. Исходя из ограничений простого уравнения Дирака для описания топологических изоляторов, объясните физическую необходимость введения квадратичной поправки, зависящей от импульса, или массового члена. Опишите, как топологический инвариант объемных зон, такой как число Черна в двух измерениях, гарантирует существование устойчивых проводящих краевых состояний благодаря принципу соответствия объема и границы, которые защищены от обратного рассеяния благодаря симметрии обращения времени.

4. Сформулируйте выражение Ландауэра-Бюттикера для баллистической электропроводности идеального одномерного канала, явно определяя квант проводимости и его физическое значение. Сопоставьте этот полностью квантово-механический взгляд на транспорт, где проводимость является функцией вероятности прохождения, с классической моделью Друде, которая рассматривает сопротивление как результат кумулятивного рассеяния отдельных электронов.

5. Проследите теоретическую эволюцию от целочисленного квантового эффекта Холла, где двумерный электронный газ в сильном магнитном поле демонстрирует квантованную холловскую проводимость, управляемую числом Черна, к квантовому спиновому эффекту Холла, который можно понимать как две копии квантового эффекта Холла, стабилизированные симметрией относительно обращения времени, и, наконец, к квантовому аномальному эффекту Холла, где спин-орбитальная связь и магнитное легирование порождают квантованный холловский отклик без какого-либо внешнего магнитного поля.

6. Сравните различные роли дефектов мелких и глубоких уровней в обычных полупроводниках, где мелкие уровни контролируют равновесную концентрацию носителей заряда для легирования, а глубокие уровни действуют как эффективные центры генерации-рекомбинации, а затем, в концептуально отличном явлении, объясните механизм, посредством которого преднамеренный беспорядок может парадоксальным образом индуцировать топологическую изолирующую фазу, известную как топологический изолятор Андерсона, создавая щель подвижности в объеме, сохраняя при этом проводящие краевые состояния.

Примеры задач:

Задача 1

Сферическая квантовая точка CdSe радиусом $R=3,5$ нм моделируется в приближении «частица в сфере». Эффективная масса электрона составляет $m_e^*=0,13 m_0$, а ширина запрещенной зоны в объемном материале равна $E_e^{vol}=1,74$ эВ.

а) Рассчитайте энергию квантового ограничения ΔE_e для низшего энергетического уровня ($n=1, l=0$) электрона в зоне проводимости. Используйте формулу: $\Delta E = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m^* R^2}$.

б) Для корректного определения низшего оптического перехода в квантовой точке необходимо учесть квантование как электрона, так и дырки. Полагая, что дырка имеет эффективную массу $m_h^*=0,45 m_0$, рассчитайте общий сдвиг энергии из-за квантового ограничения $\Delta E_{total} = \Delta E_e + \Delta E_h$. Оцените энергию этого низшего оптического перехода, $\Delta E_{точка} = E_e^{vol} + \Delta E_{total}$.

Задача 2

Идеальный баллистический одномерный квантовый провод (квантовый точечный контакт), созданный в двумерном электронном газе, имеет три занятых распространяющихся моды (поперечных подзоны) на уровне Ферми.

а) Используя формулу Ландауэра-Бюттикера для двухконтактной схемы, рассчитайте проводимость G этого провода при нулевой температуре (квант проводимости равен $G_0 = 2e^2/h$).

б) Ширина провода постепенно уменьшается. Изобразите графически зависимость проводимости G от приложенного напряжения на затворе (которое контролирует ширину), показав характерные квантованные плато. Чему равно значение проводимости, когда занята только первая подзона?

Задача 3

Распространенная двухзонная модель $k \cdot p$ для прямозонного полупроводника вблизи Γ -точки дает следующую дисперсию для зоны проводимости (c) и валентной зоны (v):

$$E_{c,v}(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + \frac{E_g}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{E_g}{2}\right)^2 + \frac{\hbar^2 k^2 E_g P^2}{2m_0}},$$

где $E_g=1,5$ эВ – ширина запрещенной зоны, P^2 – матричный элемент импульса, m_0 – масса свободного электрона.

- а) Рассчитайте эффективную массу m^* электрона на дне зоны проводимости (указание: используйте соотношение $\frac{m_0}{m^*} \approx 1 + \frac{2P^2}{m_0 E_g}$, которое получено из разложения Тейлора $E_c(k)$).
- б) Используя эту эффективную массу, приближенно найдите разность энергий $E_c(k) - E_g$ для волнового вектора электрона $k = 1 \times 10^9 \text{ м}^{-1}$.

Задача 4

Модель Су-Шриффера-Хиггера (SSH) описывает одномерную цепочку с чередующимися амплитудами прыжков v (внутри димера) и w (между димерами). Для цепочки с периодическими граничными условиями гамильтониан объема имеет вид

$$H(k) = \begin{pmatrix} 0 & v + we^{-ika} \\ v + we^{ika} & 0 \end{pmatrix}, \text{ что приводит к дисперсионному соотношению } E_{\pm}(k) = \sqrt{v^2 + w^2 + 2vw \cos(ka)}.$$

- а) Рассчитайте щель в зонной структуре объема Δ для параметров $v = 0,4 \text{ эВ}$ и $w = 0,8 \text{ эВ}$.
- б) Система является топологической при $w > v$ и тривиальной при $w < v$. Предсказывает ли соответствие «объем-граница» существование топологически защищенных краевых состояний для конечной цепочки с открытыми границами и параметрами из пункта (а)? Обоснуйте ваш ответ.

Критерии оценивания:

Результаты контрольной работы определяются оценками «отлично», «хорошо», «удовлетворительно», «неудовлетворительно».

Оценка «отлично» выставляется, если даны правильные ответы на все теоретические вопросы и все задачи решены без ошибок.

Оценка «хорошо» выставляется, если ответы на теоретические и расчетные задачи решены правильно и допущены незначительные ошибки.

Оценка «удовлетворительно» выставляется, если хотя бы один из ответов теоретической или расчетные задачи решен правильно.

Оценка «неудовлетворительно» выставляется, если теоретическая или расчетные задачи решены неверно и слабо развито понимание предмета.

3. Оценочные материалы итогового контроля (промежуточной аттестации) и критерии оценивания

Экзаменационный билет состоит из трех частей.

Первая часть представляет собой тест из 3 вопросов, проверяющих ИУК-1.1. Ответы на вопросы первой части даются путем выбора из списка предложенных.

Вторая часть содержит один вопрос, проверяющий ИОПК-2.2. Ответ на вопрос второй части дается в развернутой форме.

Третья часть содержит 2 вопроса, проверяющих ИПК-3.3 и оформленные в виде практических задач. Ответы на вопросы третьей части предполагают решение задач и краткую интерпретацию полученных результатов.

Перечень теоретических вопросов:

1. Объясните причинно-следственную связь между типом кристаллической решетки и типом химической связи полупроводника, формированием его электронной зонной структуры и, как следствие, положением края фундаментального поглощения в оптическом спектре, подробно описав физику прямых и непрямых межзонных переходов.
2. Опишите, каким образом квантовое ограничение в системах пониженной размерности (квантовые ямы, проволоки, точки) трансформирует плотность электронных состояний, и объясните, как это количественное изменение плотности состояний качественно усиливает роль кулоновских взаимодействий, приводя к

- значительному увеличению энергии связи экситонов по сравнению с объемным материалом.
- Опишите последовательность применения метода $k \cdot p$ и приближения огибающей функции для расчета дисперсии носителей заряда в полупроводниковой квантовой яме, уделив особое внимание тому, как этот подход учитывает вырождение и смешивание валентных зон в точке Бриллюэна.
 - Сформулируйте основное уравнение проводимости Ландауэра-Бюттикера для мезоскопического проводника и используйте его, чтобы объяснить происхождение квантованных плато проводимости в баллистическом квантовом контакте, проводя четкое концептуальное различие между этим подходом и классической моделью Друде, основанной на времени релаксации.
 - Сформулируйте принцип соответствия «объем-граница» применительно к топологическим изоляторам и объясните, каким образом топологический инвариант, вычисленный для зонной структуры объема (например, Z_2 инвариант через анализ четностей), однозначно предсказывает существование безщелевых поверхностных состояний, обладающих свойством отсутствия обратного рассеяния на немагнитных примесях.
 - Объясните, как сильная спин-орбитальная связь в двумерном топологическом изоляторе (например, в квантовой яме HgTe/CdTe) приводит к инверсии зон и смене Z_2 инварианта, создавая в результате топологически защищенные спиральные краевые состояния. Опишите, в чем заключается свойство спиральности этих состояний и как оно обеспечивает отсутствие обратного рассеяния, лежащее в основе квантового спинового эффекта Холла.

Примеры задач:

Задача 1.

Рассмотрим квантовую яму GaAs/AlGaAs шириной $L_z=10\text{ нм}$. Эффективная масса электрона $m^* = 0.067 m_0$.

- Рассчитайте энергию первого размерного уровня ($n=1$) в приближении бесконечно глубокой потенциальной ямы.
- Определите плотность состояний для одной подзоны ρ_{2D}
- Оцените энергию перехода между первыми подзонами валентной зоны и зоны проводимости, если ширина запрещенной зоны GaAs $E_g=1.42\text{ эВ}$.

Задача 2.

Баллистический квантовый провод (одномерный) имеет 3 открытых канала с вероятностью прохождения $T_i=1$ для каждого.

- Рассчитайте проводимость провода при нулевой температуре.
- Как изменится проводимость, если ввести рассеяние, которое уменьшает вероятность прохождения до $T_i=0.9$ для всех каналов?
- Объясните физическую причину квантования проводимости в баллистическом режиме.

Задача 3.

В двумерном электронном газе (2DEG) в магнитном поле $B=5\text{ Тл}$ наблюдается плато квантового эффекта Холла при факторе заполнения $\nu=2$.

- Рассчитайте концентрацию двумерных электронов n_s . Используйте формулу $n_s = \nu \frac{eB}{h}$.
- Чему равно холловское сопротивление R_{xy} на этом плато?
- Объясните, почему в этом режиме продольное сопротивление R_{xx} обращается в ноль.

Задача 4.

В тонкой пленке магнитного топологического изолятора реализуется квантовый аномальный эффект Холла с квантованной холловской проводимостью $\sigma_{xy} = e^2/h$

- а) Рассчитайте соответствующее значение холловского сопротивления R_{xy}
- б) Объясните, почему для наблюдения этого эффекта не требуется внешнее магнитное поле, в отличие от обычного квантового эффекта Холла.
- в) Какова ожидаемая величина продольного сопротивления R_{xx} ?

Задача 5.

В модели Су-Шриффера-Хиггера (SSH) заданы прыжковые интегралы: $v=0.4\text{эВ}$ (внутри димера), $w=0.6\text{эВ}$ (между димерами).

- а) Рассчитайте ширину запрещенной зоны Δ в точке $k=\pi/a$.
- б) Определите, находится ли система в топологической фазе.
- в) Предскажите, должны ли существовать топологически защищенные краевые состояния в конечной цепочке. Ответ обоснуйте.

Критерии оценивания:

Результаты зачета с оценкой определяются оценками «отлично», «хорошо», «удовлетворительно», «неудовлетворительно».

Оценка «отлично» ставится, если студент твердо знает материал, грамотно и по существу излагает его, умеет применять полученные знания на практике, способен самостоятельно принимать и обосновывать решения, оценивать их эффективность. Оценка «хорошо» ставится, если студент твердо знает материал, грамотно излагает его, умеет применять полученные знания на практике, но допускает не критичные неточности в ответе. Оценка «удовлетворительно» ставится, если студент, показывает фрагментарный, разрозненный характер знаний, недостаточно точно формулирует базовые понятия. Оценка «неудовлетворительно» ставится, если студент не знает большей части основного содержания дисциплины, допускает грубые ошибки в формулировках основных понятий дисциплины.

4. Оценочные материалы для проверки остаточных знаний (сформированности компетенций)

Тест

Вопрос 1 (ИОПК 2.2)

Описать причинно-следственную связь между наличием запрещенной зоны в полупроводнике и зависимостью его удельной проводимости от температуры. Объяснить, как статистика равновесных носителей заряда (закон действующих масс) и механизмы их рассеяния на фононах совместно определяют характер этой зависимости в собственном полупроводнике.

Вопрос 2 (ИОПК 2.2)

Объяснить фундаментальный физический механизм, обеспечивающий квантование холловской проводимости в квантово-аномальном холловском изоляторе в отсутствие внешнего магнитного поля. Описать роль собственной намагниченности и сильной спин-орбитальной связи в создании топологически нетривиальной зонной структуры с ненулевым числом Черна, а также то, как это приводит к появлению хиральных краевых состояний, ответственных за квантованный транспорт.

Ответы:

Вопрос 1. Зависимость удельной проводимости (σ) собственного полупроводника от температуры (T) имеет сложный характер из-за конкуренции двух факторов:

1. Концентрация носители (n , p): существование запрещенной зоны (E_g) означает, что у полупроводника при низких температурах почти нет свободных носителей заряда. С ростом температуры тепловая энергия позволяет все большему числу электронов перейти из валентной зоны в зону проводимости. Этот процесс описывается законом действующих масс: концентрация носителей растет экспоненциально с температурой по закону $n_i \propto e^{-E_g/(2k_B T)}$. Этот фактор увеличивает проводимость.

2. Подвижность носителей (μ). Одновременно с этим, с ростом температуры увеличивается амплитуда тепловых колебаний кристаллической решетки (фононов). Это усиливает рассеяние носителей на фононах, что снижает их подвижность. Подвижность падает с температурой по степенному закону, примерно как $\mu \propto T^{-3/2}$. Этот фактор уменьшает проводимость. При низких и средних температурах доминирует экспоненциальный рост концентрации. Зависимость $\sigma(T)$ резко возрастает, и ее наклон определяется шириной запрещенной зоны E_g . При высоких температурах концентрация носителей становится очень большой, и ее экспоненциальный рост замедляется. В этот момент вклад спада подвижности становится сравнимым или даже преобладающим. В результате крутой рост проводимости сменяется более пологим участком, где проводимость может даже немного снижаться.

Таким образом, наличие запрещенной зоны является первоисточником сильной температурной зависимости проводимости, а характер этой зависимости определяется конкуренцией между экспоненциальным ростом концентрации (статистика носителей) и степенным спадом подвижности (механизмы рассеяния).

Вопрос 2.

Фундаментальный механизм квантования холловской проводимости в квантово-аномальном холловском изоляторе (КАХИ) в отсутствие внешнего магнитного поля реализуется за счет формирования топологически нетривиальной электронной структуры, характеризуемой ненулевым целочисленным топологическим инвариантом - числом Черна. Для этого требуется одновременное выполнение двух условий: во-первых, собственная намагниченность, возникающая, например, за счет магнитного легирования, что спонтанно нарушает симметрию обращения времени, создавая внутреннее обменное поле, которое расщепляет электронные зоны по спину. Во-вторых, сильная спин-орбитальная связь «закручивает» импульсную зависимость этих зон, придавая их геометрии в пространстве волновых векторов нетривиальную топологию, что математически выражается в возникновении ненулевой интегральной Берри-кривизны по зоне Бриллюэна; интеграл от этой кривизны по заполненным энергетическим зонам и дает значение числа Черна C , которое непосредственно определяет величину квантованной холловской проводимости по формуле $\sigma_{xy} = C \cdot e^2/h$. Согласно фундаментальному принципу объем-граничное соответствие, разрыв топологического инварианта на границе системы с вакуумом ($C=0$) компенсируется возникновением безщелевых проводящих состояний. В КАХИ эти состояния являются строго хиральными краевыми каналами, то есть электроны в них могут двигаться только в одном направлении вдоль границы. Поскольку для обращения направления движения электрону пришлось бы туннелировать на противоположный край образца (что экспоненциально подавлено в макроскопической системе), эти краевые каналы защищены от обратного рассеяния на любых слабых примесных потенциалах и дефектах. Именно эти баллистические, односторонние проводящие каналы и переносят ток без диссипации, обеспечивая наблюдаемое на эксперименте точное квантование холловского сопротивления $R_{xy} = h/(Ce^2)$ и нулевое продольное сопротивление $R_{xx} = 0$.

Теоретические вопросы:

1. Объясните, каким образом переход от трехмерного объемного полупроводника к системе пониженной размерности (квантовая яма, провод, точка) фундаментально изменяет механизм переноса заряда, начиная с трансформации плотности электронных состояний и заканчивая переходом от классического описания в рамках модели Друде к квантовой модели баллистического транспорта, основанной на формализме Ландауэра-Бюттикера, и подробно опишите, как квантование проводимости в баллистическом нанопроводе непосредственно вытекает из этого формализма (ПК-1, ИОПК 2.2).

Ключевые аспекты, которые должен раскрыть ответ:

- (а) Эволюция плотности состояний (DOS) при переходе от 3D к 2D, 1D и 0D.
- (б) Неадекватность модели Друде (основанной на времени релаксации) для мезоскопических систем.
- (в) Формулировка формализма Ландауэра-Бюттикера ($G = (2e^2/h) \sum T_i$)
- (г) Физическая интерпретация квантования проводимости ($G = T(2e^2/h)$) как следствия баллистического транспорта по N открытым каналам.

2. Основываясь на принципе соответствия «объем-граница», объясните механизм возникновения топологически защищенных поверхностных состояний в трехмерном топологическом изоляторе, начиная с роли сильной спин-орбитальной связи в создании топологически нетривиальной зонной структуры объема, характеризуемой Z_2 -инвариантом. Детально опишите, как такое объемное свойство проявляется в виде двумерных дираковских состояний на поверхности, обладающих такими уникальными свойствами, как отсутствие обратного рассеяния и слабая антилокализация (ПК-1, ИОПК 2.2).

Ключевые аспекты, которые должен раскрыть ответ:

- (а) Понятие топологического инварианта Z_2 для 3D системы.
- (б) Роль спин-орбитального взаимодействия в инверсии зон и смене топологической фазы.
- (в) Принцип «объем-граница» как причина возникновения поверхностных состояний.
- (г) Свойства поверхностных состояний: безщелевой дираковский спектр, спин-импульсная, запрет обратного рассеяния на немагнитных примесях.

Информация о разработчиках

Кумар Ниранджан, кандидат физ.-мат. наук, ТГУ, кафедра физики полупроводников, доцент.