新型半导体材料与器件仿真实验项目

**课程介绍与课件**

电子科学与技术专业及微电子科学与工程专业的教学内容中，涉及到半导体纳米材料与器件。纳米材料与器件的宏观物理特性是由材料的微观电子结构所决定的。但是，材料的微观电子结构无法直接观察和测量，对学生理解和掌握所学知识带来了一定的难度；其次，制备纳米材料时需要考虑很多因素，如起始反应物的选择、反应物用量和配比，反应条件的设计。为了获得性能好的产品，往往需要进行大量重复性的实验，对每一次实验结果进行分析检测，再改进方案重新实验。即不断反复试验、不断摸索、不断修改，一直到获得最佳的结果为止。如果需要摸索的条件多，实验研究的过程相应会增长，不利于提高研究效率。

通过虚拟仿真实验，以图形化、视频化的方式，栩栩如生的向学生展示了纳米材料的微观电子结构与宏观光学特性之间的关系；降低了实验成本。加深了学生对学科基础理论知识的理解，使学生掌握本专业领域常用的设计与仿真软件工具，增强学生分析问题、解决问题的能力，进而达到较佳的教学效果。

在教学中，以启发式教学为主的教学方法。采用录像、视频的形式，演示课程中所涉及的文物保护纳米涂层的作用，演示纳米材料的吸收光谱随纳米线尺寸的变化。这部分穿插在多媒体课件中实施，解决传统课程黑板讲述不直观的问题。激发学生的学习兴趣。每次实验前，将学生分成若干个小组，通过小组讨论，进行合作学习，培养学生的思维表达能力，让学生多多参与，亲自动手、亲自操作、激发学习兴趣、促进学生主动学习。小组讨论后，指导教师先进行一个基本的实验流程操作，对一些关键或容易出错之处进行强调，使学生首先有一个感性的认识。每次实验都编排有依实验过程的相关问题的实验报告，学生一边实验操作一边思考，达到对理论或难点知识的深刻理解。为了给学生提供一个良好的实验条件, 在课后学生可以在校园网内任何网络端口可全天候上机实践，并与指导老师进行交互。若有任何问题，学生可以在网络平台给教师留言，进行意见反馈。

|  |
| --- |
| **2-1名称**文物防紫外线保护新材料的设计仿真 |
| **2-2实验目的**本实验通过材料设计软件，建立不同尺寸的一维ZnO纳米线，研究ZnO纳米线的光学吸收谱随纳米线尺寸的变化规律，设计出具有较好的抗紫外线特性、可用于文物保护方面的ZnO纳米线材料。相对于传统的实验研究，本实验采用计算机模拟纳米材料的结构与光学性质，使学生能主动地对材料进行结构与功能的优化与控制，从而实现材料制备的“按需定做”。通过该实验，可以激发学生兴趣，启发学生创新思维；同时，引导学生转变传统的实验研究制备材料的观念，提高自身创新素质。 |
| **2-3实验原理（或对应的知识点）**紫外线对文物具有很大的危害作用，紫外线的照射能够使彩绘文物褪色、变色以及表面的彩绘脱落，能够银器变黑，同时使纤维类文物产生光解。纳米材料具有抗紫外线的特征，在保护文物免受紫外线损害方面起到了非常重要的作用。例如ZnO、TiO2等纳米材料，它们本身具有半导体的特性，可以通过吸收或者散射紫外线来减小紫外线的通过率。同时，纳米颗粒的量子尺寸效应使其在吸光时产生“宽化”和“蓝移”现象进而增强了对紫外线的吸收作用。知识点：1半导体物理能带结构理论2 纳米材料的量子效应3 半导体的光学特性 |
| **2-4实验仪器设备（装置或软件等）**1硬件平台：IBM 服务器2软件平台：材料设计软件Materials Studio 8.0 |
| **2-5实验材料（或预设参数等）**几何结构优化时，需要对计算参数进行可靠性测试，如计算体系的赝势、平面波截断能、布里渊区的采样点（K-point）及交换关联泛函。具体的计算参数设置范围如表1所示：

|  |  |
| --- | --- |
| 赝势 | Ultrasoft |
| 截断能 | 340~420eV |
| K点 | 1×1×5~1×1×9 |
| 交换关联泛函 | GGA-PBE，GGA-PW91，GGA-WC |
| 收敛精度 | 1×10-6eV/atom |

 |
| **2-6 实验教学方法（举例说明采用的教学方法的使用目的、实施过程与实施效果）**以启发式教学为主的教学方法。1）采用录像、视频的形式，演示课程中所涉及的文物保护纳米涂层的作用，演示纳米材料的吸收光谱随纳米线尺寸的变化。这部分穿插在多媒体课件中实施，解决传统课程黑板讲述不直观的问题。激发学生的学习兴趣。2）小组讨论。每次实验前，将学生分成若干个小组，通过小组讨论，进行合作学习，培养学生的思维表达能力，让学生多多参与，亲自动手、亲自操作、激发学习兴趣、促进学生主动学习。3）实验演示。小组讨论后，指导教师先进行一个基本的实验流程操作，对一些关键或容易出错之处进行强调，使学生首先有一个感性的认识。4）实验操作。每次实验都编排有依实验过程的相关问题的实验报告，学生一边实验操作一边思考，达到对理论或难点知识的深刻理解。5）网络教学。实验教学课堂时间的安排毕竟有限。为了给学生提供一个良好的实验条件, 在课后学生可以在校园网内任何网络端口可全天候上机实践，并与指导老师进行交互。 |
| **2-7实验方法与步骤要求（学生操作步骤应不少于10步）**1、模型的建立（1）双击桌面的Materials Studio图标，进入Materials Studio材料设计软件界面；（2）新建一个名为“ZnO nanowire”的工程文件；（3）采用超晶胞的方法建立7×7×1的纤锌矿结构ZnO超胞，如图1所示：图1 7×7×1纤锌矿结构ZnO超胞(红色球代表O原子，灰色球代表Zn原子)（4）在7×7×1纤锌矿结构ZnO超胞内，截取不同尺寸（直径从0.4nm到3nm左右）的ZnO纳米线模型，具体截取的纳米线如图2所示，一个单胞内对应的原子数目分别为12、20、26、32、38、48、108。  图2 不同形状的ZnO纳米线结构俯视图2、几何结构优化不同尺寸ZnO纳米线的模型建立完成后，需要设置合理的计算参数，对图2所示不同尺寸的ZnO纳米线进行几何结构优化。具体步骤如下：1. 在Materials Studio 软件的菜单栏，点击Modules→CASTEP→Calculation，出现如图3界面；

 图3 CASTEP模块计算参数设置界面 (2)几何结构优化中计算参数的设置；几何结构优化时，需要对计算参数进行可靠性测试，如计算体系的赝势、平面波截断能、布里渊区的采样点（K-point）及交换关联泛函。具体的计算参数设置范围如表1所示，

|  |  |
| --- | --- |
| 赝势 | Ultrasoft |
| 截断能 | 340~420eV |
| K点 | 1×1×5~1×1×9 |
| 交换关联泛函 | GGA-PBE，GGA-PW91，GGA-WC |
| 收敛精度 | 1×10-6eV/atom |

3、光学性质的计算几何结构优化完成后，需要对优化好的不同尺寸ZnO纳米线的光学性质进行计算，得到其吸收系数与纳米线尺寸的关系。光学性质计算时，计算参数的设置同几何结构优化。 |
| **2-8实验结果与结论要求**图4 几种典型ZnO纳米线的光吸收图谱(剪刀算符修正值2.43eV)图4是优化参数条件下几种典型的ZnO纳米线以及体ZnO的光吸收谱，从图中可以看出，随着ZnO纳米线尺寸的减小，由于禁带宽度变宽，纳米线吸收光谱都向短波长方向移动，即发生了蓝移现象，且所有的吸收光谱波长均对应于紫外波段，表明ZnO纳米线是一种可用于紫外光器件开发的优选材料。同时，ZnO纳米线随着尺寸的变化所表现出的光谱连续可调的特性，将有利于人们设计出具有较好的抗紫外线特性、可用于文物保护方面的ZnO纳米线材料。 |
| **2-9考核要求**1新型功能材料设计仿真的内涵与定义2能直接从理论模型和计算，预测及设计新材料的结构与性能3学会如何筛选满足需求的ZnO纳米线 |
| **2-10面向学生要求****（1）专业与年级要求**电子科学与技术专业四年级学生、微电子科学与工程专业四年级学生**（2）基本知识和能力要求等**掌握MS软件的基本操作。具有半导体物理学基础知识和固体物理的基本知识背景 |

3.实验教学项目相关网络要求描述

|  |
| --- |
| **3-1有效链接网址** |
| **3-2网络条件要求**（1）说明客户端到服务器的带宽要求（需提供测试带宽服务）带宽 > 100 Mbps（2）说明能够提供的并发响应数量（需提供在线排队提示服务）并发响应数不少于10个。 |
| **3-3用户操作系统要求（如Windows、Unix、IOS、Android等）**（1）计算机操作系统和版本要求Windows XP以上（2）其它计算终端操作系统和版本要求 |
| **3-4用户非操作系统软件配置要求（如浏览器、特定软件等）**（1）计算机非操作系统软件配置要求（需说明是否可提供相关软件下载服务）Xmanager v2.0版本以上。可提供此软件下载。（2）其它计算终端非操作系统软件配置要求（需说明是否可提供相关软件下载服务） |
| **3-5用户硬件配置要求（如主频、内存、显存、存储容量等）**（1）计算机硬件配置要求主频：> 3 GHz内存： > 4 GB显存： > 256 MB存储容量（硬盘）： > 500 GB1. 其它计算终端硬件配置要求

无 |
| **3-6用户特殊外置硬件要求（如可穿戴设备等）**（1）计算机特殊外置硬件要求无1. 其它计算终端特殊外置硬件要求

无 |