**МИНОБРНАУКИ РОССИИ**

**САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ**

**ЭЛЕКТРОТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ**

**«ЛЭТИ» ИМ. В.И. УЛЬЯНОВА (ЛЕНИНА)**

**Кафедра Микрорадиоэлектроники и технологии радиоаппаратуры (МИТ)**

# ОТЧЕТ

**по ИДЗ**

**по дисциплине «ОЭиР»**

**Тема: Исследование контактных явлений в структуре металл-полупроводник**

**Вариант 14,6,3**


| | | |
|---|---|---|
| Студент гр. 1181 | _________________ | Шишков Д.А. |
| Преподаватель | _________________ | Филипюк И.А |


Санкт-Петербург

2023

Задание:

Для заданной пары металл-полупроводник оценить кинетические свойства заданных материалов, рассчитать и построить энергетическую диаграмму и вольт-амперную характеристику контакта в заданном диапазоне температур, дать рекомендации по применению исследуемого контакта.

*Таблица 1. Некоторые свойства металлов*

| No ВАР. | Элемент | Структура | Атомная масса | Параметр решетки, Å | Плотность, г/см3 | Удельное сопротивление, мкОм·см | Температура, К | | | Работа выхода φ, эВ |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| | | | | | | | Дебая (TD) | Ферми ($TF\cdot10^{-4}$) | плавления (Тпл) | |
| 14 | Au | ГЦК | 196.9 | 4.08 | 19.28 | 2.2 | 165 | 6.39 | 1337 | 4.58 |

1) Определить класс симметрии заданных материалов, построить прямую и обратную элементарные ячейки заданных материалов. Определить размеры Зоны Бриллюэна в направлениях X, L, K.

Гранецентрированная Кубическая решётка

Формула симметрии: $3L_4 4L_3 6L_2 9PC$

Класс симметрии: m3m

Так как формулы симметрии ГЦК и простой кубической решётки совпадают, приведём на рис. 1-3 изображения осей, плоскостей и центра симметрии для последнего

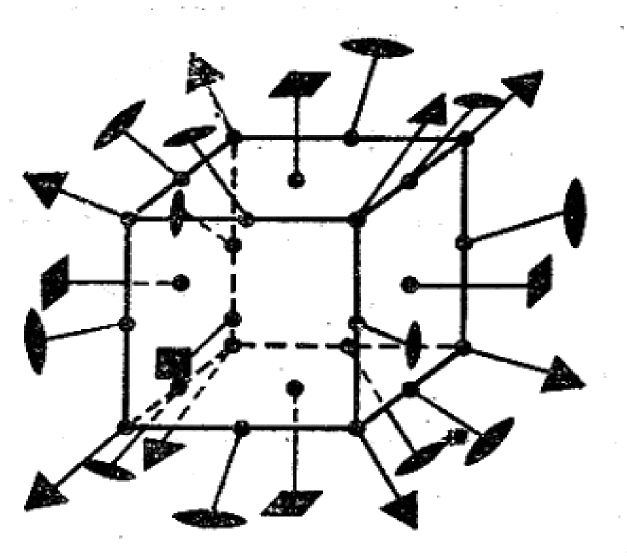

Рис. 1 Изображение осей симметрии кубической решётки

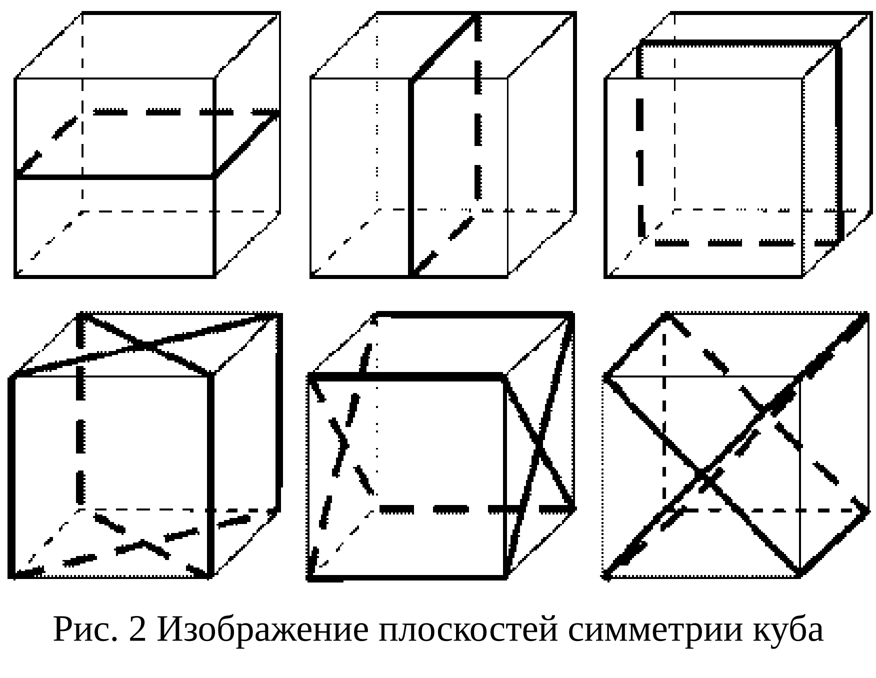

Рис. 2 Изображение плоскостей симметрии куба

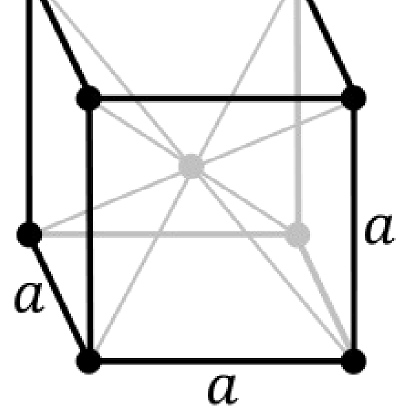


Рис. 3 Изображение центра симметрии куба

Базисные вектора:

$a_1=\begin{bmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}}\\ \frac{1}{\sqrt{2}}\\ 0\end{bmatrix}, a_2=\begin{bmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}}\\ 0\\ \frac{1}{\sqrt{2}}\end{bmatrix}, a_3=\begin{bmatrix}0\\ \frac{1}{\sqrt{2}}\\ \frac{1}{\sqrt{2}}\end{bmatrix}$, считая, что постоянная решётки = 1

Построим кристаллическую решётку по заданным векторам (рис. 4)

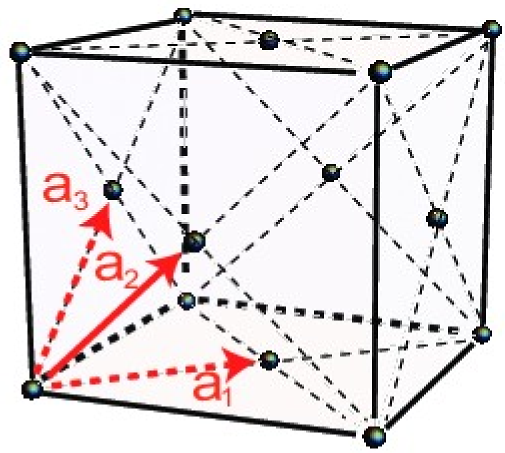


Рис. 4 ГЦК

Объём элементарной ячейки:

$$V=|\vec{a}_1\cdot[\vec{a}_2\times a_3]|=\frac{1}{\sqrt{2}}$$

Базисные вектора обратной решётки:

$$a_i^*=\frac{2\pi}{V}[a_j\times a_k], i\neq j\neq k$$

$$a_1^*=\begin{bmatrix}\sqrt{2}\pi\\ -\sqrt{2}\pi\\ -\sqrt{2}\pi\end{bmatrix}, a_2^*=\begin{bmatrix}-\sqrt{2}\pi\\ \sqrt{2}\pi\\ -\sqrt{2}\pi\end{bmatrix}, a_3^*=\begin{bmatrix}-\sqrt{2}\pi\\ -\sqrt{2}\pi\\ \sqrt{2}\pi\end{bmatrix}$$

Изобразим её на рис. 5

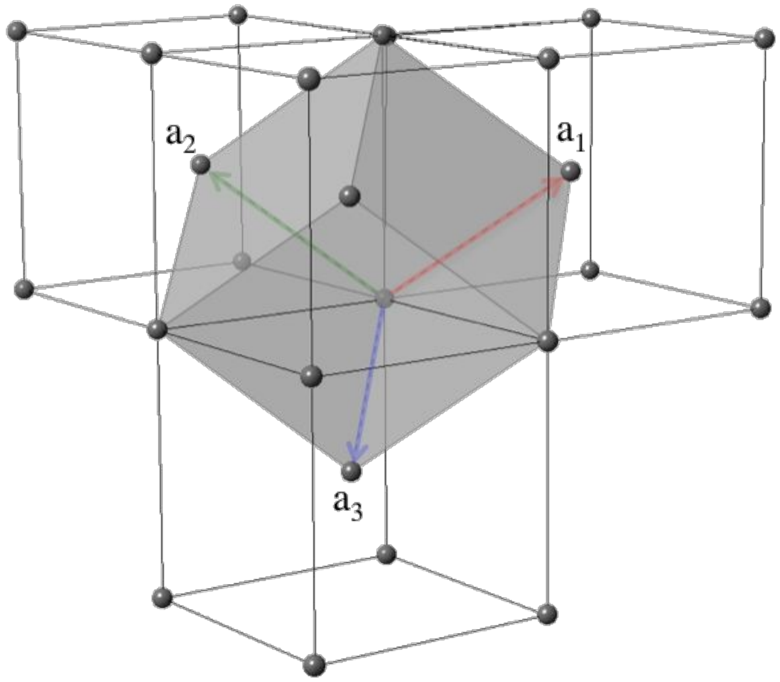


Рис. 5 Обратная решётка ГЦК

Первая зона Бриллюэна (рис. 6):

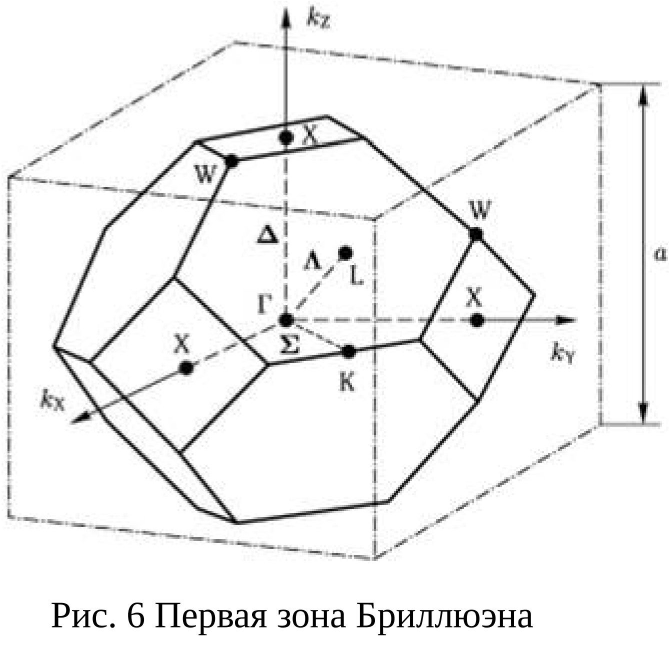


Рис. 6 Первая зона Бриллюэна

Размеры зоны Бриллюэна по направлениям X, L, K:

$X=\begin{bmatrix}0\\0\\1\end{bmatrix}$ - центр верхнего квадрата

$L=\begin{bmatrix}0.5\\0.5\\0.5\end{bmatrix}$ - центр шестиугольника

$K=\begin{bmatrix}0.75\\0.75\\0\end{bmatrix}$ - середина грани соединяющей два шестиугольника

2) Определить концентрацию электронов для заданного металла из условия касания зоны Бриллюэна и сферы Ферми и сделать суждение о применимости теории свободных электронов.

В момент касания волновой вектор kф, соответствующий радиусу сферы Ферми, равен волновому вектору kз, при котором в направлении, перпендикулярном отражающим плоскостям, выполняется уравнение Вульфа-Брэггов. Условия касания для двумерной модели можно записать в виде $k_ф=k_з$ или, поскольку $k=2\frac{\pi}{\lambda}$, то $\lambda_ф=\lambda_з$.

Объем сферы Ферми в пространстве импульсов равен $\frac{4}{3}\pi p_ф^3$ , где $p_ф$ – импульс электронов на поверхности Ферми. С другой стороны, этот же объем равен $\frac{N}{2}\frac{h^3}{V}$ , где N – число электронов в объеме V. Таким образом:

$$\frac{4}{3}\pi p_ф^3=\frac{N}{2}\frac{h^3}{V}$$

Откуда находим:

$$p_ф=h\left(\frac{3N}{8\pi V}\right)^{1/3}$$

Поскольку по соотношению де-Бройля $\lambda=\frac{h}{p}$, то $\lambda_ф=\left(\frac{8\pi V}{3N}\right)^{1/3}$

Найдем теперь λз. Из всех граней первой зоны Бриллюэна для гранецентрированной решетки ближе всего к началу координат находятся грани, обусловленные отражением электронов от плоскостей {111}. Поэтому сфера Ферми впервые коснется именно этих граней. Таким образом, для определения условий касания сферы с первой зоной Бриллюэна необходимо найти длину волны, при которой электроны взаимодействуют с плоскостями {111}. Из уравнения Вульфа – Бреггов $n\lambda=2d\sin\theta$ находим:

3

$$\lambda_з=2d=2\frac{a}{\sqrt{H^2+K^2+L^2}}=2\frac{a}{\sqrt{3}}$$

(здесь θ = 90°, так как в точке касания волновой вектор перпендикулярен к плоскостям {111}; п = 1, так как λ–наибольшее)

Если в объеме V число атомов Na, то число элементарных ячеек будет $\frac{N_a}{4}$, так как на одну ячейку гранецентрированной решетки приходится четыре атома, тогда $V = a^3 \frac{N_a}{4}$

Откуда $a = \left(\frac{4V}{N_a}\right)^{1/3}$, следовательно $\lambda_з = \frac{2}{\sqrt{3}}\left(\frac{4V}{N_a}\right)^{1/3}$

Возводя обе части этого тождества в куб и произведя необходимые сокращения, получаем:

$$\frac{N}{N_a} = \frac{\pi\sqrt{3}}{4} = 1.36$$

Список литературы:

Астанин В.В. Физика твёрдого тела