



Δημοκρίτειο Πανεπιστήμιο Θράκης
 Τμήμα Ηλεκτρολόγων Μηχανικών και Μηχανικών Υπολογιστών
 Προπτυχιακό Πρόγραμμα Σπουδών Τμήματος ΗΜΜΥ
 Ακαδ. Έτος 2023-2024

ΕΠΙΣΤΗΜΗ ΥΛΙΚΩΝ

Διάλεξη 4 δεύτερο μέρος
 Δομή των κρυσταλλικών στερεών
 Ατέλειες – Διάχυση

Κρυσταλλικές δομές

Περιεχόμενα

Δομές μετάλλων
 Δομές ημιαγωγών
 Περίθλαση
 Αντίστροφο πλέγμα

Μεταλλικές κρυσταλλικές δομές



Όλα σχεδόν τα μέταλλα κρυσταλλώνονται σε μία από τις δομές

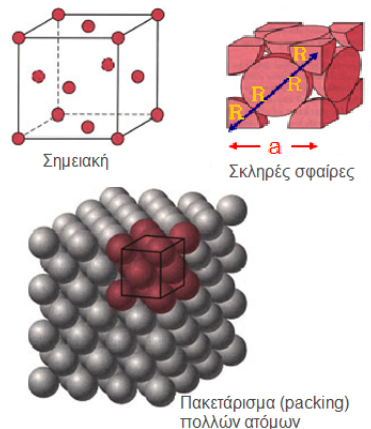
- Ολοδεδικά κεντρωμένο (fcc)
- Ενδοκέντρωμένο (bcc)
- Εξαγωνικό συμπαγούς συσσωμάτωσης (hcp)

(Εξαιρεση αποτελούν μόνο τα Mn, Sn, Ga, In, Hg, U, Pu, Pa, Sb και Bi)

Χαρακτηριστικά μοναδιαίας κυψελίδας:

1. Αριθμός ατόμων ανά κυψελίδα
 2. Σταθερά πλέγματος a (ελάχιστη ενδοατομική απόσταση)
 3. Όγκος κυψελίδας
 4. Αριθμός συναρμογής (είναι ο αριθμός πλησιέστερων γειτονικών ατόμων σε επαφή με ένα άτομο)
5. Ατομικός παράγοντας πληρότητας $APF = \frac{\text{Όγκος ατόμων στην κυψελίδα}}{\text{Όγκος κυψελίδας}}$
6. Θέσεις ατόμων στη βάση του πλέγματος

Τρεις τρόποι απεικόνισης μοναδιαίας κυψελίδας

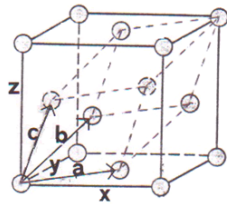


Δομές μετάλλων : Εδροκεντρωμένο κυβικό fcc

Πρωτογενής (θεμελιώδης) κυψελίδα :

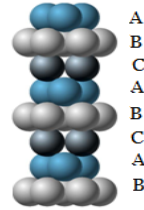
- Ρομβοεδρική (διακοπτόμενη γραμμή)
- Κρυσταλλικοί άξονες : a, b, c
- 8 1/8 πλεγματικά σημεία στις κορυφές = 1
- Τα πρωτογενή διανύσματα σχηματίζουν γωνία 60 μοίρες

$a = \alpha/2(x_0 + y_0), \quad b = \alpha/2(y_0 + z_0), \quad c = \alpha/2(x_0 + z_0)$



α) Μοναδιαία κυβική κυψελίδα (συνεχής γραμμή) και ρομβοεδρική πρωτογενής κυψελίδα (διακοπτόμενη γραμμή) του fcc, όπου φαίνονται τα πρωτογενή διανύσματα.

Με την παραδοχή των σφαιρικών ατόμων η τακτοποίηση αυτή παρέχει την πυκνότερη δομή ελαχιστοποιώντας τον όγκο



Δομές μετάλλων: Εδροκεντρωμένο κυβικό fcc

Χαρακτηριστικά μοναδιαίας κυψελίδας

•Αριθμός ατόμων/μοναδιαία κυψελίδα: 8 . 1/8 στις κορυφές και 6 . 1/2 στο κέντρο των εδρών = 4

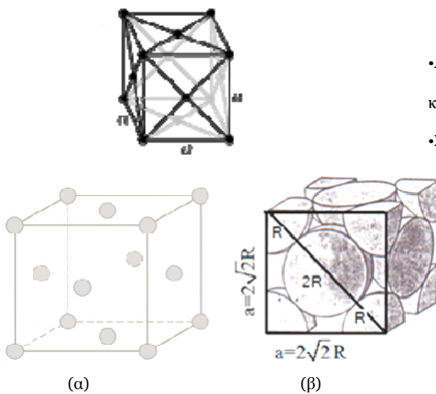
•Σχέση μεταξύ ακτίνας R και πλεγματικής σταθεράς a:

$$(4R)^2 = 2a^2 \Rightarrow 4R = a\sqrt{2} \Rightarrow a = \frac{4R}{\sqrt{2}} = 2\sqrt{2} R$$

Αριθμός συναρμογής=12

$$V_{\text{μοναδιαίας κυψ.}} = a^3 = (2\sqrt{2}R)^3 = 16\sqrt{2}R^3$$

$$APF = \frac{V_{\text{ατόμων}}}{V_{\text{κυψελίδας}}} = \frac{4 \times \frac{4}{3} \pi R^3}{V_c} = \frac{4 \times \frac{4}{3} \pi R^3}{\left(\frac{4R}{\sqrt{2}}\right)^3} = 0,74$$



α) Μοναδιαία κυψελίδα (μικρές σφαίρες για ευκρίνεια)
β) έχει σχεδιαστεί μόνο το μέρος των ατόμων που ανήκει στην κυψελίδα.

FCC Κρύσταλλοι : Μέταλλα Al, Cu, Ni, Pd, Ag, Au, Pb, γ-Fe, β-Co.
Οι ημιαγωγοί πυρίτιο, γερμάνιο, και τα διηλεκτρικά NaCl, αδάμας (τροποποιημένο fcc πλέγμα)

Δομές μετάλλων : Ενδοκεντρωμένο κυβικό (body centered cubic, bcc)

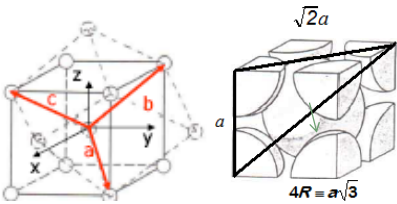
Μοναδιαία κυψελίδα: κύβος

- Κρυσταλλικοί άξονες : x, y, z
- 8 1/8 πλεγματικά σημεία στις κορυφές και 1 σημείο στο κέντρο του κύβου= 2

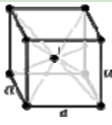
Πρωτογενής κυψελίδα : Ρομβοεδρική

- Κρυσταλλικοί άξονες : **a, b, c**
- 8 1/8 πλεγματικά σημεία στις κορυφές =1
- Τα πρωτογενή διανύσματα σχηματίζουν γωνία 60

$a = a/2(x_0 + y_0 - z_0)$, $b = a/2(-x_0 + y_0 + z_0)$, $c = a/2(x_0 - y_0 + z_0)$



α) Μοναδιαία κυβική (συνεχής γραμμή) και πρωτογενής ρομβοεδρική (διακοπτόμενη γραμμή) κυψελίδα του bcc, όπου φαίνονται τα πρωτογενή διανύσματα (κόκκινο χρώμα). Στο β) έχει σχεδιαστεί μόνο το μέρος των ατόμων που ανήκει στην κυψελίδα.



Μοναδιαία κυβική κυψελίδα του bcc πλέγματος

Χαρακτηριστικά μοναδιαίας κυψελίδας

- Άτομα στις κορυφές και στο κέντρο του κύβου
- Αριθμός ατόμων / κυψελίδα: $8 \cdot 1/8 + 1 = 2$
- Σχέση μεταξύ ακτίνας R και πλεγματικής σταθεράς a:
 $(4R)^2 = 3a^2 \Rightarrow 4R = a\sqrt{3} \Rightarrow a = \frac{4R}{\sqrt{3}}$
- Αριθμός συναρμογής= 8: κεντρικό άτομο σε επαφή με 8 άτομα στις κορυφές
- Ατομικός παράγοντας πληρότητας = 0,68

$$APF = \frac{V_{atoms}}{V_{cell}} = \frac{2 \left(\frac{4}{3} \pi \left[\frac{a\sqrt{3}}{4} \right]^3 \right)}{a^3} = \frac{\sqrt{3} \pi}{8} = 0,68$$

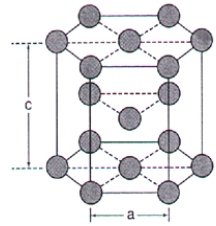
- ο κρύσταλλος bcc δεν αποτελεί συμπαγή δομή
- Πικνότερα σε άτομα επίπεδα: επίπεδα {110}
- Πικνότερες διευθύνσεις σε άτομα: τέσσερες διαγώνιες του κύβου με δείκτες Miller <111>

BCC Κρύσταλλοι : Μέταλλα Na, K, V, Cr, Fe, Rb, Nb, Mo, Ba, Eu, Ta .

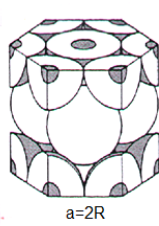
Δομές μετάλλων: Εξαγωνικό συμπαγούς συσσωμάτωσης (hexagonal closed packed, hcp)

Χαρακτηριστικά μοναδιαίας κυψελίδας

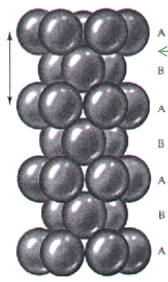
- Άτομα στις κορυφές, στο κέντρο των δύο εξαγώνων και τρία εσωτερικά
- Αριθμός ατόμων / κυψελίδα: $12 \cdot \frac{1}{6} + 2 \cdot \frac{1}{2} + 3 = 6$
- Σταθερές πλέγματος : $a = 2R$, $c/a = \sqrt{8/3} = 1,633$
- Αριθμός συναρμογής: 12
- Ατομικός παράγοντας πληρότητας = 74%



(α)



(β)



(γ)


Με την παραδοχή των σφαιρικών ατόμων η τακτοποίηση αυτή παρέχει την πικνότερη δομή ελαχιστοποιώντας τον όγκο

(α) Μοναδιαία κυψελίδα του hcp, (β) έχει σχεδιαστεί μόνο το μέρος των ατόμων που ανήκει στην κυψελίδα, και (γ) διάταξη των ατόμων σε μια hcp δομή.

Δομές μετάλλων

fcc bcc hcp

Δομές συγκεκριμένων μετάλλων

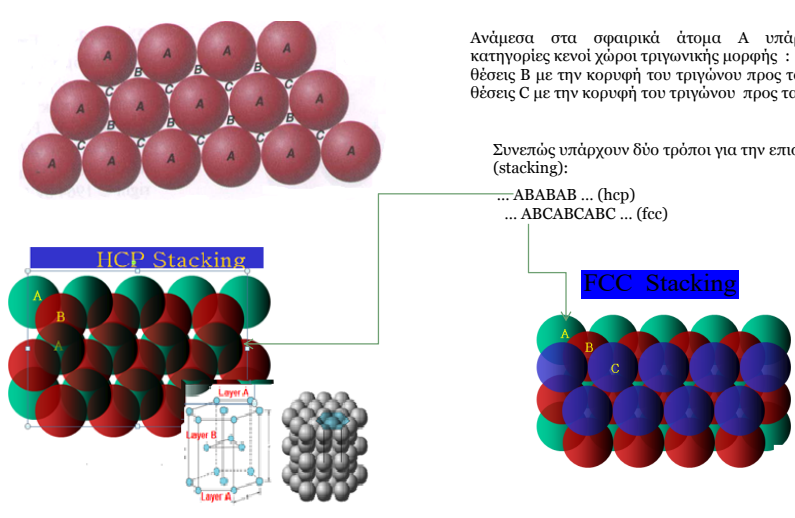


Μέταλλο		Κρυσταλλική Δομή	Ατομική Ακτίνα (nm)	Μέταλλο		Κρυσταλλική Δομή	Ατομική Ακτίνα (nm)
Αλουμίνιο	Al	FCC	0,1431	Μολυβδαίνο	Mo	BCC	0,1363
Κάδμιο	Cd	HCP	0,1490	Νικέλιο	Ni	FCC	0,1246
Χρώμιο	Cr	BCC	0,1249	Λευκόχρυσος	Pt	FCC	0,1387
Κοβάλτιο	Co	HCP	0,1253	Άργυρος	Ag	FCC	0,1445
Χαλκός	Cu	FCC	0,1278	Ταντάλιο	Ta	BCC	0,1430
Χρυσός	Au	FCC	0,1442	Τιτάνιο	Ti	HCP	0,1445
Σίδηρος (α)	Fe	BCC	0,1241	Βολφράμιο	W	BCC	0,1371
Μόλυβδος	Pd	FCC	0,1750	Ψευδάργυρος	Zn	HCP	0,1332

Τα FCC και HCP ονομάζονται συμπαγείς δομές (πετυχαίνουν κατάληψη του ελάχιστου όγκου)

Δομές μετάλλων

Περιγραφή πυκνών δομών fcc και hcp (APF=74%) με βάση τον τρόπο που στοιβάζονται πυκνά ατομικά επίπεδα στον κρύσταλλο:
(ελαχιστοποιεί τον τελικό όγκο)

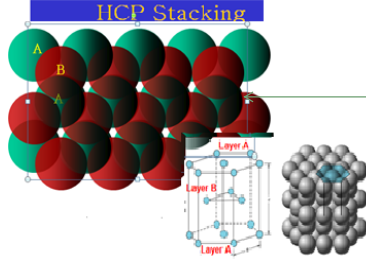


Ανάμεσα στα σφαιρικά άτομα A υπάρχουν δύο κατηγορίες κενoi χώροι τριγωνικής μορφής :
θέσεις B με την κορυφή του τριγώνου προς τα πάνω και θέσεις C με την κορυφή του τριγώνου προς τα κάτω

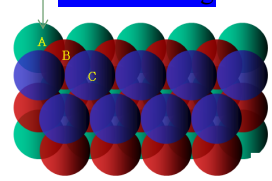
Συνεπώς υπάρχουν δύο τρόποι για την επιστοιβασία (stacking):

- ...ABABAB ... (hcp)
- ...ABCABCABC ... (fcc)

HCP Stacking

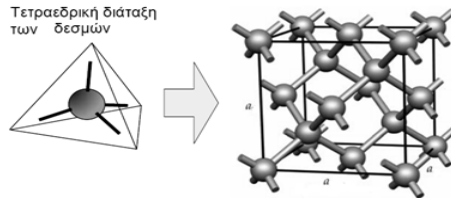


FCC Stacking

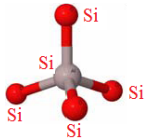


Δομές Ημιαγωγών

Η δομή του πυριτίου: έχει τη δομή του διαμαντιού
 Η δομή του διαμαντιού: προκύπτει από την τετραεδρική συμμετρία των τεσσάρων δεσμών ανά άτομο άνθρακα



Διαμάντι: α) Ένα άτομο άνθρακα με τέσσερα ισόδυναμα τριγωνικά sp^3 που διεκθύνονται στις κορυφές ενός κανονικού τετραέδρου. β) Η δομή του διαμαντιού

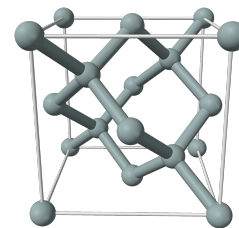


Κρύσταλλος Si
 Υβριδικά Τριγωνικά sp^3
 Γωνία δεσμού: $109,5^\circ$
 Ακτίνα ατόμου: $0,11nm$
 Σταθερά πλέγματος: $a=0,357nm$
 Μήκος δεσμού: $0,235nm$
 Ακτίνα ατόμου: $0,11nm$
 Ατομικό βάρος: $28,0855$

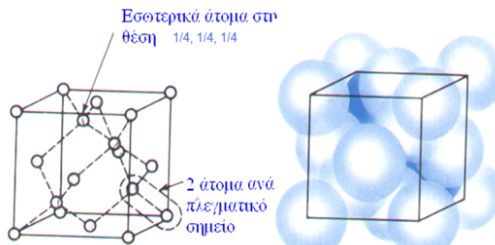
- Δεσμοί μόνο μεταξύ συγκεκριμένων ατόμων
- Σημαντική ανισοτροπία
- Διάφοροι τρόποι περιγραφής:
 FCC + τέσσερα εσωτερικά άτομα
 Δύο FCC με διαγώνια μετατόπιση κατά ένα δεσμό

Δομές Ημιαγωγών-Η δομή του πυριτίου :

Μοναδιαία κυψελίδα (όχι πρωτογενής) ο κύβος
 Σταθερά πλέγματος: $a = \frac{8R}{\sqrt{3}}$
 Αριθμός ατόμων ανά κυψελίδα : $8 \cdot \frac{1}{8} + 6 \cdot \frac{1}{2} + 4 = 8$
 Αριθμός συναρμογής: 4
 Ατομικός παράγοντας πληρότητας: $APF = \frac{\pi}{16} \cdot \sqrt{3} = 34\%$



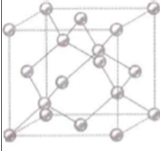
Μοναδιαία κυψελίδα :
 Αυτή της δομής FCC αλλά με βάση 2 ατόμων
 Βάση : περιλαμβάνει δύο κόμβους πλέγματος στις θέσεις : $(1,0,0)$, $(1/4, 1/4, 1/4)$



Μοναδιαία κυψελίδα , διάταξη των ατόμων

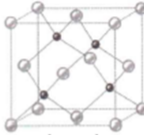
Δομές Ημιαγωγών

Στοιχειώδεις Ημιαγωγοί: Si, Ge, Sn
(Δομή διαμαντιού)



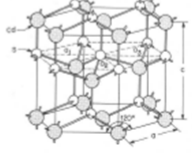
Δύο FCC του ίδιου υλικού

Σύνθετοι Ημιαγωγοί III-V: GaAs, GaN, AlAs, InPs
(Δομή Zincblende)



Ένα FCC του ενός υλικού, και ένα του άλλου

Σύνθετοι Ημιαγωγοί II-VI: CdS, HgTe, CdTe
(Δομή Wurtzite)

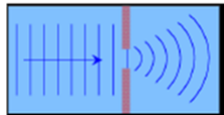


Ένα HCP του ενός υλικού, και ένα του άλλου

Sze. Physics of Semiconductor Devices

Περιθλαση-Ανάλυση δομής κρυστάλλων

Γενικά για την περιθλαση (Diffraction)



Κάθε σημείο του μετώπου ενός κύματος: πηγή

Περιθλαση : το φαινόμενο όπου τα κύματα παρακάμπτουν εμπόδια που συναντούν κατά τη διάδοσή τους (απόκλιση του φωτός από την αρχικά ευθύγραμμη πορεία του)

Στο χώρο

Δύο σήματα: $I_1(x)=A \sin(kx+\phi_1)$, $I_2(x)=B \sin(kx+\phi_2)$

$\Delta\phi = \phi_1 - \phi_2$: διαφορά φάσης

Συμβολή: μεταβολή της έντασης του κύματος εξαιτίας της επαλληλίας των επιμέρους πλάτων
Αρχή της επαλληλίας: Αλγεβρική άθροιση

Ενισχυτική συμβολή (διαφορά φάσης: 0)
Καταστρεπτική συμβολή (διαφορά φάσης: π)

(b)

1. A plane wave is incident on the double slit.
2. Waves spread out behind each slit.
3. The waves interfere in the region where they overlap.
4. Bright fringes occur where the antinodal lines intersect the viewing screen.

Top view of the double slit

Central maximum

$m = 4$
 $m = 3$
 $m = 2$
 $m = 1$
 $m = 0$
 $m = 1$
 $m = 2$
 $m = 3$
 $m = 4$

Copyright © 2008 Pearson Education, Inc., publishing as Pearson Addison-Wesley.

Περιθλαση

Περιθλαση ακτίνων X σε κρυσταλλική δομή
 Ακτίνες X: μήκος κύματος ~ σταθερά πλέγματος

$\Delta\phi = AB + BC$
 Εισαγωγική συμβολή: $k(AB + BC) = 2\pi n$
 Γεωμετρία: $AB = BC = d_{hkl} \sin\theta$
 Κυματριθμός: $k = 2\pi/\lambda$

Νόμος του Bragg:
 $2d_{hkl} \sin\theta = n\lambda, \quad (n = 1, 2, \dots, n)$

Αριθμός δυνατών ανακλάσεων
 $\sin\theta = \frac{n\lambda}{2d_{hkl}} \leq 1 \Rightarrow n \leq \frac{2d_{hkl}}{\lambda}$

Η απόσταση d για ορθογώνιο σύστημα αξόνων: $d_{hkl} = \frac{1}{\sqrt{\frac{h^2}{a^2} + \frac{k^2}{b^2} + \frac{l^2}{c^2}}}$

ενταση x-ray από ανιχνευτή
 Μεταβολή λ ή θ: μεταβολή έντασης περιθλωμένων κυμάτων

Περιθλαση

Νόμος του Bragg $2 d \sin\theta = n \lambda$

Για κάθε στοιχείο και για κάθε κρυσταλλογραφική επιφάνεια :
 Συγκεκριμένο d.
 _ Άρα μέγιστα για συγκεκριμένα θ, λ.
 _ Ανίχνευση στοιχείου
 _ Εύρεση κρυσταλλικής φάσης
 (X-Ray Diffraction, XRD)

Μέγιστα που εμφανίζονται για $n = 2, 3, 4 \dots$: Μέγιστα δεύτερης, τρίτης, τέταρτης κλπ τάξης.
 Παράδειγμα:
 Κορυφή (400) αντιστοιχεί σε $n=4$ από το επίπεδο (100)

Ένταση περιθλωμένης δέσμης:
 Είδος ατόμου / δομή κυψελίδας:

Επίδραση δομής κυψελίδας
 1 άτομο μόνο: Εξασθένηση έντασης με συντελεστή f
 f: Παράγοντας σκέδασης :
 (εξασθένηση από άτομο / εξασθένηση από ηλεκτρόνιο)

Πολλά άτομα:
 Διαφορετικοί συντελεστές – διαφορετικές θέσεις
 Συμβολή μεταξύ περιθλάσεων από άτομα ίδιας κυψελίδας
 Κάποια επίπεδα εξασθενούν / κρύβονται

Παράγοντας Σκέδασης Κυψελίδας:

$$F_{hkl} = \sum f_i \cos 2\pi \left(\frac{hx_i}{a} + \frac{ky_i}{b} + \frac{lz_i}{c} \right)$$

h, k, l: Δείκτες Miller επιπέδου
 x_i, y_i, z_i : Συντεταγμένες ατόμου i
 a, b, c: Πρωτογενή διανύσματα



Δημοκρίτειο Πανεπιστήμιο Θράκης
Τμήμα Ηλεκτρολόγων Μηχανικών και Μηχανικών Υπολογιστών
Προπτυχιακό Πρόγραμμα Σπουδών Τμήματος ΗΜΜΥ α
Ακαδ. Έτος 2018-2019

ΕΠΙΣΤΗΜΗ ΥΛΙΚΩΝ


















Διάλεξη 4
Κρυσταλλικές ατέλειες-
Διάχυση

Κρυσταλλικές ατέλειες υπάρχουν στους πραγματικούς κρυστάλλους

Γιατί μελετάμε τις ατέλειες;

Καθορίζουν τις μακροσκοπικές (φυσικές, ηλεκτρικές, οπτικές, μηχανικές, μαγνητικές) ιδιότητες των κρυστάλλων

Τρεις κατηγορίες ατελειών σύμφωνα με τις διαστάσεις :

1. Σημειακές (point defects),
2. Γραμμικές : εξαρμώσεις ή εξαρθρώσεις (dislocations ή line defects)
3. Επιφανειακές (plane defects).

Θερμοδυναμικά κριτήρια: αντιστρεπτές και μη αντιστρεπτές:

Αντιστρεπτές : σε T_1 n_1 ατέλειες, σε $T_2 > T_1$ θα γίνουν $n_2 > n_1$, όταν όμως επιστρέψουμε στη θερμοκρασία T_1 οι ατέλειες θα ξαναγίνουν n_1 (μόνο σημειακές)

Μη αντιστρεπτές: οι γραμμικές και οι επιφανειακές, γιατί μετά από θέρμανση του υλικού ελαττώνεται ο αριθμός τους

Παραδείγματα επίδρασης ατελειών στις ιδιότητες:

Αύξηση του όγκου λόγω σημειακών ατελειών \Rightarrow μείωση πυκνότητας υλικού

Αύξηση της αντίστασης των μετάλλων

Ρύθμιση της ειδικής αντίστασης στους καθαρούς ημιαγωγούς με εισαγωγή ελεγχόμενης συγκέντρωσης ατόμων προσμίξεων π.χ. B, P, As στο μονοκρυσταλλικό πυρίτιο για την κατασκευή διόδων, τρανζίστορς, ολοκληρωμένων κυκλωμάτων

Υποβαθμισμένη λειτουργία των ηλεκτρονικών διατάξεων και ολοκληρωμένων κυκλωμάτων λόγω ατελειών π.χ. Εξαρμώσεις, διδυμίες, σφάλματα επιστοίβασης κλπ στον μονοκρυσταλλικό ημιαγωγό (Αντικείμενο Μικροηλεκτρονικής)

Πλαστική ή μόνιμη παραμόρφωση μετάλλων : εξαρτάται από την παρουσία και την μετακίνηση των εξαρμώσεων (Αντικείμενο Μηχανικής υλικών)

8

Σημειακές ατέλειες - κατηγορίες

a) Αντικατάσταση με άτομο άλλου στοιχείου σε κανονική θέση του πλέγματος
 b) Εμβόλιμο άτομο άλλου στοιχείου-ενδόθετο. Δηλαδή παρουσία ατόμου σε χώρο κενού του πλέγματος
 c) Απουσία ενός ατόμου -πλεγματοκό κενό (ατέλεια Schottky)
 d) Εμβόλιμο άτομο του ίδιου στοιχείου-ενδόθετο (ατέλεια τύπου Frenkel)

Εφαρμογές: Ηλεκτρονική βιομηχανία
 Κατασκευή ντοπαρισμένων ημιαγωγικών στρωμάτων σε διατάξεις διόδων, τρανζίστορ, θυρίστορ και Ολοκληρωμένων κυκλωμάτων

Συγκέντρωση κενών-ενδόθετων

Παραμόρφωση πλέγματος (ατομικών επιπέδων)

Συγκέντρωση κενών, N_v

$$N_v = N \exp(-E_v/kT)$$
 N ατομικές (πλεγματοκές) θέσεις,
 E_v ενέργεια σχηματισμού κενού (~1 eV),
 k σταθερά Boltzmann,
 T απόλυτη θερμοκρασία (K)

Συγκέντρωση ενδόθετων, N_i

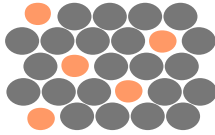
$$N_i = N \exp(-E_i/kT)$$
 E_i ενέργεια σχηματισμού ενδόθετου (~1,5-2 eV),
 Τα άτομα **ταλαντώνονται** γύρω από τη θέση ισορροπίας. Όταν αποκτούν αρκετή ενέργεια σπάζουν οι δεσμοί και μετακινούνται σε γειτονικές θέσεις (διάχυση) σε $T \gg 300K$ αφήνοντας κενές θέσεις

Αιτίες δημιουργίας σημειακών ατελειών: πλαστική παραμόρφωση, βομβαρδισμός με σωματίδια υψηλής ενέργειας, απότομη ψύξη

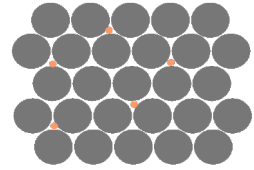
Στερεά διαλύματα

Ένα στερεό μπορεί να συμπεριλάβει στο πλέγμα του ένα ποσοστό από άλλο στοιχείο ανάλογα με τη διαλυτότητα του ενός στο άλλο, σχηματίζει στερεό διάλυμα. Τα άτομα μπαίνουν σε θέσεις στο πλέγμα ανάλογα με το μέγεθος:

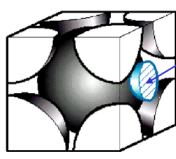
1. Σε θέσεις αντικατάστασης μεγάλα άτομα π.χ. Cu στο Ni, Mg στο Fe ή P, As στο μονοκρυσταλλικό Si
2. Σε ενδόθετες θέσεις μικρά άτομα (H, B, C, N, O) μπορεί να φτάσουν σε σημαντική συγκέντρωση, π.χ. ο C στο Fe φτάνει σε συγκέντρωση μέχρι 10%.



κράμα αντικατάστασης
(Cu στο Ni)



Κράμα ενδόθετης τοποθέτησης
(C in Fe)



ενδόθετο άτομο άνθρακα στο BCC σίδηρο

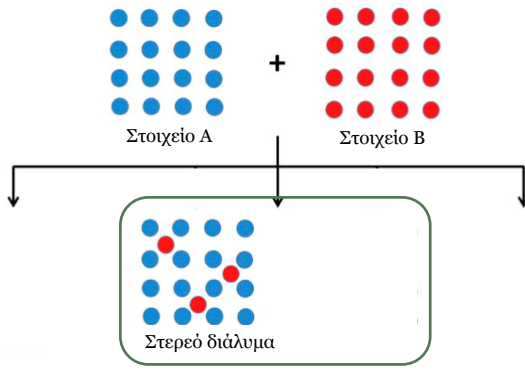
Δεύτερη φάση
Δομή B,
Σύσταση B

Πρώτη φάση
Δομή A,
Σύσταση A

Φάση είναι ένα ομογενές τμήμα ενός συστήματος που έχει ίδια σύνθεση, δομή και ιδιότητες.

Στερεά διαλύματα – Κράματα

Στερεό διάλυμα είναι η ανάμειξη δύο ή περισσότερων ουσιών που οδηγούν στο σχηματισμό μιας ενιαίας φάσης

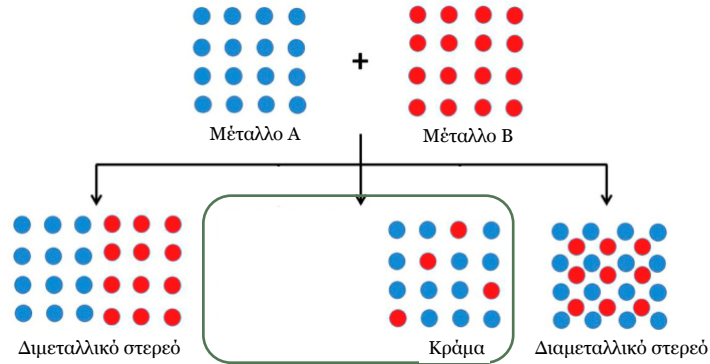


Στοιχείο A + Στοιχείο B

Στερεό διάλυμα

Στερεά διαλύματα – Κράματα

Κράμα είναι η ανάμειξη δύο μεταλλικών στοιχείων που οδηγεί στο σχηματισμό μιας φάσης

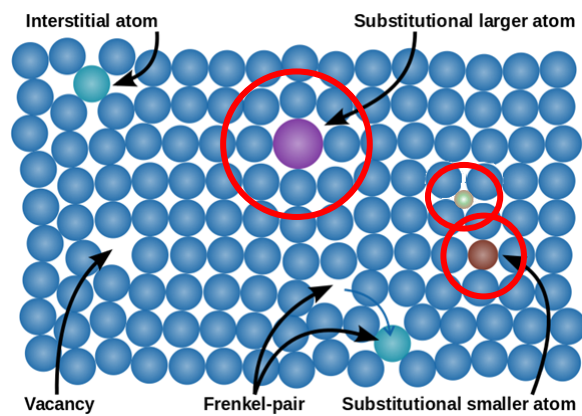


Στερεά διαλύματα – Κράματα

Τα **στερεά διαλύματα** και τα **κράματα (alloy)** δημιουργούνται όταν σε έναν όγκο ενός στοιχείου (**διαλύτης**) τοποθετούνται άτομα ενός διαφορετικού στοιχείου (**διαλυμένη ουσία**). Στα στερεά διαλύματα η δομή του κρυστάλλου παραμένει ίδια με τη δομή του διαλύτη.

Το στερεό διάλυμα είναι ένα υλικό το οποίο έχει σημειακές ατέλειες από ξένα άτομα αντικατάστασης ή ενδόθετα.

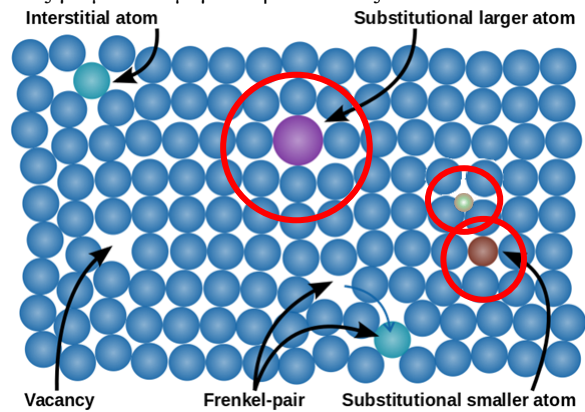
Το στερεό διάλυμα είναι ομογενές υλικό



Στερεά διαλύματα – Κράματα

Παράγοντες που καθορίζουν τη δημιουργία στερεού διαλύματος

- **Μέγεθος ατόμων.** Η ατομική ακτίνα του διαλυόμενου στοιχείου πρέπει να είναι μέχρι $\pm 15\%$ του διαλύτη.
- **Κρυσταλλική δομή.** Τα δύο μέταλλα θα πρέπει να κρυσταλλώνονται στην ίδια κρυσταλλική δομή.
- **Ηλεκτραρνητικότητα.** Όσο μικρότερη είναι η διαφορά στην ηλεκτραρνητικότητα των δύο στοιχείων τόσο πιθανότερο είναι να σχηματίσουν στερεό διάλυμα. Σε αντίθετη περίπτωση σχηματίζονται στερεές διαμεταλλικές ενώσεις (intermetallic compounds).
- **Σθένος.** Τα μέταλλα δρουν ως διαλύτες για μέταλλα μεγαλύτερου σθένους.



Στερεά διαλύματα – Κράματα



Ορείχαλκος
Διάλυμα 35% wt Zn σε Cu



Μπρούτζος
Διάλυμα 12% wt Sn σε Cu

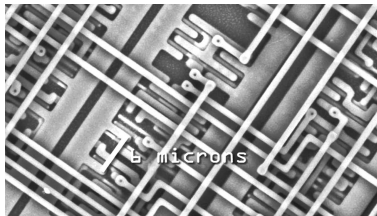
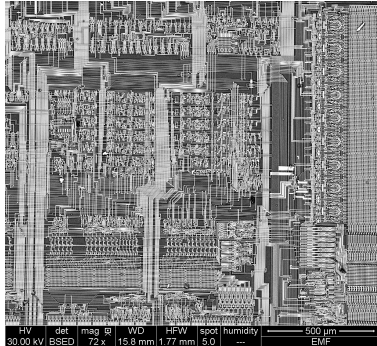


Χάλυβας (ατσάλι)
Διάλυμα 2% wt C, 1% wt Mn, Si, P, S, O σε Fe

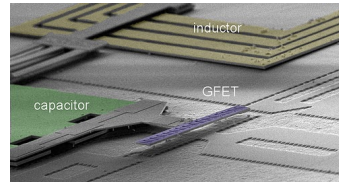


Ανοξείδωτο ατσάλι (Stainless steel)
Διάλυμα 11 % wt Cr και 2% wt C σε Fe

Στερεά διαλύματα – Κράματα



$\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$	InGaAsP
$\text{Si}_{1-x}\text{Sn}_x$	InGaAsSb
$\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$	InAsSbP
$\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$	AlInAsP
$\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{P}$	AlGaAsN
$\text{Al}_x\text{In}_{1-x}\text{As}$	InGaAsN
$\text{Al}_x\text{In}_{1-x}\text{Sb}$	InAlAsN
GaAsN	GaAsSbN
GaAsP	GaInNAsSb
GaAsSb	GaInAsSbP
AlGaIn	CdZnTe
AlGaP	HgCdTe
InGaIn	HgZnTe
InAsSb	HgZnSe
InGaSb	$(\text{Zn}_{1-x}\text{Cd}_x)_3(\text{P}_{1-y}\text{As}_y)_2$
AlGaInP	35]
AlGaAsP	$\text{Cu}(\text{In},\text{Ga})\text{Se}_2$



Γραμμικές ατέλειες ή Εξαρμοσίες:

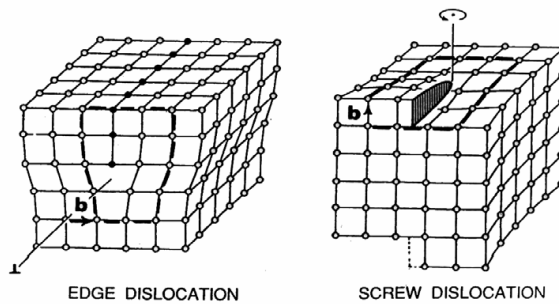
Μπορεί να θεωρηθούν σαν μία γραμμή η οποία εκτείνεται κατά μήκος αρκετών ατομικών αποστάσεων και χωρίζει ένα κρυσταλλικό επίπεδο σε δύο περιοχές που η κάθε μία ξεχωριστά είναι τέλεια, αλλά είναι ατέλειες στα σημεία επαφής τους.

Γύρω μόνο από την εξαρμοση τα άτομα είναι μετατοπισμένα από τις πλεγματικές τους θέσεις

Οι εξαρμοσίες διακρίνονται στις εξαρμοσίες ακμής (edge dislocation) και τις ελικοειδείς (screw dislocation)

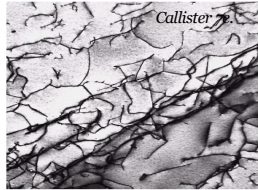
Δημιουργία εξαρμοσών:

Κατά την ανάπτυξη των κρυστάλλων
Πλαστική (μόνιμη) παραμόρφωση λόγω μηχανικών τάσεων, τάσεις λόγω βαθμίδων θερμοκρασίας, βομβαρδισμός με σωματίδια υψηλής ενέργειας

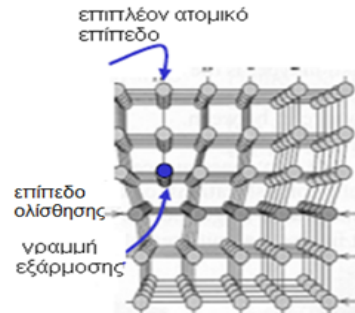


Εξάρμωση ακμής

Παρεμβολή ενός επιπέδου ατομικού επιπέδου του οποίου η ακμή (η κάτω στο σχήμα) είναι σαν μια γραμμή από μετατοπισμένα άτομα. Η εξάρμωση στο σχήμα είναι κάθετη στο επίπεδο του χαρτιού. Τοπική παραμόρφωση πλέγματος (λόγω συμπίεσης-έκτασης των δεσμών)



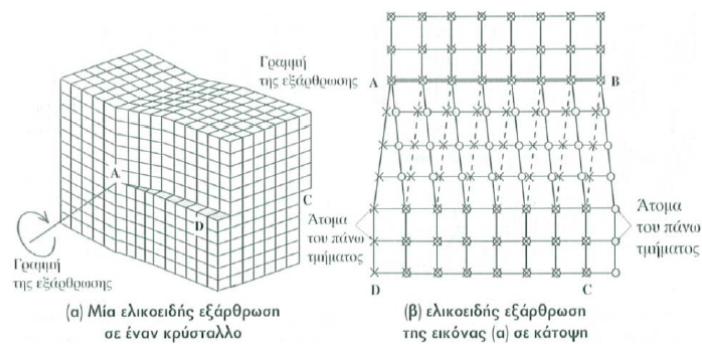
Φωτογραφία ηλεκτρονικού μικροσκοπίου: εξαρμώσεις στο χαλκό λόγω διατμητικών τάσεων



Πυκνότητα : της τάξης 10^6 cm/cm^3 στα μέταλλα
 στους ημιαγωγούς ευτυχώς είναι μόνο 0-10 cm/cm^3

Ελικοειδής εξάρμωση

Η ονομασία χαρακτηρίζει τη διάταξη των μετατοπισμένων ατόμων σε μία πλευρά της γραμμής της εξάρμωσης. Δημιουργείται όταν ένα τμήμα ενός τέλει κρυστάλλου περιστραφεί η καμφθεί σε σχέση με ένα άλλο τμήμα του κρυστάλλου από τη μία μόνο πλευρά.

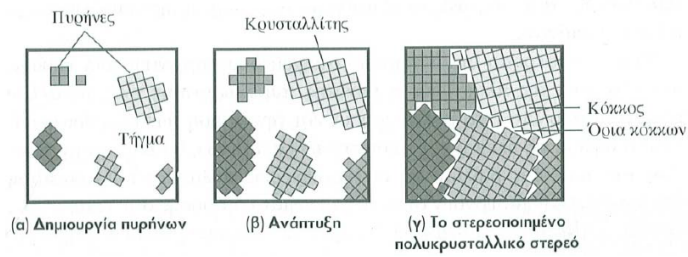


Επιφανειακές ατέλειες

Διαχωριστικές επιφάνειες ή όρια κόκκων : οι επιφάνειες μεταξύ δύο κρυσταλλιτών στα πολυκρυσταλλικά υλικά Περιέχουν πολλές σημειακές – γραμμικές ατέλειες.

Πολυκρυσταλλικά υλικά: αποτελούνται από πολλούς κρυσταλλίτες ή κόκκους (grains) με τυχαίο προσανατολισμό

Διαδικασία της κρυσταλλοποίησης



α) Η στερεοποίηση ενός πολυκρυσταλλικού στερεού από το τήγμα (οι κύβου αναπαριστούν τα άτομα) β) Σχηματισμός ορίων κόκκων μεταξύ των κόκκων (κρυσταλλιτών) όπου απεικονίζονται διάφορες ατέλειες.

Τεχνικές μικροσκοπίας

Τύπος μικροσκοπίας	Όνομα (αγγλικά)	Διακριτική ικανότητα	Εφαρμογή
Οπτική	optical	1 μm	Επιφανειακή δομή
Ηλεκτρονική σάρωσης	SEM	50-100 nm	Επιφανειακή μικροδομή
Ηλεκτρονική διέλευσης	TEM	0.3 nm	Ατομική δομή
Ατομικής δύναμης	AFM	1 nm	3D επιφανειακή νανοδομή

Μικροσκοπία
 Η ανακλαστικότητα εξαρτάται από την διεύθυνση του κρυσταλλίτη

Microscope
 Polished and etched surface
 κρυσταλλικά επίπεδα
 κρυσταλλίτες
 ορείχαλκος (κράμα CuZn)
 0.75mm

Adapted from Fig. 4.13(b) and (c), Callister 7e. (Fig. 4.13(c) is courtesy of J.E. Burke, General Electric Co.)

Οπτική μικροσκοπία

Electron Beam
 Electron Gun
 Anode
 Magnetic Lens
 Scanning Coils
 Backscattered Electron Detector
 Stage
 Specimen
 Secondary Electron Detector
 To TV Scanner

Ηλεκτρονική μικροσκοπία σάρωσης

Διάχυση (diffusion)

δηλ. μετακίνηση ατόμων, μορίων ή ιόντων (μητρικών του κρυστάλλου ή των προσμίξεων) προκαλείται από μεταβολές ή διαφορές στη συγκέντρωσή τους
 Έχει τεχνολογική εφαρμογή στην κατασκευή: ημιαγωγοί προσμίξεων στην ηλεκτρονική βιομηχανία και στερεά διαλύματα μετάλλων στη μεταλλουργία

Δύο πιο συνήθεις μηχανισμοί ατομικής διάχυσης **στα στερεά**:

- 1) **Διάχυση με κενά**: Όταν ένα άτομο μετακινείται σε γειτονικό πλεγματικό κενό (ή αντίστροφα). Απαιτείται μικρή παραμόρφωση (μικρή θερμική ενέργεια) και ο αριθμός των κενών είναι σημαντικός σε υψηλές θερμοκρασίες, ώστε να θεωρείται ένας από τους επικρατέστερους.
- 2) Στον **ενδόθετο μηχανισμό** ένα ενδόθετο άτομο (ή άτομο παρεμβολής) συνήθως μικρό, όπως άνθρακας, άζωτο, οξυγόνο ή υδρογόνο, μετακινείται μέσα από το πλέγμα σε άλλη ενδόθετη θέση. Η ενέργεια ενεργοποίησης αυτού του μηχανισμού είναι σημαντικά μικρότερη ακόμα και σε υψηλές θερμοκρασίες.

κίνηση ενός ατόμου του ίδιου υλικού ή πρόσμιξης
 κενό
 (α)

όμοιο του ατόμου παρεμβολής μετά τη διάχυση
 (β)

■ Υλικό 1
 ■ Υλικό 2

Σχηματική αναπαράσταση μηχανισμών διάχυσης σε κρυστάλλους α) Διάχυση με κενά και β) Διάχυση με άτομα παρεμβολής.

Ο ρυθμός διάχυσης ονομάζεται ροή διάχυσης J

ορίζεται ως ο αριθμός των διαχεόμενων ατόμων (η μάζα) που διαχέονται κάθετα μέσω μίας διατομής του στερεού με μοναδιαία επιφάνεια στη μονάδα του χρόνου (σε μονάδες Kg/m²-sec ή άτομα/m²-sec).

J (σε μονάδες Kg / m².s ή άτομα/m².s) = $-D \frac{dC}{dx}$ μία διάσταση

Συγκέντρωση C: μάζα ανά μονάδα όγκου,

$\frac{dC}{dx}$: Βαθμίδα συγκέντρωσης (σε μονάδες Kg / m³ ή άτομα/m³)

D: Συντελεστής διάχυσης σε μονάδες m² / s, εξαρτάται από την T

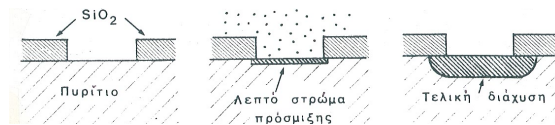
$D = D_0 e^{-\frac{Q_0}{kT}}$

D₀: σταθερά διάχυσης ανεξάρτητη από T

Q₀: ενέργεια ενεργοποίησης διάχυσης

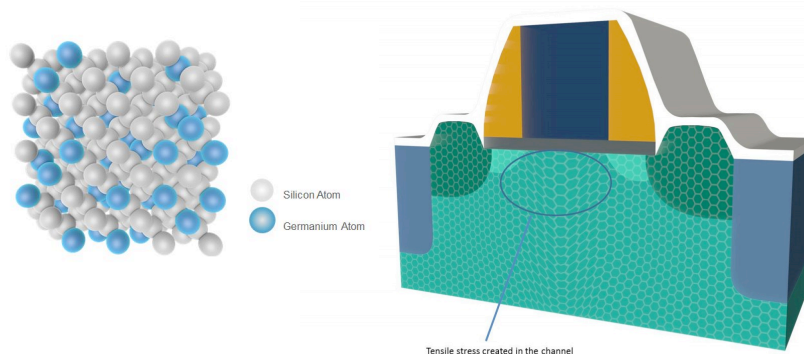
k: σταθερά του Boltzmann (8,614x10⁻⁵ eV/K)

Τα βασικά στάδια που ακολουθούνται για την κατασκευή ενός ημιαγωγού εμπλουτισμένου με προσμίξεις.



Παράδειγμα τρανζίστορ με crystal engineering ατελειών

- Για την αύξηση της ταχύτητας μέσα στο κανάλι των MOSFET, μια ιδέα θα ήταν να δημιουργήσουμε έναν κρύσταλλο με μεγαλύτερα κενά ώστε οι φορείς να βρίσκουν λιγότερα άτομα στην πορεία τους και να μην «φρενάρουν» έπειτα από κρούσεις σε αυτά.
- Εισάγουμε άτομα Ge μέσα στον κρύσταλλο πυριτίου και αυξάνουμε την πλεγματική σταθερά.

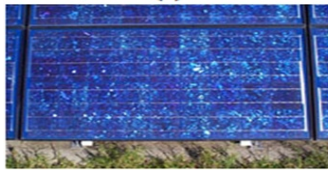


Μονοκρυσταλλικά υλικά-Πολυκρυσταλλικά υλικά

Η παρουσία ατελειών υποβαθμίζει την απόδοση λειτουργίας διατάξεων από αυτά

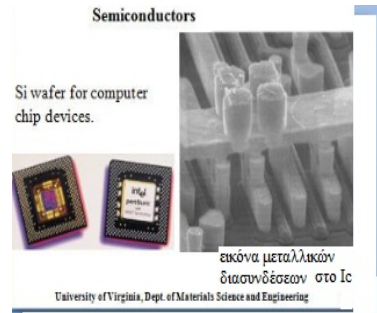


(α)



(β)

PV PANELS με Φωτοβολταϊκά στοιχεία από α)
μονοκρυσταλλικό, πυρίτιο
β) πολυκρυσταλλικό πυρίτιο



Βιομηχανία ημιαγωγών: Πάνω από 95% των ηλεκτρονικών διατάξεων (δίοδοι, τρανζίστορ, θυρίστορ) και των ηλεκτρονικών κυκλωμάτων (π.χ. μικροεπεξεργαστές, μνήμες), βασίζονται στην τεχνολογία μονοκρυσταλλικού πυρίτιου **Si**
Ημιαγωγοί **Ge, GaAs** για ειδικές εφαρμογές: δίοδοι LED, ηλεκτρονικά υψηλής ταχύτητας. Σήμερα, η πιο σημαντική διάταξη είναι το τρανζίστορ MOSFET
Αντικείμενο Μικροηλεκτρονικής



ΕΥΧΑΡΙΣΤΩ ΓΙΑ ΤΗΝ
ΠΡΟΣΟΧΗ ΣΑΣ