Elettronica dello Stato Solido Lezione 2: I cristalli



Daniele lelmini

DEIB – Politecnico di Milano daniele.ielmini@polimi.it

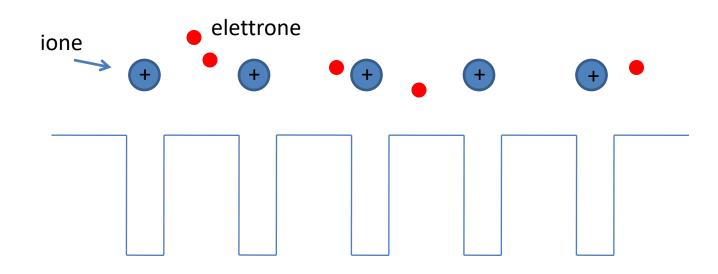
Outline

- Definizione del problema
- Struttura cristallina
- Diffrazione
- Conclusioni

Definizione del problema

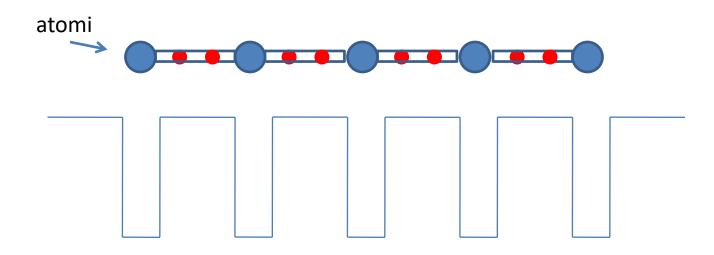
- Scopo dell'elettronica dello stato solido è fornire gli strumenti base per descrivere i dispositivi elettronici basati sui semiconduttori
- Descrivere e prevedere:
 - Stati e concentrazione dei portatori
 - Trasporto dei portatori
- necessitiamo di strumenti fisici al di fuori del dominio della meccanica/termodinamica/elettrostatica classica

Portatori in un metallo



- Metallo: gli atomi sono inquadrati in un reticolo cristallino, ogni atomo perde uno/due elettroni che sono lasciati liberi di muoversi nel reticolo ionico
- Come descrivere il movimento di un portatore nel reticolo periodico di buche di potenziale? Abbiamo bisogno di leggi fisiche per la piccola scala → la fisica classica fallisce!

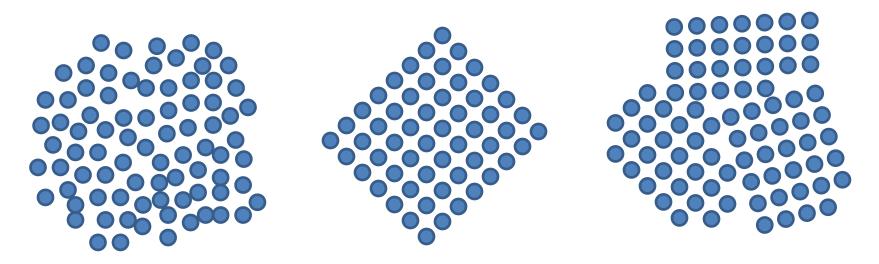
Semiconduttori e isolanti



- <u>Semiconduttori/isolanti</u>: gli atomi sono inquadrati in un reticolo cristallino, legati ad altri atomi da legami covalenti mediante elettroni condivisi
- Come possono gli elettroni contribuire alla corrente elettrica? Qual è la probabilità di essere rilasciati? quanti? Come si muovono nel potenziale periodico?

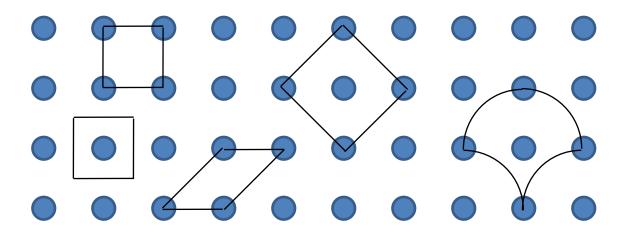
Fase amorfa e fase cristallina

- Prima di tutto dobbiamo sapere come gli atomi sono geometricamente disposti nello stato solido
- Amorfo = posizioni atomiche disordinate, non c'è ordine a lungo raggio (sebbene ci sia dell'ordine a corto raggio)
- Cristallo = perfetto ordine a lungo raggio
- Policristallo = solido composto di grani cristallini con diverso orientamento



Cella unitaria (unit cell)

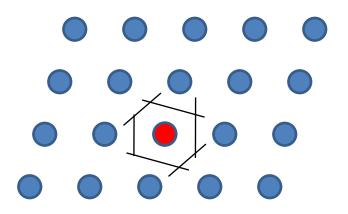
- La struttura del cristallo è caratterizzata da periodicità: data una parte, è possibile ricostruire l'intero
- <u>Cella unitaria</u> = mattoncino da usare per riprodurre l'intero cristallo
- Non necessariamente <u>unica</u> né <u>primitiva</u>



Cella primitiva

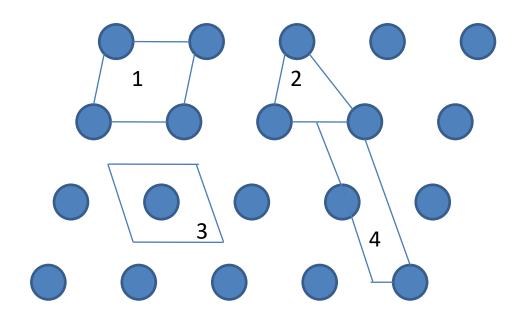
- Una cella primitiva unitaria è la più piccola cella unitaria
- La cella primitiva non è unica
- La cella di Wigner-Seitz è un particolare tipo di cella primitiva, definita come il luogo di punti più vicini ad un nodo del reticolo che ad altri

[http://en.wikipedia.org/wiki/Crystal_structure]



Vedi anche: cella di Voronoi, zona di Brillouin

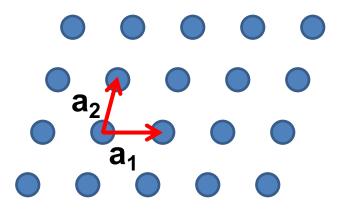
Cella unitaria, cella primitiva



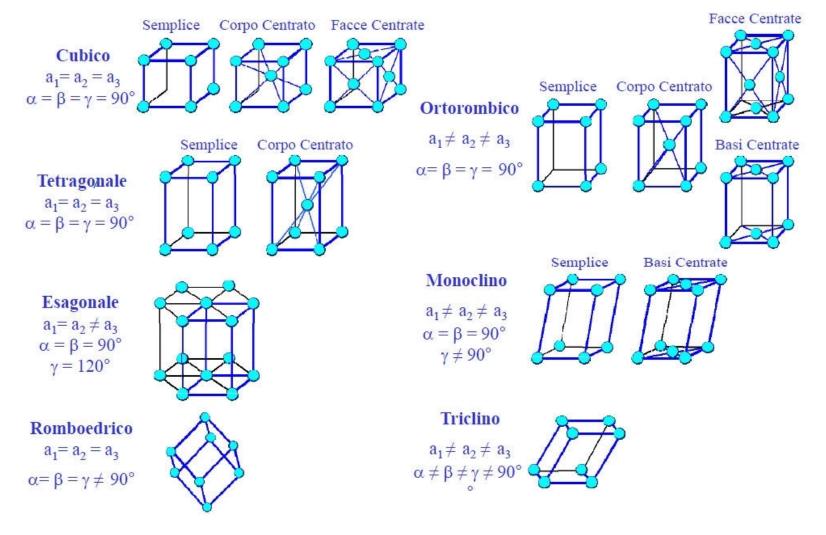
 Quale di queste celle è unitaria? Quale primitiva?

Reticoli di Bravais

- Definizione: ogni nodo del reticolo di Bravais può essere scritto come R = n₁a₁+n₂a₂+n₃a₃
- n_1 , n_2 , n_3 = numeri interi
- a₁, a₂, a₃ = vettori primitivi che definiscono la cella primitiva
- Tutti i nodi (e solo essi) sono generati per traslazione

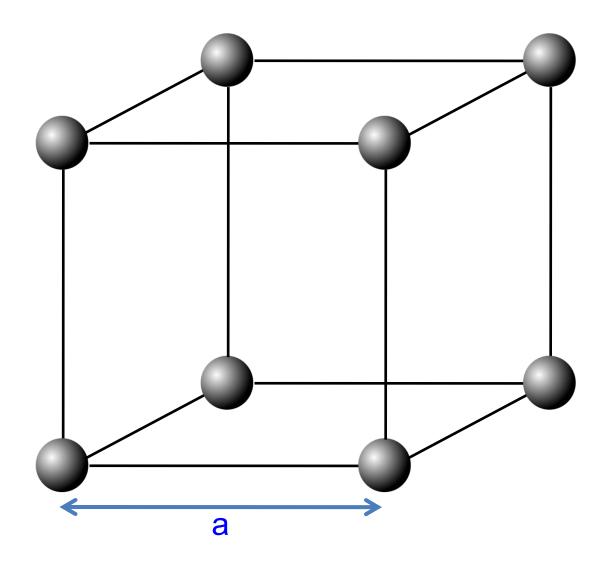


Sistemi cristallini e reticoli di Bravais

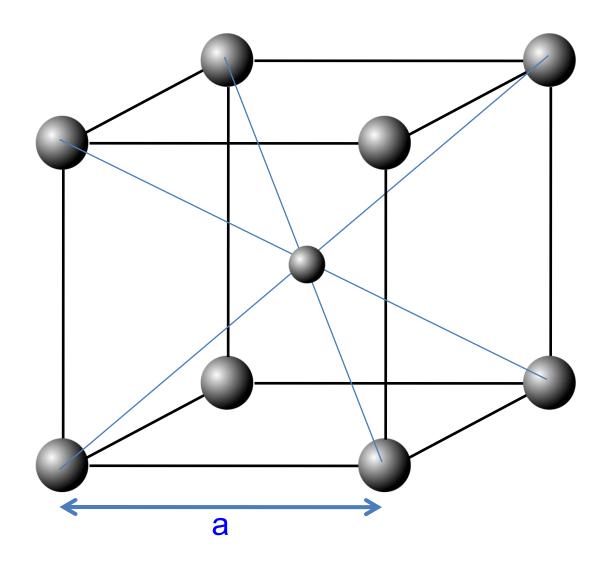


 7 sistemi di cristalli + 14 reticoli di Bravais (differiscono nel centering, e.g. corpo/faccia centrata)

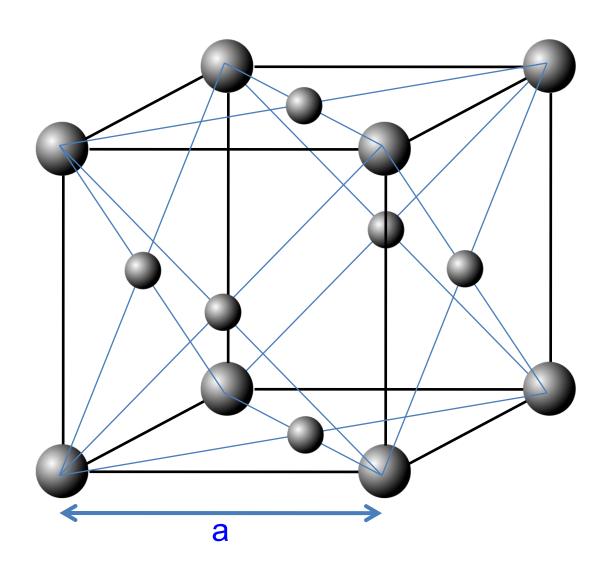
Cubico semplice



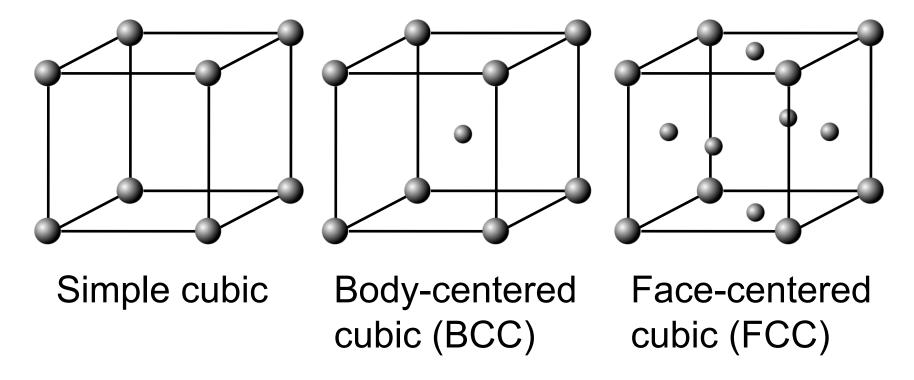
Body-centered cubic, BCC



Face-centered cubic, FCC



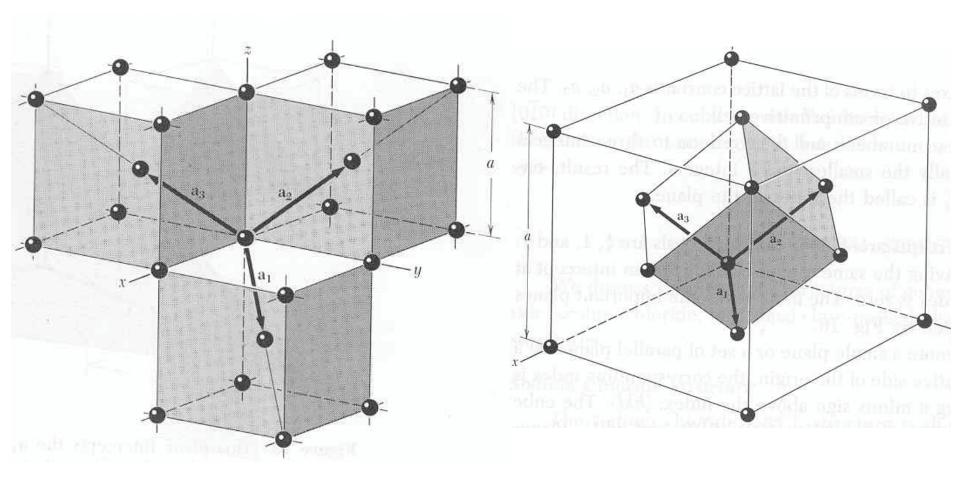
Reticoli cubici



Quanti atomi per unità?

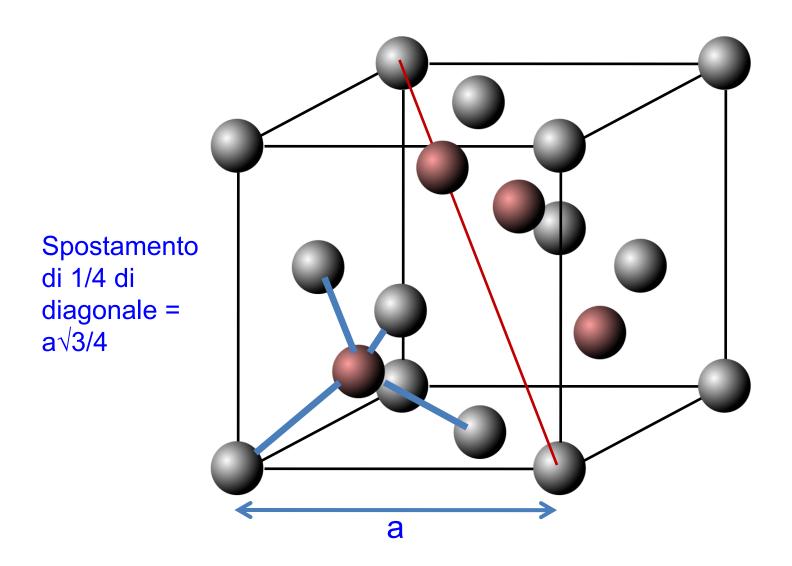
$$8 \times 1/8 = 1$$
 $8 \times 1/8 + 1 = 2$ $8 \times 1/8 + 6 \times 1/2 = 4$

Cella convenzionale e cella primitiva

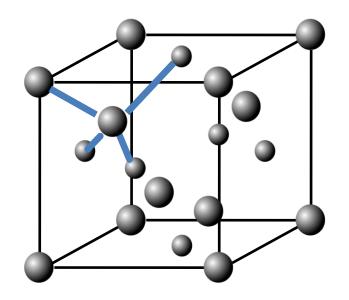


- Cella convenzionale = unitaria ad alta simmetria, ma non primitiva
- Cella primitiva: la minima unitaria, non è unica

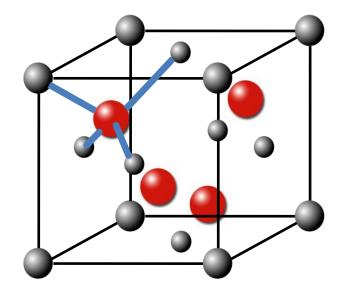
Struttura del diamante



Importanza per i semiconduttori



Struttura del diamante: C (diamante), Si, Ge



Struttura della zincoblenda: GaAs, BN cubico

- I più importanti semiconduttori mostrano queste due strutture
- Packing = 8 x 1/8 + 6 x 1/2 + 4 = 8 atomi per cella unitaria cubica
- Coordinazione (numero di atomi primi vicini) = 4

Struttura, reticolo, base

- Il diamante è una struttura, non è un reticolo (di Bravais)
- Struttura = reticolo + base
- Esempi:
 - Diamante = fcc con base da 2 atomi
 - Esagonale compatta
 (hexagonal close-packed,
 hcp) = esagonale con
 base da 2 atomi

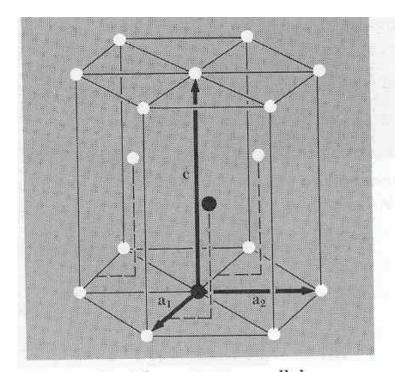
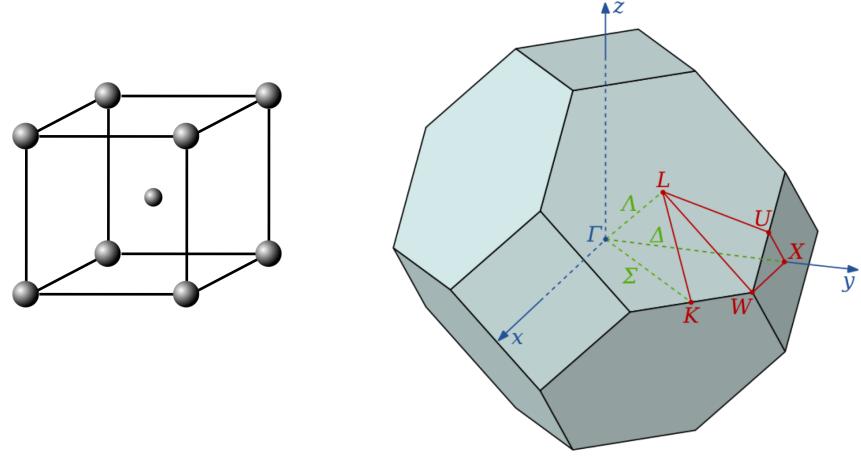


Figure 23 The primitive cell has $a_1 = a_2$, with an included angle of 120°. The c axis (or a_3) is normal to the plane of a_1 and a_2 . The ideal hcp structure has c = 1.633 a. The two atoms of one basis are shown as solid circles. One atom of the basis is at the origin; the other atom is at $\frac{2}{3}\frac{1}{3}\frac{1}{2}$, which means at the position $\mathbf{r} = \frac{2}{3}\mathbf{a}_1 + \frac{1}{3}\mathbf{a}_2 + \frac{1}{2}\mathbf{a}_3$.

Zona di Brillouin



 La zona di Brillouin è la cella di Wigner-Seitz nel reticolo reciproco, cioè il reticolo di vettori d'onda k del cristallo. Per i tipici semiconduttori (Si) con FCC, il reticolo reciproco è il BCC

Esempi

Come usare queste informazioni?

Esempio 1: $a = 5.43 \text{ Å} = 5.43 \text{ x} \cdot 10^{-10} \text{ m} \text{ nel Si}$

Atomi per cella cubica unitaria = 8

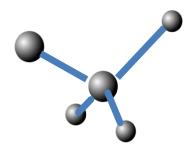
Densità atomica? $8/a^3 = 5 \times 10^{22} \text{ cm}^{-3}$

(Cfr. numero di Avogadro $N_{av} = 6 \times 10^{23}$)

Raggio atomico? $a\sqrt{3}/8 = 1.18 \text{ Å}$

Esempio 2: densità atomica nel Ge (a = 5.65 Å)

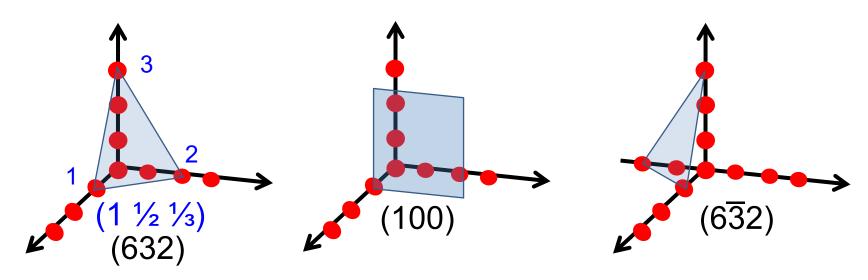
Nota: i tipici semiconduttori hanno valenza chimica = 4 (C, Si, Ge, anche GaAs in media) e il mattone elementare è un tetraedro!



Indici di Miller

- Come identificare i piani e le direzioni in un cristallo? Indici di Miller
- Prendi l'intercetta tra il piano e gli assi di riferimento

 → 1, 2, 3
- Calcola l'inverso delle coordinate → 1, 1/2, 1/3
- Moltiplica i numeri ottenuti per ottenere la terna di più piccoli interi >> 6, 3, 2

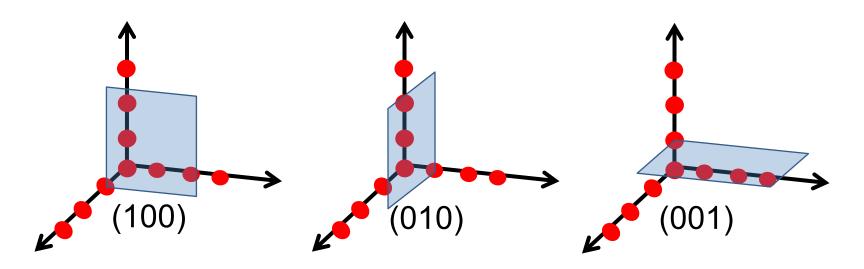


Piani equivalenti

 Per reticoli cubici (e.g. fcc o diamante), i piani paralleli alle facce del cubo sono tutti equivalenti

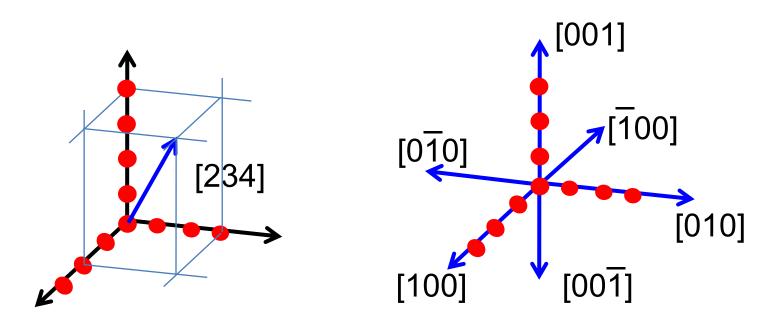
```
(100) (010) (001) (100) (001)
```

• {100} li indentifica tutti



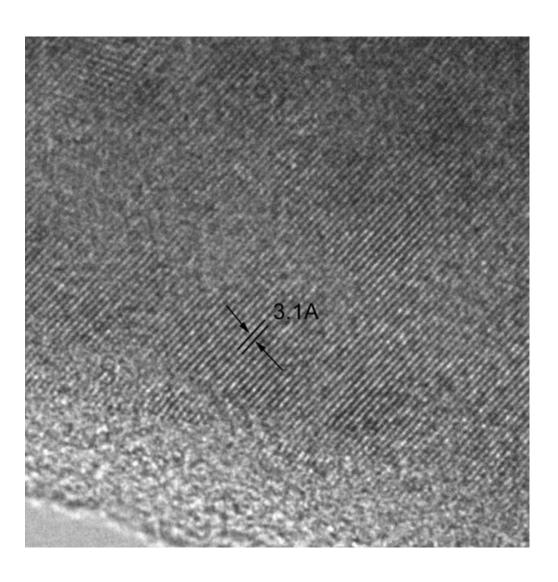
Indici di Miller per le direzioni

- Per ciascuna direzione, scegli un vettore su quella direzione
- Decomponi il vettore in proiezioni sugli assi di riferimento
- Converti nei minori interi, racchiudi in quadre come [100]
- Direzioni equivalenti indicate come <100>



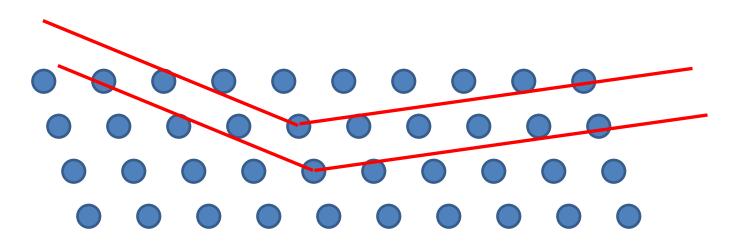
Studi della struttura cristallina

 Come riconoscere una struttura cristallina? la microscopia ad alta risoluzione può rivelare la struttura cristallina, ma è disponibile solo da 20-30 anni



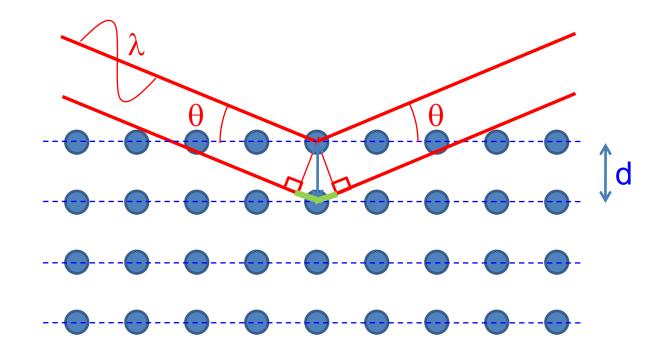
Tecniche di diffrazione

- Onde piane interagiscono con i nodi del reticolo e vengono scatterate
- Interferenza costruttiva tra onde scatterate dà luogo a picchi di diffrazione
- Ogni atomo si comporta da sorgente di onda sferica, interferenza costruttiva richiede che la differenza di cammino ottico tra due onde scatterate adiacenti sia un multiplo della lunghezza d'onda nλ



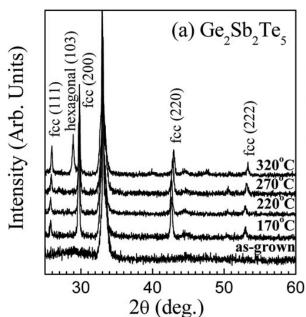
Teoria di Bragg

- L'approccio più semplice è quello della teoria di Bragg: assumiamo che i piani cristallini riflettano le onde secondo le leggi di Snell (angoli di incidenza e riflessione θ uguali)
- Per interferenza costruttiva, serve $2d\sin\theta = n\lambda$



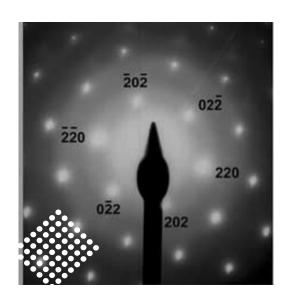
Diffrazione a raggi X

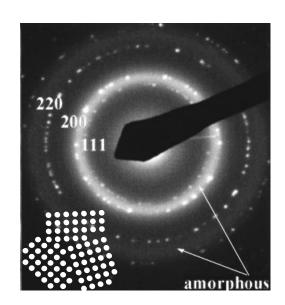
- Perché si abbia diffrazione è necessario che sinθ=λ/(2d)<1 → λ deve essere minore e confrontabile con 2d → solo i raggi X (λ ≈ pochi Å) posso dare origine a effetti di diffrazione
- I bassi ordini di diffrazione (n = 1, 2) sono in genere i più forti
- Dalla sequenza degli angoli, si può desumere la struttura cristallina (e.g. fcc o esagonale)
- Dal valore dell'angolo, si può desumere il parametro reticolare d

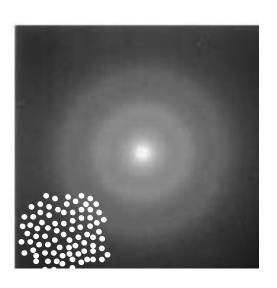


Diffrazione elettronica

- Anche gli elettroni ad alta energia possono essere usati per la diffrazione, grazie al dualismo particellaonda (prossime lezioni)
- Spot di diffrazione distinti, anelli distinti o anelli diffusi corrispondono a strutture monocristalline, policristalline ed amorfe, rispettivamente







D. Ielmini – Elettronica dello Stato Solido 02

Conclusioni

- Conoscere la struttura della materia allo stato solido è fondamentale per l'elettronica dello stato solido
- Ogni struttura cristallina è riconducibile ad un reticolo di Bravais
- La struttura a diamante a coordinazione tetraedrica è più tipica per i semiconduttori (Si, Ge, GaAs)
- Le tecniche di diffrazione permettono la caratterizzazione delle strutture cristalline