

Eðlisfræði þéttefnis I:

Kristallar og veilur

Kaflí 2

Jón Tómas Guðmundsson

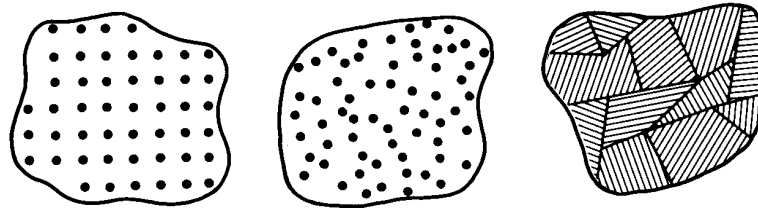
tumi@hi.is

2. vika haust 2018

Kristallafræði

- Þegar frumeindir raðast og mynda þéttefni hafa þær vel skilgreindan aðskilnað sem er ákvarðaður þannig að orkan sé lágmörkuð
- Þetta leiðir til þrí-víðrar lotubundinnar röðunar sem er þekkt sem kristallur
- Sama gildir um þéttefni sem er samsett úr meira en einu frumefni

Kristallafræði

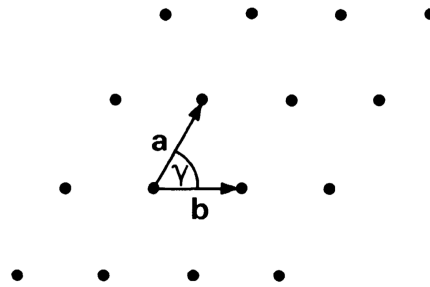


- Þéttefni getur verið, **einkristallað**, **myndlaust** eða **fjölkrystallað**
- Dæmi um myndlaust efni eru gler, gel, fjölliður
- Finna má dæmi um notkun allra þessara þriggja forma þéttefnis í rafeindatækni:
 - Flatir smárar úr myndlausum kísli eru notaðir sem rofar í flata skjái og skuggastafaglugga (e. liquid crystal display (LCD))
 - Fjölkrystallaður kísill er nú gjarnan notaður í gáttir MOSFET
 - Í flestum tólum er virkt svæði tólsins í einkristölluðum hálfleiðara

Kristallafræði

- Hér í þessu námskeiði fjöllum við fyrst og fremst um einkristalla
- Í einkristalli er atómum raðað lotubundið í þremur víddum
- Lotubundin röðun atóma í kristall er kölluð kristallsgrind
- Fyrir gefinn kristall er til grindareining sem lýsir öllum kristallinum; með því að endurtaka grindareininguna má mynda alla kristallsgrindina
- Grindareining er sá hluti kristallsins sem má endurtaka til að mynda allan kristallinn
- Grindareiningar þær sem gjaran eru notaðar eru ekki nauðsynlega minnstu mögulegu grindareiningar

Kristallafræði



- Tvívíðri grind er lýst með tveimur vigrum \mathbf{a} og \mathbf{b}
- Sérhvern punkt í grindinni má spanna með grunnvigrinum

$$\mathbf{r}_n = n_1 \mathbf{a} + n_2 \mathbf{b}$$

þar sem n_1 og n_2 eru heiltölur

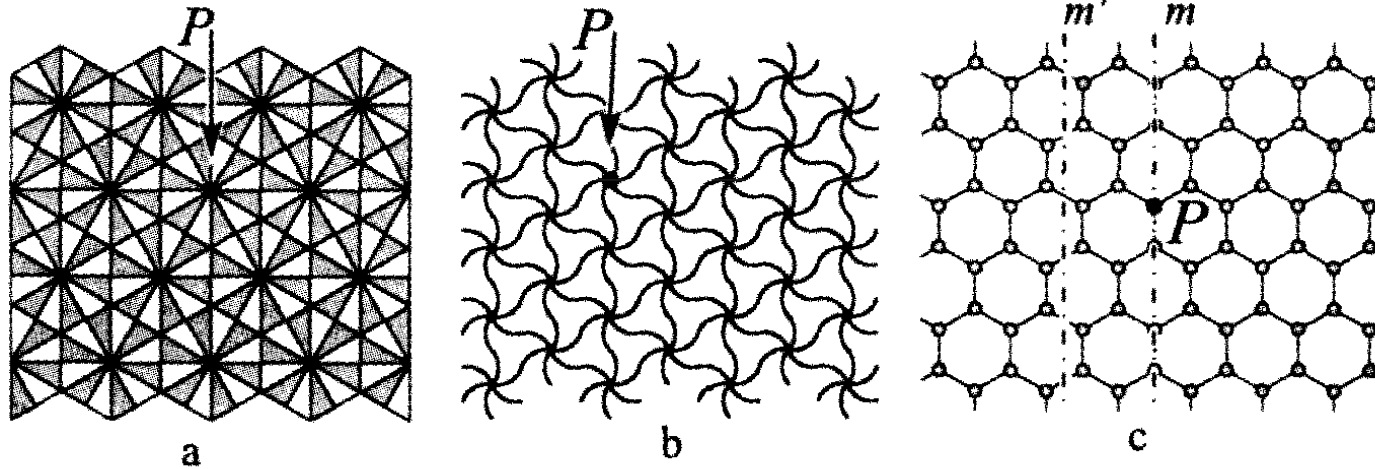
- Með því að breyta lengdum vigranna \mathbf{a} og \mathbf{b} og horninu á milli þeirra γ má fá fram mismunandi grindur
- Almennasta grindin fæst þegar $a \neq b$ og $\gamma \neq 90^\circ$

Kristallafræði

kristallur = kristallsgrind + grunnur

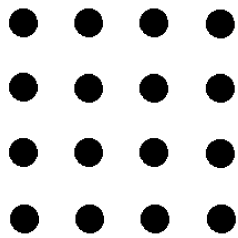
- Bravais grind er skilgreind með mengi aðgerða sem varðveita grindina (varpa grind í sjálfa sig)
- Þetta mengi nefnist samhverfugrúpa (eða rúmgrúpa í 3D) Bravais grindarinnar
- Full samhverfugrúpa Bravais grindar hefur eftirtaldar aðgerðir:
 - Hliðrun um grindarvigur **R**
 - Aðgerðir sem varðveita punkt í grindinni (speglun um punkt, speglun í plani, snúningur)
 - Samsetning þessara aðgerða

Kristallafræði

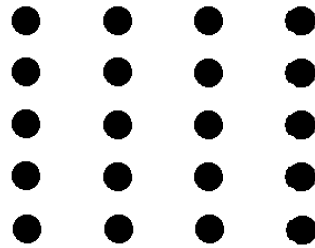


- Allir þrír tvívíðu kristallarnir á myndinni hafa sömu Bravais grindina
- Kristallinn er byggður upp með því að eindurtaka grindareininguna í sérhverjum punkti

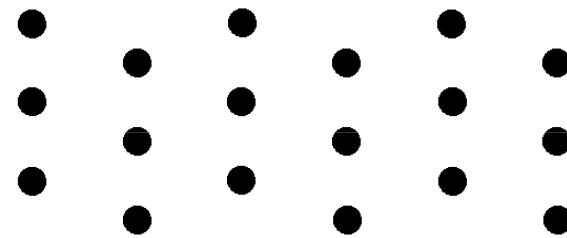
Kristallafræði



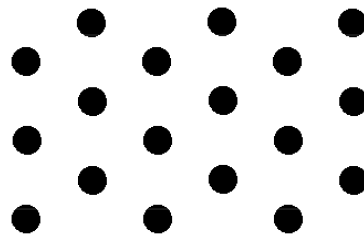
Square



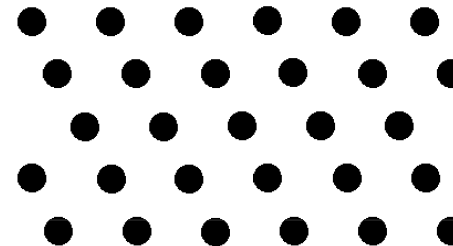
Rectangular



Centered Rectangular



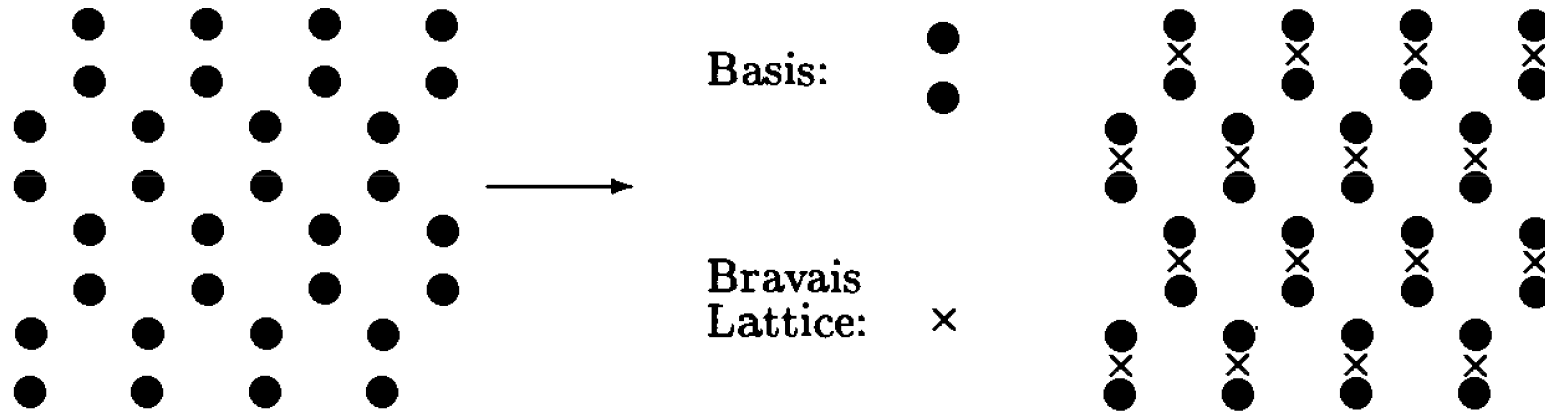
Hexagonal



Oblique

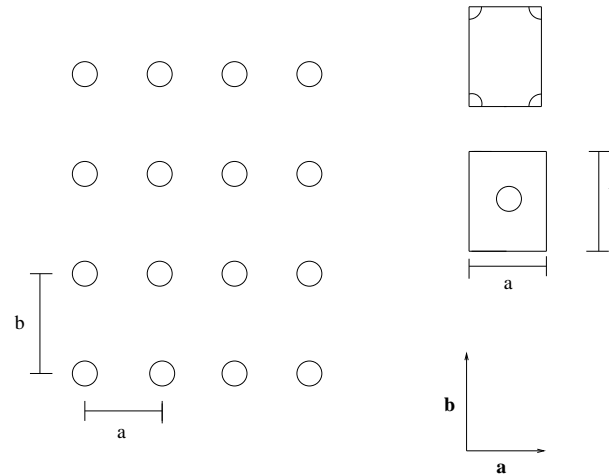
- Hinar 5 mögulegu tvívíðu Bravais grindur

Kristallafræði



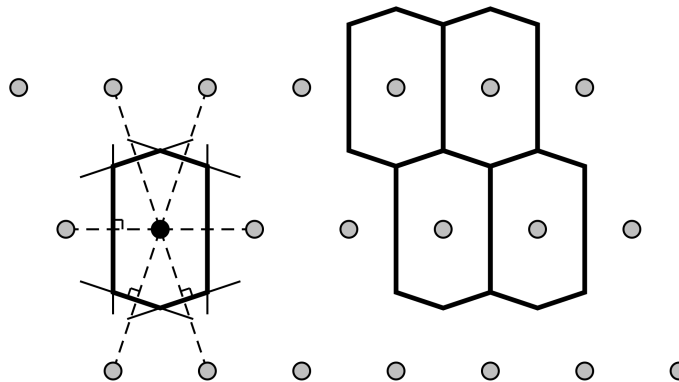
- Ekki er öll samhverf röðun punkta í grind Bravais grind
- Dæmi um reglulega lögun punkta sem ekki mynda Bravais grind
- Við sjáum hóflaga grind og val á Bravais grind og grindareiningu

Kristallafræði



- Hér sjáum við tvær grindareiningarnar sem báðar lýsa kristallsgrindinni
- Grindareining þarf ekki nauðsynlega að vera einstök
- Grunnvigrar
 - **a** vigur af lengd a samsíða a -hlið einingargrindar þar sem a er endurtekin fjarlægð
 - **b** vigur af lengd b samsíða b -hlið einingargrindar

Kristallafræði



Frá Simon (2013)

- Fyrir gefin grindarpunkt, þá er mengi allra punkta rúminu sem er nær þeim gefna grindarpunkti en öllum öðrum grindarpunktum í rúminu það sem myndar Wigner-Seitz grindareiningu hins gefna grindarpunkts
- Það er alltaf tilfellið að Wigner-Seitz grindareining gefins grindarpunkts er einingargrindin

Kristallafræði

- Jafngildir punktar eru tengdir saman með færslu grunnvigurs - heiltölumargfeldi grunnvigna

$$\mathbf{r} = h\mathbf{a} + k\mathbf{b} + l\mathbf{c}$$

- Grindareining er skilgreind með einingarvigurum

$$\mathbf{r}' = \mathbf{r} + \mathbf{T}$$

þar sem $\mathbf{T} = n_1\mathbf{a} + n_2\mathbf{b} + n_3\mathbf{c}$ $n_i \in I$

- Ef \mathbf{T} nær öllum punktum grindar er \mathbf{T} frumhliðrun og

$\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{c}$

nefnast **frumvignrar grindar** og $\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} \cdot \mathbf{c}$ **frumeining grindar**

Kristallur = kristallsgrind + hliðrun

Kristallafræði

- Til að staðsetja atóm í grind er skilgreint hnitakerfi sem miðast við ása kristallsins
- Ásar kristallsins geta haft mismunandi innbyrðis lengdir og hornin á milli þeirra geta verið mismunandi
- Þeir kristallar sem hafa mesta samhverfu hafa ása sem eru hornréttir hver á annan og mynda tening
- Sjö kerfi af ásum, sérhvert með skilgreind innbyrðis tengsl milli lengda og horna kristallaásanna eru notuð

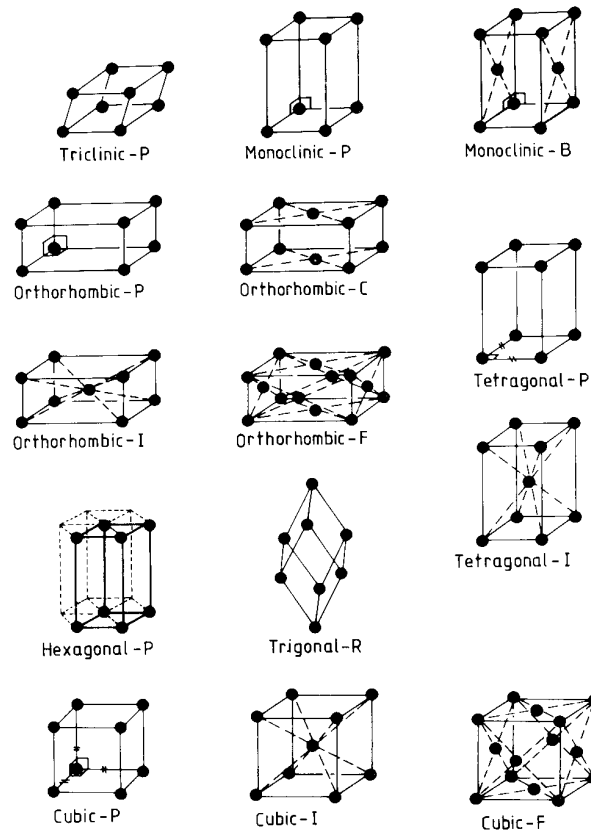
Kristallafræði

- Kristallakerfin sjö

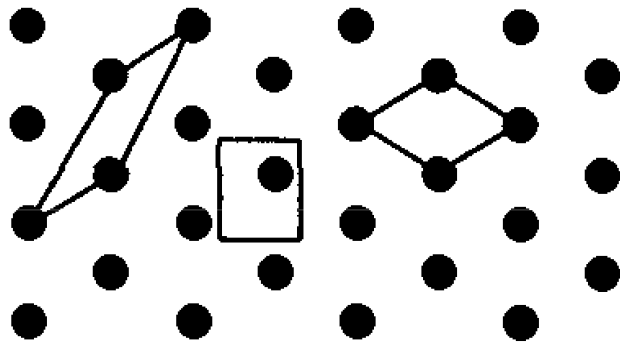
Þríhalla	$a \neq b \neq c$ $\alpha \neq \beta \neq \gamma$
Einhalla	$a \neq b \neq c$ $\alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta$
Rétthorna	$a \neq b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
Fernings	$a = b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
Tenings	$a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
Þríhyrnings	$a = b = c$ $120^\circ > \alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$
Sexhyrnings	$a = b \neq c$ $\alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$

Kristallafræði

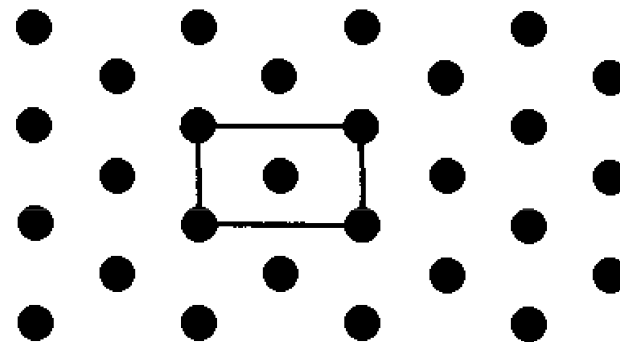
- Ef allar samsetningar með mismunandi lengdir og hornum eru taldar gefur það 14 mismunandi grindur, **Bravais grindur**



Kristallafræði



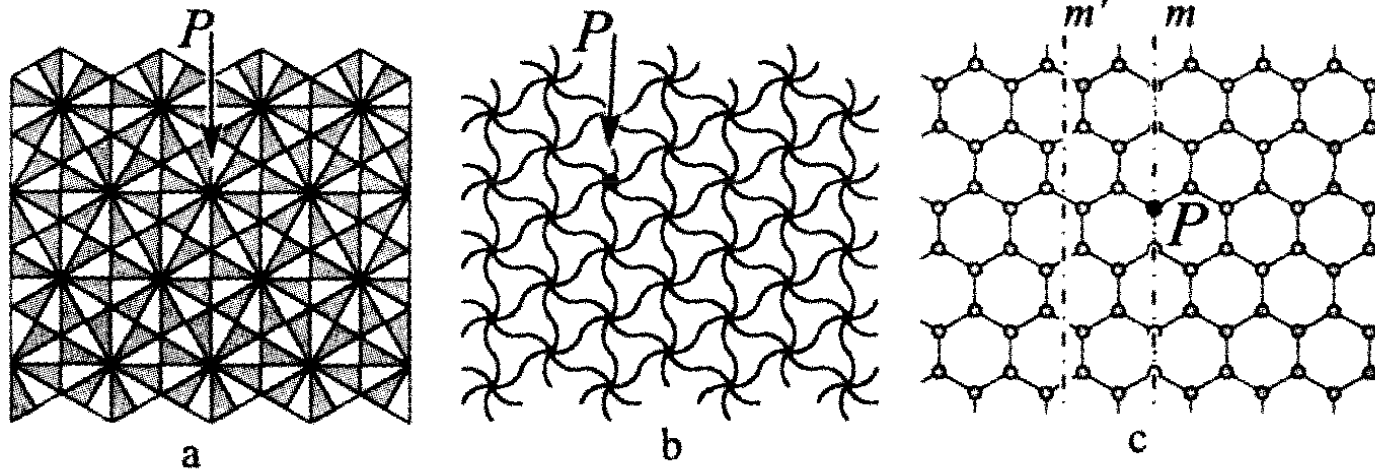
Primitive unit cell



Conventional unit cell

- Minnsta grindareining sem inniheldur einn og aðeins einn Bravais grindarpunkt (vinstri)
- Þær grindareiningar sem við notum gjarnan eru ekki nauðsynlega minnstu mögulegu grindareiningar (hægri)

Kristallafræði–samhverfa



- Þreföld snúningssamhverfa um P er sameiginleg öllum kristöllum
- Hólflaga grindin hefur einnig spegillínu um m , en hinar tvær grindirnar hafa ekki þá samhverfu
- Önnur samhverfuaðgerð er möguleg fyrir hólflaga grindina–að spegla um línuna m' og hliðra henni svo að hún falli í sjálfa sig

Punkt samhverfa

- Sérhver punktur í grind stendur fyrir frumeind eða hóp frumeinda sem hver um sig hefur tiltekna samhverfueiginleika
- Samhverfunni er lýst stærðfræðilega með vörpun á hnitakerfi
- Til dæmis er spegilsamhverfu um yz -planið lýst með vörpuninni

$$y' = y, z' = z, x' = -x$$

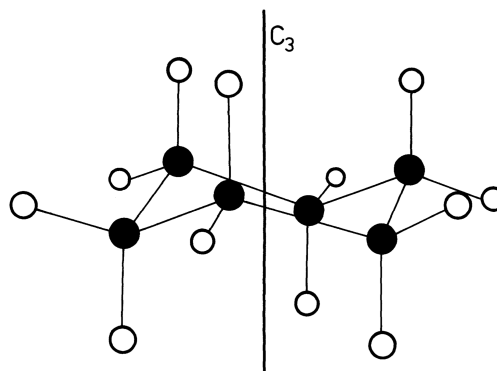
- Tilvist spegilplans í kristalli er táknúð með m

Punkt samhverfa-umhverfing

- Umhverfusamhverfu er lýst með

$$y' = -y, z' = -z, x' = -x$$

- Táknið fyrir umhverfusmhverfu $\bar{1}$
- Dæmi um sameind sem sýnir umhverfusamhverfu er cyclohexane

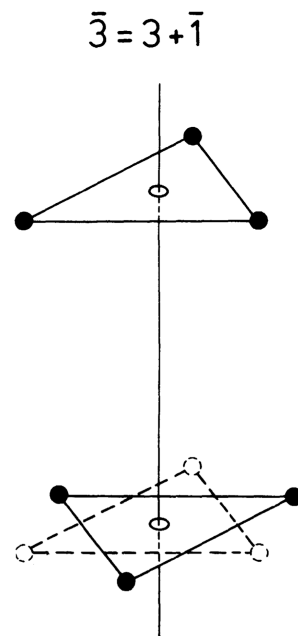


Punkt samhverfa–snúningsás

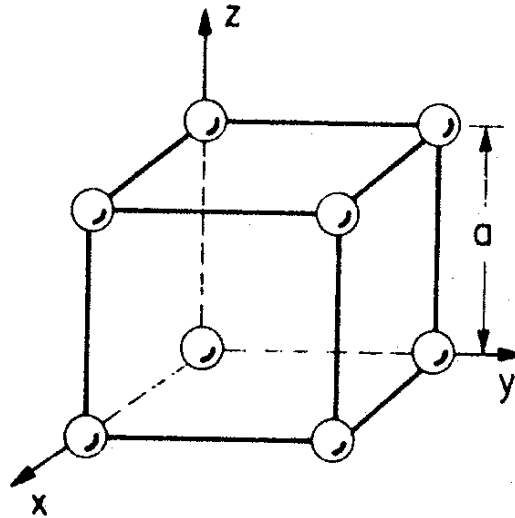
- Snúningssamhverfa er fyrir hendi ef snúningur um tiltekið horn um tiltekin ás, leiðir til eins strúktúrs
- Augljósa tilfellið er snúningur um 360° sem leiðir til sama strúktúrs
- Fjöldi millisnúninga sem leiðir til alveg eins strúktúrs er nefnd þrep snúningsássins
- Það getur því verið 2-, 3-, 4-, og 6-faldur samhverfuás, sem svara til óbreytanleika undir snúningi 180° , 120° , 90° , og 60°

Punkt samhverfa–snúningur - umhverfa

- Snúningur ásamt umhverfu getur einnig gefið nýja samhverfu
- Þetta er táknað með $\bar{2}$, $\bar{3}$, $\bar{4}$ eða $\bar{6}$
- Myndin sýnir 3-faldan snúning og umhverfu



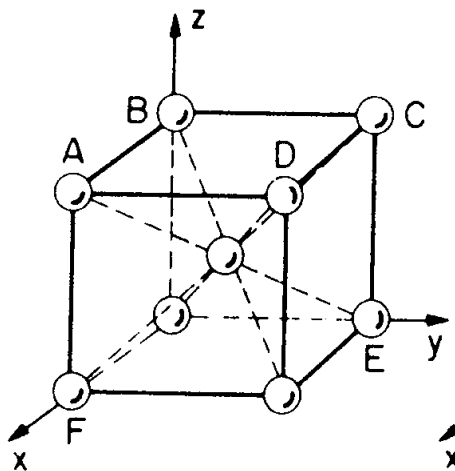
Einfaldur teningur (sc)



Frumeining einfalds tenings hefur að geyma einn og aðeins einn grindarpunkt

$$8 \times \frac{1}{8} = 1$$

Miðjusetinn teningur (bcc)



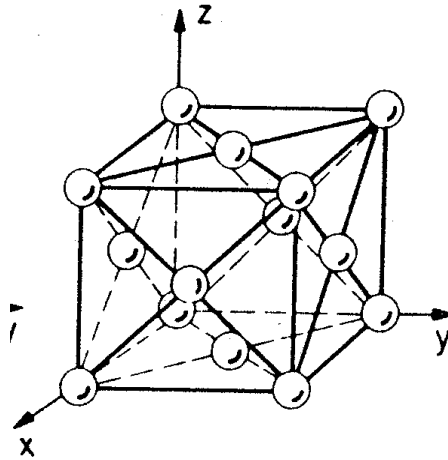
Frumeining miðjusetins tenings hefur að geyma tvo grindarpunkta

$$1 + 8 \times \frac{1}{8} = 2$$

Hvert atóm hefur 8 næstu granna

Dæmi um miðjusetinn tening eru natríum og þungsteinn

Hliðarsetinn teningur (fcc)



Frumeining hliðarsetins tenings hefur að geyma fjóra grindarpunkta

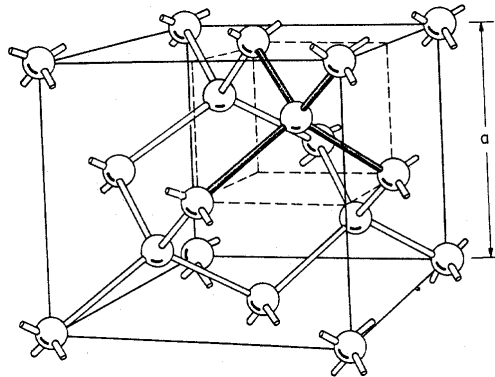
$$8 \times \frac{1}{8} + 6 \times \frac{1}{2} = 4$$

Hvert atóm hefur 12 næstu granna

Dæmi um hliðarsetinn tening eru kopar, gull og platína

Teningsgrindur-demant

Tvær kristallsgrindur, sem hvor um sig er hliðarsetinn teningur, með grunn í $(0\ 0\ 0)$ og $(\frac{1}{4}\ \frac{1}{4}\ \frac{1}{4})$



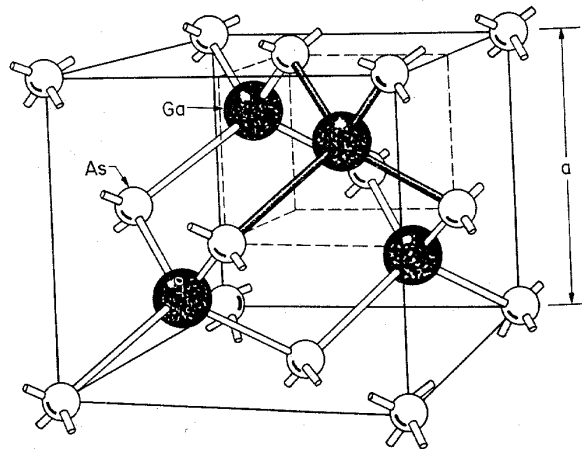
Dæmi um demantkristalgerð eru demantur, kísill og german

⇒ Dæmi 2.1.

⇒ Dæmi 2.2.

Teningsgrindur-zinc blende

Tvær kristallsgrindur úr mismunadi atómum, sem hvor um sig er hliðarsetinn teningur, með grunn í $(0\ 0\ 0)$ og $(\frac{1}{4}\ \frac{1}{4}\ \frac{1}{4})$



Dæmi um zinkblende kristallagerð eru ZnSe og GaAs

⇒ Dæmi 2.3.

⇒ Dæmi 2.4.

Kristallafræði

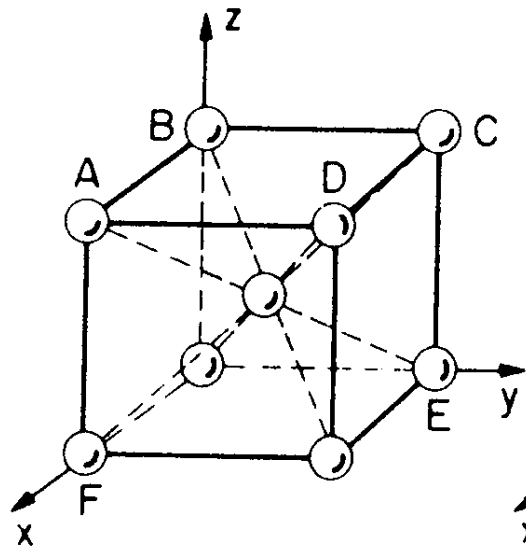
- Grindareining kísils við stofuhita hefur lengdir $a = 5.43 \text{ \AA}$ ($1 \text{ \AA} = 10^{-8} \text{ cm} = 10^{-10} \text{ m}$)
- Það eru 8 kísilatóm á grindareiningu sem hefur rúmmálið a^3
- Þetta þýðir að

$$\frac{8}{a^3} = 5 \times 10^{22} \text{ atóm/cm}^3$$

eru í kísilkristalli

- Á svipaðan hátt má reikna radía atóma, fjarlægðir milli plana o. s. frv.
- Athuga bera að atóm í demant og zinckblende grindum hafa fjóra næstu granna

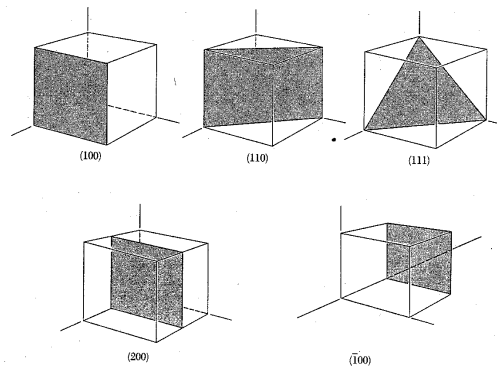
Kristallafræði



- Við sjáum að í planinu ABCD eru fjögur atóm
- Í planinu ACEF eru fimm atóm
- Þá eru fjarlægðir milli atóma mismunandi í þessum tveimur plönnum
- Eiginleikar kristalla í mismunandi kristallastefnur eru ólíkir

Kristallafræði

- Til að skilgreina plön í kristöllum eru notaðir Miller vísar
- Þeir eru fundnir samkvæmt eftirfarandi forskrift:
 - Skurðpunktar plansins við rétthyrnt hnitakerfi í grindarföstum eru fundnir
 - Fundin er umhverfa þessara talna. Þá er fundnar smæstu heiltölur sem hafa sömu hlutföll.
 - Niðurstaðan er rituð sem Miller vísir (hkl)



Kristallafræði

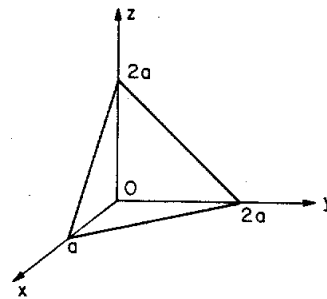
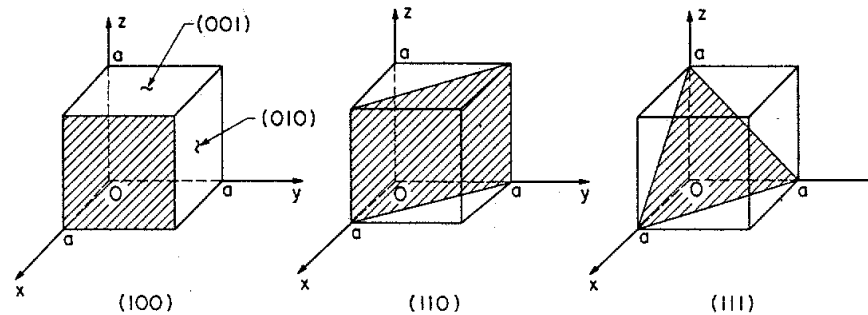


Fig. 4 A (211)-crystal plane.



Dæmi:

- Planið sker í $a, 2a, 2a$. \longrightarrow Umhverfur eru $1 \frac{1}{2} \frac{1}{2}$
- Smæstu heiltölur því $2 \ 1 \ 1$ \longrightarrow Þannig að Miller vísir er (211)

Kristallafræði

Ritháttur:

- $(\bar{h}kl)$: Fyrir plan sem sker x -ásinn í neikvæða stefnu t.d. $(\bar{1}11)$
- $\{hkl\}$: Tákna plön af jafngildri samhverfu - t.d. $\{100\}$ fyrir (100) , (010) , (001) , $(\bar{1}00)$, $(0\bar{1}0)$, og $(00\bar{1})$ í teningsamhverfu
- $[hkl]$: Fyrir kristalstefnur, eins og $[100]$ fyrir x -ásinn. Þannig er $[100]$ -stefnan hornrétt á (100) -planið, og $[111]$ -stefnan hornrétt á (111) -planið
- $\langle hkl \rangle$: Fyrir mengi jafngildra stefna - t.d. $\langle 100 \rangle$ fyrir $[100]$, $[010]$, $[001]$, $[\bar{1}00]$, $[0\bar{1}0]$, og $[00\bar{1}]$

⇒ Dæmi 2.5.

Kristallafræði

- Hornið θ milli tveggja plana $(u_1v_1w_1)$ og $(u_2v_2w_2)$ er gefið með

$$\cos \theta = \frac{u_1u_2 + v_1v_2 + w_1w_2}{\sqrt{(u_1^2 + v_1^2 + w_1^2)(u_2^2 + v_2^2 + w_2^2)}}$$

- Línan sem lýsir skurði þessara plana er $[uvw]$ þar sem

$$u = v_1w_2 - v_2w_1, \quad v = w_1u_2 - w_2u_1, \quad \text{og} \quad w = u_1v_2 - u_2v_1$$

- Aðskilnaður tveggja samsíða plana hkl er

$$d = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}$$

- Fyrir $\{100\}$ plönin er fjarlægðin a , fyrir $\{110\}$ plönin $0.707a$ og $0.577a$ fyrir $\{111\}$ plönin

Kristallafræði

- Sumir efniseiginleikar þéttefnis ráðast af kristallsstefnum
- Sem dæmi skoðum við kísil
 - $\{111\}$ plönin hafa mesta pökkun atóma
 - Fjarlægð milli plana er minnst í $\langle 111 \rangle$ stefnur 3.135 Å
 - Aflfræðilegir eiginleikar eins og togþol eru bestir í $\langle 111 \rangle$ stefnur
 - $\{111\}$ plönin oxast hraðar en $\{100\}$ plönin, þar eð þau hafa fleiri atóm á flatarmálseiningu fyrir hvarfið til að eiga sér stað
 - Ræktun er hægst í $\langle 111 \rangle$ stefnur þegar atómlögum er raðað lag eftir lag
 - Atómpéttleiki hefur hlutföllin
$$\{100\} : \{110\} : \{111\} = 1 : 1.414 : 1.155$$

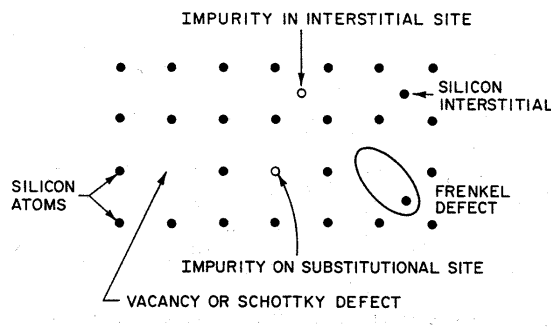
Veilur í kristöllum

- Raunverulegur kristallur er endanlegur, yfirborðsatóm eru ekki að fullu bundin
- Hann hefur veilur, sem hafa áhrif á raf-, ljós- og aflfræðilega eiginleika þéttefnisins

Slíkar veilur skiptast í

- Punktveilur
- Línuveilur
- Veilunet
- Útfellingar

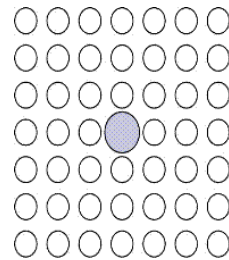
Punktveilur



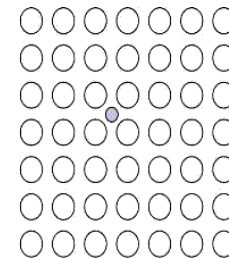
Myndin sýnir nokkur dæmi um punktveilur

- Sérhvert aðskotaatóm sem er í grindinni hvort heldur sem **staðgengill í grindarsæti** eða **atóm í milligrindarsæti** er punktveila
- Atóm sem vantar í grind myndar **eyðuveilu** (e. vacancy) sem einnig er punktveila (**Schottky veila**)
- Hýsis atóm sem situr milli reglulegra grindarsæta næst eyðuveilu er **Frenkel veila**

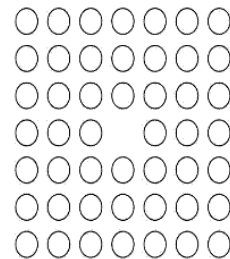
Punktveilur



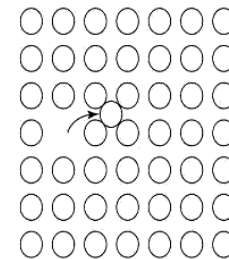
(a)



(b)



(c)

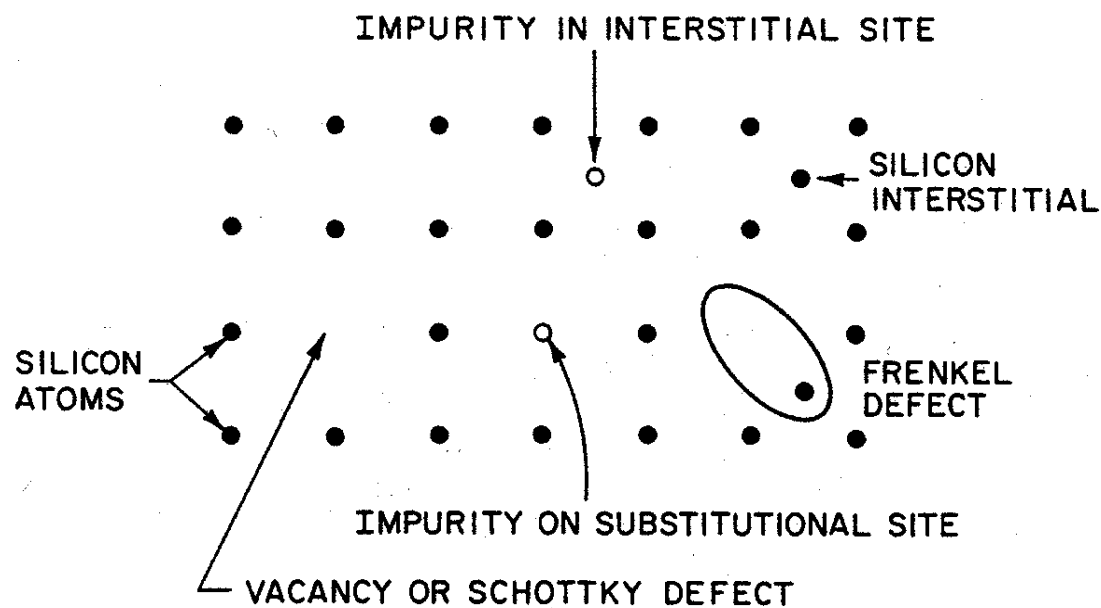


(d)

Semiconductor Devices, 2/E by S. M. Sze
Copyright © 2002 John Wiley & Sons, Inc. All rights reserved.

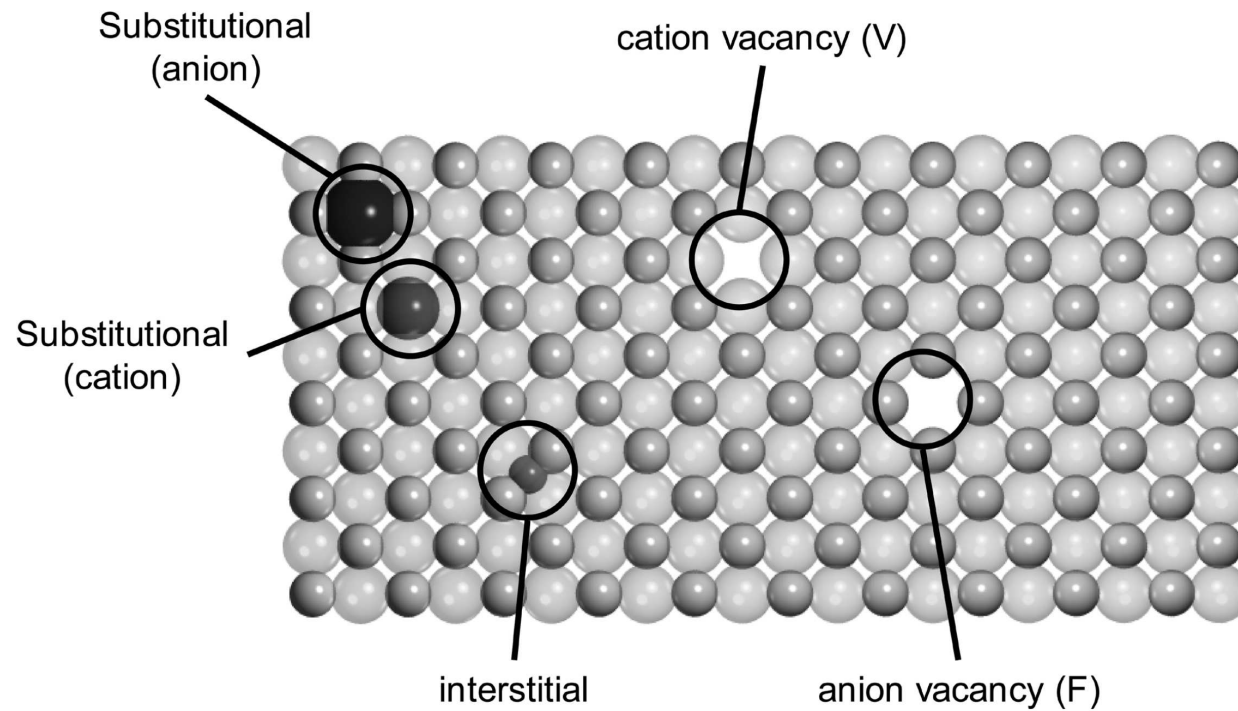
- Atóm sem viljandi er bætt í kristallsgrindina, sem og óhreinindi sem sest í grindina, er punktveila

Punktveilur



- Margar veilur verða til við framleiðslu tóla
- Sveim íbótar atóma og ræktun kristalla ræðst að miklu leyti af hegðun veilna

Punktveilur



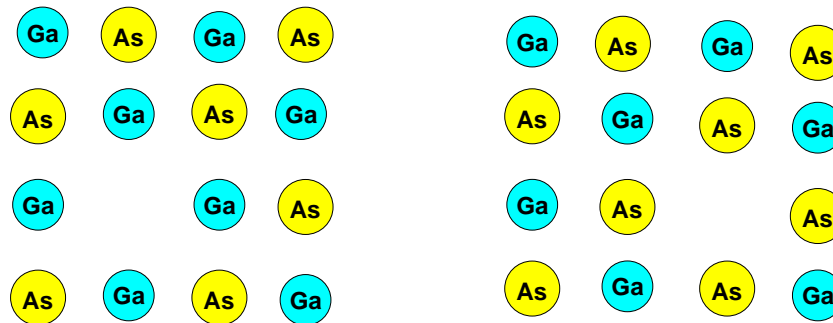
Dovesi et al. (2005)

- Dæmi um veilur í jónískum kristalli

Punktveilur

- Í hálfleiðurum þá breyta allar veilur rafeiginleikum þeirra
- Í kísilgrindinni er einfaldasta punktveilan, eyðuveila, nefnd Schottky veila
- Einföld eyðuveila er mynduð með því að slíta fjögur samgild tengi, en tvöföld eyðuveila fæst með því að slíta sex tengi
- Orkan sem þarf til að mynda tvöfalda eyðuveilu er því minni en þarf til að mynda tvær einfaldar eyðuveilur

Punktveilur



- Í GaAs geta Schottky veilur myndast í bæði Ga og As sætum
- Eins geta bæði Ga og As setið í milligrindarsæti
- Það eru mögulegar tvær gerðir Frenkel veilna
- Þá getur Ga setið í As sæti og öfugt. Þegar svo er komið höfum við **andsætuveilu** (e. antisite defect)

Punktveilur

- Eyðuveilur og atóm í milligrindarsæti hafa í varmajafnvægi tiltekin þéttleika, sem ræðst af hitastigi

$$N_s = N \exp\left(\frac{-E_s}{kT}\right)$$

þar sem

- N_s er þéttleiki punktveilunnar
- N er fjöldi atóma á einingarrúmmál í kristallsgrindinni, $N \approx 10^{22} \text{ cm}^{-3}$ fyrir kísil
- E_s er örvunarorkan
- örvunarorkan er 2.6 eV fyrir eyðuveilur og 4.5 eV fyrir milligrindarveilur
- T er hitastigið
- k er fasti Boltzmann

Punktveilur

- Frenkelveilur hafa í varmajafnvægi tiltekin þéttleika, sem ræðst af hitastigi

$$N_f = N \exp\left(\frac{-E_f}{2kT}\right)$$

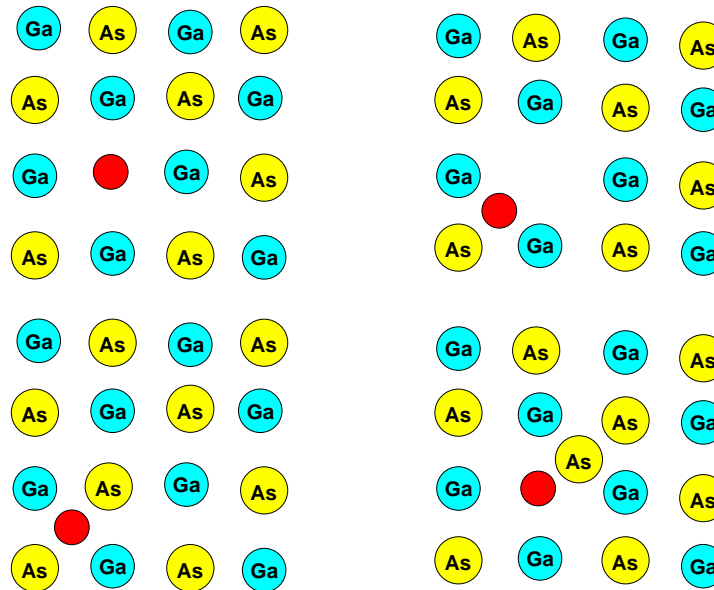
þar sem

- N_f er þéttleiki Frenkelveilu
- N er fjöldi atóma á einingarrúmmál í kristallsgrindinni, $N \approx 10^{22} \text{ cm}^{-3}$ fyrir kísil
- E_f er örvunarorkan, $\sim 1.1 \text{ eV}$ fyrir Frenkel veilur
- T er hitastigið
- k er fasti Boltzmann

Punktveilur

- Punktveilur gegna lykilhlutverki í sveimi og við oxun
- Sveim margra íbótarefna ræðst af þéttleika eyðuveilna og sama á við um oxunarhraða kísils
- Til að mynda rafvirkar veilur verða íbótaratóm yfirleitt að sitja sem staðgengill í grind. Þá mynda þau veilu með orkustig í orkugeilinni
- Veilur vegna staðgengilsatóma, sem eru efnafræðilega líkar hýsi, eru grunnar
- Þær ákvarða hleðsluberapéttleika efnisins

Punktveilur



- Staðgengilveilur eru venjulega rafvirkar og ákvarða leiðnigerð efnis
- Veilur í milligrindarsæti eru oft ekki rafvirkar
- Mikilvæg undantekning á þessu er litín í kísli, sem situr í milligrindarsæti og er rafgjafi

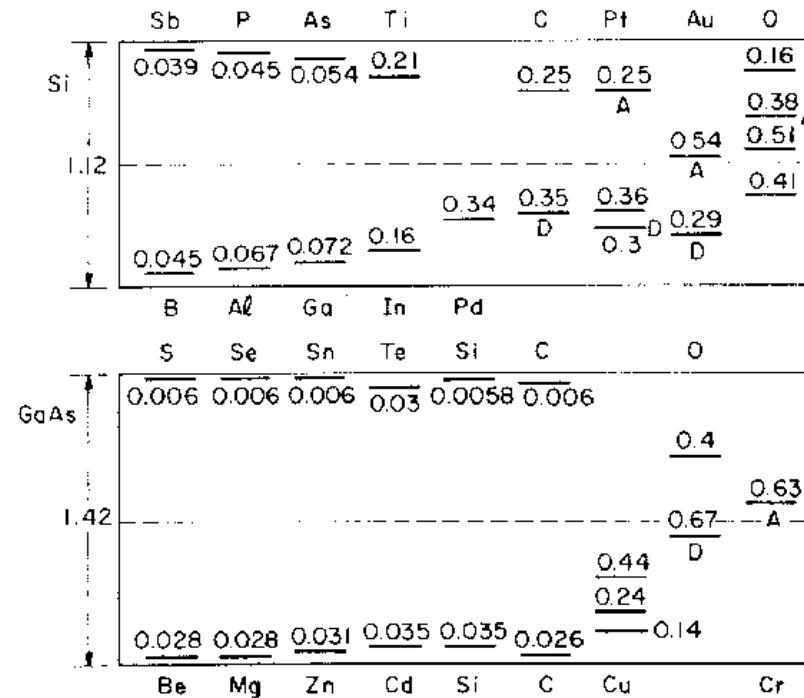
Punktveilur

		IIIA	IVA	VA	VIA					
	5	10.811	6	12.01115	7	14.0067	8	15.9994		
	B		C		N		O			
	Boron		Carbon		Nitrogen		Oxygen			
	13	26.9815	14	28.086	15	30.9738	16	32.064		
	Al		Si		P		S			
	Aluminum		Silicon		Phosphorus		Sulfur			
IIB	30	65.37	31	69.72	32	72.59	33	74.922	34	78.96
	Zn		Ga		Ge		As		Se	
	Zinc		Gallium		Germanium		Arsenic		Selenium	
	48	112.40	49	114.82	50	118.69	51	121.75	52	127.60
	Cd		In		Sn		Sb		Te	
	Cadmium		Indium		Tin		Antimony		Tellurium	
	80	200.59	81	204.37	82	207.19	83	208.980	84	(210)
	Hg		Tl		Pb		Bi		Po	
	Mercury		Thallium		Lead		Bismuth		Polonium	

- Til að mynda n-leiðni í hálfleiðara er gjarnan íbætt með atómum sem hafa einni gildisrafeind umfram hýsi
- Til að mynda p-leiðni í hálfleiðara er gjarnan íbætt með atómum sem hafa einni gildisrafeind minna en hýsir

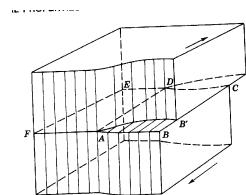
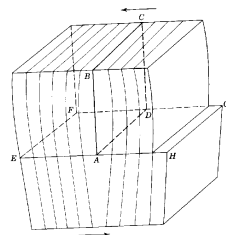
Punktveilur

- Ef íbótaratóm í hálfleiðara er efnafræðilega ólíkt hýsi, ekki úr sama eða nálægum dálki lotukerfisins, þá er líklegt að veilan verði djúp

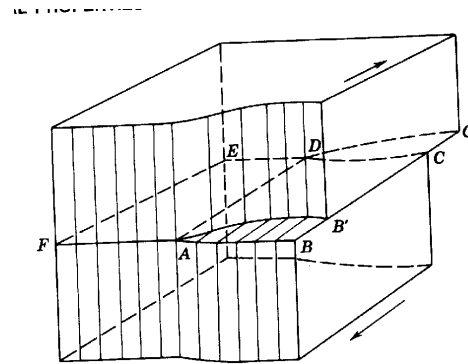
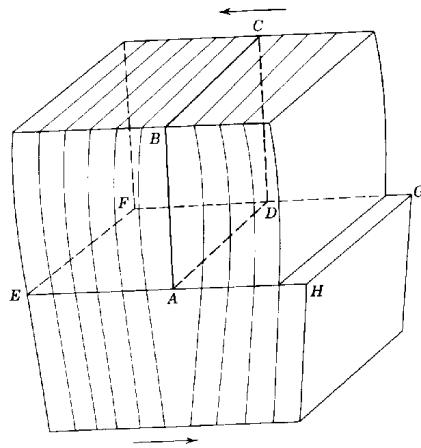


Misgengi

- Misgengi (e. dislocation) er einvíð röð punktveilna í annars fullkomnum kristalli
- Það getur komið fram ef kristallur verður fyrir álagi sem er meira en fjaðurmörk (e. elastic limit), t. d. þegar kristallurinn kólnar eftir ræktun
- Misgengi eru oft mjög flókin en samanstanda oftast af tveimur grunngerðum, **línuveilur** og **skrúfveilur**

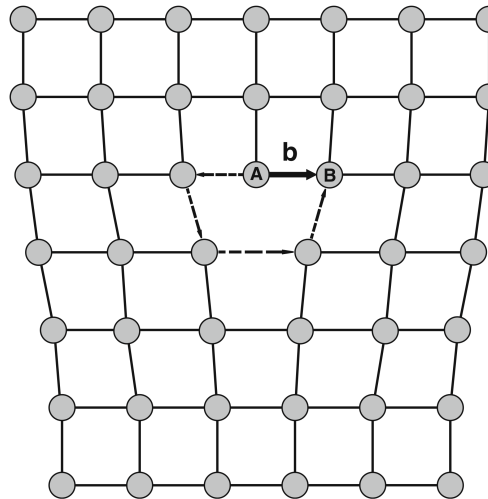


Misgengi



- Línuveila sést á myndinni til vinstri, og er í raun auka atómplan AB sem sett hefur verið inn í grindina
- Skrúfveila er sýnd á myndinni til hægri

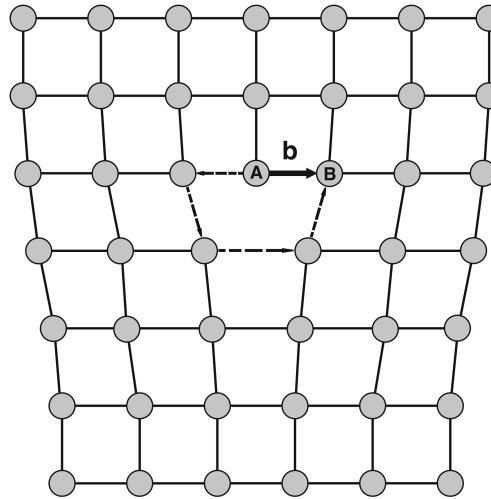
Misgengi



Frá Ibach and Lüth (2009)

- Misgengi er lýst með Burgers vigrinum
- Brotalínan sýnir lykkju umhverfis kjarna veilunnar
- Lykkjan byrjar í frumeind A – henni myndi ljúka í frumeind B ef misgengið væri ekki til staðar

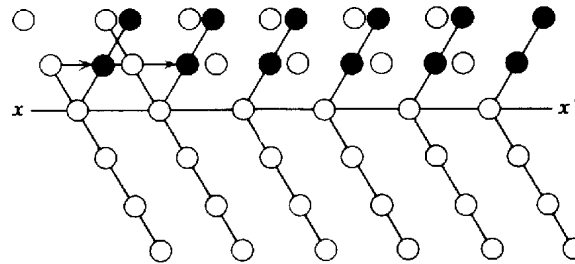
Misgengi



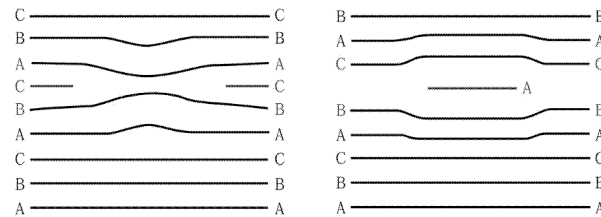
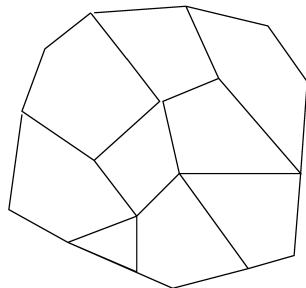
Frá Ibach and Lüth (2009)

- Þegar Burgers vigurinn er hornrétt á misgengið er um að ræða edge misgengi
- Ef Burgers vigurinn er í stefnu eftir misgenginu er um að ræða skrúfuveilu

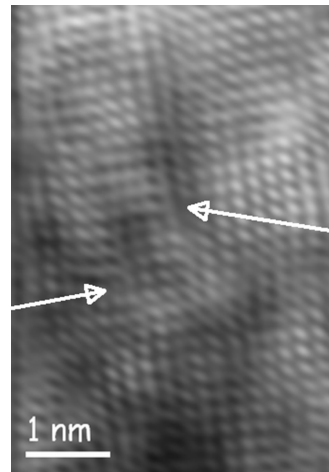
Veilunet



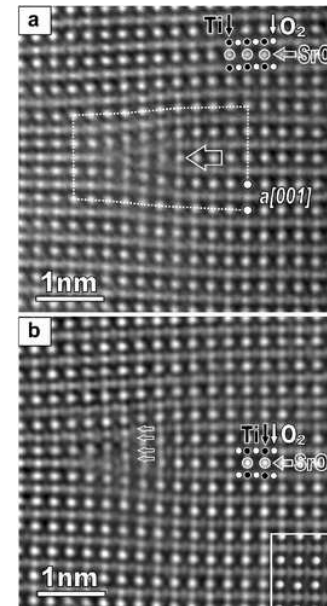
- Dæmi um veilunet eru tvíburar (e. twin), kornamörk (e. grain boundaries) og hlaðveilur (e. stacking fault)



Veilunet



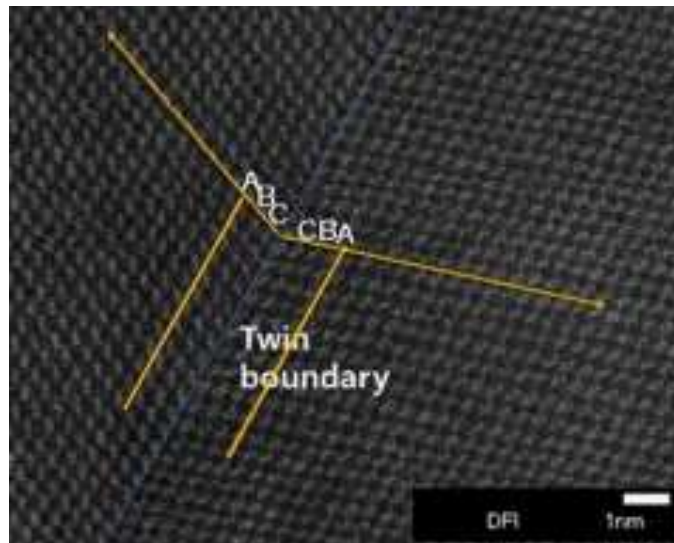
Frá Belger et al. (2012)



Frá Jia et al. (2005)

- Dæmi um hlaðveilur
 - Í TiC/VC á safír, örvarnar benda á hlaðveilur
 - Í SrTiO₃, hringirnir tákna atóm súlur úr SrO, Ti, og O

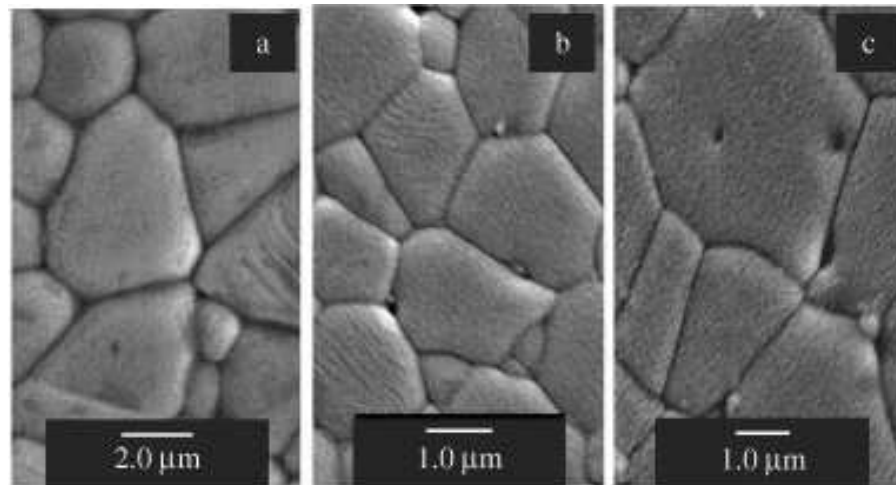
Veilunet



Frá Kim et al. (2014)

- Tvíburar í GaAs séðir með gegnskíns rafeindasmásjá (e. Transmission electron microscope (TEM))

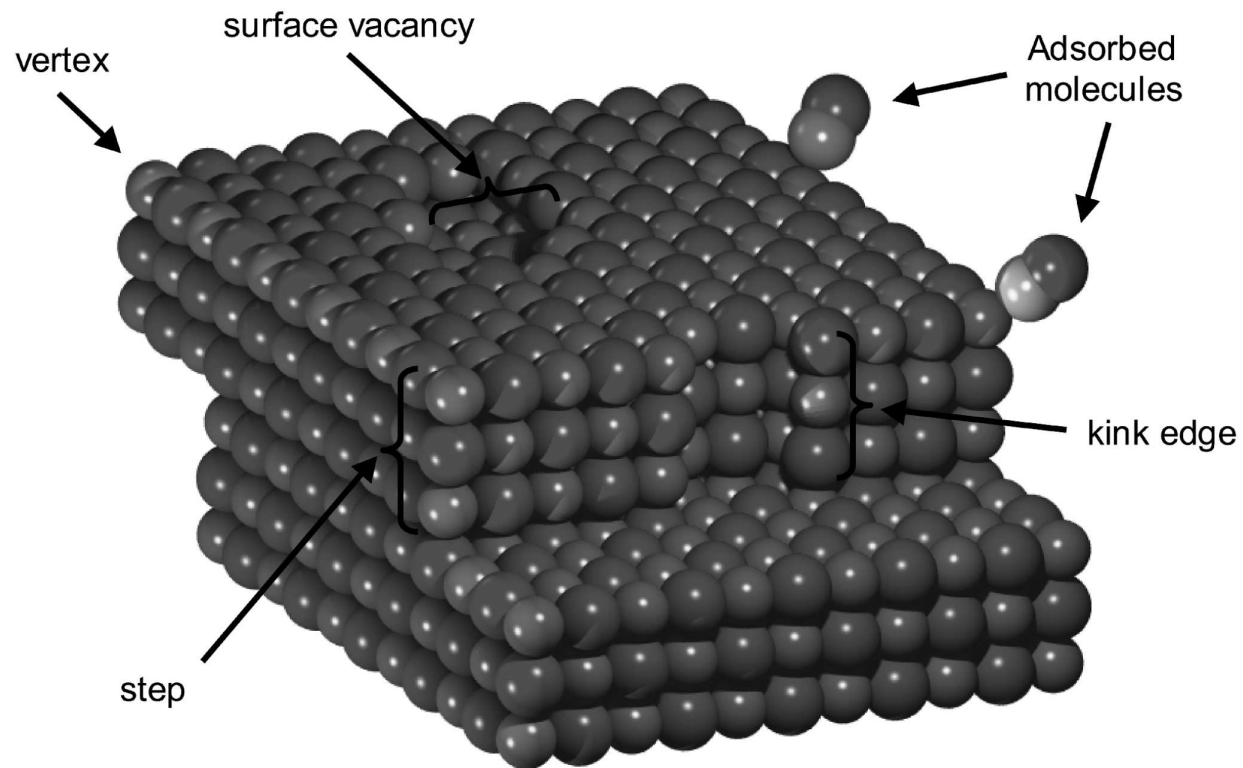
Veilunet



Frá Dibb et al. (2006)

- Korn og kornamörk í $\text{SnO}_2 \cdot (\text{Co}_{1/4}, \text{Mn}_{3/4})\text{O}$ sem notað er í spennuháð viðnám

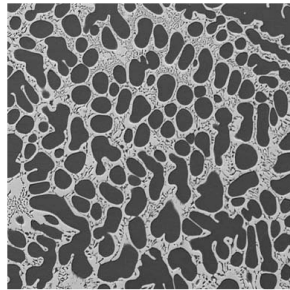
Veilur við yfirborð



Dovesi et al. (2005)

- Dæmi um yfirborðsveilur

Fasalínurit



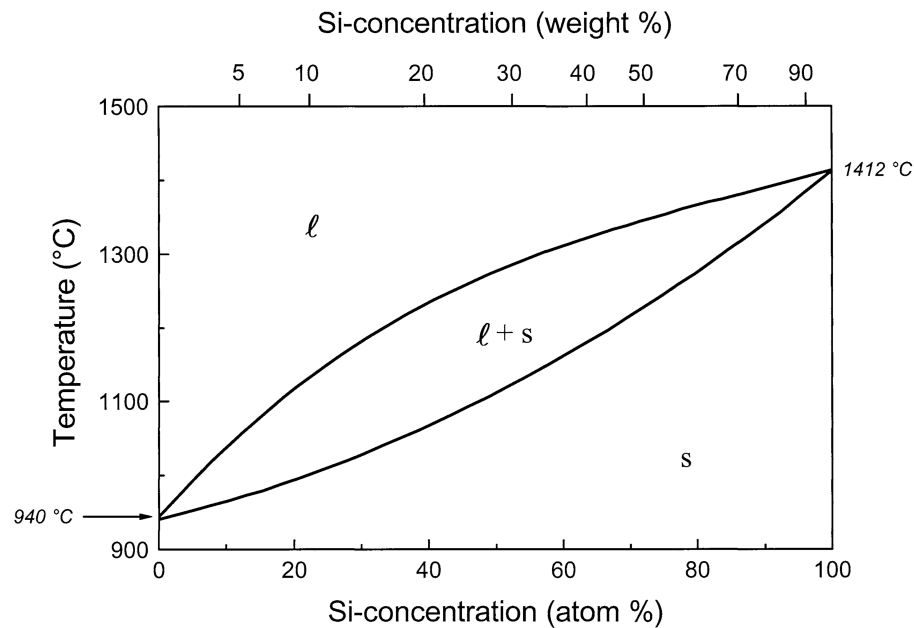
Frá Ibach and Lüth (2009)

- Nútíma functional materials samanstanda af mörgum frumefnum í ólíkum fösum
- Fasi vísar hér til svæðis af einsleitum þéttleika og formgerð sem er á lengdarskala sem er langur miðað við víddir frumeindarinnar
- Mismunandi fasa má sjá í einföldum binary melmi
- Myndin sýnir rafeindasmásjármynd (SEM) af Ag/Cu melmi
- Ljósu fletirnir sýna kopar ríka fcc fasa og dökku fletirnir silfurríka fcc fasa

Fasalínurit

- Hinir mörgu fasar í nútíma samsettu þéttefni eru oftast ekki í varmajafnvægi
- Á fasalínuriti er hitastig teiknað sem fall af þéttleika eins þáttar (á kostnað hinna)
- Fyrir tiltekið hitastig og samsetningu hefur þéttefnið tiltekna formgerð í jafnvægi
- Skilin milli mismunandi formgerða eru táknuð með línum, t. d. skil milli vökva forms og storku
- Melmi sem eru blandanleg (e. miscible) í storku hafa einföldustu fasalínuritin

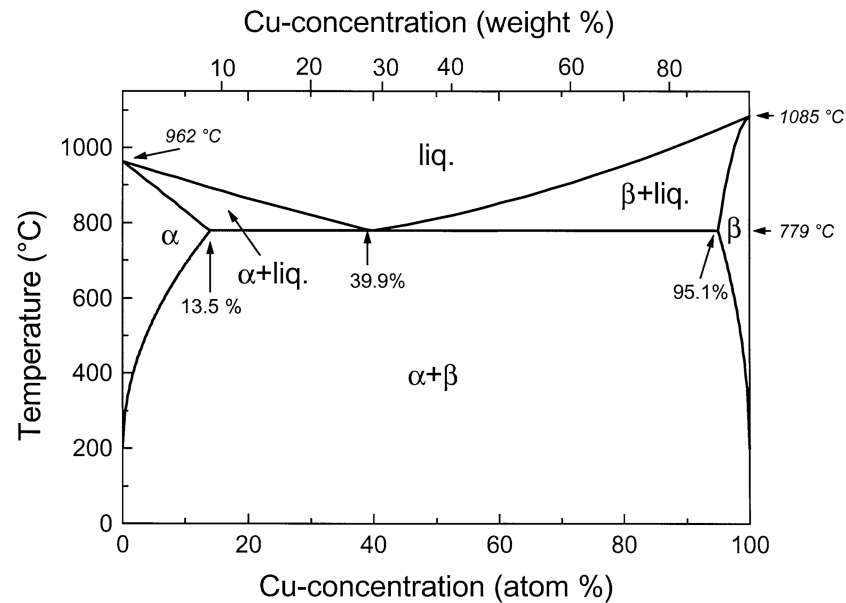
Fasalínurit



Frá Ibach and Lüth (2009)

- Dæmi um tiltölulega einfalt fasalínurit er SiGe melmið
- Það ræðst af hitastigi og hlutlallslegum þéttleika Si hvort melmið er einsleitur vökvi (l), einsleitt þéttefni (s) eða tveggja fasa kerfi með bæði storku og vökva (l+s)

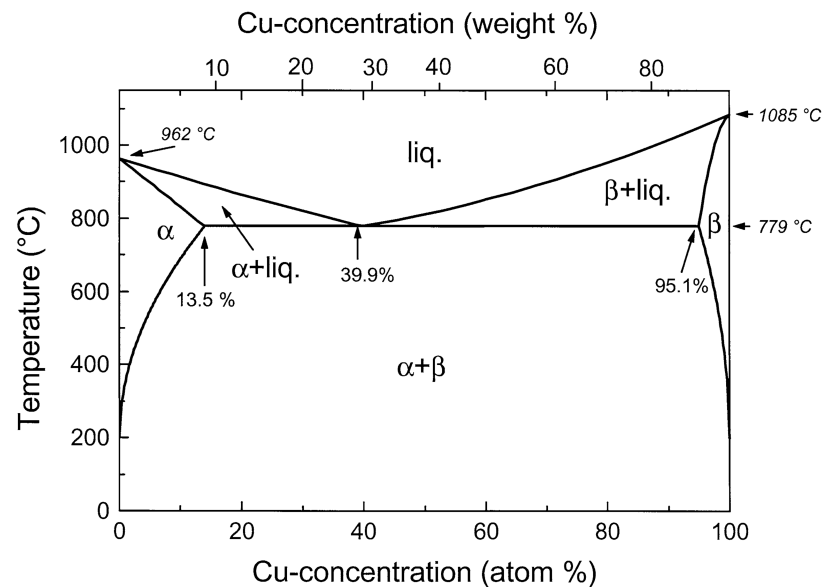
Fasalínurit



Frá Ibach and Lüth (2009)

- Fasalínuritið fyrir AgCu melmið er mun flóknara
- Ástæðan fyrir því er að storkufasi AgCu er ekki að fullu blandanlegur
- Cu er uppleysanlegt í Ag aðeins upp að tilteknu hlutfalli sem ræðst af hitastigi (α -fasi)

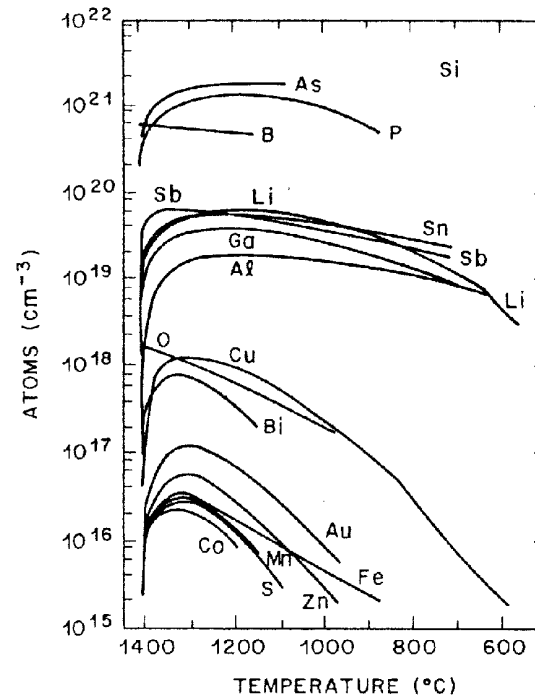
Fasalínurit



Frá Ibach and Lüth (2009)

- Á sama hátt er Ag aðeins uppleysanlegt í Cu upp að hitastigsháðu hlutfalli (β -fasi)
- Þar á milli, í blöndunar gapinu (e. miscibility gap) samanstendur storkan af smásæum míkrokristölluðum svæðum Ag-ríks α -fasa og Cu-ríks β -fasa

Útfellingar



- Útfellingar óhreininda eða íbótar atóma geta myndað veilur
- Óhreinindi hafa öll tiltekna leysni þ.e. þéttleika sem hýsir getur tekið við í storku

Frekari upplýsingar

- Þessi kafli er að mestu byggður á kafla 2 hjá Ibach and Lüth (2009) og að einhverju leyti á kafla 2.2. og 10.4.2. hjá Sze (2002). Sams konar umfjöllun má finna í köflum 7 og 12 hjá Simon (2013). Frekari upplýsingar um kristallsgerðir og samhverfur má finna hjá Barret and Massalski (1980) og Glazer (1987).

Heimildir

Barret, C. and T. B. Massalski (1980). *Structure of Metals: Crystallographic Methods, Principles and Data* (3 ed.). Pergamon Press.

Belger, A., M. Reibold, and P. Paufler (2012). Modulus and hardness change of silicon and sapphire substrates by TiC/VC multilayer coatings. *Materials Sciences and Applications* 3(4), 185–194.

Dibb, A., M. Cilense, P. R. Bueno, Y. Maniette, J. A. Varela, and E. Longo (2006). Evaluation of rare earth oxides doping $\text{SnO}_2 \cdot (\text{Co}_{1/4}, \text{Mn}_{3/4})\text{O}$ -based varistor system. *Materials Research* 9(3), 339 – 343.

Dovesi, R., B. Civalleri, R. Orlando, C. Roetti, and V. R. Saunders (2005). Ab initio quantum simulation in solid state chemistry. In K. B. Lipkowitz, R. Larter, and T. R. Cundari (Eds.), *Reviews in Computational Chemistry*, Volume 21, pp. 1–125. John Wiley & Sons.

Glazer, A. M. (1987). *The Structure of Crystals*. Bristol: Adam Hilger.

Ibach, H. and H. Lüth (2009). *Solid-State Physics: An Introduction to Principles of Materials Science* (4 ed.). Berlin Heidelberg: Springer Verlag.

Jia, C. L., A. Thust, and K. Urban (2005). Atomic-scale analysis of the oxygen configuration at a SrTiO₃ dislocation core. *Physical Review Letters* 95(22), 225506.

Kim, S. W., Y. Cho, C. Shin, W. K. Park, D. H. Kim, and D. H. Ko (2014). Defect analyses of selective epitaxial grown GaAs on STI patterned (0 0 1) Si substrates. *Journal of Crystal Growth* 401, 319 – 322.

Simon, S. H. (2013). *The Oxford Solid State Basics*. Oxford: Oxford University Press.

Sze, S. M. (2002). *Semiconductor Devices: Physics and Technology* (2 ed.). John Wiley & Sons.