Rafeindatækni fastra efna:

Kristallafræði

Kafli 2

Jón Tómas Guðmundsson

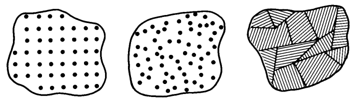
tumi@hi.is

31. ágúst 2000

Kristallafræði

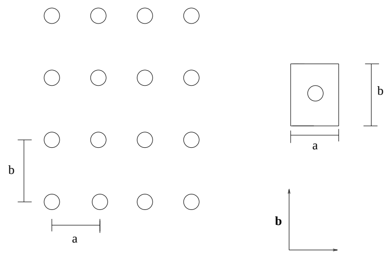
- Í rafeindatækni höfum við einkum áhuga á rafeiginleikum þéttefnis
- Við munum sjá að ferðalag hleðslubera um málm eða hálfleiðara ræðst ekki eingöngu af eiginleikum rafeindarinnar heldur einnig af því hvernig frumeindirnar raðast og mynda þéttefni

Kristallafræði



- Þéttefni getur verið, einkristallað, myndlaust eða fjölkristallað
- Þeir hálfleiðarar sem mikilvægastir eru í rafeindatækni eru einkristallar
- Í einkristalli er atómum raðað lotubundið í þremur víddum
- Lotubundin röðun atóma í kristall er kölluð kristallsgrind
- Fyrir gefin hálfleiðara er til grindareining sem lýsir öllum kristallinum; með því að endurtaka grindareininguna má mynda alla kristallsgrindina

Kristallafræði



- 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
- 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

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

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

- Grindareining er skilgreind með einingarvigrum

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

þar sem

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

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

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

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

Kristall = 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

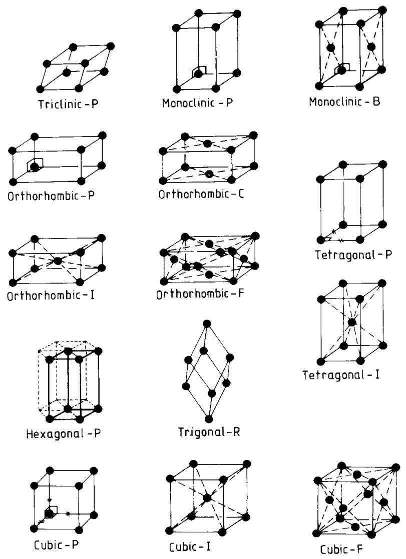
Kristallafræði

- Kristallakerfin sjö

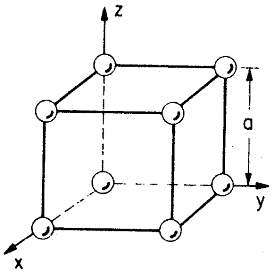
Þríhalla	$a \neq b \neq c$
	$\alpha \neq \beta \neq \gamma$
Einhalla	$a \neq b \neq c$
	$\alpha = \gamma = 90° \neq \beta$
Rétthorna	$a \neq b \neq c$
	$\alpha = \beta = \gamma = 90°$
Fernings	$a = b \neq c$
	$\alpha = \beta = \gamma = 90°$
Tenings	$a = b = c$
	$\alpha = \beta = \gamma = 90°$
Þríhyrnings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

Kristallafræði

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



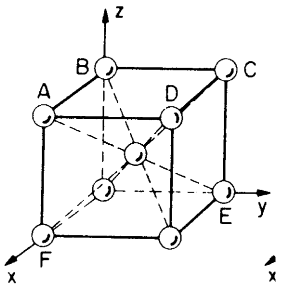
Einfaldur teningur



Frumeining einfalds tenings hefur að geyma einn og aðeins einn grindarpunkt

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

Miðjusetinn teningur



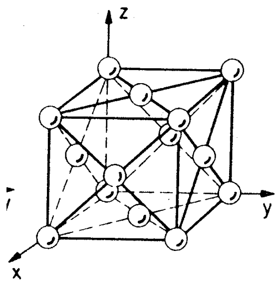
Frumeining miðjusetins tenings hefur að geyma tvo grindarpunkta

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

Hvert atóm hefur 8 næstu granna

Dæmi um miðjusetinn tening eru natríum og þungsteinn

Hliðarsetinn teningur



Frumeining hliðarsetins tenings hefur að geyma fjóra grindarpunkta

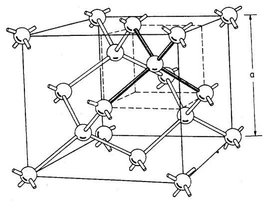
$$8 \times \frac{1}{8} + 6 \times \frac{1}{2} = 4$$

Hvert atóm hefur 12 næstu granna

Dæmi um hliðarsetinn tening eru kopar, gull og platína

Teningsgrindur-demant

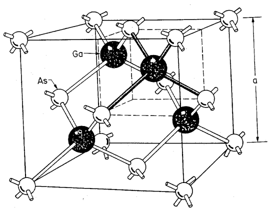
Tvær kristallagrindur, sem hvor um sig er hliðarsetinn teningur, með grunn í (0 0 0) og $(\frac{1}{4}\frac{1}{4}\frac{1}{4})$



Dæmi um demantkristalgerð eru demantur, kísill og german

Teningsgrindur-zinc blende

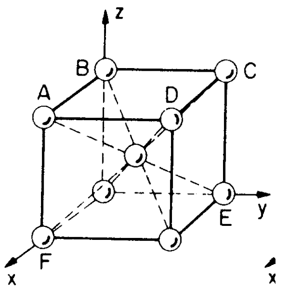
Tvær kristallagrindur úr mismunadi atómum, sem hvor um sig er hliðarsetinn teningur, með grunn í (0 0 0) og ($\frac{1}{4}\frac{1}{4}\frac{1}{4}$)



Dæmi um zinkblende kristallagerð eru ZnSe og GaAs

$\Longrightarrow$ Dæmi 2.1.
$\Longrightarrow$ Dæmi 2.2.

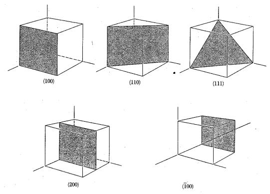
Kristallafræði



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

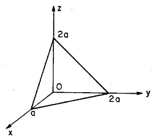
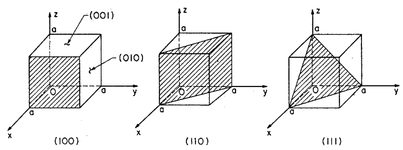


Fig. 4 A (211)-crystal plane.



Dæmi:

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

Kristallafræði

Ritháttur:

- $(\bar{h}kl)$: Fyrir plan sem sker x-ásinn í neikvæða stefnu t.d. $(\bar{1}11)$
- $\{hkl\}$: Táknar plön af jafngildri samhverfu - t.d. $\{100\}$ fyrir (100), (010), (001), $(\bar{1}00)$, $(0\bar{1}0)$, og $(00\bar{1})$ í teningssamhverfu
- $[hkl]$: 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 $[00\bar{1}]$

$\Longrightarrow$ Dæmi 2.3.

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

$$u = v_1w_2 - v_2w_1$$

$$v = w_1u_2 - w_2u_1$$

$$w = u_1v_2 - u_2v_1$$

- 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

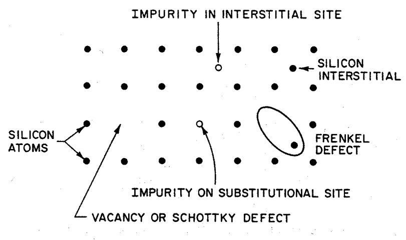
- Sumir efniseiginleikar kísils eru ráðast af kristallsstefnum
- $\{111\}$ plönin hafa mesta pökkun atóma
- Fjarlægð milli flana er minnst í $\langle 111\rangle$ stefnur 3.135 Å
- Aflfræðilegir eiginleikar eins og togþol eru bestir í $\langle 111\rangle$ stefnur
- 111 plönin oxast hraðar en 100 plönin, þar eð þau hafa fleiri atóm á flatarmálseiningu fyrir hvarfið til að eiga sér stað
- Ræktun er hægust í $\langle 111\rangle$ stefnur þegar atómlögum er raðað lag eftir lag

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 hálfleiðarans

  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 sem einnig er punktveila (Schottky veilu)
- Hýsis atóm sem situr milli reglulegra grindarsæta næst eyðuveilu er Frenkel veila

Punktveilur

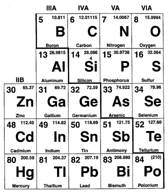
- Eyðuveilur og atóm í milligrindarsæti hafa í varmajafnvægi tiltekin þéttleika, sem ræðst af hitiastigi

$$N_{\mathrm{d}} = A \exp\left(\frac{-E_{\mathrm{a}}}{kT}\right)$$

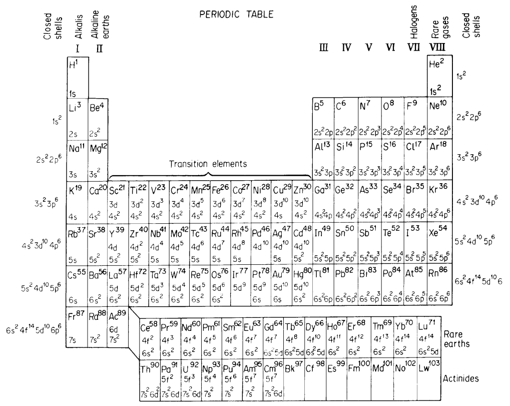
  þar sem
  - N_{d} er þéttleiki punktveilunnar
  - A er fasti
  - E_{a} er örvunarorkan
  - (2.6 eV fyrir eyðuveilur og 4.5 eV fyrir milligrindarveilur)
  - T er hitastigið
  - k er fasti Boltzmann

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 hleðsluberaþéttleika efnisins



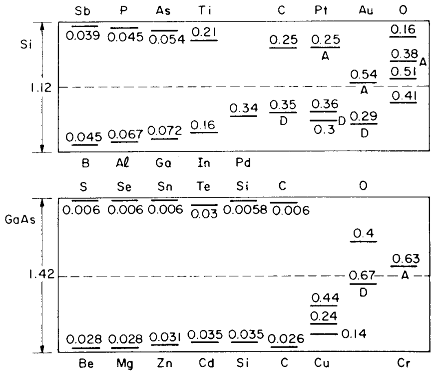
Punktveilur



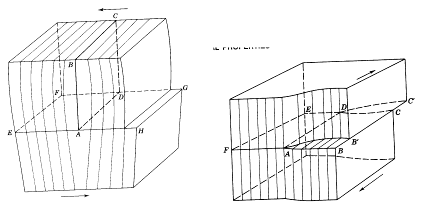
- Til að mynda n-leiðni í hálfleiðara er gjarnan íbætt með atómum sem hafa einni gildisrafeind umfram hýsi
- Til að mynda p-leiðni í hálfleiðara er gjarnan íbætt með atómum sem hafa einni gildisrafeind minna en hýsir

Punktveilur

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

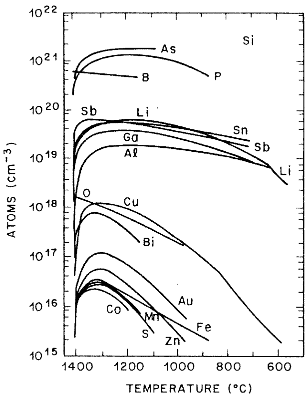


Misgengi



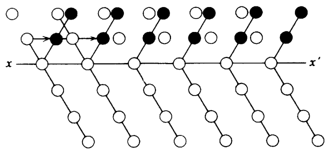
- Tvær megingerðir misgengja (e. dislocation) eru **línuveilur** og **skrúfveilur**
- Línuveila sést á myndinni til vinstri, og er í raun auka atómplan AB sem sett hefur verið inn í grindina
- Skrúfveila er sýnd á myndinni til hægri

Útfellingar

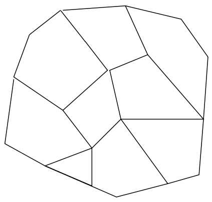


- Útfellingar óhreininda eða íbótar atóma geta myndað veilur
- Óhreinindi hafa öll tiltekna leysni þ.e. þéttleika sem hýsir getur tekið við í storku

Veilunet



- Dæmi um veilunet eru tvíburar (e. twin) og kornamörk (e. grain boundaries)



Heimildir

[1] Ben G. Streetman og Sanjay Banerjee, *Solid State Electronic Devices* , 5th ed., Prentice Hall, 2000, kaflar 1.1. - 1.2.

[2] S. M. Sze, *Semiconductor devices: Physics and technology*, John Wiley & Sons, 1985, kafli 1

[3] A. M. Glazer, *The Structure of Crystals*, Adam Hilger, Bristol, 1987

[4] B. D. Cullity, in *Elements of X-ray diffraction*, Addison-Wesley, 1967

[5] C. W. Pearce, Crystal growth and wafer preparation, in *VLSI Technology*, editor S. M. Sze, McGraw-Hill, 1988

[6] C. Barret and T. B. Massalski, Structure of Metals: Crystallograhic Methods, Principles and Data, 3rd ed., Pergamon Press, 1980