Lösungen zu Blatt 5

Aufgabe 17: Hexagonales Gitter

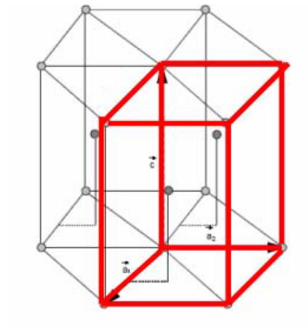


Abbildung 1: Die Einheitszelle ist rot markiert - sie enthält zwei Atome

a) Bestimmung der Koordinaten der Basisatome

Die hcp (hexagonal closly packed) hat eine zweiatomige Basis.

i) Koordinaten in Gittereinheiten:

$$(0,0,0) \qquad \text{und} \qquad (\frac{2}{3}, \frac{1}{3}, \frac{1}{2})$$

$$\text{oder vektoriell bei } \vec{0} \qquad \text{und} \qquad \frac{2}{3}\vec{a_1} + \frac{1}{3}\vec{a_2} + \frac{1}{2}\vec{c}$$

ii) Atompositionen in karthesischen Koordinaten

Abbildung 2: Tansformation in kartesische Koordinaten.

Gittervektoren karthesisch:

$$\vec{a_1} = \begin{pmatrix} -\sin 30° \\ -\cos 30° \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -0,5 \\ -0,87 \\ 0 \end{pmatrix} \qquad \vec{a_2} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \qquad \vec{c} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1,63 \end{pmatrix}.$$

1. Basisatom bei: $x = 0$; $y = 0$; $z = 0$
2. Basisatom bei: $x = -\frac{2}{3}\sin 30° + \frac{1}{3}$; $y = -\frac{2}{3}\cos 30°$; $z = 0,816$

Wie kommt man darauf?

Das zweite Basisatom liegt auf einer Auflage von drei Atomen (idealisisert als Kugeln dargestellt) des ‚Bodens‘ der Einheitszelle. Die zweite Basisatomkugel hat also ihren Mittelpunkt in Projektion auf dem Schnittpunkt der Seitenhalbierenden des gleichschenkligen Dreiecks, das von den Mittelpunkten der Auflageatome gebildet wird. Die Seitenhalbierenden schneiden sich im Verhältnis $\frac{1}{3}$ zu $\frac{2}{3}$.

b) Berechnung der Packungsdichte

i) Die Elementarzelle hat eine rautenförmige Grundfläche:

$A = |a|^2 \cos 30°$, Höhe: $\sqrt{\frac{8}{3}}|a|$

Das Volumen der Einheitszelle berechnet sich:

$|a|^3 \sqrt{\frac{8}{3}} \cos 30°$.

Es sind zwei Atome in einer Einheitszelle enthalten;
dichtgepackt entlang $(0, 1, 0) \Rightarrow |a| = 2r$,
damit ergibt sich die Packungsdichte zu:

$$PD = \frac{2\frac{4}{3}\pi r^3}{8\sqrt{\frac{8}{3}}\cos 30° r^3} = \frac{\pi}{3\sqrt{\frac{8}{3}}\cos 30°} = 0,74 \hat{=} 74\%$$

Aufgabe 18: Siliziumwafer

a) Eisenatome:

Kritische Anzahl der Eisenatome:
$c_{\text{krit,Fe}} = 10^{12} cm^{-3}$

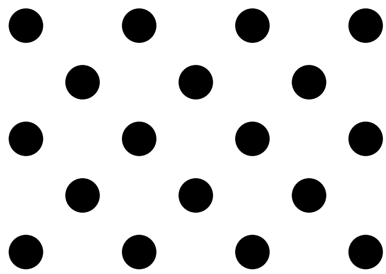
Volumen eines Wafers der Dicke $1mm$ und einer Fläche von $1cm^2$:
$Vol = 1cm^2 \cdot 0,1cm = 0,1cm^3$

Kritische Anzahl von Eisen Atomen bezogen auf unser Volumen:
$n_{\text{Fe}} = c_{\text{krit,Fe}} \cdot Vol = 10^{11}$.

Soviele Fe-Atome im Gesamtenvolumen reichen aus. Also ist bei 10^{11} Atomen auf der Oberfläche, die dann in das Silizium eindiffundieren, die kritische Konzentration erreicht.

b) Vergleich der Oberflächendichten:

Die {100}-Oberfläche sieht so aus:



Das sieht genau wie die Aufsicht auf einen normalen fcc-Kristall aus, denn die Atome, die zusätzlich in des Diamanteinheitszelle zu finden sind, liegen im Inneren dieser Zelle und spielen für die Oberfläche hier keine Rolle.

Man sieht also : 2 Atome pro Oberflächeneinheitszelle (OberflEZ).
Somit ist die Anzahl der Si-Atome (n_{Si}) pro OberflEZ:

$\frac{n_{\mathrm{Si}}}{\mathrm{OberflEZ}} = 1 + 4 \cdot \frac{1}{4} = 2$

Anzahl von Oberflächeneinheitszellen pro cm^2 für Si:
$\frac{\mathrm{OberflEZ}}{cm^2} = \frac{1}{a_{\mathrm{Si}}{}^2} = \frac{1}{(0{,}543 \cdot 10^{-7})^2 cm^2} = 3,39 \cdot 10^{14} cm^{-2}$

Daraus folgt:
$\frac{n_{\mathrm{Si}}}{cm^2} = \frac{n_{\mathrm{Si}}}{\mathrm{OberflEZ}} \cdot \frac{\mathrm{OberflEZ}}{cm^2} = 6,78 \cdot 10^{14} cm^{-2}$

Bezogen auf unser Volumen ergibt sich hiermit:
$\frac{n_{\mathrm{Fe}}}{n_{\mathrm{Si}}} = \frac{1}{6780} = 0,0147\%$
Die Si-Oberflächendichte ist 6780 mal größer. Die Oberfläche ist also mit $0,0147\%$ von Eisenatomen bedeckt.

c) Relativer Anteil
Die Elementarzelle ist vom fcc Typ mit zweiatomiger Basis (Diamandstruktur):
$\frac{n_{\mathrm{Si}}}{\mathrm{VolEZ}} = (8 \cdot \frac{1}{8} + 6 \cdot \frac{1}{2}) \cdot 2 = 8$

Demnach gibt es 8 Si Atome pro EZ.
Anzahl von Elementarzellen pro cm^3 Si:

$\frac{\mathrm{VolEZ}}{cm^3} = \frac{1}{a_{\mathrm{Si}}{}^3} = \frac{1}{(0{,}543 \cdot 10^{-7})^3 cm^3} = 6,25 \cdot 10^{21} cm^{-3}$

Daraus folgt:

$\frac{n_{\mathrm{Si}}}{cm^3} = \frac{n_{\mathrm{Si}}}{\mathrm{VolEZ}} \cdot \frac{\mathrm{VolEZ}}{cm^3} = 5 \cdot 10^{22} cm^{-3}$

Bezogen auf unser Volumen ergibt sich hiermit:

$\frac{n_{\mathrm{Fe}}}{n_{\mathrm{Si}}} = 2 \cdot 10^{-9}\%$
Der Anteil der Eisen-Atome, die interstitiell eingebaut werden, beträgt $2 \cdot 10^{-9}\%$.

d) Mittlerer Abstand

Kritische Anzahl von Eisen Atomen bezogen auf $Vol = 1cm^3$:

$n_{\mathrm{Fe}} = c_{\mathrm{krit,Fe}} \cdot Vol = 10^{12}$.

Der betrachtete cm^3 lässt sich in 10^{12} kleinere gleiche Würfel aufteilen$(10^4 \cdot 10^4 \cdot 10^4)$. Die Kantenlänge des kleinen Würfels repräsentiert den mittleren Abstand der Atome. Eine Seitenkante des betrachteten Volumens besteht somit aus 10^4 kleinen Würfeln mit der Kantenlänge:

$\frac{1cm}{10^4} = 1\mu m$

Das sind etwa 1841 Gitterkonstanten.

e) Kristallfehler

Ein Eisenatom wird als interstitielles Fremdatom in das Gitter eingebaut. (Zusatzinfo: Fe-Atome alleine wären unbedenklich. Doch es kommt zur Agglomeration und der Bildung von Eisensilizidnadeln, die zum Kurzschluss in Bauelementen führen können.)

f) Abschätzung - Mineralwasser

Na: $270\frac{mg}{l}$, $23u$; Mg: $52,8\frac{mg}{l}$, $24,31u$

$1l = 1000\mathrm{cm}^3$

Eine atomare Masseneinheit u ist definiert als $\frac{1}{12}$ der Masse eines Atoms des $12-C$ Isotopes, also $1,66 \cdot 10^{-27} kg$.

Zu berechnen: Konzentration pro Kubikcentimeter

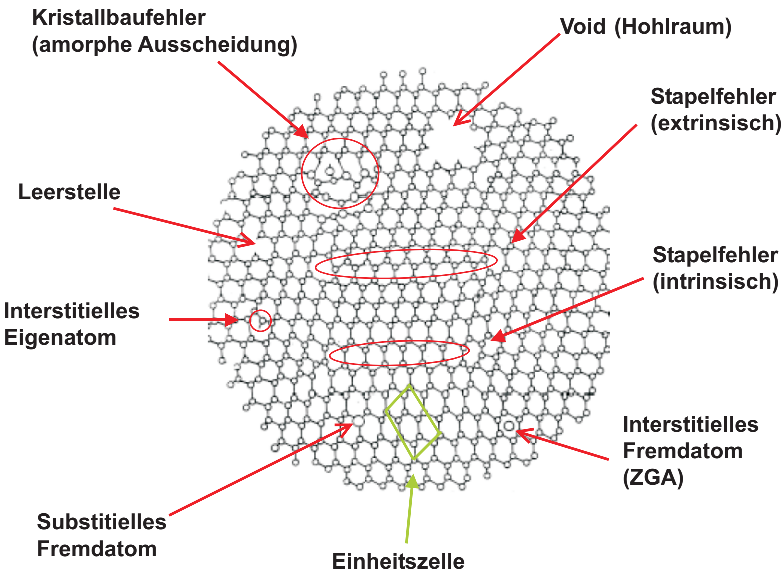
$$\frac{\text{Anzahl der Atome}}{\mathrm{cm}^3} = \frac{\text{Gewicht pro Liter}}{1000\frac{\mathrm{cm}^3}{l} \cdot \text{Atomgewicht}}$$

Konzentration für Natrium: $C_{Na} = \dfrac{270 \cdot 10^{-6} \dfrac{kg}{l}}{1000 \frac{\text{cm}^3}{l} \cdot 23 \cdot 1,66 \cdot 10^{-27 kg}} = 7,07 \cdot 10^{18} \text{cm}^{-3}$

Genauso ergibt sich für Magnesium: $C_{Mg} = 1,3 \cdot 10^{18} \text{cm}^{-3}$ Also: Die kritischen Konzentrationen sind weit überschritten.
Oder: Vergiss es einfach!

Aufgabe 19: Defekte im Diamantgitter

Lösungen zu a) und b) in folgender Graphik:



Einheitszelle: Das Si hat eine Diamandstruktur, also fcc Gitter mit Zweiatomiger Basis aus Si. Die Abbildung verdeutlicht die Atompositionen entlang der [110] Ebene.