

# Approfondimenti Lezione 4

Mara Bruzzi

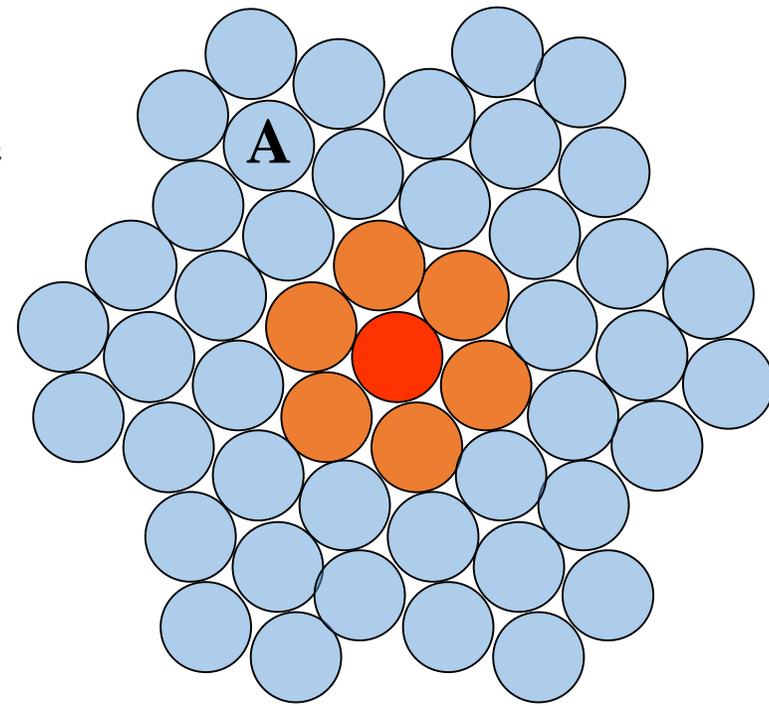
## 1. Strutture cristalline compatte

Si ottengono disponendo sfere uguali in raggruppamento regolare  
In modo da minimizzare il volume interstiziale. Ne esistono di  
due tipi:

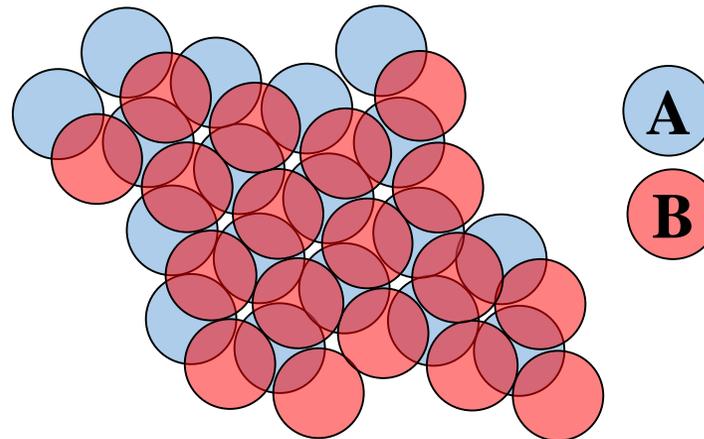
- (1) Cubica a facce centrate (FCC)
- (2) Struttura esagonale compatta (HCP)

In entrambi i casi la frazione di volume riempito è massima,  
pari a 0.74. Il numero di coordinazione dei due  
impaccamenti è lo stesso, pari a 12.

(1) Dispongo un singolo strato di sfere A ponendo a contatto ogni sfera con altre sei.

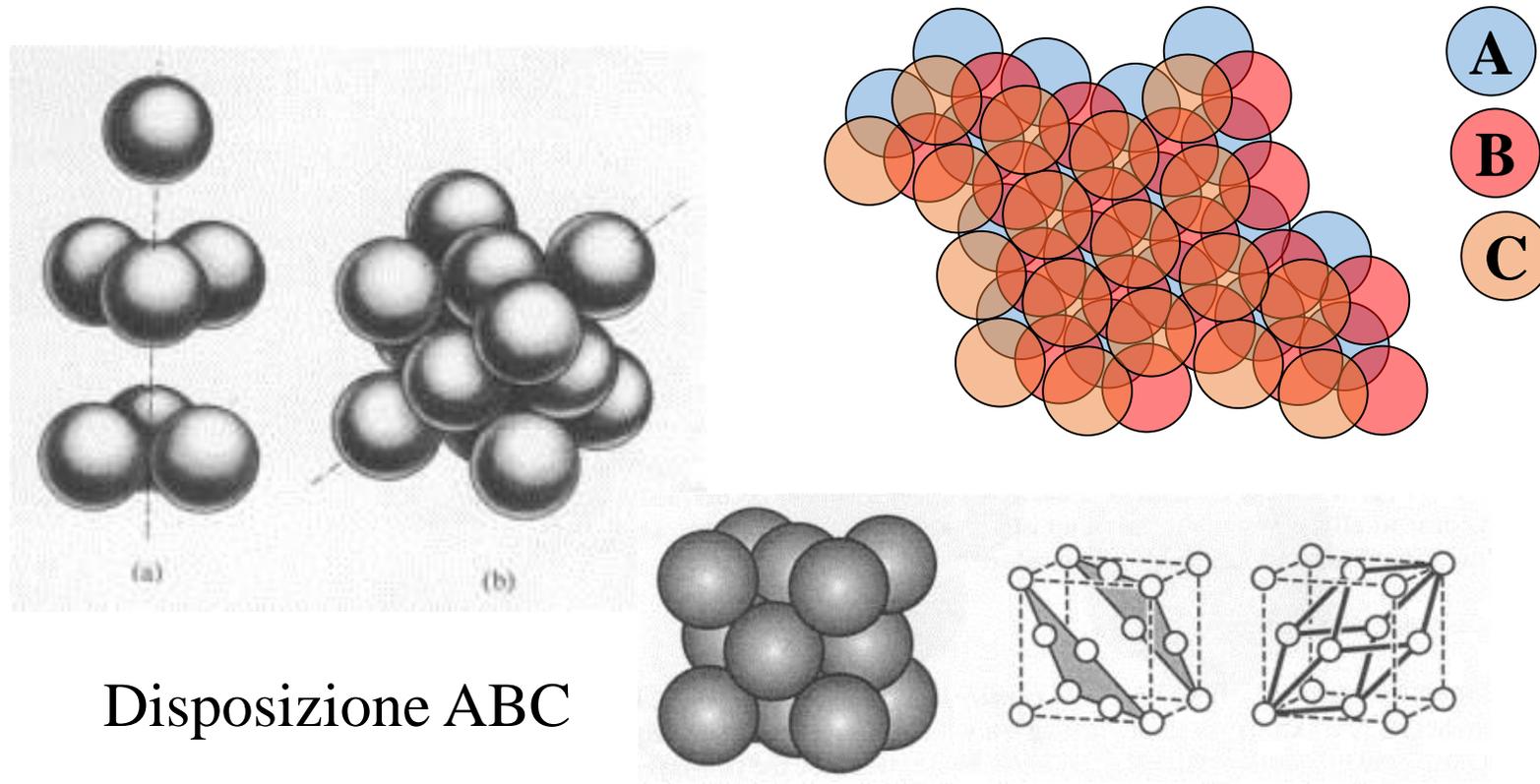


(2) Dispongo un secondo strato di sfere B simile al precedente ponendo ogni sfera a contatto con tre sfere dello strato precedente.



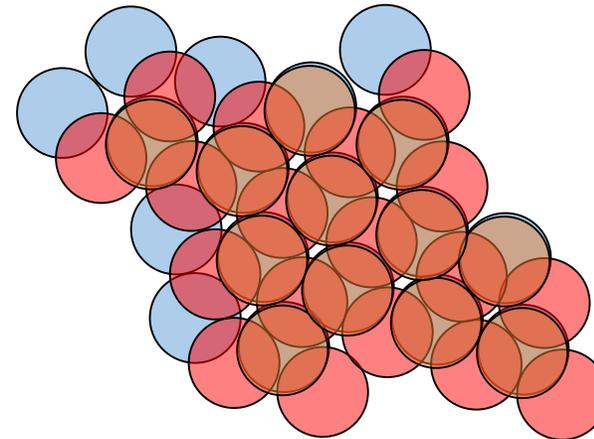
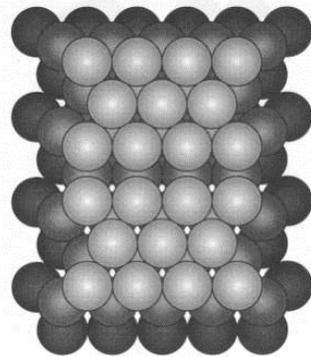
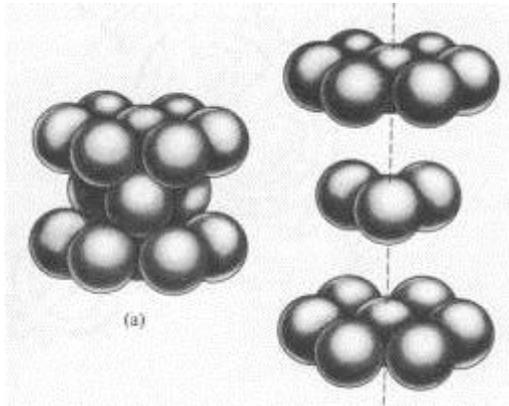
(3) Dispongo un terzo strato di sfere C simile al precedente:

(a) ponendo il centro di ogni sfera nei buchi non occupati del secondo strato (FCC)



## Struttura Esagonale Compatta – Hexagonal Close Packed

(b) i centri delle sfere C vengono messi in corrispondenza dei centri del primo strato A (HCP)

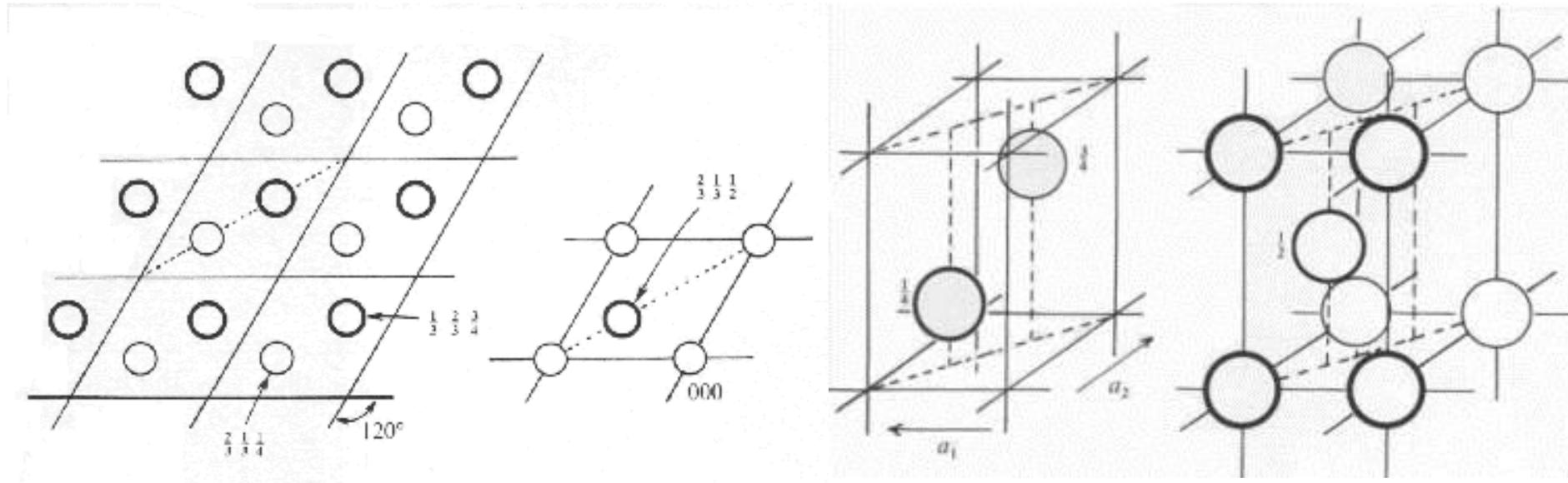


Disposizione ABA

## Hexagonal Close Packed

La struttura esagonale compatta può essere vista come due strutture esagonali semplici interpenetrate in modo che il secondo reticolo sia spostato rispetto al primo della traslazione:

$$\mathbf{T} = \frac{1}{3} \underline{\mathbf{a}}_1 + \frac{1}{3} \underline{\mathbf{a}}_2 + \frac{1}{2} \underline{\mathbf{a}}_3$$



# Approfondimento: materiali policristallini

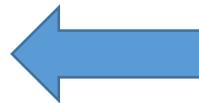
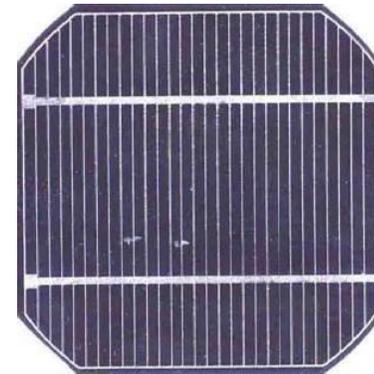
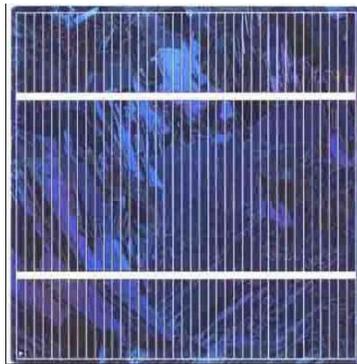
In generale, un materiale allo stato solido si presenta in forma di policristallo, con grani di diversa orientazione e dimensione circondati da un bordo detto appunto «**bordo grano**» ( **grain boundary** ).



# Esempi nel fotovoltaico: Silicio policristallino e monocristallino

Il costo di un materiale monocristallino su grande area è di solito molto più elevato di quello per un materiale allo stato policristallino, a causa di un più difficile processo di produzione e purificazione.

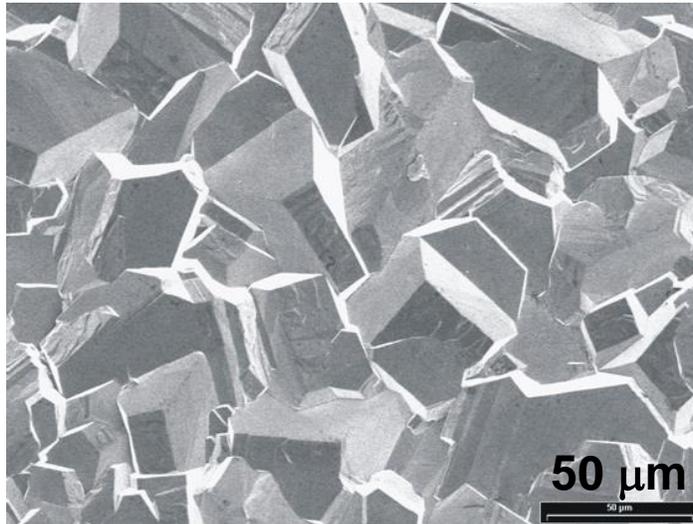
Esempio cella solare  
a Si monocristallino



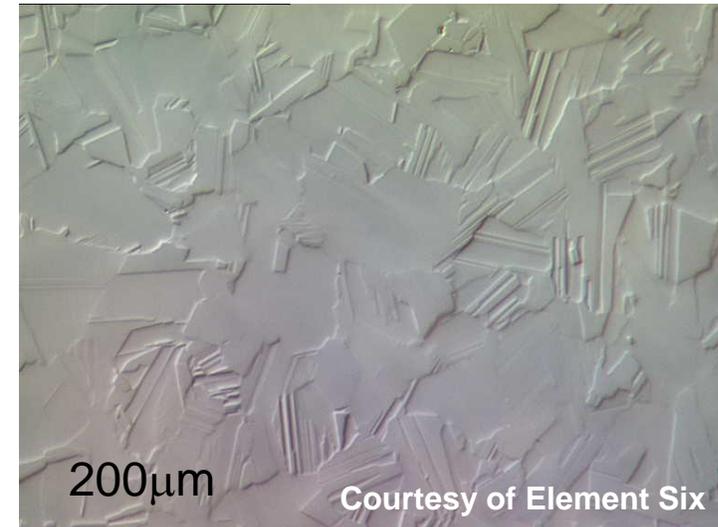
Cella solare a silicio policristallino.

Il silicio policristallino è costituito da un insieme di monocristalli con diversa orientazione: l'interfaccia fra i grani disturba l'ordine, ovvero introduce stati difetti che aumentano la ricombinazione dei portatori fotogenerati.

# Policristalli di diamante ( rivelatori UV, X.. )

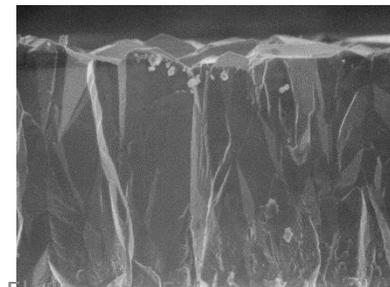
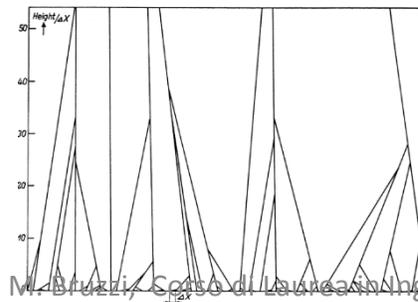


**Esempio  
diamante  
policristallino  
cresciuto presso  
la facoltà di  
ingegneria di  
Firenze**



**Policristallo di diamante dopo  
lappatura ( Element Six, UK)**

**Crescita columnare  
dei grani**



M. Bruzzi, Corso di Laurea in Ingegneria Elettronica, Fisica dei

Semiconduttori, 4° anno, 4/18/18

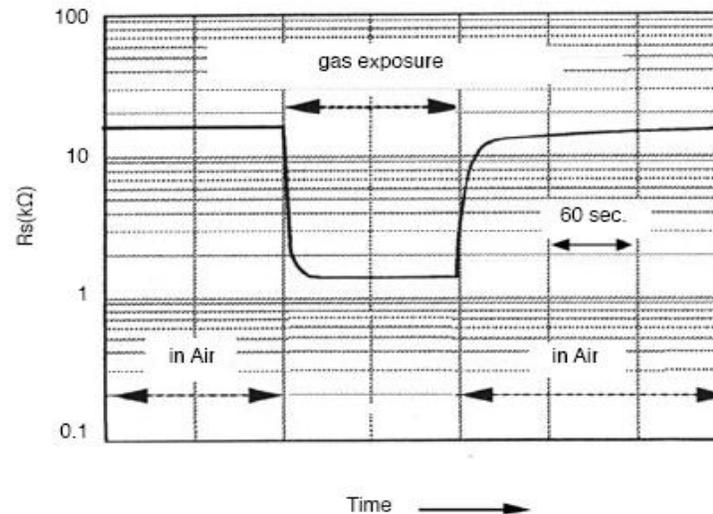
**Sezione trasversale del policristallo di diamante cresciuto a Firenze**

## Policristalli di Ossidi di metallo: Sensori di gas a stato solido

film sottile di un ossido di metallo di transizione come  $\text{SnO}_2$ ,  $\text{Al}_2\text{O}_3$ .

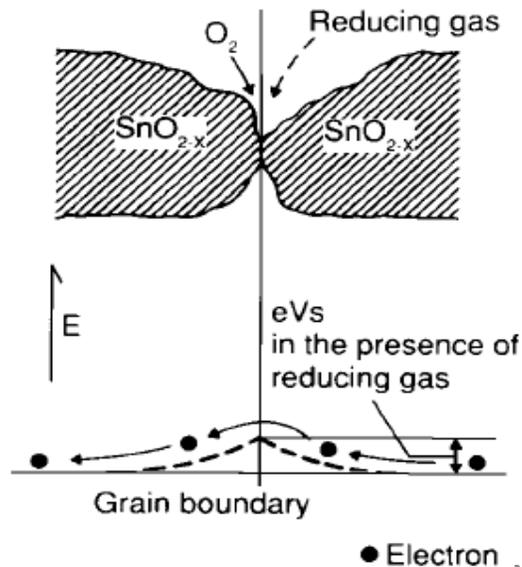
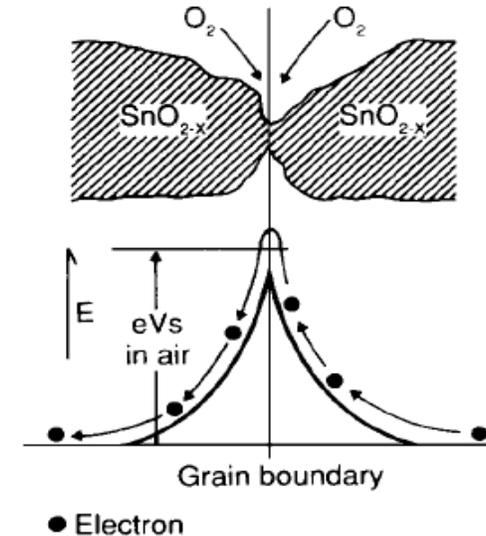
Un elemento riscaldante integrato permette di regolare la temperatura operativa mediante un apposito circuito integrato.

Una coppia di elettrodi permette di misurare la conducibilità elettrica del dispositivo, che risulta dipendente dal gas con cui la superficie del film è in contatto.



## Principio di funzionamento di un film policristallino di $\text{SnO}_2$ come sensore di CO

Quando il film di  $\text{SnO}_2$  viene riscaldato ad una certa  $T$  in aria, l'ossigeno viene adsorbito nei bordi grano. Vengono così trasferiti elettroni dalla superficie del film all'ossigeno adsorbito, il che risulta nella formazione di una regione di carica fissa positiva a bordo grano. Questo effetto crea una barriera di potenziale a bordo grano che si oppone al flusso di elettroni nel film, contribuendo ad innalzare la resistenza elettrica del sensore.



In presenza di un gas deossidizzante (riducente) gas come CO, la densità superficiale dell'ossigeno negativamente carico diminuisce e la barriera di potenziale a bordo grano si riduce, la resistenza del sensore di conseguenza diminuisce.

Link utili

Tabella Periodica

[https://chem.libretexts.org/LibreTexts/University of Missouri/UM%3A Chem 1320 \(Keller\)/02. Atoms%2C Molecules%2C and Ions/2.5%3A The Periodic Table](https://chem.libretexts.org/LibreTexts/University_of_Missouri/UM%3A_Chem_1320_(Keller)/02._Atoms%2C_Molecules%2C_and_Ions/2.5%3A_The_Periodic_Table)

Operazioni di simmetria

[https://chem.libretexts.org/LibreTexts/University of California Davis/UCD Chem 110B%3A Physical Chemistry II/Chapters/12%3A Group Theory%3A Exploiting Symmetry/12.2%3A The Symmetry of Molecules](https://chem.libretexts.org/LibreTexts/University_of_California_Davis/UCD_Chem_110B%3A_Physical_Chemistry_II/Chapters/12%3A_Group_Theory%3A_Exploiting_Symmetry/12.2%3A_The_Symmetry_of_Molecules)

Elementi di stato solido

[https://chem.libretexts.org/Textbook Maps/General Chemistry Textbook Maps/Map%3A Chemistry \(OpenSTAX\)/10%3A Liquids and Solids/10.5%3A The Solid State of Matter](https://chem.libretexts.org/Textbook_Maps/General_Chemistry_Textbook_Maps/Map%3A_Chemistry_(OpenSTAX)/10%3A_Liquids_and_Solids/10.5%3A_The_Solid_State_of_Matter)

Le strutture cristalline

[https://chem.libretexts.org/LibreTexts/University of Missouri/UM%3A Chem 1320 \(Keller\)/11%3A Liquids and Intermolecular Forces/11.7%3A Structure of Solids](https://chem.libretexts.org/LibreTexts/University_of_Missouri/UM%3A_Chem_1320_(Keller)/11%3A_Liquids_and_Intermolecular_Forces/11.7%3A_Structure_of_Solids)

<https://www.doitpoms.ac.uk/tlplib/atomic-scale-structure/index.php>

Il trend da isolante a metallico negli elementi del quarto gruppo

[https://chem.libretexts.org/Core/Inorganic Chemistry/Descriptive Chemistry/Elements Organized by Block/2 p-Block Elements/Group 14%3A The Carbon Family/1Group 14%3A General Chemistry/The Trend from Non-Metal to Metal in Group 4 Elements](https://chem.libretexts.org/Core/Inorganic_Chemistry/Descriptive_Chemistry/Elements_Organized_by_Block/2_p-Block_Elements/Group_14%3A_The_Carbon_Family/1Group_14%3A_General_Chemistry/The_Trend_from_Non-Metal_to_Metal_in_Group_4_Elements)