



Kristályos szerkezet

Tulajdonságok, orvosi alkalmazások

Dr. Balog Erika

Biofizikai és Sugárbiológiai Intézet



SEMMELWEIS
EGYETEM 1769



Szilárd anyagok

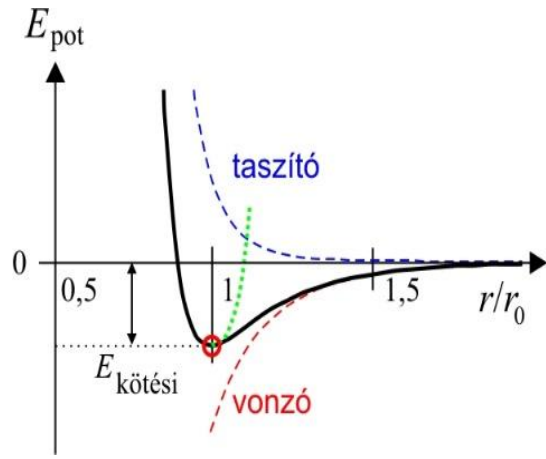
A. Kristályos anyagok

- Periodikus hosszútávú rendezettség
- Térrács - elemi cella (a természetben 14-féle, "Bravais-rácsok")
- Összetartó kölcsönhatások alapján
 - kovalens kötés: atomrác
 - ionos kötés: ionrác
 - fémes kötés: fémkristály
 - másodlagos kötések: molekularác

B. Amorf anyagok

üvegszerű, viszkózus "folyadékok"

		Bravais-rácsok	
$\beta \neq 90^\circ$ $a \neq c$	$\beta \neq 90^\circ$ $a \neq c$		
$a \neq b \neq c$	$a \neq b \neq c$	$a \neq b \neq c$	$a \neq b \neq c$
$a \neq c$		$a \neq c$	
$\alpha \neq 90^\circ$			
$\gamma = 120^\circ$			
a		a	a

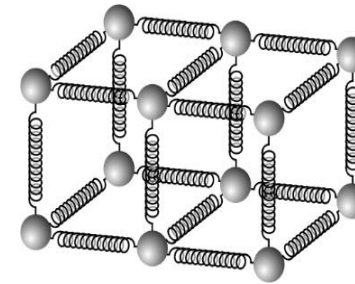


- a függvény minimumhely közelében parabolával jól közelíthető.

$$E_{pot} = D (r - r_0)^2$$

$$F = -D r$$

Kristály: rugókkal összekötött tömegpontokból álló térrács.



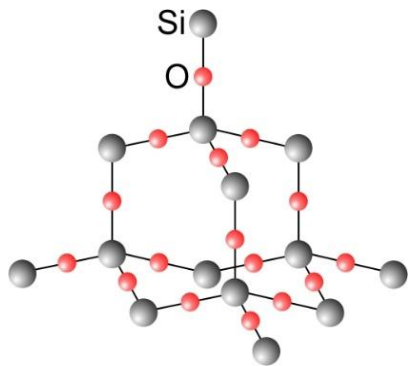
- az atomok egyensúlyi helyzetük körül rezgőmozgást végeznek.

- ha a hőmérséklet nő, a rezgés amplitúdója nő.

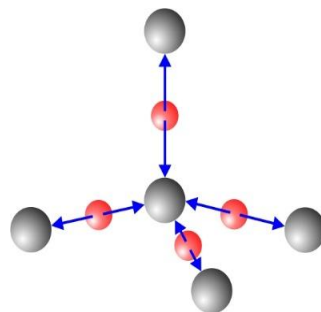
- az aszimmetrikus potenciálgödör miatt a mozgás nem lesz szimmetrikus: átlagosan hosszabb ideig tartózkodnak az egyensúlyi helyzettől nagyobb távolságra.

Hőtágulás

Piezelektromos hatás



Kvarc (SiO₂) kristályszerkezete.



- dipólus: a +/- töltések középpontja nem esik egybe.

$$p = q \cdot l$$

- poláris kovalens kötésekhez tartozó elektromos dipólusmomentumok (tetraédes kristálszimmetria miatt) eredője 0.

Ha nyomást gyakorlunk a kristályra:



feszültség mérhető a kristály két pontja között.

meghajló Si – O – Si kötések eredő dipólusmomentuma nem 0

Direkt piezelektromos hatás

Piezoelektromos hatás

Direkt piezoelektromos hatás:

*ha nyomást gyakorlunk a kristályra
(deformáljuk)*



feszültség mérhető a kristály két pontja között

ultrahang detektálás

Inverz piezoelektromos hatás:

ha feszültséget kapcsolunk a kristályra



a kristály deformálódik

*ha periodikusan változó feszültséget
kapcsolunk a kristályra*



a kristály periodikusan deformálódik = rezeg

*ha megfelelően választjuk meg a
feszültség frekvenciáját*

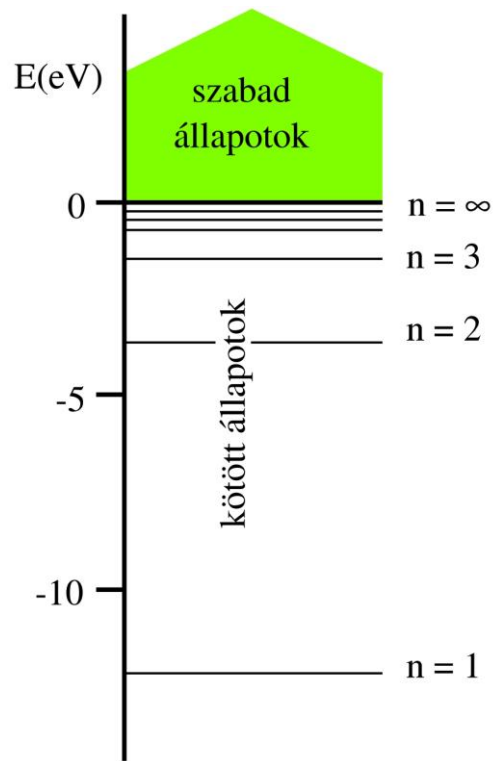


ultrahang keltés

Energianívok kristályokban

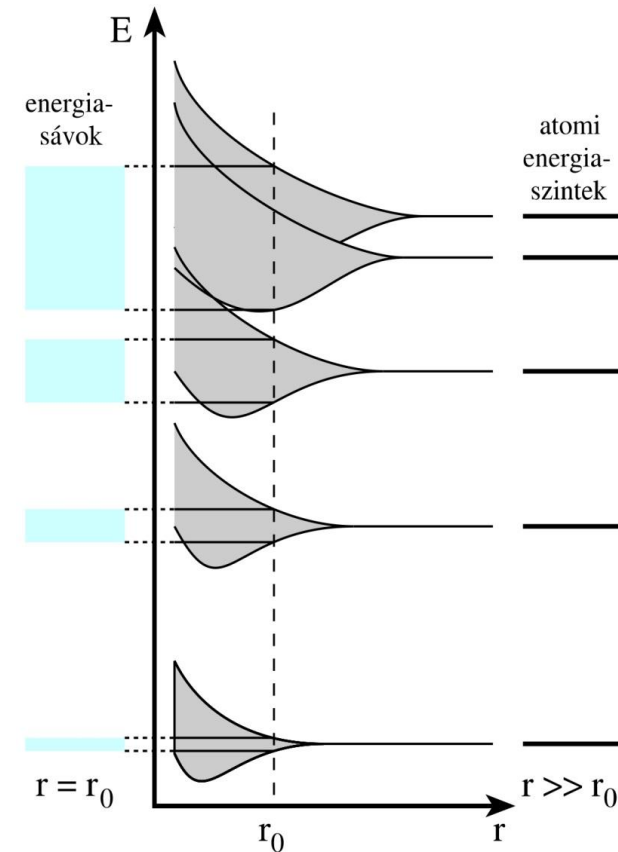
Izolált hidrogénatom

- Nincs kölcsönhatás más atomokkal
- Diszkrét energianívók
- Pauli-elv: egy atomon belül nem létezhet két olyan kötött elektron, amelynek mind a négy kvantumszáma megegyezik

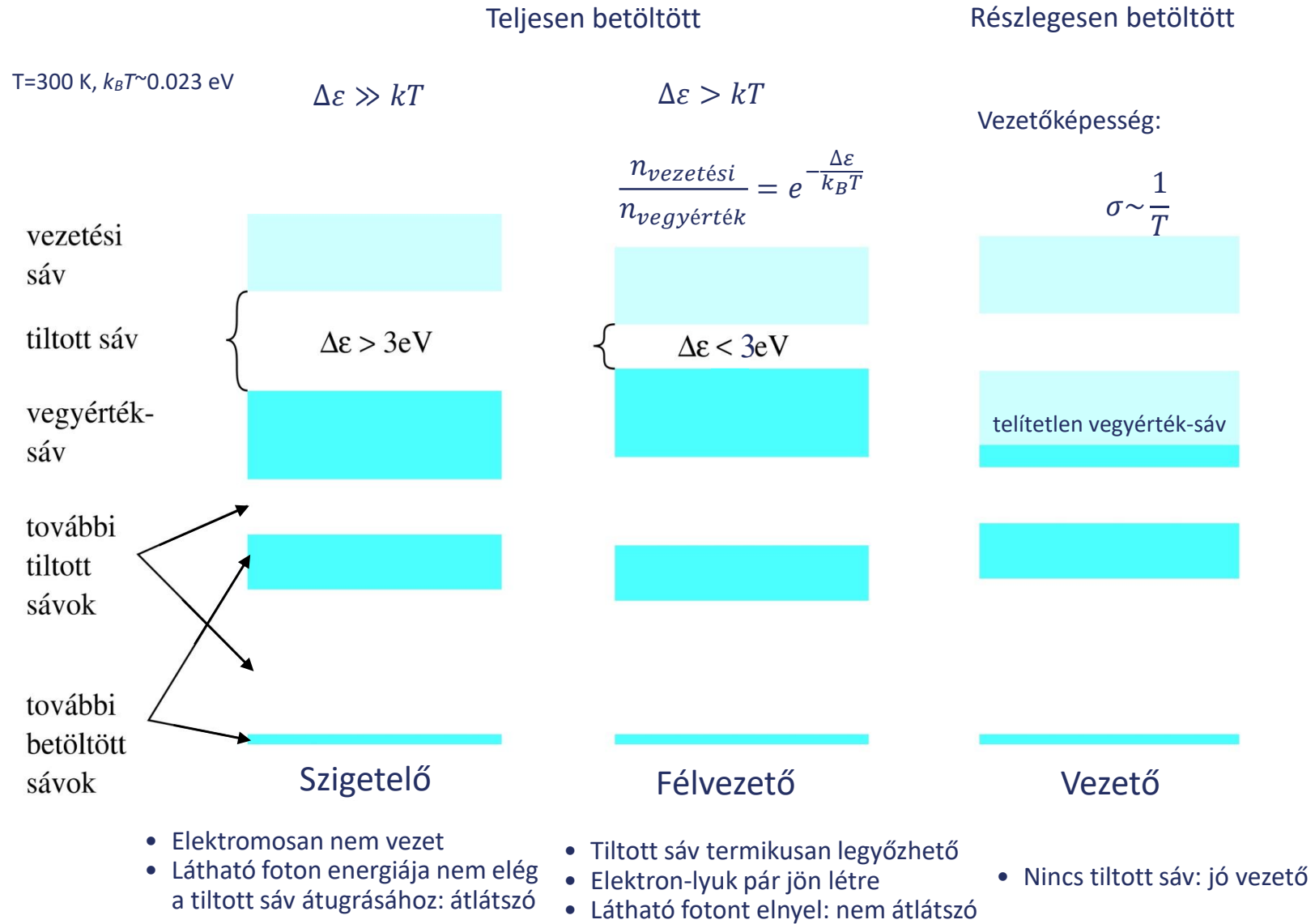


Kristály

- Atomok kölcsönhatnak
- Pauli-elv következménye: azonos kvantumállapotok elkerülése úgy valósul meg, hogy a kölcsönhatásba kerülő elektronok atomonként azonos energiaszintjei N darab közeli szintre hasad fel
- Közeli nívók folytonos **energiasávokba** olvadnak



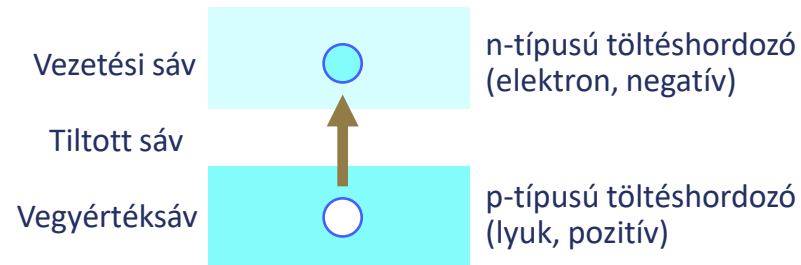
Eltérő sávszerkezetű kristályos anyagok



Félvezetők

A. Tiszta félvezetők

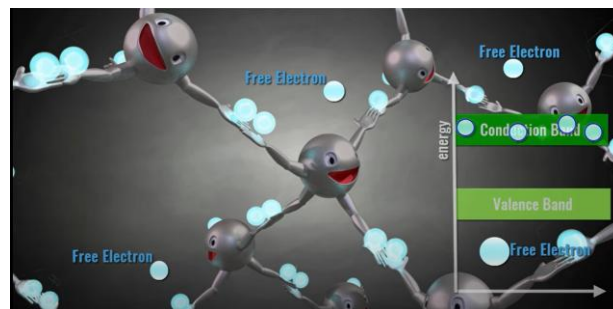
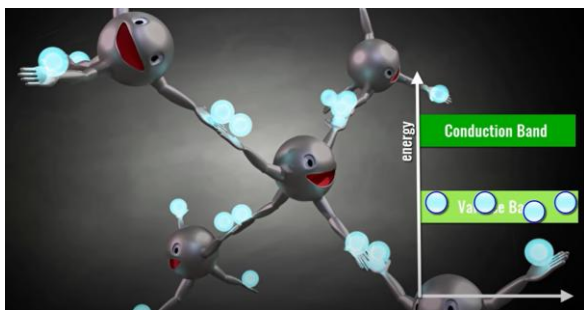
- Kétféle töltéshordozó (n, p):



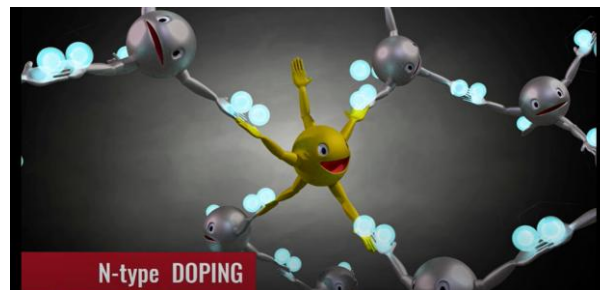
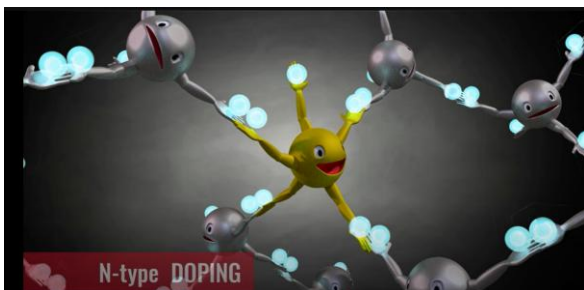
- Vezetőképesség hőmérsékletfüggő: $\sigma = konst \cdot e^{-\frac{\Delta\varepsilon}{2k_B T}}$
- Tiltott sáv ($\Delta\varepsilon$) < 3 eV
- Tiltott sáv átugrása látható fény (1.5-3 eV) abszorpciójával is előidézhető: $hf_{vis} > \Delta\varepsilon \longrightarrow$ átlátszatlan
- Tiltott sáv ($\Delta\varepsilon$) termikusan legyőzhető



Si



Si



Si - P

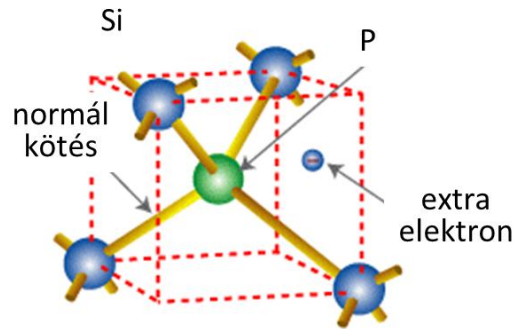
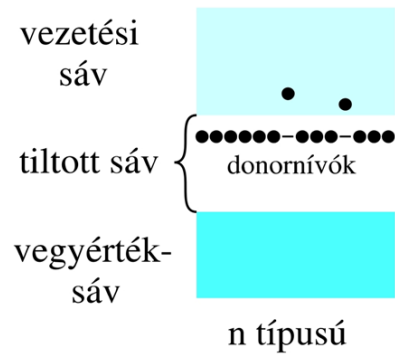
Félvezetők

B. Szennyezett félvezetők

Szennyezés: - a gazdarács atomjai között elhelyezett kis mennyiségű idegen atom:
- új elektronállapotok kialakulásához vezet, melynek következtében a tiltott sáv keskeny lesz.

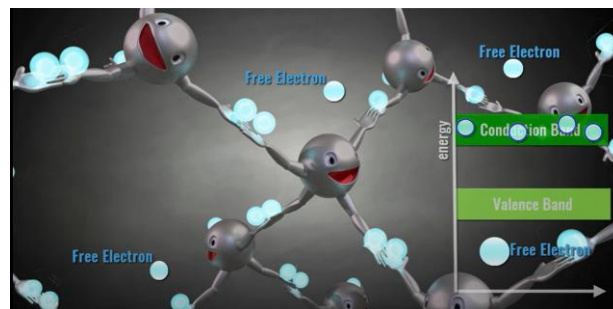
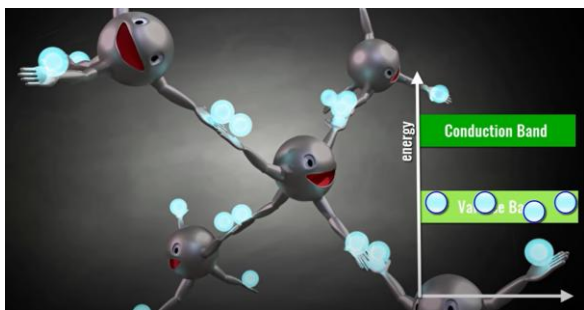
$$\frac{N_{gazda}}{N_{szennyezés}} \approx 10^6$$

n-típusú félvezető (e-donor):
4-vegyértékű gazdarácsban (Si, Ge)
5-vegyértékű szennyezés (P, As, Bi):

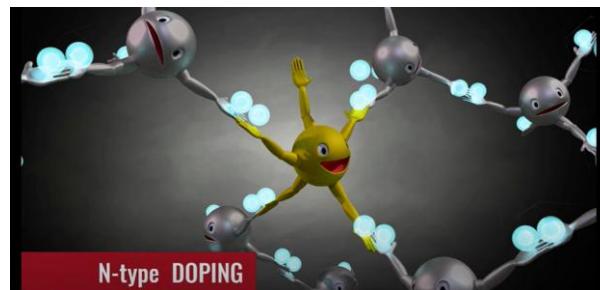
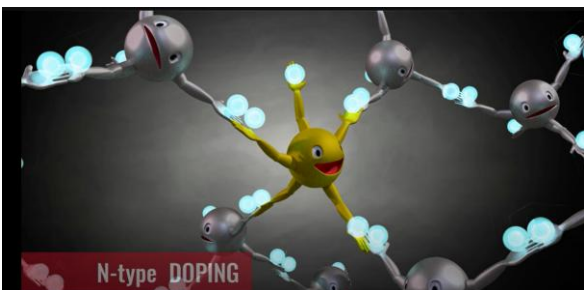




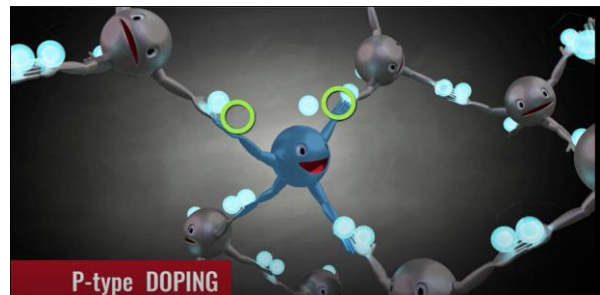
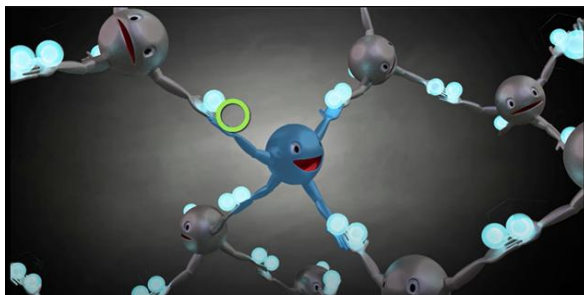
Si



Si



Si - P



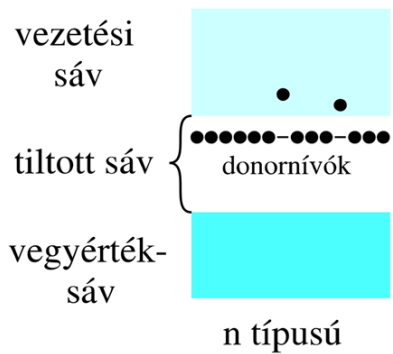
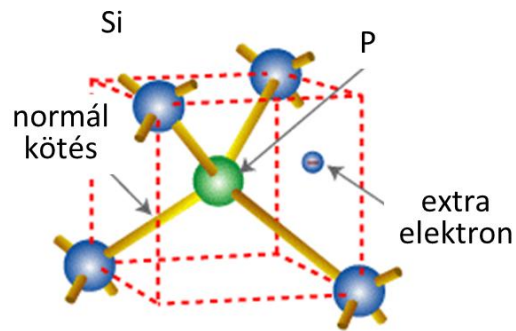
Si - B

Félvezetők

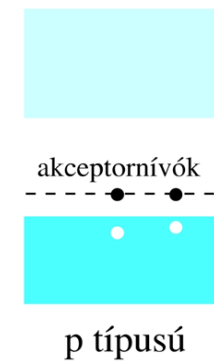
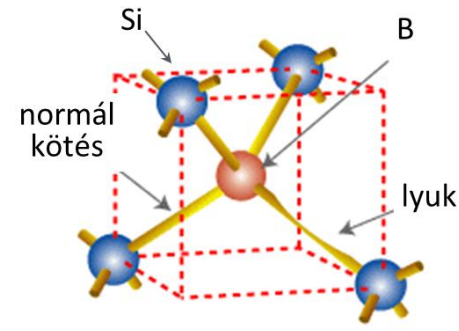
B. Szennyezett félvezetők

Szennyezés: - a gazdarács atomjai között elhelyezett kis mennyiségű idegen atom:
- új elektronállapotok kialakulásához vezet, melynek következtében a tiltott sáv keskeny lesz.

n-típusú félvezető (*e*-donor):
4-vegyértékű gazdarácsban (Si, Ge)
5-vegyértékű szennyezés (P, As, Bi):

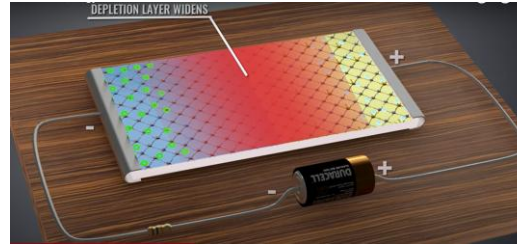
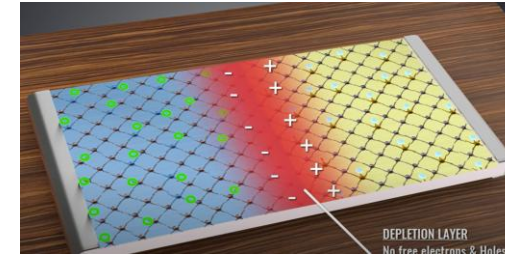
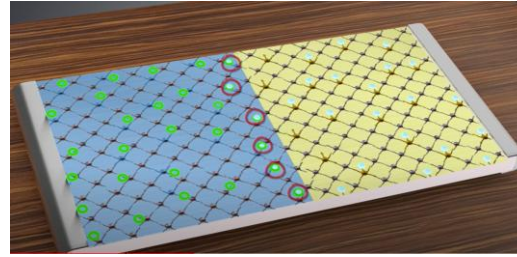
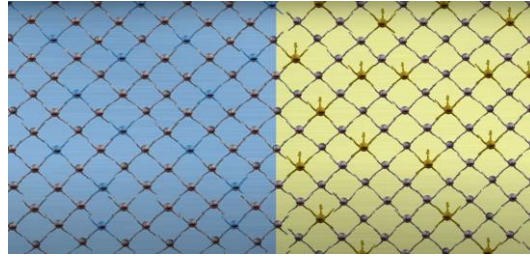
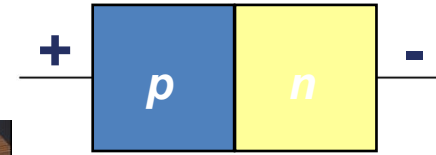


p-típusú félvezető (*e*-akceptor):
4-vegyértékű gazdarácsban (Si, Ge)
3-vegyértékű szennyezés (Al, Ga, In, B):

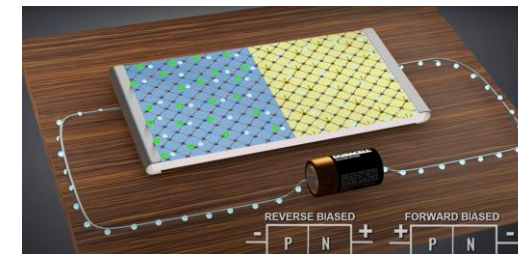
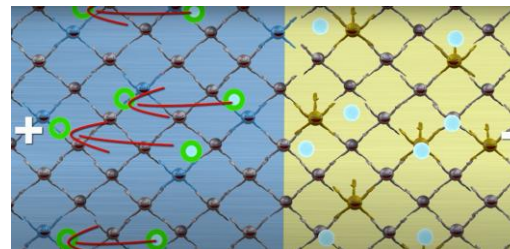
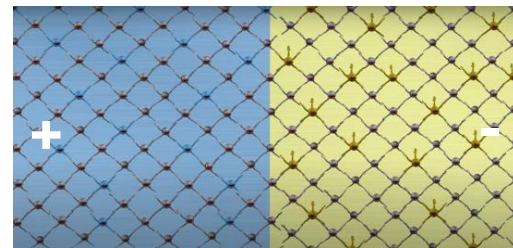


Dióda

- megfelelően szennyezett, p- és n-típusú félvezetők összeillesztéséből kialakított mikroelektronikai eszköz



- záróirányú előfeszítés

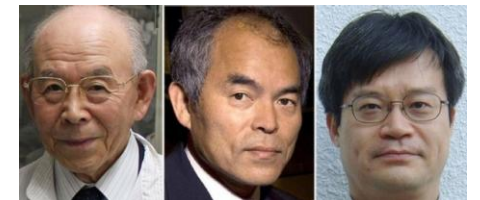
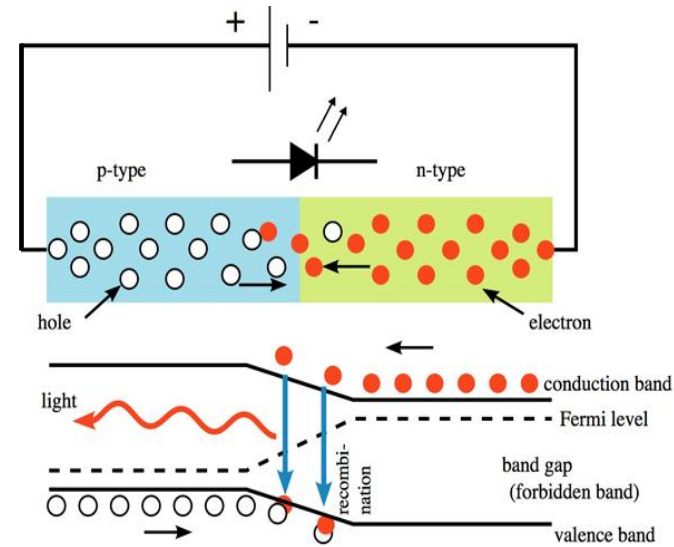
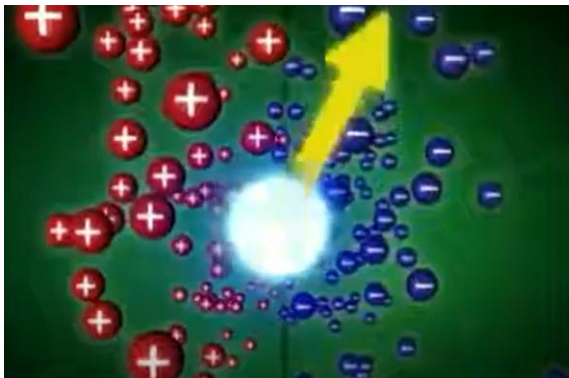
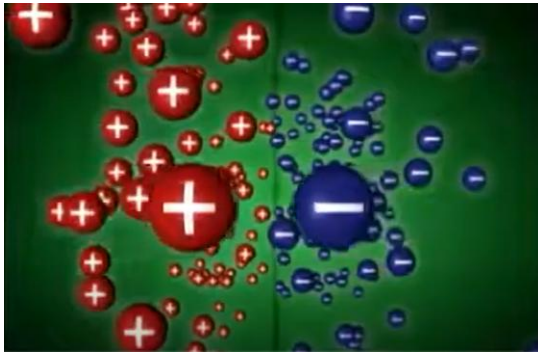
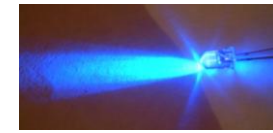


- nyitóirányú előfeszítés

Alkalmazás:

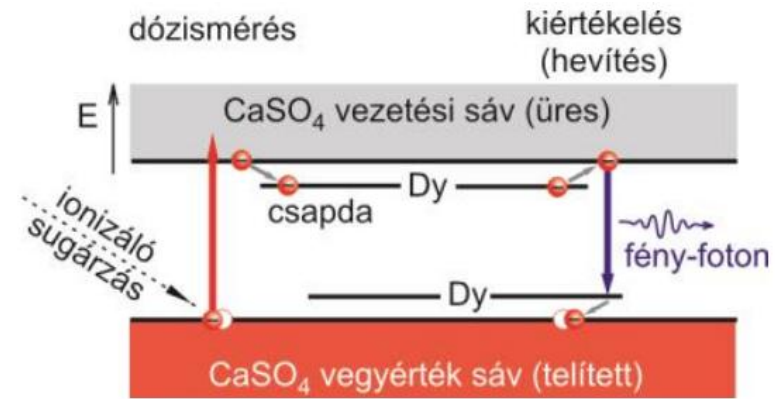
- egyenirányító
- elektromos feszültség → fényforrás, LED
- megvilágítás → feszültség → CCD pixel

Light Emitting Diode (LED)



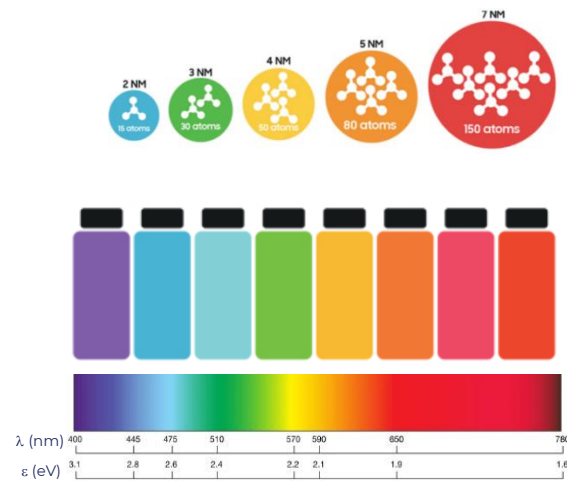
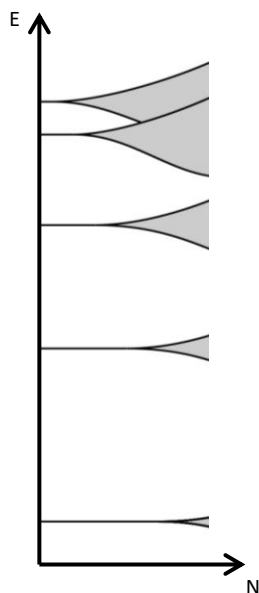
Isamu Akasaki, Shuji Nakamura, Hiroshi Amano, Nobel-prize 2014

Termolumineszcens dózismérő



Kvantumpontok:

- kis méretű (nm nagyságú, 100-1000 atomot tartalmazó) félvezetők.
- nagyságuk meghatározza tulajdonságaikat: a kibocsájtott fény energiája a kvantum pont nagyságától függ.
- a tiltott sáv szélessége határozza meg a kibocsájtott fény energiáját (hullámhosszát).
- a kibocsájtott fény energiája fordítottan arányos a kvantum pont nagyságával.



Alkalmazás:

- sejtek működése – képképzés (fehérje nagyságúak),
- lézer, mikroszkóp,
- orvosi képképzés, TV-QLED, stb.



Mounqi G. Bawendi, Louis E. Brus, Alexei I. Ekimov
kémiai Nobel-díj 2023