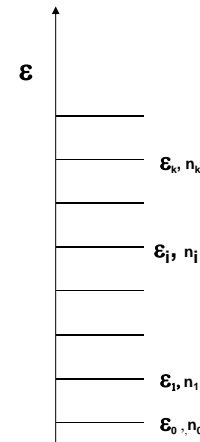


Sok részecskéből álló rendszerek leírása – II. rész Fény-abszorpció

Fidy Judit
egyetemi tanár
2015, October 29

Boltzmann eloszlás



N megkülönböztethető, független részecske
Termikus egyensúlyban (zárt rendszerben),
 $T \neq 0$ hőmérsékleten

ε_j egy részecske lehetséges energiája
 n_j az ε_j energiával bíró részecskék száma

$$E = \sum_j n_j \varepsilon_j \quad N = \sum_j n_j$$

A Boltzmann eloszlás függvényformája

$$\frac{n_k}{n_j} = e^{-\frac{\varepsilon_k - \varepsilon_j}{kT}} = e^{-\frac{\Delta \varepsilon}{kT}}$$

Boltzmann faktor

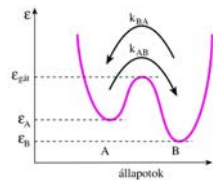
Az energia-szintek bármely (j,k) kombinációjára igaz



Ludwig Eduard Boltzmann
1844-1906, osztrák fizikus

Más jellegű példák a Boltzmann eloszlásra

3. Kémiai reakciók reakciósebességének függése a hőmérséklettől



Reakció: $A \rightleftharpoons B$

A k_{AB} és k_{BA} reakciósebességek arányosak azon reagensek számával, amelyek energiája eléri az aktivációs gát nagyságát.

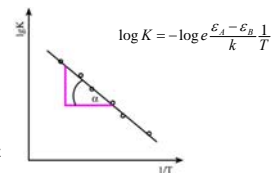
$$k_{AB} = \text{const} \times e^{-\frac{\varepsilon_{\text{barrier}} - \varepsilon_A}{kT}}$$

$$k_{BA} = \text{const} \times e^{-\frac{\varepsilon_{\text{barrier}} - \varepsilon_B}{kT}}$$

$$K = \frac{k_{BA}}{k_{AB}} = e^{-\frac{\varepsilon_A - \varepsilon_B}{kT}}$$

A hőmérsékletet változtatva és mérve a reakciósebességeket, az adatokból az aktivációs energia meghatározható

Arrhenius féle ábrázolás



4. Barometrikus magasságformula

A levegő sűrűsége az atmoszférában a tengerszinttől mért magassággal (h) csökken:

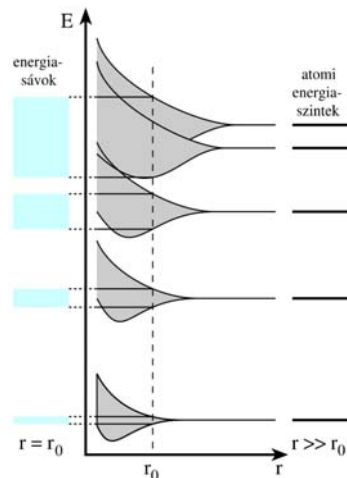
$$\frac{\rho(h)}{\rho(0)} = e^{-\frac{mgh}{kT}}$$

m a levegő részecskéinek átlagos tömege
 g gravitációs gyorsulás

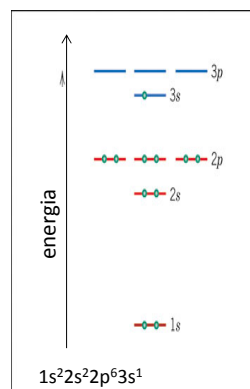
Rendezett rendszerekben (kristályokban) a részecskék közötti kölcsönhatás megváltoztatja az **elektron-állapotokat**

A részecskék kölcsönhatása kiszélesíti az atomi energiaszinteket

Pl. Kristályban N kölcsönható azonos atom ($\sim 10^{23}$)
 → egy atomi nívó N nívóra hasad → folytonos energia-sávok



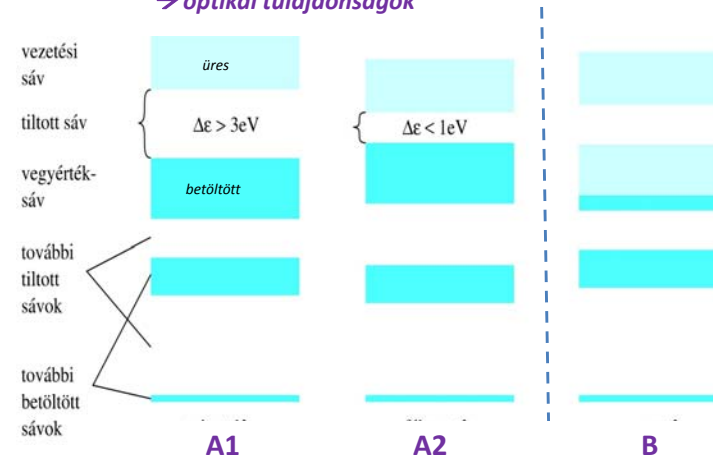
Izolált $_{11}\text{Na}$ atom elektronállapotai



A felhasadás legjobban a külső nívókat érinti → átlapolások is lehetnek

Energia-sávok tulajdonságai és a Boltzmann eloszlás

→ elektromos tulajdonságok
 → optikai tulajdonságok



A csoport anyagai



- Üres vezetési sáv: nincs elektron, amely energiát vehetne fel az elektromos térből
- Elektromos vezetés feltétele : elektron-populáció $E \geq E_{\text{vegyérték sáv}} + \Delta\epsilon$ energiával

$$\frac{n_{\text{vezetési}}}{n_{\text{vegyérték}}} = e^{-\frac{\Delta\epsilon}{kT}}$$

$$kT(\text{szobahőmérséklet}) = 0.023 \text{ eV}$$

A1 család: $\Delta\epsilon \gg kT$

→ vezetési sáv termikusan nem populálható
 → **szigetelők**

pl. gyémánt: $\Delta\epsilon = 5.4 \text{ eV}$

$$\frac{n_{\text{vez}}}{n_{\text{vegy}}} = e^{-\frac{5.4}{0.023}} = e^{-235} \approx 0$$

→ **Nincs VIS foton elnyelés → átlátszóak**

~ 2.5 eV

A2 család:

$$\Delta\epsilon \geq kT$$

$$E_{\text{gap}} \leq 1 \text{ eV}$$

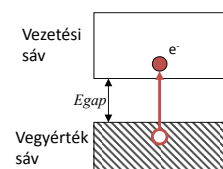


Kicsi a tiltott sáv „szélessége” → vezetési sáv termikusan populálható

$$\frac{n_{\text{vezetési}}}{n_{\text{vegyérték}}} = e^{-\frac{0.75}{0.023}} = e^{-33} = 7 \cdot 10^{-15}$$

$$N_{\text{vegyérték}} \approx 6 \cdot 10^{23} \Rightarrow n_{\text{vezetési}} \approx 4 \cdot 10^8 \text{ /cm}^3$$

T=0 K	$E_g \text{ (eV)}$
Si	1.1
Ge	0.75



n – típusú vezetés (elektron vezetés)

$$\sigma \approx e \frac{E_{\text{gap}}}{2kT}$$

p – típusú vezetés (elektron-lyuk vezetés: + töltés vezet)

Egy gerjesztéssel két töltéshordozó generálódik

A2 család: alkalmazások

Tiszta (intrinsic) félvezetők

$$\sigma = \text{const} * e^{-\frac{E_{\text{gap}}}{2kT}}$$

Gyengén függ T-től

Egyensúlyban: a töltések keltése és rekombinációja azonos valószínűségű

$p(\text{rekombináció}) \sim n^2$, $p(\text{keltés}) \sim \text{Boltzmann faktor}$

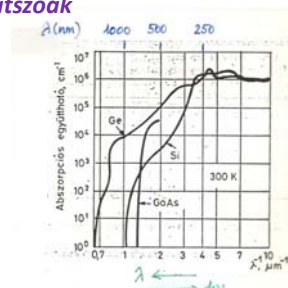
- Fajlagos vezetőképesség nő a hőmérséklettel → **thermoresistor: hőmérő**

- E_{gap} kicsi → VIS foton (~ 2 eV) elnyelés → **nem átlátszóak**

Optikai alkalmazások: foto-indukált vezetés

$$hf_{\text{VIS}} > E_{\text{gap}}$$

→ **fényérzékelők**



B csoport

Jó vezetők



e.g. 1- és 2-vegyértékű fémek Na, Mg, Cu..

	Cu	Si	T=293 K
$n(\text{töltés})/\text{m}^3$	9×10^{28}	1×10^{16}	
Fajlagos ellenállás (Ohm·cm)	2×10^{-8}	3×10^3	

Részlegesen betöltött vegyérték-elektronokkal

Elektron-vezetés lehetséges a részlegesen betöltött vezetési sávban

--elektron-vezetés

--optikai (VIS) fotonokat elnyeli - átlátszatlan

$$\sigma \approx \frac{1}{T}$$

Fajlagos vezetőképesség **csökken** a hőmérséklettel

→ **félvezetők**

Speciális A2 család

Szennyezéses félvezetők

Doping: igen kis mennyiségű második komponens (dopant/szennyező) beültetése egy félvezető kristályrácsába (gazdarács).

$$\frac{N_{\text{gazdarács}}}{N_{\text{szennyező}}} \approx 10^6$$

→ **A szennyező atomok egymástól izoláltak a gazdarácsban**

Az ötlet: a második komponens csökkentheti a gazda-félvezető tiltott sáv szélességét, és ezzel megnövelhető a termikusan gerjesztett töltéshordozók száma.

Két kombináció

-4-vegyértékű gazdarácsban 5-vegyértékű szennyező → **n-típusú**

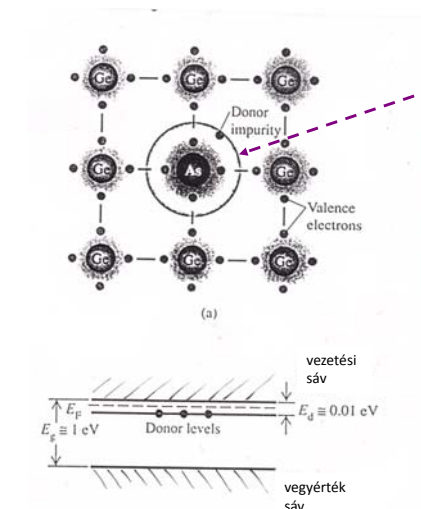
-4-vegyértékű gazdarácsban 3-vegyértékű szennyező → **p-típusú**

gazdarácsok: Ge, Si

szennyezők: - 5-vegy. : P, As, Bi

- 3-vegy. : B, Al, Ga, In

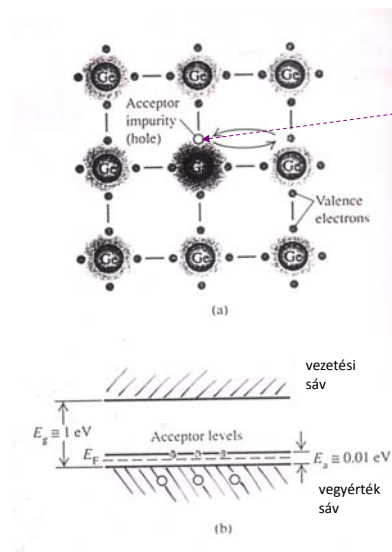
4-vegyértékű Ge rács szennyezése 5-vegyértékű As atomokkal



Gyengén kötött ötödik elektron könnyen gerjeszthető → **n-típusú vezetés**

A donor nívó csak az izolált szennyezőkön létezik. Vezetéshez az elektronokat gerjeszteni kell a vezetési sávba, de ehhez igen kis energiát kell csak fedezni.

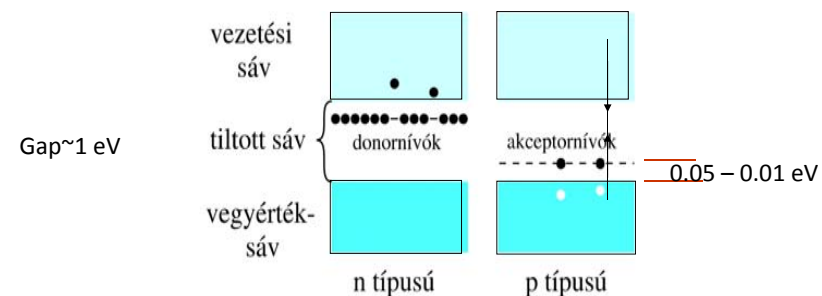
4-vegyértékű Ge-kristályban 3-vegyértékű Ga szennyező



Egy Ge –kötési elektronnak nincs partnere a Ga részéről → könnyen fogad máshonnan Ge-elektronokat
→ *p-típusú vezetés*

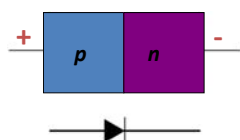
Az akceptor-nívó csak a szennyezőn létezik, de az elektron-lyukak szabadon mozoghatnak a vegyérték sávban

Szennyezéses félvezetők - összefoglalás



n- és p-típusú szennyezéses félvezetők kombinációjával az elektromos áramkörök alapegységei alakíthatók ki: *dióda (egyenirányító)* és *tranzisztor (áramerősítő)*

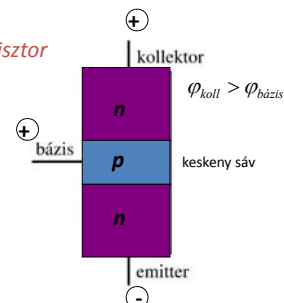
Dióda (nyitott)



dióda:

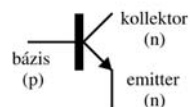
- egyenirányító
- feszültségre kapcsolva fényforrás - LED
- átalakító: fény → feszültséggé: CCD

Tranzisztor

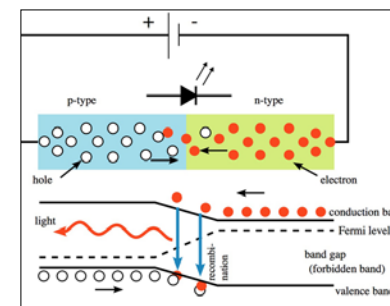


tranzisztor:

- erősítő
- számítógépek memória-eleme: bistabil multivibrátor



Light Emitting Diode - LED

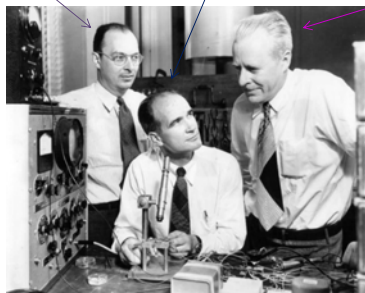


elektromos feszültség → töltésvándorlás
p – n átmenet határrétegében elektron-lyuk rekombináció
→ Fényemisszió ($E_{gap} = hf$)

Szennyezés igen kis területen kialakíthat egy egységet →
→ mikroszkopikus méretű áramkörök → **mikroelektronika**

1956 Fizikai Nobel díj a tranzistor feltalálásáért

John Bardeen, William Shockley and Walter Brattain at Bell Labs, 1948.



John Bardeen
II. Nobel 1972
Szupravezetés elmélete



Walter Brattain
Rendkívül jó kísérleti fizikus

2014 - Fizikai Nobel díj a kék LED megvalósításáért

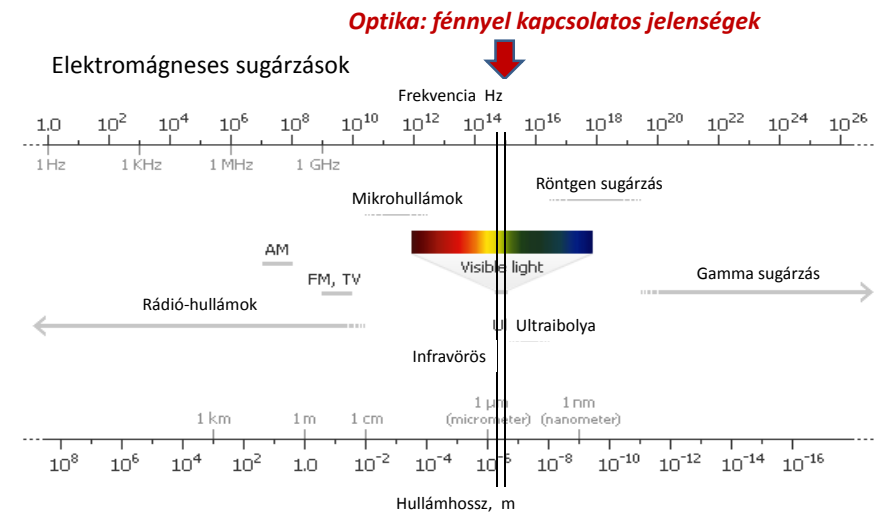
Isamu Akasaki, Shuji Nakamura, Hiroshi Amano,



Kék fényt emittáló LED



Új fejezet: vissza a fény-témakörhöz.....
Fény és anyag kölcsönhatása



hosszabb hullámhosszak: hullám leírás

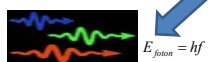
Rövidebb hullámhosszak: foton-kép



Fény anyaggal kölcsönhatásban

Kétféle leírás használatos

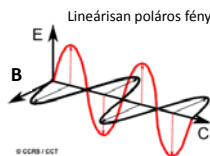
- hullám-kép
- foton-kép



$$E = E_{max} \cdot \sin \left(2\pi \frac{t}{T} + 2\pi \frac{x}{\lambda} + \Phi \right)$$

$$B = B_{max} \cdot \sin \left(2\pi \frac{t}{T} + 2\pi \frac{x}{\lambda} + \Phi \right)$$

Amplitúdó



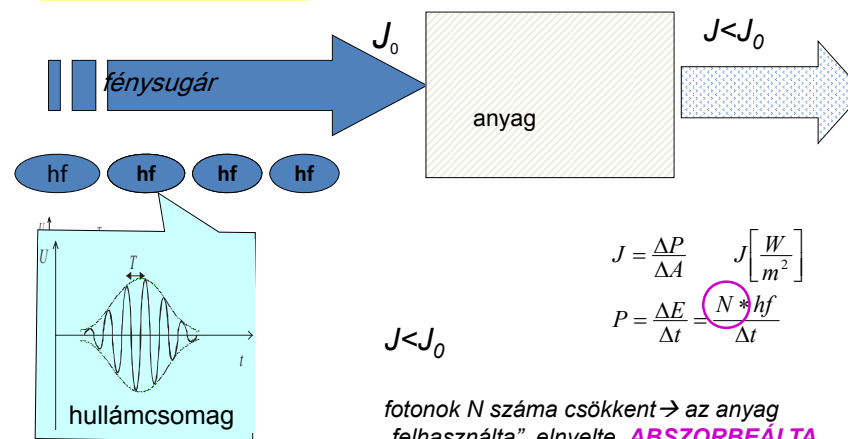
- A fény-sugárzás paraméterei:
- hullámhossz λ
 - frekvencia $f=1/T$
 - fázis ϕ
 - intenzitás (arányos az amplitúdó négyzetével)
 - az \mathbf{E} és \mathbf{B} vektorok iránya
 - a fény terjedési iránya (\mathbf{c} vektor)

Anyagi kölcsönhatás \rightarrow fény-sugárzás paraméterei megváltoznak

A következőkben: **fény-intenzitás csökkenését okozó kölcsönhatások és a hatás kvantitatív leírása**

A fény-intenzitás gyengülése anyagi kölcsönhatásban

Leírás foton-képben

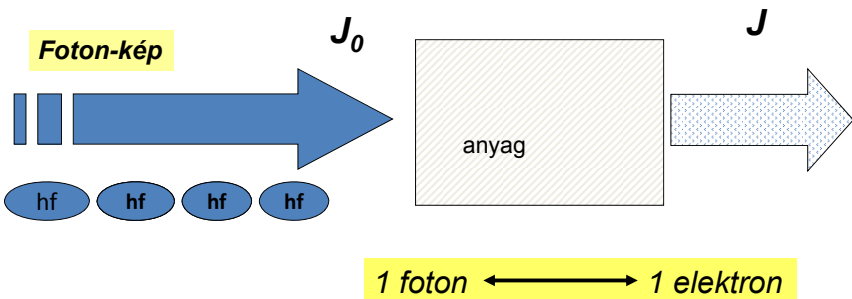


$$J = \frac{\Delta P}{\Delta A} \quad J \left[\frac{W}{m^2} \right]$$

$$P = \frac{\Delta E}{\Delta t} = \frac{N \cdot hf}{\Delta t}$$

$$J < J_0$$

fotonok N száma csökkent \rightarrow az anyag „felhasználta” elnyelte **ABSZORBEÁLTA**



A fényfoton az anyagban az elektronnal hat kölcsön

Mire tudja használni a kötött elektron a fény-foton energiáját?

$$E_{foton} = 1.5 - 3 \text{ eV?}$$

Megengedett, hogy a kötött elektron energiát vegyen fel?

Fény és anyag kölcsönhatása

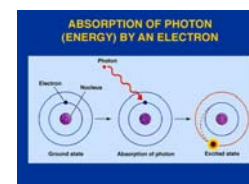
Egy elektron akkor tud felhasználni egy E_{foton} energiát ha van olyan megengedett energiaállapot, ahova ez az energia-felvétel átviszi.

- atomon/molekulán belül \rightarrow foto - **gerjesztés**
- szabad-elektron állapotokba \rightarrow foto-**ionizáció**

Sémák fény-abszorpcióval történő gerjesztésre

Izolált atomok és molekulák

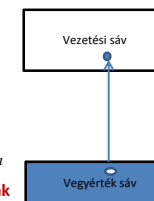
- gáz fázisban
- oldatban
- molekulakomplexbbe ágyazva



$$E_{foton} = hf = \Delta \varepsilon_{pálya}$$

Csak specifikus fotonenergiák nyelődnek el

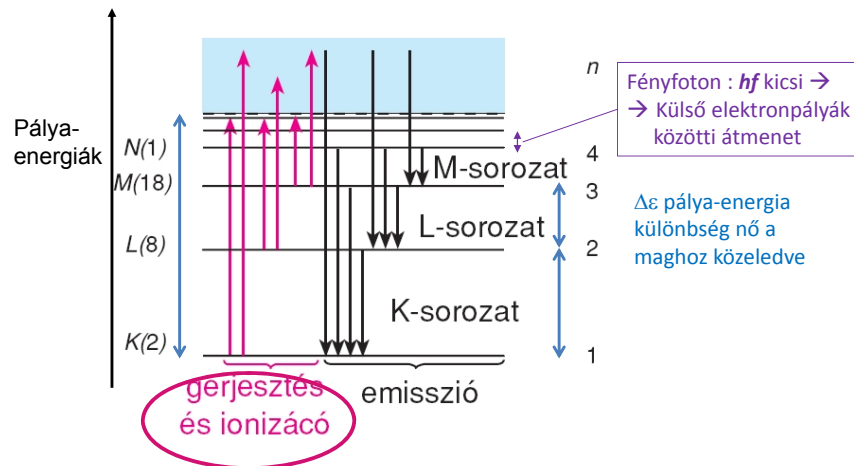
Kristályos szilárd anyagok



$$E_{foton} = hf \geq \Delta \varepsilon_{gap}$$

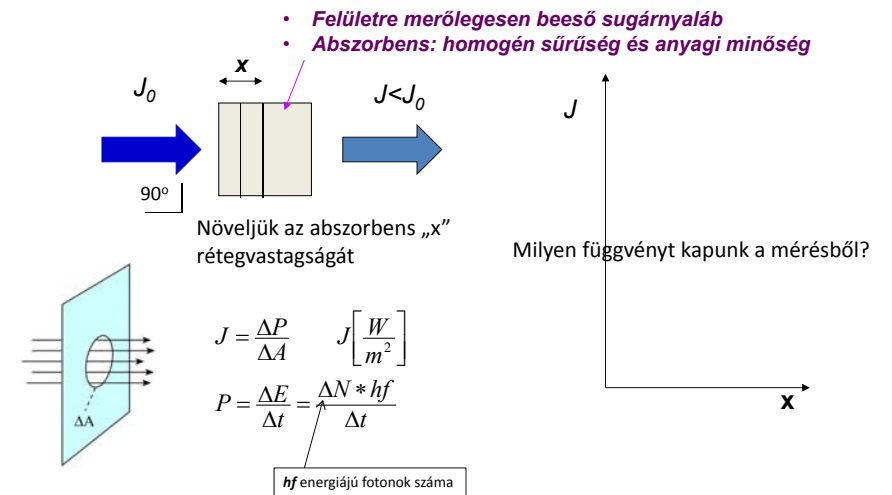
Fémek: nincs energia-gap, minden foton elnyelődik

Elektron pálya-energiák a **CU** atomban (29 elektron)

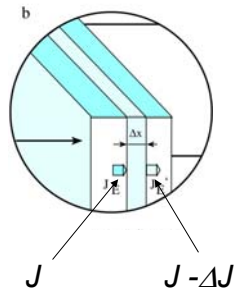


A fény-abszorpció fenomenológikus leírása (A sugárzás intenzitásának gyengülése abszorpció következtében)

Gondolat-kísérlet: egyszerű elrendezés



A mérés eredménye, ha x -t igen kis Δx rétegenként növeljük



Egy elemi lépésben: $\Delta J = -\mu \cdot \Delta x \cdot J$

Az intenzitás csökkenése egyenesen arányos az elemi réteget érő intenzitással és az elemi réteg vastagságával

Δx lépésenként haladva x -ig:

$$J = J_0 \left[1 - \frac{1}{n} \right]^n \quad \mu \Delta x = \frac{1}{n}$$

$$\left(1 - \frac{1}{n} \right)^n \xrightarrow{n \rightarrow \infty} e = 2.7182818 \dots$$

Δx -et végtelen kicsire finomítva



$$J = J_0 \cdot e^{-\mu x}$$

μ : **lineáris abszorpciós együttható** - az abszorpció okát, lényegét tartalmazza

Az abszorpció révén bekövetkező sugárintenzitás gyengülés **exponenciális törvénye**

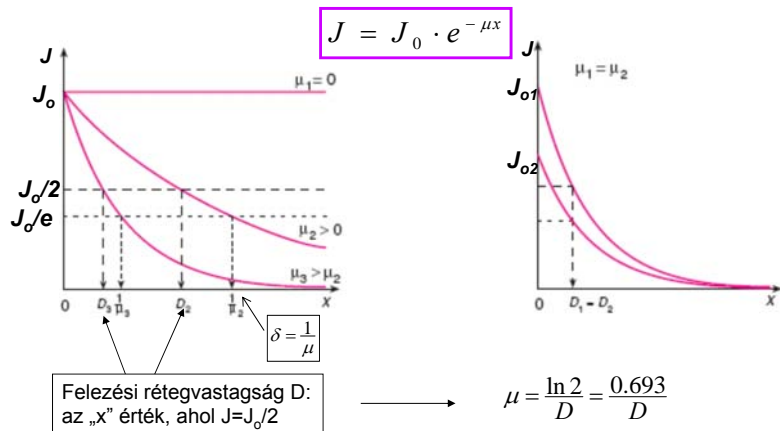
μ függ:

- a sugárzás minőségétől (fotonenergiától, részecskesugárzás kinetikus energiájától)
- az anyagi minőségtől (az anyagban levő kölcsönhatási lehetőségektől)
- az x rétegvastagságban jelen levő kölcsönható molekulák mennyiségétől (sűrűség)

Sugárzások, amelyek abszorpciójára érvényes az exponenciális törvény

- Fény (UV-VIS-IR)
- Röntgensugárzás
- γ -sugárzás
- β^- sugárzás ($x=3-4$ -szer a felezési rétegvastagság(D)-ig)

Az exponenciális abszorpció-törvény grafikus ábrázolása



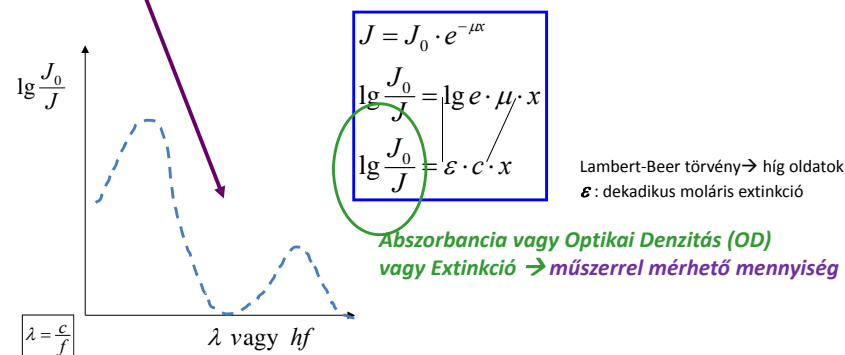
$$\mu = \frac{\ln 2}{D} = \frac{0.693}{D}$$

A $J - x$ függvény méréséből μ meghatározható

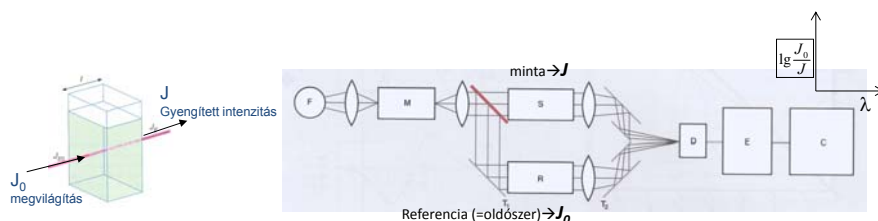
$$J = J_0 \cdot 2^{-\frac{x}{D}}$$

Abszorpciós spektroszkópia - spektrofotometria

Abszorpciós spektrum: milyen fotonenergiák nyelődnek el – a molekulára jellemző



Abszorpciós spektrofotométer felépítése



Kereskedelmi forgalomban levő műszerek **oldatok** mérésére készülnek

Pl. laboratóriumi mérésben: a minta oldat, 1 cm² keresztmetszetű kuvettában
 $x = 1$ cm

Spektrofotometria

abszorpciós spektroszkópia híg színes oldatokon koncentráció-meghatározás céljából

Bázis: Beer-Lambert törvény

$$\mu(\lambda) = \epsilon^*(\lambda) * c$$

$$J = J_0 e^{-\mu x}$$

$$\log \frac{J_0}{J} = \log e * \mu * x = \epsilon(\lambda) * c * x$$

Arányossági tényező: **moláris extinkció** (-s együtttható)

Spektrofotométerrel mérhető

Ismert koncentrációjú oldattal meghatározható

Lásd Gyakorlati jegyzet.....



Köszönöm a figyelmet!