

## Első rész: előző előadás folytatása

### Gázok

### Fázisátalakulások

### További példák a Boltzmann eloszlás következményeire

Prof. Fidy Judit  
2016 október 20

## 2. Gázok

### 2.1. Ideális gáz

#### Ideális gáz-állapot jellemzése

- nincs kölcsönhatás  $E_k=0 \rightarrow$  szerkezete rendezetlen
- Pontszerűek
- csak kinetikus energia : ütközések az edény falával
- részecskék azonosak
- izotróp: tulajdonságai függetlenek a mérés irányától
- deformálható
- térfogatát a tartály határozza meg

Termodinamika:  $\rightarrow$  kinetikus gázelmélet  
 $\rightarrow$  nyomás értelmezése  
 $\rightarrow$  állapotegyenlet

$$E_{teljes} = N \frac{1}{2} m \langle v^2 \rangle_{\text{átlag}} \quad \varepsilon_i = \frac{1}{2} m v_i^2$$

$$\frac{1}{2} m \overline{v^2} = \frac{3}{2} kT$$

$$pV = NkT$$

## 2. Gázok

### 2.1. Ideális gáz

Boltzmann-eloszlás következménye:

az egyedi részecskék  
sebessége (abszolút értéke) **eloszlást** követ

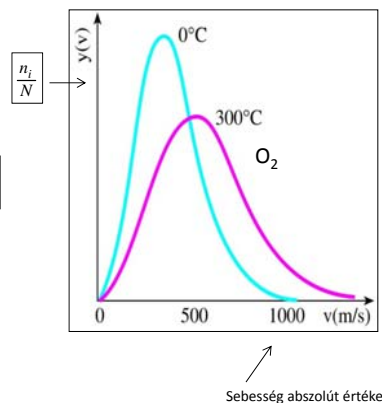
#### Maxwell-Boltzmann-féle sebességeloszlás – hőmérséklet szerepe

↓  
legvalószínűbb/átlag sebesség eltolódása  
eloszlás kiszélesedése magasabb hőmérsékleten

#### Kinetikus gázelmélet - összefoglalás:

**A hőmérséklet egyértelműen meghatározza**

- **a részecskék átlagos kinetikus energiáját**
- **az egyedi kinetikus energiák populációját**



## 2. Gázok

### 2.2. Reális gázok - az általános gáztörvény korrekciója

1. a részecskék nem pontszerűek – térfogatuk „b”  
 $\rightarrow$  **mozgási terük lecsökken** V-ről (V-Nb)-re

2. a részecskék között kölcsönhatás van, erőssége „a”

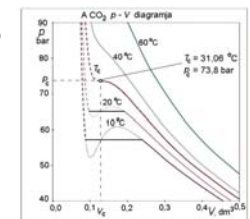
$$\rightarrow E_{\text{belső}} = E_{\text{mozg.}} + E_{\text{kölcs.}}$$

- $\rightarrow$  a  $p(V - Nb) = NkT$  értékénél **a tapasztalt nyomás kisebb**
- ütközési sebesség a vonzó kölcsönhatás miatt kisebb
  - a változás függ a koncentrációtól (N/V)

$$p \rightarrow NkT/(V - Nb) - a(N/V)^2 = p$$

**Van der Waals – egyenlet**  
(egy lehetséges leírás )

$$\left( p + a \frac{N^2}{V^2} \right) (V - Nb) = NkT$$



**De: - továbbra is igaz a hőmérséklet kinetikai értelmezése**

**- magas hőmérsékleten a reális gázok is jól leírhatók ideális gázként**

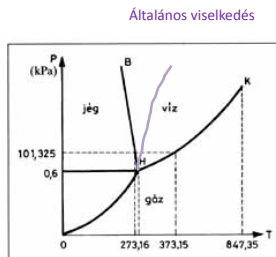
Az anyagcsaládok között és a családokon belül **fázisátalakulások** lehetségesek

Fázis: az anyag térfogatelemei fizikai és kémiai tulajdonságokban megegyeznek

**Elsőrendű fázisátalakulás:** - hőcserével jár: átlagos kötési energia változik  
- intenzív paraméter folytonosan az extenzív ugrásszerűen változik

(Másodrendű fázisátalakulás: nem jár hőcserével, a paraméterek folytonosan változnak)

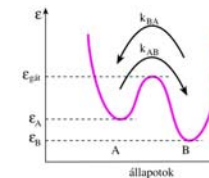
A víz fázisdiagramja



## Más jellegű példák a Boltzmann eloszlásra

Tankönyv:  
Fémek termikus elektronemissziója  
Nernst egyenlet

### 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.

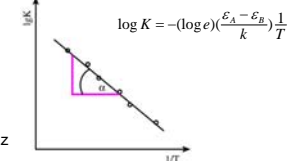
$$k_{AB} = \text{const} \times e^{-\frac{E_{\text{barrier}} - E_A}{kT}}$$

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

$$K = \frac{k_{BA}}{k_{AB}} = e^{-\frac{E_A - E_B}{kT}}$$

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

Arrhenius féle ábrázolás



### Barometrikus magasságformula

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

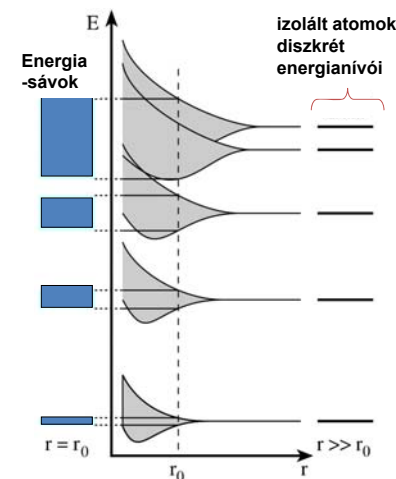
$$\frac{\rho(h)}{\rho(0)} = e^{-\frac{mgh}{kT}}$$

$m$  a levegő részecskéinek átlagos tömege  
 $g$  gravitációs gyorsulás

## Második rész

Kötött elektronok energiaállapotai rendezett rendszerekben – elektromos és optikai tulajdonságok.

## Kristályos szerkezetű anyagok

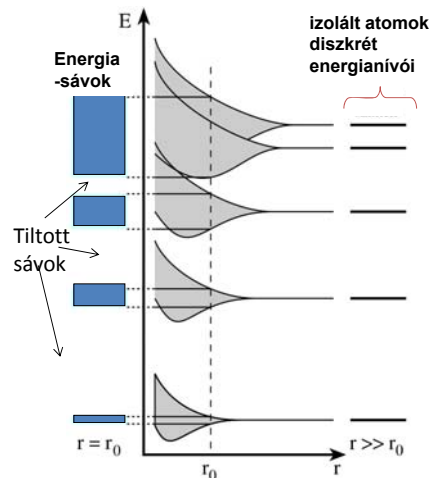


$$N \sim 10^{23}$$

$N$  azonos atomból kristály  $\rightarrow$  azonos energiaállapotú elektronok  $r_0$  távolságban

Pauli elv  $\rightarrow$  külső elektronok energiája  $N$  új nívóra hasad  $\rightarrow$  **folytonos energiasávok**

Az atomok kölcsönhatása megváltoztatja az elektronok energiáit  
Diszkrét energia nívók → folytonos energiájú sávok tiltott sávokkal elválasztva



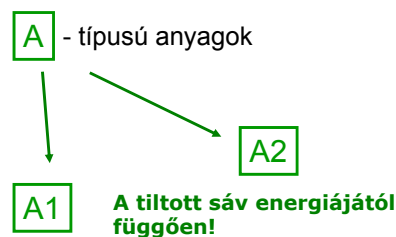
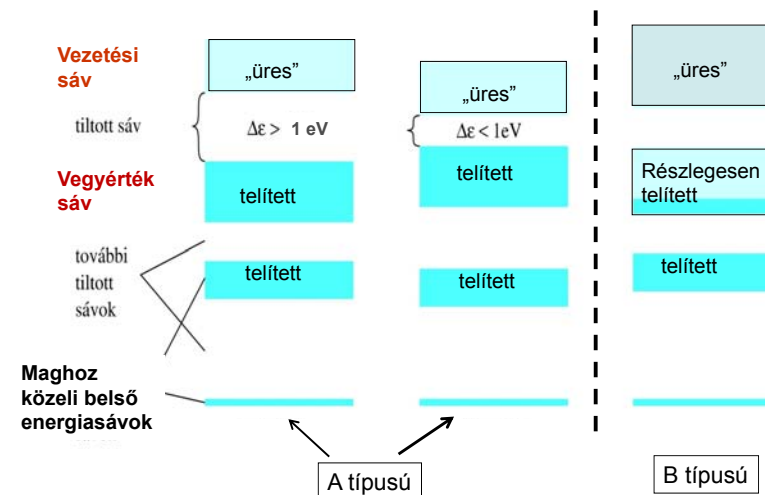
Példa: szilárd kristályos Na  
 $1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$

$2(2l+1)N = \text{elektron - állapotok száma egy sávban}$

3p		0
3s		N
2p		6N
2s		2N
1s		2N

A 3s sáv csak félig betöltött

A fizikai/kémiai tulajdonságok a legfelső telített és a legalsó üres sáv energetikai tulajdonságaitól függenek → **három jellegzetes anyagcsalád: A1 – A2 - B**



Miért?

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

$\Delta\epsilon = E_{\text{gap}}$  és  $kT$  viszonya dönti el, hogy lehetnek-e termikus okokból elektronok a vezetési sávban

$kT \sim 0.023 \text{ eV}$   $T=300 \text{ K}$ ,  
 $k=1.38 \times 10^{-23} \text{ JK}^{-1}$  Boltzmann állandó

Tiltott sáv → „gap”



## A1 típusú anyagok

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

Pl. gyémánt  $E_{\text{gap}} = 5.4 \text{ eV}$

$$\frac{n_{\text{vezetési}}}{n_{\text{vegyérték}}} = e^{-\frac{5.4}{0.023}} = e^{-235} = 0$$

$E_{\text{gap}}$  túl nagy  $kT$ -hez képest → **szigetelők**

- Nincs elektromos vezetés (elektromos letörés:  $\sim V/\text{kötés} \rightarrow 10^{10} \text{ V/m}$ )
- Nincs fényelnyelés a VIS tartományban:  $E_{\text{VISfoton}} < E_{\text{gap}} \rightarrow$   
**VIS-ben átlátszóak**
- lehetséges, hogy  $E_{\text{UVfoton}} \cong E_{\text{gap}} \rightarrow$  **UV-ben lehet, hogy nem átlátszóak**
- **IR elnyelés:** egyensúlyi kötéstávolság körüli rezgések gerjesztése

## A2 típusú anyagok

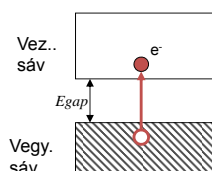
$$E_{gap} \leq 1eV$$

$E_{gap}$  nem túl nagy  $kT$ -hez képest →  
→ termikusan legyőzhető  
(tisztá) félvezetők

	$E_g (eV)$	$\frac{n_{vez}}{n_{veg}} = e^{\frac{0.75(Ge)}{0.023}} = e^{-33} = 7 \cdot 10^{-15}$
Si	1.1	
Ge	0.75	

$n_{vegérték} \approx 6 \cdot 10^{23} \Rightarrow n_{vezetési} \approx 4 \cdot 10^8$   
 $\downarrow$   
 1 M → 32g ( $\rho = 5.5 \text{ g/cm}^3$ ) →  $4 \cdot 10^8 \text{ e}^- / 6 \text{ cm}^3$

A vezetési elektronok a vegyérték sávból termikus „gerjesztéssel” jönnek létre → kétféle töltéshordozó



n-típusú töltéshordozó (vezetési elektron: negatív töltés)

p – típusú töltéshordozó (lyuk: elektron-hiány: pozitív töltés)

## B típusú anyagok

nincs tiltott sáv a vegyérték és a vezetési sáv között → jó vezetők : fémek

Pl. 1- és 2-vegyértékű fémek: Na, Mg, Cu..

	Cu	Si
$n(\text{töltés})/\text{m}^3$	$9 \cdot 10^{28}$	$1 \cdot 10^{16}$
fajlagos ellenállás ( $1/\sigma$ ) (Ohmxm)	$2 \cdot 10^{-8}$	$3 \cdot 10^3$

$T = 293 \text{ K}$

Igen kis ellenállás → nagy vezetőképesség

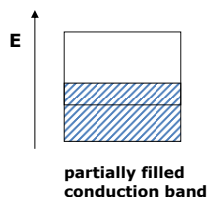
Az elektronok energia-felvétele széles tartományban lehetséges a részlegesen betöltött vezetési sávon belül

### Tulajdonságok

- Elektron-vezetés, nagy vezetőképesség
- Széles energiatartományú foton-abszorpció → átlátszatlanság

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

A fajlagos vezetőképesség csökken a hőmérséklettel  
→ félvezetők!



## (tisztá) félvezetők - folytatás

### Elektromos tulajdonságok

$$\sigma = \text{konst.} \cdot e \cdot \frac{E_{gap}}{2kT}$$

Gyengén függ T-től

Kétféle töltéshordozó keletkezése és rekombinációja együtt – keletkezési valószínűség arányos a B. faktoral.

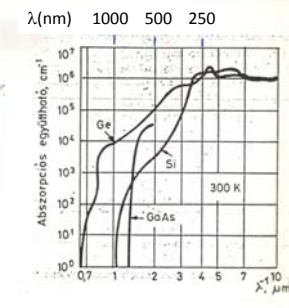
A fajlagos vezetőképesség ( $\sigma$ ) a hőmérséklet emelkedésével nő →  
→ termorezisztorok → hőmérséklet-mérés

### Optikai tulajdonságok

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

Fényfoton elnyelődhet! → gerjesztés a vezetési sávba

- VIS átlátszatlanság
- Fényelnyelés elektromos vezetést indukál →  
→ fotodetektorok



## Különleges család A2-n belül

### Szennyezéses félvezetők

„Szennyezés” (Doping) speciális technika: igen tiszta félvezető kristályban (host) igen kis mennyiségben egymástól távol, izoláltan elhelyezett idegen komponens

$$\frac{N_{host}}{N_{dopant}} \approx 10^6$$

→ Izolált szennyezők (dopants)

Ötlet: megfelelően kiválasztott dopant csökkenti az  $E_{gap}$ -t, így a termikusan létrehozott töltések száma megnövekszik

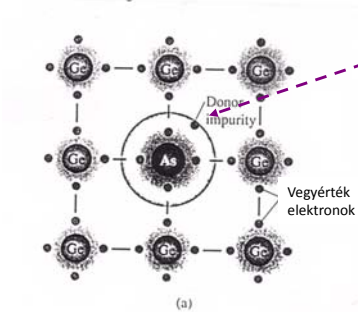
Kétféle kombinációt realizáltak

- 4-vegyértékű gazda-rácsban 5-vegyértékű dopant → n-típusú félvezető
- 4-vegyértékű gazda-rácsban 3-vegyértékű dopant → p-típusú félvezető

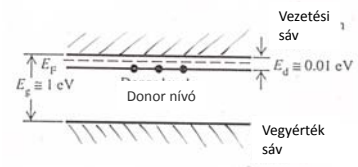
Host (gazdarács): Ge, Si

Dopant: 5-vegyértékű : P, As, Bi  
3-vegyértékű : B, Al, Ga, In

Pl. 4-vegyértékű Ge kristályrács szennyezve 5-vegyértékű As atomokkal

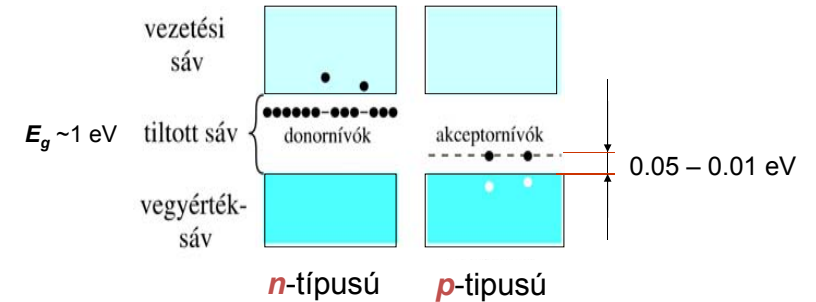


Az ötödik As-elektron nem tud részt venni kovalens kötésben → gyengén kötött a szennyezés helyén → kis energiával kiszabadulhat és részt vehet a vezetésben: „donor” állapot → **n-típusú vezetés**



A donor nívók csak a szennyezőkön léteznek, nem tudnak delokalizálódni. Ha gerjesztődnek ezek az elektronok, akkor a hátramaradt „lyukak” szintén lokalizáltak, nem vesznek részt a vezetésben.

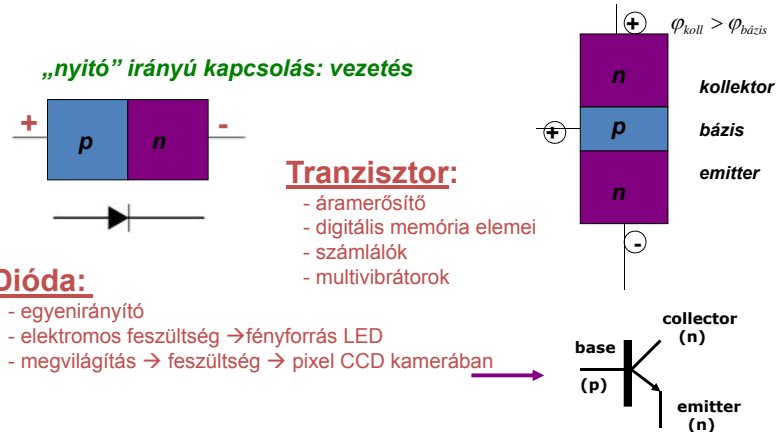
Összefoglalás: n- és p-típusú szennyezéses félvezetők



A szennyezőn létező donor nívó termikusan gerjesztett elektronjai vezetnek

A szennyező atomnál lekötetlen gazda-atom elektron „fogad” gerjesztett gazda-rács elektronokat : lokalizált akceptor-nívó populálása. A gazda-rácsban hátramaradó lyukak vezetnek

Az áramkörök alapelemei: dióda és tranzisztor  
előállíthatók n- és p-típusú szennyezéses félvezetők



**Tranzisztor:**

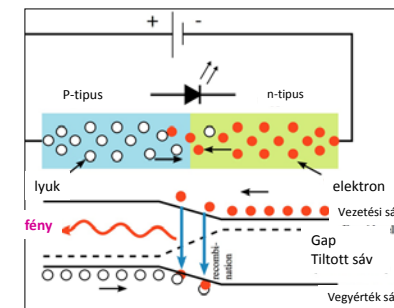
- áramerősítő
- digitális memória elemei
- számlálók
- multivibrátorok

**Dióda:**

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

Feltétel a megfelelő szennyezés → igen kis méretben előállítható áramkörök → **mikroelektronika** lehetősége

Jelenlegi legmodernebb fényforrás: LED



Elektromos vezetés hatására a p-n határrétegben többségbe került elektronok és lyukak rekombinációja → elektronok energia vesztese fényemisszióval

## 1956 – fizikai Nobel díj a félvezető tranzisztor megvalósításáért

John **Bardeen**, William **Shockley** és Walter **Brattain** a Bell Lab-ban, 1948.



**John Bardeen**  
II. Nobel 1972  
A szupravezetés elméletéért



**Walter Brattain**  
Igen jó kísérleti fizikus

## 2014 – fizikai Nobel díj a kékfényű LED megvalósításáért

Isamu Akasaki , Shuji Nakamura, Hiroshi Amano ,



LED: Light Emitting Diode



Köszönöm a figyelmet!

