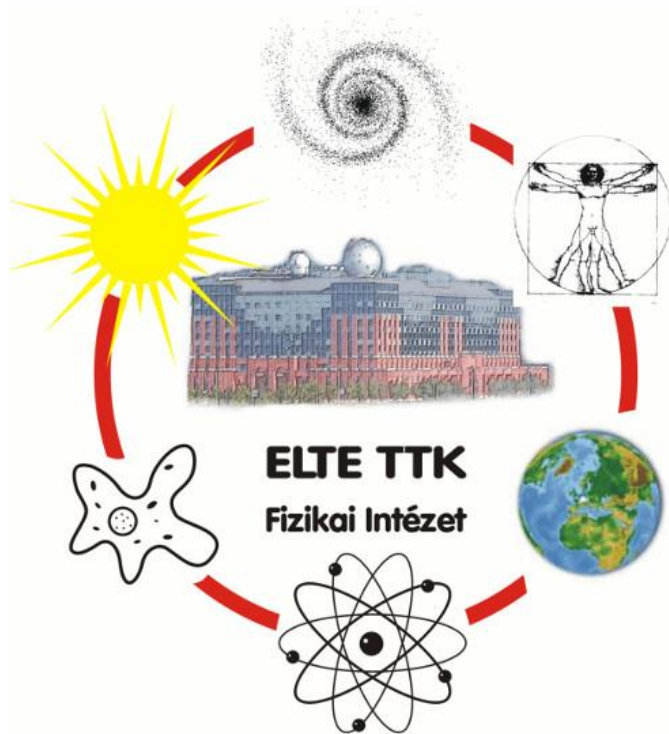


Hű, mennyi elektron! - avagy szilárdtest-fizika mindenkinek



Széchenyi Gábor
ELTE, Anyagfizikai Tanszék



ELTE

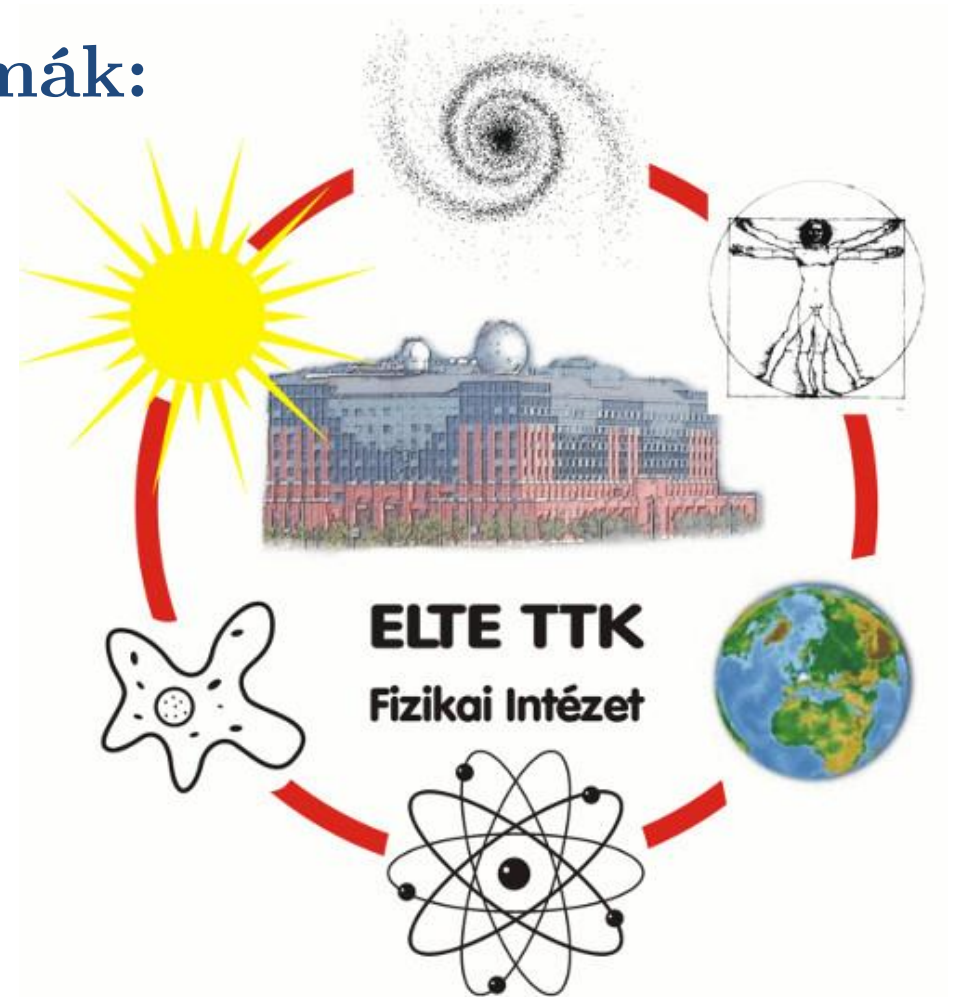
EÖTVÖS LORÁND
TUDOMÁNYEGYETEM

Atomoktól a csillagokig, 2024. december 12.

Az atomoktól a csillagokig 20. évad

A legnagyobb érdeklődést kiváltó témák:

Világegyetem	Relativitáselmélet
Kvantum-mechanika	Elemi részecskék fizikája



Meglátni a szépséget és a fizikát a mindennapi életünkben.



Milyen sokfélék a szilárdtestek!



Acél (vas)

Szürke
Kemény
Vezeti az áramot
Vonzza a mágnes

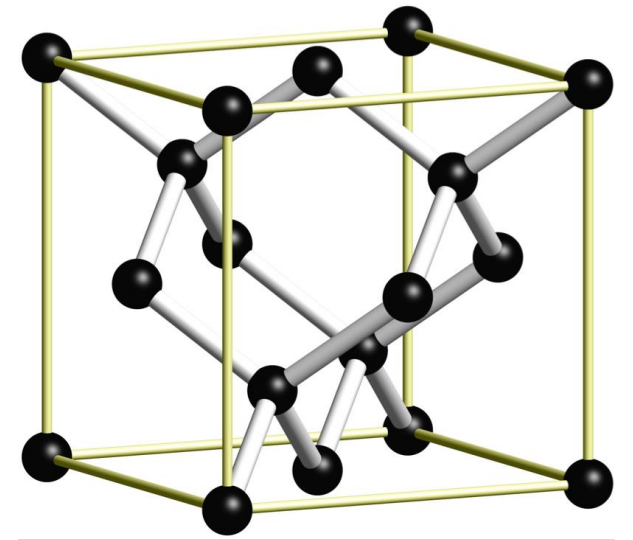
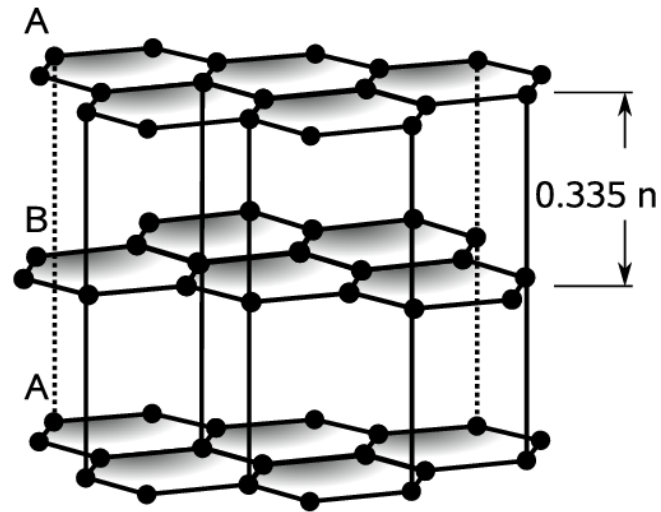
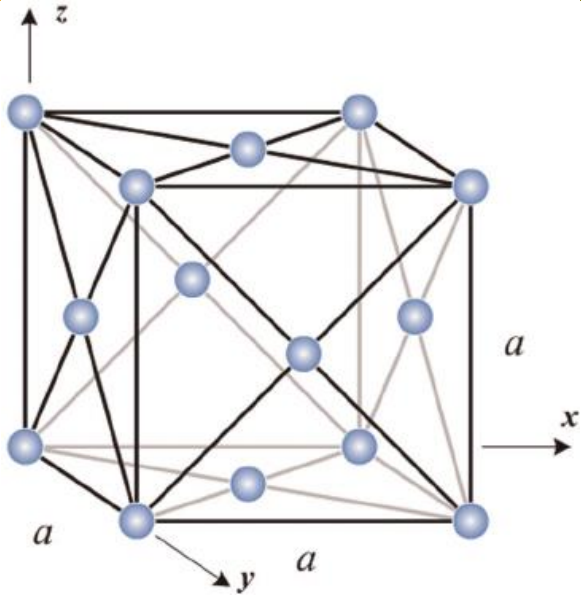
Grafit

Szürke
Puha
Vezeti az áramot
Nem vonzza a mágnes

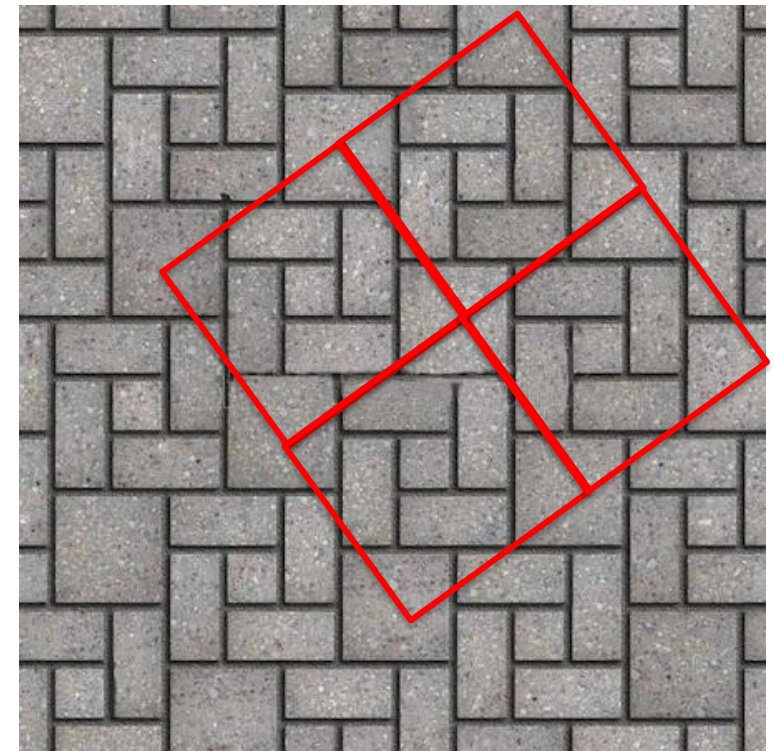
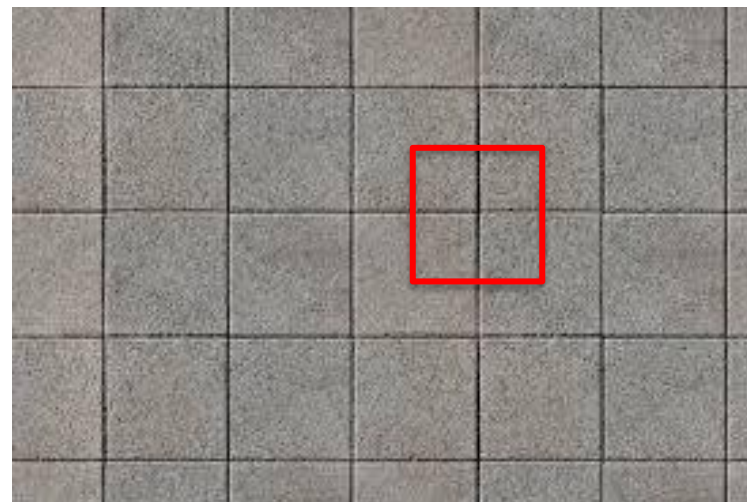
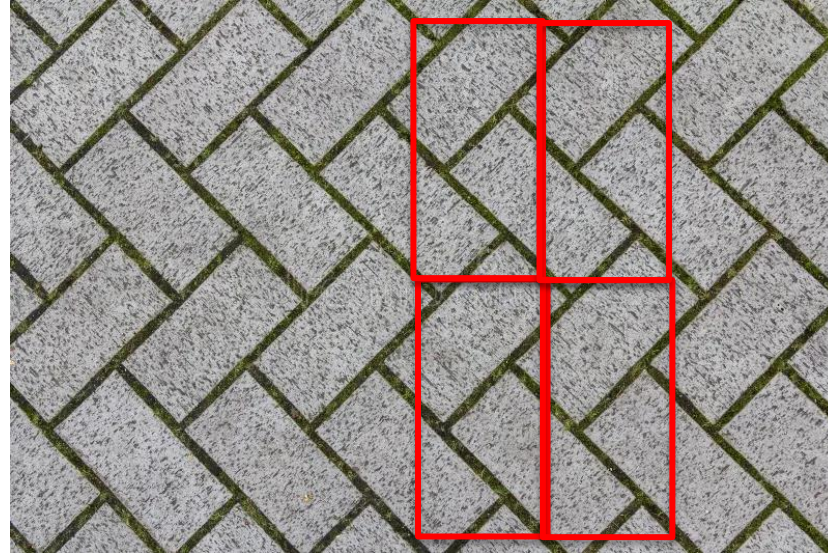
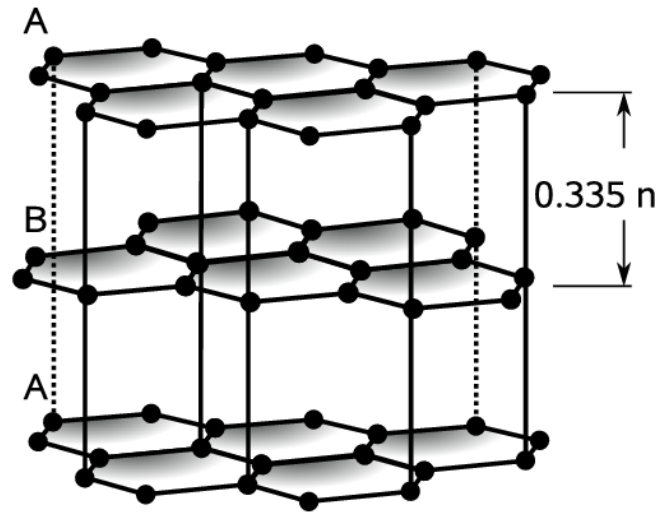
Gyémánt

Áttetsző
Kemény
Nem vezeti az áramot
Nem vonzza a mágnes

Közös tulajdonság: periodikus szerkezet

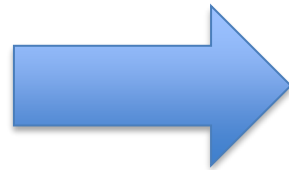
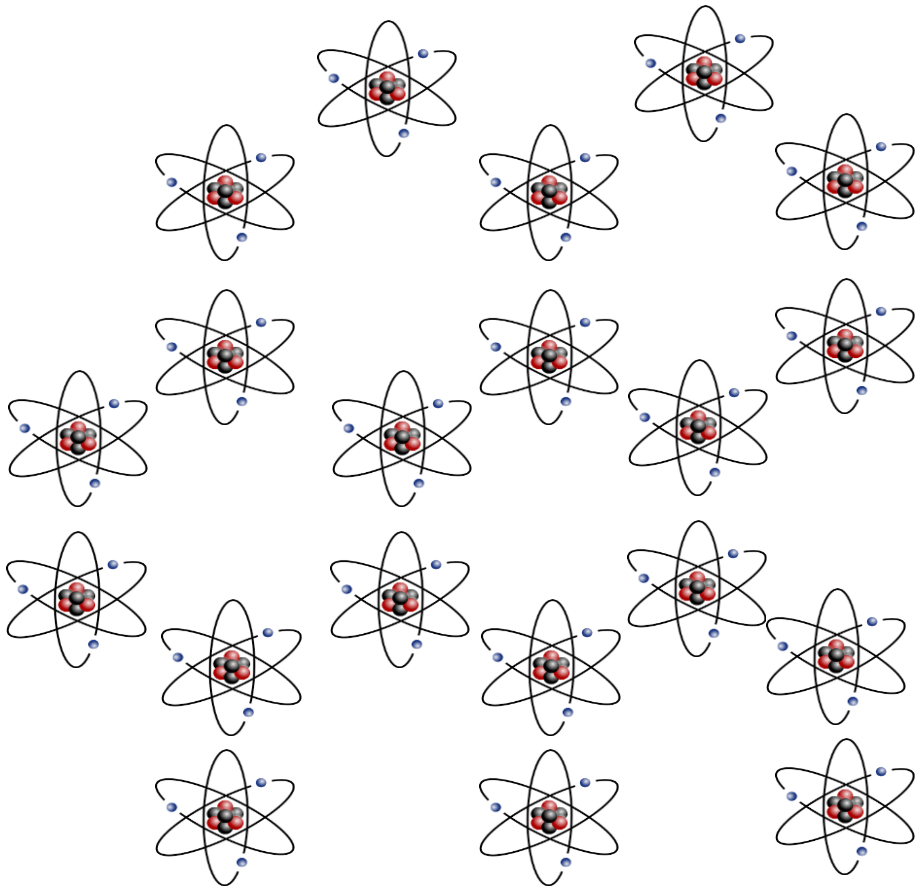


Önismétlő struktúrák



Szilárdtestfizika célja

Mikrovilág



Makroszkópikus tulajdonságok

vezetőképessége (vezet, szigetel)

hővezetése

fajhője

mágnesezettsége

EM hullámmal való kölcsönhatás (színe)

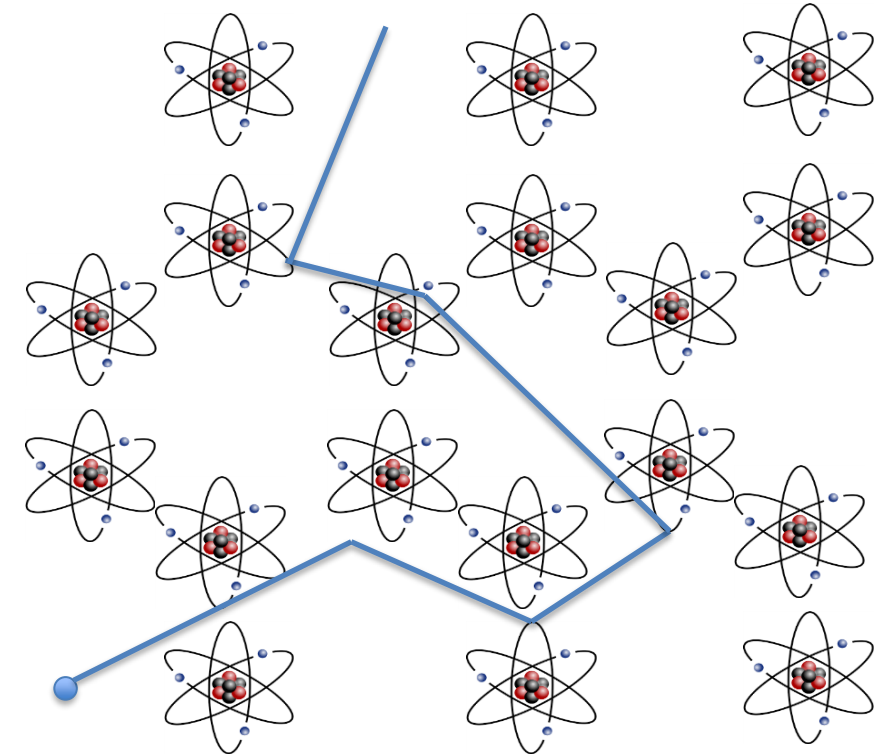
Klasszikus fizikával nem sokra megyünk

Szigetelők: csak kötött elektronok

Fémek: vannak szabad elektronok

Mely atomoknál lesznek szabad elektronok? Mitől függ?

PERIÓDUS CSOPORT	s-elemek		AZ ELEMEK PERIÓDUSOS RENDSZERE																p-elemek					
	I	II	III	IV	V	VI	VII	VIII	VIII	VIII	I	II	III	IV	V	VI	VII	0						
K	1 1,01 H 1 Hidrogén		relatív atomtömeg — 26,98 vegyjel — Al ³ ₈ ² rendszám — 13 — az elektronok eloszlása az energiaszinteken Alumínium																4,00 He 2 Hélium					
L	2 6,94 Li 3 Lítium	2 9,01 Be 4 Berillium																	10,81 B 5 Bór	12,01 C 6 Szén	14,01 N 7 Nitrogén	16,00 O 8 Oxigén	19,00 F 9 Fluor	20,18 Ne 10 Neon
M	3 22,99 Na 11 Nátrium	2 24,31 Mg 12 Magnézium																	26,98 Al 13 Alumínium	28,09 Si 14 Szilícium	30,97 P 15 Fosfor	32,07 S 16 Kén	35,45 Cl 17 Klór	39,95 Ar 18 Argon
N	4 39,10 K 19 Kálium	2 40,08 Ca 20 Kalcium	4 44,96 Sc 21 Szkandium	4 47,90 Ti 22 Titán	5 50,94 V 23 Vanádium	6 52,00 Cr 24 Krom	7 54,94 Mn 25 Mangán	8 55,85 Fe 26 Vas	9 58,93 Co 27 Kobalt	10 58,71 Ni 28 Nikkel	11 63,55 Cu 29 Réz	12 65,39 Zn 30 Cink	13 69,72 Ga 31 Gallium	14 72,59 Ge 32 Germánium	15 74,92 As 33 Arzén	16 78,96 Se 34 Szelen	17 79,90 Br 35 Brom	18 83,80 Kr 36 Kripton						
O	5 85,47 Rb 37 Rubídium	2 87,62 Sr 38 Stroncium	3 88,91 Y 39 Ittrium	4 91,22 Zr 40 Cirkónium	5 92,91 Nb 41 Niobium	6 95,94 Mo 42 Molibdén	7 98,91 Tc 43 Technécium	8 101,07 Ru 44 Rúdium	9 102,91 Rh 45 Ródium	10 106,4 Pd 46 Palládium	11 107,87 Ag 47 Ezüst	12 112,41 Cd 48 Kadmium	13 114,82 In 49 Indium	14 118,71 Sn 50 Ón	15 121,75 Sb 51 Antimon	16 127,60 Te 52 Téllur	17 126,90 I 53 Jód	18 131,30 Xe 54 Xenon						
P	6 132,91 Cs 55 Cézium	2 137,33 Ba 56 Bárium	10 178,49 57-71 Hf 72 Háfium	6 180,95 Ta 73 Tantál	6 183,85 W 74 Volfrám	6 186,21 Re 75 Rénium	6 190,2 Os 76 Ozmium	6 192,22 Ir 77 Iridium	6 195,09 Pt 78 Platina	6 196,97 Au 79 Arany	6 200,59 Hg 80 Higany	6 204,37 Tl 81 Tallium	6 207,2 Pb 82 Ólom	6 208,98 Bi 83 Bizmut	6 209 Po 84 Pólonium	6 210 At 85 Asztácium	6 222 Rn 86 Radon							
Q	7 223 Fr 87 Francium	2 226,03 Ra 88 Rádium	10 261 89-103 Rf 104 Ráfórdium	6 262 Ha 105 Hánium	6 263 Unh 106 Unilheptium	6 265 Uns 107 Unseptium	6 266 Uno 108 Unoktium	6 266 Une 109 Unnonium	*Az elemek ideiglenes elnevezése -104 Rf - Rutherfordium - 104 Ku - Kurtschatovium -105 Ha - Hanium - 105 Ns - Nielsbohrium															



Hogy megy át az elektron az atomok között?

Atomok távolsága ~0,1 nm

Atomok mérete (ha rajtuk elektron szóródik) ~0,1 nm

Szabad úthossz ~0,1 nm

HIBÁS!



Tökéletes kristályrácsban az elektronok „szinte” ellenállás nélkül mozognak.

Kvantummechanika (99 éves)



Erwin Schrödinger



Werner Heisenberg

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\Psi(t)\rangle = \hat{H} |\Psi(t)\rangle$$

„Schrödingernek egyenlete az mindent leír.”

Kvantummechanika (99 éves)



Erwin Schrödinger

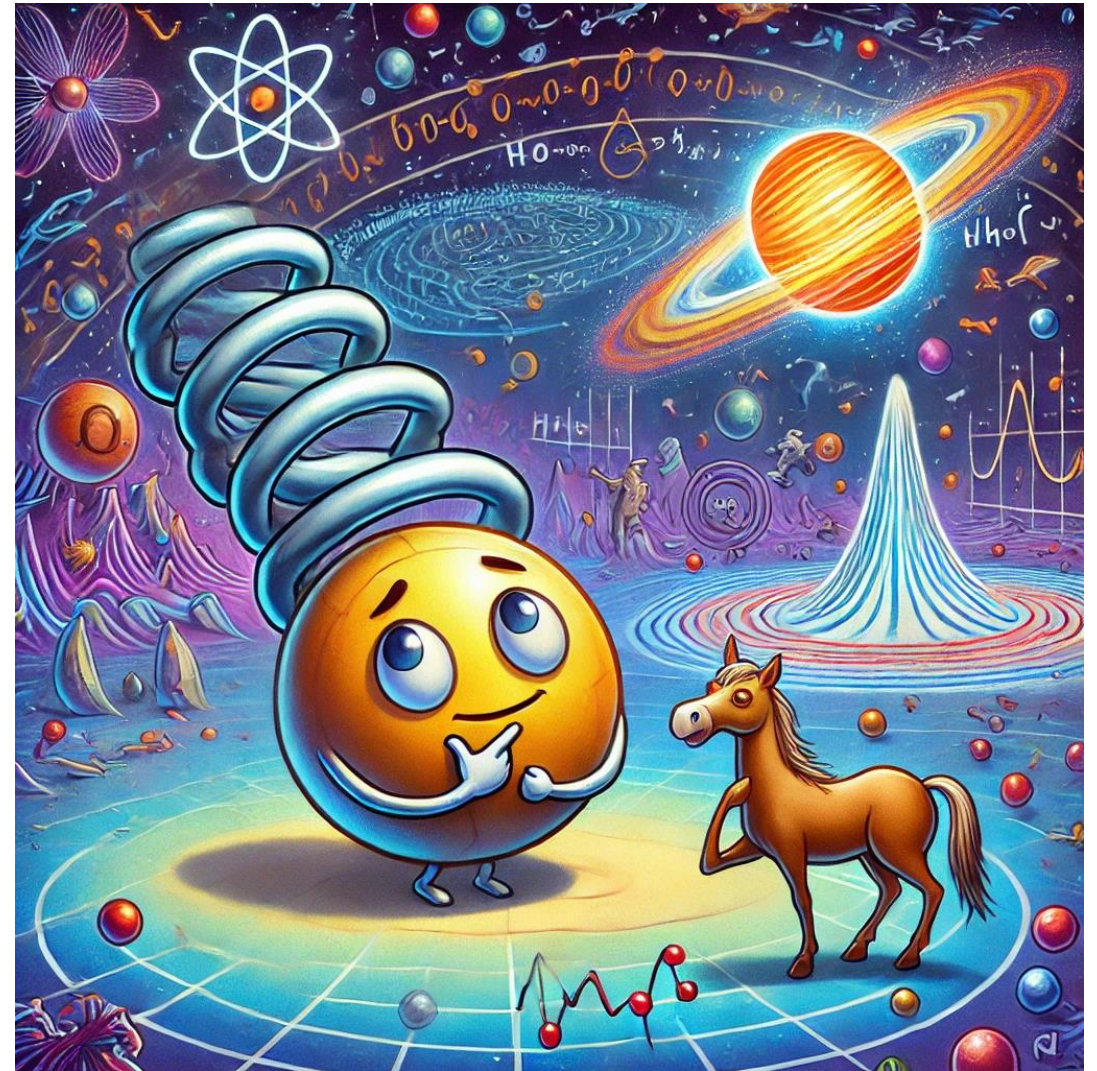


Werner Heisenberg

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\Psi(t)\rangle = \hat{H} |\Psi(t)\rangle$$

„Schrödingernek egyenlete az mindent leír.”

„Harmonikus oszcillátor, hidrogénatom,
Van-e más is a világon, én nem tudhatom.
De ha netán volna más is, rúgja meg a ló,
Az csak perturbáció.”



Kvantummechanika (99 éves)



Erwin Schrödinger



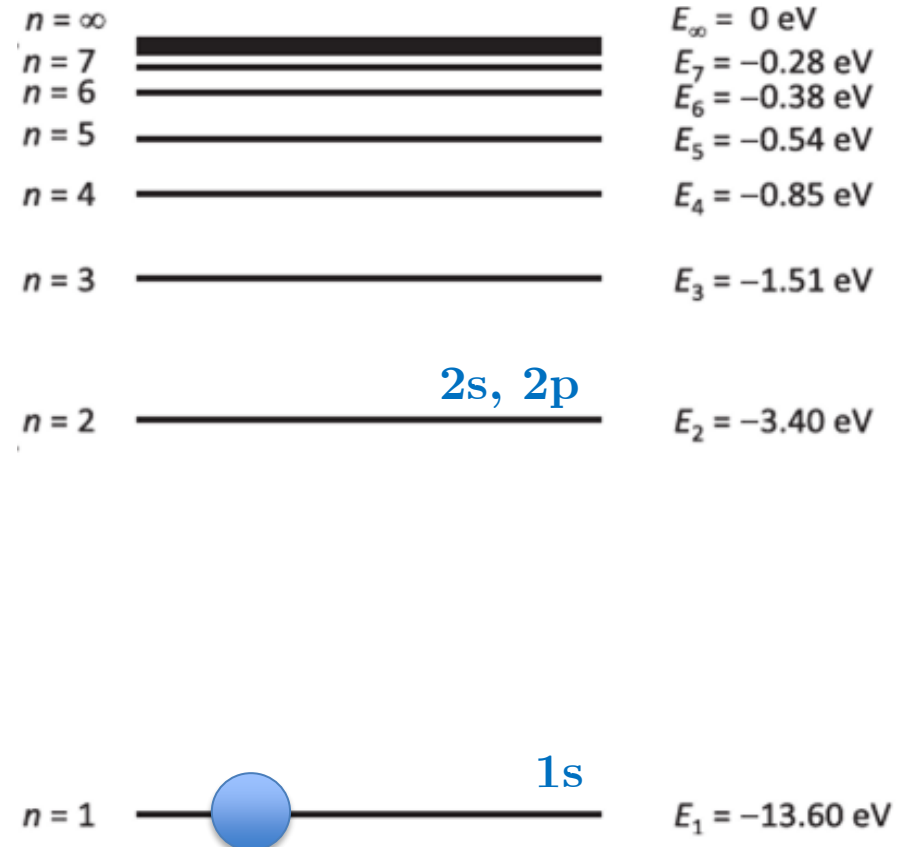
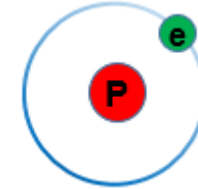
Werner Heisenberg

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\Psi(t)\rangle = \hat{H} |\Psi(t)\rangle$$

„Schrödingernek egyenlete az mindent leír.”

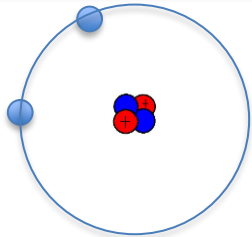
„Harmonikus oszcillátor, hidrogénatom,
Van-e más is a világon, én nem tudhatom.
De ha netán volna más is, rúgja meg a ló,
Az csak perturbáció.”

Hidrogén atom

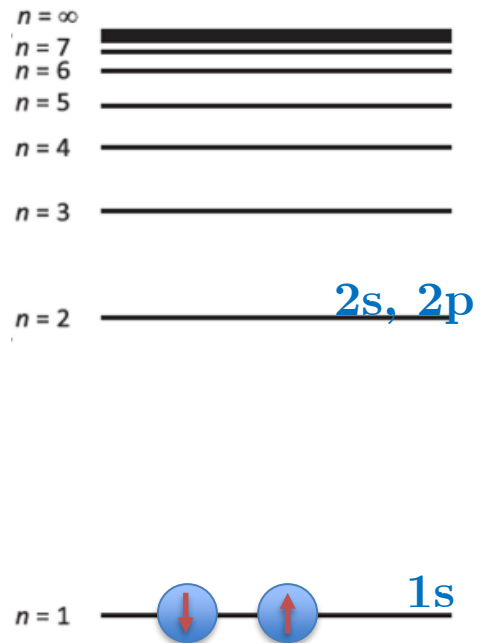
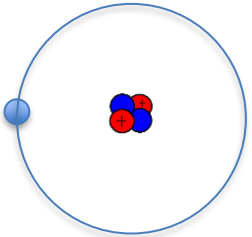


Már két elektronnal is meggyűlik a bajunk

Héliumatom

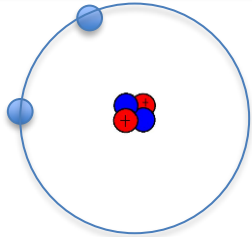


Héliumion

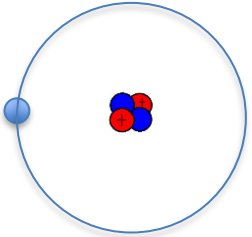


Már két elektronnal is meggyűlik a bajunk

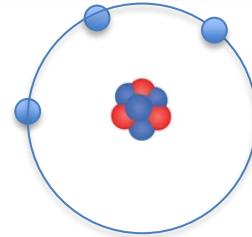
Héliumatom



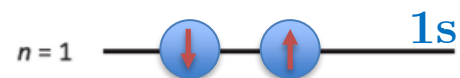
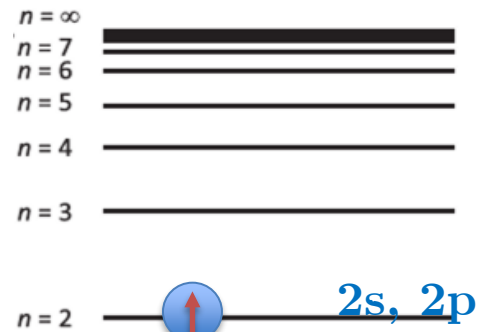
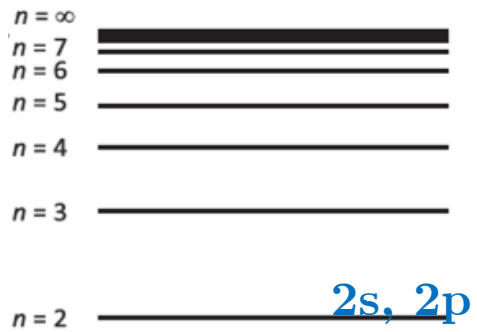
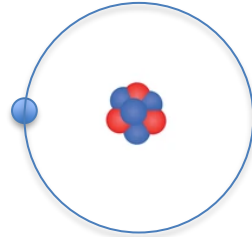
Héliumion



Lítiumatom

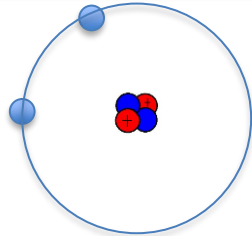


Lítiumion

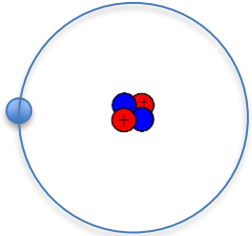


Már két elektronnal is meggyűlik a bajunk

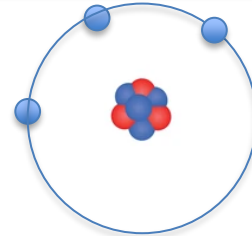
Héliumatom



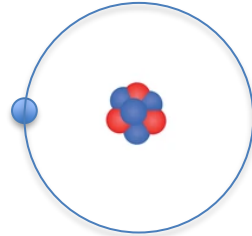
Héliumion



Lítiumatom



Lítiumion

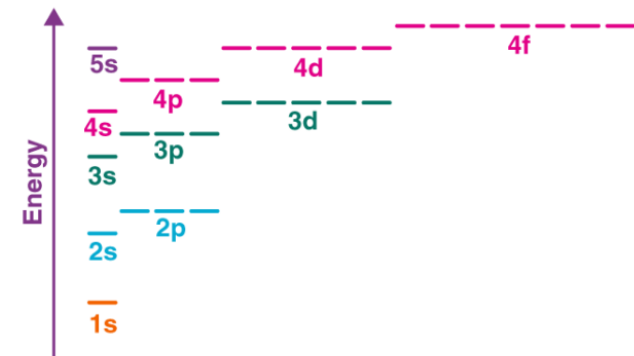
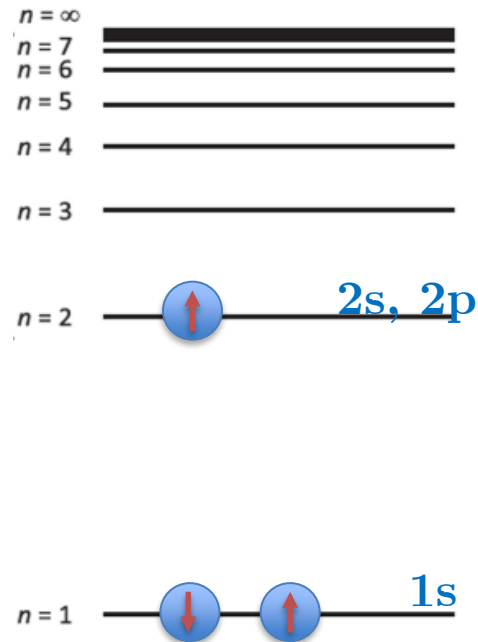
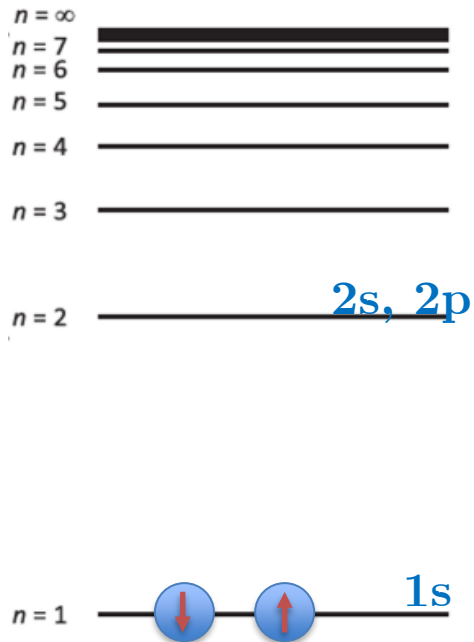
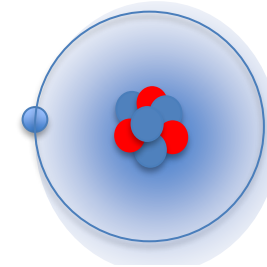


Közelítés:

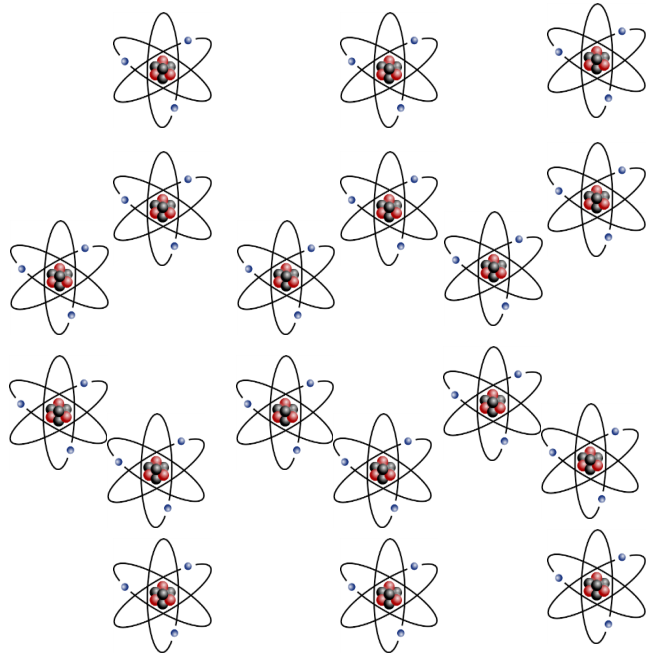
elektronok közti Coulomb-taszítás elhanyagolva



többi elektron terét átlagosan figyelembe venni



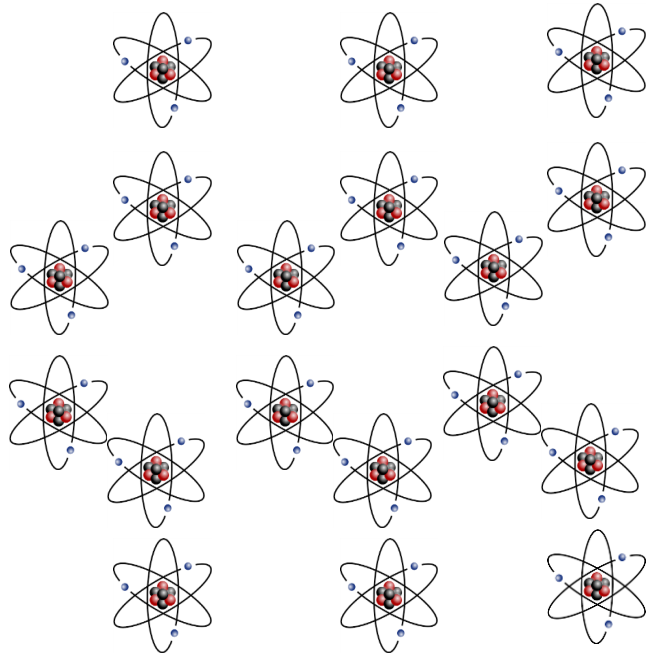
Hű, mennyi elektron!



1 kg anyagban $\sim 10^{26}$ elektron

Órült nagy szám

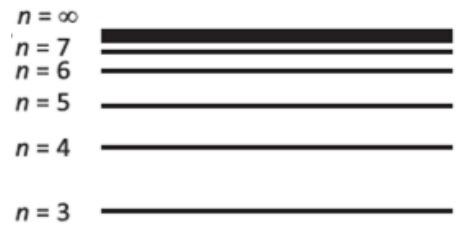
Hű, mennyi elektron!



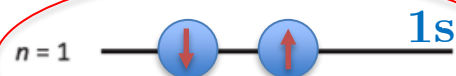
1 kg anyagban $\sim 10^{26}$ elektron

Órült nagy szám

Lítiumatom

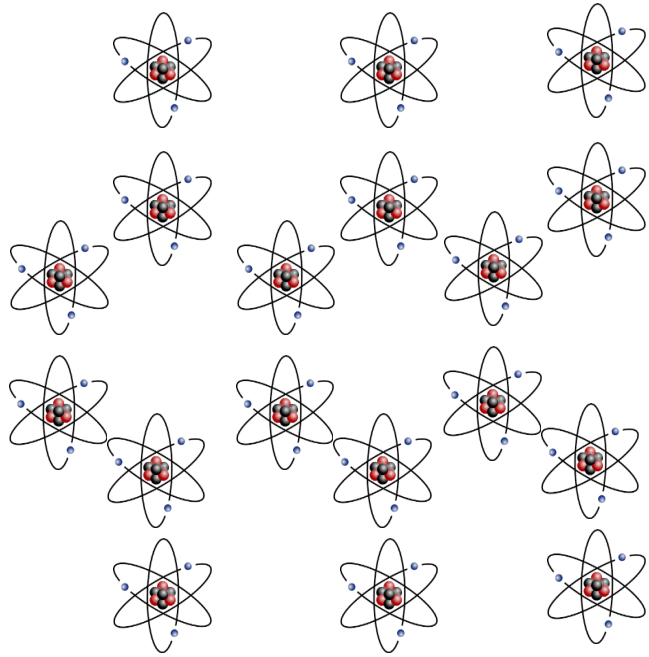


fontosak



nehéz őket gerjeszteni
atom körül lokalizálva

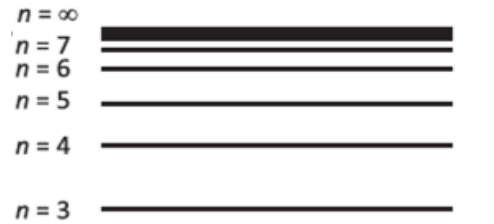
Hű, mennyi elektron!



1 kg anyagban $\sim 10^{26}$ elektron

Órült nagy szám

Lítiumatom



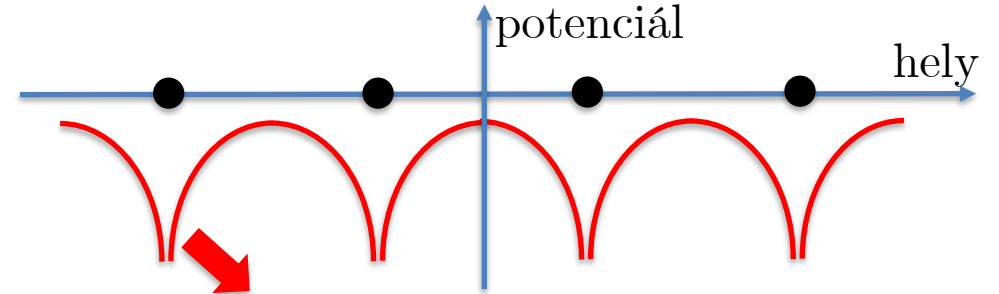
$n=2$  **2s, 2p**

fontosak

$n=1$  **1s**

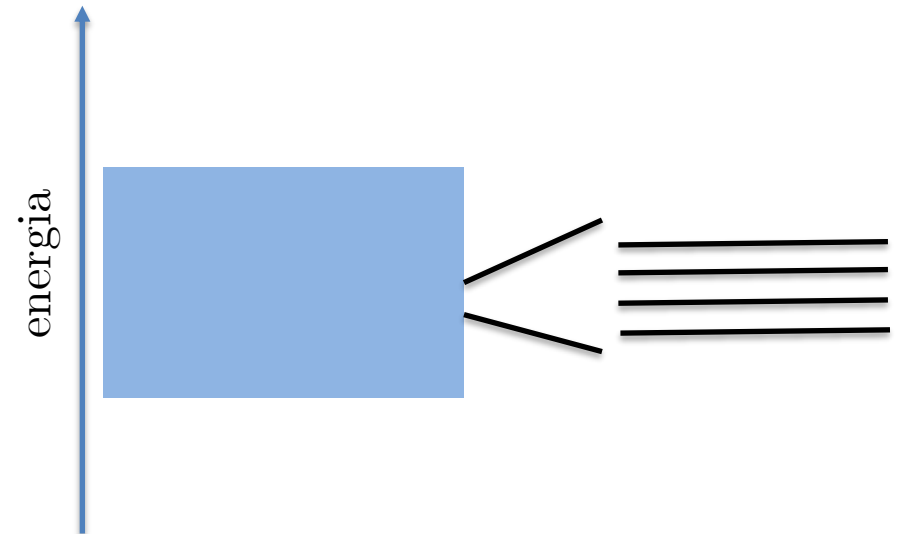
nehéz őket gerjeszteni
atom körül lokalizálva

Egy darab elektron Schrödinger-egyenletének megoldása egy periodikus potenciálban



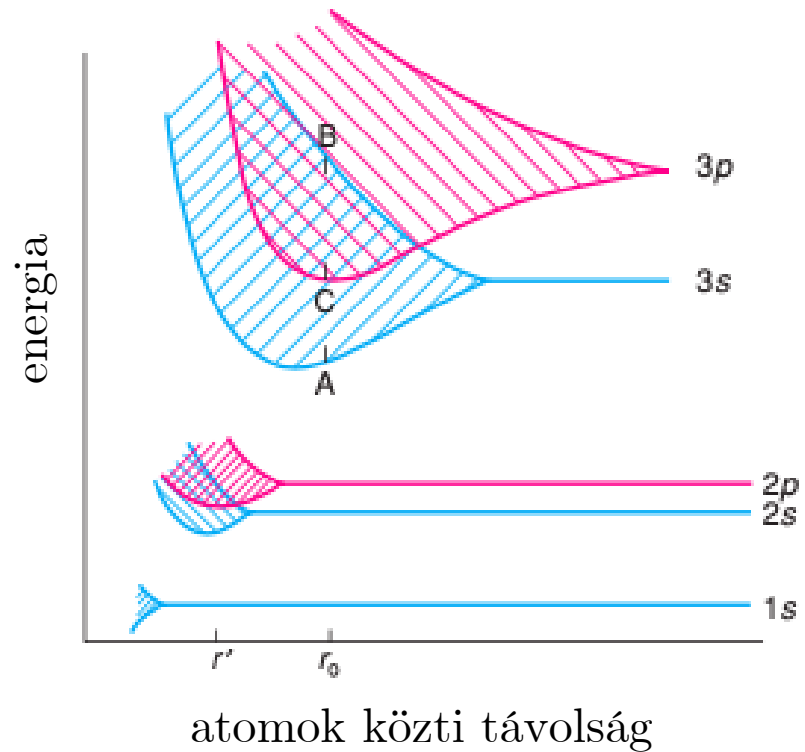
Atommag + elektronok átlagos potenciálja

Energiasávok jelennek meg



Szilárdtestekben energiasávok vannak

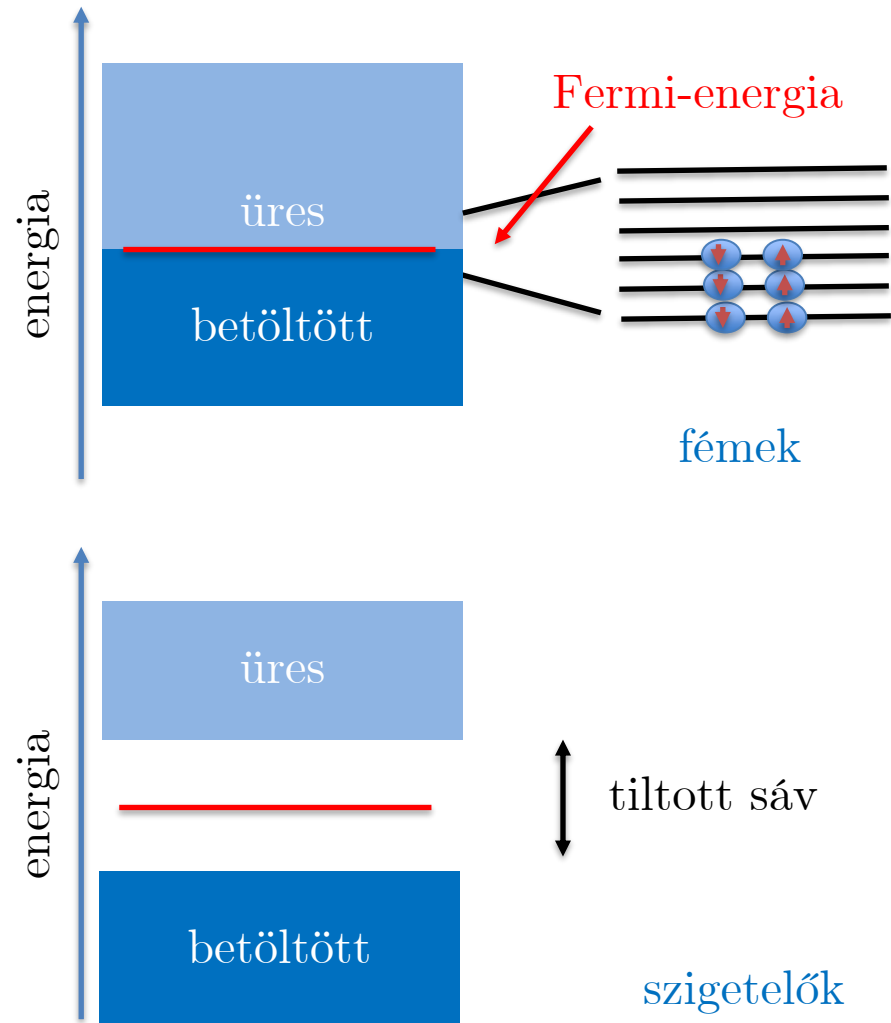
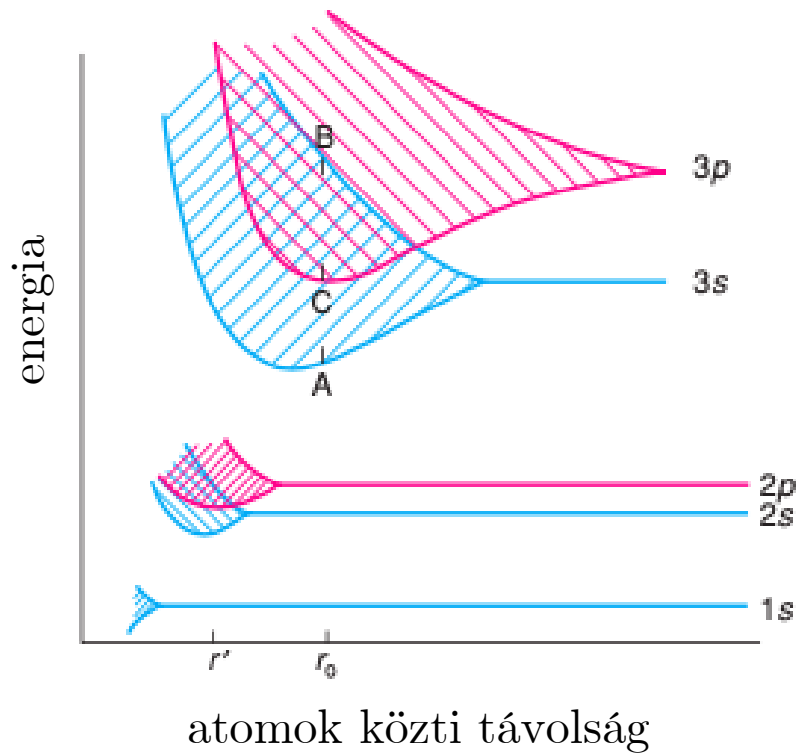
Miért jelennek meg?



Szilárdtestekben energiasávok vannak

Miért jelennek meg?

Kezdjük el feltölteni a sávokat elektronnal!



Fermi-tenger

Sávok ismerete a kulcs

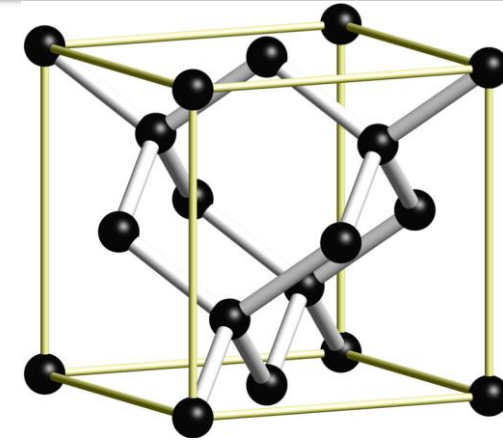


Bevett numerikus módszerek
a sáv szerkezet meghatározásához

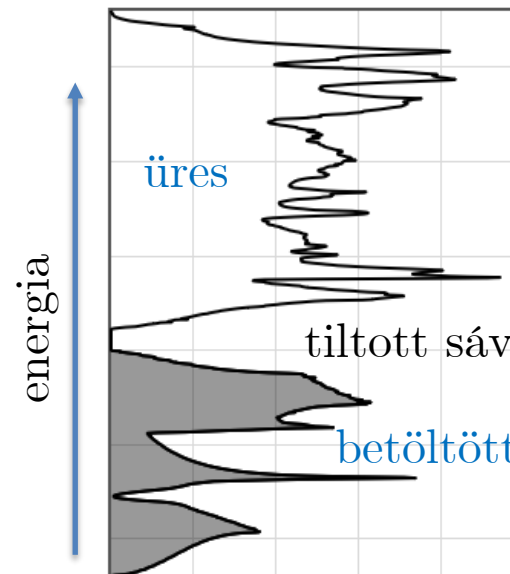
DFT: Sűrűségfunkcionál elmélet

1) Szerkezet

Szilícium



2) Sáv szerkezet meghatározása

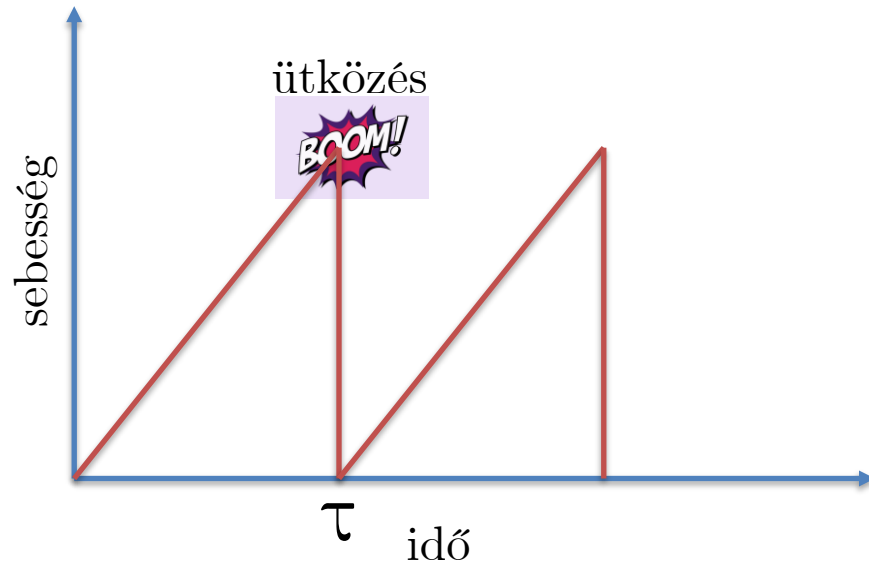


<http://lampz.tugraz.at/~hadley/memm/materials/silicon/silicon.php>

3) Fémes vagy szigetelő?
Elektromos vezetőképesség
Hővezetőképesség
Fajhő

Fémek – szabad elektron modell

Szabad elektron elektromos térben → gyorsul



Vezetőképesség:
$$\sigma = \frac{ne^2\tau}{m}$$

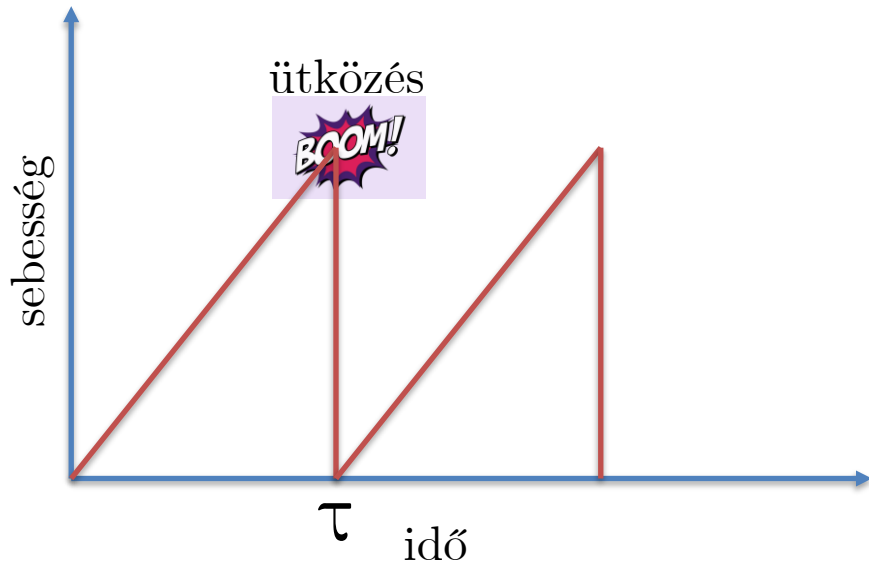
Mi okozza az ütközést?

- Ideális kristályrács
- Kristályhibák
- Rácsrezgések (hőmérséklettel nő hatása)

Fémek ellenállása nő a hőmérséklettel.

Fémek – szabad elektron modell

Szabad elektron elektromos térben → gyorsul



Vezetőképesség:
$$\sigma = \frac{ne^2\tau}{m}$$

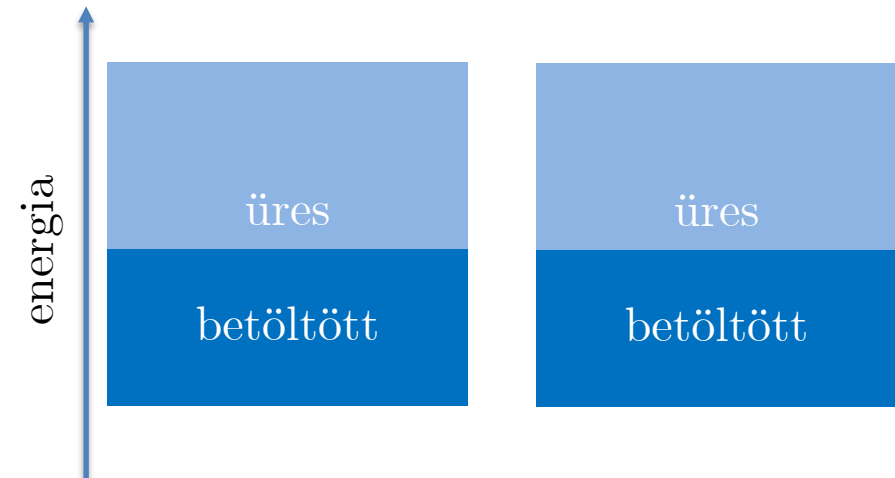
Mi okozza az ütközést?

- Ideális kristályrács
- Kristályhibák
- Rácsrezgések (hőmérséklettel nő hatása)

Fémek ellenállása nő a hőmérséklettel.

Hogyan látszik ez a sávképben?

Elektromos tér: nincs



balra haladó



jobbra haladó

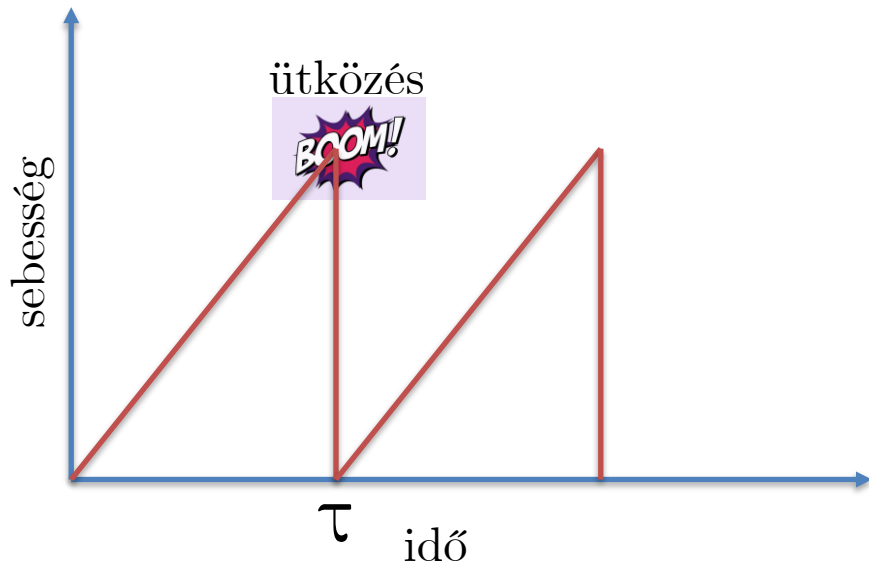


eredő áram



Fémek – szabad elektron modell

Szabad elektron elektromos térben → gyorsul



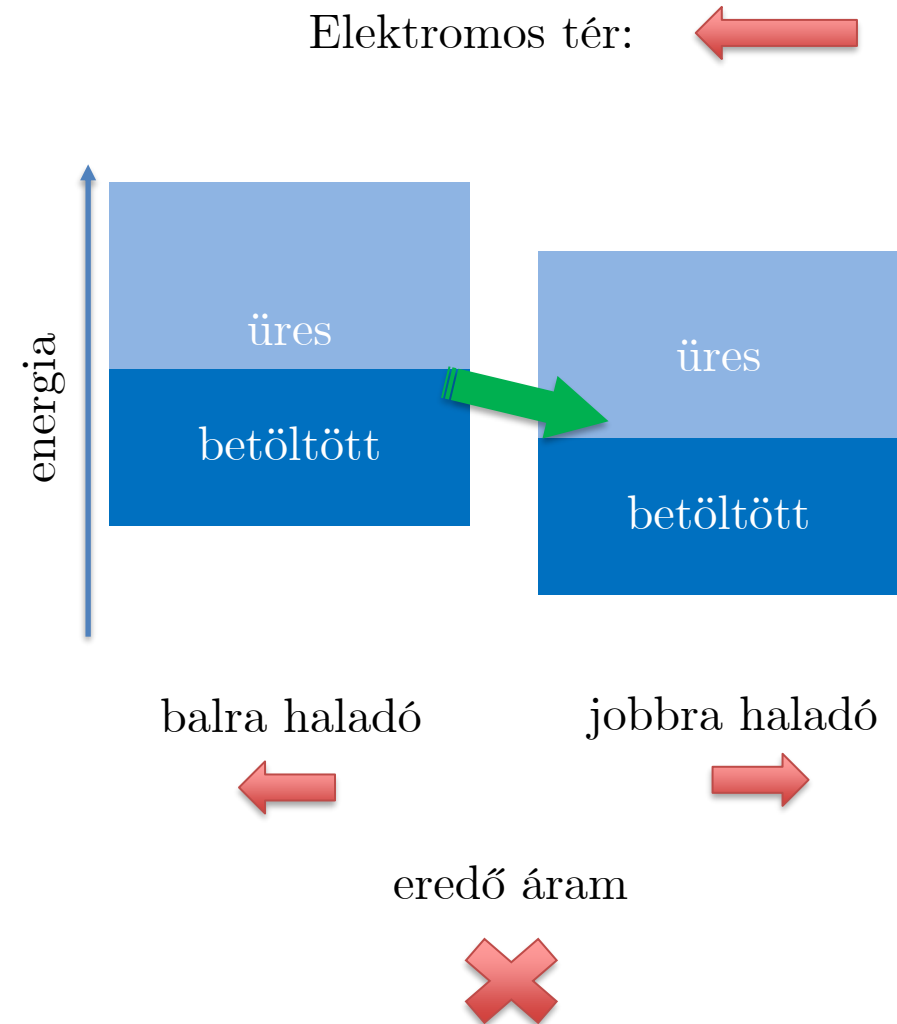
Vezetőképesség:
$$\sigma = \frac{ne^2\tau}{m}$$

Mi okozza az ütközést?

- Ideális kristályrács
- Kristályhibák
- Rácsrezgések (hőmérséklettel nő hatása)

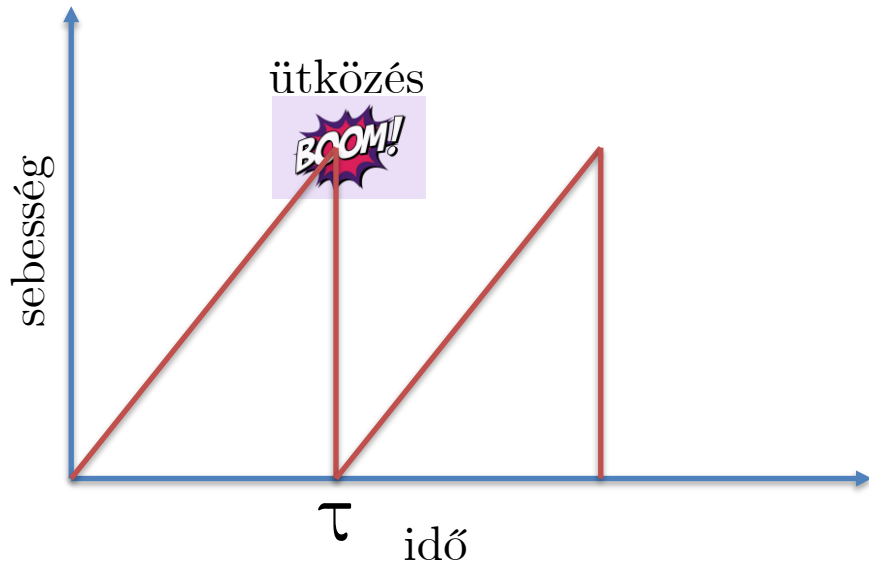
Fémek ellenállása nő a hőmérséklettel.

Hogyan látszik ez a sávképben?



Fémek – szabad elektron modell

Szabad elektron elektromos térben → gyorsul



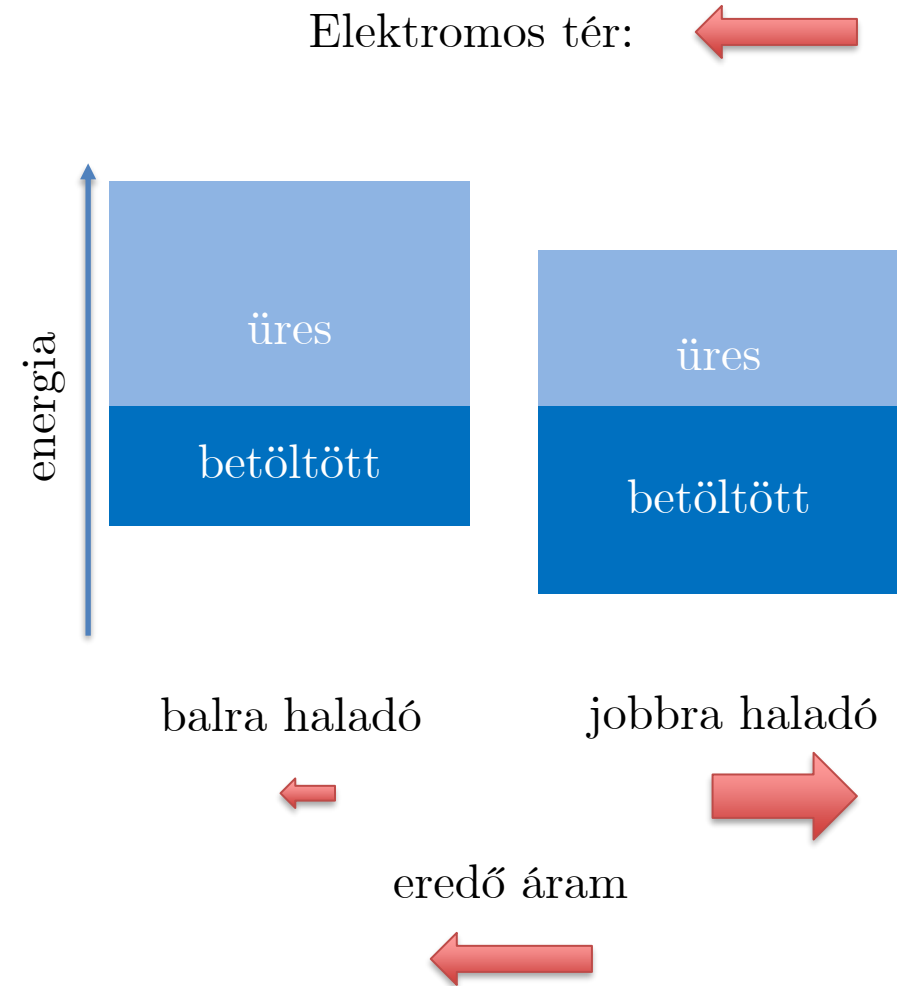
Vezetőképesség:
$$\sigma = \frac{ne^2\tau}{m}$$

Mi okozza az ütközést?

- Ideális kristályrács
- Kristályhibák
- Rácsrezgések (hőmérséklettel nő hatása)

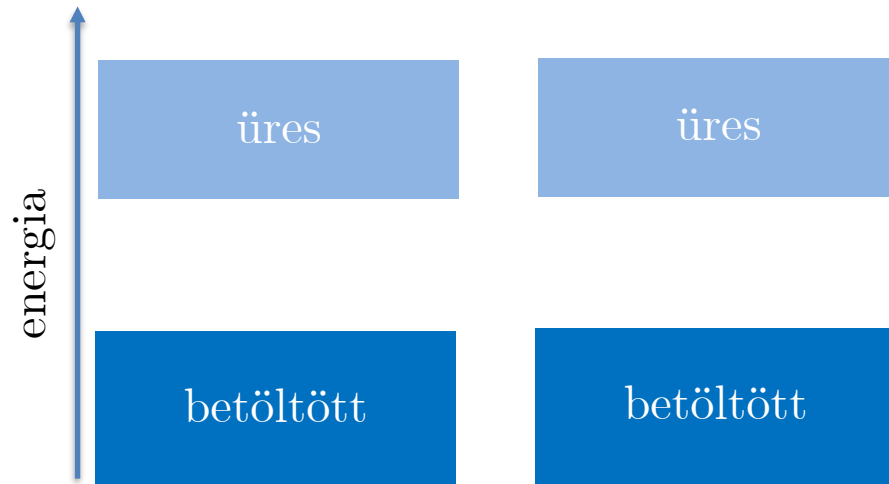
Fémek ellenállása nő a hőmérséklettel.

Hogyan látszik ez a sávképben?



Szigetelők – kötött elektronok

Elektromos tér: nincs



balra haladó



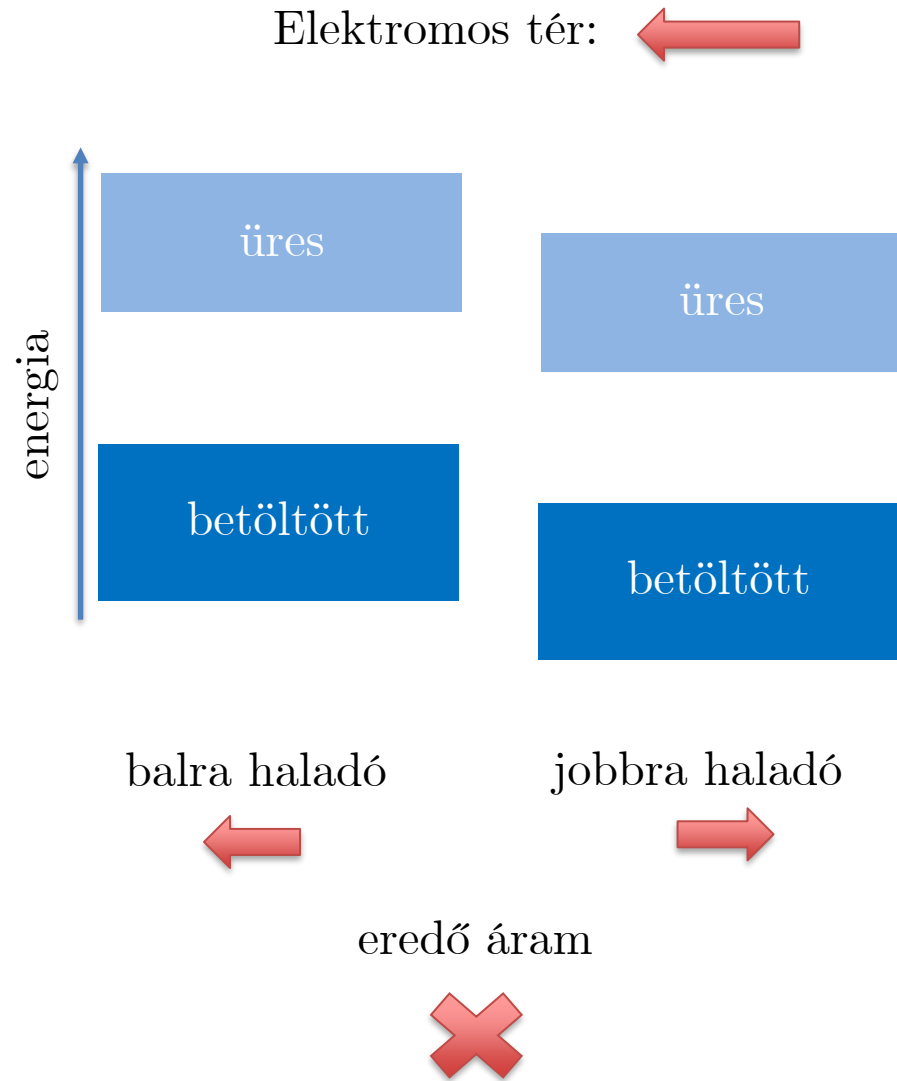
jobbra haladó



eredő áram

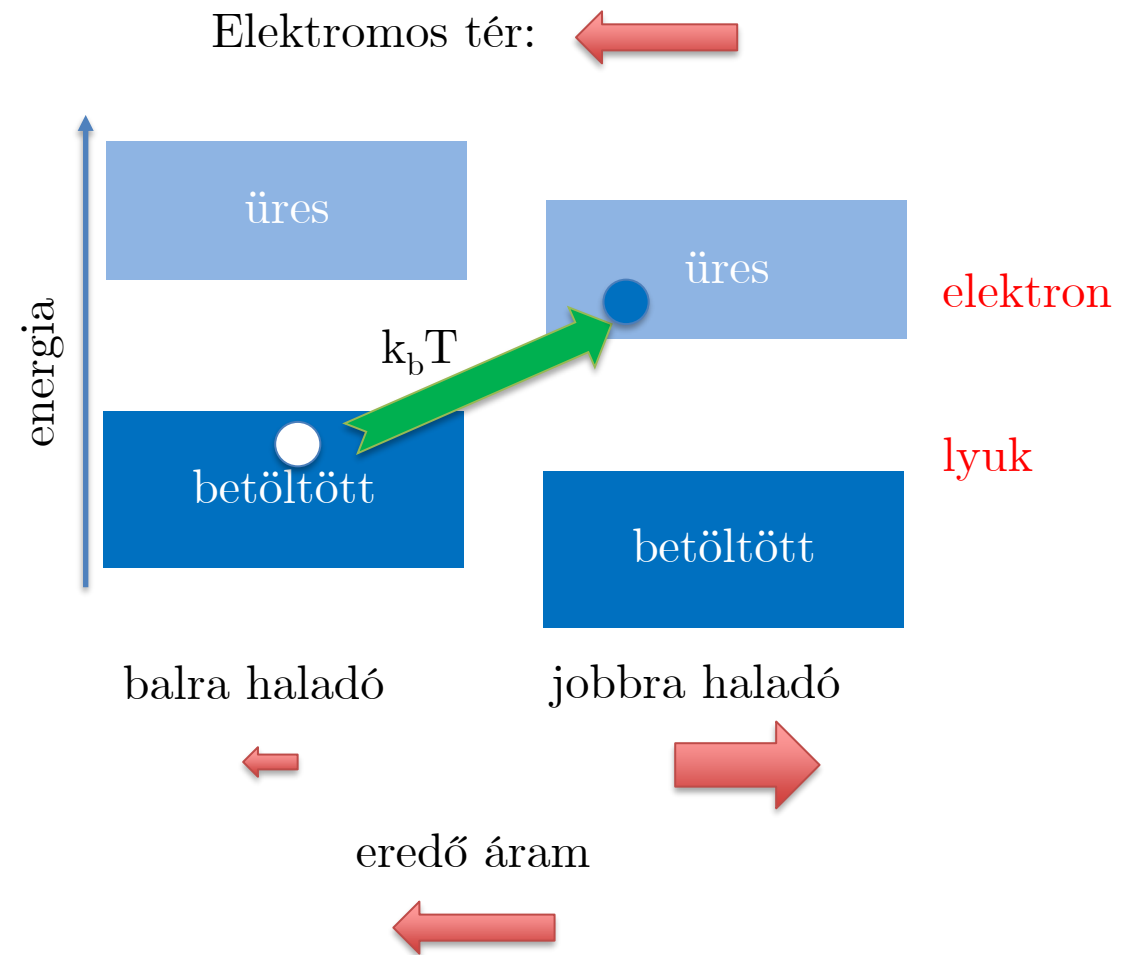
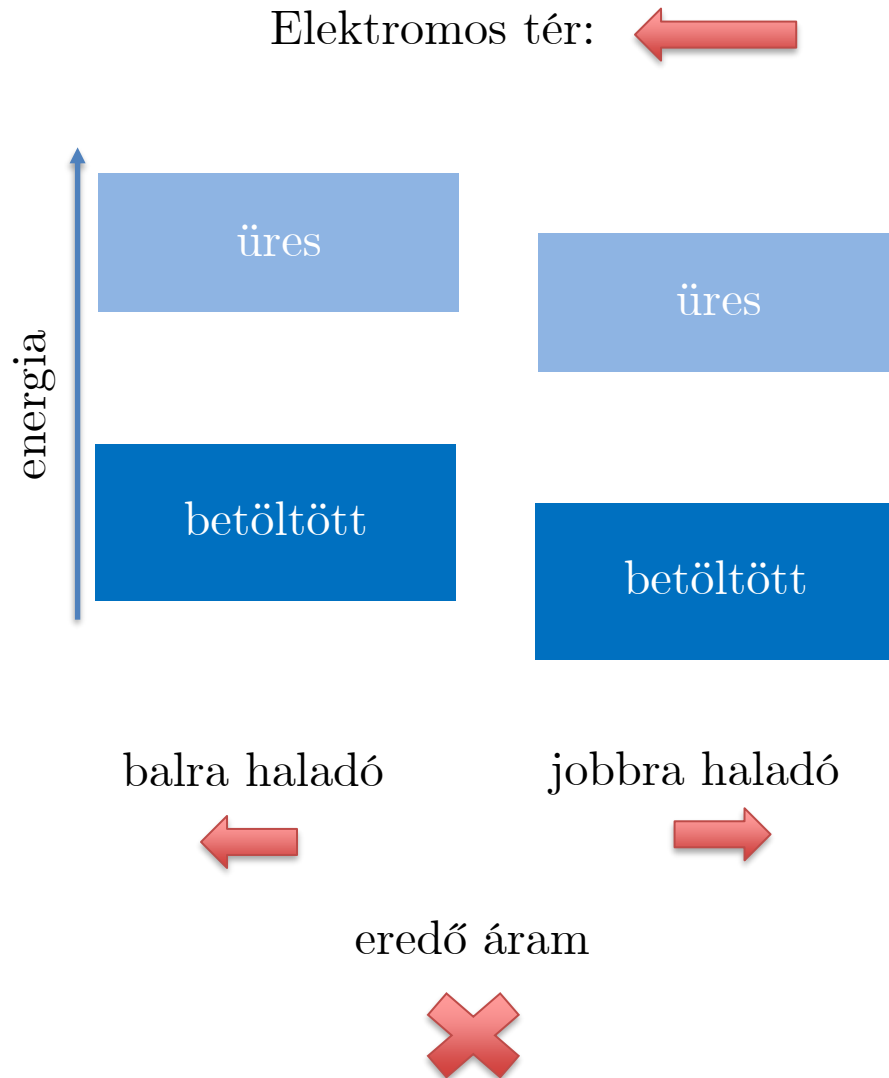


Szigetelők – kötött elektronok



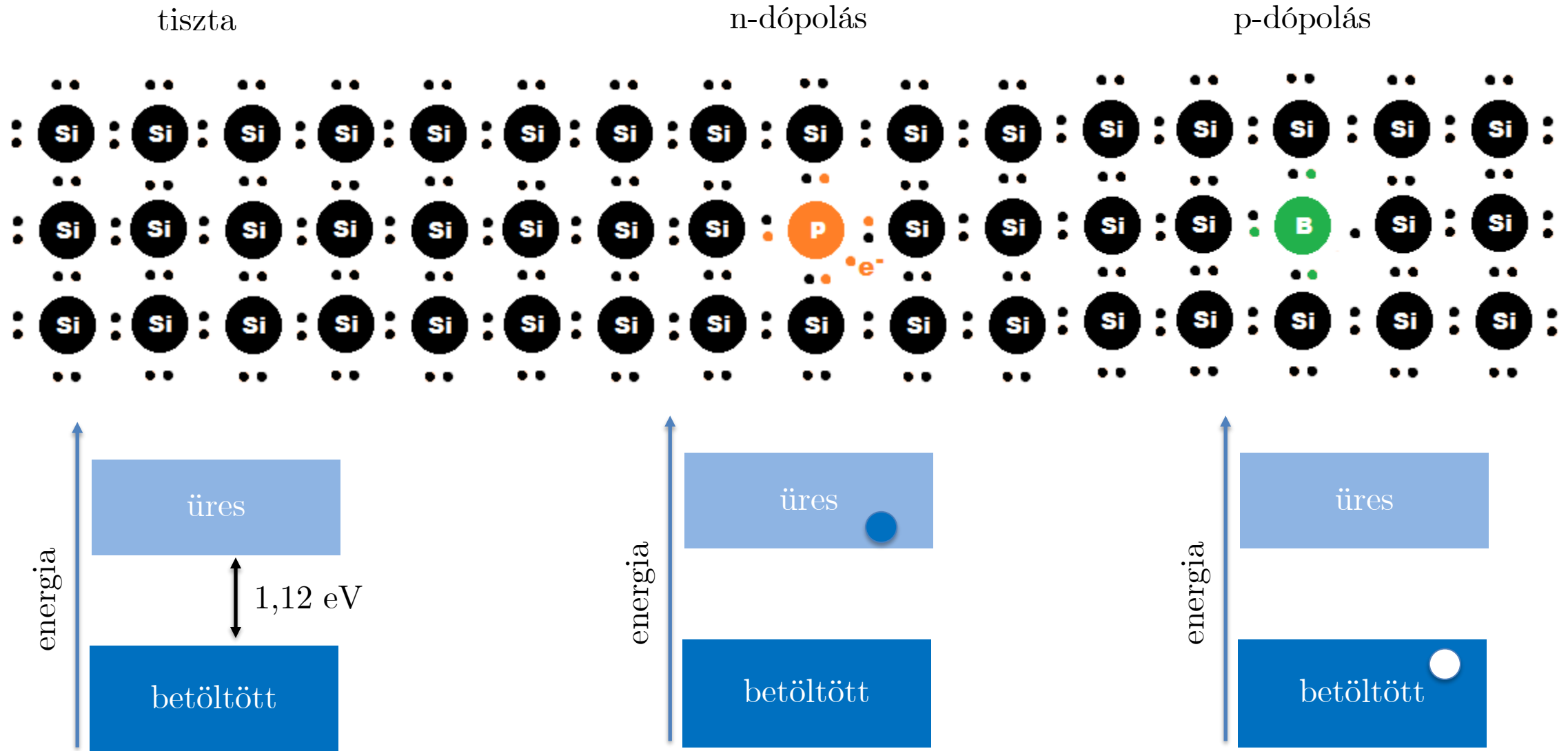
Szigetelők – kötött elektronok

Hőmérséklet szerepe:

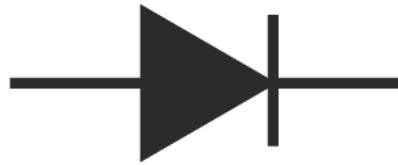


Szigetelők ellenállása csökken a hőmérséklettel.

Félvezetők - a dópolás művészete



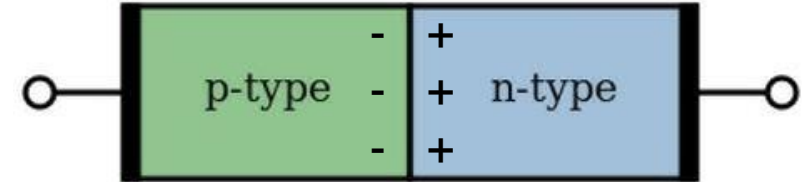
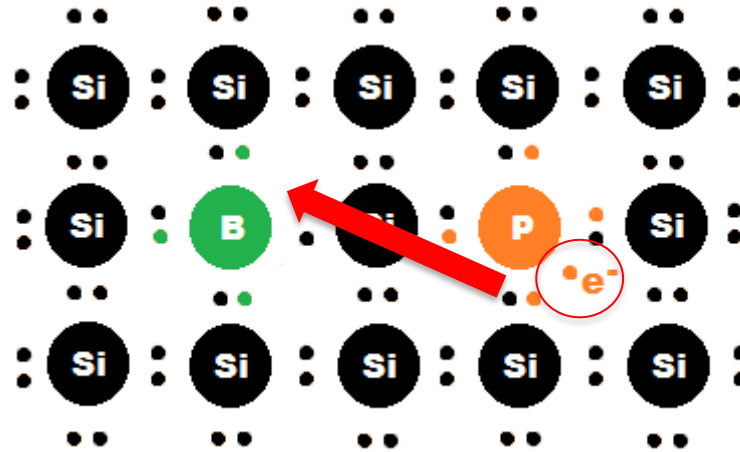
Diódák - egyenirányítás



áram

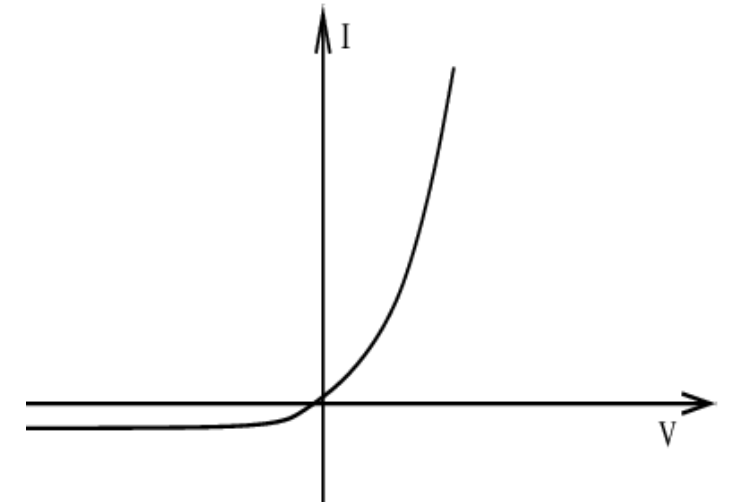
p-dópolás

n-dópolás



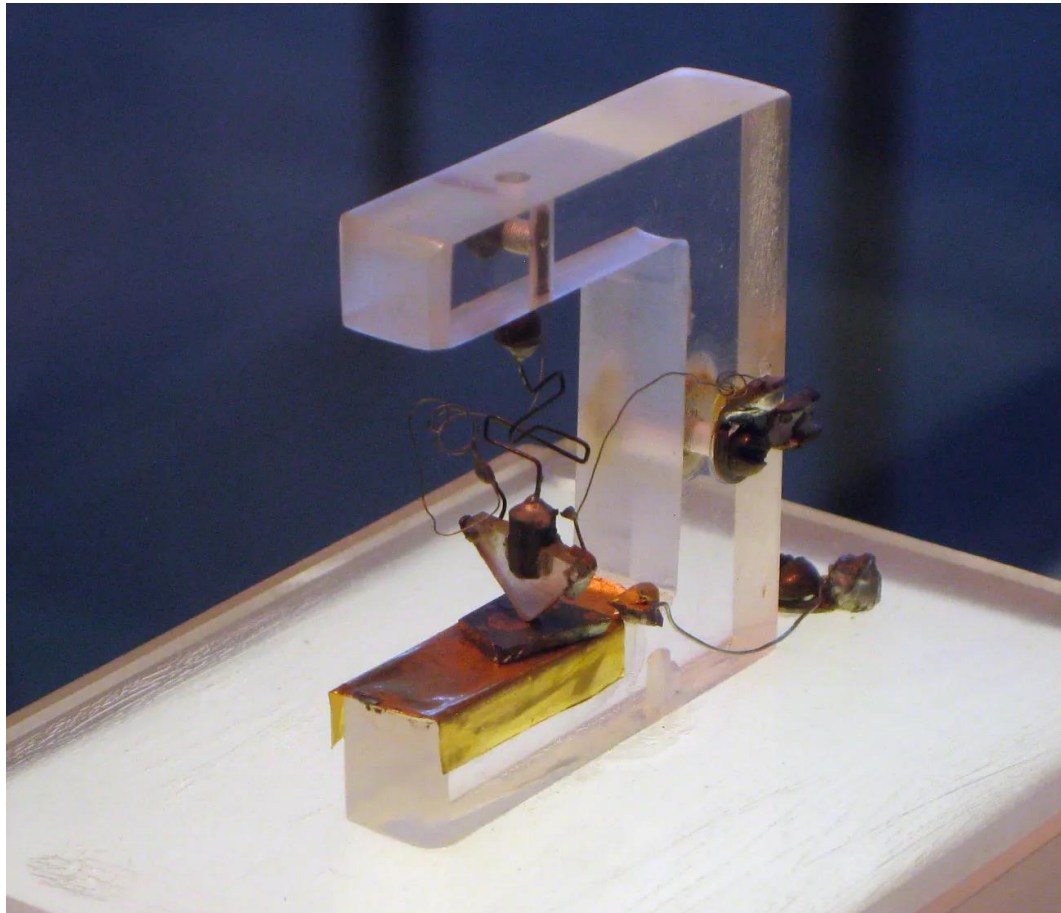
Rekombináció
a határon

energia

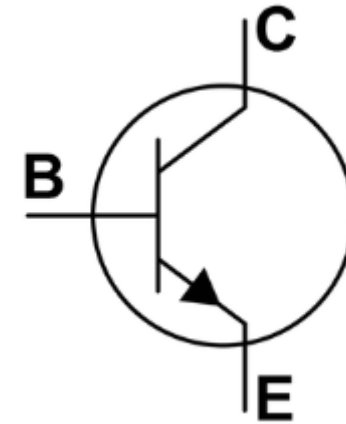


feszültség-áram karakterisztika

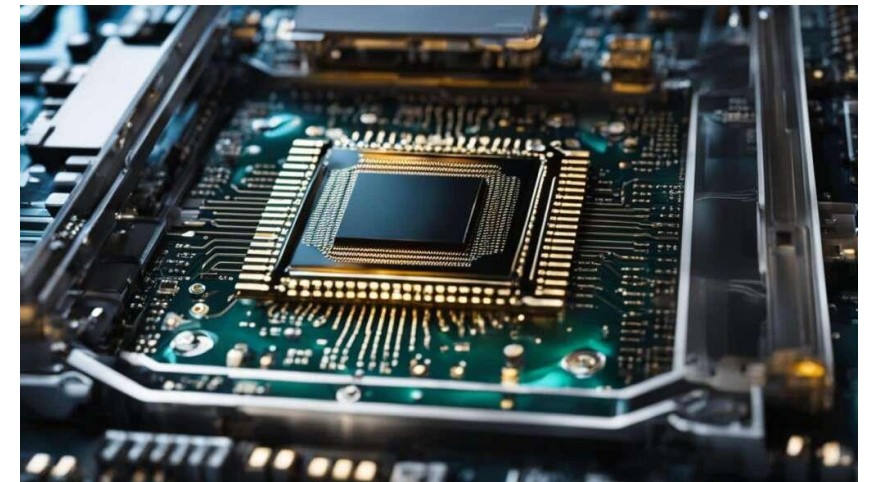
Tranzisztor – modern elektronika alapeleme



1948: Walter Brattain, John Bardeen, William Shockley

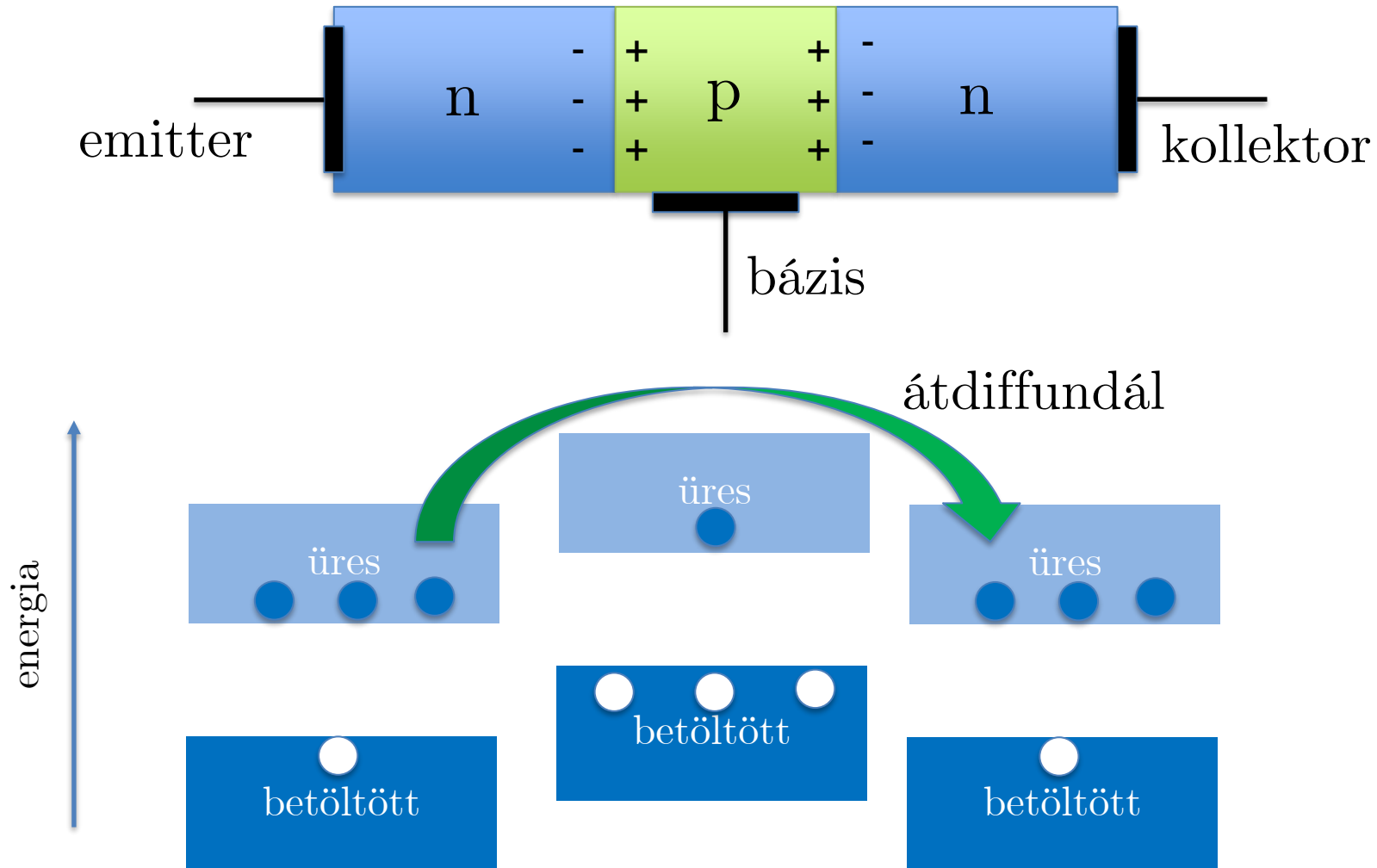


erősítés
kapcsoló üzem



milliárd tranzisztor

Tranzisztor – modern elektronika alapeleme

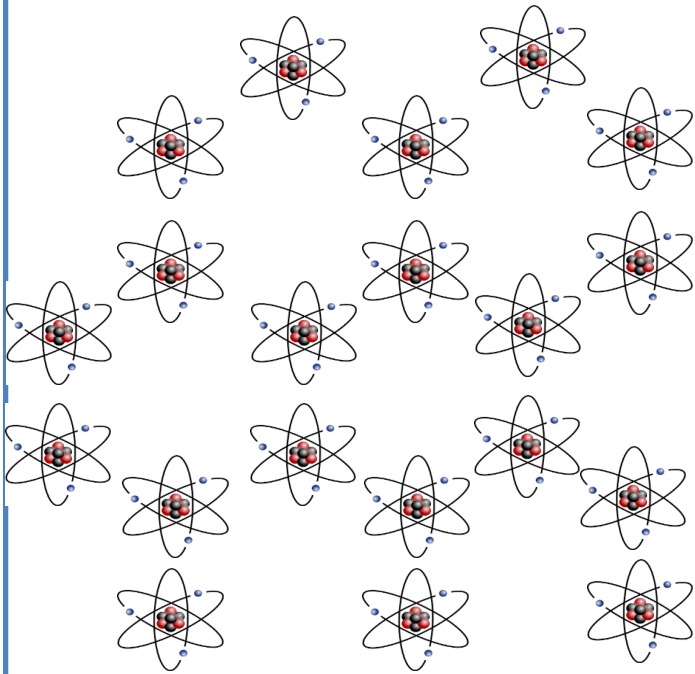


A bázis feszültségével (áramával) hangolható az emitter és kollektor közti áram.

**első
kvantum-
forradalom**

Összefoglalás – miről nem volt szó

Mikrovilág



periodikus szerkezet

nem periodikus szerkezet,
kristályhibák

elektronok (sávszerkezet)

atommagok (rácsrezgések)

mágneses momentumok

Makroszkópikus tulajdonságok

(kvalitatív, kvantitatív)

vezetőképessége (vezet, szigetel)

hővezetése

fajhője

mágnesezettsége

EM hullámmal való kölcsönhatás (színe)

Zárógondolatok

Meglátni a szépséget és a fizikát.



Köszönöm a figyelmet!