

Elektronállapotok szilárd anyagban

Sok-sok, azonos atomot rendezett szilárd testté egyesítve, az új rendszerbe azonos állapotú elektronok kerülnének. Ez a Pauli-elv szerint nem lehetséges. A természet úgy oldja meg ezt a problémát, hogy az eredetileg azonos állapotú elektronok mindegyike egy kicsit eltérő energiaszintre kerül, azaz az atomi energiaszintek felhasadnak, sávokat hoznak létre. Makroszkopikus méretű testben ez Avogadro szám nagyságrendű, 10^{23} számú alszintet jelent. A felhasadás mértéke kicsi. Elméletileg kimutatható, és kísérletekkel igazolható, hogy a sávok szélességét és egymáshoz viszonyított helyzetét az atomok közötti kölcsönhatás határozza meg. Ugyanazok az atomok más kristályrácsba rendeződve más sáv szerkezetet tud létrehozni. Gondoljuk a pl. a szén esetére. A lehetséges energiaértékeket tartalmazó sávok közötti energiatartományok az elektronok számára nem megengedettek, ezeket a sávokat *tiltott sávoknak*, vagy angolul *gap-nek* nevezik. A szilárd testekben a legkisebb energiájú üres sávot vezetési sávnak nevezzük, alatta helyezkedik el a tiltott sáv (ha van). A legfelső betöltött sáv pedig a valencia (vegyérték) sáv. Külső elektromos tér hatására az anyagok elektronjai eltérő módon viselkednek, ami alapvetően meghatározza elektromos tulajdonságaikat. Ennek megfelelően az anyagok az alábbi csoportokba oszthatók. A három lehetséges elrendeződés a következő:

Szigetelők

Ha a legfelső elektronokat tartalmazó sáv teljesen betöltött, akkor az elektronok a sávon belül nem változtathatják az energiájukat, így külső tér nem képes mozgásba hozni azokat. Ez azt jelenti, hogy ilyen módon nem vagyunk képesek áramot létrehozni. Ahhoz, hogy az ilyen anyagokban elektromos áram jöjjön létre, legalább a legfelső betöltött- és üres sáv közötti *tilos sáv szélességének* megfelelő energiát kell az elektronnal közölni. Így a legalsó üres sávba gerjeszteni kell fel az elektronokat és ezek mozoghatnak, azaz áram jöhetne létre. Szigetelő anyagok esetében a szokásos elektromos terek – pl. 220 volt-nak megfelelő tér – általában nem képesek erre, így az ilyen anyagok vezetőképessége igen kicsi, gyakorlatilag nulla. A tiltott sáv mérete ebben az esetben 5-6 eV vagy ennél nagyobb. Ezek az anyagok a *szigetelők*. Például a szénatomokból álló gyémánt esetében ez 5.5 eV. Megjegyzendő, hogy “abszolút jó” szigetelő nem létezik, mert a tiltott sáv függvényében mindig lehet találni olyan nagy feszültséget, amikor “átüt” a szigetelő és létrejön a vezetés.

Vezetők

Ha a legfelső sáv csak részben betöltött, vagy más szóval nincs tiltott sáv, akkor az elektronok ebben a sávban gyakorlatilag folytonosan növelhetik az energiájukat, így tetszőlegesen kicsi külső térrel is mozgásba hozhatók, azaz létrejön az áram. Az ilyen anyagok elektromos vezetőképessége nagy, ezek a jó *vezetők*. A szénatomok alkotta grafit pl. jó vezető

Félvezetők

Ha egy szigetelő típusú sávszerkezettel rendelkező anyag hőmérsékletét emeljük, akkor a hőmozgás átlagos energiája nő. Így egyre nő annak a valószínűsége is, hogy egy szigetelőben a hőmozgás hatására elektronok jutnak az eredetileg üres sávba, vagyis felgyorsítható töltéshordozók keletkeznek. Szobahőmérsékleten számos szigetelő-sávszerkezetű anyagnak jelentős vezetőképessége van, mert a hőmozgás az említett módon töltéshordozókat hoz létre a vezetési sávban. Az ilyen anyagokat *félvezetőknek* nevezik.

Az elektronnak az eredetileg üres sávba való átmenete egyszerre két töltéshordozót hoz létre: megjelenik egy elektron a vezetési sávban és keletkezik egy üres hely a betöltött a *vegyérték sávnak* nevezett sávban. A keletkezett üres hely lehetővé teszi az elektronok olyan mozgását a vegyérték-sávban, ami formálisan úgy is leírható, hogy pozitív töltésű elektron-hiány. Ezek a kvázirészecskék az ún. *lyukak* mozgékony pozitív töltéshordozóként viselkednek. A termikus gerjesztés tehát *gerjesztett elektron-lyuk párokat* hoz létre. Mivel a töltéshordozókat a hőmozgás kelti, várható, hogy a félvezetők vezetőképessége (illetve fajlagos ellenállása) erősen hőmérsékletfüggő és a hőmérséklet növelésével női a vezetőképesség.

Csináljunk egy becslést. Használjuk az ismert Boltzmann faktor a gerjesztett elektronok számának megbecsüléséhez. $P \sim \exp(-\varepsilon_g/2k_B T)$, ahol a ε_g a tiltott sáv nagysága. A 2-es faktor azért kell, mert csak a fele energia fordítódik az elektron gerjesztésére, a másik fele a lyuk létrehozására kell. Ha $\varepsilon_g = 4$ eV és szobahőmérsékleten vagyunk ($k_B T = 0,025$ eV), a valószínűség $P = \exp(-80) \cong 10^{-35}$. Mondjuk Avogadro számnyi elektron esetében ($6 \cdot 10^{23}$) 10^{-12} számú elektron kerül fel a vezetési sávba, ahol tudna mozogni. Ez azt jelenti, hogy gyakorlatilag nincs elektron és lyuk, ami a vezetést létre tudná hozni. Ha viszont $\varepsilon_g = 1$ eV, a valószínűség: 10^{-9} így nagyságrendileg 10^{14} gerjesztett elektron és

lyuk már létre tud hozni makroszkopikusan mérhető áramot. A Boltzmann képletből az is látszik, hogy a hőmérséklet növekedésével nő az áramot létrehozó töltések száma. Tipikus félvezetők tiltott sávja 1-2 eV. Legismertebb félvezető anyag a szilícium, amelyre alapozódik a XX. század második felében hatalmas fejlődésen átment félvezető ipar. Egy olyan anyag, amely vegyesen tartalmaz grafit és gyémánt lokális elrendezettséggel rendelkező szénatomot, szintén mutat félvezető tulajdonságot.

A szupravezetés

Bizonyos anyagok a hőmérséklet csökkenésekor egy anyagtól függő T_c kritikus hőmérsékletnél elvesztik az ellenállásukat és a $T < T_c$ hőmérsékleteken ellenállásuk nulla. Az első ilyen jelenséget 1911-ben K. Onnes figyelte meg higanyban. Az vette észre, hogy $T_c = 4.2$ K hőmérséklet alá lehűtve a higanyt az ellenállása nullává válik. Ezt a jelenséget szupravezetésnek, az ilyen anyagokat szupravezetőknek nevezik. Ezután számos másik elem esetében megfigyelték ezt a szupravezető állapotot. Pl.: Al, ($T_c = 1.14$ K), In ($T_c = 3.4$ K), Sn, ($T_c = 3.72$ K), stb. A szupravezető állapotban az anyag a külső mágneses teret "kiszorítja magából", a szupravezetőben nincs mágneses tér. A jelenség azzal függ össze, hogy alacsony hőmérsékleten a vezetési elektronok a kristály atomjainak közvetítésével egymással vonzó kölcsönhatásban álló, ún. „Cooper”-párokat képeznek. A párok a rácsrezgésekkel csak akkor tudnak kölcsönhatásba lépni (energiát felvenni), ha a kötésük megszüntetéséhez elegendő energiát kapnak. Alacsony hőmérsékleten ennek valószínűsége igen kicsi, így az elektronpárok nem tudnak a kristályráccsal kölcsönhatásba lépni, mozgásuk során tehát nem szóródnak: az ellenállás eltűnik. A hőmérséklet növekedésekor a hőmozgás szétszakítja a párokat, és visszaáll a normális vezetés. Ez a "klasszikus" szupravezetés igen alacsony (néhány K) hőmérsékleten következik be.

Újabban bizonyos többkomponensű rézoxidok kerámiákban sikerült szupravezető állapotot létrehozni magas, 100 K körüli hőmérsékleten. Ez azért ad némi reményt a mindennapi alkalmazhatóságnak, mert a könnyen előállítható cseppfolyós nitrogén hőmérséklete 77 K. A szupravezetés elméleti magyarázatát egyelőre nem ismerjük. Vannak egyéb érdekesnek tűnő szupravezetők. Például a 60 szénatomból álló futballabda alakú „fullerén” molekulákból álló kondenzált fázisba Rb teszünk szennyezést (dopoljuk), akkor $T_c = 27$ K kritikus hőmérsékletű Rb_3C_{60} szupravezetőt kapunk. Ha ugyanezt az anyagot Cs-mal dopoljuk és nagy nyomással összenyomjuk, akkor $T_c = 40$ K kritikus hőmérsékletű anyagot kapunk.

Az emberiség célja, hogy szobahőmérsékletű szupravezetőt tudjon készíteni, mert akkor közel minden második erőművet be lehetne zárni, mivel az elektromos energia kb. 40 % elveszik a szállítás során. A szupravezetőben egyszer létrehozott áram igen sokáig megmarad, másrészt nincs Joule-hő, ezért igen nagy áramok, nagy mágneses terek hozhatók létre.

Meissner effektus

1933-ban, Meissner és Ochsenfeld felfedezték, hogy a szupravezetők kiszorítják magukból a mágneses teret. A külső mágneses tér bizonyos mértékéig, az ún. kritikus mágneses mezőig a szupravezetők teljesen kiszorítják magukból a mágneses fluxust. Ha egy nem szupravezető állapotban lévő anyagra egy mágneset teszünk és az anyagot elkezdjük hűteni, akkor a kritikus hőmérséklet alá hűtve a mágnes felemelkedik. Ennek oka, hogy a szupravezető állapotban az anyag kiszorítja magából az eddig rajta keresztülmenő mágneses erővonalakat. A természet erre úgy reagál, hogy felemeli a mágneset, így a zárt erővonalak a mágnes és a szupravezető között el tudnak helyezkedni.