

Elektronikai anyagtudomány

1. előadás

Dr. Bonyár Attila, egyetemi docens bonyar.attila@vik.bme.hu

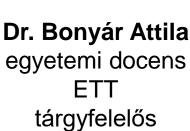
Budapest, 2023.03.02.



Bemutatkozás - a tantárgy előadói

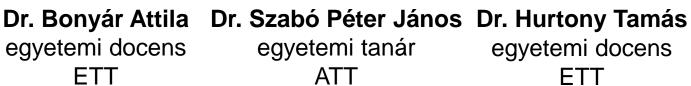
Magyar és angol kurzusok





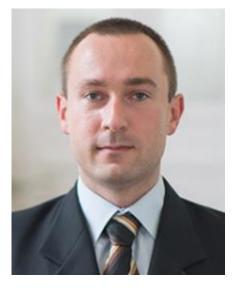


egyetemi tanár **ATT**



bonyar.attila@vik.bme.hu szabo.peter.janos@gpk.bme.hu hurtony.tamas@vik.bme.hu

Német kurzus



Dr. Májlinger Kornél Dr. Sántha Hunor egyetemi docens **ATT**



egyetemi docens ETT

majlinger.kornel@gpk.bme.hu santha.hunor@vik.bme.hu



Bemutatkozás – a tárgyfelelős



- > 2009: okleveles villamosmérnök (ötéves képzés),
- > 2011: egészségügyi mérnök (MSc),
- 2014: PhD (Fémes nanoszerkezetek vizsgálata atomierő mikroszkópiával (AFM)),
- > 2021: Habilitáció (Plazmonikus elvű bioérzékelők kutatásfejlesztése),
- Oktatott tárgyak: Nanotudomány (MSc), Alkalmazott nanotudomány (PhD), Bio- és nanoszenzorika (MSc), Nanoelektronika, nanotechnológia (MSc), Alkalmazott szenzorika (MSc).
- > Kutatási területek: bioszenzorok, optikai (plazmonika) szenzorok, nanometrológia (AFM).
- Fontosabb pozíciók: villamosmérnöki szakbizottság (2016-), egészségügyimérnöki szakbizottság (2018-), MTA-EETTB (2017-), IEEE Nanotechnology Council (NTC) TC-11 chair (2021-).



<u>Az anyagtudomány jelentése</u>: az anyagok szerkezete és tulajdonságai közötti kapcsolatok tudománya¹.

Elektronikai anyagtudomány c. természettudományos alaptárgy elsődleges célja a villamosmérnökök számára szükséges alapvető anyagszerkezeti és anyagtechnológiai ismeretek átadása a hallgatóknak².

Ez magában foglalja a különböző anyagmodellek megismerését, kristálytani alapismeretek elsajátítását, valamint a főbb, villamosmérnöki gyakorlatban alkalmazott vezető, félvezető, szigetelő, mágneses és optikai anyagok alapvető fizikai tulajdonságainak és ebből adódó viselkedésének megértését².

A tárgy további célja a geometria skálázásból (méretcsökkentésből) adódó anyagtulajdonság megváltozások, illetve fontosabb kvantummechanikai jelenségek ismertetése, amelyek a modern mikroelektronika, illetve elektronikus eszközök működésének alapját képezik².



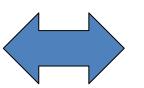
¹ Dr. Prohászka János: Bevezetés az anyagtudományba

² A tantárgy TAD-ja

<u>Az anyagtechnológia jelentése</u>: A technológia szó lépésekből álló eljárások és módszerek összességére utal, amellyel egy adott cél elérhető (pl. egy termék előállítása). Az anyagtechnológia az anyagok szerkezete és tulajdonsága között feltárt kapcsolatot használja új anyagok, szerkezetek előállítására, amelyek tervezett tulajdonságokkal rendelkeznek.

Anyagcsaládok:

Fémek, ötvözetek
Félvezető és szigetelő kristályok
Kerámiák és üvegek
Polimerek
Kompozitok



Anyagi tulajdonságok:

Mechanikai (terhelés, alakváltozás)

Elektromos (vezetési tul. és E-tér hatása)

Mágneses (mágneses tér hatása)

Termikus (hővezetés, hőátadás...)

Optikai (reflexió, áteresztés...)

Kémiai (oldhatóság, korrózió...)



Az első három előadás célja alulról felfelé építkezve (bottom-up) felépíteni egy anyagmodellt, amely segítségével az anyagcsaládok fő fizikai tulajdonságai megérthetővé, levezethetővé válnak.

Ehhez rendszerezzük a korábbi alapvető fizikai/kémiai ismereteinket, valamint egyesítjük azokat modern fizikai ismeretekkel.

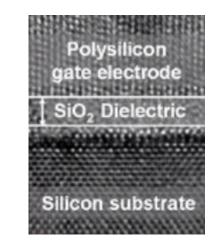
A többi előadás az itt felépített modellre támaszkodva mélyül el az anyagcsaládok fizikai tulajdonságiban.



Miért fontos az anyagtudomány? Hol tart a technológia?

Példa: nanoelektronika – mindenki zsebében.





Elektronmikroszkópos kép egy tranzisztor gate-elektródájáról (nem az SM8450!) Meg tudjuk számolni az atomokat...

Egy marék homok

Qualcomm SM8450 Snapdragon 8 Gen 1 (2022) 4 nm-es technológia (4LPE, Samsung) 145MTr/mm² tranzisztor sűrűség



Milyen ismeretekre épít az Elektronikai anyagtudomány?

- > Alapvető középiskolai fizikai, matematikai és kémiai ismeretek.
- A BSc képzésen párhuzamosan tanult fizikai ismeretek (elsősorban Fizika II).

Milyen későbbi tantárgyak építenek az Elektronikai anyagtudományra?

- > Kötelező tárgyak a BSc képzésen:
 - > Elektronikai Technológia (3. szemeszter),
 - Mikroelektronika (3. szemeszter).
- > Mikroelektronikai hardvertervezés és integráció BSc specializáció (EET, ETT):
 - Mikroelektronikai tervezés és integráció ágazat (EET),
 - > Elektronikai hardvertervezés és integráció ágazat (ETT).
- > MSc képzés választható természettudományos tárgyai:
 - Fizika 3, Nanotudomány, Fotonikai eszközök, Villamos szigetelések és kisülések.
- > MSc képzés fő és mellékspecializációk:
 - Elektronikai rendszerintegráció főspecializáció (EET-ETT),
 - > Alkalmazott szenzorika mellékspecializáció (ETT),
 - Zöld villamos energetika mellékspecializáció (EET-VET).



A tantárgy féléves menetrendje

- 1. hét: Tárgyismertetés bevezetés, atommodellek. (BA)
- 2. hét: Kémiai kötések és makroszkopikus tulajdonságok kapcsolata. (BA)
- 3. hét: Elektronszerkezet, sávszerkezet, vezetési tulajdonságok. (BA)
- 4. hét: Kristálytani alapismeretek, kristálytípusok és hibák. (SZPJ)
- 5. hét: Egykristályok, polikristályok, amorf anyagok és polimerek. Ötvözetek. (SZPJ)
- 6. hét: *Tavaszi szünet* 2023-04-17, H 18-20
- 7. hét: Fémek mechanikai tulajdonságai, azok vizsgálata. (SZPJ) ZH1
- 8. hét: Fémek vezetési tulajdonságai. Vezeték és ellenállás anyagok. (SZPJ)
- 9. hét: Mágneses anyagok. Ferro, para és diamágneses anyagok. (SZPJ)
- 10. hét: Félvezető anyagok tulajdonságai, félvezető egykristályok. (HT)
- 11. hét: Félvezető adalékolási eljárások, szilícium vegyületek. (HT)
- 12. hét: Szigetelő anyagok villamos tulajdonságai. (HT)
- 13. hét: Optikai anyagok, sugárzások, fény-anyag kölcsönhatás. (HT)
- 14. hét: A geometriai skálázás hatása, alapvető kvantummechanikai effektusok. (BA)



ZH2

2023-05-26, P 8-10

A tantárgy követelménye

- > A félév során a tárgyból két nagyZH-t írunk (egyenként 60 perces).
- > Az aláírás megszerzésének feltétele mindkét ZH elégséges teljesítése (50%).
- > A félév végi megajánlott jegy a két ZH 50-50%-os átlagával alakul ki.
- Az összegző értékelések pótlására, javítására egyszeri lehetőség biztosított (részenként).
- Pót-pótzárthelyi csak a korábbi zárthelyik teljesítésének alacsony sikeressége (kevesebb, mint egyharmad) esetén biztosított.
- > Ponthatárok a végső elszámolásnál (%):
 - **■** 50-62% 2
 - **■** 63-74% 3
 - **■** 75-86% 4
 - **87-100% 5**

Még egyeztetni fogjuk



Felkészülés a zárthelyire

- > Alapvetően csak azt kérjük számon, ami az előadáson elhangzik és a diasor tartalmazza.
- Az előadások végén felsoroljuk a felkészüléshez javasolt irodalmat.
- > Az előadások végén ellenőrző kérdésekkel segítjük a megértés elmélyítését.
- > Az előadások anyagai elérhetőek itt:
 - > MS Teams csoport.

Még egyeztetni



Áttekintés (az első három előadás)

- 1. Bevezetés: A négy alapelemtől a standard modelling
- 2. Az atom felépítése atommodellek
- 3. Az elemek periódusos rendszere
- 4. Kémiai kötések és a makroszkopikus fizikai tulajdonságok kapcsolata
- 5. Az anyagok elektronszerkezete



1. Bevezetés

Things Natural

Méretskálák

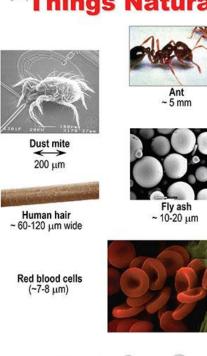
Maroszkopikus (10⁻⁴<) Mikroszkopikus (10⁻⁷-10⁻⁴) Nano-tartomány (10⁻¹⁰-10⁻⁷) Szubatomi (<10⁻¹⁰)

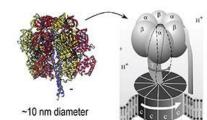
Az egyes tartományokon megváltozik:

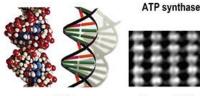
- a struktúra,
- a fizikai tulajdonságok,
- az előállítási/megmunkálási technológiák.

Lásd későbbi előadásban:

a geometriai skálázás hatásai.

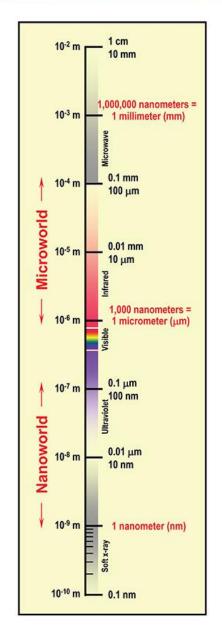






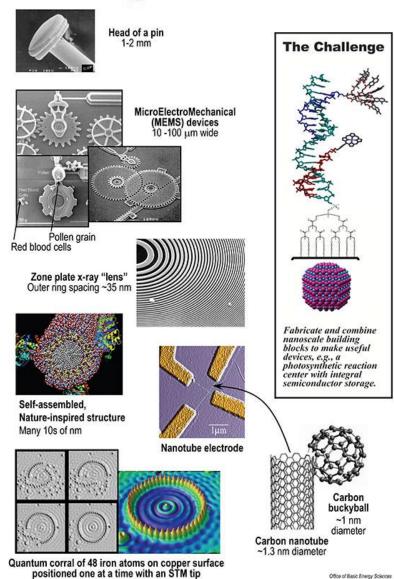
DNA ~2-1/2 nm diameter

Atoms of silicon spacing 0.078 nm



The Scale of Things - Nanometers and More

Things Manmade



Corral diameter 14 nm



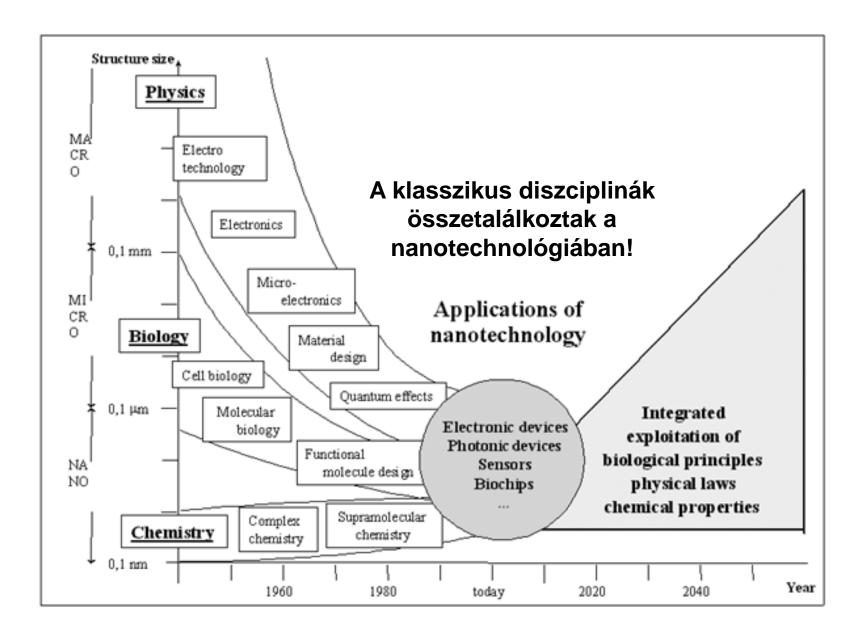


1. Bevezetés

Ma a state-of-the-art technológia a nanotechnológia.

A nanotechnológia pedig multidiszciplináris!

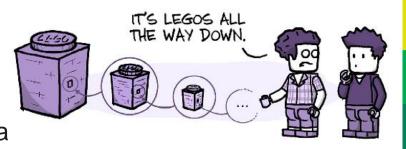
Ezért villamosmérnökként sem szabad megijednünk alapvető kémiai, biológiai fogalmaktól.





1. Bevezetés

FIRE CONTROL WATER

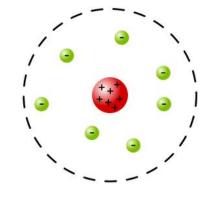


Az atom (mint alapkő) története:

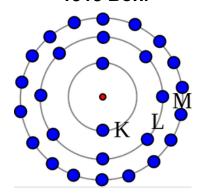
- Az ókori görögök (Empedoklész ~i.e. 450) négy eleme és tulajdonsága
- Arisztotelész (~i.e. 330) folytonos anyaga
- Atom = oszthatatlan Demokritosz (~i.e. 420), atomisták
- 1803 John Dalton molekulákká csoportosulás arányai
- 1905 Einstein Brown mozgás magyarázata
- 1897 Thomson elektron felfedezése: az atom nem is oszthatatlan
- 1904 Thomson 'szilvás puding' atommodell
- 1911 Rutherford pozitív atommag felfedezése, 'planetáris' modell
- 1913 Bohr rögzített elektron pályák és energia állapotok
- 1932 Chadwick neutron is van a magban
- 1964 Murray Gell-Mann kvark elmélet (felfedezésük egészen 1990ig)
- Azóta: Standard modell, Higgs-bozon stb.



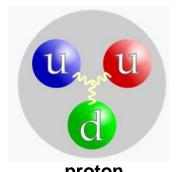
1911 Rutherford



1913 Bohr



1964 kvark-elmélet



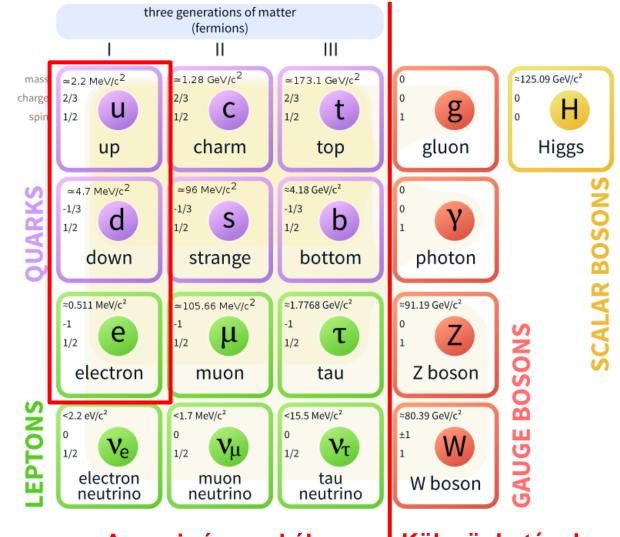
proton



Standard Model of Elementary Particles

Érdekességek.

- Minél nagyobb egy részecske energiája, annál nehezebb "előállítani". A nagyenergiájú ütköztetésekhez kellett az emberiség technológiai fejlettsége is, ez késleltette a felfedezésüket.
- A körülöttünk lévő anyag felépítéséhez mindössze csak a bekeretezett három részecske kell!
- Az anyagi részecskék magasabb generációinak felfedezése mutat hasonlóságot a periódusos rendszer kialakulásával (lásd később), megjósolták a létezésüket.





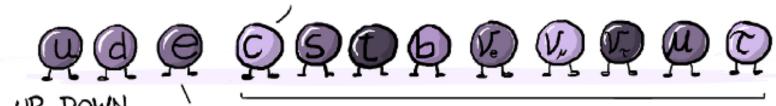
Az összes elemi részecske két nagy csoportba sorolható. Az anyagokat a **fermionok** építik fel, míg a kölcsönhatásokat a **bozonok** (mint kvázi-részecskék) hordozzák.

A fermionok a **Fermi-Dirac statisztika** szerint töltik be a lehetséges energiaállapotokat, a bozonok az **Einstein-Bose statisztika** szerint. Előbbiek engedelmeskednek a **Pauli-féle kizárási** elvnek és nem egész spinűek, míg utóbbiak nem engedelmeskednek és egész spinnel rendelkeznek.

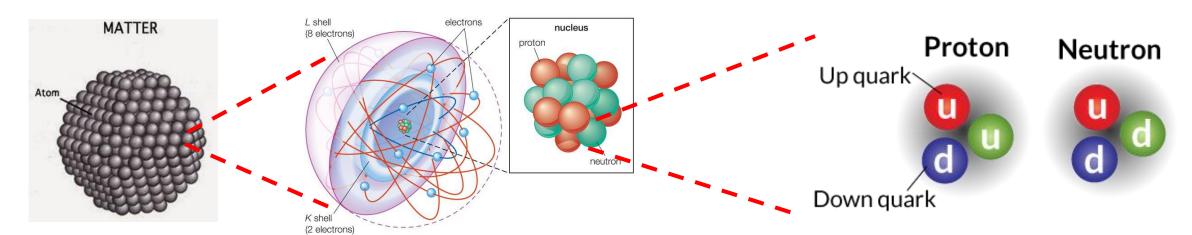
A négy alapvető fizikai kölcsönhatás az **elektromágneses** (foton), a **gyenge magerő** (W, Z), az **erős magerő** (gluon) és a **gravitáció** (Higgs). A **kvarkok** építik fel az atommagot alkotó **protonokat** és **neutronokat** (a kvarkok által felépített részecskéket *hadronoknak* is hívjuk). A **leptonok** nem érzik az erős magerőt, és van belőlük töltött részecske (pl. **elektron**) és töltéssel nem rendelkező (pl. *neutrínó*).

Szerencsénkre mindahoz, amivel az anyagtudomány foglalkozik csak három fermionra (up, down kvark, elektron) és egy bozonra (foton) lesz szükségünk [©]

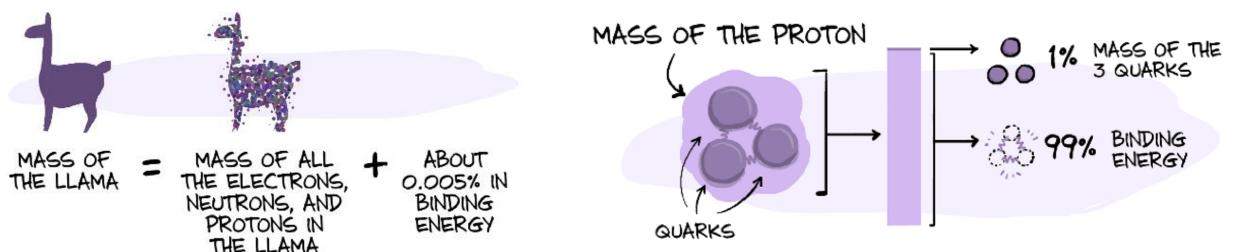
WE PREFER THE TERM "TEMPORARILY UNEMPLOYED"





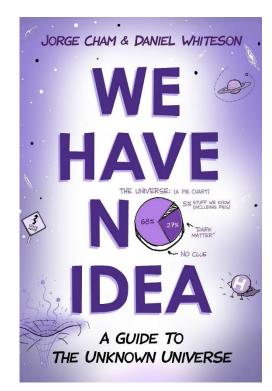


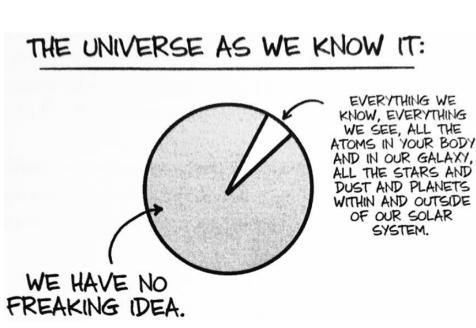
Erdekesség (1): Ha szétdaraboljuk az anyagot atomokra, majd az atomokat protonokra, neutronokra és elektronokra, akkor az anyag kiindulási tömegének 99.995% p+n+e tömege, 0.005%-a az őket összetartó erőkben tárolt energia. Viszont, ha a magot alkotó protonokat vagy neutronokat szétdarabolom 1% a felépítő kvarkok tömege és 99% a köztük lévő kötési energia.

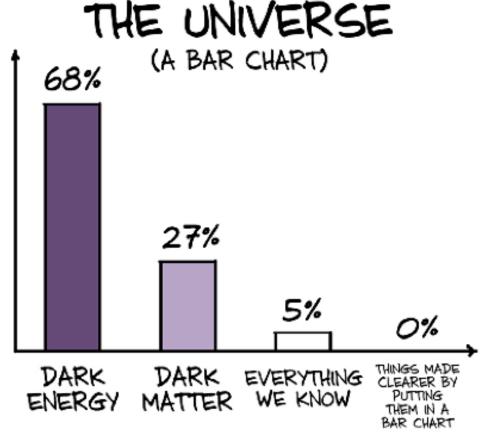


Érdekesség (2): Minden általunk ismert, fermionokból felépülő anyag az univerzum egészének (összes energiájának), csak az 5%-át teszi ki.

Könyvajánló: Aki közérthetően szeretné megérteni miért.







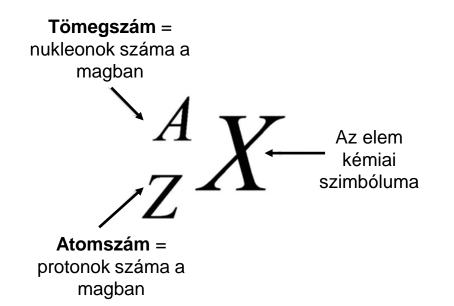


20/32

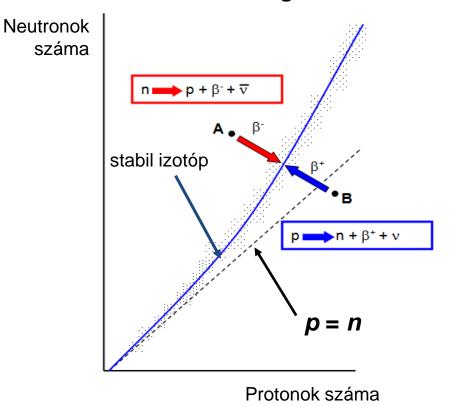
2. Az atom felépítése

Az atom három részecskéből, az atommagban (*nukleusz*) található **protonokból** és **neutronokból** (*nukleonokból*), valamint az atommag körül orbitáló **elektronokból** áll.

- > semleges atomban: protonok száma (p) = elektronok száma (e)
- rendszám (ritkán atomszám, Z) = p
- \triangleright tömegszám (A) = p + n
- \triangleright a stabilitás feltétele: $n \ge p$ (lásd az ábrán)
- izotóp: azonos protonszám mellett különböző számú neutronnal rendelkező elemek



A stabil atommag feltétele





A Bohr féle atommodell (Bohr-Rutherford-modell, 1913)

Az elektronok energiaveszteség nélkül csak a magtól adott, diszkrét távolságra elhelyezkedő, stacionárius orbitokon helyezkedhetnek el. Az adott távolsághoz tartozó orbitokat elektronhéjaknak nevezzük.

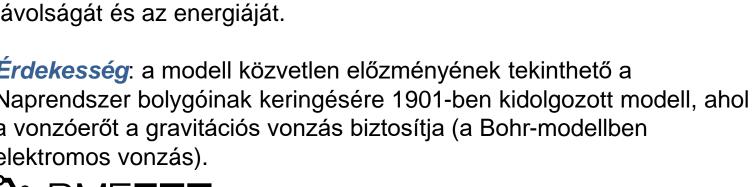
Az elektronhéjat a **főkvantumszámmal (n)** jellemezzük, és a magtól távolodva K, L, M, N betűkkel jelöljük.

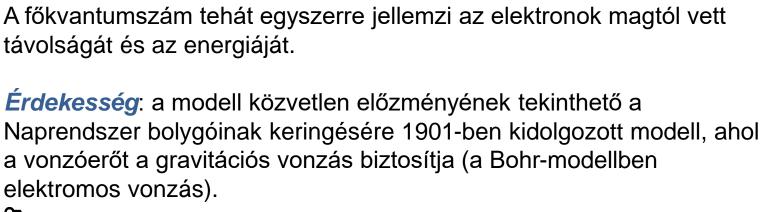
$$n_{\rm K} = 1$$
, $n_{\rm L} = 2$, $n_{\rm M} = 3$, $n_{\rm N} = 4$...

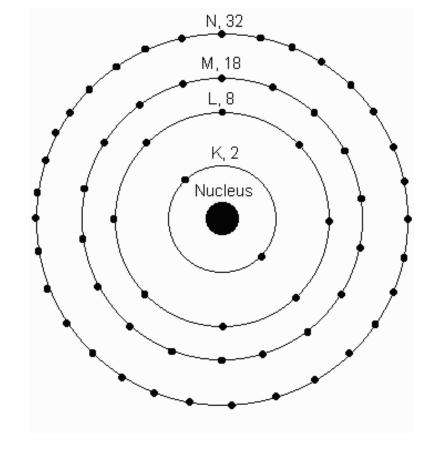
A héjon lévő maximális elektronok száma: 2n² azaz: 2, 8, 18, 32...

távolságát és az energiáját.

Naprendszer bolygóinak keringésére 1901-ben kidolgozott modell, ahol a vonzóerőt a gravitációs vonzás biztosítja (a Bohr-modellben elektromos vonzás).







A Bohr-féle atommodell (Bohr-Rutherford-modell, 1913)

Az elektronokat a mag vonzóereje tartja cirkuláris pályán. Így a mozgásból adódó centripetális erő megegyezik a Coulomb-vonzás erejével, ahol r a körpálya sugara, $m_{\rm e}$ az elektron tömege, e a töltése, v pedig a sebessége. Z a protonok száma, k pedig a Coulomb-állandó.

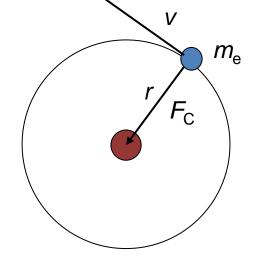
$$F_C = \frac{m_e \cdot v^2}{r} = k \frac{Z \cdot e^2}{r^2}$$

A pálya sugara és a perdület (impulzusmomentum, L) közötti **kvantálási szabály**, ahol n a főkvantumszám, h és \hbar a sima, ill. redukált Panck-állandók.

$$L = r \times p = r \cdot m_e \cdot v = n \cdot \hbar = n \frac{h}{2\pi}$$

A két egyenletből az adott *n*-hez tartozó sugár, sebesség és energia is kifejezhető.

$$r_n = \frac{\hbar^2}{k \cdot Z \cdot m_e \cdot e^2} \cdot n^2; \quad v_n = \frac{k \cdot Z \cdot e^2}{\hbar^2} \cdot \frac{1}{n}; \quad E_n = -\frac{m_e \cdot k^2 \cdot Z^2 \cdot e^4}{2\hbar^2} \cdot \frac{1}{n^2}$$





A Bohr-féle atommodell (Bohr-Rutherford-modell, 1913)

 E_n negatív előjele jelzi, hogy az elektron kötve van, valamint látható, hogy az energia fordítottan arányos a sugárral és 1/n²-el arányosan nő a magtól távolodva.

Példa: behelyettesítve a fizikai állandókat a hidrogénre (Z=1): $E_n = (-13.6 \ eV) \cdot \frac{1}{m^2}$

Az így adódó energiaszintek: -13.6 eV; -3.4 eV; -1.5 eV...

Megfordítva, az energia, ami ahhoz szükséges, hogy az elektront kiszedjük a kötésből az ionizációs energia. Ez pl. a hidrogén egy elektronjára 13.6 eV.

Ha egy elektron magasabb energiaszintről alacsonyabbra kerül, az energiakülönbözötet egy foton formájában sugározza ki, ahol f a foton frekvenciája.

$$\Delta E = E_{n+1} - E_n = -\frac{m_e \cdot k^2 \cdot Z^2 \cdot e^4}{2\hbar^2} \cdot \left(\frac{1}{(n+1)^2} - \frac{1}{n^2}\right) = h \cdot f$$
Megjegyzés: egynél több elektropok közötti kölcsönbatást

Megjegyzés: egynél több elektron elektronok közötti kölcsönhatást is, ami analitikusan nem kezelhető!

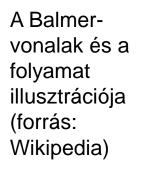


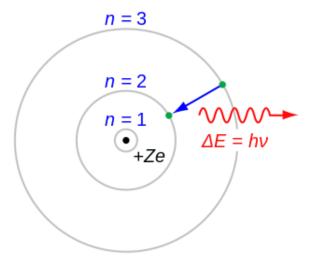
A Bohr-féle atommodell alkalmazása:

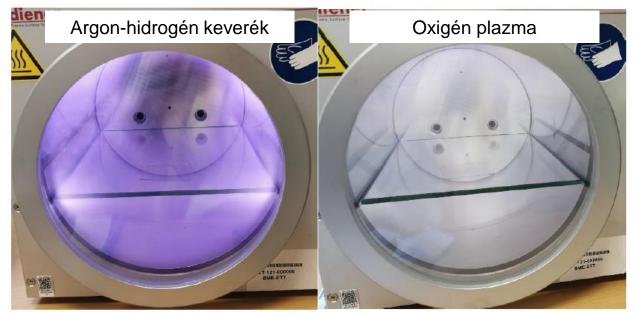
Példa (1): A látható fény energia (hullámhossz) tartománya 3.1 eV (~400 nm) – 1.55 eV (~800 nm). A hidrogénre számolt energiaszintek esetén *n*≥3 és *n*=2 közötti átmenetekre az energia ebben a tartományban lehet. Ezek az ún. **Balmer-vonalak**. Ez a jelenség adja az **plazmák (ionizált gázok) karakterisztikus színét**!



Különböző plazmák RFgenerátorban (saját képek)





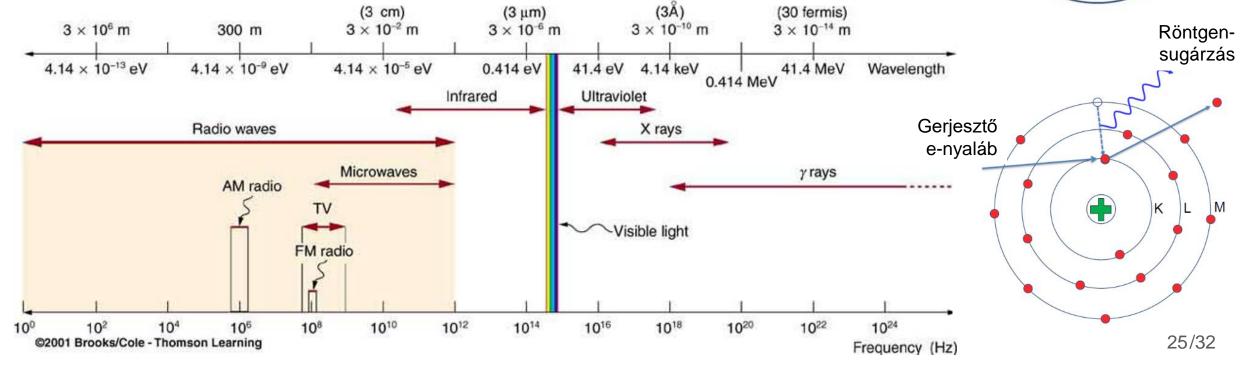


A Bohr-féle atommodell alkalmazása (2):

Példa (2): Az energiakülönbség alumínium (E_L - E_K) átmenete között 1487 eV.

Ez az energia Röntgen-tartományban van, ez a karakterisztikus Röntgen-sugárzás.

(Ez az alumínium ún. K_{α} vonala.) Ez teszi lehetővé a **Röntgenes elemanalízist**.



A kvantummechanikai atommodell

Kiindulás: de Broglie megmutatta, hogy az anyagi részecskéknek is hullámtemészete van. Schrödinger bevezette a valószínűség sűrűség fogalmát és a hullámegyenletet.

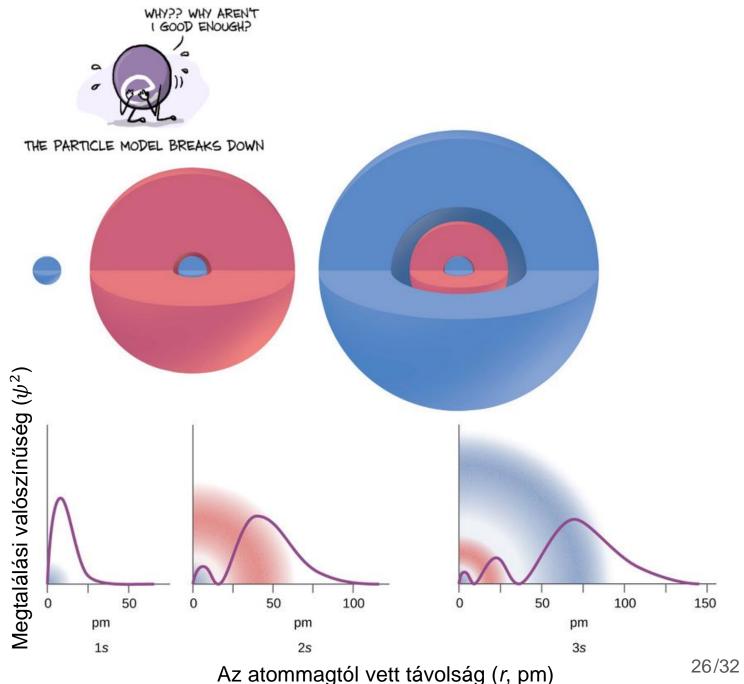
Az elektronok de Broglie-hullámhossza (λ)

$$\lambda = \frac{h}{m \cdot v}$$

A Schrödinger-egyenlet

$$((\widehat{H} \cdot \psi = E \cdot \psi))$$





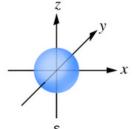
A kvantummechanikai atommodell

Elektronpálya (atompálya): az a térrész, amelyen az elektron megtalálási valószínűsége 90%.

Elektronhéj: az atommagtól azonos távolságra lévő pályák összessége (K, L, M, N). Az elektronhéjat a főkvantumszámmal (n) jellemezzük.

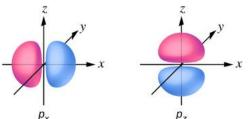
Alhéj: azonos nagyságú és alakú elektronpályák. s, p, d és f alhéjakat különböztetünk meg, a **mellékkvantumszám (I)** jellemzi őket (n-1 \geq l \geq 0). (sharp, principal, diffuse, and fundamental). Jellemzi továbbá az elektron mag körüli mozgásából származó impulzusmomentumát (perdületét) is.

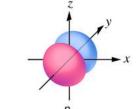
S

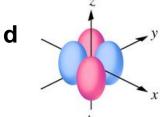


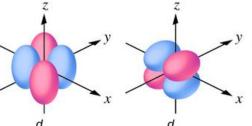
kvantumszám alhéjon Mágneses (m): belül lehetséges pályák az megkülönböztetésére (irány, energiaeltolódás) szolgál (l > m > -l). Jellemzi továbbá az electron mozgásából adódó mágneses momentumot is.

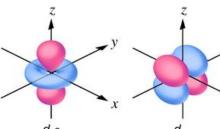


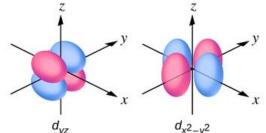














A kvantummechanikai atommodell

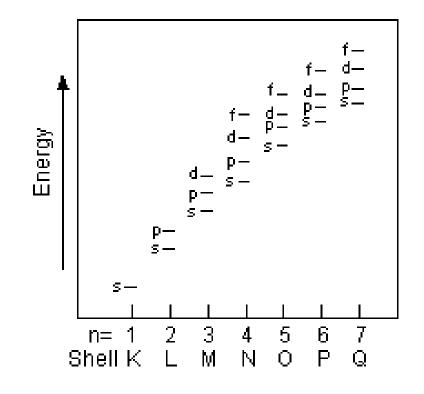
Pauli kizárási elv: egy atom két elektronjának nem lehet teljesen ugyanaz minden kvantumszáma -> minden alhéjhoz (vagyis adott n és l-hez) 2 db elektron tartozik, különböző spinkvantumszámmal (s= 1/2 vagy -1/2).

Megfigyelhető, hogy az elektronpályák energia szerinti betöltése n és I vonatkozásában nem monoton!

Kémiai szempontból a **mellékvantumszám kiemelt fontosságú**, mivel ez adja meg a kialakuló pályák alakját, ami hatással van az atomok között létrejöhető kémiai kötésekre és azok szögére.

Az atomok közötti kölcsönhatásokban (pl. kötések kialakítása) az **elektronok** vesznek részt!

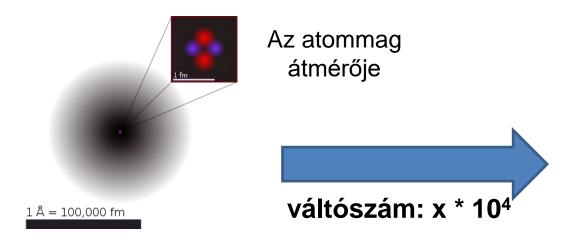
Az anyagok makroszkopikus fizikai tulajdonságainak döntő többségéért az **elektronszerkezetük** felel!





Érdekesség (1):

Hogyan képzeljük el az atomokat és az atomi méreteket?



Föld

 $1.7* 10^{-15} \text{ m (H)} - 1.17* 10^{-14} \text{ m (U)}$

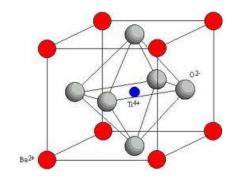
Az atommag – atomátmérő közötti váltószám nagyságrendileg megegyezik a Föld átmérője és a Föld-Nap távolság közöttivel...





váltószám: 1.2 * 10⁴

Atomok átmérője és kötéstávolság pl. szomszédos atom a rácsban



 $x * 10^{-10} m = x * 1 Å$ (ångström)



BMEETT

1,28*10⁷ m

1,5x10¹¹ m

Érdekesség (2): A kvantummechanika hatásköre – meddig tart?

John Gribbin "kockacukor" hasonlata

Kiindulás Plack-állandó: 6,55x10⁻²⁷ ergs (erg: g, cm, s rendszer)

Elektron tömege: 9x10⁻²⁸ g – ebben a nagyságrendben "hat igazán" a k-m.

Hasonlítsuk valami számunkra megfogható dologhoz:

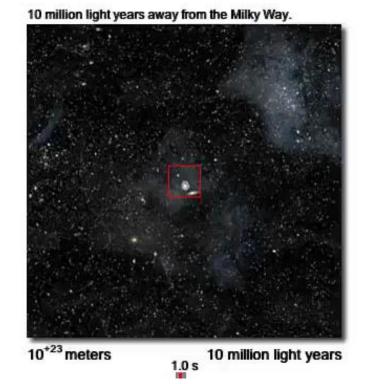
Vegyünk 10²⁷ db 1 cm-es kockacukrot (10²⁷ cm)

Egy fényév kb. 10¹⁸ cm -> kockacukor sorunk hossza 10⁹ fényév

Ismert legtávolabbi galaxis távolsága 10¹⁰ fényév



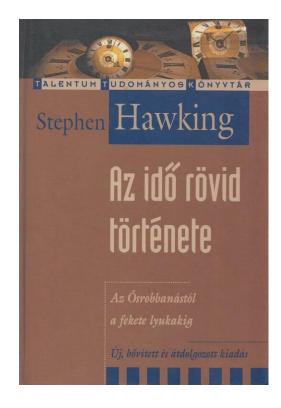
Az ember a logaritmikus hosszskála közepén



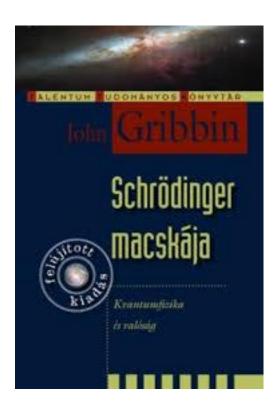




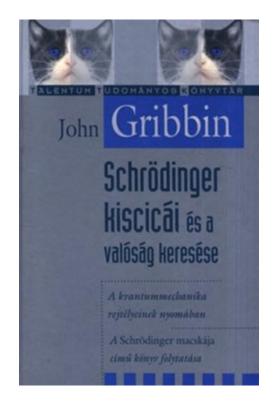
Könyvajánló: Akinek sikerült felkelteni az érdeklődését:



Stephen Hawking Az idő rövid története



John Gribbin Schrödinger macskája



John Gribbin Schrödinger kiscicái és a valóság keresése



Ellenőrző kérdések

- > Alapfogalmak definiálása (pl. elemi részecskék, atompálya, kvantumszámok, ionizációs potenciál...).
- > A Bohr-modell alapvető összefüggései.
- > A kvantummechanikai atommodell, a kvantumszámok jelentése.

Példák igaz-hamis kérdésekre:

- A Bohr-féle atommodellben a nagyobb energiájú elektronok a nukleuszhoz közelebb helyezkednek el. (H)
- A Bohr-féle atommodellben az elektronok energiája és a magtól vett távolsága egyenesen arányos. (I)
- Minél közelebb helyezkedik el egy elektron a maghoz képes, annál könnyebb őt kiszakítani az atomból. (H)
- A mellékkvantumszám felel az atompályák alakjáért. (I)
- A fő különbség a fermionok és a bozonok között, hogy a fermionoknak lehet minden kvantumszáma azonos, a bozonoknak nem. (H)
- Az atompályán kívül az elektron kb. 10% valószínűséggel található meg. (I)

