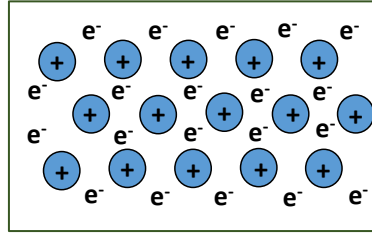


GİRİŞ

Metallerde bağlanma ile ilgili teoriler (serbest elektron teorisi, değerlik bağı teorisi, molekül orbital teorisi), iletkenler, yarı iletkenler ve yalıtkanlar, üstün iletkenlik, diyotlar, fotovoltaiik etki ve ışık yayan diyotlar (LEDler)

1. SERBEST ELEKTRON TEORİSİ

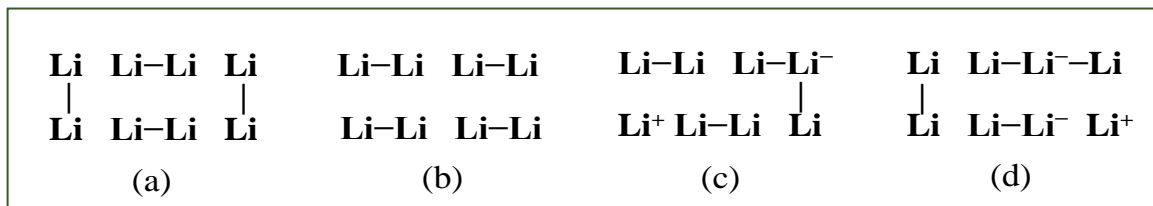
1900' lü yıllarda Drude, metali içinde elektronların hareket ettiği bir örgü olarak kabul etmiş ve elektronların hareketini gaz moleküllerinin serbest hareketine benzetmiştir. Bu fikir 1923 yılında Lorentz tarafından geliştirilmiştir. Lorentz, değerlik elektronlarının oldukça düşük iyonlaşma enerjilerini dikkate alarak, metallerin serbest değerlik elektronları denizinin içine yerleştirmiş pozitif iyonların oluşturduğu katı kümelerden meydana gelen örgü olarak tanımlamıştır (Şekil 8). Bu model, elektronların serbest hareketi ve kristali bir arada tutan kuvvetin, elektron bulutu ile pozitif iyonlar arasında ki etkileşimden kaynaklandığını açıklayabilmektedir. Ancak, değerlik elektronları sayısının artması ile bağlanma enerjisinin kalitatif olarak açıklanmasına karşın, kantitatif hesaplamalarda başarılı olamamıştır.



Şekil 8. Serbest elektron teorisine göre metallerde bağlanma

2. DEĞERLİK BAĞI TEORİSİ

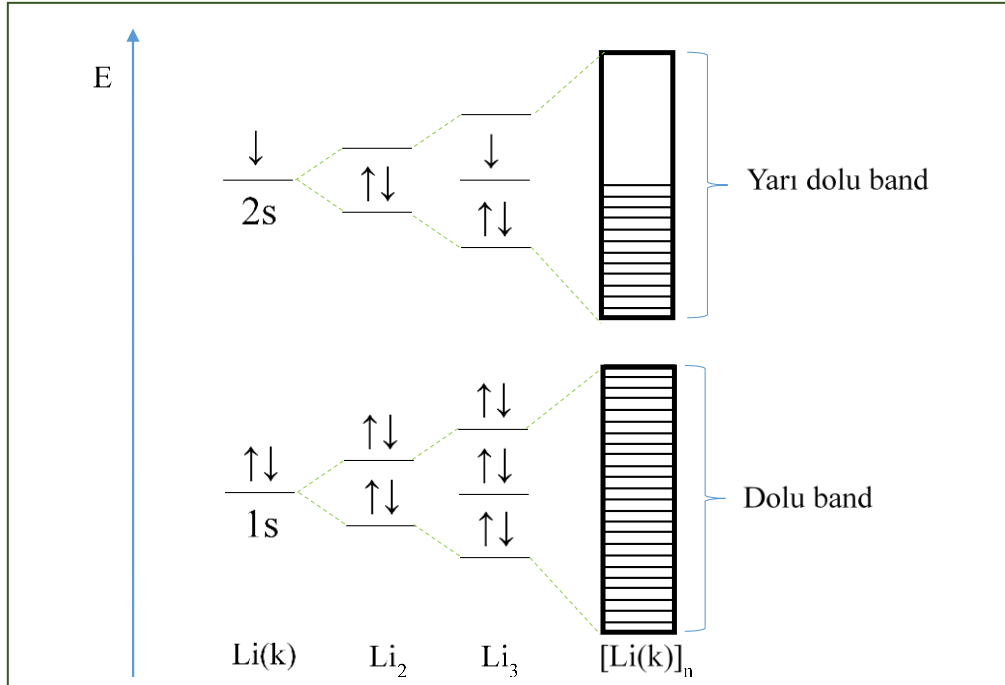
İç merkezli kübik yapıya sahip olan Li kristali içinde koordinasyon sayısı 8 olan bir Li atomunu inceleyelim. Bu Li atomu bir değerlik elektronuna sahiptir ve ancak komşu Li atomlarının birisi ile iki elektronlu bir kovalent bağ verebilir. Kristal içindeki bu atom, diğer komşu Li atomlarına da eşit olarak bağlanmalıdır. Bu durumda Şekil 9' da (a) ve (b) olarak verilen türler ve bunlara benzer türler oluşabilir. Bir Li atomu ancak iyonlaşır ise iki bağ oluşturabilir. Bu durumda Şekil 9' da (c) ve (d) olarak verilen yapılara benzer pek çok yapı oluşabilir.



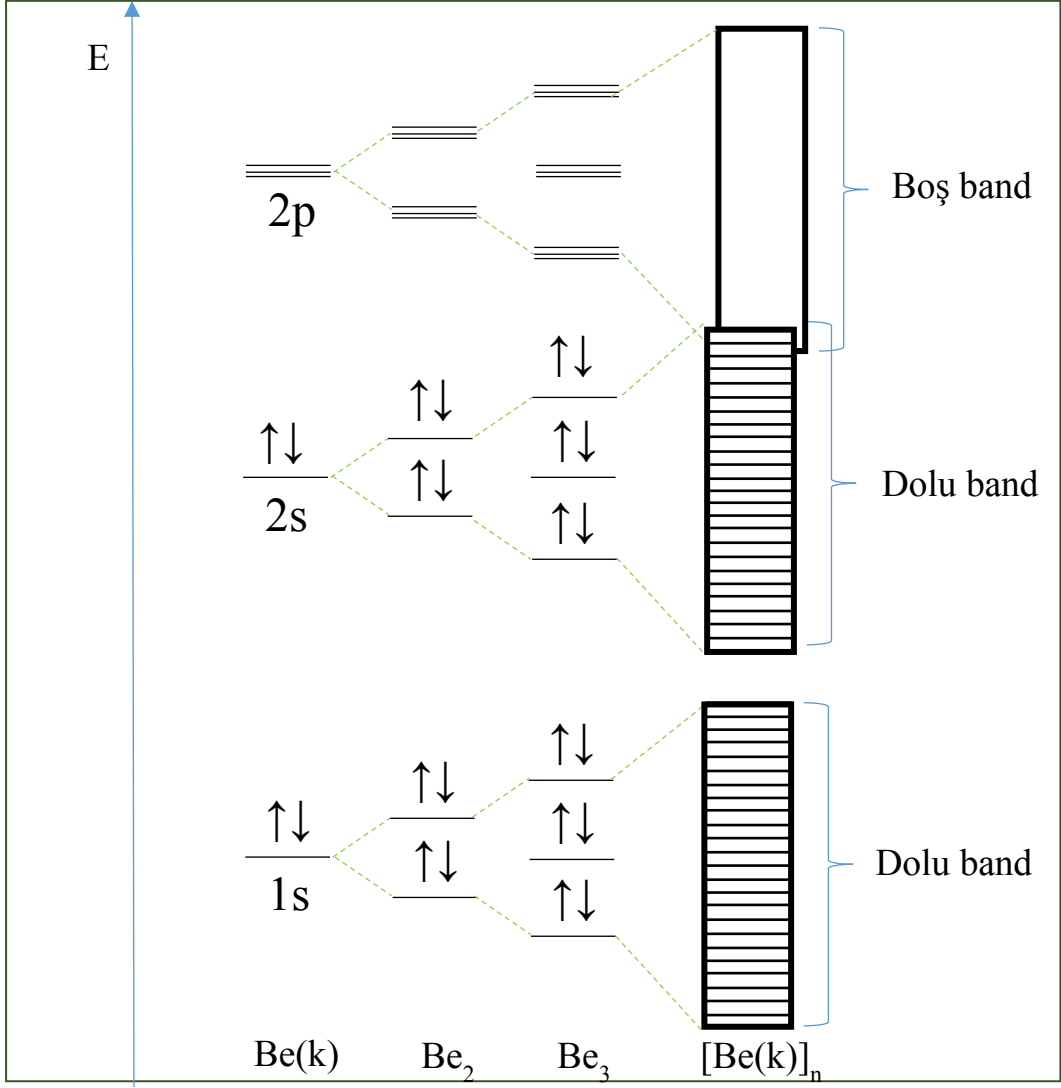
Şekil 9. Değerlik bağı teorisine göre metallerde bağlanma

3. MOLEKÜL ORBİTAL TEORİSİ (BAND TEORİSİ)

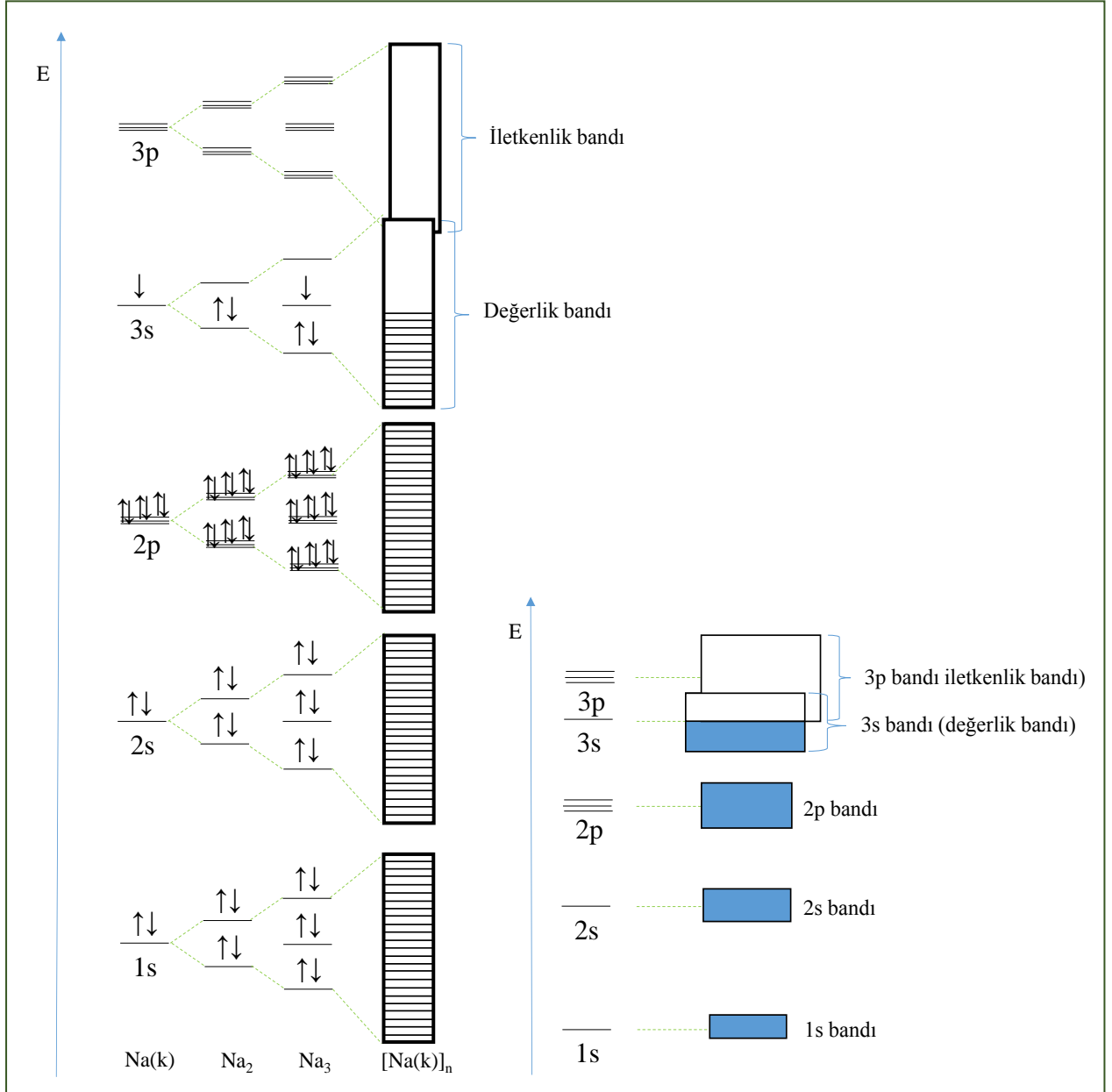
Molekül orbital teorisinin kristal yapılara uygulanması band teorisi olarak bilinmektedir. Bir metalik kristalde en azından avogadro sayısının bir kesri kadar atom bulunmaktadır. Atomların aynı alt kabuktaki orbitallerinin örtüşmesinden oluşan molekül orbitali sayısı çok fazla olduğundan, molekül orbitallerinin enerjileri birbirine oldukça yakındır. Bu nedenle, bu orbitaller topluluğu bir band olarak göz önüne alınır. Çok sayıda aynı tür atomik orbitalin girişimi ile oluşan, birbirine oldukça yakın çok sayıda enerji düzeyi içeren bu topluluğa “enerji bandı” adı verilir (Şekil 10, Şekil 11 ve Şekil 12). s orbitallerinden türetilen band s bandı, p orbitallerinden türetilen band p bandı olarak adlandırılır. Aynı değerlik tabakasında bulunan p orbitalleri, s orbitallerinden daha yüksek enerjili olduğundan bunların verdiği s ve p bandları arasında da bir enerji boşluğu bulunmaktadır. Band genişliği, bandın oluşturduğu orbitalin hacmine bağlıdır (Şekil 12). Çekirdekten uzaklaştıkça orbitallerin hacmi büyüdüğünden, daha geniş bandlar oluşur. Bu nedenle 2s bandı 1s bandından daha geniştir. Ardışık iki band arasındaki aralığa band aralığı denir. Band teorisine göre, metallerin değerlik bandı ile iletkenlik bandının örtüşmesinden oluşan bileşik band kısmen dolu olduğundan, elektronlar serbestçe hareket edebilmektedir (Şekil 10). Elektronların serbestçe hareketi nedeni ile metaller iletken özellik göstermektedir.



Şekil 10. Li' nin molekül orbital enerji diyagramı



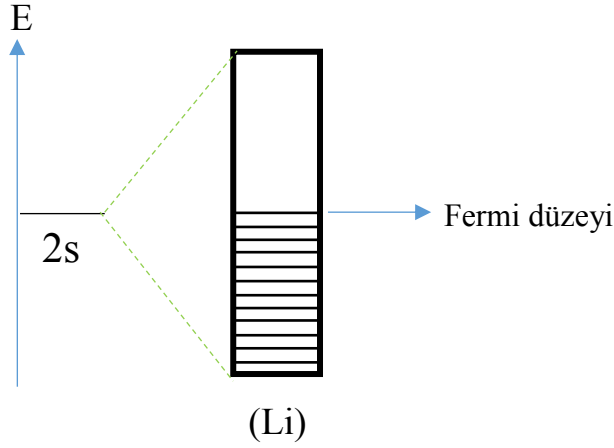
Şekil 11. Be' nin molekül orbital enerji diyagramı



Şekil 12. Na' nın molekül orbital enerji diyagramı

PROF. DR. SELEN BİLGE KOÇAK
KİM248 METALLER KİMYASI

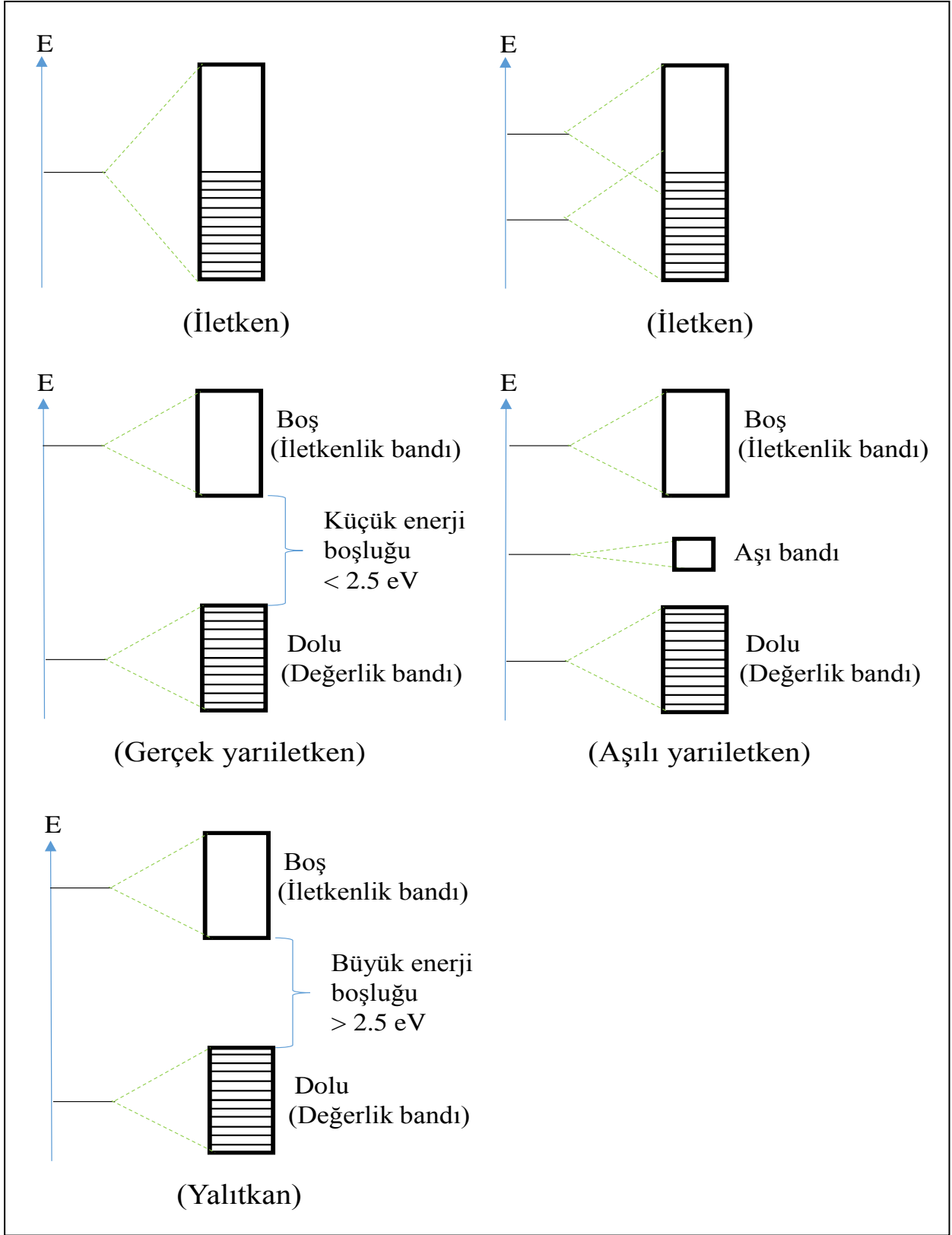
T=OK' de elektronların içinde bulunduğu en yüksek enerjili düzey "Fermi düzeyi" olarak adlandırılmaktadır (Şekil 13). Fermi düzeyine yakın olan elektronlar, yüksek derecede hareketliliğe sahiptir. Bu hareketli elektronlar, çok az bir enerji ile boş enerji düzeylerine geçerek metalin ısı ve elektrik iletkenliğini sağlamaktadır.



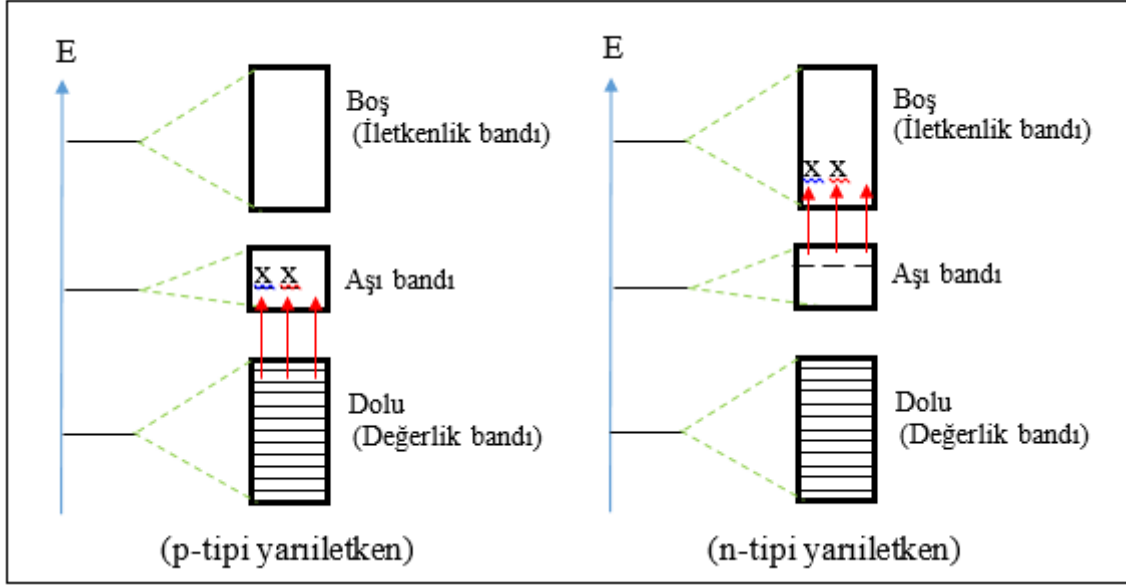
Şekil 13. Li için fermi düzeyi

İLETKENLER, YARI İLETKENLER VE YALITKANLAR

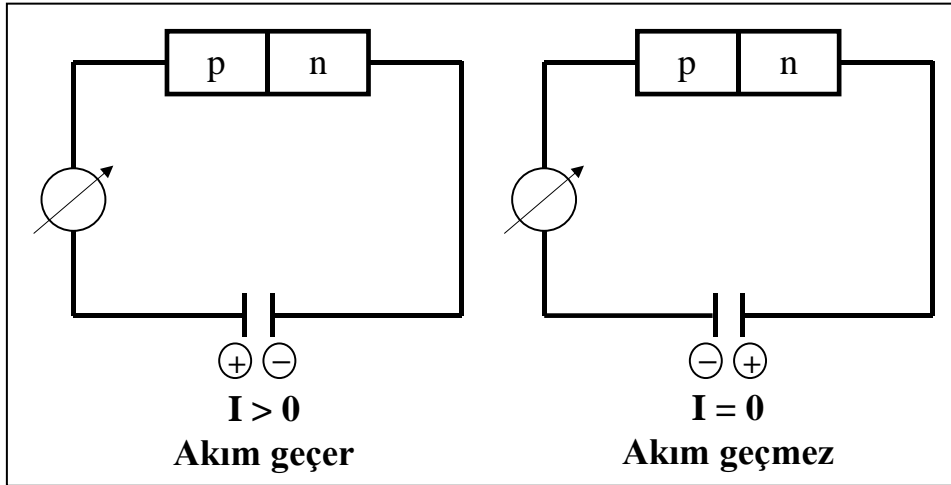
İletkenlerde (metallerde), değerlik bandı kısmen doludur ya da değerlik bandı ile iletkenlik bandı çakışmaktadır. Yani dolu ve boş molekül orbitalleri arasında önemli bir enerji aralığı yoktur ve elektron geçişi kolaylıkla gerçekleşebilmektedir (Şekil 14). **Yalıtkanlarda** (ametallerde), değerlik bandı doludur ve bu yüzden band içinde elektron geçişi mümkün değildir. Ayrıca değerlik bandı ile iletkenlik bandı arasında önemli bir enerji aralığı vardır. Bu nedenle elektronlar, serbest olarak hareket edebilecekleri bu boş banda geçemez (Şekil 14). **Gerçek yarı iletkenler**, yalıtkanlara benzemekle birlikte tam dolu değerlik tabakası ile boş iletkenlik bandı arasındaki enerji aralığı, az sayıda elektronun değerlik bandından boş iletkenlik bandına geçmesini sağlayacak derecede düşüktür (Şekil 14). Sıcaklığın yükseltilmesi ile iletkenlik bandına geçen elektronların sayısı artar ve iletkenlik bandındaki bu elektronlar ile değerlik bandında geriye kalan eşleşmemiş elektronlar yarı iletkenlerin iletkenliğini sağlar. Sıcaklık değiştirilmeden bir yarı iletkenin iletkenliği, değerlik bandı ile iletkenlik bandı arasında elektron geçişini kolaylaştırmak için başka bir bandın (aşırı bandının) konulması ile artırılabilir. Bu şekilde aşırı yarı iletkenler (safsızlık yarı iletkenleri) elde edilir. Bu tür yarı iletkenler n- ve p-tipi olmak üzere iki çeşittir (Şekil 15).



Şekil 14. İletkenlerde, yarı iletkenlerde ve yalıtkanlarda bandlar



Şekil 15. n- ve p-tipi yarı iletkenlerde bandlar



Şekil 16. Diodların çalışma prensibi

İki ayrı p-tipi yarı iletken blok arasına n-tipi yarı iletken kesilmiş başka bir yarı iletken levhanın yerleştirilmesi ile hazırlanan sisteme transistör (voltaj yükseltici) denir. Transistörlerde küçük bir potansiyel fark, büyük bir potansiyel farka dönüştürülür.

ÜSTÜN İLETKENLER

Elektriği hemen hemen hiç direnç göstermeden ileten maddelere üstün iletkenler denir. Diğer bir deyişle, bir üstün iletkenin elektrik direnci sıfır veya sıfıra çok yakındır. Bu yüzden elektrik akımı enerji kaybı olmaksızın taşınır ve teorik olarak akım sınırsız iletilir. Metallerin normal sıcaklıklardaki yüksek elektrik iletkenliği, sıcaklığın düşürülmesi ile daha da artmaktadır. 1919 yılında Kammerling Onnes, sıvı He' da Hg' yi incelerken üstün iletkenliği keşfetmiştir. Onnes, Hg ve Pb gibi metallerin mutlak 0'a yakın sıcaklıklarda üstün iletken olduğunu bulmuştur. Maddelerin elektrik direncinin ani olarak düştüğü ve üstün iletimin görüldüğü bir kritik sıcaklık T_k vardır. Kritik sıcaklığın üzerine çıkıldığında, atomların artan termal hareketi küçük olan elektronlar arası çekim kuvvetine üstün gelmekte ve üstün iletkenlik son bulmaktadır.

Üstün iletkenlerin önemi:

- 1) Alternatif akımın üstün iletkenlerden yapılmış dirençsiz kablolar kullanılarak düşük kayıplar ile taşınması mümkündür.
- 2) Bilgisayarların küçültülmesindeki en büyük sıkıntı, kabloların ısınması ve istenmeyen bu ısının nasıl uzaklaştırılacağıdır. Üstün iletkenlerin ısınmamasından dolayı kabloların üstün iletken malzemelerden yapılması ile ısı problemi ortadan kaldırılacaktır.
- 3) Güçlü elektromıknatıslar, üstün iletken sarımlar kullanarak hazırlanmaktadır. Bunu daha yüksek sıcaklıklarda yapmak daha kolay olacaktır.
- 4) Manyetik alan üzerinde yüzerek havada hareket eden üstün iletken Maglev trenlerinin kullanımı, yüksek sıcaklık üstün iletkenlerinin keşfi ile yaygınlaşacaktır.