

## Dalyko aprašas

<b>Dalyko sando kodas</b> ( <i>Course code</i> )	MKFA7124
<b>Dalyko pavadinimas</b> ( <i>Course title</i> )	Kai kurios fizikos aktualijos
<b>Dėstytojo (-jų) pedagoginis vardas, vardas ir pavardė</b> ( <i>Name and position of lecturer</i> )	Prof. habil. dr. Antanas Feliksas Orliukas
<b>Dalyko sando lygis</b> ( <i>Level of Course</i> )	<i>Antroji pakopa</i>
<b>Kuriame kurse dėstomas</b> ( <i>Year of study</i> )	I-ojo kurso magistrinėse studijose (MIF)
<b>Semestras</b> ( <i>Semester</i> )	<b>Pavasario</b>
<b>VU kreditai</b> ( <i>VU credits</i> )	3
<b>ECTS kreditai</b> ( <i>ECTS credits</i> )	5
<b>Reikalavimai</b> ( <i>Prerequisites</i> )	Bendrąją fiziką, matematinę analizę, matematinius fizikos metodus, matematinę statistiką

## **Dalyko sando tikslai** *(Objectives of the course)*

Paskaitose analizuojamos medžiagų sandaros, termodinaminiai dėsningumai, nagrinėjami laidininkų, puslaidininkų, feroelektrikų, superjonikų laidumai, kalbama apie elektroninio, joninio laidumų sandų sąryšį bei taškinius defektus kietuose kūnuose. Dalyje paskaitų nagrinėjami feroelektriniai, feromagnetiniai, superjoniniai faziniai virsmai bei medžiagų fizikinių savybių modeliavimui, įskaitant izomorfinį elementų keitimą, stabilizuojančių priemaišų įtaką bei nuokrypio nuo stechiometrijos poveikį elektriniam kietųjų kūnų laidumui. Kalbama apie praktinį medžiagų taikymą. Studentai supažindinami su naujausiais kietojo kūno fizikos atsiekimais, su matematinės fizikos bei medžiagotyros sąsajomis, aptariami atomo bei branduolio fizikos dėsningumai.

**Dalyko sando turinys**  
*(Course content)*

**1. Molekulių fizika**

1. Medžiagos sandara.
2. Termodinamikos dėsniai
3. Kietųjų kūnų savybės
4. Skysčių savybės
5. Dujų savybės

**2. Medžiagų elektrinis laidumas**

1. Metalai elektriniame lauke
2. Puslaidininkiai ir dielektrikai elektriniame lauke.
3. Feroelektrikai.
4. Diamagnetikai, paramagnetikai, feromagnetikai magnetiniame lauke
5. Superjonikai.
6. Superlaidininkai.

### **3. Cheminė junginių sudėtis ir jų elektrinės savybės**

1. Izomorfinio elementų keitimo įtaka elektrinėms kietųjų kūnų elektrinėms savybėms.
2. Stabilizuojančiųjų priemaišų įtaka elektrinėms kietųjų kūnų savybėms.
3. Stechiometrija ir elektrinės kai kurių medžiagų savybės.

**4. Kietakūnių medžiagų taikymas**

**5. Atomo ir branduolio fizikos pagrindiniai dėsniai**

**Pagrindinės literatūros  
sąrašas (*Reading list*)**

1. Tetsuichi Kudo and Kazuo Fueki “Solid state ionics”, Kadansha, 1990.
2. . J.D.Cutnell, K.W.Johnson, “Physics”, Southern Illinois University at Carbondale, 2007.
3. A.F. Orliukas “Superjoniniai laidininkai”, VUL, 2004.
4. J.D.Cutnell, K.W.Johnson, ”Essentials of Physics”,Southern Illinois University at Carbondale, 2006.
5. V. Grivickas, A,F.Orliukas, A. Žindulis, S. Tamulevičius, Medžiagų mokslas, Progreus, Vilnius, 2008.

<b>Papildomos literatūros sąrašas</b>	<p>1. P. Brazdžiūnas "Atomo fizika" M., V., 1965.</p> <p>2. A. Orliukas "Kietojo kūno jonika /1 ir 11 dalys/, VU, 1996.</p>
<b>Mokymo dėstymo metodai</b> <i>(Teaching methods)</i>	Paskaitos, naudojantis demonstracijomis bei projekcine technika
<b>Lankomumo reikalavimai</b> <i>(Attendance requirements)</i>	Ne mažiau 75% paskaitų
<b>Vertinimo būdas ir metodas</b> <i>(Assessment methods)</i>	Du kontroliniai darbai raštu, egzaminas raštu, patikslinimas žodžiu. Vertinimas-50% kontrolinių darbų vidurkis, 50% egzaminas.
<b>Dėstomoji kalba</b> <i>(Language of instruction)</i>	Lietuvių
<b>Aprobuota katedros</b>	Data 2012-01-24
<b>Patvirtinta Studijų programos komiteto</b>	<i>Data 2007/2008m.</i>

## Molekulių fizika

Elektroninės būsenos atome yra nusakomos kvantiniais skaičiais: pagrindiniu skaičiumi “n”, orbitiniu skaičiumi “l”, magnetiniu orbitiniu “m<sub>l</sub>” ir magnetiniu sukininiu “m<sub>s</sub>”. Pagal Paulio principą kiekvienas elektronas nusakomas savuoju kvantiniu skaičių n, l, m<sub>l</sub>, m<sub>s</sub> rinkiniu, kuris skiriasi nuo kito elektrono analogiško rinkinio. Bendras max elektroninių būsenų skaičius esant pagrindiniam kvantiniam skaičiui “n” yra  $i_{\max} = 2n^2$ . “n” gali būti 1,2,3,4,5,6,7. Apvalkalų simboliai yra: K, L, M, N, O, P, Q.

Kiekviename apvalkale elektronai yra išsidėstę pogrupiuose: s, p, d, f. Max elektronų skaičius pogrupyje yra:  $i_{\max} = 2(2l+1)$  l= 0, 1, 2, 3, 4,.....  $i_{\max} = 2, 6, 10, 14, 18...$  Pogrupių simboliai reiškia: s(sharp), p (principal), d (diffuse), f (fundamental).



Atomai jungiasi į molekules. Atomų masė, išreikšta atominiais masės vienetais vadinama **atomine mase**.

$$1 \text{ a.m.v.} = 1,66 \cdot 10^{-27} \text{ kg.}$$

Molekulės masė išreikšta a.m.v. vadinamas **molekuline mase**.

$$\text{Pav. N}_2\text{O: } m = 2 \cdot 14 \text{ a.m.v.} + 16 \text{ a.m.v.} = 44 \text{ a.m.v.}$$

Medžiagos kiekis, kurio masė išreikšta gramais ir atitinka jos molekulinei arba atominei masei, vadinama medžiagos **moliu**. SI sistemoje, pvz., C -  $12 \cdot 10^{-3} \text{ kg/mol}$ , O<sub>2</sub> -  $32 \cdot 10^{-3} \text{ kg/mol}$ . 1 mol yra  $N_A = 6,02 \cdot 10^{23} \text{ 1/mol}$  dalelių – tai Avogadro skaičius. Molekulės masė arba neutrono masė  $m_n \cong 1,6748 \text{ a.m.v.}$ , protono masė  $m_p \cong 1,673 \cdot 10^{-27} \text{ kg} = 1,0073 \text{ a.m.v.}$ , elektrono  $m_e = 9,109 \cdot 10^{-31} \text{ kg} = 5,485 \cdot 10^{-4} \text{ a.m.v.}$

*$\mu$  – molio masė*

Molekulių arba atomų skaičius

$$n = \frac{MN_A}{\mu}$$

M – medžiagos masė

$$\rho = \frac{M}{V}$$

$\rho$  - medžiagos tankis.

## Termodinamikos dėsniai

Fizikos dalis, nagrinėjanti šiluminius procesus ir kūnų šiluminės savybės, neįskaitant medžiagos vidinės sandaros, vadinama **termodinamika**. Chaotinis dalelių judėjimas vadinamas **šiluminiu judėjimu**, o energija, kurią įgyja šios dalelės dėl tokio judėjimo, vadinama **šilumine energija**. Jeigu dalelės judėdamos apsieičia vienodais energijos kiekiais, vadinama šilumine pusiausvyra. Jeigu kūnai savo vidinę energiją perduoda vienas kitam neatliekant mechaninio darbo yra vadinama **šilumine apykaita**. **Šilumos kiekis, kurį gauna kūnas šiluminės apykaitos būdu naudojamas jo vidinės energijos pokyčiui bei mechaninio darbo atlikimui** – tai yra I-asis termodinamikos principas.

$$\Delta Q = \Delta U + \Delta A \text{ (darbas)}$$

$\nearrow$   
*vid.energija*

Iš čia plaukia ir antrasis termodinamikos principas, kuris sako, kad negalima sukurti amžinojo variklio. Šiluminė apykaita susijusi su **šiluminiu laidumu**.

Šiluminio laidumo lygtis tokia:

$$Q = \chi \frac{s \Delta t \tau}{d} \quad \left( \chi = \frac{Qd}{s \tau \Delta t} = \frac{J \cdot m}{m^2 s \text{ deg}} = \frac{W}{m \text{ deg}} \right)$$

čia:  $\chi$  - šiluminio laidumo koeficientas,  $s$  – plotas, per kurį vyksta šiluminė apykaita,  $\tau$  - laikas,  $\Delta t$  – temperatūrų skirtumas,  $d$  – pernešamos medžiagos storis.

Svarbus parametras, kurio dėka nusakoma šilumos apykaita yra **savitoji šiluminė talpa**

$$c = \frac{Q}{m\Delta t} \left[ \frac{J}{kg \cdot \text{deg}} \right]$$

SI sistemos savituoju šilumos talpos vienetu laikoma tokia kūno šiluminė talpa, kurio 1 kg masės sugeria arba išspinduliuoja 1 J energiją, pakitus jo temperatūrai 1 deg.

Jeigu sistemoje yra 4 kūnai, pvz., 2 kūnai atiduoda tam tikrus šilumos kiekius  $Q_1$  ir  $Q_2$ , o kiti 2 kūnai gauna  $Q_3$  ir  $Q_4$  šilumos kiekius, tai  $Q_1 + Q_2 = Q_3 + Q_4$ , tai yra šilumos balanso lygtis.

Šis šilumos kiekis priklauso nuo degiųjų medžiagų kaloringumo (arba savitosios degimo šilumos)

$$Q = m\lambda$$

$$\lambda = \frac{Q}{m}; \left[ \frac{J}{kg} \right]$$

SI sistemoje kaloringumo vienetu laikomas toks medžiagos kaloringumas, kai pilnai sudegusios 1 kg medžiagos masė išskiria 1 J energiją. Taigi šie pagrindiniai sąryšiai ir nusako kūnų termodinaminę būseną.

## Kietųjų kūnų savybės

Deformacijos, kurios pilnai išnyksta išnykus kūnus veikiančioms jėgoms, vadinamos **tampriosiomis deformacijomis**. **Plastinių deformacijų** atveju jos išlieka nustojus veikti kūnus išorinėms jėgoms. Deformacijos gali būti spaudimo, tempimo, šlyties, sukimo, lenkimo. Deformacijos yra absoliučios ir santykinės.

Absoliučios: 
$$\Delta l = l - l_o$$

Santykinės: 
$$\varepsilon = \frac{\Delta l}{l_o}$$

Atliekant deformaciją, kūnas priešinasi deformuojančiai jėgai. Ši savybė vadinama kūnų vidine įtampa.

$$\sigma = \frac{F}{s} \left[ \frac{N}{m^2} \right] \Rightarrow [Pa]$$

Esant spaudimo arba tempimo deformacijai  $\sigma = E\varepsilon = E \frac{\Delta l}{l_o}$  ( $E$  – *Jungo modulis*)

Jeigu  $\Delta l = l_o$ , tai  $E = \sigma$ . Tokiu būdu **Jungo modulis** rodo tokį medžiagos mechaninį tempimą, kai jos matmenys padidėja dvigubai.

Iš kitos pusės kūnai keičia savo matmenis juos šildant arba šaldant. Keičiasi jų linijiniai matmenys

$$l = l_0(1 + \alpha t), \quad \alpha = \frac{\Delta l}{l_0 \Delta t}$$

- linijinio plėtimosi koeficientas.

Keičiasi jų ir tūris

$$V = V_0(1 + \beta t) \quad \beta \approx 3\alpha \quad .$$

Šildant kietas medžiagas iki tam tikros temperatūros jos lydosi. Medžiagų lydymasis nusakomas **savitąja lydymosi šiluma**

$$q = \frac{Q}{m} \left[ \frac{J}{kg} \right]$$

## Skysčių savybės

Skysčiai yra charakterizuojami klampumu. Jų klampumo koeficientas

$$\eta = \frac{Fl}{\Delta V s}; [Pa \cdot s] \quad ; \quad (1)$$

čia:  $l$  atstumas tarp sluoksnių skystyje,  $\Delta V$  sluoksnių judėjimo greičių skirtumas,  $s$  skysčio sluoksnių sąlyčio plotas,  $F$  – trinties jėga tarp sluoksnių skystyje.

Iš (1) gauname:

$$F = \eta \frac{\Delta V s}{l} \quad (2)$$

Tai Niutono sąryšis. Stoksas eksperimentiškai nustatė, kad

$$F = 6\pi\eta R V \quad (3)$$

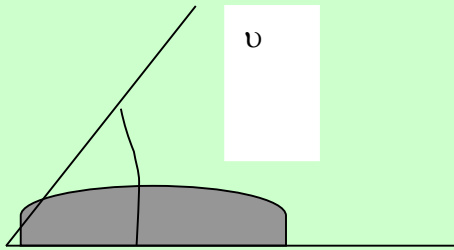
Skystis slegia į indo sienelės bei dugną

$$P = \frac{F}{S} [Pa]$$

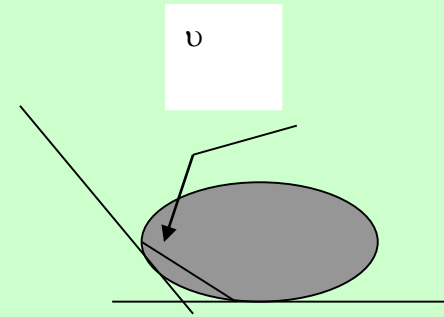
Skysčio paviršius nusakomas paviršiaus įtempimo koeficientu  $\chi = F/l$ ,  $l$  – paviršiaus kontūro ilgis,  $F$  – paviršiaus įtempimo jėga

R-rutuliuo  
radiusas, V-jo  
greitis skystyje

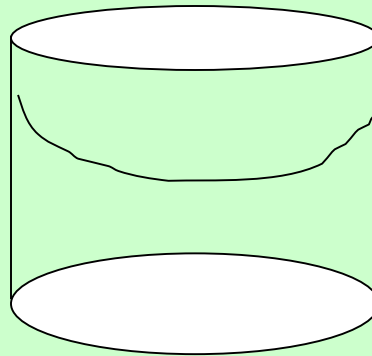
Skysčiai gali šlapinti kūnus arba jų nešlapinti. Jeigu skysčiai šlapina kūnus, gauname tokį vaizdą:



Jeigu nešlapina gauname tokį vaizdą:



Jeigu skystį talpinsime į plonus vamzdelius, gauname vaizdą:



Tokiu atveju skysčio slėgis po menisku yra mažesnis negu išorėje atmosferos slėgis. Skystis plonuose vamzdeliuose kyla į viršų iki tol, kol susilygina slėgiai. Skysčio kilimo aukštis

$$h = \frac{2 \chi \cos \vartheta}{\rho g r}$$

## Dujų savybės

Idealiosios dujos yra laikomos tokios, kai dujų molekulės yra vaizduojamos tam tikros masės rutuliukai tolygiai pasiskirstę visame tūryje ir sąveikauja tarp savęs tik jų susidūrimo metu.

Realiosios dujos yra laikomos tokios dujos, tarp kurių molekulių veikia sąveikos jėgos.

$$\vec{K}_1 = m\vec{V} \quad . \text{ Atsitrenkusios dalelės judėjimo kiekis tampa lygus } \vec{K}_2 = -m\vec{V} \quad . \quad (1)$$

Jeigu dalelė per laiką  $\Delta\tau$  juda greičiu  $\vec{V}$ , tai ji nulėks nuotolį  $\Delta\vec{r} = \vec{V}\Delta\tau$ . Čia  $\Delta\vec{r}$  - laisvasis lėkio nuotolis,

$\Delta\tau$  - laisvasis lėkio laikas. Indo tūris  $V = \Delta r^3 = \Delta r S = V S \Delta\tau$ . Jeigu kiekviename tūrio elemente yra  $n_0$  molekulių, tai visame tūryje turėsime  $n = V n_0$ . Didžiausia tikimybė šiuo atveju, kad dalelės pasieks

kubo sienelės yra 1/6, tokiu būdu

$$n = \frac{1}{6} \vec{V} S_{\Delta} \tau n_0 \quad (2)$$

Iš (1) ir (2) sektų

$$\begin{aligned} |\Delta K| &= \vec{K}_2 - \vec{K}_1 = -m\vec{V} - m\vec{V} = |2mV| \\ \Delta K &= |\Delta K|_n = 2m\vec{V} \frac{1}{6} n_0 \vec{V} S \Delta\tau = \frac{1}{3} n_0 m \vec{V}^2 S \Delta\tau \end{aligned} \quad (3)$$



Iš mechanikos žinoma, kad

$$F\Delta\tau = \Delta K; \quad F = \frac{\Delta K}{\Delta\tau}; \quad p = \frac{F}{S}, \text{ tai } p = \frac{\Delta K}{\Delta\tau S} \quad (4)$$

Iš (3) ir (4) turime  $p = \frac{2n}{3V} \langle E_K \rangle$  (5). Gaudami šiuos sąryšius daleidome, kad visi

dujų molekulių greičiai yra vienodi. Tačiau gali būti jie ir skirtingi. Todėl praktiškai reikia vidurkinti

$$\langle V \rangle^2 = \frac{V_1^2 + V_2^2 + \dots V_n^2}{n} \quad (6)$$

Tokiu būdu (5) lygtis bus užrašoma taip:

$$p = \frac{1}{3} n_0 m \langle V \rangle^2 \quad (7)$$

Padauginus ir padalijus dešinę lygties pusę iš 2 gausime

$$(8) \quad p = \frac{2}{3} n_0 \left( \frac{m \langle V \rangle^2}{2} \right) = \frac{2}{3} n_0 \langle E_K \rangle$$

$$n_0 = \frac{n}{V}$$

čia

(8) lygtis vadinama pagrindinė dujų kinetinės teorijos lygtimi arba Klauzijaus lygtimi.

Kadangi  $\vec{p} = \frac{1}{3} n_0 m \vec{V}^2$

Vieno molio atveju  $n = N_A$ , o tūris  $V = V_0$ , tai (9) lygtis bus tokia

$$pV_0 = \frac{2}{3} N_A \langle E_K \rangle \quad . \quad (10)$$

Čia sandauga  $N_A \langle E_K \rangle = U_0$ , tai yra molio idealiųjų dujų šiluminė energija

$$pV_0 = \frac{2}{3} U_0 \quad . \quad (11)$$

Vieno molio tūris, esant slėgiui  $p = 101 \text{ kPa}$  bei  $t = 0^\circ \text{ C}$   $V_0 = 22,4 \cdot 10^{-3} \text{ m}^3/\text{mol}$ , tai iš (11)

$$U_0 = \frac{3}{2} pV_0 = \frac{3 \cdot 1,01 \cdot 10^5 \text{ Pa} \cdot 22,4 \cdot 10^{-3} \text{ m}^3 / \text{mol}}{2} = 3390 \text{ J/mol} \quad .$$

Eksperimentu nustatyta, kad vienatomių idealiųjų dujų molinė šiluminė talpa, esant pastoviam tūriui  $c = 12,4 \text{ J/mol} \cdot \text{deg}$ , tai pakitus dujų temperatūrai 1 deg jų šiluminė energija pakis ir bus tai lygu:

$$U_2 - U_1 = C(t_2 - t_1) \quad . \quad (12)$$

Iš (12) lygties galime rasti temperatūrą  $t_2$ , kuriai esant dujų šiluminė energija taps lygi  $U_2 = 0$ , t.y. jeigu  $t_1 = 0^\circ C$   $U_1 = 3390 J/mol$ .

$$t_2 = \frac{U_2 - U_1}{C} = -\frac{3390}{12,4} = -273,16 \text{ deg}$$

Pagal Kelviną ši temperatūra priimta atskaitos taškų temperatūrų skalėje ir yra vadinama absoliučiu nuliumi, o temperatūrų skalė, kurioje atskaitos taškas yra absoliutus nulis yra vadinama Kelvino skale. Temperatūrų Celsijaus ir Kelvino skalių sąsajos bus tokios:

$$T, K = t^\circ C + 273$$

(12) lygtį *Kelvino skalėje* užrašome taip:

$$U_2 - U_1 = C(T_2 - T_1), \quad (13)$$

o vieno molio idealiųjų dujų šiluminė energija bet kokioje temperatūroje

$$U = \left(\frac{2}{3} C\right) T \quad (14)$$

*Farengeito ir Celsijaus skalių sąsajos* tokios:  $t^\circ C/100 = (t^\circ F - 32)/180$ ;  $t^\circ C = 5/9(t^\circ F - 32)$

Pažymėję  $R = \frac{2}{3} C = \frac{2}{3} \cdot 12,4 J/mol$   $K \Rightarrow 8,3 \frac{J}{molK} = R$  - universalioji dujų konstanta. Tokiu

būdu

$$pV_0 = RT. \quad (15)$$

(15) lygties abi puses padauginę iš molių skaičiaus  $\nu$ , turėsime  $\nu pV_0 = \nu RT$ ;  $\nu = \frac{M}{\mu}$ , tai

$$pV = \frac{M}{\mu} RT \quad (16)$$

(16) lygtis vadinama idealiųjų dujų būvio lygtimi arba **Kleiperono-Mendelejevo lygtimi**.

Kadangi bendra masė  $n$  molekulių  $M = mn$ , o vieno molio masė  $\mu = mN_A$ , tai  $\frac{M}{\mu} = n / N_A$ , tai tokiu būdu (16) lygtį perrašome taip

$$pV = \frac{n}{N_A} RT \quad (17)$$

Dydis  $\frac{R}{N_A} = k = \frac{8,3}{6,02 \cdot 10^{23}} = 1,38 \cdot 10^{-23} \text{ J/K}$ ,  $k$  yra Bolcmano konstanta. Tokiu būdu (17) perrašome taip:

$$pV = knT \quad (18)$$

Sulyginę (18) ir (8) lygtis turėsime:

$$\langle E_k \rangle = \frac{3}{2} kT \quad (19)$$

Čia visur buvo kalbama apie idealiąsias dujas, kurios yra viename ir tame pačiame būvyje. Tačiau, dujos esant tam tikroms sąlygoms gali keisti savo būvį. Tegul būvyje I dujos nusakomos  $M_1 p_1 V_1$  ir  $T_1$ , o II būvyje  $M_2 p_2 V_2$  ir  $T_2$ . Sutinkamai su (16) turėsime

$$\begin{aligned} p_1 V_1 &= \frac{M_1}{\mu} R T_1 \\ p_2 V_2 &= \frac{M_2}{\mu} R T_2 \end{aligned} \quad , \quad (20)$$

tai

$$\frac{p_1 V_1}{p_2 V_2} = \frac{M_1 T_1}{M_2 T_2} \Rightarrow \frac{p_1 V_1}{M_1 T_1} = \frac{p_2 V_2}{M_2 T_2} \quad . \quad (21)$$

Jeigu  $M_1 = M_2$ , tai

$$\frac{p_1 V_1}{T_1} = \frac{p_2 V_2}{T_2}$$

*Esant izoterminiam procesui,  $T_1 = T_2$  turėsime*

$$\frac{p_1}{p_2} = \frac{V_2}{V_1}$$

(22)

*Ši dėsninumą nepriklausomai vienas nuo kito nustatė Boilis ir Mariotas.*

Esant izochoriniam procesui, kai  $V_1 = V_2$

$$\frac{p_1}{p_2} = \frac{T_1}{T_2}, \quad (23)$$

Šį dėsnį nustatė Šarlis.

Esant izobariniam procesui, kai  $p_1 = p_2$ , tai

$$\frac{V_1}{V_2} = \frac{T_1}{T_2} \quad (24)$$

Šį dėsnį nustatė Gei-Liusakas.

Šio proceso metu atliekamas darbas

$$A = p(V_2 - V_1) = p\Delta V \quad (25)$$

Jeigu  $\langle E_K \rangle = \frac{m\langle V^2 \rangle}{2}$ , o  $n_0 m = M$ , tai  $pV = \frac{1}{3}M\langle V^2 \rangle$  arba (16) atrodys taip

$$\frac{1}{3}M\langle V^2 \rangle = \frac{M}{\mu}RT, \quad \text{čia} \quad \langle V \rangle = \sqrt{\frac{3RT}{\mu}} \quad (26)$$

Dujose galimas ir toks procesas, kai šiluminė apykaita su aplinka nevyksta, toks **procesas vadinamas adiabatiniu**.

**Realiųjų dujų** (garų) atveju tinka visi idealiųjų dujų dėsniumai, jeigu realiosios dujos yra žemuose slėgiuose ir aukštose temperatūrose. Kalbant pvz. apie H<sub>2</sub>O garų kiekį, pvz., atmosferoje naudotinos **absoliučios bei santykinės** drėgmės sąvokos. H<sub>2</sub>O garų kiekis vienetiniame oro

tūryje vad. absoliučia drėgme. Ji matuojama  $\rho' = \frac{m}{V}$ , čia m – garų masė, V – tūris. Temperatūra, kuriai esant H<sub>2</sub>O garai atmosferoje tampa sotinantys, vad. **rasos tašku**. Vandens garų kiekis tūrio vienetu oro, esant jų sočiai (rasos taškui) vad. max. oro drėgme  $\rho_0$ . Sotį galime pasiekti 2 būdais: didindami garų tankį ties T=const arba žeminant T garų, laikant pastovų  $\rho'$ .

Santykinė oro drėgme  $\beta = \frac{\rho'}{\rho_0} \cdot 100\%$ . Drėgmė matuojama **psichrometrais**. Kalbant apie

atmosferą svarbu žinoti, koks oro molekulių skaičius supančios Žemę jos atmosferos

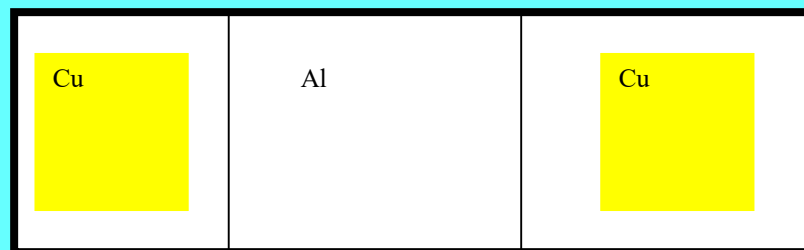
vienetiniame tūryje. Tai surandame taip:  $n = \frac{N_A}{V} = \frac{6,02 \cdot 10^{23} \text{ 1/mol}}{22,4 \cdot 10^{-3} \text{ m}^3 \cdot \text{mol}} = 2,7 \cdot 10^{25} \text{ m}^{-3}$

Siurbiant oro molekules iš tam tikros talpos vad. tos talpos vakuavimu. Dabar skiriamos trys vakuavimo pakopos: p = 10<sup>5</sup> – 10<sup>2</sup> Pa – žemas vakuumas p = 10<sup>2</sup> – 10<sup>-1</sup> Pa – vidutinis

Vakuumas p = 10<sup>-1</sup> – 10<sup>-4</sup> Pa – aukštasis (gibusis vakuumas). Laboratorinėmis sąlygomis galima pasiekti vakuumus iki 10<sup>-10</sup> Pa. Absoliučiu vakuumu vad. toks, kai talpoje absoliučiai nėra nei vienos dalelės.

## ELEKTROS SROVĖS NEŠĖJŲ METALUOSE PRIGIMTIS

Pirmasis jau **1901 m.** elektros srovės nešėjų metaluose prigimtį bandė eksperimentiškai nustatyti **Rikke**. Jis sujungė strypus, taip kaip parodyta 1 pav. ir leido jais tekėti visus metus nuolatinę srovę.



1 pav.

Per šį laiką pratekėjo  $3.5 \cdot 10^6 \text{C}$  krūvis, tačiau nei svoris strypų, nei sąlyčio taškai nepakito.

Rikke padarė išvadą, kad medžiagos atomai metaluose srovės pernešimo procesuose nedalyvauja, o gali būti čia elektronai, kuriuos pirmą kartą jau 1897 m. atrado Tomsonas.



Norint tuo įsitikinti, reikėjo išmatuoti elektronų ženklą bei savitąjį krūvį.

Buvo sumanytas eksperimentas, kurio idėja remėsi tuo, kad jeigu krūvio nešėjai metaluose yra elektronai, tai privertus judėti strypą tam tikru greičiu ir vėl jį stabdant turi atsirasti, dėl neigiamo pagreičio strype, srovės impulsas. Beje, tokį elektros krūvių pagreitį nejudančiame metalo cilindre galime sudaryti patalpinus laidininką į elektrinį lauką

$$E = -\frac{ma}{q},$$

tai yra prie jo galų prijungti įtampą

$$U = lE; \quad I = \frac{U}{R}$$

$$dq = Idt = -\frac{lma}{eR} dt = -\frac{ml}{eR} dV$$

V-greitis

per stabdymo laiką strypu prajudės krūvis

$$q = \int_0^t dq = -\int_v^0 \frac{ml}{eR} dV = \frac{ml}{e} \frac{V}{R}$$

Pirmieji tokį bandymą atliko **1913 m. Mandelštanas ir Papaleksi.**

1916 m. Tomsonas ir Stjuartas 500 m ritele įsukę 300 m/s linijiniu greičiu stabdė ir

paskaičiavo savitąjį krūvį  $\left(\frac{q}{m}\right)$ . Jie gavo šį santykį, eksperimento paklaidų

leistinuose rėmuose, artimą elektrono savitajam krūviui, t.y.  $\left(\frac{1.6 \cdot 10^{-19} \text{ C}}{9.109 \cdot 10^{-31} \text{ kg}}\right) = 1.756 \cdot 10^{-11} \text{ C/kg}$

Elektronų skaičių tūrio vienetė skaičiuojame taip  $\frac{\rho}{\mu} N_A$

(čia  $\rho$  - medžiagos tankis,  $\mu$  - kilomolio masė,  $N_A$  - Avogadro sk.). Pvz., kalio

$$\frac{\rho}{\mu} = 20 \text{ kmol/m}^3, N_A = 6.02 \cdot 10^{23} \quad n = 2 \cdot 10^4 \cdot 6.02 \cdot 10^{23} \approx 1.204 \cdot 10^{28} \text{ m}^{-3}$$

Klasikinė metalų laidumo teorija buvo pateikta Drudės, vėliau tikslinta Lorencio. Padal Drudę vidutinis elektronų greitis metaluose gali būti išreikštas lygtimi:

$$\bar{V} = \sqrt{\frac{8kT}{\pi m}},$$

taigi T=300 K temperatūroje  $\bar{V} = \sqrt{\frac{8 \cdot 1.38 \cdot 10^{-23} \cdot 300}{3.14 \cdot 9.1 \cdot 10^{-31}}} \approx 10^5 \text{ m/s}$ . Jeigu talpiname metalą į

elektrinį lauką, tai be chaotinio judėjimo greičio  $\bar{V}$  atsiranda ir tvarkingas greitis  $\langle u \rangle$ .

Kadangi elektronai metaluose yra nuolatiniam judėjime, tai jų laisvojo lėkio laikas

$$\tau = \frac{\lambda}{V}$$

( $\lambda$  - vidutinis laisvasis lėkis),

$$\langle u \rangle = \frac{qE\lambda}{mV}$$

$$j = nq\langle u \rangle; \langle u_{\max} \rangle = qE\tau/m; \langle u \rangle = 1/2 \langle u_{\max} \rangle = qE\lambda/2mv; j = nq^2\lambda E/2mv$$

$$\sigma = nq^2\lambda/2mv$$

tai jo vidutinė kinetinė energija

$$\langle E_k \rangle = \frac{m\langle u \rangle^2}{2} = \frac{q^2\lambda^2}{2mV^2} E^2$$

$$j = \sigma E$$

Tokiu būdu, elektronai susidurdami su gardelės jonais, atiduoda  $E_k$  energiją gardelei. Kadangi kiekvienas elektronas per sekundę vidutiniškai turi  $E_k$  energiją, tai kiekvienu momentu atidavus  $E_k$  energiją gardelei yra šildoma medžiaga. Tokiu būdu tūrio vienetė per laiko vienetą išsiskiria šiluma

$$\frac{dQ}{dt} = n \frac{1}{\tau} \langle E_k \rangle = \frac{nq^2 \lambda}{2mV} E^2 = RI^2$$

$$R = \gamma \frac{dl}{ds} : \quad \frac{dQ}{dt} = \gamma \frac{dl}{ds} (Ids)^2 = \eta j^2 dV$$

$$Q = \int_0^t dt \int_V \eta j^2 dV$$

Pastarioji matematinė išreiška atitinka [Džaulio-Lenco dėsnį](#).

Metalai yra ne tik geri elektros, bet ir šilumos laidininkai. Jau 1853 m. Videmanas ir Francas nustatė Al šiluminio laidumo koeficientą  $\chi$ :

$$\chi = \frac{1}{3} n m v \lambda C_v; \quad C_v = \frac{3 R}{2 \mu} = \frac{3 k}{2 m}; \quad \text{tai } \chi = \frac{1}{2} n k v \lambda$$

Beje, 
$$\frac{\chi}{\sigma} = \frac{k m V^2}{q^2}; \quad \frac{m V^2}{2} = \frac{3}{2} k T, \quad \text{tai } \frac{\chi}{\sigma} = 3 \left( \frac{k}{q} \right)^2 T.$$

Kadangi 
$$\sigma = \frac{n q^2 \lambda}{2 m V} \text{ tai įstatę reikšmes gausime } \frac{\chi}{\sigma} = 2.23 \cdot 10^{-8} T.$$

Metalų kiloatomo savitoji šiluma  $C_v = 9R/2$ ; čia  $R = 8,3143 \cdot 10^3 \text{ J/kmol} \cdot \text{K}$  (dujų pastovioji).

# Laidininkai elektriniame lauke

Šiek tiek apie ekranavimą:

$$E = 0 \quad \text{viduje,} \quad \varphi = \text{const}, \quad E = E_n = \frac{\sigma}{\epsilon\epsilon_0};$$

$\sigma$  - paviršinio krūvio tankis.

$$\langle V + u \rangle = \langle V \rangle + \langle u \rangle = \langle u \rangle$$

Srovės stipris

$$I = \frac{dq}{dt}$$

(1) jeigu yra ir  $p$  ir  $n$  krūvininkai, tai

$$I = \frac{dq^+}{dt} + \frac{dq^-}{dt}$$

Srovės tankis

$$j = \frac{dI}{dS} \quad (3).$$

$$\vec{I} = \int_s \vec{j} d\vec{S}$$

(4)

$$j = e^+ n^+ \vec{u}^+ + |e^-| n^- \vec{u}^-$$

5)

Pvz.,  $j$  tankis Cu yra  $j \approx 10^7 \text{ A} \cdot \text{m}^{-2}$ , tai  $\langle \vec{u} \rangle \approx \frac{10^7}{1.6 \cdot 10^{-19}} \cdot 10^{-29} = 10^{-3} \text{ m/s}$ .

Įvedus  $\rho^+ = n^+ e^+$ ;  $\rho^- = n^- e^-$ ; turėsime

$$j = \rho^+ u^+ + \rho^- u^- \quad \sigma = q^+ n^+ \mu^+ + q^- n^- \mu^- : \mu = \frac{u}{E}; u = \mu E; j = \sigma E$$

SI sistemoje matuojama I[A] - Ampero apibrėžimas seka iš magnetizmo skyriaus.

## Nenutrūkstamumo lygtis

Lygtis  $\oint \vec{j} d\vec{S}$  rodo krūvių ištaką iš tūrio V, kuris ribotas plotu S, per laiko vienetą. Kita vertus, ši lygtis rodo krūvių mažėjimo greitį iš tūrio V:

$$\oint_S \vec{j} d\vec{S} = -\frac{dq}{dt}$$

Dydis  $q=en$ , tai

$$q = \int_V \rho dV \text{ ir } \oint_S \vec{j} d\vec{S} = -\frac{d}{dt} \int_V \rho dV \quad 1)$$

Čia reikia imti dalinę išvestinę, nes  $\rho$  priklauso nuo laiko ir koordinačių.

Pagal Ostrogradskio-Gauso formulę

$$\int_S \vec{E} d\vec{S} = \int_V \nabla \vec{E} dV$$

$$\int_V \nabla \vec{j} dV = -\int_V \frac{\partial \rho}{\partial t} dV$$

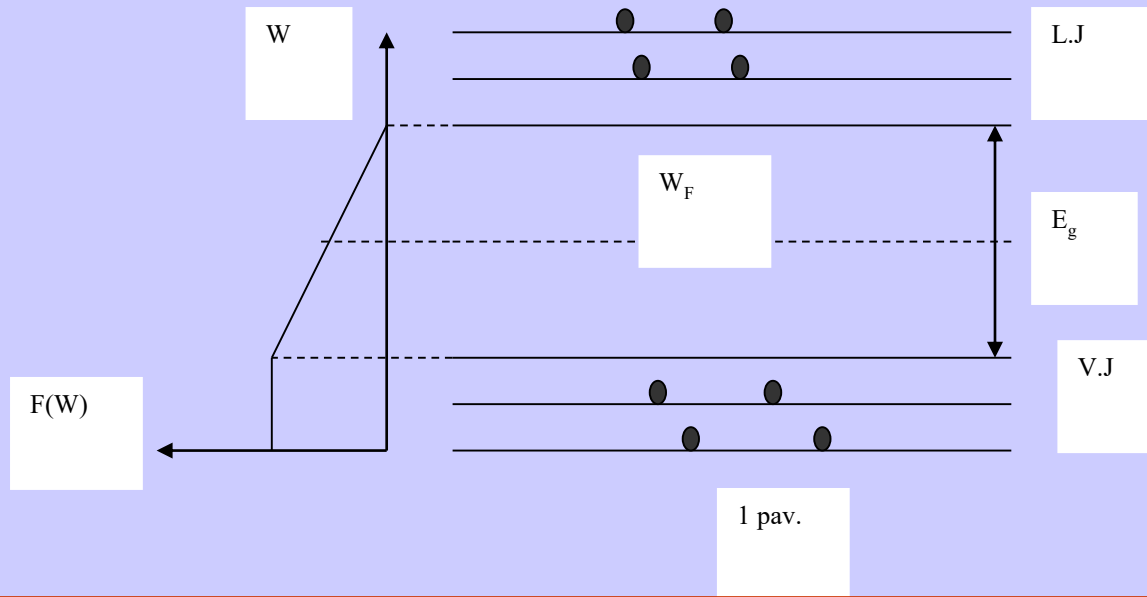
2) arba

$$\nabla \vec{j} = -\frac{\partial \rho}{\partial t} \quad (3)$$

Ši lygtis yra vadinama nenutrūkstamumo lygtimi ir išreiškia krūvių tvermės dėsnį.

# PUSLAIDININKIAI IR DIELEKTRIKAI ELEKTRINIAME LAUKE

Kalbant apie puslaidininkių laidumą, yra skiriamos dvi jo rūšys:  $n$  ir  $p$ , kurios savo ruožtu skirstomos į savąjį ir priemaišinį laidumus. Aiškinant puslaidininkių laidumą naudojantis juostiniu modeliu, yra vaizduojama tai taip(1 pav):



Čia 
$$F(W) = \frac{1}{e^{(E_g - W_F)/kT} + 1} = \frac{1}{e^{E_g/2kT} + 1} \quad (1) \text{ elektronų būsenų pasiskirstymo funkcija, kurią}$$

užrašė Fermis,

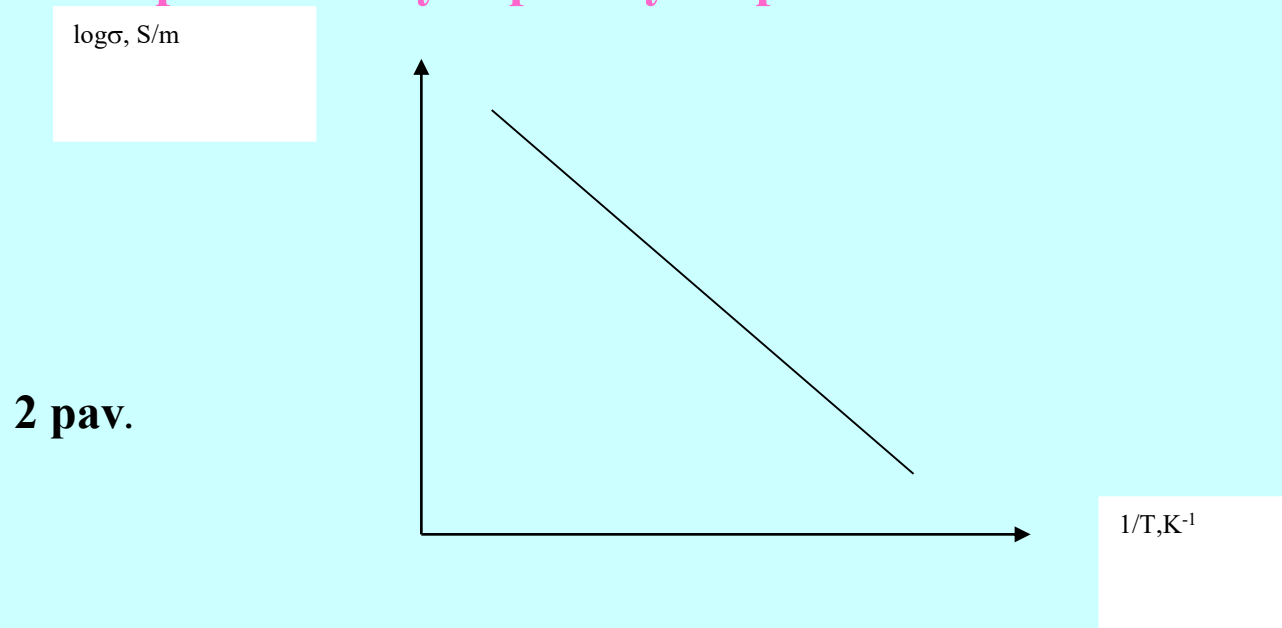
remdamasis Paulio draudimo principu,  $W_F$  - Fermio lygmuo,  $E_g$  - draustinės juostos plotis. Šio modelio remuose laikoma, kad valentinė juosta (V.J.) užpildyta elektronais, kurie gali pereiti į laidumo juostą (L.J.) Savasis laidumas reiškiasi, kai elektronai iš V.J. pereina į L.J. Laisvasis nuo elektronų vietos V.J. yra vad. elektroninėmis skylutėmis.



Kadangi tokiuose puslaidininkiuose  $E_g - W_F = \frac{E_g}{2}$ , tai remiantis (1) formule savasis puslaidininkių

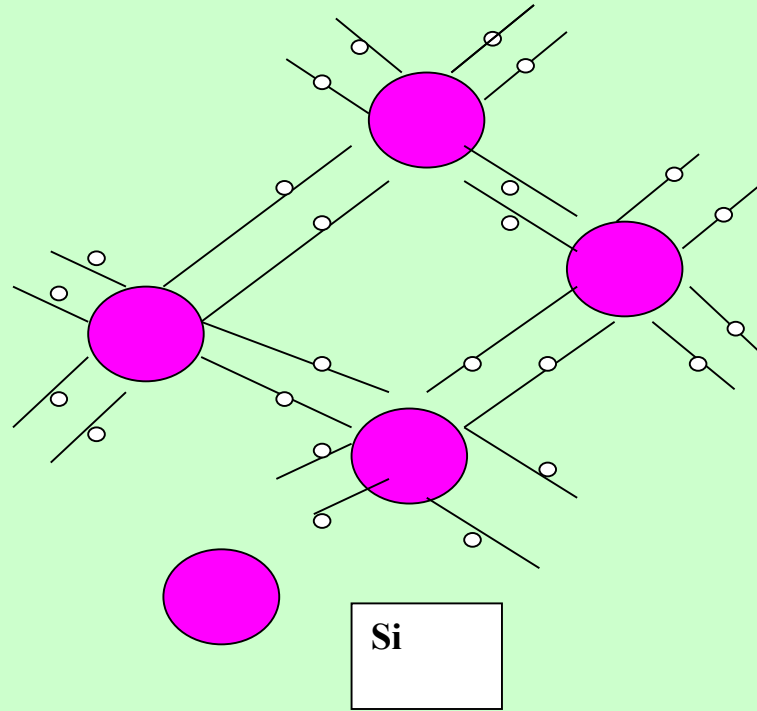
laidumas išreiškiamas taip:  $\sigma = \sigma_0 e^{-\frac{E_g}{2kT}}$ . Šio laidumo temperatūrinė

priklausomybė parodyta 2pav.



Klasikiniai puslaidininkiai yra elementų periodinės lentelės IV grupės elementai (Ge, Si, Sn, Pb, Ti, Zr ir kt.).

Kristalinėse gardelėse tarp atomų dominuoja kovalentiniai ryšiai. Kiekvienas atomas, būdamas keturių kaimynų apsuptyje (kaip tai parodyta 3pav.) rišamas elektronų poromis.

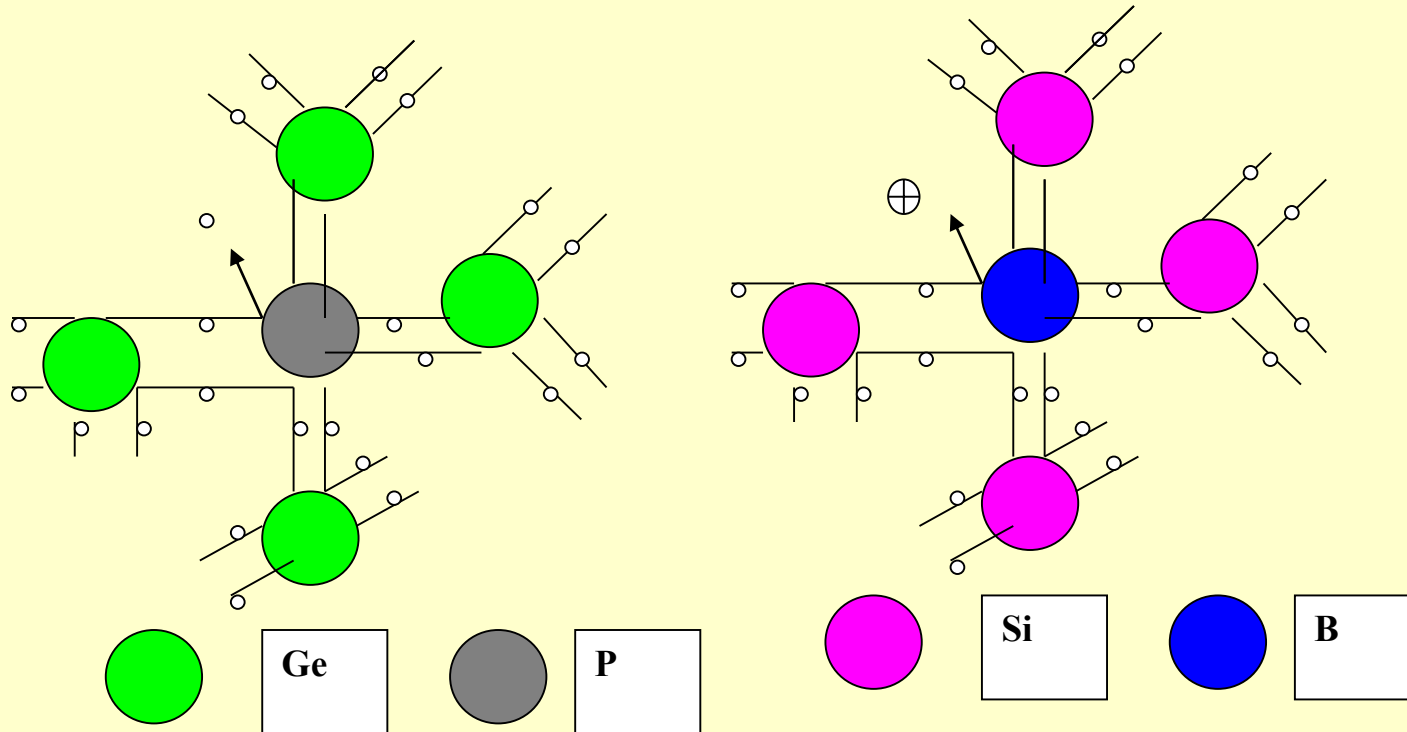


3 pav.

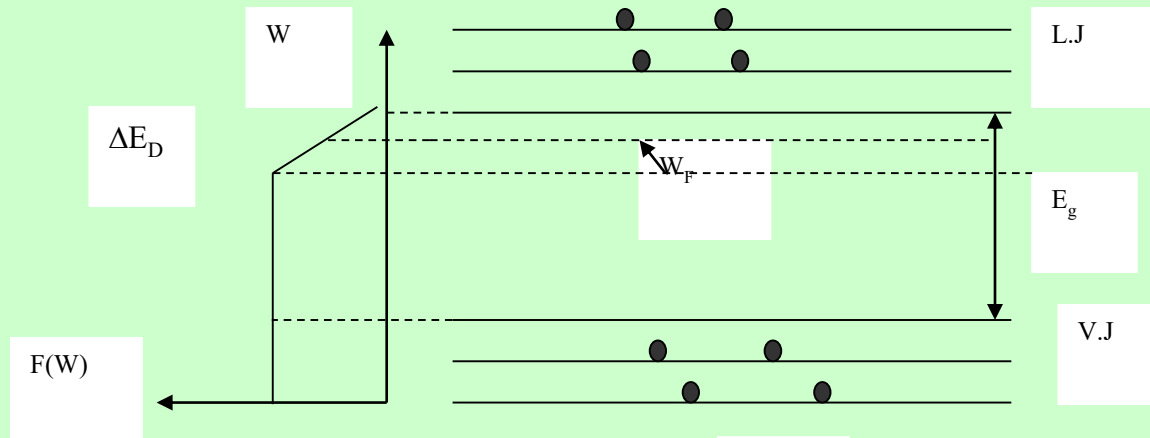
Pasišalinęs ir ryšio elektronas kuria toje vietoje perteklinį + krūvį – susidaro skylutė, kuri irgi pradeda judėti, o susidūrus su elektronu rekombinuoja. Vėl atsiranda naujasis laisvasis elektronas, kai jis įgauna papildomos energijas (ar tai  $kT$ , ar gardelės virpesių) išsilaisvinimui. Juostiniame modelyje rekombinacija reikštų elektronų perėjimą iš LJ į laisvąjį VJ lygmenį. Kiek skylučių, tiek ir elektronų tankis didėjant temperatūrai eksponentiškai didėja. Kai nėra elektrinio lauko  $n$  ir  $p$  krūviai juda chaotiškai, esant laukui jų judėjimas tampa kryptingu.

## Priemaišinis laidumas

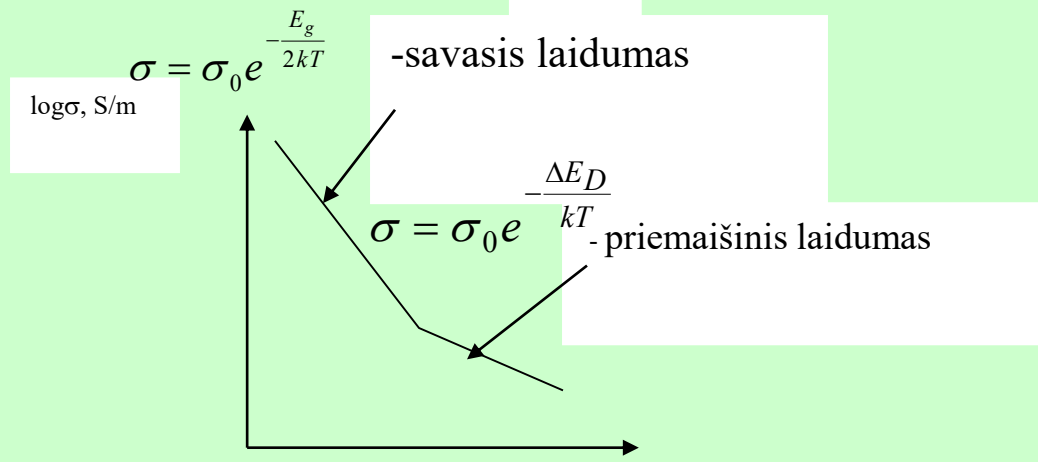
Implantavus į Ge gardelę penkiavalentį P atomą, atsiranda laisvasis  $e^-$  ir puslaidininkis tampa  $n$  tipo, o implantavus į Si gardelę trivalentį B atomą, atsiranda laisvoji skylutė  $p$  ir puslaidininkis tampa  $p$  tipo (3a,b pav.)



Priemaišiniai atomai  $E_g$  juostoje sudaro donorinius lygmenis (žiūr.4 pav). Tokio priemaišinio puslaidininkio laidumo temperatūrinė priklausomybė parodyta 5 pav.



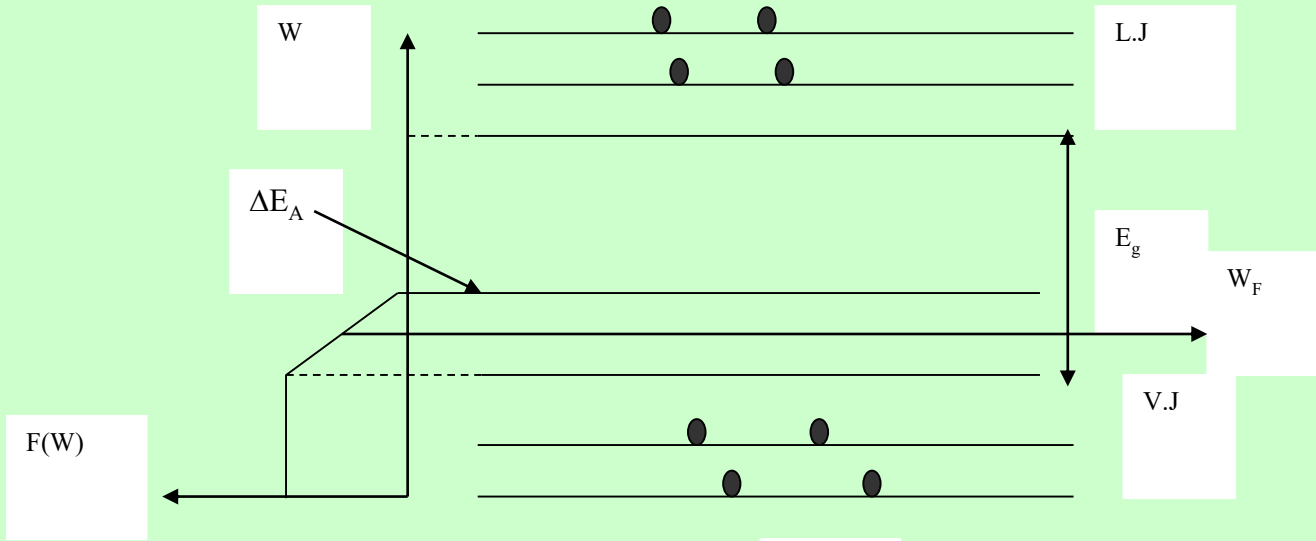
4 pav.



5 pav.

$1/T, K^{-1}$

Jeigu į Si gardelę įvesime Boro (B) atomus. Tai trivalenčio B trijų elektronų B nepakanka sudaryti kovalentinių ryšių su keturiais Si kaimynais, t.y. vienas ryšių liks nesotintas ir sudarys vietą elektrono pagavimui. Pereinant elektronui į šią energinę vietą, liks laisva elektroninė skylutė, kuri judės tarp gardelės atomų. Toks laidumas yra  $p$ , o priemaišiniai B atomai sudaro akceptorinius lygmenis. Tokio priemaišinio puslaidininkio juostinis modelis parodytas 6 pav.

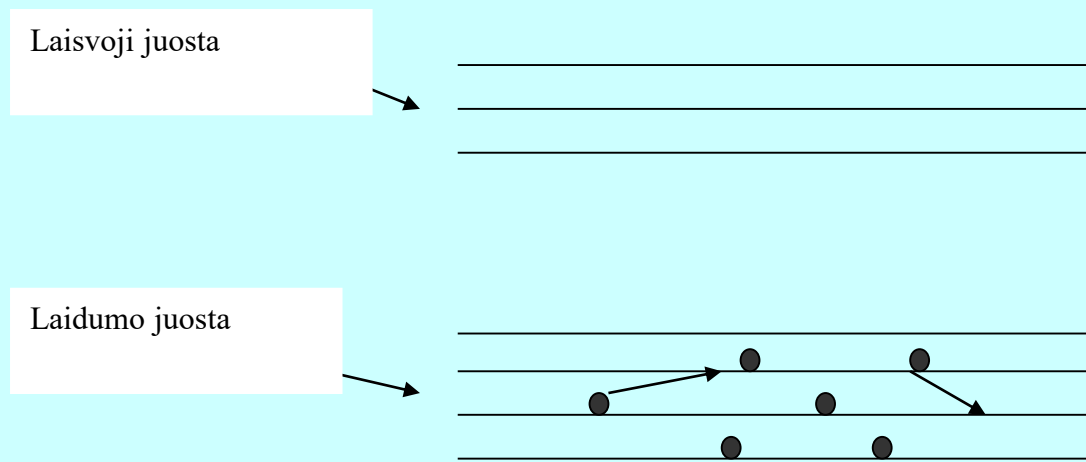


6 pav.

Tokio priemaišinio puslaidininkio laidumo temperatūrinė priklausomybė yra analogiška, kaip pavaizduota 5 pav. tik priemaišinėje laidumo srityje laidumo eksponentinėje priklausomybėje vietoj energijos  $\Delta E_D$  išrašomas  $\Delta E_A$  dydis.

Dielektrikų laidumas yra aiškinamas analogiškai, kaip ir puslaidininkių, tačiau jų  $E_{\rho_{diel}} \gg E_{g_{pust}}$ .

Metalu atveju, jų laidumas aiškinamą elektronų pasikeitimą lygmeninis valentinėje zonoje (kaip tai parodyta 7 pav.).



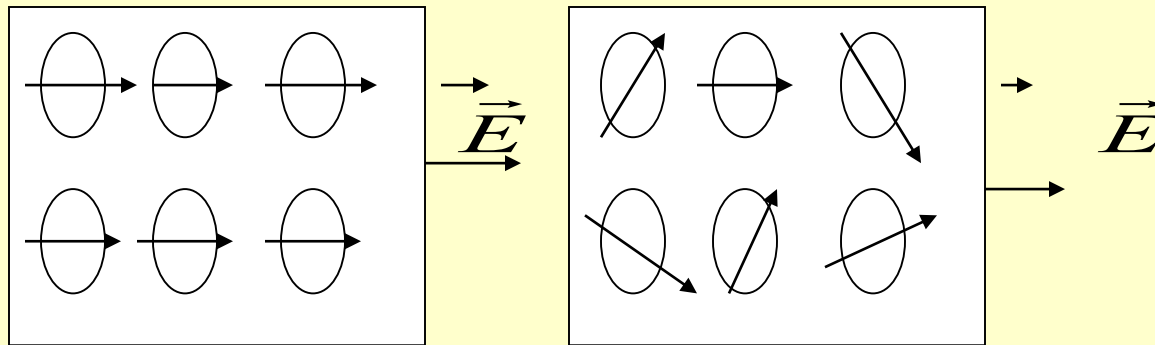
7 pav.

Didėjant T metalų savitoji varža  $\gamma \cong T$  .

## Dielektrikai elektriniame lauke

Patalpinus medžiagas į elektrinį lauką, jose krūvininkai pradeda judėti kryptingai.

Dielektrikai, paprastai yra joninio ryšio kristalinės medžiagos. Jonų elektroninės orbitos yra uždaros ir jų elektrinis  $n$ ,  $p$  laidumas gali sąlygoti priemaišos, kurias dalinai sutrikdo šių orbitų uždarumą. Joniniai kristalai gali būti nepoliniai arba poliniai. Poliniai vadinami tada, kai kristalinė gardelė neturi simetrijos centro. Patalpinus tokius kristalus į elektrinį lauką molekulės, kurios vaizduojamos lygtai dipoliai, pvz.,  $\text{Na}^+\text{Cl}^-$  stengiasi išdėstyti lauko kryptimi. Tai atrodo taip kaip parodyta 8 a,b pav.



8 a pav. nepoliniai dielektrikai

8 b pav. Poliniai dielektrikai

Toks molekulių išsidėstymas  $\vec{E}$  krypties atžvilgiu vad. **polarizacija**.

Elektriniame lauke nepoliniuose dielektrikuose poliarizacijos vektoriaus kryptis ir  $E$  kryptis sutampa, tuo tarpu nepoliniuose dielektrikuose net nesant elektrinio lauko jie jau yra poliarizuoti.

$$\vec{P} = \frac{\sum P_i}{\Delta V} \quad \vec{P} - \text{vad. poliarizacijos vektoriumi } \vec{P}_i \text{ dipolinismomentas}$$

$V$  – dielektriko turis

$\chi$  dielektrinis jautris

$$\varepsilon' = 1 + \chi$$

$$P = \chi \varepsilon_0 E$$

Elektrinės indukcijos vektorius

$$\vec{D} = \varepsilon_0 \vec{E} + \vec{P} = \varepsilon_0 \vec{E} + \chi \varepsilon_0 \vec{E} = \varepsilon_0 (1 + \chi) \vec{E}$$

Arba

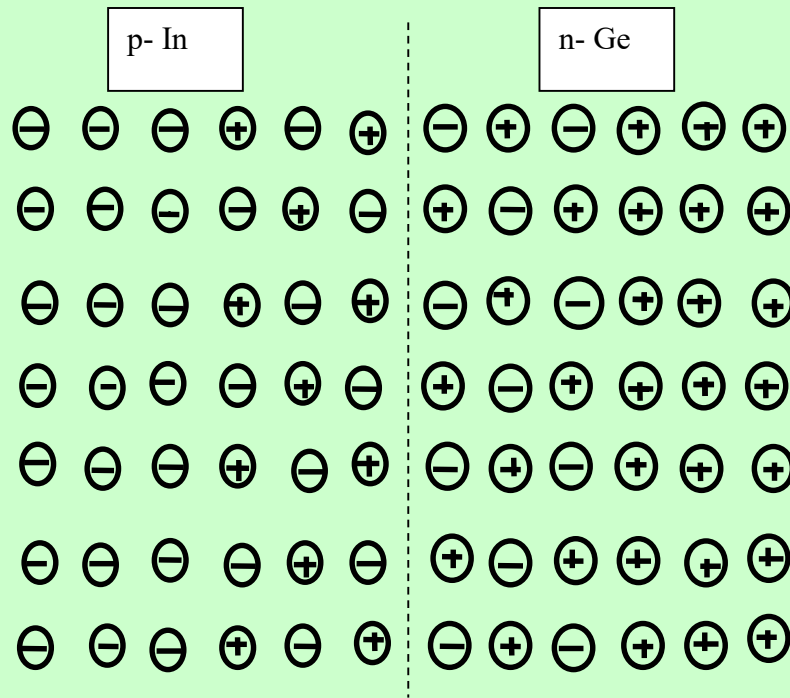
$$\vec{D} = \varepsilon' \varepsilon_0 \vec{E} = \varepsilon_0 \vec{E}$$

Nepolinių dielektrikų  $\varepsilon' \cong 10$ , polinių, tokių kaip feroelektrikai  $\varepsilon' \cong 10^2 - 10^4$ .



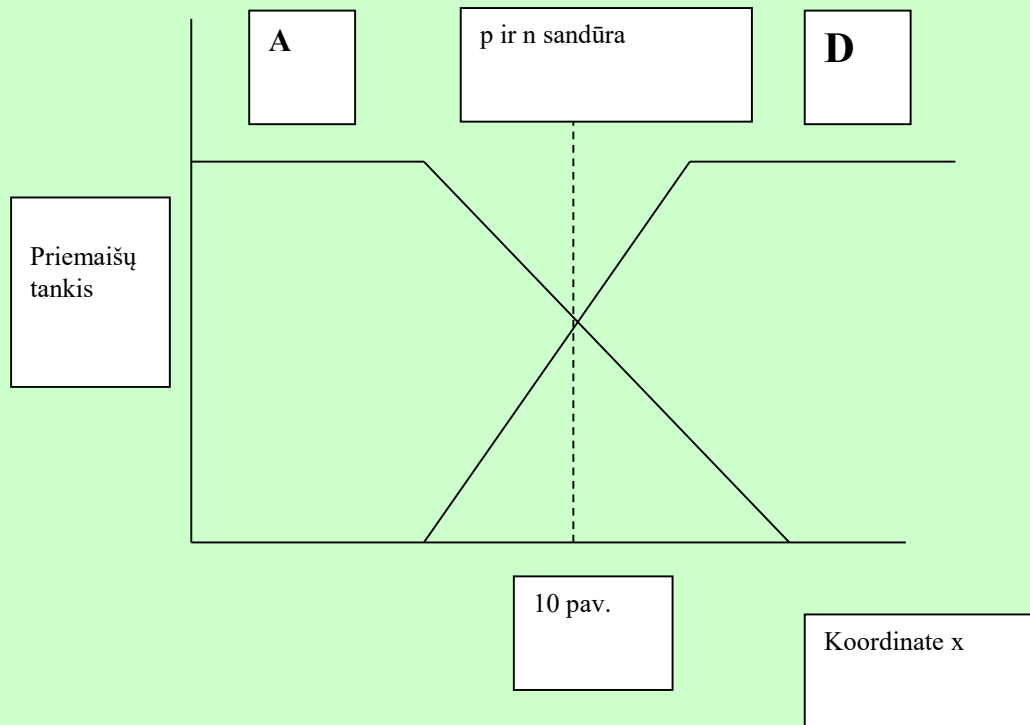
## *p* ir *n* sandūra

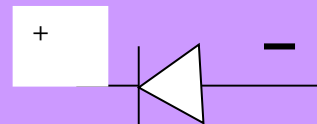
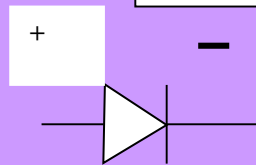
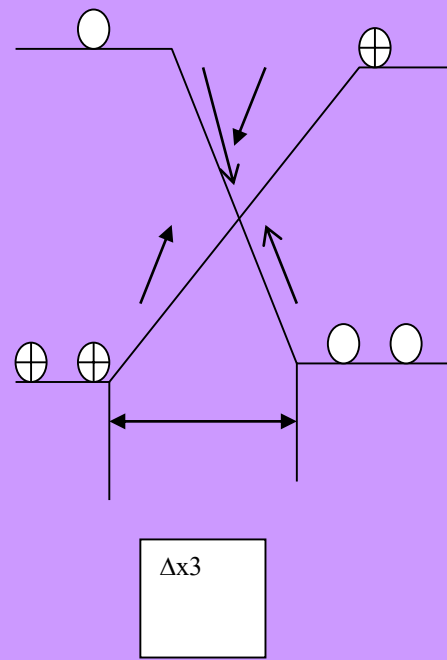
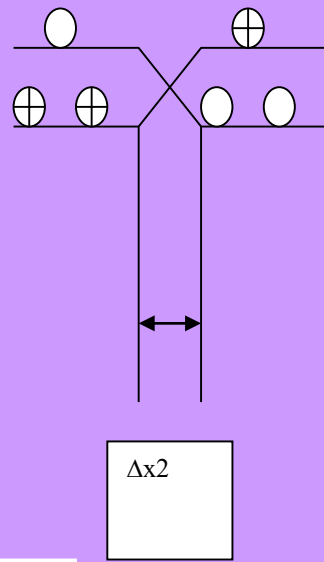
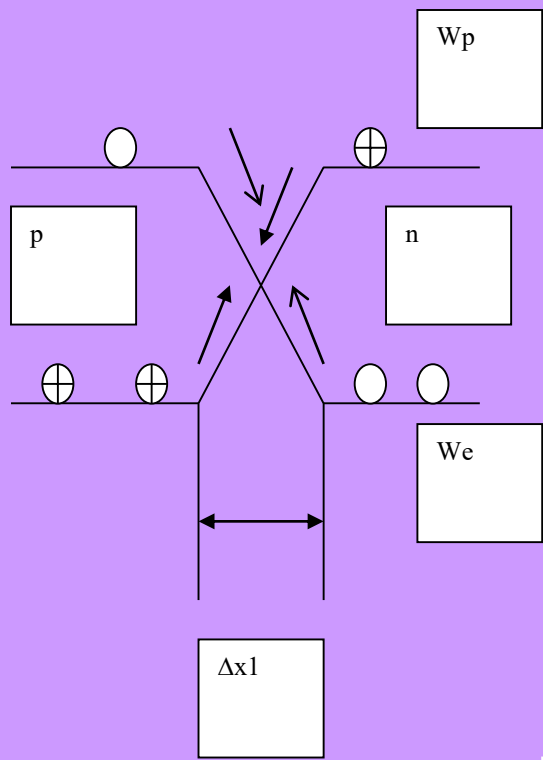
Visos minėtosios medžiagos (metalai, puslaidininkiai, dielektrikai) vienaip arba kitaip plačiai naudojami visose mūsų gyvenimo srityse. Radiotechnikoje, elektronikoje plačiai naudojama *p* ir *n* puslaidininkių sandūra. *p* ir *n* sandūra gaminama paprasčiausiu atveju taip: imamas n-Ge monokristalas ir inertinių dujų atmosferoje arba vakuume į jį implantuojamas In atomas. In atomas difunduoja į Ge. Tokiame gylyje iki, kurio difunduoja In, Ge tampa skyliniu (p-Ge). Riboje turime *p-n* sandūrą (žiūr. 9 pav.).

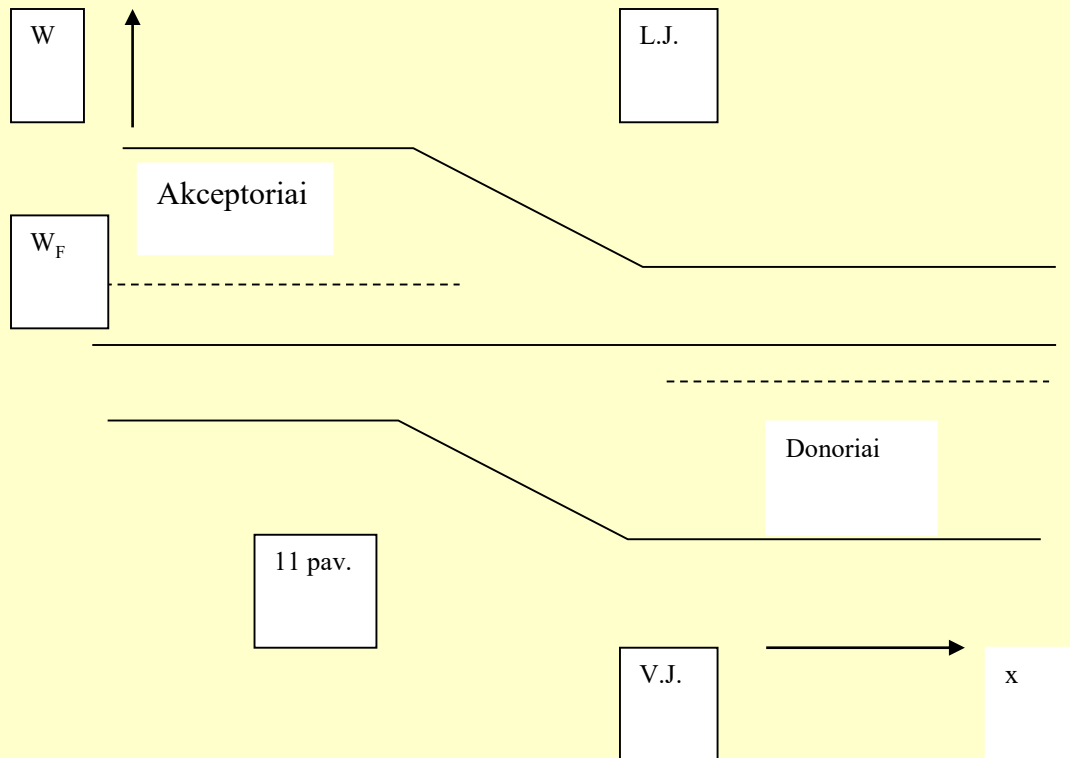


9 pav. Struktūrinis *p* ir *n* sandūros atvaizdavimas

In atomai sudaro akceptorinius lygmenis. Akceptorinių ir donorinių priemaišų pasiskirstymas p ir n sandūrų aplinkoje parodyta 10 pav.







P ir n sandūros juostinis modelis parodytas 11 pav.  
 Paprasčiausia  $p$ - $n$  sandūra yra naudojama konstruojant puslaidininkinių diodus (detektorius). Diodai naudojami kintamajai elektros srovei lyginti.

# Medžiagos magnetiniame lauke

$$\vec{I} = \frac{\sum \vec{p}_m}{\Delta V}; \quad \vec{I} = \varkappa \vec{H}$$

Magnetinis jautris  $\varkappa_{ka}, \varkappa_{km} \left[ m^3 / kmol \right]$

Savitasis ,  $\varkappa_s = \frac{1}{\rho} \varkappa$  čia  $\rho [kg / m^3]$

$$\vec{H} = \frac{\vec{B}}{\mu_0} - \vec{I} \Rightarrow \frac{\vec{B}}{\mu_0} - \varkappa \vec{H}; \quad \frac{\vec{B}}{\mu_0} = \vec{H} + \varkappa \vec{H}$$

$$\vec{H}(1 + \varkappa) = \frac{\vec{B}}{\mu_0} \Rightarrow \vec{H} \mu \mu_0 = \vec{B}$$

$$\mu = 1 + \chi; \quad \mu_a = \mu_0 \mu; \quad \mu_0 = 4\pi \cdot 10^{-7} \text{ H}_n / \text{m}.$$

$$\vec{H} = \frac{\vec{B}}{\mu_0(1 + \chi)};$$

Fe  $\mu \approx 5 \cdot 10^3$ , supermalojus  $\mu = 8 \cdot 10^5$

Diamagnetikai  $\chi_{\text{km}} \sim 10^{-8} \div 10^{-7} \text{ m}^3 / \text{kmol}$

$$\chi_{\text{km}} \sim 10^{-7} \div 10^{-6} \text{ m}^3 / \text{kmol}$$

$$\chi_{\text{km}} \sim 10^3 \text{ m}^3 / \text{kmol}$$

## Paramagnetikai

Jeigu medžiagų atomų magnetinis momentas  $P_m \neq 0$  turime paramagnetikus.

Pagal Kiuri, paramagnetikų magnetinis jautris  $\chi_{\text{kmol}} = \frac{C}{T}$  .

1905 Lanževenas paskelbė klasikinę paramagnetikų teoriją.

Atomai lauke  $\vec{B}$  įgyja energiją  $\rightarrow W = -pB \cos \vartheta$  1)

$\vartheta$  yra kampas tarp  $\vec{p}_m$  ir  $\vec{B}$  . Įmagnetėjimas  $\vec{I} = n_0 \vec{p}_m L(a)$  2).

$L(a)$  – klasikinė Lanževeno funkcija  $L(a) = \text{ctha} - \frac{1}{a}$  3)

$$a = \frac{\mu_0 p_m H}{kT} \quad 4) \quad p_m \approx 10^{-23} \text{ J} \cdot \text{m}^2 / \text{Wb}$$

Kai  $p_m \ll kT$ , tai  $L(a) \approx a/3$ , tai  $\vec{I} = \frac{n_0 p_m^2 \mu_0}{3kT} \vec{H}$  5)

$$\chi_{\text{kmol}} = \frac{n_0 p_m^2 \mu_0}{3kT} \Rightarrow \left| \frac{I}{H} \right| \quad 6)$$

Kai  $p_m H \gg kT$ ,  $L(a) \rightarrow 1$  tai  $I = n_0 p_m$  7) Metaluose

$$\chi_{\text{kmol}} = \frac{3n_0 \mu_B^2 \mu_0}{2W_F} \quad 8)$$

Čia  $n_0$ -elektronų tankis  $\mu_B = 9.27 \cdot 10^{-23} \text{ J/T}$   $\mu_B = -\frac{e\hbar}{2m}$

Boro magnetonas,  $W_F$ -Fermio lygmuo

$$e = 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ C}; \quad \hbar = 1,0545 \cdot 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}; \quad m = 9,1 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$$

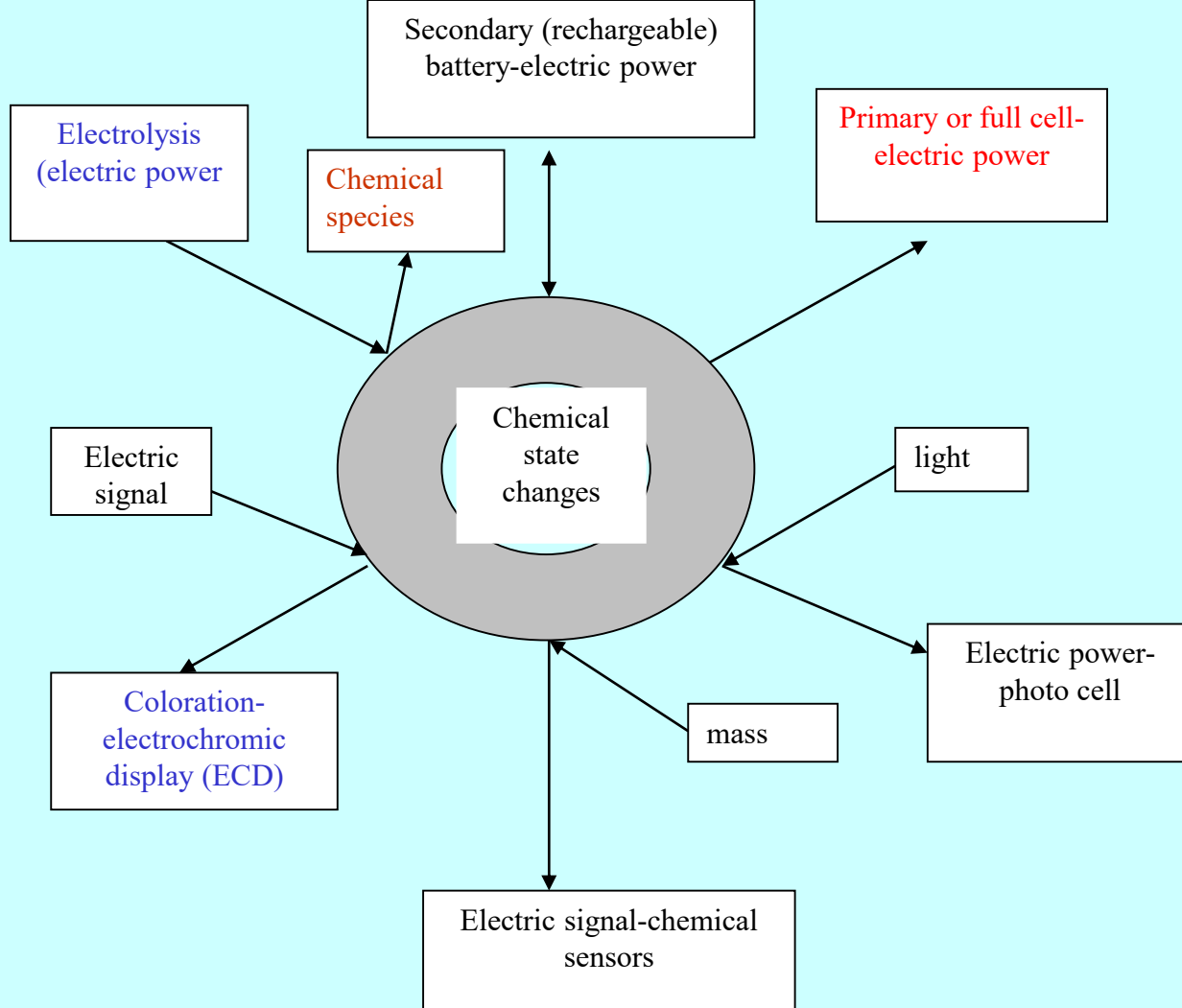


# Diamagnetikai

Normaliose sąlygose jų  $p_m = 0$ , tačiau papildomai  $\vec{B}$  laukų atomų

elektriniuose apvalkaluose galima indukuoti  $\vec{p}_m$ .

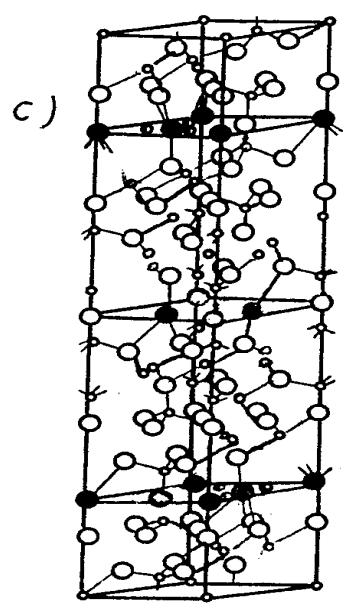
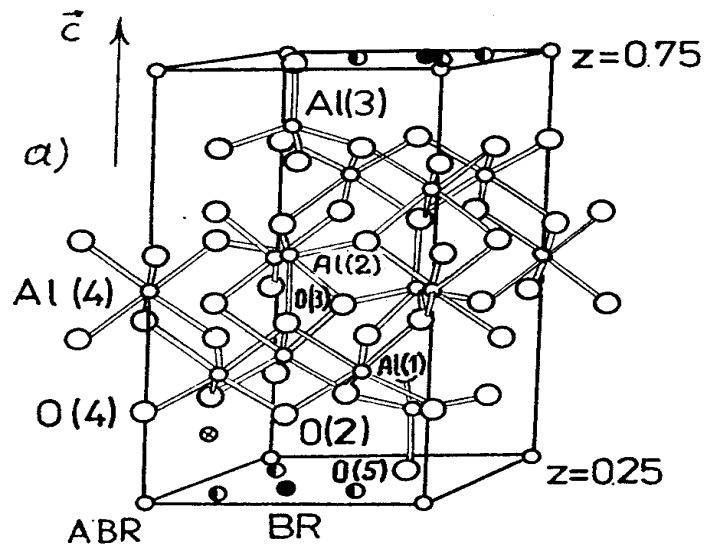
$$\chi_{\text{kmol}} = \frac{n_0 \mu_B^2 \mu_0}{2W_F}$$



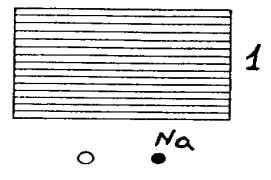
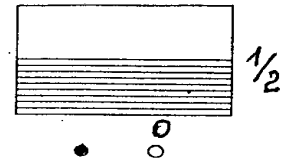
**Electrochemical devices**  
 agree T. Kudo, K. Fueki, SSI, 1990

<b>1833</b>	<b>Faraday's Law</b>
<b>1897</b>	<b>ZrO<sub>2</sub> glower (Nernst)</b>
<b>1920</b>	<b>High ionic conduction in <math>\alpha</math>-AgI</b>
<b>1933</b>	<b>Diffusion theory of lattice defects</b>
<b>1934</b>	<b>Ion transport mechanism for <math>\alpha</math>-AgI</b>
<b>1943</b>	<b>Ionic conduction theory for ZrO<sub>2</sub></b>
<b>1962</b>	<b>High temperature fuel cell using ZrO<sub>2</sub></b>
<b>1967</b>	<b><math>\beta</math>-alumina, Rb Ag<sub>4</sub>I<sub>5</sub></b>
<b>1969</b>	<b>Electro-chromism in WO<sub>3</sub></b>
<b>1970</b>	<b>Electric double-layer capacitors (ionistor)</b>
<b>1970</b>	<b>Electrochemical memory devices</b>
<b>1972</b>	<b>Solid state Li battery, memoriode</b>
<b>1976</b>	<b>NASICON secondary battery using TiS<sub>2</sub> intercalation</b>
<b>1979</b>	<b>High Cu<sup>+</sup> conductor Organic polymer solid-electrolyte</b>
<b>1981</b>	<b>Plastic battery</b>
<b>1983</b>	<b>Commercial ECD</b>
<b>Future prospects of SSI Neuron fiber</b>	

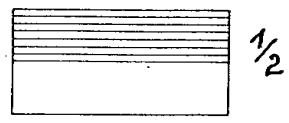
**Bio-computer system**



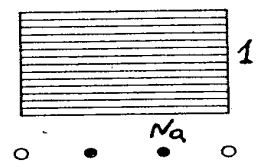
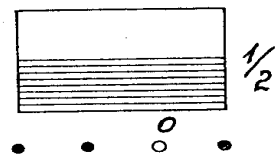
- BR
- ABR
- mO
- O



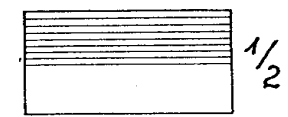
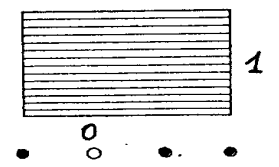
b)

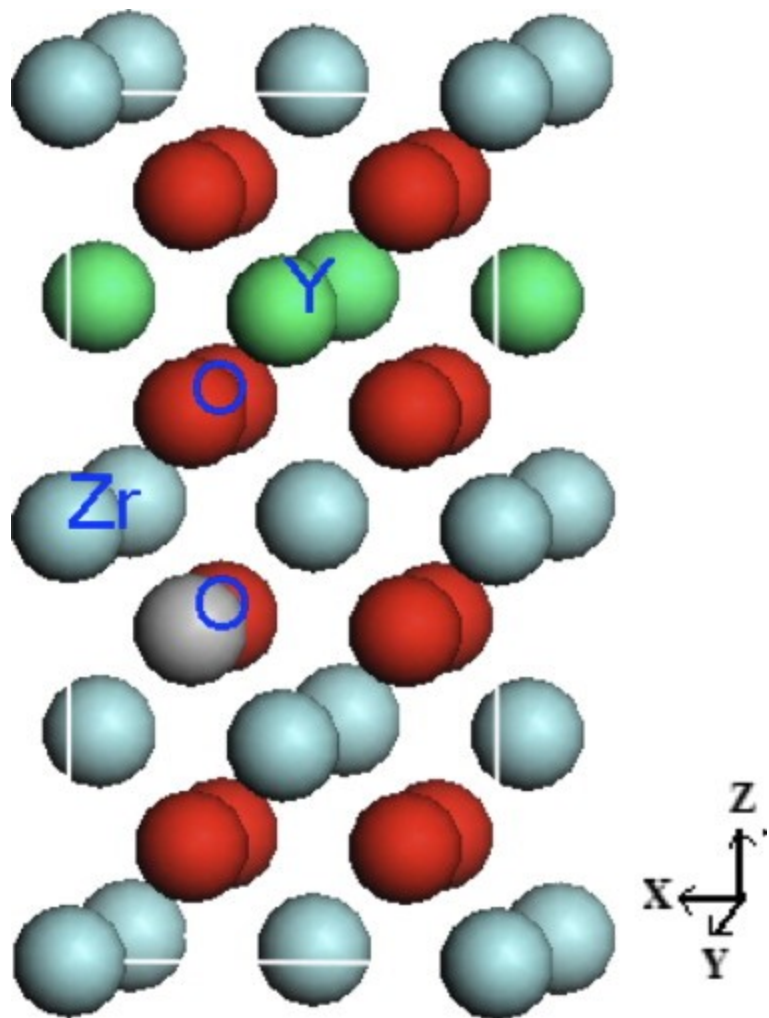


- O
- Al
- Na
- mO

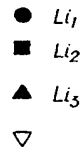
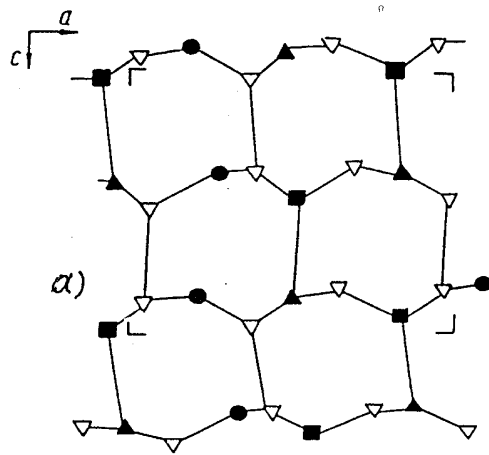


d)





YSZ



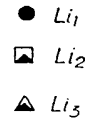
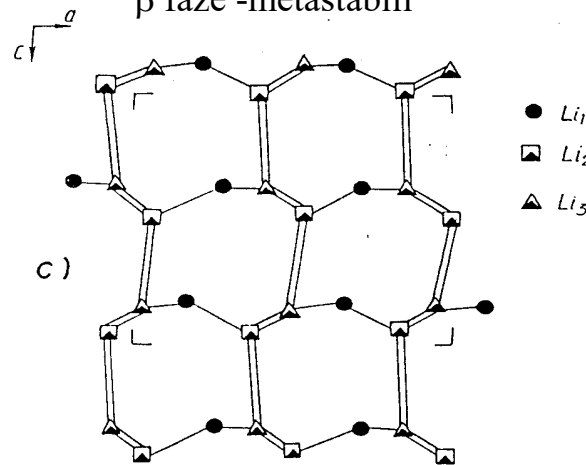
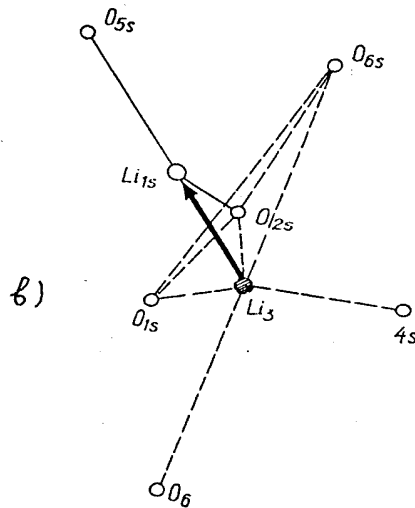
$\alpha \rightleftharpoons \beta$   $T=450\text{K}$

$\beta \rightleftharpoons \gamma$   $T=523\text{K}$

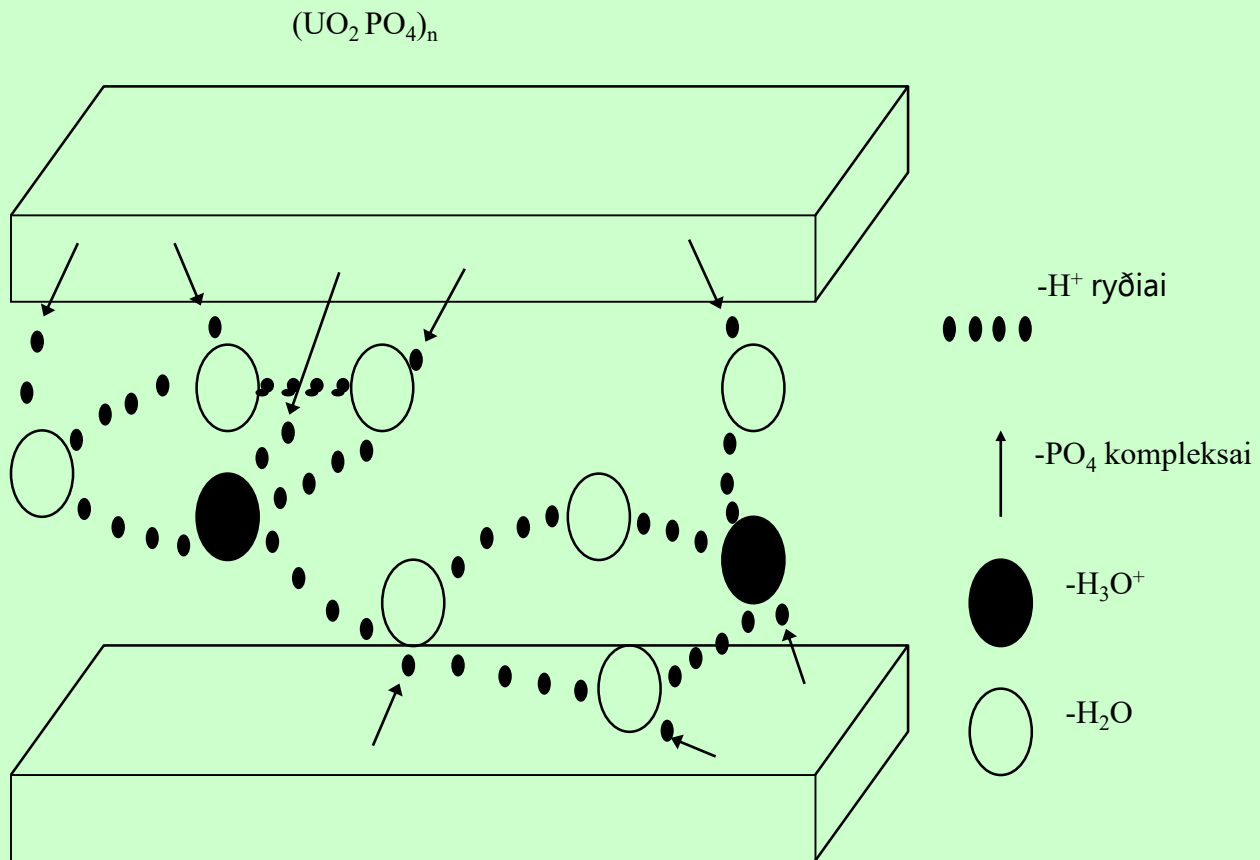
$\alpha$  fazè-monoklininè ( $P_{2/n}$ )

$\gamma$  fazè-rombinè ( $P_{can}$ )

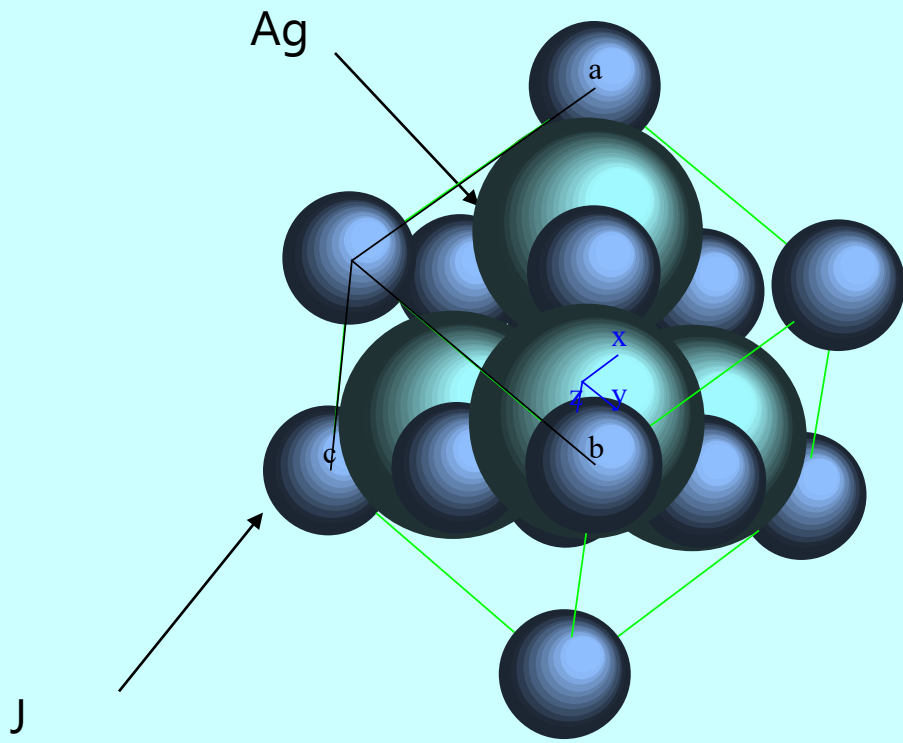
$\beta$  fazè -metastabili



a)  $\alpha$ - $Li_3Fe_2(PO_4)_3$   $Li^+$  ion map on the (010) plane, b) oxygen window in  $\beta$  phase on the (001) plane, c)  $\gamma$  -  $Li_3Fe_2(PO_4)_3$   $Li^+$  ion map on the (010) plane

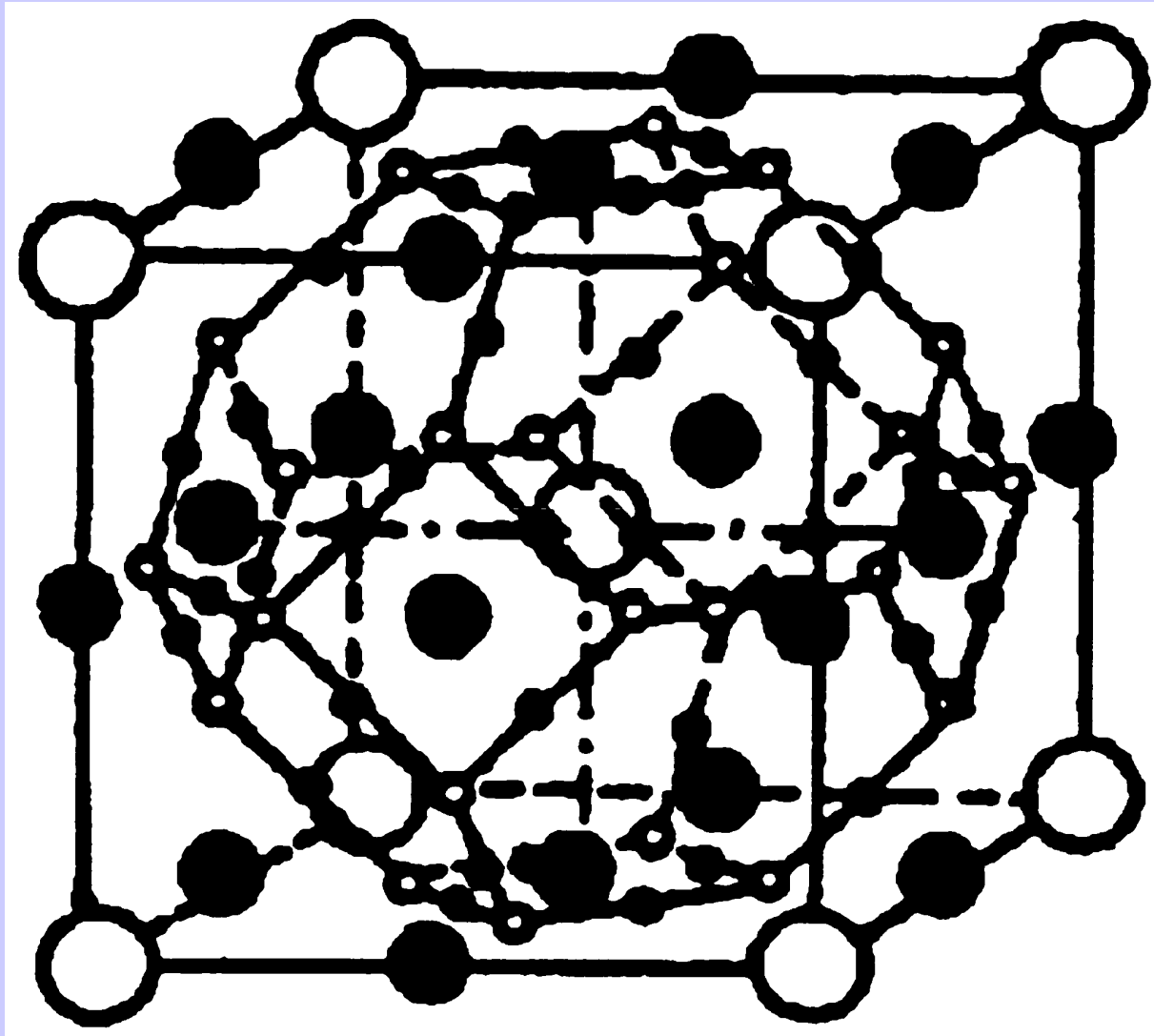


HUP structure



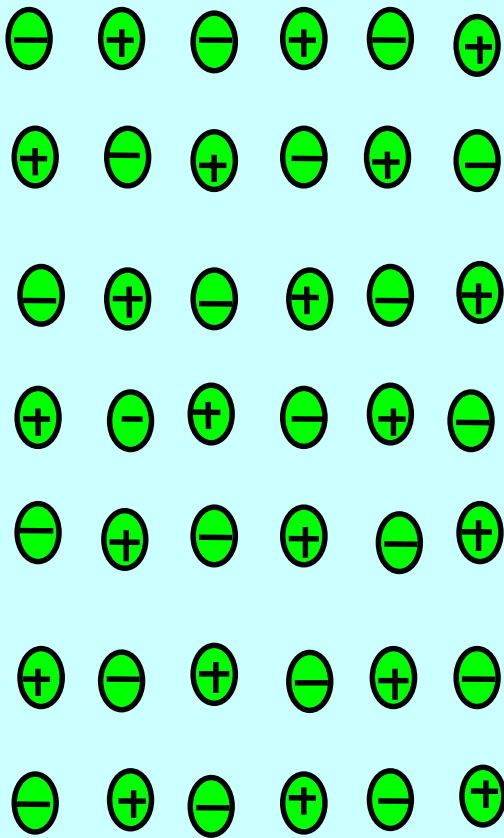
$\alpha$ -AgJ structure



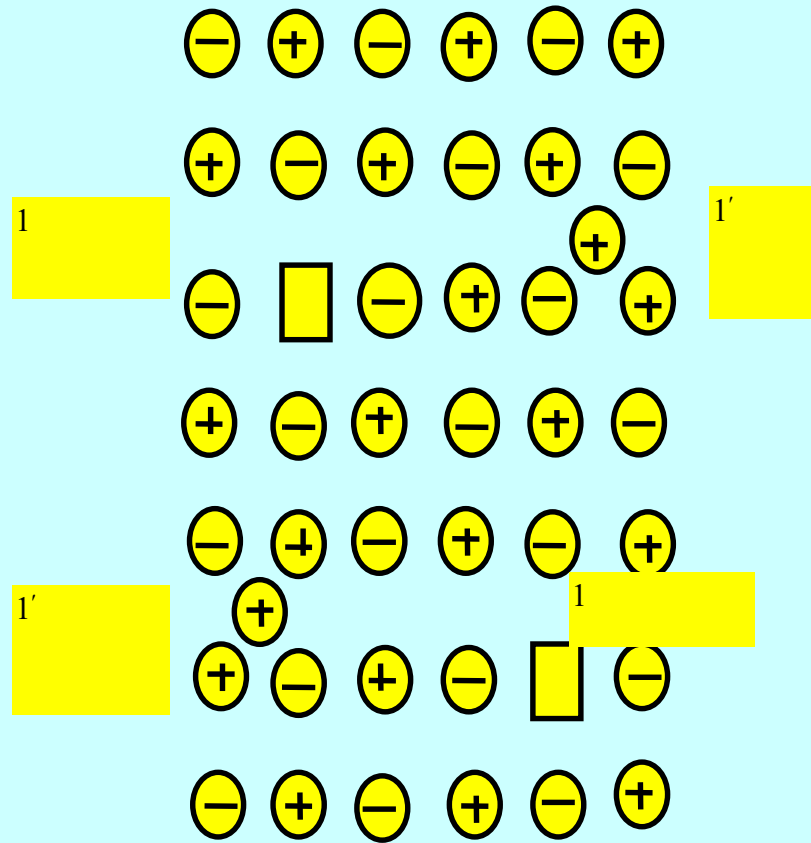


$\alpha$ -AgI lattice

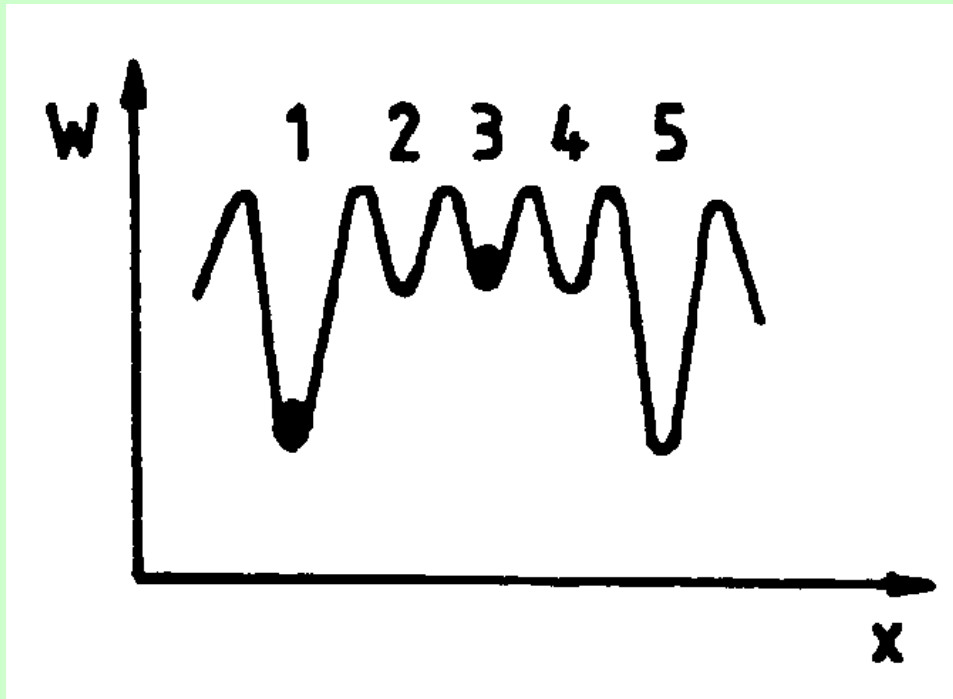
In the lattice of  $\alpha$ -AgI are d-12, b-6 and h-24 energy positions for diffusion of 2 Ag ions.



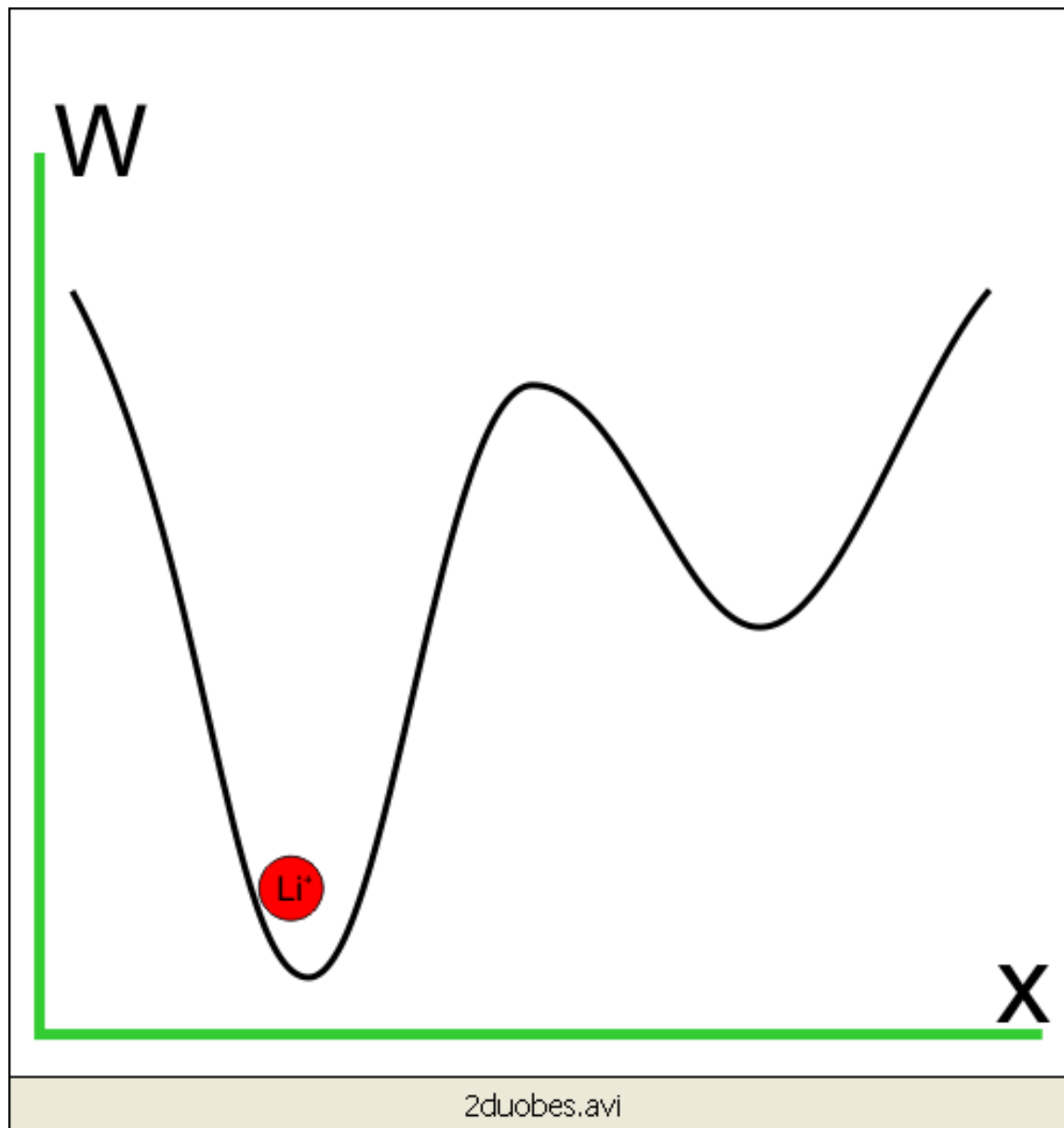
Ideal lattice



Point Frenkel –type defects



The energy relief of of ions in the lattice with the point Frenkel –type defects



2duobes.avi

# Point Frenkel - type defect

$$N_j = N_v$$

$$F = N_F \cdot G_F - T \cdot S$$

$$G_F = H_F - T \cdot S_F$$

$$P_1 = \frac{N'}{(N' - N_F) N_F!}$$

$$P_2 = \frac{N!}{(N - N_F) N_F!}$$

$$S = k \ln P \quad P = P_1 \cdot P_2$$

$$S = k(\ln P_1 + \ln P_2) = k \ln \left\{ \frac{N'}{(N' - N_F) N_F!} \cdot \frac{N!}{(N - N_F) N_F!} \right\} \quad \begin{array}{l} 1 \ll N_F \ll N, N' \\ \ln x! \approx x \ln x - x \end{array}$$

$$k = 1,38 \cdot 10^{-23} \text{ J} \cdot \text{K}^{-1}$$

$$\ln = \frac{N'}{(N' - N_F) N_F!} = \ln(N' - N_F) - \ln N_F! =$$

$$= N' \ln N' - N' - (N' - N_F) \ln(N' - N_F) + (N' - N_F) - N_F \ln N_F + N_F =$$

$$= N' \ln N' - N' \ln(N' - N_F) + N_F \ln(N' - N_F) - N_F \ln N_F$$

$$\ln = \frac{N!}{(N - N_F) N_F!} = N \ln N - N \ln(N - N_F) +$$

$$+ N_F \ln(N - N_F) - N_F \ln N_F; \quad \left( \frac{\partial F}{\partial N_F} \right) = 0$$

$$\frac{S}{k} = N \ln N - N' \ln N' - 2N_F \ln N_F -$$

$$- (N' - N_F) \ln(N' - N_F) - (N - N_F) \ln(N - N_F)$$

$$- \frac{G_F}{kT} = 2 \ln N_F - \ln(N - N_F) - \ln(N' - N_F)$$

$$N_F \ll N, N'$$

$$N_F^2 = (N - N_F)(N' - N_F) \exp\left(-\frac{G_F}{kT}\right)$$

$$N_F^2 = NN' \exp\left(-\frac{G_F}{kT}\right)$$

$$N_F = \sqrt{NN'} \exp\left(-\frac{G_F}{2kT}\right)$$

$N'$ -j. tarpmazgiuose;

$N$ -j. mazgiuose;

$P_1$ -j. pasiskirstymo tikimybe;

$P_2$ -vakansiju pasiskirstymo tikimybe;

$S_F = \Delta Q/T$ ;  $H_F = U + pV$ .

$N_j$ -concentration of ions

$N_v$ -concentration of vacancies

$N_F$ -concentr. of p.Frenkel def.

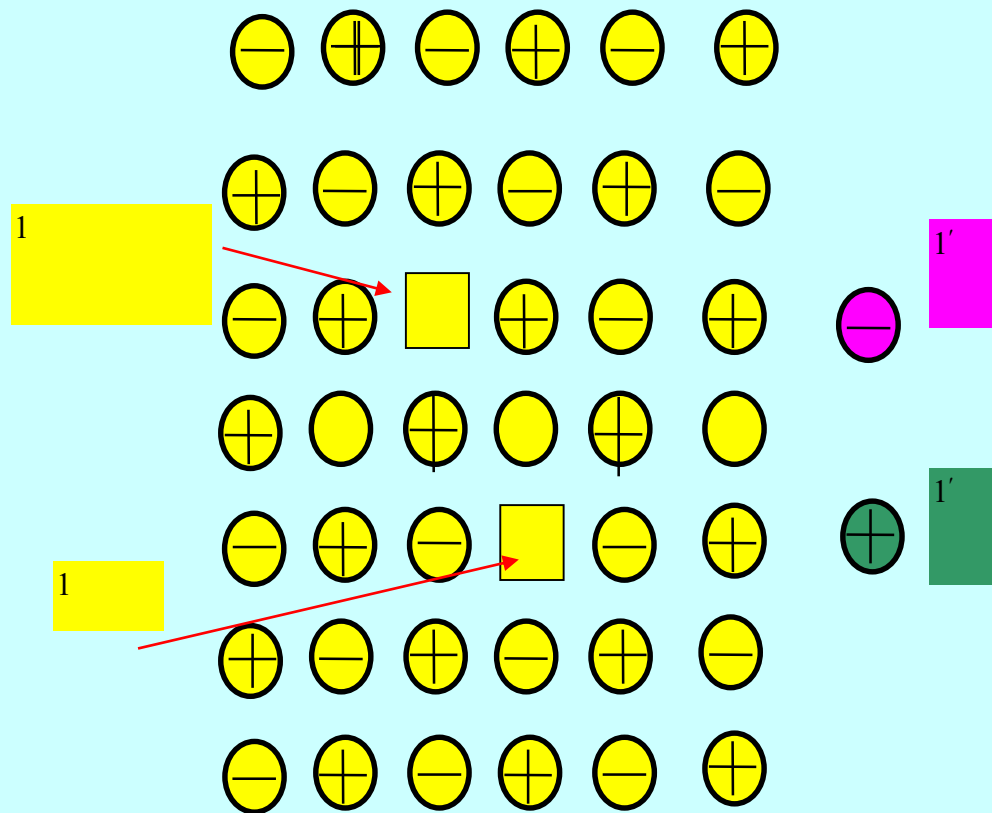
F-free energy of lattice

$G_F$ -Gibbs energy

S-entropy

$H_F$ -enthalpy

$P_1, P_2$ -probabilities



Point Schottky-type defects

# Point Schottky-type defect

$$F = N_s \cdot G_s - T \cdot S$$

$$G_s = H_s - T \cdot S_s$$

$$P = \frac{N!}{(N - N_s)! N_s!}$$

$$S_s = k \ln P = k \ln \frac{N!}{(N - N_s)! N_s!}$$

$$G_s = T \frac{\partial S_s}{\partial N_s}$$

$$\frac{\partial S_s}{\partial N_s} = k \ln \frac{N}{N_s}$$

$$\frac{G_s}{k \cdot T} = \ln \frac{N}{N_s}$$

$$N_s = N \exp\left(-\frac{G_s}{k \cdot T}\right)$$

F-free energy of the lattice

$N_s$ -concentr. of p.Schottky defects

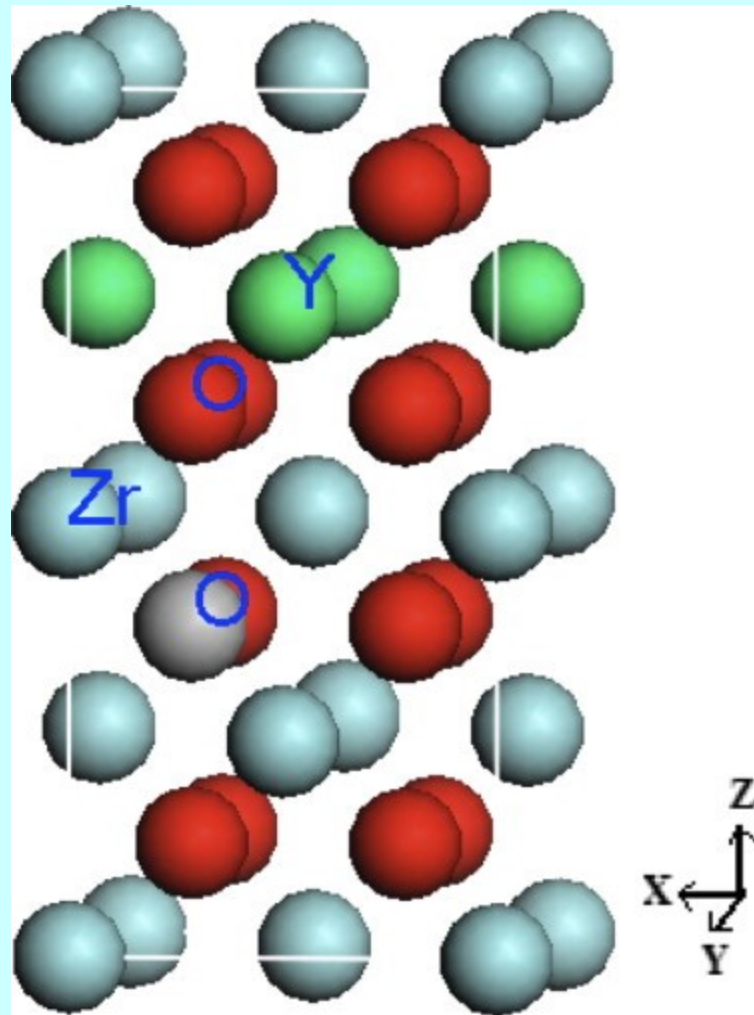
N-concentration of the ions in lattice

T-temperature

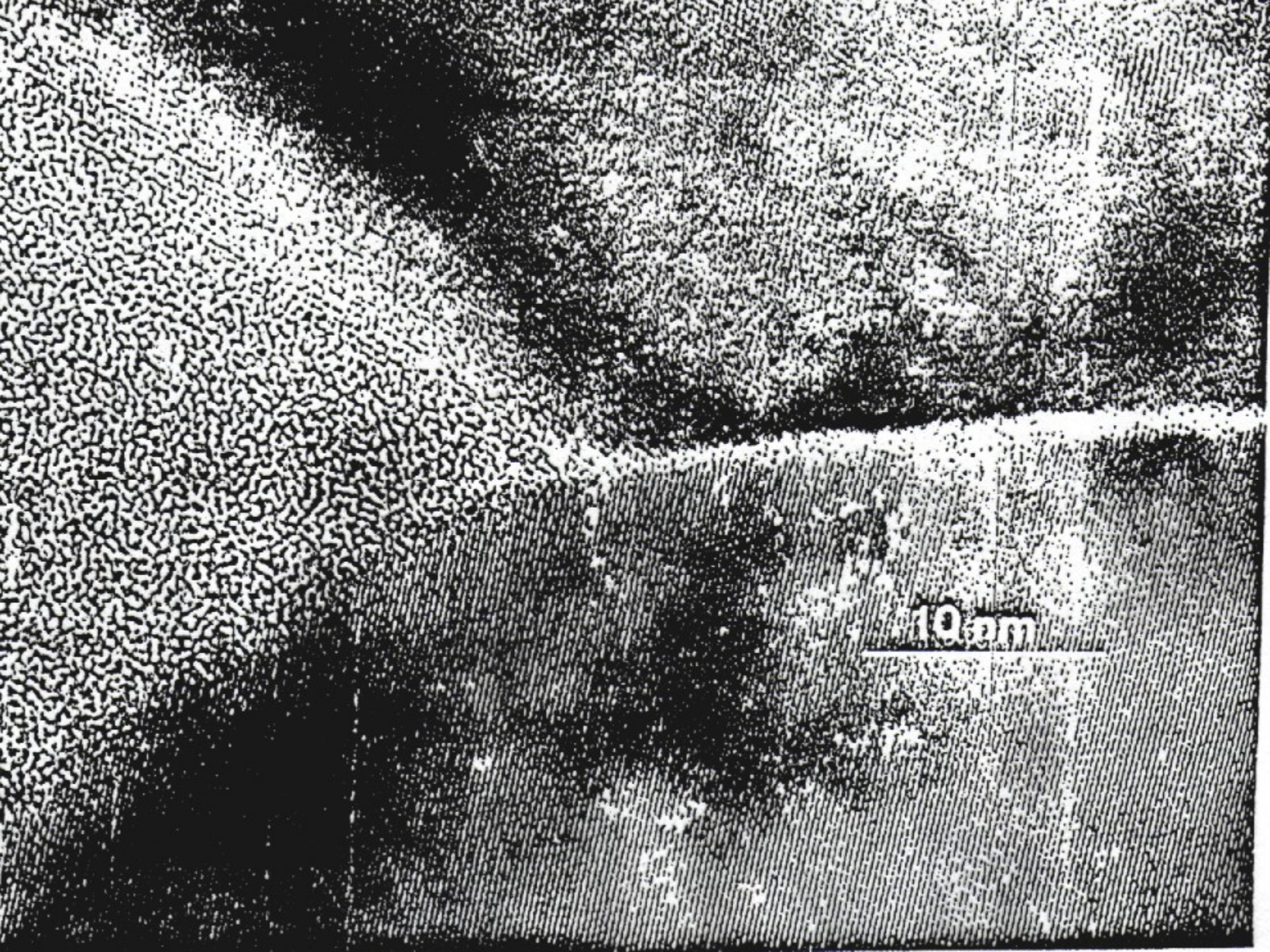
P-probability

$G_s$ -Gibbs energy





YSZ



10µm

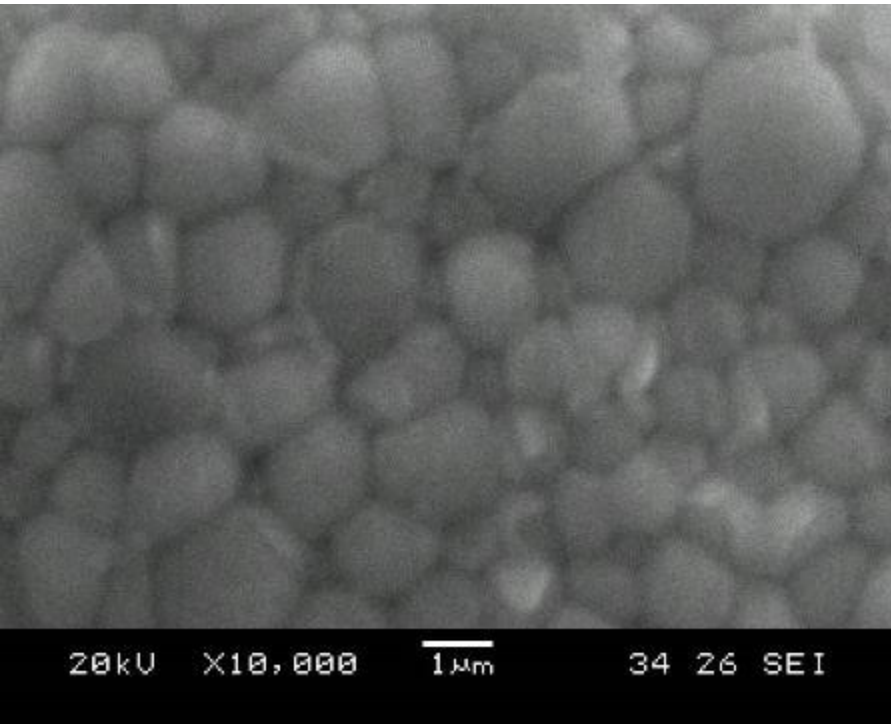
Commercial YSZ, GDC and SDC powder with different surface area  $S_{\text{BET}}$  from company **Fuel Cell Materials** were used for the sintering of the ceramics.

The powder was uniaxially cold-pressed at 150 MPa. The sintering of the ceramic samples was conducted in air at temperature  $T = 1773$  K. The sintering duration of the ceramics was 1 h. The composition,  $S_{\text{BET}}$  of the powder and relative density of the ceramics are presented in Table

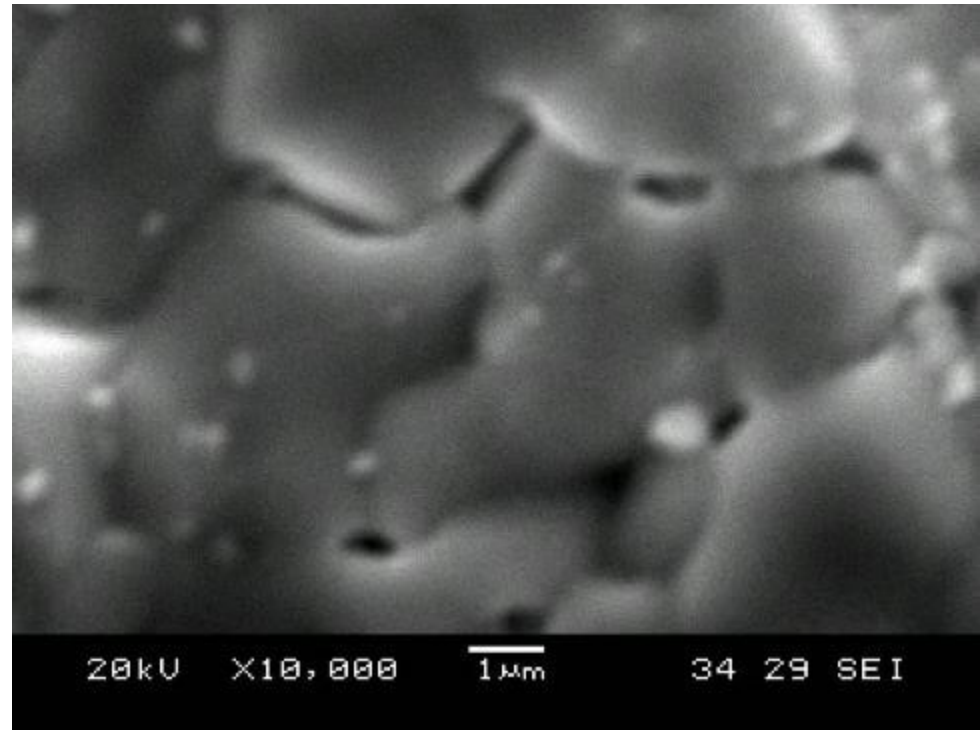
YSZ, GDC, SDC composition,  $S_{\text{BET}}$  of the powder theoretical and relative densities of the ceramics.

Composition	$S_{\text{BET}}$ , m <sup>2</sup> /g	$D_{\text{theoretical}}$ g/cm <sup>3</sup>	$d$ , %
Gd <sub>0.2</sub> Ce <sub>0.8</sub> O <sub>1.9</sub>	220	7.24[3]	95.0
Sm <sub>0.2</sub> Ce <sub>0.8</sub> O <sub>1.9</sub>	212	7.15[1]	94.0
Sm <sub>0.15</sub> Ce <sub>0.85</sub> O <sub>2-<math>\delta</math></sub>	195	7.22[5]	94.0
Sm <sub>0.15</sub> Ce <sub>0.85</sub> O <sub>1.925</sub>	203	-	94.0
Sm <sub>0.15</sub> Ce <sub>0.85</sub> O <sub>1.925</sub>	8	-	92.0
Gd <sub>0.1</sub> Ce <sub>0.9</sub> O <sub>1.95</sub>	6.44	7.21[2]	97.0
Gd <sub>0.1</sub> Ce <sub>0.9</sub> O <sub>2-<math>\delta</math></sub>	201	-	95.0
92 mol% ZrO <sub>2</sub> 8 mol%Y <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	1.67	5.96[4]	97.0
92 mol% ZrO <sub>2</sub> 8 mol%Y <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	12.4	-	95.0

1. H.B.Li et al. Acta Mater. 54(2006)721; 2. K.Huang et al. J. Amer. Ceram. Soc. 81(1998)357; 3. G. Chiadeli et al. Sol. State Ioncs, 176(2005)1505; 4. H.Liu et al. Mat. And Design, 31(2010)2972; 5. C.Jiang et al. Power Sources, 165(2007)134.

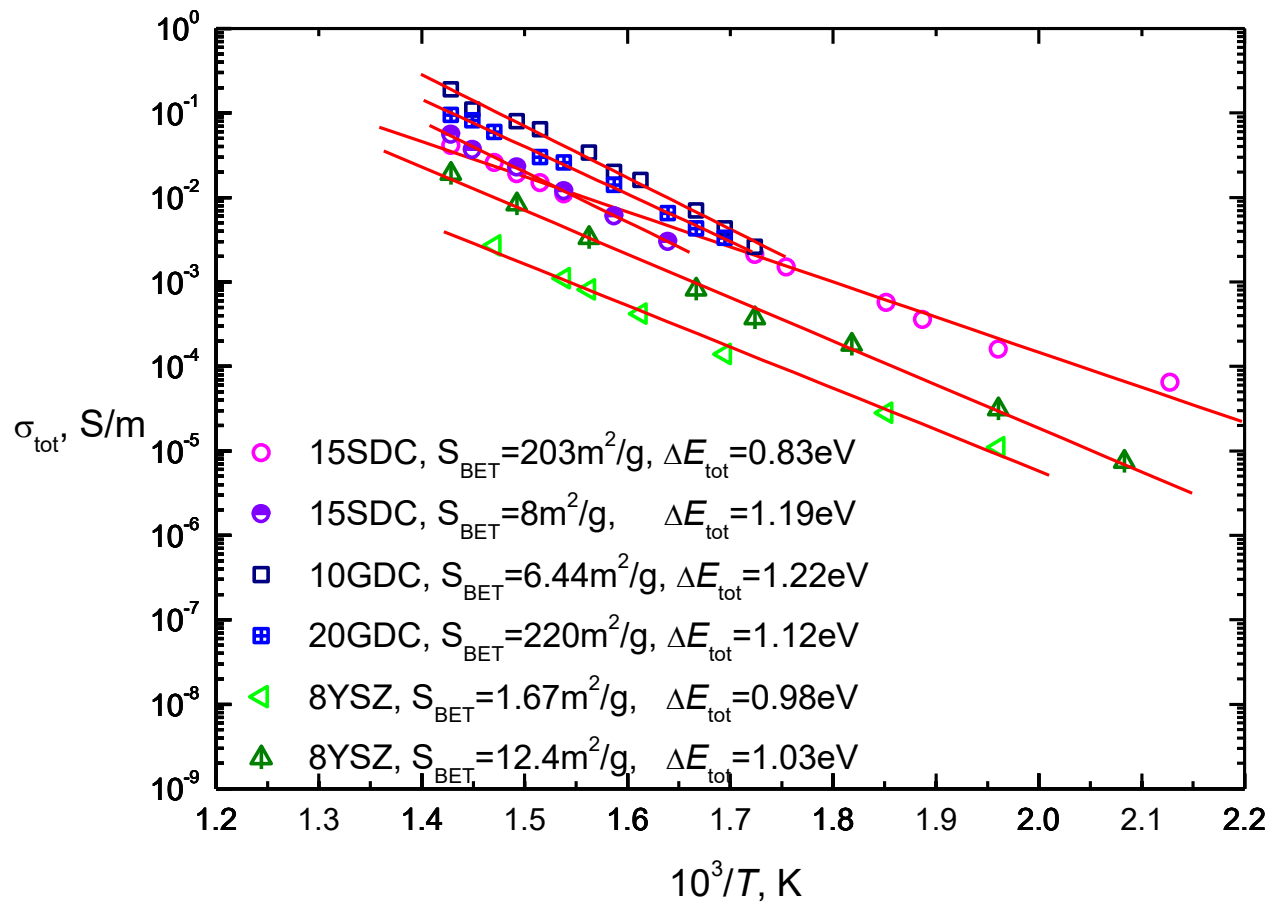


a)



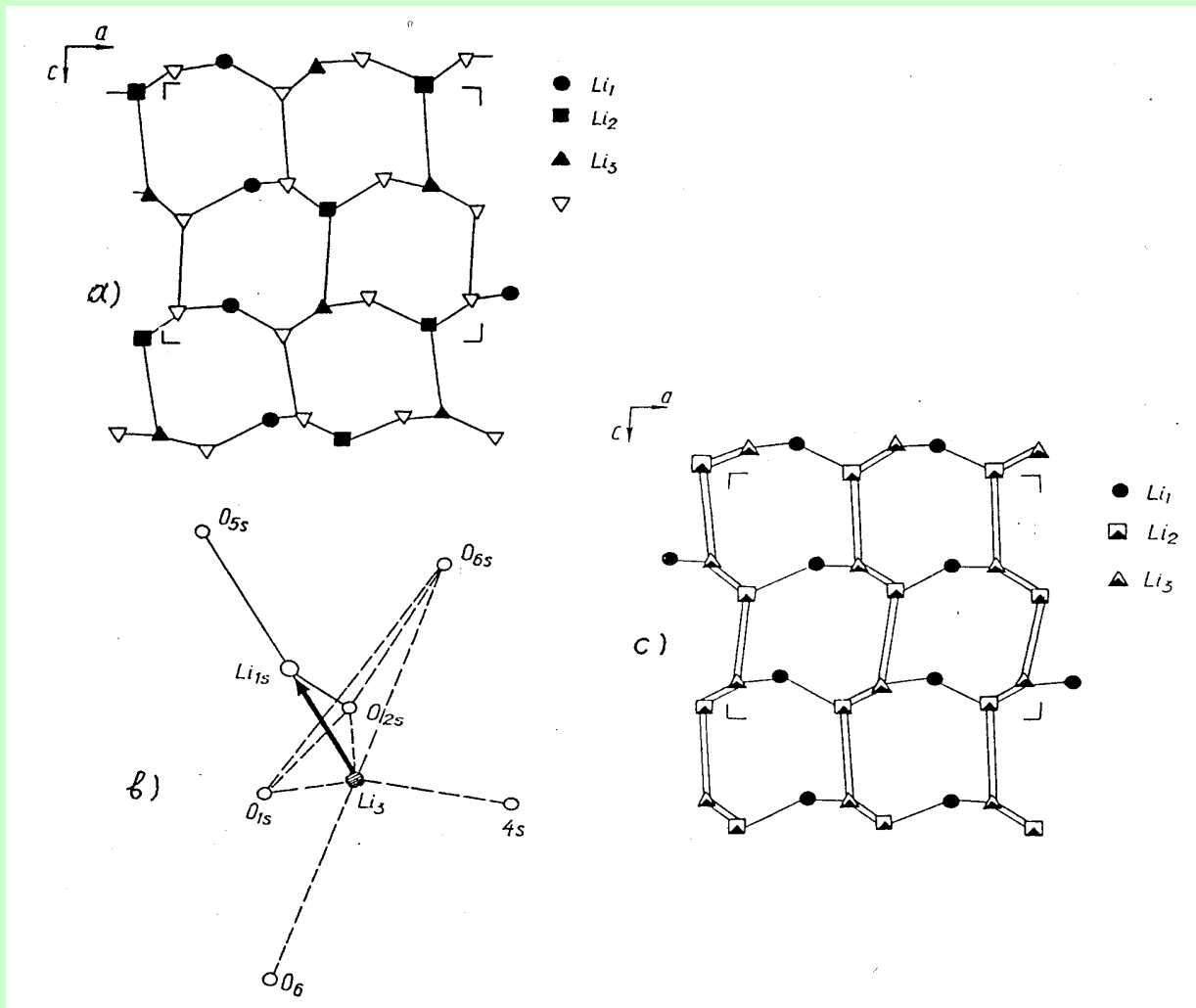
b)

**SEM images of  $\text{Ce}_{0.9}\text{Gd}_{0.1}\text{O}_{1.95}$  ceramics sintered from powder with  $S_{\text{BET}} = 158.03 \text{ m}^2/\text{g}$  (a) and  $S_{\text{BET}} = 6.44 \text{ m}^2/\text{g}$  (b)**



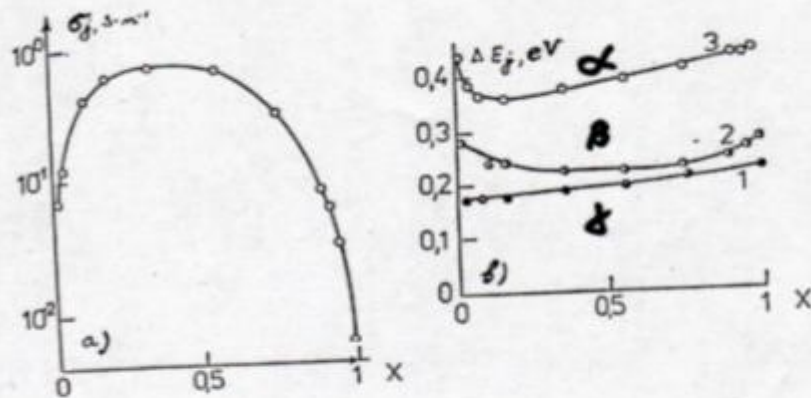
## ZrO<sub>2</sub>- xmol%Y<sub>2</sub>O<sub>3</sub> cheminės sudėties tyrimo rezultatai

Mol% Y <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	Priemaišos (%)						
	Fe <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	SiO <sub>2</sub>	Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	MgO	TiO <sub>2</sub>	CaO	Cl
6.15	<0.005	0.071	<0.01	0.001	0.14	0.009	0.011
8.27	0.001	0.105	<0.01	0.002	0.122	0.012	0.032
9.79	<0.01	0.077	0.01	<0.01	0.083	0.013	0.02
15.20	0.06	0.14	<0.01	<0.01	0.14	<0.01	1.93
19.40	<0.01	0.11	<0.01	<0.01	0.12	<0.01	0.39



a)  $\alpha$ - $Li_3Fe_2(PO_4)_3$   $Li^+$  ion map on the (010) plane, b) oxygen window in  $\beta$  phase on the (001) plane, c)  $\gamma$ - $Li_3Fe_2(PO_4)_3$   $Li^+$  ion map on the (010) plane

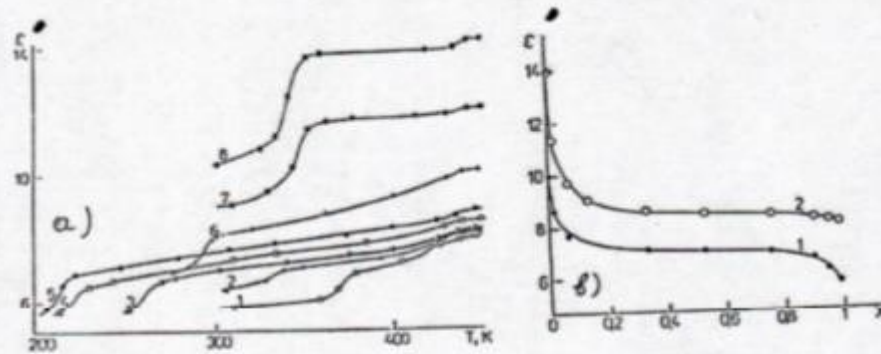




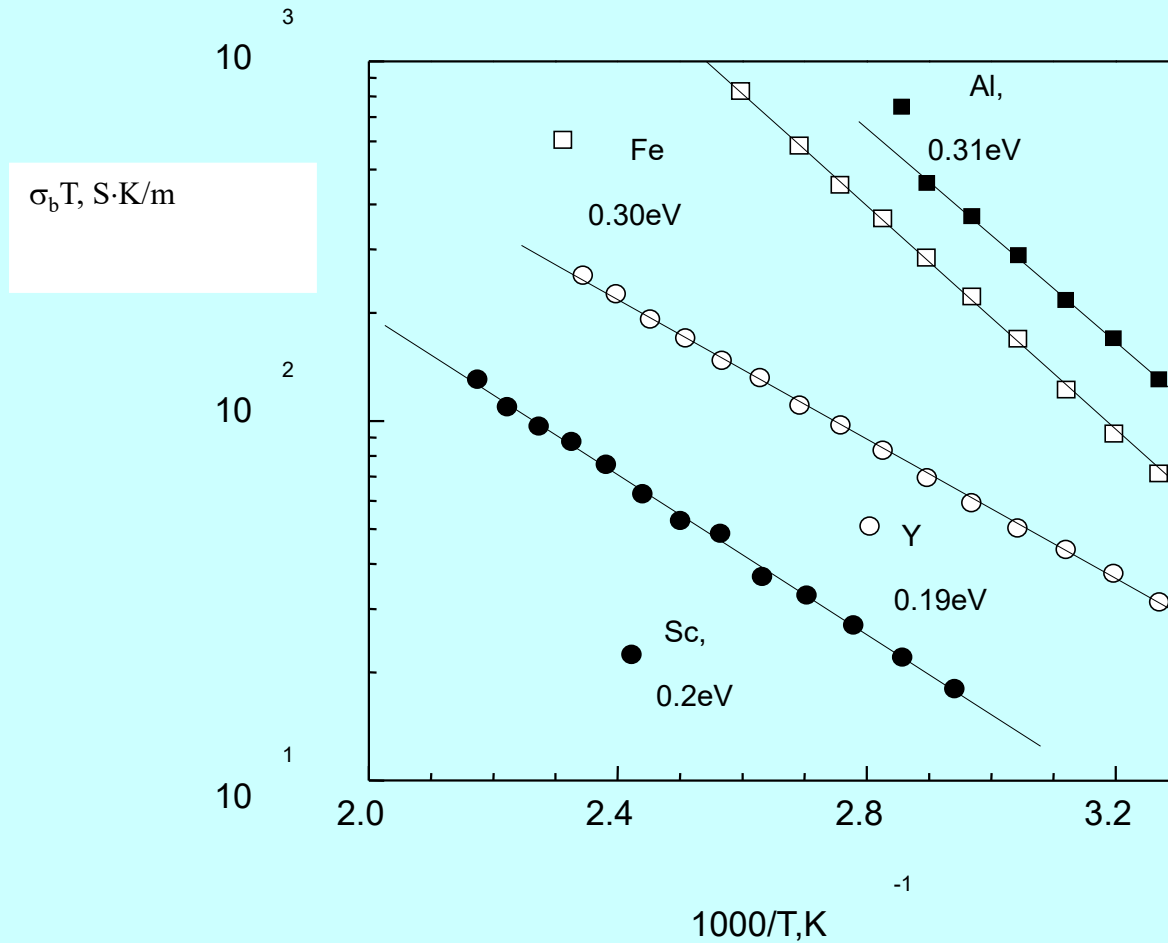
T=335-348K  $\alpha - \beta$

T=416-422K  $\beta - \gamma$

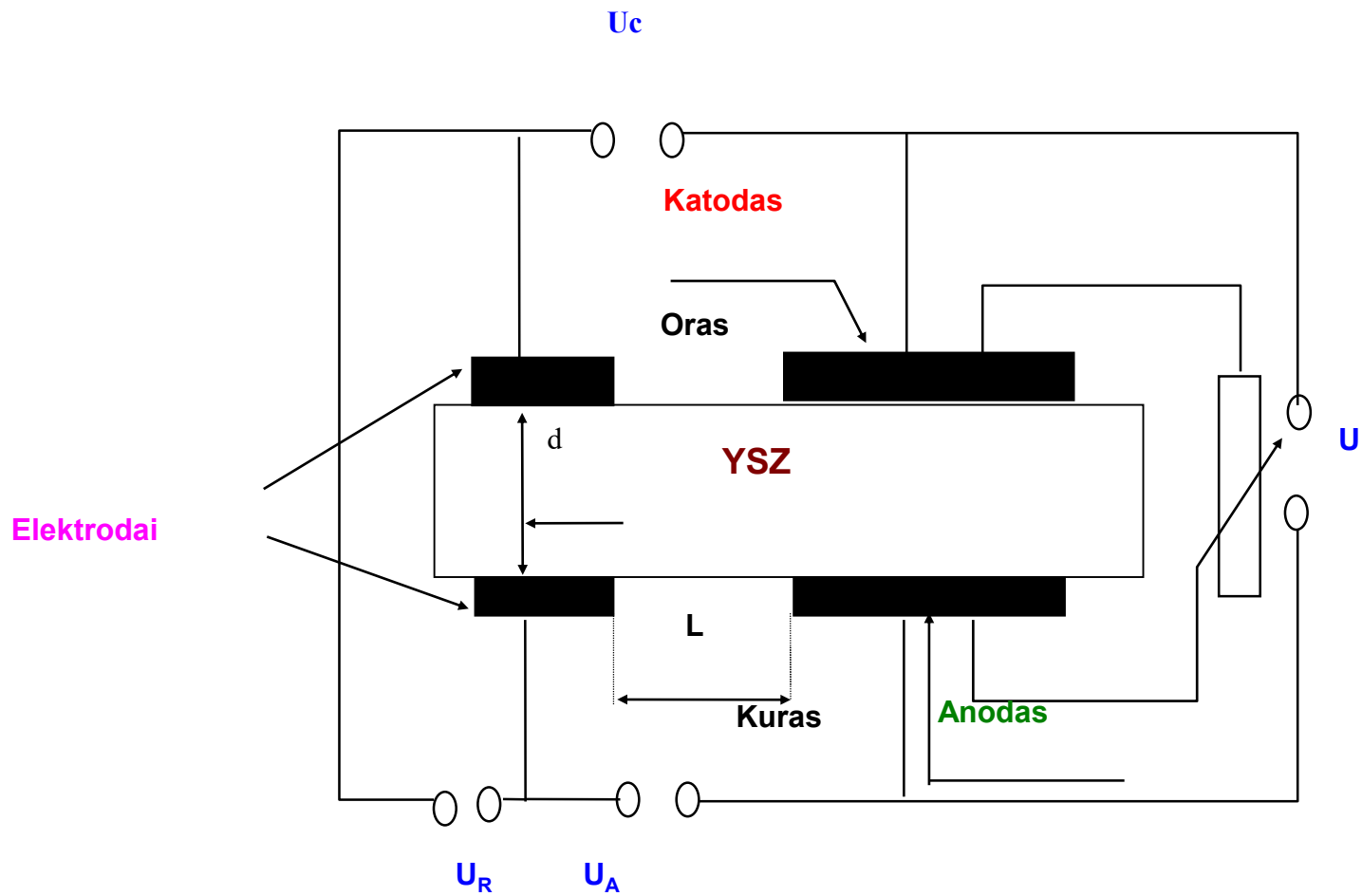
7.2 pav. a)  $\text{Na}_3\text{Sc}_{2(1-x)}\text{Fe}_{2x}(\text{PO}_4)_3$  keramikų  $\sigma_j(x)$  priklausos  $T = 300 \text{ K}$  temperatūroje, b)  $\Delta E_j(x)$  priklausos: 1 –  $\gamma$  fazė, 2 –  $\beta$  fazė, 3 –  $\alpha$  fazė



7.3 pav. a)  $\text{Na}_3\text{Sc}_{2(1-x)}\text{Fe}_{2x}(\text{PO}_4)_3$  keramikų  $\epsilon(T, x)$  priklausos: 1 –  $x = 1$ , 2 –  $x = 0,9$ , 3 –  $x = 0,75$ , 4 –  $x = 0,55$ , 5 –  $x = 0,35$ , 6 –  $x = 0,15$ , 7 –  $x = 0,03$ , 8 –  $x = 0$ ; b)  $\epsilon(x)$  priklausos  $T = 300 \text{ K}$  (1), ir  $450 \text{ K}$  (2) temperatūroje



Temperature dependences of  $\sigma_b$  of  $\text{Li}_{1+x}\text{M}_x\text{Ti}_{2-x}(\text{PO}_4)_3$  solid electrolyte ceramics (where  $\text{M}=\text{Sc}, \text{Al}, \text{Fe}, \text{Y}; x=0.3$ )



**Kietojo elektrolito kuro elemento struktūrinė schema**

## JAV SOFC PROGRAMOJE DIRBA:

1. NACIONALINIS KOMERCINIS STANDARTŲ IR TECHNOLOGIJŲ DEPARTAMENTAS
2. FEDERALINIS ENERGETIKOS TECHNOLOGIJŲ CENTRAS
3. GYNYBOS DEPARTAMENTAS
4. DUJŲ TYRIMO INSTITUTAS
5. ELEKTRINIŲ IŠTEKLIŲ TYRIMO INSTITUTAS
6. BERKLIO LAWRENCO LABORATORIJA
7. KALIFORNIJOS UNIVERSITETAS

VISŲ MINĖTŲJŲ ORGANIZACIJŲ ŠIUOS DARBUS FINANSUOJA:

1. CERAMATEC
2. ZTEK
3. TECHNOLOGIJŲ VALDYBOS
4. GIMINGŲJŲ SIGNALŲ AEROVISATOS KORPORACIJA

AUSTRALIJOJE SOFC GAMINAMI KERAMIKINIŲ KURO GARDELIŲ  
LABORATORIJOJE

EUROPOJE:

DIRBAMA ŠVEICARIJOJE, ANGLIJOJE, VOKIETIJOJE,  
PRANCŪZIJOJE, DANIJOJE

## State-of-the-art SOFC

Unfortunately, the dominant SOFC developers aim at stationary applications. Such ceramic solutions are indeed heavy, sluggish, expensive and fragile and must be operated at high temperatures. But totally different SOFCs are presently developed for mobile applications. The following results, Table 1, have recently been presented:

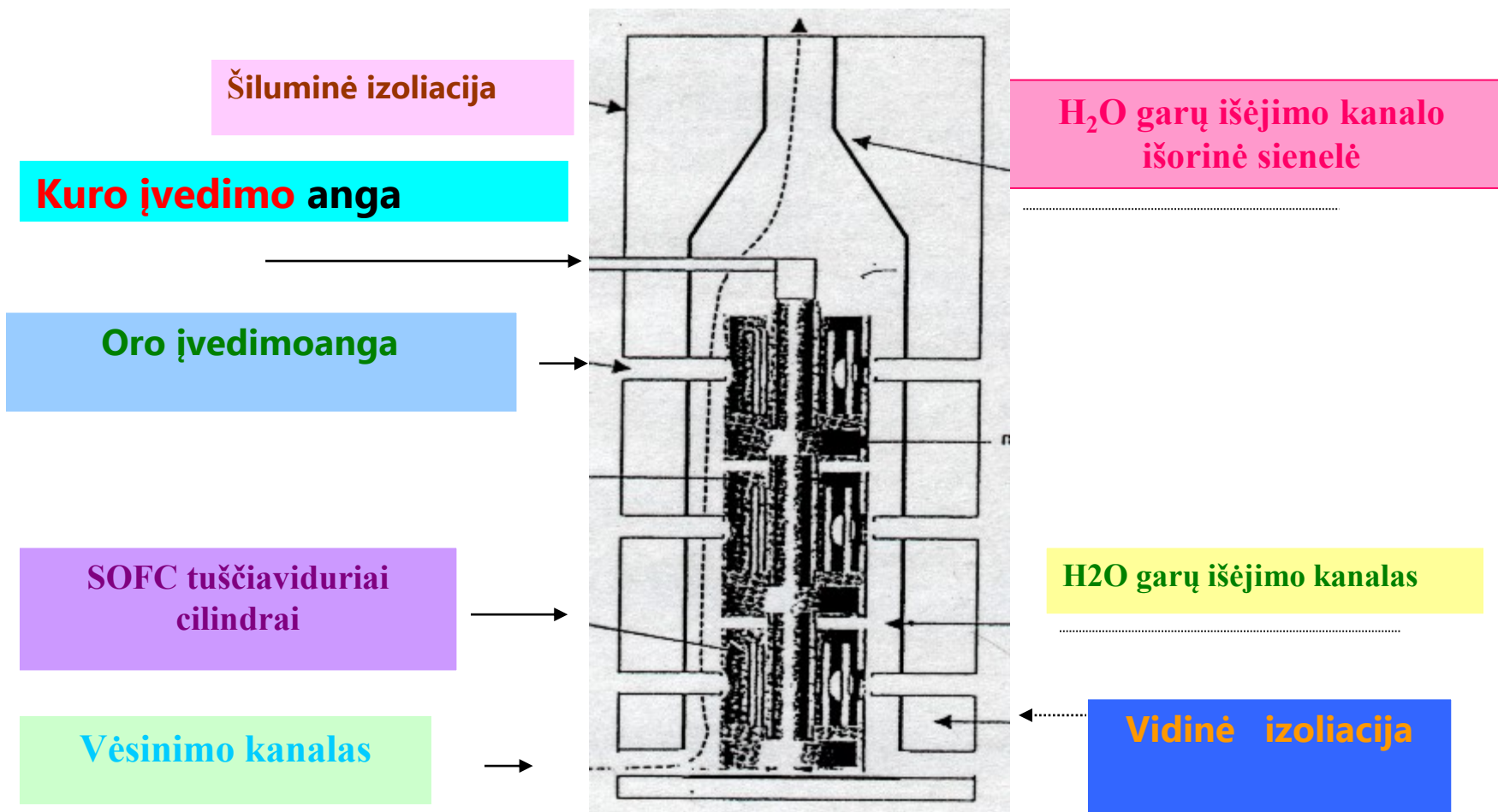
**Table 1** Recent results reported by distinguished SOFC laboratories

Feature	Value	References
Power density at 800°C	1.935 W / cm <sup>2</sup>	Berkeley Lawrence Lab. (2)
Stack power per volume	over 1 kW / L	Allied-Signal Aerospace (3)
Stack power per mass	over 1 kW / kg	Allied-Signal Aerospace (3)
Warm-up: to 800°C	1 minute	Keele University (4)
or „to operating temperature“	5 seconds	Keele University (5)
Cool-down, 1000 to 800°C	31 hours	Univ. of California (6)

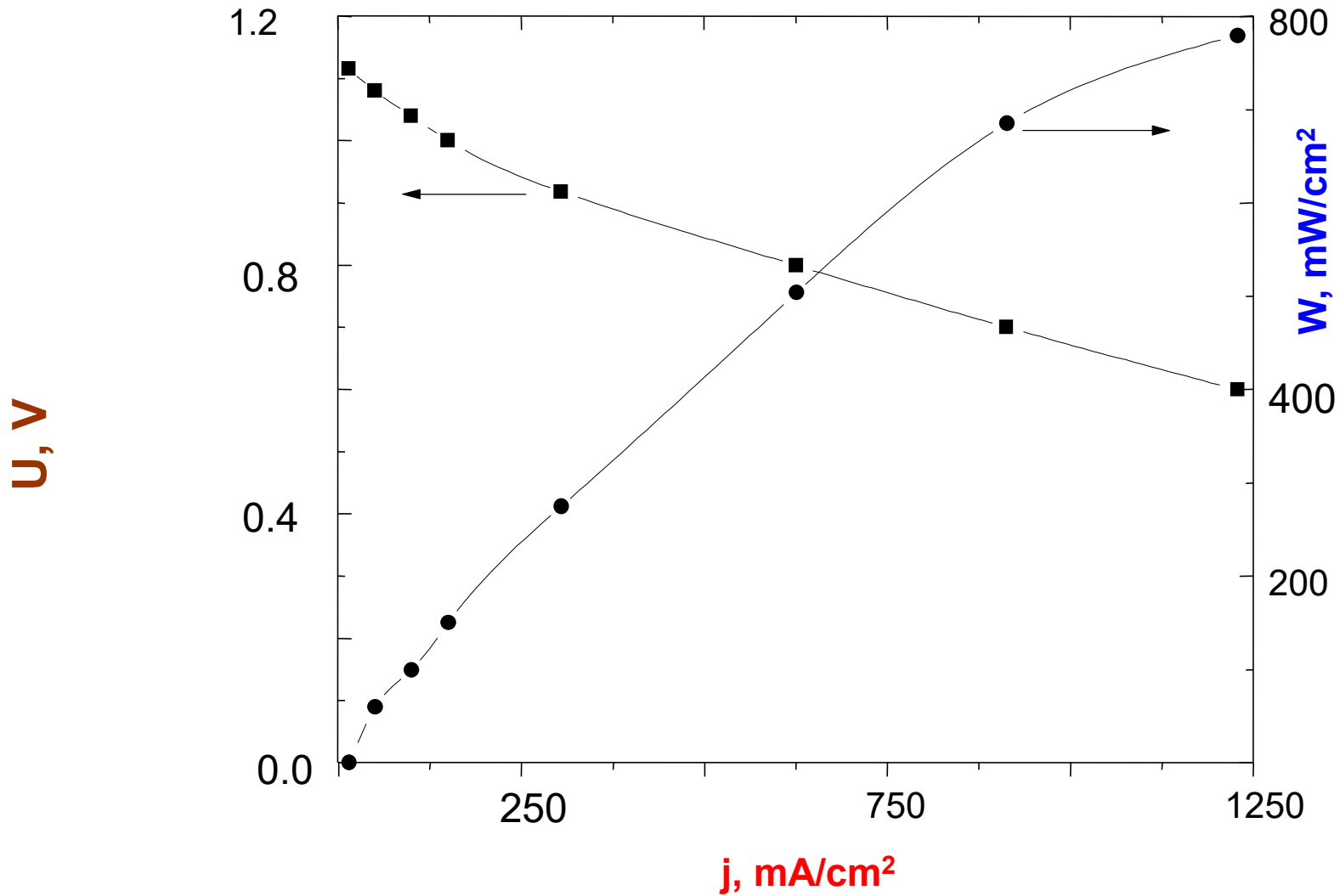
Although these results come from different laboratories, they illustrate the potentials of advanced SOFC technology: planar, hybrid (metal-ceramic), bipolar designs with thin (5 to 10 μm) supported ceramic electrolytes and operating temperatures between 650°C and 800°C. Such light weight, compact SOFCs are under development for automotive applications. Table 2 documents what can be expected in the near future:

**Table 2** Projected trends of development of SOFCs for transportation

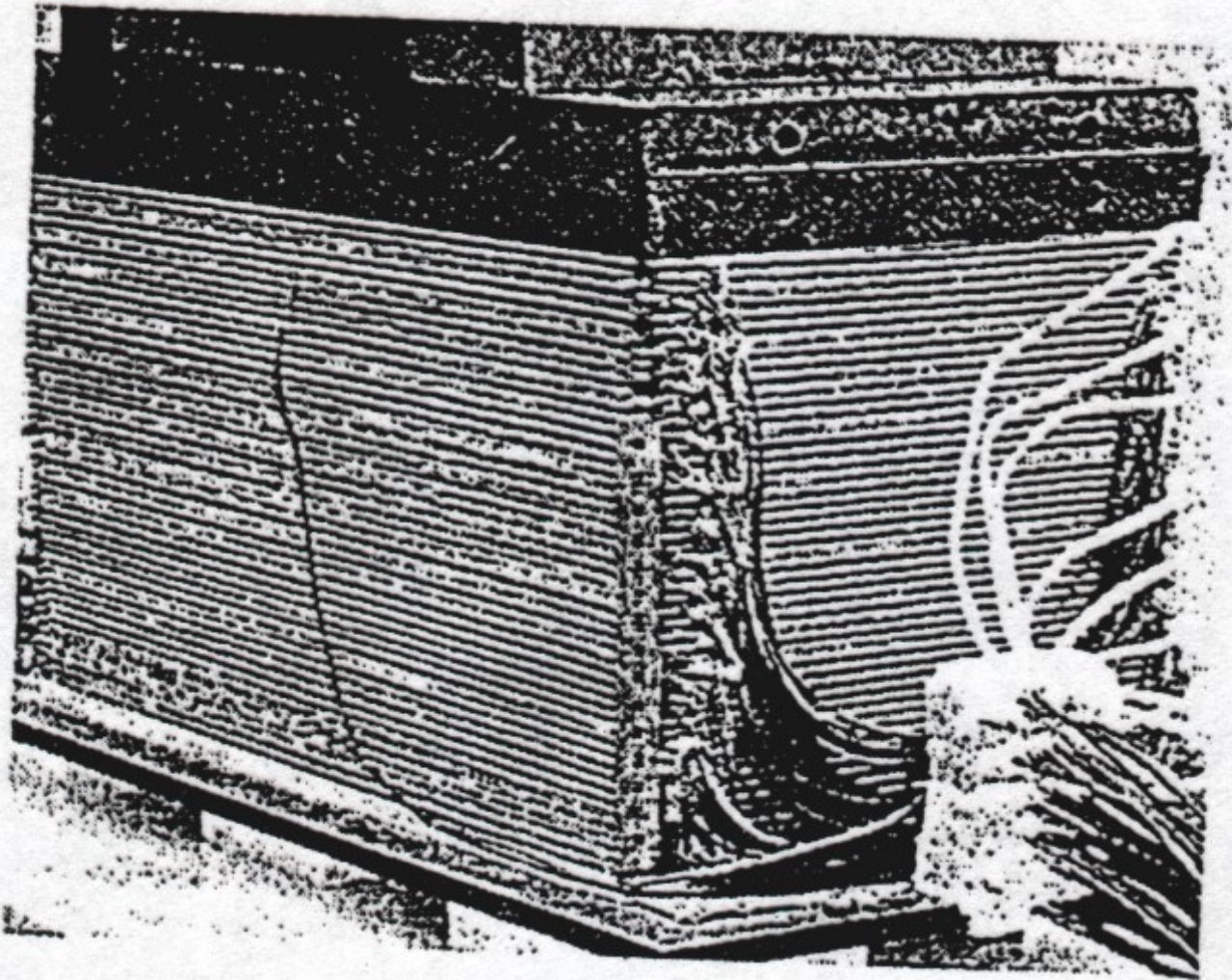
Features	Projections
Operating temperature	(550°C) 600°C to 800°C
Start-up (ambient to operating temp.)	less than 2 minutes
Stack power per volume	2 kW / L
Stack power per mass	2 kW / kg
Fuel	unleaded gasoline, diesel, Methanol
Reforming	integrated internal and in situ
Cooling	air, heat rejection by exhaust
Duty lifetime	5,000 hours



**Cilindrinės formos SOFC modulis**



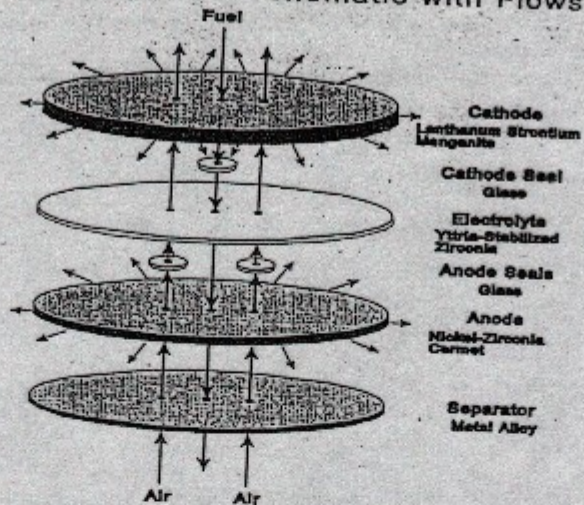
Storassluoksnio SOFC  $U - j - W$  charakteristikos



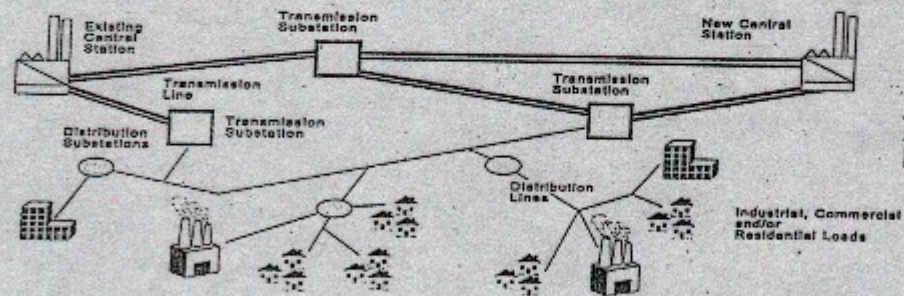
5kW SOFC modulus pagal S.P.S. Badwal ir K. Foger



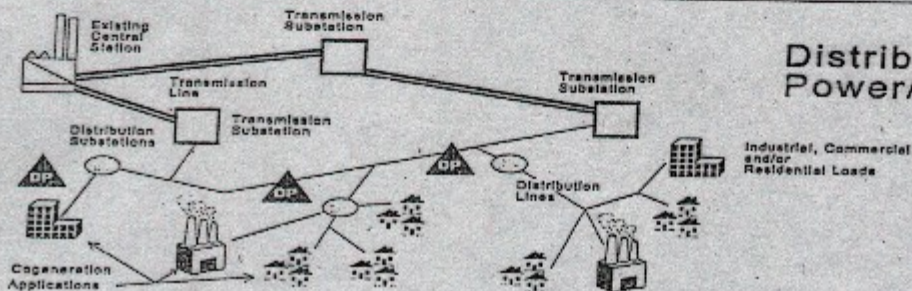
# IRF SOFC Exploded Schematic with Flows



## New Power Generation Options

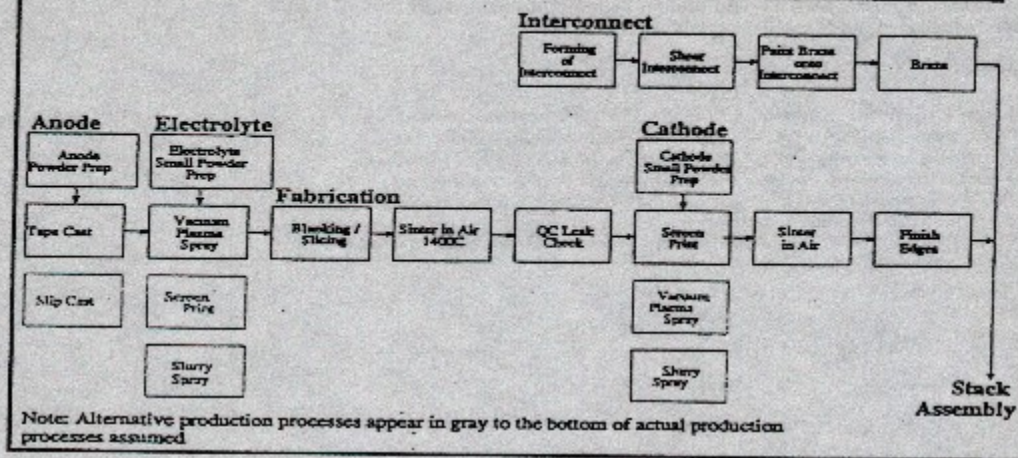


Traditional Expansion



Distributed Power/Cogeneration

## Multi-Fired Process Flow for SOFC Planar Configurations



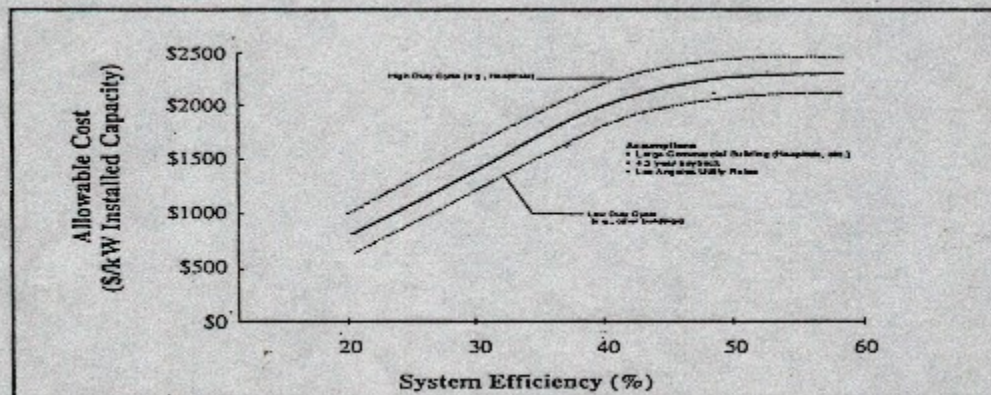
Example of manufacturing process description.

Market Segment		Typical Capacity	Allowable Installed Cost <sup>1</sup> (\$/kW)	
			Entry <sup>2</sup>	Sustained <sup>2</sup>
On-site	Commercial Cogeneration	50 kW - 2 MW	\$1,500 - 2,000	\$800 - 1,300
	Industrial Cogeneration	5 - 200 MW	\$1,000 - 1,200	\$800 - 1,000
	Residential Power	0.5 - 10 kW	\$1,000 - 2,500	\$800 - 1,000
Utility	Distributed Power	5 - 20 MW	\$1,300 - 1,500	\$800 - 1,300
	Central Station	100 - 500 MW	\$900 - 1,100	\$700 - 900

<sup>1</sup> Total installed system costs, including all owners costs. Targets apply widely to industrialized country markets. Costs have been calculated based on a range of electricity and gas rate structures. Allowable costs for hydrogen fueled systems would be considerably lower as merchant hydrogen prices are typically 2-3 times as high as natural gas.

<sup>2</sup> "Entry" costs are based on early high value markets. "Sustained" costs must be realized to achieve significant market penetration.

### Summary characterization of potential stationary power markets



Impact of system efficiency on allowable system cost.

## Chronology of Solid Electrolyte Cells

Date	Electrolyte	Log (S/cm)	Typical Cell System
1950-60	AgI	-5	Ag/V <sub>2</sub> O <sub>5</sub>
1960-65	Ag <sub>3</sub> SI	-2	Ag/I <sub>2</sub>
1965-72	RbAg <sub>4</sub> I <sub>5</sub>	-0.5	Ag/Me <sub>4</sub> NI <sub>5</sub>
1965-75	Beta-alumina	-1.5	Na-Hg/I <sub>2</sub> ,PC
1970-75	LiI(Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> )	-5	Li/PbI <sub>2</sub>
1970-80	LiI	-7	Li/I <sub>2</sub>
1978-85	LiX-PEO <sup>b</sup>	-7	Li/V <sub>2</sub> O <sub>5</sub>
1980-86	Li <sub>0.36</sub> I <sub>0.14</sub> O <sub>0.007</sub> P <sub>0.11</sub> S <sub>0.38</sub>	-3.3	Li/TiS <sub>2</sub>
1983-87	MEEP <sup>c</sup>	-4	Li/TiS <sub>2</sub>
1985-92	Plasticized SPE <sup>d</sup>	-3	Li/V <sub>6</sub> O <sub>13</sub>
1985-92	Li <sub>0.35</sub> I <sub>0.12</sub> O <sub>0.31</sub> P <sub>0.12</sub> S <sub>0.098</sub>	-4.7	Li/TiS <sub>2</sub>
1990-92	Li <sub>0.39</sub> N <sub>0.020</sub> O <sub>0.47</sub> P <sub>0.12</sub>	-5.6	Li/a-V <sub>2</sub> O <sub>5</sub>

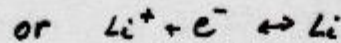
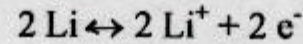
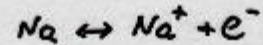
PEO - Polyethylene oxide

MEEP - methoxyethoxytyoxy polyphosphazene

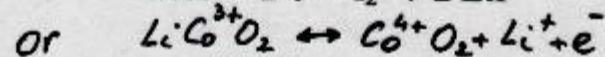
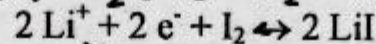
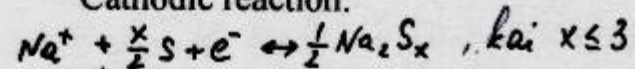
SPE - solid polymer electrolyte

## CHEMICAL REACTIONS IN SSB

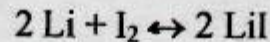
Anodic reaction:



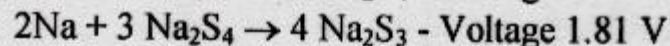
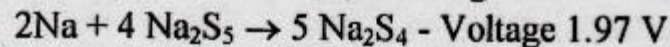
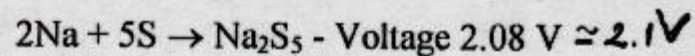
Cathodic reaction:



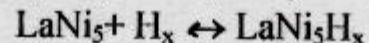
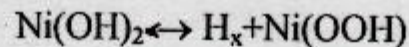
Total reaction:

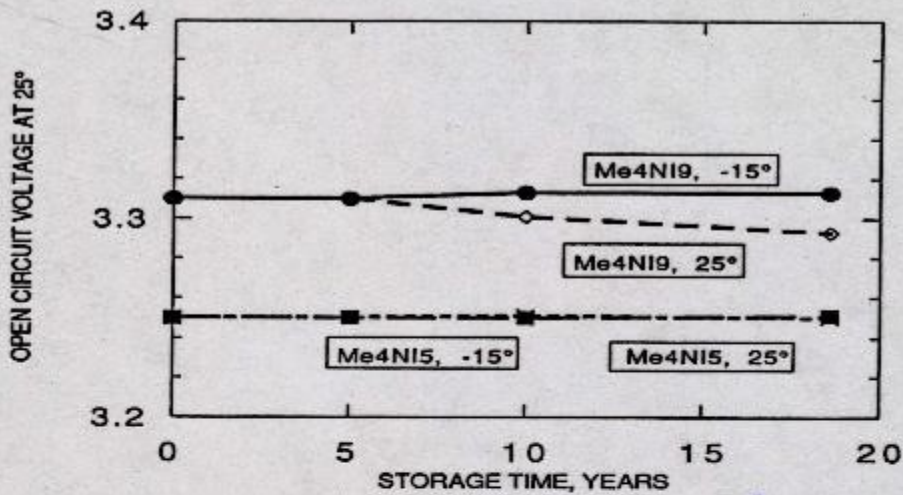


The chemical reactions in the Na/S superionic batteries:

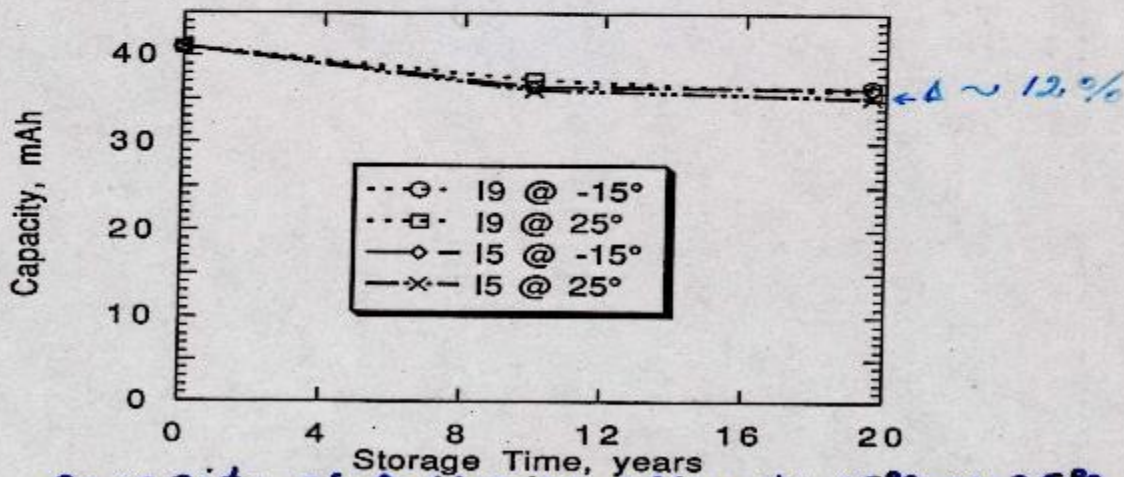


The chemical reactions in the Ni-MH cell

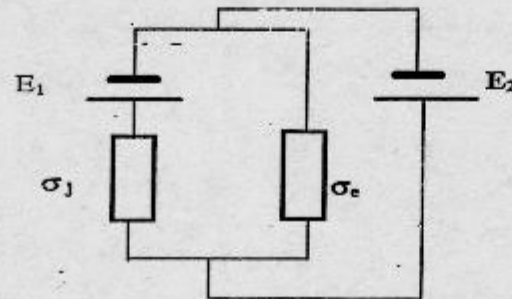
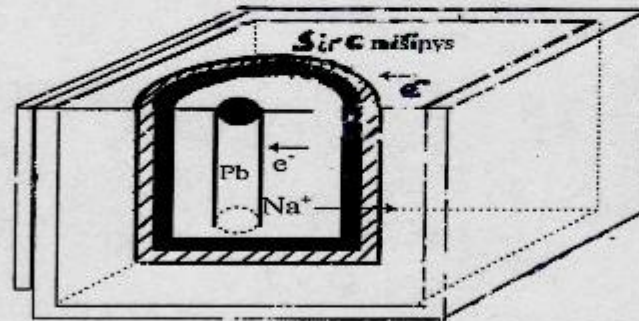
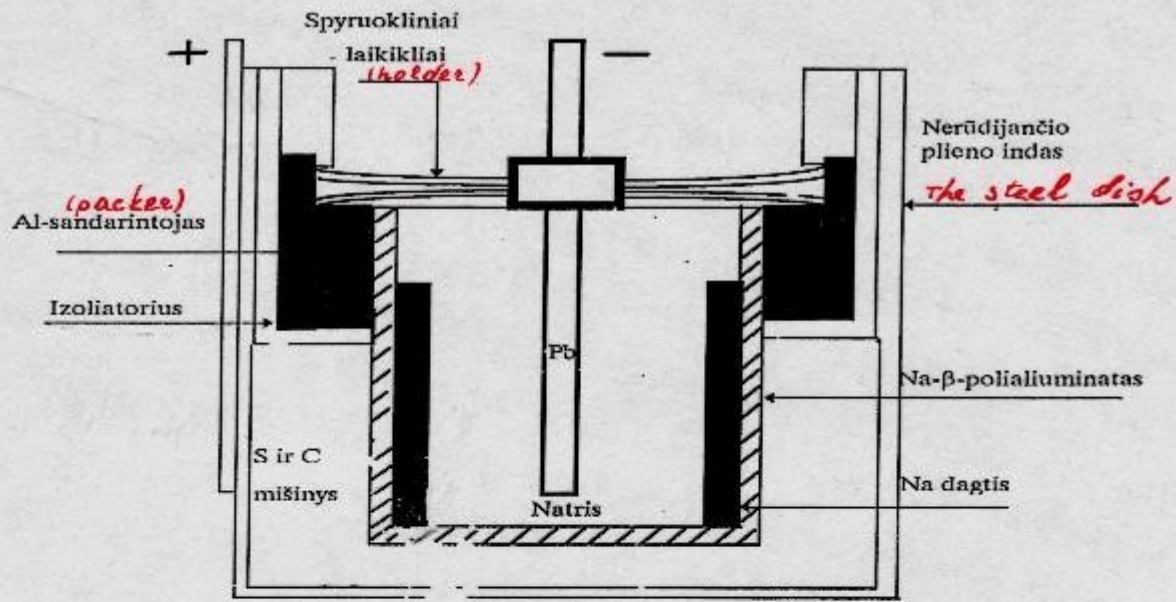




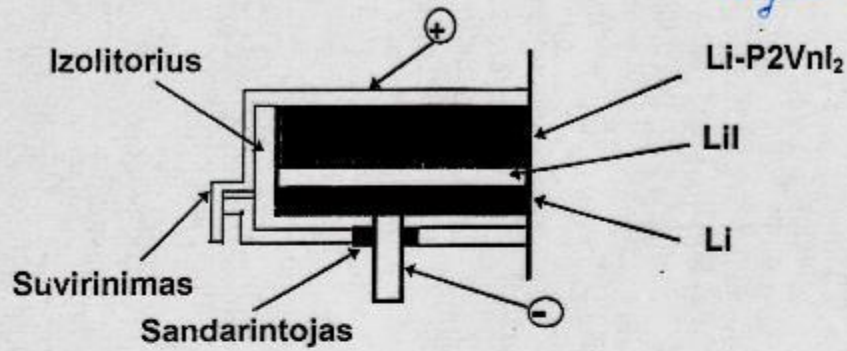
Open circuit voltage of Ag/I<sub>2</sub> batteries as function of storage time



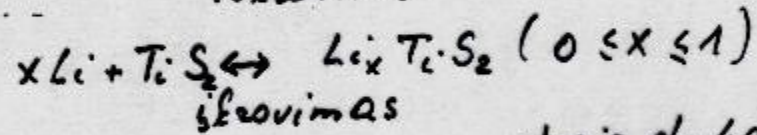
Capacity of batteries after  $t = -15^\circ\text{C}$  or  $25^\circ\text{C}$  storage (I<sub>9</sub> - Ag/Me<sub>4</sub>NI<sub>9</sub>, I<sub>5</sub> - Ag/Me<sub>4</sub>NI<sub>5</sub>). Batteries were discharged at 25° and 60°C, at a constant load of 64,9 kΩ (30 day rate)



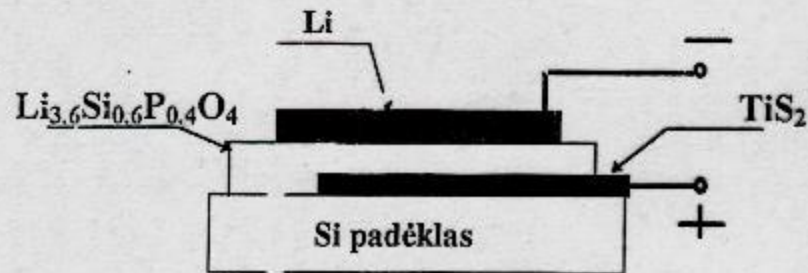
*Poly-2 vinylpyridinium I<sub>2</sub> complex*

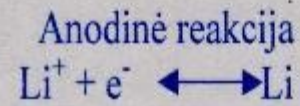
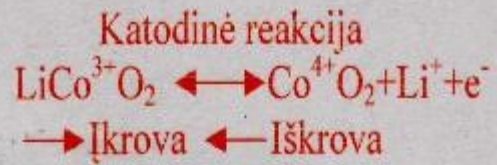
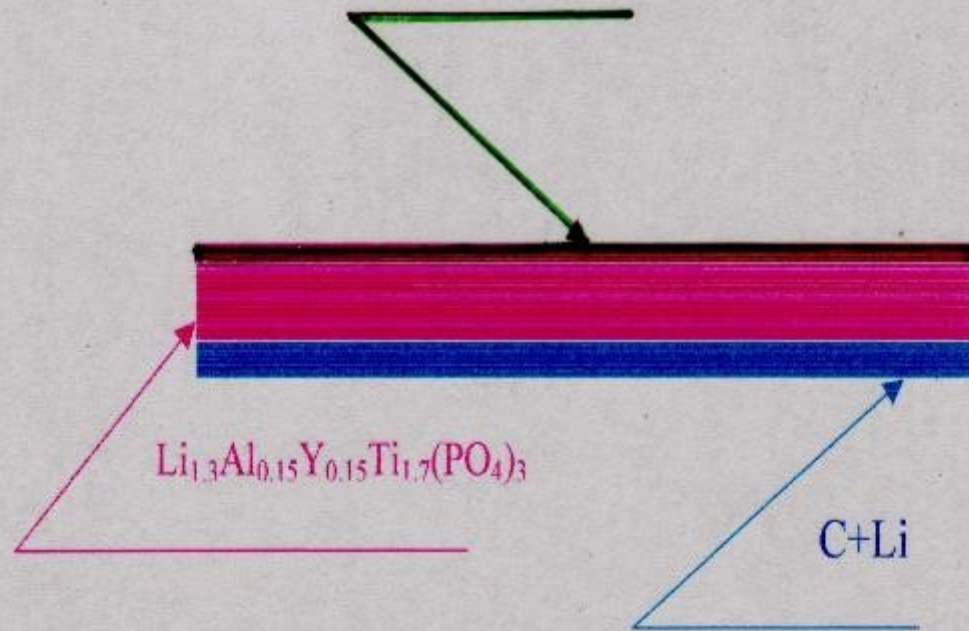


*iškrovimas*



*storis d = 40 μm*

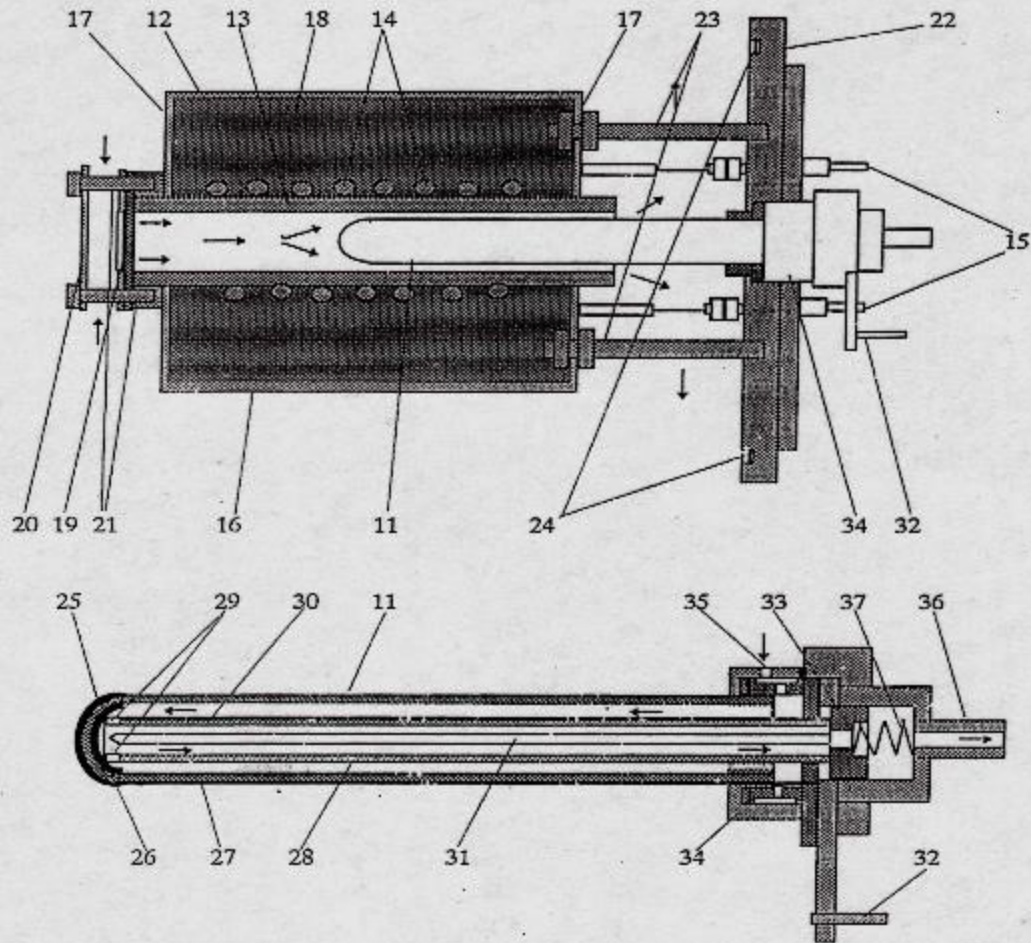


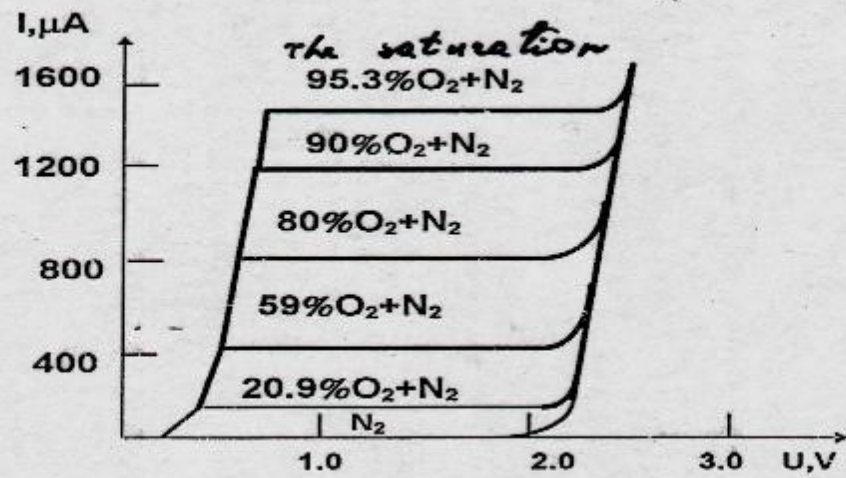
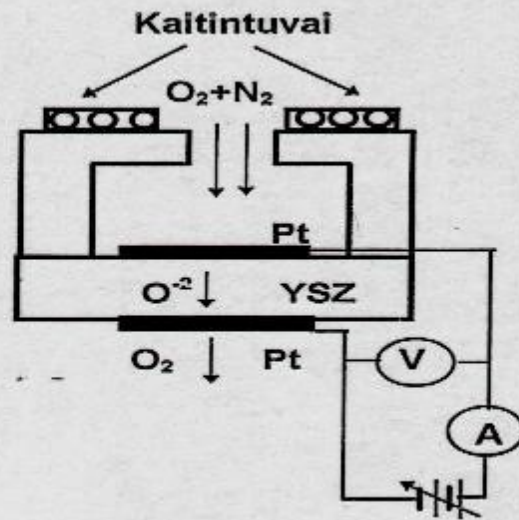


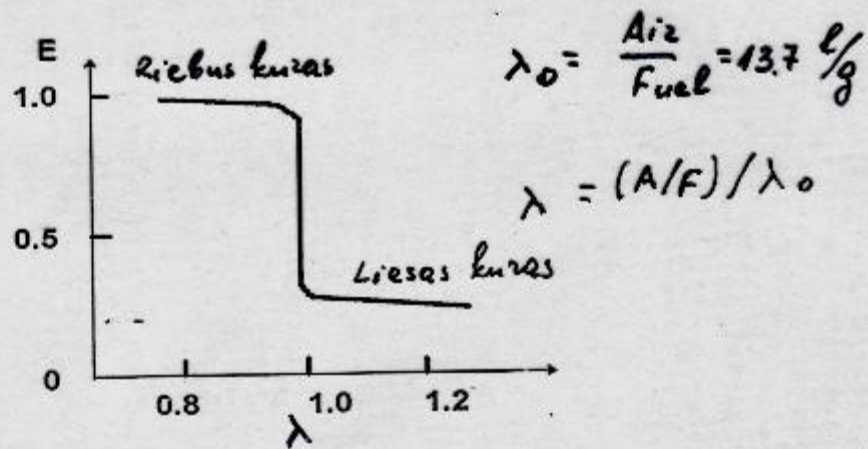
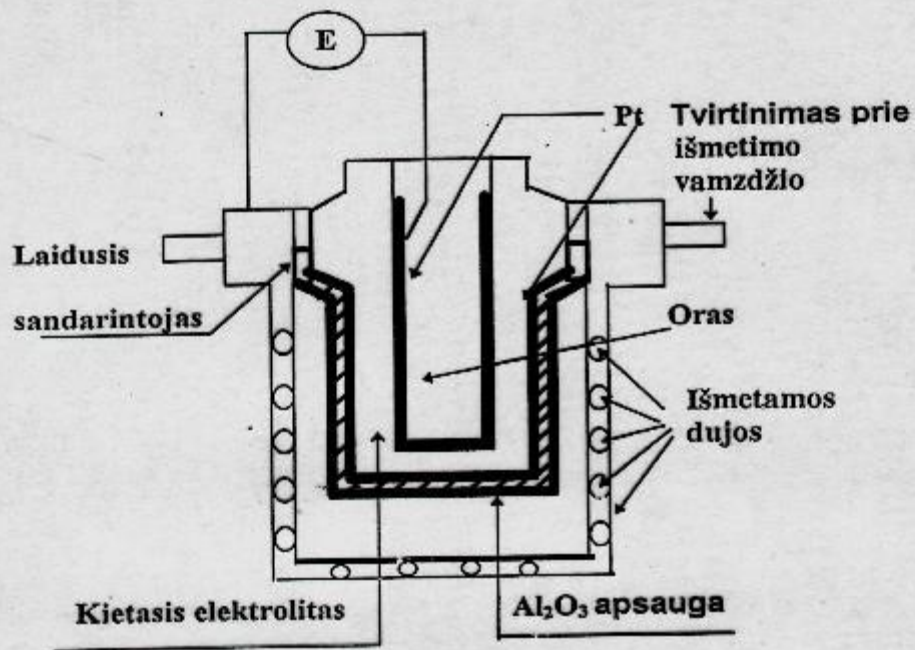


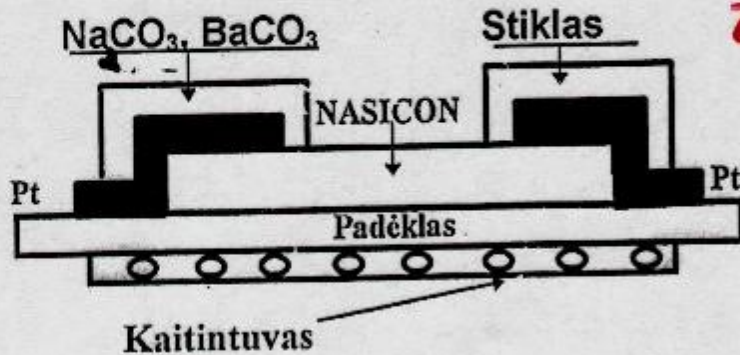
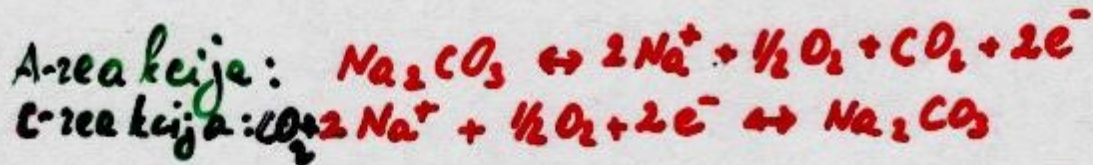
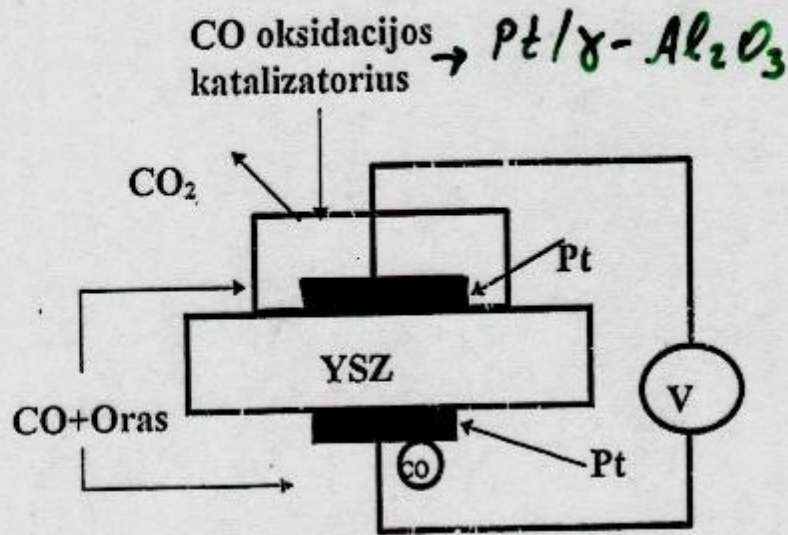
$$E = \frac{RT}{4F} \ln \frac{P_{O_2}'}{P_{O_2}''}; \quad F = 9.6487 \cdot 10^7 \text{ C/kg}$$

$$R = 8.3143 \cdot 10^3 \text{ J/K} \cdot \text{kmol}$$





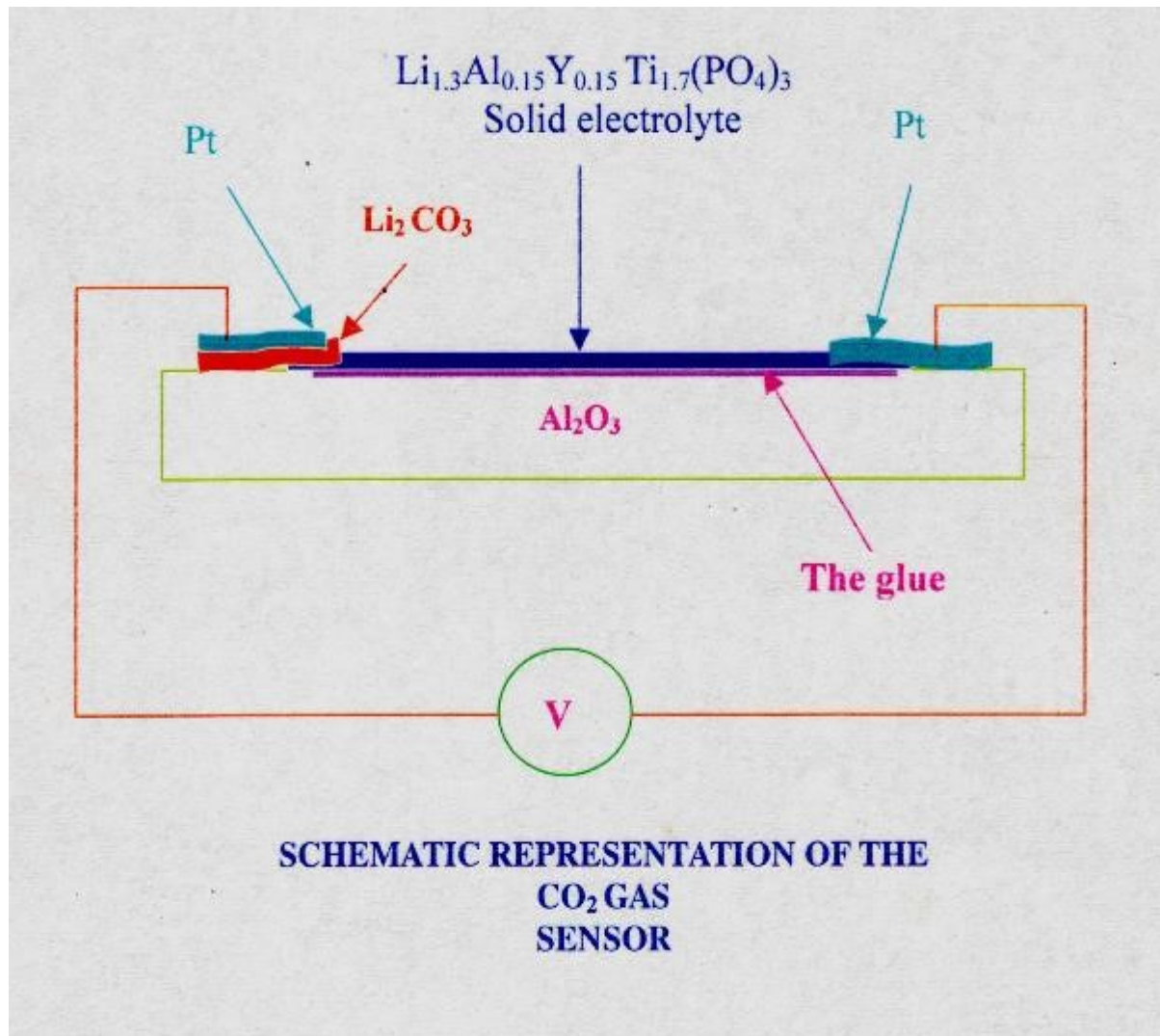


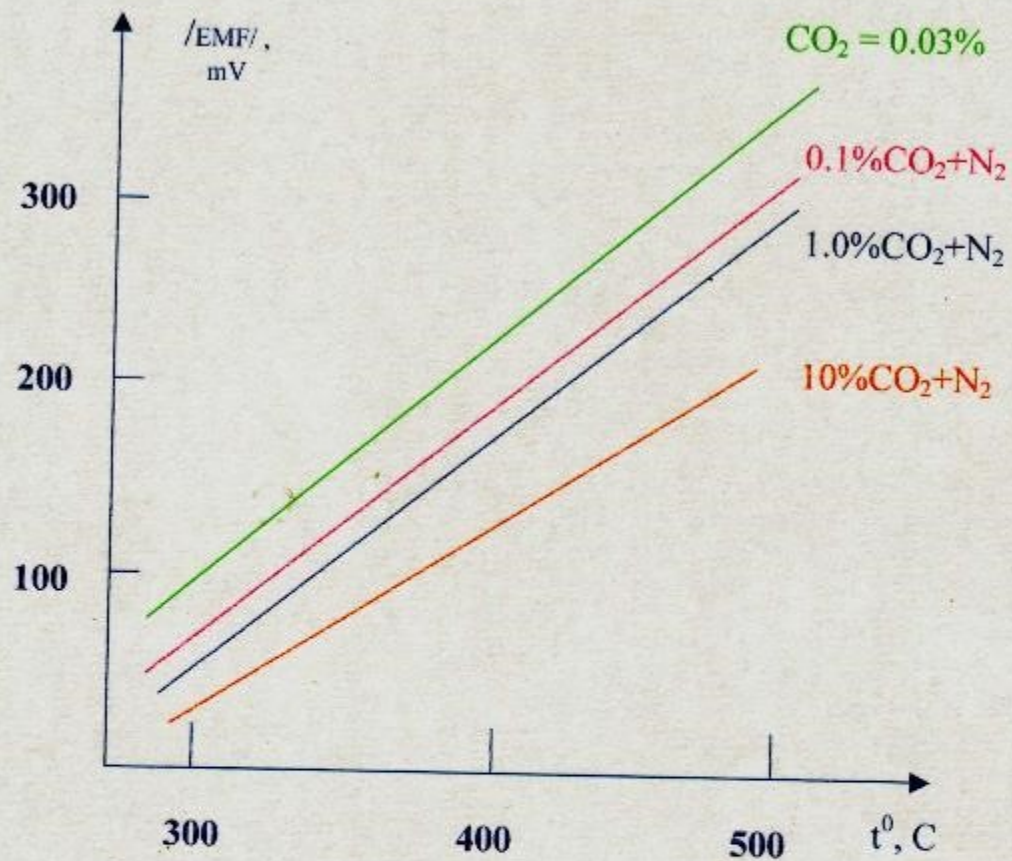


$$E = E_0 + \frac{RT}{2F} \ln p_{\text{CO}_2} + \frac{RT}{4F} \ln p_{\text{O}_2}$$

$$F = 9.6487 \cdot 10^7 \text{ C/kg}$$

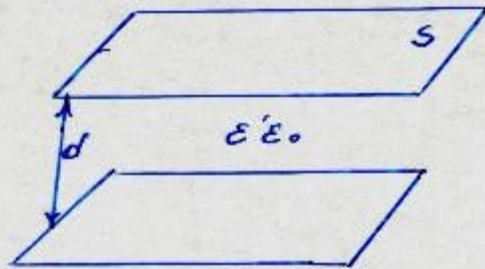
$$R = 8.3143 \cdot 10^3 \text{ J/K.kmol}$$





**TEMPERATURE DEPENDENCE OF THE EMF  
OF THE CO<sub>2</sub> SENSOR AT DIFFERENT  
PARTIAL PRESSURE OF CO<sub>2</sub> GAS**

Plakšciojo kondensatoriaus talpa



$$C = \frac{\epsilon \epsilon_0 S}{d}$$

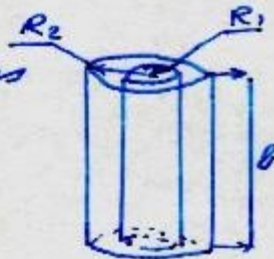
Rutulio talpa

$$C = 4\pi \epsilon \epsilon_0 R$$



Cilindrinio kondensatoriaus talpa

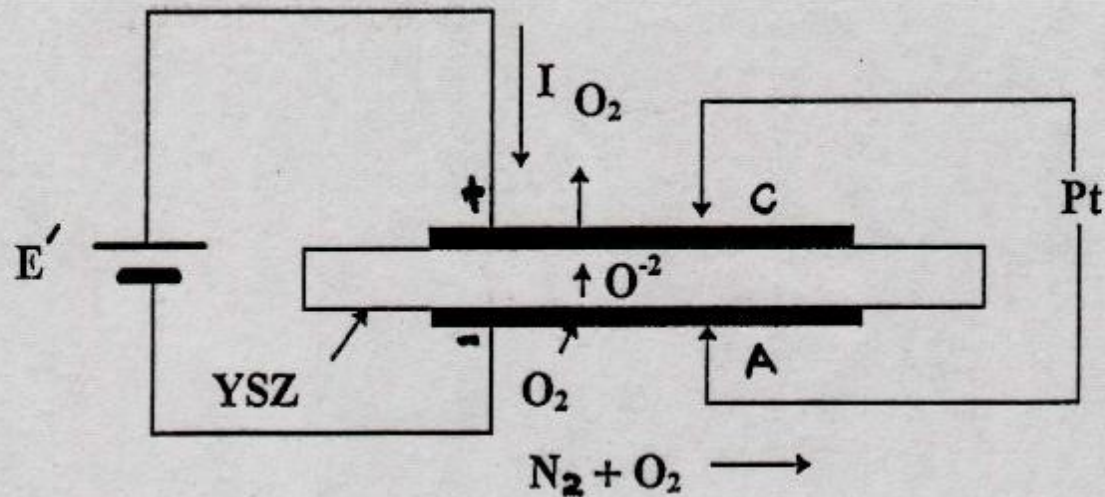
$$C = \frac{2\pi \epsilon \epsilon_0 l}{\ln\left(\frac{R_2}{R_1}\right)}$$



Sferinio kondensatoriaus talpa

$$C = 4\pi \epsilon \epsilon_0 \frac{R_1 R_2}{R_2 - R_1}$$





$$V \approx I/4F ; \quad F \approx 9.65 \cdot 10^7 \text{ C/kg-e} \cdot \text{eV}$$

$$T = 298 \text{ K} ; \quad P = 1 \text{ atm} , \quad I = 1 \text{ A}$$

$$v = 3 \text{ ml/min}$$



## Pagrindiniai atomo ir branduolio fizikos dėsningumai ir jų sąryšiai

Medžiagos atomą sudaro branduolys ir aplink branduolį apskritiminėmis orbitomis juda elektronai. Šios orbitos nėra panašios į Saulės sistemos planetų judėjimo trajektorijas. Elektroninės orbitos yra geometrinė vieta taškų, kuriose galima tikėtis aptikti elektroną. Orbitos radiusas - tai atstumas nuo atomo branduolio, kuriame su *max* tikimybe gali būti elektronas. Sutinkamai su kvantine teorija, medžiagos atomai sugeria ir išspinduliuoja energiją kvantais. Tai 1913 m. traktavo Nilsas Boras. Jo idėjos pateikiamos trim postulatais:

1-asis postulatą vadinamas stacionariųjų būsenų taisyklė. Visų medžiagų atomai gali būti ypatingose stacionariose būsenose ir kiekviena būsena yra nusakoma energija  $\varepsilon_1, \varepsilon_2, \dots, \varepsilon_n$ . Šios energinės būsenos yra leistinos. Tarpinės būsenos tarp energijų  $\varepsilon_1$  ir  $\varepsilon_2$ ,  $\varepsilon_3$  ir  $\varepsilon_4$  ir t.t. yra draustinės.

2-asis postulatą vadinamas orbitų kvantavimo taisyklė. Elektronai apie branduolius juda stacionariomis orbitomis, kurių judėjimo kiekio  $mV$  ir orbitos ilgio sandauga

$$(2\pi R)mV = nh \quad \text{arba} \quad mVR = nh$$

( $n$  yra sveikas skaičius ( $n \neq 0$ ) vadinamas kvantiniu skaičiumi).

3-asis postulatą vadinamas dažnių taisyklė. Visų medžiagų atomai spinduliuoja ir sugeria energiją kvantais (fotonais) pereinant jiems iš vienos stacionarios į kitą būseną

$$h\nu = \varepsilon_n - \varepsilon_m \quad .$$

Boro teorija leidžia gana tiksliai nustatyti orbitų spindulius ir elektronų energiją, kurie juda branduolio elektriniame lauke, kurio krūvis  $ze$ . Kai  $z=1$ , turime  $H$  atomą, o jo

pirmosios orbitos  $r_1 = 0,528 \cdot 10^{-10} \text{ m}$  .

Visų kitų orbitų spinduliai

$$r_n = r_1 \frac{n^2}{z^2} \quad . \quad (1)$$

$$r_2=4r_1, r_3=9r_1, r_4=16r_1.$$

Tokiu būdu, elektronas  $H$  atome gali būti trijose orbitose, kurių spinduliai sudaro santykį lygų natūrinių skaičių eilės kvadratams. Elektronas, judėdamas apie branduolį, turi kinetinę ir potencinę energiją. Pilnoji atomo energija

$$E = -E_0 \frac{Z^2}{n^2}$$

(2)

čia (-) ženklas reiškia, kad norint pašalinti elektroną iš atomo reikia atlikti darbą prieš branduolio jėgas.  $E_0$  - minimali elektrono energija, kai jis yra arčiausiai branduolio.  $Z$  ir  $E_0$  tam tikram branduoliui yra konstantos. Šiuo atveju  $E(n)$  ir čia  $n$  vadinamas *pagrindiniu kvantiniu skaičiumi*. Kai  $n=1$  - atomas turi min. energiją ir yra su  $E_1=-13,5$  eV normalioje būsenoje. Kai  $n=2, 3, 4, \dots$   $E_2=-3,38$ ,  $E_3=-1,51$  ir  $E_4=-0,85$  eV. Tai reiškia, norint atomui pereiti iš pirmos stacionarios būsenos į antrąją, jis turi sugerti energiją  $\Delta E_1=E_2-E_1=-3,38-(-13,53)=10,15$  eV. Jeigu suteiktoji energija mažesnė negu 10,15 eV, tai atomas apsimams nesugeria energijos. Jeigu atomui suteikti energiją  $\Delta E > 13,5$  eV, tai elektronas palieka atomą ir išeina iš jo.

Sugėręs kvantą energijos atomas negali būti sužadintoje būsenoje. Maždaug po  $10^{-8}$  s atomas iš sužadintosios būsenos pereina į normaliąją. Šio perėjimo metu išspinduliuojama energija, kuri nusakoma trečiuoju Boro postulatu:

$$\lambda = \frac{hc}{\Delta E} .$$

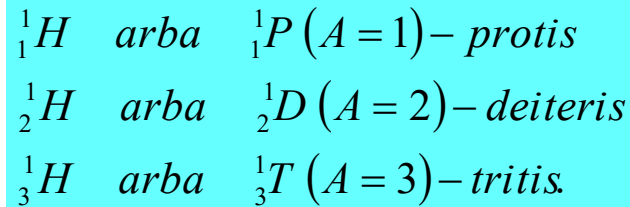
Iš spektrų, galime nustatyti medžiagų atomų rūšį.

Rezerfordas nustatė, kad atomų branduolių geometriniai matmenys apie  $10^4$  kartų mažesni už atomų. Empiriškai nustatyta, kad branduolio  $\varnothing$

A-branduolio masė ( $A=Z+N$ ).  $d = 2,8\sqrt[3]{A} \cdot 10^{15} (m)$

Atomo branduolys, kaip ir elektrinės orbitos, nėra griežtai geometriškai apibrėžti. Tiksliai matuojant branduolių mases, paaiškėjo, kad tų pačių atomų branduoliai gali turėti skirtingas mases. Tai reiškia, kad branduoliai turi tą patį skaičių protonų ir skirtingus skaičius neutronų. Tokie atomai, kurių branduoliai turi tuos pačius krūvius, bet skirtingas mases vadinami *izotopais*. Vidutiniškai kiekvienas atomas turi 3 stabilūs izotopus (užuraniniai- daugiau ). Dabar yra žinoma apie 300 stabilių ir 800 nestabilių izotopų.

To paties atomo izotopai pasižymi tomis pačiomis cheminėmis savybėmis. Pvz., vandenilio izotopai:



Gamtiniai cheminiai junginiai dažniausiai yra izotopų rinkinys (pvz.,  ${}^{231}_{92}U$  ir  ${}^{238}_{92}U$ ),

todėl a.m.v. nėra sveikas skaičius. Nuklonai branduolyje yra diskretiniuose (energinuose) lygmenyse, kuriam charakteringas griežtas energinis dydis. Pereinant atomo branduoliui iš vieno energinio lygmens į kitą, išspinduliuojami fotonai (gama kvantai) arba  $\gamma$ -spinduliavimas. Jeigu branduolys turi  $Z$  protonų, masės  $m_p$  ir  $N$  neutronų mases  $m_n$ , tai branduolio masė

$$M = Z m_p + N m_n \quad (1)$$

Pvz., *He* branduolys  $Z=N=2$ , tai  $M=2m_p+2m_n=2\cdot 1,00728 \text{ a.m.v.} = 2\cdot 1,00854=4,03164 \text{ a.m.v.}$  Tačiau realiai matuojant *He* branduolio masę, pasirodo, kad ji yra  $0,0308 \text{ a.m.v.}$  mažesnė, negu teoriškai apskaičiuota vertė. Tai paaiškina reliatyvumo teorija. Susidarant branduoliui dalis nuklonų kinetinės energijos išspinduliuojama

elektromagnetinėmis bangomis ;  $\Delta E = \Delta mc^2$

$\Delta m$  yra masės defektas. Nuklonai branduolyje yra surišti branduolinėmis jėgomis. Energijos kiekis, kuris reikalingas tam, kad išskirti nuklonus, nesuteikiant jiems kinetinės energijos, vadinama *branduolio ryšio energija*. Branduolinės energijos yra pačios didžiausios energijos lig šiolei žinomos gamtoje. Analogiškų dydžių yra branduolių sintezės energijos. Vienų atomų branduoliai savaime skyla, kitų - būna stabilūs.

Apie branduolių stabilumą galima spręsti iš jų savitosios nuklonų ryšio energijos:

$$\Delta W = \frac{931,8\Delta m}{Z + N} \quad (2)$$

kadangi visos sintezės reakcijos vyksta aukštoje temperatūroje, jos vadinamos *termobranduolinėmis reakcijomis*.

Branduolių skilimo bei sintezės procesai naudojami atominių (branduolių) bei termobranduolinių bombų gamyboje.

Vykstant branduolių skilimui skylantys cheminiai elementai irgi virsta kitais. Skilimo pasekoje pasireiškia radioaktyvumas, kuris nusakomas: 1)  $\alpha$  - skilimu, 2)  $\beta$  - skilimu, 3)  $\gamma$  - spinduliavimu, 4) savaiminiu branduolių skilimu, 5) protoniniu radioaktyvumu. Jeigu radioaktyvumas reiškiasi dėl savaiminio skilimo, jis vadinamas *natūraliu radioaktyvumu*, o jeigu dirbtinai sukuriamas - *dirbtiniu*.



Branduolių skilimas nusakomas tokia lygtimi

$$N = N_0 \exp(-\lambda t) \quad , \quad (3)$$

čia  $\lambda$  - skilimo pastovioji. Laikas, per kurį skyla pusė branduolių vadinamas *skilimo pusperiodis* ir (3) perrašome taip:

$$1/2 N_0 = N_0 \exp(-\lambda t) \quad (4)$$

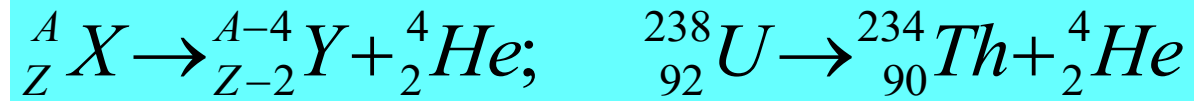
čia  $T = \frac{\ln 2}{\lambda} = \frac{0,693}{\lambda}$

*Radioaktyviojo branduolio gyvavimo trukmė*

$$\tau = \frac{1}{\lambda} \quad . \quad (5)$$

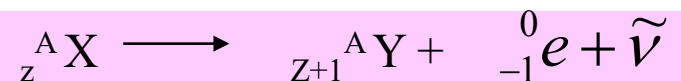
**$\alpha$  - skilimas - tai  $\alpha$  - spinduliai, atsiradę skylant branduoliams.**

***Reakcija***



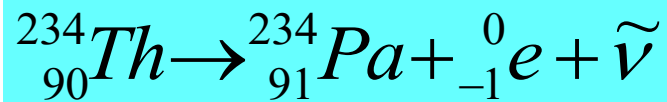
**$\alpha$  - dalelių greičiai  $\sim 10^7 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$ , greitai slopsta.**

Žinomi  $\beta$ ,  $\beta^+$  bei elektroninis pagavimas  
 $\beta^+$  - skilimas:



( $\bar{\nu}$  - antineutrinas) . Dukterinis branduolys turi eilės Nr. vienetu aukštesnį negu motininis branduolis, nors masės skaičiai  $A$  vienodi.

Pvz. .

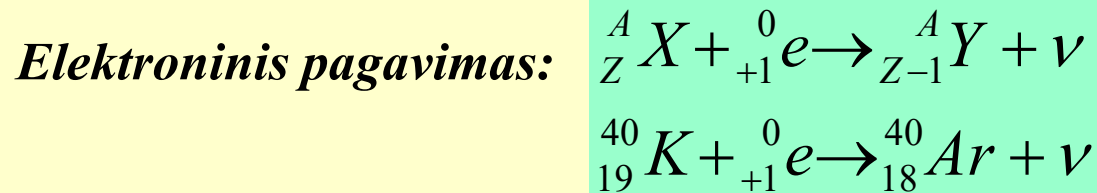


(Pa - prataktinis)

$\beta^+$  - (arba pozitroninis skilimas)

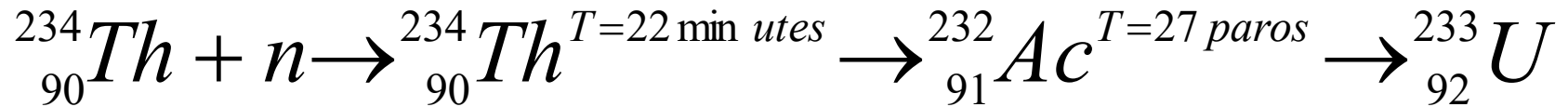


( $\nu$ - neutrinas )



$\gamma$ - spinduliavimas - tai elektromagnetinės bangos.

Savaiminis branduolių skilimas buvo stebimas apie 1940 m., kai radioaktyviųjų elementų branduoliai skyla per pusę savaime bombarduojant juos neutromais ( $n$ ).



Tai yra grandininė reakcija. Čia  ${}_{92}^{233}\text{U}$  izotopas, kurio nėra gamtoje, jam būdingas  $\alpha$ -skilimas.

1963 m. pirmą kartą pastebėtas branduolių skilimas, kai jo metu atsiranda vienas arba du protonai. Radioaktyviųjų medžiagų aktyvumas matuojamas Kiuri [C], tai

$$3,7 \cdot 10^{10} \alpha - \frac{\text{skilimu}}{s}$$

Kitas vienetas yra Rezerfordas [Rd], tai

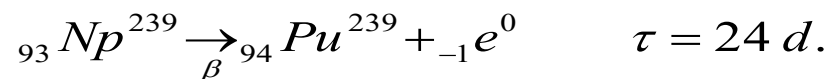
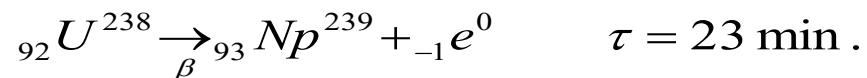
$$1,00 \cdot 10^6 \alpha - \frac{\text{skilimu}}{s}$$

$$1\text{mC}=37\text{Rd}.$$

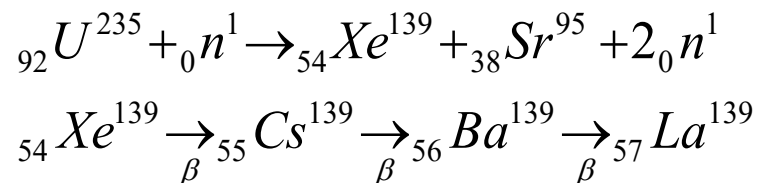
Spinduliuotės dalis, kurią sugeria  $m$  masės kūnas, vad. doze:

$$D = E / m \quad [J / kg]$$

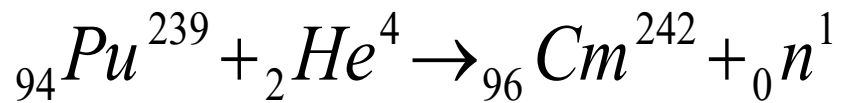
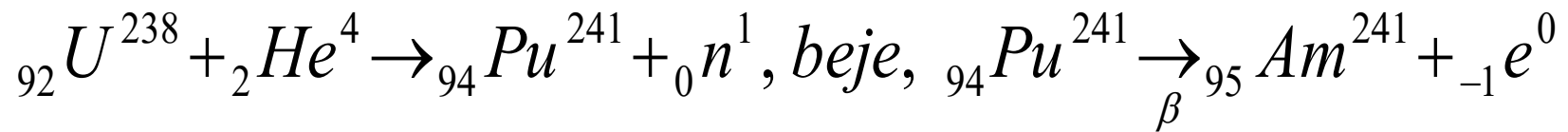
Skylant atomo branduiliams, atsiranda radioaktyvusis spinduliavimas. Skilimas vyksta grandininio reakcijos išdavose: pvaz.,



Gali būti ir toks atvejis:



Jeigu skilimas vyksta veikiant branduolius  $\alpha$  dalelėmis, tuomet turime tokias grandines reakcijas:



Čia:

*U* – uranas

*Xe* – ksenonas

*Np* – neptunijus

*Pu* – plutonis

*Am* – americis

*Cm* – Kiuris