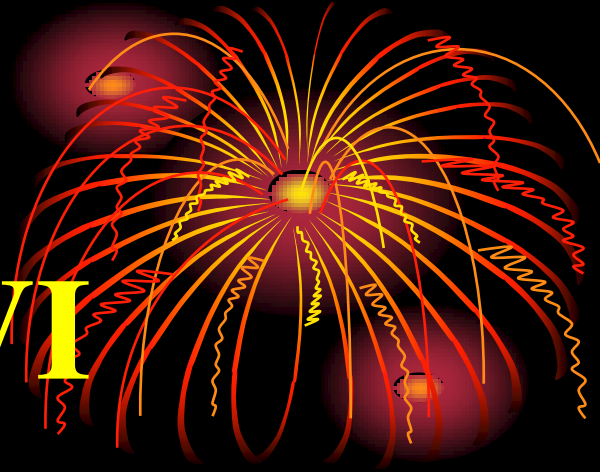


CHƯƠNG VI

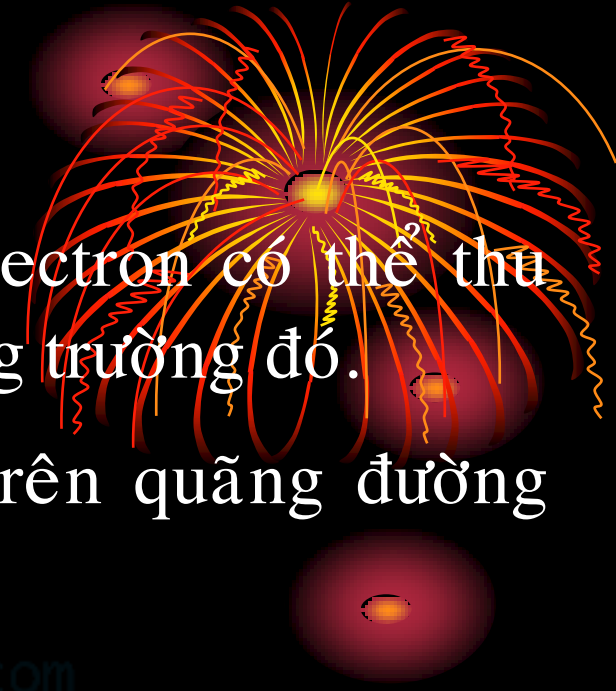


NĂNG LƯỢNG CỦA ĐIỆN TỬ TRONG TRƯỜNG TUẦN HOÀN CỦA TÍNH THỂ


PHÂN BIỆT CÁC CHẤT

BÁN DẪN ĐIỆN - KIM LOẠI VÀ ĐIỆN MÔ ĐƯA VÀO CẤU TRÚC VÙNG NĂNG LƯỢNG CỦA CHÚNG

- Dòng điện là dòng chuyển động có hướng của các hạt mang điện dưới tác dụng của điện trường ngoài.
- Vận tốc của tập thể electron dưới tác dụng của điện trường ngoài phải có thành phần khác 0 dọc theo phương của điện trường.
- Trong một vùng hoàn toàn đầy electron, các electron chỉ có thể thay đổi vị trí cho nhau và dọc theo một chiều nào đó, vectơ vận tốc tổng cộng bằng 0.

- 
- Khi đặt điện trường lên tinh thể, electron có thể thu được năng lượng khi chuyển động trong trường đó.
 - Năng lượng mà electron thu được trên quãng đường bay tự do λ bằng $eE \lambda$.
 - Trên thực tế $eE \lambda \ll E_g$.
 - Như vậy, năng lượng mà electron thu được khi đó không đủ để cho nó nhảy qua vùng cấm để lên vùng dẫn.

\Rightarrow muốn dẫn điện tốt, chất phải có vùng năng lượng chứa đầy electron .



- Năng lượng dao động nhiệt của mạng tinh thể có thể cung cấp năng lượng cho electron nhảy từ một vùng đáy lên vùng trống ở trên.

- Ở một nhiệt độ T nào đó, động năng trung bình của các nguyên tử bằng $3kT/2$ (khoảng $0,037 \text{ eV}$) ở nhiệt độ phòng.

- Trên thực tế bao giờ cũng có các nguyên tử có năng lượng rất lớn hơn giá trị trung bình đó. Theo phân bố Boltzmann, xác suất để nguyên tử dao động có năng lượng bằng E tỷ lệ với $\exp(-E_g/kT)$.

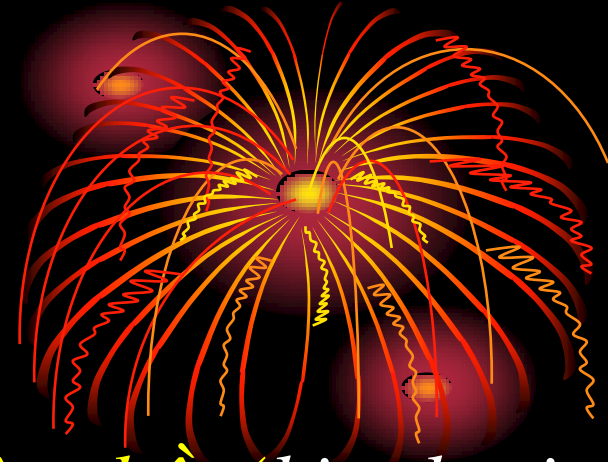


Các nguyên tử , khi va chạm với các electron, nhường cho chúng một phần hay toàn bộ năng lượng của mình.

Nếu năng lượng đó bằng hoặc lớn hơn độ rộng vùng cấm E_g thì electron có thể nhảy lên vùng trên.

Với những điều vừa nói, dựa vào cấu trúc vùng năng lượng của một chất ta có thể biết chất đó dẫn điện hay cách điện.

KIM LOẠI



1. Chất có *vùng hóa trị chỉ đầy một phần* (kim loại kiềm) hay đã *đầy hoàn toàn nhưng có một phần trùng với vùng nằm ở trên* (kim loại kiềm thổ) .

Dưới tác dụng của điện trường ngoài, các electron có thể chuyển động dễ dàng trong phạm vi của vùng hóa trị.

VÍ DỤ

Các kim loại kiềm : Li, Na, K, Rb và Cs .

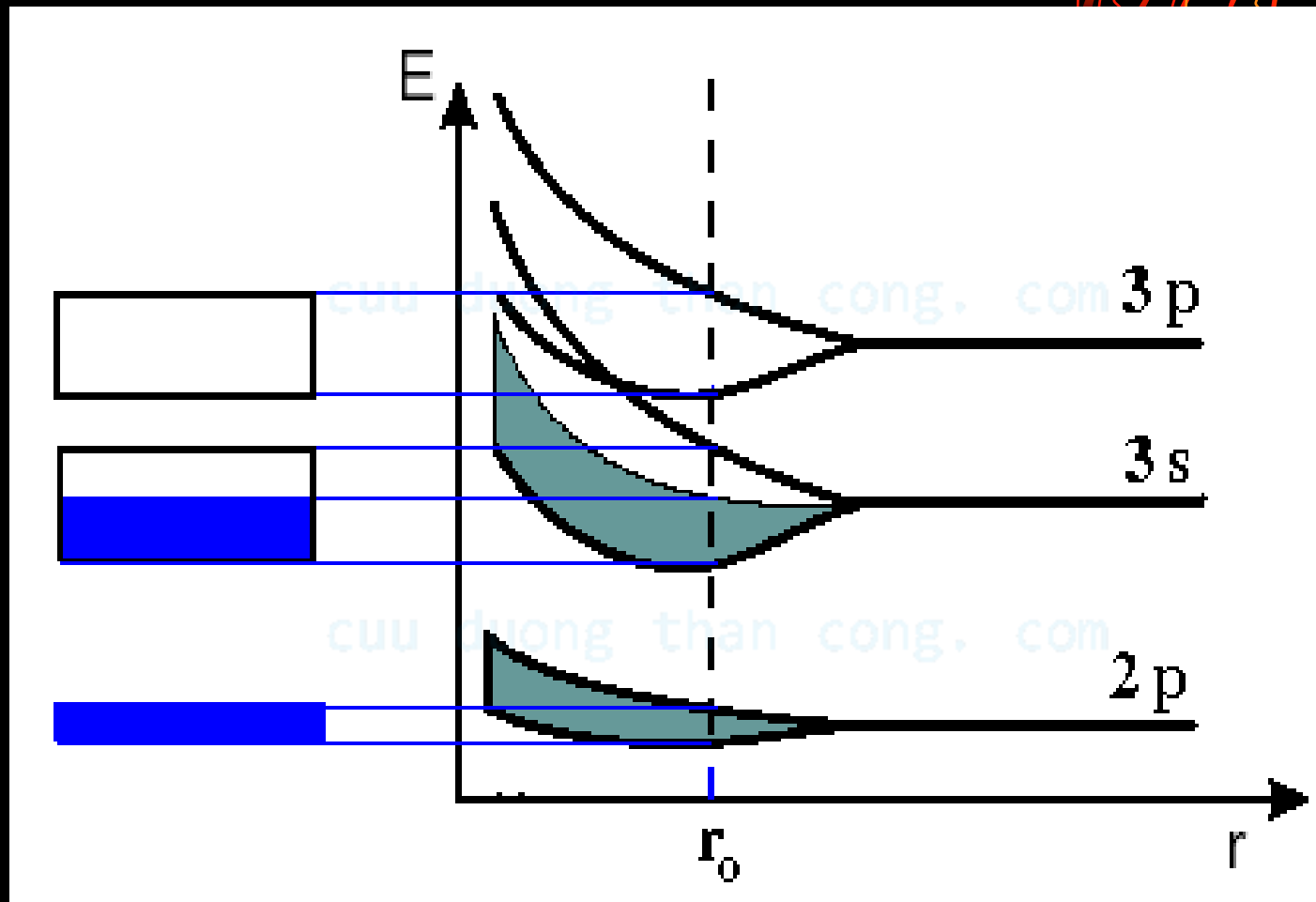
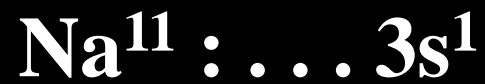
Các electron hóa trị trong các kim loại này nằm ở trạng thái n_s . Khi tạo thành tinh thể chất rắn, các vùng năng lượng trừ vùng hóa trị, đều hoàn toàn đầy electron .

Vùng hóa trị (hình thành từ mức n_s) có $2N$ trạng thái nhưng chỉ có N electron : vùng hóa trị chỉ đầy một nửa.

Các kim loại kiềm dẫn điện tốt.

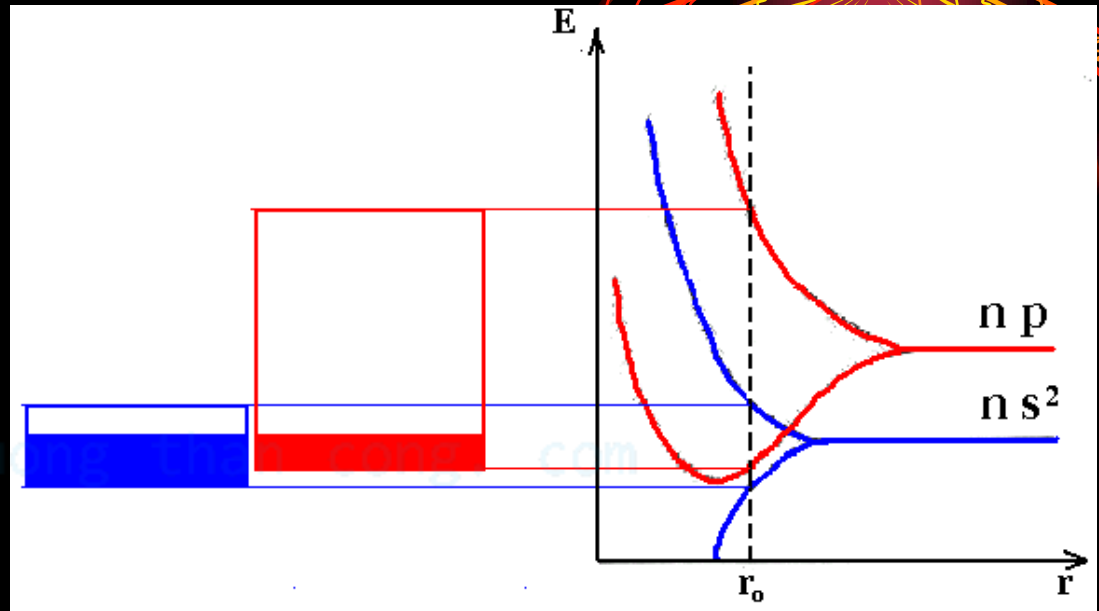


KIM LOẠI KIỀM



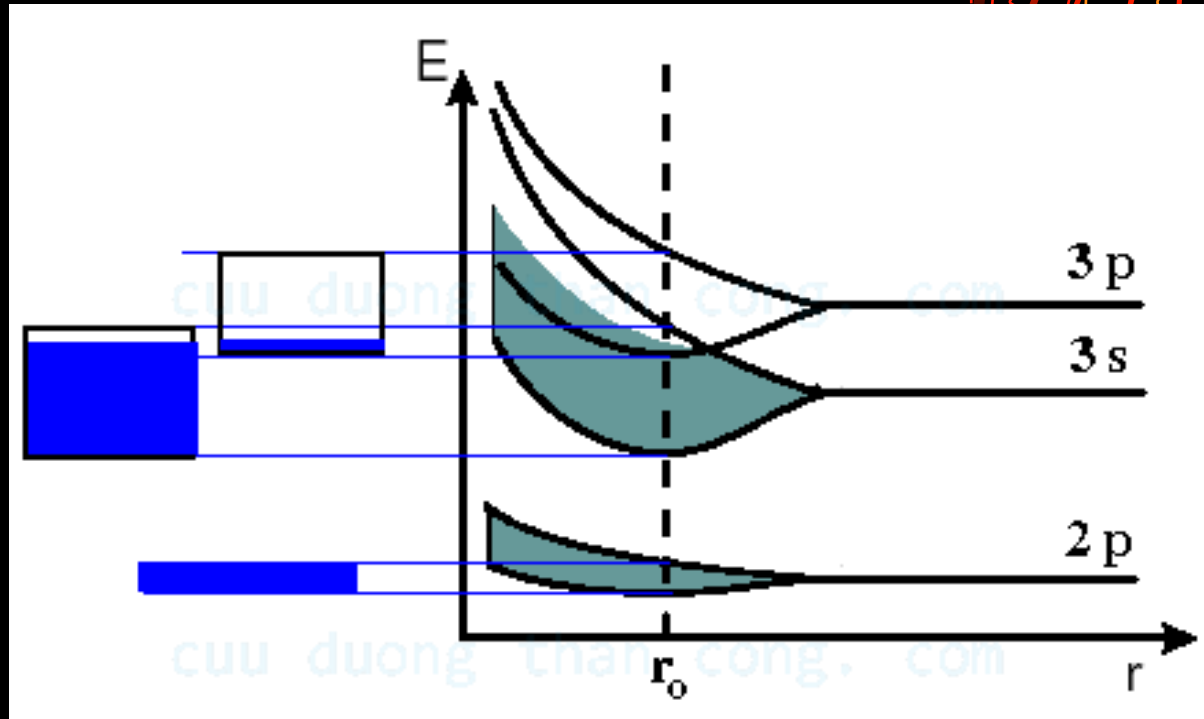
KIM LOẠI KIỀM THỔ

Các kim loại kiềm thổ có hai electron hóa trị nằm ở trạng thái n_s .



Tuy nhiên khi hình thành tinh thể, vùng ns và np phủ nhau một phần. Nhờ đó, các electron nằm ở các mức cao của vùng ns chiếm các mức thấp của vùng np cho đến khi cả hai vùng chứa electron đến một mức ngang nhau.

VÍ DỤ



Cả hai vùng này đều có electron và còn nhiều mức trống. Kim loại kiềm thổ dẫn điện tốt.

CHẤT CÁCH ĐIỆN VÀ CHẤT BÁN DẪN

Chất có vùng hóa trị chứa đầy electron và trên đó là vùng cấm năng lượng có độ rộng bằng E_g .

Ở nhiệt độ 0 K chất này hoàn toàn không dẫn điện vì năng lượng mà electron thu được trong điện trường ngoài và dao động nhiệt không đủ để vượt qua vùng cấm.

Ở một nhiệt độ T nào đó, xác suất để electron có năng lượng bằng E_g tỷ lệ với $\exp(-E_g/kT)$.

Như vậy, bao giờ cũng có một số electron có năng lượng nhiệt đủ để nhảy lên vùng năng lượng nằm ở bên trên còn rất nhiều mức trống.

Nếu E_g khá lớn và ở nhiệt độ không quá cao thì số electron nhảy được lên vùng trên không đáng kể và chất như vậy trên thực tế là một chất không dẫn điện.

Thông thường quy ước : **chất có cấu trúc vùng với $E_g \geq 3 \text{ eV}$ là chất cách điện.**

Nếu $E_g < 3 \text{ eV}$, khi nhiệt độ không quá thấp thì số electron có đủ năng lượng để vượt qua vùng cấm khá nhiều
 \Rightarrow **Chất bán dẫn**

Số electron từ vùng hóa trị nhảy lên vùng trên (được gọi là *vùng dẫn*) trong một đơn vị thời gian bằng $A \exp(-E_g / kT)$ với A là một hệ số tỷ lệ không phụ thuộc nhiệt độ.

- Mỗi electron nhảy được lên vùng dẫn để lại một lỗ trống ở trong vùng hóa trị.
- Đồng thời với sự nhảy lên vùng năng lượng cao hơn của electron là quá trình nhảy ngược trở lại vùng hóa trị (quá trình tái hợp electron -lỗ trống) .
- Tốc độ của quá trình này tỷ lệ với nồng độ n của electron có trong vùng dẫn và nồng độ p của lỗ trống có trong vùng hóa trị , nghĩa là bằng $\gamma.n.p$ với γ là hệ số tỷ lệ.

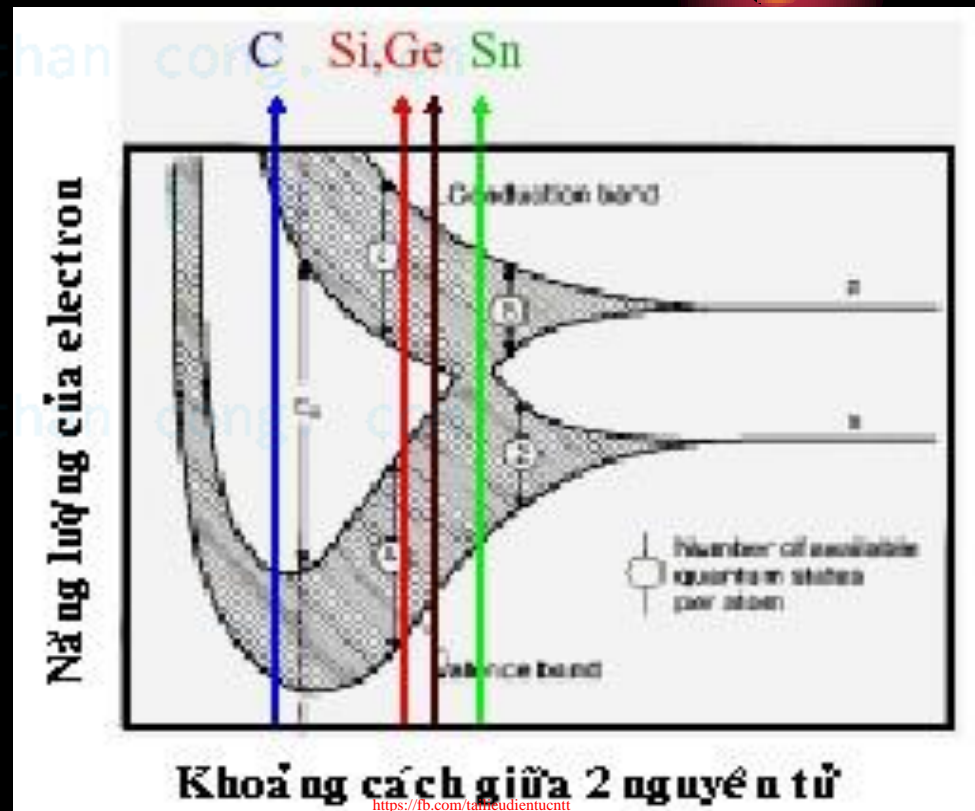
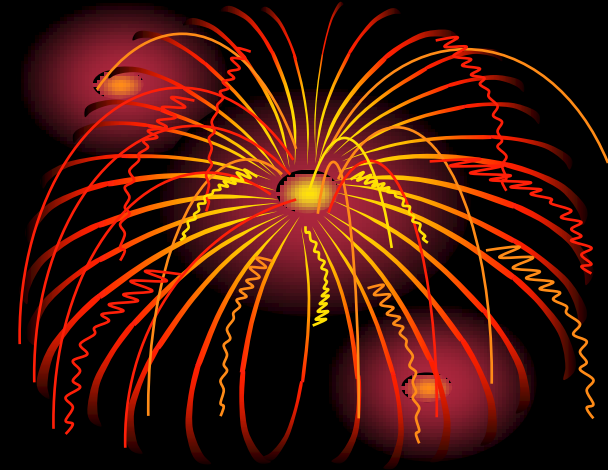
$$A \exp^{-\frac{E_g}{kT}} = \gamma.n.p = \gamma n^2. (\text{vì } n = p).$$

Trong trạng thái
cân bằng động



$$n = \sqrt{\frac{A}{\gamma}} \exp^{-\frac{E_g}{2kT}}$$

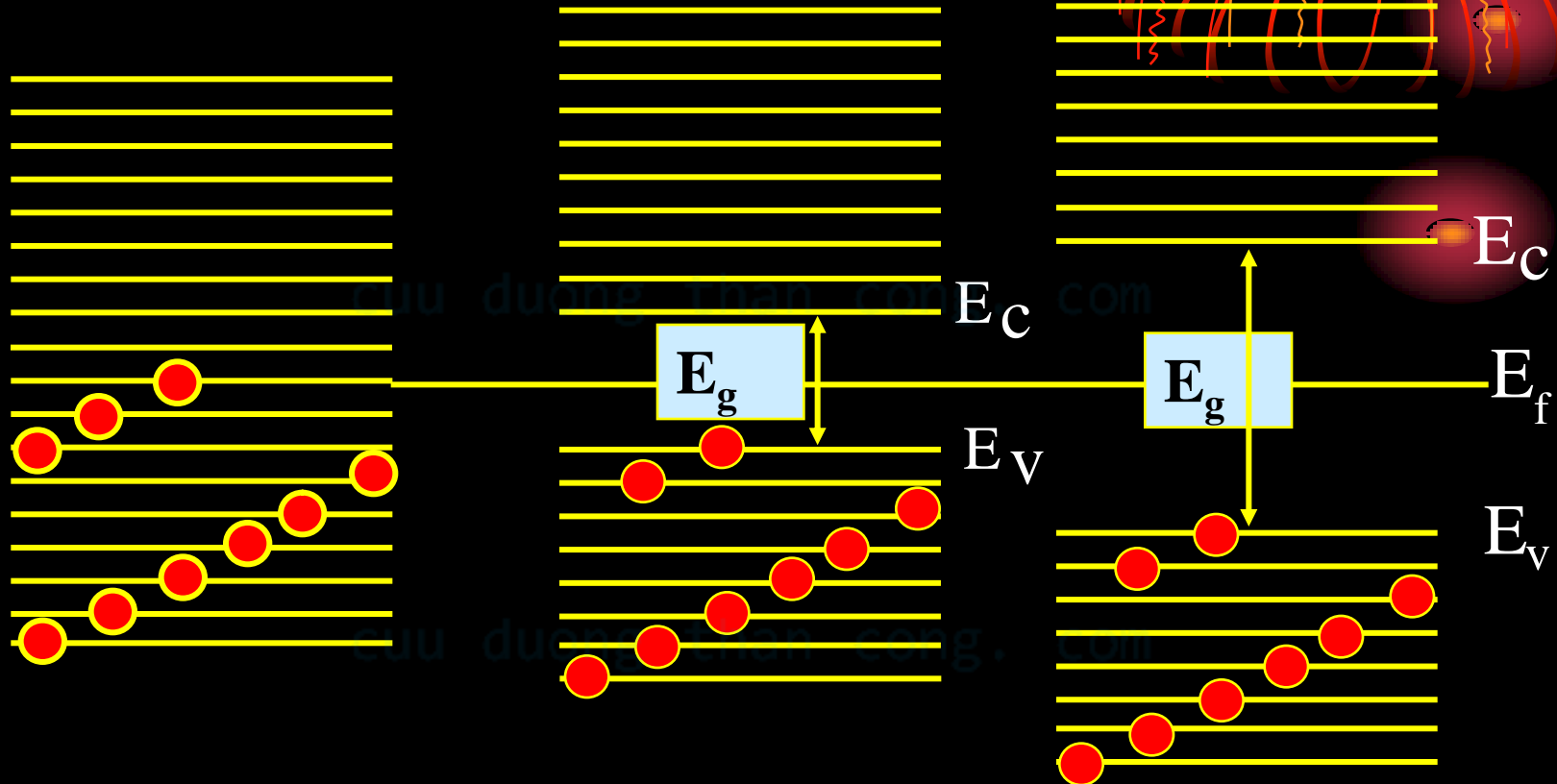
Nguyên tố	a (nm)	E_g
C (kim cương)	0,356	5 eV
Si	0,543	1,1 eV
Ge	0,566	0,7 eV
Thiếc	0,646	

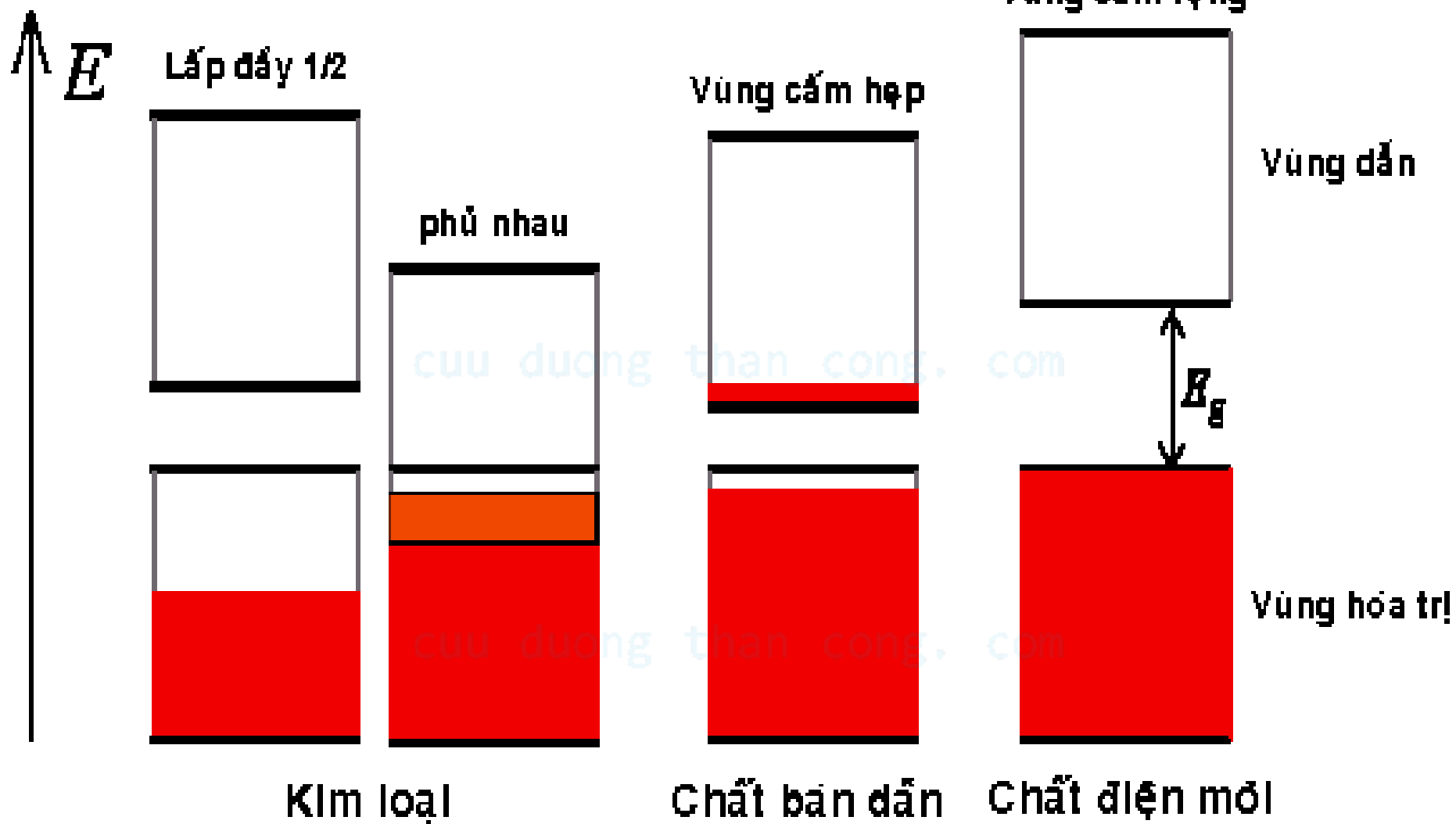


Kim loại

Chất bán dẫn

Điện môi





THÀNH CÔNG VÀ HẠN CHẾ CỦA LÝ THUYẾT VÙNG ĐƠN GIẢN



- Giải thích được tại sao chất rắn là chất dẫn điện, chất bán dẫn hoặc chất cách điện.
- Thiết lập quan hệ giữa các tính chất của vật liệu và nguyên tử.
- Giải thích sự tồn tại của các hạt có điện tích dương (lỗ trống) và giải thích khái niệm khối lượng hiệu dụng.
- Phép gần đúng một electron không thể tính đến các hiệu ứng tập thể như hiện tượng sắt từ và siêu dẫn và sự chuyển pha do năng lượng toàn phần của electron.