

ĐỀ CƯƠNG ÔN TẬP MÔN HỌC VẬT LIỆU HỌC ĐẠI CƯƠNG

(Tài liệu được cung cấp có bản quyền bởi Hoàng Trọng Vân Đ-ĐTK6.4)

Câu 1 : Trình bày cấu trúc vùng năng lượng trong vật rắn.

Trả lời :

Cấu trúc vùng năng lượng của vật rắn trong tất cả các chất dẫn điện, bán dẫn và trong nhiều điện môi, chỉ tồn tại dẫn điện bằng điện tử và độ dẫn điện phụ thuộc mạnh vào các số lượng điện tử có khả năng dẫn điện. tuy nhiên không phải mọi điện tử trong nguyên tử đều có được gia tốc khi có mặt điện trường. Trong một loại vật liệu đã cho số điện tử có khả năng dẫn điện liên quan đến sự sắp xếp các trạng điện tử và còn với các cách thức điện tử chiếm lĩnh trong các trạng thái đó. Sự khảo sát cơ bản về các vấn đề này khá phức tạp cần vận dụng các nguyên lý của cơ học lượng tử.

Trong riêng mỗi nguyên tử tồn tại mức năng lượng gián đoạn. Các điện tử sắp xếp thành các tầng và các lớp được chỉ bởi các chữ s, p, d, f. Trong mỗi lớp phải có tương ứng $2l + 1 = 1, 3, 5$ và 7 quỹ đạo khác nhau. Trong số các nguyên tử điện tử chiếm lĩnh các trạng thái có mức năng lượng thấp nhất cứ hai điện tử có spin đối xong chiếm một quỹ đạo phù hợp với nguyên lý loại trừ Pauli. Cấu hình điện tử của một nguyên tử cô lập biểu thị sắp xếp điện tử vào các trạng thái cho phép.

Sự giãn từ một mức năng lượng điện tử trong ngu thành một vùng nluong trong vật rắn tùy thuộc vào khoảng cách jua các ngu, sự jan này bắt đầu từ các đử ngoài cùng của ngu bởi vì chúng bị nhiễu loạn trước tiên khi các ngu liên kết với nhau.

Các tính chất điện của vran fu thuộc vào cấu trúc vùng năng lượng của nó, cụ thể là sự sắp xếp các vùng ngoài cùng và cách thức lấp đầy chúng bởi đtử. Theo quan điểm này vùng chứa các đtử có năng lượng cao nhất được gọi là vùng hóa trị, còn vùng dẫn điện là vùng có mức năng lượng cao hơn kề bên đó mà trong đa số các trường hợp về cơ bản là bỏ trống.

ở các cấu trúc vùng thứ 2 cũng tìm thấy trong các kim loại vùng hóa trị bị lấp đầy và còn phủ lên cả vùng dẫn vùng này nếu như không bị phủ thì hoàn toàn còn trống.

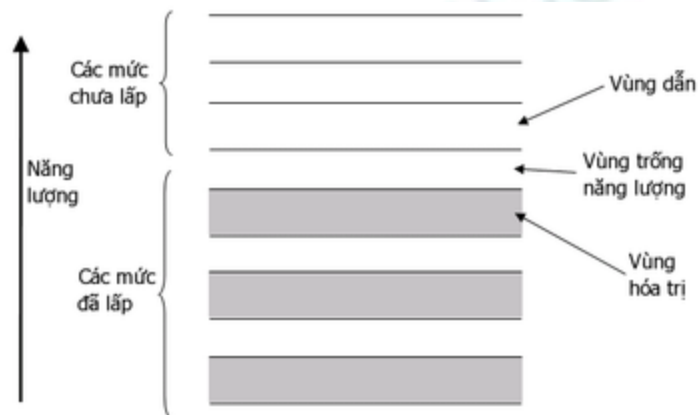
TaiLieu.vn

Câu 2 : Nêu cấu trúc vùng năng lượng của bán dẫn và điện môi từ đó chứng minh tính chất dẫn điện của chúng.

Trả lời :

a. Vùng năng lượng của bán dẫn.

Tính chất dẫn điện của các vật liệu rắn được giải thích nhờ lý thuyết vùng năng lượng. Như ta biết, điện tử tồn tại trong nguyên tử trên những mức năng lượng gián đoạn (các trạng thái dừng). Nhưng trong chất rắn, khi mà các nguyên tử kết hợp lại với nhau thành các khối, thì các mức năng lượng này bị phủ lên nhau, và trở thành các vùng năng lượng và sẽ có ba vùng chính.



Cấu trúc năng lượng của điện tử trong mạng nguyên tử của chất bán dẫn. Vùng hóa trị được lấp đầy, trong khi vùng dẫn trống. Mức năng lượng Fermi nằm ở vùng trống năng lượng.

Vùng hóa trị (Valence band): Là vùng có năng lượng thấp nhất theo thang năng lượng, là vùng mà điện tử bị liên kết mạnh với nguyên tử và không linh động.

Vùng dẫn (Conduction band): Vùng có mức năng lượng cao nhất, là vùng mà điện tử sẽ linh động (như các điện tử tự do) và điện tử ở vùng này sẽ là điện tử dẫn, có nghĩa là chất sẽ có khả

năng dẫn điện khi có điện tử tồn tại trên vùng dẫn. Tính dẫn điện tăng khi mật độ điện tử trên vùng dẫn tăng.

Vùng cấm (Forbidden band): Là vùng nằm giữa vùng hóa trị và vùng dẫn, không có mức năng lượng nào do đó điện tử không thể tồn tại trên vùng cấm. Nếu bán dẫn pha tạp, có thể xuất hiện các mức năng lượng trong vùng cấm (mức pha tạp). Khoảng cách giữa đáy vùng dẫn và đỉnh vùng hóa trị gọi là độ rộng vùng cấm, hay năng lượng vùng cấm (Band Gap). Tùy theo độ rộng vùng cấm lớn hay nhỏ mà chất có thể là dẫn điện hoặc không dẫn điện.

Như vậy, tính dẫn điện của các chất rắn và tính chất của chất bán dẫn có thể lý giải một cách đơn giản nhờ lý thuyết vùng năng lượng như sau:

+ Kim loại có vùng dẫn và vùng hóa trị phủ lên nhau (không có vùng cấm) do đó luôn luôn có điện tử trên vùng dẫn vì thế mà kim loại luôn luôn dẫn điện.

+ Các chất bán dẫn có vùng cấm có một độ rộng xác định. Ở không độ tuyệt đối ($0\text{ }^{\circ}\text{K}$), mức Fermi nằm giữa vùng cấm, có nghĩa là tất cả các điện tử tồn tại ở vùng hóa trị, do đó chất bán dẫn không dẫn điện. Khi tăng dần nhiệt độ, các điện tử sẽ nhận được năng lượng nhiệt ($k_B.T$ với k_B là hằng số Boltzmann) nhưng năng lượng này chưa đủ để điện tử vượt qua vùng cấm nên điện tử vẫn ở vùng hóa trị. Khi tăng nhiệt độ đến mức đủ cao, sẽ có một số điện tử nhận được năng lượng lớn hơn năng lượng vùng cấm và nó sẽ nhảy lên vùng dẫn và chất rắn trở thành dẫn điện.

+ Khi nhiệt độ càng tăng lên, mật độ điện tử trên vùng dẫn sẽ càng tăng lên, do đó, tính dẫn điện của chất bán dẫn tăng dần theo nhiệt độ (hay điện trở suất giảm dần theo nhiệt độ). Một

cách gần đúng, có thể viết sự phụ thuộc của điện trở chất bán dẫn vào nhiệt độ như sau:

$$R = (R_0) \exp\left(\frac{\Delta E_g}{2 K_b.T}\right)$$

với: R_0 là hằng số, ΔE_g là độ rộng vùng cấm. Ngoài ra, tính dẫn của chất bán dẫn có thể thay đổi nhờ các kích thích năng lượng khác, ví dụ như ánh sáng. Khi chiếu sáng, các điện tử sẽ hấp thụ năng lượng từ photon, và có thể nhảy lên vùng dẫn nếu năng lượng đủ lớn. Đây chính là nguyên nhân dẫn đến sự thay đổi về tính chất của chất bán dẫn dưới tác dụng của ánh sáng (quang-bán dẫn).

b. Vùng năng lượng của điện môi.

Điện môi là những chất không dẫn điện (cách điện). Trong phân tử của các chất điện môi, số lượng các điện tích tự do là rất ít. Điều này làm khả năng mang điện của nó rất kém. Nhưng khi điện trường tăng vượt quá 1 giá trị giới hạn thì điện môi bị đánh thủng (mất tính cách điện), mỗi điện môi khác nhau có 1 điện trường giới hạn khác nhau hằng số điện môi ϵ chỉ phụ thuộc vào tính chất của điện môi. Hằng số điện môi của chân không = 1.

Câu 3 : Dựa vào độ linh động của điện tử và cấu trúc vùng năng lượng anh (chị) hãy nêu đặc điểm của điện trở kim loại.

Tính chất dẫn điện, hay cản trở điện, của nhiều vật liệu có thể giải thích bằng cơ học lượng tử. Mọi vật liệu đều được tạo nên từ mạng lưới các nguyên tử. Các nguyên tử chứa các electron, có năng lượng gắn kết với hạt nhân nguyên tử nhận các giá trị rời rạc trên các mức cố định. Các mức này có thể được nhóm thành

2 nhóm: vùng dẫn và vùng hóa trị thường có năng lượng thấp hơn vùng dẫn. Các electron có năng lượng nằm trong vùng dẫn có thể di chuyển dễ dàng giữa mạng lưới các nguyên tử.

Khi có hiệu điện thế giữa hai đầu miếng vật liệu, một điện trường được thiết lập, kéo các electron ở vùng dẫn di chuyển nhờ lực Coulomb, tạo ra dòng điện. Dòng điện mạnh hay yếu phụ thuộc vào số lượng electron ở vùng dẫn.

Các electron nói chung sắp xếp trong nguyên tử từ mức năng lượng thấp đến cao, do vậy hầu hết nằm ở vùng hóa trị. Số lượng electron nằm ở vùng dẫn tùy thuộc vật liệu và điều kiện kích thích năng lượng (nhiệt độ, bức xạ điện từ từ môi trường). Chia theo tính chất các mức năng lượng của electron, có ba loại vật liệu chính sau:

Vật liệu	Điện trở suất, ρ (Ωm)
Kim loại	10^{-8}
Bán dẫn	thay đổi mạnh
Cách điện	10^{16}

Lý thuyết vừa nêu không giải thích tính chất dẫn điện cho mọi vật liệu. Vật liệu như siêu dẫn có cơ chế dẫn điện khác, nhưng không nêu ở đây do vật liệu này không có điện trở.

Trong kim loại luôn có electron nằm ở vùng dẫn. Trên thực tế, không có khoảng cách giữa vùng dẫn và vùng hóa trị, và có thể coi hai vùng là một đối với kim loại.

Kim loại có vùng dẫn và vùng hóa trị phủ lên nhau (không có vùng cấm) do đó luôn luôn có điện tử trên vùng dẫn vì thế mà kim loại luôn luôn dẫn điện.

Mạng lưới nguyên tử của kim loại, thực tế, không hoàn hảo: các chỗ bị sút mẻ trong mạng lưới tán xạ electron, gây nên sự cản trở với sự di chuyển của electron (điện trở). Khi nhiệt độ tăng, các nguyên tử dao động mạnh hơn và dễ va chạm vào các electron hơn, khiến điện trở tăng theo.

Vật dẫn điện càng dài, số lượng va chạm của electron trên đường đi càng tăng, khiến điện trở vật dẫn càng tăng.

TaiLieu.vn

Câu 4 : Nêu và giải thích tính dẫn điện của bán dẫn loại P.

Trả lời :

Xét bán dẫn nguyên tố silic. Một nguyên tử silic có 4 điện tử vòng ngoài mỗi điện tử này liên kết đồng hóa trị với 4 nguyên tử silic lân cận. Giả sử 1 nguyên tử tạp chất có hóa trị 3 được thay thế vào (nguyên tử nhóm III A: Al, B, Ga). Ta lấy bo. Một trong các mối liên kết đồng hóa trị xung quanh mỗi nguyên tử này sẽ bị thiếu 1 điện tử. Chỗ thiếu đó có thể xem như 1 lỗ trống liên kết yếu với nguyên tử tạp chất. Có thể giải phóng lỗ trống này khỏi nguyên tử tạp chất bằng cách là điện tử và lỗ trống đổi chỗ cho nhau. Một lỗ trống chuyển động được coi như là ở trạng thái kích thích. Vậy trong trường hợp này tạp chất bo làm cho lỗ trống trong tinh thể tăng lên rất nhiều: chỉ cần một số nguyên tử tạp chất bằng một phần triệu số nguyên tử bán dẫn tinh khiết cũng làm cho số lỗ trống tăng lên hàng vạn lần, do đó độ dẫn điện của bán dẫn có tạp chất lớn hơn độ dẫn điện của bán dẫn tinh khiết hàng vạn lần.

Mỗi 1 nguyên tử tạp chất đưa vào khe cảm một mức năng lượng nằm sát phía trên đỉnh của vùng hóa trị. Mỗi lỗ trống sẽ được tạo ra trong vùng hóa trị khi kích thích nhiệt độ 1 điện tử chuyển từ vùng hóa trị lên trạng thái điện tử tạp chất.

Với 1 chuyển dời như thế chỉ có 1 hạt tải (1 lỗ trống) được sinh ra trong vùng hóa trị mà không có điện tử tự do nào được tạo ra hoặc ở mức tạp chất hoặc ở trong vùng dẫn. Tạp chất này được

gọi là acceptor (tạp chất nhận). bởi vì nó có khả năng nhận điện tử từ vùng hóa trị và để lại đó 1 lỗ trống .

Đối với bán dẫn tạp chất loại này, lỗ trống có mật với nồng độ cao hơn nhiều so với điện tử ($p \gg n$) và trong trường hợp đó vật liệu được gọi là chất bán dẫn loại p bởi vì tính dẫn điện chủ yếu do các điện tích dương đảm nhiệm. Lỗ trống được gọi là hạt tải đa số, điện tử là hạt tải thiểu số.

TaiLieu.vn

Câu 5 : Nêu và giải thích tính dẫn điện của bán dẫn loại N.

Trả lời :

Xét bán dẫn nguyên tố silic. Một nguyên tử silic có 4 điện tử vòng ngoài mỗi điện tử này liên kết đồng hóa trị với 4 nguyên tử silic lân cận. Giả sử 1 nguyên tử tạp chất có hóa trị 5 được thay thế vào (nguyên tử nhóm V A: P, As, Sb). Chỉ có 4 trong 5 nguyên tử tạp chất này có thể tham gia vào liên kết. Một điện tử thừa ra chỉ dính 1 cách lỏng lẻo xung quanh nguyên tử tạp chất bởi lực hút tĩnh điện yếu năng lượng liên kết của điện tử này tương đối nhỏ ($0,01 \text{ eV}$) \Rightarrow dễ bị tách khỏi nguyên tử tạp chất \Rightarrow nó trở thành điện tử tự do (tức điện tử dẫn). Như vậy, trong trường hợp này (tức) làm cho số điện tử tự do trong bán dẫn tăng lên rất nhiều. Và chỉ cần một số nguyên tử tạp chất bằng một phần triệu số nguyên tử bán dẫn tinh khiết cũng làm cho số điện tử tăng lên hàng vạn lần, nghĩa là độ dẫn điện của bán dẫn có tạp chất lớn độ dẫn điện của bán dẫn tinh khiết hàng vạn lần.

Mỗi điện tử lỏng lẻo đó chiếm một mức năng lượng đang nằm trong khe cấm và ngay dưới đáy vùng dẫn. Để kích thích điện tử nhảy từ 1 trong các trạng thái (mức) tạp chất này lên 1 mức trong vùng dẫn đòi hỏi 1 năng lượng tương ứng với năng lượng liên kết trong điện tử. Cứ mỗi lần kích thích sẽ cấp 1 điện tử đơn vào vùng dẫn. Tạp chất loại này gọi là đônơ (tạp chất cho). Bởi mỗi điện tử đônơ đc kích thích từ 1 tạp chất nên không tạo ra lỗ trống ở trong vùng hóa trị do đó trong bán dẫn có tạp chất mật độ điện tử rất lớn so với mật độ lỗ trống. Vì lẽ đó bán dẫn có tạp