

Th c m c xin liên h : thanhlam1910_2006@yahoo.com

www.mientayvn.com

3. Cấu trúc loại kim cương hoặc kẽm pha (Zinc Blend)

Mô tả: Trong cấu trúc thuộc loại này mỗi nguyên tử đều nằm ở tâm của một hình tứ diện (*tetrahedron*) (có 4 mặt đều là tam giác) và được bao vây xung quanh bằng 4 nguyên tử *cùng loại* (nếu là cấu trúc kim cương) hoặc *khác loại* (nếu là cấu trúc kẽm pha, trong đó kẽm pha là tên người ta hay dùng để gọi ZnS) nằm trên các đỉnh của hình tứ diện này (hình 1.12). Như vậy ta thấy rằng ở đây mạng tinh thể gồm hai mạng FCC lồng vào nhau, mạng nọ xô dịch đi so với mạng kia một đoạn bằng $1/4$ đường chéo không gian của hình lập phương FCC nói trên. Từ đây có thể nói rằng:

- Loại mạng Bravais đại diện cho tính chất đối xứng tịnh tiến của mạng tinh thể là mạng FCC.
- Nên tinh thể gồm hai nguyên tử (cùng loại hoặc khác loại), tức là ô cơ sở chứa 2 nguyên tử. Nếu chọn hệ tọa độ với 3 vectơ đơn vị là 3 cạnh của một mạng FCC (biểu diễn trên hình 1.12) thì 2 nguyên tử này nằm ở các điểm có tọa độ là 000 và $1/4, 1/4, 1/4$.

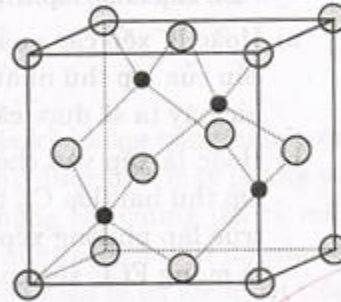
16

CƠ SỞ VẬT LÝ CHẤT RẮN, ĐÀO TRẦN CAO,
NXB ĐẠI HỌC QUỐC GIA HÀ NỘI, 2004

- Mỗi nguyên tử có 4 nguyên tử (cùng loại hoặc khác loại) vây quanh trên các nút mạng lân cận gần nhất.
- Một ô đơn vị như trên hình vẽ chứa 8 nguyên tử.

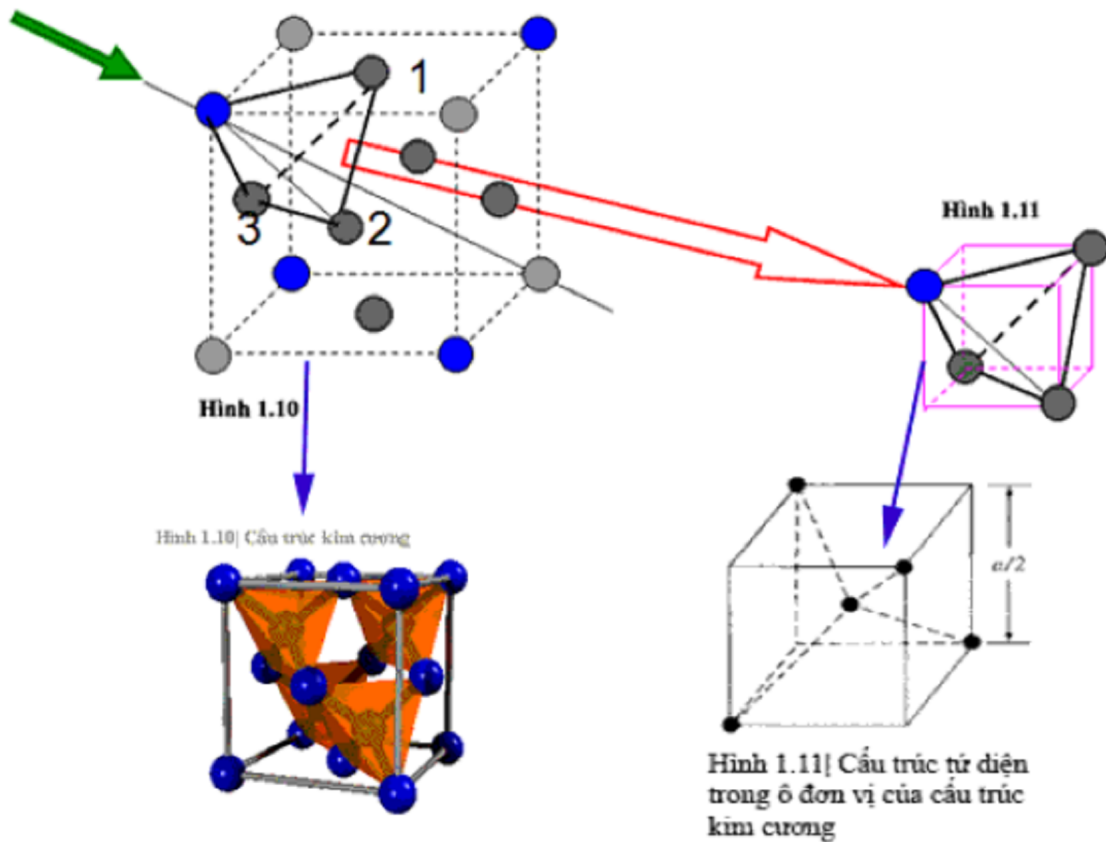
Đáng chú ý là trong cấu trúc kim cương tuy tất cả các nguyên tử đều thuộc cùng một loại nhưng vẫn không có cách nào xếp chúng vào chỉ một mạng Bravais.

Cấu trúc kim cương và kẽm pha là cấu trúc hết sức quan trọng trong Vật lý bán dẫn vì một loạt các chất bán dẫn quan trọng nhất như Si, Ge và nhiều chất bán dẫn A_2B_6 đều có cấu trúc tinh thể thuộc loại này. Các thí dụ về cấu trúc này là (cột bên cạnh tên tinh thể là hằng số mạng tính theo đơn vị là Å):



Hình 1.12
Sơ đồ vị trí các nguyên tử tinh thể ZnS.

Si	5,43	ZnS	5,41
Ge	5,65	InAs	6,04
C	3,56	InSb	6,46
ZnSe	5,65	SiC	4,35
CdS	5,82	AlP	5,42



bài tập 5, trang 44, Introduction to solid state physics, Charles Kittel, tái bản lần 8.
Thảo luận cấu trúc của kim cương. Cấu trúc tinh thể kim cương được mô tả trên. Ô nguyên tố (khác với ô nguyên tử) bao gồm 8 nguyên tử. (a) Tìm thảo luận cấu trúc F' của ô nguyên tố này. (b) Tìm tọa độ của F' và chứng minh rằng các phân tử có phép cấu trúc kim cương thỏa mãn một trong hai điều kiện sau: 1) tổng các khối lượng m_1, m_2, m_3 của chúng và $m_1 + m_2 + m_3 = 4n$ 2) tổng các khối lượng m_1, m_2, m_3 bằng 1.
Cách 1: Theo trang 2-2 của quyển bài tập kèm theo sách này

$$F'_{m_1, m_2, m_3} = F_{m_1, m_2, m_3} \times F(\text{nền})$$

ở đây: F_{m_1, m_2, m_3} là thừa số cấu trúc của mạng

Lập phương tâm mặt.

$F(\text{nền})$ là thừa số cấu trúc của nền.

- Theo slide bài giảng của thầy, (slide 71)

$$F_{m_1, m_2, m_3} = \Phi [1 + \cos \pi(m_1 + m_2) + \cos \pi(m_1 + m_3) + \cos \pi(m_2 + m_3)]$$

Tức là:

✓ Nếu m_1, m_2, m_3 đều là chẵn hoặc đều lẻ thì $F = 4\Phi$

✓ Nếu m_1, m_2, m_3 vừa có chẵn, lẻ lẫn lộn thì $F = 0$.

- Nền của kim cương bao gồm các nguyên tử nằm tại $000; \frac{1}{4} \frac{1}{4} \frac{1}{4}$ nên thừa số cấu trúc của nền

là:

$$F(\text{nền}) = \Phi (1 + e^{-i \frac{1}{2} \pi(m_1 + m_2 + m_3)})$$

Bây giờ, ta thấy F_{m_1, m_2, m_3} chỉ khác không nếu m_1, m_2, m_3

đều chẵn hoặc đều lẻ.

- Nếu tất cả các chỉ số đều chẵn, thừa số

cấu trúc của nền sẽ bằng không nếu $m_1 + m_2 + m_3 \neq 4n$.

Vd: Với phân xạ (222), chúng ta có $F(\text{nền}) = 1 + e^{-i\pi} = 0 \Rightarrow$ bị cấm

- Nếu tất cả các chỉ số đều lẻ, thừa số cấu trúc của nền sẽ $\neq 0$ không trong mọi trường hợp.

3. Mạng kim cương xét như mạng PC với nền (basis)

Như ta đã biết, cấu trúc tinh thể kiểu kim cương (thí dụ điển hình là các tinh thể Si và Ge) không phải là mạng Bravais đơn mà gồm 2 mạng Bravais FCC lồng vào nhau, nói cụ thể hơn nó là mạng FCC với nền gồm 2 nguyên tử cùng loại nằm ở các vị trí:

$$000, \frac{1}{4} \frac{1}{4} \frac{1}{4}$$

58

Mỗi mạng Bravais FCC trên đây đến lượt mình lại có thể coi là gồm 4 mạng Bravais PC lồng vào nhau, do đó tổng hợp lại ta có thể coi mạng Bravais của cấu trúc kim cương là mạng PC kèm với nền gồm 8 nguyên tử cùng loại nằm ở các tọa độ:

$$000, 0\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2}, \frac{1}{2}0\frac{1}{2}\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\frac{1}{2}0\frac{1}{2}, \frac{1}{4}\frac{1}{4}\frac{1}{4}, \frac{1}{4}\frac{3}{4}\frac{3}{4}, \frac{3}{4}\frac{1}{4}\frac{3}{4}, \frac{3}{4}\frac{3}{4}\frac{1}{4}$$

Từ đây ta thấy rằng mạng kim cương so với mạng PC có hệ số tán xạ cấu trúc:

$$F_{hkl} = f \{ 1 + \exp i\pi(k+l) + \exp i\pi(l+h) + \exp i\pi(h+k) + \exp i\frac{\pi}{2}(h+k+l) + \exp i\frac{\pi}{2}(h+3k+3l) + \exp i\frac{\pi}{2}(3h+3k+l) + \exp i\frac{\pi}{2}(3h+k+3l) \}.$$

Nếu xét cụ thể hơn thì có thể thấy rằng:

$$F_{100} = 0, F_{110} = 0, F_{111} = 6$$

$$F_{200} = 0, F_{211} = 0, F_{220} = 8, F_{221} = 0$$

Tức là mạng kim cương so với mạng PC đã thiếu ảnh của các họ mặt phẳng (100), (110), (200), (211), (221)...