Trao đổi trực tuyến tại:

www.mientayvn.com/chat_box_li.html

Lời giới thiệu về cuốn sách từ www.mientayvn.com

Cuốn sách vật lí điện tử và bán dẫn này do các thành viên của mientayvn.com gửi đến chúng tôi vào ngày 21/4/2009. Sách trình bày hầu hết các vấn đề trọng yếu của vật lí bán dẫn với phương pháp sư phạm dễ hiểu, kết hợp với các công cụ giáo dục hiện đại, đặc biệt là mô phỏng. Những video mô phỏng và những thí nghiệm ảo được đưa vào để minh họa các ý tưởng lí thuyết trừu tượng. Các video này không được gửi kèm cùng với sách mà tác giả của nó chỉ cho địa chỉ để người đọc có thể truy cập trên Internet. Đây chỉ là 5 chương đầu tiên của sách, các chương tiếp theo sẽ được viết trong một ngày gần đây.

Đối tượng sử dụng sách này là sinh viên các chuyên ngành vật lí, điện tử và bất cứ ai muốn nghiên cứu và tìm hiểu về bán dẫn.

Về tài liệu tham khảo, chúng tôi khuyên bạn nên đọc cuốn Semiconductor physics and devices_ Basic principle của giáo sư Neaman ở đại học New Mexico. Sách này có nhiều bài tập và một quyển bài giải kèm theo.

Admin của www.mientayvn.com ,

Nguyễn Thanh Lâm

VẬT LÍ ĐIỆN TỬ VÀ BÁN DẪN

www.mientayvn.com

LỜI MỞ ĐẦU

TRIẾT LÍ VÀ MỤC TIÊU

Mục đích của sách là cung cấp cho người đọc kiến thức cơ bản về đặc tính, hoạt động và giới hạn của thiết bị bán dẫn. Để thu được những kiến thức này, về cơ bản người học phải có hiểu biết thấu đáo về các quá trình vật lí xảy ra trong vật liệu bán dẫn. Mục tiêu của sách hợp nhất cơ học lượng tử, lí thuyết lượng tử của vật rắn, vật lí vật liệu bán dẫn, và vật lí thiết bị bán dẫn lại với nhau. Tất cả những nội dung này là cần thiết để hiểu về hoạt động của các thiết bị bán dẫn trong hiện tại và những sự phát triển trong tương lai của chúng.

Lượng kiến thức vật lí được đưa vào trong tài liệu này nhiều hơn những cuốn sách giới thiệu về thiết bị bán dẫn khác. Mặc dù tầm bao quát của sách hơi rộng nhưng tác giả nhận thấy rằng một khi người đọc đã nắm vững kiến thức nền tảng và những kiến thức về vật liệu thấu đáo thì vật lí thiết bị bán dẫn sẽ được hiểu một cách nhanh chóng và dễ dàng. Sự nhấn mạnh những kiến thức vật lí cơ bản sẽ có lợi trong việc hiểu và thiết kế những thiết bị bán dẫn mới.

Bởi vì mục đích của tài liệu này là giới thiệu lí thuyết về thiết bị bán dẫn, nên có rất nhiều lí thuyết nâng cao đã bị bỏ qua. Thêm vào đó, những quá trình chế tạo không được mô tả chi tiết. Có vài thảo luận chung về kĩ thuật chế tạo chẳng hạn như khuếch tán và cấy Ion, nhưng ở đây cần nhớ rằng những kết quả của quá trình chế tạo này có tác động trực tiếp đến đặc tính của thiết bị.

ĐIỀU KIỆN TIÊN QUYẾT TRƯỚC KHI ĐỌC SÁCH

Sách này dành cho sinh viên năm III và năm IV. Điều kiện tiên quyết để hiểu tài liệu này là kiến thức toán học cao cấp, đặc biệt là phương trình vi phân (chỉ yêu cầu đã học sơ qua để biết tra cứu dạng nghiệm của mỗi loại phương trình); vật lí đại cương, đặc biệt là tĩnh điện học; và các môn vật lí hiện đại, đặc biệt là cơ học lượng tử (Chỉ yêu cầu người học biết sơ lược về cơ học lượng tử vì trong tài liệu cũng nhắc lại những kiến thức cơ học lượng tử cần thiết). Nếu người đọc đã học qua khóa học nhập môn về mạch điện tử thì sẽ rất hữu dụng nhưng nó cũng không cần thiết ở đây.

CÁCH SẮP XẾP TRONG SÁCH

Sách bắt đầu từ giới thiệu kiến thức vật lí đến quá trình vật lí trong vật liệu bán dẫn và sau đó đề cập đến vật lí thiết bị bán dẫn. Chương I giới thiệu cấu trúc tinh thể của chất rắn, hướng đến vật liệu bán dẫn đơn tinh thể lí tưởng. Chương 2 và 3 giới thiệu cơ học lượng tử và lí thuyết lượng tử của chất rắn, chúng là những kiến thức vật lí cơ bản.

Chương 4 đến chương 6 đề cập đến quá trình vật lí trong vật liệu bán dẫn. Chương 4 giới thiệu quá trình vật lí trong bán dẫn ở trạng thái cân bằng; chương 5 nói về hiện tượng vận chuyển hạt tải điện trong bán dẫn. Sau đó, đặc tính của hạt tải điện ngoại lai không cân bằng được xây dựng trong chương 6. Kiến thức về hành vi của hạt tải điện ngoại lai trong bán dẫn là cần thiết để hiểu về các quá trình vật lí trong thiết bị bán dẫn.

Vật lí thiết bị bán dẫn cơ bản được xây dựng từ chương 7 đến chương 13. Chương 7 đề cập đến các quá trình điện trong tiếp xúc p-n cơ bản. Tiếp xúc kim loại-bán dẫn, cả chỉnh lưu và không chỉnh lưu, và tiếp xúc dị thể bán dẫn cũng được khảo sát trong chương 9, trong khi đó chương 10 nói về transistor lưỡng cực. Transistor hiệu ứng trường kim loại-oxit-bán dẫn được giới thiệu trong chương 11 và 12, và chương 13 đề cập đến JFET. Khi đã học qua chương tiếp xúc p-n, người đọc có thể học bất cứ chương nào trong các chương nói về các loại transistor vì các chương này được xây dựng độc lập với nhau. Chương 14 khảo sát thiết bị quang học và cuối cùng chương 15 đề cập đến thiết bị bán dẫn dùng trong các mạch công suất.

Chú ý: Những phần được đánh dấu * có nghĩa là bạn có thể bỏ qua chúng mà vẫn có thể hiểu những phần sau.

Mục lục

Lời mở đầu

Chương 0: Bán dẫn và mạch tích hợp (IC)

Chương 1: Cấu trúc tinh thể của chất rắn

Chương 2: Giới thiệu cơ học lượng tử

Chương 3: Giới thiệu lí thuyết lượng tử của chất rắn

Chương 4: Bán dẫn ở trạng thái cân bằng

Chương 5: Hiện tượng vận chuyển hạt tải điện

Chương 6: Hạt tải điện ngoại lai không cân bằng trong bán dẫn

Chương 7: Tiếp xúc p-n

Chương 8: Diode tiếp xúc p-n

Chương 9: Kim loại-Bán dẫn và chuyển tiếp dị thể bán dẫn

Chương 10: Transistor lưỡng cực

Chương 11: Cơ bản về transistor hiệu ứng trường Bán dẫn-Oxit-Kim loại

Chương 12: Transistor hiệu ứng trường Bán dẫn-Oxit-Kim loại: Những khái niệm bổ sung

Chương 13: Transistor hiệu ứng trường

Chương 14: Thiết bị quang

Chương 15: Thiết bị bán dẫn công suất

Phục lục A Bảng kí tự quy ước

Phục lục B Hệ đơn vị, bảng chuyển đổi và những hằng số thông dụng

Phụ lục C Bảng tuần hoàn

Phụ lục D Hàm sai số

Phụ lục E Cách rút ra phương trình sóng Schrodinger

Phụ lục F Đơn vị năng lượng -Electron vôn

Phụ lục G Đáp số một số bài tập

PHẦN MỞ ĐẦU

Bán Dẫn Và Mạch Tích Hợp (IC)

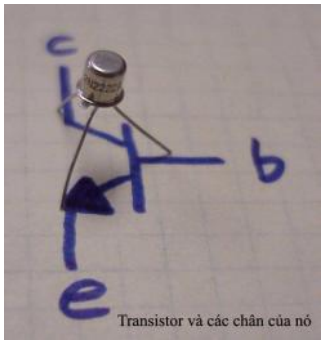
TỔNG QUAN

Chúng ta thường nghe mọi người nói rằng chúng ta đang sống trong thời đại thông tin. Một lượng lớn thông tin có thể thu được qua Internet và cũng có thể thu được một cách nhanh chóng qua những khoảng cách xa bằng những hệ thống truyền thông vệ tinh. Sự phát triển của transistor và IC đã dẫn đến những khả năng đáng kinh ngạc này. IC thâm nhập vào hầu hết mọi mặt của đời sống hàng ngày chẳng hạn như đầu đọc đĩa CD, máy Fax, máy Scan laser tại các siêu thị, và điện thoại di động. Một trong những ví dụ điển hình nhất của kĩ thuật mạch tích hợp là máy tính số – ngày nay một laptop tương đối nhỏ cũng có khả năng tính toán hơn một thiết bị được dùng để gửi con người lên mặt trăng cách đây vài năm. Lĩnh vực điện tử bán dẫn tiếp tục là một lĩnh vực có tốc độ phát triển nhanh, với hàng nghìn tài liệu nghiên cứu được xuất bản mỗi năm.

LỊCH SỬ

Thiết bị bán dẫn có một lịch sử phát triển khá dài nhưng sự bùng nổ của kĩ thuật mạch tích hợp chỉ mới xuất hiện trong hai hoặc ba thập niên gần đây. Tiếp xúc kim loại–bán dẫn bắt nguồn từ những công trình trước đây của Braun vào năm 1874. Ông đã phát minh ra bản chất bất đối xứng của độ dẫn điện giữa tiếp xúc kim loại và bán dẫn. Những thiết bị này được dùng như detector trong những thí nghiệm trên radio trước đây. Vào năm 1906, Pickard đã đưa ra phát minh về detector tiếp xúc điểm dùng silic và, năm 1907, Pierce đã công bố nghiên cứu về đặc tính chỉnh lưu của diode được chế tạo bằng cách phun kim loại trên những loại bán dẫn khác nhau.

Năm 1935, bộ chỉnh lưu selen và diode tiếp xúc điểm silic đã được dùng làm bộ phát hiện tỉ số. Với sự phát triển của Radar, nhu cầu về những diode tách sóng và bộ trộn sóng tăng lên. Những phương pháp tạo ra Silic và Gemani pha tạp cao cũng được phát triển trong suốt thời gian này. Bước tiến trong hiểu biết về tiếp xúc kim loại–bán dẫn được hỗ trợ bởi sự phát triển trong vật lí bán dẫn. Có lẽ sự kiện quan trọng nhất trong thời kì này là lí thuyết về sự phát xạ nhiệt của Bethe vào năm 1942, theo lí



Transistor và các chân của nó

thuyết này dòng điện được xác định bởi quá trình phát electron trong kim loại chứ không phải qua sự trôi giạt hoặc khuếch tán. Một bước đột phá khác diễn ra vào năm 1947 khi transistor đầu tiên được chế tạo và được kiểm tra tại phòng thí nghiệm Bell bởi William Shockley, John Bardeen, và Walter Brattain. Transisto r đầu tiên này là một thiết bị tiếp xúc điểm và dùng Germani đa tinh thể. Hiệu ứng transistor cũng sớm được chứng minh trong silic. Một sự cải tiến có ý nghĩa khác xuất hiện vào cuối những năm 1949 khi vật liệu đơn tinh thể được dùng thay cho vật liệu đa tinh thể. Đơn tinh thể đã đạt được sự đồng đều và một số tính chất được cải tiến so với những vật liệu bán dẫn khác.

Bước tiến tiếp theo trong sự phát triển của transistor là sử dụng quá trình khuếch tán để hình thành nên những tiếp xúc cần thiết. Quá trình này cho phép điều khiển tốt hơn tính chất của transistor và đã thu được những thiết bị có thể hoạt động ở tần số cao. Transistor mô đỉnh bằng được chế tạo bằng phương pháp khuếch tán được thương mại hóa vào năm 1957 (loại Germani) và năm 1958 (loại Silic). Quá trình khuếch tán cũng cho phép nhiều transistor được chế tạo trên một lớp silic đơn tinh thể mỏng, vì vậy giá thành của những thiết bị này giảm xuống.

MẠCH TÍCH HỢP (IC)

IC định thời 555

Đến lúc này, những thành phần trong mạch điện tử vẫn phải được kết nối với nhau bằng những dây riêng biệt. Tháng 11 năm 1958, Jack Kilby thuộc công ti Texas Instruments đã chế tạo IC đầu tiên bằng Germany. Cũng trong khoảng thời gian đó, Robert Noyce thuộc công ti Fairchild Semiconductor cũng đã chế tạo thành công IC bằng silic dùng công nghệ planar. Mạch đầu tiên đã sử dụng transistor lưỡng cực. Sau đó, những transistor MOS được chế tạo vào giữa những năm 60. Công nghệ MOS, đặc biệt là CMOS đã trở thành tiêu điểm lớn cho việc thiết kế và chế tạo IC. Silic là vật liệu bán dẫn chính được sử dụng trong chế tạo IC. GaAs và những bán dẫn hợp chất khác được dùng trong những ứng dụng đặc biệt đòi hỏi tần số cao và những thiết bị phát quang.

Kể từ IC đầu tiên đó, việc thiết kế mạch đã trở nên tinh vi hơn, và mạch tích hợp ngày càng phức tạp hơn. Chip silic đơn tinh thể cỡ 1 cm^2 đã chứa hơn một

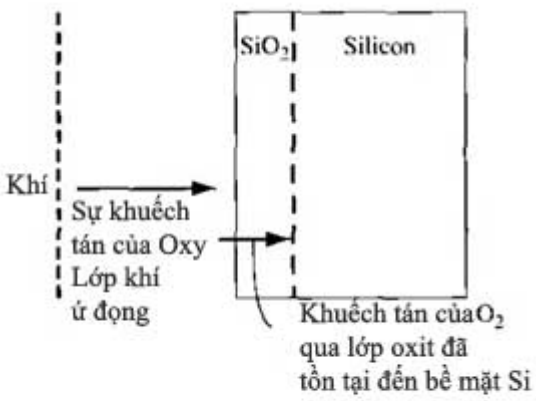
triệu transistor. Một số IC có thể có hơn hàng trăm chân, trong khi mỗi transistor chỉ có 3 chân. Một IC có thể chứa những hàm đại số, logic, và nhớ trong một chip bán dẫn đơn tinh thể–ví dụ về loại IC này là vi xử lí. Những nghiên cứu về quá trình chế tạo silic cùng với sự tăng tính tự động hóa trong thiết kế và chế tạo đã dẫn đến giá thành thấp hơn và sản lượng cao hơn.

CHẾ TẠO

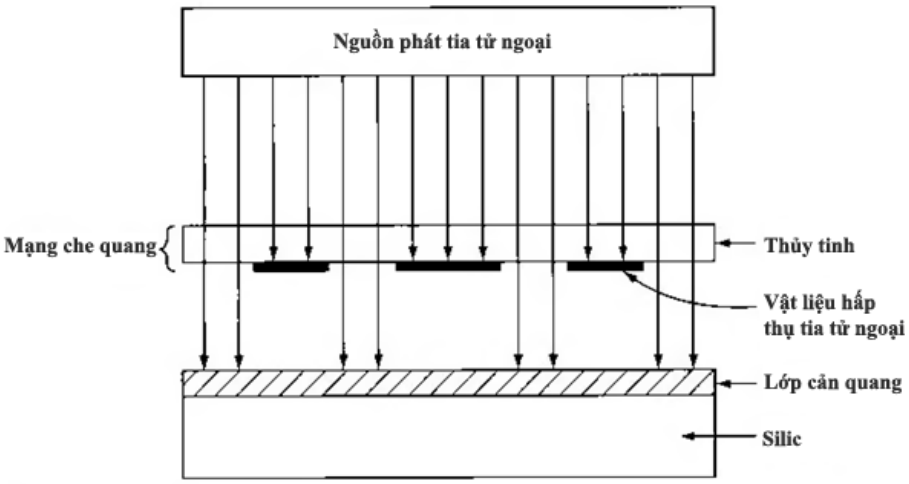
Mạch tích hợp là kết quả trực tiếp của việc phát triển những kĩ thuật chế tạo transistor và những dây liên kết trong chip đơn. Sau đây chúng ta sẽ mô tả một vài quá trình này. Phần giới thiệu này nhằm mục đích cung cấp cho người đọc một số thuật ngữ cơ bản trong chế tạo.

Oxi hóa nhiệt Sự thành công của những IC được chế tạo từ tinh thể sillic là nhờ một loại oxit thiên nhiên tuyệt vời, SiO_2, được hình thành trên bề mặt silic. Oxit này được dùng như cổng cách li trong MOSFET và cũng được dùng như chất cách điện giữa các thiết bị và được gọi là oxit trường. Những dây liên kết bằng kim loại kết nối những thiết bị khác nhau có thể được đặt trên đỉnh của oxit trường. Hầu hết các chất bán dẫn khác không hình thành đủ oxit tự nhiên để dùng trong việc chế tạo thiết bị.

Silic sẽ bị oxi hóa ở nhiệt độ phòng trong không khí hình thành nên oxit tự nhiên mỏng có độ dày khoảng 25 A^0. Tuy nhiên, đa số sự oxi hóa được thực hiện tại nhiệt độ cao bởi vì quá trình cơ bản đòi hỏi oxi khuếch tán qua oxit đang tồn tại đến bề mặt silic để tương tác có thể xảy ra. Sơ đồ của quá trình oxi hóa được biểu diễn trong hình 0.1. Oxi khuếch tán trực tiếp qua lớp khí ứ đọng kế với bề mặt oxit và sau đó khuếch tán qua lớp oxit đang tồn tại đến bề mặc silic, ở đó O_2 tương tác với Si hình thành nên SiO_2. Bởi vì tương tác này, silic bị phá hủy tại bề mặt của nó. Lượng silic bị phá hủy gần bằng 44% độ dày của oxit sau cùng.



Hình 0.1| Sơ đồ quá trình oxi hóa



Hình 0.2| Sơ đồ biểu diễn việc dùng mạng che quang

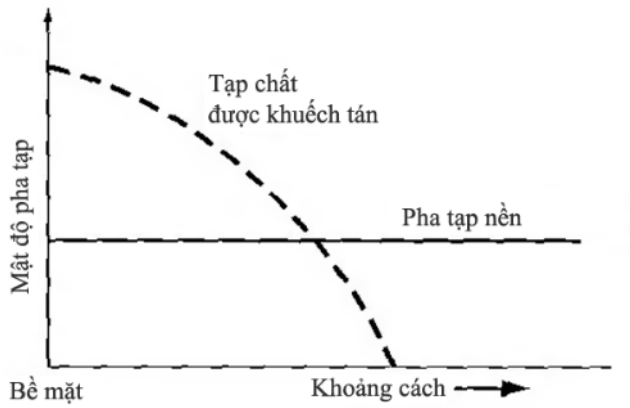
Mạng che quang và quang khắc Mạch trên mỗi chip được tạo ra bằng cách dùng mạng che quang và quang khắc. Mạng che quang là sự biểu diễn về mặt vật lí của một thiết bị hoặc một phần của thiết bị. Vùng đục trên mạng được tạo bởi vật liệu hấp thụ tia tử ngoại. Đầu tiên, một lớp nhạy quang được gọi là lớp cản quang được phủ trên bề mặt của bán dẫn. Lớp cản quang là một polime hữu cơ thực hiện những biến đổi hóa học khi tiếp xúc với ánh sáng tử ngoại. Lớp cản quang tiếp xúc với ánh sáng tử ngoại qua mạng che quang như được chỉ ra trong hình 0.2. Sau đó, lớp cản quang được phát triển trong một dung dịch hóa học. Thuốc hiện ảnh được dùng để di chuyển những phần không mong muốn của lớp cản quang và tạo ra một hình dạng thích hợp trên silic. Mạng che quang và quá trình quang khắc là yếu tố then chốt để xác định xem thiết bị chế tạo ra có thể nhỏ như thế nào. Thay vì dùng ánh sáng tử ngoại, electron và tia X cũng có thể được dùng để bốc lớp cản quang ra.

Ăn mòn Sau khi hình dạng của lớp cản quang được hình thành, lớp cản quang còn lại có thể được dùng như một mặt nạ, vì thế vật liệu không bị phủ bởi lớp cản quang sẽ bị ăn mòn. Hiện nay, ăn mòn Plasma là một quá trình tiêu chuẩn được dùng trong chế tạo IC. Thông thường, một chất khí ăn mòn chẳng hạn như khí CFC (CloFlocarbon) được bơm vào một buồng áp suất thấp. Plasma được tạo ra bằng cách đặt một điện áp tần số radio giữa catot và anot. Miếng silic được đặt ở catot. Những ion mang điện dương trong Plasma được gia tốc hướng về Catot và bắn phá miếng bán dẫn theo hướng vuông góc với bề mặt. Tương tác vật lí và hóa học thực sự tại bề mặt rất phức tạp nhưng kết quả cuối cùng là silic có thể bị ăn mòn dị hướng trong những vùng được chọn lọc của miếng bán dẫn. Nếu lớp cản

quang được đặt vào bề mặt của silic đioxit thì silic đioxit cũng có thể bị ăn mòn theo cách tương tự.

Khuếch tán

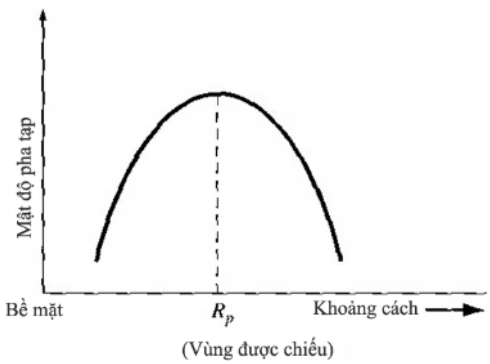
Quá trình nhiệt được dùng rộng rãi trong chế tạo IC là khuếch tán. Khuếch tán là một quá trình mà qua đó những loại nguyên tử tạp chất đặc biệt có thể được đưa vào trong vật liệu silic. Quá trình pha tạp này làm thay đổi tính chất điện của silic và hình thành nên tiếp xúc pn. (Tiếp xúc pn là thành phần cơ bản của thiết bị bán dẫn.) Miếng silic bị oxi hóa để hình thành đioxit silic và những cửa sổ nhỏ được mở trong oxit trong những vùng được chọn lựa dùng kĩ thuật quang khắc và ăn mòn như vừa được mô tả ở trên.



Hình 0.3| Mật độ tạp chất sau cùng được khuếch tán vào bề mặt của bán dẫn

Sau đó miếng bán dẫn được đặt trong lò nhiệt độ cao (khoảng 1100^0C) và những nguyên tử pha tạp chẳng hạn như Bo hoặc Photpho được đưa vào. Những nguyên tử pha tạp dần dần khuếch tán và di chuyển vào trong silic do gradient mật độ. Bởi vì quá trình khuếch tán đòi hỏi gradient trong mật độ nguyên tử, mật độ sau cùng của những nguyên tử khuếch tán là phi tuyến như được biểu diễn trong hình 0.3. Khi miếng bán dẫn được lấy ra khỏi lò và nhiệt độ của miếng bán dẫn trở lại nhiệt độ phòng, hệ số khuếch tán của những nguyên tử pha tạp về cơ bản bằng 0 vì thế những nguyên tử pha tạp định xứ trong vật liệu silic.

Cấy Ion Đây là quá trình thay thế cho quá trình khuếch tán nhiệt độ cao. Một chùm những ion pha tạp được gia tốc ở năng lượng cao và đến bề mặt bán dẫn. Khi những ion đi vào silic, chúng va chạm với những nguyên tử silic, đánh mất năng lượng và cuối cùng dừng lại tại một độ sâu nào đó trong tinh thể. Bởi vì quá trình va chạm về bản chất là thống kê, do đó có một sự phân bố độ sâu thâm nhập của những ion pha



Hình 0.4 | Mật độ cấy Ion Bo vào Silic

tạp. Hình 0.4 biểu diễn ví dụ về quá trình cấy Bo vào silic tại một năng lượng nào đó.

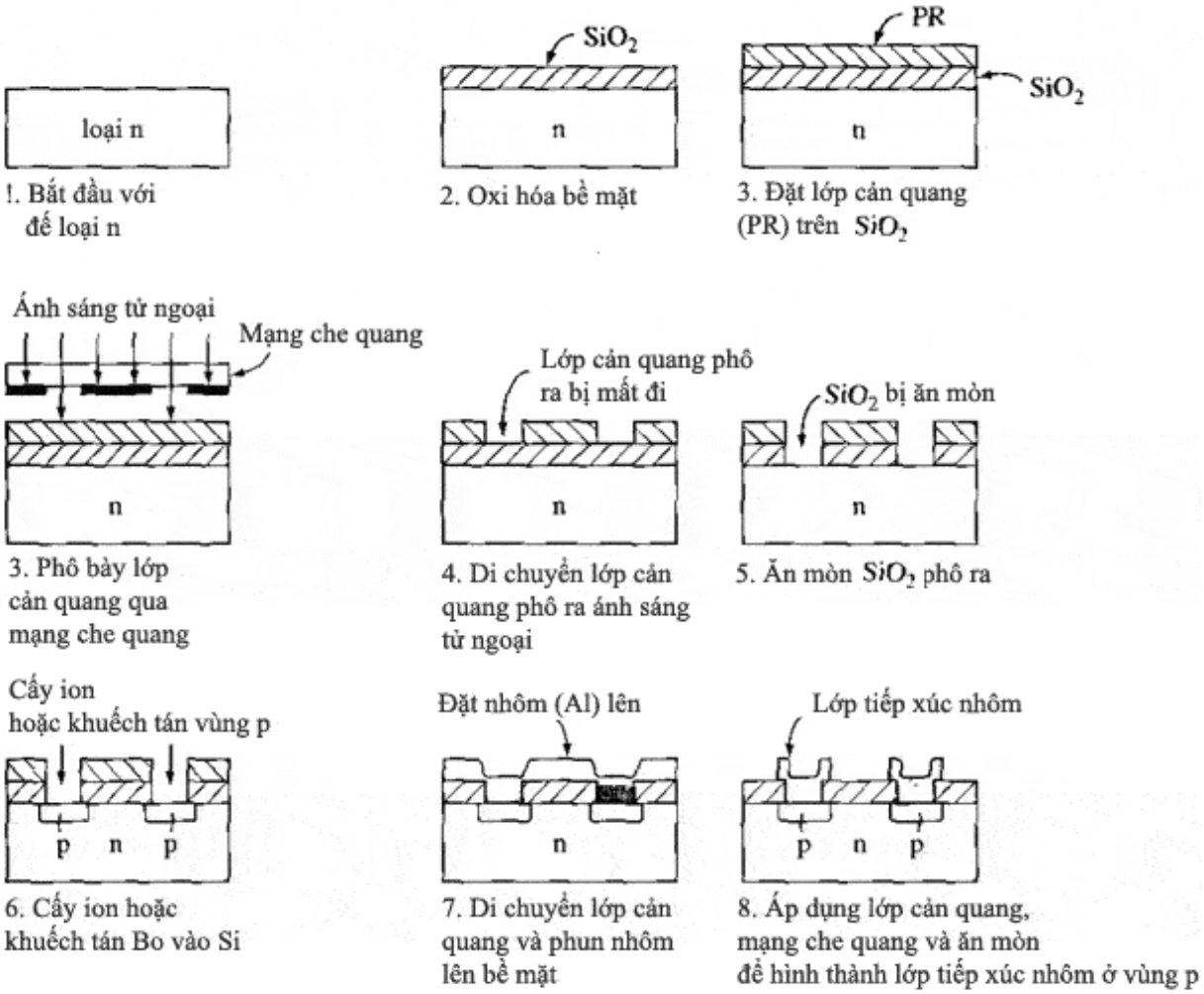
Hai ưu điểm của quá trình cấy ion so với quá trình khuếch tán là: (1) quá trình cấy ion là một quá trình nhiệt độ thấp và (2) những lớp tạp chất được cố định rất tốt. Lớp cản quang và lớp oxit có thể được dùng để ngăn cản sự thâm nhập của những nguyên tử tạp chất để cho quá trình cấy Ion có thể xuất hiện trong những vùng rất được chọn lựa của silic.

Một nhược điểm của cấy ion là tinh thể silic có thể bị hỏng bởi sự thâm nhập của những nguyên tử tạp chất dẫn đến sự va chạm của những nguyên tử tạp chất tới và những nguyên tử silic chủ. Tuy nhiên, đa số sự hư hỏng có thể được loại bỏ bằng cách luyện silic ở nhiệt độ cao. Nhiệt độ luyện thường rất thấp hơn nhiệt độ của quá trình khuếch tán.

Mạ kim loại, liên kết, và đóng gói Sau khi thiết bị bán dẫn đã được chế tạo bằng những quy trình như đã được thảo luận. Chúng cần được kết nối với nhau để hình thành nên mạch. Thường màn kim loại được kết tủa bởi kĩ thuật kết tủa chân không và những dây liên kết được hình thành dùng quang khắc và ăn mòn. Nói chung, lớp bảo vệ nitric silic cuối cùng được kết tủa trên toàn bộ chip.

Những chip IC riêng biệt được tách ra bằng cách vạch và bẽ gãy miếng bán dẫn. Sau đó chip IC được đưa vào trong gói. Cuối cùng, những gạch liên kết bằng chì được dùng để gắn những dây bằng nhôm hoặc vàng giữa chip và các chân trên gói.

Tóm tắt: Quá trình chế tạo tiếp xúc pn được đơn giản hóa. Hình 0.5 này biểu diễn những bước cơ bản trong sự hình thành tiếp xúc pn. Những bước này bao gồm một vài quá trình được mô tả trong đoạn trước.



Hình 0.5| Các bước cơ bản trong quá trình hình thành tiếp xúc pn

- Xem video mô tả các công đoạn chế tạo chip bằng kĩ thuật quang khắc [photolithography] tại: http://www.youtube.com/watch?v=zFnJQjcnhGQ
- Xem video mô tả các công đoạn chế tạo thiết bị NMOS bằng kĩ thuật quang khắc: http://www.youtube.com/watch?v=725rVHro6uM

CHƯƠNG I: CẤU TRÚC TINH THỂ CỦA CHẤT RẮN

TỔNG QUAN

Tài liệu này nghiên cứu tính chất và đặc tính điện của vật liệu và thiết bị bán dẫn. Mà bán dẫn lại là chất rắn. Do đó tính chất điện của chất rắn được quan tâm hàng đầu. Bán dẫn nói chung là vật liệu đơn tinh thể. Tính chất điện của vật liệu đơn tinh thể không chỉ phụ thuộc vào thành phần hóa học mà còn phụ thuộc vào sự sắp xếp của các nguyên tử trong chất rắn; do đó, cần có một sự tìm hiểu ngắn gọn về cấu trúc tinh thể của chất rắn. Sự hình thành hoặc phát triển của vật liệu đơn tinh thể là một phần quan trọng của kĩ thuật bán dẫn. Một thảo luận ngắn về một vài kĩ thuật nuôi tinh thể được đưa vào trong chương này để cung cấp cho người đọc một số thuật ngữ mô tả cấu trúc thiết bị bán dẫn. Chương nhập môn này cung cấp những kiến thức nền tảng về vật liệu đơn tinh thể và sự hình thành của tinh thể để cho người đọc có thể hiểu về tính chất điện của vật liệu và thiết bị bán dẫn.

1.1| VẬT LIỆU BÁN DẪN

Bán dẫn là một nhóm vật liệu có tính dẫn điện nằm trung gian giữa kim loại và chất cách điện. Hai loại bán dẫn chung nhất là vật liệu bán dẫn cơ bản nằm ở nhóm IV của bảng tuần hoàn, và vật liệu bán dẫn hợp chất, đa số chúng được hình thành do sự kết hợp đặc biệt của những nguyên tố nhóm III và nhóm V. Bảng 1.1 biểu diễn một phần của bảng tuần hoàn trong đó có những bán dẫn phổ biến và bảng 1.2 liệt kê một vài vật liệu bán dẫn. (Bán dẫn cũng có thể được hình thành từ sự kết hợp của những nguyên tố nhóm II và VI, nhưng nói chung những vật liệu này không được xét trong tài liệu này.)

Bảng 1.2| Bảng liệt kê vài chất bán dẫn

Bán dẫn cơ bản	
Si	Silic
Ge	Germani
Bán dẫn hợp chất	
AlP	Aluminum phosphide
AlAs	Aluminum arsenide
GaP	Gallium phosphide
GaAs	Gallium arsenide
InP	Indium phosphide

Bảng 1.1| Một phần của bảng tuần hoàn

III	IV	V
B	C	
Al	Si	P
Ga	Ge	As
In		Sb

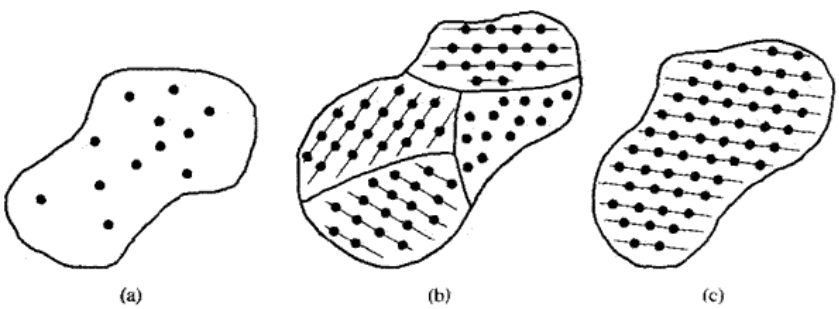
Những bán dẫn cơ bản là những bán dẫn mà trong thành phần cấu trúc của nó chỉ có một loại nguyên tử là silic hoặc germany. Hiện nay silic là bán dẫn phổ biến nhất được dùng trong mạch tích hợp và sẽ được nhắc đến thường xuyên trong tài liệu này.

Những hợp chất hai nguyên tố chẳng hạn như GaAs hoặc GaP được hình thành bằng sự kết hợp của những nguyên tố nhóm III và V. GaAs là một trong những bán dẫn hợp chất phổ biến hơn cả. Tính chất quang học tốt của nó làm cho nó hữu dụng trong những thiết bị quang học. GaAs cũng được dùng trong những ứng dụng đặc biệt chẳng hạn như những ứng dụng đòi hỏi vận tốc cao.

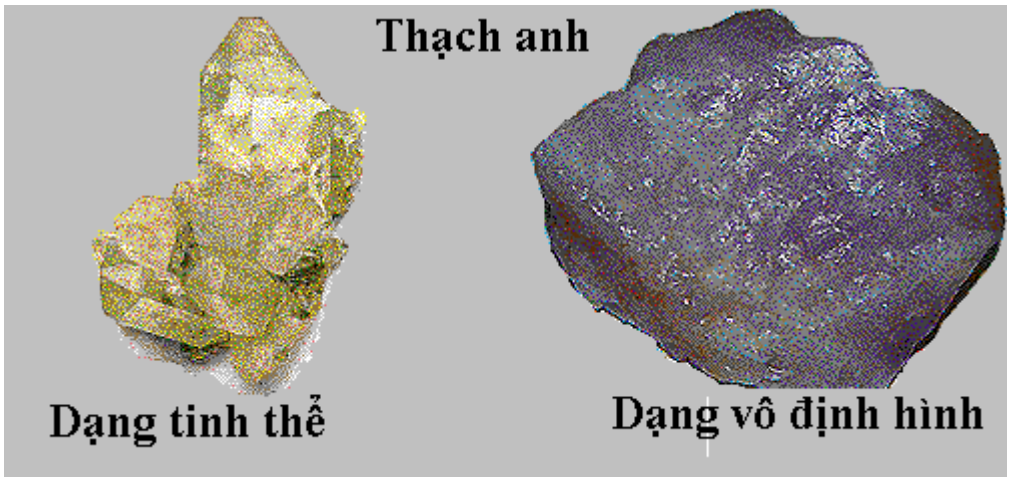
Bên cạnh đó cũng có những bán dẫn hợp chất 3 nguyên tố. Một ví dụ là $Al_xGa_{1-x}As$, trong đó chỉ số dưới x chỉ định phần của nguyên tố có số nguyên tử nhỏ hơn. Những chất bán dẫn phức tạp hơn cũng có thể được hình thành cung cấp sự đa dạng khi chọn tính chất vật liệu.

1.2|PHÂN LOẠI CHẤT RẮN

Ba dạng tồn tại của chất rắn là vô định hình, đa tinh thể, và đơn tinh thể. Mỗi loại được đặc trưng bởi kích thước của vùng có trật tự trong vật liệu. Một vùng có trật tự là vùng trong thể tích không gian ở đó những nguyên tử hoặc những phân tử có sự sắp xếp hình học đều đặn hoặc tuần hoàn. Vật liệu vô định hình có trật tự chỉ trong một vài hướng nguyên tử hoặc phân tử , trong khi vật liệu đa tinh thể có mức độ trật tự cao hơn trên nhiều hướng nguyên tử hoặc phân tử. Những vùng có trật tự này, hoặc những vùng đơn tinh thể thay đổi kích thước và sự định hướng đối với những vùng khác. Vùng đơn tinh thể được gọi là lớp và được chia tách với những lớp khác bởi biên lớp. Một cách lí tưởng có thể xem vật liệu đơn tinh thể có mức độ trật tự cao, hoặc sự tuần hoàn hình học đều đặn trong toàn bộ thể tích của vật liệu.



Hình 1.1| Ba loại chất rắn: (a) vô định hình, (b) đa tinh thể, (c) đơn tinh thể



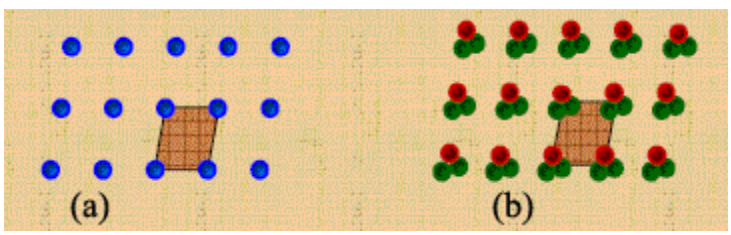
Nói chung, sự thuận lợi của vật liệu đơn tinh thể là ở chỗ tính chất điện của nó tốt hơn những vật liệu không phải đơn tinh thể, bởi vì biên lớp có khuynh hướng làm giảm đặc tính điện. Biểu diễn hai chiều của vật liệu vô định hình, đa tinh thể, và vật liệu đơn tinh thể được trình bày trong hình 1.1.

1.3|MẠNG KHÔNG GIAN

Chúng ta sẽ khảo sát đơn tinh thể với sự tuần hoàn hình học đều đặn trong sự sắp xếp nguyên tử của nó. Một đơn vị đại diện, hoặc nhóm các nguyên tử được lặp lại sau những khoảng đều đặn ở mỗi chiều để hình thành đơn tinh thể. Sự sắp xếp tuần hoàn của những nguyên tử trong tinh thể được gọi là mạng.

1.3.1 Ô đơn vị và ô đơn vị tối giản

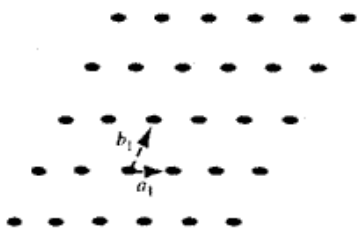
Chúng ta có thể biểu diễn một nguyên tử (a) hoặc nhóm các nguyên tử (b) nào đó bằng một chấm được gọi là điểm mạng. Ví dụ: trong tinh thể Silic, mỗi điểm mạng của nó là một nguyên tử silic; còn trong tinh thể nước đá, mỗi điểm mạng của nó là phân tử nước.



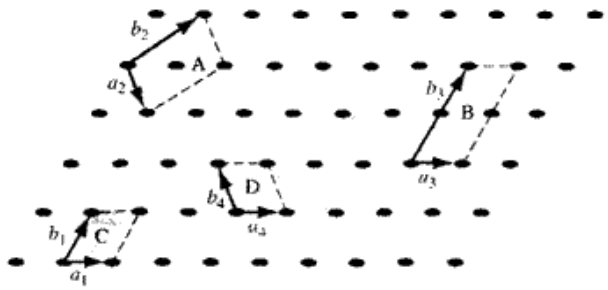
Hình 1.2 biểu diễn mạng hai chiều vô hạn bao gồm những điểm mạng. Cách đơn giản nhất để lặp lại các nguyên tử hoặc nhóm nguyên tử là tịnh tiến. Mỗi điểm mạng trong hình 1.2 có thể được tịnh tiến một khoảng cách na_1 theo một chiều và

khoảng cách mb_1 theo chiều thứ 2 để tạo ra mạng 2 chiều (n, m là các số nguyên). Sự tịnh tiến theo chiều thứ 3 sẽ tạo ra mạng 3 chiều. Những hướng tịnh tiến không cần vuông góc nhau.

Nhìn vào hình 1.3, chúng ta thấy rằng chỉ cần lặp lại một trong các hình bình hành A, B, C, D thì sẽ tạo ra được toàn bộ mạng tinh thể. Các hình bình hành này gọi là các ô đơn vị. Ô đơn vị A có thể được tịnh tiến theo hướng a_2 và b_2, ô đơn vị B có thể được tịnh tiến theo hướng a_3 và b_3, và toàn bộ mạng 2 chiều có thể được xây dựng bằng cách tịnh tiến cả 2 loại ô đơn vị này. Những ô đơn vị C và D trong hình 1.3 cũng có thể được dùng để xây dựng toàn bộ mạng bằng cách dùng những phép tịnh tiến thích hợp. Vậy chúng ta có thể định nghĩa ô đơn vị là một thể tích nhỏ của tinh thể có thể được dùng để tạo ra toàn tinh thể. Ô đơn vị không phải là duy nhất. Những kết quả của việc khảo sát mạng 2 chiều có thể dễ dàng được mở rộng cho trường hợp 3 chiều để mô tả vật liệu đơn tinh thể thực.



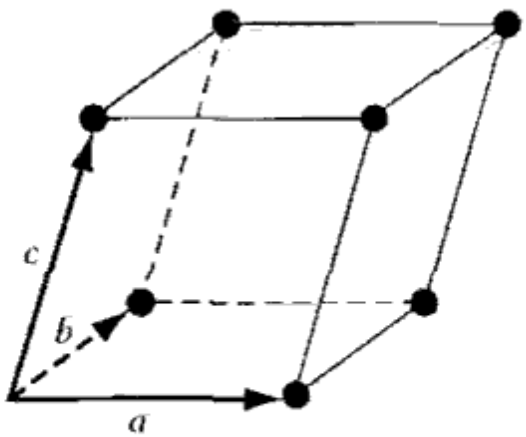
Hình 1.2| Biểu diễn hai chiều của mạng đơn tinh thể



Hình 1.3| Biểu diễn hai chiều của mạng đơn thể trong dó có chỉ ra những ô đơn vị

Ô đơn vị tối giản là ô đơn vị nhỏ nhất mà có thể được lặp lại để hình thành mạng. Trong nhiều trường hợp, sẽ thuận lợi hơn nếu dùng ô đơn vị chứ không phải ô đơn vị tối giản. Ô đơn vị được chọn có những mặt bên vuông góc trong khi những mặt bên của ô đơn vị tối giản có thể không vuông góc.

Một loại ô đơn vị 3 chiều được biểu diễn trong hình 1.4. Mối quan hệ



Hình 1.4| Một loại ô đơn vị trong trường hợp 3 chiều

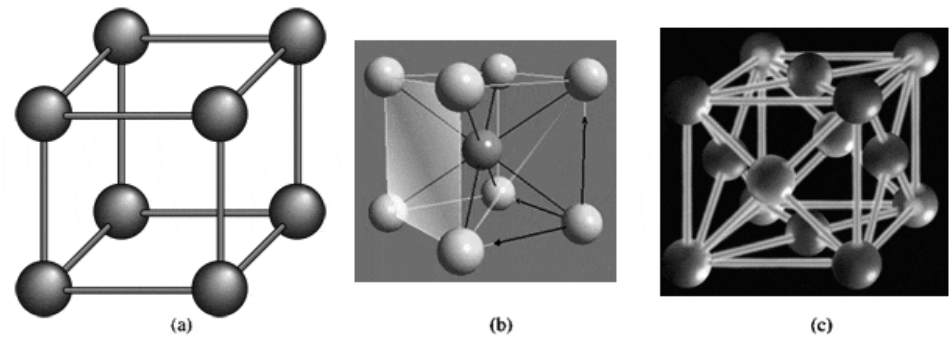
giữa ô này và mạng được đặc trưng bởi 3 vecto **a**, **b**, và **c.** Ba vecto này không cần thiết phải vuông góc nhau và có thể bằng nhau hoặc không bằng nhau về độ dài. Mỗi điểm mạng trong mạng 3 chiều có thể tìm được bằng cách dùng vecto:

$$\boldsymbol{r} = p\boldsymbol{a} + q\boldsymbol{b} + s\boldsymbol{c} \qquad (1.1)$$

ở đây *p*, *q* và *s* là những số nguyên. Bởi vì vị trí của gốc tọa độ là tùy ý, chúng ta sẽ đặt *p*, *q* và *s* là những số nguyên dương cho đơn giản.

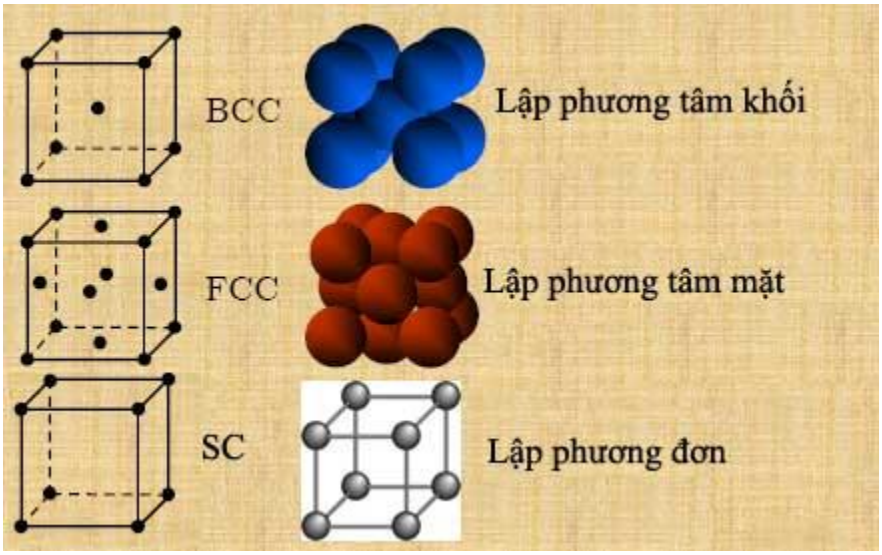
1.3.2 Cấu trúc mạng cơ bản

Trước khi thảo luận về tinh thể bán dẫn, chúng ta hãy xét 3 cấu trúc tinh thể và xác định một số tính chất cơ bản của những tinh thể này. Hình 1.5 biểu diễn cấu trúc lập phương đơn, lập phương tâm khối và lập phương tâm mặt. Đối với những cấu trúc đơn giản này, chúng ta có thể chọn những ô đơn vị sao cho những vecto **a**, **b**, và **c** vuông góc với nhau và có độ dài bằng nhau. Cấu trúc lập phương đơn (SC) có một nguyên tử đặt tại mỗi đỉnh; cấu trúc lập phương tâm khối (BCC) có thêm một nguyên tử đặt ở tâm của hình lập phương; và cấu trúc lập phương tâm mặt (FCC) có thêm những nguyên tử ở mỗi mặt.



Hình 1.5| Ba loại mạng: (a) Lập phương đơn. (b) Lập phương tâm khối, (c) Lập phương tâm mặt

Bằng cách tìm hiểu về cấu trúc tinh thể của vật liệu và hướng mạng của nó, chúng ta có thể xác định vài tính chất của tinh thể. Chẳng hạn, chúng ta có thể xác định mật độ thể tích của nguyên tử.

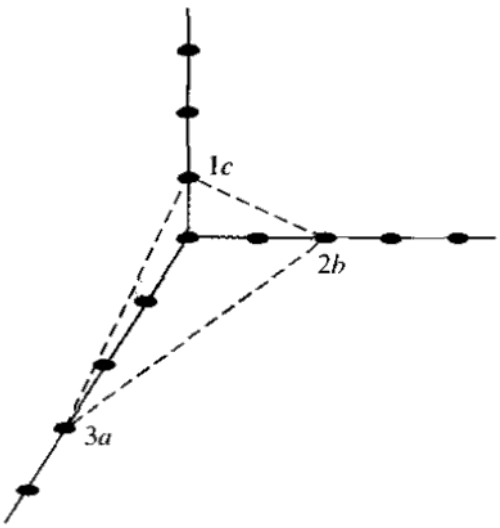


1.3.3 Mặt phẳng tinh thể và chỉ số Miller

Bởi vì tinh thể thực có kích thước không xác định, nghĩa là cuối cùng chúng kết thúc tại một bề mặt. Thiết bị bán dẫn được chế tạo ngay tại hoặc gần bề mặt vì vậy tính chất bề mặt có thể ảnh hưởng đến đặc tính thiết bị. Chúng ta muốn mô tả những bề mặt này theo mạng. Những bề mặt, hoặc mặt phẳng trong tinh thể có thể được mô tả bằng cách đầu tiên xem xét giao điểm của mặt phẳng dọc theo những trục ***a***, ***b***, và ***c*** được dùng để mô tả mạng.

*Ví dụ 1.2: Hãy mô tả mặt phẳng được biểu diễn trong hình 1.6. (trong hình 1.6 những điểm mạng chỉ được biểu diễn dọc theo ba trục **a**, **b**, **c**)*

Giải:



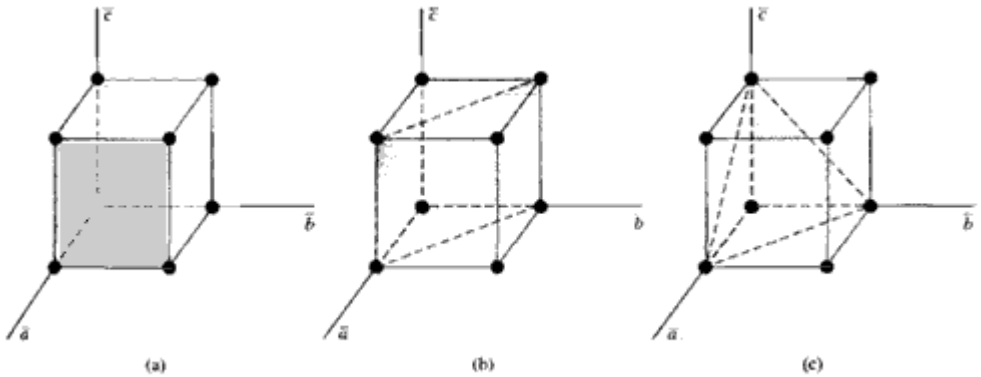
Hình 1.6| Mặt phẳng tinh thể đại diện

- *Giao điểm của mặt phẳng với ba trục a, b, c là p=3, q=2, v s=1.*
- *Lấy nghịch đảo, chúng ta có:(1/3; 1/2; 1/1)*
- *Quy đồng mẫu số của ba phân số này: (2/6; 3/6; 6/6)*
- *Những chữ số ở tử sẽ là những chỉ số biểu diễn mặt phẳng mạng, nghĩa là chúng ta có mặt phẳng*

(2,3,6). Những chữ số này cũng được gọi là chỉ số Miller.

- *Chúng ta sẽ gọi mặt phẳng trong trường hợp tổng quát là (hkl)*
- *Kết luận: Những mặt phẳng song song với mặt phẳng trong hình 1.6 sẽ có cùng chỉ số Miller là (2,3,6). Như vậy, các mặt phẳng song song nhau hoàn toàn tương đương nhau.*

Ba mặt phẳng thường được xét trong tinh thể lập phương được biểu diễn trong hình



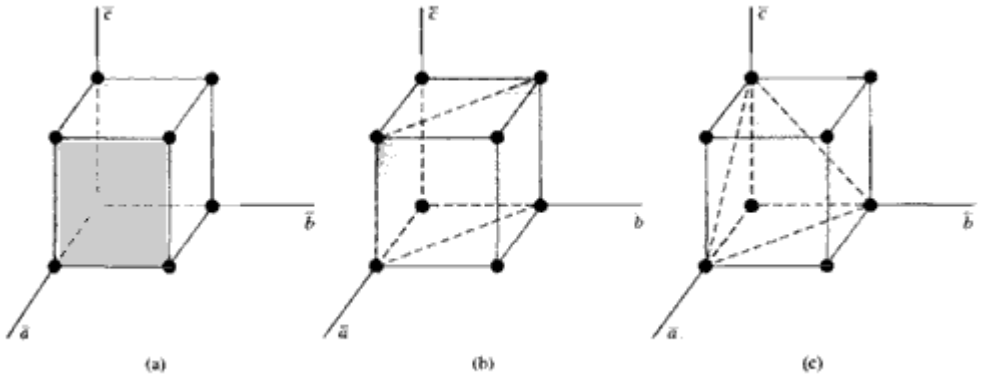
Hình 1.7| Ba mặt phẳng mạng: (a) mặt phẳng (100), (b) mặt phẳng (110), (c) mặt phẳng (111)

1.7. Mặt phẳng trong hình 1.7a song song với những trục b và c vì vậy giao điểm là $p=1$, $q=\infty$ và $s=\infty$. Lấy nghịch đảo, chúng ta thu được chỉ số Miller là (1, 0, 0), vì vậy mặt phẳng được biểu diễn trong hình 1.7a là mặt phẳng (100). Một lần nữa, bất kì mặt phẳng nào song song với mặt phẳng được biểu diễn trong hình 1.7a và được chia tách bằng một số nguyên lần hằng số mạng hoàn toàn tương đương nhau và được gọi là mặt phẳng (100). Một sự thuận lợi của việc lấy nghịch đảo giao điểm để thu được chỉ số Miller là tránh được việc sử dụng ∞ khi mô tả mặt phẳng song song với một trục. Tuy nhiên, nếu chúng ta mô tả mặt phẳng đi qua gốc tọa độ của hệ, chúng ta sẽ lại thu được một hoặc một số chỉ số Miller không xác định sau khi lấy nghịch đảo của giao điểm. Tuy nhiên, vị trí của gốc tọa độ của một hệ tọa độ là hoàn toàn tùy ý và vì vậy bằng phép tịnh tiến gốc tọa độ đến một điểm mạng tương đương khác, chúng ta sẽ tránh được dùng ∞ trong tập hợp những chỉ số Miller.

Đối với cấu trúc lập phương đơn, lập phương tâm khối và lập phương tâm mặt có một bậc đối xứng cao. Những trục có thể được quay 90^0 ở một trong 3 chiều và mỗi điểm mạng lại có thể được mô tả bởi phương trình (1.1):

$$\boldsymbol{r}=p\boldsymbol{a}+q\boldsymbol{b}+s\boldsymbol{c} \qquad (1.1)$$

Mỗi mặt của cấu trúc lập phương được biểu diễn trong hình 1.7a hoàn toàn tương



Hình 1.7| Ba mặt phẳng mạng: (a) mặt phẳng (100), (b) mặt phẳng (110), (c) mặt phẳng (111)

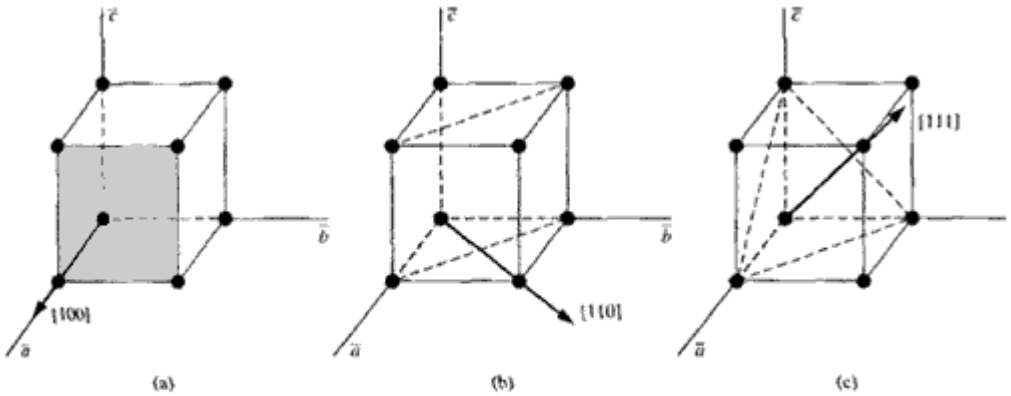
đương. Những mặt phẳng này được nhóm với nhau và được gọi là tập những mặt phẳng {100}.

Chúng ta tiếp tục xét những mặt phẳng được biểu diễn trong hình 1.7b và 1.7c. Giao điểm của mặt phẳng được biểu diễn trong hình 1.7b là $p=1$, $q=1$, và $s=\infty$. Chỉ số Miller được tìm bằng cách lấy nghịch đảo của những giao điểm này, và kết quả là, mặt phẳng này được gọi là mặt phẳng (110). Theo cách tương tự, mặt phẳng được biểu diễn trong hình 1.7c được gọi là mặt phẳng (111).

Một đặc tính khác của tinh thể cũng có thể được xác định là khoảng cách giữa những mặt phẳng tương đương gần nhất. Một đặc tính khác là mật độ bề mặt của nguyên tử, số nguyên tử trên cm^2 ($\#/cm^2$) bị cắt bởi một mặt phẳng nào đó. Cần nhớ rằng, bán dẫn đơn tinh thể có kích thước xác định và phải kết thúc tại một số bề mặt. Mật độ bề mặt của nguyên tử là quan trọng trong nhiều trường hợp, chẳng hạn trong việc xác định những vật liệu khác, như điện môi, sẽ khớp với bề mặt của vật liệu bán dẫn như thế nào.

Cùng với việc mô tả mặt phẳng tinh thể trong mạng, chúng ta còn muốn mô tả những hướng đặc biệt trong tinh thể. Hướng có thể được biểu diễn qua tập hợp 3 số nguyên là những thành phần tọa độ của một vecto theo hướng đó. Chẳng hạn, đường chéo của mạng lập phương đơn sẽ có tọa độ là 1,1,1. Do đó, đường chéo được mô tả theo hướng [111]. Dấu ngoặc vuông dùng để phân biệt với dấu ngoặc tròn (được dùng để chỉ mặt phẳng mạng). Ba hướng cơ bản và những mặt phẳng mạng có liên quan của cấu trúc lập phương đơn được biểu diễn trong hình 1.9. Chú

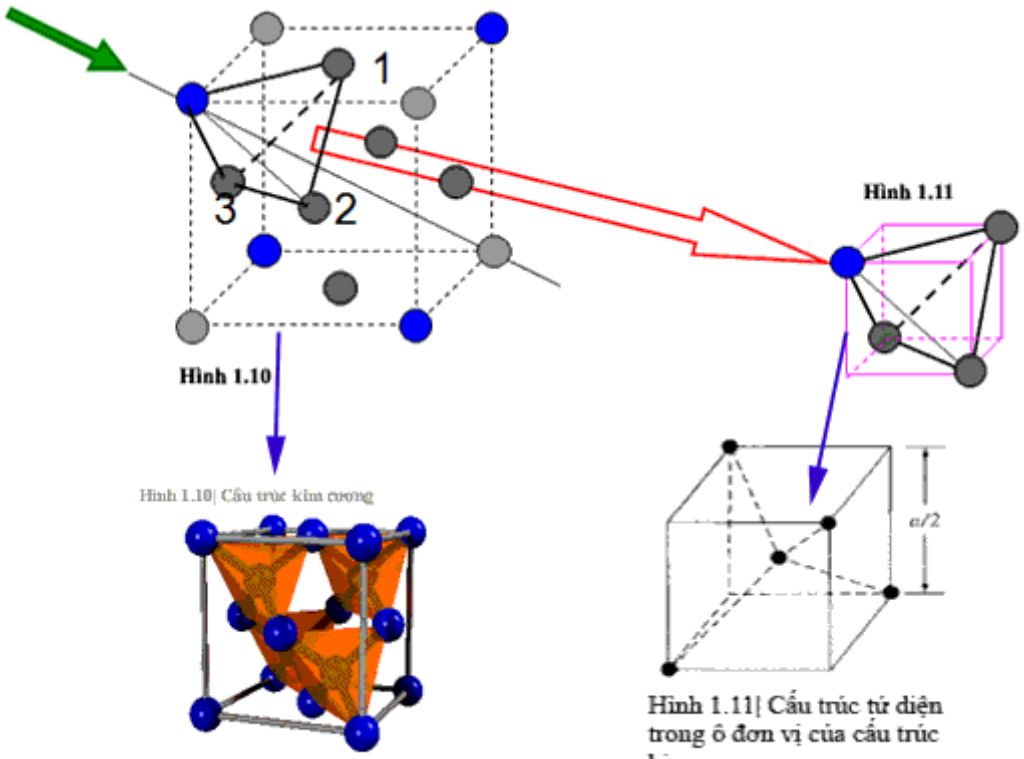
ý rằng trong mạng lập phương đơn, hướng [hkl] vuông góc với mặt phẳng (hkl). Tính chất này sẽ không còn đúng trong mạng không phải lập phương.



Hình 1.9| Ba hướng và mặt phẳng mạng: (a) mặt phẳng (100) và hướng [100], (b) mặt phẳng (110) và hướng [110], (c) mặt phẳng (111) và hướng [111]

1.3.4 Cấu trúc kim cương

Như đã từng nói, silic là một vật liệu bán dẫn phổ biến nhất. Silic là nguyên tố nhóm IV và có cấu trúc kim cương. Germany cũng là một nguyên tố nhóm IV và có cấu trúc giống kim cương. Ô đơn vị của kim cương được biểu diễn trong hình 1.10.



Hình 1.10| Cấu trúc kim cương

Hình 1.11| Cấu trúc tứ diện trong ô đơn vị của cấu trúc kim cương

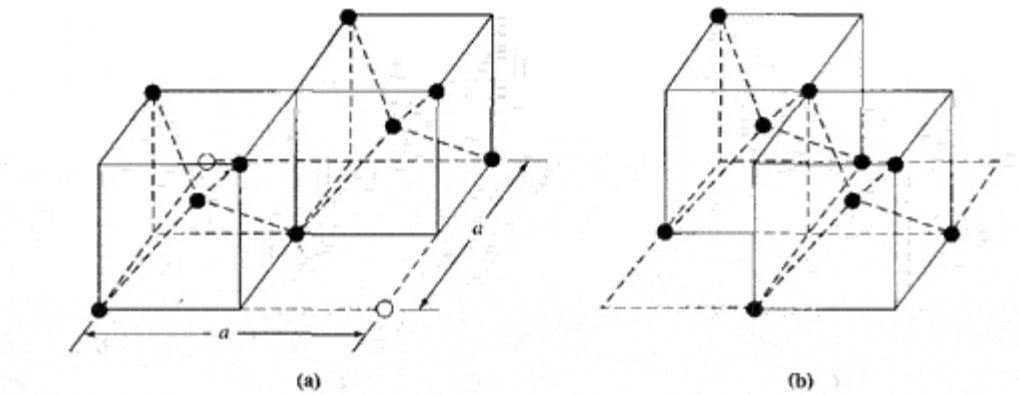
Chúng ta có thể bắt đầu hiểu mạng kim cương bằng cách xem xét cấu trúc tứ diện được biểu diễn trong hình 1.11. Về cơ bản cấu trúc này là lập phương tâm khối thiếu 4

nguyên tử ở các đỉnh.

Mỗi nguyên tử trong cấu trúc tứ diện có 4 nguyên tử lân cận gần nhất và cấu trúc này là thành phần cơ bản của mạng kim cương.

Có một vài cách để hình dung cấu trúc kim cương. Một cách để hiểu sâu hơn về cấu trúc kim cương là xét hình 1.12.

Hình 1.12a biểu diễn 2 cấu trúc lập phương tâm khối, hoặc tứ diện, những cấu trúc này kề chéo nhau. Những vòng tròn tô đen biểu diễn những nguyên tử trong mạng được tạo ra khi cấu trúc được tịnh tiến sang trái hoặc sang phải một hằng số mạng a.



Hình 1.12| Mạng kim cương (a) nửa dưới (b) nửa trên

Hình 1.12b biểu diễn nửa trên của cấu trúc kim cương. Nửa trên chứa 2 cấu trúc tứ diện được nối chéo nhau theo một đường vuông góc với đường chéo nửa dưới. Một tính chất quan trọng trong cấu trúc kim cương là bất kì nguyên tử nào trong cấu trúc kim cương cũng có 4 nguyên tử lân cận gần nhất. Chúng ta sẽ rút ra tính chất này một lần nữa khi nghiên cứu về liên kết nguyên tử trong phần tiếp theo.

1.4|LIÊN KẾT HÓA HỌC GIỮA CÁC NGUYÊN TỬ VÀ PHÂN TỬ TRONG TINH THỂ

Có một số phần trong sách này có kèm theo các video rất sinh động để giúp các bạn nhanh chóng nắm được ý tưởng của vấn đề. Vì các video có dung lượng lớn không thể gửi kèm theo tài liệu này, nên tác giả giới thiệu cho bạn đến trang www.mientayvn.com để xem. Hãy copy link đính kèm và dán vào thanh adress trên trình duyệt web của bạn. Sao đó, bạn sẽ tìm thấy các video. Nếu bạn không có

đường truyền Internet thì các bạn có thể xem các video này vào một dịp thuận lợi nào đó. Không sao cả vì nó là phần tham khảo [tùy chọn].

Các video trong phần này xin các bạn xem tại địa chỉ:

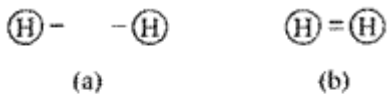
http://mientayvn.com/Dien%20tu/Sach/Vat%20li%20dien%20tu%20va%20ban%20dan/Chuong%20I/14.html

Chúng ta đang xem xét những cấu trúc đơn tinh thể khác nhau. Câu hỏi nảy sinh là tại sao một cấu trúc tinh thể nào đó lại thiên về một cách tổ hợp các nguyên tử theo cách riêng của nó. Một định luật cơ bản trong tự nhiên là năng lượng tổng trong một hệ ở trạng thái cân bằng nhiệt có khuynh hướng đạt đến giá trị cực tiểu. Tương tác xuất hiện giữa những nguyên tử để hình thành nên chất rắn nhằm đạt đến năng lượng toàn phần cực tiểu và tương tác này phụ thuộc vào từng loại nguyên tử. Do đó, loại liên kết hoặc tương tác giữa những nguyên tử phụ thuộc vào nguyên tử cụ thể hoặc những nguyên tử trong tinh thể. Nếu không có liên kết mạnh giữa những nguyên tử, chúng sẽ "không dính" với nhau để tạo nên chất rắn.

Tương tác giữa những nguyên tử có thể được mô tả theo cơ học lượng tử. Mặc dù những kiến thức về cơ học lượng tử được đưa vào trong chương sau nhưng sự mô tả các liên kết hóa học trong nguyên tử theo cơ học lượng tử vẫn nằm ngoài phạm vi nghiên cứu của tài liệu này. Tuy nhiên, chúng ta có thể thu được những kiến thức định tính về cách thức tương tác của những nguyên tử bằng cách xem xét những electron lớp ngoài cùng hay những electron hóa trị trong nguyên tử.

Những nguyên tử tại 2 biên của bảng tuần hoàn (ngoại trừ khí trơ) có khuynh hướng mất hoặc thu electron hóa trị để hình thành những Ion. Do đó, về cơ bản những ion này có lớp năng lượng ngoài cùng đầy hoàn toàn. Những nguyên tố ở nhóm I của bảng tuần hoàn có khuynh hướng mất một electron của chúng và trở thành ion mang điện dương, trong khi những nguyên tố ở nhóm VII của bảng tuần hoàn có khuynh hướng thu thêm một electron và trở thành ion mang điện âm. Những ion mang điện dương này sẽ tương tác Coulomb và hình thành liên kết được gọi là liên kết ion. Nếu những ion này đến gần nhau thì lực đẩy sẽ chiếm ưu thế vì vậy có một khoảng cách cân bằng giữa hai ion này. Trong tinh thể, những ion mang điện âm có khuynh hướng bị bao quanh bởi những ion mang điện dương và những ion mang điện dương có khuynh hướng bị bao quanh bởi những ion mang điện âm, vì vậy mạng tuần hoàn nguyên tử được hình thành để tạo nên mạng

tinh thể. Ví dụ điển hình của liên kết ion là NaCl. Video sau đây sẽ biểu diễn quá trình hình thành liên kết ion giữa nguyên tử Na và nguyên tử Clo.



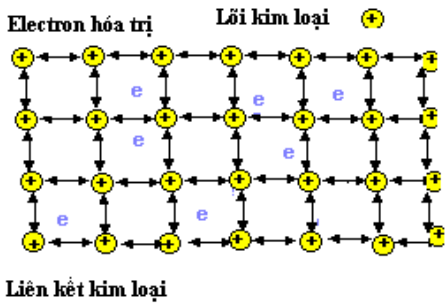
Hình 1.15| Biểu diễn (a) những electron hóa trị của nguyên tử hidro (b) liên kết cộng hóa trị trong phân tử hidro

Tương tác giữa những nguyên tử có khuynh hướng hình thành những lớp đầy hoàn toàn như chúng ta thấy trong liên kết ion. Một liên kết nguyên tử khác có khuynh hướng đạt đến những lớp đầy là liên kết cộng hóa trị, ví dụ như trong phân tử hidro. Nguyên tử hidro có một electron và cần một electron nữa để có thể lấp đầy lớp năng lượng thấp nhất. Sơ đồ của hai nguyên tử hidro không tương tác và phân tử hidro với liên kết cộng hóa trị được biểu diễn trong hình 1.15. Liên kết cộng hóa trị dẫn đến việc dùng chung electron giữa những nguyên tử, kết quả là lớp electron hóa trị của mỗi nguyên tử sẽ đầy. Video sau mô tả quá trình hình thành liên kết cộng hóa trị của phân tử hidro và phân tử nước (Hydrogen: nguyên tử hidro, hydrogen molecule: phân tử hidro, water molecule: phân tử nước).

Những nguyên tử nhóm IV của bảng tuần hoàn, ví dụ như Si và Ge cũng có khuynh hướng hình thành liên kết cộng hóa trị. Những nguyên tố này có 4 electron hóa trị và cần thêm 4 electron hóa trị để đạt đến cấu hình bền vững. Chẳng hạn, nếu một nguyên tử silic có 4 nguyên tử lân cận gần nhất, trong đó mỗi nguyên tử đóng góp một electron hóa trị để dùng chung thì nguyên tử ở giữa sẽ có 8 electron ở lớp ngoài cùng. Hình 1.16a biểu diễn năm nguyên tử silic không tương tác trong đó mỗi nguyên tử có 4 electron hóa trị. Hình 1.16b là biểu diễn hai chiều của liên kết cộng hóa trị trong silic.Nguyên tử ở trung tâm có 8 electron hóa trị.

Một sự khác nhau cơ bản giữa liên kết cộng hóa trị của hidro và của silic là khi phân tử hidro được hình thành, nó không có những electron được thêm vào để hình thành thêm những liên kết cộng hóa trị, trong khi những nguyên tử silic bên ngoài luôn luôn có sẵn những electron hóa trị để hình thành thêm những liên kết cộng hóa trị. Do đó, mạng những nguyên tử silic hình thành nên một tinh thể có kích thước không xác định, trong đó mỗi nguyên tử silic có 4 nguyên tử lân cận gần nhất và 8 electron được dùng chung. Bốn nguyên tử lân cận gần nhất hình thành nên liên kết cộng hóa trị tương ứng với cấu trúc tứ diện và mạng kim cương, nó lần lượt được biểu diễn trong hình 1.11 và 1.10. Tất nhiên, liên kết nguyên tử và cấu trúc tinh thể có liên hệ trực tiếp với nhau.

Loại liên kết nguyên tử thứ 3 là liên kết kim loại. Những nguyên tố nhóm I có một electron hóa trị. Chẳng hạn, nếu hai nguyên tử Natri (Z=11) được mang đến gần nhau, những electron hóa trị sẽ tương tác với nhau giống như trong liên kết cộng hóa trị. Khi nguyên tử Natri thứ 3 được mang đến gần hai nguyên tử đầu, những electron hóa trị cũng có thể tương tác và tiếp tục hình thành một liên kết. Natri ở thể rắn có cấu trúc lập phương tâm khối, vì vậy mỗi nguyên tử có 8 nguyên tử lân cận gần nhất trong đó mỗi nguyên tử góp vào một electron. Chúng ta có thể xem những ion dương kim loại được vây quanh bởi một biển các electron, chất rắn được giữ với nhau bởi lực tĩnh điện. Sự mô tả này cho ta một bức tranh định tính về liên kết kim loại.



Một loại liên kết nguyên tử thứ 4 là liên kết Van der Waal. Đây là liên kết yếu nhất trong các liên kết hóa học. Chẳng hạn, phân tử HF được hình thành bởi liên kết ion. Tâm hiệu dụng của những hạt mang điện dương không trùng với tâm hiệu dụng của những hạt mang điện âm. Sự bất đối xứng trong phân bố điện tích dẫn đến sự hình thành một lưỡng cực điện nhỏ có thể tương tác với những lưỡng cực của các phân tử HF khác. Bởi vì tương tác yếu, chất rắn được hình thành bởi liên kết Van der Waals có nhiệt độ nóng chảy tương đối thấp – quả thực hầu hết các vật liệu này tồn tại ở dạng khí trong điều kiện nhiệt độ phòng.

Xem video mô tả sự hình thành phân tử HF bằng liên kết Van der Waal.

1.5|KHUYẾT TẬT VÀ TẠP CHẤT TRONG CHẤT RẮN

Các video trong phần này xin xem tại:

http://mientayvn.com/Dien%20tu/Sach/Vat%20li%20dien%20tu%20va%20ban%20dan/Chuong%20I/15.html

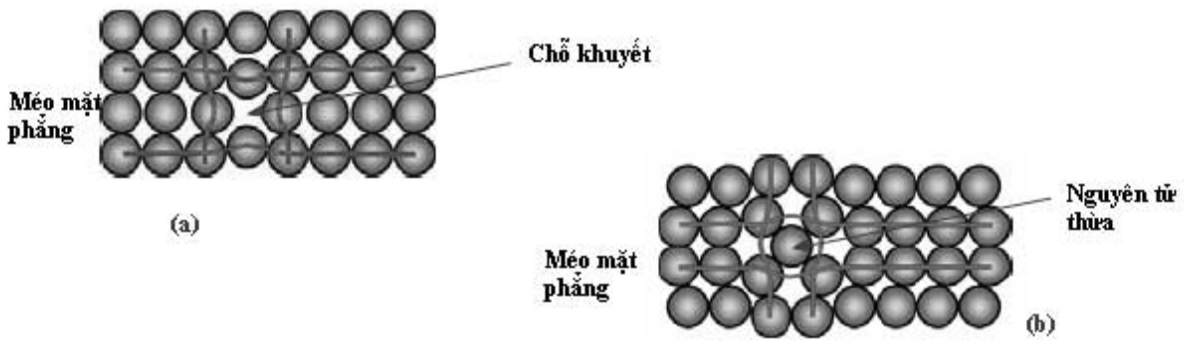
Cho đến lúc này, chúng ta chỉ mới khảo sát cấu trúc tinh thể lí tưởng. Trong tinh thể thực, mạng không hoàn hảo mà chứa những khuyết tật; nghĩa là, sự tuần hoàn hình học hoàn hảo bị gián đoạn theo những cách thức nào đó. Khuyết tật có khuynh hướng làm biến đổi tính chất điện của vật liệu, và trong một số trường hợp, những tham số điện có thể chịu ảnh hưởng mạnh bởi những khuyết tật hoặc tạp chất này.

1.5.1 Khuyết tật trong chất rắn

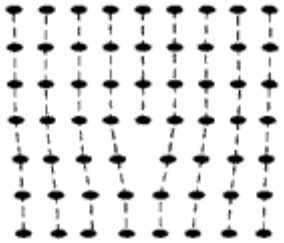
Một loại khuyết tật mà tất cả các tinh thể đều có là dao động. Đơn tinh thể hoàn hảo chứa những hạt (nguyên tử, phân tử hoặc ion) tại các nút mạng, những hạt này cách nhau một khoảng bằng hằng số. Ngoài ra, các hạt trong tinh thể có một năng lượng nhiệt nào đó, nó là hàm theo nhiệt độ. Năng lượng nhiệt này làm cho những hạt dao động ngẫu nhiên quanh những điểm mạng cân bằng. Dao động nhiệt ngẫu nhiên này làm cho khoảng cách giữa các nguyên tử biến đổi một cách ngẫu nhiên, phá vỡ sự sắp xếp tuần hoàn của những nguyên tử. Khuyết tật này được gọi là dao động mạng ảnh hưởng đến những đại lượng điện như chúng ta sẽ thấy sau này trong quá trình khảo sát tính chất của vật liệu bán dẫn.

Một loại khuyết tật khác là sai hỏng điểm. Có vài loại mà chúng ta cần xem xét. Trong một mạng đơn tinh thể lí tưởng, những nguyên tử được sắp xếp một cách tuần hoàn đều đặn. Tuy nhiên, trong tinh thể thực, một nguyên tử có thể bị mất ở một mặt mạng nào đó. Khuyết tật này được gọi là nút khuyết; nó được biểu diễn bằng đồ thị trong hình 1.17a. Trong trường hợp khác, một nguyên tử có thể được đặt vào giữa những mặt mạng. Sai hỏng này được gọi là sai hỏng ngoài nút và được biểu diễn trong hình 1.17b. Trong trường hợp sai hỏng chỗ khuyết và sai hỏng ngoài nút, không chỉ sự sắp xếp hình học của nguyên tử bị phá vỡ mà liên kết hóa học lí tưởng giữa những nguyên tử cũng bị gián đoạn, điều này dẫn đến làm thay đổi tính chất điện của vật liệu. Sai hỏng chỗ khuyết và sai hỏng ngoài nút nếu đặt gần nhau sẽ tương tác nhau và hình thành sai hỏng chỗ khuyết-ngoài nút. Sai hỏng chỗ khuyết-ngoài nút này còn được gọi là sai hỏng Frenkel tạo ra những ảnh hưởng khác biệt so với những sai hỏng chỗ khuyết và sai hỏng ngoài nút riêng lẻ.

Hình 1.17| Biểu diễn hai chiều của mạng đơn tinh thể (a) sai hỏng chỗ khuyết (b) sai hỏng ngoài nút



Sai hỏng điểm liên quan đến vị trí của từng nguyên tử hoặc một nguyên tử. Trong sự hình thành vật liệu đơn tinh thể, những sai hỏng phức tạp hơn có thể xuất hiện. Chẳng hạn sai hỏng đường xuất hiện khi dãy các nguyên tử bị thiếu trong một mặt mạng. Sai hỏng này được gọi là sự lệch đường và được biểu diễn trong hình 1.18. Cũng như đối với sai hỏng điểm, sự lệch đường làm gián đoạn cả sự tuần hoàn hình học đều đặn của mạng và những liên kết nguyên tử lí tưởng trong tinh thể. Sự lệch này cũng có thể làm thay đổi tính chất điện của vật liệu, thường là theo những cách thức không thể tiên đóan được như đối với sai hỏng điểm.



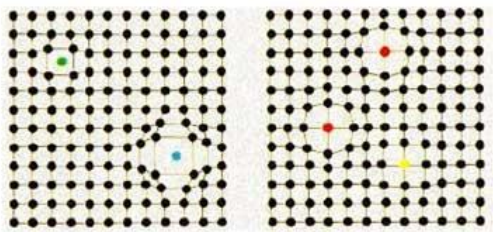
Hình 1.18| Biểu diễn hai chiều sự méo đường

Những sự lệch phức tạp khác cũng có thể hình thành trong mạng tinh thể. Phần nhập môn này chỉ muốn đưa vào một vài loại sai hỏng cơ bản và chứng tỏ rằng tinh thể thực không nhất thiết là một cấu trúc tinh thể hoàn hảo. Ảnh hưởng của những sai hỏng này đến tính chất điện của bán dẫn sẽ được xét trong chương sau.

1.5.2 Tạp chất trong chất rắn

Những nguyên tử bên ngoài, hoặc những nguyên tử tạp chất có thể hiện diện trong mạng tinh thể. Những nguyên tử tạp chất có thể nằm tại mặt mạng bình thường, trong trường hợp này chúng được gọi là tạp chất thế chỗ. Những nguyên tử có thể nằm giữa những mặt mạng bình thường, trong trường hợp này chúng được gọi là tạp chất ngoài nút. Cả hai loại tạp chất này là sai hỏng mạng và được biểu diễn trong hình 1.19. Một số tạp chất, chẳng hạn như Oxi trong Si có khuynh hướng trơ; tuy nhiên, chẳng hạn như vàng hoặc photpho trong Si có thể thay đổi tính chất điện của vật liệu một cách mạnh mẽ.

Hình 1.19| Biểu diễn hai chiều của mạng đơn tinh thể cho thấy (a) tạp chất ngoài nút (b) tạp chất thế chỗ



(a) Tạp chất ngoài nút (b) Tạp chất thế chỗ

Trong chương 4, chúng ta sẽ thấy rằng, bằng cách thêm một lượng tạp chất có kiểm soát, tính chất điện của bán dẫn có thể thay đổi tùy ý. Kĩ thuật thêm những

nguyên tử tạp chất vào vật liệu bán dẫn để thay đổi tính chất điện của nó được gọi là pha tạp. Có hai phương pháp pha tạp tổng quát: khuếch tán tạp chất và cấy Ion.

Quy trình khuếch tán thực sự phụ thuộc vào hình dạng bên ngoài của bán dẫn, nói chung, khuếch tán tạp chất được thực hiện bằng cách đặt tinh thể bán dẫn ở môi trường khí nhiệt độ cao (gần 1000^0 C) chứa những nguyên tử tạp chất. Tại nhiệt độ cao này, nhiều nguyên tử tinh thể có thể chuyển động ngẫu nhiên trong và ngoài những mặt mạng đơn tinh thể của chúng. Những chỗ khuyết có thể được tạo ra do chuyển động ngẫu nhiên này vì vậy những nguyên tử tạp chất có thể di chuyển trong mạng bằng cách nhảy từ chỗ khuyết này đến chỗ khuyết khác. Khuếch tán tạp chất là một quá trình mà ở đó tạp chất di chuyển từ vùng có nồng độ cao từ bề mặt sang vùng có nồng độ thấp trong tinh thể. Khi những nguyên tử tạp chất bị đóng băng trong những mặt phẳng mạng thay thế. Sự khuếch tán những tạp chất khác nhau vào những vùng được chọn của bán dẫn cho phép chúng ta chế tạo những mạch điện tử phức tạp trên một đơn tinh thể bán dẫn.

Nói chung, quá trình cấy Ion xảy ra ở nhiệt độ thấp hơn khuếch tán. Một chùm những ion tạp chất được gia tốc đến động năng nằm trong khoảng 50 KeV hoặc lớn hơn và sau đó đến bề mặt bán dẫn. Những ion pha tạp năng lượng cao đi vào tinh thể và dừng lại ở một độ sâu trung bình tính từ bề mặt. Một ưu điểm của cấy ion là có thể điều khiển được những nguyên tử ion đi vào một vùng đặc biệt của tinh thể. Một nhược điểm của kĩ thuật này là những nguyên tử tạp chất tới va chạm với những nguyên tử tinh thể làm hỏng sự thay đổi vị trí mạng. Tuy nhiên, hầu hết sự làm hỏng mạng có thể tránh được bằng cách luyện nhiệt, nghĩa là tăng nhiệt độ của tinh thể trong thời gian ngắn. Sự luyện nhiệt là bước cần thiết sau khi cấy ion.

Video sau đây dùng tinh thể NaCl để minh họa các loại sai hỏng điểm trong mạng tinh thể. Trong quá trình xem video, bạn có thể gặp một số cụm từ sau:

- *Defect in solid*: những khuyết tật trong chất rắn
- *In this module, you will learn about the various types of point defects present in the crystal lattice of solid*: Trong phần này, chúng ta sẽ khảo sát những loại sai hỏng điểm khác nhau trong mạng tinh thể của chất rắn.
- *Defects in crystalline solids*:Sai hỏng trong chất rắn kết tinh
- *Point defect*: sai hỏng điểm

- *Line defect*: sai hỏng đường
- *Point defects are of three types*: sai hỏng điểm gồm 3 loại
- *Stoichiometric*: hợp thức
- *Non stoichiometric*: không hợp thức
- *Impurity defects*: sai hỏng tạp chất
- *In cases of non ionic solids, the stoichiometric defect are of two types* : Đối với những trường hợp chất rắn không phải ion, sai hỏng hợp thức gồm hai loại
- *Vacancy defects*: sai hỏng chổ khuyết
- *Interstitial defects*: sai hỏng ngoài nút
- *Frenkel defects*: sai hỏng Frenkel
- *Schottky defects*: sai hỏng Schottky
- *Impurity defecs*: sai hỏng tạp chất

*1.6| CÁC KĨ THUẬT NUÔI CẤY VẬT LIỆU BÁN DẪN

Các video trong phần này xin xem tại:

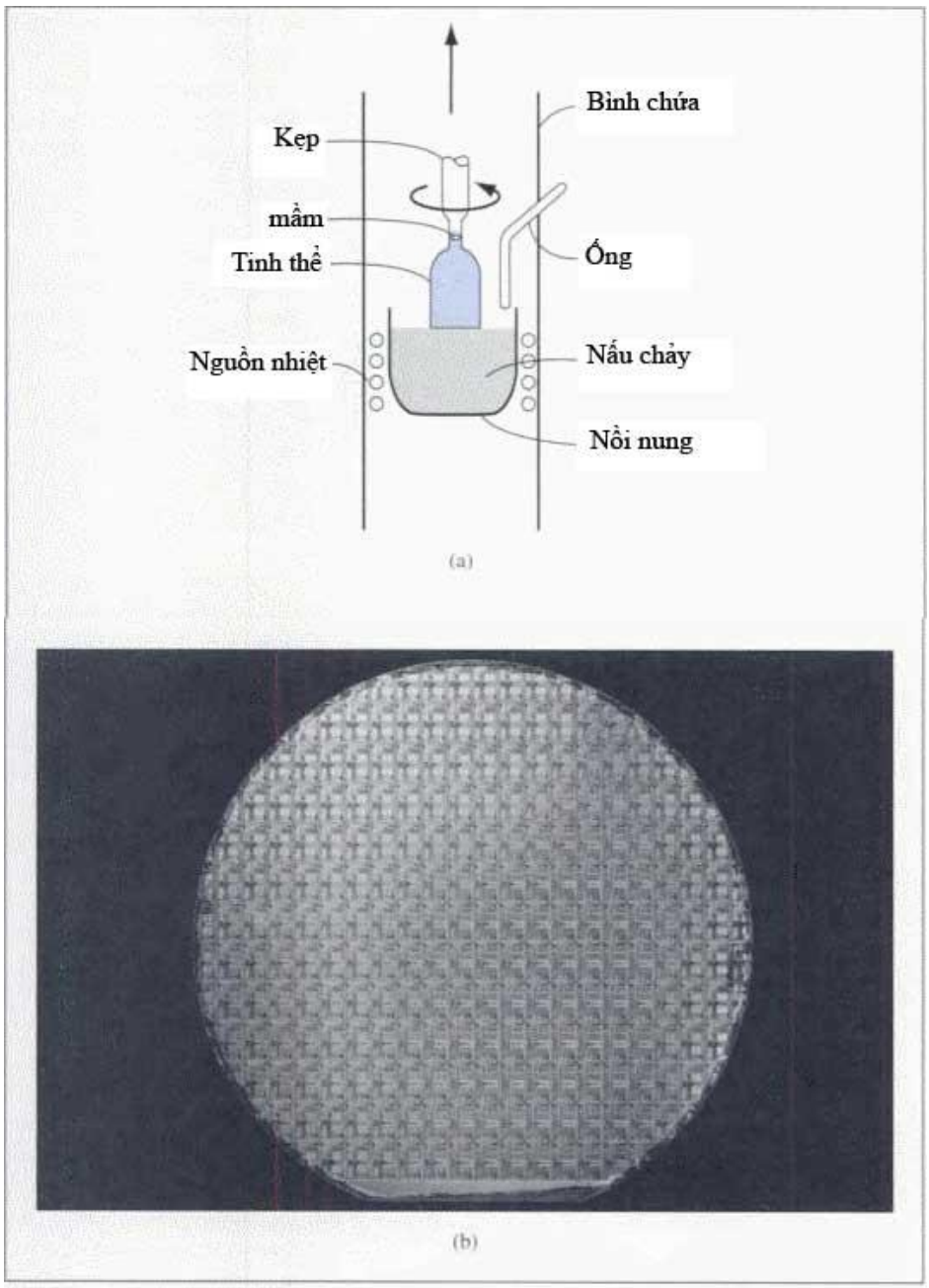
http://mientayvn.com/Dien%20tu/Sach/Vat%20li%20dien%20tu%20va%20ban%20dan/Chuong%20I/16.html

Sự thành công trong việc chế tạo mạch tích hợp cỡ rất lớn (VLSI) là kết quả của sự phát triển và cải tiến kĩ thuật nuôi vật liệu đơn tinh thể thuần khiết. Bán dẫn là một trong số những vật liệu tinh khiết nhất. Chẳng hạn, Si có nồng độ tạp chất cao nhất nhỏ hơn một phần mười tỉ. Yêu cầu độ tinh khiết cao đồng nghĩa với việc cần phải rất cẩn thận trong việc phát triển và xử lí vật liệu ở mỗi bước trong quá trính chế tạo. Cơ chế và động học của quá trình phát triển tinh thể cực kì phức tạp và sẽ được mô tả một cách rất chung chung trong tài liệu này. Tuy nhiên, những kiến thức tổng quát về kĩ thuật nuôi và những thuật ngữ đã được đưa vào.

1.6.1 Nuôi bằng cách đun

Kĩ thuật thông thường để nuôi tinh thể được gọi là phương pháp Czochralski. Trong kĩ thuật này, một miếng nhỏ vật liệu bán dẫn được gọi là mầm được mang đến tiếp xúc với bề mặt của một vật liệu giống nó ở pha lỏng, và sau đó được kéo chậm từ thể lỏng. Khi mầm được kéo chậm, sự hóa rắn xuất hiện giữa lớp tiếp xúc lỏng-rắn. Thông thường tinh thể cũng được quay chậm khi nó đang được kéo để trộn lỏng, dẫn đến nhiệt độ đồng đều hơn. Những nguyên tử tạp chất, chẳng hạn như Bo hoặc Photpho có thể được thêm vào bán dẫn đang tan chảy. Hình 1.20 biểu

diễn sơ đồ của quá trình nuôi Crochralski và thỏi silic được hình thành trong quá trình này.



Hình 1.20| (a) Mô hình bộ kéo tinh thể và (b) ảnh của miến silic với một dãy các IC. Mạch được kiểm tra trên miếng silic và sau đó được tách thành những chip riêng biệt.

Video sau đây sẽ mô tả phương pháp Czochralski:

Một vài tạp chất có thể đi vào thỏi một cách ngẫu nhiên. Sự tinh chế vùng là kĩ thuật phổ biến để làm tinh khiết vật liệu. Cuộn cảm nhiệt độ cao, hoặc cuộn dây cảm ứng r-f được cho đi chậm dọc theo chiều dài của thỏi. Nhiệt độ được cảm ứng bởi cuộn dây đủ cao để cho một lớp chất lỏng mỏng được hình thành. Tại lớp tiếp xúc rắn-lỏng, có sự phân bố tạp chất giữa hai pha. Thông số mô tả sự phân bố này được gọi là hệ số phân tầng: tỉ số giữa mật độ tạp chất trong chất rắn với mật độ trong chất lỏng. Chẳng hạn, nếu hệ số phân tầng bằng 0.1 thì có nghĩa là nồng độ tạp chất trong chất lỏng lớn gấp 10 lần nồng độ tạp chất trong chất rắn. Khi vùng chất lỏng di chuyển trong vật liệu, tạp chất được dồn theo chất lỏng. Sau vài đoạn của cuộn dây r-f, hầu như tạp chất bị dồn về cuối thanh, rồi bị cắt. Di chuyển vùng nấu chảy, hoặc kĩ thuật lọc vùng có thể tạo được mức độ tinh khiết cần thiết.

Sau khi bán dẫn được hình thành, thỏi bán dẫn được đẽo gọt để có đường kính thích hợp và lấy một mặt phẳng chuẩn trên toàn bộ chiều dài của thỏi để kí hiệu sự định hướng trong tinh thể. Mặt phẳng này vuông góc với hướng [110] hoặc biểu thị mặt phẳng (110). (xem hình 1.20b). Do đó, điều này cho phép nhiều chip riêng biệt được chế tạo theo một mặt phẳng tinh thể đã cho sao cho những chip có thể được tách ra từng phần dễ dàng hơn. Sau đó thỏi này được cắt thành từng miếng. Mỗi miếng phải đủ dày để tự hỗ trợ về mặt cơ khí cho nó. Thao tác mài 2 mặt cơ khí tạo ra một miếng phẳng có độ dày đồng nhất. Bởi vì quá trình mày có thể để lại những bề mặt bị hỏng và bị làm bẩn do hoạt động cơ khí, bề mặt phải được lấy đi bằng cơ chế hóa học. Bước cuối cùng là đánh bóng. Bước này cho ra một bề mặt nhẵn mà những thiết bị có thể được chế tạo hoặc những quá trình nuôi cấy tiếp theo có thể được tiến hành trên nó. Miếng bán dẫn cuối cùng này được gọi là vật liệu đế.

Video sau đây sẽ cho bạn biết quy trình chế tạo ra đế như thế nào

CHƯƠNG II: GIỚI THIỆU CƠ HỌC LƯỢNG TỬ

CHƯƠNG II

Cơ Bản Về Cơ Học Lượng Tử

TỔNG QUAN

Mục đích của tài liệu này là giúp người đọc hiểu về hoạt động và đặc tính của thiết bị bán dẫn. Một cách lí tưởng, chúng ta sẽ khảo sát những thiết bị này ngay tức khắc. Tuy nhiên, để hiểu đặc tuyến V-A, chúng ta cần hiểu biết về đặc tính chuyển động của electron trong tinh thể khi electron chịu sự tác động của các thế năng khác nhau.

Chuyển động của các vật thể vĩ mô, chẳng hạn như các hành tinh và vệ tinh có thể được tiên đoán với độ chính xác cao dùng vật lí cổ điển dựa trên các định luật chuyển động của Newton. Trong khi đó những thực nghiệm với electron và sóng điện từ tần số cao dẫn đến những kết quả mâu thuẫn với vật lí cổ điển. Tuy nhiên, những kết quả thực nghiệm này có thể được tiên đoán bằng các định luật cơ học lượng tử. Lí thuyết sóng cơ học lượng tử là cơ sở cho lí thuyết vật lí bán dẫn.

Chúng ta sẽ tập trung vào những vật liệu bán dẫn mà tính chất điện của nó liên quan trực tiếp đến đặc tính chuyển động của electron trong mạng tinh thể. Hành vi và đặc tính của những electron này có thể được mô tả bằng cơ học sóng. Cơ học sóng sử dụng phương trình Schrodinger và phương trình này được giới thiệu trong chương này.

Mục tiêu của chương này là giới thiệu vắn tắt về cơ học lượng tử để cho người đọc thu được kiến thức và dần dần quen với phương pháp phân tích. Những kiến thức nhập môn này hình thành nên cơ sở của vật lí bán dẫn.

2.1|NHỮNG NGUYÊN LÍ CỦA CƠ HỌC LƯỢNG TỬ

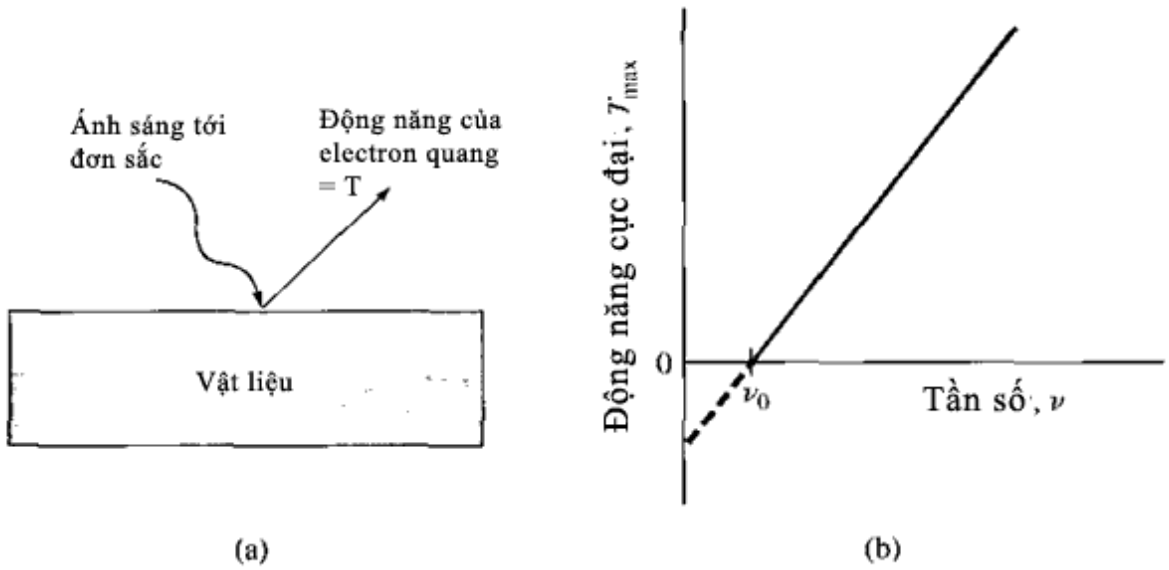
Xem video và làm thí nghiệm ảo tại:

http://mientayvn.com/Dien%20tu/Sach/Vat%20li%20dien%20tu%20va%20ban%20dan/Chuong%20II/21.html

Trước khi nghiên cứu về cơ sở toán học của cơ học lượng tử, có ba nguyên lí mà chúng ta cần xem xét: nguyên lí lượng tử hóa năng lượng, nguyên lí lưỡng tính sóng-hạt và nguyên lí bất định.

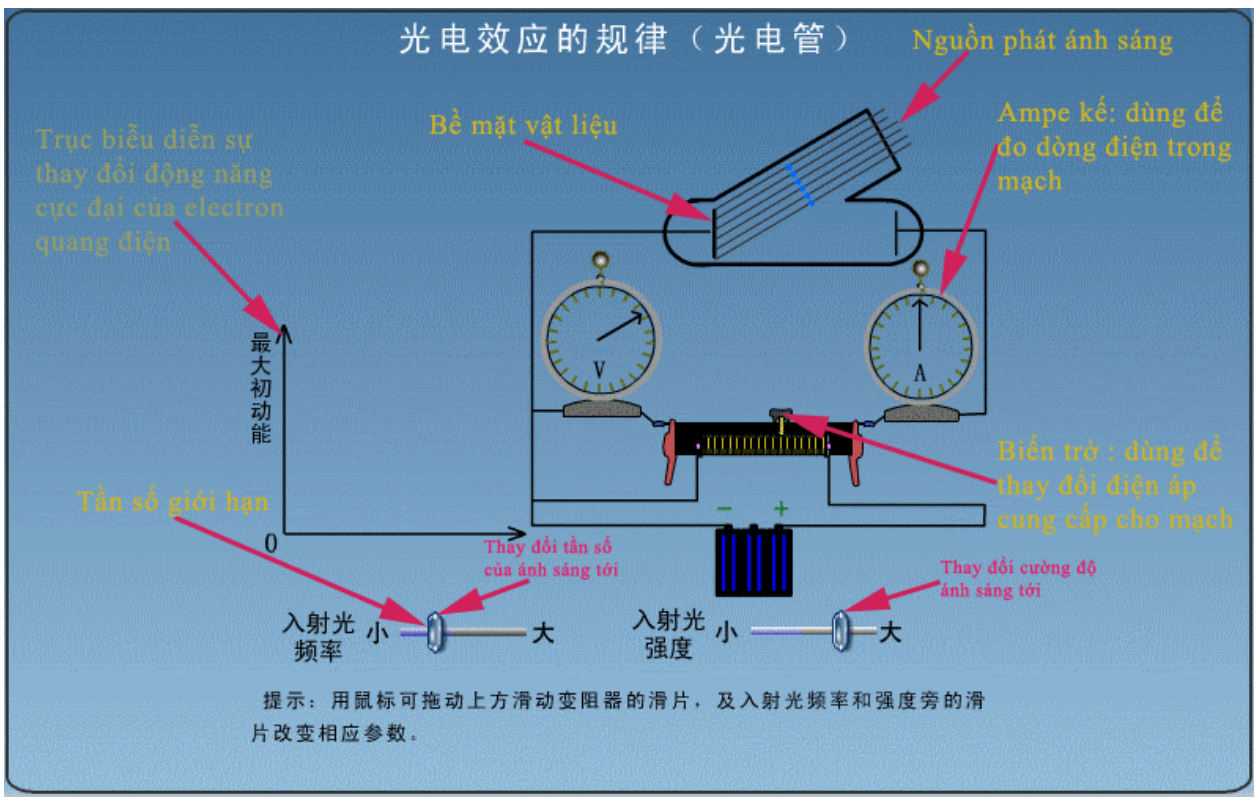
2.1.1 Lượng tử hóa năng lượng

Một thí nghiệm chứng tỏ có sự mâu thuẫn giữa kết quả thực nghiệm với lí thuyết cổ điển của ánh sáng là hiệu ứng quang điện. Nếu ánh sáng không đơn sắc được chiếu đến bề mặt sạch của vật liệu, thì những electron (những electron quang) có thể được phát ra từ bề mặt. Theo vật lí cổ điển, nếu cường độ ánh sáng đủ lớn, động năng của electron sẽ lớn hơn công thoát và electron sẽ thoát ra khỏi bề mặt kim loại không phụ thuộc vào tần số của ánh sáng tới. Điều này thực tế không xảy ra. Hiệu ứng quan sát được trong thực tế là, với cường độ ánh sáng tới không đổi, nếu tần số ánh sáng nhỏ hơn một tần số υ_0 nào đó (υ_0 là tần số giới hạn phụ thuộc vào loại vật liệu cụ thể) thì sẽ không có electron nào được thoát ra từ bề mặt vật liệu. Còn khi $\upsilon \geq \upsilon_0$ động năng cực đại của electron quang biến đổi tuyến tính theo tần số. Kết quả này được biểu diễn trong hình 2.1. Nếu cường độ ánh sáng tới biến đổi còn tần số không đổi, tốc độ phát xạ electron quang thay đổi, nhưng động năng cực đại vẫn giữ nguyên.



Hình 2.1| (a) Hiệu ứng quang điện (b) Động năng cực đại của electron quang là hàm theo tần số của ánh sáng tới

Tiếp theo, chúng ta sẽ thực hiện một thí nghiệm ảo về hiệu ứng quang điện. Trước tiên, hãy xem hình vẽ mô tả các bộ phận và cách điều khiển thí nghiệm.



Nhấp vào đây để thực hiện thí nghiệm.

Vào năm 1900, Planck đã giả thuyết rằng bức xạ nhiệt được phát ra từ bề mặt đun nóng thành những lượng năng lượng nhỏ rời rạc được gọi là lượng tử. Năng lượng của những lượng tử này là E=hυ, ở đây υ là tần số của bức xạ và h được gọi là hằng số Planck (h=6,625.10^{-34} J-s). Sau đó vào năm 1905, Einstein đã giải thích hiệu ứng quang điện bằng cách giả thiết rằng năng lượng trong sóng ánh sáng bao gồm những lượng nhỏ rời rạc. Những lượng nhỏ rời rạc này được gọi là photon có năng lượng là E=hυ. Do đó, một photon với năng lượng đủ lớn mới có thể va chạm vào electron ở bề mặt vật liệu. Năng lượng nhỏ nhất để bứt electron ra khỏi bề mặt được gọi là công thoát của vật liệu.

Và phần năng lượng dư sẽ biến thành động năng của electron quang. Kết quả này đã được xác nhận bằng thực nghiệm và được minh họa trong hình 2.1. Hiệu ứng quang điện chứng tỏ bản chất gián đoạn của photon và chứng minh hành vi giống hạt của photon.

Động năng cực đại của electron quang có thể viết là

$$T_{\max} = \frac{1}{2} m\upsilon^2 = h\nu - h\nu_0 \qquad (2.1)$$

ở đây $h\nu$ là năng lượng photon tới và $h\nu_0$ là năng lượng cực tiểu, hoặc công thoát cần để bứt electron ra khỏi bề mặt.

2.1.2 Lưỡng tính sóng-hạt

Chúng ta dã thấy trong phần trước rằng trong hiệu ứng quang điện, sóng ánh sáng hành xử như thể chúng là hạt. Hành vi giống như hạt của sóng điện từ cũng là công cụ để giải thích hiệu ứng Compton. Trong thí nghiệm này, chùm tia X được chiếu tới chất rắn. Một phần của chùm tia X bị lệch và tần số của sóng lệch này

thay đổi so với sóng tới. Nếu chúng ta xét bài toán này như sự va chạm giữa các photon tia X và các electron trong chất rắn, sử dụng định luật bảo toàn năng lượng và động lượng, chúng ta có thể suy ra được kết quả hoàn toàn phù hợp với thực nghiệm.

Năm 1924, de Broglie đã giả thuyết về sự tồn tại của sóng vật chất. Ông ta lập luận rằng sóng biểu hiện hành vi giống như hạt, vì thế có thể tiên đoán rằng hạt cũng sẽ biểu hiện những tính chất giống như sóng. Đây là giả thuyết De Broglie về sự tồn tại của lưỡng tính sóng hạt. Động lượng của photon là:

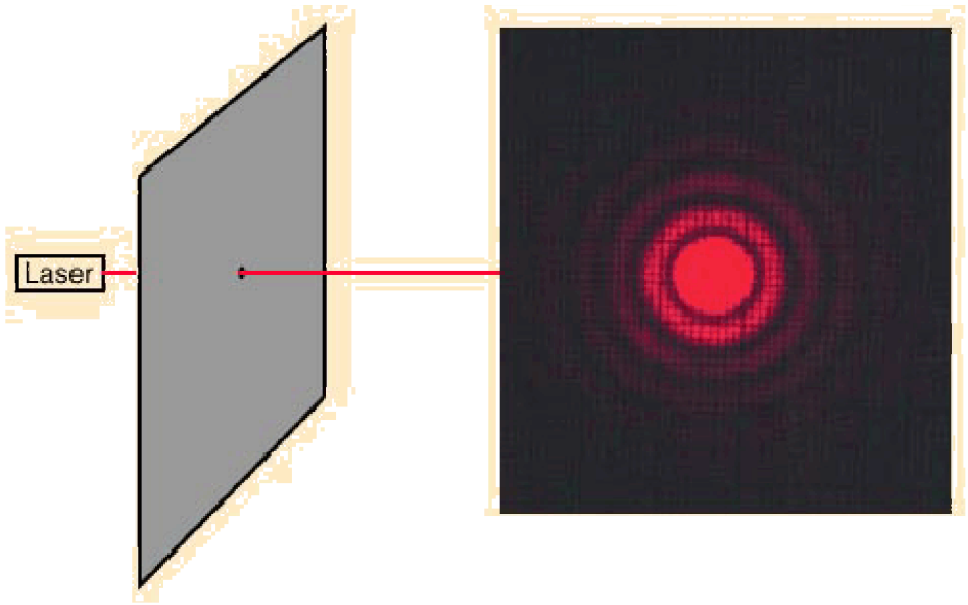
$$p=h/\lambda \tag{2.2}$$

ở đây λ là bước sóng của sóng ánh sáng. Do đó, De Broglie đã giả thuyết rằng bước sóng của hạt có thể được biểu diễn là

$$\lambda=h/p \tag{2.3}$$

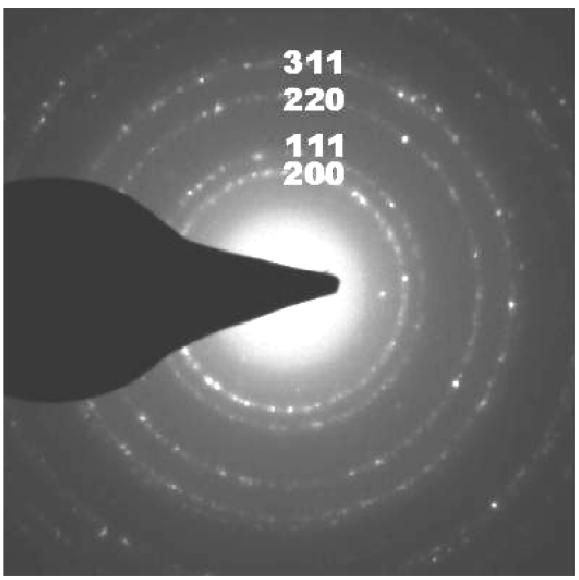
ở đây p là động lượng của hạt và λ được gọi là bước sóng De Broglie của sóng vật chất.

Bản chất sóng của electron đã được kiểm tra theo vài cách. Như chúng ta đã biết, sóng được đặc trưng bởi các hiện tượng giao thoa và nhiễu xạ. Nhiễu xạ là hiện tượng ánh sáng sau khi đi qua những khe hẹp có độ lớn cỡ bước sóng của chính ánh sáng đó thì các tia sáng không còn truyền thẳng. Về mặt thực nghiệm, chúng ta sẽ thấy trên màn quan sát xuất hiện những vân sáng tối xen kẽ nhau với cường độ khác nhau. Chẳng hạn khi ánh sáng laser (là ánh sáng đơn sắc) đi qua một lỗ nhỏ hình cầu có đường kính xấp xỉ bằng bước sóng của nó thì trên màn quan sát chúng ta sẽ thấy như sau:



Vì thế, nếu muốn chứng minh electron có tính chất sóng thì chúng ta phải bố trí thí nghiệm thế nào để cho có thể quan sát được hiện tượng nhiễu xạ electron qua một khe nào đó. Để có hiện tượng nhiễu xạ xảy ra thì tất nhiên khe này phải có kích thước xấp xỉ bằng bước sóng của electron. Các khe này chính là các khe trong mạng tinh thể của các chất rắn kết tinh.

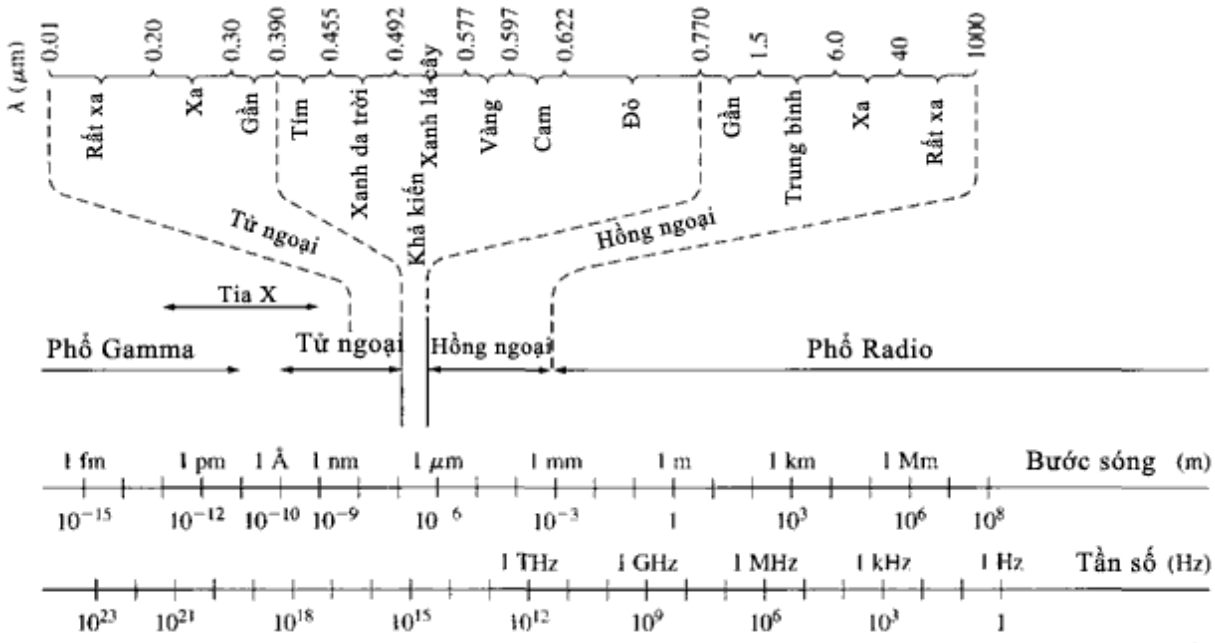
Chẳng hạn khi chiếu chùm electron vào tinh thể bạch kim thì chúng ta sẽ thu được một hình ảnh như sau:



Bạn có thấy nó cũng gồm những vân sáng và vân tối xen kẽ nhau giống như hiện tượnng nhiễu xạ ánh sáng laser ở trên không.

Vậy là, trong thực tế có tồn tại hiện tượng nhiễu xạ electron. Nghĩa là electron là một hạt nhưng lại thể hiện tính chất sóng. Những dãy số như 311, 220, 111, 200 là kí hiệu các mặt mạng của tinh thể.

Để thu được vài đánh giá về tần số và bước sóng liên quan đến nguyên lí lưỡng tính sóng-hạt, hình 2.4 biểu diễn thang sóng điện từ. Chúng ta thấy rằng bước sóng 72,7 A^0 thu được trong ví dụ tiếp theo thuộc vùng tử ngoại. Thông thường, chúng ta sẽ xem xét bước sóng trong vùng tử ngoại và nhìn thấy.



Hình 2.4 | Phổ sóng điện từ

Những bước sóng này rất ngắn so với phổ radio thông thường.

Ví dụ 2.2: Tính bước sóng de Broglie của electron chuyển động với vận tốc 10^5 cm/s.

Giải

Động lượng của electron sẽ là

$$p = m\upsilon = (9.11\times10^{-31})(10^5) = 9.11\times10^{-26}$$

Do đó, bước sóng De broglie là:

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{6.625 \times 10^{-34}}{9.11 \times 10^{-26}} = 7.27 \times 10^{-9} m$$

Hay $\lambda = 72.7 \overset{0}{A}$

Kết luận: Kết quả này cho thấy bậc độ lớn bước sóng De Broglie của một electron thông thường

Trong một số trường hợp sóng điện từ hành xử như thể chúng là hạt (những photon) và thỉnh thoảng hạt hành xử như thể chúng là sóng. Nguyên lí lưỡng tính sóng-hạt của cơ học lượng tử áp dụng chủ yếu cho các hạt vi mô chẳng hạn như electron, nhưng cũng có thể áp dụng cho proton và nơtron. Đối với những hạt vĩ mô, chúng ta có thể chứng tỏ rằng những phương trình chuyển động mô tả chúng sẽ trở về những phương trình của cơ học cổ điển. Nguyên lí lưỡng tính sóng – hạt là cơ sở để mô tả chuyển động và hành vi của electron trong tinh thể.

Xem phim tài liệu (tùy chọn)

2.1.3 Nguyên lí bất định

Nguyên lí bất định Heisenberg được đưa ra vào năm 1927, cũng áp dụnh chủ yếu cho các hạt vi mô và phát biểu rằng chúng ta không thể mô tả chính xác tuyệt đối hành vi của những hạt ở cấp độ dưới nguyên tử này. Nguyên lí bất định mô tả mối quan hệ cơ bản giữa những biến liên hợp, chẳng hạn như vị trí và động lượng, năng lượng và thời gian.

Phát biểu thứ nhất của nguyên lí bất định là không thể mô tả chính xác đồng thời vị trí và động lượng của hạt. Nếu độ bất định tọa độ là Δp và độ bất định vị trí là Δx thì hệ thức bất định được viết là

$$\Delta p.\Delta x \geq \hbar \qquad (2.4)$$

ở đây $\hbar=h/2\pi=1,054.10^{-34}$ *J-s* và được gọi là hằng số Planck hiệu dụng. Phát biểu này có thể được khái quát hóa cho góc và momen động lượng.

Phát biểu thứ hai của nguyên lí bất định là không thể đồng thời mô tả chính xác tuyệt đối năng lượng và khoảng thời gian mà hạt tồn tại ở trạng thái năng lượng này. Nếu độ bất định trong năng lượng là ΔE và độ bất định thời gian là Δt thì hệ thức bất định được phát biểu là

$$\Delta E.\Delta t\geq\hbar \qquad (2.5)$$

Một cách để hình dung hệ thức bất định là xét sự đo đồng thời vị trí và động lượng, và sự đo đồng thời năng lượng và thời gian. Hệ thức bất định muốn nói rằng những sự đo đồng thời này có độ sai lệch trong phạm vi nào đó. Tuy nhiên, hằng số Planck hiệu dụng rất nhỏ; hệ thức bất định chỉ có ý nghĩa cho những hạt ở cấp độ dưới nguyên tử. Và chúng ta cần nhớ rằng hệ thức bất định là một phát biểu cơ bản và nó không liên hệ gì đến sai số của phép đo.

Một kết quả của hệ thức bất định là chúng ta không thể xác định chính xác vị trí của electron. Thay vào đó, chúng ta sẽ xác định xác suất tìm thấy electron trong một khoảng nào đó. Trong chương sau, chúng ta sẽ xây dựng hàm mật độ xác suất cho phép chúng ta xác định xác suất mà một electron có một năng lượng nào đó. Vì vậy, trong việc mô tả hành vi của electron, chúng ta sẽ làm việc với hàm xác suất.

Video sau đây sẽ mô tả chuyển động của electron trong nguyên tử, bạn không thể thấy các electron mà chỉ thấy những đám mây electron.

2.2 PHƯƠNG TRÌNH SÓNG SCHRODINGER

Những kết quả thực nghiệm trên sóng điện từ và hạt vi mô không thể giải thích được bằng các định luật cơ học cổ điển, điều đó đòi hỏi phải xây dựng một môn cơ

học mới cho các hạt vi mô. Năm 1926, Schrodinger đã xây dựng cơ học sóng, nó hợp nhất nguyên lí lượng tử do Planck đưa ra và nguyên lí lưỡng tính sóng hạt của De Broglie. Dựa trên nguyên lí lưỡng tính sóng hạt, chúng ta sẽ mô tả chuyển động của electron trong tinh thể bằng lí thuyết sóng. Lí thuyết sóng này được mô tả bởi phương trình sóng Schrodinger.

2.2.1 Phương trình sóng

Phương trình sóng Schrodinger một chiều, phi tương đối tính là:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi(x,t)}{\partial x^2}+V(x)\psi(x,t)=j\hbar\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t} \tag{2.6}$$

ở đây $\psi(x,t)$ là hàm sóng, $V(x)$ là thế năng được giả sử là không phụ thuộc thời gian, m là khối lượng của hạt và j là một hằng số ảo bằng $\sqrt{-1}$. Có một luận cứ lí thuyết để dẫn ra phương trình sóng Schrodinger, nhưng phương trình là một định đề cơ bản của cơ học lượng tử. Hàm sóng $\psi(x,t)$ sẽ được dùng để mô tả hành vi của hệ và về mặt toán học $\psi(x,t)$ là một hàm phức.

Chúng ta có thể xác định phần phụ thuộc thời gian của hàm sóng và phần phụ thuộc tọa độ bằng cách dùng kĩ thuật tách biến. Giả sử rằng hàm sóng có thể được viết dưới dạng

$$\psi(x,t)=\psi(x)\phi(t) \tag{2.7}$$

ở đây $\psi(x)$ là hàm theo tọa độ x và $\phi(t)$ là hàm theo thời gian. Thế dạng này của nghiệm vào phương trình sóng Schrodinger, chúng ta thu được:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\phi(t)\frac{\partial^2\psi(x)}{\partial x^2}+V(x)\psi(x)\phi(t)=j\hbar\psi(x)\frac{\partial\phi(t)}{\partial t} \tag{2.8}$$

Nếu chia cho hàm sóng toàn phần, phương trình 2.8 trở thành

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{\psi(x)}\frac{\partial^2\psi(x)}{\partial x^2}+V(x)=j\hbar\frac{1}{\phi(t)}\frac{\partial\phi(t)}{\partial t} \tag{2.9}$$

Bởi vì vế trái của phương trình là hàm theo vị trí x và vế phải của phương trình là hàm theo thời gian, muốn phương trình này có nghĩa thì mỗi vế của phương trình này phải bằng hằng số. Chúng ta kí hiệu hằng số này là η.

Do đó, phần phụ thuộc thời gian của phương trình (2.9) được viết là

$$\eta = j\hbar\frac{1}{\phi(t)}\frac{\partial\phi(t)}{\partial t} \tag{2.10}$$

Nghiệm của phương trình 2.10 có thể được viết dưới dạng

$$\phi(t)=e^{-j(\eta/\hbar)t} \tag{2.11}$$

Dạng nghiệm này là dạng hàm mũ của sóng sin, ở đây η/ħ là tần số bức xạ ω. Chúng ta có $E=h\nu$ hoặc E=hω/2π. Do đó, ω=η/ħ =E/ħ vì thế hằng số tách biến η bằng năng lượng E của hạt.

Phần không phụ thuộc thời gian của phương trình sóng Schrodinger bây giờ có thể được viết từ phương trình (2.9) là:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{\psi(x)}\frac{\partial^2\psi(x)}{\partial x^2}+V(x)=E \tag{2.12}$$

ở đây hằng số tách biến là năng lượng toàn phần E của hạt. Phương trình (2.12) có thể được viết là:

$$\frac{\partial^2\psi(x)}{\partial x^2}+\frac{2m}{\hbar^2}[E-V(x)]\psi(x)=0 \tag{2.13}$$

ở đây m là khối lượng của hạt, *V(x)* là thế năng của hạt, và *E* là năng lượng toàn phần của hạt. Phương trình sóng Schrodinger không phụ thuộc thời gian cũng có thể được dẫn ra dựa vào phương trình sóng cổ điển như được chứng minh trong phần phụ lục E. Cách tiếp cận này đơn giản nhưng nó chứng tỏ sự đáng tin cậy của phương trình sóng Schrodinger độc lập thời gian.

2.2.2 Ý nghĩa vật lí của hàm sóng

Mục đích cuối cùng của chúng ta là dùng phương trình sóng $\psi(x,t)$ để mô tả hành vi của electron trong tinh thể. Hàm $\psi(x,t)$ là hàm sóng, vì vậy cần phải biết mối quan hệ giữa hàm và electron là gì. Hàm sóng toàn phần là tích của hàm sóng không phụ thuộc thời gian và hàm sóng phụ thuộc thời gian. Từ (2.7) chúng ta có

$$\psi(x,t) = \psi(x)\phi(t) = \psi(x)e^{-j(E/\hbar)t} \tag{2.14}$$

Bởi vì hàm sóng toàn phần là hàm phức nên bản thân nó không thể biểu diễn một đại lượng vật lí thực.

Năm 1926, Max Born đã phát biểu rằng bình phương modun hàm sóng $|\psi(x,t)|^2\,dx$ là xác suất tìm thấy hạt trong khoảng từ x đến $x+dx$ tại một thời điểm nào đó, hoặc $|\psi(x,t)|^2$ là hàm mật độ xác suất. Chúng ta có:

$$|\psi(x,t)|^2 = \psi(x,t)\psi^*(x,t) \tag{2.15}$$

Ở đây $\psi^*(x,t)$ là hàm liên hợp phức. Do đó

$$\psi^*(x,t) = \psi^*(x)e^{+j(E/\hbar)t}$$

Vì thế tích của hàm sóng toàn phần và liên hợp phức của nó sẽ bằng

$$|\psi(x,t)|^2 = \psi(x,t)\psi^*(x,t) = [\psi(x)e^{-j(E/\hbar)t}][\psi^*(x)e^{+j(E/\hbar)t} \tag{2.16}$$

Do đó, chúng ta có

$$|\psi(x,t)|^2 = \psi(x)\psi^*(x) = |\psi(x)|^2 \tag{2.17}$$

Là hàm mật độ xác suất và không phụ thuộc thời gian. Một sự khác biệt lớn giữa cơ học cổ điển và cơ học lượng tử là trong cơ học cổ điển, vị trí của hạt có thể được xác định chính xác, trong khi đó trong cơ học lượng tử, vị trí của hạt được xác định theo xác suất. Chúng ta sẽ xác định hàm mật độ xác suất trong vài trường hợp, và bởi vì nó không phụ thuộc thời gian, nói chung, chúng ta sẽ chỉ quan tâm đến những phương trình sóng không phụ thuộc thời gian.

2.2.3 Điều kiện biên

Bởi vì hàm sóng $|\psi(x,t)|^2$ biểu diễn hàm mật độ xác suất, do đó, đối với một hạt, chúng ta phải có

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 \, dx = 1 \tag{2.18}$$

Xác suất tìm thấy hạt trong toàn không gian là tất nhiên. Phương trình (2.18) cho phép chúng ta chuẩn hóa hàm sóng và là điều kiện được dùng để xác định những hệ số trong hàm sóng.

Điều kiện còn lại áp đặt cho hàm sóng và đạo hàm của nó. Tuy nhiên chúng ta phải phát biểu điều kiện biên và đưa ra lí lẽ biện minh tại sao chúng ta phải áp đặt những điều kiện ấy. Hàm sóng và đạo hàm bậc nhất của nó phải có tính chất sau nếu năng lượng toàn phần E và thế năng $V(x)$ của nó xác định ở mọi nơi.

Điều kiện 1: $\psi(x)$ phải xác định, liên tục và đơn trị.

Điều kiện 2: $\frac{\partial \psi}{\partial x}$ phải xác định, liên tục và đơn trị.

Bởi vì $|\psi(x)|^2$ là mật độ xác suất nên $\psi(x)$ phải xác định và đơn trị. Nếu mật độ xác suất không xác định tại điểm nào đó trong không gian thì xác suất tìm thấy hạt tại vị trí này sẽ là chắc chắn (100%) và nguyên lí bất định sẽ bị vi phạm. Nếu năng lượng toàn phần E và thế năng $V(x)$ xác định ở mọi nơi thì từ phương trình (2.13), đạo hàm bậc II phải xác định, nghĩa là đạo hàm bậc I phải liên tục. Đạo hàm bậc I có liên quan đến động lượng hạt, là đại lượng xác định và đơn trị. Cuối cùng, đạo hàm bậc I xác định có nghĩa là chính hàm số đó phải liên tục. Trong một vài trường hợp đặc biệt mà chúng ta sẽ xem xét, hàm thế sẽ không xác định tại một vùng nào đó của không gian. Đối với trường hợp này, đạo hàm bậc nhất không liên tục, nhưng điều kiện biên còn lại vẫn còn đúng.

2.3|ỨNG DỤNG CỦA PHƯƠNG TRÌNH SÓNG SCHRODINGER

Bây giờ chúng ta sẽ áp dụng phương trình sóng Schrodinger cho một số bài toán cụ thể với các hàm thế khác nhau. Những trường hợp này sẽ minh họa các phương pháp được dùng để giải phương trình Schrodinger và kết quả của những trường hợp này sẽ cung cấp cho chúng ta kiến thức về hành vi của electron trong các thế năng khác nhau. Chúng ta sẽ dùng những kết quả được rút ra để thảo luận về tính chất của bán dẫn.

2.3.1 Electron trong không gian tự do

Đầu tiên, xét chuyển động của một electron trong không gian tự do. Nếu không có lực tác động lên hạt thì hàm thế $V(x)$ sẽ bằng 0. Do đó, từ phương trình (2.13) phương trình sóng không phụ thuộc thời gian có thể được viết là

$$\frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} + \frac{2mE}{\hbar^2}\psi(x) = 0 \tag{2.19}$$

Nghiệm của phương trình vi phân này có thể được viết dưới dạng

$$\psi(x) = A\exp\left[\frac{jx\sqrt{2mE}}{\hbar}\right] + B\exp\left[\frac{-jx\sqrt{2mE}}{\hbar}\right] \tag{2.20}$$

Phần phụ thuộc thời gian của nghiệm vẫn sẽ là

$$\phi(t) = e^{-j(E/\hbar)t} \tag{2.21}$$

Do đó, nghiệm toàn phần của hàm sóng là

$$\psi(x,t) = A\exp\left[\frac{j}{\hbar}(x\sqrt{2mE} - Et)\right] + B\exp\left[\frac{-j}{\hbar}(x\sqrt{2mE} + Et)\right] \tag{2.22}$$

Đây là nghiệm sóng chạy, điều đó có nghĩa là hạt di chuyển trong không gian tự do được biểu diễn bằng sóng chạy. Số hạng đầu tiên, với hệ số A là sóng chạy theo hướng $+x$, còn số hạng thứ hai với hệ số B là sóng chạy theo hướng $-x$. Giá trị của những hệ số này sẽ được xác định từ điều kiện biên. Chúng ta sẽ gặp lại nghiệm sóng chạy của electron trong tinh thể hoặc vật liệu bán dẫn.

Giả sử rằng chúng ta có một hạt di chuyển theo hướng $+x$, nó sẽ được mô tả bởi sóng chạy $+x$, hệ số $B=0$. Chúng ta có thể viết nghiệm sóng chạy dưới dạng

$$\Psi(x,t)=A\exp[j(kx-\omega t)] \tag{2.23}$$

ở đây k là số sóng và

$$k = \frac{2\pi}{\lambda} \tag{2.24}$$

λ là bước sóng, so sánh phương trình (2.22) với phương trình (2.23) suy ra bước sóng sẽ là

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2mE}} \tag{2.25}$$

Từ nguyên lí lưỡng tính sóng hạt De Broglie, bước sóng cũng có thể được viết là

$$\lambda = \frac{h}{p} \tag{2.26}$$

Một hạt tự do với năng lượng xác định cũng sẽ có bước sóng và động lượng xác định.

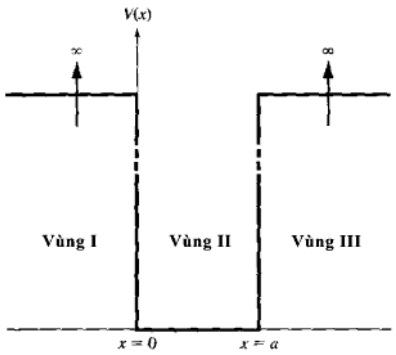
Hàm mật độ xác suất $\psi(x,t)\psi^*(x,t)=AA^*$, là hằng số không phụ thuộc vị trí. Hạt tự do với động lượng xác định có thể được tìm thấy với xác suất bằng nhau ở

mọi nơi. Kết quả này phù hợp với nguyên lí bất định Heisenberg: động lượng sẽ dẫn đến vị trí không xác định.

Một hạt tự do định xứ được xem như bó sóng (được hình thành bằng cách chồng chất nhiều hàm sóng với động lượng khác nhau). Chúng ta sẽ không xem xét bó sóng ở đây.

2.3.2 Giếng thế vô hạn

Bài toán hạt chuyển động trong giếng thế vô hạn là ví dụ điển hình về hạt liên kết. Thế *V(x)* là hàm theo tọa độ được biểu diễn trong hình 2.5. Hạt được giả sử tồn tại trong vùng II, cũng có nghĩa là nó bị giam trong vùng không gian xác định.



Hình 2.5 | Hàm thế của giếng thế vô hạn

Từ phương trình (2.13) suy ra phương trình sóng Schrodinger độc lập thời gian trong trường hợp này là

$$\frac{\partial^2\psi(x)}{\partial x^2}+\frac{2m}{\hbar^2}[E-V(x)]\psi(x)=0 \qquad (2.13)$$

ở đây *E* là năng lượng toàn phần của hạt. Nếu *E* xác định, hàm sóng phải bằng 0 cả trong vùng I và III. Hạt không thể xuyên qua hàng rào thế xác định này, vì vậy xác suất tìm thấy hạt trong vùng I và vùng III bằng 0

Phương trình sóng Schrodinger độc lập thời gian trong vùng II, ở đây *V=0* là

$$\frac{\partial^2\psi(x)}{\partial x^2}+\frac{2mE}{\hbar^2}\psi(x)=0 \qquad (2.27)$$

Nghiệm của phương trình này có dạng

$$\psi(x)=A_1\cos Kx+A_2\sin Kx \qquad (2.28)$$

ở đây

$$K=\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \qquad (2.29)$$

Điều kiện biên liên tục của hàm sóng cho ta

$$\Psi(x=0)=\psi(x=a)=0 \qquad (2.30)$$

Áp dụng điều điều kiện biên tại $x=0$, chúng ta có A_1 phải bằng 0. Tại $x=a$, chúng ta có

$$\Psi(x=a)=0=A_2 sinKa \qquad (2.31)$$

Phương trình này có nghĩa nếu $Ka=n\pi$, ở đây n là số nguyên dương $n=1,2,3,\ldots$ được gọi là số lượng tử. Chúng ta có thể viết

$$K=\frac{n\pi}{a} \qquad (2.32)$$

Giá trị âm của n sẽ làm cho hàm sóng có dấu âm và tương ứng với các hàm mật độ xác suất giống với trường hợp n dương. Về mặt vật lí, chúng ta không thể phân biệt bất cứ sự khác nhau nào giữa các nghiệm $+n$ và $-n$. Bởi vì sự dư thừa này, những giá trị âm của n sẽ không được xét đến.

Hệ số A_2 có thể tìm được bằng cách dùng điều kiện biên chuẩn hóa được cho trong phương trình (2.18) là $\int_{-\infty}^{+\infty}\psi(x)\psi^*(x)dx=1$. Vì hàm sóng là hàm thực nên $\psi(x)=\psi^*(x)$. Thế hàm sóng vào phương trình (2.18) chúng ta có

$$\int_0^a A_2^2 \sin^2 Kx dx = 1 \qquad (2.33)$$

Tính tích phân sau đó ta suy ra được

$$A_2=\sqrt{\frac{2}{a}} \qquad (2.34)$$

Cuối cùng nghiệm độc lập thời gian là

$$\psi(x)=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \qquad \text{ở đây } n=1,2,3\ldots\ldots\ldots \qquad (2.35)$$

Nghiệm này biểu diễn electron trong giếng thế không xác định và là nghiệm sóng dừng. Electron tự do được biểu diễn bởi sóng chạy, và bây giờ hạt liên kết được biểu diễn bằng sóng dừng.

Tham số K trong nghiệm được định nghĩa bởi phương trình (2.29) và (2.32). Từ hai biểu thức này của K, suy ra

$$\frac{2mE}{\hbar^2} = \frac{n^2\pi^2}{a^2} \tag{2.36}$$

Do đó năng lượng toàn phần là

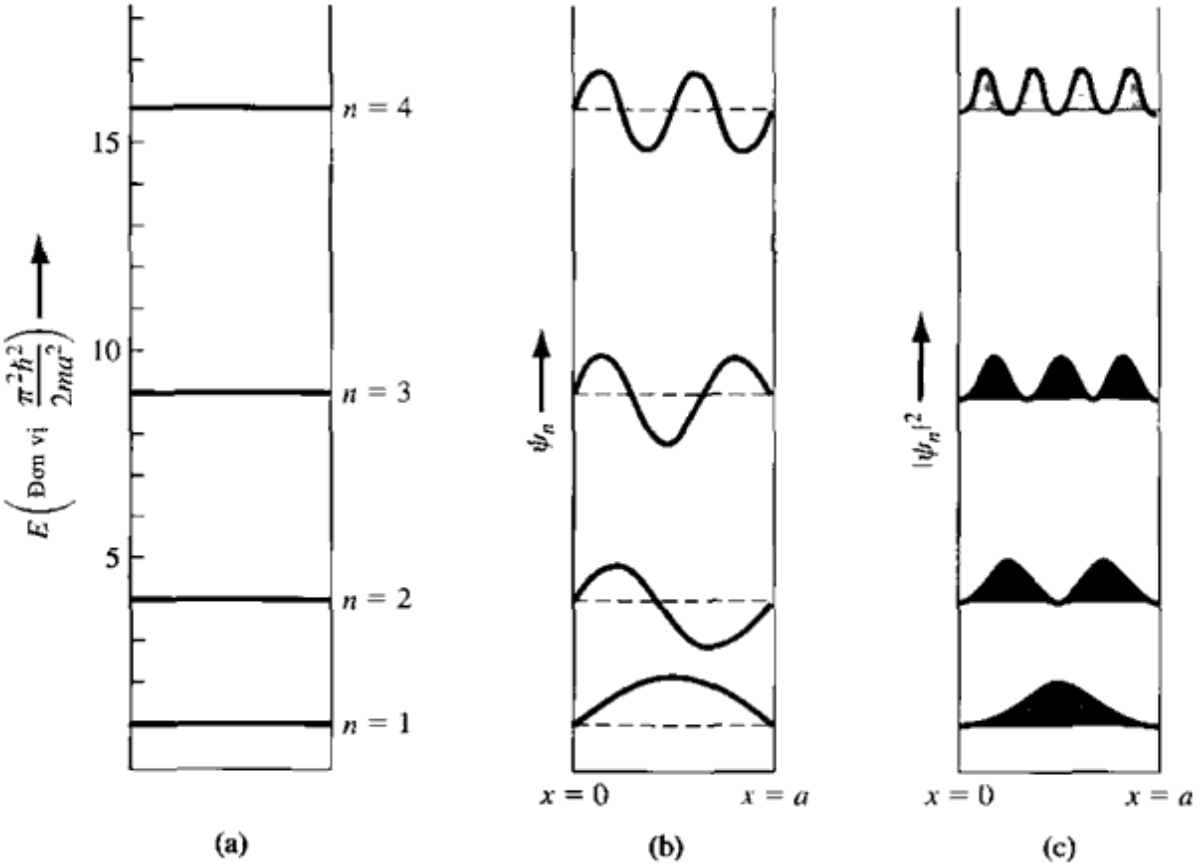
$$E = E_n = \frac{\hbar^2 n^2 \pi^2}{2ma^2} \qquad \text{ở đây } n=1, 2, 3\ldots\ldots\ldots \tag{2.37}$$

Đối với hạt trong giếng thế vô hạn, hàm sóng là

$$\psi(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin Kx \tag{2.38}$$

Ở đây hằng số K phải có những giá trị rời rạc, nghĩa là năng lượng toàn phần của hạt chỉ có những giá trị rời rạc. Kết quả này có nghĩa là năng lượng của hạt bị lượng tử hóa. Nghĩa là, năng lượng của hạt chỉ có những giá trị rời rạc nào đó. Sự lượng tử hóa năng lượng của hạt trái ngược với những kết quả của vật lí cổ điển. Vật lí cổ điển chỉ cho phép hạt có những giá trị năng lượng liên tục. Năng lượng rời rạc dẫn đến những trạng thái lượng tử sẽ được xét chi tiết hơn trong chương này và những chương sau. Sự lượng tử hóa năng lượng của hạt liên kết là kết quả cực kì quan trọng.

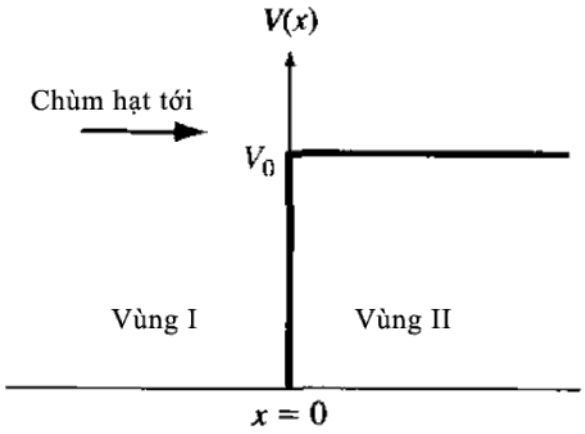
Hình 2.6a biểu diễn 4 mức năng lượng đầu tiên của hạt trong giếng thế không xác định, và hình 2.6b và 2.6c biểu diễn hàm sóng và hàm xác suất tương ứng. Chúng ta có thể rút ra rằng khi năng lượng tăng, xác suất tìm thấy hạt tại vị trí *x* bất kì cũng trở nên đồng đều hơn.



Hình 2.6| Hạt trong giếng thế không xác định: (a) Bốn mức năng lượng thấp nhất. (b) Các hàm sóng tương ứng. (c) Các hàm xác suất tương ứng

2.3.3 Hàm thế bậc thang

Bây giờ xét hàm thế bậc thang được biểu diễn trong hình 2.7. Trong phần trước, chúng ta đã xét một hạt bị giam giữa hai hàng rào thế. Trong ví dụ này, chúng ta sẽ giả sử rằng có một dòng hạt xuất phát từ $-\infty$ và chuyển động theo hướng $+x$. Kết quả đáng chú ý thu được trong trường hợp năng lượng toàn phần của hạt nhỏ hơn độ cao hàng rào, hoặc $E<V_0$.



Hình 2.7| Hàm thế bậc thang

Một lần nửa chúng ta cần xét phương trình sóng không phụ thuộc thời gian trong mỗi vùng. Trong vùng I, *V=0*, phương trình sóng là

$$\frac{\partial^2 \psi_1(x)}{\partial x^2} + \frac{2mE}{\hbar^2}\psi_1(x) = 0 \tag{2.39}$$

Nghiệm tổng quát của phương trình này có thể viết dưới dạng

$$\psi_1(x) = A_1 e^{jK_1 x} + B_1 e^{-jK_1 x} \quad (x \le 0) \tag{2.40}$$

ở đây, hằng số K_1 là

$$K_1 = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \tag{2.41}$$

Số hạng thứ I trong phương trình (2.40) là sóng chạy theo hướng $+x$ biểu diễn sóng tới, và số hạng thứ 2 là sóng chạy tho hướng $-x$ biểu diễn sóng phản xạ. Như trong trường hợp của hạt tự do, những hạt tới và hạt phản xạ được biểu diễn bằng sóng chạy.

Đối với sóng tới, $A_1A_1^*$ là hàm mật độ xác suất của những hạt tới. Nếu chúng ta nhân hàm mật độ xác suất này với vận tốc tới thì $\upsilon_i.A_1.A_1^*$ là thông lượng hạt tới (đơn vị là $\#/cm^2\text{-}s$). Tương tự, đại lượng $\upsilon_r.B_1.B_1^*$ là thông lượng hạt phản xạ, ở đây υ_r là vận tốc của sóng phản xạ (υ_i và υ_r trong những số hạng này chỉ là giá trị độ lớn của vận tốc)

Trong vùng II, thế năng $V=V_0$. Nếu chúng ta giả sử rằng $E<V_0$ thì phương trình vi phân mô tả hàm sóng trong vùng II có thể được viết là

$$\frac{\partial^2\psi_2(x)}{\partial x^2}-\frac{2m}{\hbar^2}[V_0-E]\psi_2(x)=0 \tag{2.42}$$

Nghiệm tổng quát có thể được viết dưới dạng

$$\psi_2(x)=A_2e^{-K_2x}+B_2e^{+K_2x}\ (x\geq 0) \tag{2.43}$$

ở đây

$$K_2=\sqrt{\frac{2m(V_0-E)}{\hbar^2}} \tag{2.44}$$

Hàm sóng ψ_2 phải xác định khi $x\geq 0$. Điều đó cũng có nghĩa là cho dù x tiến đến vô cùng thì ψ_2 cũng phải xác định. Nhưng khi thế $x=\infty$ vào biểu thức của ψ_2 trong (2.43) thì số hạng thứ hai sẽ bằng vô cùng, dẫn đến cả hàm sóng cũng bằng vô cùng. Muốn điều này không xảy ra thì hệ số B_2 phải bằng 0. Hàm sóng lúc này được viết là

$$\psi_2(x)=A_2e^{-K_2x} \tag{2.45}$$

Hàm sóng tại $x=0$ phải liên tục:

$$\psi_1(0)=\psi_2(0) \tag{2.46}$$

Do đó từ phương trình (2.40), (2.45) và (2.46), chúng ta thu được

$$A_1+B_1=A_2 \tag{2.47}$$

Bởi vì hàm thế xác định ở mọi nơi, đạo hàm bậc I của hàm sóng phải liên tục:

$$\left.\frac{\partial\psi_1}{\partial x}\right|_{x=0}=\left.\frac{\partial\psi_2}{\partial x}\right|_{x=0} \tag{2.48}$$

Dùng phương trình (2.40), (2.45) và (2.48), chúng ta thu được

$$jK_1A_1-jK_1B_1=-K_2A_2 \tag{2.49}$$

Chúng ta có thể giải phương trình (2.47) và (2.49) để xác định hệ số B_1 và A_2 theo hệ số sóng tới A_1. Kết quả là

$$B_1 = \frac{-(K_2^2 + 2jK_1K_2 - K_1^2)A_1}{(K_2^2 + K_1^2)} \tag{2.50a}$$

Và

$$A_2 = \frac{2K_1(K_1 - jK_2)A_1}{(K_2^2 + K_1^2)} \tag{2.50b}$$

Hàm mật độ xác suất phản xạ là

$$B_1B_1^* = \frac{(K_2^2 - K_1^2 + 2jK_1K_2)(K_2^2 - K_1^2 - 2jK_1K_2)A_1.A_1^*}{(K_2^2 + K_1^2)^2} \tag{2.51}$$

Chúng ta có thể định nghĩa hệ số phản xạ R là tỉ số của thông lượng phản xạ và thông lượng tới

$$R = \frac{\upsilon_r.B_1.B_1^*}{\upsilon_i.A_1.A_1^*} \tag{2.52}$$

ở đây υ_i và υ_r tương ứng là vận tốc tới và vận tốc phản xạ của hạt. Trong vùng I, *V=0* vì thế *E=T*, ở đây T là động năng của hạt. Động năng được viết là:

$$T=(1/2)m\upsilon^2 \tag{2.53}$$

Vì thế, từ phương trình (2.41) hằng số K_1 có thể được viết là

$$K_1 = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}\left(\frac{1}{2}m\upsilon^2\right)} = \sqrt{m^2\frac{\upsilon^2}{\hbar^2}} = \frac{m\upsilon}{\hbar} \tag{2.54}$$

Do đó, vận tốc tới có thể được viết là

$$\upsilon_i = \frac{\hbar}{m}.K_1 \tag{2.55}$$

Bởi vì hạt phản xạ cũng tồn tại trong vùng I, độ lớn của vận tốc phản xạ là

$$\upsilon_r = \frac{\hbar}{m}.K_1 \tag{2.56}$$

Độ lớn của vận tốc tới và vận tốc phản xạ bằng nhau. Do đó, hệ số phản xạ là

$$R = \frac{\upsilon_r . B_1 . B_1^*}{\upsilon_i . A_1 . A_1^*} = \frac{B_1 . B_1^*}{A_1 . A_1^*} \tag{2.57}$$

Thế những biểu thức từ phương trình (2.51) vào phương trình (2.57),chúng ta thu được

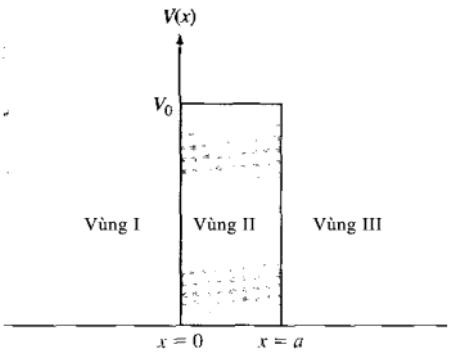
$$R = \frac{B_1 . B_1^*}{A_1 . A_1^*} = \frac{\left(K_2^2 - K_1^2\right)^2 + 4K_1^2 K_2^2}{\left(K_2^2 + K_1^2\right)^2} = 1.0 \tag{2.58}$$

Kết quả R=1 có nghĩa là tất cả những hạt đến hàng rào thế có năng lượng $E<V_0$ cuối cùng đều bị phản xạ. Chúng không được hấp thụ hoặc truyền qua hàng rào thế. Kết quả này hoàn toàn phù hợp với cơ học cổ điển và chúng ta tự hỏi rằng tại sao phải xét vấn đề này theo cơ học lượng tử. Kết quả đáng quan tâm xuất hiện tại vùng II.

Nghiệm trong vùng II được cho bởi phương trình (2.45) là $\psi_2 = A_2 e^{-K_2 x}$. Hệ số A_2 theo phương trình (2.47) là $A_2=A_1+B_1$, hệ thức này được chúng ta rút ra từ điều kiện biên. Đối với trường hợp $E<V_0$, hệ số A_2 khác 0. Nếu A_2 khác 0 thì hàm mật độ xác suất $\psi_2(x).\psi_2(x)^*$ của hạt trong vùng II khác 0. Kết quả này chứng tỏ rằng có một xác suất nào đó để chùm hạt tới xuyên qua hàng rào và tồn tại ở vùng II. Xác suất để hạt xuyên qua hàng rào thế là sự khác nhau cơ bản giữa cơ học cổ điển và cơ học lượng tử: sự xuyên hầm là không được phép theo quan điểm cổ điển. Mặc dù có xác suất để hạt chui qua hàng rào , nhưng hệ số phản xạ trong vùng I bằng 1, cuối cùng hạt trong vùng II sẽ chuyển động lòng vòng và sau đó quay trở về vùng I.

2.3.4 Hàng rào thế

Xét hàng rào thế được biểu diễn trong hình 2.8. Một lần nữa, vấn đề đáng quan tâm hơn là trường hợp năng lượng toàn phần của hạt tới $E<V_0$. Chúng ta lại giả sử rằng chúng ta có một dòng các hạt tới xuất phát từ miềm âm của trục x và di chuyển theo hướng +x. Như trước, chúng ta cần giải phương trình sóng Schrodinger độc lập



Hình 2.8| Hàng rào thế

thời gian trong 3 vùng. Nghiệm của phương trình sóng trong vùng I, II và III tương ứng là:

$$\psi_1(x) = A_1 e^{jK_1 x} + B_1 e^{-jK_1 x} \tag{2.59a}$$

$$\psi_2(x) = A_2 e^{K_2 x} + B_2 e^{-K_2 x} \tag{2.59b}$$

$$\psi_3(x) = A_3 e^{jK_1 x} + B_3 e^{-jK_1 x} \tag{2.59c}$$

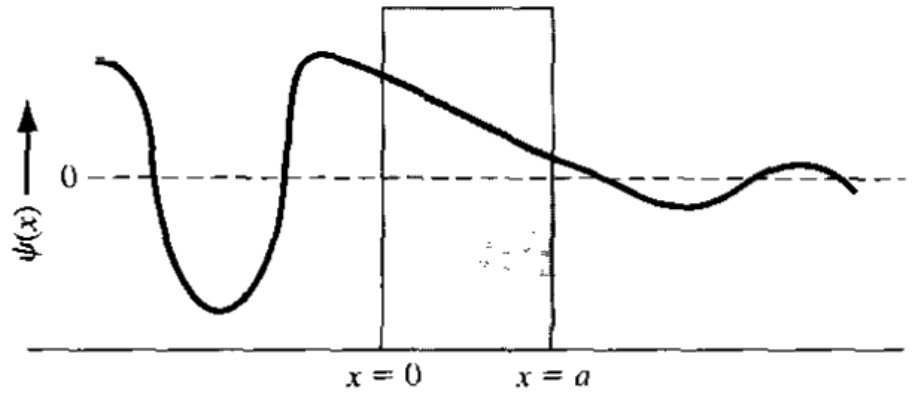
Ở đây

$$K_1 = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \tag{2.60a}$$

Và

$$K_2 = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E)} \tag{2.60b}$$

Hệ số B_3 trong phương trình (2.59c) biểu diễn sóng chạy âm trong vùng III. Tuy nhiên, khi một hạt đi vào trong vùng III, không có sự thay đổi thế năng để gây ra phản xạ; do đó, hệ số B_3 phải bằng 0. Chúng ta phải giữ cả những số hạng lũy thừa trong phương trình (2.59b) bởi vì độ rộng hàng rào thế xác định; nghĩa là không số hạng nào trở thành không liên kết. Chúng ta có 4 điều kiện biên tại x=0 và x=a tương ứng với những hàm sóng và đạo hàm bậc nhất của nó phải liên tục. Chúng ta có thể tìm các hệ số B_1, A_2, B_2 và B_3 theo A_1. Nghiệm trong ba vùng được biểu diễn trong hình 2.9.



Hình 2.9| Hàm sóng qua hàng rào thế

Một thông số đáng quan tâm là hệ số truyền qua được định nghĩa là tỉ số giữa thông lượng được truyền qua trong vùng III với thông lượng tới trong vùng I. Do đó, hệ số truyền qua T là:

$$T = \frac{\upsilon_t . A_3 . A_3^*}{\upsilon_i . A_1 . A_1^*} = \frac{A_3 . A_3^*}{A_1 . A_1^*} \tag{2.61}$$

ở đây υ_t và υ_i là vận tốc của những hạt truyền qua và những hạt tới. Bởi vì thế năng $V=0$ ở cả vùng I và vùng III nên vận tốc tới và vận tốc truyền qua bằng nhau. Hệ số truyền qua có thể được xác định bằng cách cách giải những phương trình điều kiện biên. Đối với trường hợp đặc biệt khi $E<<V_0$, chúng ta tìm được:

$$T \approx 16\left(\frac{E}{V_0}\right)\left(1-\frac{E}{V_0}\right)\exp(-2K_2 a) \tag{2.62}$$

Phương trình (2.62) có nghĩa là có một xác suất nào đó để một hạt xuyên qua hàng rào thế và đi vào trong vùng III. Hiện tượng này được gọi là sự chui hầm và quá mâu thuẫn với cơ học cổ điển. Sau này chúng ta sẽ thấy hiện tương chui hầm lượng tử này sẽ được áp dụng trong vật lí bán dẫn như thế nào, chẳng hạn như diode chui hầm.

Những ứng dụng của phương trình sóng Schrodinger với những hàm thế năng một chiều khác nhau được tìm thấy trong các bài tập cuối chương. Một trong số các hàm thế này biểu diễn cấu trúc giếng lượng tử trong các thiết bị bán dẫn hiện đại.

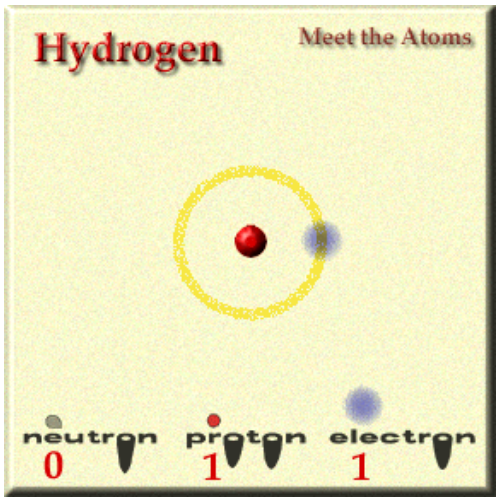
*2.4| MỞ RỘNG LÍ THUYẾT SÓNG CHO NHỮNG NGUYÊN TỬ

Xem video tại:

http://mientayvn.com/Dien%20tu/Sach/Vat%20li%20dien%20tu%20va%20ban%20dan/Chuong%20II/24.html

Ở trên, chúng ta đã xét một vài hàm thế năng một chiều và đã giải phương trình sóng Schrodinger độc lập thời gian để thu được hàm xác suất tìm hạt tại những vị trí khác nhau. Bây giờ xét hàm thế của nguyên tử một electron, hoặc Hydro. Chúng ta sẽ không đi vào giải bài toán cụ thể mà chỉ ghi nhận và rút ra nhận xét về hàm sóng và các mức năng lượng.

2.4.1 Nguyên tử một electron



Hạt nhân là một proton mang điện dương nặng và electron là một hạt mang điện âm nhẹ. Theo lí thuyết Bohr cổ điển, electron quay xung quanh hạt nhân. Hàm thế do tương tác Coulomb giữa proton và electron là:

$$V(r) = \frac{-e^2}{4\pi\varepsilon_0 r} \qquad (2.63)$$

ở đây e là độ lớn của điện tích đơn vị và ε_0 là hằng số điện môi chân không. Hàm thế này dẫn đến bài toán ba chiều trong hệ tọa độ cầu.

Chúng ta có thể tổng quát hóa phương trình sóng Schrodinger cho trường hợp ba chiều bằng cách viết

$$\nabla^2\psi(r,\theta,\phi) + \frac{2m_0}{\hbar^2}[E - V(r)]\psi(r,\theta,\phi) = 0 \qquad (2.64)$$

ở đây ∇^2 là toán tử Laplace và phải được viết trong hệ tọa độ cầu cho trường hợp này. m_0 là khối lượng nghỉ của electron. Trong hệ tọa độ cầu, phương trình Schrodinger có thể được viết là:

$$\frac{1}{r^2}\cdot\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial\psi}{\partial r}\right)+\frac{1}{r^2\sin^2\theta}\cdot\frac{\partial^2\psi}{\partial\phi^2}+\frac{1}{r^2\sin\theta}\cdot\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial\psi}{\partial\theta}\right)+\frac{2m_0}{\hbar^2}[E-V(r)]\psi=0 \qquad (2.65)$$

Nghiệm của phương trình (2.65) có thể được xác định bằng phương pháp tách biến. Chúng ta có thể giả sử rằng nghiệm của phương trình sóng độc lập thời gian có thể được viết dưới dạng:

$$\psi(r,\theta,\phi)=R(r).\Theta(\theta)\Phi(\phi) \qquad (2.66)$$

ở đây R, Θ và Φ là hàm theo r, θ và ϕ. Thế dạng này của nghiệm vào phương trình (2.65), chúng ta sẽ thu được

$$\frac{\sin^2\theta}{R}\cdot\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial R}{\partial r}\right)+\frac{1}{\Phi}\cdot\frac{\partial^2\Phi}{\partial\phi^2}+\frac{\sin\theta}{\Theta}\cdot\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\cdot\frac{\partial\Theta}{\partial\theta}\right)+r^2\sin^2\theta\cdot\frac{2m_0}{\hbar^2}(E-V)=0 \qquad (2.67)$$

Chúng ta thấy rằng số hạng thứ 2 trong phương trình (2.67) là hàm chỉ phụ thuộc vào ϕ, trong khi tất cả các hệ số khác là hàm phụ thuộc vào r và θ. Do đó, chúng ta có thể viết

$$\frac{1}{\Phi}\frac{\partial^2\Phi}{\partial\phi^2}=-m^2 \qquad (2.68)$$

ở đây m là hằng số tách biến. Nghiệm của phương trình (2.68) có dạng

$$\Phi=e^{im\phi} \qquad (2.69)$$

Bởi vì hàm sóng phải đơn trị nên *m* phải là số nguyên, hoặc

$$m=0,\pm1,\pm2,\pm3..... \qquad (2.70)$$

Hợp nhất hằng số tách biến, chúng ta có thể tách thêm những biến θ và *r* và tạo ra thêm hai hằng số tách biến *l* và *n*. Những hằng số tách biến *n, l, m* được gọi là những số lượng tử và mối liên hệ giữa chúng là

n= 1, 2, 3,…..

l= n–1, n–2, n–3, ….,0 **(2.71)**

m= –l,…,0,…..+l

Ví dụ: n=1; l=0; m=0

n=2; l=0,1; m=0 (đối với l=0), m=–1, 0, +1 (đối với l=1)

n=3; l=0, 1, 2; m=0 (đối với l=0), m=–1, 0, 1 (đối với l=1), m=–2, –1, 0, 1, 2 (đối với l=2)

…….……

Mỗi tập hợp các số lượng tử tương ứng với một trạng thái lượng tử mà electron có thể chiếm.

Năng lượng electron có thể viết dưới dạng

$$E_n = \frac{-m_0 e^4}{(4\pi\varepsilon_0)^2 2\hbar^2 n^2} \qquad (2.72)$$

ở đây *n* là số lượng tử. Năng lượng âm nghĩa là electron liên kết với hạt nhân và chúng ta lại thấy rằng năng lượng của electron liên kết bị lượng tử hóa. Nếu năng lượng trở thành dương thì electron sẽ không còn là hạt liên kết và năng lượng toàn phần của nó sẽ không còn bị lượng tử hóa. Bởi vì tham số *n* trong phương trình (2.72) là số nguyên, nên năng lượng toàn phần của electron chỉ có thể nhận những giá trị rời rạc. Năng lượng bị lượng tử hóa một lần nữa chính là kết quả của hạt liên kết trong một vùng không gian xác định.

Nghiệm của phương trình sóng có thể được kí hiệu là ψ_{nlm}, ở đây *n,l,m* là những số lượng tử khác nhau. Đối với trạng thái năng lượng thấp nhất , *n=1, l=0* và *m=0*, và hàm sóng là:

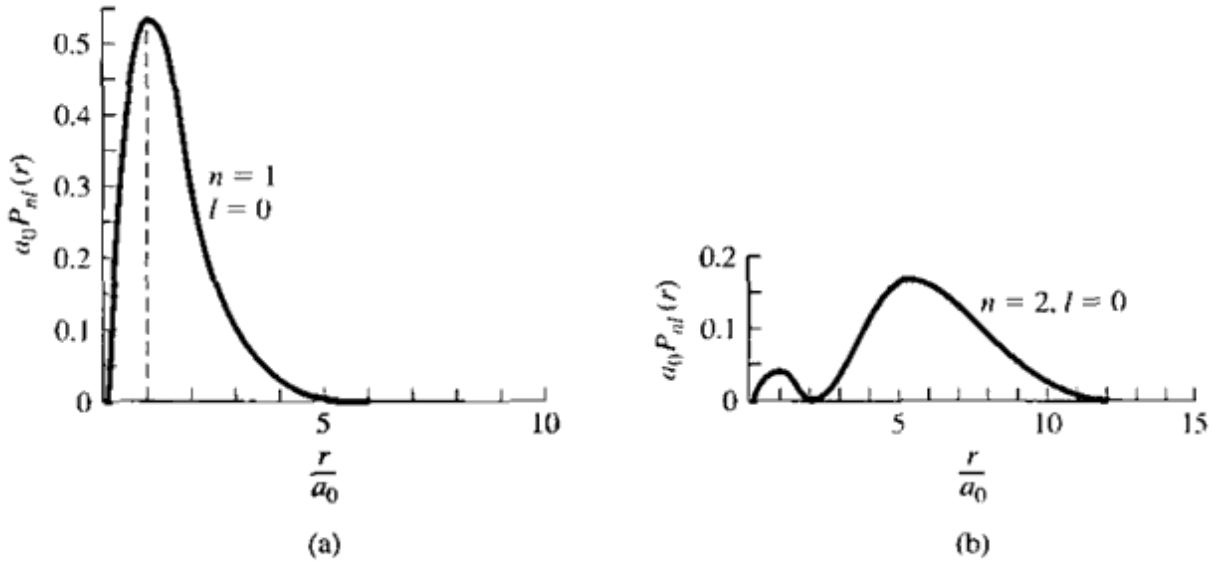
$$\psi_{100} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \cdot \left(\frac{1}{a_0}\right)^{3/2} e^{-r/a_0} \qquad (2.73)$$

Hàm này đối xứng cầu, trong đó

$$a_0 = \frac{4\pi\varepsilon_0\hbar^2}{m_0 e^2} = 0.529\,\overset{0}{A} \qquad (2.74)$$

Và bằng bán kính Bohr.

Hàm mật độ xác suất theo r, hoặc xác suất tìm thấy electron tại một khoảng nào đó từ hạt nhân tỉ lệ với tích $\psi_{100}.\psi^*_{100}$ và với thể tích vi phân của vỏ xung quanh hạt nhân. Hàm mật độ xác suất đối với trạng thái năng lượng thấp nhất được vẽ trong hình 2.10a. Khoảng cách có xác suất lớn nhất từ hạt nhân là tại $r=a_0$. Điều này giống với lí thuyết Bohr. Xét hàm xác suất đối xứng cầu này, bây giờ chúng ta có thể hình thành khái niệm đám mây electron, hoặc những mức năng lượng bao quanh hạt nhân thay vì những quỹ đạo rời rạc của hạt quanh hạt nhân.



Hình 2.10| Hàm mật độ xác suất theo r của nguyên tử một electron trong (a) trạng thái năng lượng thấp nhất (b) trạng thái năng lượng cao hơn kế tiếp

Hàm mật độ xác suất theo r của hàm sóng đối xứng cầu cao hơn tiếp theo tương ứng với *n=2*, *l=0* và *m=0* được biểu diễn trong hình 2.10b. Hình này biểu diễn ý tưởng về những mức năng lượng cao hơn tiếp theo của electron. Mức năng lượng thứ hai ở tại bán kính tính từ hạt nhân lớn hơn mức năng lượng thứ nhất. Như được chỉ ra trong hình, mặc dù vẫn còn một xác suất nhỏ để electron tồn tại ở những bán kính nhỏ hơn. Đối với trường hợp *n=2* và *l=1* có 3 trạng thái khả dĩ tương ứng với 3 giá trị được phép của số lượng tử m. Những hàm sóng này không còn đối xứng cầu nữa.

Hãy xem ở trạng thái n=3, l=1, m=0, electron trong nguyên tử hidro chuyển động như thế nào

Hãy xem ở trạng thái n=3, l=1, m=1, electron trong nguyên tử hidro chuyển động như thế nào

Mặc dù chúng ta đã không đi sâu vào những chi tiết toán học của bài toán nguyên tử một electron nhưng ba kết quả sau đây là quan trọng và được dùng trong phân tích vật liệu bán dẫn. **Thứ nhất** là nghiệm của phương trình sóng Schrodinger một lần nữa mang đến hàm phân bố electron như nó được giải với những hàm thế đơn giản hơn. Trong quá trình xây dựng lí thuyết vật lí bán dẫn trong chương sau, chúng ta cũng sẽ xét hàm phân bố electron. **Kết quả thứ hai** là sự lượng tử hóa những mức năng của electron liên kết. **Thứ ba** là khái niệm về số lượng tử và những trạng thái lượng tử, nó được rút ra từ phương pháp tách biến. Chúng ta sẽ xét lại khái niệm này trong phần tiếp theo và trong những chương sau khi nghiên cứu vật lí bán dẫn.

2.4.2 Bảng tuần hoàn

Phần đầu của bảng tuần hoàn các nguyên tố hóa học có thể được xác định bằng cách dùng kết quả của nguyên tử một electron cùng với 2 khái niệm nữa. **Khái niệm thứ nhất** là spin của electron. Electron có momen động lượng nội tại, hoặc spin. Nó bị lượng tử hóa và có thể nhận một trong hai giá trị khả dĩ. Spin được kí hiệu bởi số lượng tử *s*, nó có giá trị bằng *+1/2* hoặc *–1/2*. Bây giờ chúng ta có bốn số lượng tử cơ bản là *n,l,m* và *s*.

Khái niệm thứ hai là nguyên lí loại trừ Pauli. Nguyên lí loại trừ Pauli phát biểu rằng trong bất kì hệ thống nào (nguyên tử, phân tử, hoặc tinh thể), không có 2 electron nào có cùng trạng thái lượng tử. Trong nguyên tử, nguyên lí loại trừ Pauli muốn nói rằng không có hai electron nào có cùng tập hợp các số lượng tử. Chúng ta sẽ thấy rằng nguyên lí loại trừ Pauli cũng là một nhân tố quan trọng trong việc xác định phân bố của electron vào những trạng thái năng lượng có sẵn trong tinh thể.

Bảng 2.1 biểu diễn vài nguyên tử đầu tiên của bảng tuần hoàn. Với nguyên tử thứ nhất, Hidro, chúng ta có một electron ở trạng thái năng lượng thấp nhất ứng với *n=1*. Từ phương trình (2.71) cả hai số lượng tử l và m phải bằng 0. Tuy nhiên,

electron có thể nhận giá trị spin là *+1/2* hoặc *–1/2*. Đối với Heli, hai electron có thể tồn tại ở mức năng lượng thấp nhất. Đối với trường hợp này *l=m=0*, vì vậy bây giờ cả hai trạng thái spin của electron bị chiếm và mức năng lượng thấp nhất đầy. Hoạt động hóa học của một nguyên tố được xác định chủ yếu dựa vào các electron hóa trị hoặc các electron ngoài cùng. Bởi vì mức năng lượng hóa trị của He đầy nên nó sẽ không tương tác với các nguyên tố khác và là nguyên tố khí trơ.

Nguyên tố thứ 3 Li có 3 electron. Electron thứ 3 phải được sắp vào trong mức năng lượng thứ 2 tương ứng với n=2, số lượng tử l có thể là 0 hoặc 1, và khi l=1, số lượng tử m có thể là –1,0,+1. Trong mỗi trường hợp, spin của electron có thể là +1/2 hoặc –1/2. Do đó, đối với n=2 có 8 trạng thái lượng tử khả dĩ. Neon có 10 electron. Hai electron ở mức n=1 và 8 electron ở mức n=2. Bây giờ mức năng lượng thứ hai đầy, có nghĩa là Neon cũng là nguyên tử khí trơ.

Từ nghiệm của phương trình sóng schrodinger cho nguyên tử một electron, cộng với khái niệm về spin của electron và nguyên lí loại trừ Pauli, chúng ta có thể xây dựng nên bảng tuần hoàn các nguyên tố. Khi số nguyên tử của nguyên tố tăng, những electron sẽ bắt đầu tương tác với nhau vì thế việc xây dựng bảng tuần hoàn sẽ hơi khác chút ít so với phương pháp trình bày ở đây.

Bảng 2.1| Phần đầu của bảng tuần hoàn

Nguyên tố	Kí hiệu	n	l	m	s
H	$1s^1$	1	0	0	$+\frac{1}{2}$ or $-\frac{1}{2}$
He	$1s^2$	1	0	0	$+\frac{1}{2}$ and $-\frac{1}{2}$
Li	$1s^2 2s^1$	2	0	0	$+\frac{1}{2}$ or $-\frac{1}{2}$
Be	$1s^2 2s^2$	2	0	0	$+\frac{1}{2}$ and $-\frac{1}{2}$
Bo	$1s^2 2s^2 2p^1$	2	1		
C	$1s^2 2s^2 2p^2$	2	1		
N	$1s^2 2s^2 2p^3$	2	1		$m = 0, -1, +1$
O	$1s^2 2s^2 2p^4$	2	1		$s = +\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$
F	$1s^2 2s^2 2p^5$	2	1		
Ne	$1s^2 2s^2 2p^6$	2	1		

Video sau đây sẽ mô tả sự phân bố electron vào các mức năng lượng:

CHƯƠNG III

Giới Thiệu Lí Thuyết Lượng Tử Của Chất Rắn

TỔNG QUAN

Trong chương trước, chúng ta đã áp dụng cơ học lượng tử và phương trình sóng Schrodinger để xác định đặc tính chuyển động của electron trong các dạng thế năng khác nhau. Chúng ta nhận thấy một tính chất quan trọng của electron trong nguyên tử hoặc trong tinh thể là electron chỉ có thể nhận những giá trị năng lượng rời rạc; nghĩa là năng lượng bị lượng tử hóa. Chúng ta cũng đã thảo luận nguyên lí loại trừ Pauli, nó phát biểu rằng trong nguyên tử không thể có hai electron có cùng 4 số lượng tử. Trong chương này, chúng ta sẽ tổng quát hóa những kết quả này cho những electron trong mạng tinh thể.

Một trong những mục tiêu của chúng ta là xác định tính chất điện của vật liệu bán dẫn, chúng ta sẽ dùng nó để xây dựng đặc tính Vôn-Ampe của thiết bị bán dẫn. Để hướng tới mục tiêu này, chúng ta có 2 nhiệm vụ trong chương này: xác định tính chất của electron trong mạng tinh thể và xác định tính chất thống kê của một số lượng lớn những electron trong mạng tinh thể.

Để bắt đầu, chúng ta sẽ mở rộng khái niệm những mức năng lượng rời rạc của từng electron sang vùng năng lượng trong chất rắn đơn tinh thể. Đầu tiên chúng ta sẽ thảo luận định tính về khả năng xuất hiện vùng năng lượng trong tinh thể, và sau đó sẽ xây dựng mô hình toán học chặt chẽ hơn của lí thuyết này dùng phương trình sóng Schrodinger. Lí thuyết vùng năng lượng này là nguyên lí cơ bản của vật lí bán dẫn và cũng có thể được dùng để giải thích sự khác nhau về tính chất điện giữa kim loại, bán dẫn và điện môi.

Bởi vì dòng điện trong chất rắn phụ thuộc vào dòng chảy toàn phần của các điện tích, do đó việc xác định đáp ứng của một electron trong tinh thể với trường ngoài cũng rất quan trọng, chẳng hạn như trường điện. Sự chuyển động của electron trong mạng tinh thể khác với trong không gian tự do. Chúng ta sẽ xây dựng khái niệm cho phép thiết lập mối quan hệ giữa những biểu thức mô tả trạng thái lượng tử của electron trong mạng tinh thể với những biểu thức mô tả trạng thái cổ điển của nó. Việc phân tích này sẽ dẫn đến một tham số được gọi là khối lượng hiệu dụng. Chúng ta cũng sẽ thấy rằng chúng ta có thể định nghĩa một loại hạt mới

trong bán dẫn được gọi là lỗ trống. Chuyển động của cả electron và lỗ trống đều làm nảy sinh dòng điện trong bán dẫn.

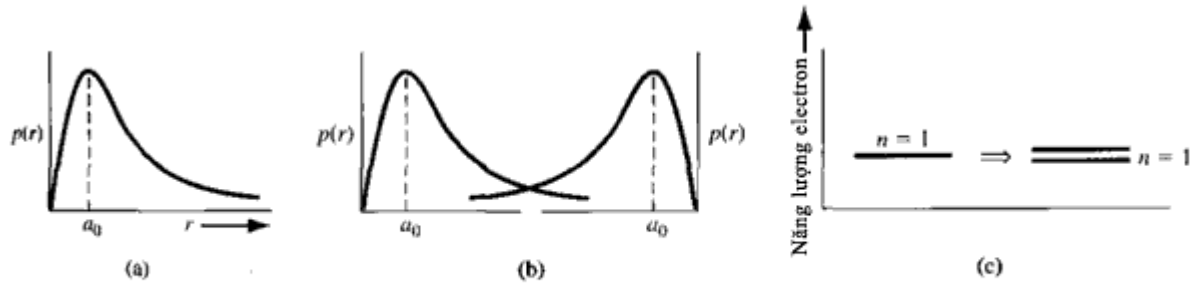
Bởi vì số lượng electron trong bán dẫn rất lớn nên chúng ta không thể theo dõi chuyển động của từng hạt riêng biệt. Chúng ta sẽ nghiên cứu chuyển động của tập hợp electron bằng phương pháp thống kê. Chú ý rằng nguyên lý loại trừ Pauli sẽ giúp chúng ta xác định những định luật thống kê mà tập hợp các electron phải tuân theo. Hàm phân bố sẽ xác định sự phân bố của những electron vào những trạng thái năng lượng đã có. Lí thuyết vùng năng lượng và hàm phân bố sẽ được dùng rộng rãi trong chương tiếp theo khi chúng ta xây dựng lí thuyết bán dẫn ở trạng thái cân bằng.

3.1|VÙNG NĂNG LƯỢNG VÀ VÙNG CẤM

Trong chương trước, chúng ta đã khảo sát nguyên tử Hydro một electron. Việc phân tích này chứng tỏ rằng năng lượng của electron liên kết bị lượng tử hóa: Chỉ những giá trị năng lượng rời rạc của electron mới được phép. Mật độ xác suất theo r của electron cũng được xác định. Hàm này cho biết xác suất tìm thấy electron tại một khoảng cách nào đó từ hạt nhân và chứng tỏ rằng electron không có quỹ đạo xác định. Chúng ta có thể mở rộng những kết quả từ nguyên tử đơn giản này sang tinh thể và rút ra một cách định tính khái niệm về vùng năng lượng và vùng cấm. Sau đó, chúng ta có thể áp dụng cơ học lượng tử và phương trình sóng Schrodinger cho bài toán một electron trong tinh thể. Chúng ta sẽ nhận thấy rằng sơ đồ vùng năng lượng trong tinh thể bao gồm những vùng năng lượng bị chia tách bởi những khe năng lượng.

3.1.1 Sự hình thành vùng năng lượng

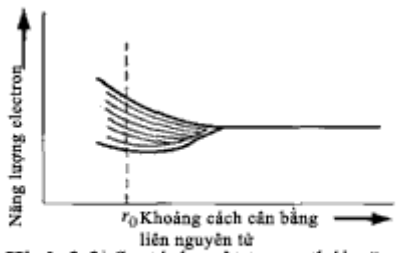
Hình 3.1a biểu diễn hàm mật độ xác suất theo r của electron khi nó ở trạng thái năng lượng thấp nhất trong nguyên tử hidro, và hình 3.1b biểu diễn đường cong xác suất khi hai nguyên tử được mang đến gần nhau. Hàm sóng của những eletron này xen phủ nhau, điều này có nghĩa là hai electron sẽ tương tác. Sự tương tác hoặc nhiễu loạn này sẽ tách một mức năng lượng thành hai mức năng lượng và



Hình 3.1| (a) Hàm mật độ xác suất của nguyên tử hidro cô lập. (b) Các hàm mật độ xác suất của hai nguyên tử hidro cạnh nhau xen phủ nhau. (c) Sự tách trạng thái n=1

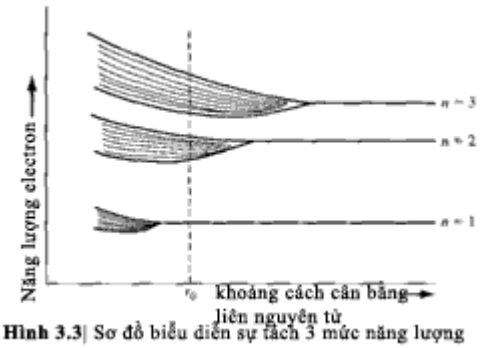
được biểu diễn trong hình 3.1c. Sự tách một trạng thái thành hai trạng thái rời rạc phù hợp với nguyên lí loại trừ Pauli.

Bây giờ giả sử chúng ta có những nguyên tử hidro ở rất xa nhau. Nếu bằng cách nào đó chúng ta đẩy những nguyên tử này lại với nhau thì những mức năng lượng bị lượng tử hóa ban đầu sẽ tách thành một vùng các mức năng lượng rời rạc. Hiện tượng này được biểu diễn trong hình 3.2, ở đây r_0 biểu diễn khoảng cách cân bằng liên nguyên tử trong tinh thể. Tại khoảng cách cân bằng liên nguyên tử có một vùng năng lượng và trong vùng này chứa rất nhiều mức năng lượng sát nhau. Nguyên lí loại trừ Pauli phát biểu rằng sự hợp lại của những nguyên tử để hình thành hệ thống tinh thể không làm biến đổi tổng số trạng thái lượng tử bất kể kích thước của nó. Tuy nhiên, bởi vì không thể có hai electron nào có cùng các số lượng tử nên mức năng lượng rời rạc phải tách thành vùng năng lượng để cho mỗi electron chiếm một trạng thái lượng tử riêng biệt.



Hình 3.2| Sự tách một trạng thái năng lượng thành một vùng năng lượng

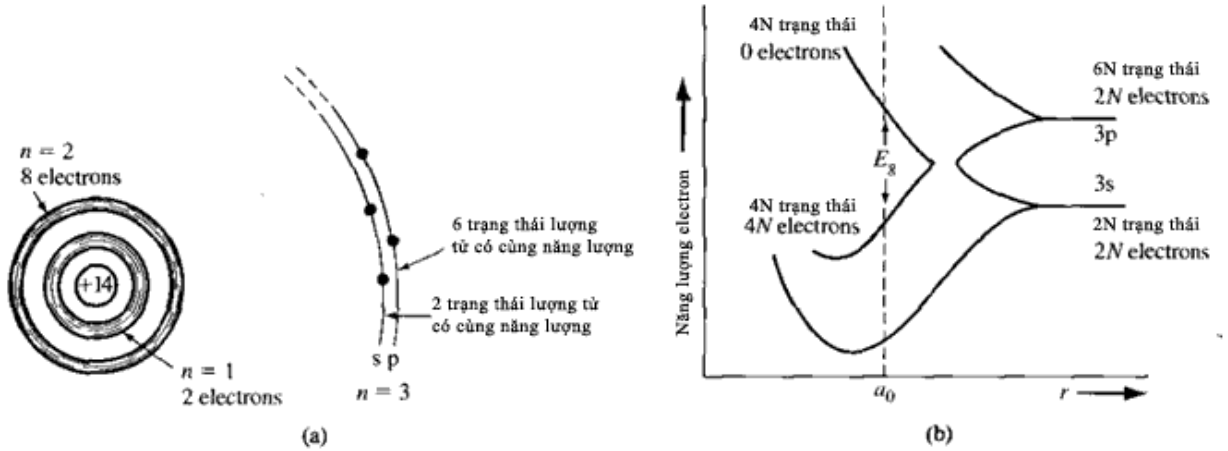
Chúng ta đã thấy từ trước rằng, số trạng thái lượng tử ở mỗi mức năng lượng tương đối nhỏ. Do đó, để có chỗ cho tất cả các electron trong tinh thể, chúng ta phải có nhiều mức năng lượng trong vùng năng lượng. Chẳng hạn xét một ví dụ: giả sử rằng chúng ta có một hệ với 10^{19} nguyên tử một electron và cũng giả sử rằng tại khoảng cách cân bằng liên nguyên tử, độ rộng của vùng năng lượng là 1eV. Để cho đơn giản, chúng ta giả thiết rằng mỗi electron trong hệ chiếm một mức năng lượng và, nếu những trạng thái năng lượng cách đều nhau thì mỗi mức năng lượng cách nhau là 10^{-19} eV. Sự chênh lệch năng lượng này khá nhỏ, vì vậy trong thực tế, chúng ta có thể xem như vùng năng lượng gần như liên tục.



Hình 3.3| Sơ đồ biểu diễn sự tách 3 mức năng lượng thành các vùng năng lượng

Một lần nữa xét sự tuần hoàn đều đặn của những nguyên tử, trong đó mỗi nguyên tử chứa nhiều hơn một electron. Giả sử nguyên tử trong tinh thể tưởng tượng này chứa đến 3 mức năng lượng (n=1, 2, 3). Nếu những nguyên tử ban đầu ở rất xa nhau, những electron của những nguyên tử kề nhau sẽ không tương tác và sẽ chiếm những mức năng lượng rời rạc. Nếu những nguyên tử này được mang đến gần nhau, những electron trong lớp ngoài cùng n=3 sẽ bắt đầu tương tác trước, vì thế mức năng lượng rời rạc này sẽ tách thành vùng năng lượng. Nếu những nguyên tử tiếp tục di chuyển đến gần nhau, những electron trong lớp n=2 cũng sẽ bắt đầu tương tác và sẽ tách thành vùng năng lượng. Cuối cùng, nếu những nguyên tử đến đủ gần nhau những electron của lớp trong cùng n=1 cũng có thể tương tác, vì vậy mức năng lượng này cũng có thể tách thành vùng năng lượng. Sự tách những mức năng lượng rời rạc này được biểu diễn định tính trong hình 3.3. Nếu khoảng cách cân bằng liên nguyên tử là r_0, chúng ta có những vùng năng lượng bị chia tách bởi những khe năng lượng hay vùng cấm. Sự tách vùng năng lượng này và sự hình thành vùng cấm là lí thuyết vùng năng lượng của vật liệu đơn tinh thể.

Sự tách vùng thực sự trong tinh thể phức tạp hơn. Sự phân bố electron của nguyên tử silic được biểu diễn trong hình 3.4a. Mười trong số 14 những electron trong nguyên tử chiếm những mức năng lượng nằm sâu bên trong gần hạt nhân. Bốn electron hóa trị còn lại liên kết tương đối yếu và là những electron tham gia vào tương tác hóa học. Hình 3.4b biểu diễn sự tách vùng của Silic. Chúng ta chỉ cần xem xét mức n=3 của những electron hóa trị bởi vì hai mức năng lượng đầu tiên hoàn toàn đầy và liên kết chặt với hạt nhân. Trạng thái 3s tương ứng với n=3 và *l=0* và chứa hai trạng thái lượng tử trên nguyên tử. Trạng thái này sẽ chứa hai electron tại T=0 K. Trạng thái 3p tương ứng với n=3 và *l=1* và chứa 6 trạng thái lượng tử trên nguyên tử. Trạng thái này sẽ chứa hai electron còn lại trong nguyên tử silic.



Hình 3.4| (a) Một nguyên tử Si cô lập. (b) Sự tách những trạng thái 3s và 3p của Si thành những vùng năng lượng và khe năng lượng

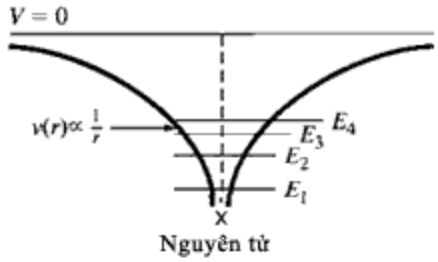
Khi khoảng cách liên nguyên tử giảm, những trạng thái 3s và 3p tương tác và xen phủ. Tại khoảng cách cân bằng liên nguyên tử, những vùng lại bắt đầu tách, nhưng bây giờ 4 trạng thái lượng tử trên nguyên tử trong vùng thấp hơn và bốn trạng thái lượng tử trên nguyên tử ở vùng cao hơn. Ở độ không tuyệt đối, những electron sẽ ở trạng thái năng lượng thấp nhất, vì thế tất cả những trạng thái ở vùng thấp hơn (vùng hóa trị) sẽ đầy và tất cả những trạng thái ở vùng cao hơn (vùng dẫn) sẽ trống. Khe năng lượng E_g giữa đỉnh của vùng hóa trị và đáy vùng dẫn là độ rộng vùng cấm.

Chúng ta đã thảo luận định tính cách thức và lí do tại sao những vùng năng lượng và vùng cấm được hình thành trong tinh thể. Sự hình thành vùng năng lượng này liên quan trực tiếp đến tính chất điện của tinh thể như chúng ta sẽ thấy trong phần sau đây.

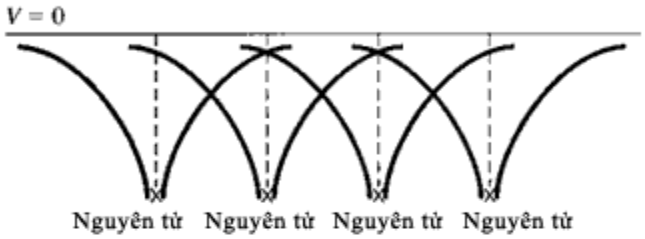
*3.1.2 Mô hình Kronnig-Penney

Trong phần trước, chúng ta đã thảo luận định tính về sự tách các mức năng lượng khi những nguyên tử được mang đến gần nhau để hình thành nên tinh thể. Những khái niệm về vùng năng lượng và vùng cấm có thể được xây dựng chặt chẽ hơn bằng cách áp dụng cơ học lượng tử và phương trình sóng Schrodinger. Người đọc cũng có thể bỏ qua phần suy luận sau, nhưng những kết quả của nó sẽ hình thành nên cơ sở của lí thuyết vùng năng lượng trong bán dẫn.

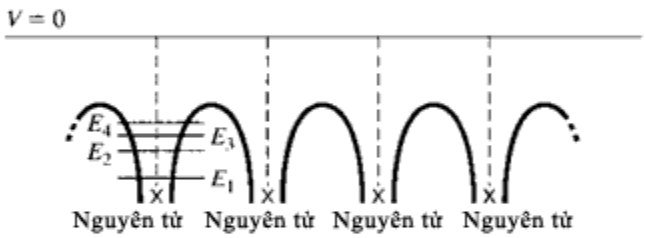
Hàm thế của nguyên tử một electron, không tương tác được biểu diễn trong hình 3.5a. Những mức năng lượng gián đoạn của electron cũng được biểu diễn trong hình. Hình 3.5b biểu diễn dạng hàm thế của các nguyên tử được sắp xếp gần nhau trong mạng một chiều. Hàm thế của những nguyên tử kề nhau xen phủ nhau, và hàm thế tổng cộng trong trường hợp này được biểu diễn trong hình 3.5c. Chúng ta sẽ dùng hàm thế này trong phương trình sóng Schrodinger để mô hình hóa vật liệu đơn tinh thể một chiều.



(a)

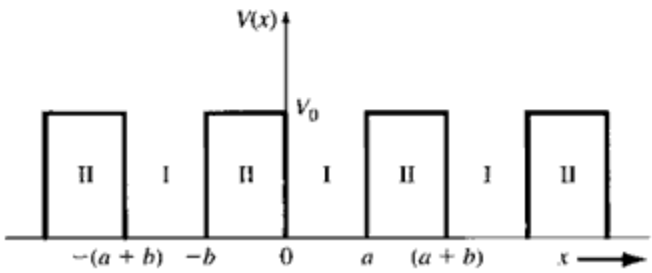


(b)



(c)

Hình 3.5| (a) Hàm thế của một nguyên tử cô lập (b) Sự xen phủ hàm thế của những nguyên tử cạnh nhau. (c) Hàm thế toàn phần của đơn tinh thể một chiều



Hình 3.6| Hàm thế một chiều của mô hình Kronig-Penney

Đối với mạng đơn tinh thể một chiều, việc giải phương trình sóng Schrodinger được làm cho đơn giản hơn bằng cách xét một hàm thế đơn giản hơn. Hình 3.6 là mô hình Kronig-Penney của hàm thế tuần hoàn, nó được dùng để biểu diễn mạng đơn tinh thể một chiều. Chúng ta cần giải phương trình sóng Schrodinger trong mỗi vùng. Như trong một bài tập đã giải trước đây, chúng ta chỉ quan tâm đến những nghiệm trong trường hợp $E<V_0$, tương ứng với một hạt được liên kết trong tinh thể. Những electron được giam cầm trong giếng thế, nhưng chúng vẫn có khả năng xuyên hầm qua giếng. Mô hình Kronig-Penney là biểu diễn thế tuần hoàn lí tưởng hóa của mạng đơn tinh thể một chiều, nhưng kết quả rút ra cũng sẽ minh họa những tính chất quan trọng về chuyển động của electron trong mạng tinh thể tuần hòan.

Để thu được nghiệm của phương trình song Schrodinger, chúng ta phải dùng lí thuyết hàm Bloch. Lí thuyết này phát biểu rằng đối với những bài toán có liên quan đến hàm thế năng biến đổi tuần hoàn, tất cả các hàm sóng một electron phải có dạng

$$\psi(x) = u(x)e^{jkx} \tag{3.1}$$

Tham số *k* được gọi là hằng số chuyển động và sẽ được xem xét chi tiết hơn khi chúng ta xây dựng lí thuyết. Hàm *u(x)* là hàm tuần hoàn với chu kì *(a+b)*.

Chúng ta đã phát biểu trong chương II rằng, nghiệm của phương trình sóng là tích của nghiệm phụ thuộc thời gian và nghiệm không phụ thuộc thời gian, hoặc

$$\psi(x,t) = \psi(x)\phi(t) = u(x)e^{jkx}.e^{-j(E/\hbar)t} \tag{3.2}$$

Nó có thể được viết lại là

$$\psi(x,t) = \psi(x)\phi(t) = u(x)e^{j[kx-(E/\hbar)t]} \tag{3.3}$$

Nghiệm dạng sóng chạy này biểu diễn chuyển động của electron trong vật liệu đơn tinh thể. Biên độ của sóng chạy là hàm tuần hoàn và *k* được gọi là số sóng.

Bây giờ, chúng ta có thể bắt đầu xác định mối quan hệ giữa tham số *k*, năng lượng toàn phần *E* và thế năng V_0. Nếu chúng ta xét vùng I trong hình 3.6 ($0<x<a$) ở đó V(x)=0, lấy đạo hàm bậc II của phương trình (3.1), và thế kết quả này vào

phương trình sóng Schrodinger không phụ thuộc thời gian (2.13), chúng ta sẽ thu được hệ thức sau

$$\frac{d^2u_1(x)}{dx^2} + 2jk\frac{du_1(x)}{dx} - (k^2 - \alpha^2)u_1(x) = 0 \tag{3.4}$$

Hàm $u_1(x)$ là biên độ của hàm sóng trong vùng I và thông số α được định nghĩa là

$$\alpha^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \tag{3.5}$$

Bây giờ xét vùng II, $-b<x<0$, ở đó $V(x)=V_0$, và áp dụng phương trình sóng Schrodinger. Chúng ta thu được hệ thức

$$\frac{d^2u_2(x)}{dx^2} + 2jk\frac{du_2(x)}{dx} - (k^2 - \alpha^2 + \frac{2mV_0}{\hbar^2})u_2(x) = 0 \tag{3.6}$$

ở đây $u_2(x)$ là biên độ của hàm sóng trong vùng II. Chúng ta có thể định nghĩa

$$\frac{2m}{\hbar^2}(E - V_0) = \alpha^2 - \frac{2mV_0}{\hbar^2} = \beta^2 \tag{3.7}$$

Vì thế phương trình (3.6) có thể được viết là

$$\frac{d^2u_2(x)}{dx^2} + 2jk\frac{du_2(x)}{dx} - (k^2 - \beta^2)u_2(x) = 0 \tag{3.8}$$

Chú ý rằng từ phương trình (3.7), nếu $E>V_0$ thì tham số β là thực, ngược lại nếu $E<V_0$ thì β ảo.

Nghiệm của phương trình (3.4) trong vùng I có dạng

$$u_1(x) = Ae^{j(\alpha-k)x} + Be^{-j(\alpha+k)x} \text{ khi } 0<x<a \tag{3.9}$$

Và nghiệm của phương trình (3.8) trong vùng II có dạng

$$u_2(x) = Ce^{j(\beta-k)x} + De^{-j(\beta+k)x} \text{ khi } -b<x<0 \tag{3.10}$$

Bởi vì thế năng xác định ở mọi nơi, cả hàm sóng $\psi(x)$ và đạo hàm bậc nhất của nó phải liên tục. Điều kiện liên tục này dẫn đến hàm biên độ sóng $u(x)$ và đạo hàm bậc nhất của nó cũng phải liên tục.

Nếu chúng ta xét biên tại $x=0$ và áp dụng điều kiện liên tục cho biên độ sóng, chúng ta có

$$u_1(0)=u_2(0) \tag{3.11}$$

Thế phương trình (3.9) và (3.10) vào phương trình (3.11), chúng ta thu được

$$A+B-C-D=0 \tag{3.12}$$

Bây giờ áp dụng điều kiện

$$\left.\frac{du_1}{dx}\right|_{x=0} = \left.\frac{du_2}{dx}\right|_{x=0} \tag{3.13}$$

Chúng ta thu được

$$(\alpha - k)A - (\alpha + k)B - (\beta-k)C + (\beta + k)D = 0 \tag{3.14}$$

Chúng ta đã xem xét vùng I với $0<x<a$ và vùng II với $-b<x<0$. Điều kiện tuần hoàn và liên tục có nghĩa là hàm u_1 khi $x \to a$ bằng với hàm u_2 khi $x \to -b$. Điều kiện này có thể được viết là

$$u_1(a)=u_2(-b) \tag{3.15}$$

Thế $u_1(x)$ và $u_2(x)$ vào phương trình (3.15) thu được:

$$Ae^{j(\alpha-k)a} + Be^{-j(\alpha+k)a} - Ce^{-j(\beta-k)b} - De^{j(\beta+k)b}=0 \tag{3.16}$$

Cuối cùng điều kiện biên là

$$\left.\frac{du_1}{dx}\right|_{x=a} = \left.\frac{du_2}{dx}\right|_{x=-b} \tag{3.17}$$

Ta được:

$$(\alpha-k)Ae^{j(\alpha-k)a}-(\alpha+k)Be^{-j(\alpha+k)a}-(\beta-k)Ce^{-j(\beta-k)b}+(\beta+k)De^{j(\beta+k)b}=0 \tag{3.18}$$

Bây giờ chúng ta có 4 phương trình thuần nhất, phương trình (3.12), (3.14), (3.16), và (3.18), với 4 biến là kết quả của việc áp dụng 4 điều kiện biên. Tập hợp những phương trình đồng nhất, tuyến tính có nghiệm không tầm thường nếu, và chỉ nếu định thức của hệ số bằng 0. Trong trường hợp của chúng ta, hệ số ở đây là hệ số của A, B, C, và D.

Việc tính toán định thức này không khó nhưng đòi hỏi phải thực hiện nhiều phép toán và sẽ không được xem xét chi tiết ở đây. Kết quả là

$$\frac{-(\alpha^2+\beta^2)}{2\alpha\beta}(\sin\alpha a)(\sin\beta b)+(\cos\alpha a)(\cos\beta b)=\cos k(a+b) \tag{3.19}$$

Phương trình (3.19) thiết lập mối quan hệ giữa tham số *k* với năng lượng toàn phần *E* (qua tham số α) và hàm thế V_0 (qua tham số *β*).

Như đã đề cập, chúng ta chỉ quan tâm đến những nghiệm xuất hiện trong trường hợp $E < V_0$, đó là năng lượng của electron liên kết trong tinh thể. Từ phương trình (3.7), suy ra tham số β là đại lượng ảo. Chúng ta có thể định nghĩa

$$\beta = j\gamma \tag{3.20}$$

ở đây γ là đại lượng thực. Phương trình (3.19) có thể được viết theo γ là

$$\frac{(\gamma^2-\alpha^2)}{2\alpha\gamma}(\sin\alpha a)(\sin\gamma b)+(\cos\alpha a)(\cos\gamma b)=\cos k(a+b) \tag{3.21}$$

Phương trình (3.21) không thể giải bằng phương pháp giải tích thông thường mà phải giải bằng phương pháp số và phương pháp đồ thị để thu được hệ thức giữa *k*, *E*, và V_0. Nghiệm của phương trình sóng Schrodinger đối với trường hợp một hạt liên kết cho ra những mức năng lượng rời rạc. Nghiệm của phương trình (3.21) sẽ cho ra một vùng năng lượng.

Để thu được phương trình dễ giải hơn bằng phương pháp đồ thị và do đó sẽ minh họa được bản chất của kết quả, hãy cho độ rộng hàng rào thế $b \to 0$ và chiều cao hàng rào $V_0 \to \infty$ nhưng sao cho tích bV_0 vẫn còn xác định. Phương trình (3.21) có thể rút lại là

$$\left(\frac{mV_0ba}{\hbar^2}\right)\frac{\sin\alpha a}{\alpha a}+\cos\alpha a=\cos ka \tag{3.22}$$

Chúng ta có thể định nghĩa tham số

$$P'=\frac{mV_0ba}{\hbar^2} \tag{3.23}$$

Cuối cùng, chúng ta có hệ thức

$$P'\frac{\sin\alpha a}{\alpha a}+\cos\alpha a=\cos ka \tag{3.24}$$

Phương trình (3.24) một lần nữa cho chúng ta mối quan hệ giữa tham số k, năng lượng toàn phần E (qua tham số α), và hàng rào thế bV_0. Chúng ta có thể rút ra rằng phương trình (3.24) không phải là nghiệm của phương trình sóng Schrodinger mà là điều kiện để phương trình sóng Schrodinger có nghiệm. Nếu chúng ta giả sử rằng tinh thể có độ rộng vô hạn thì k trong phương trình (3.24) có thể nhận một khoảng các giá trị thực.

3.1.3 Giản đồ không gian k

Để hiểu bản chất của nghiệm, đầu tiên hãy xem xét trường hợp đặc biệt khi $V_0 \to 0$. Trong trường hợp này $P'=0$ tương ứng với hạt tự do bởi vì không có hàng rào thế năng. Từ phương trình (3.24), chúng ta có

$$cos\alpha a = cos ka \tag{3.25}$$

Hoặc $\alpha = k$ (3.26)

Bởi vì thế năng bằng 0, năng lượng toàn phần E sẽ bằng động năng, vì thế, từ phương trình (3.5), phương trình (3.26) có thể được viết là

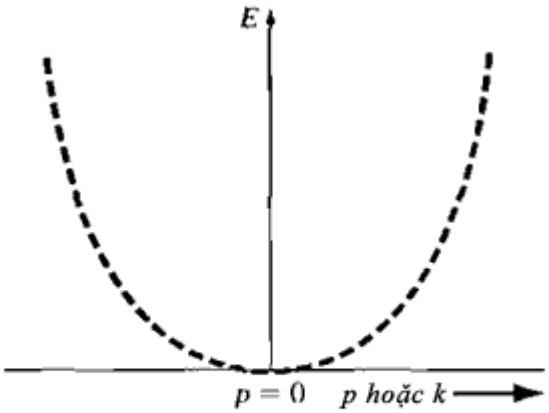
$$\alpha=\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}=\sqrt{\frac{2m\left(\frac{1}{2}m\upsilon^2\right)}{\hbar^2}}=\frac{p}{\hbar}=k \tag{3.27}$$

ở đây p là động lượng của hạt. Như vậy, đối với electron tự do, hằng số chuyển động k có liên hệ với động lượng của hạt. Tham số k còn được gọi là số sóng.

Chúng ta cũng có thể thiết lập mối quan hệ giữa năng lượng và động lượng là

$$E=\frac{p^2}{2m}=\frac{\hbar^2k^2}{2m} \tag{3.28}$$

Hình 3.7 là đồ thị biểu diễn mối quan hệ giữa năng lượng E và động lượng p của hạt tự do. Bởi vì động lượng và số sóng có liên hệ tuyến tính, hình 3.7 cũng là đường cong biểu diễn E theo k của hạt tự do.

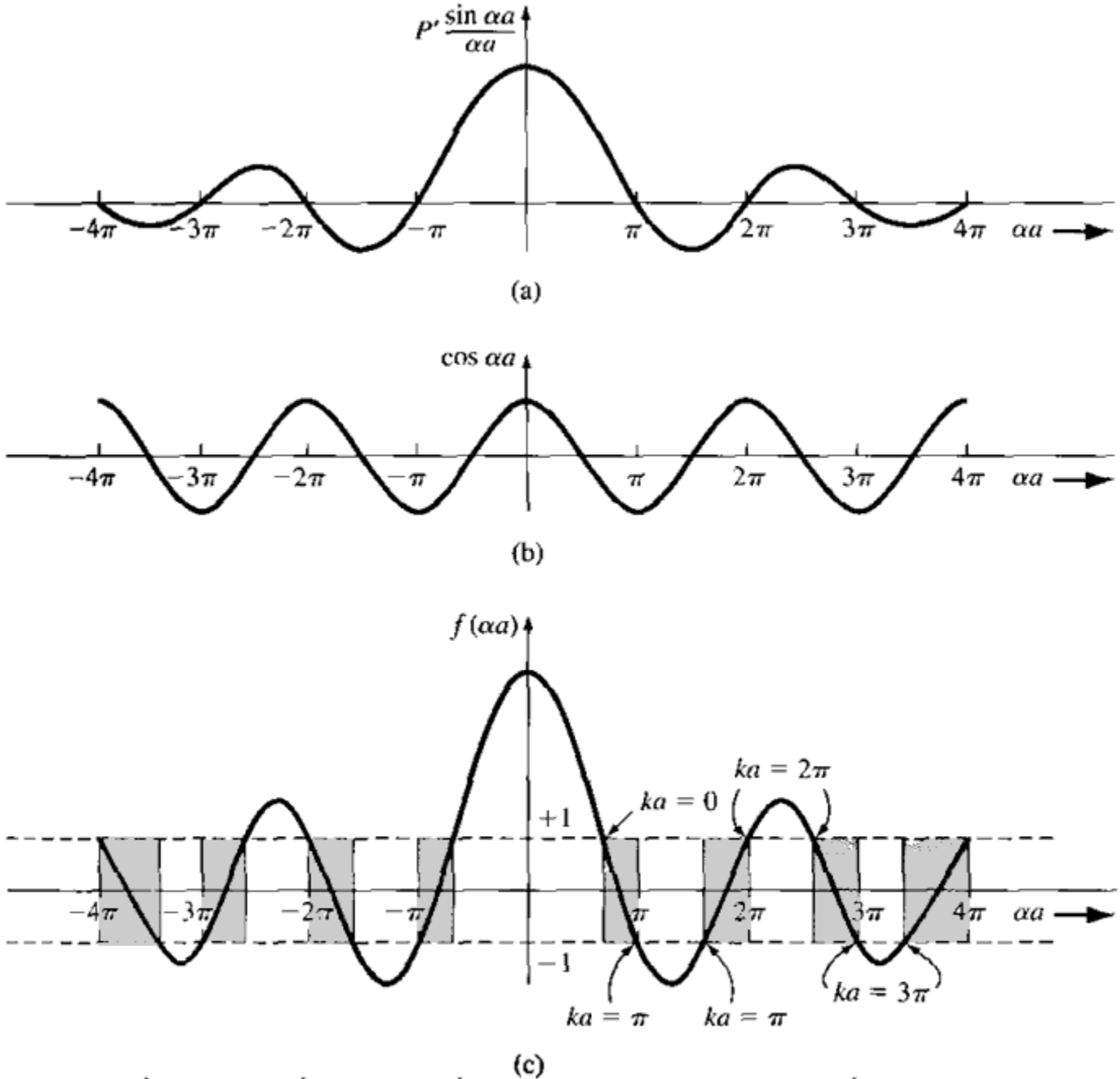


Hình 3.7| Đường cong E theo k dạng parabon của electron tự do

Bây giờ chúng ta muốn xem xét mối quan hệ giữa *E* và *k* từ phương trình (3.24) cho hạt trong mạng đơn tinh thể. Khi tham số P' tăng, hạt trở nên liên kết chặt hơn với giếng thế hoặc nguyên tử. Chúng ta có thể định nghĩa vế trái của phương trình (3.24) là hàm *f(αa)*, sao cho

$$f(\alpha a) = P'\frac{\sin\alpha a}{\alpha a} + \cos\alpha a \tag{3.29}$$

Hình 3.8a là số hạng đầu tiên của phương trình (3.29) theo αa. Hình 3.8b biểu diễn đồ thị của số hạng cosαa và hình 3.8c là tổng của 2 số hạng, hoặc *f(αa)*.



Hình 3.8| Đồ thị của (a)Số hạng thứ nhất trong phương trình (3.29), (b) Số hạng thứ hai trong phương trình (3.29), và (c) Toàn bộ hàm $f(\alpha a)$. Vùng tô sậm biểu diễn những giá trị được phép của (αa) tương ứng với những giá trị thực của k.

Từ phương trình (3.24), chúng ta cũng có

$$f(\alpha a)=\cos ka \qquad (3.30)$$

Để phương trình (3.30) có nghĩa, những giá trị được phép của *f(αa)* phải ở giữa +1 và –1. Hình 3.8c biểu diễn những giá trị được phép của αa trong vùng tô sậm. Hình vẽ này cũng chỉ ra giá trị của *ka* ở vế phải của phương trình (3.30) tương ứng với những giá trị được phép của *f(αa)*.

Bây giờ, chúng ta sẽ tìm hàm số biểu diễn mối quan hệ giữa *E* và *k*, sau đó vẽ đồ thị của nó. Chúng ta sẽ xét trường hợp P' đủ lớn, tức là khi điện tử liên kết mạnh với ô mạng tinh thể nhưng chúng vẫn còn có thể chuyển từ chỗ này đến chỗ khác trong mạng. Trong trường hợp này miền giá trị của *αa* là một khoảng rất hẹp tiếp cận với nπ về phía trái. Ta có thể viết:

$\alpha a = n\pi + \delta$

Ở đây |δ|<<1 và n=1, 2, 3,…Khi đó

$\sin\alpha a = \sin(n\pi+\delta) = \sin n\pi\cos\delta + \cos n\pi\sin\delta = (-1)^n\sin\delta \approx (-1)^n\delta,$

vì *δ* nhỏ nên $\sin\delta \approx \delta$

Còn $\cos\alpha a \approx \cos n\pi = (-1)^n$.

Khi đó phương trình (3.24) có thể viết là:

$$f(\alpha a) = P'\frac{(-1)^n\delta}{n\pi} + (-1)^n = \cos ka$$

Suy ra

$$\delta = \frac{n\pi\cos ka}{(-1)^n K} - \frac{(-1)^n n\pi}{(-1)^n K} = \frac{n\pi}{K}[(-1)^n\cos ka - 1]$$

Và

$$\alpha a = n\pi + \delta = n\pi[1 + \frac{1}{P'}(-1)^n\cos ka - \frac{1}{P'}]$$

$$\Rightarrow \alpha = \frac{n\pi}{a}[1 + \frac{1}{P'}(-1)^n\cos ka - \frac{1}{P'}]$$

Vì theo (3.5)

$$E = \frac{\hbar^2 \alpha^2}{8\pi^2 m}$$

Thì $$E_n = \frac{\hbar^2}{8\pi^2 m} \cdot \frac{n^2 \pi^2}{a^2} \left\{ 1 + \frac{1}{P'} [(-1)^n \cos ka - 1] \right\}^2 = \frac{h^2 n^2}{8ma^2} \left[1 + \frac{2}{P'} (-1)^n \cos ka - \frac{2}{P'} \right]$$

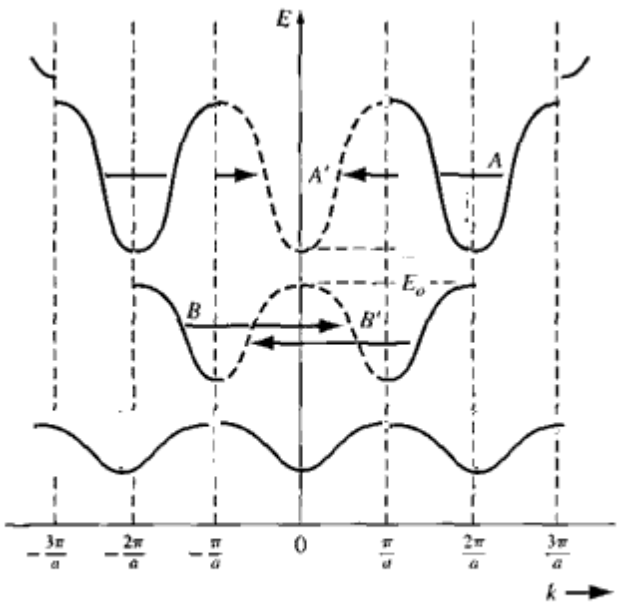
(vì P'>>1 nên bình phương số hạng thứ hai có thể bỏ qua).

Như vậy, năng lượng điện tử trong vùng năng lượng thứ n có dạng:

$$E_n(k) = A_n + (-1)^n B_n \cos ka$$

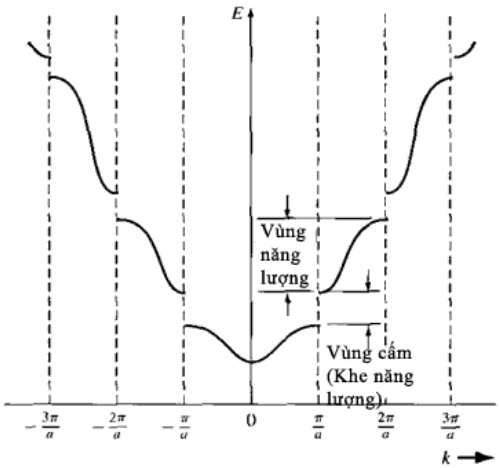
Trong đó $$A_n = \frac{h^2 n^2}{8ma^2} \left(1 - \frac{2}{P'} \right); \qquad B_n = \frac{h^2 n^2}{8ma^2} \frac{2}{P'},$$

Đồ thị của nó có dạng:

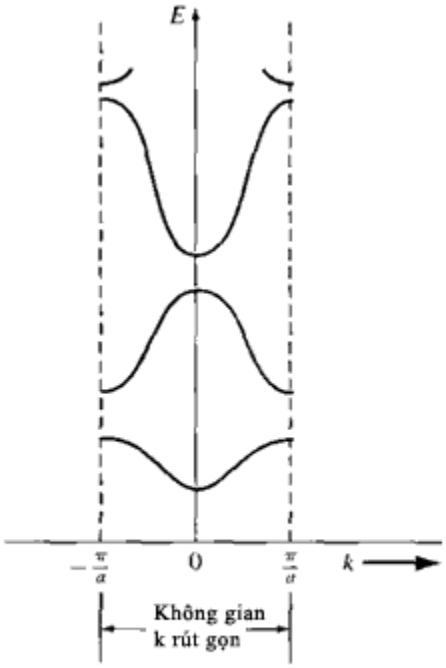


Hình 3.10| Đồ thị của E theo k khi P' đủ lớn

Hình 3.9 biểu diễn khái niệm về vùng năng lượng được phép của hạt chuyển động trong mạng tinh thể. Bởi vì năng lượng E không liên tục, chúng ta cũng có khái niệm về vùng năng lượng cấm của hạt trong tinh thể.



Hình 3.9| Giản đồ E theo k được tạo ra từ hình 3.8. Vùng năng lượng và khe năng lượng được chỉ ra.



Hình 3.11| Giản đồ E theo k trong biểu diễn vùng rút gọn

Hình 3.11 biểu diễn đồ thị E theo k nằm trong khoảng $-\pi/a<k<\pi/a$. Đồ thị này được gọi là giản đồ không gian k rút gọn.

Chúng ta chú ý rằng trong phương trình (3.27) đối với electron tự do, động lượng của hạt và số sóng k liên hệ với nhau qua hệ thức $p=\hbar k$. Như đã nói sự tương tự giữa nghiệm electron tự do và electron trong tinh thể được biểu diễn trong hình 3.9, tham số $\hbar k$ trong đơn tinh thể được gọi là động lượng mạng. Tham số này không thật sự là động lượng của electron trong tinh thể, nhưng là hằng số của những chuyển động liên quan đến tương tác tinh thể.

Chúng ta đã xem xét mô hình Kronig-Penney, nó là hàm thế tuần hoàn một chiều được dùng để mô hình hóa mạng tinh thể. Kết quả chính của việc phân tích này là những electron trong tinh thể chiếm những vùng năng lượng được phép và không nằm trong những vùng năng lượng cấm. Đối với vật liệu đơn tinh thể thực 3

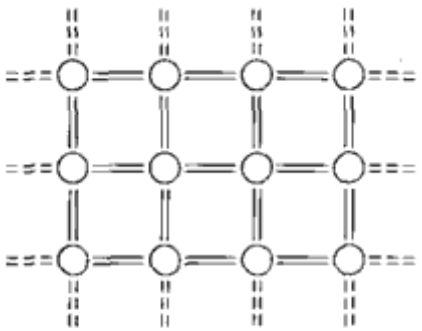
chiều, lí thuyết vùng năng lượng cũng tương tự. Chúng ta sẽ thu được thêm những tính chất của electron từ mô hình Kronig-Penney trong phần tiếp theo.

3.2|SỰ DẪN ĐIỆN TRONG VẬT RẮN

Một lần nữa, chúng ta quan tâm đến kết quả cuối cùng là xác định đặc tính Vôn-Ampe của thiết bị bán dẫn. Chúng ta cần xem xét sự dẫn điện trong chất rắn bởi vì nó liên quan đến lí thuyết vùng mà chúng ta vừa xây dựng. Hãy bắt đầu bằng cách xem xét chuyển động của electron trong những vùng năng lượng khác nhau.

3.2.1 Vùng năng lượng và mô hình liên kết

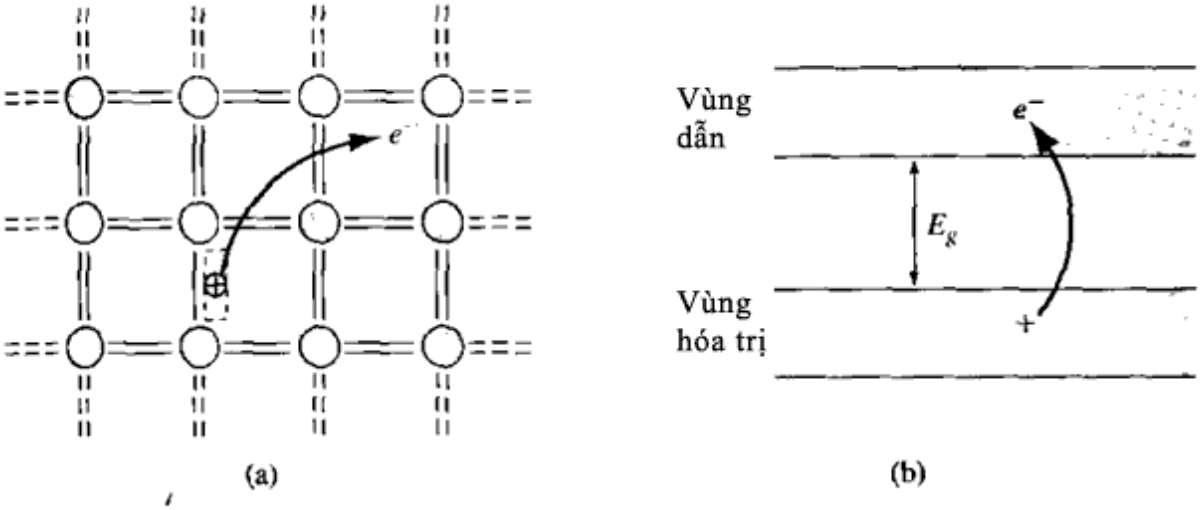
Trong chương một, chúng ta đã thảo luận liên kết cộng hóa trị của Silic. Hình 3.12 là biểu diễn hai chiều của liên kết cộng hóa trị trong mạng đơn tinh thể Silic. Hình này biểu diễn Silic tại *T=0 K* trong đó mỗi nguyên tử silic được bao quanh bởi 8 electron hóa trị. Những electron này đang ở trạng thái năng lượng thấp nhất của chúng và có liên quan trực tiếp đến liên kết cộng hóa trị. Hình 3.4b biểu diễn sự tách những trạng thái năng lượng rời rạc thành những vùng năng lượng khi tinh thể silic được hình thành. Tại *T=0 K*, 4N trạng thái ở vùng thấp hơn, vùng hóa trị được lấp đầy những electron hóa trị. Tất cả những electron hóa trị được biểu diễn trong hình 3.12 ở trong vùng hóa trị. Vùng năng lượng cao hơn, vùng dẫn, hoàn toàn trống tại *T=0K*.



Hình 3.12| Biểu diễn hai chiều của liên kết cộng hóa trị trong bán dẫn tại T=0K

Khi nhiệt độ tăng trên *0K*, vài electron hóa trị có thể thu đủ nhiệt năng để bẽ gãy liên kết cộng hóa trị và nhảy lên vùng dẫn. Hình 3.13a là biểu diễn hai chiều

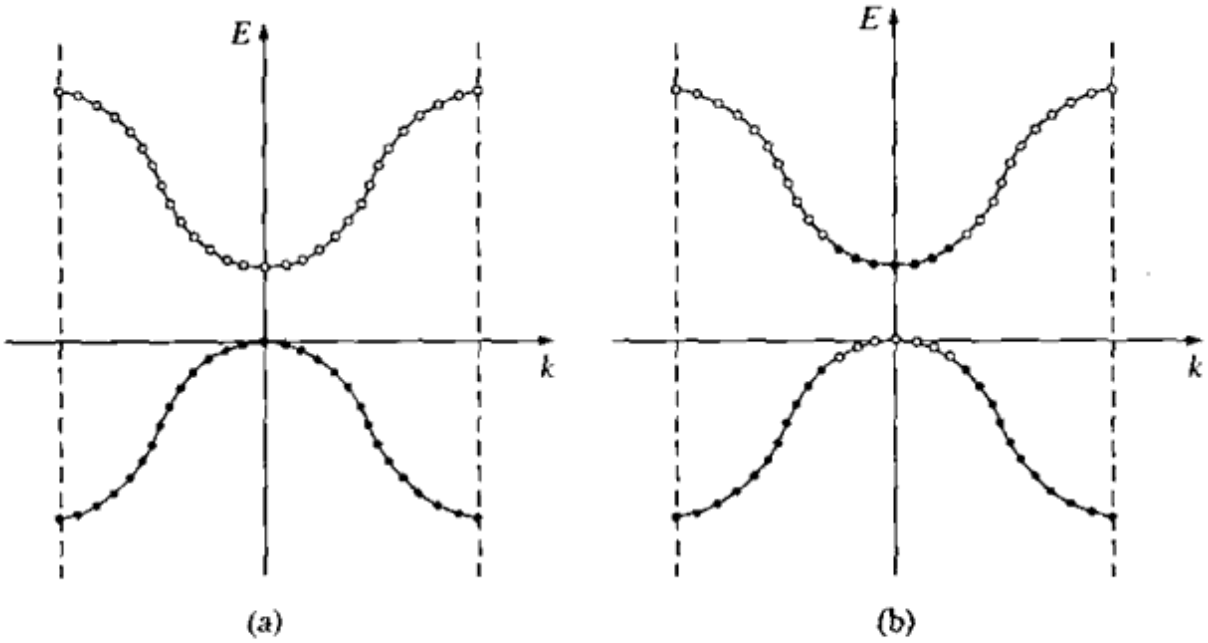
của hiện tượng bẽ gãy liên kết này và hình 3.13b là mô hình vùng năng lượng của nó.



Hình 3.13| (a)Biểu diễn hai chiều của sự bẽ gãy liên kết hóa trị. (b) Biểu diễn vùng năng lượng tương ứng và sự tạo các hạt mang điện dương và âm do sự bẽ gãy liên kết hóa trị

Bán dẫn trung hòa điện. Điều này có nghĩa là, khi electron mang điện âm bẽ gãy liên kết cộng hóa trị của nó, những trạng thái trống mang điện dương được tạo ra ở vị trí liên kết cộng hóa trị ban đầu trong vùng hóa trị. Khi nhiệt độ càng tăng, càng nhiều liên kết cộng hóa trị bị bẽ gãy, càng nhiều electron nhảy lên vùng dẫn, và càng nhiều trạng thái trống mang điện dương được tạo ra trong vùng hóa trị.

Chúng ta cũng có thể thiết lập mối quan hệ giữa sự bẽ gãy liên kết này với đồ thị *E* theo *k*. Hình 3.14a biểu diễn đồ thị E theo k của vùng dẫn và vùng hóa trị tại *T=0K*. Những trạng thái năng lượng trong vùng hóa trị hoàn toàn đầy và những trạng thái trong vùng dẫn trống. Hình 3.14b biểu diễn những vùng này *ở T>0K*, ở đó những electron thu đủ năng lượng để nhảy lên vùng dẫn và để lại những trạng thái trống trong vùng hóa trị. Chúng ta đang giả sử rằng lúc này chưa có ngoại lực đặt vào vì vậy những electron và những trạng thái trống phân bố đối xứng theo *k*.



Hình 3.14| Giản đồ E theo k của vùng dẫn và vùng hóa trị trong bán dẫn tại (a) T = 0K (b) T> 0K

3.2.2 Dòng trôi dạt

Dòng điện phụ thuộc vào lưu lượng chảy toàn phần của điện tích. Nếu chúng ta có tập hợp các ion mang điện dương với mật độ là N (cm^{-3}) và vận tốc trôi giạt trung bình là υ_d (cm/s) thì mật độ dòng trôi giạt sẽ là

$$J=qN\upsilon_d \qquad A/cm^2 \tag{3.32}$$

Thay vì xét vận tốc trôi giạt trung bình, chúng ta xét vận tốc của từng Ion thì chúng ta có thể viết mật độ dòng trôi dạt là

$$J = q\sum_{i=1}^{N}\upsilon_i \tag{3.33}$$

ở đây υ_i là vận tốc trôi giạt của Ion thứ i. Tổng này được lấy trên một đơn vị thể tích để cho mật độ dòng J có đơn vị là A/cm^2.

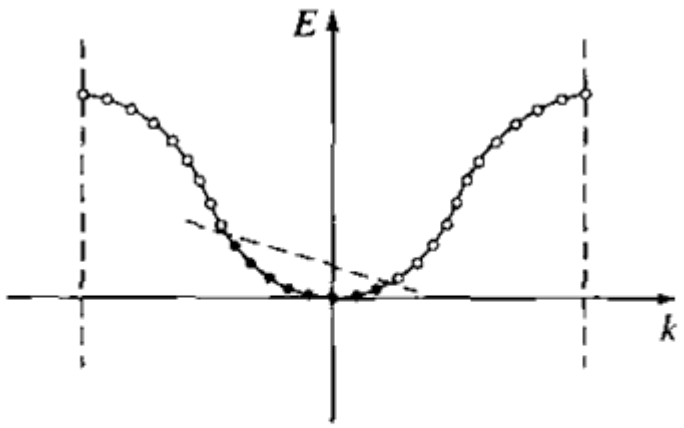
Bởi vì electron là những hạt mang điện, sự trôi giạt toàn phần của những electron trong vùng dẫn sẽ tạo ra dòng điện. Như được chỉ trong hình 3.14b, phân bố electron trong vùng dẫn là hàm chẵn theo k khi không có ngoại lực. Nhắc lại

rằng trong trường hợp electron tự do, k liên hệ với động lượng sao cho có bao nhiêu electron với giá trị +|k| cũng có bấy nhiêu electron có số sóng –|k|, mật độ dòng trôi giạt toàn phần do những electron này gây ra bằng 0. Kết quả này là tất nhiên bởi vì không có ngoại lực đặt vào.

Nếu lực tác động vào hạt và hạt di chuyển, nó sẽ thu năng lượng. Hiệu ứng này được biểu diễn là

$$dE=Fdx=F\upsilon dt \tag{3.34}$$

ở đây F là lực tác động, dx là khoảng cách vi phân mà hạt chuyển động, υ là vận tốc, và dE là sự tăng năng lượng. Nếu ngoại lực tác động vào electron trong vùng dẫn, có những trạng thái năng lượng trống mà những electron có thể di chuyển vào trong đó; do đó, dưới tác động của ngoại lực, electron có thể thu năng lượng và động lượng. Sự phân bố electron trong vùng dẫn có thể trông giống như hình 3.15, nó có nghĩa là những electron đã thu năng lượng toàn phần.



Hình 3.15| Sự phân bố bất đối xứng của electron trong giản đồ E-k khi có lực ngoài đặt vào.

Chúng ta có thể viết mật độ dòng trôi giạt do chuyển động của những electron là

$$J = -e\sum_{i=1}^{n}\upsilon_i \tag{3.35}$$

ở đây *e* là độ lớn của điện tích và *n* là số electron trên đơn vị thể tích trong vùng dẫn. Một lần nữa, tổng được lấy trên đơn vị thể tích vì thế đơn vị của mật độ dòng là A/cm^2. Chúng ta có thể rút ra từ phương trình (3.35) rằng dòng điện liên hệ trực tiếp với vận tốc electron; nghĩa là, dòng điện phản ánh sự chuyển động của electron trong tinh thể tốt như thế nào.

3.2.3 Khối lượng hiệu dụng của electron

Nói chung, sự di chuyển của electron trong mạng tinh thể khác với trong không gian tự do. Cùng với ngoại lực đặt vào, có những nội lực trong tinh thể do những ion mang điện dương hoặc những proton và những electron mang điện âm, sẽ ảnh hưởng đến chuyển động của những electron trong mạng. Chúng ta có thể viết

$$F_{toàn\ phần} = F_{ngoài} + F_{trong} = ma \tag{3.36}$$

ở đây $F_{toàn\ phần}$, $F_{ngoài}$ và F_{trong} tương ứng là lực toàn phần, ngoại lực, và những nội lực tác động lên một hạt trong tinh thể. *a* là gia tốc và *m* là khối lượng nghỉ của hạt.

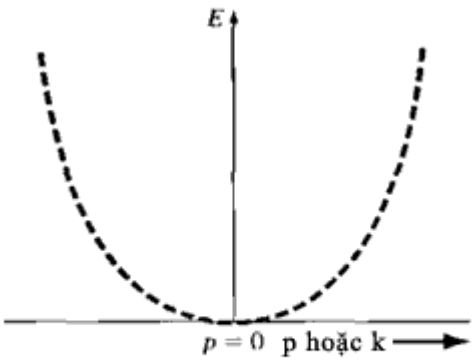
Bởi vì rất khó để tính đến tất cả các nội lực nên chúng ta sẽ viết phương trình

$$F_{ngoài} = m^* a \tag{3.37}$$

ở đây gia tốc *a* liên hệ trực tiếp với lực bên ngoài. Đại lượng m^* được gọi là khối lượng hiệu dụng trong đó có tính đến khối lượng của hạt và ảnh hưởng của những nội lực.

Để hiểu khái niệm khối lượng hiệu dụng, hãy xét sự khác nhau trong chuyển động giữa một viên bi thủy tinh trong một bình chứa nước và trong bình chứa dầu. Nói chung, viên bi sẽ rơi qua nước với tốc độ nhanh hơn rơi qua dầu. Ngoại lực trong ví dụ này là trọng lực và nội lực có liên quan đến độ nhớt của chất lỏng. Bởi vì sự khác nhau trong chuyển động của viên bi trong hai trường hợp này nên khối lượng của viên bi sẽ biểu hiện khác nhau trong nước và trong dầu.

Chúng ta cũng có thể thiết lập mối quan hệ giữa khối lượng hiệu dụng của electron trong tinh thể với giản đồ E theo k như được chỉ ra trong hình 3.11. Trong vật liệu bán dẫn, chúng ta sẽ gặp những vùng năng lượng hầu như trống electron và những vùng năng lượng khác hầu như đầy electron.



Hình 3.7| Giản đồ E theo k dạng parabon của electron tự do

Để bắt đầu, hãy xét trường hợp của electron tự do mà giản đồ E theo k của nó được biểu diễn trong hình 3.7.

Nhớ lại phương trình (3.28), năng lượng và động lượng liên quan với nhau qua biểu thức $E=p^2/2m=\hbar^2/k^2/2m$, ở đây m là khối lượng của electron. Mối quan hệ giữa động lượng và vecto sóng k là $p=\hbar k$. Nếu lấy đạo hàm của phương trình (3.28) theo k chúng ta thu được

$$\frac{dE}{dk}=\frac{\hbar^2 k}{m}=\frac{\hbar p}{m} \tag{3.38}$$

Suy ra:

$$\frac{1}{\hbar}\frac{dE}{dk}=\frac{p}{m}=\upsilon \tag{3.39}$$

ở đây υ là vận tốc của hạt. Đạo hàm bậc nhất của E theo k có liên quan đến vận tốc của hạt.

Bây giờ nếu chúng ta lấy đạo hàm bậc hai của E theo k, chúng ta có

$$\frac{d^2E}{dk^2}=\frac{\hbar^2}{m} \tag{3.40}$$

Chúng ta có thể viết lại phương trình (3.40) là

$$\frac{1}{\hbar^2}\frac{d^2E}{dk^2}=\frac{1}{m} \tag{3.41}$$

Đạo hàm bậc hai của E theo k là nghịch đảo của khối lượng của hạt. Đối với trường hợp electron tự do, khối lượng là hằng số (hiệu ứng không tương đối), vì vậy đạo hàm bậc hai là hằng số. Chúng ta cũng có thể rút ra từ hình 3.7 rằng d^2E/dk^2 là đại lượng dương, nghĩa là khối lượng của electron cũng là đại lượng dương.

Nếu chúng ta đặt điện trường vào những electron tự do và dùng phương trình chuyển động cổ điển Newton, chúng ta có thể viết

$$F=ma=-eE \tag{3.42}$$

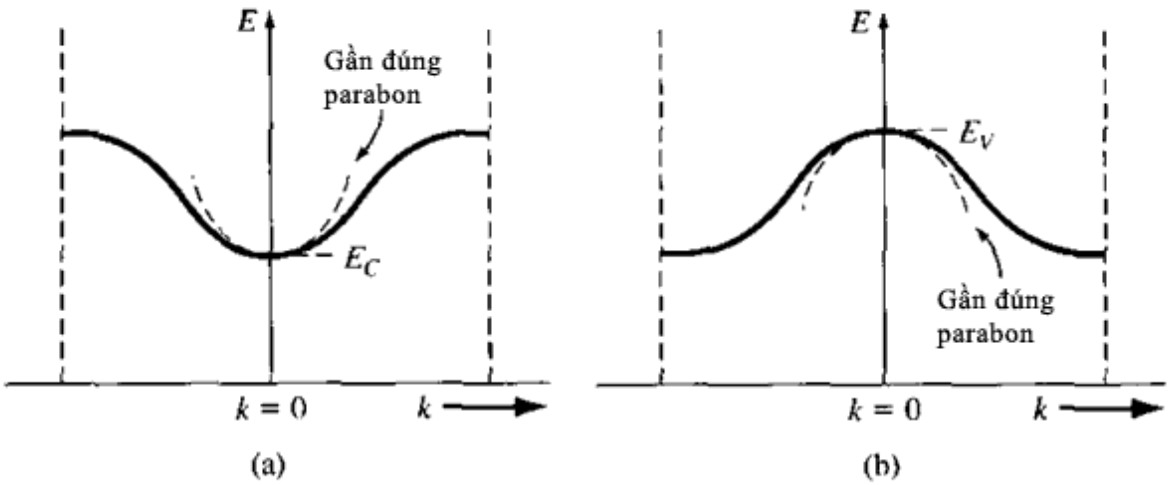
ở đây a là gia tốc, E là điện trường đặt vào, và e là độ lớn của hạt mang điện. Chúng ta suy ra được gia tốc là

$$a=-eE/m \tag{3.43}$$

Chuyển động của electron ngược hướng với điện trường đặt vào bởi vì electron là hạt mang điện tích âm.

Chúng ta có thể áp dụng những kết quả này cho electron ở đáy vùng năng lượng. Xét vùng năng lượng trong hình 3.16a. Năng lượng gần đáy vùng có thể xem gần đúng là parabon, giống như của electron tự do. Chúng ta có thể viết

$$E-E_c=C_1(k)^2 \tag{3.44}$$



Hình 3.16| (a) Vùng dẫn trong không gian k rút gọn, và gần đúng parabon. (b) Vùng hóa trị trong không gian k rút gọn, và gần đúng parabon

E_c là năng lượng tại đáy vùng. Bởi vì $E > E_c$, tham số C_1 là đại lượng dương.

Lấy đạo hàm bậc 2 của E theo k từ phương trình (3.44), chúng ta thu được

$$\frac{d^2E}{dk^2}=2C_1 \tag{3.45}$$

Chúng ta có thể viết phương trình (3.45) ở dạng

$$\frac{1}{\hbar^2}\frac{d^2E}{dk^2}=\frac{2C_1}{\hbar^2} \quad (3.46)$$

So sánh phương trình (3.46) với phương trình (3.41) chúng ta có thể xem $\hbar^2/2C_1$ như khối lượng của hạt. Tuy nhiên, độ cong của đường cong trong hình 3.16a sẽ không giống độ cong của đường cong của hạt tự do. Chúng ta có thể viết

$$\frac{1}{\hbar^2}\frac{d^2E}{dk^2}=\frac{2C_1}{\hbar^2}=\frac{1}{m^*} \quad (3.47)$$

ở đây m* được gọi là khối lượng hiệu dụng. Bởi vì $C_1>0$, chúng ta cũng có $m^*>0$.

Khối lượng hiệu dụng là một thông số thiết lập mối quan hệ giữa những kết quả cơ học lượng tử với các phương trình lực cổ điển. Trong đa số các trường hợp, electron ở đáy của vùng dẫn có thể xem như hạt cổ điển mà chuyển động của nó có thể được mô hình hóa theo cơ học Newton, miễn là nội lực và những tính chất cơ học lượng tử được tính đến trong khối lượng hiệu dụng. Nếu chúng ta đặt một trường điện vào electron ở đáy vùng năng lượng thì chúng ta có thể viết gia tốc là

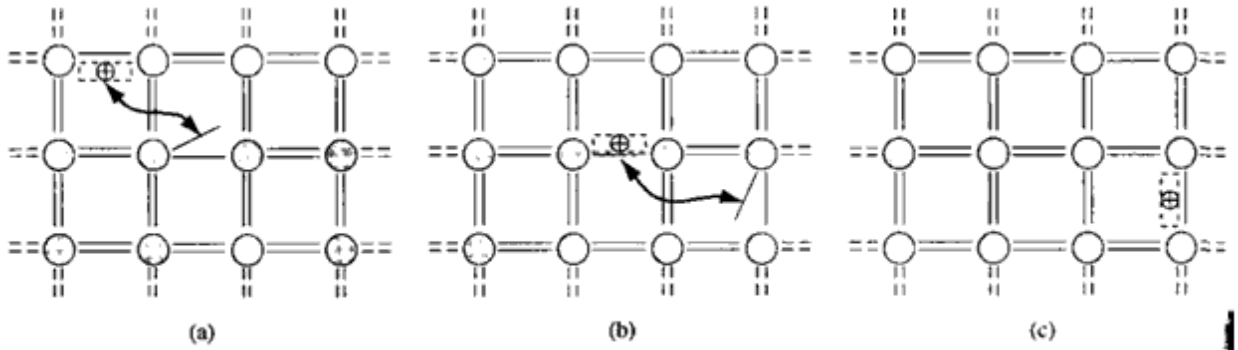
$$a=\frac{-eE}{m_n^*} \quad (3.48)$$

ở đây m_n^* là khối lượng hiệu dụng của electron. Khối lượng hiệu dụng m_n^* của electron gần đáy vùng dẫn là hằng số.

3.2.4 Khái niệm lỗ trống

Trong khi xem xét biểu diễn hai chiều của liên kết cộng hóa trị trong hình 3.13a, những "trạng thái trống" mang điện dương sẽ được tạo ra khi một electron hóa trị được giải phóng và đi vào trong vùng dẫn. Khi $T>0K$, tất cả những electron hóa trị có thể thu nhiệt năng; nếu những electron hóa trị thu một lượng nhiệt năng nhỏ, nó có thể nhảy vào trạng thái trống. Sự di chuyển của một electron hóa trị vào trạng thái trống tương đương với sự tự di chuyển của chính trạng thái trống mang điện dương. Hình 3.17 biểu diễn sự chuyển động của những electron hóa trị trong tinh thể lần lượt làm đầy một trạng thái trống và tạo ra trạng thái trống mới, sự chuyển động này tương đương với chuyển động của hạt mang điện dương trong vùng hóa trị. Bây giờ tinh thể có thêm hạt dẫn điện thứ hai có thể làm phát sinh dòng điện.

Hạt tải điện này được gọi là lỗ trống và như chúng ta sẽ thấy, nó cũng có thể được xem là hạt cổ điển mà chuyển động của nó có thể được mô hình hóa sử dụng cơ học Newton.



Hình 3.17| Hình dung chuyển động của lỗ trống trong bán dẫn

Mật độ dòng trội giạt do các electron trong vùng hóa trị trong hình 3.14b có thể được viết là

$$J = -e \sum_{i\,(\text{filled})} v_i \tag{3.49}$$

ở đây tổng được lấy trên những trạng thái bị electron đến chiếm (filled). Việc tính toán tổng này không thuận lợi bởi vì nó trải rộng trên vùng hóa trị gần đầy và có tính đến một số lượng lớn các trạng thái. Chúng ta có thể viết lại phương trình (3.49) dưới dạng

$$J = -e \sum_{i\,(\text{đầy hoàn toàn})} v_i + e \sum_{i\,(\text{trống})} v_i \tag{3.50}$$

Nếu chúng ta xét vùng đầy hoàn toàn, tất cả những trạng thái bị chiếm bởi những electron. Từng electron có thể được xem như chuyển động với vận tốc được cho bởi phương trình

$$\upsilon(E) = \left(\frac{1}{\hbar}\right)\left(\frac{dE}{dk}\right) \tag{3.39}$$

Vùng đối xứng theo k và mỗi trạng thái bị chiếm sao cho với mỗi electron có vận tốc |υ| sẽ có những electron tương ứng với vận tốc –|υ|. Bởi vì vùng đầy, sự phân

bố electron theo k không thể thay đổi khi có ngoại lực đặt vào. Do đó, mật độ dòng trôi giạt toàn phần trong những vùng đầy hoàn toàn bằng 0 hoặc

$$-e \sum_{i\ (\text{đầy hoàn toàn})} v_i \equiv 0 \tag{3.51}$$

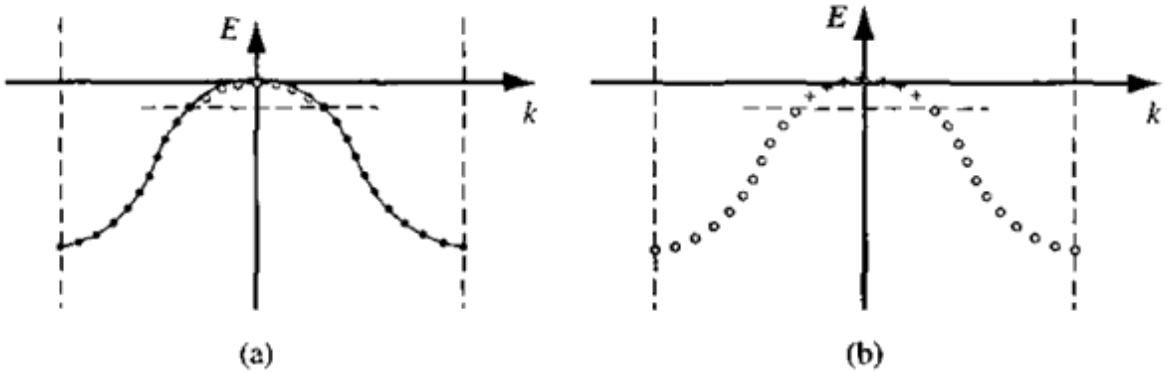
Bây giờ chúng ta có thể viết mật độ dòng trôi dạt từ phương trình (3.50) cho vùng gần đầy là

$$J = +e \sum_{i\ (\text{trống})} v_i \tag{3.52}$$

ở đây υ_i trong tổng là

$$\upsilon(E) = \left(\frac{1}{\hbar}\right)\left(\frac{dE}{dk}\right)$$

gắn với trạng thái trống. Phương trình (3.52) hoàn toàn tương đương với việc thay thế một hạt mang điện dương trong những trạng thái trống và giả sử rằng tất cả những trạng thái khác trong vùng trống, hoặc trung hòa điện. Khái niệm này được biểu diễn trong hình 3.18. Hình 3.18 a biểu diễn vùng hóa trị với những trạng thái được lắp đầy bởi những electron bình thường, trong khi hình 3.28b biểu diễn khái niệm mới về những điện tích dương chiếm những trạng thái trống ban đầu. Khái niệm này có liên quan đến phần khảo sát của chúng ta về "những trạng thái trống" mang điện dương trong vùng hóa trị được biểu diễn trong hình 3.17.



Hình 3.18| (a) Vùng hóa trị bình thường với các trạng thái năng lượng bị chiếm bởi electron. (b) Khái niệm về lỗ trống chiếm những trạng thái ban đầu trống

υ_i trong tổng của phương trình (3.52) liên quan đến mức độ chuyển động dễ dàng của electron trong bán dẫn như thế nào. Bây giờ xét một electron gần đỉnh của vùng năng lượng được xem gần đúng là parabon vì thế chúng ta có thể viết

$$(E–E_\upsilon)= – C_2(k)^2 \tag{3.53}$$

E_υ là năng lượng tại đỉnh vùng. Bởi vì $E<E_\upsilon$ đối với electron trong vùng này, do đó tham số C_2 phải là đại lượng dương.

Lấy đạo hàm bậc II của E theo k từ phương trình (3.53), chúng ta thu được

$$\frac{d^2E}{dk^2} = -2C_1 \tag{3.54}$$

Chúng ta có thể sắp xếp lại phương trình này sao cho

$$\frac{1}{\hbar^2}\frac{d^2E}{dk^2} = \frac{-2C_1}{\hbar^2} \tag{3.55}$$

So sánh phương trình (3.55) với phương trình (3.41), chúng ta có thể viết

$$\frac{1}{\hbar^2}\frac{d^2E}{dk^2} = \frac{-2C_1}{\hbar^2} = \frac{1}{m^*} \tag{3.56}$$

ở đây m^* lại là khối lượng hiệu dụng. Chúng ta đã thừa nhận rằng C_2 là đại lượng dương, từ đó suy ra m^* phải là đại lượng âm. Vậy electron gần đỉnh vùng hành động như thể nó có khối lượng âm.

Chúng ta phải nhớ rằng tham số khối lượng hiệu dụng được dùng để thiết lập mối quan hệ giữa cơ học lượng tử và cơ học cổ điển. Nổ lực để thiết lập mối quan hệ giữa hai lí thuyết này dẫn đến một kết quả khác lạ là khối lượng hiệu dụng âm. Tuy nhiên, chúng ta cũng cần nhớ rằng nghiệm của phương trình sóng Schrodinger cũng dẫn đến những kết quả mâu thuẫn với cơ học cổ điển. Khối lượng hiệu dụng âm là một ví dụ như thế.

Trong khi thảo luận về khối lượng hiệu dụng trong phần trước, chúng ta dùng sự tương tự với viên bi chuyển động trong hai chất lỏng. Bây giờ xét một khối nước đá đặt ở tâm của bình chứa đầy nước: khối nước đá sẽ di chuyển lên phía trên bề mặt theo hướng ngược với trọng lực. Khối nước đá sẽ có khối lượng hiệu dụng âm bởi vì gia tốc của nó ngược chiều với ngoại lực. Tham số khối lượng hiệu dụng có tính đến tất cả những nội lực tác động lên hạt.

Nếu chúng ta lại xét electron gần đỉnh của vùng năng lượng và dùng phương trình lực Newton để tính lực điện trường tác động, chúng ta sẽ có

$$\boldsymbol{F} = m^* \boldsymbol{a} = -e\boldsymbol{E} \tag{3.57}$$

Tuy nhiên, m* bây giờ là đại lượng âm, vì vậy chúng ta có thể viết

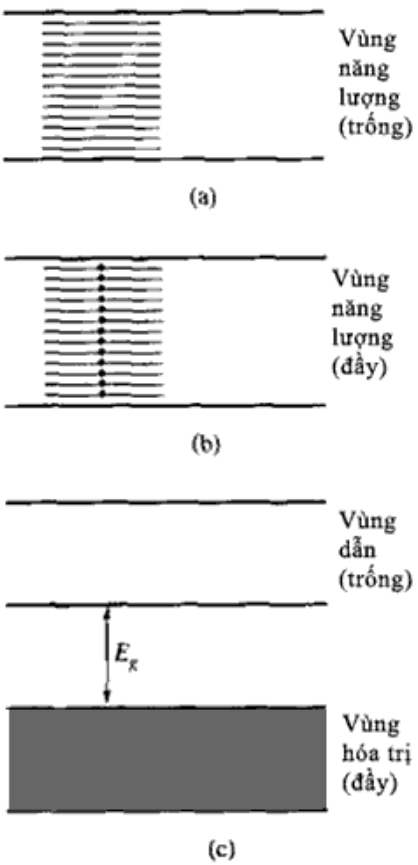
$$\boldsymbol{a} = \frac{-e\boldsymbol{E}}{-|m^*|} = \frac{+e\boldsymbol{E}}{|m^*|} \tag{3.58}$$

Một electron di chuyển gần đỉnh vùng năng lượng sẽ chuyển động cùng hướng với trường điện đặt vào.

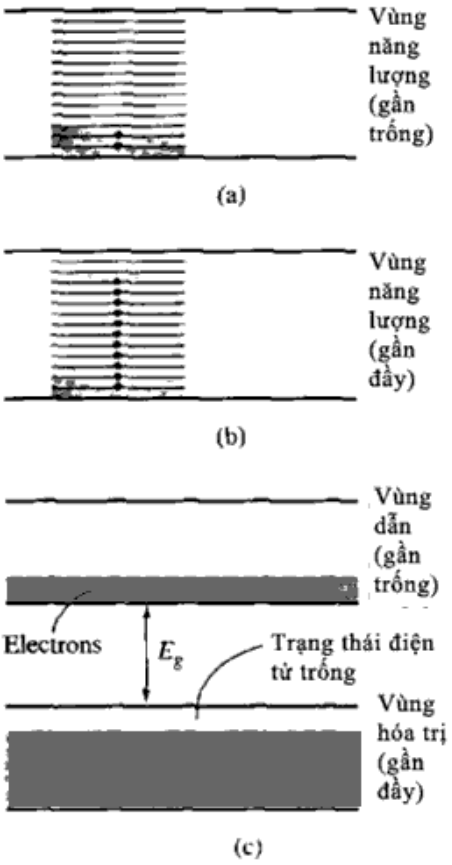
Chuyển động toàn phần của electron trong vùng gần đầy có thể được mô tả bằng cách chỉ xem xét những trạng thái trống, và chúng ta xem là có một hạt mang điện dương và một khối lượng ngược dấu với *m** trong phương trình (3.56) gắn với mỗi trạng thái đó. Bây giờ chúng ta có thể mô hình hóa vùng này như thể nó có những hạt mang điện dương và khối lượng hiệu dụng dương. Mật độ của những hạt này trong vùng hóa trị bằng mật độ của những trạng thái năng lượng trống. Những hạt mới này gọi là lỗ trống. Do đó, lỗ trống có khối lượng hiệu dụng dương được kí hiệu là m^*_p và mang điện dương, vì vậy nó sẽ di chuyển cùng hướng với trường đặt vào.

3.2.5 Kim loại, chất cách điện và bán dẫn

Mỗi tinh thể có cấu trúc vùng năng lượng riêng của nó. Chúng ta chú ý rằng sự tách những trạng thái năng lượng trong silic để hình thành nên vùng dẫn và vùng hóa trị rất phức tạp. Các vật liệu khác nhau có cấu trúc vùng năng lượng khác nhau dẫn đến tính chất điện của chúng khác nhau. Chúng ta có thể bắt đầu hiểu định tính một vài sự khác nhau cơ bản trong tính chất điện của các vật liệu khác nhau do sự khác nhau trong cấu trúc vùng năng lượng của nó bằng cách xét vài vùng năng lượng được đơn giản hóa.



Hình 3.19| Vùng năng lượng (a) trống (b) đầy hoàn toàn (c) Khe năng lượng giữa hai vùng



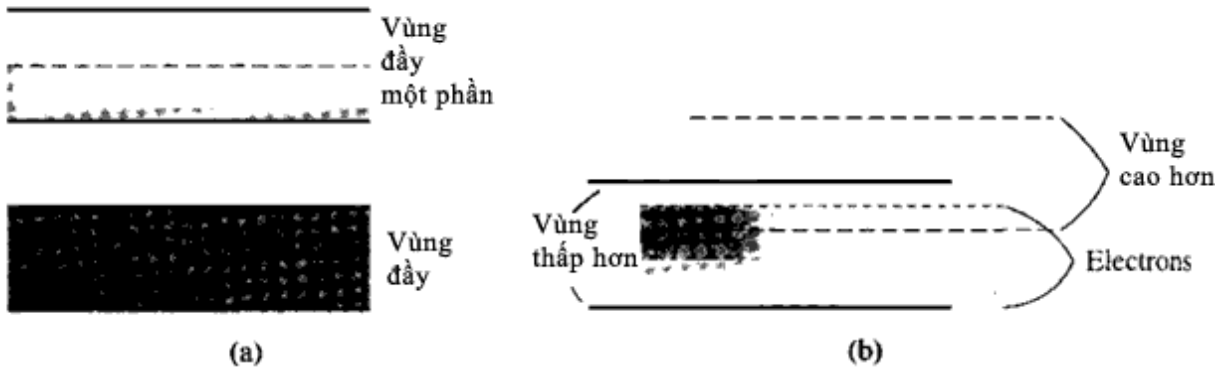
Hình 3.20| Vùng năng lượng (a) gần trống, (b)gần đầy, và (c) khe năng lượng giữa hai vùng

Có một số dạng vùng năng lượng cần xét. Hình 3.19a biểu diễn vùng năng lượng hoàn toàn trống electron. Nếu trường điện được đặt vào, không có hạt để di chuyển, vì vậy sẽ không có dòng điện. Hình 3.19b biểu diễn một vùng năng lượng khác mà những trạng thái năng lượng của nó hoàn toàn đầy electron. Chúng ta đã rút ra trong phần trước rằng vùng năng lượng hoàn toàn đầy cũng sẽ không làm phát sinh dòng điện. Một vật liệu có vùng năng lượng đầy hoàn toàn hoặc trống hoàn toàn là chất cách điện. Điện trở của chất

cách điện rất lớn hay nói cách khác độ dẫn điện của chất cách điện rất nhỏ. Về cơ bản là không có những hạt mang điện có thể đóng góp vào để tạo nên dòng trôi giạt. Hình 3.19c biểu diễn giản đồ năng lượng được đơn giản hóa của chất cách điện. Năng lượng vùng cấm E_g của chất cách điện thường vào cỡ 3.5 đến 6 eV hoặc lớn hơn, vì vậy ở nhiệt độ phòng sẽ không có electron trong vùng dẫn và vùng hóa trị còn hoàn toàn đầy. Có rất ít những electron và lỗ trống được tạo ra do nhiệt trong chất cách điện.

Hình 3.20a biểu diễn vùng năng lượng với vài electron nằm gần đáy vùng. Bây giờ, nếu trường điện điện được đặt vào, những electron có thể thu năng lượng, di chuyển đến trạng thái năng lượng cao hơn, và di chuyển trong tinh thể. Dòng điện tích toàn phần là dòng điện. Hình 3.20b biểu diễn vùng năng lượng gần đầy electron, nó có nghĩa là chúng ta có thể xem xét những lỗ trống trong vùng này. Nếu điện trường được đặt vào, lỗ trống có thể di chuyển và tạo ra dòng điện. Hình 3.20c biểu diễn giản đồ vùng năng lượng được đơn giản hóa cho trường hợp này. Năng lượng vùng cấm có thể vào cỡ 1eV. Giản đồ vùng năng lượng này biểu diễn bán dẫn ở $T>0K$. Điện trở của bán dẫn, như chúng ta sẽ thấy trong phần tiếp theo có thể được điều khiển và thay đổi nhiều bậc độ lớn.

Tính chất của kim loại là điện trở rất nhỏ. Giản đồ vùng năng lượng của kim loại có thể có một trong hai dạng. Hình 3.21a biểu diễn vùng năng lượng đầy một phần trong đó có sẵn nhiều electron dẫn vì thế kim loại có độ dẫn điện rất lớn. Hình 3.21b biểu diễn một dạng khác của giản đồ vùng năng lượng của kim loại. Sự tách vùng thành vùng năng lượng và vùng cấm là một hiện tượng phức tạp và hình 3.21b biểu diễn trường hợp trong đó vùng dẫn và vùng hóa trị xen phủ nhau tại khoảng cách cân bằng liên nguyên tử. Như trong trường hợp được biểu diễn trong hình 3.21a, có một số lượng lớn những electron cũng như một số lượng lớn các trạng thái năng lượng trống mà electron có thể di chuyển vào trong đó, vì vậy vật liệu này thể hiện tính dẫn điện cao.

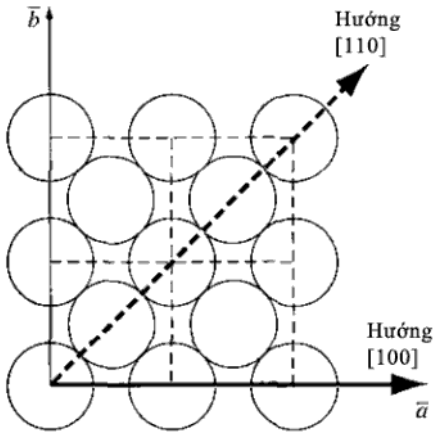


Hình 3.21|Hai loại giản đồ vùng năng lượng của kim loại (a) loại vùng đầy một phần và (b) Các vùng năng lượng xen phủ nhau

3.3| MỞ RỘNG CHO TRƯỜNG HỢP BA CHIỀU

Khái niệm cơ bản về vùng năng lượng và vùng cấm cùng với khối lượng hiệu dụng đã được xây dựng trong phần trước. Trong phần này, chúng ta sẽ mở rộng những khái niệm này cho trường hợp ba chiều và tinh thể thực. Chúng ta sẽ xem xét tính chất nào đó của tinh thể ba chiều theo giản đồ *E-k*, khe năng lượng và khối lượng hiệu dụng. Chúng ta chỉ khảo sát một cách ngắn gọn về những khái niệm ba chiều cơ bản; do đó, nhiều chi tiết sẽ không được xét.

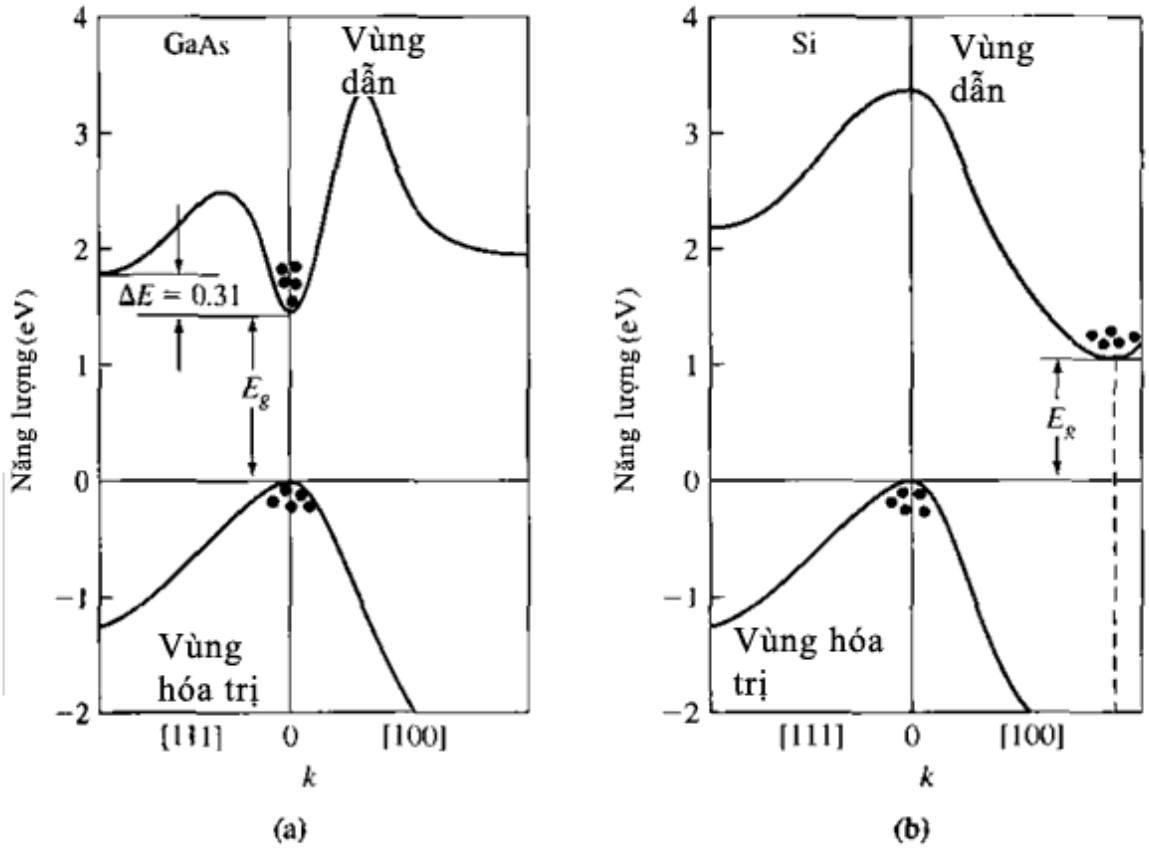
Một khó khăn gặp phải trong việc mở rộng hàm thế sang trường hợp 3 chiều là khoảng cách giữa những nguyên tử thay đổi khi hướng trong tinh thể thay đổi. Hình 3.22 biểu diễn cấu trúc lập phương tâm mặt với hướng [100] và hướng [110] được chỉ ra. Những electron di chuyển theo những hướng khác nhau sẽ gặp những dạng thế năng khác nhau và do đó những biên không gian k khác nhau. Giản đồ E theo k nói chung là hàm theo hướng không gian k trong tinh thể.



Hình 3.22| Mặt phẳng (100) của tinh thể lập phương tâm mặt biểu diễn hướng [100] và hướng [110]

3.3.1 Giản đồ không gian k của Si và GaAs

Hình 3.23 biểu diễn giản đồ E theo k của GaAs và Si. Những giản đồ được đơn giản hóa này biểu diễn những tính chất cơ bản đã được xét trong tài liệu này nhưng không biểu diễn những chi tiết thích hợp cho những khóa học nâng cao.



Hình 3.23| Cấu trúc vùng năng lượng của (a) GaAs và (b)Si

Chú ý rằng thay cho những trục k dương và âm thông thường, bây giờ chúng ta biểu diễn hai hướng tinh thể khác nhau. Giản đồ *E* theo *k* của mô hình một chiều đối xứng theo *k* vì thế không thu được thêm thông tin mới nào nếu biểu diễn những trục âm. Trong thực tế thường vẽ giản đồ năng lượng của hướng [100] ở phía trục +k và giản đồ năng lượng của hướng [111] ở phía trục –k. Trong trường hợp của mạng kim cương và ZnS, cực đại của vùng hóa trị và cực tiểu của vùng dẫn cùng xuất hiện tại *k=0* hoặc dọc theo một trong hai hướng này.

Hình 3.23a biểu diễn giản đồ E theo k của GaAs. Cực đại của vùng hóa trị và cực tiểu vùng dẫn cùng xuất hiện tại *k=0*. Những electron trong vùng dẫn có

khuynh hướng định cư tại đáy vùng dẫn có *k=0*. Tương tự, những lỗ trống trong vùng hóa trị có khuynh hướng định cư tại đỉnh vùng hóa trị tại cùng giá trị k. Trong GaAs, cực tiểu năng lượng vùng dẫn và cực đại năng lượng vùng hóa trị xuất hiện tại cùng giá trị của *k*. Một bán dẫn với tính chất được nói ở trên gọi là bán dẫn khe năng lượng trực tiếp; sự chuyển dịch giữa hai vùng năng lượng được thực hiện mà không có sự biến đổi trong động lượng của tinh thể. Bản chất trực tiếp này có ảnh hưởng đáng kể đến tính chất quang học của vật liệu. GaAs và những vật liệu khe năng lượng trực tiếp khác thích hợp để dùng trong laser bán dẫn và các thiết bị quang học.

Giản đồ *E* theo *k* của Si được biểu diễn trong hình 3.23b. Cực đại năng lượng vùng hóa trị xuất hiện tại *k=0* như trước. Cực tiểu năng lượng vùng dẫn không xuất hiện tại *k=0*, mà dọc theo hướng [100]. Sự khác nhau giữa cực tiểu năng lượng vùng dẫn và cực đại năng lượng vùng hóa trị vẫn được định nghĩa là năng lượng vùng cấm E_g. Bán dẫn mà cực đại năng lượng vùng hóa trị của nó và cực tiểu năng lượng vùng dẫn không xuất hiện tại cùng giá trị *k* được gọi là bán dẫn khe năng lượng gián tiếp. Khi những electron thực hiện chuyển dời giữa vùng dẫn và vùng hóa trị, chúng phải tuân theo định luật bảo toàn động lượng. Sự chuyển dịch trong vật liệu khe năng lượng gián tiếp cần thiết phải bao gồm một sự tương tác với tinh thể để cho động lượng tinh thể bảo toàn.

Ge cũng là vật liệu bán dẫn khe năng lượng gián tiếp, cực đại vùng hóa trị của nó xuất hiện tại k=0 và cực tiểu vùng dẫn của nó xuất hiện dọc theo hướng [111]. GaAs là bán dẫn khe năng lượng trực tiếp, nhưng những bán dẫn hợp chất khác chẳng hạn như GaP và AlAs có khe vùng gián tiếp.

3.3.2 Nói thêm về khái niệm khối lượng hiệu dụng

Độ cong của đồ thị E theo k gần cực tiểu vùng dẫn có liên quan đến khối lượng hiệu dụng của electron. Chúng ta có thể rút ra từ hình 3.23 rằng độ cong của vùng dẫn tại giá trị cực tiểu của nó trong GaAs lớn hơn trong Si, vì vậy khối lượng hiệu dụng của electron trong vùng dẫn của GaAs sẽ nhỏ hơn trong Si.

Đối với đồ thị E theo k một chiều, khối lượng hiệu dụng được định nghĩa trong phương trình (3.41) là $1/m^* = 1/\hbar^2 . d^2E/dk^2$. Khái niệm khối lượng hiệu dụng sẽ phức tạp trong tinh thể thực. Tinh thể ba chiều có 3 vecto k. Độ cong của đồ thị E theo k tại cực tiểu vùng dẫn sẽ khác nhau theo ba hướng của k. Chúng ta sẽ

không xem xét chi tiết những khối lượng hiệu dụng khác nhau ở đây. Trong những phần sau và những chương sau, những khối lượng hiệu dụng được dùng trong tính toán sẽ thuộc loại trung bình thống kê thích hợp cho đa số những tính toán thiết bị.

3.4| HÀM MẬT ĐỘ TRẠNG THÁI

Như chúng ta đã phát biểu, cuối cùng chúng ta muốn mô tả đặc tuyến Vôn-Ampe của thiết bị bán dẫn. Bởi vì dòng điện phụ thuộc vào dòng chảy của điện tích, vì thế một bước quan trọng trong quá trình này là phải xác định số electron và lỗ trống trong bán dẫn có thể tham gia dẫn điện. Số hạt tải điện có thể đóng góp vào quá trình tải điện là một hàm số theo số trạng thái năng lượng bởi vì, theo nguyên lí loại trừ Pauli, mỗi electron chỉ có thể chiếm một trạng thái lượng tử. Khi chúng ta thảo luận về sự tách những mức năng lượng thành vùng năng lượng và vùng cấm, chúng ta đã chỉ ra vùng năng lượng thực sự được tạo ra từ những mức năng lượng rời rạc. Chúng ta phải xác định mật độ những trạng thái năng lượng này như hàm số theo năng lượng để tính mật độ electron và lỗ trống.

3.4.1 Suy luận toán học

Để xác định mật độ trạng thái lượng tử như hàm theo năng lượng, chúng ta cần xét một mô hình toán học thích hợp. Những electron được phép di chuyển tự do trong vùng dẫn của bán dẫn, nhưng bị giam hãm trong tinh thể. Đầu tiên, chúng ta sẽ xét electron tự do bị giam cầm trong giếng thế vô hạn ba chiều, ở đây giếng thế biểu diễn tinh thể. Thế năng của giếng thế được định nghĩa là

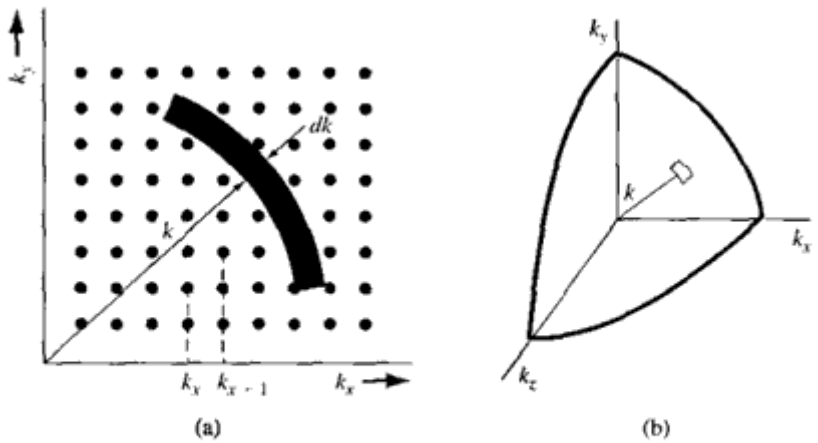
$$V(x,y,z) = \begin{cases} 0 & khi 0 < x < a \\ & 0 < y < a \\ & 0 < y < a \\ \infty & cho - cac - truong - hop - con - lai \end{cases} \qquad (3.59)$$

ở đây tinh thể được giả sử là hình lập phương cạnh a. Phương trình sóng Schrodinger ba chiều có thể được giải bằng phương pháp tách biến. Ngoại suy kết quả từ giếng thế vô hạn một chiều, chúng ta có thể chứng tỏ rằng (xem bài tập 3.21)

$$\frac{2mE}{\hbar^2} = k^2 = k_x^2 + k_y^2 + k_z^2 = (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2)\left(\frac{\pi^2}{a^2}\right) \tag{3.60}$$

ở đây n_x, n_y, n_z là những số nguyên dương. (Những giá trị âm của n_x, n_y, n_z mang lại cùng hàm sóng (ngược dấu) như những giá trị nguyên dương, dẫn đến cùng năng lượng và hàm xác suất, vì vậy những số nguyên âm không biểu diễn thêm các trạng thái lượng tử khác.)

Chúng ta có thể vẽ đồ thị những trạng thái lượng tử trong không gian k. Hình 3.24a biểu diễn đồ thị hai chiều như hàm theo k_x và k_y. Mỗi điểm biểu diễn một trạng thái lượng tử tương ứng với những giá trị nguyên khác nhau của n_x và n_y khác nhau. Những giá trị âm và dương của k_x, k_y, k_z có cùng năng lượng và biểu diễn cùng trạng thái năng lượng. Bởi vì những giá trị âm của k_x, k_y, k_z không biểu diễn



Hình 3.24| (a) Mạng hai chiều của những trạng thái lượng tử trong không gian k. (b) Một phần tám hình cầu không gian k dương

thêm những trạng thái lượng tử, nên mật độ trạng thái lượng tử sẽ được xét chỉ trong một phần tám hình cầu của không gian k như được biểu diễn trong hình 3.24b.

Khoảng cách giữa hai trạng thái lượng tử theo hướng k_x là

$$k_{x+1} - k_x = (n_x + 1)\frac{\pi}{a} - n_x\frac{\pi}{a} = \frac{\pi}{a} \tag{3.61}$$

Tổng quát hóa kết quả này cho trường hợp ba chiều, thể tích V_k của một trạng thái lượng tử là

$$V_k=(\pi/a)^3 \tag{3.62}$$

Bây giờ chúng ta có thể xác định mật độ trạng thái lượng tử trong không gian *k*. Thể tích vi phân trong không gian *k* được biểu diễn trong hình 3.24b và bằng $4\pi k^2 dk$, vì vậy mật độ trạng thái lượng tử trong không gian *k* có thể được viết là

$$g_T(k)dk = 2\left(\frac{1}{8}\right)\frac{4\pi k^2 dk}{\left(\frac{\pi}{a}\right)^3} \tag{3.63}$$

Hệ số 2 đầu tiên tính đến hai trạng thái spin được phép cho mỗi trạng thái lượng tử; hệ số tiếp theo 1/8 tính đến trường hợp chúng ta xem xét những trạng thái lượng tử của những giá trị dương k_x, k_y, k_z. Thành phần $4\pi k^2 dk$ một lần nữa là thể tích vi phân và thành phần $(\pi/a)^3$ là thể tích của một trạng thái lượng tử. Phương trình (3.63) có thể được đơn giản hóa thành

$$g_T(k)dk = \frac{\pi k^2 dk}{\pi^3}a^3 \tag{3.64}$$

Phương trình (3.64) biểu diễn hàm mật độ trạng thái theo động lượng, qua tham số *k*. Bây giờ chúng ta có thể xác định mật độ trạng thái lượng tử như một hàm của năng lượng E. Đối với electron tự do, *E* và *k* liên hệ nhau qua hệ thức

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \tag{3.65a}$$

Hoặc

$$k = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2mE} \tag{3.65b}$$

Lấy vi phân dk

$$dk = \frac{1}{\hbar}\sqrt{\frac{m}{2E}}dE \tag{3.66}$$

Sau đó, thế những biểu thức của k^2 và dk vào trong phương trình (3.64), số trạng thái lượng tử giữa E và $E+dE$ là

$$g_T(E)dE = \frac{\pi a^3}{\pi^3}\left(\frac{2mE}{\hbar^2}\right).\frac{1}{\hbar}\sqrt{\frac{m}{2E}}dE \tag{3.67}$$

Bởi vì $\hbar=h/2\pi$, phương trình (3.67) có thể viết là

$$g_T(E)dE = \frac{4\pi a^3}{h^3}.(2m)^{3/2}.\sqrt{E}dE \tag{3.68}$$

Phương trình (3.68) cho biết tổng số trạng thái lượng tử giữa E và $E+dE$ trong thể tích không gian tinh thể a^3. Nếu chúng ta chia cho thể tích a^3 thì chúng ta sẽ thu được mật độ trạng thái lượng tử trên một đơn vị thể tích của tinh thể. Do đó, phương trình (3.68) trở thành

$$g_T(E) = \frac{4\pi(2m)^{3/2}}{h^3}.\sqrt{E} \tag{3.69}$$

Ví dụ: Mật độ trạng thái của một electron tự do được cho bởi phương trình (3.69). Hãy tính mật độ trạng thái trên một đơn vị thể tích trong khoảng năng lượng từ 0 đến 1eV.

Giải

Từ phương trình (3.69), suy ra mật độ trạng thái lượng tử trên một đơn vị thể tích là:

$$N = \int_0^{1eV} g(E)dE = \frac{4\pi(2m)^{3/2}}{h^3}\int_0^{1eV}\sqrt{E}dE$$

$$\Leftrightarrow N = \frac{4\pi(2m)^{3/2}}{h^3}.\frac{2}{3}.E^{3/2}$$

Thế số vào, ta được:

$$\Leftrightarrow N = \frac{4\pi[2(9.11\times10^{31})]^{3/2}}{(6.625\times10^{-34})^3}.\frac{2}{3}.(1.6\times10^{-19})^{3/2} = 4.5\times10^{27}\,m^{-3}$$

Vậy

$$N = 4.5\times10^{27}\,trang-thai/m^{-3}$$

Nhận xét: Mật độ trạng thái thông thường rất lớn. Như chúng ta sẽ thấy trong các phần sau và trong các chương tiếp theo, mật độ trạng thái trong bán dẫn cũng là một số rất lớn, nhưng thường thì nó nhỏ hơn mật độ nguyên tử trong tinh thể bán dẫn.

Mật độ trạng thái lượng tử là hàm theo năng lượng *E*. Khi năng lượng của electron tự do này nhỏ, số trạng thái lượng tử giảm. Hàm mật độ này thực ra là mật độ đôi, trong đó đơn vị là số trạng thái trên một đơn vị năng lượng trên một đơn vị thể tích.

3.4.2 Mở rộng cho bán dẫn

Trong phần trước, chúng ta đã rút ra biểu thức tổng quát của hàm mật độ trạng thái của electron dùng mô hình electron tự do với khối lượng *m* bị giam trong một giếng thế vô hạn ba chiều. Chúng ta có thể mở rộng mô hình tổng quát này cho bán dẫn để xác định mật độ trạng thái lượng tử trong vùng dẫn và vùng hóa trị. Những electron và lỗ trống bị giam trong tinh thể bán dẫn vì vậy chúng ta sẽ lại dùng mô hình giếng thế không xác định.

Mối quan hệ parabon giữa năng lượng và động lượng của electron tự do theo phương trình (3.28) *là* $E=p^2/2m=\hbar^2k^2/2m$. Hình 3.16a biểu diễn vùng dẫn trong không gian rút gọn k. Đường cong *E* theo k gần *k=0* tại đáy vùng dẫn có thể được xem là gần như parabon, vì vậy chúng ta có thể viết

$$E = E_c + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_n^*} \tag{3.70}$$

ở đây E_c là năng lượng ở đáy vùng dẫn và m^*_n là khối lượng hiệu dụng của electron. Phương trình (3.70) có thể được viết là

$$E - E_c = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_n^*} \tag{3.71}$$

Dạng tổng quát của hệ thức *E* theo *k* cho electron ở đáy vùng dẫn giống như electron tự do, ngoại trừ khối lượng được thay bằng khối lượng hiệu dụng. Do đó, chúng ta có thể xem electron ở đáy vùng dẫn là electron tự do với khối lượng của riêng nó. Vế phải của phương trình (3.71) cùng dạng với vế phải của phương trình (3.28), nó được dùng để rút ra hàm mật độ trạng thái. Chúng ta có thể tổng quát hóa những kết quả của electron tự do trong phương trình (3.69) và suy ra mật độ trạng thái năng lượng điện tử trong vùng dẫn là

$$g_c(E) = \frac{4\pi (2m_n^*)^{3/2}}{h^3} \cdot \sqrt{E - E_c} \tag{3.72}$$

Phương trình (3.72) có nghĩa khi $E \geq E_c$. Khi năng lượng của electron trong vùng dẫn giảm, số trạng thái lượng tử cũng giảm.

Mật độ trạng thái lượng tử trong vùng hóa trị có thể thu được bằng cách dùng mô hình giếng thế không xác định, bởi vì lỗ trống cũng bị giam trong bán dẫn và có thể được xem như hạt tự do. Khối lượng hiệu dụng của lỗ trống là m^*_p. Hình 3.16b biểu diễn vùng hóa trị trong không gian rút gọn k. Chúng ta cũng có thể xem một cách gần đúng đồ thị E theo k gần k=0 là parabon cho lỗ trống tự do, vì thế

$$E = E_v - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_p^*} \tag{3.73}$$

Phương trình (3.73) có thể được viết lại là

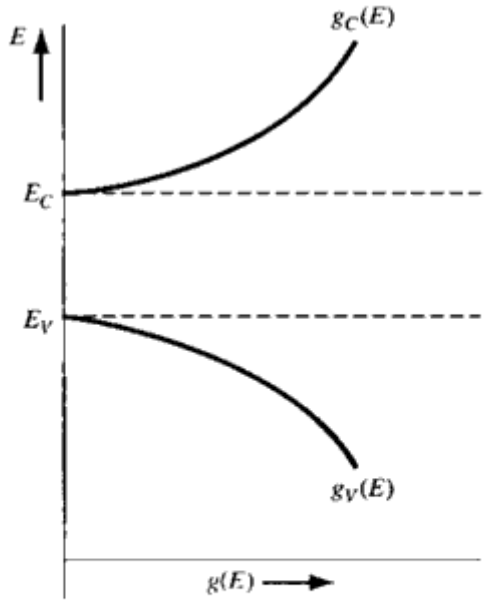
$$E_v - E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_p^*} \tag{3.74}$$

Một lần nữa, vế phải của phương trình (3.74) có cùng dạng với dạng được dùng để rút ra hàm mật độ trạng thái. Do đó, chúng ta có thể tổng quát hóa hàm mật độ trạng thái từ phương trình (3.69) để áp dụng cho vùng hóa trị, vì thế

$$g_v(E) = \frac{4\pi (2m_p^*)^{3/2}}{h^3} \cdot \sqrt{E_v - E} \tag{3.75}$$

Phương trình (3.75) có nghĩa khi $E \leq E_v$.

Chúng ta đã thừa nhận rằng trạng thái lượng tử không tồn tại trong vùng cấm, vì vậy $g(E)=0$ khi $E_v < E < E_c$. Hình 3.25 biểu diễn mật độ trạng thái như hàm theo năng lượng. Nếu khối lượng hiệu dụng của electron và lỗ trống bằng nhau thì $g_c(E)$ và $g_v(E)$ sẽ đối xứng qua mức năng lượng nằm giữa E_c và E_v. Ta gọi nó là năng lượng giữa khe, E_{midgap}.



Hình 3.25| Mật độ trạng thái năng lượng trong vùng dẫn và mật độ trạng thái năng lượng trong vùng hóa trị như là hàm số của năng lượng

3.5|CƠ HỌC THỐNG KÊ

Khi khảo sát một số lượng lớn hạt, chúng ta chỉ quan tâm đến đặc tính thống kê của nhóm như toàn thể chứ không quan tâm đến đặc tính của từng hạt riêng biệt. Chẳng hạn, chất khí trong bình chứa sẽ tác dụng một áp suất trung bình lên thành bình. Áp suất này là kết quả tác động tổng hợp của những phân tử khí, nhưng chúng ta không theo dõi từng phân tử riêng biệt khi nó va chạm với thành bình. Tương tự, trong tinh thể, tính chất điện sẽ được xác định theo đặc tính thống kê của một số lượng lớn các electron.

3.5.1 Các định luật thống kê

Trong việc xác định đặc tính thống kê của các hạt, chúng ta phải xét những định luật thống kê mà các hạt này tuân theo. Có 3 định luật phân bố xác định phân bố của hạt vào những trạng thái năng lượng có sẵn.

Định luật thứ nhất là hàm phân bố Maxwell – Boltzmann. Trong trường hợp này, các hạt được xem là có thể phân biệt được bằng cách đánh số từ 1 đến N, và

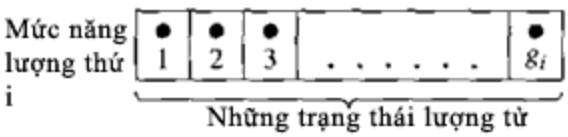
không giới hạn số hạt được phép trong mỗi trạng thái năng lượng. Trạng thái của phân tử khí trong bình chứa ở áp suất thấp tuân theo phân bố này.

Định luật thứ hai là phân bố Bose – Einstein. Hạt trong trường hợp này không thể phân biệt được và một lần nữa không có giới hạn số hạt được phép trong mỗi trạng thái lượng tử. Trạng thái của photon, hoặc bức xạ vật đen tuân theo phân bố này.

Phân bố thứ 3 là hàm phân bố Fermi – Dirac. Trong trường hợp này, các hạt cũng không thể phân biệt được, nhưng lúc này chỉ một hạt được phép trong mỗi trạng thái lượng tử. Những electron trong tinh thể tuân theo định luật này. Trong các trường hợp trên, các hạt được giả sử là không tương tác.

3.5.2 Hàm phân bố Fermi-Dirac

Khi nghiên cứu phần này, bạn không cần thiết phải hiểu cách chứng minh để rút ra phân bố Fermi-Dirac, bạn chỉ cần biết dạng của hàm phân bố Fermi-Dirac $f_F(E)$ và ý nghĩa của nó. Nhưng ở đây, chúng tôi cũng đưa vào cách suy luận để rút ra phân bố này để bạn đọc tham khảo.



Hình 3.26| Mức năng lượng thứ i với g_i trạng thái lượng tử

Hình 3.26 biểu diễn mức năng lượng thứ i với g_i trạng thái lượng tử. Số hạt tối đa được phép trong mỗi trạng thái lượng tử tuân theo nguyên lí loại trừ Pauli. Có g_i cách chọn nơi để đặt hạt đầu tiên, $(g_i–1)$ cách chọn nơi đặt hạt thứ hai, $(g_i–2)$ cách chọn nơi đặt hạt thứ ba, và v.v…Vì thế số cách sắp xếp N_i hạt vào mức năng lượng thứ i (ở đây $N_i \leq g_i$) là

$$g_i(g_i-1).....[g_i-(N_i-1)=\frac{g_i!}{(g_i-N_i)!}] \tag{3.76}$$

Biểu thức này bao gồm tất cả các hoán vị của N_i hạt.

Tuy nhiên, bởi vì những hạt là không thể phân biệt được, số $N_i!$ hoán vị mà hạt có trong bất kì cách sắp xếp nào không được coi như những sắp xếp riêng biệt. Sự hóan vị của bất kì 2 electron nào cũng không tạo ra một sự sắp xếp mới. Do đó, số cách độc lập thực sự để sắp N_i hạt vào mức thứ i là

$$W_i = \frac{g_i!}{N_i!(g_i - N_i)!} \tag{3.77}$$

Phương trình (3.77) cho ta số cách thực sự độc lập để thực hiện phân bố N_i hạt vào mức thứ i. Tổng số cách sắp xếp (N_1, N_2, N_3,….,N_n) những hạt không phân biệt vào n mức năng lượng là tích của tất cả những phân bố, hoặc

$$W = \prod_{i=1}^{n} \frac{g_i!}{N_i!(g_i - N_i)!} \tag{3.78}$$

Tham số W là tổng số cách để sắp xếp n electron trong hệ này. Chúng ta muốn tìm phân bố có xác suất lớn nhất, nghĩa là chúng ta muốn tìm giá trị cực đại của W. Cực đại W được tìm bằng cách thay đổi N_i trong số E_i mức, nó làm thay đổi phân bố, nhưng cùng lúc đó, chúng ta sẽ giữ tổng số hạt và năng lượng toàn phần không đổi.

Chúng ta có thể viết hàm phân bố xác suất là

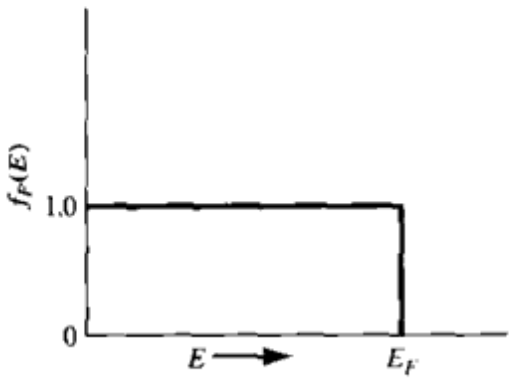
$$\frac{N(E)}{g(E)} = f_F(E) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E - E_F}{kT}\right)} \tag{3.79}$$

ở đây E_F được gọi là năng lượng Fermi. $N(E)$ là số hạt trên một đơn vị thể tích trên một đơn vị năng lượng và hàm $g(E)$ là số trạng thái lượng tử trên một đơn vị thể tích trên một đơn vị năng lượng. Hàm $f_F(E)$ được gọi là hàm phân bố Fermi-Dirac hoặc hàm phân bố cho xác suất mà một trạng thái lượng tử tại mức năng lượng E bị chiếm bởi một electron. Một cách giải thích khác về hàm phân bố là $f_F(E)$ là tỉ số những trạng thái lượng tử bị chiếm trong tổng số trạng thái lượng tử ở năng lượng E.

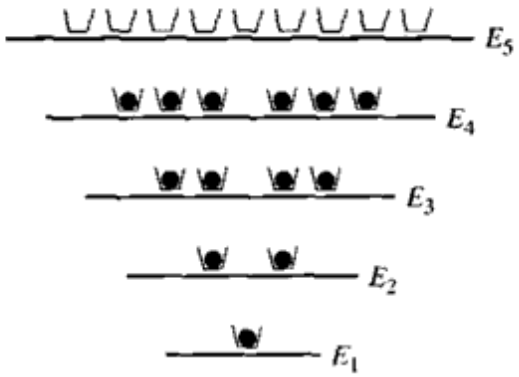
3.5.3 Hàm phân bố và năng lượng Fermi

Để hiểu về ý nghĩa của hàm phân bố và năng lượng Fermi, chúng ta sẽ vẽ đồ thị hàm phân bố theo năng lượng. Đầu tiên, cho $T=0K$ và xét trường hợp khi $E<E_F$. Số hạng e mũ trong phương trình (3.79) trở thành $exp[(E-E_F)/kT] \rightarrow exp(-\infty)=0$. Cuối cùng hàm phân bố sẽ bằng $f_F(E<E_F)=1$. Chúng ta lại cho T=0K và xét trường hợp $E>E_F$. Số hạng e mũ trong hàm phân bố trở thành $exp[(E-E_F)/kT] \rightarrow exp(+\infty) \rightarrow +\infty$. Cuối cùng hàm phân bố trở thành $f_F(E>E_F)=0$.

Hàm phân bố Fermi-Dirac tại $T=0K$ được vẽ trong hình 3.27. Kết quả này chứng tỏ rằng, tại T=0K, những electron ở trạng thái năng lượng thấp nhất của



Hình 3.27| Hàm Fermi theo năng lượng trong trường hợp T=0K

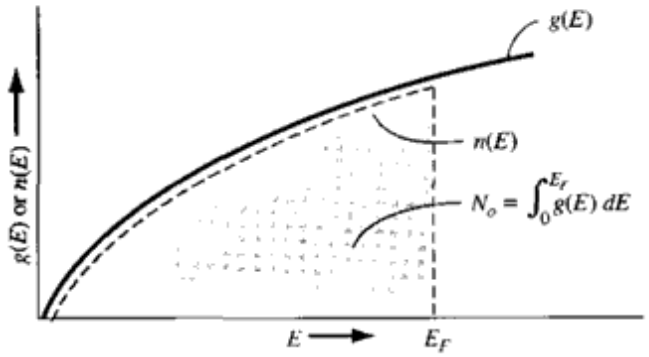


Hình 3.28 | Những trạng thái năng lượng rời rạc và những trạng thái lượng tử của một hệ nào đó tại T=0K

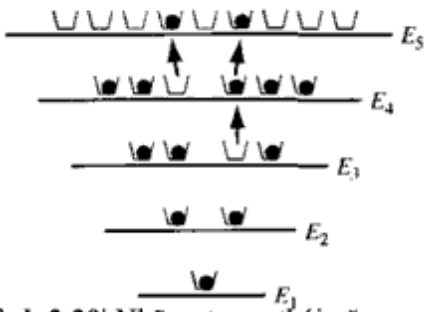
chúng. Xác suất để một trạng thái lượng tử bị chiếm bằng 1 khi $E>E_F$ và xác suất để một trạng thái lượng tử bị chiếm bằng 0 khi $E>E_F$. Tất cả các electron có năng lượng dưới năng lượng Fermi tại $T=0K$.

Hình 3.28 biểu diễn những mức năng lượng rời rạc của một hệ thống nào đó cùng với số trạng thái lượng tử có sẵn tại mỗi mức năng lượng. Đối với trường hợp này, nếu chúng ta giả sử rằng hệ chứa 13 electron thì hình 3.28 chỉ ra những electron này được phân bố vào những trạng thái lượng tử khác nhau như thế nào ở $T=0K$. Những electron sẽ ở trong trạng thái năng lượng thấp nhất có thể có, vì thế xác suất để một trạng thái lượng tử bị chiếm trong những mức năng lượng từ E_1 đến E_4 bằng 1, và xác suất để một trạng thái lượng tử bị chiếm ở mức năng lượng E_5 bằng 0. Trong trường hợp này, năng lượng Fermi phải ở trên E_4 nhưng thấp hơn E_5. Năng lượng Fermi xác định phân bố thống kê của những electron và không tương ứng với mức năng lượng nào cả.

Bây giờ xét trường hợp trong đó mật độ trạng thái lượng tử g(E) là hàm liên tục theo năng lượng như được biểu diễn trong hình 3.29. Nếu chúng ta có N_0 electron trong hệ này, thì phân bố của những electron này vào những trạng thái lượng tử tại T=0K được biểu diễn bởi những đường đứt nét. Những electron phải ở trạng thái năng lượng thấp nhất vì thế tất cả các trạng thái bên dưới E_F được làm đầy và tất cả những trạng thái năng lượng trên E_F trống. Nếu trong một hệ nào đó có g(E) và N_0 đã biết thì có thể xác định được mức Fermi E_F.



Hình 3.29| Mật độ trạng thái lượng tử và những electron trong một hệ năng lượng liên tục tại T=0K



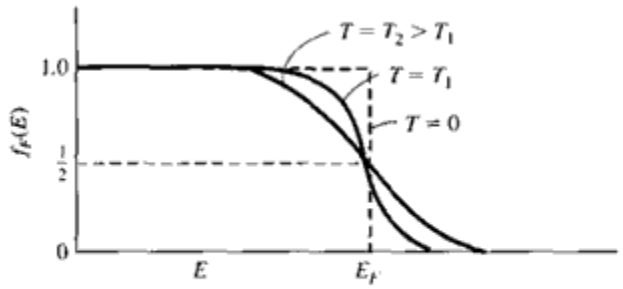
Hình 3.30| Những trạng thái năng lượng rời rạc và những trạng thái lượng tử của cùng một hệ được biểu diễn trong hình 3.28 khi T>0K

Xét trường hợp khi nhiệt độ tăng trên 0 K. Những electron thu được một lượng nhiệt năng nào đó vì thế một số electron có thể nhảy lên những mức năng lượng cao hơn, điều đó có nghĩa là sự phân bố electron vào những trạng thái năng lượng sẽ thay đổi. Hình 3.30 biểu diễn cùng những mức năng lượng rời rạc và những trạng thái lượng tử như trong hình 3.28. Sự phân bố những electron vào những trạng thái lượng tử đã thay đổi so với trường hợp T=0K. Hai electron từ mức E_4 đã thu đủ năng lượng để nhảy lên E_5, và một electron từ E_3 đã nhảy lên E_4. Khi nhiệt độ thay đổi, sự phân bố electron theo năng lượng cũng thay đổi.

Sự thay đổi trong phân bố các electron vào những mức năng lượng khi T>0K có thể được hiểu bằng cách vẽ đồ thị hàm phân bố Fermi-Dirac. Nếu chúng ta đặt E=E_F và T>0K thì phương trình (3.79) trở thành

$$f_F(E = E_F) = \frac{1}{1 + \exp(0)} = \frac{1}{2}$$

Xác suất để một trạng thái bị chiếm ở $E=E_F$ bằng ½. Hình 3.31 biểu diễn hàm phân bố Fermi-Dirac ở một vài nhiệt độ, giả sử năng lượng Fermi không phụ thuộc nhiệt độ



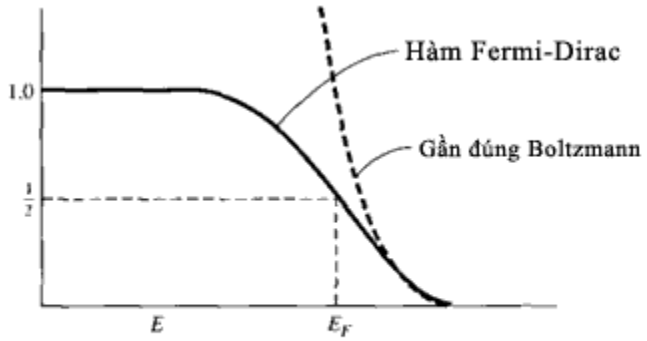
Hình 3.31| Hàm phân bố Fermi theo năng lượng ở các nhiệt độ khác nhau.

Chúng ta có thể thấy rằng khi nhiệt độ lớn hơn không độ tuyệt đối, xác suất để những trạng thái năng lượng trên E_F bị chiếm bởi các electron sẽ khác 0 và một số trạng thái năng lượng dưới E_F bị trống. Kết quả này có nghĩa là một số electron đã nhảy lên mức năng lượng cao hơn khi nhiệt năng tăng.

Xét trường hợp $E–E_F>>kT$, ở đây số hạng e mũ trong mẫu số của phương trình (3.79) lớn hơn 1 rất nhiều. Chúng ta có thể bỏ qua 1 ở mẫu, vì thế hàm phân bố Fermi trở thành

$$f_F(E) \approx \exp\left[\frac{-(E-E_F)}{kT}\right] \tag{3.80}$$

Phương trình (3.80) được gọi là gần đúng Maxwell-Boltzmann, hoặc đơn giản là gần đúng Boltzmann. Hình 3.33 biểu diễn hàm xác suất Fermi-Dirac và gần đúng Boltzmann. Hình này chỉ định khoảng năng lượng mà phép gần đúng áp dụng được.



Hình 3.33| Hàm phân bố Fermi-Dirac và gần đúng Maxwell-Boltzmann

Gần đúng Boltzmann có nghĩa khi $exp[(E–E_F)/kT] >> 1$. Tuy nhiên, trong thực tế thường dùng $E–E_F >> kT$ khi áp dụng gần đúng Boltzmann. Chúng ta sẽ dùng gần đúng Boltzmann này trong khi khảo sát về bán dẫn ở chương sau.

CHƯƠNG IV

Bán dẫn ở trạng thái cân bằng

TỔNG QUAN

Chúng ta đã xem xét bán dẫn nói chung và áp dụng những khái niệm cơ học lượng tử để xác định một số đặc tính của electron trong mạng đơn tinh thể. Trong chương này, chúng ta sẽ áp dụng một cách cụ thể những khái niệm này vào vật liệu bán dẫn. Đặc biệt, chúng ta sẽ dùng mật độ trạng thái lượng tử trong vùng dẫn và mật độ trạng thái lượng tử trong vùng hóa trị cùng với hàm phân bố Fermi-Dirac để xác định mật độ electron và lỗ trống tương ứng trong vùng dẫn và vùng hóa trị. Chúng ta cũng sẽ áp dụng khái niệm năng lượng Fermi cho vật liệu bán dẫn.

Chương này khảo sát bán dẫn ở trạng thái cân bằng. Trạng thái cân bằng, hoặc cân bằng nhiệt là trạng thái không có lực ngòai *[chẳng hạn như điện áp, điện trường, từ trường, hoặc Gradient nhiệt độ]* tác động vào bán dẫn. Trong trường hợp này, tất cả những tính chất của bán dẫn sẽ không phụ thuộc vào thời gian. Cân bằng là điểm khởi đầu của chúng ta trong việc xây dựng vật lí bán dẫn. Sau đó chúng ta sẽ có thể xác định những tính chất xuất hiện khi có sự lệch so với trạng thái cân bằng, chẳng hạn như khi một điện áp được đặt vào thiết bị bán dẫn.

Đầu tiên chúng ta sẽ xem xét tính chất của bán dẫn ròng, nghĩa là một tinh thể tinh khiết không có những nguyên tử tạp chất hoặc sai hỏng. Chúng ta sẽ thấy rằng những tính chất điện của bán dẫn có thể thay đổi theo ý muốn bằng cách thêm vào bán dẫn chủ một lượng có kiểm soát các nguyên tử tạp chất, còn gọi là những nguyên tử kích thích. Tùy thuộc vào loại tạp chất được đưa vào, hạt tải điện chiếm ưu thế trong bán dẫn có thể là electron trong vùng dẫn hoặc lỗ trống trong vùng hóa trị. Việc thêm những nguyên tử tạp chất sẽ thay đổi sự phân bố electron vào những trạng thái năng lượng sẵn có, vì vậy năng lượng Fermi trở thành một hàm của nồng độ và loại nguyên tử pha tạp.

Cuối cùng, như một phần của việc khảo sát này, chúng ta sẽ thử tìm hiểu sâu hơn ý nghĩa của năng lượng Fermi.

4.1|HẠT TẢI ĐIỆN TRONG BÁN DẪN

Dòng điện là đại lượng đặc trưng cho mức độ chuyển động có hướng của các điện tích. Trong bán dẫn, hai loại hạt tải điện, electron và lỗ trống có thể đóng góp vào dòng điện. Bởi vì dòng điện trong bán dẫn được xác định bằng số electron trong vùng dẫn và số lỗ trống trong vùng hóa trị, một tính chất quan trọng của bán dẫn là mật độ của những hạt tải điện này. Mật độ electron và lỗ trống có liên quan đến hàm mật độ trạng thái và hàm phân bố Fermi. Những hàm này đã được chúng ta xem xét ở các chương trước.

4.1.1 Phân bố electron và lỗ trống ở trạng thái cân bằng

Phân bố là mật độ electron trong khoảng năng lượng từ E đến E+dE.

Phân bố (theo năng lượng) của electron trong vùng dẫn bằng mật độ trạng thái lượng tử nhân với xác suất mà một trạng thái lượng tử bị chiếm bởi một electron. Phát biểu này được viết dưới dạng phương trình là

$$n(E) = g_c(E)\, f_F(E) \tag{4.1}$$

ở đây $f_F(E)$ là hàm phân bố Fermi-Dirac và $g_c(E)$ là mật độ trạng thái lượng tử trong vùng dẫn. Do đó, nồng độ electron tổng cộng trên một đơn vị thể tích trong vùng dẫn được tính bằng cách lấy tích phân phương trình (4.1) trên tòan bộ khoảng năng lượng vùng dẫn.

Tương tự, phân bố (theo năng lượng) của lỗ trống trong vùng hóa trị là mật độ trạng thái lượng tử trong vùng hóa trị nhân với xác suất mà một trạng thái không bị chiếm bởi electron. Chúng ta có thể biểu diễn điều này là

$$p(E) = g_v(E)[1 - f_F(E)] \tag{4.2}$$

Nồng độ lỗ trống tổng cộng trên một đơn vị thể tích được tính bằng cách lấy tích phân hàm này trên tòan bộ khoảng năng lượng vùng hóa trị.

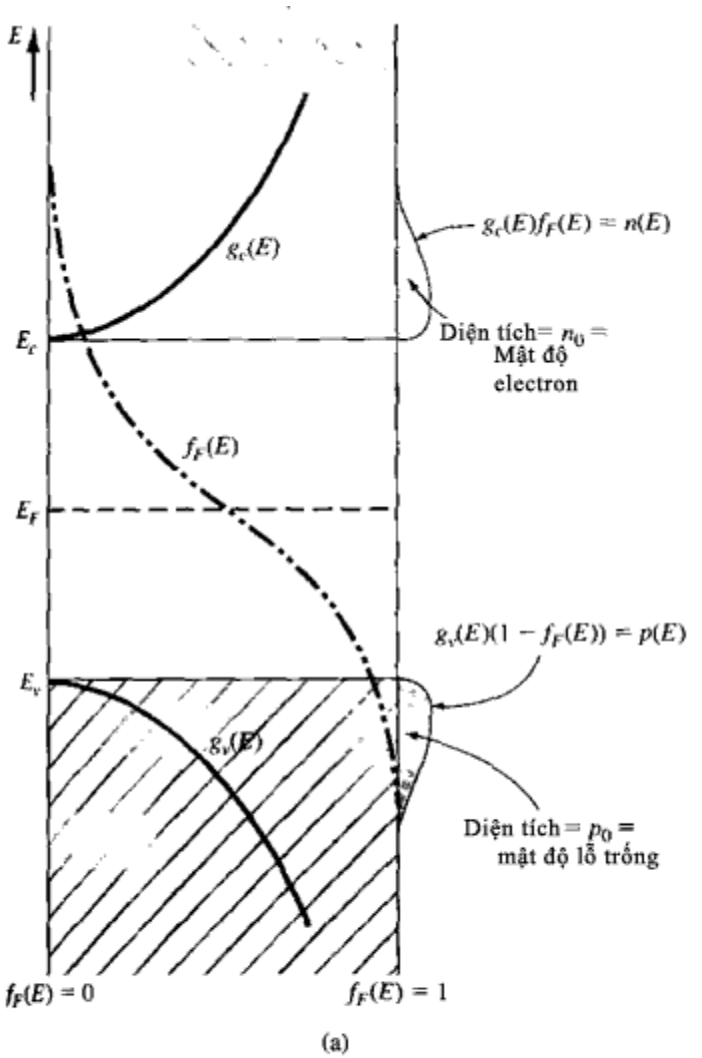
Để tìm nồng độ electron và lỗ trống cân bằng nhiệt, chúng ta cần xác định vị trí của mức Fermi E_F đối với đáy của năng lượng vùng dẫn E_c và đỉnh của năng lượng vùng hóa trị E_v. Để trả lời câu hỏi này, đầu tiên chúng ta hãy xem xét bán dẫn ròng. Một bán dẫn ròng lí tưởng là bán dẫn tinh khiết không có những nguyên tử tạp chất và những sai hỏng mạng trong tinh thể. Trong chương trước, chúng ta đã thống nhất với nhau rằng, đối với một bán dẫn ròng tại $T=0K$, tất cả những

trạng thái năng lượng trong vùng hóa trị đầy electron và tất cả trạng thái năng lượng trong vùng dẫn hoàn toàn trống electron. Do đó, mức năng lượng Fermi phải hơi ở giữa E_c và E_v. (Năng lượng Fermi không cần ứng với một mức năng lượng cụ thể nào.)

Dưới đây là phần lập luận để xác định vị trí của mức Fermi trong trường hợp $T > 0K$. Trong lập luận này, chúng ta sẽ giả sử rằng khối lượng hiệu dụng của electron và lỗ trống gần bằng nhau. Điều này dẫn đến mức Fermi nằm rất gần năng lượng giữa khe $(=1/2[E_c+E_v])$. Tuy nhiên, thực tế thì khối lượng hiệu dụng của electron và lỗ trống không hề bằng nhau. Vì vậy, mức Fermi phải dịch chuyển lên trên hoặc dưới so với năng lượng giữa khe. Nhưng dù sao đi nữa, mục đích của chúng ta chỉ là muốn chứng minh năng lượng Fermi vẫn còn nằm trong vùng cấm. Ở phần 4.1.4, chúng ta sẽ tìm vị trí mức Fermi bằng một lập luận chặt chẽ hơn.

Khi nhiệt độ bắt đầu tăng trên $0\ K$, những electron hóa trị sẽ thu được nhiệt năng. Một vài electron trong vùng hóa trị có thể thu đủ năng lượng để nhảy lên vùng dẫn. Khi một electron nhảy từ vùng hóa trị lên vùng dẫn, một trạng thái trống, hoặc lỗ trống, được tạo ra trong vùng hóa trị. Do đó, trong bán dẫn ròng, electron và lỗ trống được tạo ra từng cặp sao cho số electron trong vùng dẫn bằng số lỗ trống trong vùng hóa trị.

Hình 4.1 biểu diễn đồ thị hàm mật độ trạng thái trong



Hình 4.1| Hàm mật độ trạng thái, hàm phân bố Fermi -Dirac và diện tích biểu diễn mật độ electron và lỗ trống trong trường hợp mức Fermi nằm gần năng lượng giữa khe.

vùng dẫn $g_c(E)$, mật độ trạng thái trong vùng hóa trị $g_v(E)$, và hàm phân bố Fermi-Dirac đối với $T > 0$ khi E_F nằm gần khỏang giữa E_c và E_v. Lúc này, nếu chúng ta giả sử rằng khối lượng hiệu dụng của electron và lỗ trống bằng nhau thì $g_c(E)$ và $g_v(E)$ là những hàm đối xứng qua năng lượng giữa khe (năng lượng ở giữa E_c và E_v). Chúng ta đã biết từ trước rằng hàm $f_F(E)$ khi $E > E_F$ đối xứng với hàm $1-f_F(E)$ khi $E < E_F$ qua giá trị năng lượng $E=E_F$.

Tích của $g_c(E)$ và $f_F(E)$ là phân bố của electron $n(E)$ trong vùng dẫn được cho bởi phương trình (4.1).Tích của $g_v(E)$ và $[1-f_F(E)]$ là phân bố của lỗ trống $p(E)$ trong vùng hóa trị được cho bởi phương trình (4.2). Hai tích này được chỉ ra trong hình. Do đó diện tích dưới những đường cong này là mật độ electron tổng cộng trong vùng dẫn và mật độ lỗ trống tổng cộng trong vùng hóa trị. Từ đây chúng ta thấy rằng nếu $g_c(E)$ và $g_v(E)$ đối xứng, năng lượng Fermi phải là năng lượng giữa khe để thu được nồng độ electron và lỗ trống bằng nhau. Nếu khối lượng electron và lỗ trống không bằng nhau thì hàm mật độ trạng thái hiệu dụng $g_c(E)$ và $g_v(E)$ không đối xứng qua năng lượng giữa khe. Do đó, mức Fermi đối với bán dẫn ròng sẽ hơi dịch chuyển so với năng lượng giữa khe để có nồng độ electron và lỗ trống bằng nhau.

4.1.2 Những phương trình của n_0 và p_0

Chúng ta đã thừa nhận rằng năng lượng Fermi trong bán dẫn ròng gần năng lượng giữa khe. Sau này chúng ta sẽ thấy rằng trong trường hợp đặc biệt, năng lượng Fermi có thể lệch so với năng lượng giữa khe. Tuy nhiên, đầu tiên chúng ta sẽ giả sử rằng mức Fermi vẫn còn ở trong khe năng lượng.

Phương trình nồng độ cân bằng nhiệt của electron có thể tìm bằng cách lấy tích phân phương trình (4.1) trên vùng dẫn, hoặc

$$n_0 = \int g_c(E)\, f_E(E) dE \qquad (4.3)$$

Giới hạn dưới của tích phân là E_c và giới hạn trên của tích phân có thể là đỉnh của năng lượng vùng dẫn. Tuy nhiên, bởi vì hàm phân bố Fermi tiến nhanh tới 0 khi năng lượng tăng như được chỉ ra trong hình 4.1, chúng ta có thể lấy giới hạn trên của tích phân là vô cùng.

Chúng ta đang giả sử rằng năng lượng Fermi ở trong khe năng lượng. Đối với electron trong vùng dẫn, chúng ta có $E > E_c$. Nếu $(E_c - E_F) >> kT$, thì $(E - E_F) >> kT$, vì thế hàm phân bố Fermi biến thành gần đúng Boltzmann,

$$f_F(E) = \frac{1}{1 + \exp\dfrac{E - E_F}{kT}} \approx \exp\frac{[-(E - E_F)]}{kT} \tag{4.4}$$

Áp dụng gần đúng Boltzmann cho phương trình (4.3), mật độ electron trong vùng dẫn là

$$n_0 = \int_{E_c}^{\infty} \frac{4\pi (2m_n^*)^{3/2}}{h^3} \sqrt{E - E_c}\, \exp\left[\frac{-(E - E_F)}{kT}\right] dE \tag{4.5}$$

Tích phân của phương trình (4.5) có thể được tính dễ dàng hơn bằng cách đổi biến. Nếu chúng ta đặt

$$\eta = \frac{E - E_c}{kT} \tag{4.6}$$

Thì phương trình (4.5) trở thành

$$n_0 = \frac{4\pi (2m_n^* kT)^{3/2}}{h^3} \exp\left[\frac{-(E_c - E_F)}{kT}\right] \int_0^{\infty} \eta^{1/2} \exp(-\eta)\, d\eta \tag{4.7}$$

Hàm dưới dấu tích phân là hàm gamma, tích phân của nó là:

$$\int_0^{\infty} \eta^{1/2} \exp(-\eta) d\eta = \frac{1}{2}\sqrt{\pi} \tag{4.8}$$

Thì phương trình (4.7) trở thành

$$n_0 = 2\left(\frac{2\pi m_n^* kT}{h^2}\right)^{3/2} \exp\left[\frac{-(E_c - E_F)}{kT}\right] \tag{4.9}$$

Chúng ta có thể định nghĩa một hệ số N_c là

$$N_c = 2\left(\frac{2\pi m_n^* kT}{h^2}\right)^{3/2} \tag{4.10}$$

Vì thế nồng độ electron cân bằng nhiệt trong vùng dẫn có thể được viết là

$$n_0 = N_c \exp\left[\frac{-(E_c - E_F)}{kT}\right] \tag{4.11}$$

Hệ số N_c được gọi là mật độ hiệu dụng của hàm trạng thái trong vùng dẫn. Nếu chúng giả sử rằng $m_n^*=m_0$, thì giá trị của hàm mật độ trạng thái hiệu dụng tại $T=300K$ là $N_c=2.5\times10^{19}cm^{-3}$, đó là bậc độ lớn của N_c cho hầu hết các chất bán dẫn. Nếu khối lượng hiệu dụng của electron lớn hơn hay nhỏ hơn m_0 thì giá trị của hàm mật độ trạng thái hiệu dụng sẽ thay đổi tương ứng, nhưng vẫn còn cùng bậc độ lớn.

VÍ DỤ 4.1

Tính tóan xác suất để trạng thái năng lượng tại $E=E_c$ bị chiếm bởi một electron và tính nồng độ electron cân bằng nhiệt trong Silic tại $T=300K$.

Giả sử năng lượng Fermi thấp hơn 0.25 eV so với năng lượng vùng dẫn. Giá trị của N_c đối với Silic tại $T=300K$ là $N_c=2.8\times10^{19}\ cm^{-3}$.

- Giải

Xác suất mà một trạng thái tại $E=E_c$ bị chiếm bởi một electron là

$$f_F(E_c) = \frac{1}{1+\exp\left(\frac{E_c - E_F}{kT}\right)} \approx \exp\left[\frac{-(E_c - E_F)}{kT}\right]$$

Hay

$$f_F(E_c) = \exp\left(\frac{-0.25}{0.0259}\right) = 6.43\times10^{-5}$$

Mật độ electron là

$$n_0 = N_c \exp\left[\frac{-(E_c - E_F)}{kT}\right] = \left(2.8\times10^{19}\right)\exp\left(\frac{-0.25}{0.0259}\right)$$

Hay $n_0 = 1.8\times10^{15}cm^{-3}$

- Kết luận

Xác suất mà một trạng thái bị chiếm rất nhỏ, nhưng vì có một số lượng lớn các trạng thái nên nồng độ electron là một giá trị có thể chấp nhận được.

Nồng độ lỗ trống ở trạng thái cân bằng nhiệt trong vùng hóa trị được tính bằng cách lấy tích phân phương trình (4.2) trên vùng hóa trị:

$$p_0 = \int g_v(E)[1 - f_E(E)]dE \tag{4.12}$$

Chú ý rằng

$$1 - f_F(E) = \frac{1}{1 + \exp\dfrac{E_F - E}{kT}} \tag{4.13a}$$

Đối với những trạng thái năng lượng trong vùng hóa trị, $E < E_v$. Nếu $(E_F - E_v) >> kT$ (hàm Fermi vẫn còn được giả sử là ở trong khe năng lượng), thì chúng ta có một dạng hơi khác với gần đúng Boltzmann. Phương trình (4.13a) có thể được viết là

$$1 - f_F(E) = \frac{1}{1 + \exp\dfrac{E_F - E}{kT}} \approx \exp\left[\frac{-(E_F - E)}{kT}\right] \tag{4.13b}$$

Áp dụng gần đúng Boltzmann của phương trình (4.13b) cho phương trình (4.12), chúng ta tìm được mật độ lỗ trống ở trạng thái cân bằng nhiệt trong vùng hóa trị là

$$p_0 = \int_{-\infty}^{E_v} \frac{4\pi(2m_p^*)^{3/2}}{h^3}\sqrt{E_v - E}\,\exp\left[\frac{-(E_F - E)}{kT}\right]dE \tag{4.14}$$

ở đây giới hạn dưới của tích phân được lấy là $-\infty$ thay vì đáy của vùng hóa trị. Hàm phân bố Fermi-Dirac giảm đủ nhanh vì thế sự gần đúng này có thể áp dụng được.

Phương trình (4.14) có thể được tính tóan dễ dàng hơn bằng cách lại thực hiện phương pháp đổi biến. Nếu chúng ta đặt

$$\eta' = \frac{E_v - E}{kT} \tag{4.15}$$

Thì phương trình (4.14) trở thành

$$p_0 = \frac{-4\pi(2m_p^* kT)^{3/2}}{h^3} \exp\left[\frac{-(E_F - E_v)}{kT}\right] \int_{+\infty}^{0} (\eta')^{1/2} \exp(-\eta')\, d\eta' \qquad (4.16)$$

ở đây dấu trừ là do vi phân $dE = -kTd\eta'$. Chú ý rằng giới hạn dưới của η' là $+\infty$ khi $E = -\infty$. Nếu chúng ta đổi cận tích phân, chúng ta phải đưa vào một dấu trừ khác. Từ phương trình (4.8), phương trình (4.16) trở thành

$$p_0 = 2\left(\frac{2\pi m_p^* kT}{h^2}\right)^{3/2} \exp\left[\frac{-(E_F - E_v)}{kT}\right] \qquad (4.17)$$

Chúng ta có thể định nghĩa một hệ số N_v là

$$N_v = 2\left(\frac{2\pi m_p^* kT}{h^2}\right)^{3/2} \qquad (4.18)$$

Hệ số này được gọi là *hàm mật độ trạng thái hiệu dụng trong vùng hóa trị*. Lúc này, mật độ lỗ trống cân bằng nhiệt trong vùng hóa trị có thể được viết là

$$p_0 = N_v \exp\left[\frac{-(E_F - E_v)}{kT}\right] \qquad (4.19)$$

Độ lớn của N_v cũng có bậc cỡ $10^{19}\ cm^{-3}$ tại $T=300K$ cho đa số các chất bán dẫn.

VÍ DỤ 4.2

Tính mật độ lỗ trống ở trạng thái cân bằng nhiệt của Silic tại $T=400K$.

Giả sử rằng năng lượng Fermi cao hơn năng lượng vùng hóa trị là 0.27 eV. Giá trị của N_v đối với Silic tại $T=300K$ là $N_v = 1.04\times10^{19}\ cm^{-3}$.

- Giải

  Giá trị của N_v tại $T=400K$ là:

  $$N_v = (1.04\times10^{19})\left(\frac{400}{300}\right)^{3/2} = 1.60\times10^{19}\,\text{cm}^{-3}$$

  Và

  $$kT = (0.0259)\left(\frac{400}{300}\right) = 0.03453eV$$

  Do đó nồng độ lỗ trống là

$$p_0 = N_v \exp\left[\frac{-(E_F - E_v)}{kT}\right] = (1.60\times10^{19})\exp\left(\frac{-0.27}{0.03453}\right)$$

Hoặc

$$p_0 = 6.43\times10^{15}\,cm^{-3}$$

- Kết luận

  Giá trị của N_v tại bất kì nhiệt độ nào có thể tìm bằng cách dùng giá trị *ở 300K* và sự phụ thuộc nhiệt độ.

Hàm mật độ trạng thái hiệu dụng, N_c và N_v của một chất bán dẫn là không đổi ở một nhiệt độ xác định. Bảng 4.1 cho giá trị của hàm mật độ trạng thái và khối lượng hiệu dụng của Silic, GaAs, và Germani. Chú ý rằng đối với GaAs, N_c nhỏ hơn giá trị điển hình $10^{19}\ cm^{-3}$. Sự khác nhau này là do khối lượng hiệu dụng của electron trong GaAs nhỏ.

Bảng 4.1| Hàm mật độ trạng thái hiệu dụng và khối lượng hiệu dụng

	N_c (cm^{-3})	N_v (cm^{-3})	m_n^*/m_0	m_p^*/m_0
Si	2.8×10^{19}	1.04×10^{19}	1.08	0.56
GaAs	4.7×10^{17}	7.0×10^{18}	0.067	0.48
Ge	1.04×10^{19}	6.0×10^{18}	0.55	0.37

Nồng độ electron ở trạng thái cân bằng nhiệt trong vùng dẫn và lỗ trống trong vùng hóa trị có liên hệ trực tiếp với mật độ trạng thái hiệu dụng và mức năng lượng Fermi.

4.1.3 Nồng độ hạt tải nội tại

Đối với bán dẫn ròng, mật độ electron trong vùng dẫn bằng với mật độ lỗ trống trong vùng hóa trị. Chúng ta có thể kí hiệu n_i và p_i tương ứng là nồng độ electron và lỗ trống trong bán dẫn ròng. Những đại lượng này thường được gọi là nồng độ electron nội tại và nồng độ lỗ trống nội tại. Tuy nhiên vì $n_i=p_i$, vì vậy thông thường chúng ta dùng đại lượng n_i là nồng độ hạt tải điện nội tại, đại lượng này đề cập đến cả nồng độ electron nội tại và nồng độ lỗ trống nội tại.

Mức năng lượng Fermi đối với bán dẫn ròng được gọi là năng lượng Fermi riêng, hoặc $E_F \equiv E_{Fi}$. Nếu chúng ta áp dụng phương trình (4.11) và (4.19) cho bán dẫn ròng, thì chúng ta có thể viết

$$n_0 = n_i = N_c \exp\left[\frac{-(E_c - E_{Fi})}{kT}\right] \tag{4.20}$$

Và

$$p_0 = p_i = n_i = N_v \exp\left[\frac{-(E_{Fi} - E_v)}{kT}\right] \tag{4.21}$$

Nếu chúng ta lấy tích của phương trình (4.20) và (4.21), chúng ta thu được

$$n_i^2 = N_c N_v \exp\left[\frac{-(E_c - E_{Fi})}{kT}\right].\exp\left[\frac{-(E_{Fi} - E_v)}{kT}\right] \tag{4.22}$$

Hoặc

$$n_i^2 = N_c N_v \exp\left[\frac{-(E_c - E_v)}{kT}\right] = N_c N_v \exp\left[\frac{-E_g}{kT}\right] \tag{4.23}$$

ở đây E_g là năng lượng của khe năng lượng (hay còn gọi là năng lượng vùng cấm). Đối với một bán dẫn xác định tại một nhiệt độ không đổi, giá trị của n_i là hằng số, và không phụ thuộc vào năng lượng Fermi.

Nồng độ hạt tải điện nội tại của Silic tại *T=300K* có thể được tính bằng cách dùng giá trị hàm mật độ trạng thái hiệu dụng từ bảng 4.1. Giá trị của n_i được tính từ phương trình (4.23) đối với E_g*=1.12 eV* là $n_i = 6.95\times10^9\ cm^{-3}$. Giá trị được thừa nhận rộng rãi của silic ở T=300K gần bằng $1.5\times10^{10}\ cm^{-3}$.Giá trị này có thể sai lệch chút ít trong các tài liệu khác nhau. Đầu tiên, giá trị của khối lượng hiệu dụng được xác định tại nhiệt độ thấp bằng cách thực hiện những thí nghiệm cộng hưởng xyclotron. Bởi vì khối lượng hiệu dụng được xác định bằng thực nghiệm, và bởi vì nó là thước đo mức độ chuyển động dễ dàng của hạt trong tinh thể nên đại lượng này có lẽ là một hàm phụ thuộc một ít vào nhiệt độ. Kế tiếp, hàm mật độ trạng thái của bán dẫn được tính bằng cách tổng quát hóa mô hình của một electron trong giếng thế vô hạn 3 chiều. Hàm lí thuyết này có thể không phù hợp hòan tòan với thực nghiệm. Tuy nhiên sự khác nhau giữa giá trị lí thuyết và giá trị thực nghiệm của n_i chỉ là thừa số 2 trong nhiều trường hợp là không đáng kể. Bảng 4.2 liệt kê những giá trị được chấp nhận rộng rãi của n_i
đối với Silic, GaAs, và Ga

Bảng 4.2| Những giá trị được thừa nhận rộng rãi của n_i tại T=3K

Si	$n_i = 1.5 \times 10^{10}\ \text{cm}^{-3}$
GaAs	$n_i = 1.8 \times 10^{6}\ \text{cm}^{-3}$
Ge	$n_i = 2.4 \times 10^{13}\ \text{cm}^{-3}$

tại $T=300K$.

Nồng độ hạt tải điện nội tại là hàm phụ thuộc rất mạnh vào nhiệt độ.

VÍ DỤ 4.3

Tính nồng độ hạt tải điện nội tại trong GaAs tại $T=300K$ và tại $T=450K$.

Giá trị của N_c và N_v tại $300K$ đối với GaAs tương ứng là $4.7\times10^{17}\ cm^{-3}$ và $7.0\times10^{18}\ cm^{-3}$. Cả N_c và N_v biến đổi theo $T^{3/2}$. Giả sử rằng khe năng lượng có độ rộng là 1.42 eV và biến đổi không đáng kể theo nhiệt độ trên khoảng này. Giá trị của kT tại 450K là

$$kT=(0.0259)\left(\frac{450}{300}\right)=0.3885eV$$

- Giải

  Dùng phương trình (4.23), chúng ta tìm được đối với $T=300K$

  $$n_i^2=(4.7\times10^{17})(7.0\times10^{18})\exp\left(\frac{-1.42}{0.0259}\right)=5.09\times10^{12}$$

  Vì thế

  $$n_i=2.27\times10^{6}cm^{-3}$$

  Tại $T=450K$, chúng ta tìm được

  $$n_i^2=(4.7\times10^{17})(7.0\times10^{18})\left(\frac{450}{300}\right)^3\exp\left(\frac{-1.42}{0.03885}\right)=1.48\times10^{21}$$

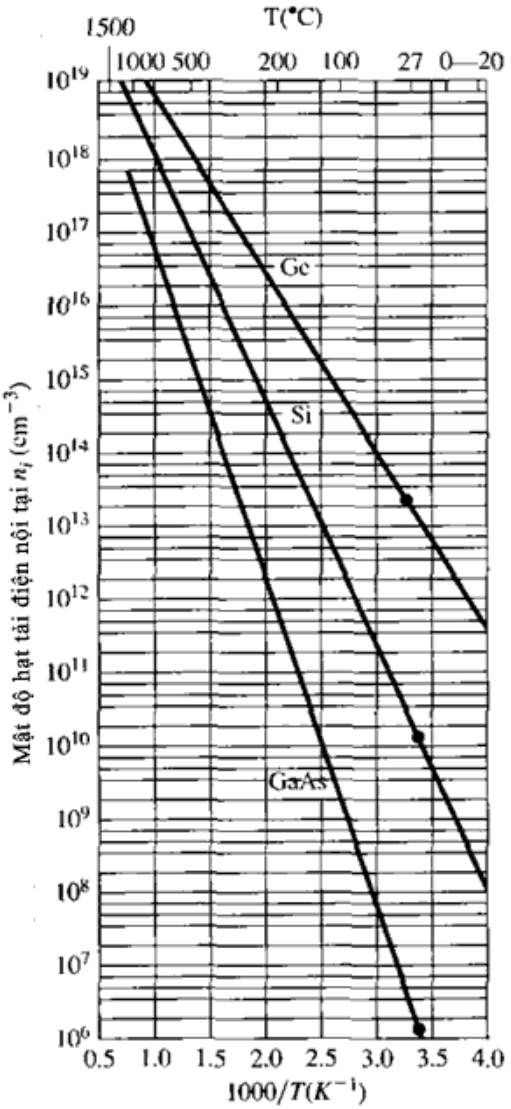
  Vì thế

  $$n_i=3.85\times10^{10}cm^{-3}$$

- Kết luận

  Chúng ta có thể rút ra từ ví dụ này rằng nồng độ hạt tải điện nội tại tăng 4 bậc về độ lớn khi nhiệt độ tăng 150^0C.

Hình 4.2 là đồ thị của n_i theo phương trình (4.23) của Silic, GaAs, và Ge như một hàm theo nhiệt độ. Như thấy trong hình, giá trị của n_i đối với những bán dẫn này dễ dàng thay đổi vài bậc về độ lớn khi nhiệt độ thay đổi trên một khoảng vừa phải.



Hình 4.2| Mật độ hạt tải điện nội tại của Ge, Si, và GaAs theo nhiệt độ.

4.1.4 Vị trí mức Fermi riêng

Chúng ta đã thảo luận một cách định tính rằng mức năng lượng Fermi ở gần giữa khe năng lượng đối với bán dẫn ròng. Chúng ta có thể tính tóan cụ thể vị trí của mức Fermi riêng. Bởi vì nồng độ electron và lỗ trống bằng nhau, cho phương trình (4.20) và (4.21) bằng nhau, chúng ta có

$$N_c \exp\left[\frac{-(E_c - E_{Fi})}{kT}\right] = N_v \exp\left[\frac{-(E_{Fi} - E_v)}{kT}\right] \quad (4.24)$$

Nếu chúng ta lấy logarit cơ số e của phương trình này và giải tìm E_{Fi} , chúng ta thu được

$$E_{Fi} = \frac{1}{2}(E_c + E_v) + \frac{1}{2}kT \ln\left(\frac{N_v}{N_c}\right) \quad (4.25)$$

Từ định nghĩa của N_c và N_v trong phương trình (4.10) và (4.18), phương trình (4.25) có thể được viết là

$$E_{Fi} = \frac{1}{2}(E_c + E_v) + \frac{3}{4}kT \ln\left(\frac{m_p^*}{m_n^*}\right) \quad (4.26a)$$

Số hạng thứ nhất, $½(E_c+E_v)$ chính xác là năng lượng giữa E_c và E_v , hoặc năng lượng giữa khe. Chúng ta có thể định nghĩa

$$\frac{1}{2}(E_c + E_v) = E_{midgap}$$

Vì thế

$$E_{Fi} - E_{midgap} = \frac{3}{4}kT \ln\left(\frac{m_p^*}{m_n^*}\right) \quad (4.26b)$$

Nếu khối lượng hiệu dụng electron và lỗ trống bằng nhau $m_p^* = m_n^*$ thì mức Fermi riêng ở ngay giữa dãy.

Nếu $m_p^* > m_n^*$, thì mức Fermi riêng hơi ở trên khoảng giữa của khe năng lượng,

Và nếu $m_p^* < m_n^*$, nó hơi ở dưới khoảng giữa của khe năng lượng.

Hàm mật độ trạng thái có liên hệ trực tiếp với khối lượng hiệu dụng hạt tải điện; do đó khối lượng hiệu dụng lớn hơn có nghĩa là hàm mật độ trạng thái lớn hơn. Mức Fermi riêng phải dịch chuyển xa vùng có mật độ trạng thái lớn hơn để giữ cho số electron và lỗ trống bằng nhau.

VÍ DỤ 4.4

Xác định vị trí của mức Fermi đối với khỏang giữa của khe năng lượng trong Silic tại *T=300K*.

Khối lượng hiệu dụng của electron và lỗ trống lần lượt là $m_n^* = 1.08m_0$ và $m_p^* = 0.56m_0$.

Giải

Mức Fermi riêng đối với khỏang giữa của khe năng lượng là

$$E_{Fi} - E_{midgap} = \frac{3}{4}kT\ln\left(\frac{m_p^*}{m_n^*}\right) = \frac{3}{4}\times 0.0259 \times \ln\frac{0.56}{1.08}$$

Hoặc

$$E_{Fi} - E_{midgap} = -0.0128eV = -12.8meV$$

Kết luận: Mức Fermi riêng trong Silic thấp hơn năng lượng giữa khe là 12.8 meV. Nếu chúng ta so sánh 12.8 meV với 560 meV (một phần hai độ rộng khe năng lượng của silic) thì chúng ta sẽ thấy sự chênh lệch này khá nhỏ. Vì thế, trong nhiều ứng dụng, chúng ta có thể xem như mức Fermi riêng ở giữa khe năng lượng.

KIỂM TRA KIẾN THỨC

E4.6 Xác định mức Fermi riêng so với khỏang giữa của khe năng lượng trong GaAs tại T=300K.

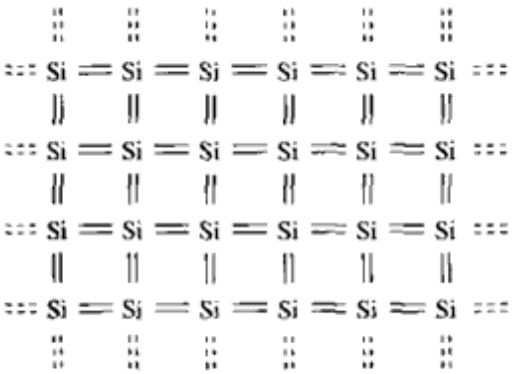
4.2|NGUYÊN TỬ TẠP CHẤT VÀ MỨC NĂNG LƯỢNG

Bán dẫn ròng có thể là một bài học lí thú, nhưng sức mạnh thực sự của bán dẫn có thể thu được bằng cách thêm một lượng nhỏ tạp chất có kiểm soát, hoặc những nguyên tử tạp chất. Quá trình pha tạp này được mô tả vắn tắt trong chương 1, có thể làm thay đổi hòan tòan tính chất điện của bán dẫn. Những bán dẫn được pha tạp được gọi là bán dẫn tạp, là vật liệu dùng để chế tạo những thiết bị bán dẫn khác nhau mà chúng ta sẽ xem xét trong chương tiếp theo.

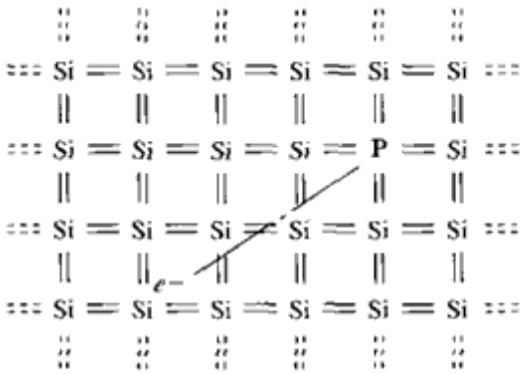
4.2.1 Mô tả định tính

Trong chương 3, chúng ta đã thảo luận liên kết cộng hóa trị của silic và đã xem xét biểu diễn 2 chiều đơn giản của mạng đơn tinh thể silic như được chỉ trong hình 4.3.

Bây giờ hãy xem xét việc thêm vào những nguyên tố tạp chất thuộc nhóm V, chẳng hạn như photpho. Nguên tố nhóm V có 5 electron hóa trị. 4 electron trong số chúng sẽ đóng góp vào liên kết cộng hóa trị với những nguyên tử silic, còn lại electron thứ 5 liên kết lỏng lẻo với nguyên tử photpho. Hiệu ứng này được biểu diễn bằng đồ thị trong hình 4.4. Chúng ta gọi electron hóa trị thứ 5 là electron cho hay electron đono.

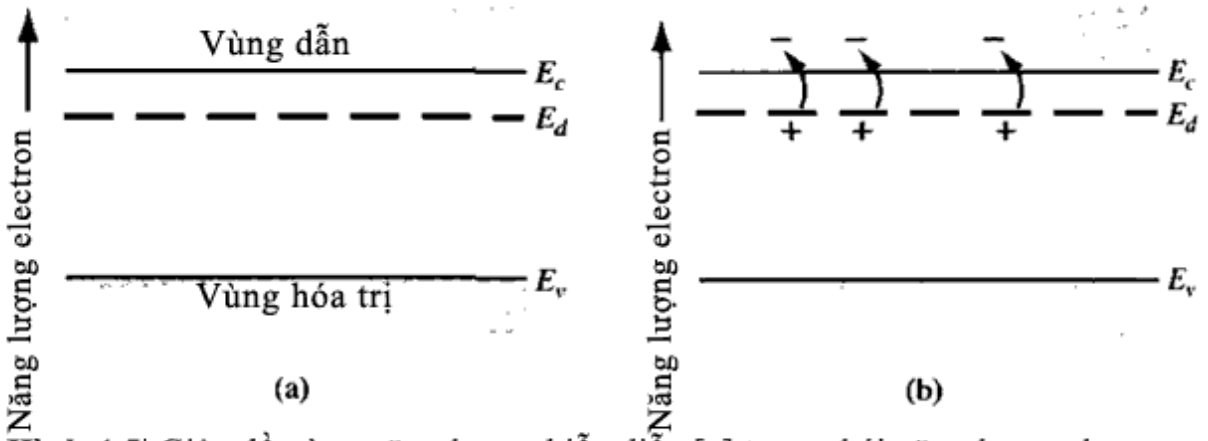


Hình 4.3| Biểu diễn hai chiều của các liên kết hóa học trong Sillic



Hình 4.4| Biểu diễn hai chiều của mạng Sillic được pha tạp chất Photpho

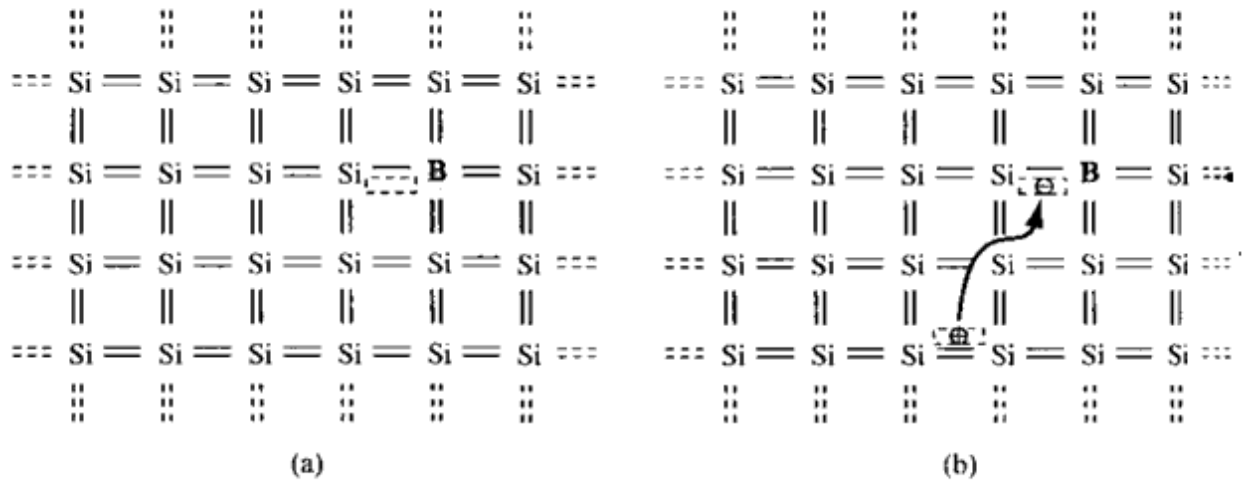
Nguyên tử photpho mà không có electron đôno là hạt mang điện dương. Tại nhiệt độ rất thấp, electron đôno liên kết với nguyên tử photpho. Tuy nhiên, bằng trực giác có thể dễ dàng thấy rằng năng lượng cần thiết để đưa electron đono vào trong vùng dẫn nhỏ đáng kể so với năng lượng cần thiết để đưa những electron hóa trị lên vùng dẫn. Hình 4.5 chỉ ra giản đồ năng lượng như chúng ta tiên đóan. Mức năng lượng E_d là trạng thái năng lượng của electron đôno.



Hình 4.5| Giản đồ vùng năng lượng biểu diễn [a] trạng thái năng lượng donor rời rạc và [b] hiện tượng những donor bị ion hóa

Nếu một lượng năng lượng nhỏ, chẳng hạn như nhiệt năng được cung cấp cho những electron đono, nó có thể nhảy lên vùng dẫn, để lại bên dưới một Ion Photpho mang điện dương. Lúc này, electron trong vùng dẫn có thể di chuyển trong tinh thể để tạo ra dòng điện, trong khi những hạt mang điện dương nằm cố định trong tinh thể. Lọai nguyên tử tạp chất này cho electron vào vùng dẫn và được gọi là nguyên tử tạp chất đono. Những nguyên tử tạp chất cho thêm những electron vào vùng dẫn mà không tạo ra lỗ trống trong vùng hóa trị. Vật liệu cuối cùng được gọi là bán dẫn lọai *n* (*n* để chỉ electron mang điện âm).

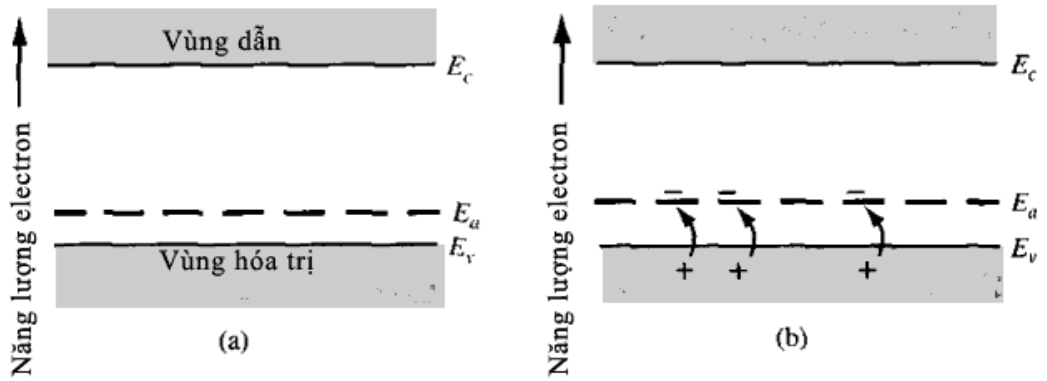
Bây giờ, xét trường hợp pha những nguyên tử tạp chất nhóm III, chẳng hạn như Bo vào bán dẫn chủ Silic. Những nguyên tố nhóm III có 3 electron hóa trị, tất cả chúng đều tham gia vào liên kết cộng hóa trị. Như được biểu diễn trong hình 4.6a, một vị trí liên kết cộng hóa trị bị trống. Nếu một electron nhảy vào chiếm vị trí "trống" này, năng lượng của nó sẽ phải lớn hơn năng lượng của những electron hóa



Hình 4.6| Biểu diễn hai chiều của mạng Sillic [a] được pha tạp bởi nguyên tử Bo [b] biểu diễn sự ion hóa nguyên tử Bo tạo ra lỗ trống

trị, bởi vậy trạng thái điện tích của nguyên tử Bo sẽ là âm. Tuy nhiên, electron chiếm vị trí "trống" này không có đủ năng lượng để đi vào trong vùng dẫn, vì năng lượng của nó nhỏ hơn rất nhiều năng lượng vùng dẫn. Hình 4.6b biểu diễn cách thức những electron thu một lượng nhỏ nhiệt năng và di chuyển trong tinh thể. Vị trí trống gắn với nguyên tử Bo bị chiếm, và những vị trí của electron hóa trị khác trở thành trống. Những vị trí electron trống này có thể được xem là lỗ trống trong vật liệu bán dẫn.

Hình 4.7 biểu diễn trạng thái năng lượng như đã dự đoán của những vị trí "trống" và sự hình thành lỗ trống trong vùng hóa trị. Lỗ trống có thể di chuyển trong tinh thể để tạo ra dòng điện, trong khi nguyên tử Bo mang điện âm nằm cố định trong tinh thể. Nguyên tử nhóm III nhận một electron từ vùng hóa trị và vì vậy được gọi là nguyên tử tạp chất acceptor. Nguyên tử acceptor có thể tạo ra lỗ trống trong vùng hóa trị mà không tạo ra electron trong vùng dẫn. Loại vật liệu bán dẫn này được gọi là bán dẫn loại *p* (*p* dùng để chỉ những lỗ trống mang điện dương).



Hình 4.7| Giản đồ vùng năng lượng cho thấy [a] Những trạng thái năng lượng acceptor rời rạc và [b] hiện tượng những trạng thái acceptor bị ion hóa

Vật liệu bán dẫn đơn tinh thể tinh khiết được gọi là bán dẫn ròng. Việc thêm một lượng tạp chất có kiểm soát, hoặc đôno hoặc acceptor, tạo ra một vật liệu được gọi là bán dẫn pha tạp. Bán dẫn pha tạp sẽ có số electron trội hơn (bán dẫn loại *n*) hoặc lỗ trống trội hơn (loại *p*).

4.2.2 Năng lượng Ion hóa

Chúng ta có thể tính tóan khoảng cách gần đúng từ electron đono đến ion pha tạp đono, và năng lượng cần thiết để đưa electron đono vào vùng dẫn. Năng lượng này được gọi là năng lượng ion hóa. Chúng ta có thể dùng mô hình Bohr cho việc tính tóan này. Lí do dùng mô hình này là hầu hết những khỏang cách khả dĩ của electron từ hạt nhân trong nguyên tử hidro, được xác định từ cơ học lượng tử giống với bán kính Bohr. Những mức năng lượng trong nguyên tử hidro được xác định theo cơ học lượng tử cũng giống với kết quả thu được từ lí thuyết Bohr.

Trong trường hợp nguyên tử tạp chất đono (cho), chúng ta có thể hình dung electron đono chuyển động xung quanh ion đono, nó được gắn vào vật liệu bán dẫn. Chúng ta sẽ cần dùng hằng số điện môi của bán dẫn trong tính tóan chứ không dùng hằng số điện môi của không gian tự do như được dùng trong trường hợp của nguyên tử hidro. Chúng ta sẽ dùng khối lượng hiệu dụng của electron trong tính tóan.

Sự phân tích bắt đầu bằng cách thiết lập lực hút Coulomb giữa electron và ion bằng với lực hướng tâm do chuyển động quỹ đạo của electron. Điều kiện này sẽ cho một quỹ đạo bền vững. Chúng ta có

$$\frac{e^2}{4\pi\varepsilon r_n^2} = \frac{m^*\upsilon^2}{r_n} \tag{4.27}$$

ở đây υ là độ lớn vận tốc và r_n là bán kính quỹ đạo. Nếu chúng ta giả sử momen động lượng cũng bị lượng tử hóa, thì chúng ta có thể viết

$$m^* r_n \upsilon = n\hbar \tag{4.28}$$

ở đây *n* là số nguyên dương. Tìm υ từ phương trình (4.28), thế vào trong phương trình (4.27), và tìm bán kính, chúng ta thu được

$$r_n = \frac{n^2\hbar^2 4\pi\varepsilon}{m^* e^2} \tag{4.29}$$

Giả thiết momen động lượng bị lượng tử hóa dẫn đến bán kính bị lượng tử hóa.

Bán kính Bohr được định nghĩa là

$$a_0 = \frac{4\pi\varepsilon_0\hbar^2}{m_0 e^2} = 0.53A^0 \tag{4.30}$$

Lập tỉ số giữa bán kính orbital đono và bán kính Bohr:

$$\frac{r_n}{a_0} = n^2\varepsilon_r\left(\frac{m_0}{m^*}\right) \tag{4.31}$$

ở đâu ε_r là hằng số điện môi tỉ đối của vật liệu bán dẫn, m_0 là khối lượng nghỉ của electron, và m^* là khối lượng hiệu dụng dẫn của electron trong bán dẫn.

Nếu chúng ta xét trạng thái năng lượng thấp nhất *n=1*, và nếu chúng ta xét Silic có $\varepsilon_r=11.7$ và khối lượng hiệu dụng dẫn là $m^*/m_0=0.26$ thì chúng ta có

$$\frac{r_1}{a_0} = 45 \tag{4.32}$$

Hoặc $r_1=23.9\ A^0$. Bán kính này tương ứng gần bằng 4 hằng số mạng trong silic. Cần nhớ rằng một ô đơn vị trong silic thực tế chứa 8 nguyên tử, vì vậy bán kính của electron đono chứa đựng nhiều nguyên tử silic. Electron đôno không liên kết chặt với những nguyên tử đôno.

Năng lượng tòan phần của electron do chuyển động quỹ đạo là

$$E=T+V \tag{4.33}$$

ở đây T là độ năng và V là thế năng của electron. Động năng là

$$T=\frac{1}{2}m^*\upsilon^2 \tag{4.34}$$

Dùng vận tốc υ từ phương trình (4.28) và bán kính r_n từ phương trình (4.29), động năng trở thành

$$T=\frac{m^*e^4}{2(n\hbar)^2(4\pi\varepsilon)^2} \tag{4.35}$$

Thế năng là

$$V=\frac{-e^2}{4\pi\varepsilon r_n}=\frac{-m^*e^4}{(n\hbar)^2(4\pi\varepsilon)^2} \tag{4.36}$$

Năng lượng tòan phần là tổng của động năng và thế năng:

$$E=T+V=\frac{-m^*e^4}{2(n\hbar)^2(4\pi\varepsilon)^2} \tag{4.37}$$

Đối với nguyên tử hidro, $m^*=m_0$ và $\varepsilon=\varepsilon_0$. Năng lượng Ion hóa của nguyên tử hidro ở trạng thái năng lượng thấp nhất là $E=-13.6\ eV$. Nếu chúng ta xét silic, năng lượng ion hóa là E=−25.8 meV, nhỏ hơn rất nhiều độ rộng khe năng lượng của silic. Năng lượng này gần bằng năng lượng ion hóa của nguyên tử đôno, hoặc năng lượng cần thiết để đưa electron đôno vào vùng dẫn. Đối với những tạp chất đôno bình thường chẳng hạn như photpho hoặc Arsen, mô hình nguyên tử hidro này hòan tòan phù hợp và cho biết độ lớn của năng lượng Ion hóa. Bảng 4.3 liệt kê năng lượng ion hóa được đo từ thực nghiệm của vài tạp chất trong silic và Germani. Germani và silic có hằng số điện môi và khối lượng hiệu dụng khác nhau; vì thế chúng ta tiên đoán rằng năng lượng ion hóa sẽ khác nhau.

Bảng 4.3| Năng lượng ion hóa tạp chất trong Si và Ge

	Năng lượng ion hóa [eV]	
Tạp chất	Si	Ge
Donors		
P	0.045	0.012
As	0.05	0.0127
Acceptors		
Bo	0.045	0.0104
Al	0.06	0.0102

4.2.3 Bán dẫn nhóm III-V

Trong phần trước, chúng ta đã thảo luận việc pha tạp chất đôno và acceptor vào bán dẫn nhóm IV, ví dụ silic. Trường hợp bán dẫn hợp chất nhóm III-V, chẳng hạn như GaAs, phức tạp hơn. Những nguyên tố nhóm II, chẳng hạn như Berili, Kẽm, Cađimi, có thể đưa vào mạng như tạp chất, thay thế cho nguyên tố Ga nhóm III để trở thành tạp chất acceptor. Tương tự, những nguyên tố nhóm VI, chẳng hạn như Selen và Telu, có thể đưa vào mạng thay cho nguyên tố Arsen nhómV để trở thành tạp chất đôno. Năng lượng Ion hóa tương ứng của những tạp chất này nhỏ hơn những tạp chất trong silic. Năng lượng ion hóa của đôno trong GaAs cũng nhỏ hơn năng lượng ion hóa của acceptor, bởi vì khối lượng hiệu dụng của electron nhỏ hơn lỗ trống.

Những nguyên tố nhóm IV, chẳng hạn như silic và Germani cũng có thể là những nguyên tử pha tạp trong GaAs. Nếu một nguyên tử silic thay thế một nguyên tử Gali, tạp chất silic sẽ đóng vai trò như đôno, nhưng nếu nguyên tử silic thay thế nguyên tử arsen thì tạp chất silic đóng vai trò như acceptor. Đối với Germani cũng vậy. Những tạp chất như thế được gọi là lưỡng tính. Thực nghiệm đối với GaAs, người ta nhận thấy rằng Germani thường làm acceptor hơn và silic thường làm đono hơn. Bảng 4.4 liệt kê năng lượng ion hóa của vài nguyên tử tạp chất khác nhau trong GaAs.

Bảng 4.4| Năng lượng ion hóa tạp chất trong GaAs

Tạp chất	Năng lượng ion hóa (eV)
Donors	
Selenium	0.0059
Tellurium	0.0058
Silicon[Sillic]	0.0058
Germanium	0.0061
Acceptors	
Beryllium	0.028
Zinc [kẽm]	0.0307
Cadmium	0.0347
Silicon	0.0345
Germanium	0.0404

KIỂM TRA KIẾN THỨC

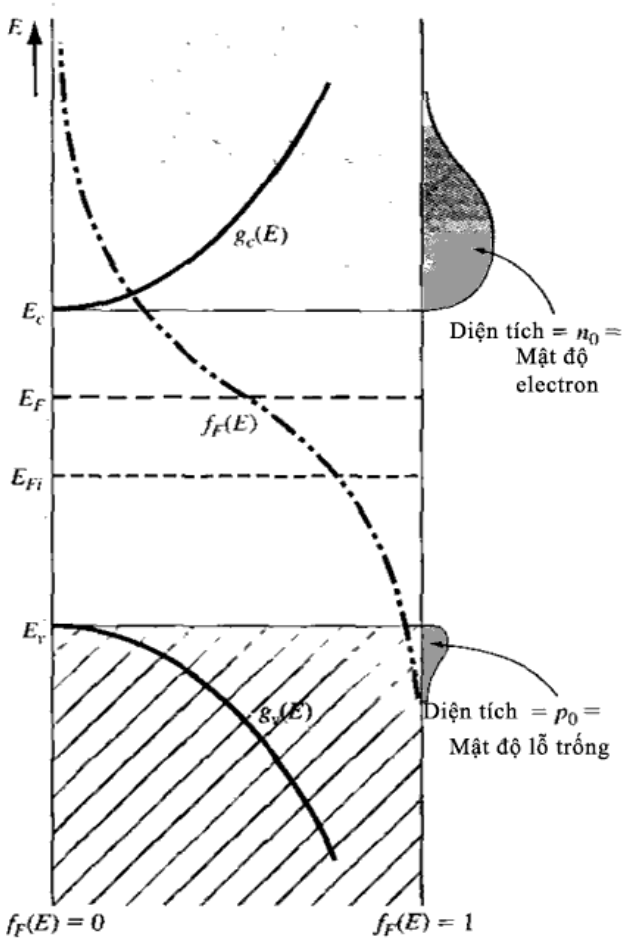
E4.7 Tính bán kính (so với bán kính Bohr) của electron đôno ở trạng thái năng lượng thấp nhất trong GaAs.

4.3|BÁN DẪN PHA TẠP

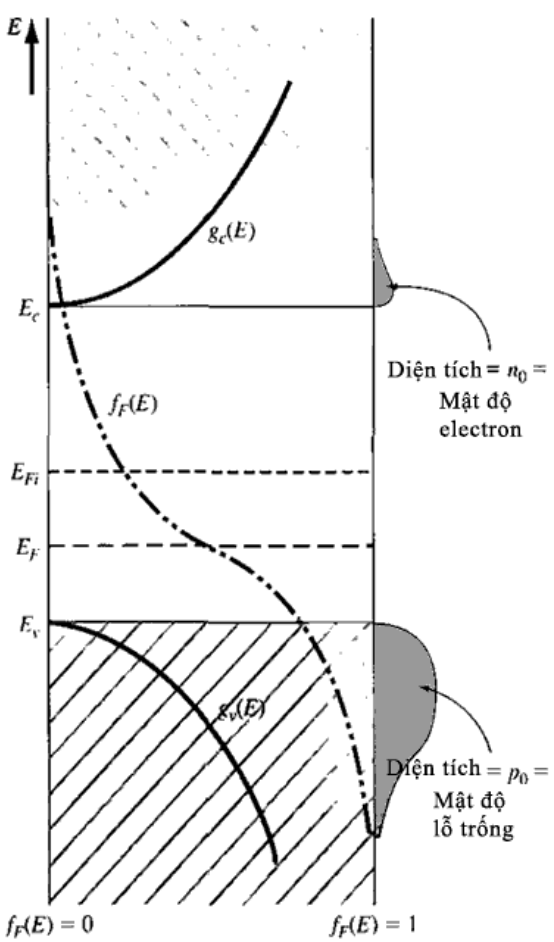
Chúng ta đã định nghĩa bán dẫn ròng là vật liệu không có những nguyên tử tạp chất được đưa vào trong mạng tinh thể của nó. Bán dẫn pha tạp được định nghĩa là bán dẫn mà trong đó một lượng chất kích tạp hoặc những nguyên tử pha tạp được thêm vào sao cho mật độ electron và lỗ trống cân bằng nhiệt khác với nồng độ hạt tải điện riêng. Mỗi loại bán dẫn pha tạp có một loại hạt tải điện chiếm ưu thế trong nó.

4.3.1 Phân bố electron và lỗ trống ở trạng thái cân bằng

Việc thêm vào những nguyên tử tạp chất đôno và acceptor vào bán dẫn sẽ làm thay đổi những electron và lỗ trống trong vật liệu. Bởi vì năng lượng Fermi có liên quan đến hàm phân bố, năng lượng Fermi sẽ thay đổi khi những nguyên tử kích tạp được thêm vào. Nếu năng lượng Fermi thay đổi so với năng lượng gần giữa khe, mật độ electron trong vùng dẫn và mật độ lỗ trống trong vùng hóa trị sẽ thay đổi. Những hiệu ứng này được biểu diễn trong hình 4.8 và 4.9. Hình 4.8 biểu diễn trường hợp $E_F > E_{Fi}$ và hình 4.9 biểu diễn trường hợp $E_F < E_{Fi}$. Khi $E_F > E_{Fi}$, mật độ electron lớn hơn mật độ lỗ trống, và khi $E_F < E_{Fi}$, mật độ lỗ trống lớn



Hình 4.8| Hàm mật độ trạng thái, hàm phân bố Fermi-Dirac, và diện tích biểu diễn mật độ electron và lỗ trống trong trường hợp mức Fermi ở trên mức Fermi riêng



Hình 4.9| Hàm mật độ trạng thái, hàm phân bố Fermi-Dirac, và diện tích biểu diễn mật độ electron và lỗ trống trong trường hợp mức Fermi thấp hơn mức Fermi riêng

hơn mật độ electron. Khi mật độ electron lớn hơn mật độ lỗ trống, bán dẫn là loại *n*; những nguyên tử đono đã được thêm vào. Khi mật độ lỗ trống lớn hơn mật độ electron, bán dẫn là loại *p*; những nguyên tử tạp chất acceptor đã được thêm vào. Mức năng lượng Fermi trong bán dẫn thay đổi khi mật độ electron và lỗ trống thay đổi và, một lần nữa, năng lượng Fermi lại thay đổi khi tạp chất đono và acceptor được thêm vào. Sự thay đổi của mức Fermi như một hàm của nồng độ chất pha tạp được xem xét trong phần 4.6.

Những biểu thức được rút ra trước đây cho nồng độ electron và lỗ trống ở trạng thái cân bằng nhiệt (4.11) và (4.19) là phương trình tổng quát cho n_0 và p_0 theo năng lượng Fermi. Những phương trình này là

$$n_0 = N_c \exp\left[\frac{-(E_c - E_F)}{kT}\right]$$

Và

$$p_0 = N_v \exp\left[\frac{-(E_F - E_v)}{kT}\right]$$

Như chúng ta vừa thảo luận, năng lượng Fermi có thể thay đổi trong khe năng lượng, do đó nó sẽ làm thay đổi n_0 và p_0.

VÍ DỤ 4.5

Tính nồng độ electron và lỗ trống cân bằng nhiệt tương ứng với năng lượng Fermi cho trước.

Xét silic tại $T=300K$ sao cho $N_c=2.8\times10^{19}\ cm^{-3}$ và $N_v=1.04\times10^{19}\ cm^{-3}$. Giả sử rằng năng lượng Fermi thấp hơn năng lượng vùng dẫn là 0.25 eV. Nếu chúng ta giả sử rằng độ rộng khe năng lượng của silic là 1.12 eV, thì năng lượng Fermi sẽ nằm trên năng lượng vùng hóa trị là 0.87 eV.

- Giải

  Dùng phương trình (4.11), chúng ta có

  $$n_0 = (2.8\times10^{19})\exp\left(\frac{-0.25}{0.0259}\right) = 1.8\times10^{15}cm^{-3}$$

  Từ phương trình (4.19), chúng ta có thể viết

  $$p_0 = (1.04\times10^{19})\exp\left(\frac{-0.87}{0.0259}\right) = 2.7\times10^{4}cm^{-3}$$

- Kết luận

  Sự thay đổi mức Fermi thực sự là một hàm theo nồng độ tạp chất đôno và acceptor được thêm vào bán dẫn. Tuy nhiên thí dụ này chứng tỏ rằng nồng độ electron và lỗ trống thay đổi vài bậc độ lớn so với nồng độ hạt tải điện riêng khi năng lượng Fermi thay đổi vài phần thập phân của 1 eV.

Trong ví dụ này, bởi vì $n_0 > p_0$, bán dẫn là loại n. Trong bán dẫn loại *n*, electron được gọi là hạt tải điện đa số và lỗ trống là hạt tải điện thiểu số. Tương tự,

trong bán dẫn loại lọai *p*, ở đây $p_0 > n_0$, lỗ trống là hạt tải điện đa số và electron là hạt tải điện thiểu số.

Chúng ta có thể rút ra dạng khác của phương trình mật độ cân bằng nhiệt của electron và lỗ trống. Nếu chúng ta cộng và trừ năng lượng Fermi riêng vào trong hàm e mũ của phương trình (4.11), chúng ta có thể viết

$$n_0 = N_c \exp\left[\frac{-(E_c - E_{Fi}) + (E_F - E_{Fi})}{kT}\right] \tag{4.38a}$$

Hoặc

$$n_0 = N_c \exp\left[\frac{-(E_c - E_{Fi})}{kT}\right] \exp\left[\frac{(E_F - E_{Fi})}{kT}\right] \tag{4.38b}$$

Nồng độ hạt tải điện riêng được cho bởi phương trình (4.20) là

$$n_i = N_c \exp\left[\frac{-(E_c - E_{Fi})}{kT}\right]$$

vì vậy nồng độ electron cân bằng nhiệt có thể được viết là

$$n_0 = n_i \exp\left[\frac{(E_F - E_{Fi})}{kT}\right] \tag{4.39}$$

Tương tự, nếu chúng ta cộng và trừ năng lượng Fermi riêng vào hàm e mũ của phương trình (4.19), chúng ta sẽ thu được

$$p_0 = n_i \exp\left[\frac{-(E_F - E_{Fi})}{kT}\right] \tag{4.40}$$

Như chúng ta sẽ thấy, mức Fermi thay đổi khi đono và acceptor được thêm vào, nhưng phương trình (4.39) và (4.40) chứng tỏ rằng, khi mức Fermi thay đổi so với mức Fermi riêng, n_0 và p_0 thay đổi so với giá trị n_i. Nếu $E_F > E_{Fi}$ thì chúng ta sẽ có $n_0 > n_i$ và $p_0 < n_i$. Một tính chất của bán dẫn loại n là $E_F > E_{Fi}$ vì vậy $n_0 > p_0$. Tương tự, trong bán dẫn loại *p*, $E_F < E_{Fi}$ vì vậy $p_0 > n_i$ và $n_0 < n_i$; do đó $p_0 > n_0$.

Chúng ta có thể thấy sự phụ thuộc của n_0 và p_0 vào E_F trong hình 4.8 và 4.9. Khi E_F di chuyển lên trên hoặc xuống dưới E_{Fi}, sự xen phủ của hàm xác suất và hàm mật độ trạng thái trong vùng dẫn và vùng hóa trị thay đổi. Khi E_F nằm trên

E_{Fi}, hàm xác suất trong vùng dẫn tăng, trong khi xác suất $1-f_F(E)$ của trạng thái trống trong vùng hóa trị giảm. Khi E_F nằm dưới E_{Fi}, trường hợp ngược lại xuất hiện.

4.3.2 Tích n_0p_0

Chúng ta có thể lấy tích của biểu thức n_0 và p_0 được cho tương ứng trong phương trình (4.11) và (4.19). Kết quả là

$$n_0 p_0 = N_c N_v \exp\left[\frac{-(E_c - E_F)}{kT}\right]\exp\left[\frac{-(E_F - E_v)}{kT}\right] \tag{4.41}$$

Nó có thể được viết lại là

$$n_0 p_0 = N_c N_v \exp\frac{-E_g}{kT} \tag{4.42}$$

Bởi vì phương trình (4.42) được rút ra cho giá trị tổng quát của năng lượng Fermi, giá trị của n_0 và p_0 không nhất thiết bằng nhau. Tuy nhiên, phương trình (4.42) giống chính xác với phương trình (4.23), là phương trình mà chúng ta đã rút ra cho trường hợp của bán dẫn ròng. Do đó, đối với bán dẫn ở trạng thái cân bằng nhiệt, chúng ta có,

$$n_0 p_0 = n_i^2 \tag{4.43}$$

Phương trình (4.43) phát biểu rằng tích của n_0 và p_0 luôn luôn là hằng số đối với một loại bán dẫn cho trước tại một nhiệt độ xác định. Mặc dù phương trình này dường như rất đơn giản, nhưng nó là một trong những định luật cơ bản của bán dẫn ở trạng thái cân bằng nhiệt. Ý nghĩa của biểu thức này sẽ trở nên rõ ràng hơn trong chương tiếp theo. Cần nhớ rằng phương trình (4.43) được rút ra dùng gần đúng Boltzmann. Nếu gần đúng Boltzmann không áp dụng được, thì tương tự, phương trình (4.43) cũng không có giá trị.

Nói một cách nghiêm khắc, bán dẫn pha tạp ở trạng thái cân bằng nhiệt không chứa các hạt tải điện riêng, mặc dù có thể có một số hạt tải điện được tạo ra do nhiệt. Nồng độ electron và lỗ trống riêng bị thay đổi do chất pha tạp đono và acceptor. Tuy nhiên, chúng ta có thể xem mật độ riêng n_i trong phương trình (4.43) đơn giản như là một thông số của vật liệu bán dẫn.

*4.3.3 Tích phân Fermi-Dirac

Trong việc rút ra phương trình (4.11) và (4.19) cho nồng độ electron và lỗ trống ở trạng thái cân bằng nhiệt, chúng ta đã sử dụng gần đúng Boltzmann. Nếu không sử dụng gần đúng Boltzmann, nồng độ electron ở trạng thái cân bằng nhiệt được viết từ phương trình (4.3) là

$$n_0 = \frac{4\pi}{h^3}(2m_n^*)^{3/2}\int_{E_c}^{\infty}\frac{(E-E_c)^{1/2}\,dE}{1+\exp\left(\dfrac{E-E_F}{kT}\right)} \qquad (4.44)$$

Nếu một lần nữa chúng ta đổi biến và đặt

$$\eta = \frac{E-E_c}{kT} \qquad (4.45a)$$

Và còn định nghĩa

$$\eta_F = \frac{E_F-E_c}{kT} \qquad (4.45b)$$

Thì chúng ta có thể viết lại phương trình (4.44) là

$$n_0 = 4\pi\left(\frac{2m_n^*kT}{h^2}\right)^{3/2}\int_0^{\infty}\frac{\eta^{1/2}\,d\eta}{1+\exp(\eta-\eta_F)} \qquad (4.46)$$

Tích phân Fermi được định nghĩa là

$$F_{1/2}(\eta_F) = \int_0^{\infty}\frac{\eta^{1/2}d\eta}{1+\exp(\eta-\eta_F)} \qquad (4.47)$$

Hàm này, được gọi là tích phân Fermi-Dirac, là hàm được lập bảng theo biến η_F . Hình 4.10 là đồ thị của hàm Fermi-Dirac. Chú ý rằng nếu $\eta_F>0$ thì $E_F>E_c$; vì thế năng lượng Fermi thực sự ở trong vùng dẫn.

VÍ DỤ 4.6

Tính nồng độ electron dùng tích phân Fermi-Dirac.

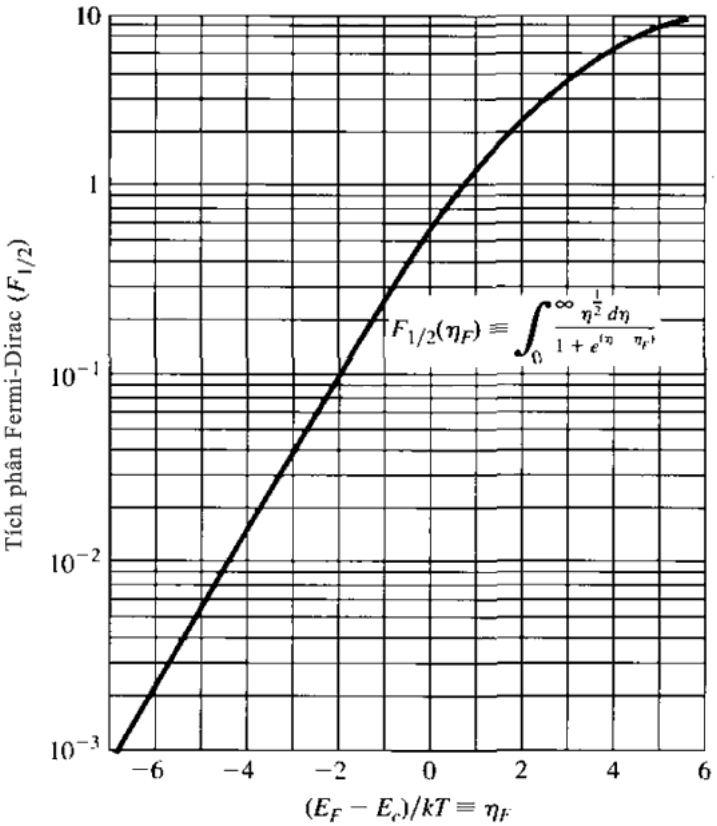


Figure 4.10 Tích phân Fermi-Dirac $F_{1/2}$ là hàm số theo năng lượng Fermi

Đặt $\eta_F=2$ sao cho năng lượng Fermi ở trên vùng dẫn khỏang 52 meV tại $T=300K$.

- Giải

  Phương trình (4.46) có thể được viết là

  $$n_0 = \frac{2}{\sqrt{\pi}} N_c F_{1/2}(\eta_F)$$

  Đối với silic tại 300K, $N_c=2.8\times10^{19}\ cm^{-3}$, và từ phương trình 4.10, tích phân Fermi-Dirac có giá trị là $F_{1/2}(2)=2.3$. Do đó

  $$n_0 = \frac{2}{\sqrt{\pi}}(2.8\times10^{19})(2.3) = 7.27\times10^{19}\,cm^{-3}$$

- Kết luận

  Chú ý rằng nếu chúng ta đã dùng phương trình (4.11), giá trị ở trạng thái cân bằng nhiệt của $n_0=2.08\times10^{20}\ cm^{-3}$, nó không chính xác bởi vì gần đúng Boltzmann không đúng trong trường hợp này.

Chúng ta có thể dùng phương pháp tổng quát để tính nồng độ của lỗ trống ở trạng thái cân bằng nhiệt. Chúng ta thu được

$$p_0 = 4\pi \left(\frac{2m_p^* kT}{h^2}\right)^{3/2} \int_0^\infty \frac{(\eta')^{1/2}\, d\eta'}{1 + \exp(\eta' - \eta_F')} \qquad (4.48)$$

ở đây

$$\eta' = \frac{E_v - E}{kT} \qquad (4.49a)$$

Và

$$\eta'_F = \frac{E_v - E_F}{kT} \qquad (4.49b)$$

Tích phân trong phương trình (4.48) tương tự với tích phân Fermi-Dirac được định nghĩa bởi phương trình (4.47), mặc dù biến của nó được định nghĩa khác. Chúng ta chú ý rằng nếu $\eta_F' > 0$, thì mức Fermi ở trong vùng hóa trị.

KIỂM TRA KIẾN THỨC

E4.8 Tính tóan nồng độ electron cân bằng nhiệt trong silic đối với trường hợp $E_F=E_c$ và T=300K.

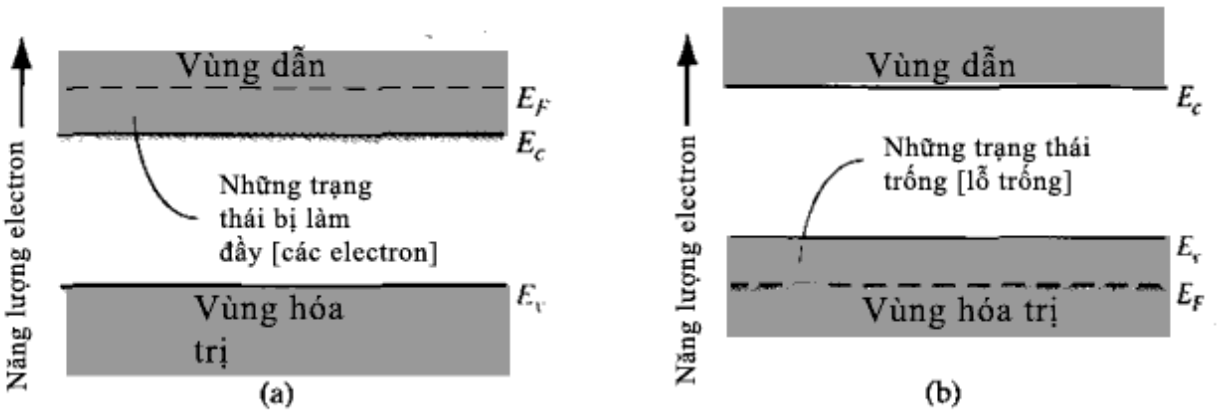
4.3.4 Bán dẫn suy biến và không suy biến

Trong quá trình khảo sát việc thêm những nguyên tử tạp chất vào trong vật liệu bán dẫn, chúng ta đã giả sử đơn giản rằng nồng độ những nguyên tử tạp chất được thêm vào nhỏ hơn so với mật độ của bán dẫn gốc. Một số lượng nhỏ những nguyên tử tạp chất được trải ra đủ xa nhau sao cho không có tương tác giữa những electron đono, chẳng hạn, trong vật liệu lọai *n*. Chúng ta đã giả sử rằng những nguyên tử tạp chất đưa vào những trạng thái năng lượng đono rời rạc, không tương tác trong bán dẫn lọai *n* và những trạng thái acceptor rời rạc, không tương tác trong bán dẫn lọai *p*. Những lọai bán dẫn này được gọi là bán dẫn không suy biến.

Nếu mật độ tạp chất tăng lên, khỏang cách giữa những nguyên tử tạp chất giảm và đến một lúc nào đó những electron đono chẳng hạn bắt đầu tương tác với nhau. Khi hiện tượng xuất hiện, năng lượng đono rời rạc riêng lẻ sẽ tách thành vùng năng lượng. Khi mật độ đono tăng thêm nữa, vùng trạng thái đono mở rộng và có thể xe phủ đáy của vùng dẫn. Sự xen phủ này xuất hiện khi nồng độ đono gần bằng mật độ trạng thái hiệu dụng. Khi nồng độ electron trong vùng dẫn vượt

quá mật độ trạng thái N_c, năng lượng Fermi nằm trong vùng dẫn. Loại bán dẫn này được gọi là bán dẫn suy biến loại *n*.

Cũng theo cách tương tự, khi nồng độ chất pha tạp acceptor tăng trong bán dẫn loại *p*, những trạng thái năng lượng acceptor rời rạc sẽ tách thành vùng năng lượng và có thể xen phủ đỉnh của vùng hóa trị. Năng lượng Fermi sẽ nằm trong vùng hóa trị khi nồng độ lỗ trống vượt quá mật độ trạng thái N_v. Loại bán dẫn này được gọi là bán dẫn suy biến loại *p*.



Hình 4.11| Giản đồ vùng năng lượng đơn giản hóa của bán dẫn suy biến [a] loại n và [b] loại p

Mô hình sơ đồ vùng năng lượng của bán dẫn suy biến loại *n* và bán dẫn loại *p* được biểu diễn trong hình 4.11. Những trạng thái năng lượng bên dưới E_F chủ yếu được làm đầy bởi electron và những trạng thái năng lượng bên trên E_F chủ yếu được làm đầy bởi lỗ trống. Trong bán dẫn suy biến loại *n*, những trạng thái giữa E_F và E_c chủ yếu được làm đầy bởi các electron; vì thế mật độ electron trong vùng dẫn rất lớn. Tương tự, trong bán dẫn suy biến loại *p*, những trạng thái năng lượng giữa E_v và E_F chủ yếu được làm đầy bởi lỗ trống; vì thế mật độ lỗ trống trong vùng hóa trị rất lớn.

4.4|THỐNG KÊ CỦA ĐONO VÀ ACCEPTOR

Trong chương trước, chúng ta đã thảo luận hàm phân bố Fermi-Dirac, nó cho biết xác suất mà một trạng thái năng lượng nào đó sẽ bị chiếm bởi một electron. Chúng ta cần xem xét lại hàm này và áp dụng thống kê xác suất cho những trạng thái đono và acceptor.

4.4.1 Hàm xác suất

Một nguyên lí được dùng trong việc rút ra hàm xác suất Fermi-Dirac là nguyên lí loại trừ Pauli, nó phát biểu rằng chỉ một hạt được phép trong mỗi trạng thái lượng tử. Nguyên lí loại trừ Pauli cũng áp dụng cho những trạng thái đono và acceptor.

Giả sử chúng ta có N_i electron và g_i trạng thái lượng tử, ở đây chỉ số dưới i dùng để chỉ mức năng lượng thứ *i*. Có g_i cách chọn nơi đặt hạt thứ nhất. Mỗi mức đono có thể có 2 định hướng spin cho electron đono; vì thế mỗi mức đono có 2 trạng thái lượng tử. Tuy nhiên, sự chèn một electron vào một trạng thái lượng tử sẽ ngăn cản việc đặt electron vào trạng thái lượng tử thứ 2. Bằng việc thêm 1 electron, đòi hỏi chỗ khuyết của nguyên tử được thõa mãn, và việc thêm electron thứ 2 vào mức đono là không thể.

Hàm xác suất để một electron chiếm trạng thái đono là

$$n_d = \frac{N_d}{1+\frac{1}{2}\exp\left(\frac{E_d - E_F}{kT}\right)} \tag{4.50}$$

ở đây n_d là nồng độ electron chiếm mức đono và E_d là năng lượng của mức Đono. Thừa số ½ trong phương trình này là kết quả trực tiếp của yếu tố spin vừa được đề cập. Thừa số ½ thỉnh thỏang được viết là *1/g*, ở đây *g* được gọi là yếu tố suy biến.

Phương trình (4.50) cũng có thể được viết dưới dạng

$$n_d = N_d - N_d^+ \tag{4.51}$$

ở đây N_d^+ là mật độ đono bị ion hóa. Trong nhiều ứng dụng, chúng ta sẽ quan tâm đến mật độ đono bị ion hóa hơn là mật độ electron ở trạng thái đono.

Nếu chúng ta phân tích tương tự đối với những nguyên tử acceptor, chúng ta thu được biểu thức

$$p_a = \frac{N_a}{1+\frac{1}{g}\exp\left(\frac{E_F - E_a}{kT}\right)} = N_a - N_a^- \tag{4.52}$$

ở đây N_a là mật độ nguyên tử acceptor, E_a là mức năng lượng acceptor, p_a là mật độ lỗ trống ở trạng thái acceptor, và N_a^- là mật độ acceptor bị ion hóa. Một lỗ trống

trong một trạng thái acceptor tương ứng với một nguyên tử acceptor trung hòa điện và một vị trí liên kết "trống" như chúng ta thảo luận trong phần 4.2.1. Hệ số *g* ở đây cũng được gọi là thừa số suy biến. Thừa số suy biến *g* ở trạng thái cơ bản thường lấy là 4 đối với mức acceptor trong silic và GaAs do cấu trúc vùng của chúng.

4.4.2 Ion hóa hòan tòan và đóng băng

Hàm xác suất để một electron chiếm trạng thái năng lượng đono vừa được cho bởi phương trình (4.50). Nếu chúng ta giả sử rằng $(E_d - E_F) >> kT$, thì

$$n_d \approx \frac{N_d}{\frac{1}{2}\exp\left(\frac{E_d - E_F}{kT}\right)} = 2N_d \exp\left[\frac{-(E_d - E_F)}{kT}\right] \tag{4.53}$$

Nếu $(E_d - E_F) >> kT$ thì gần đúng Boltzmann cũng đúng đối với những electron trong vùng dẫn sao cho, từ phương trình (4.11),

$$n_0 = N_c \exp\left[\frac{-(E_c - E_F)}{kT}\right]$$

Chúng ta có thể xác định tỉ số của số electron ở trạng thái đono với tổng số electron. Dùng những biểu thức từ phương trình (4.53) và (4.11), chúng ta viết

$$\frac{n_d}{n_d + n_0} = \frac{2N_d \exp\left[\frac{-(E_d - E_F)}{kT}\right]}{2N_d \exp\left[\frac{-(E_d - E_F)}{kT}\right] + N_c \exp\left[\frac{-(E_c - E_F)}{kT}\right]} \tag{4.54}$$

Mức Fermi sẽ bị triệt tiêu trong biểu thức này. Chia cả tử và mẫu cho biểu thức ở tử, chúng ta thu được

$$\frac{n_d}{n_d + n_0} = \frac{1}{1 + \frac{N_c}{2N_d}\exp\left[\frac{-(E_c - E_d)}{kT}\right]} \tag{4.55}$$

Thừa số $(E_c - E_d)$ chính là năng lượng ion hóa của những electron đono.

VÍ DỤ 4.7

Xác định phần electron ở trạng thái đono tại $T=300K$ so với tổng số electron.

Xét photpho pha vào trong silic, *ở T=300K*, nồng độ pha tạp N_d là $10^{16}\ cm^{-3}$.

- Giải

  Dùng phương trình (4.55), chúng ta tìm được

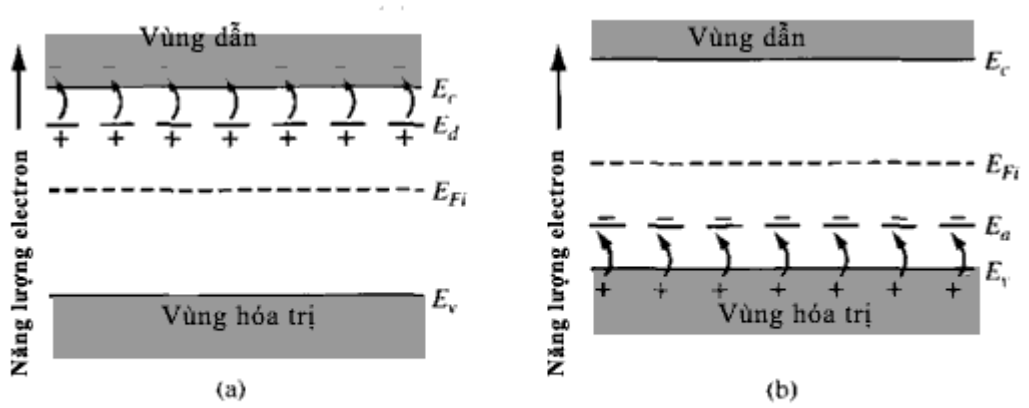
$$\frac{n_d}{n_d+n_0}=\frac{1}{1+\frac{2.8\times10^{19}}{2(10^{16})}\exp\left[\frac{-0.045}{0.0259}\right]}=0.0041=0.41\%$$

- Kết luận

  Ví dụ này chứng tỏ rằng có rất ít elecron ở trạng thái đono so với các electron ở vùng dẫn. Về cơ bản, tất cả các electron ở trạng thái đono đều ở trong vùng dẫn và, bởi vì chỉ 0.4% trạng thái đono chứa electron, những trạng thái đono được gọi là bị ion hóa hòan tòan.

Do đó, về cơ bản, tại nhiệt độ phòng những trạng thái đono bị ion hóa hòan tòan, đối với nồng độ pha tạp thông thường 10^{16} cm^{-3}, hầu hết tất cả những nguyên tử tạp chất đono đã đưa electron lên vùng dẫn.

Về cơ bản, tại nhiệt độ phòng cũng có sự ion hóa hòan tòan những nguyên tử acceptor. Điều này có nghĩa là mỗi nguyên tử acceptor đã nhận một electron từ vùng hóa trị vì thế p_a bằng 0. Tại nồng độ pha tạp acceptor điển hình, một lỗ trống được tạo ra trong vùng hóa trị cho mỗi nguyên tử acceptor. Hiệu ứng ion hóa này và sự tạo electron và lỗ trống trong vùng dẫn và vùng hóa trị tương ứng được biểu diễn trong hình 4.12.

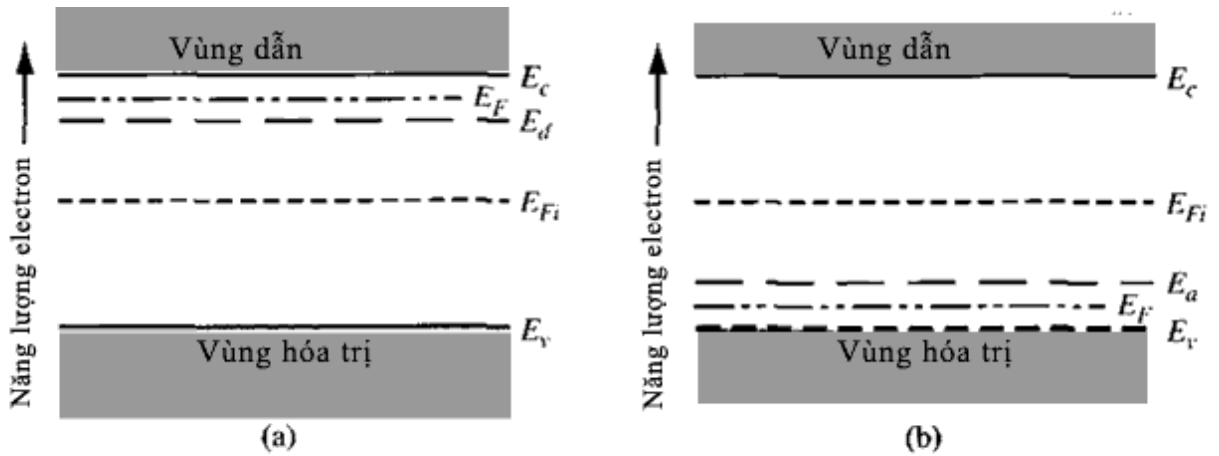


Hình 4.12| Giản đồ năng lượng biểu diễn sự ion hóa hoàn toàn của [a] những trạng thái donor [b] những trạng thái acceptor

Trường hợp ngược lại với trường hợp ion hóa hòan tòan xuất hiện tại *T=0K*. Tại 0 độ tuyệt đối, tất cả các electron ở trạng thái năng lượng thấp nhất có thể có của nó;

nghĩa là, đối với bán dẫn loại *n*, mỗi trạng thái đono phải chứa một electron, do đó $n_d=N_d$ hoặc $N_d^+=0$. Do đó, từ phương trình (4.50) chúng ta phải có $exp[(E_d-E_F)/kT]=0$. Bởi vì $T=0K$, điều này chỉ xảy ra khi $exp(-\infty)=0$, có nghĩa là $E_F > E_d$. Mức năng lượng Fermi phải ở trên mức đono tại độ không tuyệt đối. Trong trường hợp của bán dẫn loại *p* tại không độ tuyệt đối, những nguyên tử tạp chất sẽ không chứa bất cứ electron nào, vì thế mức Fermi phải ở dưới mức acceptor. Sự phân bố của electron vào những trạng thái năng lượng khác nhau, và vì thế năng lượng Fermi là hàm của nhiệt độ.

Sự phân tích chi tiết không được đưa vào trong tài liệu này chứng tỏ rằng tại $T=0K$, năng lượng Fermi phải ở giữa E_c và E_d đối với bán dẫn loại *n* và ở giữa E_a và E_v đối với bán dẫn loại *p*. Hình 4.13 chỉ ra những hiệu ứng này. Không có electron nào từ trạng thái đono được đưa lên do nhiệt năng vào vùng dẫn; hiệu ứng này được gọi là đóng băng. Tương tự, khi không có electron nào từ vùng hóa trị được đưa vào những trạng thái acceptor, hiệu ứng này cũng được gọi là đóng băng.



Hình 4.13| Giản đồ năng lượng tại $T = 0$ đối với bán dẫn [a]loại n [b]loại p

Giữa $T=0K$, đóng băng, và $T=300K$, ion hóa hòan tòan, chúng ta có sự ion hóa những nguyên tử đono và acceptor một phần.

VÍ DỤ 4.8

Xác định nhiệt độ mà tại đó 90% những nguyên tử acceptor bị ion hóa.

Xét silic loại *p* được pha Bo vào với mật độ $N_a=10^{16}\ cm^{-3}$.

- Giải

  Tìm tỉ số lỗ trống ở trạng thái acceptor so với tổng số lỗ trống trong vùng hóa trị cộng với trạng thái acceptor. Sử dụng gần đúng Boltzmann và giả sử hệ số suy biến là $g = 4$, chúng ta viết

  $$\frac{p_a}{p_0 + p_a} = \frac{1}{1 + \frac{N_v}{4N_a}\exp\left[\frac{-(E_a - E_v)}{kT}\right]}$$

  Trong trường hợp 90% bị ion hóa,

  $$\frac{p_a}{p_0 + p_a} = 0.10 = \frac{1}{1 + \frac{(1.04\times10^{19})\left(\frac{T}{300}\right)^{3/2}}{4(10^{16})}\exp\left[\frac{-0.045}{0.0259\left(\frac{T}{300}\right)}\right]}$$

  Dùng phương pháp thử sai, chúng ta tìm được $T=193K$.

- Kết luận

  Thí nghiệm này chứng tỏ rằng tại nhiệt độ thấp hơn nhiệt độ phòng khoảng 100^0 C, chúng ta vẫn có 90% những nguyên tử acceptor bị ion hóa; nói cách khác, 90% những nguyên tử acceptor đã đưa lỗ trống vào vùng hóa trị.

KIỂM TRA KIẾN THỨC

E4.9 Xác định phần trong tổng số lỗ trống vẫn ở trong trạng thái acceptor của silic tại $T=300K$ khi pha vào Bo có mật độ là $N_a=10^{17}\ cm^{-3}$.

E4.10 Xét silic được pha photpho với nồng độ là $N_d=5\times10^{15}\ cm^{-3}$. Vẽ đồ thị biểu diễn tỉ lệ phần trăm những nguyên tử tạp chất bị ion hóa theo nhiệt độ trong khoảng $100\le T\le400K$.

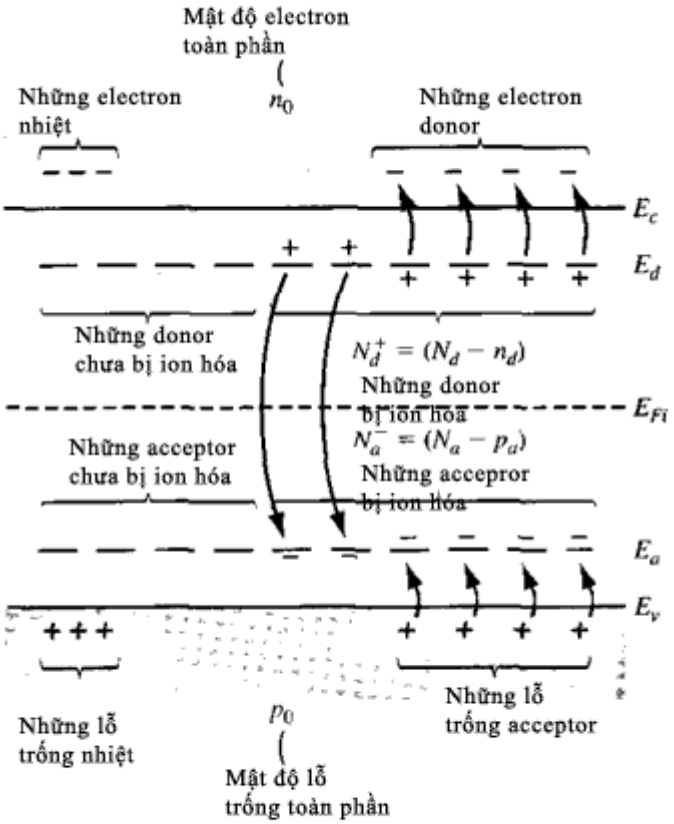
4.5|SỰ TRUNG HÒA ĐIỆN

Ở trạng thái cân bằng nhiệt, tinh thể bán dẫn trung hòa điện. Những electron được phân bố vào những trạng thái năng lượng khác nhau, tạo ra những hạt mang điện âm và dương, nhưng mật độ dòng điện tòan phần bằng 0. Điều kiện trung hòa điện này được dùng để xác định mật độ electron và lỗ trống cân bằng nhiệt như một hàm theo mật độ tạp chất pha tạp. Chúng ta sẽ định nghĩa bán dẫn bù và rồi xác định mật độ electron và lỗ trống như một hàm của mật độ đono và acceptor.

4.5.1 Bán dẫn bù

Bán dẫn bù là loại bán dẫn chứa cả những nguyên tử tạp chất đono và acceptor trong cùng một vùng. Bán dẫn bù có thể được hình thành bằng cách khuếch tán tạp chất acceptor vào vật liệu loại *n* hoặc bằng cách khuếch tán tạp chất đono vào vật liệu loại *p*. Chúng ta được bán dẫn bù loại *n* khi $N_d > N_a$, và bán dẫn bù loại *p* khi $N_a > N_d$. Nếu $N_a = N_d$, chúng ta có bán dẫn hòan tòan bù là loại bán dẫn có tính chất như bán dẫn ròng. Sau này chúng ta sẽ thấy rằng bán dẫn bù được tạo ra một cách hòan tòan tự nhiên trong quá trình chế tạo thiết bị.

4.5.2 Mật độ electron và lỗ trống ở trạng thái cân bằng



Hình 4.14| Sơ đồ vùng năng lượng của bán dẫn bù cho thấy những donor và những acceptor bị ion hóa và chưa bị ion hóa

Hình 4.14 biểu diễn giản đồ năng lượng của bán dẫn khi cả những nguyên tử tạp chất đono và acceptor được thêm vào cùng một vùng để hình thành bán dẫn bù. Hình này chỉ ra cách thức mà những electron và lỗ trống được phân bố vào những trạng thái khác nhau.

Điều kiện trung hòa điện được biểu hiện qua sự bằng nhau của mật độ những hạt mang điện dương và mật độ những hạt mang điện âm. Do đó, chúng ta có $n_0 + N_a^- = p_0 + N_d^+$ (4.56)

Hoặc

$$n_0 + (N_a - p_a) = p_0 + (N_d - n_d) \quad (4.57)$$

ở đây n_0 và p_0 tương ứng là mật độ electron và lỗ trống ở trạng thái cân bằng nhiệt trong vùng dẫn và vùng hóa trị. Thông số n_d là mật độ electron ở trạng thái năng lượng đono, vì vậy $N_d^+ = N_d - n_d$ là mật độ những trạng thái đono tích điện dương. Tương tự, p_a là mật độ lỗ trống ở trạng thái acceptor, vì vậy $N_a^- = N_a - p_a$ là mật độ

những trạng thái acceptor tích điện âm. Chúng ta có biểu thức của n_0, p_0, n_d, và p_a theo năng lượng Fermi và nhiệt độ.

Nếu chúng ta giả sử sự ion hóa là hoàn tòan, cả n_d và p_a đều bằng 0, và phương trình (4.57) trở thành

$$n_0 + N_a = p_0 + N_d \tag{4.58}$$

Nếu chúng ta biểu diễn p_0 là n_i^2/n_0, thì phương trình (4.58) có thể được viết là

$$n_0 + N_a = \frac{n_i^2}{n_0} + N_d \tag{4.59a}$$

Phương trình này được viết lại là

$$n_0^2 - (N_d - N_a)n_0 - n_i^2 = 0 \tag{4.59b}$$

Mật độ elctron n_0 có thể được xác định dùng công thức nghiệm của phương trình bậc 2 là

$$n_0 = \frac{(N_d - N_a)}{2} + \sqrt{\left(\frac{N_d - N_a}{2}\right)^2 + n_i^2} \tag{4.60}$$

Chúng ta chỉ dùng dấu dương cho tam thức bậc hai vì ở giới hạn khi bán dẫn là bán dẫn ròng $N_a=N_d=0$, nồng độ electron phải là đại lượng dương, hoặc $n_0=n_i$.

Phương trình (4.60) được dùng để tính mật độ electron trong bán dẫn lọai *n*, hoặc khi $N_d>N_a$. Mặc dù phương trình (4.60) được rút ra cho bán dẫn bù, nhưng nó vẫn áp dụng được cho trường hợp $N_a=0$.

VÍ DỤ 4.9

Xác định mật độ electron và lỗ trống ở trạng thái cân bằng nhiệt ứng với nồng độ pha tạp cho trước.

Xét bán dẫn Silic loại *n* tại $T=300K$ ở đó $N_d=10^{16}\ cm^{-3}$ và $N_a=0$. Mật độ hạt tải điện riêng được giả sử bằng $n_i=1.5\times10^{10}\ cm^{-3}$.

- Giải

  Từ phương trình (4.60), mật độ hạt tải điện đa số (electron) là

$$n_0 = \frac{10^{16}}{2} + \sqrt{\left(\frac{10^{16}}{2}\right)^2 + (1.5\times10^{10})^2} \approx 10^{16} cm^{-3}$$

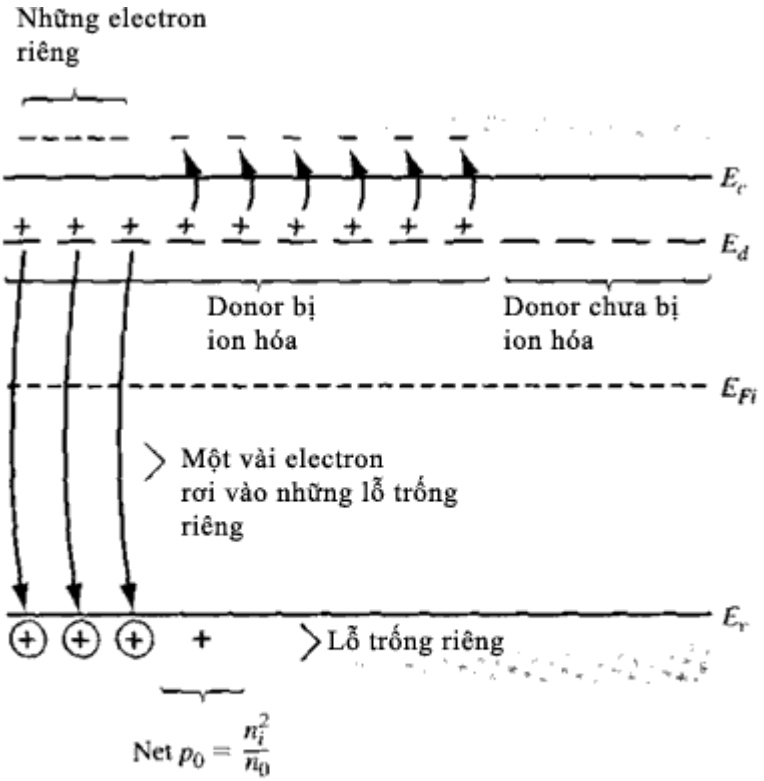
Mật độ hạt tải điện thiểu số (lỗ trống) là

$$p_0 = \frac{n_i^2}{n_0} = \frac{(1.5\times10^{10})^2}{1\times10^{16}} = 2.25\times10^4 cm^{-3}$$

- Kết luận

  Trong ví dụ này, $N_d >> n_i$, vì vậy về cơ bản mật độ hạt tải điện đa số (electron) bằng với mật độ pha tạp đono. Mật độ hạt tải điện đa số và thiểu số khác nhau nhiều bậc về độ lớn.

Chúng ta đã nhất trí trong khi thảo luận và chúng ta cũng rút ra kết quả từ ví dụ 4.9 rằng mật độ electron ở vùng dẫn tăng hơn so với mật độ hạt tải điện riêng khi chúng ta thêm vào những nguyên tử tạp chất đono. Cùng lúc đó, mật độ hạt tải điện thiểu số − lỗ trống giảm so với nồng độ hạt tải điện riêng khi chúng ta thêm những nguyên tử đono. Chúng ta phải nhớ rằng khi chúng ta thêm những nguyên tử tạp chất đono và tương ứng là những electron đono, có sự phân bố lại electron vào những trạng thái năng lượng. Hình 4.15 biểu diễn sơ đồ của sự phân bố lại. Một vài electron đono sẽ rơi vào những trạng thái trống trong vùng hóa trị



Hình 4.15| Giản đồ năng lượng biểu diễn sự phân bố lại những electron khi donor được thêm vào

, và trong quá trình đó nó sẽ triệt tiêu vài lỗ trống riêng. Do đó, mật độ hạt tải điện thiểu số − lỗ trống sẽ giảm như chúng ta thấy trong ví dụ 4.9. Cùng lúc đó, bởi vì sự phân bố lại này, mật độ electron toàn phần trong vùng dẫn không đơn giản bằng mật độ đono cộng với mật độ electron riêng.

VÍ DỤ 4.10

Tính mật độ electron và lỗ trống cân bằng nhiệt trong mẫu Germani ứng với mật độ pha tạp cho trước.

Xét mẫu Germani tại $T=300K$ ở đó $N_d=5\times10^{13}\ cm^{-3}$ và $N_a=0$. Giả sử rằng $n_i=2.4\times10^{13}\ cm^{-3}$.

- Giải

  Một lần nữa, từ phương trình (4.60), nồng độ electron tải điện đa số là

$$n_0 = \frac{5\times10^{13}}{2} + \sqrt{\left(\frac{5\times10^{13}}{2}\right)^2 + (2.4\times10^{13})^2} = 5.97\times10^{13} cm^{-3}$$

Nồng độ lỗ trống tải điện thiểu số là

$$p_0 = \frac{n_i^2}{n_0} = \frac{\left(2.4\times10^{13}\right)^2}{5.97\times10^{13}} = 9.65\times10^{12}\,cm^{-3}$$

- Kết luận

  Nếu độ lớn của nồng độ pha tạp đono và nồng độ hạt tải điện riêng khác nhau quá nhiều thì nồng độ electron tải điện đa số ở trạng thái cân bằng nhiệt bị ảnh hưởng bởi nồng độ riêng.

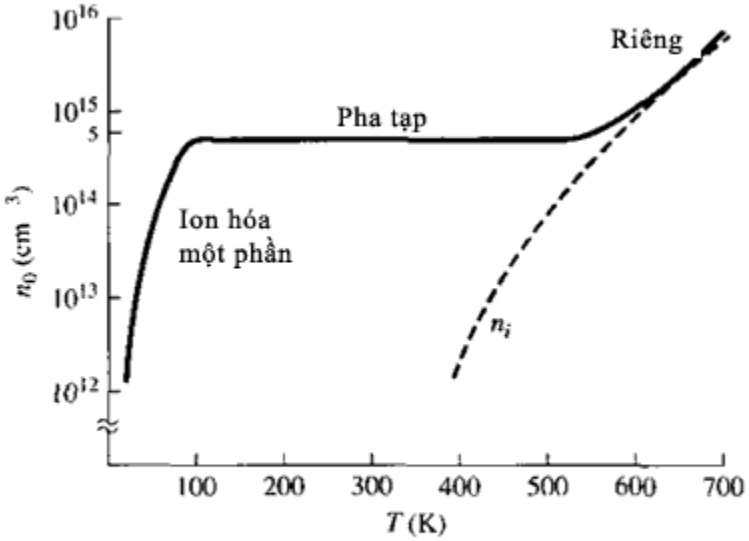
Chúng ta đã thấy rằng nồng độ hạt tải điện riêng n_i là hàm phụ thuộc nhiều vào nhiệt độ. Khi nhiệt độ tăng, có thêm những cặp electron-lỗ trống được tạo ra do nhiệt vì vậy số hạng n_i^2 trong phương trình (4.60) bắt đầu trội hơn. Cuối cùng, bán dẫn sẽ mất tính chất pha tạp của nó. Hình 4.16 biểu diễn mật độ electron theo nhiệt độ của silic được pha 5×10^5 đono trên một cm^3. Khi nhiệt độ tăng, chúng ta có thể thấy nơi mà tại đó mật độ riêng bắt đầu chiếm ưu thế.

Nếu chúng ta xét lại phương trình (4.58) và biểu diễn n_0 là n_i^2/p_0 thì chúng ta có

$$\frac{n_i^2}{p_0} + N_a = p_0 + N_d \qquad (4.61a)$$

Chúng ta có thể viết lại là

$$p_0^2 - (N_d - N_a)\,p_0 - n_i^2 = 0 \qquad (4.61b)$$



Hình 4.16| Mật độ electron theo nhiệt độ trong ba vùng: ion hóa một phần, tạp chất, và riêng

Dùng công thức nghiệm của phương trình bậc hai, nồng độ lỗ trống là

$$p_0 = \frac{(N_a - N_d)}{2} + \sqrt{\left(\frac{N_a - N_d}{2}\right)^2 + n_i^2} \tag{4.62}$$

ở đây, một lần nữa, phải dùng dấu cộng. Phương trình (4.62) được dùng để tính tóan nồng độ hạt tải điện đa số − lỗ trống ở trạng thái cân bằng nhiệt trong bán dẫn loại *p*, hoặc khi $N_a > N_d$. Phương trình này cũng áp dụng cho trường hợp $N_d = 0$.

VÍ DỤ 4.11

Tính mật độ elctron và lỗ trống ở trạng thái cân bằng nhiệt trong bán dẫn bù loại *p*.

Xét bán dẫn silic tại $T = 300K$ ở đó $N_a = 10^{16}\ cm^{-3}$ và $N_d = 3\times10^{15}\ cm^{-3}$. Giả sử $n_i = 1.5\times10^{10}\ cm^{-3}$.

- Giải

  Vì $N_a > N_d$ bán dẫn bù là loại p và nồng độ lỗ trống ở trạng thái cân bằng nhiệt được cho bởi phươnhg trình (4.62) là

$$p_0 = \frac{10^{16} - 3\times10^{15}}{2} + \sqrt{\left(\frac{10^{16} - 3\times10^{15}}{2}\right)^2 + (1.5\times10^{10})^2}$$

Vì vậy

$p_0 \approx 7\times10^{15} cm^{-3}$

Nồng độ hạt tải điện thiểu số − electron là

$$n_0 = \frac{n_i^2}{p_0} = \frac{(1.5\times10^{10})^2}{7\times10^{15}} = 3.21\times10^4 cm^{-3}$$

- Kết luận

  Nếu chúng ta giả sử sự ion hóa hòan tòan và nếu $(N_a - N_d) >> n_i$, thì nồng độ hạt tải điện đa số − lỗ trống chỉ là sự khác nhau giữa nồng độ đono và acceptor.

Chúng ta có thể rút ra rằng, đối với bán dẫn bù lọai *p*, mật độ hạt tả điện thiểu số − electron được xác định từ

$$n_0 = \frac{n_i^2}{p_0} = \frac{n_i^2}{(N_a - N_d)}$$

VÍ DỤ 4.12

Xác định mật độ pha tạp cần thiết trong vật liệu bán dẫn.

Một thiết bị silic với vật liệu lọai *n* hoạt động tại $T=550K$. Tại nhiệt độ này mật độ hạt tải điện riêng phải đóng góp không quá 5% vào mật độ electron tổng cộng. Xác định nồng độ đono tối thiểu được đòi hỏi để phù hợp với yêu cầu này.

- Giải

  Tại $T=550K$, nồng độ hạt tải điện riêng được tìm bằng phương trình (4.23)

$$n_i^2 = N_c N_v \exp\left(\frac{-E_g}{kT}\right) = \left(2.8\times10^{19}\right)\left(1.04\times10^{19}\right)\left(\frac{550}{300}\right)^3 \exp\left[\frac{-1.12}{0.0259}\left(\frac{300}{550}\right)\right]$$

  Hoặc

$n_i^2 = 1.02\times10^{29}$

  Vì thế

$n_i = 3.20\times10^{14} cm^{-3}$

  Để cho mật độ hạt tải điện riêng không đóng góp quá 5% vào mật độ electron tổng cộng, chúng ta đặt $n_0 = 1.05N_d$.

  Từ phương trình (4.60), chúng ta có

$$n_0 = \frac{N_d}{2} + \sqrt{\left(\frac{N_d}{2}\right)^2 + n_i^2}$$

Hoặc

$$1.05N_d = \frac{N_d}{2} + \sqrt{\left(\frac{N_d}{2}\right)^2 + (3.20\times10^{14})^2}$$

Suy ra

$$N_d = 1.39\times10^{15}\,cm^{-3}$$

- Kết luận

  Nếu nhiệt độ vẫn còn nhỏ hơn *T=550K* thì mật độ hạt tải điện riêng sẽ đóng góp không quá 5% vào mật độ electron tổng cộng ở mật độ pha tạp đono này.

Phương trình (4.60) và (4.62) được dùng để tính tóan mật độ hạt tải điện đa số − electron trong bán dẫn loại *n* và mật độ hạt tải điện đa số−lỗ trống trong bán dẫn loại *p*. Về mặt lí thuyết, nồng độ hạt tải điện thiểu số − lỗ trống trong bán dẫn loại *n* có thể được tính từ phương trình (4.62). tuy nhiên, chúng ta sẽ trừ 2 số bậc $10^{16}\ cm^{-3}$ để thu được một số bậc $10^{-4}\ cm^{-3}$, điều mà từ quan điểm thực tế là không thể có. Mật độ hạt tải điện thiểu số được tính từ $n_0p_0=n_i^2$ một khi nồng độ hạt tải điện đa số đã được xác định.

KIỂM TRA KIẾN THỨC

E4.11 Xét bán dẫn bù GaAs tại T=300K được pha $N_d=5\times10^{15}\ cm^{-3}$ và $N_a=2\times10^{16}\ cm^{-3}$. Tính tóan mật độ electron và lỗ trống ở trạng thái cân bằng nhiệt.

E4.12 Silic được pha $N_d=10^{15}\ cm^{-3}$ và $N_a=0$. (a) Vẽ đồ thị mật độ electron tho nhiệt độ trên khỏang $300\le T\le600K$. (b) Tính tóan nhiệt độ tại đó mật độ electron bằng $1.1\times10^{15}\ cm^{-3}$.

4.6|VỊ TRÍ CỦA MỨC NĂNG LƯỢNG FERMI

Chúng ta đã thảo luận định tính trong phần 4.3.1 mật độ electron và lỗ trống thay đổi như thế nào khi mức năng lượng Fermi di chuyển trong khe năng lượng. Do đó, trong phần 4.5, chúng ta đã tính tóan mật độ electron và lỗ trống như một hàm của mật độ pha tạp đono và acceptor. Bây giờ, chúng ta có thể xác định ví trí của mức năng lượng Fermi như một hàm của nồng độ pha tạp và nhiệt độ. Những điều

có liên quan đến mức năng lượng Ferni sẽ được thảo luận kĩ hơn sau phần suy luận tóan học.

4.6.1 Suy luận tóan học

Vị trí của mức năng lượng Fermi trong khe năng lượng có thể được xác định bằng cách dùng những phương trình đã được xây dựng để tính mật độ electron và lỗ trống ở trạng thái cân bằng nhiệt. Nếu chúng ta sử dụng gần đúng Boltzmann thì từ phương trình (4.11) chúng ta có $n_0=N_c exp[-(E_c-E_F)/kT]$. Chúng ta có thể tìm E_c-E_F từ phương trình này và thu được

$$E_c - E_F = kT \ln\left(\frac{N_c}{n_0}\right) \tag{4.63}$$

ở đây n_0 được cho bởi phương trình (4.60). Nếu chúng ta xét bán dẫn lọai *n* ở đó $N_d >> n_i$ thì $n_0 \approx N_d$, do đó

$$E_c - E_F = kT \ln\left(\frac{N_c}{N_d}\right) \tag{4.64}$$

Khỏang cách giữa đáy của vùng dẫn và mức năng lượng Fermi là một hàm phụ thuộc vào mật độ đono. Khi mật độ đono tăng, mức Fermi di chuyển đến gần vùng dẫn. Ngược lại, nếu mức Fermi di chuyển đến gần vùng dẫn hơn thì mật độ electron trong vùng dẫn tăng. Chúng ta chú ý rằng nếu chúng ta có bán dẫn bù thì số hạng N_d trong phương trình (4.64) đơn giản được thay thế bằng N_d-N_a, hoặc mật độ đono hiệu dụng tòan phần.

VÍ DỤ 4.13

Xác định mật độ pha tạp đono cần thiết để thu được năng lượng Fermi xác định.

Silic tại $T=300K$ chứa mật độ pha tạp acceptor là $N_a=10^{16}$ cm^{-3}. Xác định mật độ những nguyên tử tạp chất đono cần thêm vào để cho silic là lọai *n* và năng lượng Fermi thấp hơn biên năng lượng vùng dẫn là 0.20 eV.

- Giải
  Từ phương trình (4.64), chúng ta có
  $$E_c - E_F = kT \ln\left(\frac{N_c}{N_d - N_a}\right)$$

Phương trình này được viết lại là

$$N_d - N_a = N_c \exp\left[\frac{-(E_c - E_F)}{kT}\right]$$

Do đó

$$N_d - N_a = 2.8\times10^{19} \exp\left[\frac{-0.20}{0.0259}\right] = 1.24\times10^{16}\, cm^{-3}$$

Hoặc

$$N_d = 1.24\times10^{16} + N_a = 2.24\times10^{16}\, cm^{-3}$$

- Kết luận

  Bán dẫn bù có thể được chế tạo để cho ra những mức năng lượng Fermi đặc biệt.

Chúng ta có thể xây dựng một công thức hơi khác để xác định vị trí mức Fermi. Chúng ta đã có từ phương trình (4.39) là $n_0=n_i exp[(E_F-E_{Fi})/kT]$. Chúng ta có thể tìm E_F-E_{Fi}

$$E_F - E_{Fi} = kT \ln\left(\frac{n_0}{n_i}\right) \tag{4.65}$$

Phương trình (4.65) có thể được dùng riêng cho bán dẫn loại *n*, trong đó n_0 được cho bởi phương trình (4.60), để tìm sự khác nhau giữa mức Fermi và mức Fermi riêng như một hàm theo mật độ đono. Chúng ta cần chú ý rằng, nếu mật độ đono hiệu dụng tòan phần bằng 0, nghĩa là, $N_d-N_a=0$ thì $n_0 = n_i$ và $E_F = E_{Fi}$. Bán dẫn bù hoàn toàn có những tính chất của bán dẫn ròng như mật độ hạt tải điện và vị trí mức Fermi.

Chúng ta có thể rút ra phương trình tương tự cho bán dẫn loại *p*. Từ phương trình (4.19), chúng ta có $p_0=N_\upsilon exp\,[-(E_F - E_\upsilon)/kT]$, do đó

$$E_F - E_\upsilon = kT \ln\left(\frac{N_\upsilon}{p_0}\right) \tag{4.66}$$

Nếu chúng ta giả sử rằng $N_a>>n_i$, thì phương trình (4.66) có thể được viết là

$$E_F - E_\upsilon = kT \ln\left(\frac{N_\upsilon}{N_a}\right) \tag{4.67}$$

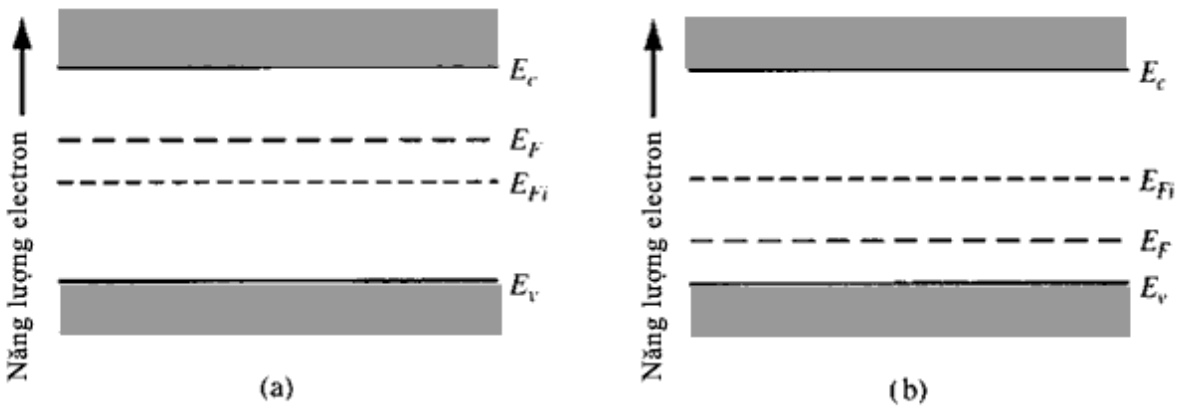
Khoảng cách giữa mức Fermi và đỉnh của vùng hóa trị đối với bán dẫn loại *p* là hàm logarit của mật độ acceptor: khi mật độ acceptor tăng, mức Fermi di chuyển đến gần vùng hóa trị hơn. Phương trình (4.67) vẫn còn sử dụng gần đúng Boltzmann. Tương tự như trên, nếu chúng ta có bán dẫn bù loại *p* thì số hạng N_a trong phương trình (4.67) được thay thế bằng $N_a–N_d$, hoặc mật độ acceptor hiệu dụng toàn phần.

Chúng ta cũng có thể rút ra một biểu thức cho mối quan hệ giữa mức Fermi và mức Fermi riêng theo mật độ lỗ trống. Từ phương trình (4.40) chúng ta có $p_0=n_i exp[–(E_F–E_{Fi})/kT]$, suy ra

$$E_{Fi} - E_F = kT \ln\left(\frac{p_0}{n_i}\right) \tag{4.68}$$

Phương trình (4.68) có thể được dùng để tìm sự khác nhau giữa mức Fermi riêng và năng lượng Fermi theo nồng độ acceptor. Mật độ lỗ trống trong phương trình (4.68) được cho trong phương trình (4.62).

Chúng ta có thể rút ra từ phương trình (4.65) rằng, đối với bán dẫn loại *n*, $n_0 > n_i$ và $E_F > E_{Fi}$. Đối với bán dẫn *n*, mức Fermi ở trên mức Fermi riêng. Đối với bán dẫn loại *p*, $p_0 > n_i$, và từ phương trình



Hình 4.17| Vị trí của mức Fermi đối với bán dẫn [a] loại n ($N_d > N_a$)
[b] loại p ($N_d < N_a$)

(4.68) chúng ta thấy rằng $E_{Fi} > E_F$.Mức Fermi ở dưới mức Fermi riêng E_{Fi}. Những kết quả này được biểu diễn trong hình 4.17.

4.6.2 Sự biến đổi của E_F theo mật độ pha tạp và nhiệt độ

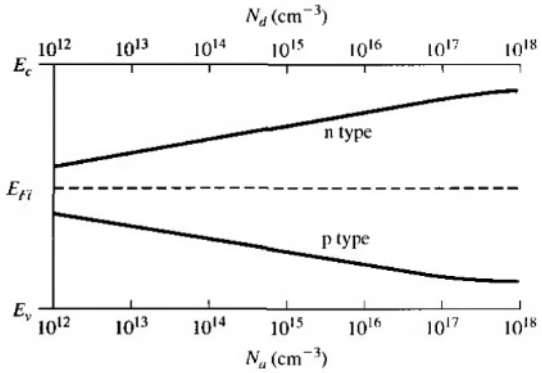


Figure 4.18 | Position of Fermi level as a function of donor concentration (n type) and acceptor concentration (p type).

Hình 4.18| Vị trí mức Fermi là hàm theo mật độ donor [loại n] và mật độ acceptor [loại p]

Chúng ta có thể vẽ đồ thị vị trí của mức năng lượng Fermi như một hàm số theo mật độ pha tạp. Hình 4.18 biểu diễn mức năng lượng Fermi như một hàm của mật độ đono (loại *n*) và như một hàm theo mật độ aceeptor (loại *p*) đối với silic tại *T=300K*. Khi mức pha tạp tăng, mức năng lượng Fermi di chuyển đến gần vùng dẫn hơn đối với bán dẫn loại *n* và di chuyển đến gần vùng hóa trị hơn đối với vật liệu loại *p*. Hãy nhớ rằng phương trình mức năng lượng Fermi mà chúng ta rút ra đang sử dụng gần đúng Boltzmann.

VÍ DỤ 4.14

Xác định vị trí mức Fermi và sự pha tạp cực đại mà tại đó gần đúng Boltzmann vẫn sử dụng được.

Xét silic loại *p*, tại *T=300K*, được pha tạp với Bo. Chúng ta có thể giả sử rằng giới hạn của gần đúng Boltzmann xuất hiện khi $E_F–E_a=3kT$. (Xem phần 4.1.2.)

- Giải

  Từ bảng 4.3, chúng ta tìm thấy năng lượng ion hóa $E_a – E_\upsilon$=0.045 eV đối với Bo trong silic. Nếu chúng ta giả sử rằng $E_{Fi}\approx E_{giữa\ khe}$ thì theo phương trình (4.68), vị trí của mức Fermi khi pha tạp cực đại là

  $$E_{Fi} - E_F = \frac{E_g}{2} - (E_a - E_\upsilon) - (E_F - E_a) = kT \ln\left(\frac{N_a}{n_i}\right)$$

  Hoặc

  $$0.56 - 0.045 - 3(0.0259) = 0.437 = (0.0259)\ln\left(\frac{N_a}{n_i}\right)$$

  Do đó, nồng độ pha tạp là

$$N_a = n_i \exp\left(\frac{0.437}{0.0259}\right) = 3.2\times10^{17}\, cm^{-3}$$

- Kết luận
  Nếu mật độ acceptor (hoặc đono) trong silic gần lớn hơn 3×10^{17} cm^{-3} thì gần đúng Boltzmann của hàm phân bố không còn giá trị và phương trình cho mức Fermi không còn hoàn toàn chính xác.

KIỂM TRA KIẾN THỨC

E4.13 Xác định vị trí mức Fermi đối với vùng năng lượng hóa trị trong GaAs loại p tại T=300K. Mật độ pha tạp là $N_a=5\times10^{16}$ cm^{-3} và $N_d=4\times10^{15}$ cm^{-3}.

E4.14 Tính vị trí mức Fermi trong silic loại n tại T=300K so với mức năng lượng Fermi riêng. Mật độ pha tạp $N_d=2\times10^{17}$ cm^{-3} và $N_a=3\times10^{16}$ cm^{-3}.

Mật độ hạt tải điện riêng n_i, trong phương trình (4.65) và (4.68) là hàm phụ thuộc rất mạnh vào nhiệt độ, vì thế E_F cũng là hàm phụ thuộc vào nhiệt độ. Hình 4.19 biểu diễn mức năng lượng Fermi trong silic theo nhiệt độ ứng với những mật độ đono và acceptor khác nhau. Khi nhiệt độ tăng, n_i tăng, và E_F di chuyển đến gần mức Fermi riêng hơn. Tại nhiệt độ cao, vật liệu bán dẫn bắt đầu đánh mất tính chất pha tạp của nó và bắt đầu giống bán dẫn ròng hơn. Tại nhiệt độ rất thấp, sự đóng băng xuất hiện; gần đúng Boltzmann không còn sử dụng được nữa và phương trình mà chúng ta rút ra cho vị trí mức Fermi không

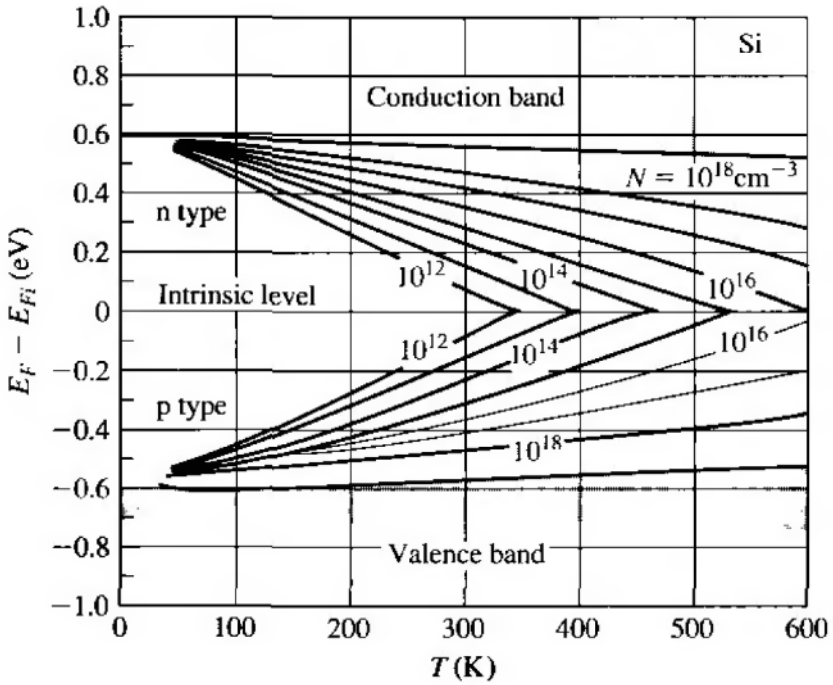


Figure 4.19 | Position of Fermi level as a function of temperature for various doping concentrations. *(From Sze [13].)*

Hình 4.19| Vị trí mức Fermi là hàm theo nhiệt độ ở các mật độ pha tạp khác nhau

Các thuật ngữ tiếng Anh trong hình:

Conduction band: vùng dẫn

Valance band: vùng hóa trị

Intrinsic level: mức riêng

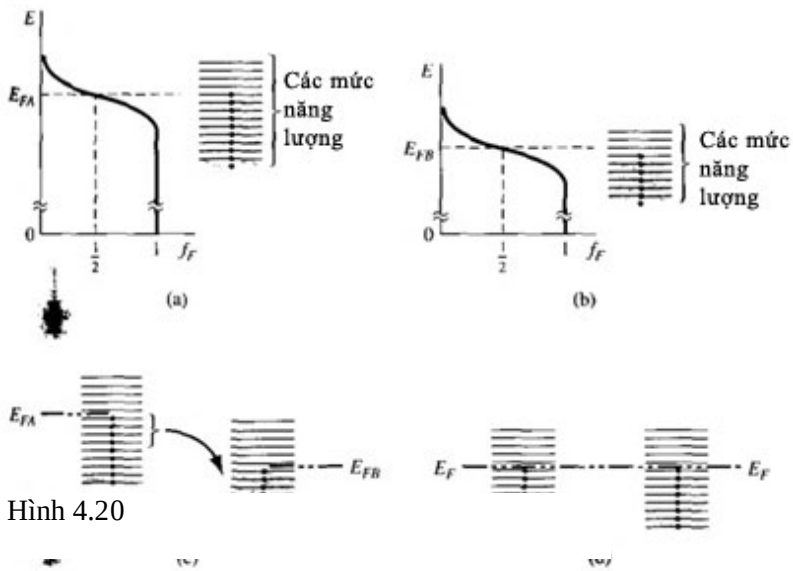
n type: loại n

p type: loại p

còn áp dụng được nữa. Tại nhiệt độ thấp lúc sự đóng băng xuất hiện, mức Fermi ở trên E_d đối với vật liệu loại n và dưới E_a đối với vật liệu loại p. Tại nhiệt độ không tuyệt đối, tất cả các trạng thái năng lượng dưới E_F đầy và tất cả những trạng thái năng lượng trên E_F trống.

4.6.3 Tính phù hợp của năng lượng Fermi

Chúng ta đã tính toán vị trí của mức năng lượng Fermi như một hàm số theo mật độ pha tạp và nhiệt độ. Sự phân tích này dường như hơi tùy tiện và hư cấu. Tuy nhiên, những biểu thức này sẽ được dùng sau này trong việc xem xét tiếp xúc pn và những thiết bị bán dẫn khác mà chúng ta xem xét. Trong trạng thái cân bằng nhiệt, một điểm quan trọng là mức năng lượng Fermi là hằng số trong hệ. Chúng ta sẽ không chứng minh phát biểu này nhưng chúng ta có thể thấy bằng trực giác tính hợp lệ của nó bằng việc xem xét ví dụ sau đây.



Hình 4.20

Năng lượng Fermi của [a] Vật liệu A ở trạng thái cân bằng nhiệt [b] vật liệu B ở trạng thái cân bằng nhiệt, [c] vật liệu A và B khi chúng tiếp xúc nhau và [d] A và B tiếp xúc nhau ở trạng thái cân bằng nhiệt

Giả sử rằng chúng ta có một vật liệu A nào đó, những electron của chúng được phân bố vào những trạng thái năng lượng như được biểu diễn trong hình 4.20a. Đa số những trạng thái năng lượng dưới E_{FA} chứa electron và đa số những trạng thái năng lượng trên E_{FA} trống. Xét vật liệu khác là vật liệu B, những electron của nó được phân bố vào những trạng thái năng lượng như được biểu diễn trong hình 4.20b. Những trạng thái năng lượng dưới E_{FB} hầu như đầy và những trạng thái năng lượng trên E_{FB} hầu như trống. Nếu hai vật liệu này được mang đến tiếp xúc nhau, những electron trong toàn hệ này có khuynh hướng vào những trạng thái năng lượng thấp nhất. Những electron từ vật liệu A sẽ đi vào trong những trạng thái năng lượng thấp hơn của vật liệu B, như được chỉ trong hình 4.20c cho đến khi đạt đến trạng thái cân bằng nhiệt. Trạng thái cân bằng nhiệt đạt được khi sự phân bố của những electron, như một hàm của năng lượng giống nhau trong 2 vật liệu. Trạng thái cân bằng này xuất hiện khi năng lượng Fermi giống nhau trong 2 vật liệu như được biểu diễn trong hình 4.20d. Năng lượng Fermi rất quan trọng trong vật lí bán dẫn, nó cũng cung cấp cho ta một sự minh họa trực quan về tính chất của vật liệu và thiết bị bán dẫn.

CHƯƠNG V

Hiện tượng vận chuyển hạt mang điện

TỔNG QUAN

Trong chương trước, chúng ta đã xét bán dẫn ở trạng thái cân bằng và xác định mật độ electron và lỗ trống trong vùng dẫn và vùng hóa trị. Hiểu biết về mật độ những hạt mang điện này giúp chúng ta hiểu biết về tính chất điện của vật liệu bán dẫn. Dòng chảy tổng cộng của electron và lỗ trống trong bán dẫn sẽ tạo ra dòng điện. Quá trình làm những hạt mang điện này di chuyển được gọi là sự vận chuyển. Trong chương này, chúng ta sẽ xem xét 2 cơ chế vận chuyển cơ bản trong tinh thể bán dẫn: sự trội dạt–sự di chuyển của những hạt mang điện bởi trường điện, và sự khuếch tán–sự di chuyển của hạt mang điện bởi ***gradient mật độ***. Nhân tiện, chúng ta sẽ đề cập đến vấn đề ***gradient nhiệt độ*** trong bán dẫn cũng có thể dẫn đến sự di chuyển của những hạt tải điện. Tuy nhiên khi kích thước thiết bị bán dẫn ngày càng trở nên nhỏ hơn, hiệu ứng này thường được bỏ qua. Hiện tượng vận chuyển hạt tải điện là cơ sở cho việc xác định đặc tuyến Vôn–Ampe của thiết bị bán dẫn. Trong toàn chương này, chúng ta sẽ giả sử rằng mặc dù sẽ có dòng electron và lỗ trống chuyển động do quá trình vận chuyển, nhưng về thực chất, sự cân bằng nhiệt sẽ không bị ảnh hưởng. Quá trình không cân bằng sẽ được xem xét trong chương tiếp theo.

5.1| SỰ TRÔI DẠT CỦA HẠT TẢI ĐIỆN

Khi điện trường đặt vào bán dẫn sẽ tạo ra lực tác động lên electron và lỗ trống làm cho chúng chuyển động có gia tốc, miễn là có sẵn những trạng thái năng lượng trong vùng dẫn và vùng hóa trị. Sự di chuyển của điện tích bởi một trường điện được gọi là *sự trôi dạt*. Sự trôi dạt của những điện tích làm phát sinh *dòng trôi dạt*.

5.1.1 Mật độ dòng trôi dạt

Nếu chúng ta có các điện tích dương mật độ ρ di chuyển với vận tốc trôi dạt trung bình là υ_d thì mật độ dòng trôi dạt là:

$$J_{troi_dat} = \rho \upsilon_d \tag{5.1}$$

ở đây đơn vị của J_{troi_dat} là $C/cm^2\text{-}s$ hoặc $amps/cm^2$. Nếu mật độ điện tích khối gây ra bởi các lỗ trống mang điện dương, thì

$$J_{p|troi_dat} = (ep)\upsilon_{dp} \tag{5.2}$$

ở đây $J_{p|troi_dat}$ là mật độ dòng điện trôi dạt gây ra bởi các lỗ trống và υ_{dp} là vận tốc trôi dạt trung bình của lỗ trống.

Phương trình chuyển động của lỗ trống mang điện dương dưới tác dụng của điện trường là

$$F = m_p^* a = eE \tag{5.3}$$

ở đây e là độ lớn của điện tích đơn vị, a là gia tốc, E là cường độ điện trường, và m_p^* là khối lượng hiệu dụng của lỗ trống. Nếu cường độ điện trường là hằng số thì chúng ta suy ra vận tốc sẽ tăng tuyến tính với thời gian. Tuy nhiên, những hạt mang điện trong bán dẫn còn va chạm với những nguyên tử tạp chất bị ion hóa và những nguyên tử mạng dao động nhiệt. Những sự dao động và tán xạ này làm thay đổi vận tốc của hạt.

Khi một lỗ trống được gia tốc trong tinh thể bởi trường điện, vận tốc tăng. Khi hạt mang điện va chạm với một nguyên tử trong mạng tinh thể, hạt sẽ mất một phần hay toàn bộ năng lượng của nó. Hạt sẽ bắt đầu gia tốc và thu lại năng lượng lần nữa cho đến khi nó tham gia vào quá trình tán xạ tiếp theo. Điều này được lặp đi lặp lại. Trong suốt quá trình này, hạt sẽ thu được vận tốc trôi dạt trung bình tỉ lệ thuận với cường độ trường điện (trong trường hợp điện trường yếu). Do đó, chúng ta có thể viết

$$\upsilon_{dp} = \mu_p E \tag{5.4}$$

ở đây μ_p là hệ số tỉ lệ và được gọi là *độ linh động của lỗ trống*. Độ linh động là một thông số quan trọng của bán dẫn bởi vì nó mô tả mức độ chuyển động của hạt dưới tác dụng của điện trường. Đơn vị của độ linh động thường được biểu diễn là $cm^2/V\text{-}s$.

Bằng cách kết hợp (5.2) và (5.4), chúng ta có thể viết mật độ dòng trôi dạt bởi các lỗ trống là

$$J_{p|troi_dat} = (ep)\upsilon_{dp} = e\mu_p pE \tag{5.5}$$

Dòng trôi dạt do các lỗ trống gây ra chuyển động cùng hướng với điện trường.

Tương tự, đối với electron, chúng ta có thể viết

$$J_{n|troi_dat} = \rho\upsilon_{dn} = (-en)\upsilon_{dn} \tag{5.6}$$

ở đây $J_{n|troi_dat}$ là mật độ dòng trôi dạt của electron và υ_{dn} là vận tốc trôi dạt trung bình của electron.

Vận tốc trôi dạt trung bình của electron cũng tỉ lệ thuận với cường độ trường điện đối với trường điện yếu. Tuy nhiên, bởi vì electron là hạt mang điện âm, sự chuyển động toàn phần của electron phải ngược với hướng của trường điện. Do đó chúng ta có thể viết

$$\upsilon_{dn} = -\mu_n E \tag{5.7}$$

ở đây μ_n là độ linh động của electron và là đại lượng dương. Phương trình (5.6) có thể được viết là

$$J_{n|troi_dat} = (-en)(-\mu_n E) = e\mu_n nE \tag{5.8}$$

Dòng trôi dạt quy ước của electron cũng cùng chiều với điện trường mặc dù chuyển động của từng electron là ngược chiều điện trường.

Độ linh động của electron và lỗ trống là hàm số theo nhiệt độ và mật độ pha tạp như chúng ta sẽ thấy trong phần tiếp theo. Bảng 5.1 biểu diễn một vài giá trị độ linh động điển hình tại $T=300K$ và mật độ pha tạp thấp.

Bảng 5.1| Giá trị độ linh động điển hình tại $T = 300$ K và mật độ pha tạp thấp

	μ_n (cm²/V-s)	μ_p (cm²/V-s)
Silicon [Sillic]	1350	480
Gallium arsenide [GaAs]	8500	400
Germanium [Ge]	3900	1900

Bởi vì cả electron và lỗ trống tham gia vào dòng trôi dạt nên mật độ dòng trôi dạt toàn phần bằng tổng của mật độ dòng trôi dạt của lỗ trống và electron, vì vậy chúng ta có thể viết

$$J_{troi_dat} = e(\mu_n n + \mu_p p)E \tag{5.9}$$

VÍ DỤ 5.1

Tính mật độ dòng trôi dạt trong bán dẫn khi đã biết trước độ lớn của cường độ trường điện.

Xét mẫu GaAs tại *T=300K* với mật độ pha tạp $N_a=0$ và $N_d=10^{16}cm^{-3}$. Giả sử sự ion hóa là hoàn toàn và độ linh động của electron và lỗ trống được cho trong bảng 5.1. Tính mật độ dòng điện trôi giạt nếu trường điện *E=10V/cm* được đặt vào.

- Giải

  Bởi vì $N_d>N_a$, bán dẫn là loại *n* và mật độ electron tải điện đa số theo chương 4 là

  $$n=\frac{N_d-N_a}{2}+\sqrt{\left(\frac{N_d-N_a}{2}\right)^2+n_i^2}\approx 10^{16}cm^{-3}$$

  Mật độ lỗ trống tải điện thiểu số là

  $$p=\frac{n_i^2}{n}=\frac{\left(1.8\times10^6\right)^2}{10^{16}}=3.24\times10^{-4}cm^{-3}$$

  Đối với bán dẫn pha tạp này, mật độ dòng trôi dạt là

  $$J_{troi_dat}=e(\mu_n n+\mu_p p)\approx e\mu_n N_d E$$

  Do đó

  $$J_{troi_dat}=(1.6\times10^{-19})(8500)(10^{16})(10)\approx 136A/cm^2$$

- Kết luận

  Mật độ dòng trôi dạt có độ lớn đáng kể trong bán dẫn khi đặt vào điện trường có giá trị tương đối nhỏ. Chúng ta có thể rút ra từ ví dụ này rằng mật độ dòng trôi dạt chủ yếu được gây ra bởi những hạt tải điện đa số trong bán dẫn pha tạp.

KIỂM TRA KIẾN THỨC

E5.1 Xét mẫu silic tại T=300K được pha tạp với nồng độ pha tạp $N_d=10^{15}$ cm^{-3} và $N_a=10^{14}$ cm^{-3}. Giả sử độ linh động của electron và lỗ trống được cho trong bảng 5.1. Tính toán mật độ dòng trôi dạt nếu một trường điện E=35V/cm được đặt vào.

E5.2 Trong một thiết bị bán dẫn silic loại p, mật độ dòng trôi dạt $J_{troi_dat}=120$ A/cm^2 khi trường điện E=20V/cm được đặt vào. Xác định mật độ tạp chất cần thiết để đạt được yêu cầu này. Giả sử độ linh động của electron và lỗ trống được cho trong bảng 5.1.

5.1.2 Những yếu tố ảnh hưởng đến độ linh động

Trong phần trước, chúng ta đã định nghĩa độ linh động, nó liên quan đến vận tốc trôi dạt trung bình của hạt tải điện trong trường điện. Độ linh động của electron và lỗ trống là một thông số quan trọng mô tả đặc tính của sự trôi dạt hạt tải điện, như đã thấy trong phương trình (5.9).

Phương trình (5.3) thiết lập mối quan hệ giữa gia tốc của lỗ trống với lực điện trường. Chúng ta có thể viết phương trình này là

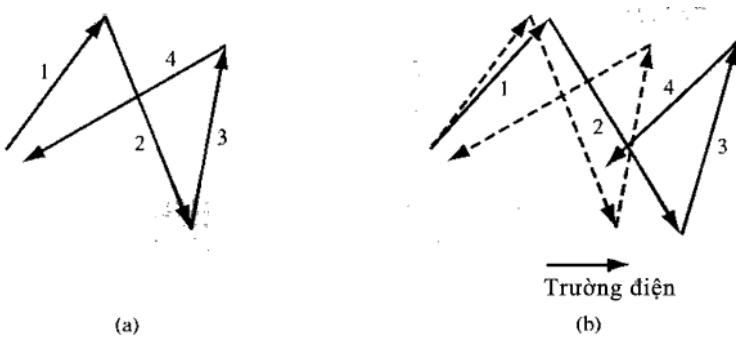
$$F = m_p^* \frac{d\upsilon}{dt} = eE \tag{5.10}$$

ở đây υ là vận tốc của hạt do trường điện gây ra và không bao gồm vận tốc chuyển động nhiệt ngẫu nhiên. Nếu chúng ta giả sử rằng khối lượng hiệu dụng và cường độ trường điện là hằng số thì chúng ta có thể lấy tích phân phương trình (5.10) và thu được

$$\upsilon = \frac{eEt}{m_p^*} \tag{5.11}$$

ở đây chúng ta đã giả sử rằng vận tốc trôi dạt ban đầu bằng 0.

Hình 5.1a biểu diễn mô hình bằng đồ thị của vận tốc chuyển động nhiệt ngẫu nhiên [a] và chuyển động của lỗ trống trong bán dẫn khi không có trường điện [b]. Có một khoảng thời gian trung bình giữa những va chạm được kí hiệu là τ_{cp}. Nếu trường điện nhỏ được đặt vào như được chỉ ra trong hình 5.1b, sẽ có sự trôi dạt của lỗ trống theo hướng của trường điện *E*, và vận tốc trôi dạt toàn phần sẽ gây ra một nhiễu loạn nhỏ trên vận tốc chuyển động nhiệt ngẫu nhiên, vì vậy thời gian giữa những va chạm sẽ không thay đổi đáng kể. Nếu chúng ta dùng thời gian trung bình giữa những va chạm τ_{cp} thay cho thời gian t



Hình 5.1| Hành vi thông thường của lỗ trống trong bán dẫn khi [a]không có trường điện và [b] có trường điện

trong phương trình (5.11), thì vận tốc cực đại trung bình ngay trước lúc va chạm hoặc tán xạ là

$$\upsilon_{d|cuc_dai} = \left(\frac{e\tau_{cp}}{m_p^*} \right) E \tag{5.12a}$$

Vận tốc trôi dạt trung bình bằng một nữa giá trị cực đại vì vậy chúng ta có thể viết

$$\langle \upsilon_d \rangle = \frac{1}{2} \left(\frac{e\tau_{cp}}{m_p^*} \right) E \tag{5.12b}$$

Tuy nhiên, quá trình va chạm không đơn giản như mô hình này, mà nó mang bản chất thống kê. Trong một mô hình chính xác hơn bao gồm hiệu ứng phân bố thống kê, thừa số ½ trong phương trình (5.12b) không xuất hiện. Do đó, độ linh động của lỗ trống là

$$\mu_p = \frac{\upsilon_{dp}}{E} = \frac{e\tau_{cp}}{m_p^*} \tag{5.13}$$

Sự phân tích tương tự áp dụng cho electron; vì thế chúng ta có thể viết độ linh động của electron là

$$\mu_n = \frac{e\tau_{cn}}{m_n^*} \tag{5.14}$$

ở đây τ_{cn} là thời gian trung bình giữa những lần va chạm của electron.

Có 2 cơ chế va chạm hoặc tán xạ chiếm ưu thế trong bán dẫn và ảnh hưởng đến độ linh động hạt tải điện: phonon hoặc tán xạ mạng; và tán xạ với tạp chất bị ion hóa.

Tại nhiệt độ trên độ không tuyệt đối, những nguyên tử trong tinh thể bán dẫn có một lượng nhiệt năng nào đó làm cho những nguyên tử này dao động ngẫu nhiên xung quanh vị trí mạng của chúng trong tinh thể. Dao động mạng gây ra sự phá vỡ hàm thế tuần hoàn lí tưởng. Hàm thế tuần hoàn lí tưởng trong chất rắn cho phép những electron di chuyển mà không bị cản trở hoặc tán xạ qua tinh thể. Nhưng dao động nhiệt phá vỡ hàm thế, dẫn đến sự tương tác giữa electron hoặc lỗ

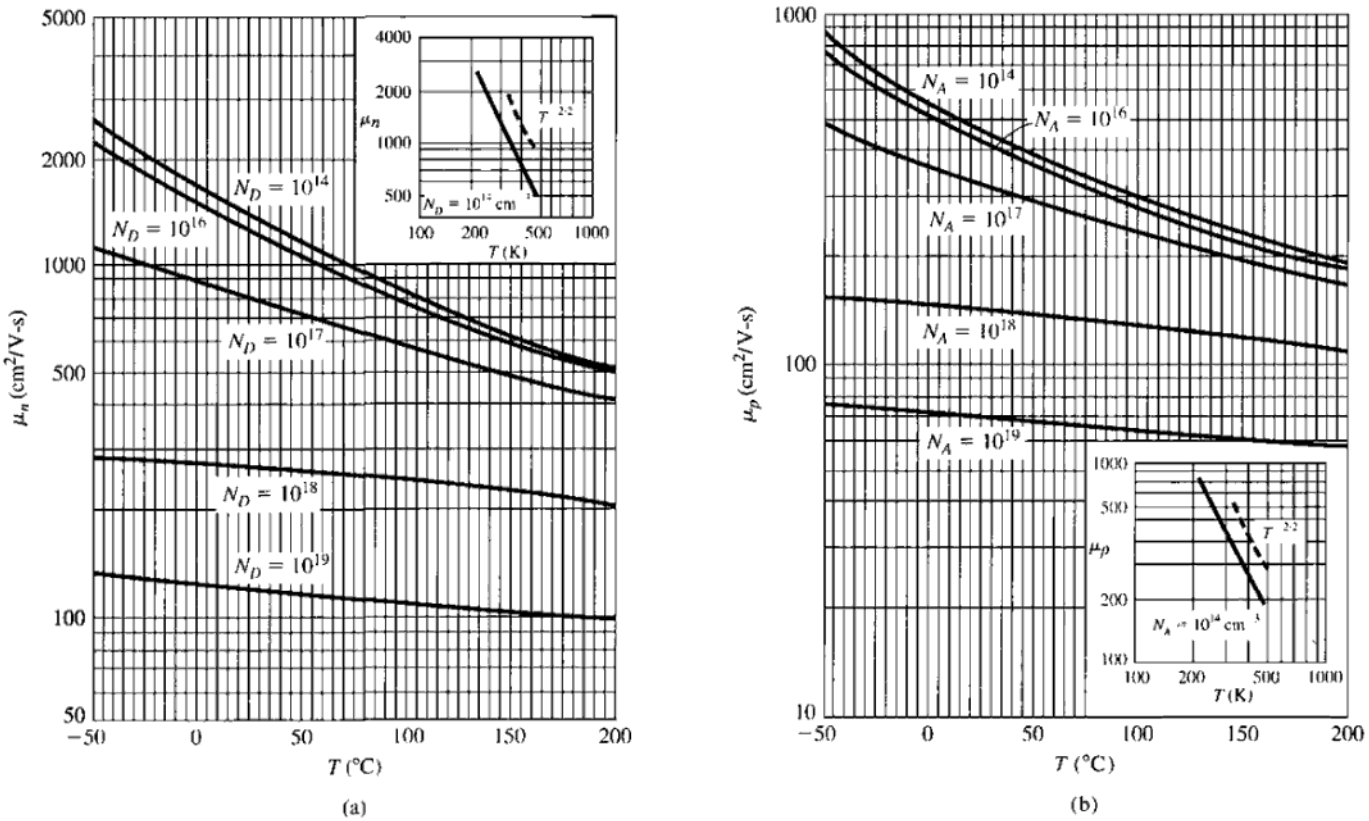
trống với những nguyên tử dao động mạng. *Sự tán xạ mạng* này cũng được gọi là *tán xạ phonon*.

Bởi vì tán xạ mạng có liên hệ với chuyển động nhiệt của nguyên tử nên mức độ tán xạ sẽ là hàm của nhiệt độ. Nếu chúng ta kí hiệu μ_L là độ linh động sẽ được quan sát chỉ nếu tán xạ mạng tồn tại thì lí thuyết tán xạ phát biểu rằng: đối với bậc nhất

$$\mu_L \propto T^{-3/2} \tag{5.15}$$

Độ linh động do tán xạ mạng tăng khi nhiệt độ giảm. Bằng trực giác, chúng ta có thể tiên đoán dao động mạng giảm khi nhiệt độ giảm, điều này có nghĩa là xác suất tán xạ cũng giảm, vì thế tăng độ linh động.

Hình 5.2 biểu diễn sự phụ thuộc vào nhiệt độ của độ linh động của electron và lỗ trống trong Silic. Trong bán dẫn được pha tạp nhẹ, tán xạ mạng chiếm ưu thế và độ linh động hạt tải điện giảm theo nhiệt độ như chúng ta đã thảo luận. Sự phụ thuộc vào nhiệt độ của độ linh động tỉ lệ với T^{-n}. Những hình nhỏ kèm theo chứng tỏ rằng thông số n không bằng 3/2 như lí thuyết tán xạ bậc nhất đã tiên đoán. Tuy nhiên, độ linh động đúng là tăng khi nhiệt độ giảm.



Hình 5.2

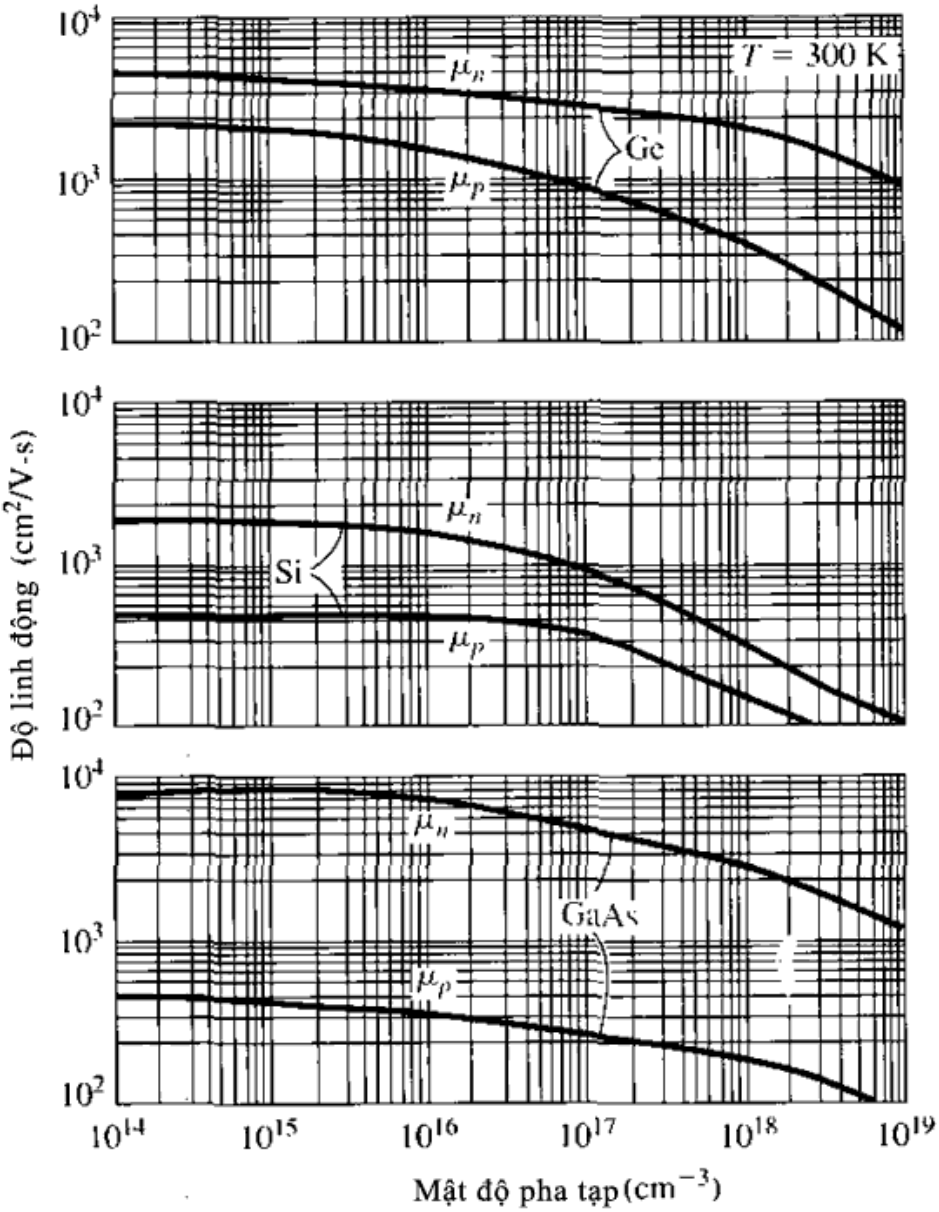
Cơ chế tương tác thứ hai ảnh hưởng đến độ linh động của hạt tải điện là tán xạ với tạp chất bị ion hóa. Chúng ta đã thấy rằng những nguyên tử tạp chất được thêm vào bán dẫn để điều khiển hoặc thay đổi tính chất của nó. Những tạp chất này bị ion hóa ở nhiệt độ phòng vì thế tương tác Coulomb xuất hiện giữa electron hoặc lỗ trống với những nguyên tử tạp chất bị ion hóa này. Tương tác Coulomb này tạo ra sự tán xạ hoặc va chạm và cũng làm thay đổi vận tốc của hạt tải điện. Nếu chúng ta kí hiệu μ_I là độ linh động do sự tán xạ với những nguyên tử tạp chất bị ion hóa thì đối với bậc nhất chúng ta có

$$\mu_I \propto \frac{T^{+3/2}}{N_I} \tag{5.16}$$

ở đây $N_I = N_d^+ + N_a^-$ là nồng độ các nguyên tử pha tạp bị ion hóa trong bán dẫn. Nếu nhiệt độ tăng, vận tốc chuyển động nhiệt ngẫu nhiên của các hạt tải điện tăng, rút ngắn thời gian mà các hạt tải điện ở trong vùng lân cận của tâm tạp chất bị ion hóa. Thời gian ở trong vùng lân cận của lực Coulomb càng nhỏ, hiệu ứng tán xạ càng

nhỏ và giá trị kì vọng của μ_I càng lớn. Nếu số tâm tạp chất bị ion hóa tăng thì xác suất mà một hạt tải điện chạm vào những tâm tạp chất bị ion hóa tăng, nghĩa là giá trị của μ_I nhỏ hơn.

Hình 5.3 là đồ thị biểu diễn độ linh động của electron và lỗ trống trong Germani, Silic, và GaAs tại $T=300K$ như một hàm theo mật độ pha tạp. Chính xác hơn, những đường cong này là độ linh động theo mật độ tạp chất ion hóa N_I. Khi mật độ pha tạp tăng, số tâm tán xạ pha tạp tăng, vì thế giảm độ linh động.



Hình 5.3| Độ động của electron và lỗ trống theo mật độ pha tạp đối với Ge, Si, GaAs tại *T=300K*

KIỂM TRA KIẾN THỨC

E5.3 (a) Dùng hình 5.2, tìm tìm độ linh động của electron khi (i) $N_d=10^{17}$ cm^{-3}, $T=150^0$ C và (ii) $N_d=10^{16}cm^{-3}$, $T=0^0C$. (b) Tìm độ linh động của lỗ trống khi (i) $N_a=10^{16}$ cm^{-3}, $T=50^0C$; và (ii) $N_a=10^{17}$ cm^{-3}, $T=150^0C$.

E5.4 Dùng hình 5.3 xác định độ linh động của electron và lỗ trống trong (a) silic khi $N_d=10^{15}cm^{-3}$, $N_a=0$; (b)silic khi $N_d=10^{17}cm^{-3}$, $N_a=5\times10^{16}cm^{-3}$; (c) silic khi $N_d=10^{16}cm^{-3}$, $N_a=10^{17}cm^{-3}$; và (d)GaAs khi $N_d=N_a=10^{17}cm^{-3}$.

Nếu τ_L là thời gian trung bình giữa những va chạm do tán xạ mạng thì dt/τ_L là xác suất của sự kiện dao động mạng trong khoảng thời gian vi phân dt. Tương tự, nếu τ_I là thời gian trung bình giữa những va chạm do sự tán xạ với những nguyên tử tạp chất bị ion hóa, thì dt/τ_I là xác suất của một sự kiện tán xạ với những nguyên tử tạp chất bị ion hóa trong khoảng thời gian vi phân dt. Nếu 2 quá trình tán xạ này độc lập thì xác suất tổng cộng của sự kiện tán xạ xuất hiện trong khoảng thời gian dt là tổng của những sự kiện riêng biệt:

$$\frac{dt}{\tau}=\frac{dt}{\tau_I}+\frac{dt}{\tau_L} \tag{5.17}$$

So sánh phương trình (5.17) với định nghĩa về độ linh động được cho bởi phương trình (5.13) hoặc (5.14), chúng ta có thể viết

$$\frac{1}{\mu}=\frac{1}{\mu_I}+\frac{1}{\mu_L} \tag{5.18}$$

ở đây μ_I là độ linh động do quá trình tán xạ với những nguyên tử tạp chất bị ion hóa và μ_L là độ linh động do quá trình tán xạ mạng. Thông số μ là độ linh động toàn phần. Khi có thêm những cơ chế tán xạ độc lập nữa, những giá trị nghịch đảo của độ linh động được thêm vào có nghĩa là độ linh động toàn phần giảm.

5.1.3 Độ dẫn điện

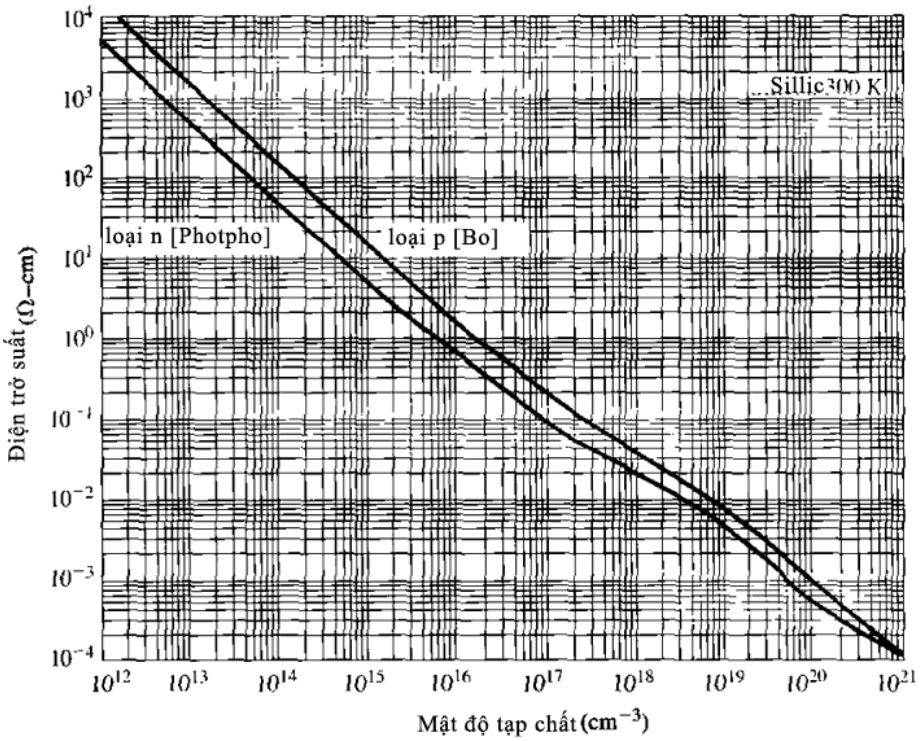
Mật độ dòng trôi dạt được cho bởi phương trình (5.9) có thể được viết lại là

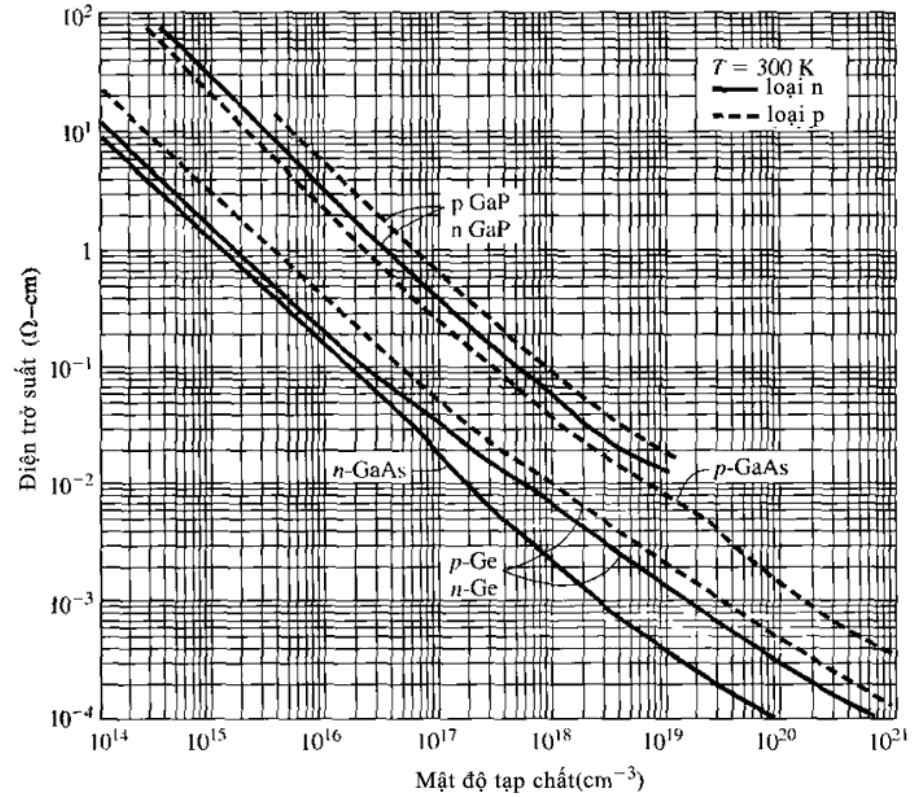
$$J_{troi_dat}=e(\mu_n n+\mu_p p)E=\sigma E \tag{5.19}$$

ở đây σ là điện dẫn suất của vật liệu bán dẫn. Điện dẫn suất có đơn vị là $(\Omega\text{-cm})^{-1}$ và là một hàm của mật độ và độ linh động của electron và lỗ trống. Chúng ta vừa chỉ ra rằng độ linh động là hàm của mật độ pha tạp, do đó, điện dẫn suất là hàm hơi phức tạp của mật độ pha tạp. Nghịch đảo của điện dẫn suất là điện trở suất được kí hiệu là ρ và đơn vị là *ohm-cm*. Chúng ta có thể viết công thức cho điện trở suất là

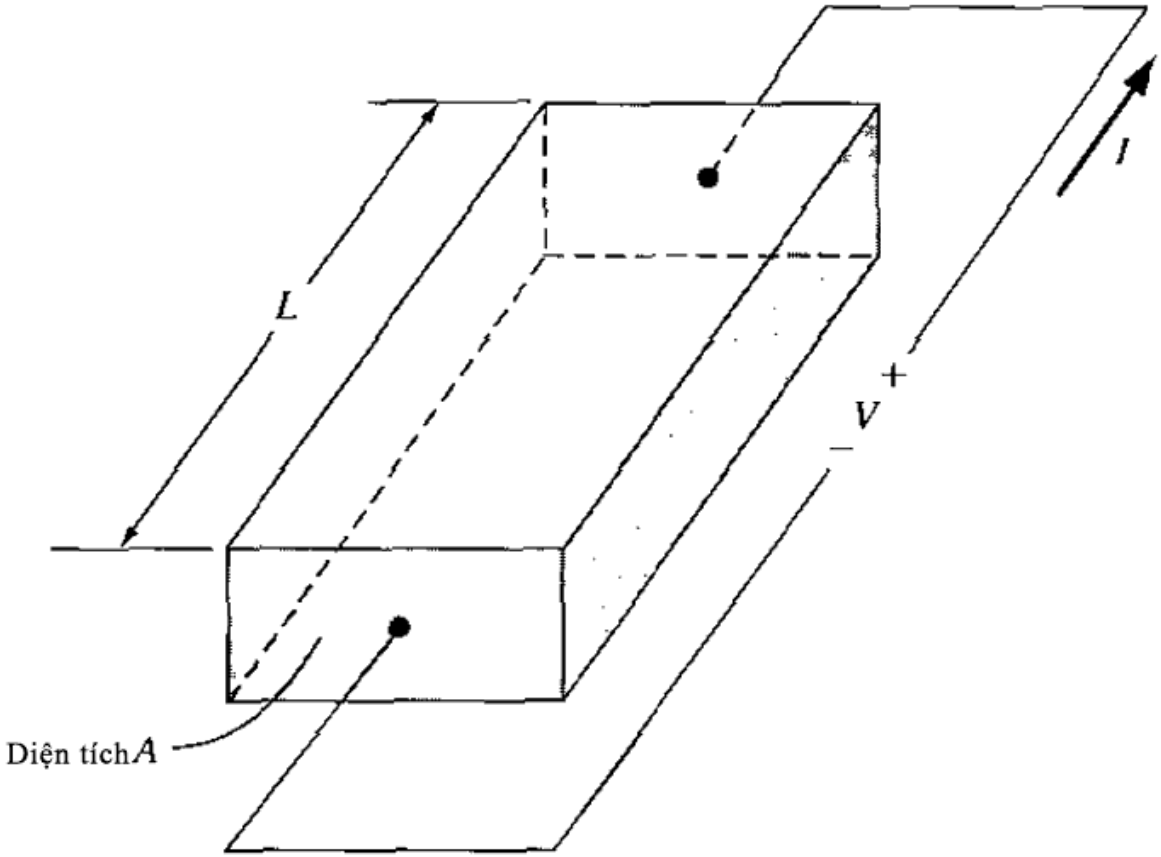
$$\rho = \frac{1}{\sigma} = \frac{1}{e(\mu_n n + \mu_p p)} \tag{5.20}$$

Hình 5.4 là đồ thị của điện trở suất theo mật độ pha tạp trong Sillic, Germani, GaAs, và GaP tại *T=300K*. Hiển nhiên đường cong này không phải là hàm tuyến tính theo N_d và N_a do ảnh hưởng của độ linh động.





Hình 5.4|Điện trở suất theo mật độ pha tạp tại $T \simeq 300\,\mathrm{K}$ trong [a] Sillic và [b]Ge, GaAs, và GaP



Hình 5.5| Thanh bán dẫn như là một điện trở

Nếu chúng ta có một thanh vật liệu bán dẫn như được chỉ trong hình 5.5 và một điện áp được đặt vào để tạo ra dòng điện I thì chúng ta có thể viết

$$J = \frac{I}{A} \tag{5.21a}$$

Và

$$E = \frac{V}{L} \tag{5.21b}$$

Bây giờ chúng ta có thể viết lại phương trình (5.19) là

$$\frac{I}{A} = \sigma\left(\frac{V}{L}\right) \tag{5.22a}$$

Hoặc

$$V = \left(\frac{L}{\sigma A}\right) I = \left(\frac{\rho L}{A}\right) I = IR \qquad (5.22b)$$

Phương trình (5.22b) là định luật Ohm cho bán dẫn. Điện trở là một hàm của điện trở suất, hoặc điện dẫn suất, và dạng hình học của bán dẫn.

Nếu chúng ta xét bán dẫn loại *p* với tạp chất acceptor $N_a(N_d=0)$ và $N_a >> n_i$, và nếu chúng ta giả sử rằng độ linh động của electron và lỗ trống cùng bậc độ lớn thì điện dẫn suất trở thành

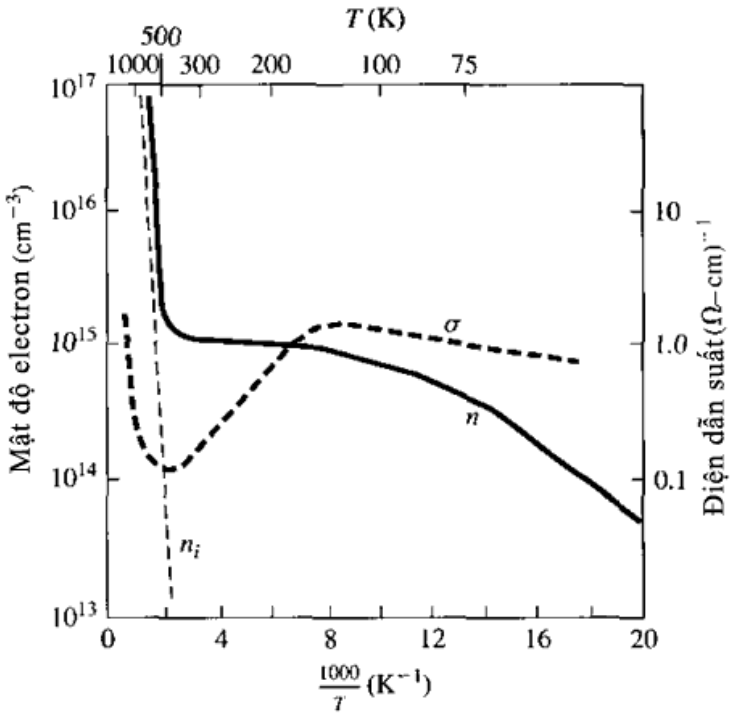
$$\sigma = e(\mu_n n + \mu_p p) \approx e\mu_p p \qquad (5.23)$$

Nếu chúng ta giả sử sự ion hóa là hoàn toàn thì phương trình (5.23) trở thành

$$\sigma \approx e\mu_p N_a \approx \frac{1}{\rho} \qquad (5.24)$$

Điện dẫn suất và điện trở suất là một hàm phụ thuộc chủ yếu vào thông số của những hạt tải điện đa số.

Chúng ta có thể vẽ đồ thị mật độ hạt tải điện và điện dẫn suất của bán dẫn như hàm số theo nhiệt độ cho một mật độ pha tạp cụ thể nào đó. Hình 5.6 biểu diễn mật độ electron và điện dẫn suất của silic như một hàm theo nghịch đảo của nhiệt độ trong trường hợp $N_d=10^{15}cm^{-3}$. Ở khoảng giữa của thang nhiệt độ, hoặc khoảng pha tạp như được chỉ ra trong hình vẽ, chúng ta có sự ion hóa hoàn toàn– mật độ electron về cơ bản sẽ giữ giá trị không đổi. Tuy nhiên độ linh động là một hàm theo nhiệt độ vì vậy điện dẫn suất



Hình 5.6| Mật độ electron và điện dẫn suất theo nghịch đảo của nhiệt độ trong Sillic

biến đổi theo nhiệt độ trong khoảng này. Tại nhiệt độ cao hơn, mật độ hạt tải điện riêng tăng và bắt đầu chiếm ưu thế so với mật độ electron cũng như điện dẫn suất. Trong khoảng nhiệt độ thấp hơn, sự đóng băng bắt đầu xuất hiện, mật độ electron và điện dẫn suất giảm cùng với sự giảm của nhiệt độ.

VÍ DỤ 5.2

Xác định mật độ pha tạp và độ linh động của hạt tải điện đa số của bán dẫn bù khi đã biết loại và điện dẫn suất của nó.

Xét bán dẫn bù silic loại *n* tại *T=300K*, với độ dẫn điện $\sigma=16\ (\Omega\text{-cm})^{-1}$ và mật độ pha tạp acceptor là $10^{17}\ cm^{-3}$. Xác định mật độ đono và độ linh động của electron.

- Giải

  Đối với bán dẫn loại n tại *T=300K*, chúng ta có thể giả sử sự ion hóa là hoàn toàn. Do đó với $N_d-N_a>>n_i$ thì điện dẫn suất là

  $\sigma \approx e\mu_n n = e\mu_n(N_d-N_a)$

  Chúng ta có

  $16=(1.6\times10^{-19})\mu_n(N_d-10^{17})$

  Bởi vì độ linh động là là hàm của mật độ pha tạp bị ion hóa nên chúng ta có thể dùng hình 5.3 cùng với phương pháp thử sai để xác định μ_n và N_d. Chẳng hạn, nếu chúng ta chọn $N_d=2\times10^{17}$ thì $N_I=N_d^{+}+N_a^{-}=3\times10^{17}$ sao cho $\mu_n\approx510\ cm^2/V\text{-}s$ suy ra $\sigma=8.16\ (\Omega\text{-cm})^{-1}$. Nếu chúng ta chọn $N_d=5\times10^{17}$ thì $N_I=6\times10^{17}$ sao cho $\mu_n\approx325\ cm^2/V\text{-}s$ suy ra $\sigma=20.8\ (\Omega\text{-cm})^{-1}$. Sự pha tạp bị giới hạn bởi 2 giá trị này. Dùng phương pháp thử sai, ta được

  $N_d\approx3.5\times10^{17}\ cm^{-3}$

  Và

  $\mu_n\approx400\ cm^2/V\text{-}s$

  vì vậy

  $\sigma\approx16\ (\Omega\text{-cm})^{-1}$

- Kết luận

  Chúng ta có thể thấy từ ví dụ này rằng, trong vật liệu bán dẫn có độ dẫn điện cao, đô linh động là hàm phụ thuộc mạnh vào mật độ hạt tải điện.

VÍ DỤ 5.3

Thiết kế điện trở bán dẫn để điều khiển mật độ dòng cho trước.

Bán dẫn silic ở T=300K ban đầu được pha tạp với mật độ đono là $N_d=5\times10^{15}cm^{-3}$. Acceptor được thêm vào để hình thành bán dẫn bù loại p. Điện trở có giá trị là 10 kΩ và điều khiển mật độ dòng điện 50 A/cm^2 khi hiệu điện thế 5 V được đặt vào.

- Giải

  Khi hiệu điện thế 5 V được đặt vào điện trở 10 kΩ thì dòng điện là

$$I = \frac{V}{R} = \frac{5}{10} = 0.5mA$$

Nếu mật độ dòng điện được giới hạn là 50 A/cm^2 thì tiết diện truyền qua là

$$A = \frac{I}{J} = \frac{0.5\times10^{-3}}{50} = 10^{-5}cm^2$$

Nếu chúng ta giới hạn điện trường là E=100 V/cm (hơi tùy tiện tại điểm này) thì độ dài của điện trở là

$$L = \frac{V}{E} = \frac{5}{100} = 5\times10^{-2}cm$$

Từ phương trình (5.22b) điện dẫn suất của bán dẫn là

$$\sigma = \frac{L}{RA} = \frac{5\times10^{-2}}{(10^4)(10^{-5})} = 0.50(\Omega - cm)^{-1}$$

Điện dẫn suất của bán dẫn bù loại p là

$\sigma \approx e\mu_p p = e\mu_p(N_a - N_d)$

ở đây độ linh động là hàm của mật độ tạp chất bị ion hóa N_a+N_d

Dùng phương pháp thử sai, nếu $N_a=1.25\times10^{16}$cm^{-3} thì $N_a+N_d=1.75\times10^{16}$ cm^{-3}, và độ linh động của lỗ trống, từ hình 5.3 gần bằng μ_p=410 cm^2/V-s. Do đó, điện dẫn suất là

$$\sigma = e\mu_p(N_a - N_d) = (1.6\times10^{-19})(410)(1.25\times10^{16} - 5\times10^{15}) = 0.492$$

Giá trị này rất gần với giá trị mà chúng ta cần.

- Kết luận

Bởi vì độ linh động có liên hệ với mật độ tạp chất bị ion hóa tổng cộng nên việc xác định mật độ tạp chất để đạt được một điện dẫn suất cho trước không dễ.

E5.5 Silic tại T=300K được pha tạp với mật độ pha tạp $N_d=5\times10^{16}cm^{-3}$ và $N_a=2\times10^{16}cm^{-3}$. (a) Độ linh động của electron và lỗ trống là bao nhiêu? (b) Xác định điện dẫn suất và điện trở suất của vật liệu.

E5.6 Xét thiết bán dẫn silic ở nhiệt độ T=300K, vật liệu được yêu cầu là loại n với điện trở suất là 0.10 Ω-cm. (a)Xác định mật độ pha tạp cần thiết và (b) độ linh động của elctron thu được.

E5.7 Một thanh silic loại p, chẳng hạn như được chỉ trong hình 5.5, có tiết diện truyền qua là $A=10^{-16}cm^2$ và độ dài là $L=1.2\times10^{-3}$ cm. Khi đặt điện áp 5 V vào, dòng điện qua thanh là 2 mA. Xác định (a)điện trở, (b) điện trở suất của silic, và (c) mật độ pha tạp đono.

Đối với vật liệu bán dẫn ròng, điện dẫn suất có thể được viết là

$$\sigma_i = e(\mu_n + \mu_p)n_i \qquad (5.25)$$

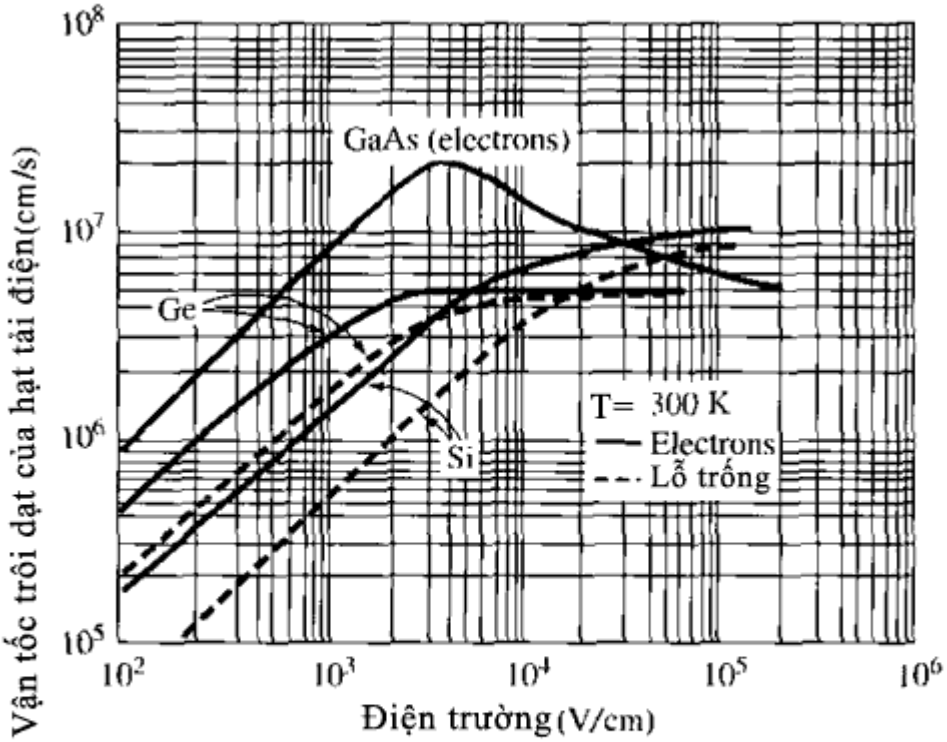
Mật độ electron và lỗ trống bằng nhau trong bán dẫn ròng, vì vậy điện dẫn suất riêng bao gồm cả độ linh động của electron và lỗ trống. Nói chung, bởi vì độ linh động của electron và lỗ trống không bằng nhau, điện dẫn suất riêng không phải là giá trị nhỏ nhất có thể tại nhiệt độ cho trước.

5.1.4 Bão hòa vận tốc

Trong khi khảo sát vận tốc trôi dạt, chúng ta đã giả sử rằng độ linh động không phải là hàm của cường độ điện trường.Vận tốc tổng cộng của một hạt bằng tổng của vận tốc chuyển động nhiệt ngẫu nhiên và vận tốc trôi dạt. Tại *T=300K*, năng lượng chuyển động nhiệt trung bình ngẫu nhiên là

$$\tfrac{1}{2}mv_{th}^2=(3/2)kT=(3/2)(0.0259)=0.03885\,eV \qquad (5.26)$$

Năng lượng này tương ứng với vận tốc chuyển động nhiệt trung bình cỡ 10^7 *cm/s* đối với electron trong *Silic*. Trong *Sllic* được pha tạp đono thấp, nếu chúng ta giả sử độ linh động của electron $\mu_n=1350\ cm^2/V\text{-}s$ và điện trường tác dụng là 75 V/cm thì vận tốc trôi dạt là 10^5 cm/s, tức là bằng 1% của vận tốc chuyển động nhiệt. Điện trường này không làm thay đổi đáng kể năng lượng của electron.

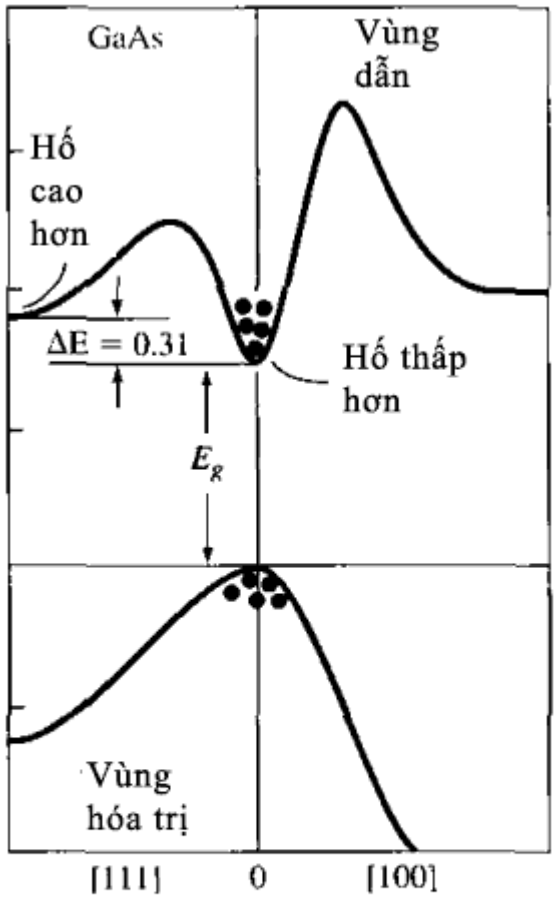


Hình 5.7| Vận tốc trôi dạt theo điện trường của Si, Ge, và GaAs pha tạp cao

Hình 5.7 là đồ thị của vận tốc trôi dạt trung bình theo cường độ trường điện đặt vào đối với electron và lỗ trống trong Silic, GaAs, và germani. Tại trường điện yếu, vận tốc biến đổi tuyến tính theo cường độ trường điện, độ dốc của đồ thị biểu diễn vận tốc trôi dạt theo cường độ trường điện là độ linh động. Đặc điểm của vận tốc trôi dạt của hạt tải điện tại cường độ trường điện cao về cơ bản hơi khác so với phần đồ thị tuyến tính được quan sát ở cường độ điện trường yếu. Chẳng hạn vận tốc trôi dạt của electron trong silic bão hòa tại giá trị cỡ 10^7 cm/s tại cường độ trường điện khoảng 30kV/cm. Nếu vận tốc trôi dạt của những hạt mang điện bão hòa thì mật độ dòng điện trôi dạt cũng bão hòa và không phụ thuộc vào cường độ trường điện tác dụng vào.

Đồ thị biểu diễn sự phụ thuộc của vận tốc trôi dạt vào cường độ điện trường của GaAs phức tạp hơn của silic và germani. Tại trường yếu, độ dốc của đường cong này không đổi và là độ linh động của electron , nó cỡ *8500 cm^2/V-s* đối với GaAs. Độ linh động của electron trong điện trường yếu của GaAs lớn hơn nhiều so

với Silic. Khi cường độ điện trường tăng, vận tốc trôi trong GaAs đạt đến một giá trị đỉnh và rồi giảm xuống. Độ linh động vi phân là độ dốc của đường cong tại một điểm và độ dốc âm của đường cong biểu thị một độ linh động vi phân âm. Độ linh động vi phân âm tạo ra một điện trở vi phân âm; tính chất này được sử dụng trong việc thiết kế máy hiện sóng.



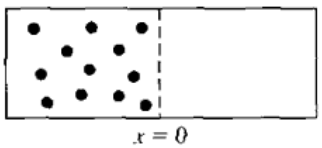
Hình 5.8| Cấu trúc vùng năng lượng của GaAs cho thấy những hố cao hơn và thấp hơn trong vùng dẫn

Độ linh động vi phân âm có thể hiểu được bằng cách xem xét đồ thị E theo k của GaAs, nó được biểu diễn lại trong hình 5.8. Khối lượng hiệu dụng của electron trong hố thấp hơn là $m_n^* = 0.067 m_0$. Khối lượng hiệu dụng nhỏ dẫn đến độ linh động lớn. Khi điện trường E tăng, năng lượng của electron tăng và electron có thể bị tán xạ vào những hố cao hơn, ở đó khối lượng hiệu dụng bằng 0.55 m_0. Khối

lượng hiệu dụng lớn hơn trong hố phía trên làm cho độ linh động nhỏ hơn. Cơ chế chuyển qua các hố này dẫn đến sự giảm vận tốc trôi dạt trung bình của electron với trường điện, hoặc đặc tính độ linh động vi phân âm.

5.2|SỰ KHUẾCH TÁN HẠT TẢI ĐIỆN

Cùng với sự trôi dạt có một cơ chế thứ hai có thể gây ra dòng điện trong bán dẫn. Chúng ta hãy xem xét một mẫu cổ điển là một bình chứa, như được vẽ trong hình 5.9, được chia thành 2 phần bởi một màng. Phía trái chứa những phân tử khí ở một nhiệt độ nào đó và phía phải ban đầu trống. Những phân tử khí chuyển động nhiệt ngẫu nhiên liên tục vì thế khi màn bị phá vỡ những phân tử khí di chuyển sang bên phải của bình chứa. Sự khuếch tán là một quá trình mà nhờ đó những hạt chảy từ những vùng có mật độ cao

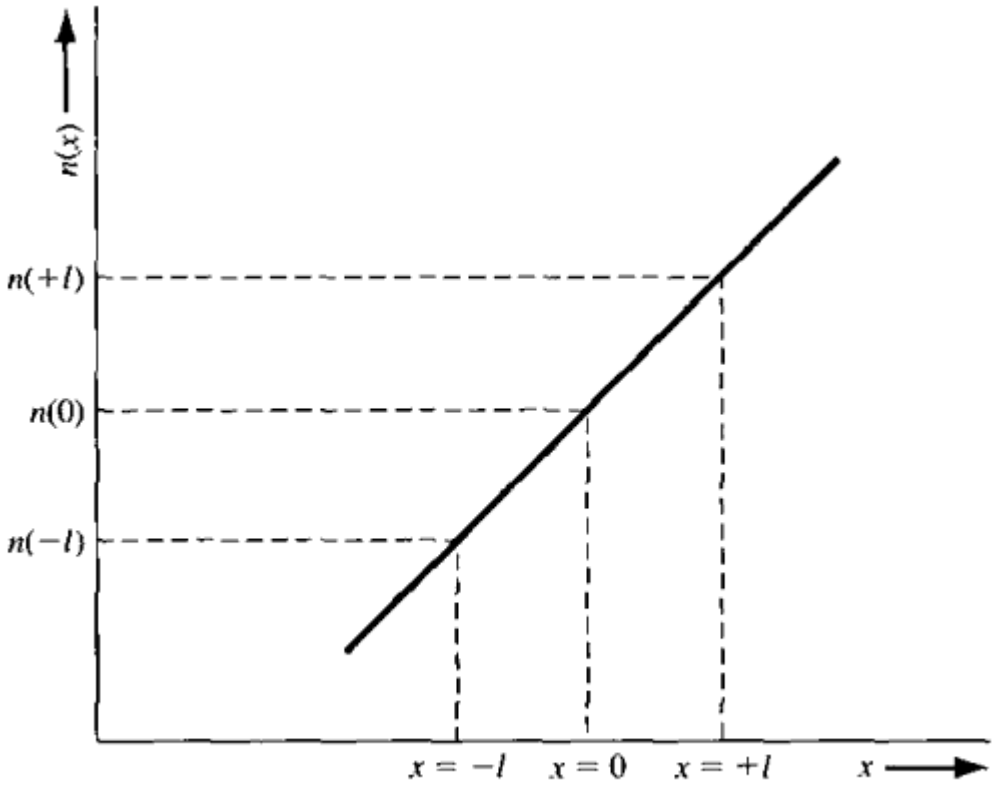


Hình 5.9| Bình chứa được ngăn cách bởi một màn với những phân tử khí ở một bên

sang những vùng có mật độ thấp. Nếu những phân tử khí là những hạt mang điện, sự di chuyển toàn phần của những hạt mang điện sẽ tạo ra dòng điện khuếch tán.

5.2.1 Mật độ dòng điện khuếch tán

Để bắt đầu hiểu quá trình khuếch tán trong bán dẫn, chúng ta sẽ xem xét một mô hình được đơn giản hóa. Giả sử rằng mật độ electron biến đổi theo một hướng như được chỉ ra trong hình 5.10. Nhiệt độ được giả sử là đồng đều sao cho vận tốc chuyển động nhiệt trung bình của electron không phụ thuộc vào x. Để tính dòng điện, chúng ta sẽ xác định dòng toàn phần của electron trên một đơn vị thời gian trên một đơn vị diện tích qua mặt phẳng $x=0$. Nếu ***khoảng cách l được chỉ ra trong hình là quãng đường tự do trung bình của electron***, nghĩa là khoảng cách trung bình mà electron di chuyển giữa 2 lần va chạm ($l=\upsilon_{th}\tau_{cn}$), thì tính trung bình, electron di chuyển sang phải từ $x= -l$ và di chuyển sang trái từ $x=+l$ sẽ đi qua mặt



Hình 5.10 Mật độ electron theo khoảng cách

phẳng *x=0*. Một nửa electron tại *x= –l* sẽ di chuyển sang phải bất cứ lúc nào và một nửa electron tại *x=+l* sẽ di chuyển sang trái bất cứ lúc nào, tốc độ di chuyển toàn phần của dòng electron theo hướng *+l* qua *x=0* là

$$F_n = \frac{1}{2}n(-l)\upsilon_{th} - \frac{1}{2}n(+l)\upsilon_{th} = \frac{1}{2}\upsilon_{th}[n(-l) - n(+l)] \tag{5.27}$$

Nếu chúng ta khai triển mật độ electron thành chuỗi Taylor quanh *x=0* và chỉ giữ lại 2 số hạng đầu thì chúng ta có thể viết phương trình (5.27) là

$$F_n = \frac{1}{2}\upsilon_{th}\left\{\left[n(0) - l\frac{dn}{dx}\right] - \left[n(0) + l\frac{dn}{dx}\right]\right\} \tag{5.28}$$

Tương đương

$$F_n = -\upsilon_{th} l\frac{dn}{dx} \tag{5.29}$$

Mỗi electron có điện tích *(–e)*, vì vậy dòng điện là

$$J = -eF_n = +e\upsilon_{th} l \frac{dn}{dx} \tag{5.30}$$

Dòng được mô tả bởi phương trình (5.30) là dòng khuếch tán electron và tỉ lệ với đạo hàm theo tọa độ, hay gradient mật độ của mật độ electron.

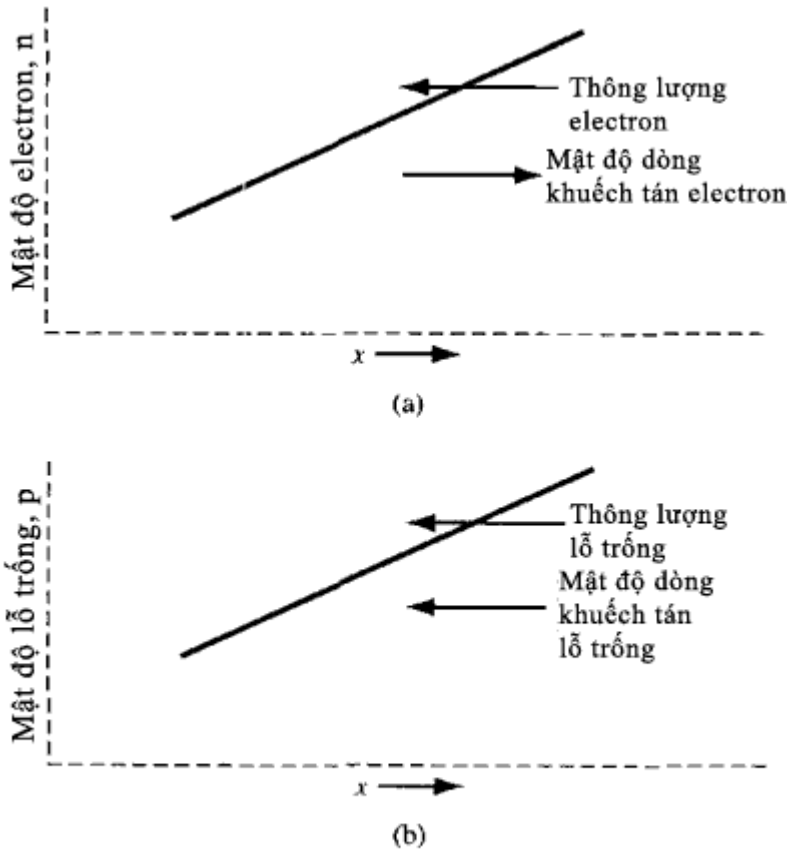
Sự khuếch tán của electron từ vùng có mật độ cao sang vùng mật độ thấp tạo ra một dòng electron chảy về hướng *x* âm của mẫu này. Bởi vì electron có điện tích âm nên hướng của dòng điện là hướng x dương. Hình 5.11a biểu diễn dòng chảy của electron và hướng của dòng điện trong không gian một chiều. Chúng ta có thể viết mật độ dòng khuếch tán electron cho trường hợp một chiều dưới dạng

$$J_{nx|khuech_\tan} = eD_n \frac{dn}{dx} \tag{5.31}$$

ở đây D_n được gọi là *hệ số khuếch tán electron*, đơn vị là cm^2/s, và là đại lượng dương. Nếu gradient mật độ của electron âm, dòng khuếch tán sẽ chảy theo hướng *x* âm.

Hình 5.11b biểu diễn ví dụ về mật độ lỗ trống như hàm số theo khoảng cách trong bán dẫn. Sự khuếch tán của lỗ trống từ vùng có mật độ cao đến vùng có mật độ thấp tạo ra một dòng chảy lỗ trống theo hướng âm. Bởi vì lỗ trống là hạt mang điện dương nên chiều của mật độ dòng khuếch tán theo quy ước cũng theo hướng *x* âm. Mật độ dòng khuếch tán của lỗ trống tỉ lệ với gradient mật độ của lỗ trống và với điện tích, vì vậy chúng ta có thể viết

$$J_{px|khuech_\tan} = -eD_p \frac{dn}{dx} \tag{5.32}$$



Hình 5.11| [a] Khuếch tán electron do gradient mật độ. [b] Khuếch tán lỗ trống do gradient mật độ

đối với trường hợp một chiều. D_p được gọi là hệ số khuếch tán lỗ trống, đơn vị là cm^2/s, và là đại lượng dương. Nếu gradient mật độ lỗ trống âm, chiều của dòng khuếch tán sẽ là chiều x dương.

VÍ DỤ 5.4

Tính mật độ dòng khuếch tán khi đã biết gradient mật độ.

Giả sử rằng trong bán dẫn GaAs loại n tại $T=300K$, mật độ electron biến đổi tuyến tính từ 1×10^{18} đến 7×10^{17} cm^{-3} trên khoảng cách 0.10 cm. Tính mật độ dòng khuếch tán nếu hệ số khuếch tán electron là $D_n=225$ cm^2/s.

- Giải
  Mật độ dòng khuếch tán là

$$J_{n|khuech\,tan} = eD_n \frac{dn}{dx} \approx eD_n \frac{\Delta n}{\Delta x}$$
$$= (1.6\times10^{-19})(225)\left(\frac{1\times10^{18} - 7\times10^{17}}{0.10}\right) = 108 A/cm^2$$

- Kết luận
  Với một Gradient mật độ nhỏ cũng có thể tạo ra dòng khuếch tán đáng kể trong vật liệu bán dẫn.

KIỂM TRA KIẾN THỨC

E5.8 Mật độ electron trong silic là $n(x)=10^{15}e^{-(x/L)}$ cm^{-3} $(x\geq0)$ ở đây $L=10^{-14}$cm. Hệ số khuếch tán electron là $D_n=25$ cm^2/s. Xác định mật độ dòng khuếch tán electron tại (a)x=0, (b)$x=10^{-14}$cm, và (c)$x\rightarrow\infty$.

E5.9 Mật độ lỗ trống trong silic biến đổi tuyến tính từ x=0 đến x=0.01 cm. Hệ số khuếch tán của lỗ trống là $D_p=10$ cm^2/s, mật độ dòng khuếch tán của lỗ trống là 20 A/cm^2, và mật độ lỗ trống tại x=0 là $p=4\times10^{17}cm^{-3}$. Hỏi mật độ lỗ trống bàng bao nhiêu tại x=0.01 cm ?

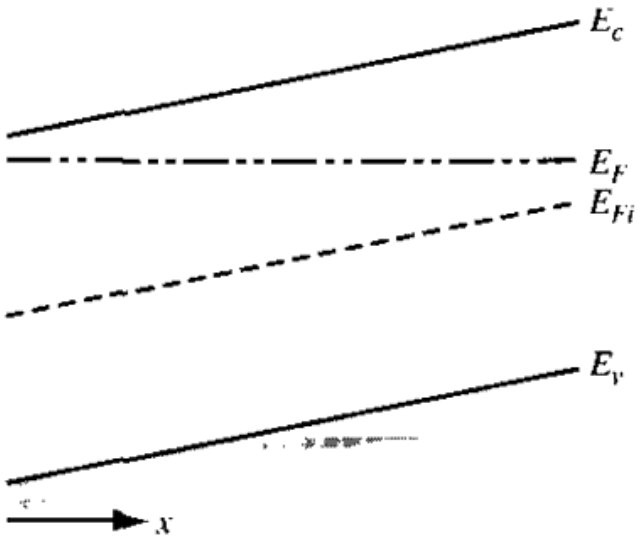
E5.10 Mật độ lỗ trống trong silic là $p(x)=2\times10^{15}e^{-(x/L)}cm^{-3}$ $(x\geq0)$. Hệ số khuếch tán của lỗ trống là $D_p=10$ cm^2/s. Giá trị của mật độ dòng khuếch tán tại x=0 là $J_{khuech_tan}=+6.4$ A/cm^2. Giá trị của L bằng bao nhiêu ?

5.3| SỰ PHÂN BỐ TẠP CHẤT THÀNH TỪNG LỚP

Cho đến lúc này, trong đa số các trường hợp, chúng ta đã giả sử rằng bán dẫn được pha tạp đều. Tuy nhiên, trong nhiều thiết bị bán dẫn, có thể có những vùng được pha tạp không đồng đều. Chúng ta sẽ nghiên cứu xem bán dẫn được pha tạp không đều đạt đến trạng thái cân bằng nhiệt như thế nào và từ sự phân tích này, chúng ta sẽ rút ra hệ thức Einstein. Hệ thức này có liên quan đến độ linh động và hệ số khuếch tán.

5.3.1 Điện trường cảm ứng

Xét bán dẫn được pha tạp không đều với những nguyên tử tạp chất đono. Khi bán dẫn ở trạng thái cân bằng nhiệt, mức năng lượng Fermi không đổi trong toàn tinh thể vì vậy giản đồ năng lượng trông giống như hình 5.12. Mật độ pha tạp giảm khi x tăng trong trường hợp này. Sẽ có sự khuếch tán hạt tải điện đa số –electron từ vùng mật độ cao sang vùng mật độ thấp theo hướng x dương. Dòng electron để lại phía sau những ion đono mang điện dương. Sự tách thành những điện tích âm và dương này làm cảm ứng một trường điện theo hướng ngược với quá trình khuếch tán. Khi đạt đến trạng thái cân bằng, mật độ hạt tải điện linh động không bằng với mật độ tạp chất cố định và điện trường cảm ứng ngăn cản bất cứ sự phân chia điện tích nào khác nữa. Trong hầu hết các trường hợp, điện tích không gian được tạo ra do quá trình khuếch tán này là một phần nhỏ của mật độ pha tạp vì thế mật độ hạt tải điện linh động khác nhiều so với mật độ các nguyên tử tạp chất.



Hình 5.12| Giản đồ vùng năng lượng của bán dẫn ở trạng thái cân bằng nhiệt với mật độ tạp chất donor không đồng đều

Điện thế Φ của electron liên hệ với thế năng của electron qua điện tích *(–e)*, vì vậy chúng ta có thể viết

$$\Phi=(1/e)(E_F - E_{Fi}) \tag{5.35}$$

Điện trường trong trường hợp một chiều được định nghĩa là

$$E_x = -\frac{d\Phi}{dx} = \frac{1}{e}\frac{dE_{Fi}}{dx} \tag{5.36}$$

Bảng 5.2| Giá trị của hệ số linh động và hệ số khuếch tán điển hình tại$T = 300$ K ($\mu =$ cm^2/V-s and $D =$ cm^2/s)

	μ_m	D_n	μ_p	D_p
Silicon [Si]	1350	35	480	12.4
Gallium arsenide [GaAs]	8500	220	400	10.4
Germanium [Ge]	3900	101	1900	49.2

Nếu mức Fermi riêng thay đổi như một hàm số theo khoảng cách trong bán dẫn ở trạng thái cân bằng nhiệt, một điện trường sẽ tồn tại trong bán dẫn.

Nếu chúng ta giả sử một điều kiện giả trung hòa tại đó mật độ electron gần bằng mật độ pha tạp đono thì chúng ta vẫn có thể viết

$$n_0 = n_i \exp\left[\frac{E_F - E_{Fi}}{kT}\right] \approx N_d(x) \tag{5.37}$$

Giải để tìm $E_F - E_{Fi}$

$$E_F - E_{Fi} = kT \ln\left(\frac{N_d(x)}{n_i}\right) \tag{5.38}$$

Ở trạng thái cân bằng nhiệt, mức Fermi không đổi vì vậy khi lấy đạo hàm theo x, chúng ta thu được

$$-\frac{dE_{Fi}}{dx} = \frac{kT}{N_d(x)}\frac{dN_d(x)}{dx} \tag{5.39}$$

Do đó, kết hợp phương trình (5.39) và (5.36) điện trường có thể được viết là

$$E_x = -\left(\frac{kT}{e}\right)\frac{1}{N_d(x)}\frac{dN_d(x)}{dx} \tag{5.40}$$

Bởi vì chúng ta có điện trường nên sẽ có sự chênh lệch điện thế trong vật liệu bán dẫn do sự pha tạp không đồng đều.

VÍ DỤ 5.5

Xác định điện trường cảm ứng trong bán dẫn ở trạng thái cân bằng nhiệt khi đã biết sự biến đổi tuyến tính trong mật độ pha tạp.

Giả sử mật độ đono trong bán dẫn loại *n* tại T=300K là

$N_d(x)=10^{16}-10^{19}x$ (cm^{-3})

ở đây đơn vị của x là cm và nằm trong khoảng 0 đến 1 μm.

- Giải
  Lấy đạo hàm mật độ đono, chúng ta có
  $$\frac{dN_d(x)}{dx}=10^{-19}cm^{-4}$$
  Trường điện được cho bởi phương trình (5.40), vì vậy chúng ta có
  $$E_x=\frac{-(0.0259)(-10^{19})}{(10^{16}-10^{19}x)}$$
  Chẳng hạn, tại x=0, chúng ta tìm được
  $E_x=25.9\ V/cm$
- Kết luận
  Chúng ta nhớ trong phần dòng trôi giạt rằng một trường điện khá nhỏ có thể tạo ra mật độ dòng trôi giạt đáng kể, vì thế một trường điện cảm ứng do sự pha tạp không đồng đềuco1 thể ảnh hưởng đáng kể đến tính chất của thiết bị bán dẫn.

5.3.2 Hệ thức Einstein

Nếu chúng ta xét bán dẫn được pha tạp không đều được biểu diễn bởi giản đồ năng lượng như trong hình 5.12 và giả sử chưa có kết nối điện và bán dẫn ở trạng thái cân bằng nhiệt thì dòng electron và lỗ trống phải bằng 0. Chúng ta có thể viết

$$J_n=0=en\mu_nE_x+eD_n\frac{dn}{dx} \tag{5.41}$$

Nếu chúng ta giả sử chuẩn trung hòa sao cho n ≈ $N_d(x)$ thì chúng ta có thể viết lại phương trình (5.41) là

$$J_n=0=e\mu_nN_d(x)E_x+eD_n\frac{dN_d(x)}{dx} \tag{5.42}$$

Thế biểu thức của cường độ trường điện từ phương trình (5.40) vào phương trình (5.42), chúng ta th

$$0 = -e\mu_n N_d \left(\frac{kT}{e}\right)\frac{1}{N_d(x)}\frac{dN_d(x)}{dx} + eD_n\frac{dN_d(x)}{dx} \tag{5.43}$$

Phương trình (5.43) có nghĩa với điều kiện là

$$\frac{D_n}{\mu_n} = \frac{kT}{e} \tag{5.44a}$$

Dòng lỗ trống cũng phải bằng 0 trong bán dẫn. Từ điều kiện này chúng ta có thể chứng tỏ rằng

$$\frac{D_p}{\mu_p} = \frac{kT}{e} \tag{5.44b}$$

Kết hợp phương trình (5.44a) và (5.44b) cho ta

$$\frac{D_n}{\mu_n} = \frac{D_p}{\mu_p} = \frac{kT}{e} \tag{5.45}$$

Hệ số khuếch tán và độ linh động là một thông số không độc lập nhau. Hệ thức giữa độ linh động và hệ số khuếch tán theo biểu thức (5.45) được gọi là *hệ thức Einstein*.

Bảng 5.2| Giá trị của hệ số linh động và hệ số khuếch tán điển hình tại$T = 300$ K (μ = cm^2/V-s and D = cm^2/s)

	μ_m	D_n	μ_p	D_p
Silicon [Si]	1350	35	480	12.4
Gallium arsenide [GaAs]	8500	220	400	10.4
Germanium [Ge]	3900	101	1900	49.2

VÍ DỤ 5.6

Xác định hệ số khuếch tán khi đã biết độ linh động của hạt tải điện. Giả sử rằng độ linh động của hạt tải điện là 1000 cm^2/V-s tại T=300K.

- Giải
  Dùng hệ thức Einstein, chúng ta có

$$D = \left(\frac{kT}{e}\right)\mu = (0.0259)(1000) = 25.9 cm^2/s$$

- Kết luận

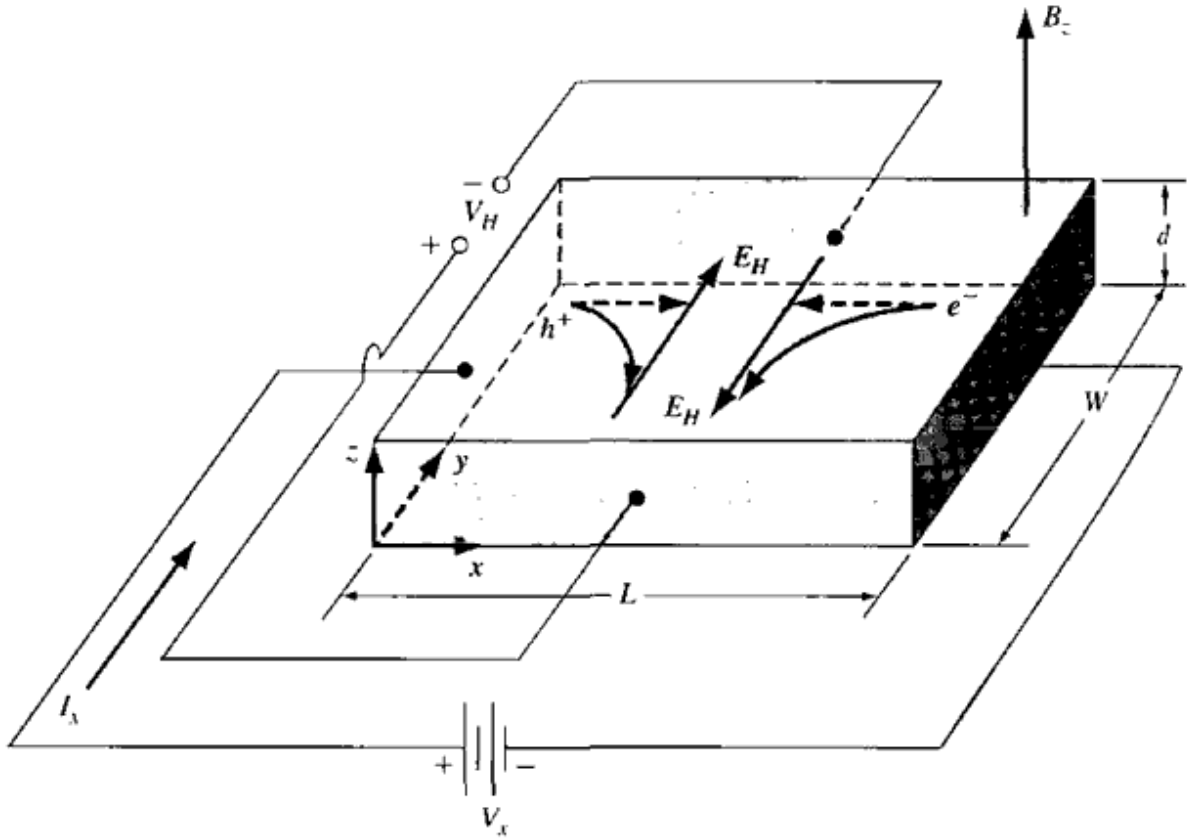
  Mặc dù ví dụ này hơi đơn giản nhưng cần nhớ rằng bậc độ lớn tương đối của độ linh động và hệ số khuếch tán. Hệ số khuếch tán nhỏ hơn độ linh động gần 40 lần ở nhiệt độ phòng.

Bảng 5.2 cho biết giá trị hệ số khuếch tán tại T=300K ứng với độ linh động được liệt kê trong bảng 5.1 cho silic, GaAs, và Ge.

Hệ thức giữa độ linh động và hệ số khuếch tán (5.45) chứa nhiệt độ. Cần nhớ rằng hiệu ứng nhiệt đa số là kết quả của tán xạ mạng và tán xạ với những nguyên tử tạp chất bị ion hóa như được thảo luận trong phần 5.1.2. Khi độ linh động là hàm phụ thuộc mạnh vào nhiệt độ bởi quá trình tán xạ, hệ số khuếch tán cũng là hàm phụ thuộc mạnh vào nhiệt độ. Sự phụ thuộc nhiệt độ được cho trong phương trình (5.45) là một phần nhỏ của tính chất nhiệt thực sự.

*5.4|HIỆU ỨNG HALL

Hiệu ứng Hall là hệ quả của lực tác dụng lên điện tích chuyển động trong điện trường và từ trường. Hiệu ứng Hall được dùng để phân biệt giữa bán dẫn loại *p* và bán dẫn loại *n* và để đo mật độ hạt tải điện đa số và độ linh động. Thiết bị hiệu ứng Hall được khảo sát trong phần này được dùng trong thực nghiệm để đo các thông số của bán dẫn. Tuy nhiên, nó cũng được ứng dụng rộng rãi trong kĩ thuật như trong đầu dò từ và những mạch điện ứng dụng khác.



Hình 5.13| Sơ đồ đo hiệu ứng Hall

Lực tác dụng lên hạt có điện tích q và di chuyển trong từ trường là

$$\boldsymbol{F}=q\boldsymbol{\upsilon}\times\boldsymbol{B} \tag{5.46}$$

ở đây tích có hướng được thực hiện giữa vận tốc và cường độ từ trường vì vậy vectơ lực vuông góc với cả vecto vận tốc và vecto cường độ từ trường.

Hình 5.13 minh họa hiệu ứng Hall. Một thỏi bán dẫn có dòng điện I_x chạy trong nó được đặc trong từ trường vuông góc với dòng điện. Trong trường hợp này, từ trường hướng theo trục z. Electron và lỗ trống chảy trong bán dẫn sẽ chịu một lực như được chỉ ra trong hình. Lực tác dụng trên cả electron và lỗ trống đều theo hướng ($-y$). Trong bán dẫn loại p ($p_0 > n_0$), sẽ có một sự tích tụ điện tích mang điện dương trên bề mặt $y=0$ của bán dẫn, và trong bán dẫn loại n ($n_0 > p_0$) sẽ có sự tích tụ những hạt mang điện âm trên bề mặt $y=0$. Điện tích toàn phần này cảm ứng một trường điện theo hướng y như trong hình vẽ. Ở trạng thái xác lập, lực từ sẽ cân bằng với lực điện như trong hình vẽ. Sự cân bằng này có thể được viết là

$$\boldsymbol{F}=q[\boldsymbol{E}+\boldsymbol{\upsilon}\times\boldsymbol{B}]=0 \qquad (5.47a)$$

Tương đương

$$qE_y=q\upsilon_x B_z \qquad (5.47b)$$

Trường điện cảm ứng theo hướng y được gọi là trường Hall. Trường Hall tạo ra một điện áp qua bán dẫn được gọi là điện áp Hall. Chúng ta có thể viết

$$V_H=+E_H W \qquad (5.48)$$

W là kích thước được chỉ trên hình vẽ.

Do đó, độ linh động của lỗ trống là:

$$\mu_p=\frac{I_x L}{epV_x Wd} \qquad [5.49a]$$

Tương tự, đối với bán dẫn loại n, khi cường độ trường yếu thì độ linh động của electron là:

$$\mu_n=\frac{I_x L}{enV_x Wd} \qquad [5.49b]$$

Các chương tiếp theo sẽ được bổ sung sau 7 tuần nữa. Hôm nay là *21/4/2009*. Góp ý về nội dung của sách xin gửi đến một trong 2 mail sau:

Thanhlam1910_2006@yahoo.com

Hoặc

Frbwrthes@gmail.com

www.mientayvn.com