PHÙNG HỒ

GIÁO TRÌNH

VẬT LÝ ĐIỆN TỬ

NHÀ XUẤT BẢN KHOA HỌC VÀ KỸ THUẬT

TRƯỜNG ĐẠI HỌC BÁCH KHOA HÀ NỘI

GS PHÙNG HỒ

GIÁO TRÌNH

VẬT LÝ ĐIỆN TỬ

(In lần thứ 2)

NHÀ XUẤT BẢN KHOA HỌC VÀ KỸ THUẬT
HÀ NỘI 2007

Mục lục

Lời nói đầu

Từ lâu vật lý đã là cơ sở khoa học của nhiều ngành kỹ thuật, đặc biệt là ngành kỹ thuật điện tử, viễn thông. Càng ngày càng nhiều những thành tựu khoa học vật lý được nhanh chóng ứng dụng vào kỹ thuật điện tử, viễn thông.

Kỹ sư điện tử, hơn ai hết, cần có những hiểu biết sâu sắc về vật lý hiện đại. Vì vậy ngoài giáo trình "Vật lý đại cương" chung cho tất cả các ngành kỹ thuật, trong chương trình đào tạo kỹ sư điện tử được bổ sung thêm giáo trình "Vật lý điện tử".

Giáo trình "Vật lý điện tử" nhằm mục đích cung cấp thêm cho sinh viên những hiểu biết về vật lý hiện đại liên quan trực tiếp đến ngành kỹ thuật điện tử, viễn thông. Năm 1981, Phó giáo sư Nguyễn Minh Hiển, với mục đích trên, đã biên soạn tập "Các bài giảng về vật lý điện tử".

Gần đây do yêu cầu hiện đại hóa nội dung chương trình giảng dạy, khoa Điện tử - Viễn thông trường Đại học Bách khoa Hà nội đã xây dựng một đề cương mới cho môn học "Vật lý điện tử". "Giáo trình Vật lý điện tử" này được biên soạn dựa theo đề cương đó. Tuy nhiên, để cho giáo trình được mạch lạc, sự sắp xếp các chương mục trong giáo trình có ít nhiều thay đổi so với đề cương môn học.

Giáo trình được chia làm năm chương, gồm ba đơn vị học trình với thời lượng 45 tiết. Chương thứ nhất trình bày "Chuyển động của các hạt tích điện trong chân không dưới tác dụng của điện trường và từ trường". Chương thứ hai giới thiệu "Một số vấn đề vật lý lượng tử", cung cấp những hiểu biết cơ bản để tiếp tục nghiên cứu những chương sau. Chương thứ ba trình bày "Phổ năng lượng của các hệ hạt lượng tử", từ nguyên tử hydro đơn giản, nguyên tử có nhiều điện tử, phân tử và cuối cùng đến tinh thể chất rắn. Chương thứ tư đề cập "Một số vấn đề Vật lý bán dẫn", giới thiệu những khái niệm cần thiết nhất để nghiên cứu vật lý linh kiện điện tử, linh kiện quang điện tử. Chương thứ năm giới thiệu "những cơ sở vật lý của quá trình truyền và xử lý tín hiệu quang", đề cập những cơ sở vật lý của các linh kiện quang điện tử như linh

kiện dẫn sóng quang, sợi quang, điều biến tín hiệu quang, nguồn phát quang, thu tín hiệu quang, tách sóng quang. Cuối mỗi chương có bài tập kèm theo đáp số.

Giáo trình Vật lý điện tử này đã được lưu hành nội bộ từ năm 1976 và được tác giả cùng một số đồng nghiệp sử dụng để giảng dạy cho sinh viên hệ chính quy và hệ tại chức ngành điện tử-viễn thông trường Đại học Bách khoa Hà nội cũng như cho sinh viên ngành điện tử-viễn thông ở một vài trường đại học khác trong nước. Do yêu cầu cấp bách về tài liệu giảng dạy và học tập, nghiên cứu chúng tôi xuất bản rộng rãi "Giáo trình Vật lý điện tử" nhằm phục vụ kịp thời đông đảo bạn đọc. Chúng tôi rất mong được sự góp ý của các bạn đọc về những sai sót chắc chắn khó tránh khỏi trong sách.

Tác giả.

Chương 1

CHUYỂN ĐỘNG CỦA CÁC HẠT TÍCH ĐIỆN TRONG CHÂN KHÔNG DƯỚI TÁC DỤNG CỦA ĐIỆN TRƯỜNG VÀ TỪ TRƯỜNG

Ngày nay rất nhiều những dụng cụ điện tử chân không (thường gọi là đèn điện tử) đã lỗi thời và không được sử dụng. Tuy nhiên vẫn còn nhiều dụng cụ điện tử quan trọng ứng dụng sự chuyển động của các hạt tích điện dưới tác dụng của điện và từ trường như: ống tia điện tử của máy dao động ký điện tử, ống hình của máy thu hình, kính hiển vi điện tử, máy gia tốc, khối phổ kế...Vì vậy những kiến thức về sự chuyển động của điện tử trong chân không dưới tác dụng của điện và từ trường vẫn rất cần thiết cho những chuyên gia của ngành điện tử.

1.1 Phương trình chuyển động của hạt tích điện trong điện trường và từ trường không đổi

Giả sử trong không gian tồn tại một điện trường tĩnh với vec-tơ cường độ điện trường $\vec{\mathcal{E}}$ và một từ trường tĩnh với vec-tơ cảm ứng từ $\vec{B}$. Một hạt có khối lượng m, có điện tích q sẽ chịu một lực tác dụng là

$$\vec{F} = q\vec{\mathcal{E}} + q[\vec{v} \times \vec{B}] \tag{1.1}$$

Trong hệ SI, $\vec{F}$ đo bằng N, q đo bằng C, $\vec{\mathcal{E}}$ đo bằng V/m, $\vec{v}$ đo bằng m/s và $\vec{B}$ đo bằng T. Phương trình chuyển động của hạt sẽ là:

$$\frac{d(m\vec{v})}{dt} = q\vec{\mathcal{E}} + q[\vec{v} \times \vec{B}] \tag{1.2}$$

Đối với các hạt có $v \ll c$ (c - vận tốc ánh sáng) có thể coi m là không đổi và phương trình (1.2) có dạng:

$$m\frac{d\vec{v}}{dt} = q\vec{\mathcal{E}} + q[\vec{v} \times \vec{B}] \tag{1.3}$$

Nhân vô hướng hai vế của (1.3) với $\vec{v}$ và biến đổi ta có:

$$\frac{m}{2} \cdot \frac{d(v^2)}{dt} = q\vec{v} \cdot \vec{\mathcal{E}} \tag{1.4}$$

Từ đây ta có nhận xét:

a/ Sự biến đổi động năng của hạt chỉ do tác dụng của điện trường, từ trường tĩnh không thể làm thay đổi động năng của hạt, từ trường chỉ có thể làm thay đổi hướng chuyển động của hạt.

b/ Giả sử trong khoảng thời gian từ t_1 đến t_2 hạt chuyển động từ điểm A_1 đến điểm A_2. Lấy tích phân hai vế phương trình (1.4) dọc theo quỹ đạo A_1A_2 ta có:

$$\frac{mv_2^2}{2} - \frac{mv_1^2}{2} = q\int_{A_1}^{A_2} \vec{\mathcal{E}}d\vec{s} = -q\int_{A_1}^{A_2} \text{grad}U d\vec{s} = q(U_1 - U_2) \tag{1.5}$$

$\vec{v_1}, \vec{v_2}$ - vận tốc của hạt tại A_1 và A_2, tương ứng,
U_1, U_2 - điện thế tại các điểm A_1 và A_2, tương ứng.
Phương trình (1.5) có thể viết lại:

$$\frac{mv_1^2}{2} + qU_1 = \frac{mv_2^2}{2} + qU_2 \tag{1.6}$$

Vậy năng lượng toàn phần của hạt tại A_1 và A_2 bằng nhau.

c/ Nếu cho vận tốc ban đầu tại A_1 bằng không, từ (1.6) ta có

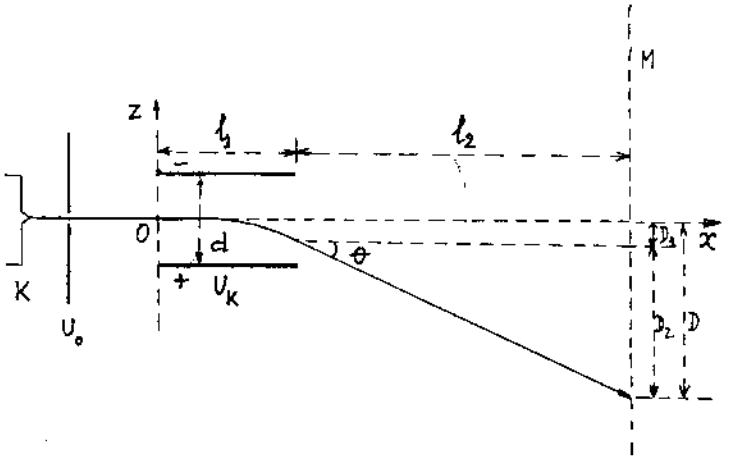
$$\frac{mv^2}{2} = q(U_1 - U_2) = qU \tag{1.7}$$

$U = U_1 - U_2$ là hiệu điện thế giữa hai điểm A_1và A_2. Ta đi đến kết luận khi điện tích chuyển động trong trường tĩnh điện sự thay đổi động năng của hạt được xác định bởi hiệu điện thế U.

Dựa vào đây người ta đưa ra một đơn vị năng lượng gọi là electron-volt (eV), là năng lượng mà một điện tích $q = e = 1,6 \cdot 10^{-19}$C thu được khi đi qua một hiệu điện thế tăng tốc bằng 1V; $1\text{eV} = 1,6 \cdot 10^{-19}\text{J}; 1\text{J} = 6,24 \cdot 10^{18}\text{eV}$.

Từ (1.7) khi biết điện tích, khối lượng của hạt ta có thể tính được vận tốc v của hạt.

$$v = \sqrt{\frac{2q}{m}U}, \quad \text{đối với điện tử} \quad v(\frac{m}{s}) = 6 \cdot 10^5\sqrt{U(V)} \tag{1.8}$$



Hình 1.1: *Sơ đồ mô tả chuyển động của điện tử trong ống tia điện tử dùng tụ điện lái tia.*

Cần lưu ý rằng động năng của điện tích thu được chỉ phụ thuộc vào điện thế điểm đầu và điểm cuối của chuyển động, chính điều này chứng tỏ trường tĩnh điện là một trường thế. Từ phương trình (1.3) nếu biết sự phụ thuộc của các trường vào tọa độ, $\vec{\mathcal{E}}(\vec{r}), \vec{B}(\vec{r})$, biết các điều kiện ban đầu của điện tích ta có thể giải bài toán để tìm được quỹ đạo cũng như các thông số khác của chuyển động của điện tích. Giải bài toán tổng quát sẽ phức tạp nên ta sẽ xét một số trường hợp riêng sau đây.

1.2 Chuyển động của hạt tích điện trong điện trường đều

Xét chuyển động của hạt có điện tích q, có khối lượng m, trong tụ điện phẳng với điện trường đồng đều $\vec{\mathcal{E}}$, ta có:

$$m\frac{d\vec{v}}{dt} = q\vec{\mathcal{E}} \tag{1.9}$$

Với điều kiện biên là: tại thời điểm $t = t_0$, hạt có tọa độ là $\vec{r}_0$ và vận tốc là $\vec{v}_0$, lấy tích phân (1.9) ta có:

$$\vec{v} = \vec{v}_0 + \int_{t_0}^{t} \frac{q}{m}\vec{\mathcal{E}}dt = \frac{q}{m}\vec{\mathcal{E}}(t - t_0) + \vec{v}_0 = \frac{d\vec{r}}{dt} \tag{1.10}$$

Tích phân (1.10) ta có

$$\begin{aligned}\vec{r} &= \vec{r}_0 + \int_{t_0}^{t} \vec{v}dt = \frac{q}{2m}\vec{\mathcal{E}}(t-t_0)^2 + \vec{v}_0(t-t_0) + \vec{r}_0 \\ \vec{r} &= \frac{q}{2m}\vec{\mathcal{E}}(t-t_0)^2 + \vec{v}_0(t-t_0) + \vec{r}_0 \end{aligned} \tag{1.11}$$

Chúng ta xét trường hợp đơn giản và thông dụng nhất, trường hợp chuyển động của chùm điện tử trong tụ điện phẳng là hai bản lái tia của ống tia điện tử trong máy dao động ký điện tử, như vẽ ở hình (1.1).

Ở đây chúng ta chọn $\vec{\mathcal{E}} = (0, 0, \mathcal{E}_z)$, chiều dài của tụ điện phẳng là l_1, khoảng cách giữa hai bản lái tia là d, vận tốc ban đầu của điện tử song song với trục x, $\vec{v}_0 = v_{x_0}$, và được xác định bởi điện thế của cực gia tốc điện tử U_0, nghĩa là $v_0 = v_{x_0} = \sqrt{\frac{2e}{m}U_0}$. Hiệu điện thế giữa hai bản lái tia là U_K, điện trường trong tụ điện phẳng là $\vec{\mathcal{E}} = \frac{U_K}{d}$. Chọn gốc tọa độ $\vec{r}_0 = 0$ tại điểm điện tử bắt đầu đi vào vùng tác động của điện trường của tụ điện vào thời điểm $t_0 = 0$. Từ những giả thiết trên và phương trình (1.10) ta có:

$$\vec{v} = -\frac{e}{m}\vec{\mathcal{E}}t + \vec{v}_0 \quad \text{và} \quad \vec{r} = \frac{-e}{2m}\vec{\mathcal{E}}t^2 + \vec{v}_0 t \tag{1.12}$$

Viết (1.12) dưới dạng các thành phần:

$$\begin{cases} v_x = v_{x_0} = \sqrt{\frac{2e}{m}U_0} \\ v_y = 0 \\ v_z = -\frac{e}{m}\mathcal{E}_z t = -\frac{e}{m}\frac{U_K}{d}t \end{cases} \quad \begin{cases} x = v_{x_0}t = \sqrt{\frac{2e}{m}U_0}\cdot t \\ y = 0 \\ z = -\frac{e}{2m}\mathcal{E}t^2 = -\frac{e}{2m}\frac{U_K}{d}t^2 \end{cases} \tag{1.13}$$

Chúng ta thấy quĩ đạo của điện tử nằm trong mặt phẳng (xoz) và được biểu diễn bởi công thức

$$\begin{aligned} z &= -\frac{e}{2m}\frac{U_K}{d}\frac{x^2}{\frac{2e}{m}U_0} = \frac{-U_K}{4dU_0}x^2 \\ z &= \frac{-U_K}{4dU_0}x^2; \quad y = 0 \end{aligned} \tag{1.14}$$

Từ đây ta có thể kết luận:

- Quỹ đạo của điện tử là một đường parabol.

- Với U_K và U_0 cho trước quỹ đạo không phụ thuộc vào các đặc trưng của hạt (khối lượng, điện tích), điều đó có nghĩa là trường tĩnh điện không có khả năng phân tách các hạt theo các đặc trưng của chúng.

- Nếu thay đổi U_K và U_0 cùng một số lần như nhau quỹ đạo của hạt sẽ không đổi.

Khi ra khỏi vùng tác dụng của điện trường trong tụ điện, điện tử sẽ chuyển động thẳng đều và đập lên màn huỳnh quang M. Chúng ta có thể tính được độ lệch của chùm điện tử D so với tâm của màn, như vẽ ở hình (1.1) ta có:

$$D = D_1 + D_2; \quad D_1 = z_1 = \frac{-e}{2m}\frac{U_K}{d}t_1^2;$$

$$t_1 = \frac{l_1}{v_{x_0}} = \frac{l_1}{\sqrt{\frac{2e}{m}U_0}} \quad \text{do đó } D_1 = -\frac{e}{2m}\frac{U_K}{d}\frac{l_1^2}{\frac{2eU_0}{m}} = \frac{-U_K}{U_0}\cdot\frac{l_1^2}{4d}$$

$$D_1 = \frac{-U_K}{U_0}\cdot\frac{l_1^2}{4d}$$

$$D_2 = l_2 \text{tg}\theta = l_2\frac{v_z}{v_x} = l_2\frac{-\frac{e}{m}\frac{U_K}{d}t_1}{\sqrt{\frac{2e}{m}U_0}} = -l_2\frac{U_K}{U_0}\frac{l_1}{2d}$$

$$D = -\frac{U_K}{U_0}\cdot\frac{l_1}{2d}(\frac{l_1}{2} + l_2) \tag{1.15}$$

Từ (1.15) ta thấy:

- Độ lệch của chùm điện tử càng lớn khi điện áp tăng tốc càng nhỏ, khoảng cách từ vùng có điện trường đến màn hình càng lớn. Dựa trên nguyên tắc đó người ta thiết kế các ống tia điện tử.

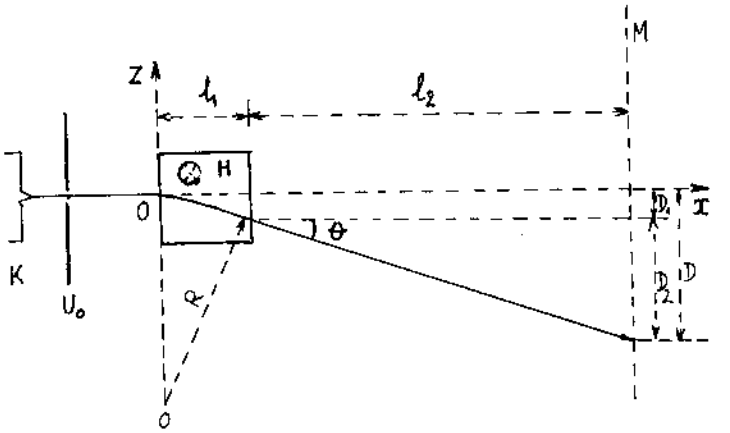
- Độ lệch của chùm điện tử tỷ lệ thuận với U_K, hiệu điện thế giữa hai bản lái tia. Trong ống tia điện tử, để đặc trưng cho sự phụ thuộc này người ta đưa ra một đại lượng gọi là độ nhạy S của ống. Về độ lớn, độ nhạy S bằng độ lệch của chùm điện tử gây nên bởi sự thay đổi điện áp làm lệch (hiệu thế giữa hai bản lái tia) có độ lớn $1V$.

$$S = \frac{D}{U_K} = \frac{l_1}{2dU_0}(\frac{l_1}{2} + l_2) \tag{1.16}$$

Thông thường độ nhạy trung bình của ống tia điện tử cỡ $S = 0,25\text{mm/V}$.

- Trên đường đi của chùm tia điện tử chúng ta có thể đặt hai cặp bản lái tia (hai tụ) vuông góc với nhau. Tụ có bản vuông góc với trục z gây nên độ lệch theo trục z (theo phương thẳng đứng). Tụ có bản vuông góc với trục y gây nên độ lệch theo trục y (theo phương nằm ngang).

- Nếu điện áp trên hai bản lái tia là điện áp xoay chiều thì các điện tử sẽ dao động liên tục giữa hai phiến và do đó điểm sáng trên màn hình cũng chuyển động liên tục. Nếu điện áp trên hai bản là "điện áp răng cưa" thì điểm



Hình 1.2: *Sơ đồ ống tia điện tử dùng cuộn dây từ trường lái tia.*

sáng sẽ chuyển động đều trên màn hình và nó có thể đóng vai trò như một "trục thời gian" trên màn hình. Bằng cách đặt trên hai tụ lái tia những điện áp răng cưa thích hợp có thể thực hiện việc quét toàn bộ màn hình theo từng dòng một.

- Tốc độ của tia điện tử rất lớn gần như tức thời với sự thay đổi điện áp, nên ống tia điện tử là một dụng cụ gần như không có quán tính. Tuy nhiên nếu tần số của điện áp quá cao ($f > 10^9$Hz) thì nhận xét trên không còn đúng nữa.

1.3 Chuyển động của hạt tích điện trong từ trường đều

Xét chuyển động của một hạt có điện tích q, khối lượng m trong không gian có từ trường đều với vec-tơ cảm ứng từ $\vec{B}$ ta có

$$m\frac{d\vec{v}}{dt} = q[\vec{v} \times \vec{B}] \tag{1.17}$$

Từ đây chúng ta có nhận xét:

- Gia tốc của hạt $\vec{a} = \ddot{\vec{r}} = \frac{d\vec{v}}{dt}$ luôn luôn vuông góc với vec tơ vận tốc $\vec{v}$. Vì vậy như trên ta đã nhận xét, tác dụng của từ trường không làm thay đổi động năng hay độ lớn của vận tốc hạt.

- Ta có thể viết (1.17) dưới dạng các thành phần

$$\left.\begin{aligned} \ddot{x} &= \frac{dv_x}{dt} = \frac{q}{m}(\dot{y}B_z - \dot{z}B_y) \\ \ddot{y} &= \frac{dv_y}{dt} = \frac{q}{m}(\dot{z}B_x - \dot{x}B_z) \\ \ddot{z} &= \frac{dv_z}{dt} = \frac{q}{m}(\dot{x}B_y - \dot{y}B_x) \end{aligned}\right\} \tag{1.18}$$

1.3.1 Trường hợp vận tốc ban đầu vuông góc với từ trường. Chúng ta xét trường hợp đơn giản và thường dùng nhất, đó là trường hợp sử dụng cuộn dây từ trường như một cuộn lái tia trong ống tia điện tử, trong đó vec-tơ cảm ứng từ vuông góc với vec-tơ vận tốc ban đầu $\vec{v}_0 = v_{x_0} = \sqrt{\frac{2e}{m}U_0}$;$\vec{B} = (0, B_y, 0)$, chiều dài vùng tác dụng của từ trường theo trục x là l_1, khoảng cách giữa vùng tác dụng của từ trường đến màn hình là l_2, như vẽ ở hình (1.2) Vì $\vec{v}_0 = v_{x_0}$, nghĩa là $v_{y_0} = 0$, $B_x = 0, B_z = 0$ cho nên ta có thể kết luận $v_y = 0$; $y = 0$ và quỹ đạo của điện tử là một đường cong phẳng nằm trong mặt xOz vuông góc với đường sức từ trường.

Vì gia tốc của chuyển động luôn vuông góc với vec-tơ vận tốc và độ lớn của vận tốc không đổi $|\vec{v}| = |\vec{v}_0|$ cho nên quỹ đạo của điện tử phải là một đường tròn, trong đó lực tác dụng của từ trường là lực hướng tâm, ta có

$$\frac{mv^2}{R} = evB_y \quad \text{vì } v = v_0 \quad \text{nên} \quad \frac{mv_0^2}{R} = ev_0B \tag{1.19}$$

Từ đây ta rút ra được bán kính của quỹ đạo chuyển động

$$R = \frac{mv_0}{eB} \tag{1.20}$$

Thời gian đi hết một vòng của quỹ đạo, nghĩa là chu kỳ của chuyển động quay là

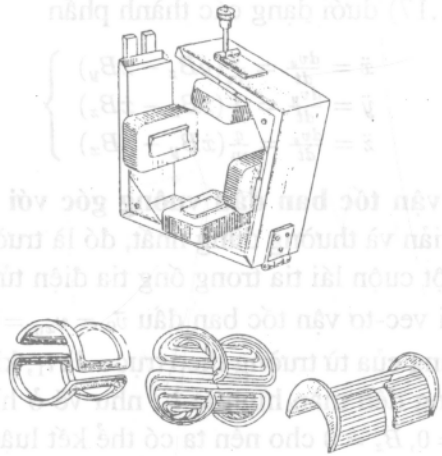
$$T = \frac{2\pi R}{v_0} = \frac{2\pi m}{eB} \tag{1.21}$$

Tần số quay f và vận tốc góc của chuyển động là

$$f = \frac{1}{T} = \frac{eB}{2\pi m}; \quad \omega = \frac{2\pi}{T} = \frac{eB}{m} \tag{1.22}$$

Tần số quay của điện tử trong từ trường vuông góc được gọi là tần số cyclotron. Điện tử có thể thực hiện được chuyển động quay chỉ trong trường hợp vùng tác dụng của từ trường rộng và từ trường đủ lớn.

Trong trường hợp chúng ta xét trong ống tia điện tử vùng từ trường l_1 hẹp và từ trường nhỏ, quỹ đạo của điện tử chỉ là một cung tròn, ra khỏi vùng tác dụng của từ trường điện tử sẽ chuyển động thẳng đều và đập lên màn hình.



Hình 1.3: *a- cuộn lái tia có lõi sắt, b- cuộn lái tia không có lõi sắt.*

Nếu độ lệch trong từ trường không lớn chúng ta có thể viết một cách gần đúng độ lệch của điện tử trong vùng tác dụng của từ trường:

$$z \cong x \cdot \frac{x}{2R} = \frac{x^2 eB}{2mv_0} = \frac{eBx^2}{2m\sqrt{\frac{2e}{m}U_0}} = \sqrt{\frac{e}{2mU_0}} \cdot \frac{Bx^2}{2}$$

$$z \cong \sqrt{\frac{e}{2mU_0}} \cdot \frac{Bx^2}{2} \tag{1.23}$$

Từ (1.23) chúng ta có những nhận xét sau:

- Với $x < l_1$ phương trình quỹ đạo là $z \cong \sqrt{\frac{e}{2mU_0}} B \frac{x^2}{2}; y = 0$

- Quỹ đạo của hạt trong từ trường tĩnh phụ thuộc vào các đặc trưng của hạt (vào tỷ số q/m). Như vậy từ trường tĩnh có khả năng phân tách chùm điện tích theo các đặc trưng của hạt, ví dụ trong khối phổ kế.

- Quỹ đạo của một hạt sẽ không đổi khi $\frac{B}{\sqrt{U_0}}$ không đổi.

- Cũng tương tự như trong ống tia điện tử dùng tụ điện lái tia, trong ống dùng cuộn từ trường lái tia ta cũng có thể tính độ lệch tia trên màn hình D.

$$D = D_1 + D_2$$

Trong đó

$$D_1 = z_1 = \frac{l_1^2 eB}{2mv_0} = \sqrt{\frac{e}{2mU_0}} \cdot \frac{Bl_1^2}{2}$$

$$D_2 = l_2 \cdot \mathrm{tg}\theta = \frac{l_1}{R} \cdot l_2 = \frac{l_1 eB}{mv_0} \cdot l_2 = \sqrt{\frac{e}{2mU_0}} \cdot Bl_1 l_2$$

Kết quả là

$$D = \frac{eBl_1}{mv_0}(\frac{l_1}{2} + l_2) = \sqrt{\frac{e}{2mU_0}} Bl_1(\frac{l_1}{2} + l_2) \tag{1.24}$$

- Trong trường hợp này chúng ta cũng có thể đưa ra khái niệm độ nhạy S. Nếu dòng điện I chạy trong ống dây sinh ra từ trường B thì B có độ lớn tỷ lệ thuận với I. Khi đó độ nhạy được định nghĩa như sau: độ nhạy của ống tia điện tử về độ lớn bằng độ lệch của chùm điện tử gây nên bởi sự thay đổi dòng điện có độ lớn bằng $1A$ chạy qua cuộn lái tia.

$$S = \frac{D}{I} = \frac{el_1}{mv_0}(\frac{l_1}{2} + l_2)\frac{B}{I} = \sqrt{\frac{e}{2mU_0}} l_1(\frac{l_1}{2} + l_2)\frac{B}{I} \tag{1.25}$$

- Trên hình (1.3) biểu diễn một số cuộn lái tia có lõi sắt (1.3 a) và không có lõi sắt (1.3 b).

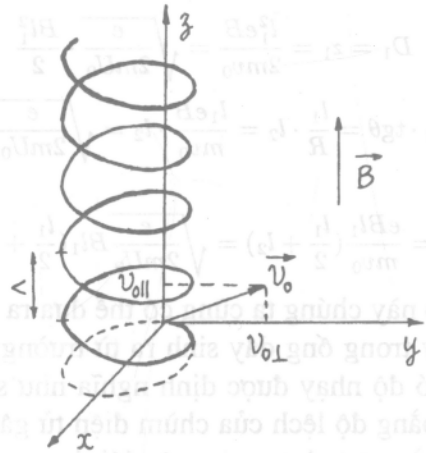
1.3.2 Trường hợp tổng quát. Bây giờ chúng ta xét trường hợp tổng quát hơn, khi mà vận tốc ban đầu $\vec{v_0}$ của hạt điện tích hợp với đường sức từ một góc bất kỳ. Ở đây ta phân tích $\vec{v_0}$ thành hai thành phần: một thành phần $v_\parallel$ song song với $\vec{B}$ và một thành phần $v_\perp$ vuông góc với $\vec{B}$. Thành phần $v_\perp$sẽ gây nên chuyển động quay theo quỹ đạo tròn như vừa xét ở trên, còn thành phần $v_\parallel$ gây nên chuyển động tịnh tiến song song với $\vec{B}$. Quỹ đạo của chuyển động tổng hợp sẽ là một đường có dạng lò xo "vấn" lấy đường sức của từ trường. Bước của lò xo là

$$\Lambda = v_\parallel T = v_\parallel \cdot \frac{2\pi m}{qB}$$

Trên hình (1.4) biểu diễn quỹ đạo "lò xo" của điện tích trong từ trường.

Chúng ta nhận thấy rằng $v_\parallel$ càng lớn thì bước của lò xo càng lớn, lò xo càng giãn ra, sau mỗi bước quỹ đạo của điện tích lại lặp lại tuần hoàn.

- Từ tính chất chuyển động này chúng ta thấy từ trường đều có khả năng hội tụ được chùm hạt phân kỳ yếu và có độ lớn của vận tốc gần đồng đều. Giả sử có một chùm điện tử phát ra từ catot K và được tăng tốc bởi anot A sau đó đi qua lỗ nhỏ ở anot dưới dạng một chùm tia phân kỳ yếu với v_0 gần đồng đều và $v_\perp \ll v_\parallel$. Nếu chùm tia đi qua một từ trường có vec-tơ $\vec{B}$ song song



Hình 1.4: *Quỹ đạo của hạt tích điện trong từ trường với $\vec{v}_0$ có phương bất kỳ.*

Hình 1.5: *Quỹ đạo của hạt điện tử trong từ trường song song với trục của chùm điện tử phân kỳ yếu.*

với trục của chùm tia thì sau những khoảng thời gian bằng chu kỳ T điện tử sẽ cắt trục chùm tia tại những điểm gần bằng nhau, bằng bước của lò xo, vì rằng

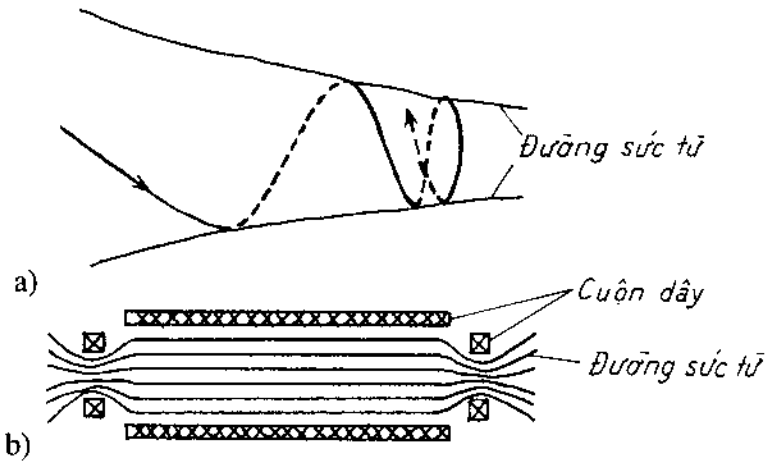
$$T = \frac{2\pi m}{eB}$$

và

$$\Lambda = Tv_{\parallel} \simeq Tv_0 = \frac{2\pi m}{eB} v_0$$

Như vậy từ trường đều dọc theo chùm tia có khả năng hội tụ chùm phân kỳ yếu, nhưng quỹ đạo của điện tử có dạng lò xo, như biểu diễn ở hình (1.5).

- Cuối cùng chúng ta có một nhận xét là nếu từ trường dọc chùm tia không



Hình 1.6: *a- mô tả hiện tượng điện tích bị phản xạ trong từ trường, b- cấu hình bẫy từ.*

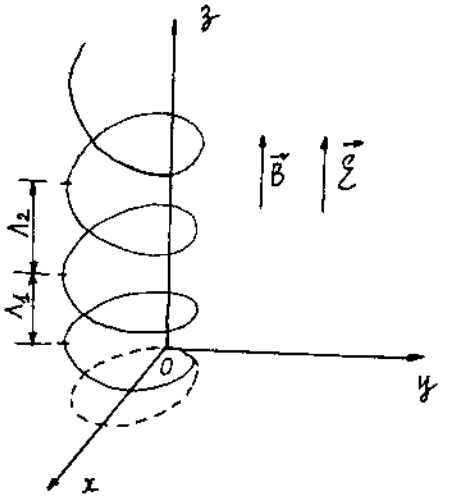
đều thì bước của lò xo và bán kính quay của điện tử sẽ thay đổi, vec-tơ cảm ứng từ $\vec{B}$ càng lớn (mật độ đường sức dày) thì Λ càng nhỏ và R càng nhỏ, quỹ đạo của điện tử sẽ phức tạp hơn nhiều, thậm chí xẩy ra hiện tượng điện tích bị phản xạ trở lại. Đó chính là nguyên tắc của các bẫy từ dùng để nhốt plasma mà ta có thể hiểu một cách định tính trên hình (1.6).

1.4 Chuyển động của hạt tích điện trong chân không dưới tác dụng đồng thời của điện trường và từ trường đều

Khi có tác dụng đồng thời của điện trường và từ trường hạt sẽ chuyển động theo những quỹ đạo khác nhau tùy thuộc vào sự phân bố tương hỗ giữa các trường đó. Chúng ta sẽ xét một số trường hợp thường gặp sau đây.

1.4.1 Điện trường và từ trường song song. Xét chuyển động của một điện tích q, khối lượng m, có vận tốc ban đầu $\vec{v_0}$ trong không gian có điện trường $\vec{\mathcal{E}} = (0, 0, \mathcal{E}_z)$ và từ trường $\vec{B} = (0, 0, B_z)$ song song với nhau và hướng theo trục z. Nếu $\vec{v_0}$ làm thành với trục z một góc θ và tại thời điểm $t = 0$ điện tích nằm tại vị trí $\vec{r_0} = 0$ thì điện tích sẽ đồng thời tham gia hai chuyển động:

- Chuyển động quay theo đường tròn bán kính $R = \frac{mv_{0\perp}}{qB}$ với chu kỳ $T = \frac{2\pi m}{qB}$ trên mặt phẳng vuông góc trục z

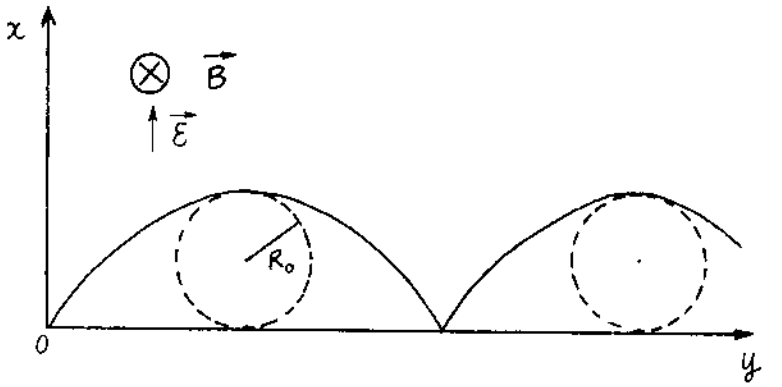


Hình 1.7: *Quỹ đạo của điện tích dưới tác dụng của điện và từ trường song song.*

- Chuyển động thẳng có gia tốc đều theo trục z với vận tốc $v_z = v_{0\|} + \frac{q\mathcal{E}}{m}t$. Quỹ đạo của chuyển động tổng hợp sẽ là những đường lò xo có bước thay đổi dần như biểu diễn ở hình (1.7). Quỹ đạo của chuyển động tất nhiên còn phụ thuộc vào chiều của $\vec{\mathcal{E}}$ so với $v_{0\|}$.

1.4.2 Điện trường và từ trường vuông góc. Xét chuyển động của một hạt có điện tích q, khối lượng m, có vận tốc ban đầu $\vec{v}_0 = (v_{ox}, v_{oy}, 0)$, ở thời điểm $t = 0$, $\vec{r}_0 = 0$, trong điện trường $\vec{\mathcal{E}} = (\mathcal{E}_x, 0, 0)$ và từ trường $\vec{B} = (0, 0, B_z)$, vuông góc với bề mặt giấy như ở hình vẽ (1.8). Phương trình (1.3) có thể viết lại dưới dạng các thành phần

$$\left.\begin{aligned}
\frac{d^2x}{dt^2} &= \frac{q}{m}\mathcal{E}_x + \frac{q}{m}\left(\frac{dy}{dt}B_z - \frac{dz}{dt}B_y\right)\\
\frac{d^2y}{dt^2} &= \frac{q}{m}\mathcal{E}_y + \frac{q}{m}\left(\frac{dz}{dt}B_x - \frac{dx}{dt}B_z\right)\\
\frac{d^2z}{dt^2} &= \frac{q}{m}\mathcal{E}_z + \frac{q}{m}\left(\frac{dx}{dt}B_y - \frac{dy}{dt}B_x\right)
\end{aligned}\right\} \qquad (1.26)$$



Hình 1.8: *Quỹ đạo của điện tích dưới tác dụng của điện và từ trường vuông góc.*

Hay là

$$\begin{aligned}\frac{d^2x}{dt^2} &= \frac{q}{m}\mathcal{E} + \frac{q}{m}\frac{dy}{dt}B\\ \frac{d^2y}{dt^2} &= -\frac{q}{m}\frac{dx}{dt}B\\ \frac{d^2z}{dt^2} &= 0.\end{aligned} \tag{1.27}$$

Nếu giả thiết $v_{oz} = 0; z_0 = 0$ chúng ta có thể thấy quỹ đạo là một đường cong phẳng nằm trong mặt phẳng xOy (mặt giấy). Lấy tích phân phương trình thứ 2 ta có:

$$\frac{dy}{dt} = -\frac{qB}{m}x + v_{oy} = -\omega x + v_{oy} \tag{1.28}$$

với $\omega = \frac{qB}{m}$. Thay (1.28) vào phương trình thứ nhất của (1.27) ta có

$$\frac{d^2x}{dt^2} + \omega^2 x = \frac{q\mathcal{E}}{m} + \omega v_{oy} \tag{1.29}$$

Nghiệm tổng quát của (1.29) là

$$x = c_1 \sin\omega t + c_2 \cos\omega t + \frac{q\mathcal{E}}{m\omega^2} + \frac{v_{oy}}{\omega}, \tag{1.30}$$

trong đó c_1, c_2 là các hằng số tích phân. Từ (1.30), ta có

$$\frac{dx}{dt} = c_1\omega\cos\omega t - c_2\omega\sin\omega t \tag{1.31}$$

Từ các điều kiện biên:

$$t = 0, x = 0, y = 0, v_x = v_{ox}, v_y = v_{oy}$$

ta có thể tính được c_1, c_2, kết quả tính toán cho ta

$$\begin{aligned} x(t) &= \frac{m}{qB} v_{ox} \sin \frac{qB}{m} t + (\frac{m}{qB} v_{oy} + \frac{m}{qB} \frac{\mathcal{E}}{B})(1 - \cos \frac{qB}{m} t) \\ y(t) &= -\frac{\mathcal{E}}{B} t - \frac{m v_{ox}}{qB}(1 - \cos \frac{qB}{m} t) + (\frac{m}{qB} v_{oy} + \frac{m}{qB} \frac{\mathcal{E}}{B}) \sin \frac{qB}{m} t. \end{aligned} \tag{1.32}$$

Nếu cho $\vec{v}_0 = 0, v_{ox} = v_{oy} = 0$ ta có

$$\left.\begin{aligned} x(t) &= \frac{m}{qB} \frac{\mathcal{E}}{B}(1 - \cos \frac{qB}{m} t) = R_0(1 - \cos \omega t) \\ y(t) &= -\frac{\mathcal{E}}{B} t + \frac{m}{qB} \frac{\mathcal{E}}{B} \sin \frac{qB}{m} t = -\frac{\mathcal{E}}{B} t + R_0 \sin \omega t \end{aligned}\right\} \tag{1.33}$$

với

$$R_0 = \frac{m\mathcal{E}}{qB^2} \tag{1.34}$$

Các phương trình (1.33) là phương trình tham số biểu diễn một đường cong gọi là cycloit là quỹ đạo của điện tích. Đường cong cycloit chính là quỹ đạo của một điểm trên đường tròn có bán kính R_0 nằm trong mặt phẳng xoy và lăn trên trục y với vận tốc góc ω, như biểu diễn trên hình (1.8).

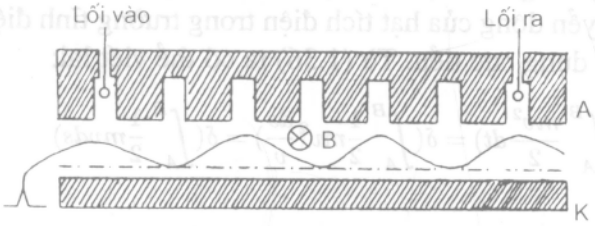
Phương trình (1.33) cũng cho ta thấy vận tốc trung bình của hạt theo trục y là $u = \frac{\mathcal{E}}{B}$, và chuyển động của hạt có thể xem như gồm hai dạng: chuyển động tịnh tiến theo trục y với vận tốc trung bình u và chuyển động quay với tần số góc ω. Độ cao cực đại của cycloit ($x_{\max}$) đạt được khi

$$\cos \omega t = -1, \quad \omega t = (2k + 1)\pi$$

và bằng $x_{\max} = 2R_0$.

Quỹ đạo của hạt cắt trục y tại những điểm cách đều nhau ứng với $x_{\min} = 0$ khi $\cos \omega t = 1$, $\omega t = 2\pi$. Khoảng cách giữa những điểm cắt nhau bằng $\Delta y = 2\pi R_0$. Dạng chuyển động của điện tử trên đây được sử dụng như nguyên lý hoạt động của một loại dụng cụ điện tử magnetron, một loại đèn phát siêu cao tần. Trên hình (1.9) vẽ sơ đồ một loại magnetron: magnetron phẳng (như một máy phát siêu cao tần ứng dụng sự tương tác giữa chùm điện tử và sóng điện từ).

Magnetron gồm có catot phát điện tử và anot có các hốc cộng hưởng, đặt trong từ trường. Điện tử phát ra từ K dưới tác dụng của điện và từ trường



Hình 1.9: *Nguyên lý hoạt động của magnetron phẳng.*

vuông góc với nhau sẽ chuyển động theo các quỹ đạo cycloit. Độ cao các cycloit phụ thuộc vào điện áp trên hai bản và từ trường. Chính quỹ đạo đặc biệt này của điện tử đã tạo nên sự tương tác và trao đổi năng lượng giữa chùm điện tử và sóng điện từ trong magnetron và được sử dụng như nguyên lý hoạt động của magnetron.

1.5 Sự tương tự quang cơ

Chúng ta biết rằng trong quang học có một nguyên lý quan trọng đó là nguyên lý Ferma hay còn gọi là nguyên lý thời gian cực tiểu. Theo nguyên lý này, khi tia sáng lan truyền từ điểm A đến điểm B thì trong số tất cả các quỹ đạo có thể nó sẽ lan truyền theo quỹ đạo mà thời gian cần thiết để đi hết quỹ đạo đó là cực tiểu. Nguyên lý đó được diễn tả bằng toán học dưới dạng một biến phân như sau:

$$\delta(\int_A^B dt) = \delta(\int_A^B \frac{ds}{v}) = \delta(\int_A^B nds) = 0 \tag{1.35}$$

trong đó v là tốc độ lan truyền của ánh sáng trong môi trường có chiết suất là n; $v = \frac{c}{n}$, c là tốc độ lan truyền của ánh sáng trong chân không. Từ (1.35) nguyên lý Ferma cũng có thể phát biểu: quang lộ của tia sáng theo quỹ đạo thật của nó bao giờ cũng là cực trị.

Trong cơ học ta cũng có nguyên lý tương tự như nguyên lý Ferma, đó là nguyên lý tác dụng cực tiểu, được biểu diễn bằng toán học như sau: đối với một hạt chuyển động trong trường thế ta luôn có:

$$\delta(\int_A^B Tdt) = \delta(\int_A^B \frac{mv^2}{2}dt) = 0 \tag{1.36}$$

trong đó T là động năng của hạt v là vận tốc của hạt. Vì điện trường là một trường thế nên chuyển động của hạt tích điện trong trường tĩnh điện phải tuân theo nguyên lý tác dụng cực tiểu. Từ (1.36) ta có thể viết lại:

$$\delta(\int_A^B \frac{mv^2}{2}dt) = \delta(\int_A^B \frac{1}{2}mv^2\frac{ds}{v}) = \delta(\int_A^B \frac{1}{2}mvds)$$

hay là

$$\delta(\int_A^B vds) = 0; \quad v = \sqrt{\frac{2q}{m}U}; \quad \delta(\int_A^B \sqrt{U}ds) = 0 \tag{1.37}$$

Từ đây chúng ta thấy rằng có thể xem quỹ đạo của hạt tích điện trong trường tĩnh điện như đường đi của tia sáng nếu trong không gian có thể xem n tương tự như $\sqrt{U}$, nghĩa là sự thay đổi giá trị căn bậc hai của điện thế trong không gian giống như sự thay đổi của chiết suất trong môi trường.

Sự tương tự đó gọi là sự tương tự quang cơ, nó cho phép xây dựng một thứ quang học các chùm điện tử, chùm ion giống như quang học các tia sáng.

Như chúng ta biết trong quang học có ba định luật cơ bản:

1. Trong môi trường đồng nhất (có chiết suất đồng đều) ánh sáng bao giờ cũng truyền thẳng.

2. Khi tia sáng đi từ môi trường có chiết suất n_1 sang môi trường có chiết suất n_2, nó bị khúc xạ ở mặt giới hạn giữa hai môi trường và tỷ số giữa góc tới và góc khúc xạ thoả mãn điều kiện

$$\frac{\sin\alpha}{\sin\beta} = \frac{n_2}{n_1}.$$

3. Góc phản xạ của tia sáng trên mặt phẳng giới hạn giữa hai môi trường bằng góc tới

$$\alpha = \alpha'$$

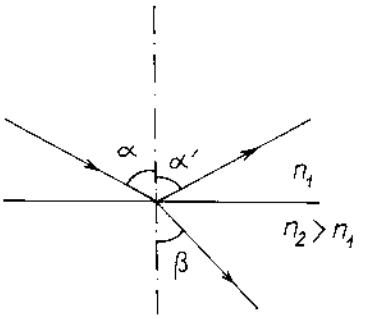
(xem hình (1.10)).

Đối với chuyển động của hạt điện tích trong trường tĩnh điện ta cũng có thể phát biểu những định luật tương tự:

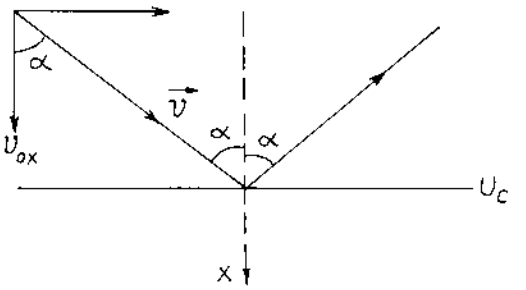
1. Trong vùng có điện thế không đổi ($U = \text{const}$) hạt điện tích chuyển động thẳng (chú ý $v \sim \sqrt{U}$).

2. Nếu chùm hạt tích điện phản xạ trên bề mặt đẳng thế thì góc tới bằng góc phản xạ.

Ở đây chúng ta hãy xét điều kiện phản xạ một chùm điện tử chẳng hạn. Hướng một chùm điện tử có vận tốc ban đầu bằng $\vec{v}_0$ vào một bề mặt kim loại



Hình 1.10: *Hiện tượng phản xạ và khúc xạ ánh sáng.*



Hình 1.11: *Hiện tượng phản xạ tia điện tử.*

(một colectơ) có điện thế U_C. Để điện tử rơi lên colectơ khi colectơ tích điện âm $U_C < 0$, thì vận tốc điện tử phải thoả mãn điều kiện

$$\frac{m}{2}v_{ox}^2 \geq eU_C;$$

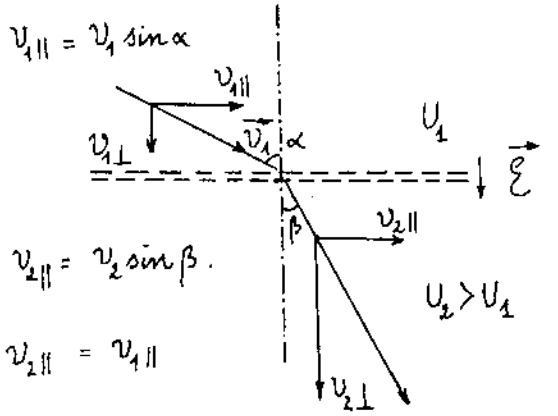
với trục x vuông góc với bề mặt colectơ như ở hình vẽ (1.11).

$v_{ox} = v_0 \cos\alpha$ và do đó điều kiện trên có thể viết lại:

$$\frac{m}{2}v_0^2 \cos^2\alpha \geq eU_C.$$

Vì $\frac{mv_0^2}{2} = eU_0$, $\frac{m}{2}v_0^2\cos^2\alpha = eU_0\cos^2\alpha = eU_0(1-\sin^2\alpha)$, nên điều kiện để điện tử rơi vào colectơ là:

$$|eU_0|(1-\sin^2\alpha) \geq |eU_C|$$



Hình 1.12: *Hiện tượng khúc xạ tia điện tử.*

hay $\sin\alpha \leq \sqrt{1 - |\frac{U_C}{U_0}|}$.
Ngược lại, điều kiện để chùm tia phản xạ trở lại là

$$\sin\alpha > \sqrt{1 - |\frac{U_C}{U_0}|} \tag{1.38}$$

Điều kiện (1.38) tương tự như điều kiện phản xạ toàn phần trong quang học

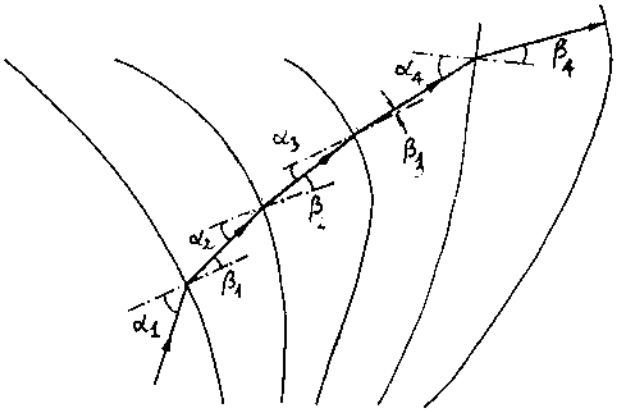
$$\sin\alpha > \frac{n_2}{n_1}.$$

3. Khi hạt điện tích chuyển động từ vùng có điện thế U_1 sang vùng có điện thế U_2 thì hướng và độ lớn của vận tốc của hạt sẽ thay đổi và được xác định bằng định luật

$$\frac{\sin\alpha}{\sin\beta} = \frac{\sqrt{U_2}}{\sqrt{U_1}}.$$

Hiện tượng khúc xạ chùm hạt tích điện này là do sự tác dụng của lực điện trường tồn tại ở một lớp mỏng phân cách giữa hai vùng có điện thế khác nhau làm thay đổi thành phần $v_\perp$ (vuông góc với bề mặt phân cách) của vận tốc, xem hình (1.12).

Điện trường trong lớp phân cách không làm thay đổi thành phần $v_\parallel$ của vận tốc: $v_1 \sin\alpha = v_2 \sin\beta$; $\frac{v_1}{v_2} = \frac{\sin\beta}{\sin\alpha}$. Định luật khúc xạ trên đây cho phép ta xác định được quỹ đạo của hạt tích điện chuyển động trong một trường tĩnh



Hình 1.13: *Phương pháp xác định quỹ đạo điện tích trong một trường thế tĩnh điện bất kỳ.*

điện bất kỳ. Muốn vậy ta phải biểu diễn trường tĩnh điện bằng tập hợp rất nhiều các mặt đẳng thế phân bố sát nhau để có thể xem điện thế trong khoảng không gian giữa hai mặt đẳng thế là không đổi và bằng

$$U = \frac{U_i + U_{i+1}}{2}.$$

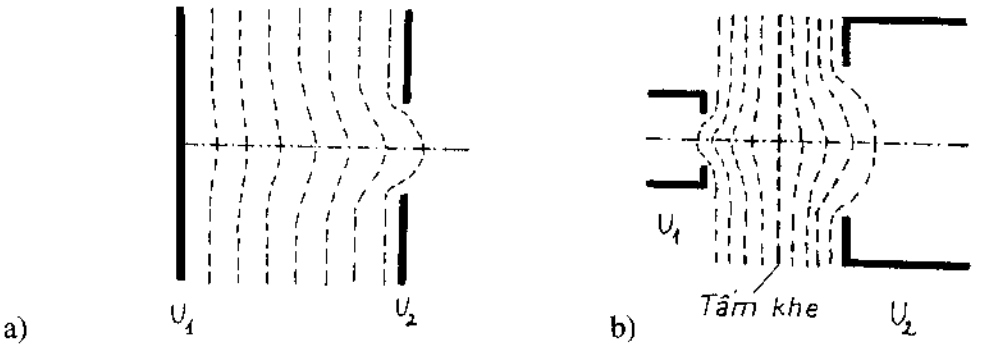
Chúng ta có thể gọi $\sqrt{U}$ là chiết suất điện tử của không gian trong đó có điện tích chuyển động.

Sử dụng định luật khúc xạ qua mặt thứ i ta sẽ nhận được

$$\frac{\sin\alpha_i}{\sin\beta_i} = \frac{\sqrt{U_{i+1} + U_i}}{\sqrt{U_{i-1} + U_i}} \tag{1.39}$$

Quỹ đạo thật sự của hạt được thay thế một cách gần đúng bằng một đường gãy khúc gồm nhiều đoạn thẳng nối với nhau. Số mặt đẳng năng càng lớn độ chính xác của phép tính càng cao (xem hình (1.13)).

Như đã nhận xét trong mục §1-2, quỹ đạo của hạt điện tích không phụ thuộc vào khối lượng và điện tích của nó, quy luật này được gọi là quy luật đồng dạng của các hạt chuyển động trong trường tĩnh điện.



Hình 1.14: *a- thấu kính tĩnh điện một mặt phẳng, một mặt cong, b- thấu kính tĩnh điện hai mặt cong.*

1.6 Chuyển động của hạt tích điện trong trường tĩnh điện không đều, thấu kính tĩnh điện

Cũng như trong quang học của các chùm ánh sáng, trong quang học của các chùm điện tử (ta gọi là quang học điện tử), thấu kính là phần tử quan trọng nhất, nó dùng để hội tụ hay phân kỳ chùm điện tử.

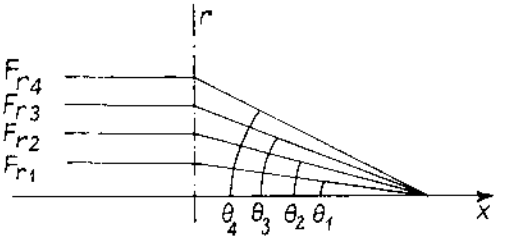
Thấu kính điện tử có thể tạo được bằng điện trường không đồng nhất có đối xứng trục, hoặc từ trường không đồng nhất có đối xứng trục. Trong mục này ta sẽ xét loại thấu kính thứ nhất, được gọi là thấu kính tĩnh điện.

Trên hình (1.14 a,b) biểu diễn hai loại thấu kính tĩnh điện: Thấu kính một mặt phẳng một mặt cong (1.14 a) và thấu kính hai mặt cong (1.14b) trong đó các đường đứt nét biểu diễn các mặt đẳng thế.

Các thấu kính được cấu tạo từ hai điện cực có điện thế khác nhau U_1 nhỏ hơn U_2 và có hình dạng đối xứng trục. Trong hình (1.14b), các điện cực đó là những hình trụ đồng trục, còn ở hình (1.14a) các điện cực có dạng phẳng với lỗ tròn ở giữa, gọi là điapham (diaphragm).

Đầu tiên ta khảo sát một cách định tính quỹ đạo của điện tử qua thấu kính, đi từ trái sang phải, từ miền U_1 sang miền U_2, $U_1 < U_2$.

Cường độ điện trường $\vec{\mathcal{E}}$ và do đó lực tác dụng lên điện tử $\vec{F}$ có thể phân tích thành hai thành phần F_z dọc theo trục và F_r vuông góc với trục. Trên hình (1.14 b) chúng ta nhận thấy rằng các mặt đẳng thế cong về hai phía và có độ cong khác nhau, có thể tìm được một mặt đẳng thế gần giữa khe có dạng gần như phẳng, ta gọi vị trí này là tâm khe giữa hai cực hình trụ (đường



Hình 1.15: *Giải thích nguyên lý hội tụ chùm điện tử.*

đứt nét đậm). Dễ dàng thấy rằng khi điện tử chuyển động từ trái sang phải và đang nằm phía bên trái tâm khe, lực F_r có chiều hướng vào trục của thấu kính nghĩa là có tác dụng hội tụ, ở phía bên phải tâm khe lực F_r có chiều ngược lại hướng từ trục ra ngoài, nghĩa là có tác dụng phân kỳ. Tuy nhiên tác dụng phân kỳ của phần bên phải không triệt tiêu hoàn toàn tác dụng hội tụ của phần bên trái, bởi vì ở phần bên phải điện tử chuyển động với vận tốc lớn hơn nên thời gian chịu tác dụng nhỏ hơn. Kết quả là khi một chùm điện tử song song với trục của thấu kính đi qua phần bên phải tâm khe, mức độ hội tụ của chùm điện tử đó bị giảm đi chút ít, nhưng quỹ đạo của điện tử vẫn cắt trục tại một điểm nào đó, được xem là tiêu điểm phải của thấu kính, khoảng cách từ tiêu điểm đến tâm khe là tiêu cự. Tiêu cự phía trái và phía phải có thể khác nhau.

Chúng ta thấy rằng để một chùm điện tử song song đi qua thấu kính hội tụ tại tiêu điểm lực hướng trục F_r tác dụng vào điện tử phải tỷ lệ thuận với r, lực càng lớn khi hạt càng ở xa trục, như minh hoạ ở hình (1.15). Rõ ràng điện thế trong hệ thấu kính phải có đối xứng trục:

$$U(r) = U(-r).$$

Hàm phân bố điện thế phải thoả mãn phương trình Laplace mà trong tọa độ trụ (và có đối xứng trục) có dạng

$$\frac{\partial^2 U}{\partial r^2} + \frac{1}{r}\frac{\partial U}{\partial r} + \frac{\partial^2 U}{\partial z^2} = 0 \tag{1.40}$$

Phương trình (1.40) cũng có thể viết lại dưới dạng

$$\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}(r\cdot\frac{\partial U}{\partial r})+\frac{\partial^2 U}{\partial z^2}=0 \tag{1.41}$$

Trong trường hợp chùm điện tử hẹp (r nhỏ) ta có thể biểu diễn $U(r,z)$ dưới dạng một dãy các hàm mũ của r.

$$U(r,z)=\sum_0^n U_n(z)r^n=U_0(z)+U_1(z)r+U_2(z)r^2+\cdots$$

Tuy nhiên, do tính đối xứng trục trong tổng này chỉ còn lại các số hạng có số mũ của r là chẵn, nghĩa là

$$U(r,z)=U_0(z)+U_2(z)r^2+U_4(z)r^4+\cdots \tag{1.42}$$

Nếu ta dùng các ký hiệu sau đây cho đạo hàm

$$\dot{r}=\frac{dr}{dt};\quad r'=\frac{\partial r}{\partial z}, \tag{1.43}$$

sử dụng điều kiện phương trình Laplace (1.41) và tính đối xứng trục ta có thể viết:

$$U(r,z)=U_0(z)-\frac{r^2}{4}U_0''+\cdots \tag{1.44}$$

trong đó: $U_0(z)$ là điện thế trên trục thấu kính (với $r=0$); U_0'' là đạo hàm bậc hai theo z của $U(r,z)$ trên trục thấu kính. Biểu thức (1.44) nghiệm đúng (1.41) nếu giả thiết $U_0''''(z)\ll U_0''(z)$.

Chúng ta hãy tìm các lực của điện trường tác dụng vào điện tử : Lực theo trục z:

$$F_z=m\ddot{z}=e\frac{\partial U}{\partial r}=eU_0' \tag{1.45}$$

Ở đây chúng ta đã bỏ qua U_0''' là đại lượng nhỏ. Lực theo r:

$$F_r=m\ddot{r}=e\frac{\partial U}{\partial r}=-\frac{er}{2}U_0''$$

Ta thấy rằng lực F_r này tỷ lệ thuận với r khoảng cách đến trục. Có thể viết một cách gần đúng rằng theo trục z vận tốc của điện tử thay đổi theo công thức

$$\frac{1}{2}m\dot{z}^2=eU_0 \tag{1.46}$$

Tìm dạng của quỹ đạo nghĩa là tìm $r = r(z)$ (sự phụ thuộc của r vào z) khi điện tử chuyển động. Vì $r = r(t); z = z(t)$ta có thể chứng minh được công thức toán học sau:

$$\ddot{r} = \dot{z}^2 r'' + \ddot{z} r' \tag{1.47}$$

Thật vậy ta có:

$$\dot{r} = \frac{\partial r}{\partial z}\frac{\partial z}{\partial t} = r'\dot{z}$$

$$\ddot{r} = \frac{\partial}{\partial t}[r'\dot{z}] = \dot{z}\frac{\partial}{\partial t}[r'] + r'\frac{\partial}{\partial t}[\dot{z}] = \dot{z}r''\dot{z} + r'\ddot{z} \tag{1.48}$$

Xác định các giá trị từ (1.45) và (1.46) rồi thay vào (1.48) ta có

$$-\frac{er}{2m}U_0'' = \frac{2e}{m}U_0 r'' + \frac{e}{m}U_0' r'$$

hay là

$$r'' + \frac{U_0'}{2U_0}r' + \frac{U_0''}{4U_0}r = 0 \tag{1.49}$$

Phương trình (1.49) được gọi là phương trình cơ bản của thấu kính tĩnh điện. Đây là phương trình vi phân bậc hai với các hệ số biến đổi, rất khó giải để tìm nghiệm tổng quát. Tuy nhiên từ đây ta cũng có thể rút ra một số nhận xétvề quỹ đạo của điện tử hay hạt tích điện nói chung:

- Quỹ đạo của hạt tích điện không phụ thuộc vào điện tích và khối lượng của chúng (trong công thức (1.49) không có mặt e/m).

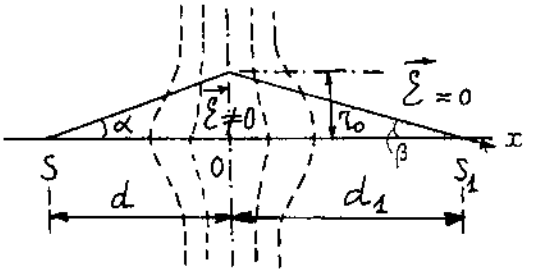
- Nếu ta thay đổi giá trị điện thế của các điểm trên trục thấu kính (trục z) một số lần như nhau thì quỹ đạo của hạt tích điện không đổi, (đó là vì các tỷ số U_0'/U_0 và U_0''/U_0 không thay đổi).

- Nếu biết các giá trị của điện thế dọc theo trục thấu kính, nghĩa là nếu biết các hàm U_0, U_0', U_0'' thì ta có thể tìm được quỹ đạo của điện tử $r = r(z)$.

- Chúng ta có thể dùng (1.49) để giải bài toán trong trường hợp một thấu kính tĩnh điện mỏng và yếu. Người ta gọi thấu kính tĩnh điện mỏng khi vùng không gian trong thấu kính có $\vec{\mathcal{E}} \neq 0$ là hẹp, trong vùng đó giá trị r của điện tử không kịp thay đổi nhiều. Để xác định ta xét một chùm điện tử từ điểm s cách khe thấu kính một khoảng d (khoảng cách vật) làm thành với trục một góc α, khi đi qua thấu kính chùm này bị khúc xạ và cắt trục tại điểm s_1, ở khoảng cách ảnh d_1, như ở hình (1.16).

Chúng ta có thể viết lại phương trình (1.49):

$$\sqrt{U_0}r'' + \frac{u_0'}{2\sqrt{U_0}}r' + \frac{U_0''r}{4\sqrt{U_0}} = 0$$



Hình 1.16: *Giải thích cách tính tiêu cự thấu kính tĩnh điện.*

hay là

$$\frac{\partial}{\partial z}\left[\sqrt{U_0(z)}\frac{\partial r}{\partial z}\right] = -\frac{1}{4}\frac{U_0''(z)}{\sqrt{U_0(z)}}r(z) \tag{1.50}$$

Tích phân (1.50) theo z từ S đến S_1, ta có

$$\sqrt{U_0(z)}\left.\frac{\partial r}{\partial z}\right|_{S_1} - \sqrt{U_0(z)}\left.\frac{\partial r}{\partial z}\right|_{S} = -\frac{1}{4}\int_S^{S_1}\frac{U_0''(z)}{\sqrt{U_0(z)}}r(z)dz \tag{1.51}$$

Vì hàm số dưới dấu tích phân chỉ khác không trong một vùng rất hẹp và trong vùng đó r thay đổi rất ít $r \simeq r_0$. Khi đó ta có thể thay

$$\left.\frac{\partial r}{\partial z}\right|_S = \mathrm{tg}\alpha = \frac{r_0}{d};\ \left.\frac{\partial r}{\partial z}\right|_{S_1} = \mathrm{tg}\beta = -\frac{r_0}{d_1}$$

Thay các giá trị thu được vào (1.51) ta có

$$-\frac{r_0\sqrt{U_0(S_1)}}{d_1} - \frac{r_0\sqrt{U_0(S)}}{d} = -\frac{r_0}{4}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{U_0''(z)}{\sqrt{U_0(z)}}d_z \tag{1.52}$$

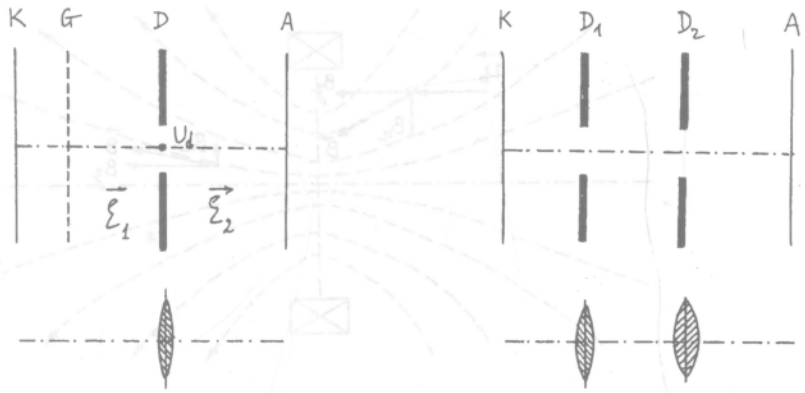
ở đây $U_0(S_1) = U_0(z = S_1); U_0(S) = U_0(z = S)$

Nếu cho $d = \infty$ và $d_1 = f_2$ và ta có thể tính được tiêu cự bên phải

$$\frac{1}{f_2} = \frac{1}{4\sqrt{U_0(S_1)}}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{U_0''(z)}{\sqrt{U_0(z)}}dz \tag{1.53}$$

Tương tự như vậy nếu cho $d_1 = \infty$ ta tính được tiêu cự bên trái

$$\frac{1}{f_1} = \frac{1}{4\sqrt{U_0(S)}}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{U_0''(z)}{\sqrt{U_0(z)}}dz \tag{1.54}$$



Hình 1.17: *a- thấu kính tĩnh điện đơn gồm 1 điapham, b- hệ hai thấu kính đơn.*

Ta nhận thấy rằng trong (1.53) và (1.54) f phụ thuộc vào dấu của đạo hàm bậc hai $U_0''(z)$. Nếu $U_0'' > 0$ thì f sẽ lớn hơn không ta được thấu kính hội tụ, nếu $U_0'' < 0, f < 0$ ta được thấu kính phân kỳ. Tỷ lệ giữa hai tiêu cự

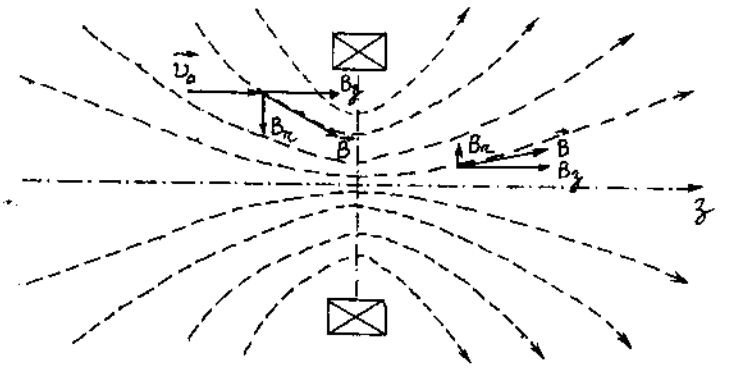
$$\frac{f_1}{f_2} = \frac{\sqrt{U_0(S_1)}}{\sqrt{U_0(S)}} = \frac{\sqrt{U_1}}{\sqrt{U_2}} \tag{1.55}$$

- Trong trường hợp đơn giản nhất như vẽ ở hình (1.17 a), thấu kính tĩnh điện chỉ gồm một tấm chắn có cửa sổ tròn (điapham), giải gần đúng phương trình (1.54) cho ta công thức tính tiêu cự (ví dụ điện tử đi từ trái sang phải)

$$f = \frac{4U_d}{\mathcal{E}_2 - \mathcal{E}_1}$$

trong đó $\mathcal{E}_2 = (U_A - U_D)/d_2, \mathcal{E}_1 = (U_D - U_G)/d_1; U_A-$ điện thế anot, U_G điện thế lưới, U_D-điện thế tại tâm của điapham (so với catot), d_1 khoảng cách giữa lưới và điapham, d_2- khoảng cách giữa điapham và anot, $\mathcal{E}_1, \mathcal{E}_2$ điện trường phía bên trái và bên phải của điapham.

- Cũng có thể có những hệ quang học điện tử phức tạp hơn, ví dụ như hệ gồm hai thấu kính ở hình (1.17b). Vì cửa sổ trên điapham rất nhỏ so với khoảng cách giữa các điapham nên tác dụng của từng điapham xem như độc lập với nhau. Điện trường được tính theo điện thế ở hai điện cực bên cạnh.



Hình 1.18: *Nguyên lý hoạt động của thấu kính từ mỏng.*

1.7 Chuyển động của hạt tích điện trong từ trường tĩnh không đều, thấu kính từ

Chúng ta xét chuyển động của điện tử có vận tốc ban đầu $\vec{v}_0$ trong từ trường của một cuộn dây ngắn, được xem là một thấu kính từ mỏng.

Rõ ràng từ trường ở đây là không đều nhưng có đối xứng trục như được minh hoạ trên hình (1.18).

Chúng ta phân tích vec-tơ cảm ứng từ $\vec{B}$ ra hai thành phần:

- B_z hướng theo trục cuộn dây, cũng là trục thấu kính
- B_r hướng theo phương bán kính

Nếu chiều đường sức quy ước như trên hình vẽ (1.18) thì thành phần B_r ở bên trái có chiều hướng vào trục thấu kính, còn ở bên phải có chiều hướng từ trục thấu kính ra ngoài.

Giả sử vận tốc ban đầu của điện tử $\vec{v}_0$ có hướng từ trái sang phải và song song trục z, $v_0 = \sqrt{\frac{2e}{m}U_0}$. Do tác dụng của thành phần B_r điện tử sẽ chịu một lực vuông góc với mặt phẳng chứa B_r và $\vec{v}$.

$$F_\varphi = ev_0B_r$$

Lực F_φ làm cho điện tử có xu hướng chuyển động quanh trục của cuộn dây với thành phần vận tốc tương ứng $v_\varphi = \frac{er}{2m}B_z$, (ở đây $v_\varphi = r\dot{\varphi}$ và có thể chứng minh rằng $\dot{\varphi} = \frac{1}{2}\frac{e}{m}B_z$).

Đến lượt thành phần vận tốc v_φ lại chịu tác dụng của thành phần từ trường

B_z, lực tác dụng vuông góc với v_φ và B_z nên hướng theo r về phía trục của cuộn dây có giá trị F_r:

$$F_r = ev_\varphi B_z = \frac{e^2 r}{2m} B_z^2 \tag{1.56}$$

Chúng ta nhận thấy rằng lực theo hướng bán kính này tỷ lệ với r, khoảng cách từ vị trí của điện tử đến trục cuộn dây giống như công thức (1.46) đối với thấu kính tĩnh điện. Như vậy từ trường không đều của cuộn dây ngắn đã làm lệch quỹ đạo của các điện tử về phía trục cuộn dây và do đó sau khi ra khỏi cuộn dây các điện tử này được hội tụ tại một điểm trên trục z, đó chính là tiêu điểm của thấu kính từ mỏng.

Cần lưu ý rằng ở nửa bên phải như quy ước trên hình (1.18) thành phần B_r của từ trường hướng từ trục ra ngoài, do đó vận tốc v_φ của điện tử sẽ giảm đi nhưng vẫn còn khác không, kết quả là tính hội tụ của từ trường vẫn được đảm bảo.

- Trên cơ sở phương trình chuyển động

$$m\frac{d^2\vec{r}}{dt^2} = -e[\vec{v} \times \vec{B}] \tag{1.57}$$

với giả thiết chùm tia hẹp (r nhỏ) tính đối xứng trục của từ trường cuộn dây, từ phương trình Maxwell

$$div\vec{B} = 0$$

hay viết trong hệ tọa độ đối xứng trục

$$\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}(rB_r) + \frac{\partial B_z}{\partial z} = 0 \tag{1.58}$$

có thể tính gần đúng phương trình quỹ đạo của điện tử

$$\frac{d^2 r}{dz^2} + \frac{e}{m}\frac{B_{z0}^2(z)}{8U_0} r = 0 \tag{1.59}$$

Đây là phương trình cơ bản của thấu kính từ, trong đó $B_{z0}(z)$ là thành phần B_z (theo trục z) của từ trường tại các điểm trên trục thấu kính (r=0).

Nếu ta lấy tích phân (1.59) và xử lý như đối với phương trình cơ bản của thấu kính tĩnh điện (1.49) ta có thể đi đến công thức tiêu cự của thấu kính từ

$$\frac{1}{f} = \frac{e}{8U_0}\int_{-\infty}^{\infty} B_{z0}^2(z)dz \tag{1.60}$$

Công thức (1.60) cho thấy f luôn dương và thấu kính từ luôn là thấu kính hội tụ. Cần lưu ý rằng do thành phần v_φ của điện tử, nghĩa là do điện tử có xu hướng quay quanh trục thấu kính nên ảnh của vật qua thấu kính sẽ bị quay đi một góc

$$\theta = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{e}{2mU_0}}\int_{-\infty}^{\infty} B_0(z)dz.$$

1.8 Chuyển động của các hạt tích điện với vận tốc gần bằng vận tốc ánh sáng

Theo biểu thức cổ điển của định luật thứ hai của Newton: Lực tổng hợp tác dụng lên một vật bằng đạo hàm động lượng của vật theo thời gian, nghĩa là:

$$\vec{F} = \frac{d}{dt}(m\vec{v}) \tag{1.61}$$

Để bao gồm cả các hiệu ứng tương đối tính chúng ta cần đưa vào sự kiện là khối lượng thay đổi theo vận tốc của vật. Từ đó suy ra rằng biểu thức của định luật hai Newton mở rộng cho cả thuyết tương đối hẹp trở thành:

$$\vec{F} = \frac{d\vec{P}}{dt} = \frac{d}{dt}\left[\frac{m_0\vec{v}}{\sqrt{1-v^2/c^2}}\right] = \frac{d}{dt}[m\vec{v}] \tag{1.62}$$

Trong đó m là khối lượng của hạt khi chuyển động, m_0 là khối lượng tĩnh của hạt và

$$m = \frac{m_0}{\sqrt{1-v^2/c^2}} \tag{1.63}$$

Trong cơ học cổ điển cũng như cơ học tương đối tính, động năng T của một vật chuyển động bằng công của ngoại lực thực hiện để làm tăng vận tốc của vật từ 0 đến giá trị v cho trước:

$$T = \int_{v=0}^{v} \vec{F}d\vec{S} \tag{1.64}$$

Chúng ta xét bài toán một chiều $\vec{F} = F_x, d\vec{S} = dx$ và thay $\vec{F}$ từ (1.62) vào (1.64) ta có:

$$T = \int_{v=0}^{v} \frac{d}{dt}[mv]dx = \int_{v=0}^{v} d(mv)\frac{dx}{dt}$$

$$T = \int_{v=0}^{v} (mdv + vdm)v = \int_{v=0}^{v} (mvdv + v^2dm) \tag{1.65}$$

Từ (1.63) ta có $m^2 = \frac{m_0^2}{1-v^2/c^2}$ hay

$$m^2c^2 - m^2v^2 = m_0^2c^2 \tag{1.66}$$

Lấy vi phân hai vế (1.66) ta có

$$2mc^2dm - m^2 2vdv - v^2 2mdm = 0$$

hay là

$$(mvdv + v^2dm) = c^2dm \tag{1.67}$$

Vế trái của (1.67) chính là biểu thức dưới dấu tích phân của (1.65) vì vậy ta có:

$$T = \int_{v=0}^{v} (mvdv + v^2dm) = \int_{m=m_0}^{m} c^2dm = c^2(m - m_0)$$

$$T = mc^2 - m_0c^2 = m_0c^2\left[\frac{1}{\sqrt{1-v^2/c^2}} - 1\right] \tag{1.68}$$

Khi $v \ll c$ ta có

$$T = m_0c^2\left[1 + \frac{1}{2}\frac{v^2}{c^2} + \cdots\right] - m_0c^2 \approx \frac{m_0v^2}{2}$$

Ta lại có biểu thức động năng trong cơ học cổ điển. Như vậy khi hạt chuyển động với vận tốc lớn khối lượng của nó thay đổi, khối lượng của hạt chuyển động lớn hơn khối lượng nghỉ của hạt một lượng là:

$$\Delta m = \frac{T}{c^2}$$

Động năng của hạt biểu diễn hiệu số giữa năng lượng toàn phần của hạt E đang chuyển động và năng lượng nghỉ E_0 của hạt, do đó

$$E - E_0 = mc^2 - m_0c^2.$$

Nếu lấy năng lượng nghỉ của hạt là $E_0 = m_0c^2$ chúng ta nhận được hệ thức Einstein

$$E = mc^2 \tag{1.69}$$

Hệ thức này nêu lên sự tương đương giữa năng lượng và khối lượng .

Bây giờ chúng ta áp dụng những kết quả trên để xác định vận tốc của một hạt tích điện được gia tốc bởi một hiệu điện thế U, ta có

$$E - E_0 = \frac{m_0c^2}{\sqrt{1-v^2/c^2}} - m_0c^2 = qU \tag{1.70}$$

Từ đây ta có:

$$v = c\sqrt{1 - \frac{1}{(1 + \frac{qU}{m_0c^2})^2}} \tag{1.71}$$

Khi $U \longrightarrow \infty$ ta thấy $v \longrightarrow c$, còn khi U nhỏ ta lại có công thức $v = \sqrt{\frac{2qU}{m_0}}$. Đối với điện tử ta có thể tính được:

$$\frac{m}{m_0} = 1 + \frac{eU}{m_0c^2} = 1 + \frac{U}{511.10^3} \tag{1.72}$$

tức là khi điện tử đi qua hiệu điện thế $U = 511kV$ khối lượng của nó tăng gấp đôi. Ta có thể tính được năng lượng tĩnh của điện tử :

$$E_0 = m_0c^2 = 9,1.10^{-31}.(3.10^8)^2 = 8,19.10^{-14}\text{J} = 0,511\text{MeV}$$

Vì động lượng được bảo toàn (chứ không phải vận tốc!), nên để tiện lợi người ta thường biểu diễn năng lượng của vật dưới dạng một hàm của động lượng. Để làm điều đó ta bình phương biểu thức của m và nhân hai vế với $c^4[1 - v^2/c^2]$ ta được

$$m^2c^4 - m^2v^2c^2 = m_0^2c^4$$

Vì $E = mc^2, E_0 = m_0c^2$ và $|\vec{P}| = mv$ ta có

$$E^2 = (P.c)^2 + E_0^2$$

hay

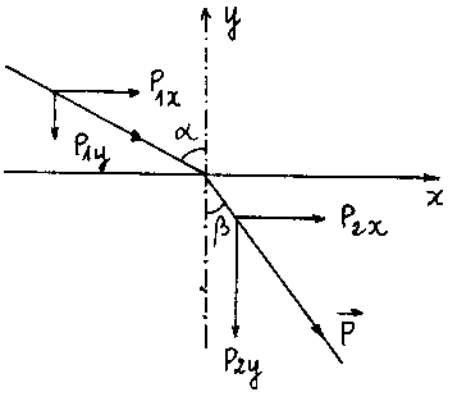
$$E^2 = (mc^2)^2 = (T + m_0c^2)^2 = P^2c^2 + (m_0c^2)^2 \tag{1.73}$$

Từ $P = mv$ ta cũng tính được vận tốc của hạt

$$v = \frac{Pc^2}{E} \tag{1.74}$$

Đối với hạt chuyển động với vận tốc gần bằng vận tốc ánh sáng sự tương tự quang-cơ vẫn xảy ra, tuy nhiên biểu thức của hệ số khúc xạ sẽ thay đổi bởi vì trong trường hợp này thay vì xét sự thay đổi vận tốc ta xét sự thay đổi động lượng, như ở hình (1.19). Khi hạt tích điện đi qua giữa hai miền có điện thế khác nhau thành phần động lượng song song với mặt phân cách là không đổi (chứ không phải thành phần vận tốc song song với mặt phân cách không đổi). Định luật khúc xạ sẽ là:

$$\frac{\sin\alpha}{\sin\beta} = \frac{P_2}{P_1} \tag{1.75}$$



Hình 1.19: *Khúc xạ tia điện tử với vận tốc lớn.*

Ta lại có $P^2 = \frac{1}{c^2}(E^2 - E_0^2)$.

$$P^2 = \frac{1}{c^2}\left[(E_0 + qU)^2 - E_0^2\right] = \frac{1}{c^2}\left[(qU)^2 + 2qUE_0\right].$$

Thay vào (1.75) ta có:

$$\frac{\sin\alpha}{\sin\beta} = \frac{U_2\sqrt{1 + \frac{2m_0c^2}{qU_2}}}{U_1\sqrt{1 + \frac{2m_0c^2}{qU_1}}} \tag{1.76}$$

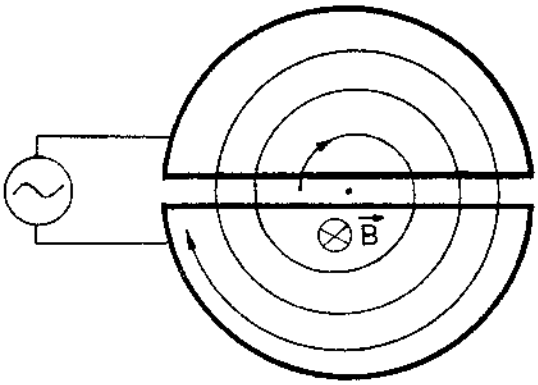
Như vậy ta có trong trường hợp này chỉ số khúc xạ trong quang học điện tử có dạng

$$n = U\sqrt{1 + \frac{2m_0c^2}{qU}} \tag{1.77}$$

Chỉ số khúc xạ không những chỉ phụ thuộc vào điện thế U mà còn phụ thuộc vào tỷ số khối lượng trên điện tích $\frac{m_0}{q}$ của hạt. Như vậy là quy luật đồng dạng trong chuyển động của các hạt tích điện không còn đúng nữa đối với các hạt tương đối tính.

Ngược lại vì trong từ trường hạt tích điện không thay đổi độ lớn của vận tốc mà chỉ thay đổi hướng của nó, nên các hạt tương đối tính vẫn chuyển động bình thường như hạt cổ điển và chỉ cần thay $m = \frac{m_0}{\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}}}$. Ví dụ bán kính cong của quỹ đạo của hạt tích điện được tính bởi công thức:

$$R = \frac{mv}{qB} = \frac{m_0v}{qB\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} \tag{1.78}$$



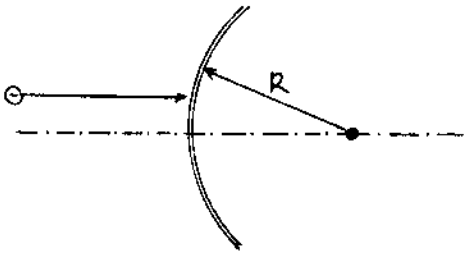
Hình 1.20: *Sơ đồ nguyên lý máy gia tốc Cyclotron.*

Để gia tốc các hạt tích điện ta phải dùng các máy gia tốc. Một trong những máy gia tốc đơn giản là máy cyclotron sử dụng từ trường không đổi và điện trường thay đổi với tần số cao (cỡ 1.10^7 Hz). Cấu tạo của cyclotron có dạng như ở hình (1.20): Hai nửa của một hình trụ dẹt (hình chữ D) cách điện với nhau bằng một khe hở nối với một nguồn điện cao tần. Hai điện cực này được đặt trong chân không và từ trường đều vuông góc với mặt đáy.

Chúng ta biết rằng trong từ trường hạt tích điện có vận tốc $\vec{v}_0$ vuông góc với đường sức $\vec{B}$ sẽ chuyển động theo quỹ đạo tròn bán kính $R = \frac{mv}{qB}$, với chu kỳ không phụ thuộc vào vận tốc $T = \frac{2\pi R}{v} = \frac{2\pi m}{qB}$. Do điện áp xoay chiều đặt giữa hai nửa hình trụ, trên khe chân không giữa hai điện cực đó điện trường có chiều thay đổi theo thời gian với chu kỳ T_0. Nếu chu kỳ T_0 bằng chu kỳ quay của hạt tích điện T thì có thể đạt được điều kiện là khi hạt đi từ trên xuống điện trường có dấu thích hợp để gia tốc nó làm cho nó chuyển động nhanh hơn với bán kính cong lớn hơn (nhưng chu kỳ không đổi) đến khi hạt đi qua khe hở từ dưới lên điện trường lại đổi dấu và gia tốc nó. Cứ như thế hạt sẽ được tăng tốc và mở rộng dần bán kính quỹ đạo. Cần lưu ý rằng trong buồng gia tốc chân không phải rất cao, áp suất khí phải rất thấp (cỡ $10^{-9} - 10^{-10}$mmHg) để tránh hạt tích điện bị va chạm vào các phân tử khí dư.

Bài tập chương I

(1-1) Tìm biểu thức và xác định độ nhạy của một ông tia điện tử của máy dao động ký có các thông số sau: Hiệu điện thế tăng tốc chùm điện tử là 900V,



Hình 1.21: *Cho bài tập (1-3).*

khoảng cách từ điểm giữa bản lái tia đến màn huỳnh quang bằng 20cm, chiều dài các bản lái tia bằng 2cm, khoảng cách giữa hai bản lái tia bằng $0,5$cm.

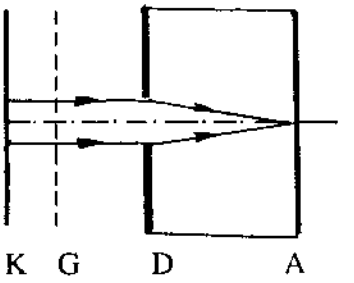
(1-2) Tìm biểu thức và xác định độ nhạy của một ống tia điện tử của máy dao động ký có các thông số sau: Hiệu điện thế tăng tốc chùm điện tử là 900V. Khoảng cách giữa tâm của vùng từ trường làm lệch tia điện tử đến màn huỳnh quang bằng 35cm. Hệ thống lái tia gồm hai cuộn dây Helmholtz hình tròn có bán kính $R = 2,5$cm đặt cách nhau một khoảng cách $2z = 5$cm. Số vòng dây trên mỗi cuộn là 200 vòng. Kích thước vùng tác dụng của từ trường là $2R$, trong đó từ trường được xem là đều.

Chú ý: cường độ từ trường trong cuộn Helmholtz được tính bởi công thức $H = \frac{i}{2}\frac{WR^2}{(R^2+z^2)^{3/2}}$. Độ từ thẩm của chân không $\mu_0 = 1,26 \cdot 10^{-6}$Tm/A; i là dòng điện trong cuộn dây, W số vòng dây của cả hai cuộn.

(1-3) Trên đường đi của chùm điện tử người ta đặt một hệ gồm hai lưới có dạng mặt cầu đồng tâm bán kính trung bình là $R = 3$cm. Điện thế lưới ngoài là $U_1 = 300$V, điện thế lưới trong là $U_2 = 500$V (so với catot phát xạ điện tử). Chứng minh rằng hệ hai lưới này có tính hội tụ đối với chùm điện tử. Tính tiêu cự của hệ. (Hình (1.21)).

(1-4) Một hệ quang học điện tử gồm một catot phẳng K, một lưới tăng tốc G, có điện thế U_G bằng 200V, một tấm ngăn (điapham) có điện thế U_D và một anot A được nối với điapham, hình (1.22). Xác định điện thế U_D (so với catot) để chùm điện tử song song hội tụ lên anot. Cho biết khoảng cách giữa lưới tăng tốc đến điapham là $0,5$cm, khoảng cách giữa điapham đến anot là $0,8$cm.

(1-5). Xét một hệ quang học điện tử như ở hình (1.17-b) gồm 1catot K,



Hình 1.22: *Cho bài tập (1-4).*

hai điapham D_1, D_2 và một anot A. Khoảng cách giữa các điện cực đó bằng nhau và bằng 1cm. Điện thế của điapham thứ 1 D_1 bằng điện thế anot A và bằng $U_1 = 100\text{V}$ (so với điện thế catot K). Xác định điện thế của điapham thứ 2 D_2 để cho chùm điện tử song song đi qua hệ hội tụ ở anot A.

Đáp số

(1-1) $S = 4,5 \cdot 10^{-4}\text{m/V}$;

(1-2) $S = 0,618\text{m/A}$;

(1-3) $f = 13,25 \cdot 10^{-2}\text{m}$;

(1-4) $U_D = 57\text{V}$;

(1-5) có hai nghiệm $U_2 = 432\text{V}$ và $U_2 = 28\text{V}$.

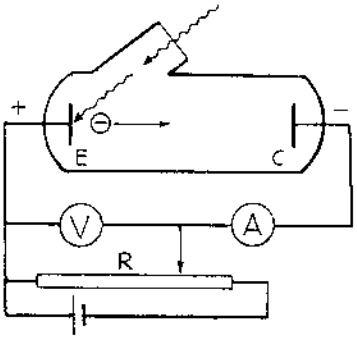
Chương 2

MỘT SỐ VẤN ĐỀ VẬT LÝ LƯỢNG TỬ

Ngày nay rất nhiều lĩnh vực khoa học, kỹ thuật, công nghệ cần có những hiểu biết về các hệ vi mô, trong đó các quy luật tương tác, chuyển động chỉ có thể giải thích được nhờ những kiến thức vật lý lượng tử. Vì vậy, các chuyên gia về điện tử, những người thiết kế, sử dụng những linh kiện bán dẫn, quang điện tử... rất cần thiết những hiểu biết tối thiểu về cơ sở của thuyết lượng tử, về phổ năng lượng của các hệ vi mô.

2.1 Lưỡng tính sóng hạt của các hệ vi mô

Từ lâu chúng ta đã quen biết tính chất sóng của ánh sáng qua các hiện tượng giao thoa, nhiễu xạ và cũng đã quen biết tính chất hạt của điện tử. Đầu thế kỷ thứ hai mươi, khoa học phát hiện ra những hiện tượng đối với ánh sáng (bức xạ điện từ) không thể giải thích được bằng tính chất sóng của nó, mà chỉ có thể giải thích được nếu giả thiết tia sáng là một chùm hạt. Ngược lại đối với chùm điện tử người ta cũng phát hiện ra những hiện tượng chứng tỏ chúng có tính chất sóng. Theo quan niệm cổ điển thì hạt là một đối tượng vật chất có vị trí, xung lượng, động năng, khối lượng, và điện tích, còn sóng lại có bước sóng, tần số, vận tốc, biên độ, cường độ, năng lượng. Hạt có thể định xứ ở một chỗ, còn sóng thì lại trải dài và lan rộng do đó choán một khoảng không gian rộng lớn. Một vấn đề quan trọng được đặt ra vào đầu thế kỷ 20 là phải xây dựng một lý thuyết có thể phản ánh được hai bản chất trái ngược nhau của một hệ vi mô: bản chất sóng và bản chất hạt, mà ta gọi là lưỡng tính sóng hạt.



Hình 2.1: *Sơ đồ thí nghiệm hiệu ứng quang điện.*

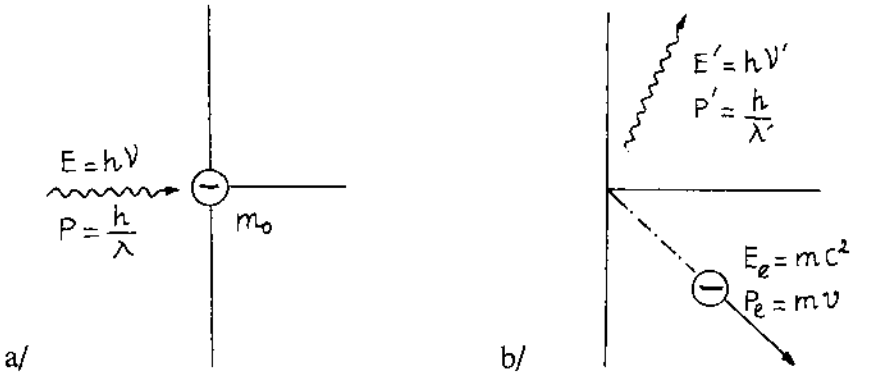
2.1.1 Lưỡng tính sóng-hạt của bức xạ điện từ. Cuối thế kỷ 17 đã xảy ra một cuộc tranh luận sôi nổi và kéo dài về bản chất của ánh sáng. Đầu tiên Newton đưa ra giả thuyết: ánh sáng là một dòng hạt chuyển động rất nhanh được phát ra từ một nguồn sáng và lan truyền trong không gian theo các định luật quang học. Ngược lại Huygens lại quan niệm: ánh sáng hoàn toàn có tính chất sóng. Sự phát minh ra các hiện tượng giao thoa và nhiễu xạ ánh sáng đã chứng minh rõ rệt bản chất sóng của ánh sáng và giả thuyết của Newton bị lãng quên dần. Đầu thế kỷ 20 sau khi phát minh ra các hiệu ứng quang điện, hiệu ứng Compton người ta mới quay lại thuyết hạt ánh sáng bởi vì các hiệu ứng này không thể giải thích bằng thuyết sóng ánh sáng. Chúng ta hãy xét hai hiện tượng điển hình phản ánh tính chất hạt của ánh sáng, bức xạ điện từ.

1. Hiệu ứng quang điện. Trong một thí nghiệm quang điện, người ta cho ánh sáng chiếu vào một bản kim loại đặt trong bình kín đã rút hết không khí, như ở hình (2.1). Từ bề mặt bản kim loại phát xạ ra các điện tử. Người ta có thể thay đổi tần số ν của ánh sáng, hiệu điện thế U giữa hai điện cực emitơ và colectơ (cực phát và cực góp) cũng như vật liệu làm cực phát.

Nếu các điện tử có đủ năng lượng để thắng được thế hãm thì chúng tới được colectơ và tạo thành dòng điện được ghi bằng ampe-kế A, muốn thế điện tử phải có động năng lớn hơn công cản do điện trường gây nên, nghĩa là

$$\frac{1}{2}mv^2 \geq eU$$

Nếu động năng của điện tử nhỏ hơn eU thì nó không tới được cực góp và không tham gia vào dòng điện.



Hình 2.2: *Sơ đồ tương tác photon-điện tử tự do: a- Trước tương tác, b- Sau tương tác.*

Người ta quan sát được các kết quả thực nghiệm sau:

1. Thực tế dòng điện được thiết lập gần như tức thời ngay cả khi cường độ ánh sáng rất yếu. Khoảng thời gian từ lúc ánh sáng tới đến khi quan sát được các điện tử vào cỡ $10^{-9}s$ và không phụ thuộc cường độ ánh sáng.

2. Khi giữ tần số và hiệu điện thế hãm không đổi dòng điện I tỷ lệ với cường độ bức xạ tới.

3. Khi giữ tần số và cường độ sáng không đổi, dòng điện I sẽ giảm khi U tăng và triệt tiêu khi U đạt tới một giá trị U_s nào đó không phụ thuộc vào cường độ sáng, gọi là hiệu điện thế hãm.

4. Đối với một vật liệu làm cực phát cho trước, hiệu điện thế hãm U_s phụ thuộc tuyến tính vào tần số theo biểu thức:

$$eU_s = h\nu - W_0 \tag{2.1}$$

W_0 phụ thuộc loại vật liệu, h là hằng số Planck.

5. Đối với mỗi vật liệu cho trước lại tồn tại một tần số ngưỡng ν_s sao cho nếu ánh sáng tới có tần số $\nu < \nu_s$ thì sẽ không bứt được electron ra khỏi vật liệu dù cường độ bức xạ có giá trị như thế nào.

Mẫu sóng ánh sáng chỉ có thể giải thích được một kết quả, đó là kết quả 2 về tính tỷ lệ giữa cường độ dòng điện và cường độ bức xạ tới. Thực vậy, cường độ bức xạ càng lớn nó càng mang nhiều năng lượng do đó số điện tử bị bứt ra càng lớn. Trái lại, bốn kết quả khác đều không thể giải thích được theo mẫu sóng ánh sáng.

Để giải thích kết quả thực nghiệm trên, Einstein đưa ra mẫu lượng tử ánh

sáng. Theo mẫu này, bức xạ điện từ được tạo thành từ các photon hay các lượng tử. Mỗi photon có một năng lượng E chỉ phụ thuộc vào tần số ν của bức xạ theo biểu thức

$$E = h\nu = h\frac{c}{\lambda} \tag{2.2}$$

Trong đó $h = 6,626 \cdot 10^{-34}$Js là hằng số Planck. Mỗi photon sẽ tương tác hoàn toàn hoặc không tương tác với vật chất nghĩa là nó hoặc có thể truyền toàn bộ năng lượng của mình hoặc không truyền một chút năng lượng nào cho vật chất.

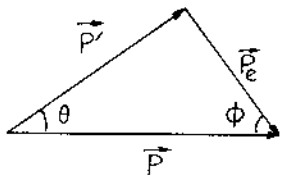
Theo quan điểm đó năng lượng do photon mang đến bị hấp thụ bởi chỉ một điện tử. Nếu điện tử bị bứt ra khỏi kim loại thì nó sẽ có động năng bằng hiệu số giữa năng lượng photon mà nó hấp thụ và năng lượng liên kết điện tử với bề mặt kim loại. Năng lượng liên kết điện tử với bề mặt W_0 có thể khác nhau. Tuy nhiên mỗi vật liệu được đặc trưng bởi một năng lượng liên kết cực tiểu. Năng lượng cần thiết để giải phóng các điện tử liên kết yếu nhất gọi là công thoát φ. Tất nhiên φ là nhỏ nhất trong các giá trị W_0. Trong những điều kiện đó, các điện tử sẽ được phát xạ với các động năng khác nhau, xác định bởi công thức $T = h\nu - W_0$. Như vậy T thay đổi từ không đến giá trị động năng cực đại $T_{\max} = h\nu - \varphi$. Điều này giải thích được kết quả thực nghiệm (3), hệ thức tuyến tính (4) và tần số ngưỡng (5), xác định bởi điều kiện $T = 0$

$$h\nu_s = W_{0\min} = \varphi$$

Photon có tần số thấp hơn ($\nu < \nu_s$) không thể bứt bất kỳ một điện tử nào ra khỏi kim loại dù cường độ bức xạ tới có giá trị lớn như thế nào.

Kết quả (1) cũng được giải thích khi coi sự hấp thụ photon là tức thời. Cuối cùng khi bức xạ càng mạnh thì mật độ photon càng lớn, do vậy số điện tử phát ra càng nhiều, từ đó giải thích được kết quả (2).

2. *Hiệu ứng Compton.* Mô hình sóng ánh sáng cho rằng khi một bức xạ điện từ bị tán xạ trên một hạt tích điện thì bức xạ tán xạ về khắp mọi phương phải có cùng tần số như bức xạ tới. Năm 1922 Arthur H. Compton đã chứng minh rằng nếu ta thừa nhận cách lý giải theo quan điểm lượng tử về bức xạ điện từ (mẫu hạt về sóng điện từ) thì tần số của bức xạ tán xạ phải nhỏ hơn tần số của bức xạ tới và phụ thuộc vào góc tán xạ. Sự phân tích của Compton thực ra dựa trên cơ sở coi hiện tượng tán xạ của bức xạ điện từ giống như một va chạm đàn hồi giữa một photon và một hạt tích điện tự do. Tuy chưa biết tường tận loại tương tác này nhưng khi áp dụng đinh luật bảo toàn xung



Hình 2.3: *Sơ đồ biểu diễn định luật bảo toàn xung lượng*

lượng, ta thấy photon tán xạ đã chịu một sự biến đổi bước sóng $\Delta\lambda$ cho bởi công thức

$$\Delta\lambda = \lambda' - \lambda = \frac{h}{m_0 c}(1 - \cos\theta) \tag{2.3}$$

m_0 -- khối lượng nghỉ của điện tử.

Đại lượng $\frac{h}{m_0 c}$ được gọi là bước sóng Compton, đối với điện tử $\frac{h}{m_0 c} = 0,0234$Å. Cần lưu ý rằng $\Delta\lambda$ chỉ phụ thuộc góc tán xạ θ mà không phụ thuộc năng lượng của photon.

Kết quả trên đây có thể tính được nếu xem tán xạ giữa photon và điện tử là va chạm đàn hồi giữa hai hạt, một hạt đang bay (photon) và một hạt đứng yên (điện tử) như va chạm giữa hai hòn bi, sơ đồ tương tác mô tả ở hình (2.2).

Photon được coi như một hạt có năng lượng $E = h\nu = \frac{hc}{\lambda}$ và xung lượng $p = h/\lambda$. Theo định luật bảo toàn năng lượng ta có thể viết năng lượng của hệ hai hạt trước và sau tương tác.

$$\frac{hc}{\lambda} + m_0 c^2 = \frac{hc}{\lambda'} + mc^2 \tag{2.4}$$

Chuyển vế và bình phương hai vế phương trình (2.4) ta có:

$$(mc^2)^2 = \frac{h^2c^2}{\lambda^2\lambda'^2}(\lambda^2 + \lambda'^2) - \frac{2h^2c^2}{\lambda\lambda'} + \frac{2hm_0c^3}{\lambda\lambda'}(\lambda' - \lambda) + (m_0c^2)^2 \tag{2.5}$$

Định luật bảo toàn xung lượng dẫn đến giản đồ biểu diễn trên hình (2.3). Vì $\vec{P}_e = \vec{P} - \vec{P'}$ nên suy ra:

$$\begin{aligned} \vec{P}_e\vec{P}_e &= \vec{P}_e^2 = P^2 + P'^2 - 2\vec{P}\vec{P'} = \\ &= \frac{h^2}{\lambda^2} + \frac{h^2}{\lambda'^2} - 2\frac{h^2}{\lambda\lambda'}\cos\theta \end{aligned}$$

$$P_e^2 = \frac{h^2}{\lambda^2\lambda'^2}\left[\lambda'^2 + \lambda^2 - 2\lambda\lambda'\cos\theta\right] \tag{2.6}$$

Ta lại có công thức liên hệ giữa năng lượng và xung lượng như (1.73):

$$(mc^2)^2 = (P_e c)^2 + (m_0c^2)^2 \tag{2.7}$$

Thay (2.5) và (2.6) vào (2.7) ta có:

$$\begin{aligned}&\frac{h^2c^2}{\lambda^2\lambda'^2}(\lambda^2+\lambda'^2) - \frac{2h^2c^2}{\lambda\lambda'} + \frac{2hm_0c^3}{\lambda\lambda'}(\lambda'-\lambda) + (m_0c^2)^2\\ &= \frac{h^2c^2}{\lambda^2\lambda'^2}(\lambda'^2+\lambda^2-2\lambda\lambda'\cos\theta) + (m_0c^2)^2\end{aligned}$$

Do đó

$$\frac{2hm_0c^3}{\lambda\lambda'}(\lambda'-\lambda) = \frac{2h^2c^2}{\lambda'\lambda} - 2\frac{h^2c^2}{\lambda\lambda'}\cos\theta$$

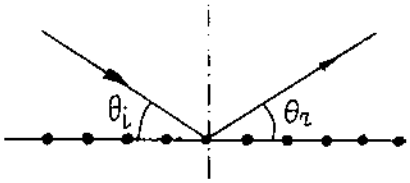
hay là

$$\lambda' - \lambda = \Delta\lambda = \frac{h}{m_0c}(1-\cos\theta)$$

Thực nghiệm về tán xạ tia Rơnghen trên điện tử tự do đã chứng minh những tính toán trên đây là đúng.

2.1.2 Lưỡng tính sóng-hạt của vật chất. Năm 1924 Luis De Broglie đưa ra giả thuyết: nếu bức xạ điện từ hoạt động lúc như một sóng, lúc như một hạt thì có lẽ những đối tượng vật chất khác như electron, thường được xem là những hạt, cũng có khi hoạt động như một sóng. Nói cách khác, De Broglie đưa ra giả thuyết là nếu có các hạt nào đó đi xuyên qua các khe rộng vào cỡ bước sóng kết hợp với chúng thì hạt đó sẽ bị nhiễu xạ giống hệt như hiện tượng nhiễu xạ qua một khe của các photon truyền qua. Đối với photon, ta có hai biểu thức, $\nu = E/h$ và $\lambda = h/p$, trong đó vế trái mô tả các đặc trưng sóng của photon (tần số, bước sóng), còn vế phải lại thể hiện các đặc trưng hạt (năng lượng, động lượng). Mối liên hệ sóng hạt được biểu thị qua hằng số Planck. Dựa vào tính chất đối xứng của tự nhiên De Broglie đưa ra giả thuyết là các bước sóng kết hợp với hạt phải thoả mãn các hệ thức giống như các hệ thức tương ứng của photon. De Broglie đã phát biểu thành tiên đề sau: *Mỗi hạt đều kết hợp với một sóng mà bước sóng được xác định theo hệ thức*

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{mv} \tag{2.8}$$



Hình 2.4: *Phản xạ trên mặt phẳng Bragg*

Tuy nhiên, giữa photon và các hạt khác, có sự khác nhau trong cách thức kết hợp các tính chất sóng và hạt. Vì đối với photon, ta có hệ thức $\lambda\nu = c$, nên chỉ cần một hệ thức là có thể suy ra bước sóng và tần số từ các tính chất hạt là năng lượng và xung lượng. Còn đối với các hạt khác thì phải có hai hệ thức để suy ra bước sóng ($\lambda = h/p$) và tần số ($\nu = E/h$) tương ứng với chúng. Dưới đây chúng ta xét hai thực nghiệm minh chứng cho giả thuyết De Broglie.

1. Định luật nhiễu xạ tia Rơnghen của Bragg. Năm 1912 Max von Laue đã nêu vấn đề có thể dùng các tinh thể (coi như gồm các nguyên tử sắp xếp đều đặn theo một trật tự nào đó) để làm cách tử nhiễu xạ đối với tia Rơnghen. Thật vậy, các tia Rơnghen là bức xạ điện từ có bước sóng khoảng 1Å tương đương khoảng cách giữa các nguyên tử trong tinh thể.

Năm 1913, William Bragg đã xây dựng được lý thuyết nhiễu xạ tia Rơnghen. Ông đã chứng tỏ rằng mỗi mặt phẳng nguyên tử trong tinh thể, gọi là mặt phẳng Bragg, đều phản xạ bức xạ tới giống hệt một gương phản xạ ánh sáng như mô tả ở hình (2.4).

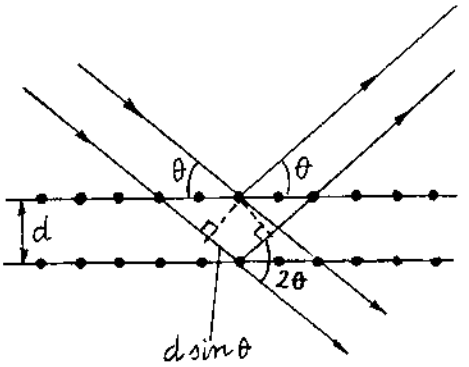
Nếu ta xét các tia phản xạ từ các mặt phẳng Bragg song song và cách đều nhau một khoảng d như ở hình (2.5) thì các tia phản xạ đó có thể cho cực đại giao thoa.

Định luật Bragg phát biểu: điều kiện để có cực đại giao thoa là hiệu đường đi $2d\sin\theta$ giữa hai tia kế tiếp nhau phải bằng một số nguyên lần bước sóng.

$$2d\sin\theta = n\lambda \tag{2.9}$$

Nếu biết n và d thì có thể xác định bước sóng của bức xạ tới bằng cách đo góc 2θ giữa các phương của tia tới và tia phản xạ, như đã chỉ ra ở hình (2.5).

Trong bất kỳ tinh thể nào người ta đều có thể tìm được nhiều họ mặt Bragg khác nhau, mỗi họ có một khoảng cách d riêng biệt. Nếu ta có một chùm tia Rơnghen đi xuyên qua một vật liệu đa tinh thể, bột tinh thể, gồm nhiều tinh



Hình 2.5: *Sơ đồ giải thích định luật Bragg*

thể con định hướng hỗn loạn và đặt một phim ảnh ở phía sau thì ta sẽ thấy một ảnh nhiễu xạ gồm các vòng tròn đồng tâm. Mỗi vòng tròn đồng tâm tương ứng với một bậc nhiễu xạ xác định bởi một họ mặt Bragg riêng biệt.

2. *Thí nghiệm nhiễu xạ điện tử.* Lần đầu tiên ở phòng thí nghiệm Bell thuộc công ty điện thoại Hoa kỳ, Davisson và Germer, năm 1927 đã thực hiện thành công các thí nghiệm nhiễu xạ điện tử. Hai ông cho một chùm điện tử có năng lượng $54eV$ đập vào một đơn tinh thể Ni và nghiên cứu sự phụ thuộc vào góc phản xạ của cường độ chùm điện tử phản xạ. Các ông đã thu được những cực đại, nghĩa là một bức tranh nhiễu xạ điện tử.

Bước sóng tính theo kết quả thực nghiệm về nhiễu xạ điện tử rất phù hợp với giá trị của bước sóng De Broglie.

G.P. Thomson đã nghiên cứu sự truyền điện tử qua một màng mỏng kim loại (đa tinh thể). Trong thí nghiệm này nếu điện tử xử sự như các hạt thì ta phải thấy một ảnh mờ do chùm điện tử ló gây ra. Nhưng thay vào đó Thomson đã thu được một ảnh nhiễu xạ gồm những vòng tròn đồng tâm mà chỉ có thể giải thích được nếu coi điện tử xử sự như các sóng. Do đó thí nghiệm Thomson cũng lại nghiệm đúng giả thuyết De Broglie.

Sau đó, việc nghiên cứu hiện tượng nhiễu xạ nơtron năng lượng thấp lại một lần nữa khẳng định sự đúng đắn của giả thuyết De Broglie. Đối với điện tử ta có:

$$\lambda_e = \frac{h}{mv} = \frac{h}{m\sqrt{\frac{2eU}{m}}} = \frac{h}{\sqrt{2meU}} \cong 12,2\sqrt{U}\text{Å}$$

Nếu điện tử được tăng tốc bằng hiệu điện thế $1V$ thì nó có bước sóng $\lambda_e = 12,2$Å, với U cỡ $150V$, $\lambda_e \cong 1$Å, cùng bậc với bước sóng Ronghen.

Về mặt nguyên tắc, lưỡng tính sóng-hạt cũng phải đặc trưng cho cả vật vĩ mô. Tuy nhiên vì λ tỷ lệ nghịch với khối lượng, nên bước sóng của các vật rất nhỏ và tính chất sóng của các vật không thể hiện.

Trong thí nghiệm nhiễu xạ điện tử trên tinh thể Ni, bước sóng của điện tử có giá trị cỡ 1Å cùng cỡ với khoảng cách giữa các nguyên tử. Nếu điện tử được gia tốc đến năng lượng 10^9eV bước sóng λ_e của nó cỡ $\lambda_e = 10^{-13}$m. Nếu cho các điện tử này tán xạ lên bề mặt Ni thì tính chất sóng của nó không được thể hiện rõ ràng. Tuy nhiên các điện tử đó sẽ thể hiện tính chất sóng khi chúng tán xạ (tương tác) trên các đối tượng có kích thước nhỏ hơn, ví dụ như hạt nhân nguyên tử (cỡ 10^{-13}m).

Theo mẫu Bohr về nguyên tử, các điện tử trong nguyên tử chuyển động trong trường của hạt nhân với vận tốc cỡ $2,2 \cdot 10^6$m/s, ứng với bước sóng De Broglie của điện tử $\lambda_e = 3,310^{-10}$m. Trong khi đó bán kính quỹ đạo của nguyên tử $a_0 = 0,53 \cdot 10^{-10}$m. Vì lẽ đó khi xét chuyển động của điện tử trong nguyên tử ta phải dùng cơ học sóng, nghĩa là cơ học lượng tử.

2.2 Các tính chất của sóng De Broglie

2.2.1 Hàm sóng phẳng De Broglie. Trước khi có giả thuyết của De Broglie người ta chỉ biết đến hai loại sóng là sóng cơ (sóng đàn hồi) và sóng điện từ. Để mô tả các sóng này người ta sử dụng các hàm sóng. Hàm sóng biểu diễn sự biến thiên của một đại lượng vật lý theo thời gian và không gian. Trong sóng cơ đại lượng vật lý đó là độ lệch (li độ) khỏi vị trí cân bằng của một phần tử vật chất, trong sóng điện từ đại lượng vật lý đó là vectơ cường độ điện trường, vectơ cường độ từ trường. Biểu thức hàm sóng có dạng:

$$D = A\cos(\omega t - \vec{K}\vec{r}) \tag{2.10}$$

trong đó D là đại lượng vật lý biến đổi như đã nói ở trên, A là biên độ, là giá trị cực đại của D, ω là tần số góc, $\vec{K}$ là vectơ sóng, có phương và chiều trùng với phương và chiều truyền sóng, có độ lớn bằng $K = \frac{2\pi}{\lambda}$ gọi là số sóng, λ là bước sóng. Nếu sóng truyền theo trục x ta có thể viết

$$D = A\cos(\omega t - \frac{2\pi}{\lambda}x) \tag{2.11}$$

hay $D = A\cos(\frac{2\pi}{T}t - \frac{2\pi}{\lambda}x)$.

Từ đây ta thấy rất rõ: hàm sóng mô tả quá trình thay đổi đại lượng D, tuần hoàn theo thời gian với chu kỳ bằng T và tuần hoàn theo không gian với chu kỳ không gian bằng bước sóng λ.

Nếu sóng truyền theo một hướng bất kỳ trong không gian thì vectơ sóng $\vec{K}$ được biểu diễn bằng ba thành phần (K_x, K_y, K_z) và (2.10) có thể viết lại:

$$D = A\cos\left[\omega t - (K_x x + K_y y + K_z z)\right], \tag{2.12}$$

x, y, z là ba thành phần của vectơ tọa độ $\vec{r}$ và $K_x = \frac{2\pi}{\lambda}\vec{X}$; $K_y = \frac{2\pi}{\lambda}\vec{Y}$; $K_z = \frac{2\pi}{\lambda}\vec{Z}$; $\vec{X}, \vec{Y}, \vec{Z}$ là ba vectơ đơn vị của trục tọa độ x, y, z. Hàm sóng cũng có thể viết dưới dạng hàm sin thay vì viết dưới dạng hàm cos.

Để tiện lợi trong việc tính toán, nhiều khi ngươi ta biểu diễn hàm sóng dưới dạng hàm mũ:

$$D = Ae^{-i(\omega t - \vec{K}\vec{r})} \tag{2.13}$$

Vì

$$Ae^{-i\varphi} = A(\cos\varphi - i\sin\varphi) \tag{2.14}$$

nên hàm sóng dạng (2.10) chẳng qua là phần thực của hàm (2.13).

De Broglie giả thiết rằng chuyển động của một vi hạt tự do có thể được mô tả (hay là được kết hợp) bằng một hàm sóng phẳng đơn sắc có dạng như (2.10) hay (2.13):

$$\Psi(\vec{r}, t) = Ae^{-i(\omega t - \vec{K}\vec{r})} \tag{2.15}$$

trong đó $\omega = \frac{E}{\hbar}$ với $\hbar = h/2\pi$, $E = h\nu$, $\nu = \frac{\omega}{2\pi}$

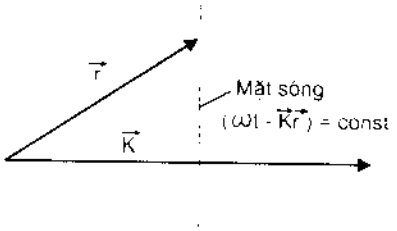
$$K = \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{P}{\hbar} \qquad \text{vì} \qquad P = \frac{h}{\lambda} \tag{2.16}$$

Thay các đại lượng ở (2.16) vào (2.15) ta có:

$$\Psi(\vec{r}, t) = Ae^{-\frac{i}{\hbar}(Et - \vec{p}\vec{r})} \tag{2.17}$$

Như vậy hàm sóng (2.17) được đặc trưng bởi năng lượng hạt E và vectơ xung lượng $\vec{P}$ của hạt, vectơ $\vec{P}$ có ba thành phần P_x, P_y, P_z và liên hệ với vectơ sóng $\vec{K}$ bằng (2.16).

Hàm sóng (2.15) là một hàm sóng phẳng vì mặt sóng, nơi mà sóng có pha như nhau, là một mặt phẳng vuông góc với phương truyền sóng như biểu diễn trên hình (2.6). Thật vậy, tại một thời điểm t cho trước các điểm có pha φ bằng nhau phải nằm trên mặt phẳng vuông góc với $\vec{K}$, vì trên mặt phẳng đó tất cả các điểm đều thoả mãn $\vec{K}\vec{r} = \text{const}$, nên $\varphi = (\omega t - \vec{K}\vec{r}) = \text{const}$.



Hình 2.6: *Mặt sóng của hàm sóng phẳng.*

Hàm sóng (2.15) là một hàm đơn sắc bởi vì nó được đặc trưng bởi một tần số $\nu = \frac{\omega}{2\pi} = \frac{E}{h}$ nhất định.

Sóng De Broglie được gọi là sóng vật chất, nó cũng lan truyền giao thoa, nhiễu xạ... như một sóng phẳng. Bây giờ chúng ta sẽ khảo sát một số những tính chất đặc trưng của sóng De Broglie.

2.2.2 Ý nghĩa xác suất của sóng De Broglie. Vấn đề đặt ra bây giờ là tìm hiểu để biết điều gì sẽ xảy ra khi một dạng vật chất (như điện tử chẳng hạn) lại biểu hiện các tính chất sóng. Nói cách khác ta phải tìm hiểu ý nghĩa của hàm sóng De Broglie.

1. Ý nghĩa xác suất của bức xạ điện từ. Giả sử có ảnh giao thoa qua hai khe nằm sát nhau của ánh sáng (bức xạ điện từ). Theo quan điểm sóng, thì cường độ sáng I là năng lượng trên một đơn vị diện tích, một đơn vị thời gian tại một điểm trên màn hình có dạng:

$$I = \epsilon_0 c \mathcal{E}^2, \tag{2.18}$$

trong đó $\mathcal{E}$ là cường độ điện trường tại điểm đó, ϵ_0 là hằng số điện, c vận tốc ánh sáng.

Mặt khác theo quan điểm hạt thì cường độ bằng:

$$I = h\nu N \tag{2.19}$$

trong đó $h\nu$ là năng lượng một photon và N là thông lượng photon (số photon trên một đơn vị diện tích, một đơn vị thời gian) tới điểm đó.

Ta không có cách nào để đoán trước nơi mà một photon cho trước sẽ rơi vào để sinh ra một chớp sáng. Nhưng nếu ta xét ảnh giao thoa gồm các vân sáng vân tối xen kẽ nhau thì mỗi photon sẽ có xác suất lớn để rơi vào chỗ vân sáng và có xác suất bằng không để rơi vào chỗ vân tối. Như vậy ta có thể nói rằng thông lượng photon tới mỗi điểm trên màn hình cho ta số đo xác suất để tìm được một photon ở lân cận điểm đó.

Vì $I = \epsilon_0 c\mathcal{E}^2 = h\nu N$ nên ta suy ra $N \sim \mathcal{E}^2$. Theo quan điểm lượng tử thì đại lượng dao động (ở đây là điện trường) phải là một hàm mà bình phương của nó cho ta xác suất tìm thấy photon tại một điểm cho trước.

2. *Ý nghĩa xác suất của sóng vật chất.* Ảnh giao thoa ánh sáng nói trên cũng có thể là ảnh giao thoa của các sóng vật chất. Khi đó, ý nghĩa xác suất dựa trên lưỡng tính sóng-hạt của ánh sáng được mở rộng cho lưỡng tính sóng hạt của vật chất. Thành thử sóng kết hợp với điện tử cho phép giải thích đúng ảnh nhiễu xạ điện tử, thì cũng chính sóng đó được biểu diễn bởi hàm sóng mà giá trị tuyệt đối bình phương $|\Psi|^2$ cho ta xác suất tìm thấy một điện tử tại một điểm cho trước. Muốn kết hợp các cách biểu diễn sóng và hạt, ta phải từ bỏ ý nghĩ cho rằng mỗi hạt cho trước phải được định xứ rõ ràng phải có quỹ đạo xác định, ta chỉ được phép nói về xác suất tìm hạt tại một điểm xác định ở một thời điểm đã cho.

Thông thường ta ký hiệu hàm sóng De Broglie, hàm sóng vật chất, bằng Ψ. Sóng De Broglie Ψ của một photon là một sóng điện từ, còn đối với một electron hay một hạt vật chất khác thì Ψ là một sóng De Broglie phi điện từ.

2.2.3 Nhóm sóng. Sự lan truyền của sóng De Broglie. Ta xét một sóng đơn sắc lan truyền dọc theo trục x

$$\Psi(x,t) = Ae^{-i(\omega t - kx)} \tag{2.20}$$

Đại lượng $\varphi = (\omega t - kx)$ gọi là pha của sóng. Giả sử ở thời điểm t tại một điểm x nào đó pha của sóng có giá trị là α , tọa độ của điểm này được xác định từ phương trình $(\omega t - Kx) = \alpha$. Theo sự biến thiên của thời gian điểm có pha là α phải dịch chuyển với một vận tốc là v_f xác định từ điệu kiện không đổi của pha

$$\omega t - Kx = \text{const} \tag{2.21}$$

Lấy vi phân biểu thức (2.21) ta có:

$$\omega - K\frac{dx}{dt} = \frac{d\alpha}{dt} = 0 \quad \longrightarrow \frac{dx}{dt} = \frac{\omega}{K}$$

Từ ký hiệu v_f trên đây ta có vận tốc pha là:

$$v_f = \frac{\omega}{K} \tag{2.22}$$

Áp dụng tính toán trên đây với sóng De Broglie ta có

$$v_f = \frac{\omega}{K} = \frac{\hbar\omega}{\hbar K} = \frac{E}{p} = \frac{mc^2}{mv} = \frac{c^2}{v} \tag{2.23}$$

Theo thuyết tương đối, vận tốc truyền tín hiệu, ở đây là vận tốc của hạt v, không thể lớn hơn vận tốc ánh sáng c, do đó vận tốc pha v_f đối với hạt tương đối tính lớn hơn vận tốc ánh sáng. Điều này chứng tỏ vận tốc pha v_f của sóng De Broglie không thể có ý nghĩa vật lý trực tiếp, nó không đặc trưng cho tốc độ truyền hạt, truyền năng lượng hay truyền tín hiệu.

Cần lưu ý rằng đối với hạt cổ điển chuyển động với vận tốc $v \ll c$, thì vận tốc pha của sóng De Broglie sẽ là

$$v_f = \frac{E}{p} = \frac{mv^2}{2mv} = \frac{v}{2}$$

Còn đối với photon ta có

$$v_f = \frac{E}{p} = \frac{mc^2}{mc} = c$$

Như vậy vận tốc pha của sóng De Broglie có thể lớn hơn, bằng hoặc nhỏ hơn vận tốc ánh sáng và không đồng nhất với tốc độ truyền hạt, truyền năng lượng, truyền tín hiệu.

Vấn đề đặt ra là làm thế nào để có thể mô tả được đồng thời tính chất sóng và tính chất hạt của hệ vi mô. Cụ thể ta cần xem những sóng nào (dĩ nhiên không phải là sóng đơn sắc) có thể đặt tương ứng với các hạt quan sát được trong thực tế, ví dụ điện tử trong ống tia điện tử chẳng hạn.

Giả sử trong thí nghiệm ta xác định được vị trí của hạt tại thời điểm t_0 nào đó. Sai số của phép đo tọa độ là Δx, nghĩa là ta biết nó nằm giữa x_0 và $x_0 + \Delta x$. Theo quan điểm của cơ học lượng tử, điều này có nghĩa là hàm sóng đặc trưng cho hạt sẽ bằng không trong toàn bộ không gian, trừ miền nằm giữa x_0 và $x_0 + \Delta x$. Rõ ràng trong trường hợp này hàm sóng không thể là một hàm đơn sắc De Broglie mà là một tổ hợp các hàm sóng tương tự như vậy.

Tổ hợp các sóng đơn sắc có số sóng chỉ khác nhau rất ít quanh một giá trị trung bình K_0 được gọi là bó sóng, hay nhóm sóng và có thể biểu diễn dưới

dạng một tích phân

$$\Psi(x,t) = \int_{K_0-\Delta K}^{K_0+\Delta K} A(K)e^{-i(\omega t - Kx)}dK \tag{2.24}$$

Như vậy trạng thái chuyển động của hạt được xác định bởi sự chồng chất của nhiều sóng đơn sắc có số sóng K gần nhau và có pha, biên độ khác nhau.

Do kết quả của sự chồng chất, giao thoa của các sóng đơn sắc thành phần, hàm sóng $\Psi(x,t)$ có biên độ cực đại tại giá trị x_0 gọi là tâm sóng và giảm dần khi đi ra xa giá trị đó. Trên hình (2.7) biểu diễn sự tổng hợp của ba sóng khác nhau $(\lambda_0 - \Delta\lambda), \lambda_0, (\lambda_0 + \Delta\lambda)$. Trong thực tế số các sóng đơn sắc là rất lớn và bó sóng hay nhóm sóng có một "kích thước" Δx nào đó khác 0. Lý thuyết về các quá trình sóng có thể chứng minh rằng có sự liên quan giữa "kích thước" nhóm sóng và gia số ΔK, chúng liên hệ với nhau bởi: $\Delta K \Delta x = 1$. Vậy chuyển động của một hạt được gắn với sự lan truyền của một nhóm sóng có biên độ cực đại ở một điểm gọi là tâm sóng.

Vì vận tốc pha của các sóng đơn sắc trong nhóm sóng khác nhau nên các sóng này lan truyền đến một điểm bất kỳ nào đó với những pha nói chung là khác nhau. Sóng tổng hợp tại điểm đó phụ thuộc vào quan hệ pha giữa các sóng. Nếu các pha gần hoàn toàn ngược nhau thì sóng tổng hợp là cực tiểu, ngược lại, nếu các pha ở điểm đó gần trùng nhau thì sóng tổng hợp sẽ cực đại, điểm này chính là tâm của nhóm sóng, năng lượng của sóng hầu như được tập trung ở tâm sóng.

Vì quan hệ giữa các sóng không ngừng biến đổi theo thời gian nên tâm của nhóm sóng sẽ di chuyển (kèm theo năng lượng của sóng cũng di chuyển) với một vận tốc nào đó. Vận tốc này được gọi là vận tốc nhóm.

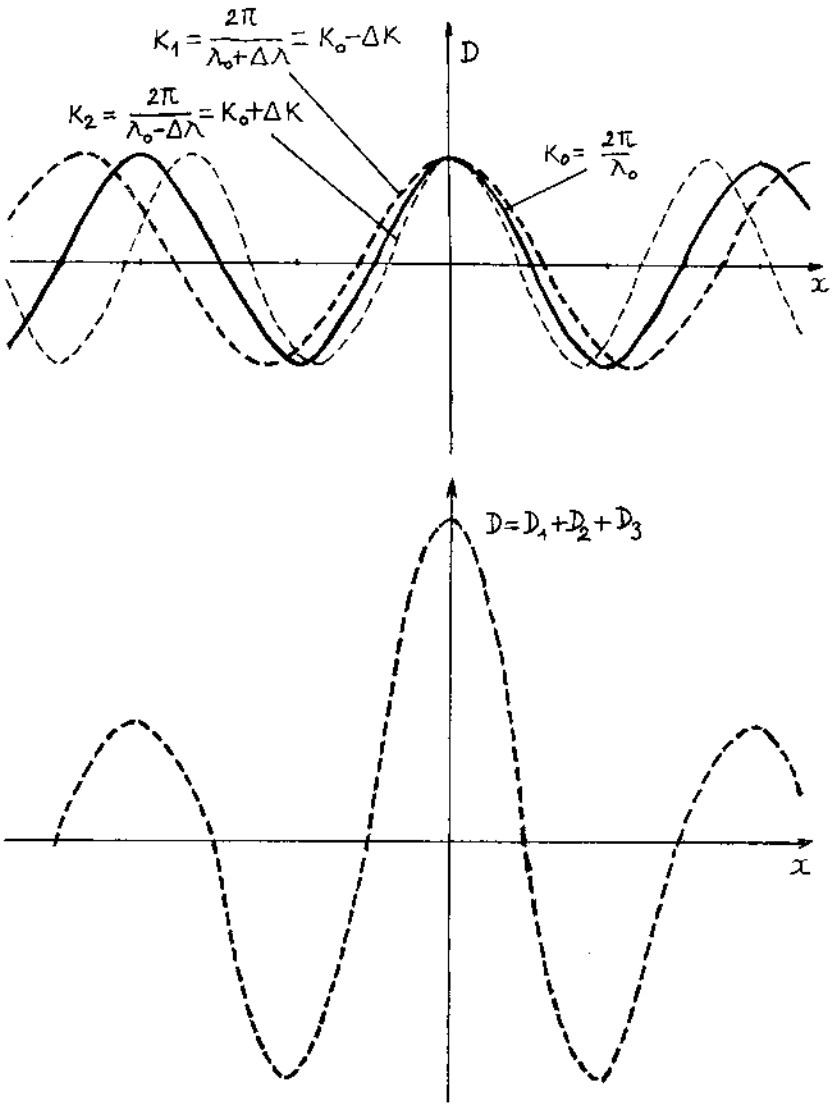
Vận tốc nhóm được xác định từ điều kiện là tại tâm sóng pha của các sóng trùng nhau mà không phụ thuộc vào số sóng K.

Vị trí của điểm mà tại đó pha của các sóng trùng nhau và không đổi khi K thay đổi phải đáp ứng điều kiện sau

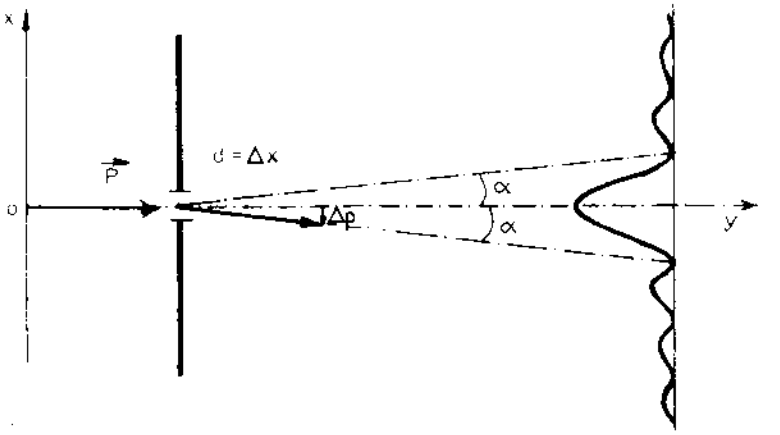
$$\frac{d\alpha}{dK} = 0 \quad \longrightarrow \quad \frac{d(\omega t - Kx)}{dK} = 0 \tag{2.25}$$

Từ đó ta có biểu thức của các vị trí tâm sóng theo thời gian

$$x = \frac{d\omega}{dK}t = v_g t$$



Hình 2.7: *Sơ đồ biểu diễn sự tạo thành nhóm sóng.*



Hình 2.8: *Sơ đồ giải thích nguyên lý bất định Heisenberg*

Vậy vận tốc nhóm v_g được xác định bằng công thức

$$v_g = \frac{d\omega}{dK} \tag{2.26}$$

Ta có thể tính được vận tốc của một hạt trong trường hợp không tương đối tính:

$$v_g = \frac{d\omega}{dK} = \frac{d(\hbar\omega)}{d(\hbar K)} = \frac{dE}{dp} = \frac{d(\frac{p^2}{2m})}{dp} = \frac{p}{m} = v$$

2.3 Nguyên lý bất định Heisenberg

2.3.1 Hệ thức bất định về tọa độ và xung lượng của hạt. Giả sử ta muốn xác định chính xác vị trí của một đối tượng vật chất như điện tử chẳng hạn, thì ta phải thực hiện một thí nghiệm nào đó: ví dụ ta có thể đặt một khe trên lộ trình của hạt chuyển động theo phương y, nghĩa là với xung lượng $\vec{P} = P_y$ và với năng lượng cho trước như ở hình (2.8). Nếu hạt để lại một dấu vết trên màn chắn đặt sau khe thì ta biết chắc hạt đã qua khe. Khi đó ta xác định được vị trí của hạt trên trục x với sai số bằng độ rộng d của khe. Nói cách khác ta đã xác định vị trí của hạt tại thời điểm (và cả trước thời điểm) hạt qua khe với độ bất định $\Delta x = d$. Khe càng hẹp, độ bất định Δx càng nhỏ và vị trí của hạt theo trục xđược xác định càng chính xác.

Do bản chất của vật chất, ta biết rõ hạt sẽ bị nhiễu xạ khi đi qua khe. Ta không thể đoán trước hạt sẽ rơi vào chỗ nào trên màn chắn, nhưng sau khi hạt đã rơi vào một điểm nào đó trên màn chắn thì ta biết chắc hạt đã qua khe và có sự thay đổi của xung lượng của hạt.

Hiện tượng nhiễu xạ đã tác động đến xung lượng của hạt. Khi hạt chưa qua khe ta hoàn toàn không biết vị trí của nó nhưng lại biết xung lượng của hạt, cả về độ lớn (vì đã biết năng lượng hạt) và phương (vuông góc với khe). Khi hạt qua khe thì ta có thể xác định được vị trí của hạt nhưng thành phần xung lượng P_x theo phương x của hạt trở nên khác không vì hạt chuyển động lệch với phương ban đầu về một điểm nào đó trên ảnh nhiễu xạ. Vì ta không biết hạt rơi vào đâu trên màn hình nên ta có một độ bất định tương ứng ΔP_x về thành phần xung lượng theo phương x. Theo lý thuyết nhiễu xạ thì vị trí của vân tối thứ nhất được xác định theo công thức $\sin\alpha = \frac{\lambda}{d}$. Mặc dầu ta không thể biết chính xác điểm rơi trên màn nhưng vị trí có xác suất lớn nhất vẫn ở lân cận vùng trung tâm ảnh nhiễu xạ. Vì vậy ta có thể coi P_x nằm trong khoảng từ 0 đến $P\sin\alpha$, nghĩa là $\Delta P_x = p\sin\alpha = p\frac{\lambda}{d}$. $\Delta P_x = \frac{h}{\lambda}\frac{\lambda}{d} = \frac{h}{d}$.

Để giảm độ bất định về thành phần P_x ta có thể mở rộng khe d, nhưng khi đó lại tăng độ bất định Δx.

Ta có hệ thức

$$\Delta x \Delta P_x = h$$

Như vậy cùng một thí nghiệm ta không thể về nguyên tắc làm nhỏ đồng thời độ bất định về vị trí Δx và về thành phần xung lượng theo phương x, ΔP_x.

Ví dụ trên đã minh họa nguyên lý Heisenberg phát biểu năm 1927, gọi là nguyên lý bất định Heisenberg. Cơ lượng tử đã chứng minh rằng đối với mọi kiểu thí nghiệm các độ bất định Δx và ΔP_x liên hệ với nhau theo hệ thức

$$\Delta x \Delta P_x \geq \frac{h}{2\pi}$$

Cần nhấn mạnh rằng hệ thức này có hiệu lực cả trong lý thuyết, nó có thể được suy ra từ hệ thức $\Delta x \Delta K \cong 1$ đã nói ở trên, trong đó Δx là kích thước nhóm sóng , ΔK là gia số của số sóng trong nhóm sóng.

2.3.2 Hệ thức bất định về năng lượng và thời gian. Ta có thể thiết lập hệ thức bất định Heisenberg cho nhiều cặp đại lượng khác nhau. Ví dụ muốn đo năng lượng E của một vật ta phải tiến hành trong một thời gian Δt. Như vậy ta có thể chứng minh rằng giữa độ bất định về năng lượng và độ bất định về

thời gian có hệ thức

$$\Delta E \Delta t \geq \frac{h}{2\pi}$$

Kết quả là chỉ có thể biết năng lượng của một vật với độ chính xác cao nhất ($\Delta E = 0$) nếu phép đo được tiến hành trong khoảng thời gian vô hạn ($\Delta t = \infty$).

Nguyên lý bất định này kéo theo một hệ quả quan trọng là các hệ lượng tử như nguyên tử có thể tồn tại ở một trạng thái trong một thời gian rất ngắn, gọi là thời gian sống τ. Muốn đo năng lượng của hệ thì phải đo trước khi trạng thái đó bị phân rã. Như vậy độ bất định của hệ về năng lượng sẽ là

$$\Delta E = \frac{h}{2\pi\tau} \qquad \text{và} \qquad \Delta E \cdot \tau \geq \frac{h}{2\pi}$$

2.3.3 Nguyên lý bổ sung. Nguyên lý bất định đã khẳng định là trong cùng một thí nghiệm không thể đồng thời đo được các giá trị của hai đại lượng gọi là liên hợp (như P_x với x, E với t) với độ chính xác tùy ý. Từ đó suy ra rằng các tính chất sóng và hạt của vật chất không thể xác định đồng thời trong cùng một thí nghiệm.

Ví dụ, nếu ta làm thí nghiệm để đo các đặc trưng hạt của một đối tượng thì ở đây nhất thiết phải có Δx và Δt bằng không vì theo định nghĩa một hạt có thể được định xứ với độ chính xác cao vô hạn ở bất kỳ thời điểm nào. Còn xung lượng và năng lượng là các đặc trưng sóng ($\lambda = h/p, \nu = E/h$) thì theo nguyên lý bất định, hoàn toàn không biết.

Như vậy khi các tính chất hạt xuất hiện thì các tính chất sóng bị loại trừ.

Việc không thể quan sát được đồng thời các tính chất hạt và tính chất sóng của vật chất đã minh họa một nguyên lý do Niels Bohr đưa ra vào năm 1928 mà người ta gọi là nguyên lý bổ sung.

Các tính chất sóng và hạt bổ sung cho nhau theo ý nghĩa là cả hai mô hình sóng, hạt đều cần thiết để ta hiểu được đầy đủ các tính chất của vật chất tuy vẫn không thể quan sát được đồng thời các đặc trưng sóng và hạt.

2.4 Phương trình cơ bản của cơ học lượng tử. Phương trình Schrödinger

Để mô tả một cách định lượng trạng thái chuyển động của các đối tượng vi mô có lưỡng tính sóng hạt ta phải thiết lập một phương trình thể hiện được tính chất đó, giống như phương trình Newton đối với các vật vĩ mô hay như phương trình Maxwell đối với sóng điện từ.

Phương trình cần tìm phải đồng thời thoả mãn giả thuyết De Broglie và sự phụ thuộc giữa năng lượng và tần số thông qua hằng số Planck.

Ta xét một hạt vi mô có khối lượng m chuyển động với vận tốc $v \ll c$ trong một trường lực $U = U(x, y, z, t)$. Tính chất hạt có thể được đặc trưng bằng hai đại lượng E và $\vec{P}$

$$E = T + U \qquad \text{với} \qquad T = \frac{1}{2m}(P_x^2 + P_y^2 + P_z^2)$$

Tính chất sóng được đặc trưng bằng bước sóng và tần số liên hệ với các đại lượng trên bằng các công thức:

$$E = h\nu; \quad p = \frac{h}{\lambda}$$

2.4.1 Hạt tự do. Đây là trường hợp hạt chuyển động trong không gian $U = 0$. Hàm sóng De Broglie có dạng:

$$\Psi(\vec{r}, t) = A \cdot e^{-\frac{i}{\hbar}(Et - \vec{p}\vec{r})} = Ae^{-\frac{i}{\hbar}(Et - p_x x - p_y y - p_z z)} \tag{2.27}$$

Lấy đạo hàm biểu thức (2.27) theo thời gian ta được:

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} E\Psi$$

Từ đây ta rút ra

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = E\Psi \tag{2.28}$$

Lấy đạo hàm bậc hai (2.27) theo tọa độ x, y, z ta có thể viết

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2} = -\frac{1}{\hbar^2}\left[P_x^2 + P_y^2 + P_z^2\right]\Psi = \Delta\Psi$$

$$\Delta\Psi + \frac{p^2}{\hbar^2}\Psi = 0 \quad \longrightarrow \quad \Delta\Psi + \frac{2m}{\hbar^2}T\Psi = 0$$

vì $\frac{p^2}{2m} = T$ hay là vì hạt tự do ta có $E = T$ nên viết được:

$$\Delta\Psi + \frac{2m}{\hbar^2}E\Psi = 0 \tag{2.29}$$

2.4.2 Hạt trong một trường lực. Xuất phát từ phương trình (2.29), Schrödinger đã đưa ra một giả định về sau được thừa nhận như một tiên đề của cơ học lượng tử: chuyển động của một vi hạt bất kỳ trong một trường lực $U \neq 0$ cũng được mô tả bằng phương trình giống như (2.29) trong đó $T = E$ được thay thế bởi $T = E - U$, nghĩa là phương trình có dạng:

$$\Delta\Psi + \frac{2m}{\hbar^2}(E - U)\Psi = 0 \tag{2.30}$$

Kết hợp phương trình (2.30) với (2.28) ta được phương trình Schrödinger dạng tổng quát:

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi + U\Psi \tag{2.31}$$

Nếu thế năng U là một hàm không phụ thuộc vào thời gian thì năng lượng toàn phần của vi hạt sẽ bảo toàn, trạng thái của hệ trong đó năng lượng có giá trị hoàn toàn xác định, không đổi, được gọi là trạng thái dừng. Trong trường hợp này hàm sóng Ψ có thể được biểu diễn dưới dạng tích của hai thừa số, trong đó một thừa số chỉ phụ thuộc vào tọa độ, thừa số kia chỉ phụ thuộc thời gian, nghĩa là ta có thể viết

$$\Psi(x, y, z, t) = \Psi(x, y, z)\varphi(t) \tag{2.32}$$

Thay (2.32) vào (2.31) ta được hai phương trình

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}[\Psi(x, y, z)\varphi(t)] = E[\Psi \cdot \varphi]$$

và

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta(\Psi \cdot \varphi) + U(\Psi \cdot \varphi) = E(\Psi \cdot \varphi)$$

Sau khi giản ước Ψ ở phương trình đầu, φ ở phương trình sau, ta có:

$$i\hbar\frac{\partial\varphi}{\partial t} = E\varphi \tag{2.33}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi + U\Psi = E\Psi. \tag{2.34}$$

Nghiệm của phương trình (2.33) là

$$\varphi(t) = e^{-i\frac{E}{\hbar}t} \tag{2.35}$$

Phương trình (2.34) được gọi là phương trình Schrödinger trạng thái dừng có nghiệm là $\Psi(x, y, z)$. Nghiệm của phương trình Schrödinger tổng quát là:

$$\Psi(x, y, z, t) = \Psi(x, y, z)e^{-i\frac{E}{\hbar}t} \tag{2.36}$$

Cần lưu ý rằng: bản thân hàm sóng Ψ nói chung là hàm phức không có ý nghĩa vật lý trực tiếp mà chỉ có bình phương modun của nó mới có ý nghĩa vật lý. Đại lượng $|\Psi|^2$ xác định không phải mật độ một đại lượng vật lý nào như trong lý thuyết cổ điển mà nó chỉ xác định mật độ xác suất đại lượng đó, ví dụ mật độ xác suất tìm thấy hạt trong một đơn vị thể tích tại một thời điểm nhất định $|\Psi|^2$ được tính như sau

$$|\Psi|^2 = \Psi \cdot \Psi^* \tag{2.37}$$

Trong đó Ψ^* là hàm liên hợp phức của Ψ. Vì xác suất tìm thấy hạt trong toàn bộ không gian bằng 1 nên ta có điều kiện chuẩn hoá của hàm sóng:

$$\int\int\int_{x,y,z} |\Psi|^2 dxdydz = 1$$

Mặt khác từ (2.36) ta có : $\left[\Psi(x,y,z) \cdot e^{-\frac{iE}{\hbar}t}\right]^* = \Psi^*(x,y,z)e^{\frac{iE}{\hbar}t}$. và $\Psi(x,y,z,t) \cdot \Psi^*(x,y,z,t) = \Psi(x,y,z) \cdot \Psi^*(x,y,z)$ nên đối với trạng thái dừng sự phân bố xác suất tìm thấy hạt không phụ thuộc vào thời gian.

Với những nhận xét trên đây chúng ta thấy rằng về mặt toán học, hàm sóng phải thoả mãn những điều kiện sau đây: đơn trị, liên tục, hữu hạn.

2.5 Toán tử trong cơ học lượng tử

2.5.1 Khái niệm toán tử. Toán tử là sự biểu diễn tượng trưng một phép toán nào đó (đại số, vi phân, tích phân...) được tiến hành đối với một hàm số để nhận được một hàm số khác và được viết như sau:

$$\hat{L}\Psi = \varphi$$

Ta nói rằng toán tử $\hat{L}$ tác dụng lên Ψ cho ta φ. Như vậy toán tử $\hat{L}$ thiết lập quy tắc nhận hàm φ từ hàm Ψ.

Giả sử do kết quả tác dụng của toán tử $\hat{L}$ lên hàm số Ψ ta được chính hàm số đó nhân với một hằng số L, tức là $\hat{L}\Psi = L\Psi$, khi đó hàm số Ψ được gọi là hàm riêng của toán tử $\hat{L}$ và số L được gọi là trị riêng của toán tử đó. Tập hợp tất cả các trị riêng của toán tử $\hat{L}$ hợp thành phổ của toán tử. Phổ này có thể là phổ rời rạc, phổ liên tục hoặc phổ hỗn hợp. Trong trường hợp phổ rời rạc, các hàm riêng và trị riêng được đánh số thứ tự và viết như sau:

$$\hat{L}\Psi_i = L_i\Psi_i, \quad i = 1, 2, 3, ..$$

Giá trị trung bình của một đại lượng vật lý được xác định bởi công thức

$$\bar{L} = \int \Psi^* \hat{L} \Psi dV \tag{2.38}$$

Trong cơ học lượng tử chỉ sử dụng các toán tử tuyến tính và tự liên hợp.

Một toán tử được gọi là tuyến tính, nếu nó thoả mãn điều kiện

$$\left.\begin{aligned} \hat{L}(\Psi_1 + \Psi_2) &= \hat{L}\Psi_1 + \hat{L}\Psi_2 \\ \hat{L}(c\Psi) &= c\hat{L}\Psi. \end{aligned}\right\} \tag{2.39}$$

Điều kiện (2.39) đảm bảo nguyên lý chồng chất các trạng thái: Nếu hệ có thể ở vào các trạng thái Ψ_1 và Ψ_2 thì nó cũng có thể ở vào trạng thái được xác định bằng tổ hợp tuyến tính của hai hàm

$$\Psi = c_1\Psi_1 + c_2\Psi_2 \qquad (c_1, c_2 \text{ là các hằng số}). \tag{2.40}$$

Toán tử tuyến tính $\hat{L}$ được gọi là tự liên hợp nếu thoả mãn điều kiện:

$$\int_V \Psi^* \hat{L} \Psi dV = \int_V \Psi \hat{L}^* \Psi^* dV \tag{2.41}$$

Toán tử tự liên hợp còn gọi là toán tử Hermit.

Ví dụ toán tử $\frac{\partial}{\partial x}$ không phải là toán tử tự liên hợp, nhưng toán tử $i\frac{\partial}{\partial x}$ lại là toán tử tự liên hợp. Thật vậy

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^* \hat{L} \Psi dx &= i\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^* \frac{d\Psi}{dx} dx \\ &= i\Psi^*\Psi|_{-\infty}^{+\infty} - i\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi \frac{d\Psi^*}{dx} dx \\ &= -i\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi \frac{d\Psi^*}{dx} dx \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi \hat{L}^* \Psi^* dx. \end{aligned}$$

Chú ý rằng nếu $\hat{L} = i\frac{\partial}{dx}$ thì $\hat{L}^* = -i\frac{\partial}{dx}$.

Đòi hỏi các toán tử trong cơ học lượng tử phải là các toán tử tự liên hợp xuất phát từ cơ sở vật lý là giá trị trung bình của đại lượng vật lý L phải là một giá trị thực, tức là $\bar{L} = \bar{L}^*$; mà $\bar{L} = \int \Psi^* \hat{L} \Psi dV$; $\bar{L}^* = \int \Psi \hat{L}^* \Psi^* dV$. Do đó $\int \Psi^* \hat{L} \Psi dV = \int \Psi \hat{L}^* \Psi^* dV$.

Các toán tử liên hợp có hai tính chất cơ bản sau đây:

1. Các trị riêng của toán tử tự liên hợp bao giờ cũng là trị thực $\bar{L}_n = \bar{L}_n^*$.

2. Các hàm riêng của toán tử tự liên hợp ứng với các trị riêng khác nhau, hợp thành một hệ hàm trực giao. Tính chất này được biểu diễn như sau:

$$\int \Psi_n^* \Psi_m dV = \delta_{m,n} = \begin{cases} 0 & \text{nếu} \quad n \neq m \\ 1 & \text{nếu} \quad n = m. \end{cases} \tag{2.42}$$

Bây giờ ta xét hai toán tử $\hat{L}$ $\hat{M}$. Nếu $\hat{L}(\hat{M}\Psi) \neq \hat{M}(\hat{L}\Psi)$ thì ta nói $\hat{L}$ và $\hat{M}$ không giao hoán với nhau. Nếu $\hat{L}(\hat{M}\Psi) = \hat{M}(\hat{L}\Psi)$ thì ta nói $\hat{L}$ và $\hat{M}$ giao hoán với nhau.

Ví dụ 1. Hai toán tử $\hat{L} = x\cdot$ và $\hat{M} = \frac{d}{dx}$ là không giao hoán với nhau vì

$$\begin{aligned} \hat{L}(\hat{M}\Psi) - \hat{M}(\hat{L}\Psi) &= x\frac{d\Psi}{dx} - \frac{d}{dx}(x\Psi) \\ &= x\frac{d\Psi}{dx} - \left[x\frac{d\Psi}{dx} + \Psi\right] = -\Psi. \end{aligned}$$

Kết quả này được viết dưới dạng sau

$$[\hat{L}, \hat{M}]\Psi = -\Psi \qquad \text{hay} \qquad [\hat{L}, \hat{M}] = -1$$

Ví dụ 2. Hai toán tử $\hat{L} = c$ (hằng số) và $\hat{M} = \frac{d}{dx}$ giao hoán với nhau vì:

$$c \cdot \frac{d}{dx} = \frac{d}{dx} \cdot c, \qquad \text{tức là} \qquad [c, \frac{d}{dx}] = 0$$

Giả sử trạng thái của hệ được mô tả bởi hàm sóng Ψ_i, hàm sóng này lại là hàm riêng của đồng thời hai toán tử $\hat{L}$ và $\hat{M}$

$$\hat{L}\Psi_i = L_i\Psi_i, \quad \hat{M}\Psi_i = M_i\Psi_i \tag{2.43}$$

Cho $\hat{M}$ tác dụng lên hai vế của phương trình đầu và $\hat{L}$ tác dụng lên hai vế của phương trình sau, sau đó trừ đi ta có:

$$(\hat{M}\hat{L} - \hat{L}\hat{M})\Psi_i = M_iL_i\Psi_i - L_iM_i\Psi_i = 0$$

Như vậy, nếu Ψ_i là hàm riêng tương ứng đồng thời với hai trị riêng L_i và M_i của hai toán tử $\hat{L}$ và $\hat{M}$ khác nhau, thì hai toán tử này sẽ giao hoán với nhau. Điều này có nghĩa là tính giao hoán của các toán tử là tiêu chuẩn xác nhận rằng các đại lượng liên quan đến các toán tử đó có thể được đồng thời đo chính xác. Ngược lại nếu các toán tử $\hat{L}$ và $\hat{M}$ không giao hoán thì các đại lượng vật lý L và M không thể đồng thời được đo chính xác. Độ chính xác của phép đo đại lượng L phụ thuộc vào độ chính xác phép đo đại lượng M. Tính chất này là hệ quả trực tiếp của nguyên lý bất định Heisenberg.

2.5.2 Toán tử và các đại lượng vật lý. Các toán tử trong cơ học lượng tử được thiết lập từ các đại lượng vật lý bằng cách so sánh các biểu thức tương ứng trong phương trình sóng hoặc dựa vào các công thức cổ điển biểu diễn mối liên hệ giữa các đại lượng vật lý. Ở đây chúng ta sẽ đề cập đến một số toán tử thường gặp nhất.

1. Toán tử xung lượng. Xung lượng $\vec{P}$ có các thành phần theo các trục tọa độ x, y, z là P_x, P_y, P_z. Ở đây ta tìm toán tử thành phần xung lượng theo trục x, nó được ký hiệu là $\hat{P}_x$. Từ biểu thức hàm sóng De Broglie (2.27):

$$\Psi(x, y, z, t) = A \cdot e^{-\frac{i}{\hbar}(Et - P_x x - P_y y - P_z z)},$$

ta tính được đạo hàm theo x:

$$\frac{\partial \Psi}{\partial x} = \frac{i}{\hbar} P_x \Psi \qquad \text{hay là} \qquad -i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial x} = P_x \Psi \tag{2.44}$$

Người ta xem phương trình (2.44) như một phương trình toán tử trong đó $-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$ là toán tử thành phần xung lượng theo trục x và P_x là trị riêng của $\hat{P}_x$. Cũng tương tự như vậy ta có:

$$\begin{aligned} \hat{P}_x &= -i\hbar\tfrac{\partial}{\partial x} \\ \hat{P}_y &= -i\hbar\tfrac{\partial}{\partial y} \\ \hat{P}_z &= -i\hbar\tfrac{\partial}{\partial z} \end{aligned} \tag{2.45}$$

2. Các toán tử tọa độ và các hàm tọa độ. Các toán tử tọa độ được định nghĩa là phép nhân bình thường với tọa độ đó, nghĩa là ta có:

$$\hat{x} = x; \quad \hat{y} = y, \quad \hat{z} = z, \quad \hat{x}\Psi = x\Psi$$

Các toán tử của bất kỳ hàm tọa độ nào cũnglà phép nhân với chính hàm đó:

$$\hat{U}(x, y, z) = U(x, y, z); \quad \hat{U}\Psi = U\Psi$$

Ta có thể chứng minh rằng: các cặp toán tử $\hat{x}$ và $\hat{P}_x$, $\hat{y}$ và $\hat{P}_y$, $\hat{z}$ và $\hat{P}_z$ là không giao hoán với nhau:

$$\left.\begin{aligned} \hat{x}\hat{P}_x - \hat{P}_x\hat{x} &= i\hbar \\ \hat{y}\hat{P}_y - \hat{P}_y\hat{y} &= i\hbar \\ \hat{z}\hat{P}_z - \hat{P}_z\hat{z} &= i\hbar \end{aligned}\right\} \tag{2.46}$$

3. *Toán tử động năng.* Toán tử động năng được xác định dựa trên công thức cổ điển liên hệ giữa động năng và xung lượng:

$$T = \frac{p^2}{2m} = \frac{1}{2m}\left[P_x^2 + P_y^2 + P_z^2\right]$$

Trong cơ học lượng tử, toán tử động năng được định nghĩa:

$$\begin{aligned}
\hat{T} &= \frac{1}{2m}(\hat{P}_x^2 + \hat{P}_y^2 + \hat{P}_z^2) \\
&= \frac{1}{2m}\left[(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x})(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}) + (-i\hbar\frac{\partial}{\partial y})(-i\hbar\frac{\partial}{\partial y}) + (-i\hbar\frac{\partial}{\partial z})(-i\hbar\frac{\partial}{\partial z})\right] \\
&= -\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right] = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta;
\end{aligned}$$

Δ là Laplacian.

4. *Toán tử năng lượng toàn phần, toán tử Hamiltonian.* Toán tử năng lượng toàn phần được xác định dựa trên công thức $H = T + U \longrightarrow \hat{H} = \hat{T} + \hat{U}$

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U(x, y, z) \tag{2.47}$$

Sử dụng định nghĩa toán tử Hamiltonian ta có thể biểu diễn phương trình Schrödinger dưới dạng toán tử

$$\hat{H}\Psi = E\Psi \tag{2.48}$$

Như vậy năng lượng toàn phần E của hệ là trị riêng của toán tử Hamiltonian.

5. *Toán tử thành phần moment động lượng.* Toán tử moment động lượng được xác định từ công thức cổ điển đối với moment động lượng tương đối với một điểm cho trước O.

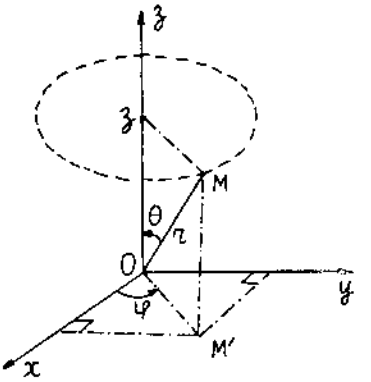
$$\vec{M} = [\vec{r} \times \vec{P}]$$

Từ đây ta dễ dàng xác định toán tử hình chiếu của moment động lượng theo các trục tọa độ.

$$\left.\begin{aligned}
\hat{M}_x &= \hat{y}\hat{P}_z - \hat{z}\hat{P}_y = -i\hbar(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}) \\
\hat{M}_y &= \hat{z}\hat{P}_x - \hat{x}\hat{P}_z = -i\hbar(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}) \\
\hat{M}_z &= \hat{x}\hat{P}_y - \hat{y}\hat{P}_x = -i\hbar(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x})
\end{aligned}\right\} \tag{2.49}$$

Ta cũng có thể dễ dàng xác định toán tử bình phương moment động lượng từ công thức:

$$\begin{aligned}
\hat{M}^2 &= \hat{M}_x^2 + \hat{M}_y^2 + \hat{M}_z^2 \\
&= -\hbar^2\left[(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y})^2 + (z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z})^2 + (x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x})^2\right].
\end{aligned} \tag{2.50}$$



Hình 2.9: *Hệ tọa độ cầu.*

Ta có thể chứng minh rằng các toán tử thành phần moment động lượng là không giao hoán với nhau, ta có

$$[\hat{M}_x, \hat{M}_y] = i\hbar\hat{M}_z; \qquad [\hat{M}_y, \hat{M}_z] = i\hbar\hat{M}_x$$
$$[\hat{M}_z, \hat{M}_x] = i\hbar\hat{M}_y; \qquad [\hat{M}_x \cdot \hat{M}_y - \hat{M}_y \cdot \hat{M}_x]\Psi = i\hbar\hat{M}_z\Psi.$$

Tuy nhiên mỗi toán tử $\hat{M}_x, \hat{M}_y, \hat{M}_z$ lại giao hoán với toán tử bình phương moment động lượng.

$$[\hat{M}_x, \hat{M}^2] = [\hat{M}_y, \hat{M}^2] = [\hat{M}_z, \hat{M}^2] = 0$$

6. *Phương trình toán tử thành phần moment động lượng:*

$$\hat{M}_z\Psi = M_z\Psi$$
$$-i\hbar(x\frac{\partial\Psi}{\partial y} - y\frac{\partial\Psi}{\partial x}) = M_z\Psi \tag{2.51}$$

Để giải phương trình này ta sử dụng hệ tọa độ cầu (r, θ, φ) liên hệ với (x, y, z) như ở hình (2.9), nghĩa là

$$\left.\begin{aligned} z &= r\cos\theta \\ x &= r\sin\theta\cos\varphi \\ y &= r\sin\theta\sin\varphi \end{aligned}\right\}$$

$$\frac{\partial}{\partial\varphi} = \frac{\partial x}{\partial\varphi}\frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial y}{\partial\varphi}\frac{\partial}{\partial y} + \frac{\partial z}{\partial\varphi}\frac{\partial}{\partial z}$$

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial\varphi} &= -r\sin\theta\sin\varphi\frac{\partial}{\partial x} + r\sin\theta\cos\varphi\frac{\partial}{\partial y}\\ &= -y\frac{\partial}{\partial x} + x\frac{\partial}{\partial y} = x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}.\end{aligned}$$

Như vậy trong tọa độ cầu ta có thể viết phương trình (2.51) như sau

$$\frac{\partial\Psi}{\partial\varphi} = -\frac{i}{\hbar}M_z\Psi \tag{2.52}$$

Tích phân phương trình (2.52) ta được

$$\Psi = c\cdot e^{\frac{i}{\hbar}M_z\varphi}, \tag{2.53}$$

với c là hằng số tích phân).

Điều kiện đơn trị: Hàm sóng không đổi khi φ thay đổi một lượng bằng 2π:

$$\Psi(\varphi+2\pi) = \Psi(\varphi) \quad\longrightarrow\quad e^{\frac{i}{\hbar}M_z(\varphi+2\pi)} = e^{\frac{i}{\hbar}M_z\varphi}$$

Điều đó có nghĩa là

$$e^{\frac{i}{\hbar}M_z 2\pi} = 1 \tag{2.54}$$

và $\frac{M_z}{\hbar}$ phải là các số nguyên

$$\frac{M_z}{\hbar} = 0, \pm1, \pm2, \cdots = m \tag{2.55}$$

Như vậy hàm riêng của toán tử $\hat{M}_z$ là $\Psi = c\cdot e^{im\varphi}$, còn trị riêng của nó bằng $M_z = m\hbar$. Trong cơ học lượng tử hình chiếu của moment động lượng của hệ vi mô nhận những giá trị gián đoạn bằng số nguyên lần $\hbar$. Trong trường hợp này người ta nói M_z đã bị lượng tử hoá. Số m xác định độ lớn của M_z được gọi là số lượng tử từ.

7. *Phương trình bình phương moment động lượng:*

$$\hat{M}^2\Psi = M^2\Psi$$

$\hat{M}^2 = \hat{M}_x^2 + \hat{M}_y^2 + \hat{M}_z^2$, được xác định bằng công thức (2.49), trong tọa độ cầu toán tử $\hat{M}^2$ có dạng

$$\hat{M}^2 = -\hbar^2\Delta_{\theta,\varphi} \tag{2.56}$$

Trong đó $\Delta_{\theta,\varphi}$ là phần góc của toán tử Laplacian trong hệ tọa độ cầu:

$$\Delta_{\theta,\varphi} = \frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi} \tag{2.57}$$

Vì toán tử $\hat{M}^2$ chỉ tác dụng lên phần góc θ và φ, do đó hàm sóng Ψ cũng có thể xem như là hàm của θ và φ, ta có

$$-\hbar^2 \Delta_{\theta,\varphi} \Psi(\theta,\varphi) = M^2 \Psi(\theta,\varphi) \tag{2.58}$$

Có thể chứng minh rằng hàm sóng $\Psi(\theta,\varphi)$ được xác định từ phương trình (2.58) chỉ thoả mãn điều kiện đơn trị khi M^2 bị lượng tử hoá theo quy luật:

$$M^2 = l(l+1)\hbar^2; \qquad \text{với} \qquad l = 0, 1, 2, \ldots$$

Số l được gọi là số lượng tử quỹ đạo.

2.6 Một số bài toán đơn giản của cơ học lượng tử

Chúng ta sẽ xét một số bài toán đơn giản nhưng cần thiết.

2.6.1 Chuyển động của hạt tự do. Giả sử ta xét một hạt có khối lượng m, chuyển động tự do trong không gian, $U = 0$. Phương trình Schrödinger

$$\hat{H}\Psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi = E\Psi \tag{2.59}$$

$E = T + U = T$. Phương trình (2.59) có thể viết lại dưới dạng

$$\Delta\Psi + \frac{2m}{\hbar^2}T\Psi = 0 \tag{2.60}$$

Xét trường hợp bài toán một chiều theo phương x và đặt tham số $K = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2mT}$ ta có

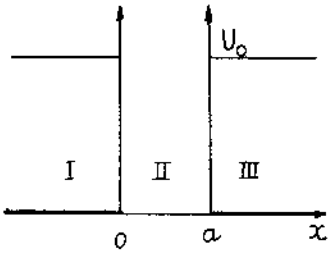
$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} + K^2\Psi = 0 \tag{2.61}$$

Nghiệm riêng của phương trình (2.61) có dạng

$$\Psi(x) = c \cdot e^{\pm iKx} \tag{2.62}$$

Vì động năng của một hạt tự do $T = \frac{mv^2}{2}$ luôn luôn lớn hơn không do đó K luôn luôn là một số thực và nghiệm (2.62) thoả mãn điều kiện liên tục, đơn trị, hữu hạn với mọi giá trị $T > 0$. Tham số K ở đây đóng vai trò số sóng. Sự phụ thuộc của năng lượng vào số sóng K có dạng

$$E = \frac{\hbar^2 K^2}{2m}$$



Hình 2.10: *Sơ đồ hố thế năng.*

Sự phụ thuộc giữa E và K được gọi là phổ năng lượng của hạt. Trong trường hợp này phổ năng lượng được xem là phổ liên tục và có dạng hàm parabol. Vì $K = \frac{p}{\hbar}$ nên ta có

$$\Psi(x) = c \cdot e^{\pm \frac{i}{\hbar} p_x x}$$

Hàm sóng này là hàm riêng của toán tử $\hat{P}_x$. Như vậy hai toán tử $\hat{H}$ và $\hat{P}_x$ có cùng hàm riêng nên chúng giao hoán với nhau và do đó năng lượng E và động lượng $\vec{P}$ của hạt có thể được đo chính xác đồng thời.

Còn xác suất tìm hạt tại một vị trí nào đó trong không gian bằng

$$\Psi^* \Psi = |c|^2 e^{\pm iKx} \cdot e^{\mp iKx} = |c|^2 = \text{const},$$

không phụ thuộc vào tọa độ. Điều này chứng tỏ tọa độ của hạt là hoàn toàn bất định. Kết quả này phù hợp với nguyên lý bất định Heisenberg.

2.6.2 Hạt trong hố thế năng. Ta xét chuyển động của hạt trong một vùng thế năng biến đổi như sau: (Hình (2.10))

$U = U_0$ tại vùng $x < 0$, $U = 0$ tại vùng $0 \leq x \leq a$, $U = U_0$ tại vùng $x > a$. Vùng có thế năng biến đổi như thế này được gọi là một hố thế năng, a được gọi là bề rộng, U_0 được gọi là chiều cao hố thế năng. Ta xét trường hợp năng lượng toàn phần E của hạt nhỏ hơn chiều cao hố thế.

Theo vật lý cổ điển trong trường hợp này hạt chỉ có thể chuyển động trong hố thế mà không thể nào vượt ra ngoài được.

1. Trường hợp hàng rào thế vô hạn, $U_0 \longrightarrow \infty$. Khi đó hàm sóng ở vùng ngoài hố phải bằng không, còn hàm sóng ở trong hố thế được xác định bởi phương trình sóng (2.61)

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} + K^2\Psi = 0, \qquad \text{khi} \qquad 0 \leq x \leq a \tag{2.63}$$

Với điều kiện biên suy ra từ điều kiện liên tục của hàm sóng

$$\Psi(0) = \Psi(a) = 0$$

Nghiệm tổng quát của phương trình (2.63) có dạng

$$\Psi(x) = Ae^{iKx} + Be^{-iKx}$$

ứng dụng điều kiện biên ta có

$$\begin{array}{ll} x = 0 \longrightarrow A + B = 0 & A = -B \\ x = a \longrightarrow Ae^{iKa} + Be^{-iKa} = 0 & e^{iKa} - e^{-iKa} = 0 \end{array}$$

hay là $\sin Ka = 0$ và $K = \frac{n\pi}{a}$ với $n = 1, 2, 3, \cdots$ Thay giá trị của K vào biểu thức năng lượng ta có

$$E_n = \frac{\hbar^2 K_n^2}{2m} = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2ma^2}$$

(Chú ý rằng ở đây không tồn tại trạng thái ứng với $n = 0, K = 0$ vì khi đó $\Psi(x) = 0$.) Như vậy vì K nhận những giá trị gián đoạn nên năng lượng E cũng nhận những giá trị gián đoạn, nói cách khác phổ năng lượng của hạt không liên tục. Năng lượng nhỏ nhất mà hạt trong hố thế có thể có là không phải bằng không mà ứng với $n = 1$, $K = \frac{\pi}{a}$ và

$$E_1 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} = \frac{h^2}{8ma^2}$$

Khoảng cách giữa hai mức năng lượng cho phép cạnh nhau tăng theo số lượng tử n và tỷ lệ với hiệu bình phương giữa chúng

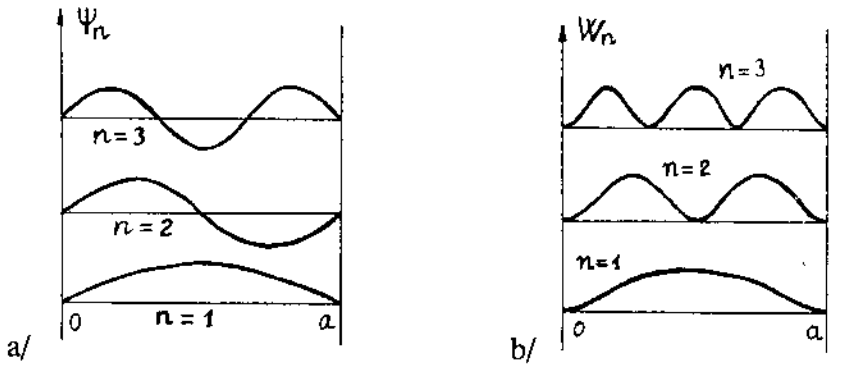
$$\Delta E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2}[(n+1)^2 - n^2] \cong \frac{\hbar^2 \pi^2}{ma^2} n$$

Bề rộng của hố thế năng càng lớn thì ΔE_n càng nhỏ. Đối với điện tử, khi $a = 1cm$

$$E_n = 3,37 \cdot 10^{-15} n^2 \cdot eV$$
$$\Delta E_n = 0,7 \cdot 10^{-15} n \cdot eV.$$

Khi $a = 5$Å,

$$E_n = 0,68 n^2 eV$$
$$\Delta E_n = 1,36 neV.$$



Hình 2.11: *a- Hàm sóng Ψ_n của vi hạt trong hố thế năng, U_0 giới hạn, b- Xác suất tìm hạt W_n trong hố thế năng, U_0 giới hạn.*

Bây giờ chúng ta có thể viết biểu thức của hàm sóng ứng với các giá trị năng lượng cho phép:

$$\Psi_n(x) = A_n\left[e^{iK_nx} - e^{-iK_nx}\right] = A_n \sin K_n x = A_n \sin(\frac{n\pi}{a}x) \tag{2.64}$$

Biên độ A_n có thể tìm được từ điều kiện chuẩn hoá:

$$\int_0^a |\Psi_n|^2 dx = 1 \qquad \text{và bằng} \qquad A_n = \sqrt{\frac{2}{a}}$$

Mật độ xác suất tìm thấy hạt

$$W_n(x) = |\Psi_n(x)|^2 = \frac{2}{a}\sin^2(\frac{\pi n}{a}x) \tag{2.65}$$

Trên hình (2.11) biểu diễn sự phụ thuộc hàm sóng và xác suất tìm hạt theo x.

2. *Trường hợp hàng rào thế U_0 là giới hạn, $U = U_0 < \infty$.* Trong vùng II hình (2-10) nghiệm tổng quát phương trình vẫn như cũ có dạng

$$\Psi(x) = Ae^{iKx} + Be^{-iKx} \tag{2.66}$$

nhưng sẽ có các điều kiện biên khác.

Trong vùng I và III phương trình Schrödinger có dạng:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\Psi}{dx^2} + U_0\Psi = E\Psi; \qquad \text{hay} \qquad \frac{d^2\Psi}{dx^2} - \left[\frac{2m(U_0 - E)}{\hbar^2}\right]\Psi = 0$$

Chúng ta giả thiết $E < U_0$ và ký hiệu: $K_1^2 = \frac{2m(U_0-E)}{\hbar^2}$. Phương trình Schrödinger có dạng

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} - K_1^2\Psi = 0 \tag{2.67}$$

Lời giải tổng quát của (2.67) sẽ là

$$\Psi_{I,III} = Ce^{K_1x} + De^{-K_1x}, \tag{2.68}$$

với K_1 thực, lớn hơn không.

Trong vùng I, $x < 0$, ta phải cho $D = 0$, cũng như thế, trong vùng III, $x > 0$ ta phải cho $C = 0$, vậy ta có trong vùng I, $x < 0$, $\Psi_I = Ce^{K_1x}$, trong vùng III, $x > a$, $\Psi_{III} = D \cdot e^{-K_1x}$.

Điều kiện biên đòi hỏi sự liên tục của hàm sóng và đạo hàm bậc nhất của hàm sóng, nghĩa là ta có:

$$\text{Tại} \quad x = 0 \quad \Psi_I = \Psi_{II} \quad \text{và} \quad \frac{d\Psi_I}{dx} = \frac{d\Psi_{II}}{dx} \tag{2.69}$$

$$\text{Tại} \quad x = a \quad \Psi_{II} = \Psi_{III} \quad \text{và} \quad \frac{d\Psi_{II}}{dx} = \frac{d\Psi_{III}}{dx} \tag{2.70}$$

Điều kiện (2.69) tại $x = 0$ cho ta 2 phương trình

$$C \cdot e^0 = Ae^0 + Be^0 \rightarrow C = A + B$$

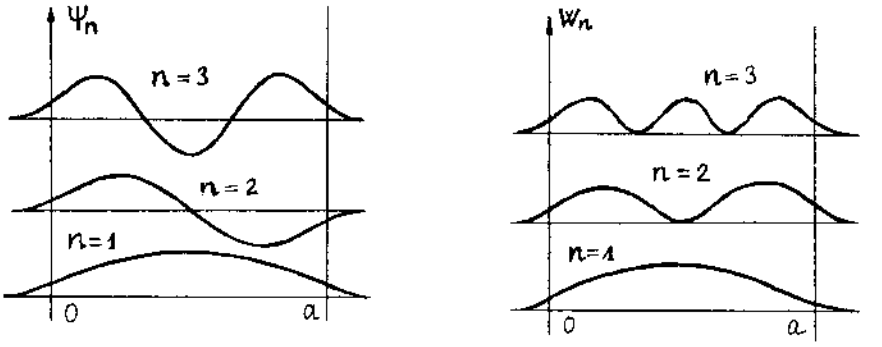
$$K_1Ce^0 = KAe^0 - KBe^0 \rightarrow K_1C = KA - KB$$

Điều kiện (2.70) tại $x = a$ cũng cho ta hai phương trình tương tự, cộng thêm ta có phương trình chuẩn hoá

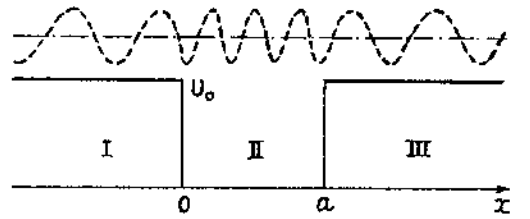
$$\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi|^2 dx = 1$$

Từ 5 phương trình đó chúng ta có thể tìm được 5 ẩn số: A, B, C, D và năng lượng $E(K)$. Bỏ qua những tính toán cồng kềnh chúng ta có thể đưa ra một số nhận xét về một số trạng thái thấp nhất cũng như hàm sóng và xác suất tìm hạt đối với các trạng thái đó, trên hình (2.12) biểu diễn hàm sóng và xác suất tìm hạt của 3 trạng thái thấp nhất.

So sánh với các hàm sóng trong trường hợp $U_0 = \infty$ ở hình (2.11) ta thấy ở đó trạng thái thấp nhất ứng với $\lambda = 2a$, còn trong trường hợp $U_0 < \infty$ ta thấy$\lambda > 2a$. Vì $p = \frac{h}{\lambda}$ ta thấy trạng thái thấp nhất khi $U_0 < \infty$ ứng với năng



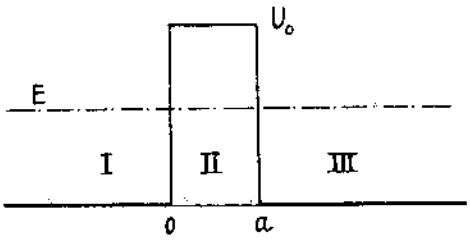
Hình 2.12: *a- Hàm sóng Ψ_n của vi hạt trong hố thế năng, với $U_0 = \infty$, b- Xác suất tìm hạt W_n trong hố thế năng, $U_0 = \infty$.*



Hình 2.13: *Hàm sóng Ψ_n của vi hạt khi $E > U_0$.*

lượng thấp hơn so với khi $U_0 = \infty$. Phía ngoài hố thế năng ta thấy hàm sóng giảm theo quy luật hàm mũ, nhưng nó khác không trong một vùng ngoài bờ hố. Điều đó có nghĩa là ở ngoài bờ hố nơi mà $E < U_0$ xác suất tìm thấy hạt vẫn khác không. Đó là biểu hiện của tính chất sóng của hạt không thể giải thích bằng vật lý cổ điển. Hiện tượng thâm nhập của hạt vào trong vùng cấm như thế là trái với định luật bảo toàn năng lượng. Tuy nhiên chúng ta có thể giải thích hiện tượng đó từ nguyên lý bất định Heisenberg: $\Delta E \Delta t \geq \hbar$. Thật vậy năng lượng là bất định, nó có thể không tuân theo định luật bảo toàn trong thời gian rất ngắn $\tau = \Delta t = \hbar/\Delta E$ và hạt có thể ở ngoài bờ hố trong thời gian τ.

3. *Trường hợp năng lượng hạt lớn hơn U_0,* hạt là tự do, khắp mọi vùng hàm sóng có dạng hình sin, nhưng số sóng ở vùng II khác số sóng ở vùng I



Hình 2.14: *Sơ đồ hàng rào thế năng chữ nhật.*

và vùng III như trình bày ở hình (2.13); Trong vùng II:

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2mE}}$$

Trong vùng I và III

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2m(E - U_0)}}$$

Khi $E > U_0$ phổ năng lượng của hạt là liên tục.

2.6.3 Hiệu ứng đường ngầm (tunnel). Xét chuyển động của hạt trong vùng có thế năng biến đổi như ở hình (2.14), gọi là hàng rào thế năng.

$$U = \begin{cases} 0 & \text{khi} \quad x < 0 \\ U_0 > E & \text{khi} \quad 0 \leq x \leq a \\ 0 & \text{khi} \quad x > a \end{cases}$$

Theo vật lý cổ điển một hạt ở trong vùng I có năng lượng toàn phần E nhỏ hơn chiều cao hàng rào thế (U_0) thì chỉ có thể chuyển động trong vùng I, không thể vượt qua hàng rào thế vùng II để sang vùng III. Tuy nhiên do tính chất sóng của hạt vi mô, cơ học lượng tử tiên đoán tồn tại một xác suất khác không tìm thấy hạt trong vùng III. Hiện tượng đó gọi là hiệu ứng đường ngầm (tunnel).

Ta xét bài toán cụ thể bằng cách giải phương trình Schrödinger đối với từng vùng, trong trường hợp một chiều

$$\frac{d^2\Psi_1}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}E\Psi_1 = 0 \qquad \text{với} \qquad x < 0 \tag{2.71}$$

$$\frac{d^2\Psi_2}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - U_0)\Psi_2 = 0 \qquad \text{với} \qquad 0 \leq x \leq a \tag{2.72}$$

$$\frac{d^2\Psi_3}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}E\Psi_3 = 0 \qquad \text{với} \qquad x > a \tag{2.73}$$

Chúng ta đặt

$$K_1 = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2mE}; \quad K_2 = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(U_0 - E)}; \quad K_3 = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2mE} = K_1$$

Ta có thể viết nghiệm của ba phương trình (2.71), (2.72), (2.73),

$$\Psi_1 = A_1 e^{iK_1 x} + B_1 e^{-iK_1 x} \tag{2.74}$$

$$\Psi_2 = A_2 e^{K_2 x} + B_2 e^{-K_2 x} \tag{2.75}$$

$$\Psi_3 = A_3 e^{iK_1 x} + B_3 e^{-iK_1 x} \tag{2.76}$$

Mỗi nghiệm được xem là gồm hai sóng một sóng lan truyền theo trục x và một sóng phản xạ ngược lại. Trong vùng III không thể có sóng phản xạ nên ta có thể cho $B_3 = 0$. Nghĩa là:

$$\Psi_3 = A_3 e^{iK_1 x} \tag{2.77}$$

Từ điều kiện liên tục của hàm sóng và đạo hàm bậc nhất của hàm sóng chúng ta có :

$$\begin{array}{ll} \Psi_1(0) = \Psi_2(0); & \Psi_2(a) = \Psi_3(a) \\ \left.\frac{d\Psi_1}{dx}\right|_{x=0} = \left.\frac{d\Psi_2}{dx}\right|_{x=0} & \left.\frac{d\Psi_2}{dx}\right|_{x=a} = \left.\frac{d\Psi_3}{dx}\right|_{x=a} \end{array} \tag{2.78}$$

ứng dụng các điều kiện biên vào các hàm sóng ta có

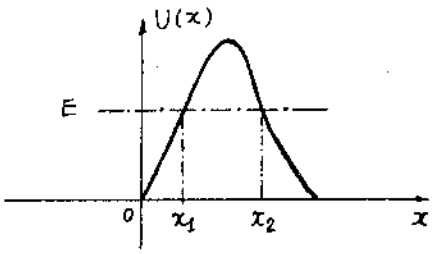
$$\left.\begin{array}{ll} A_1 + B_1 = A_2 + B_2 & (1) \\ iK_1(A_1 - B_1) = K_2(A_2 - B_2) & (2) \\ A_2 e^{K_2 a} + B_2 e^{-K_2 a} = A_3 e^{iK_1 a} & (3) \\ K_2(A_2 e^{K_2 a} - B_2 e^{-K_2 a}) = iK_1 A_3 e^{iK_1 a} & (4) \end{array}\right\} \tag{2.79}$$

Từ hệ phương trình (2.79) ta có thể tính được mối liên hệ giữa biên độ sóng tới vùng III (A_3) và biên độ sóng tới vùng I (A_1).

$$\frac{A_3}{A_1} = \frac{2iK_1K_2e^{-iK_1a}}{(K_1^2 - K_2^2)\,\mathrm{sh}(K_2a) + 2iK_1K_2\,\mathrm{ch}(K_2a)}$$

Ta có thể tìm hệ số truyền qua của hàng rào thế D, nghĩa là tỷ số giữa mật độ hạt đi qua hàng rào và mật độ hạt đến hàng rào. Dễ dàng thấy rằng:

$$D = \frac{|A_3|^2}{|A_1|^2} = \frac{4K_1^2K_2^2}{(K_1^2 + K_2^2)^2\,\mathrm{sh}^2(K_2a) + 4K_1^2K_2^2} \tag{2.80}$$



Hình 2.15: *Sơ đồ hàng rào thế năng bất kỳ.*

Trong thực tiễn chỉ quan tâm đến các trường hợp mà trong đó $K_2a > 1$ và ta có thể viết $\text{sh}K_2a = \frac{1}{2}e^{K_2a}$ và $K_1 = K_2$, nên (2.80) có thể viết gần đúng

$$D = \frac{1}{1 + (\frac{1}{2}e^{K_2a})^2} \approx e^{-2K_2a}$$

Thay $K_2 = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(U_0 - E)}$ vào biểu thức trên ta có

$$D = e^{-\frac{2a}{\hbar}\sqrt{2m(U_0-E)}} \tag{2.81}$$

Từ đây chúng ta có nhận xét:

- Độ truyền qua của hàng rào phụ thuộc mạnh vào bề rộng hàng rào, với $(U_0 - E) = 5eV$ ta thấy D đối với điện tử thay đổi: $D = e^{-2,3a(\text{Å})}$.

a(Å)	1	1,5	2	2,5	10
D	0,100	0,032	0,010	0,·003	$1,026 \cdot 10^{-10}$

- Hiệu ứng đường ngầm là hiệu ứng lượng tử, nếu trong công thức ta cho $\hbar = 0$ thì $D = 0$.

- Đối với loại hàng rào thế có dạng bất kỳ người ta dùng công thức tính D như sau:

$$D = C \cdot e^{-\frac{2\sqrt{2m}}{\hbar}\int_{x_1}^{x_2}\sqrt{U(x)-E}dx} \tag{2.82}$$

Giá trị x_1, x_2 xác định như trên hình vẽ (2.15).

- Ứng dụng: Hiện tượng tự phát xạ, kính hiển vi quét tunnel, diode tunnel

2.6.4 Dao động tử điều hoà (oscillator). Trong cơ học cổ điển, dao động tử điều hoà đơn giản nhất là một quả cầu có khối lượng m treo trên một lò xo

không trọng lượng có độ cứng K. Nếu kéo quả cầu lệch khỏi vị trí cân bằng (được quy ước tại điểm $x = 0$) dọc theo trục thẳng đứng x thì sẽ sinh ra một lực tỷ lệ với ly độ x và ngược chiều x, đó là lực đàn hồi:

$$F = -Kx = m\frac{d^2x}{dt^2}$$

Giải phương trình chuyển động này ta được

$$x = A\cos(\omega t + \alpha)$$

A - biên độ, ω - tần số góc, α - pha ban đầu.

Trong trường hợp này ta có thể tính thế năng của quả cầu

$$U(x) = -\int_0^x F dx = \int_0^x Kx dx = \frac{Kx^2}{2}$$

Năng lượng toàn phần bằng

$$E = T + U = \frac{1}{2}mv^2 + \frac{Kx^2}{2}$$

Theo quan điểm cổ điển năng lượng của dao động tử điều hoà có thể nhận bất kỳ giá trị nào, kể cả giá trị cực tiểu $E = 0$ ứng với trạng thái nghỉ hoàn toàn.

Nếu xét dao động tử điều hoà theo quan điểm cơ lượng tử ta sẽ thấy kết quả hoàn toàn khác.

Ở đây ta xét bài toán một chiều về chuyển động của một hạt trong hố thế năng parabol $U(x) = \frac{Kx^2}{2}$.

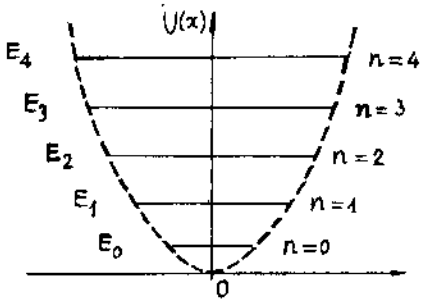
Phương trình Schrödinger đối với dao động tử có dạng

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - \frac{Kx^2}{2})\Psi = 0 \tag{2.83}$$

Giải phương trình này ta thấy: nghiệm của nó thoả mãn các điều kiện của hàm sóng không phải với bất kỳ giá trị năng lượng nào mà chỉ đối với những giá trị năng lượng E xác định bởi biểu thức sau:

$$E_n = \hbar\omega(n + 1/2) \qquad \text{với} \qquad n = 0, 1, 2, 3, \ldots \tag{2.84}$$

Như vậy năng lượng của dao động tử điều hoà lượng tử là một đại lượng bị lượng tử hoá.



Hình 2.16: *Phổ năng lượng của dao động tử điều hòa.*

Giá trị năng lượng nhỏ nhất mà dao động tử điều hoà có thể nhận không phải bằng không mà bằng

$$E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega \tag{2.85}$$

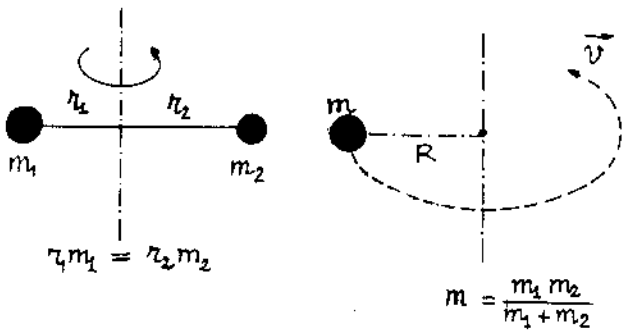
E_0 được gọi là năng lượng điểm không. Sự tồn tại của giá trị E_0 hoàn toàn phù hợp với nguyên lý bất định. Thật vậy, ở trạng thái nghỉ hoàn toàn $\Delta x = 0$, theo hệ thức bất định thì $\Delta P = \infty$, nghĩa là vận tốc và động năng cũng vô cùng lớn ở trạng thái nghỉ hoàn toàn, điều này là phi lý. Từ đó suy ra dao động tử điều hoà lượng tử không thể có trạng thái nghỉ hoàn toàn, tức là không thể ở đáy đường parabol thế năng (hình (2.16)). Kết quả này tương tự kết quả khảo sát hạt trong hố thế năng. Chỉ có ở đây năng lượng tỷ lệ với n, chứ không phải với n^2.

2.6.5 Quay tử rắn. Ta xét một hệ gồm hai hạt có khối lượng m_1 và m_2 được nối với nhau bằng một thanh không trọng lượng, trong quá trình chuyển động khoảng cách giữa hai hạt luôn cố định, đó là quay tử rắn. Bài toán về chuyển động quay của hệ trên quy về bài toán của một hạt duy nhất với khối lượng rút gọn như ở hình (2.17)

$$m = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$$

Moment quay quán tính của quay tử tương đối với trục vuông góc với đường nối hai hạt tại điểm trọng tâm của hệ: $J = mR^2$. Phương trình Schrödinger có dạng:

$$\Delta\Psi + \frac{2m}{\hbar^2}E\Psi = 0 \tag{2.86}$$



Hình 2.17: *Sơ đồ mô tả moment quán tính của quay tử.*

Ta không giải phương trình (2.86) mà chỉ quan tâm đến phổ năng lượng cho phép của moment động lượng quay:

$$M = mvR = mR^2\Omega = J\Omega$$

ở đây Ω - vận tốc góc, $v = R\Omega$. Biểu thức của năng lượng

$$E = T = \frac{m}{2}v^2 = \frac{m}{2}R^2\Omega^2 = \frac{J}{2}\Omega^2$$

Từ đây suy ra mối liên hệ giữa năng lượng và moment động lượng

$$E = \frac{M^2}{2J} \quad \longrightarrow \quad \hat{H} = \frac{\hat{M}^2}{2J}$$

Công thức này cho ta mối liên hệ giữa toán tử năng lượng và toán tử bình phương moment động lượng của quay tử. Mà ta đã biết hàm riêng và trị riêng của toán tử bình phương moment động lượng

$$\hat{M}^2\Psi = M^2\Psi$$

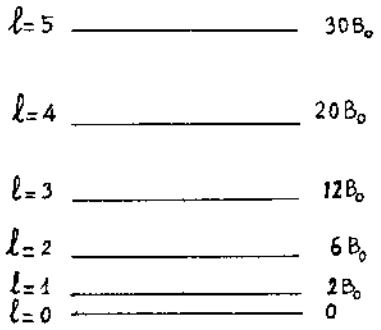
Trị riêng của tóan tử $\hat{M}^2$ là $\hat{M}^2 = \hbar^2 l(l+1)$ với $l = 0, 1, 2, 3, \ldots$ Từ đây ta có biểu thức xác định phổ năng lượng của quay tử.

$$E = \frac{\hbar^2}{2J}l(l+1) = B_0 l(l+1); \tag{2.87}$$

B_0 là hằng số quay. Ở đây khoảng cách giữa hai mức năng lượng cạnh nhau là

$$\Delta E_l = E_{l+1} - E_l = 2B_0(l+1) \tag{2.88}$$

Phổ năng lượng của quay tử biểu diễn trên hình (2.18).



Hình 2.18: *Phổ năng lượng của quay tử.*

Bài tập chương II

(2.1) Một mặt bằng kali ở cách ngọn đèn 100W là 75cm. Giả thiết năng lượng bức xạ của đèn trong đơn vị thời gian chỉ bằng 5% công suất định mức. Nếu coi mỗi nguyên tử kali có dạng một đĩa dẹt đường kính 1Å, hãy xác định thời gian cần thiết để mỗi nguyên tử đó hấp thụ một năng lượng bằng công thoát của nó $\varphi_K \cong 2\text{eV}$, theo mẫu sóng ánh sáng. Rút ra nhận xét.

(2.2) Người ta chiếu kali bằng tia cực tím bước sóng 2500Å. Biết công thoát của kali là $2,2eV$, tính động năng cực đại của các electron phát ra. Nếu cường độ bức xạ tới là 2W/m^2, tính số điện tử do một đơn vị diện tích phát ra trong một đơn vị thời gian.

(2.3) Một photon X năng lượng $0,3\text{MeV}$ va chạm trực diện với một electron lúc đầu ở trạng thái nghỉ. Tính vận tốc lùi của electron bằng cách áp dụng các nguyên lý bảo toàn năng lượng và xung lượng. Kiểm tra lại kết quả bằng công thức Compton.

(2.4) Tính hiệu điện thế gia tốc cần thiết để bước sóng kết hợp với một electron (sóng De Broglie) có bước sóng 1Å (vào cỡ khoảng cách giữa các nguyên tử trong tinh thể).

(2.5) Chứng tỏ rằng khi một hạt có năng lượng rất lớn so với năng lượng nghỉ của nó thì hạt sẽ có bước sóng kết hợp gần đúng bằng bước sóng của photon có cùng năng lượng.

(2.6) Tính vận tốc pha và vận tốc nhóm của một sóng De Broglie có bước sóng $\lambda = h/p = h/mv$.

(2.7) Một chùm hẹp electron năng lượng 60keV đi xuyên qua một màng đa tinh thể bạc (Ag) có khoảng cách giữa mặt mạng là $d = 4,08$Å. Xác định bán

kính ảnh nhiễu xạ bậc nhất trên màn hình đặt ở sau màng bạc 40cm.

(2.8) Ta giả thiết $h = 6,625 \cdot 10^{-3}$Js thay cho $6,62510^{-34}$Js. Người ta ném các viên bi khối lượng 66,25g với vận tốc 5m/s xuyên qua hai cửa sổ hẹp, song song và cách nhau 0,6m. Mỗi lần ném, viên bi lọt qua cửa sổ nào là hoàn toàn ngẫu nhiên. Tính khoảng cách vân của ảnh giao thoa trên tường cách phía sau cửa sổ 12m.

(2.9) Giả sử ta có thể đo được xung lượng của một hạt đến phần nghìn. Xác định độ bất định cực tiểu về vị trí của hạt:

a- Nếu hạt có khối lượng 5mg và vận tốc 2m/s.

b- Nếu hạt là điện tử có vận tốc $1,8 \cdot 10^8$m/s.

(2.10) Độ rộng của một vạch quang phổ bước sóng 4000Å bằng 10^{-4}Å. Tính thời gian trung bình để hệ nguyên tử ở trạng thái năng lượng đó.

(2.11) Giả sử độ bất định về xung lượng của một hạt đúng bằng xung lượng của nó. Tìm hệ thức giữa độ bất định cực tiểu về vị trí hạt và bước sóng De Broglie của nó.

(2.12) Giả thiết năng lượng của một hạt đang chuyển động theo đường thẳng là $E = \frac{1}{2}mv^2$, chứng minh rằng $\Delta E \cdot \Delta t \geq h/2\pi$, trong đó $\Delta t = \Delta x/v$.

(2.13) Một hạt khối lượng m bị bắt buộc phải ở trên đoạn thẳng L. Dựa vào nguyên lý bất định hãy xác định năng lượng cực tiểu mà hạt có thể có.

Nếu trong hạt nhân, có đường kính 10^{-14}m, có mặt một điện tử thì động năng cực tiểu của nó bằng bao nhiêu.

(2.14) Tìm hàm riêng và trị riêng của toán tử $\hat{L} = i\frac{d}{dx}$. Qua đó chứng minh rằng hình chiếu xung lượng của hạt tự do là đại lượng không bị lượng tử hoá.

(2.15) Một vi khuẩn rất nhỏ (tiny bacterium) có khối lượng 10^{-14}kg bị nhốt giữa hai vách cứng cách nhau 0,1mm. Xác định vận tốc nhỏ nhất của nó. Nếu vận tốc của nó khoảng 1mm trong 100s, hãy xác định số lượng tử ứng với trạng thái đó của nó.

(2.16) Một điện tử có động năng 50eV đến gần một hàng rào hình chữ nhật có chiều cao 70eV và bề dày là

$$a/L = 1,0\text{nm}$$

$$b/L = 0,1\text{nm}$$

Hãy tính xác suất điện tử đi qua theo hiệu ứng đường ngầm.

(2.17) Chứng minh rằng biên độ A của các hàm sóng mô tả các trạng thái của hạt trong một hố thế năng có vách cao vô cực là $A = \sqrt{2/L}$, trong đó L là bề rộng của hố thế.

(2.18) a/ Tính ba mức năng lượng thấp nhất của điện tử nhốt trong một hố thế có vách vô cực, bề rộng $L = 10^{-10}$m.

b/ Nếu một photon được phát ra khi điện tử chuyển từ mức có $n = 2$ xuống mức có $n = 1$ thì bước sóng của photon bằng bao nhiêu.

Đáp số

(2.1). $t = 57,6$s;

(2.2). $T_{\max} = 2,75$eV; Je $= 2.52 \cdot 10^{18} \frac{\text{electron}}{\text{m}^2\text{s}}$.

(2.3). $v = 0,65c$;

(2.4) $U = 151$V.

(2.5).$\lambda_\gamma = \frac{hc}{E} = \lambda$.

(2.6) $v_f = \frac{c^2}{v}$; $v_g = v$.

(2.7). $R = 0,478$cm.

(2.8) $\Delta y = 0,4$m.

(2.9)a/ $\Delta x = 10,56 \cdot 10^{-20}$Å; b/ $\Delta = 5,14$Å.

(2.10) $\tau = 8,48 \cdot 10^{-9}s$.

(2.11) $\Delta x = \frac{\lambda}{2\pi}$.

(2.13). $E = \frac{h^2}{32\pi^2 mL^2}$; $T_{\min} = 9,35$MeV. (2.15). $v = 3.10^{-16}$m/s; $n = 3 \cdot 10^{10}$.

(2.16). $a/b/D = e^{-46} = 1,3 \cdot 10^{-20}$.

(2.18). $E_1 = 37,7eV, E_2 = 151$eV, $E_3 = 339$eV; $\lambda = 1,1 \cdot 10^{-8}$m.

Chương 3

PHỔ NĂNG LƯỢNG CỦA CÁC HỆ HẠT LƯỢNG TỬ

Vào cuối thế kỷ 19, nhiều công trình thực nghiệm đã được tiến hành nhằm nghiên cứu phổ gián đoạn của các bức xạ phát ra trong các quá trình phóng điện trong chất khí. Thực nghiệm cho thấy phổ của hydro là phổ đơn giản nhất, bước sóng của bức xạ do nguyên tử hydro phát ra đều được tìm thấy từ một công thức thực nghiệm đơn giản: công thức Rydberg:

$$\frac{1}{\lambda} = R(\frac{1}{n_l^2} - \frac{1}{n_u^2}) \quad \text{với} \quad R = 1,0967758 \cdot 10^{-3} \text{Å}^{-1} \tag{3.1}$$

ở đây

- $n_l = 1$ và $n_u = 2, 3, 4, \ldots$ cho ta dãy Lyman (tử ngoại),
- $n_l = 2$ và $n_u = 3, 4, 5, \ldots$ cho ta dãy Balmer (nhìn thấy),
- $n_l = 3$ và $n_u = 4, 5, 6, \ldots$ cho ta dãy Paschen (hồng ngoại),
- $n_l = 4$ và $n_u = 5, 6, 7, \ldots$ cho ta dãy Brackett (hồng ngoại xa).

Chính những kết quả thực nghiệm này đã làm cơ sở vật lý cho những lý thuyết về nguyên tử hydro như mẫu nguyên tử Bohr.

Xác định phổ năng lượng của điện tử trong các hệ lượng tử như nguyên tử, phân tử, hay tinh thể rắn là bài toán quan trọng bậc nhất của vật lý lượng tử. Những kết quả về lý thuyết và thực nghiệm trong lĩnh vực này là hết sức vĩ đại. Những kết quả đó đã được ứng dụng rộng rãi trong kỹ thuật, công nghệ, đặc biệt là trong kỹ thuật điện tử.

Trong chương này chúng ta sẽ nghiên cứu những bài toán xác định phổ năng lượng của hệ lượng tử từ đơn giản như nguyên tử hydro đến phân tử và

cuối cùng đến phổ năng lượng của điện tử trong tinh thể chất rắn. Cuối chương này chúng ta đề cập đến một ứng dụng quan trọng trong lĩnh vực quang điện tử: nguyên lý hoạt động của các laser trong đó sử dụng kết quả nghiên cứu các phổ năng lượng của nguyên tử, đó là laser khí như laser He-Ne, laser tinh thể sử dụng phổ năng lượng của các ion phụ gia như laser hồng ngọc.

Những ứng dụng kết quả nghiên cứu phổ năng lượng của các tinh thể như tinh thể bán dẫn sẽ được trình bày trong chương sau.

3.1 Bài toán về nguyên tử hydro và các ion đồng dạng

Nguyên tử hydro có một hạt nhân với điện tích $+e$ và một điện tử với điện tích $-e$. Để tổng quát hoá ta xét bài toán tương tác giữa một hệ gồm hai điện tích $-e$ và $+ze$. Lực tương tác là lực Coulomb. Trường thế trong đó điện tử chuyển động sẽ là

$$U(r) = -\frac{ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} \tag{3.2}$$

- Phương trình Schrödinger viết cho điện tử chuyển động trong trường đối xứng cầu của hạt nhân có dạng:

$$\Delta\Psi + \frac{2m}{\hbar^2}\left[E + \frac{ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}\right]\Psi. = 0 \tag{3.3}$$

Trong tọa độ cầu (r, θ, φ) phương trình (3.3) có dạng

$$\begin{aligned} &\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}(r^2\frac{\partial\Psi}{\partial r}) + \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\frac{\partial\Psi}{\partial\theta}) + \\ &\frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2\Psi}{\partial\varphi^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E + \frac{ze^2}{4\pi\epsilon_0 r})\Psi = 0 \end{aligned} \tag{3.4}$$

- Giải phương trình này theo phương pháp tách biến số, bằng cách đặt

$$\Psi(r, \theta, \varphi) = R(r) \cdot \phi(\theta, \varphi) \tag{3.5}$$

Thay (3.5) vào (3.4) ta tìm được hai phương trình:

$$\frac{1}{R}\frac{\partial}{\partial r}(r^2\frac{\partial R}{\partial r}) + \frac{2m}{\hbar^2}(E + \frac{ze^2}{4\pi\epsilon_0 r})r^2 = \lambda \tag{3.6}$$

$$\frac{1}{\phi}\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\frac{\partial\phi}{\partial\theta}) + \frac{1}{\phi}\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2\Phi}{\partial\varphi^2} = -\lambda. \tag{3.7}$$

λ hằng số biến đổi.

Ta có thể tiếp tục tách các biến góc θ và φ bằng cách đặt:

$$\phi(\theta, \varphi) = X(\theta) \cdot Y(\varphi) \tag{3.8}$$

Thay (3.8) vào (3.7) ta được hai phương trình

$$\left[\frac{1}{X(\theta)} \frac{1}{\sin\theta} \frac{d}{d\theta}(\sin\theta \frac{dX}{d\theta}) + \lambda\right] \sin^2\theta = m_l^2 \tag{3.9}$$

$$\frac{1}{Y} \frac{d^2Y}{d\varphi^2} = -m_l^2. \tag{3.10}$$

m_l^2 là hằng số biến đổi.

Nghiệm của phương trình (3.10) có dạng

$$Y(\varphi) = A \cdot e^{im_l\varphi} \tag{3.11}$$

trong đó A là hằng số có thể xác định từ điều kiện chuẩn hoá. Nghiệm này là bị chặn và liên tục, muốn nó thoả mãn điều kiện đơn trị ta cần có:

$$e^{im_l\varphi} = e^{im_l(\varphi+2\pi)} \tag{3.12}$$

thì m_l chỉ có thể là các số nguyên,

$$m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \ldots \tag{3.13}$$

Bây giờ ta xét phương trình (3.9) và viết lại nó dưới dạng

$$\frac{1}{\sin\theta} \frac{d}{d\theta}(\sin\theta \frac{dX}{d\theta}) - \frac{m_l^2}{\sin^2\theta} X(\theta) + \lambda X(\theta) = 0 \tag{3.14}$$

ở đây m_l^2 đã thoả mãn điều kiện (3.13).

Người ta đã chứng minh rằng phương trình (3.14) chỉ có nghiệm hữu hạn và liên tục khi

$$\lambda = l(l+1) \quad \text{với} \quad l = 0, 1, 2, \ldots \tag{3.15}$$

$$\text{và} \qquad |m_l| \leq l \tag{3.16}$$

Vậy với mỗi giá trị l, m_l có thể nhận các giá trị

$$m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots, \pm l$$

tức là m_l có thể nhận $(2l+1)$ giá trị khác nhau.

Nghiệm của phương trình (3.14) có dạng là một hàm số cầu:

$$X_{l,m_l}(\theta) = \sqrt{\frac{2l+1}{2} \cdot \frac{(l-m_l)!}{(l+|m_l|)!}} P_1^{|m_l|}(\cos\theta) \tag{3.17}$$

Trong đó $P_\alpha^{m_l}(\eta) = (1-\eta^2)^{m_l/2} \frac{d^{m_l}}{d\eta^{m_l}} [P_\alpha(\eta)]$; $P_\alpha(\eta)$ là đa thức Legiandre:

$$P_\alpha(\eta) = \frac{1}{2^\alpha l!} \frac{d^\alpha}{d\eta^\alpha} \left[(\eta^2-1)^\alpha\right]; P_1(\cos\theta) = \frac{1}{l!}\cos\theta$$

ta có thể viết một vài hàm X_{l,m_l} đầu tiên làm ví dụ:

với

$l=0$	$m_l=0$	ta có	$X_{00} = \frac{1}{\sqrt{2}}$
$l=1$	$m_l=0$	ta có	$X_{10} = \sqrt{\frac{3}{2}}\cos\theta$
$l=1$	$m_l=1$	ta có	$X_{11} = \sqrt{\frac{3}{4}}\sin\theta$
$l=1$	$m_l=-1$	ta có	$X_{1,-1} = \sqrt{\frac{3}{4}}\sin\theta$

Thay $\lambda = l(l+1)$ vào phương trình (3.6) ta viết lại dưới dạng

$$\frac{d}{dr}(r^2\frac{dR}{dr}) + \frac{2m}{\hbar^2}\left[Er^2 + \frac{ze^2r}{4\pi\epsilon_0} - \frac{l(l+1)\hbar^2}{2m}\right]R = 0 \tag{3.18}$$

Kết quả khảo sát phương trình này cho thấy:

a/ Nếu $E = (\frac{mv^2}{2} - \frac{ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}) > 0$ phương trình (3.18) có nghiệm với mọi giá trị E. Trong trường hợp này ta được một phổ giá trị riêng E liên tục, tức là năng lượng cho phép của điện tử không bị lương tử hoá. Điều này rất dễ hiểu vì khi $E > 0$, động năng của điện tử đã thắng được lực hút Coulomb và điện tử được hoàn toàn tự do, nó có thể chuyển động ra xa hạt nhân một khoảng vô cùng lớn.

b/ Nếu $E < 0$, phương trình (3.18) chỉ có nghiệm thoả mãn các điều kiện đối với một số giá trị hoàn toàn xác định của E. Để tìm những giá trị đó người ta giải phương trình (3.18) qua hai bước.

Trước hết tìm nghiệm tiệm cận của phương trình, tức là nghiệm ứng với điều kiện $r \longrightarrow \infty$ (điện tử ở rất xa và độc lập với hạt nhân), khi đó phương trình (3.18) có dạng gần đúng với $r \longrightarrow \infty$:

$$\frac{d^2R}{dr^2} + \frac{2m}{\hbar^2}ER = 0 \tag{3.19}$$

Nghiệm của (3.19) có dạng

$$R_\alpha = A_1 e^{\alpha r} + B_1 e^{-\alpha r}$$

A_1, B_1 là hằng số, $\alpha = \sqrt{-\frac{2m}{\hbar^2}E} > 0$. Để thoả mãn điều kiện hữu hạn của hàm sóng ta phải giả thiết $A_1 = 0$ và ta có

$$R_\alpha = B_1 e^{-\alpha r} \tag{3.20}$$

Tiếp theo ta tìm nghiệm gần đúng của (3.18) bằng cách đặt:

$$R = R_\alpha \cdot f = e^{-\alpha r} f \text{ với } f = \rho^\gamma \sum_{i=0}^{\infty} a_i \rho^i$$

Trong đó ρ là một biến số không thứ nguyên, $\rho = \frac{r}{r_0}$ với r_0 là độ dài đặc trưng trong hàm R_α theo (3.20), $r_0 = \frac{1}{\alpha}$.

Nghiệm của phương trình (3.18) có dạng

$$R = e^{-\alpha r} \sum_{i=0}^{\infty} a_i \rho^{\gamma+i} \tag{3.21}$$

Kết quả khảo sát hàm R từ điều kiện hữu hạn thấy rằng muốn R đáp ứng điều kiện hàm sóng ta chỉ có thể lấy được n_r số hạng trong chuỗi và cần loại bỏ các số hạng bắt đầu từ số hạng thứ $(n_r + 1)$ trong chuỗi.

Từ đây ta rút ra được biểu thức xác định các giá trị năng lượng cho phép của điện tử liên kết với hạt nhân:

$$E_n = -\frac{mz^2e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2 2\hbar^2}\frac{1}{n^2} \tag{3.22}$$

Trong công thức này m là khối lượng của điện tử, còn n nhận những giá trị $n \geq l + 1$ và gọi là số lượng tử chính.

Vì $n \geq l + 1$ mà $l = 0, 1, 2, \ldots$ do vậy $n = 1, 2, 3, \ldots$

Đối với nguyên tử hyđro thay các số liệu vào (3.22) ta có

$$E_n = -13,58\frac{1}{n^2}(\text{eV}) \tag{3.23}$$

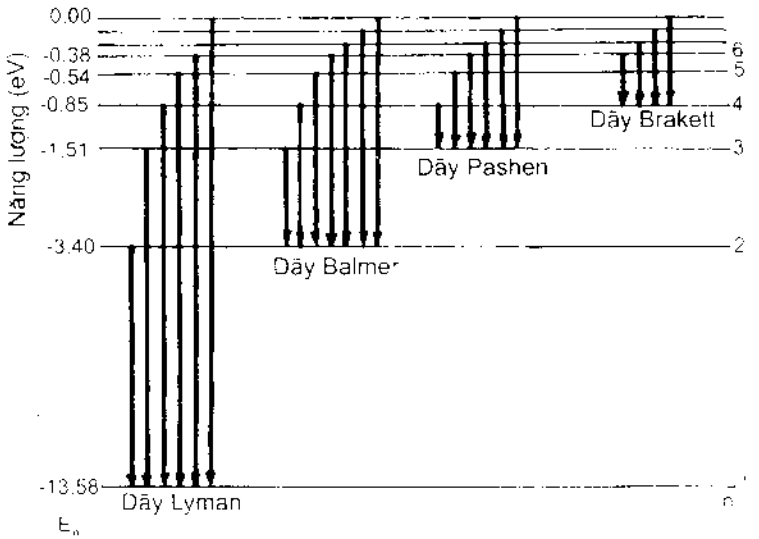
Thay các giá trị n vào (3.23) ta được các giá trị năng lượng cho phép của điện tử trong nguyên tử hyđro, phổ năng lượng của hyđro được mô tả ở hình (3.1). Giá trị một vài mức năng lượng đó là:

$n = 1 \quad E_1 = -13,58\text{eV}$

$n = 2 \quad E_2 = -3,40\text{eV}$

$n = 3 \quad E_3 = -1,51\text{eV}$

$n = \infty \quad E_\infty = 0\text{eV}$ trạng thái ion hoá



Hình 3.1: *Sơ đồ phổ năng lượng của hydro.*

Ở đây cực tiểu tuyệt đối của năng lượng ứng với $n = 1$ và chính giá trị tuyệt đối của nó bằng năng lượng ion hoá nguyên tử hydro

$$|E_1| = E_{\text{ionhoá}} = 13,58\text{eV}$$

Từ hình (3.1) ta cũng hiểu được sự hình thành các dãy quang phổ như dãy Lyman, dãy Ballmer, dãy Paschen, dãy Brackett.

- Dạng cụ thể của hàm bán kính $R(r)$ trong trường hợp $E < 0$ với năng lượng bị lượng tử hoá:

$$R_n(r) = \sqrt{\frac{4(n-l-1)!}{n^4[(n+l)!]^3}} \left(\frac{z}{a_B}\right)^{\frac{3}{2}} \left(\frac{2rz}{na_B}\right)^l e^{-\frac{zr}{na_B}} L_{l+n}^{2l+1}\left(\frac{2rz}{na_B}\right) \tag{3.24}$$

$$\text{với} \qquad L_\beta^\alpha(\eta) = \frac{d^\beta}{d\eta^\beta}\left[e^\eta \frac{d^\alpha}{d\eta^\alpha}(\eta^\alpha e^{-\eta})\right]; \beta \le \alpha.$$

$a_B = \frac{\hbar^2}{me^2} = 0,529 \cdot 10^{-8}\text{cm}$ được gọi là bán kính Bohr.

Ví dụ một số hàm bán kính cụ thể:

$$\begin{aligned} n=1 \quad l=0 \quad & R_{10} = 2\left(\frac{z}{a_B}\right)^{3/2} e^{-\frac{zr}{a_B}} \\ n=2 \quad l=0 \quad & R_{20} = \frac{1}{2\sqrt{2}}\left(\frac{z}{a_B}\right)^{3/2} (2-\frac{zr}{a_B}) e^{-\frac{zr}{2a_B}} \\ n=2 \quad l=1 \quad & R_{21} = \frac{1}{2\sqrt{6}}\left(\frac{z}{a_B}\right)^{3/2} \frac{zr}{a_B} e^{-\frac{zr}{2a_B}}. \end{aligned} \tag{3.25}$$

Bây giờ ta xét nghiệm tổng quát của bài toán. Trước hết chúng ta nhận thấy rằng trong quá trình tìm nghiệm từ điều kiện của hàm sóng đã xuất hiện 3 số lượng tử:

- $n = 1, 2, 3, \ldots, \infty$ số lượng tử chính xác định năng lượng của trạng thái.

- $l = 0, 1, 2, \ldots, (n-1)$ số lượng tử quỹ đạo xác định độ lớn của mômen động lượng qũy đạo.

- $m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots, \pm l$ số lượng tử từ xác định hình chiếu của mômen động lượng đó lên một trục xác định, nghĩa là xác định phương hướng của mômen động lượng qũy đạo.

Cả ba số lượng tử này xác định hàm sóng $\Psi_{nlm_l}(r, \theta, \varphi)$ tức là xác định trạng thái của điện tử trong nguyên tử. Nói cách khác bất cứ trạng thái nào của điện tử đều được xác định bằng tập hợp 3 số lượng tử trên. Để tiện cho việc sử dụng, người ta ký hiệu các trạng thái điện tử như sau

n	1	2		3		
l	0	0	1	0	1	2
m_l	0	0	$0, +1, -1$	0	$0, +1, -1$	$0, +1, -1, +2, -2$
Trạng thái	$1s$	$2s$	$2p$	$3s$	$3p$	$3d$

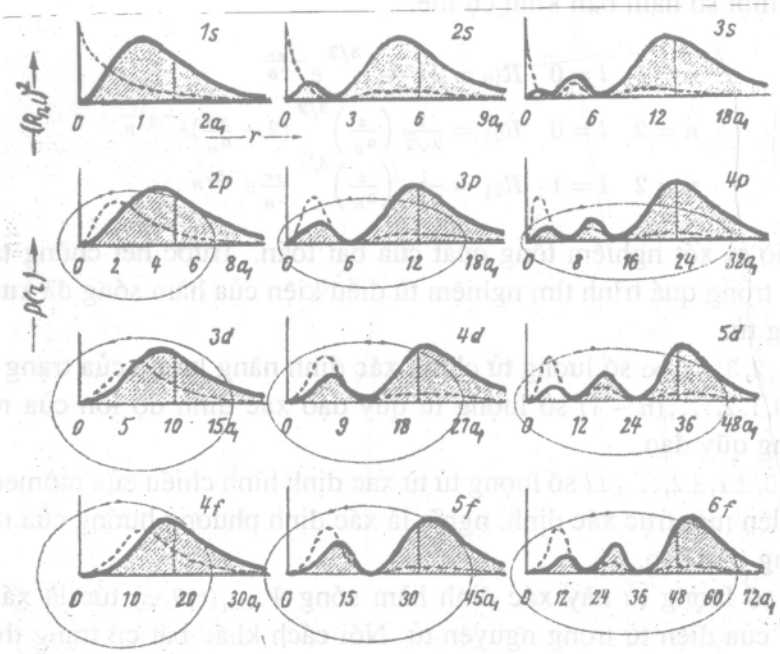
Như vậy quy tắc ký hiệu trạng thái của điện tử dựa vào số lượng tử l : ứng với $l = 0, 1, 2, 3 \ldots$ ta có các trạng thái được ký hiệu là $s, p, d, f \ldots$ còn số lượng tử chính n được đặt trước ký hiệu chữ đó.

- Nghiệm tổng quát của bài toán có dạng:

$$\Psi_{nlm_l}(r, \theta, \varphi) = R_{nl}(r) X_{lm_l}(\theta) Y_{m_l}(\varphi) \tag{3.26}$$

Xác suất tìm thấy điện tử ở trạng thái được đặc trưng bằng ba số lượng tử n, l, m_l trong phần tử thể tích dV bằng

$$\begin{aligned} dW &= |\Psi_{nlm_l}(r, \theta, \varphi)|^2 dV = |\Psi_{nlm_l}(r, \theta, \varphi)|^2 r^2 \sin\theta dr d\theta d\varphi \\ &= |R_{nl}(r)|^2 r^2 dr \cdot |\Phi_{lm_l}(\theta, \varphi)|^2 \sin\theta d\theta d\varphi. \end{aligned} \tag{3.27}$$



Hình 3.2: *Đồ thị biểu diễn các hàm $|R_{nl}|^2$ (đường đứt nét) và $P(r)$ (đường liền nét) đối với các trạng thái khác nhau, theo khoảng cách r tính theo bán kính Borh (a_B).*

Nếu lấy tích phân cả hai vế của (3.27) theo mọi giá trị của θ và φ ta được xác suất tìm thấy điện tử ở trong một vùng được giới hạn bởi hai mặt cầu có bán kính r và $r + dr$.

$$dW(r) = |R_{nl}(r)|^2 r^2 dr \int_0^{\pi} |X_{lm_l}(\theta)|^2 \sin\theta d\theta \int_0^{2\pi} |Y_{m_l}(\varphi)|^2 d\varphi \qquad (3.28)$$

Từ điều kiện chuẩn hoá của các hàm số góc $X_{lm_l}(\theta)$ và $Y_{m_l}(\varphi)$ ta có

$$dW(r) = |R_{nl}(r)|^2 r^2 dr = P(r)dr; \text{ với } P(r) = |R_{nl}(r)|^2 r^2 \qquad (3.29)$$

Đồ thị biểu diễn các hàm $|R_{nl}|^2$ và $P(r)$ có dạng như trên hình (3.2), ở đây đường liền nét biểu diễn hàm $P(r)$, đường đứt nét biểu diễn hàm $|R_{nl}|^2$, diện tích phần gạch gạch biểu diễn mật độ xác suất tìm thấy điện tử, vạch đứng đậm nét chỉ vị trí của đại lượng trung bình, a_B - bán kính Bohr.

Bây giờ nếu ta lấy tích phân biểu thức (3.27) theo mọi giá trị của r sẽ thu được biểu thức xác định xác suất tìm thấy điện tử trong góc khối $d\Omega = \sin\theta d\theta d\varphi$

theo phương (θ, φ).

$$\begin{aligned} dW(\theta,\varphi) &= |\Phi_{lm_l}(\theta,\varphi)|^2 d\Omega \int_0^\infty |R_{nl}(r)|^2 dr \\ &= |X_{lm_l}(\theta)|^2 \cdot |Y_{m_l}(\varphi)|^2 d\Omega \int_0^\infty |R_{nl}(r)|^2 r^2 dr \\ &\quad (\quad \text{vì} \quad |Y_{lm_l}(\varphi)|^2 = \frac{1}{2\pi}) \\ dW(\theta,\varphi) &= \frac{1}{2\pi}|X_{lm_l}(\theta)|^2 \sin\theta d\theta d\varphi. \end{aligned} \tag{3.30}$$

Đồ thị hàm $|X_{lm_l}(\theta)|^2$ trong hệ tọa độ cực có dạng như ở hình (3.3).

Trong trường hợp $l = 0$, hàm $|X_{lm_l}(\theta)|^2$ không phụ thuộc vào góc θ, tức là mật độ xác suất có tính đối xứng cầu. Trong các trường hợp $l \neq 0$, sự phân bố xác suất theo góc khối phức tạp hơn.

Năng lượng của điện tử trong nguyên tử hydro được xác định bởi số lượng tử n, còn hàm sóng mô tả trạng thái của điện tử đó lại được xác định bởi tập 3 số lượng tử n, l, m_l. Trong trường hợp này người ta nói rằng mức năng lượng của điện tử là mức suy biến theo số lượng tử n.

Có thể đưa ra một định nghĩa tổng quát về mức năng lượng suy biến như sau. Mức năng lượng E_i của hệ vi mô được gọi là suy biến nếu ứng với giá trị năng lượng đó có nhiều hơn một hàm trạng thái Ψ_{ij}; với $j = 1, 2, \ldots, g$, đều là nghiệm của phương trình Schrödinger:

$$\hat{H}\Psi_{ij} = E_i\Psi_{ij} \tag{3.31}$$

ngoài ra tổ hợp tuyến tính của các hàm số đó

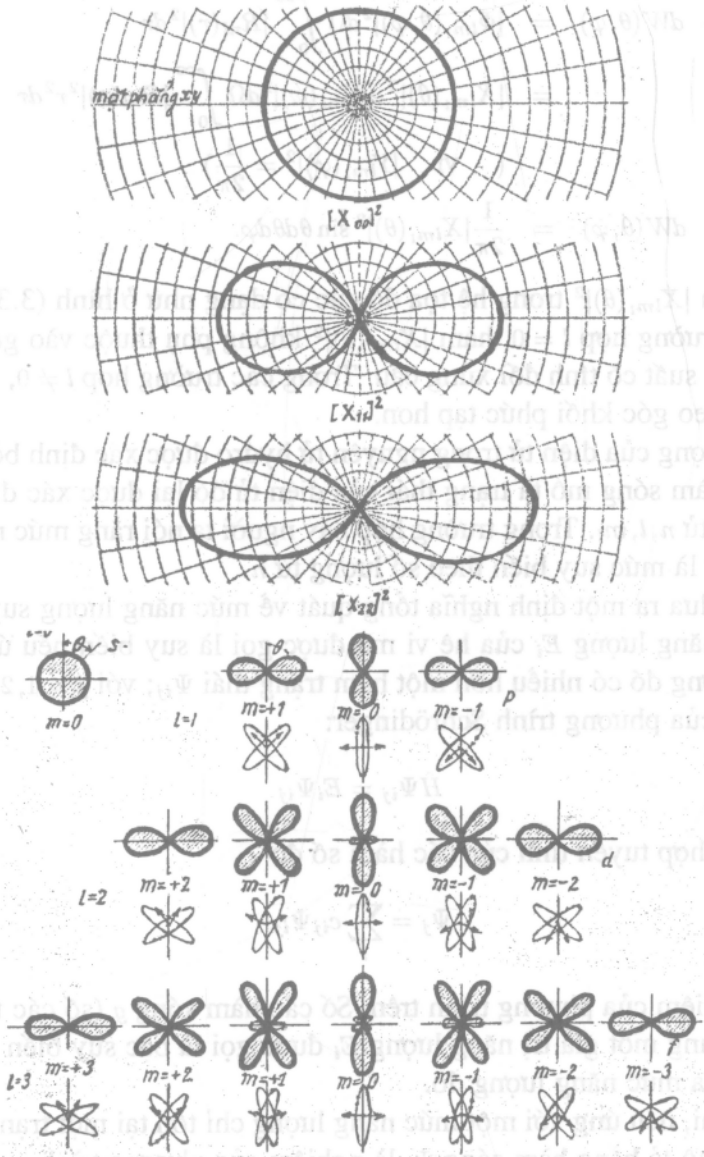
$$\Psi_j = \sum_i c_{ij}\Psi_{ij} \tag{3.32}$$

cũng là nghiệm của phương trình trên. Số các hàm sóng g (số các trạng thái) có cùng chung một giá trị năng lượng E_i được gọi là bậc suy biến hay lượng thống kê của mức năng lượng đó.

Ngược lại, nếu ứng với một mức năng lượng chỉ tồn tại một trạng thái duy nhất được mô tả bằng hàm sóng Ψ_i là nghiệm của phương trình

$$\hat{H}\Psi_i = E_i\Psi_i$$

thì mức năng lượng đó được gọi là không suy biến.



Hình 3.3: *Đồ thị biểu diễn hàm* $|X_{lm_l}|^2$ *trong hệ tọa độ cực.*

Áp dụng định nghĩa trên ta xác định được bậc suy biến của các mức năng lượng của điện tử trong nguyên tử hyđro. Với một giá trị n cho trước l có thể nhận các giá trị từ 0 đến $(n-1)$. Đồng thời với mỗi giá trị l cho trước m_l lại có thể nhận $(2l+1)$ giá trị. Vậy ta có

$$g = \sum_{l=0}^{n-1}(2l+1) = n^2 \tag{3.33}$$

Ta thấy rằng trừ mức năng lượng cơ bản E_1 ra, còn tất cả các mức năng lượng khác của nguyên tử hyđro đều suy biến theo số lượng tử n.

Sự khác nhau cơ bản giữa mức năng lượng suy biến và mức năng lượng không suy biến là khi có tác dụng phụ lên nguyên tử, ví dụ khi đặt nguyên tử trong từ trường, các mức năng lượng suy biến bị tách ra thành nhiều phân mức khác nhau. Số các phân mức này nói chung bằng bậc suy biến cuả mức năng lượng suy biến ban đầu. Hiện tượng này gọi là sự mất suy biến.

3.2 Hệ nhiều điện tử, nguyên lý loại trừ Pauli

3.2.1 Hệ nhiều điện tử. Cho đến nay chúng ta chỉ nghiên cứu các hệ với nhiều mức năng lượng nhưng chỉ chứa một điện tử, nghĩa là trong nguyên tử hyđro và các ion đồng dạng ($He^+, Li^{++}, Be^{+++}, \ldots$) Đối với các hệ này phương trình Schrödinger giải được một cách dễ dàng bằng phương pháp giải tích, nó cho phép ta xác định được chính xác hàm sóng $\Psi_{nlm_l}(r,\theta,\varphi)$ mô tả các trạng thái dừng của điện tử và các giá trị năng lượng cho phép E_n.

Đối với các nguyên tử có từ hai điện tử trở lên, bài toán trở nên phức tạp hơn nhiều vì ở đây ta phải xác định trạng thái của một hệ nhiều hạt tương tác lẫn nhau.

Giả sử ta có một hệ gồm một hạt nhân với điện tích dương $+ze$ và N điện tử. Hàm sóng biểu diễn trạng thái của hệ này dĩ nhiên sẽ phụ thuộc vào tọa độ của N điện tử và có dạng:

$$\Psi = \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3, ..., \vec{r}_N) = \Psi(x_1, y_1, z_1, x_2, y_2, z_2, ..., x_N, y_N, z_N) \tag{3.34}$$

Hàm sóng này là nghiệm của phương trình Schrödinger

$$\sum_{i=1}^{N} \Delta_i \Psi + \frac{2m}{\hbar^2}[E - U] = 0 \tag{3.35}$$

với $\Delta_i = \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_i^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_i^2}$,

E - năng lượng toàn phần của cả hệ, U - thế năng của cả hệ bao gồm thế năng tương tác giữa hạt nhân với từng điện tử và giữa các điện tử với nhau.

$$U = \sum_{i=1}^{N} U_i(x_i, y_i, z_i) + \sum_{i \neq j} V(|x_i - x_j|, |y_i - y_j|, |z_i - z_j|) \tag{3.36}$$

Ở đây bình phương modun của hàm sóng $|\Psi|^2$ sẽ xác định gía trị xác suất tìm thấy một điện tử ở tọa độ $\vec{r}_1$, một điện tử khác ở tọa độ $\vec{r}_2 \cdots$.

Cần lưu ý rằng do nguyên lý không thể phân biệt các hạt cùng loại, nên ở đây ta không nói $|\Psi^2|$ là xác suất tìm thấy điện tử thứ nhất ở tọa độ $\vec{r}_1$, điện tử thứ 2 ở tọa độ $\vec{r}_2$... Do sự phức tạp của biểu thức thế năng (3.36) phương trình (3.35) chỉ giải được bằng phương pháp gần đúng.

- Gần đúng đơn giản nhất (gần đúng bậc không) là gần đúng mà trong đó người ta bỏ qua tương tác giữa điện tử với nhau. Khi đó ta có một hệ các phương trình có dạng:

$$\Delta_i \Psi_i(x_i, y_i, z_i) + \frac{2m}{\hbar^2}[E_i - U_i(x_i, y_i, z_i)]\Psi_i(x_i, y_i, z_i) = 0 \tag{3.37}$$

và hàm sóng gần đúng bậc không của cả hệ là:

$$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, ..., \vec{r}_N) = \Psi_1(\vec{r}_1)\Psi_1(\vec{r}_2) \cdots \Psi_1(\vec{r}_N) \tag{3.38}$$

Năng lượng toàn phần của hệ là

$$E = \sum_{i=1}^{N} E_i$$

Tuy nhiên trên thực tế trong nhiều bài toán ta không thể bỏ qua tương tác của điện tử với nhau, ví dụ khi số điện tử nhiều hơn 10 thì thế năng tương tác giữa điện tử với nhau xấp xỉ thế năng tương tác giữa điện tử với hạt nhân.

Phương pháp gần đúng thứ hai là phương pháp trường tự hợp. Giả sử ta xét một điện tử i nào đó, thế năng của điện tử này bao gồm thế năng tương tác với hạt nhân $U(x_i, y_i, z_i)$ của điện tử đó và thế năng tương tác giữa điện tử thứ i đó với các điện tử khác là V_{Ni}, nó phụ thuộc vào tọa độ của $(N-1)$ điện tử khác. Giả sử chúng ta có thể thay thế thế năng tương tác V_{Ni} bằng một thế năng hiệu dụng V_i^* sao cho:

- Về độ lớn V_i^* gần bằng năng lượng tương tác của điện tử i với $(N-1)$ điện tử còn lại, V_{Ni}.

- V_i^* chỉ phụ thuộc vào tọa độ của điện tử i, (x_i, y_i, z_i). Trong trường hợp đó ta có thể viết

$$U = \sum_{i=1}^{N} U_i(x_i, y_i, z_i) + \sum_{i}^{N} V_i^*(x_i, y_i, z_i) = \sum_{i}^{N}(U_i + V_i^*) \tag{3.39}$$

và phương trình (3.35) được thay thế bằng hệ phương trình

$$\Delta_i \Psi_i(x_i, y_i, z_i) + \frac{2m}{\hbar^2}[E_i - (U_i + V_i^*)]\Psi_i = 0 \tag{3.40}$$

Hệ phương trình (3.40) có chứa V_i^* và được giải tương tự như phương trình (3.3). Vấn đề quan trọng ở đây là chọn được V_i^* thích hợp.

3.2.2 Spin của điện tử. Trong quá trình giải phương trình Schrödinger đối với nguyên tử đã xuất hiện ba số lượng tử n, l, m_l mà ý nghĩa vật lý của chúng có thể tóm gọn như sau:

a/ Số lượng tử chính n xác định năng lượng toàn phần của điện tử theo quy tắc lượng tử hoá:

$$E_n = -\frac{mz^2e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2\hbar^2}\frac{1}{n^2}, \quad n = 1, 2, 3, .. \tag{3.41}$$

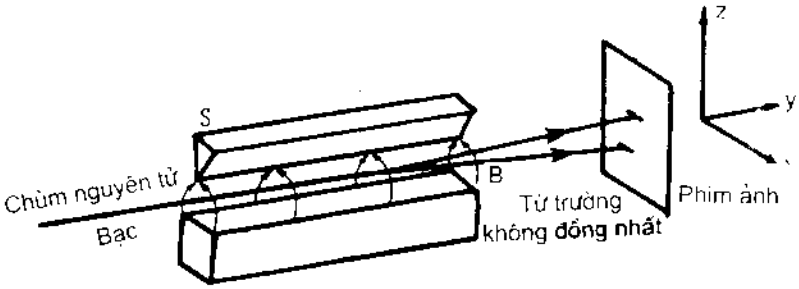
b/ Số lượng tử quỹ đạo l xác định độ lớn của mômen động lượng quỹ đạo của điện tử trong quá trình chuyển động xung quanh hạt nhân theo quy tắc

$$M_l = \hbar\sqrt{l(l+1)}, \quad l = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots, \pm(n-1) \tag{3.42}$$

c/ Số lượng tử từ m_l xác định độ lớn hình chiếu của monen động lượng quỹ đạo trên trục z cho trước

$$M_{l_z} = \hbar m_l, \quad m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots, \pm l \tag{3.43}$$

Cần lưu ý rằng số lượng tử này chỉ có ý nghĩa vật lý khi có tác dụng của trường ngoài lên nguyên tử bởi vì chỉ nhờ có trường ngoài mới có sự phân chia thành những phương xác định trong không gian và khi đó ta mới có thể xác định được hình chiếu của monent động lượng lên phương của trường ngoài. Như vậy hai số lượng tử l và m_l xác định độ lớn và hướng của mômen động lượng qũy đạo của điện tử. Vì điện tử là một hạt tích điện nên đồng thời với mômen động lượng nó còn có mômen từ. Mômen từ qũy đạo của điện tử được ký hiệu là $\vec{\mu}_l$, có chiều ngược với mômen động lượng qũy đạo $\vec{M}_l$. Có thể chứng minh rằng $\vec{\mu}_l = -\frac{e}{2m}\vec{M}_l$.



Hình 3.4: *Sơ đồ thí nghiệm của Stern và Gerlach.*

Đại lượng $(-\frac{e}{2m})$ được gọi là hệ số từ cơ của mômen qũy đạo. Sự tương tác giữa mômen từ qũy đạo của điện tử với từ trường ngoài đã làm cho mỗi vạch phổ được tách thành nhiều vạch riêng biệt, khi nguyên tử nằm trong từ trường ngoài. Hiện tượng này được gọi là hiệu ứng Zeeman. Hiệu ứng Zeeman được giải thích với giả thuyết rằng một mômen từ $\vec{\mu}$ đặt trong từ trường $\vec{B}$ sẽ có thế năng E_B và $E_B = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}$.

Tuy nhiên kết quả thực nghiệm chứng tỏ rằng tập hợp ba số lượng tử trên chưa đủ xác định một cách trọn vẹn trạng thái của điện tử trong nguyên tử. Để giải thích các kết quả thực nghiệm, đặc biệt là để giải thích vạch kép của quang phổ phát xạ nguyên tử hydro ở trạng thái $1s$, năm 1925 S.A. Goudsmitt và G.E. Uhlenbeck đã đề ra giả thuyết về spin của điện tử và đưa thêm vào đây số lượng tử thứ tư gọi là số lượng tử spin của điện tử để xác định đầy đủ trạng thái của điện tử.

Theo giả thuyết này thì ngoài mômen động lượng quỹ đạo $\vec{M}_l$ được xác định bằng số lượng tử l, điện tử còn có một mômen động lượng riêng gọi là mômen spin $\vec{M}_s$ và mômen từ spin. Giả thuyết về spin giải thích được thí nghiệm của Stern và Gerlach tiến hành vào năm 1921, trong đó một chùm nguyên tử bạc với mômen động lượng quỹ đạo bằng không đi qua một từ trường không đồng nhất bị tách làm hai phần chứa cùng một số nguyên tử dưới dạng hai vệt trên màn chắn nằm phía trên và phía dưới vệt bạc khi không có từ trường. Mô hình thí nghiệm được trình bày ở hình (3.4).

Thí nghiệm này cũng chứng tỏ spin chỉ có thể định hướng theo hai cách khác nhau đối với từ trường ngoài.

Chúng ta thấy rằng đối với số lượng tử l hình chiếu của mômen từ quỹ đạo

lên phương của từ trường cũng chỉ có thể có $(2l+1)$ giá trị. Tương tự ta có thể tính số lượng tử s của spin bằng biểu thức $2 = (2s+1)$, vì hình chiếu của mômen spin chỉ có thể nhận hai gía trị, từ đó $s = 1/2$. Từ kết quả tính toán cho thấy mômen động lượng spin của điện tử có độ lớn M_s bằng:

$$M_s = \hbar\sqrt{s(s+1)} \tag{3.44}$$

Hình chiếu của mômen động lượng spin lên trục định hướng z bất kỳ được xác định bằng biểu thức

$$M_{sz} = \hbar m_s \tag{3.45}$$

với $m_s = s, s-1 = 1/2, -1/2$ là số lượng tử spin.

Kết luận lại số lượng tử spin m_s chỉ có thể nhận hai giá trị $1/2$ và $-1/2$, mômen động lượng spin có thể có hai khả năng định hướng: hoặc là trùng với hướng trường ngoài hoặc là ngược với hướng trường ngoài. Đồng thời với mômen động lượng Spin, điện tử cũng có mômen từ Spin $\vec{\mu}_s$. Giữa mômen động lượng Spin và mômen từ Spin cũng có một hệ thức.

$$\vec{\mu}_s = -g_e \frac{e}{2m}\vec{M}_s$$

với $g_e = 2,002$ và thường lấy gần đúng bằng 2.

- Vậy để đặc trưng đầy đủ cho một trạng thái điện tử ta đã có bốn số lượng tử n, l, m_l, m_s. Hàm số sóng bây giờ là hàm của 4 biến số và có thể ký hiệu như sau

$$\Psi_{nlm_lm_s}(x,y,x,\sigma) = \underbrace{\Psi_{nlm_l}(x,y,z)}_{\text{hàm tọa độ}} \cdot \underbrace{S_{m_s}(\sigma)}_{\text{hàm spin}} \tag{3.46}$$

$\sigma = \pm\frac{1}{2}$ còn được gọi là tọa độ spin.

- Nếu cộng mômen động lượng quỹ đạo với mômen động lượng spin ta được mômen động lượng toàn phần của điện tử

$$\vec{M} = \vec{M}_l + \vec{M}_s \tag{3.47}$$

Độ lớn của mômen $\vec{M}$ này được xác định bằng số lượng tử j gọi là số lượng tử mômen động lượng toàn phần (hay số lượng tử nội).

$$M = \hbar\sqrt{j(j+1)} \tag{3.48}$$

với $j = |l \pm s| = |l \pm 1/2|$; ví dụ $l = 2, j = 5/2, 3/2$.

Hình chiếu của mômen toàn phần $\vec{M}$ lên trục z được xác định bằng biểu thức

$$M_z = \hbar m_j, \quad \text{với} \quad m_j = +j, j-1, ..., -j, \tag{3.49}$$

ví dụ $j = 5/2$ thì $m_j = 5/2, 3/2, 1/2, -1/2, -3/2, -5/2$; có $(2j+1)$ giá trị. Sự tương tác giữa các mômen qũy đạo và Spin có thể giải bằng mẫu bán cổ điển. Trong mẫu bán cổ điển của Bohr điện tử quay quanh hạt nhân với mômen động lượng qũy đạo $\vec{\mu}_l$. Khi nhìn từ phía điện tử thì điện tử thấy hạt nhân mang điện dương quay quanh mình với cùng vận tốc góc. Từ đó suy ra rằng hạt nhân quay quanh điện tử sẽ gây ra tại vị trí của điện tử một từ trường $\vec{B}$ song song với $\vec{M}_l$. Đến lượt mình từ trường nội của hạt nhân này sẽ tác dụng lên mômen từ Spin của điện tử. Do $\vec{\mu}_s$ tỷ lệ với $\vec{M}_s, \vec{B}$ tỷ lệ với $\vec{M}_l$ nên thế năng tương tác giữa $\vec{B}$ và $\vec{\mu}_s$ là

$$E_s = K\vec{M}_l\vec{M}_s, \quad K \text{ là một hằng số}$$

Sự tương tác này gọi là tương tác Spin - qũy đạo. Sự tương tác này thể hiện trong hiệu ứng Zeeman nội, có tác dụng phân tách một mức năng lượng với $\vec{M}_l \neq 0$ thành hai mức con tương ứng với hai giá trị cho phép của M_{lz}.

- Khi tính đến sự tồn tại của spin điện tử và sự phụ thuộc tương đối của khối lượng vào vận tốc, biểu thức xác định các mức năng lượng của điện tử trong nguyên tử hydro và các ion đồng dạng được viết như sau:

$$E_{nj} = \frac{mz^2e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2 2\hbar^2}\frac{1}{n^2}\left\{1 + \frac{\alpha^2 z^2}{n}(\frac{1}{j+\frac{1}{2}} - \frac{3}{4n}\right\} \tag{3.50}$$

trong đó $\alpha = \frac{2\pi e^2}{\hbar c} = \frac{1}{137}$: hằng số cấu trúc tinh tế.

Như vậy ngoài số lượng tử chính n ra, các mức năng lượng còn phụ thuộc vào số lượng tử j. Các mức năng lượng có cùng chung số lượng tử chính nhưng có số lượng tử j (gọi là số lượng tử nội) khác nhau sẽ có giá trị khác nhau. Điều này cũng có nghĩa là mức năng lượng của trạng thái điện tử còn phụ thuộc vào số lượng tử qũy đạo l.

3.2.3 Nguyên lý không thể phân biệt các hạt cùng loại. Nguyên lý loại trừ Pauli. Như đã biết trong cơ học cổ điển các hạt vĩ mô bao giờ cũng chuyển động theo những quỹ đạo xác định, do vậy ta có thể theo dõi được sự chuyển động của các hạt đó một cách chính xác và tại từng thời điểm ta có thể phân biệt được hạt này với hạt kia. Nói cách khác, ta luôn luôn có thể phân biệt được các hạt cổ điển cùng loại dựa trên quỹ đạo chuyển động của chúng. Song, đối với các hạt lượng tử, thì vấn đề sẽ hoàn toàn khác. Theo

quan điểm cơ học lượng tử, hạt không có quỹ đạo chuyển động xác định, do đó về nguyên tắc ta không thể theo dõi chuyển động của chúng để qua đó mà phân biệt được. Đó chính là nguyên lý không thể phân biệt hạt cùng loại, một trong những nguyên lý cơ bản của cơ học lượng tử.

- Ta áp dụng nguyên lý này để xét một hệ gồm hai vi hạt. Nếu ta đổi chỗ hai hạt này cho nhau thì dĩ nhiên trạng thái của cả hệ sẽ không đổi. Ta hãy xem về mặt toán học sự hoán vị này ảnh hưởng như thế nào đến hàm sóng.

Gọi $\Psi(1,2)$ và $\Psi(2,1)$ là hàm sóng trước và sau khi hoán vị. $|\Psi(1,2)|^2$ biểu thị mật độ xác suất tìm thấy một hạt tại vị trí 1 với tọa độ $\vec{r}_1$ và một hạt khác tại vị trí 2 với tọa độ $\vec{r}_2$. Đối với $|\Psi(2,1)|^2$ ta cũng có kết luận tương tự như vậy.

Theo nguyên lý không phân biệt các hạt cùng loại ta có

$$|\Psi(1,2)|^2 = |\Psi(2,1)|^2$$

hay là $\Psi(1,2) = \pm\Psi(2,1)$. Như vậy kết quả của sự hoán vị hai hạt sẽ dẫn đến hai khả năng

a/ Hàm sóng của hệ không thay đổi sau phép hoán vị

$$\Psi(1,2) = \Psi(2,1)$$

trong trường hợp này người ta nói hàm sóng của hệ là hàm đối xứng.

b/ Hàm sóng của hệ đổi dấu sau phép hoán vị:

$$\Psi(1,2) = -\Psi(2,1)$$

trong trường hợp này ta nói hàm sóng của hệ là hàm phản đối xứng.

- Do nguyên lý không thể phân biệt các hạt cùng loại, hàm sóng đặc trưng cho hệ hạt cùng loại chỉ có thể là đối xứng hoặc phản đối xứng. Kết quả nghiên cứu lý thuyết và thực nghiệm khẳng định rằng đối với điện tử và các vi hạt có spin bán nguyên (ví dụ: proton, neutron có spin bằng $\frac{1}{2}$) thì hàm sóng đặc trưng cho chúng bao giờ cũng là phản đối xứng. Ngược lại, đối với các hạt có spin bằng không hoặc bằng một số nguyên (ví dụ photon có spin bằng 1 π-mezon... có spin bằng không) thì hàm sóng đặc trưng cho chúng bao giờ cũng là đối xứng.

- Ta hãy xét một hệ gồm hai điện tử, trong đó trạng thái của một điện tử được đặc trưng bằng 4 số lượng tử n, l, m_l, m_s (ký hiệu bốn số này bằng chữ a) còn trạng thái điện tử kia được đặc trưng bằng 4 số lượng tử n', l', m'_l, m'_s (ký

hiệu bằng chữ b). Trong gần đúng bậc không, khi bỏ qua tương tác giữa điện tử với nhau ta có thể biểu diễn hàm sóng của hệ qua hàm sóng từng điện tử như sau:

$$\Psi = \begin{cases} \Psi_a(1)\Psi_b(2) \\ \Psi_a(2)\Psi_b(1) \end{cases}$$

Tuy nhiên có thể thấy rằng cả hai hàm sóng này đều không thoả mãn điều kiện hàm sóng phản đối xứng.

Vì vậy để đảm bảo điều kiện phản đối xứng ta phải lấy tổ hợp tuyến tính của hai hàm đó dưới dạng:

$$\Psi(1,2) = \Psi_a(1)\Psi_b(2) - \Psi_a(2)\Psi_b(1)$$

Ta thấy $\Psi(1,2)$ thoả mãn điều kiện phản đối xứng, thật vậy.

$$\Psi(2,1) = \Psi_a(2)\Psi_b(1) - \Psi_a(1)\Psi_b(2) = -\Psi(1,2)$$

Bây giờ nếu cả hai điện tử của hệ ở trong cùng một trạng thái lượng tử là trạng thái a thì ta có

$$\Psi(2,1) = \Psi_a(2)\Psi_a(1) - \Psi_a(1)\Psi_a(2) = 0$$

Từ đây ta rút ra kết luận xác suất tồn tại của cả hai điện tử trong cùng một trạng thái lượng tử luôn bằng không. Nói cách khác, trong nguyên tử không thể có hai điện tử cùng ở vào một trạng thái được đặc trưng bằng 4 số lượng tử n, l, m_l, m_s. Đây chính là nguyên lý loại trừ Pauli được đưa ra năm 1925.

3.2.4 Cấu hình điện tử của nguyên tử. Ta hãy áp dụng nguyên lý Pauli để xét quy luật phân bố các điện tử trong nguyên tử. Trước hết, ta hãy tưởng tượng điều gì sẽ xảy ra nếu ta không để ý đến nguyên lý Pauli mà cứ bổ sung dần từng điện tử vào xung quanh hạt nhân mang điện tích ze đến chừng nào nhận được nguyên tử trung hòa (có z điện tử). Trong gần đúng một điện tử, nếu bỏ qua tương tác giữa các điện tử, thì mỗi điện tử sẽ chuyển động hoàn toàn độc lập trong trường thế $U = \dfrac{ze^2}{4\pi\epsilon_o r}$. Điều này có nghĩa là các mức năng lượng cho phép trong nguyên tử giống như các mức năng lượng đã tính cho nguyên tử hydro. Mức năng lượng thấp nhất của hệ $E_1 = -z^2 13,58\text{eV}$ và tất các các điện tử của hệ đều có thể nằm ở trạng thái này nếu không tính đến nguyên lý Pauli.

Tuy nhiên, điều giả định trên không thể xảy ra. Theo nguyên lý Pauli, khi $n = 1$, thì $l = 0$ và $m_l = 0$. Như vậy có thể có tối đa là hai điện tử ứng với hai giá trị $m_s = \pm 1/2$ nằm ở mức năng lượng E_1.

- Ta có thể sắp xếp các điện tử theo các mức năng lượng. Theo nguyên lý Pauli, trong nguyên tử không thể có hai điện tử có cùng chung 4 số lượng tử

$$n = n', m = m', m_l = m_l', m_s = m_s'$$

Từ đây ta có thể tính được số các điện tử tối đa ở trong nguyên tử có cùng chung ba, hai và một số lượng tử.

a/ Số điện tử có cùng chung ba số lượng tử n, l, m_l tối đa là 2 ($m_s = -1/2$ và $m_s = 1/2$).

b/ Số điện tử có cùng chung hai số lượng tử n và l tối đa là $2(2l + 1)$. Các điện tử này được gọi là các điện tử tương đương và chúng hợp thành một phân lớp.

c/ Số điện tử có chung số lượng tử n tối đa là $2n^2$. Đó là vì với mỗi giá trị n, ta có thể có các giá trị l

$$l = 0, 1, 2, ..., n - 1$$

mỗi giá trị l ta có $(2l + 1)$ giá trị m_l và có $2(2l + 1)$ điện tử. Vì thế số điện tử có cùng số lượng tử n phải bằng

$$\sum_{l=0}^{n-1} 2(2l + 1) = 2n^2 \tag{3.51}$$

Các điện tử có cùng một số lượng tử chính n hợp thành một lớp. Thứ tự sắp xếp các lớp và phân lớp điện tử trong nguyên tử như sau:

1. Theo lớp: Năng lượng phụ thuộc số lượng tử chính theo công thức $E_n = -\dfrac{mz^2e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2 2\hbar^2}\dfrac{1}{n^2} \sim \dfrac{1}{n^2}$. Như vậy n càng nhỏ thì năng lượng càng thấp. Quy luật sắp xếp điện tử theo lớp: các điện tử sẽ điền đầy các mức năng lượng thấp, nằm gần hạt nhân ứng với số lượng tử n nhỏ trước, sau đó chúng điền đầy tiếp các lớp ứng với n lớn hơn.

2. Theo phân lớp: Khi trong nguyên tử có nhiều điện tử thì các điện tử chuyển động không chỉ trong trường tĩnh điện Coulomb có đối xứng xuyên tâm mà còn trong trường thế tương tác khác, ví dụ tương tác giữa các mômen từ quỹ đạo. Vì vậy năng lượng của chúng không chỉ phụ thuộc vào số lượng

tử chính n mà còn phụ thuộc vào số lượng tử quỹ đạo l nữa. Kết quả là cùng một giá trị n như nhau năng lượng của các trạng thái với l khác nhau là khác nhau. Khi $l_1 < l_2 < l_3 \cdots$ thì $E_{l_1} < E_{l_2} < E_{l_3} \cdots$. Do đó trong cùng một lớp các điện tử có xu hướng nằm ở các mức năng lượng ứng với số lượng tử l nhỏ hơn trước, sau đó mới điền đầy đến các mức ứng với l lớn hơn. Như vậy nếu những điều trên đây hoàn toàn đúng ta có thể viết được quy luật phân bố các điện tử theo các lớp và phân lớp như sau

$$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 4d^{10} 4f^{14}$$

Đặc điểm các trạng thái được biểu diễn trong bảng dưới đây

Tên lớp	K	L		M			N			
Số lượng tử n	1	2		3			4			
Số lượng tử l	0	0	1	0	1	2	0	1	2	3
Tên phân lớp	1s	2s	2p	3s	3p	3d	4s	4p	4d	4f
Số điện tử tối đa trong phân lớp	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14
Số điện tử tối đa trong lớp	2	8		18			32			

Công thức phân bố trên đây được gọi là cấu hình điện tử của nguyên tử. Ví dụ cấu hình điện tử của một số nguyên tố ở đầu bảng tuần hoàn Mendeleev

H $z = 1$: $1s^1$

He $z = 2$: $1s^2$

Li $z = 3$: $1s^2 2s^1$

Be $z = 4$: $1s^2 2s^2$

B $z = 5$: $1s^2 2s^2 2p^1$

C $z = 6$: $1s^2 2s^2 2p^2$

Kết quả thực nghiệm cho thấy rằng công thức về cấu hình điện tử trên đây thực ra chỉ đúng cho các nguyên tố đứng trước Kali. Đối với Kali $z = 19$, cấu hình điện tử đáng lẽ theo công thức là $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d$, nhưng thực tế cho thấy Kali có cấu hình $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s$.

Như vậy ở đây có sự đổi chỗ giữa phân lớp $3d$ và $4s$, cụ thể là theo lý thuyết thì $E(3d) < E(4s)$ nhưng trên thực tế thì ngược lại $E(4s) < E(3d)$.

Do vậy để xác định được cấu hình thực sự của tất cả các nguyên tử người ta phải xây dựng một quy tắc mới, quy tắc đó như sau: Trong nguyên tử các điện tử được sắp xếp theo thứ tự tăng dần của tổng $(n + l)$. Nếu hai phân lớp

có cùng chung tổng $(n+l)$ thì phân lớp nào ứng với số lượng tử n nhỏ hơn sẽ nằm sâu hơn và được điền đầy trước. Như vậy cấu trúc điện tử của nguyên tử có thể biểu diễn theo quy tắc điền đầy các phân lớp sau:

$$\begin{array}{lcccccccccccccccc} ① & 1s^2 & 2s^2 & 2p^6 & 3s^2 & 3p^6 & 4s^2 & 3d^{10} & 4p^6 & 5s^2 & 4d^{10} & 5p^6 & 6s^2 & 4f^{14} & 5d^{10} & 7s^2 \\ (n+l) = & 1 & 2 & 3 & 3 & 4 & 4 & 5 & 5 & 5 & 6 & 6 & 6 & 7 & 7 & 7 \end{array}$$

Trên thực tế sự điền đầy các phân lớp cũng không hoàn toàn tuân theo quy tắc này, ta vẫn thấy rất nhiều ngoại lệ, ví dụ:

$$\begin{array}{ll} 24Cr & (1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^5 4s^1) \\ 29Cu & (1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^1) \\ 41Nb & (1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 4d^4 5s^1) \\ 42Mo & (1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 4d^5 5s^1). \end{array}$$

Các lớp (hoặc các phân lớp) được điền đầy tối đa gọi là lớp (hoặc phân lớp) bão hòa. Các điện tử của lớp chưa điền đầy hoàn toàn gọi là các điện tử hoá trị và thường có vai trò quyết định tính chất hoá học của nguyên tố.

Cần lưu ý rằng các phân lớp d, f tuy được điền đầy sau các phân lớp s, p, ví dụ $4f$ điền đầy sau $5s, 5p$ và $6s$, nhưng lý thuyết tính toán cho thấy trong các trạng thái d, f điện tử nằm gần hạt nhân hơn các trạng thái s, p nhiều. Vì vậy trong các nguyên tố đất hiếm có số z từ 58 đến 71 đều có lớp vỏ điện tử ngoài cùng ở trạng thái $6s^2$, có hoá trị hai và có tính chất hoá học giống nhau.

3.3 Trạng thái điện tử của nguyên tử

Như ta đã thấy, đối với điện tử trạng thái lượng tử của nó được đặc trưng bằng bốn số lượng tử: n, l, m_l và m_s (hoặc j). Đối với nguyên tử có một điện tử như hyđro và các ion đồng dạng, trạng thái của điện tử cũng chính là trạng thái của nguyên tử. Chính vì vậy, đối với nguyên tử hyđro nói trạng thái của điện tử hoặc trạng thái của nguyên tử cũng chỉ là một.

Tuy nhiên đối với các nguyên tử có từ hai điện tử trở lên trạng thái lượng tử của chúng phải được xác định từ trạng thái của tất cả các điện tử có trong nguyên tử.

Để khảo sát trạng thái điện tử của nguyên tử người ta sử dụng mẫu vectơ-nguyên tử. Theo mẫu này trạng thái của nguyên tử được xác định không chỉ bằng độ lớn của vectơ mômen động lượng quỹ đạo và mômen spin của điện tử mà còn bằng sự định hướng tương hỗ giữa các vectơ này. Để tiện việc khảo

sát trạng thái của điện tử người ta dùng các ký hiệu sau:

$\vec{l}$ - vectơ mômen quỹ đạo của điện tử.

$\vec{s}$ - vectơ mômen động lượng spin của điện tử

$\vec{j}$ - vectơ mômen động lượng toàn phần của điện tử.

Độ lớn của các vectơ này được xác định bởi các quy tắc lượng tử hoá của cơ học lượng tử.

$$\begin{aligned} |\vec{l}| &= \hbar\sqrt{l(l+1)} \\ |\vec{s}| &= \hbar\sqrt{s(s+1)} \\ |\vec{j}| &= \hbar\sqrt{j(j+1)} \end{aligned}$$

Các vectơ mômen động lượng quỹ đạo $\vec{l}$ và mômen động lượng spin $\vec{s}$ có thể định hướng tương hỗ với nhau bằng nhiều cách. Tuy nhiên chúng ta có thể sắp xếp sự tương tác giữa các mômen đó theo trình tự sau đây:

- Vectơ mômen động lượng quỹ đạo của các điện tử liên kết sinh ra mômen động lượng quỹ đạo tổng cộng của nguyên tử

$$\sum_{i=1}^{N} \vec{l}_i = \vec{L}$$

$$\text{với} \qquad |\vec{L}| = \hbar\sqrt{L(L+1)}$$

trong đó số L gọi là số lượng tử quỹ đạo tổng cộng của nguyên tử, được xác định từ số lượng tử quỹ đạo l_i của các điện tử và có thể nhận các giá trị từ cực đại của tổng đại số của l_i đến cực tiểu của tổng đó:

$$L = \sum_{1}^{N} l_i, (\sum_{1}^{N} l_i) - 1, (\sum_{1}^{N} l_i) - 2, \ldots$$

Ví dụ: trong trường hợp nguyên tử có ba điện tử với các số lượng tử quỹ đạo: $l_1 = 1, l_2 = 2, l_3 = 1$, thì số lượng tử L của nguyên tử có thể nhận các giá trị từ cực đại của tổng đại số $\sum_1^3 l_i$ đến cực tiểu $\sum_1^3 l_i$ tức là

$$L = 4, 3, 2, 1, 0$$

- Tương tự như vậy, các vectơ mômen động lượng spin của điện tử liên kết lại để tạo thành mômen động lượng spin tổng cộng của nguyên tử

$$\sum_{1}^{N} \vec{s}_i = \vec{S} \qquad \text{với} \qquad |\vec{S}| = \hbar\sqrt{S(S+1)}$$

Số lượng tử spin tổng cộng của nguyên tử S nhận giá trị nguyên hoặc bán nguyên phụ thuộc vào số điện tử N chẵn hay lẻ. Ví dụ với $N = 1$, $S = 1/2$; $N = 2, S = 0$ và $S = 1$; $N = 3$ $S = 3/2$ và $S = 1/2$; $N = 4$, $S = 0, 1, 2$; S nhận các giá trị nguyên khi N chẵn, các giá trị bán nguyên khi N lẻ.

- Cuối cùng các vectơ động lượng $\vec{L}$ và $\vec{S}$ của nguyên tử sẽ tương tác với nhau để tạo ra mômen động lượng toàn phần của nguyên tử.

$$\vec{L} + \vec{S} = \vec{J} \tag{3.52}$$

với $$|\vec{J}| = \hbar\sqrt{J(J+1)} \tag{3.53}$$

Số lượng tử J của nguyên tử được xác định từ các số lượng tử L và S và có thể nhận các giá trị

$$J = L + S, L + S - 1, L + S - 2, ..., |L - S| \tag{3.54}$$

Trường hợp tương tác giữa các vectơ mà ta đang xét gọi là tương tác spin-quỹ đạo $L - S$. Nếu $L > S$ thì số giá trị J có thể bằng $2S + 1 = \chi$, χ được gọi là độ bội của trạng thái hay độ bội của số hạng quang phổ của nguyên tử. Độ bội của trạng thái chỉ số phân mức mà một mức năng lượng ban đầu có thể tách ra do tương tác spin-quỹ đạo $L - S$

Ví dụ, trong trường hợp 3 điện tử, $N = 3$, chúng ta có $S = 1/2$ và $S = 3/2$. Đối với $S = 1/2$ số giá trị J có thể bằng 2. Đối với $S = 3/2$, số giá trị J có thể bằng 4.

Trong trường hợp 4 điện tử, $N = 4$, ta có $S = 0, 1, 2$ và tương ứng ta có:

$$\begin{aligned} J = L \quad & \chi = 2 \cdot 0 + 1 = 1 \\ J = L + 1, L, L - 1 \quad & \chi = 2 \cdot 1 + 1 = 3 \\ J = L + 2, L + 1, L, L - 1, L - 2 \quad & \chi = 2 \cdot 2 + 1 = 5. \end{aligned}$$

- Đối với nguyên tử, trạng thái điện tử của nguyên tử hay số hạng quang phổ được biểu diễn bằng ký hiệu ${}^{\chi}L_j$. Trong đó ứng với các giá trị khác nhau của L người ta dùng các chữ cái in hoa để ký hiệu trạng thái của nguyên tử tương tự như các ký hiệu đã dùng với điện tử (chữ in thường)

L	0	1	2	3	4	5
Trạng thái nguyên tử	S	P	D	F	G	H

Ví dụ nếu $L = 2$, $S = 3/2$ ta có 4 trạng thái:

$$\begin{array}{lllll} & {}^4D_{7/2} & {}^4D_{5/2} & {}^4D_{3/2} & {}^4D_{1/2}. \\ J = & 2+3/2, & 2+3/2-1, & 2+3/2-2, & 2+3/2-3 \\ \chi = & 2S+1 = 2\cdot 3/2+1 = 4 & & & \end{array}$$

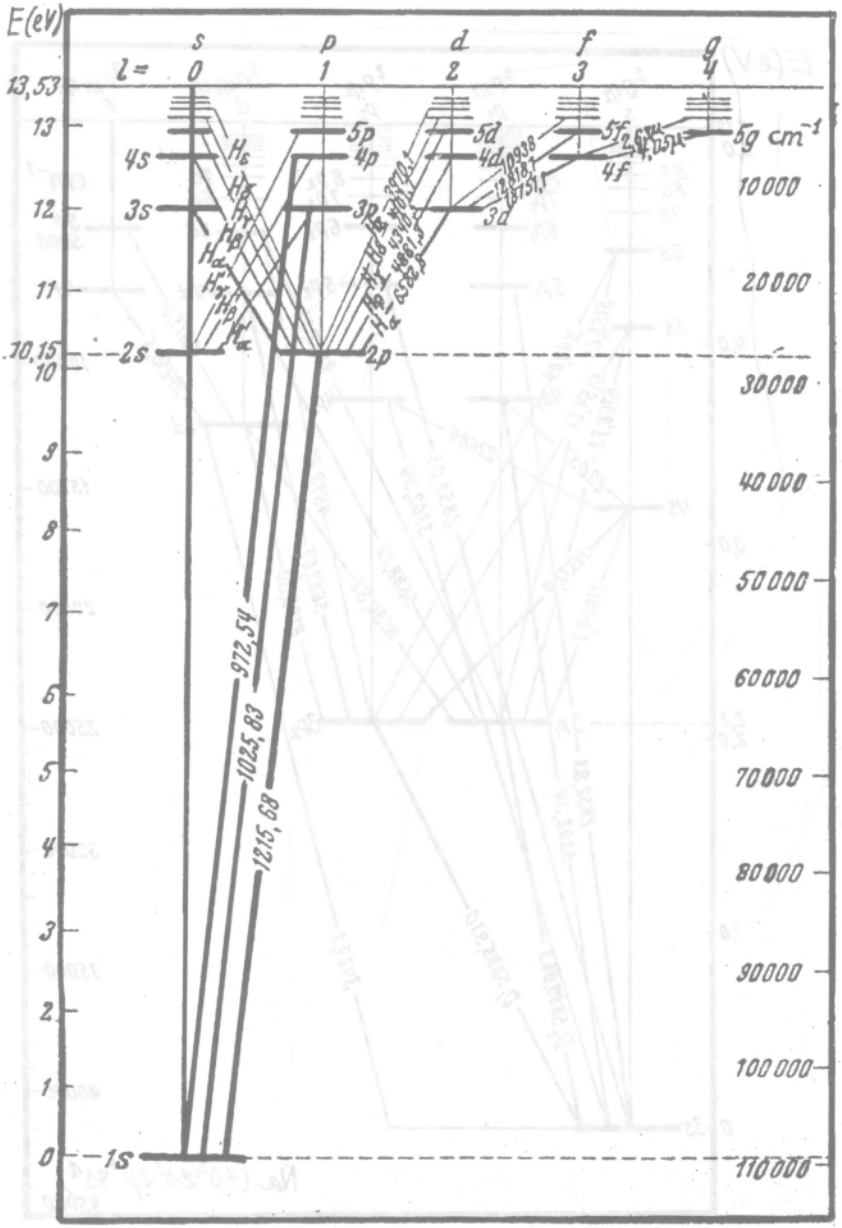
Kết quả nghiên cứu cho thấy rằng, trong các phân lớp điện tử đã điền đầy, các điện tử được sắp xếp sao cho mômen động lượng quỹ đạo của chúng triệt tiêu lẫn nhau, mômen động lượng spin của chúng triệt tiêu nhau và cả ba số lượng tử ứng với phân lớp đó L, S, J đều bằng không.

Vì vậy để xét trạng thái điện tử của nguyên tử ta có thể bỏ qua các lớp điện tử đã điền đầy và chỉ cần xét các lớp chưa điền đầy nghĩa là chỉ cần xét các điện tử hoá trị. Bây giờ chúng ta xét một số ví dụ cụ thể.

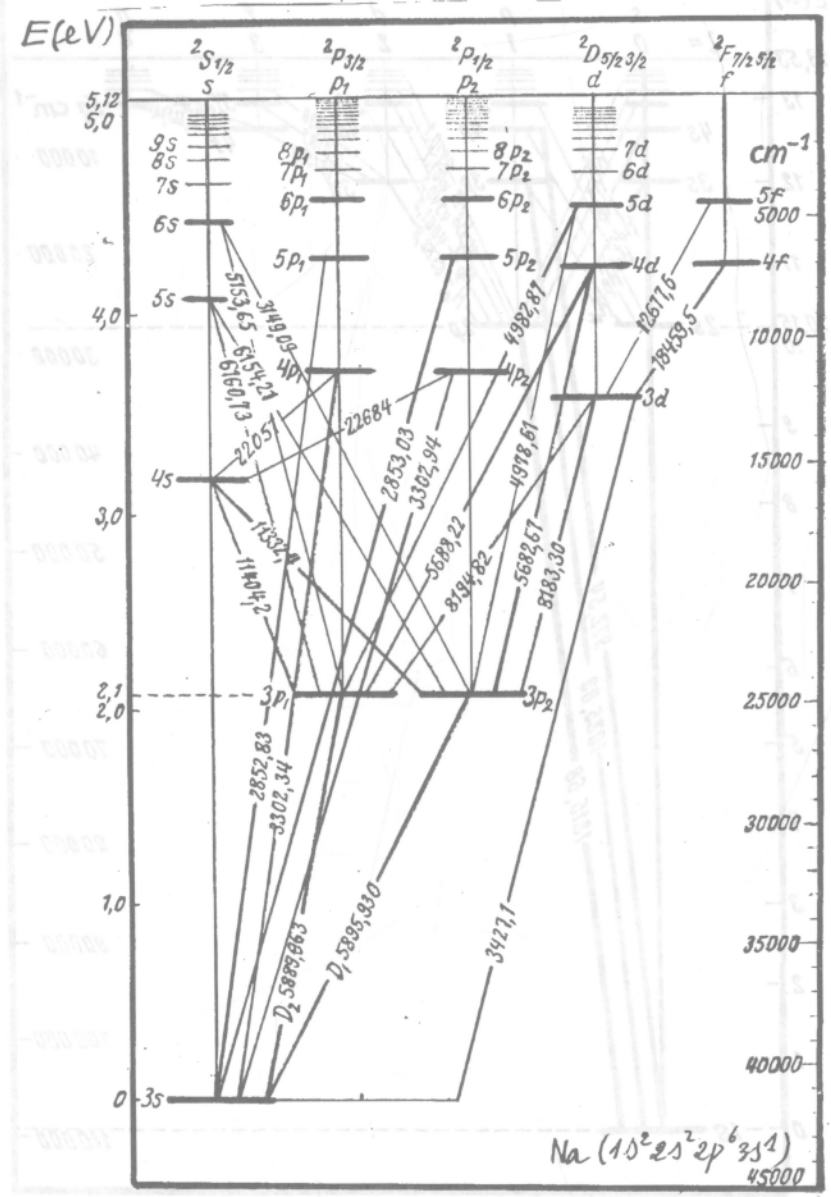
3.3.1 Trạng thái điện tử của nguyên tử hyđro. Ở trạng thái cơ bản nguyên tử hyđro có một điện tử ở trạng thái $1s$. Ở đây chỉ có 1 điện tử nên $L = l = 0$, $S = s = 1/2$, $J = j = 1/2$. Trạng thái cơ bản của nguyên tử hyđro là ${}^2S_{1/2}$ có độ bội $\chi = 2S + 1 = 2$. Đây cũng chính là trạng thái điện tử của các nguyên tố có điện tử hoá trị là 1 điện tử ns^1 như các kim loại kiềm. Trên hình (3.5) biểu diễn phổ năng lượng của hyđro và hình (3.6) của natri. Trên các sơ đồ này gốc năng lượng được tính từ trạng thái cơ bản theo trục tung bên trái với đơn vị eV. (Chú ý rằng bước sóng ánh sáng ứng với năng lượng photon bằng 1eV là $1,24 \cdot 10^{-6}\text{m} = 12400\text{Å}$). Trục bên phải cũng là trục năng lượng nhưng tính theo giá trị nghịch đảo bước sóng tương ứng $\frac{1}{\lambda}$, bằng đơn vị cm^{-1}. Các đường thẳng nối giữa các trạng thái biểu diễn các chuyển mức có thể. Các trạng thái có một con số đứng trước chỉ số lớp. Trong trường hợp này $N = 1$, các trạng thái có độ bội $\chi = 2$ gọi là các trạng thái đublet. Từ sơ đồ này chúng ta cũng thấy rõ sự hình thành các dãy Lyman, Balmer, Pashen.

3.3.2 Phổ năng lượng của nguyên tử He, para-He và orto-He. Quang phổ của He có những điểm đặc biệt đáng chú ý sau đây. Nó gồm những dãy vạch kiểu như đối với các nguyên tử kim loại kiềm, tuy nhiên mỗi dãy như vậy gồm có hai phiên bản khác nhau về độ nét: phiên bản nét và phiên bản mờ. Trong phiên bản mờ mỗi vạch phổ thực chất là ba vạch rất gần nhau, ví dụ vạch đặc trưng màu vàng thực chất là ba vạch có bước sóng $5875,963\text{Å}; 5875,643\text{Å}; 5875,601\text{Å}$. Những vạch như vậy được gọi là vạch triplet.

Từ dạng quang phổ kép, nghĩa là gồm hai phiên bản như trên đã mô tả, người ta đã nghĩ rằng He là hỗn hợp của hai nguyên tố para-He và orto-He.



Hình 3.5: *Phổ năng lượng của nguyên tử hyđro.*



Hình 3.6: *Phổ năng lượng của nguyên tử natri.*

Para-He cho các dãy phổ nét, ứng với các trạng thái đơn (singulet), orto-He cho các dãy phổ mờ, ứng với các trạng thái chập ba (triplet). Điều này có vẻ như hợp lý vì người ta không phát hiện được sự tổ hợp giữa hai hệ singulet và triplet. Tuy nhiên, theo thực tế và lý thuyết giả thuyết nói trên là không đúng.

Dạng quang phổ kép trong hệ nguyên tử có hai điện tử, $N = 2$, là do trong hệ nguyên tử đó có hai hệ mức năng lượng: hệ các mức năng lượng đơn (singulet) và hệ các mức năng lượng triplet, do các quy tắc lựa chọn, mà ta sẽ đề cập đến sau này, không cho phép có sự tổ hợp của hai hệ đó.

Trên hình (3.7) trình bày phổ năng lượng của He cũng như các chuyển mức có thể theo quy tắc lựa chọn. Trong nguyên tử He nếu hai điện tử nằm ở trạng thái $1s$ thì chúng ta có $L = 0, S = 0, J = 0$ và trạng thái của nguyên tử sẽ là $^1S_0$ (có độ bội $\chi = 1$); $1s1s\,^1S_0$. Bây giờ nếu một điện tử ở trạng thái $1s$, điện tử thứ hai ở trạng thái $2s$, nghĩa là cấu hình điện tử có dạng $1s^1 2s^1$. Trong trường hợp này $S = 0$ hay 1. Khi $S = 0$ chúng ta có trạng thái singulet $^1S_0$ (có độ bội $\chi = 1$); $1s2s\,^1S_0$. Khi $S = 1$ ta có trạng thái triplet: $^3S_1$ (có độ bội bằng 3) $1s2s\,^3S_1$.

Khi một điện tử ở trạng thái $1s$, một điện tử ở trạng thái $2p$ ($1s2p$). Trong trường hợp này $L = 1$, nguyên tử nằm ở trạng thái P; $S = 0$ hay 1. Khi $S = 0$ chúng ta có trạng thái singulet $^1P_1$, $J = L + S = 1$.

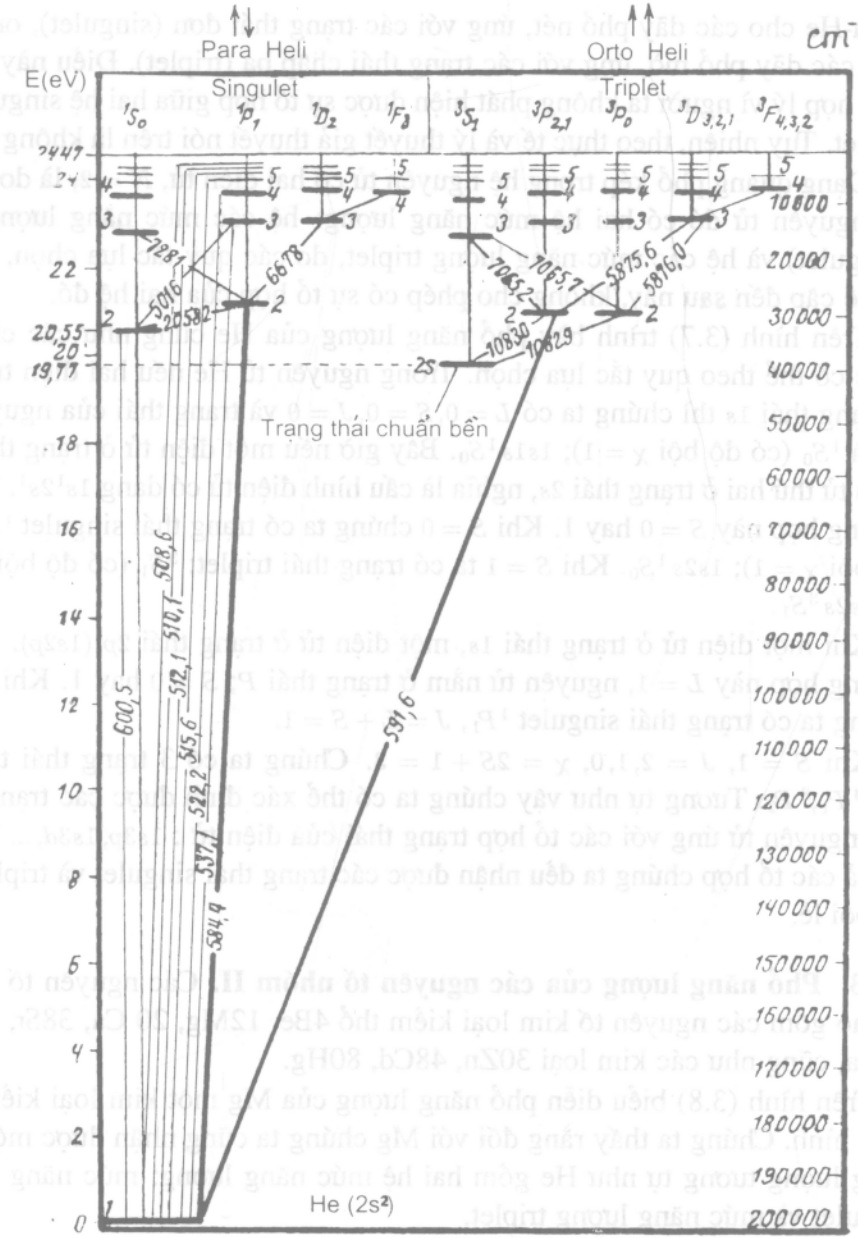
Khi $S = 1$, $J = 2, 1, 0$, $\chi = 2S + 1 = 3$. Chúng ta có 3 trạng thái triplet: $^3P_0, ^3P_1, ^3P_2$. Tương tự như vậy chúng ta có thể xác định được các trạng thái của nguyên tử ứng với các tổ hợp trạng thái của điện tử : $1s3p, 1s3d, ...$ Trong tất cả các tổ hợp chúng ta đều nhận được các trạng thái singulet và triplet, có độ bội lẻ.

3.3.3 Phổ năng lượng của các nguyên tố nhóm II. Các nguyên tố nhóm II bao gồm các nguyên tố kim loại kiềm thổ 4Be, 12Mg, 20 Ca, 38Sr, 56Ba, 88Ra, cũng như các kim loại 30Zn, 48Cd, 80Hg.

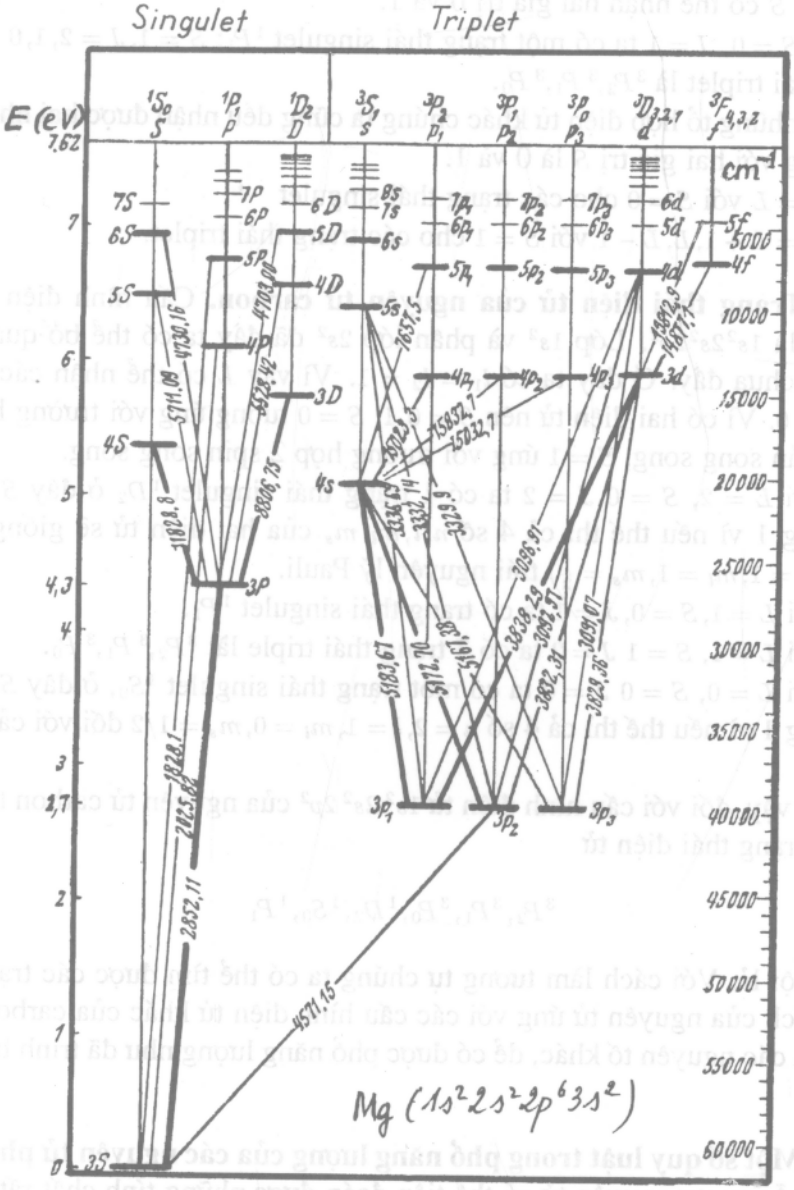
Trên hình (3.8) biểu diễn phổ năng lượng của Mg một kim loại kiềm thổ điển hình. Chúng ta thấy rằng đối với Mg chúng ta cũng nhận được một phổ năng lượng tương tự như He gồm hai hệ mức năng lượng: mức năng lượng singulet và mức năng lượng triplet.

Cấu hình điện tử của Mg là $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2$, các lớp 1 và lớp 2 điện tử đã đầy cho ta $L = 0, S = 0$, ta chỉ xét hai điện tử ở lớp thứ 3, $3s^2$.

Khi hai điện tử ở trạng thái $3s$: $l_1 = l_2 = 0, L = 0$, trong trường hợp này spin bắt buộc phải ngược nhau, $S = 0$, ta có một trạng thái singulet duy nhất $^1S_0$.



Hình 3.7: *Phổ năng lượng của nguyên tử heli.*



Hình 3.8: *Phổ năng lượng của Mg.*

Khi một điện tử ở trạng thái $3s$, một điện tử ở trạng thái $3p$ ta có $l_1 = 0, l_2 = 1, L = 1$; S có thể nhận hai giá trị 0 và 1.

Khi $S = 0$, $J = 1$ ta có một trạng thái singulet $^1P_1$; $S = 1, J = 2, 1, 0$ ta có 3 trạng thái triplet là $^3P_2, ^3P_1, ^3P_0$.

Với những tổ hợp điện tử khác chúng ta cũng đều nhận được hai nhóm giá trị J ứng với hai giá trị S là 0 và 1.

a/ $J = L$ với $S = 0$ cho các trạng thái singulet

b/ $J = L + 1, L, L - 1$ với $S = 1$ cho các trạng thái triplet.

3.3.4 Trạng thái điện tử của nguyên tử carbon. Cấu hình điện tử của carbon là $1s^2 2s^2 2p^2$. Lớp $1s^2$ và phân lớp $2s^2$ đã đầy ta có thể bỏ qua, phân lớp $2p^2$ chưa đầy. Ở đây ta có $l_1 = l_2 = 1$. Vì vậy L có thể nhận các giá trị $L = 2, 1, 0$. Vì có hai điện tử nên $S = 0, 1$. $S = 0$ tương ứng với trường hợp hai spin phản song song, $S = 1$ ứng với trường hợp 2 spin song song.

- Với $L = 2$, $S = 0$ $J = 2$ ta có 1 trạng thái singulet $^1D_2$ ở đây S không thể bằng 1 vì nếu thế thì cả 4 số n, l, m_l, m_s của hai điện tử sẽ giống nhau, $(n = 2, l = 1, m_l = 1, m_s = \frac{1}{2})$ trái nguyên lý Pauli.

- Với $L = 1, S = 0, J = 1$ ta có trạng thái singulet $^1P_1$.

- Với $L = 1$, $S = 1$ $J = 2$ ta có 3 trạng thái triple là: $^3P_2, ^3P_1, ^3P_0$.

- Với $L = 0$, $S = 0$ $J = 0$ ta có một trạng thái singulet $^1S_0$, ở đây S không thể bằng 1 vì nếu thế thì cả 4 số $n = 2, l = 1, m_l = 0, m_s = 1/2$ đối với cả 2 điện tử.

Như vậy, đối với cấu hình điện tử $1s^2 2s^2 2p^2$ của nguyên tử carbon ta có cả thảy 6 trạng thái điện tử

$$^3P_2, ^3P_1, ^3P_0, ^1D_2, ^1S_0, ^1P_1$$

có độ bội lẻ. Với cách làm tương tự chúng ta có thể tìm được các trạng thái kích thích của nguyên tử ứng với các cấu hình điện tử khác của carbon cũng như của các nguyên tố khác, để có được phổ năng lượng như đã trình bày trên đây.

3.3.5 Một số quy luật trong phổ năng lượng của các nguyên tử phức tạp. Dùng mẫu vectơ nguyên tử có thể tiên đoán được những tính chất rất tinh tế trong quang phổ của các nguyên tử phức tạp. Ví dụ có thể giải thích được hiện tượng tách các vạch quang phổ trong từ trường yếu và từ trường mạnh (hiệu ứng Zeeman, Zeeman dị thường).

Dưới đây chúng tôi chỉ nêu lên một số quy luật đối với quang phổ của các nguyên tử phức tạp.

1. Nguyên tắc chuyển dịch: Phổ và các mức năng lượng của nguyên tử có nguyên tử số z tương tự như phổ và các mức năng lượng của ion của nguyên tử có nguyên tử số $z+1$. Ví dụ phổ của H và H_e^+, của H_e và L_i^+ là hoàn toàn tương tự.

2. Nguyên tắc luân phiên về độ bội: Số hạng quang phổ của các nguyên tố của bảng tuần hoàn có độ bội chẵn và lẻ liên tiếp nhau. Ví dụ kim loại kiềm (nhóm I) có số hạng dublet (chẵn) kim loại kiềm thổ (nhóm II) có số hạng là singulet và triplet (lẻ). Đó là vì: số lượng tử spin tổng cộng S sẽ là nguyên hoặc bán nguyên phụ thuộc vào số điện tử N trong nguyên tử chẵn hay lẻ:

Khi	$N=1$	$S=1/2$	độ bội chẵn.
	$N=2$	$S=0,1$:	độ bội lẻ
	$N=3$	$S=1/2,3/2$:	độ bội chẵn
	$N=4$	$S=0,1,2$:	độ bội lẻ

với S bán nguyên ta có độ bội chẵn $\chi = 2S+1 =$ chẵn, với S nguyên ta có độ bội lẻ $\chi = 2S+1$ lẻ.

3.3.6 Quy tắc Hund. Sau khi đã xác định được các trạng thái năng lượng có thể của nguyên tử rồi thì vấn đề rất quan trọng là phải xác định được trong các trạng thái đó trạng thái nào là bền vững nhất, tức là tìm trạng thái năng lượng cơ bản của nguyên tử. Điều này có thể giải quyết được nhờ quy tắc Hund.

Nội dung quy tắc Hund bao gồm:

1. Trạng thái cơ bản của nguyên tử là trạng thái ứng với độ bội lớn nhất, (khi các điện tử có spin song song với nhau).

2. Nếu hai trạng thái có cùng độ bội thì trạng thái nào có số lượng tử L lớn hơn sẽ bền vững hơn.

3. Nếu hai trạng thái có chung độ bội và cùng số lượng tử L thì trạng thái bền vững hơn được xác định theo tiêu chuẩn sau:

   Số lượng tử J nhỏ nhất nếu phân lớp được điền đầy chưa quá một nửa số điện tử tối đa.

   Số lượng tử J lớn nhất nếu phân lớp được điền đầy quá một nửa số điện tử tối đa.

Áp dụng quy tắc Hund để xét nguyên tử carbon, ta thấy ngay rằng trạng thái cơ bản của nguyên tử carbon là $^3P_0$, các trạng thái có năng lượng lớn dần (kém bền hơn)

$$^3P_0, {}^3P_1, {}^3P_2, {}^1D_2, {}^1P_1, {}^1S_0$$

Như vậy trạng thái điện tử cơ bản của nguyên tử là trạng thái năng lượng bền vững nhất (nhỏ nhất), trạng thái không bị kích thích.

3.3.7 Chuyển mức năng lượng, quy tắc chọn lọc. Giả sử bằng cách nào đó (va chạm, chiếu sáng,...) ta đưa được một hoặc vài điện tử từ trạng thái không bị kích thích lên các lớp có năng lượng cao hơn. Trường hợp này là trường hợp nguyên tử bị khích thích, tức là nó đã chuyển từ trạng thái cơ bản lên trạng thái cao hơn gọi là trạng thái kích thích ở mức năng lượng kích thích. Nguyên tử thường tồn tại ở trạng thái kích thích một thời gian ngắn τ gọi là thời gian sống sau đó chuyển xuống một trạng thái ứng với năng lượng thấp hơn, hay trở về trạng thái cơ bản. Quá trình chuyển dời từ mức năng lượng thấp đến mức năng lượng cao hơn phải kèm theo quá trình nguyên tử hấp thụ một năng lượng, nếu năng lượng này dưới dạng bức xạ thì bức xạ phải tuân theo quy luật tần số (bảo toàn năng lượng)

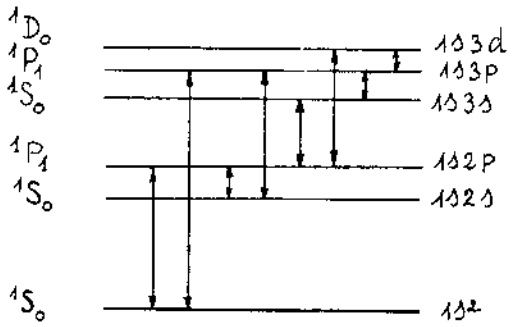
$$\hbar\omega = |E_m - E_n|$$

Quá trình chuyển từ mức năng lượng cao xuống mức năng lượng thấp hơn phải kèm theo quá trình giải phóng năng lượng, nếu năng lượng được giải phóng dưới dạng bức xạ, thì bức xạ phát ra phải tuân theo quy luật tần số trên đây.

Tuy nhiên, kết quả tính toán và thực nghiệm cho thấy rằng quá trình chuyển mức năng lượng cho phép này sang mức năng lượng cho phép khác của nguyên tử phải tuân theo quy luật chọn lọc. Quy luật chọn lọc được suy ra từ các định luật bảo toàn mômen động lượng nó khẳng định: chỉ cho phép chuyển mức giữa các trạng thái ứng với sự thay đổi số lượng tử như sau:

$$\Delta L = L_m - L_n = \pm 1$$
$$\Delta S = S_m - S_n = 0$$
$$\Delta J = J_m - J_n = 0, \pm 1.$$

Ví dụ: Trên hình (3.9) biểu diễn các chuyển mức cho phép giữa các trạng thái của nguyên tử para-heli (heli ở trạng thái mà spin của hai điện tử ngược nhau).



Hình 3.9: *Sơ đồ biểu diễn các chuyển mức được phép.*

Ngoài các chuyển dời được đánh dấu bằng các mũi tên tất cả các chuyển mức khác đều bị cấm bởi quy tắc chọn lọc. Ngoài ra còn có một quy tắc chọn lọc nữa đó là quy tắc cấm tổ hợp, ví dụ cấm các chuyển mức từ trạng thái singulet sang triplet. Tuy nhiên quy tắc này cũng có ngoại lệ, ví dụ chuyển mức giữa $^1S_0 \rightleftharpoons^3 P_1$ không bị cấm xem hình (3.7). Chính phổ năng lượng, hay cấu trúc điện tử của nguyên tử và các quy tắc chọn lọc đối với các chuyển mức đã quyết định phổ hấp thụ và phổ phát xạ quang của nguyên tử. Tất cả những kết quả đo các phổ hấp thụ, phổ phát xạ là những minh chứng cho sự đúng đắn của lý thuyết.

3.4 Phổ năng lượng của phân tử

Theo quan điểm hoá học, phân tử là phần tử nhỏ nhất của một chất còn mang đầy đủ tính chất hoá học của chất đó. Phân tử được cấu tạo từ các nguyên tử thông qua liên kết hoá học. Nguyên nhân của sự liên kết giữa nguyên tử để tạo thành phân tử là sự tương tác của các điện tử hoá trị. Các điện tử này thường tương đối tự do, nó không bị gắn quá chặt vào một hạt nhân cố định mà có thể chuyển động quanh hạt nhân này hay hạt nhân khác với những xác suất khác nhau.

Đứng về mặt cơ học phân tử có thể xem như một tập hợp gồm hai loại hạt có khối lượng rất khác nhau, là các hạt nhân có khối lượng M và điện tử có khối lượng $m \ll M$. Trong gần đúng cho phép, có thể coi khối lượng của phân tử như tập trung tại một số điểm riêng biệt là các hạt nhân.

Trong phân tử luôn luôn tồn tại 3 dạng chuyển động:

1. Chuyển động của các hạt điện tử (giống như trong nguyên tử).
2. Dao động của các hạt nhân quanh các vị trí cân bằng.
3. Chuyển động quay của cả phân tử như một khối thống nhất.

Ứng với 3 dạng chuyển động này, trong phân tử có ba loại trạng thái năng lượng khác nhau:

- Các trạng thái năng lượng điện tử
- Các trạng thái năng lượng dao động
- Các trạng thái năng lượng quay.

Trạng thái chuyển động của phân tử nói chung được viết bởi phương trình Schrödinger:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\sum_{i=1}^{n}\Delta_i - \sum_{j}^{N}\frac{\hbar^2}{2M_j}\Delta_j + U\right]\Psi = E\Psi$$

với

n- số điện tử trong phân tử

N- số hạt nhân nguyên tử có thể có khối lượng khác nhau.

E- năng lượng toàn phần của phân tử.

U- thế năng toàn phần của phân tử bao gồm ba thành phần

- Năng lượng tương tác giữa các điện tử với nhau
- Năng lượng tương tác giữa các hạt nhân với nhau
- Năng lượng tương tác giữa các điện tử với các hạt nhân.

$$U = \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0}\sum_{i,j\neq i}\frac{1}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} + \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0}\sum_{j,k\neq j}\frac{z_j z_k}{|\vec{R}_j - \vec{R}_k|} - \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0}\sum_{i,j}\frac{z_j}{|\vec{r}_i - \vec{R}_j|}.$$

$|\vec{r}_i - \vec{r}_j|$ là khoảng cách từ điện tử i đến điện tử j

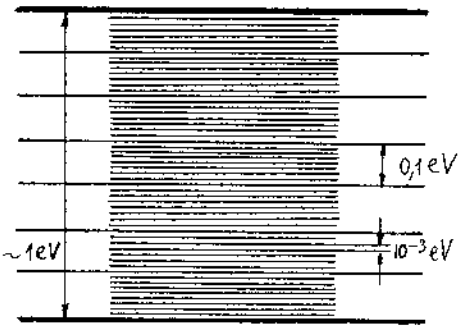
$|\vec{R}_j - \vec{R}_k|$ là khoảng cách từ hạt nhân j đến hạt nhân k

$|\vec{r}_i - \vec{R}_j|$ là khoảng cách từ điện tử i đến hạt nhân j.

Ở đây hệ số 1/2 cần đưa vào trong tổng kép vì mỗi tương tác được tính 2 lần ij và ji.

Hàm sóng của phân tử mô tả trạng thái chuyển động của cả hệ, phải phụ thuộc vào tọa độ của tất cả các hạt nhân. Trong gần đúng với mức độ nhất định ta có thể viết hàm sóng toàn phần Ψ dưới dạng tích của 3 hàm sóng

$$\Psi = \Psi_e \cdot \Psi_d \cdot \Psi_q$$



Hình 3.10: *Dạng của phổ năng lượng trong phân tử.*

Ψ_e - Hàm sóng mô tả trạng thái của điện tử trong phân tử.
Ψ_d - Hàm sóng mô tả trạng thái dao động của phân tử.
Ψ_q - Hàm sóng mô tả trạng thái chuyển động quay của phân tử.

Năng lượng toàn phần của phân tử bằng tổng các năng lượng nói trên: năng lượng điện tử, năng lượng dao động, năng lượng quay

$$E = E_e + E_d + E_q$$

Kết quả đánh giá tương quan giữa các giá trị khỏang cách giữa hai mức gần nhau của ba loại năng lượng nói trên cho biết:

$$\Delta E_e : \Delta E_d : \Delta E_q = 1 : (\frac{m}{M})^{1/2} : (\frac{m}{M})$$

Thông thường $\frac{m}{M} = 10^{-3} - 10^{-5}$ (ví dụ đối với phân tử hyđro ta có $\frac{M}{m} = 1840$).

Phổ năng lượng của phân tử chắc chắn phức tạp hơn nhiều phổ năng lượng của nguyên tử. Đối với phân tử chúng ta có thể hình dung ra rằng: trong phổ năng lượng của phân tử giữa các trạng thái điện tử có một loạt các trạng thái năng lượng dao động và giữa các trạng thái dao động lại có một loạt trạng thái năng lượng quay, như mô tả bằng sơ đồ hình (3.10). Như vậy đối với phân tử thay cho việc giải phương trình Schrödinger để xác định trạng thái lượng tử của phân tử, chúng ta có thể xét riêng biệt từng dạng chuyển động với các phương trình Schrödinger tương ứng. Chẳng hạn ta sẽ xét dưới đây để tìm hiểu các trạng thái năng lượng dao động và các trạng thái năng lượng quay của phân tử.

3.4.1 Trạng thái năng lượng dao động. Để xác định trạng thái năng lượng dao động của phân tử gồm hai nguyên tử, ta có thể sử dụng các kết quả của dao động tử điều hòa. Ta biết rằng trong trạng thái năng lượng cực tiểu của phân tử các nguyên tử được phân bố trên khoảng cách R_e. Khi lệch khỏi cân bằng này các nguyên tử thực hiện dao động. Nếu biên độ dao động tương đối nhỏ hàm thế năng đặc trưng sẽ có dạng parabon

$$U(R) = \frac{1}{2}K(R - R_e)^2$$

Giải phương trình Schrödinger với hàm thế năng này ta được biểu thức xác định năng lượng dao động của phân tử

$$E_d = \hbar\sqrt{\frac{K}{M}}(n + \frac{1}{2}) = \hbar\omega(n + \frac{1}{2}) \tag{3.55}$$

với $n = 0, 1, 2, ...$

Tuy nhiên khi biên độ tăng lên tính điều hòa sẽ mất đi. Thật vậy, trong mẫu dao động tử điều hòa khi R tăng lên thì lực đàn hồi và thế năng tăng lên theo quy luật parabon. Nhưng nếu các nguyên tử nằm cách nhau một khoảng cách lớn thì lực hút giữa chúng dần tới không và thế năng sẽ không đổi. Như vậy khi các nguyên tử thực hiện dao động với biên độ lớn ta phải thay hàm thế năng parabon bằng một hàm thế khác. Tính đến những phân tích trên người ta thay hàm thế parabon bằng hàm thế có dạng:

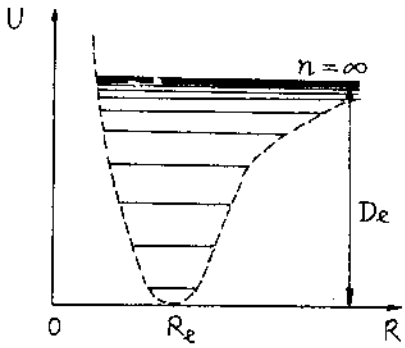
$$U(R - R_e) = D_e\left\{1 - e^{-\beta(R-R_e)^2}\right\}$$

với β và D_e là các hằng số: Khi $R \longrightarrow R_e$ ta có $U \longrightarrow 0$, khi $R \longrightarrow \infty$ ta có $U \longrightarrow D_e$.

Như vậy D_e chính là thế năng phân ly của phân tử. Năng lượng dao động tử ứng với thế năng trên đây có dạng:

$$E_d = \hbar\omega(n + 1/2) - \alpha\hbar\omega(n + 1/2)^2$$

trong đó $\alpha \ll 1$ là thông số phi điều hòa. Phổ năng lượng dao động của phân tử bây giờ khác phổ năng lượng của dao động tử điều hoà, nó có dạng như ở hình (3.11). Phía dưới thưa phía trên dày, khi $n \longrightarrow \infty$ ta có mức năng lượng phân ly.



Hình 3.11: *Phổ năng lượng dao động của phân tử.*

3.4.2 Trạng thái năng lượng quay. Đối với chuyển động quay của phân tử hai nguyên tử ta có thể sử dụng kết quả của bài toán về quay tử rắn. Năng lượng quay của phân tử trong trường hợp đó được xác định bằng biểu thức

$$E_q = \frac{\hbar^2}{2J} l(l+1) = B_0 l(l+1) \tag{3.56}$$

với $l = 0, 1, 2, ...$, B_0 - hằng số quay.

Tuy nhiên mẫu quay tử rắn áp dụng ở đây không được chính xác bởi vì khi phân tử thực hiện chuyển động quay, nó luôn luôn chịu một lực li tâm, và do vậy, khoảng cách giữa hai hạt nhân nguyên tử sẽ thay đổi (mẫu quay tử không rắn).

Nếu giải bài toán về quay tử không rắn này ta thu được biểu thức sau đây xác định phổ năng lượng quay của phân tử hai nguyên tử

$$E_q = B_0 l(l+1) - D l^2 (l+1)^2 \tag{3.57}$$

với $D \ll B_0$.

3.4.3 Quang phổ của phân tử. Từ những phân tích trên đây chúng ta có thể biểu diễn năng lượng toàn phần của hệ phân tử:

$$E = E_e + \hbar\omega(n + \frac{1}{2}) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2J}$$

Vì $\Delta E_q << \Delta E_d << \Delta E_e$ như đã nói ở trên nên phổ năng lượng của phân tử có dạng như sơ đồ ở hình (3.10). Chính vì vậy quang phổ của phân tử, rất

khác quang phổ của các nguyên tử cô lập. Quang phổ của nguyên tử cô lập là quang phổ vạch, còn quang phổ của phân tử được gọi là quang phổ dải, nghĩa là gồm một hệ các dải phổ cấu thành. Với những máy phân tích phổ năng suất phân giải cao có thể thấy rằng mỗi dải phổ lại gồm những vạch nằm rất sát nhau. Quang phổ dải của phân tử chính là do phổ năng lượng phức tạp như đã nói trên. Phân tích kỹ người ta thấy rằng : quang phổ của phân tử bao gồm các dải sau đây: Dải chuyển động quay, Dải dao động và quay, Dải điện tử và dao động.

- Dải chuyển động quay: ứng với chuyển mức giữa các mức năng lượng quay với quy tắc chọn lọc $\Delta l = \pm 1$. Tần số ứng với các chuyển mức này là

$$\omega = \frac{\Delta E_q}{\hbar} = \frac{\hbar^2}{2J \cdot \hbar}\left[(l+2)(l+1) - l(l+1)\right] = \frac{\hbar}{J}(l+1) = \omega_1(l+1)$$

Phổ chuyển động quay gồm các vạch cách đều nhau với $\Delta\omega = \omega_1, \omega_1$ vào cỡ $10^{13} \cdot s^{-1}(\lambda = 100\mu\text{m})$. Từ đó ta thấy mômen quán tính của phân tử vào cỡ 10^{-40}gcm^2. Ví dụ đối với phân tử HCl ta có $J = 2,71 \cdot 10^{-40}\text{gcm}^2$ và từ đó suy ra, khoảng cách giữa hai nguyên tử $R = 1,29\text{Å}$.

- Dải dao động và quay nhận được do những chuyển mức xảy ra giữa hai mức năng lượng dao động với cùng một cấu hình điện tử. Mỗi một mức năng lượng dao động bị phân thành một loạt các phân mức chuyển động quay đặc trưng bởi các số lượng tử l' và l''. Trong trường hợp này tần số ứng với chuyển mức được tính bởi công thức:

$$\hbar\omega = \Delta E_d + \Delta E_q = \hbar\omega_d(n' + \frac{1}{2}) - \hbar\omega_d(n'' + \frac{1}{2}) + \frac{\hbar^2}{2J}l'(l'+1) - \frac{\hbar^2}{2J}l''(l''+1)$$

Với quy tắc chọn lọc của dao động là $\Delta n = \pm 1$, của chuyển động quay là $\Delta l = \pm 1$, ta có $\omega = \omega_d \pm \omega_1 k$ với $K = 1, 2, 3, \cdots$.

Tập hợp các vạch phổ ứng với một chuyển mức dao động tạo thành một dải dao động và quay. Dải dao động và quay là tập hợp các vạch phân bố đối xứng hai bên vạch ω_d và cách đều nhau một khoảng $\Delta\omega = \omega_1$ chỉ có vạch ω_d, vạch trung tâm là không xuất hiện.

Dải điện tử - dao động nhận được do những chuyển mức xảy ra giữa hai mức năng lượng ứng với hai cấu hình điện tử khác nhau của phân tử kèm theo sự thay đổi của cả ba thành phần năng lượng E_e, E_d, E_q. Tần số ứng với chuyển mức được tính bởi công thức.

$$\omega = \frac{\Delta E_e + \Delta E_d + \Delta E_q}{\hbar} = \frac{\Delta E_e + \Delta E_d}{\hbar} + \frac{\Delta E_q}{\hbar} = \omega_0 + \frac{\Delta E_q}{\hbar}$$

Tập hợp các vạch phổ với tần số khác nhau theo các giá trị ΔE_q khác nhau được gọi là dải phổ điện tử - dao động. Tần số ω_0 xác định vị trí của dải phổ. Mỗi dải phổ điện tử - dao động có một cấu trúc phức tạp do chuyển mức năng lượng quay. Biểu thức ω có dạng: $\omega = \omega_0 + \frac{\hbar}{2J'}l'(l'+1) - \frac{\hbar}{2J''}l''(l''+1)$. Đối với trường hợp dải điện tử - dao động quy luật chọn lọc có phần rộng hơn $\Delta l = 0, \pm 1$. Ta có thể nói phổ này gồm có ba nhánh ứng với $\Delta l = 0, \Delta l = 1$, và $\Delta l = -1$.

3.5 Phổ năng lượng của điện tử trong tinh thể chất rắn

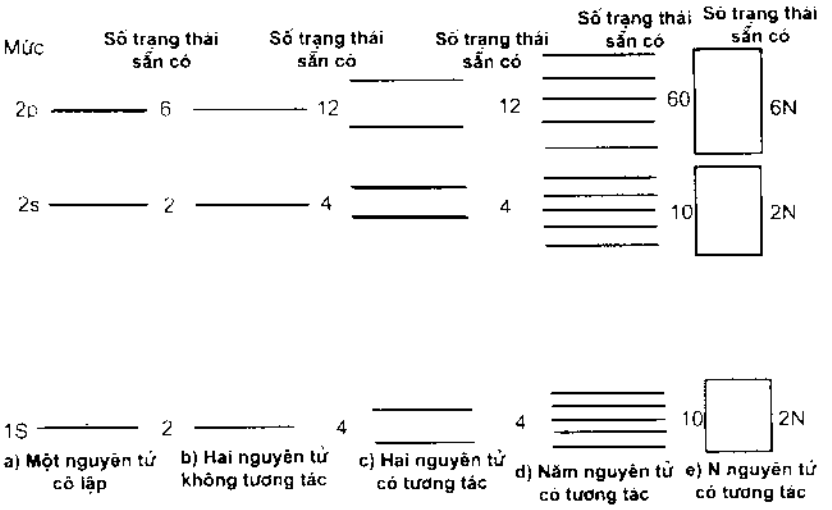
Chất rắn là trạng thái vật chất đông đặc. Trong một cm^3 chất rắn có khoảng trên 10^{22} nguyên tử. Trong chất rắn khoảng cách giữa các nguyên tử, ion, điện tử đủ nhỏ để cho lực tương tác giữa chúng trở nên rất đáng kể. Bài toán cơ bản của vật lý chất rắn thực chất là bài toán của hệ nhiều hạt có tương tác, mà trong thực tế chỉ hy vọng tìm được nghiệm gần đúng. Tuy nhiên bài toán sẽ có phần đơn giản đi nếu các nguyên tử sắp xếp theo một trật tự tuần hoàn nhất định. Vật rắn như thế gọi là tinh thể.

Để mô tả tính tuần hoàn của tinh thể, người ta đưa ra một khái niệm thuần tuý toán học: mạng lý tưởng. Mạng lý tưởng là tập hợp những điểm gọi là nút mạng mà vị trí được đặc trưng bằng các vectơ $\vec{n}$ gọi là vectơ mạng. $\vec{n}$ được định nghĩa từ 3 vectơ không cùng trên một mặt phẳng $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$ bằng biểu thức

$$\vec{n} = n_1\vec{a}_1 + n_2\vec{a}_2 + n_3\vec{a}_3 \tag{3.58}$$

n_1, n_2, n_3 là những số nguyên, $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$ là các vectơ cơ sở không cùng trên một mặt phẳng, chúng tạo thành một hình hộp gọi là ô nguyên thuỷ, nó chỉ chứa các nút mạng ở đỉnh. Nếu tại mỗi nút mạng ta gắn vào một hoặc một nhóm nguyên tử, gọi là gốc của mạng (basis) thì ta được mạng tinh thể lý tưởng. Mạng tinh thể lý tưởng cũng như mạng lý tưởng có tính tuần hoàn và vô hạn. Tinh thể thực là hữu hạn và thường có những sai lệch khỏi tính tuần hoàn, gọi là các sai hỏng.

Bài toán quan trọng bậc nhất của vật lý chất rắn là tìm phổ năng lượng của điện tử, là lý thuyết vùng năng lượng. Một chất rắn được coi như cấu tạo bởi một tập hợp các nguyên tử cô lập. Mỗi nguyên tử cô lập có một số lớn các mức năng lượng gián đoạn cho phép, trong đó có một số bị chiếm bởi các điện tử. Thông thường ở trạng thái cơ bản điện tử chỉ chiếm những mức năng lượng thấp nhất. Tuy nhiên khi bị kích thích chúng có thể chiếm các mức



Hình 3.12: *Minh họa sự hình thành vùng năng lượng.*

cao hơn, các mức năng lượng kích thích. Nếu hai nguyên tử không tương tác với nhau thì giá trị mỗi mức năng lượng vẫn giống như trường hợp nguyên tử cô lập nhưng số mức sẽ gấp đôi, xem hình (3.12a,b). Nếu hai nguyên tử có tương tác với nhau thì mỗi mức năng lượng trước đây tách thành hai mức (xem hình 3-12c). Năm nguyên tử thì mỗi mức năng lượng tách thành 5 mức như ở hình (3.12d).

Trong một mẫu tinh thể có N nguyên tử thì mỗi mức năng lượng trong nguyên tử cô lập sẽ tách thành N mức. Trong 1cm^3 chất rắn có khoảng $5 \cdot 10^{22}$ nguyên tử (ví dụ Si) thì mỗi mức năng lượng cũng tách thành $5 \cdot 10^{22}$ mức. Các mức này dĩ nhiên nằm rất sát nhau, nên trong vùng năng lượng bao gồm các mức bị tách ra, năng lượng của điện tử gần như liên tục, hình (3.12e).

Vì mỗi mức năng lượng trong nguyên tử cô lập tách thành một vùng năng lượng cho phép với bề rộng nhất định nên trong phổ năng lượng của điện tử sẽ có nhiều vùng năng lượng cho phép xen kẽ những vùng không cho phép, vùng cấm. Các điện tử có trong chất rắn sẽ điền đầy các mức năng lượng trong các vùng cho phép từ thấp đến cao. Tùy theo từng trường hợp cụ thể, có thể có những loại vùng như sau: vùng điền đầy hoàn toàn (thông thường các vùng có năng lượng thấp), vùng trống hoàn toàn (thông thường là các vùng

có năng lượng cao), vùng điền đầy một phần hay là trống một phần.

Những chất rắn có các vùng năng lượng cho phép ở nhiệt độ thấp mà chỉ điền đầy một phần thì đó là những kim loại và vùng điền đầy một phần đó gọi là vùng dẫn. Những chất rắn chỉ có các vùng điền đầy hoàn toàn và các vùng trống hoàn toàn thì gọi là chất điện môi hoặc bán dẫn. Vùng điền đầy hoàn toàn trên cùng gọi là vùng hoá trị. Vùng trống hoàn toàn dưới cùng gọi là vùng dẫn. Vùng không cho phép nằm giữa vùng hoá trị và vùng dẫn gọi là vùng cấm. Khoảng cách năng lượng giữa năng lượng cực đại trong vùng hoá trị và năng lượng cực tiểu trong vùng dẫn được gọi là bề rộng vùng cấm.

Phụ thuộc vào độ lớn của bề rộng vùng cấm mà người ta phân biệt một cách quy ước chất điện môi và chất bán dẫn. Thông thường chất bán dẫn có bề rộng vùng cấm nhỏ hơn 3eV, các chất có bề rộng vùng cấm lớn hơn 3eV được xếp là chất cách điện, điện môi.

Những điều xem xét có tính chất định tính trên đây đã giải thích được nhiều tính chất, ví dụ độ dẫn điện của các chất kim loại, bán dẫn, điện môi và đưa ra những tiêu chuẩn để phân biệt các loại vật liệu trên đây một cách chính xác hơn.

Bây giờ chúng ta sẽ dùng các khái niệm của cơ học lượng tử để xét vấn đề một cách chặt chẽ hơn, định lượng hơn.

3.5.1 Hàm sóng điện tử trong trường tuần hoàn. Trong chương trước, khi xét hàm sóng điện tử trong nguyên tử chúng ta thấy rằng nếu không để ý đến spin của điện tử thì hàm sóng hay là trạng thái lượng tử được xác định bởi tập hợp ba số lượng tử n, l, m_l đặc trưng cho ba đại lượng vật lý: năng lượng toàn phần, mômen động lượng quỹ đạo và hình chiếu của mômen động lượng quỹ đạo lên một trục. Đối với điện tử tự do mà hàm sóng của nó là hàm sóng phẳngDe Broglie

$$\Psi = Ae^{-i\vec{K}\vec{r}} = Ae^{-i(K_x x + K_y y + K_z z)} \tag{3.59}$$

thì tập hợp các đại lượng đặc trưng cho trạng thái của điện tử chính là ba thành phần của vectơ sóng (K_x, K_y, K_z) hay ba thành phần của vectơ động lượng (P_x, P_y, P_z), vì giữa vectơ sóng $\vec{K}$ và vectơ động lượng có mối liên hệ $\vec{P} = \hbar\vec{K}$. Trong trường hợp này ta có sự phụ thuộc giữa E và vectơ sóng $\vec{K}$, hay còn gọi là phổ năng lượng, có dạng parabon

$$E(K) = \frac{\hbar^2 K^2}{2m} \tag{3.60}$$

Chúng ta thấy rằng trong tinh thể, do sự sắp xếp của các nguyên tử có tính chất tuần hoàn được đặc trưng bởi các vectơ mạng: $\vec{n} = n_1\vec{a}_1 + n_2\vec{a}_2 + n_3\vec{a}_3$, thế năng của điện tử cũng phải là một hàm tuần hoàn, nghĩa là ta luôn có

$$U(\vec{r}) = U(\vec{r} + \vec{n}) \tag{3.61}$$

Điều này có nghĩa là thế năng tại hai điểm có tọa độ khác nhau một vectơ mạng phải bằng nhau. Block bằng lý thuyết đã chứng minh định lý sau đây:

Trong trường thế tuần hoàn $U(\vec{r}) = U(\vec{r} + \vec{n})$ hàm sóng của điện tử thoả mãn phương trình Schrödinger có dạng hàm Block

$$\Psi_{\vec{K}}(\vec{r}) = \varphi_{\vec{K}}(\vec{r})e^{i\vec{K}\vec{r}} \tag{3.62}$$

trong đó $\varphi_{\vec{K}}$ là một hàm tuần hoàn, nghĩa là

$$\varphi_{\vec{K}}(\vec{r}) = \varphi_{\vec{K}}(\vec{r} + \vec{n}) \tag{3.63}$$

Như vậy hàm sóng Block là một hàm sóng phẳng có biên độ $\varphi_{\vec{K}}(\vec{r})$ biến thiên theo chu kỳ tuần hoàn của mạng tinh thể. Chúng ta thêm vào hàm Block chỉ số $\vec{K}$ chỉ trạng thái vì đối với $\vec{K}$ khác nhau $\varphi_{\vec{K}}(\vec{r})$ có thể khác nhau.

3.5.2 Phương trình Schrödinger của tinh thể. Tinh thể là một hệ gồm có các hạt nhẹ (điện tử) và các hạt nặng (hạt nhân). Hàm sóng của tinh thể phụ thuộc vào tọa độ của tất cả các hạt.

$$\Psi = \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, ..., \vec{R}_1, \vec{R}_2, ...) = \Psi(\vec{r}_i, \vec{R}_\alpha) \tag{3.64}$$

ở đây $\vec{r}_i$ biểu diễn tọa độ các điện tử, $\vec{R}_\alpha$ - tọa độ các hạt nhân. Phương trình Schrödinger của tinh thể có dạng

$$\hat{H}\Psi = E\Psi \tag{3.65}$$

với $\hat{H} = \hat{T}_e + \hat{T}_z + \hat{U}_e + \hat{U}_z + \hat{U}_{ez} + \hat{V}$.

$\hat{T}_e = \sum_i \hat{T}_i = \sum_i (-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_i)$- động năng của điện tử.

$\hat{T}_z = \sum_\alpha \hat{T}_\alpha = \sum_\alpha (-\frac{\hbar^2}{2M_\alpha}\Delta_\alpha)$- động năng của hạt nhân.

$\hat{U}_e = \frac{1}{2}\sum_{i,j\neq i} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} = \frac{1}{2}\sum_{i\neq j}\hat{U}_{ij}$ thế năng tương tác điện tử với nhau

$\hat{U}_z = \frac{1}{2}\sum_{\alpha\neq\beta} \frac{z_\alpha z_\beta e^2}{4\pi\epsilon_0|\vec{R}_\alpha - \vec{R}_\beta|} = \frac{1}{2}\sum_{\alpha\neq\beta}\hat{U}_{\alpha\beta}$ thế năng tương tác hạt nhân với nhau

$\hat{U}_{ez} = \sum_{i,\alpha} \frac{z_\alpha e^2}{4\pi\epsilon_0|\vec{r}_i - \vec{R}_\alpha|} = \sum_{i,\alpha} \hat{U}_{i\alpha}$ thế năng tương tác điện tử với hạt nhân

$\hat{V} = \hat{V}(\vec{r}_i, \vec{R}_i)$ thế năng trong trường ngoài.

Phương trình Schrödinger chứa $3(z+1)N$ biến số, với N là số nguyên tử trong tinh thể, không thể giải được. Vì vậy cần tìm cách để đơn giản và giải gần đúng nó. Muốn giải phương trình này cần chuyển hệ các hạt tương tác với nhau thành một hệ không tương tác với nhau. Thật vậy, nếu một hệ có Hamiltonian biểu diễn được dưới dạng một tổng

$$\hat{H} = \sum_k \hat{H}_k$$

trong đó H_k chỉ phụ thuộc vào tọa độ hạt thứ k, nghĩa là

$$\hat{H}_k = -\frac{h^2}{2m}\Delta_k + \hat{U}_k(\vec{r}_k)$$

thì hàm sóng có thể tìm dưới dạng một tích các hàm sóng của các hạt

$$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, ...) = \Psi_1(\vec{r}_1)\cdots\Psi_2(\vec{r}_2)\cdots = \prod_i \Psi_i(\vec{r}_i)$$

và

$$E = \sum_i E_i.$$

Lợi dụng tính chất này người ta đã sử dụng các phép gần đúng.

1. Phép gần đúng đoạn nhiệt (Born-Oppenheimer) căn cứ vào sự khác nhau về khối lượng và do đó tính linh động của hai loại hạt điện tử và hạt nhân, giả thiết rằng không có sự trao đổi năng lượng (đoạn nhiệt) giữa hệ điện tử và hệ hạt nhân. Hơn thế nữa do hạt nhân có quán tính rất lớn so với điện tử người ta giả thiết hạt nhân đứng yên $\vec{R}_\alpha = \vec{R}^0_\alpha$. Bằng phép gần đúng này người ta đã tách được phương trình Schrödinger cho hệ điện tử

$$\hat{H}_e\Psi_e = E_e\Psi_e \tag{3.66}$$

Tuy nhiên đây vẫn là một phương trình hệ nhiều hạt, hàm sóng của hệ phụ thuộc $3zN$ biến số, cần phải được đơn giản đi.

2. *Phép gần đúng một điện tử* giả thuyết rằng có thể tìm được một trường thế gọi là trường tự hợp $\Omega_i(\vec{r}_i)$ sao cho:

- $\Omega_i(\vec{r}_i)$ có thể thay thế tác dụng của tất cả các điện tử còn lại lên điện tử thứ i mà ta xét.

- $\Omega_i(\vec{r}_i)$ chỉ phụ thuộc và tọa độ $\vec{r}_i$ của điện tử thứ i.

Nhờ đó ta có thể viết

$$\hat{H}_e = \sum_i \hat{H}_i; \qquad \text{với} \quad \hat{H}_i = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_i + \Omega_i(\vec{r}_i) + U_i(\vec{r}_i)$$

và hàm sóng của hệ điện tử có dạng:

$$\Psi_e(\vec{r}_1, \vec{r}_2, ...) = \prod_i \Psi(\vec{r}_i)$$

với $E_e = \sum_i E_i$ và $\Psi_i(\vec{r}_i)$ là lời giải của phương trình Schrödinger đối với 1 điện tử

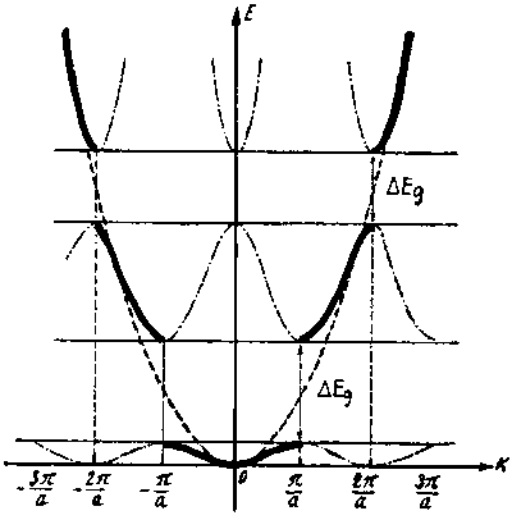
$$\hat{H}_i = E_i \Psi_i$$

mà ta có thể viết lại, bỏ các chỉ số, dưới dạng

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U(\vec{r})\right]\Psi(\vec{r}) = E\Psi(\vec{r}) \tag{3.67}$$

trong đó $U(\vec{r}) = U(\vec{r}, \vec{R}_1^0, \vec{R}_2^0, ...) + \Omega(\vec{r})$ là một hàm tuần hoàn chỉ phụ thuộc vào tọa độ của một điện tử, nghĩa là $U(\vec{r}) = U(\vec{r} + \vec{n})$.

Để giải phương trình này chúng ta cần biết $U(\vec{r})$, nghĩa là cần biết trường tự hợp $\Omega(\vec{r})$. Ngược lại muốn biết trường tự hợp ta cần phải biết hàm sóng. Như vậy $\Omega(\vec{r})$ phải có tính tự hợp, nghĩa là bản thân nó phụ thuộc vào $\Psi_i(\vec{r})$ cũng chính vì vậy mà ta gọi $\Omega(\vec{r})$ là trường tự hợp. Trong trường hợp coi $\Omega(\vec{r})$ nhỏ, ta có thể giải bài toán theo phương pháp gần đúng. Đầu tiên ta chọn một hàm sóng bậc 0 rồi từ hàm sóng bậc 0 ta có thể tìm được năng lượng bậc 1 và trường tự hợp rồi sau đó thay vào phương trình Schrödinger tìm hàm sóng gần đúng bậc 1 theo phương pháp lặp... Căn cứ vào cách chọn hàm sóng bậc 0, nghĩa là trạng thái xuất phát ban đầu, người ta chia làm hai phương pháp gần đúng: phương pháp gần đúng liên kết yếu và gần đúng liên kết mạnh.



Hình 3.13: *Phổ năng lượng của điện tử trong tinh thể theo gần đúng liên kết yếu.*

3.5.3 Phương pháp gần đúng liên kết yếu. Phương pháp này lấy hàm sóng bậc không, trạng thái xuất phát ban đầu, là hàm sóng của điện tử tự do. Đó là mẫu điện tử gần tự do. Hàm sóng bậc không là hàm sóng phẳng. Bằng phương pháp nhiễu loạn người ta tính được năng lượng gần đúng bậc nhất của điện tử và có thể tóm tắt kết quả đó như sau:

1. Năng lượng của điện tử trong trường tuần hoàn trên đại thể gần giống năng lượng của điện tử tự do, nghĩa là $E = \frac{\hbar^2 K^2}{2m}$ biểu diễn bằng đường đứt nét trên hình (3.13).

2. Do ảnh hưởng của trường tuần hoàn, phổ năng lượng của điện tử bị gián đoạn, tại các giá trị vectơ sóng $\vec{K}$, thoả mãn điều kiện phản xạ Vulf-Bragg

$$\vec{K}\vec{b} = \pi b^2 \tag{3.68}$$

trong đó $|\vec{K}| = 2\pi/\lambda$; $|\vec{b}| = |n/a|$; $\vec{b}$ gọi là vectơ mạng đảo, a là khoảng cách giữa hai mặt phẳng mạng song song gần nhau, n là số nguyên, vectơ $\vec{b}$ có độ lớn bằng $|n/a|$ và có phương vuông góc với mặt phẳng mạng. Thay các giá trị vào (3.68) ta có điều kiện nhiễu xạ Vulf-Bragg thường thấy (2.9), $2a\cos\theta = n\lambda$; θ là góc giữa vectơ $\vec{K}$ với mặt phẳng mạng.

3. Năng lượng là hàm tuần hoàn trong không gian vectơ sóng $\vec{K}$ nghĩa là

$E(\vec{K} + 2\pi\vec{b}) = E(\vec{K})$.

4. Phổ năng lượng của điện tử trong tinh thể bao gồm các vùng cho phép xen kẽ các vùng cấm.

3.5.4 Phương pháp gần đúng liên kết mạnh. Ngược với phương pháp gần đúng liên kết yếu, phương pháp này lại chọn trạng thái bậc không, trạng thái xuất phát, là hàm sóng của điện tử trong nguyên tử cô lập, ký hiệu là Ψ_a ứng với mức năng lượng E_a. Khi đó hàm sóng bậc không của điện tử trong tinh thể là tổ hợp của các hàm Ψ_a ở các nút mạng khác nhau, nghĩa là

$$\Psi_o(\vec{r}) = \sum_{\vec{m}} c_m \Psi_a(\vec{r} - \vec{m}) \tag{3.69}$$

với $\vec{m}$ là vectơ mạng $\vec{m} = m_1\vec{a}_1 + m_2\vec{a}_2 + m_3\vec{a}_3$. Ứng dụng điều kiện hàm Block ta xác định được c_m và hàm $\Psi_0(\vec{r})$ có dạng

$$\Psi_0(\vec{r}) = \sum_{\vec{m}} e^{i\vec{K}\vec{m}} \Psi_a(\vec{r} - \vec{m}) \tag{3.70}$$

Trường thế $U(\vec{r})$ trong tinh thể được xem là tổng của trường thế của tất cả các nguyên tử cô lập cộng lại ($\sum_{\vec{n}} V_a(\vec{r} - \vec{n})$) và trường thế do sự tương tác của các nguyên tử với nhau được xem như thành phần nhiễu loạn, ký hiệu là $W(\vec{r})$. Nghĩa là ta có

$$U(\vec{r}) = \sum_{\vec{n}} V_a(\vec{r} - \vec{n}) + W(\vec{r}) \tag{3.71}$$

Kết quả ta có phương trình Schrödinger:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + \sum_{\vec{n}} V_a(\vec{r} - \vec{n}) + W(\vec{r})\right] \Psi(\vec{r}) = E\Psi(\vec{r}) \tag{3.72}$$

Bây giờ ta tính năng lượng gần đúng bậc 1 dưới dạng

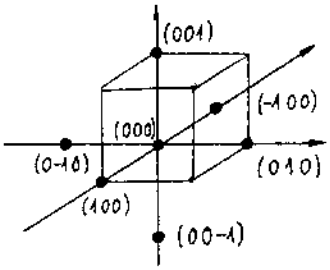
$$E = \frac{\int \Psi_0^*(\vec{r}) \hat{H} \Psi_0(r) dV}{\int \Psi_0^*(\vec{r}) \Psi(\vec{r}) dV} \tag{3.73}$$

Kết quả tính toán cụ thể cho ta biểu thức đối với năng lượng:

$$E = E_a + \frac{c}{\sum_{\vec{p}} e^{i\vec{K}\vec{p}} S_p} + \frac{\sum_{\vec{p}} e^{i\vec{K}\vec{p}} A(\vec{p})}{\sum_{\vec{p}} e^{i\vec{K}\vec{p}} S_p} \tag{3.74}$$

với

$$S_p = \int \Psi_a^*(\vec{r}) \Psi_a(\vec{r} - \vec{p}) dV \tag{3.75}$$



Hình 3.14: *Vị trí các nguyên tử trong tinh thể lập phương đơn giản.*

biểu diễn độ che phủ của hai hàm sóng thuộc hai nguyên tử nằm cách nhau một khoảng cách $\vec{p}$.

$$A(p) = \int \Psi_a^*(\vec{r}) \left[\sum_{\vec{n}-\vec{p}} V_a(\vec{r}-\vec{n}) + W(\vec{r}) \right] \Psi_a(\vec{r}-\vec{p}) dV \tag{3.76}$$

là năng lượng trao đổi do hai hàm sóng $\Psi_a(\vec{r})$ và $\Psi_a(\vec{r}-\vec{p})$ của hai nguyên tử nằm cách nhau một khoảng bằng $\vec{p}$ che phủ nhau.

$$c = \int \Psi_a^*(\vec{r}) U(\vec{r}) \Psi_a(\vec{r}) dV \tag{3.77}$$

là thế năng trung bình của điện tử lấy trong phạm vi một nguyên tử.

Để đơn giản chúng ta giả thiết rằng: các hàm sóng điện tử hoàn toàn không che phủ ngay cả khi nằm cạnh nhau. Điều đó có nghĩa là $S_p = 0$ khi $\vec{p} \neq 0$. Còn khi $\vec{p} = 0$ ta có $S_p = \int \Psi_a^*(r)\Psi_a(r)dV = 1$ và

$$E = E_a + c + \sum_{\vec{p}} e^{i\vec{K}\vec{p}} A(\vec{p}) \tag{3.78}$$

Ứng dụng kết quả này cho mạng lập phương đơn giản với giả thuyết:

mỗi nút mạng có 1 nguyên tử .

năng lượng trao đổi $A(\vec{p})$ đẳng hướng $= A(p)$.

chỉ tính năng lượng trao đổi với nguyên tử gần nhất, số nguyên tử đó bằng 6 và có tọa độ như ở hình (3.14).

$$\vec{p} = a \begin{cases} (1,0,0) & (-1,0,0) \\ (0,1,0) & (0,-1,0) \\ (0,0,1) & (0,0,-1) \end{cases}$$

Thay $\vec{p}$ vào biểu thức (3.78) và chú ý vectơ sóng $\vec{K} = (K_x, K_y, K_z)$ ta có

$$\begin{aligned} E &= E_a + c + A\left[e^{iK_x a} + e^{-iK_x a} + e^{iK_y a} + e^{-iK_y a} + e^{iK_z a} + e^{-iK_z a}\right] \\ &= E_a + c + 2A(\cos K_x a + \cos K_y a + \cos K_z a) \\ &= E(\vec{K}) \end{aligned} \tag{3.79}$$

Trên cơ sở những kết quả này ta rút ra một số kết luận:

1. Mức năng lượng gián đoạn E_a trong nguyên tử cô lập khi tạo thành tinh thể sẽ dịch đi một khoảng bằng c là thế năng trung bình của điện tử lấy trong phạm vi một nguyên tử.

2. Trong tinh thể mức năng lượng E_a tách thành một vùng năng lượng cho phép có bề rộng bằng

$$\Delta E = E_{\max} - E_{\min} \tag{3.80}$$

Ví dụ với mạng lập phương đơn giản, $\Delta E = 12A$.

Bề rộng vùng năng lượng cho phép phụ thuộc vào tích phân trao đổi $A(\vec{p})$, càng lớn khi độ che phủ hàm sóng càng cao.

3. Trong nguyên tử cô lập có nhiều mức năng lượng cho phép, khi vào trong tinh thể mỗi mức tách ra thành một vùng cho phép nằm xen kẽ các vùng không cho phép gọi là vùng cấm.

4. Trong giới hạn vùng năng lượng cho phép, năng lượng là hàm tuần hoàn, chẵn của $\vec{K}$, nghĩa là ta luôn có $E(\vec{K}) = E(-\vec{K})$.

3.5.5 Điều kiện biên tuần hoàn của hàm sóng. Ứng dụng điều kiện biên tuần hoàn, ta sẽ thu được một kết quả quan trọng quy định tính gián đoạn của vectơ sóng $\vec{K}$ và tất nhiên từ đó là sự gián đoạn của các mức năng lượng trong vùng cho phép. Kết quả tính toán cho thấy rằng, trong mẫu tinh thể hình hộp, có các cạnh theo trục x, y, z là L_x, L_y, L_z, nếu dùng điều kiện biên tuần hoàn đối với hàm sóng:

$$\begin{aligned} \Psi(x,y,z) &= \Psi(x+L_x,y,z) \\ \Psi(x,y,z) &= \Psi(x,y+L_y,z) \\ \Psi(x,y,z) &= \Psi(x,y,z+L_z) \end{aligned}$$

vectơ sóng chỉ nhận những giá trị gián đoạn sau đây (trong ví dụ mạng lập phương tinh thể đơn giản)

$$K_x = \frac{2\pi n_1}{L_x}; \quad K_y = \frac{2\pi n_2}{L_y}; \quad K_z = \frac{2\pi n_3}{L_z} \tag{3.81}$$

với

$$n_i = 0, \pm 1, \pm 2, ..., \frac{N_i}{2} \tag{3.82}$$

Trong đó $N_x N_y N_z = N$ là số nguyên tử trong mẫu tinh thể và ta có $N_x = \frac{L_x}{a}; N_y = \frac{L_y}{a}; N_z = \frac{L_z}{a}$; $N = \frac{V}{a^3}$, với V là thể tích của mẫu tinh thể.

Kết quả tính toán cũng chứng minh rằng trong trường hợp ví dụ với mạng lập phương đơn giản, mỗi nút mạng có một nguyên tử, thì chỉ có N giá trị $\vec{K}$ gián đoạn đặc trưng cho N trạng thái độc lập. Nghĩa là nếu ta lấy một giá trị ngoài các giá trị quy định ở (3.82) thì ta lại được một hàm sóng trùng với hàm sóng đã có với n_i lấy theo (3.82).

Chúng ta cũng thấy rằng gia số của K_i, nghĩa là khoảng cách giữa hai giá trị gần nhau sẽ là

$$\Delta K_x = \frac{2\pi}{L_x}, \quad \Delta K_y = \frac{2\pi}{L_y}, \quad \Delta K_z = \frac{2\pi}{L_z} \tag{3.83}$$

Gọi ΔV_K là thể tích của một phân tử trong không gian vectơ sóng $\vec{K}$, nghĩa là $\Delta V_K = \Delta K_x \Delta K_y \Delta K_z = \frac{(2\pi)^3}{V}$, ta thấy mỗi thể tích ΔV_K trong không gian $\vec{K}$ ứng với một trạng thái của điện tử.

Như vậy trong mỗi vùng năng lượng cho phép có N (N bằng số nguyên tử) mức năng lượng gián đoạn cho phép. Tuy nhiên vì N rất lớn, bề rộng vùng năng lượng cho phép cỡ một vài eV, nên khoảng cách năng lượng giữa các mức rất nhỏ. Vì thế trong nhiều trường hợp ta vẫn có thể coi phổ năng lượng trong vùng năng lượng cho phép là liên tục.

Vì mỗi vùng năng lượng chỉ có N mức năng lượng cho phép, trên mỗi mức chỉ có thể có hai điện tử có spin ngược nhau, nên nó chứa được $2N$ điện tử. Đối với kim loại kiềm, cũng như kim loại quý mỗi nguyên tử chỉ có một điện tử nằm ở trạng thái s, khi vào trong tinh thể trạng thái s trở thành một vùng năng lượng cho phép chứa được $2N$ điện tử, nhưng trong tinh thể chỉ có N điện tử, nghĩa là chỉ điền đầy $\frac{1}{2}$ và các nguyên tố này là kim loại.

Các nguyên tố nhóm II như Mg, theo phân tích trên đây phải là điện môi hay bán dẫn, nhưng chúng vẫn là kim loại vì vùng năng lượng s lại chồng chéo lên vùng p tạo thành một vùng điền đầy một phần.

Các nguyên tố nhóm III như Al là kim loại là hợp lý với cách giải thích trên đây.

Các nguyên tố nhóm IV như C, Si, Ge có 4 điện tử hóa trị nhưng trạng thái s và trạng thái p kết hợp với nhau tạo thành trạng thái lai vào trong tinh thể chúng tạo thành hai vùng năng lượng cho phép vùng phía dưới chứa được $4N$ điện tử và đầy hoàn toàn vùng phía trên chứa được $4N$ điện tử trống hoàn toàn, giữa hai vùng này tồn tại một vùng cấm. Chính vì vậy các tinh thể Ge, Si là những bán dẫn, carbon tinh thể - kim cương là điện môi.

3.5.6 Phổ năng lượng điện tử khi có từ trường ngoài tác dụng. Các hiện tượng cộng hưởng từ. Cảm ứng từ $\vec{B}$ có thể được biểu diễn qua vectơ thế $\vec{A}(\vec{r})$ bằng công thức: $\vec{B} = \mathrm{rot}\vec{A}$.

Nếu động lượng của điện tử là $\vec{P} = m\dot{\vec{r}}$, thì động lượng tổng quát hoá được định nghĩa là

$$\vec{P} = \vec{p} + e\vec{A} \tag{3.84}$$

Từ đây ta có

$$H = T + U = \frac{(\vec{P} - e\vec{A})^2}{2m} + U(\vec{r}) \tag{3.85}$$

và toán tử Hamiltonian của hệ điện tử trong tinh thể trong trường hợp này sẽ là

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \frac{(\vec{P} - e\vec{A})^2}{m} + U(\vec{r}) \\ &= \frac{(-i\hbar\nabla - e\vec{A})^2}{2m} + U(\vec{r}). \end{aligned}$$

Phương trình Schrödinger cho trường hợp có từ trường sẽ là:

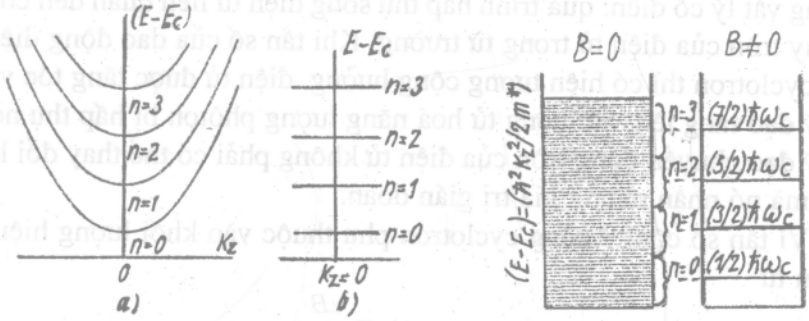
$$\hat{H}\Psi = \left[\frac{(-i\hbar\nabla - e\vec{A})^2}{2m} + U(\vec{r})\right]\Psi = E\Psi \tag{3.86}$$

Tính toán bằng các phương pháp gần đúng cho thấy rằng năng lượng của điện tử trong mỗi vùng cho phép đều lượng tử hoá theo quy luật sau:

$$E = E_0 + \frac{\hbar^2 K^2}{2m^*} + \hbar\omega_c(n + \frac{1}{2}) \tag{3.87}$$

$$= E(K_z, n, \omega_c) \tag{3.88}$$

trong đó $\omega_c = \frac{eB}{m^*}$; $n = 0, 1, 2, \ldots$; m^* được gọi là khối lượng hiệu dụng của điện tử.



Hình 3.15: *Mô tả sự hình thành các mức Landau.*

Trên hình (3.15) biểu diễn quá trình lượng tử hoá từ năng lượng gần như liên tục của điện tử trong vùng cho phép thành một phổ năng lượng gián đoạn gồm các mức Landau.

Từ (3.87) chúng ta có thể viết phổ năng lượng của điện tử trong vùng dẫn

$$E = E_c + \frac{\hbar^2 K^2}{2m^*} + \hbar\omega_c(n + \frac{1}{2}) \qquad (3.89)$$

Chúng ta nhận thấy mức năng lượng E_c nay không còn là mức cho phép. Mức năng lượng thấp nhất trong vùng dẫn, khi có từ trường, nằm cao hơn E_c một lượng $\frac{1}{2}\hbar\omega_c$. Như vậy tác dụng của từ trường đã làm cho phổ năng lượng của điện tử trong vùng năng lượng thay đổi.

Đối với các điện tử trong tinh thể không kết đôi do spin của nó tương tác với từ trường phổ năng lượng cũng thay đổi, nói cách khác là các mức năng lượng bị tách thành các phân mức. Tất cả những sự thay đổi phổ năng lượng này trong từ trường đều gây nên các hiện tượng cộng hưởng từ. Hiện tượng cộng hưởng từ là hiện tượng tăng cường quá trình hấp thụ sóng điện từ ở một tần số nào đó khi đặt tinh thể vào trong từ trường. Chúng ta xét một số hiện tượng sau.

1. *Hiện tượng cộng hưởng cyclotron.* Nếu chúng ta rọi vào tinh thể đặt trong từ trường một bức xạ (sóng điện từ) có năng lượng phôton bằng khoảng cách giữa các mức Landau thì bức xạ sẽ bị hấp thụ và gây ra chuyển mức giữa các mức Landau. Ta có thể giải thích hiện tượng cộng hưởng cyclotron

bằng vật lý cổ điển: quá trình hấp thụ sóng điện từ liên quan đến chuyển động quay tròn của điện tử trong từ trường. Khi tần số của dao động điện bằng tần số cyclotron thì có hiện tượng cộng hưởng, điện tử được tăng tốc và bán kính quỹ đạo tăng lên. Sự lượng tử hoá năng lượng phôton bị hấp thụ nói lên rằng quỹ đạo chuyển động tròn của điện tử không phải có thể thay đổi liên tục bất kỳ mà nó nhận những giá trị gián đoạn.

Vì tần số cộng hưởng cyclotron phụ thuộc vào khối lượng hiệu dụng của điện tử

$$\omega_c = \frac{eB}{m^*} \tag{3.90}$$

trong trường hợp tổng quát m^* là một đại lượng tenxơ, không đẳng hướng cho nên ω_c phụ thuộc vào định hướng tương hỗ giữa từ trường và hướng đối xứng tinh thể. Cộng hưởng cyclotron vì thế mà trở thành một phương pháp nghiên cứu khối lượng hiệu dụng và từ đó nghiên cứu cấu trúc năng lượng của tinh thể, ta sẽ nói đến các khái niệm này sau.

2. *Hiện tượng cộng hưởng từ điện tử, hay là cộng hưởng từ spin.* Chúng ta đã biết rằng các hạt nguyên tử tuân theo các nguyên lý của cơ học lượng tử theo đó sự thay đổi định hướng của mômen $\vec{J}$ không thể xảy ra liên tục mà chỉ nhận những giá trị gián đoạn. Mômen động lượng $\vec{J}$ lại liên quan chặt chẽ với mômen từ $\vec{\mu}_j$. Vì vậy bất cứ một mức năng lượng nào của một hạt khi có tác dụng của từ trường cũng bị tách thành một số phân mức (sublevel), số phân mức được xác định bằng quy tắc:

$$\chi = 2S + 1$$

trong đó S là spin của hạt, ví dụ khi $S = 1/2$, $\chi = 2$ và khoảng cách giữa hai mức con sẽ là:

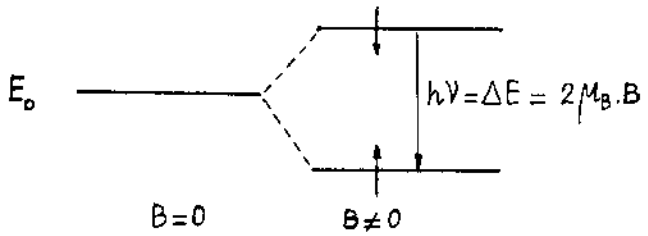
$$\Delta E = \frac{e\hbar}{m} B = 2\mu_B B \tag{3.91}$$

với $\mu_B = \frac{e\hbar}{2m}$ là magneton Bohr.

Magneton Bohr của điện tử bằng $-0,9273 \cdot 10^{-23}$J/T.

Hiện tượng hấp thụ cộng hưởng được xem là sự tiêu tốn năng lượng của trường điện từ để chuyển hạt từ phân mức này sang phân mức khác khi tần số của trường điện từ thoả mãn điều kiện

$$h\nu_e = \Delta E = 2\mu_B B \longrightarrow \nu_e = \frac{2\mu_B B}{h}$$



Hình 3.16: *Mô tả quá trình tách mức trong từ trường.*

Tính toán lý thuyết chính xác đưa đến công thức:

$$\nu_e = g_e \frac{\mu_B B}{h} = \gamma_e B \tag{3.92}$$

trong đó $\gamma_e = g_e \frac{e}{2m}$ gọi là hệ số từ-cơ, g_e gọi là $g-$factor của điện tử, hay là factor tách mức Landé. Đối với điện tử $g-$factor $= g_e \cong 2$.

Khi chúng ta đặt tinh thể vào từ trường spin điện tử có xu hướng định hướng song song với từ trường (có lợi về năng lượng hơn) và tinh thể bị từ hoá như một vật liệu thuận từ. Do tương tác với sóng điện từ có tần số thích hợp điện tử nhận được một năng lượng thích hợp đủ để chuyển sang trạng thái có spin ngược lại. Đó chính là hiện tượng cộng hưởng từ điện tử hay là cộng hưởng từ spin. Hiện tượng này cũng còn gọi là hiện tượng cộng hưởng thuận từ điện tử để phân biệt với cộng hưởng cyclotron gọi là cộng hưởng nghịch từ. Cộng hưởng từ điện tử chỉ có thể xảy ra đối với các điện tử không kết đôi, nó cũng là một phương pháp hữu hiệu để nghiên cứu cấu trúc vật liệu.

3. *Hiện tượng cộng hưởng từ hạt nhân và ứng dụng.* Vì các hạt nhân nguyên tử cũng có mômen từ spin, cho nên trong từ trường ngoài $\vec{B}$ các mức năng lượng của hạt nhân cũng bị tách mức thành các phân mức và có thể xảy ra chuyển mức giữa các phân mức khi hấp thụ sóng điện từ. Đó chính là hiện tượng cộng hưởng từ hạt nhân. Tần số cộng hưởng cũng được xác định tương tự

$$\nu_\alpha = \gamma_\alpha B = g_\alpha \frac{e}{2M} B \tag{3.93}$$

$\gamma_\alpha = g_\alpha \frac{e}{2M}$ là hệ số từ-cơ của hạt nhân, g_α - $g-$factor của hạt nhân, factor tách mức Landé, M- khối lượng proton.

Chúng ta xét trường hợp đơn giản nhất là các hạt nhân hydro ^1_1H chỉ gồm có 1 hạt proton đơn thuần. Mômen động lượng spin (cũng như mômen từ

spin) của nó giống hệt như đối với điện tử chỉ có thể có hai giá trị trong từ trường: spin hướng lên (song song với từ trường) và spin hướng xuống (đối song song với từ trường). Khi có từ trường, mức năng lượng bị tách thành hai phân mức với spin hướng lên có năng lượng thấp hơn và spin hướng xuống có năng lượng cao hơn (hình (3.16)). Trạng thái spin hướng xuống có thêm một năng lượng $\mu_B B$ và trạng thái spin hướng lên $-\mu_B B$. Khoảng cách năng lượng giữa hai trạng thái là $\Delta E = 2\mu_B B$, trong đó μ_B là mangeton Bohr của proton, mômen từ của proton, $\mu_B = 0,505038 \cdot 10^{-26}\mathrm{J/T}$.

Trong thí nghiệm cộng hưởng từ mẫu nghiên cứu được đặt trong từ trường tĩnh của một nam châm điện. Những xung điện từ siêu cao tần (bức xạ điện từ) được dọi vào mẫu. Nếu như tần số ν của bức xạ thích hợp với khoảng cách năng lượng giữa hai mức

$$h\nu = \Delta E = 2\mu_B B \tag{3.94}$$

thì photon của bức xạ điện từ sẽ bị hấp thụ và gây ra chuyển mức từ trạng thái thấp lên trạng thái cao. Hiện tượng này gọi là hiện tượng hấp thụ cộng hưởng vì quá trình hấp thụ tăng vọt.

Đối với hydro $^1_1$H tần số cộng hưởng $\nu = 42,58\mathrm{MH_z}$ khi $\vec{B} = 1\mathrm{T}$. Nếu nguyên tử H ở trong phân tử thì từ trường B là tổng cả từ trường ngoài B_{ex} cộng với từ trường địa phương B_{loc} gây ra do điện tử và hạt nhân các nguyên tử bên cạnh, nghĩa là

$$h\nu = 2\mu_B B = 2\mu_B(B_{\mathrm{ex}} + B_{\mathrm{loc}}) \tag{3.95}$$

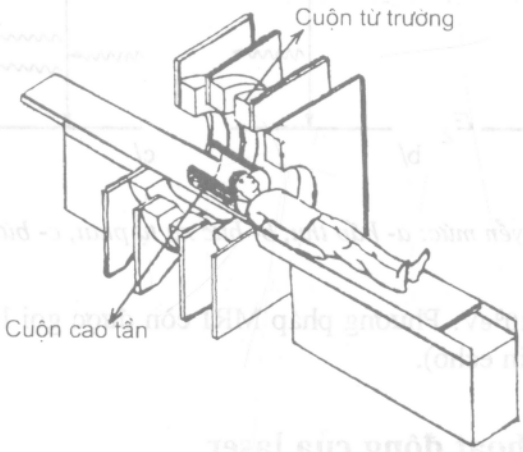
Sự thay đổi này có thể xác định được và gọi là độ "chuyển dịch hoá học".

Hiện tượng cộng hưởng từ là một công cụ lợi hại để nghiên cứu cấu trúc, mối liên kết của phân tử.

Hiện tượng cộng hưởng từ còn được dùng trong kỹ thuật ghi hình y tế, đó chính là kỹ thuật ghi hình cắt lát cộng hưởng từ hạt nhân (MRI- magnetic resonance imaging), để ngắn gọn ta sẽ dùng thuật ngữ viết tắt MRI. Sơ đồ thiết bị MRI được biểu diễn ở hình (3.17).

Nguyên tố được chọn để xác định thông thường là hydro vì hydro có nhiều trong các bộ phận của cơ thể và cho tín hiệu MRI mạnh nhất.

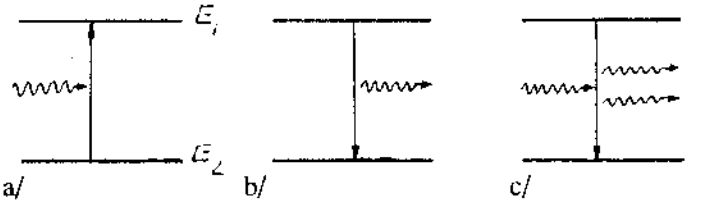
Trong thiết bị những cuộn dây lớn dùng để tạo từ trường tĩnh, còn cuôn dây cao tần dùng để phát bức xạ siêu cao tần để gây chuyển mức các hạt nhân từ trạng thái thấp lên trạng thái cao. Cũng cuộn dây này (hoặc một cuộn khác) được dùng để xác định năng lượng siêu cao tần bị hấp thụ, hoặc bức xạ khi hạt nhân trở về trạng thái thấp.



Hình 3.17: *Sơ đồ thiết bị MRI.*

Quá trình xử lý hình ảnh hai chiều hoặc ba chiều được thực hiện nhờ sự giúp đỡ của kỹ thuật máy tính. Việc đo cường độ bức xạ bị hấp thụ, hoặc bức xạ trở lại để xác định mật độ hydro trong từng phần cơ thể là một việc làm không khó. Cái khó là làm sao biết được các bức xạ đo được là từ phần nào của cơ thể phát ra, việc này phức tạp hơn nhiều. Một thủ thuật để thực hiện được việc này là dùng từ trường tĩnh thay đổi theo tọa độ, nghĩa là có một gradient từ trường dọc theo mẫu (cơ thể người). Bởi vì tần số bức xạ ν bị hấp thụ tỷ lệ với B, nên chỉ có một "lát mỏng" cơ thể trong đó giá trị B ứng với tần số photon cộng hưởng sẽ hấp thụ những photon có tần số đó. Bằng cách thay đổi ν ta sẽ đo được sự hấp thụ trong các "lát" khác nhau. Dùng các hướng grad của từ trường khác nhau ta có thể thực hiện các lát cắt vuông góc với các trục khác nhau và những tín hiệu thu được sẽ được máy tính xử lý để cho hình ảnh ba chiều, hay hai chiều trong những mặt cắt nhất định.

Phương pháp MRI thường sử dụng tín hiệu là tốc độ suy giảm hồi phục, nghĩa là tốc độ các hạt nhân bị kích thích (chuyển lên mức cao) trở về mức thấp, hơn là sử dụng tín hiệu về cường độ bức xạ bị hấp thụ hay cường độ bức xạ trở lại. Năng suất phân giải của phương pháp cỡ 1mm. Ưu điểm của phương pháp MRI là ít gây hại vì năng lượng của photon ở đây rất nhỏ (10^{-7}eV) không đủ để làm sai lệch các mối liên kết trong nguyên tử, phân tử. Năng lượng của



Hình 3.18: *Sơ đồ chuyển mức: a- hấp thụ, b- bức xạ tự phát, c- bức xạ cưỡng bức.*

photon Ronghen cỡ 10^5eV. Phương pháp MRI còn được gọi là phương pháp "tiếng vọng spin" (spin echo).

3.6 Nguyên lý hoạt động của laser

Kết quả nghiên cứu của những phần trên đây của chương này chứng tỏ rằng phổ năng lượng của các hệ vi hạt không phải liên tục mà là gián đoạn.

Trong điều kiện cân bằng, không có kích thích bên ngoài, hệ vi hạt thường chiếm những mức năng lượng thấp nhất, được gọi là những mức năng lượng cơ bản.

Khi có tác dụng của các yếu tố bên ngoài như tác dụng của bức xạ, tương tác của các hạt điện tử, ion, nguyên tử khác, tác dụng của điện trường, nhiệt độ..., hệ vi mô có thể bị kích thích chuyển lên các trạng thái với năng lượng cao hơn. Các trạng thái với năng lượng cao hơn trạng thái cơ bản được gọi là các trạng thái kích thích.

Để tìm hiểu nguyên lý hoạt động của các dụng cụ lượng tử chúng ta sẽ xét sự tương tác giữa hệ vật chất với bức xạ.

3.6.1 Mô hình hai mức năng lượng. Giả sử chúng ta có một hệ gồm các nguyên tử cùng loại và không tương tác với nhau. Giả sử hệ có hai trạng thái năng lượng: trạng thái năng lượng thấp là E_1 và trạng thái năng lượng cao hơn E_2 như ở hình (3.18) chúng ta gọi nồng độ các hạt có năng lượng E_1 là N_1 và nồng độ các hạt có năng lượng E_2 là N_2. Hệ hạt này tương tác với bức xạ điện từ có mật độ phổ năng lượng là $\sigma(\nu)$. Mật độ phổ năng lượng (mât độ năng phổ - spectral energy density)của bức xạ điện từ đặc trưng cho cường độ và sự phân bố năng lượng theo tần số của bức xạ. Mật độ phổ năng lượng là năng lượng của bức xạ chứa trong một đơn vị thể tích vật liệu có tần số trong khoảng một đơn vị tần số. Đối với một tần số nhất định $\sigma(\nu)$ liên hệ với

cường độ bức xạ bởi công thức : $\sigma(\nu) = \frac{I(\nu)}{v}$, với v là vật tốc ánh sáng trong vật liệu. Trong hệ vật chất với những điều kiện trên đây có thể xảy ra những chuyển mức lượng tử sau đây:

1. Chuyển mức hấp thụ (hình (3.18a). Đó là chuyển mức từ trạng thái E_1 lên trạng thái E_2 cao hơn khi nguyên tử hấp thụ một photon có năng lượng bằng hiệu hai mức năng lượng nghĩa là $h\nu_{12} = E_2 - E_1$. Số lượng các vụ chuyển mức hấp thụ phụ thuộc vào số nguyên tử ở mức E_1 và số photon có năng lượng $h\nu_{12}$. Số photon có năng lượng $h\nu_{12}$ hay là có tần số ν_{12} phụ thuộc vào mật độ phổ năng lượng của bức xạ $\sigma(\nu)$. Các vụ chuyển mức hấp thụ làm cho số hạt ở mức năng lượng E_1, nghĩa là N_1 giảm xuống. Ta có thể viết số nguyên tử N_1 do các vụ chuyển mức hấp thụ mà giảm xuống là

$$dN_1 = -B_{12}N_1 \cdot \sigma(\nu_{12})dt \tag{3.96}$$

trong đó B_{12} là hệ số xác suất chuyển mức hấp thụ.

2. Chuyển mức phát xạ tự phát (hình (3.18b)). Đó là quá trình xẩy ra ngẫu nhiên, nguyên tử ở trạng thái năng lượng cao E_2 hoàn toàn ngẫu nhiên chuyển xuống trạng thái thấp hơn E_1 và phát xạ ra một photon có tần số bằng ν_{12}, nghĩa là năng lượng $h\nu_{12}$. Chuyển mức bức xạ này vì thế gọi là chuyển mức bức xạ tự phát nó tự động xảy ra một cách ngẫu nhiên không cần có tác động của trường bức xạ bên ngoài. Các vụ chuyển mức phát xạ tự phát xẩy ra ngẫu nhiên và độc lập với nhau, nên các photon phát ra tuy có cùng tần số nhưng có pha khác nhau, có hướng khác nhau, có mặt phân cực khác nhau. Các photon phát xạ tự phát cũng độc lập với các photon của trường bức xạ bên ngoài, nó không đồng bộ và không cùng hướng với bức xạ bên ngoài.

3. Chuyển mức phát xạ cưỡng bức, phát xạ kích thích, (xem hình (3.18c)). Đó là chuyển mức của các nguyên tử ở trạng thái E_2 xuống trạng thái E_1 thấp hơn dưới tác dụng của photon của trường bức xạ bên ngoài có năng lượng $h\nu_{12}$, làm phát xạ ra một photon thứ hai có tần số, có pha dao động, có mặt phân cực và hướng chuyển động giống hệt như photon tới. Điều đó có nghĩa là bức xạ cưỡng bức đồng bộ với bức xạ tới cùng hướng với bức xạ tới.

Số bức xạ cưỡng bức phụ thuộc vào số nguyên tử ở mức cao E_2 và số photon có năng lượng $h\nu_{12}$ trong trường bức xạ, nghĩa là phụ thuộc vào mật độ phổ năng lượng của bức xạ.

Ngược lại số bức xạ tự phát thì chỉ phụ thuộc vào số nguyên tử ở mức cao E_2 mà không phụ thuộc vào mật độ phổ năng lượng bức xạ. Cả hai quá trình

chuyển mức này đều làm cho số nguyên tử ở mức E_2 giảm xuống. Nếu cộng cả hai quá trình thì số nguyên tử N_2 trong thời gian dt sẽ thay đổi một lượng là

$$dN_2 = dN_{2sp} + dN_{2st} = -N_2\left[A_{21} + B_{21}\sigma(\nu_{12})\right]dt$$

trong đó

dN_{2sp} - số chuyển mức bức xạ tự phát (spontaneous)
dN_{2st} - số chuyển mức phát xạ cưỡng bức (stimulated)
A_{21} - hệ số xác suất chuyển mức phát xạ tự phát
B_{21} - hệ số xác suất chuyển mức phát xạ cưỡng bức
$\sigma(\nu_{12})$ - mật độ phổ năng lượng của bức xạ.

Vì chúng ta giả thiết là hệ chỉ có hai mức năng lượng cho nên số nguyên tử ở trạng thái E_1 tăng lên bao nhiêu thì số nguyên tử ở trạng thái E_2 giảm xuống bấy nhiêu và ngược lại. Do đó chúng ta có thể viết:

$$dN_1 = -N_1B_{12}\sigma(\nu_{12})dt + N_2\left[A_{21} + B_{21}\sigma(\nu_{12})\right]dt$$
$$dN_2 = -N_2\left[A_{21} + B_{21}\sigma(\nu_{12})\right]dt + N_1B_{12}\sigma(\nu_{12})dt.$$

4. *Điều kiện cân bằng.* Trong điều kiện cân bằng nhiệt động với môi trường bên ngoài mật độ các trạng thái năng lượng là không đổi theo thời gian, nghĩa là

$$\frac{dN_1}{dt} = 0, \quad \frac{dN_2}{dt} = 0$$

Do đó ta có $N_2\left[A_{21} + B_{21}\sigma(\nu_{12})\right] = N_1B_{12}\sigma(\nu_{12})$

$$\frac{N_2}{N_1} = \frac{B_{12}\sigma(\nu_{12})}{A_{21} + B_{21}\sigma(\nu_{12})}. \tag{3.97}$$

Mặt khác, trong điều kiện cân bằng nhiệt động, mật độ hạt trong mỗi trạng thái năng lượng được viết bởi phân bố Boltzmann

$$N_i = \frac{1}{z}N \cdot g_i e^{-\frac{E_i}{kT}} \tag{3.98}$$

trong đó z - hằng số chuẩn hoá, N - tổng số hạt g_i là lượng thống kê hay bậc suy biến của trạng thái có năng lượng E_i. Vì vậy tỷ số

$$\frac{N_2}{N_1} = \frac{g_2}{g_1}e^{\frac{E_1-E_2}{kT}} = \frac{g_2}{g_1}e^{-\frac{h\nu_{12}}{kT}} \tag{3.99}$$

Kết hợp hai biểu thức vừa nhận được ta có

$$\frac{B_{12}\sigma(\nu_{12})}{A_{21}+B_{21}\sigma(\nu_{12})} = \frac{g_2}{g_1}e^{-\frac{h\nu_{12}}{kT}}$$

$$B_{12}\sigma(\nu_{12}) = (A_{21}+B_{21}\sigma(\nu_{12}))\,\frac{g_2}{g_1}e^{-\frac{h\nu_{12}}{kT}}$$

$$\sigma(\nu_{12})\left[B_{12}-B_{21}\frac{g_2}{g_1}e^{-\frac{h\nu_{12}}{kT}}\right] = \frac{g_2}{g_1}e^{-\frac{h\nu_{12}}{kT}}A_{21}.$$

$$\sigma(\nu_{12}) = \frac{A_{21}}{\frac{g_1}{g_2}B_{12}e^{\frac{+h\nu_{12}}{kT}}-B_{21}} \tag{3.100}$$

5. *Các hệ số Einstein.* Từ các biểu thức mật độ phổ năng lượng của bức xạ chúng ta thấy rằng khi nhiệt độ tăng đến ∞ thì $\sigma(\nu_{12})$ cũng phải tăng đến ∞, vì vậy khi nhiệt độ tăng đến ∞ mẫu số của biểu thức trên phải tiến đến 0 nghĩa là

$$\frac{g_1}{g_2}B_{12} = B_{21} \quad \text{hay là} \quad g_1B_{12} = g_2B_{21} \tag{3.101}$$

Nếu $g_1 = g_2$ ta có $B_{12} = B_{21}$. Thay các giá trị B_{21} mới tìm được vào biểu thức $\sigma(\nu_{12})$:

$$\sigma(\nu_{12}) = \frac{A_{21}}{\frac{g_1}{g_2}\cdot B_{12}}\cdot\left(\frac{1}{e^{\frac{+h\nu_{12}}{kT}}-1}\right) \tag{3.102}$$

Mặt khác chúng ta thấy rằng mật độ của phổ năng lượng của bức xạ cũng có thể xác định được bằng công thức Planck

$$\sigma(\nu) = \frac{8\pi n^3\nu^3h}{c^3}\cdot\frac{1}{e^{\frac{h\nu_{12}}{kT}}-1} \tag{3.103}$$

n - chỉ số khúc xạ. So sánh hai công thức ta có

$$\frac{A_{21}}{\frac{g_1}{g_2}\cdot B_{12}} = \frac{8\pi n^3\nu^3h}{c^3} \longrightarrow A_{21} = \frac{g_1}{g_2}\frac{8\pi n^3\nu^3B_{12}h}{c^3} \tag{3.104}$$

Như vậy chúng ta tìm được mối liên hệ giữa các hệ số A_{21}, B_{12}, B_{21} gọi là các hệ số Einstein:

A_{21} - hệ số xác suất chuyển mức phát xạ tự phát

B_{12} - hệ số xác suất hấp thụ

B_{21} - hệ số xác suất chuyển mức phát xạ cưỡng bức.

Nhờ những biểu thức liên hệ giữa ba hệ số chúng ta chỉ cần biết một hệ số sẽ tìm được hai hệ số kia.

Thông thường người ta coi hệ số xác suất chuyển mức phát xạ tự phát A_{21} là hằng số của hệ lượng tử và các tính toán lý thuyết đều được tiến hành cho hệ số này.

6. *Xác định hệ số xác xuất chuyển mức phát xạ tự phát.* Hệ số A_{21} cũng có thể xác định bằng thực nghiệm. Thật vậy, giả sử bằng cách nào đó có thể kích thích các hạt từ trạng thái E_1 lên trạng thái E_2. Nếu chúng ta không gây một tác động nào của trường bức xạ bên ngoài, nghĩa là không tạo điều kiện để xảy ra bức xạ cưỡng bức, thì các hạt ở trạng thái E_2 trở về trạng thái E_1 gần như chỉ qua chuyển mức phát xạ tự phát, và ta có

$$dN_2 = -N_2 A_{21} dt \longrightarrow N_2(t) = N_2(0)e^{-A_{21}t} \tag{3.105}$$

Ta có thể tính được thời gian trung bình hạt tồn tại trong trạng thái E_2, gọi là thời gian sống của trạng thái đó:

$$\tau_2 = \frac{1}{N_2(0)} \int_{t=0}^{\infty} t dN_2 \tag{3.106}$$

Thay biểu thức dN_2 vào ta có

$$\tau_2 = -A_{21} \int_{t=0}^{\infty} te^{-A_{21}t} dt = -\frac{1}{A_{21}} \int_{x=0}^{\infty} xe^{-x} dx = \frac{1}{A_{21}}. \tag{3.107}$$

Vậy thời gian sống trong trạng thái kích thích là đại lượng nghịch đảo của xác suất chuyển mức phát xạ tự phát. Vì cường độ của bức xạ tự phát tỷ lệ với nồng độ hạt trong trạng thái kích thích và xác suất chuyển mức:

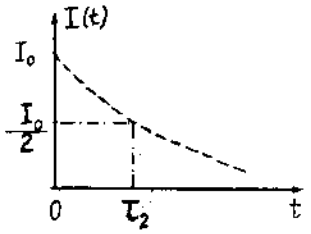
$$I = A_{21} N_2 h\nu_{12}$$

ta có thể xác định được τ_2 từ công thức

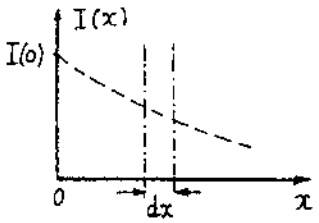
$$I(t) = I(0)e^{-\frac{t}{\tau_2}} \tag{3.108}$$

như ở hình (3.19). Từ τ_2 ta xác định được xác suất chuyển mức A_{21}. Thông thường $\tau = 10^{-8}s$ và $A_{21} \sim 10^8 \frac{1}{s}$.

7. *Định luật hấp thụ Buger Lamber.* Ta nghiên cứu sự hấp thụ bức xạ điện từ (ánh sáng) khi bức xạ đó lan truyền trong một môi trường vật chất. Chúng ta xét bài toán một chiều, cho một chùm sáng đơn sắc, ví dụ có tần số là ν_{12}, trong một môi trường cấu tạo từ các nguyên tử có hai trạng thái năng lượng



Hình 3.19: *Mô tả phương pháp xác định thời gian sống τ.*



Hình 3.20: *Giải thích định luật hấp thụ.*

E_1 và E_2, sao cho $h\nu_{12} = E_2 - E_1$. Khi chùm sáng đi qua một lớp vật chất có bề dày dx cường độ của nó giảm đi một lượng (xem hình (3.20))

$$-dI = I\alpha dx \tag{3.109}$$

trong đó α gọi là hệ số hấp thụ. Giải phương trình này ta có

$$I(x) = I(0)e^{-\alpha x} \tag{3.110}$$

Biểu thức này được gọi là định luật hấp thụ Buger-Lamber.

Như chúng ta đã xét trên đây, dưới tác dụng của bức xạ điện từ có thể xảy ra hai quá trình chuyển mức mà xác suất phụ thuộc vào mật độ phổ năng lượng. Vì thế chúng ta có thể tìm được mối liên hệ giữa hệ số Einstein và hệ số hấp thụ α. Ta có thể viết sự thay đổi cường độ chùm sáng khi đi qua lớp vật chất có bề dày dx do hai quá trình chuyển mức hấp thụ và phát xạ cưỡng bức gây nên:

$$-dI = [B_{12}N_1\sigma(\nu_{12})h\nu_{12} - B_{21}N_2\sigma(\nu_{12})h\nu_{12}]\,dx \tag{3.111}$$

Thay $B_{21} = \dfrac{g_1}{g_2}B_{12}; \sigma(\nu_{12}) = \dfrac{I}{v} = \dfrac{I \cdot n}{c}$ với n - chiết suất của môi trường, v là

vận tốc lan truyền của bức xạ trong môi trường, ta có

$$-dI = \frac{I \cdot n}{c} B_{12} h\nu_{12} \left[N_1 - \frac{g_1}{g_2} N_2 \right] dx \tag{3.112}$$

So sánh với công thức trong định luật Buger-Lamber ta có

$$\alpha = B_{12} \left[N_1 - \frac{g_1}{g_2} N_2 \right] \frac{h\nu_{12} \cdot n}{c} \tag{3.113}$$

Nếu $g_1 = g_2$ thì

$$\alpha = B_{12}(N_1 - N_2) \frac{h\nu_{12} n}{c} \tag{3.114}$$

8. *Quá trình hấp thụ dương và hấp thụ âm.* Theo công thức của α vừa mới tìm được thì trong điều kiện cân bằng nhiệt động, N_2 bao giờ cũng nhỏ hơn N_1 vì E_2 cao hơn E_1, hệ số α bao giờ cũng là đại lượng dương. Trong trường hợp đó bức xạ sẽ suy giảm dần khi lan truyền trong môi trường vật chất, đó là sự hấp thụ dương. Ngược lại nếu bằng một cách nào đó ta làm cho nồng độ các hạt ở trạng thái E_2 lớn hơn ở trạng thái E_1, nghĩa là $N_2 > N_1$, hệ nằm trong trạng thái không cân bằng, thì ta thấy hệ số hấp thụ nhận giá trị âm, $\alpha < 0$. Điều này có nghĩa là trường bức xạ sẽ được khuếch đại khi lan truyền trong môi trường vật chất có $N_2 > N_1$. Môi trường mà trong đó nồng độ hạt ở trạng thái ứng với năng lượng cao hơn lại lớn hơn nồng độ hạt ở trạng thái ứng với năng lượng thấp hơn được gọi là môi trường nghịch đảo mật độ, môi trường hoạt chất hay môi trường nhiệt độ âm. Đó là vì theo định luật Boltzmann

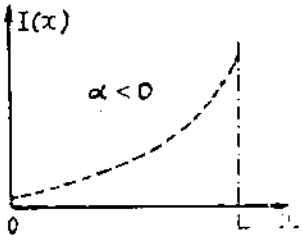
$$\frac{N_2}{N_1} = e^{\frac{E_1 - E_2}{kT}};$$

$E_2 > E_1$, N_2 muốn lớn hơn N_1 thì T phải âm, tất nhiên điều này không thể có vì hệ hạt nằm trong điều kiện không cân bằng, không thể mô tả bằng thống kê Boltzmann. Trong trường hợp $\alpha < 0$ người ta có thể gọi $|\alpha| = g$ là hệ số khuếch đại, như vậy hấp thụ âm chính là quá trình khuếch đại.

3.6.2 Nguyên lý hoạt động của laser. Thuật ngữ laser là khuếch đại ánh sáng bằng phát xạ bức xạ cưỡng bức, (Light Amplification by Stimulated Emission of Radiation).

Khi ánh sáng đi qua môi trường nghịch đảo mật độ cường độ ánh sáng tặng theo hàm mũ vì $\alpha < 0$

$$I(x) = I(0)e^{-\alpha x} = I(0)e^{|\alpha| x}$$



Hình 3.21: *Sự tăng cường độ bức xạ theo chiều dài laser.*

Quá trình khuếch đại này còn được gọi là quá trình hấp thụ âm. $\alpha < 0$ được minh họa ở hình (3.21). Cũng từ đây chúng ta thấy rằng tiền đề cho quá trình khuếch đại là:

- Tạo ra và duy trì môi trường đảo mật độ, quá trình này được gọi là quá trình bơm.

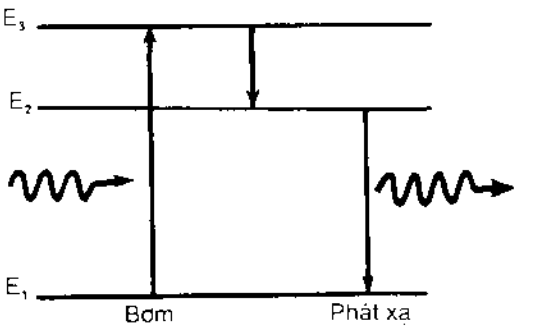
- Tạo ra điều kiện để phát xạ cưỡng bức áp đảo phát xạ tự nhiên. Chúng ta biết rằng: Khi đạt được phân bố đảo số photon do phát xạ tự nhiên cũng tăng lên mạnh. Nhưng phát xạ tự nhiên không phụ thuộc vào mật độ phổ bức xạ, nó trở thành một thứ nhiễu không kết hợp. Trong khi đó phát xạ cưỡng bức tỷ lệ với mật độ phổ bức xạ kích thích. Ta phải làm thế nào để đạt được điều kiện:

$$B_{21}\sigma(\nu) > A_{21}$$

Để tăng $\sigma(\nu)$ ta có thể dùng phương pháp khuếch đại ghép phản hồi dương, đồng thời tập trung năng lượng vào một vài mode sóng với dải tần hẹp. Để thực hiện đồng thời hai điều này người ta dùng buồng cộng hưởng, một trong những buồng cộng hưởng thường dùng là buồng cộng hưởng Fabry - Perot.

1. Quá trình bơm. Dĩ nhiên môi trường nằm trong trạng thái nghịch đảo mật độ là trạng thái không bền và các nguyên tử luôn có xu hướng trở về trạng thái cân bằng. Vì vậy muốn duy trì trạng thái nghịch đảo mật độ phải thường xuyên tiêu tốn một năng lượng để kích thích hệ hạt, quá trình đó gọi là quá trình bơm. Quá trình bơm, kích thích, tùy thuộc vào loại hệ, có thể thực hiện bằng nhiều cách: phương pháp kích thích bằng quang học (gọi là bơm quang học), phương pháp kích thích bằng điện (gọi là bơm điện).

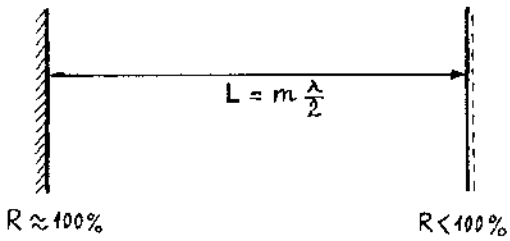
- Bơm quang học:



Hình 3.22: *Sơ đồ ba mức năng lượng*

Bơm quang học ở đây chúng ta hiểu là phương pháp kích thích hệ bằng bức xạ điện từ nói chung, bao gồm: viba, hồng ngoại, ánh sáng, tia tử ngoại.... Đây là phương pháp kích thích được dùng phổ biến.

Trong mô hình hai mức năng lượng chúng ta biết rằng ở trạng thái cân bằng nếu $E_1 < E_2$ thì $N_1 > N_2$. Nếu chúng ta kích thích hệ bằng cách dọi vào hệ ánh sáng có tần số đáp ứng điều kiện $h\nu = E_2 - E_1$, thì N_2 sẽ tăng lên, N_1 giảm xuống và $N_1 + N_2 = N = \text{const}$, N là số nguyên tử của cả hệ. Chúng ta cũng biết rằng nếu chúng ta tăng công suất bơm thì $\Delta N = N_1 - N_2$ sẽ giảm dần. Tuy nhiên tính toán cho thấy rằng ΔN chỉ có thể tiến tới không, nghĩa là $N_2 \to N_1$, chứ không thể đạt được $N_2 > N_1$. Nghĩa là trong hệ hai mức năng lượng, bằng phương pháp bơm quang học ta không thể đạt được môi trường đảo mật độ. Trường hợp $\Delta N = 0, N_1 = N_2$ được gọi là hiệu ứng bảo hòa. Hiệu ứng bảo hòa càng dễ đạt được khi thời gian sống của trạng thái ứng với E_2 càng lớn. Trạng thái của hệ khi $N_1 = N_2$ gọi là trạng thái bảo hòa, trong trạng thái này hệ không hấp thụ và cũng không phát xạ. Mặc dù hiệu ứng bảo hòa không cho phép ta tạo ra môi trường đảo mật độ nhưng nó đóng vai trò quan trọng trong việc tạo ra môi trường đó bằng mô hình ba mức, bốn mức. Giả sử ta có một hệ nguyên tử có ba mức năng lượng như ở hình (3.22) với các thông số sau $E_1, N_1; E_2, N_2, \tau_2; E_3, N_3, \tau_3$, trong đó $E_1 < E_2 < E_3$ là năng lượng tương ứng của ba mức; $N_1 + N_2 + N_3 = N$, N_1, N_2, N_3 là nồng độ nguyên tử ở 3 trạng thái E_1, E_2, và E_3; N là nồng độ toàn phần. τ_2 và τ_3 là thời gian sống của trạng thái E_2 và E_3 (tương ứng). Nếu trong một hệ ba mức với $\tau_3 < \tau_2$ chúng ta không thể dùng bơm quang học có bước sóng $h\nu = E_3 - E_1$ để đạt được



Hình 3.23: *Nguyên lý buồng cộng hưởng Fabry-Perot.*

trạng thái bão hòa $N_1 = N_3$ vì chuyển mức tự phát $E_3 \to E_2$ lớn. Tuy nhiên có thể bằng cách này làm tăng nồng độ N_2 và nhờ đó mà thiết lập được sự đảo mật độ giữa hai mức E_2 và E_1 để thu được phát xạ cưỡng bức $h\nu = E_2 - E_1$ chúng ta sẽ thấy phương pháp bơm này trong lase hồng ngọc.

- Bơm điện: Trong trường hợp laser, khí để gây nên một trạng thái kích thích của hệ nguyên tử người ta dùng hiện tượng phóng điện. Chính điện tử trong plasma phóng điện sẽ kích thích các nguyên tử từ trạng thái cơ bản lên trạng thái kích thích, khi nguyên tử trở về trạng thái thấp hơn sẽ phát xạ ra photon. Bơm điện cũng được dùng trong laser bán dẫn bằng cách đặt điện áp vào mẫu để phun hạt dẫn vào mẫu tạo ra môi trường đảo mật độ.

2. *Buồng cộng hưởng Fabry-Perot.* Thông thường các môi trường hoạt chất có hệ số hấp thụ âm α nhỏ (ví dụ hồng ngọc thường có $\alpha = 10^{-2}\text{cm}^{-1}$. Vì vậy để có được hệ số khuếch đại cao ví dụ 100 lần, chiều dài của môi trường hoạt chất phải lớn (ví dụ 5m).

Để giải quyết khó khăn này, người ta không tăng chiều dài của hoạt chất, mà tăng độ dài hiệu dụng của nó bằng cách đặt hoạt chất trong một hệ gọi là buồng cộng hưởng quang học. Buồng cộng hưởng quang học Fabry-Perot là hệ hai gương phẳng đặt song song như ở hình (3.23) trong đó một gương phản xạ toàn phần một gương bán phản xạ. Trong buồng cộng hưởng chùm sáng đồng bộ sau nhiều lần phản xạ được khuếch đại lên và được truyền ra ngoài một phần qua gương bán phản xạ. Buồng cộng hưởng đóng vai trò một thiết bị có phản hồi dương. Điều kiện cộng hưởng trong buồng cộng hưởng Fabry-Perot là: $L = m\frac{\lambda}{2}$. Trong đó L là khoảng cách giữa hai gương, λ bước sóng ánh sáng, m- số nguyên $1, 2, 3, \cdots$. Điều kiện cộng hưởng này nhận được khi hệ số phản xạ là 100%, kích thích gương là vô cực

Như vậy điều kiện cộng hưởng trong buồng cộng hưởng Fabry-Perot cho phép tồn tại nhiều sóng ánh sáng có bước sóng $\lambda = \frac{2L}{m}$. Khoảng cách về tần số giữa các sóng này có thể tính được từ điều kiện cộng hưởng

$$L = m\frac{\lambda}{2}; \lambda = \frac{c}{\nu} \rightarrow L = m\frac{C}{2\nu}$$

Tần số cộng hưởng là

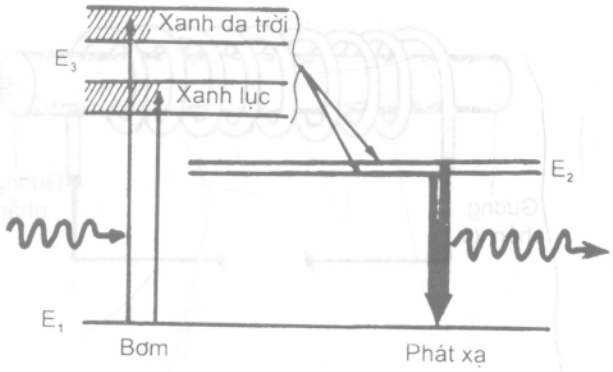
$$\nu = \frac{C}{2L} \cdot m \quad \text{và} \quad \Delta\nu = \frac{C}{2L}(m+1) - \frac{C}{2L}m$$

$$\Delta\nu_B = \frac{C}{2L}; \quad \left(\text{ứng với} \quad \Delta\lambda = 2L(\frac{1}{m} - \frac{1}{m+1}) = \frac{2L}{(m+1)m}\right)$$

Trong thực tế, các điều kiện lý tưởng của buồng cộng hưởng Fabry-Perot khó được thực hiện, nên hệ sẽ cộng hưởng không phải chỉ với ánh sáng đơn sắc mà là ánh sáng có một độ rộng phổ nhất định. Trong thực tế hai gương không cùng có một hệ số phản xạ cao (> 90%). Trong laser phát liên tục có một gương phản xạ lớn hơn 90% một gương có hệ số phản xạ thấp hơn nhiều. Trong laser xung thì gương thứ hai còn có một hệ đóng mở có thể thay đổi hệ số phản xạ từ 90% xuống rất thấp một cách đột ngột (nhờ hiệu ứng Kerr) bằng cách đó có thể tạo được những xung sáng công suất lớn và có bề rộng phổ hẹp.

Chúng ta cũng cần lưu ý rằng bức xạ cưỡng bức cũng không phải hoàn toàn đơn sắc mà nó có một độ rộng phổ khá lớn. Độ rộng của vạch phổ này là do nhiều nguyên nhân, ví dụ do độ nhòe của các mức năng lượng kích thích mà có thể suy ra được từ nguyên lý bất định $\Delta E \geq \frac{\hbar}{\tau}, \tau$ là thời gian sống. Nguyên nhân thứ hai là do chuyển động nhiệt của nguyên tử khi phát xạ gây nên hiệu ứng Doppler. Bề rộng của vạch phổ bức xạ cưỡng bức là khá lớn so với $\Delta\nu_B$ vì vậy trong phổ phát xạ của laser có thể có một số mode sóng bên cạnh một mode cực đại.

Chúng ta biết khi hệ số hấp thụ $\alpha < 0$ ta có thể đạt được trạng thái hấp thụ âm, nghĩa là ánh sáng được khuếch đại khi lan truyền trong môi trường hoạt chất. Tuy nhiên do tổn hao, do hệ số phản xạ của gương nhỏ hơn 100%; laser chỉ làm việc khi đạt được một điều kiện ngưỡng nhất định. Điều kiện ấy có thể suy ra từ lập luận sau đây: Giả sử bức xạ xuất phát từ điểm gốc) với cường độ $I(0)$ lan truyền đến và phản xạ trên gương II, rồi lại lan truyền đến và phản xạ trên gương I để trở lại điểm 0 có cường độ $I(2L) \geq I(0)$. Muốn đạt được điều kiện này thì α phải đủ lớn nghĩa là công suất kích thích phải vượt quá một giá trị ngưỡng nhất định.



Hình 3.24: *Phổ năng lượng của ion Cr^{3+} trong hồng ngọc.*

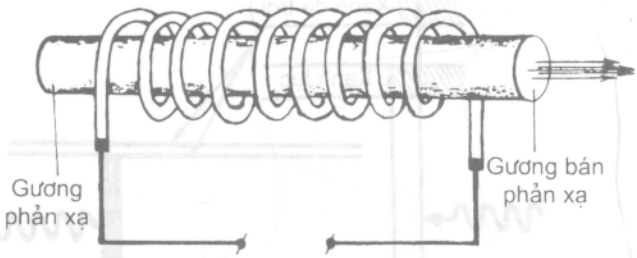
3. *Laser hồng ngọc*. Trong nhiều trường hợp, sử dụng phương pháp bơm quang học để tạo và duy trì môi trường đảo như trong laser hồng ngọc, người ta có thể dùng sơ đồ năng lượng ba mức E_1, E_2, E_3. Trong đó E_1 là mức cơ bản E_3 là mức năng lượng kích thích cao nhưng có thời gian sống ngắn, E_2 là mức năng lượng kích thích thấp hơn E_3 nhưng có thời gian sống dài hơn mức E_3 và xác suất chuyển mức tự phát từ E_3 xuống E_2 là rất lớn. Hồng ngọc là tinh thể $Al_2O_3 + 0,065\%Cr_2O_3$, màu sắc của hồng ngọc là do các ion Cr^{3+} gây nên.

Các ion Cr^{3+} trong tinh thể hồng ngọc Al_2O_3 có sơ đồ năng lượng ba mức như ở hình (3.24) thích hợp cho phương pháp bơm quang học.

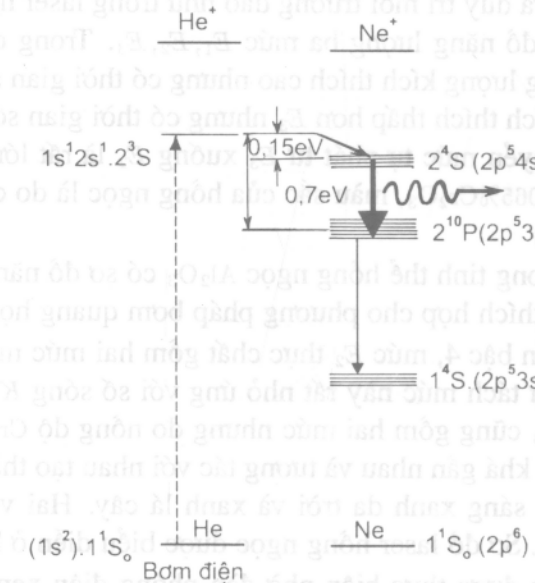
Mức E_1 suy biến bậc 4, mức E_2 thực chất gồm hai mức mỗi mức suy biến bậc 2, tuy nhiên sự tách mức này rất nhỏ ứng với số sóng $K = 14430\text{cm}^{-1}$ và 14400cm^{-1}. Mức E_3 cũng gồm hai mức nhưng do nồng độ Cr_2O_3 khá lớn nên các nguyên tử Cr ở khá gần nhau và tương tác với nhau tạo thành hai dải năng lượng ứng với ánh sáng xanh da trời và xanh lá cây. Hai vùng này có thời gian sống rất ngắn. Sơ đồ laser hồng ngọc được biểu diễn ở hình (3.25).

Bơm quang học được thực hiện nhờ đèn phóng điện xenon. Do hấp thụ các photon của ánh sáng từ đèn xenon, các ion Cr^{3+} từ mức E_1 chuyển lên mức năng lượng E_3, vì thời gian sống ở E_3 ngắn chúng nhanh chóng chuyển xuống E_2 và gây nên trạng thái nghịch đảo mật độ giữa E_1 và E_2, nghĩa là ta có $N_2 > N_1$.

Buồng cộng hưởng Fabry-Perot thực hiện nhờ hai gương phẳng bố trí ở



Hình 3.25: *Sơ đồ laser hồng ngọc.*



Hình 3.26: *Phổ năng lượng của He và Ne.*

ngoài hay được tạo nên ở hai đáy của thanh hồng ngọc có chiều dài khoảng 7,6cm (như ở hình (3.25)).

4. Laser He-Ne. Trong các laser khí nói chung quá trình bơm được thực hiện bằng phương pháp điện nhờ hiện tượng phóng điện trong chất khí. Trong laser He-Ne hiện tượng phóng điện thường được duy trì bằng trường cao tần trong môi trường hỗn hợp khí He-Ne ở áp suất 1Tor He và 0,1Tor Ne, phổ năng lượng của các nguyên tử He và Ne được biểu diễn ở hình (3.26). Cấu hình điện tử của He là $He(1s^2)$ và của Ne là $Ne(1s^2 2s^2 2p^6)$.

Laser He-Ne là bức xạ nhận được do các chuyển mức giữa 2^4S suy biến bậc 4 và $2^{10}P$ suy biến bậc 10 của nguyên tử neon, mức 2^4S là $(2p^5 4s^1)$, mức $2^{10}P$ là $(2p^5 3p^1)$. Trạng thái nghịch đảo mật độ giữa 2^4S và $2^{10}P$ của neon được thực hiện nhờ hai hiện tượng:

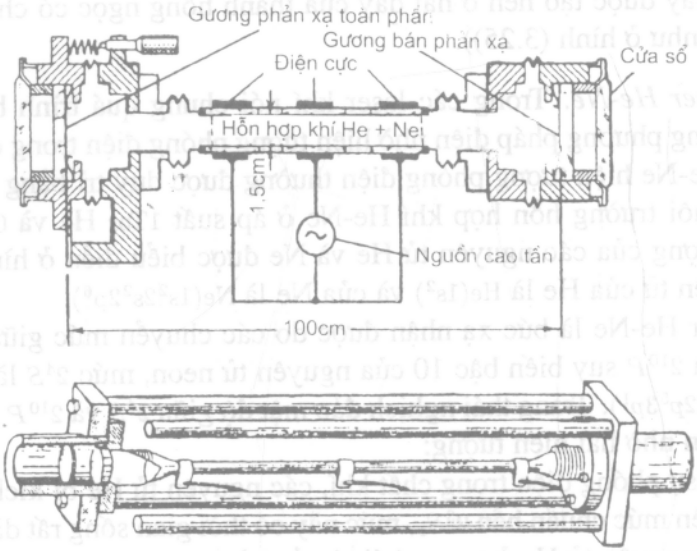
- Do sự phóng điện trong chất khí, các nguyên tử He bị kích thích từ mức cơ bản lên mức chuẩn bền 2^3S_1, mức này có thời gian sống rất dài ($\tau = 6 \cdot 10^5 s$). Khi các nguyên tử He ở trạng thái chuẩn bền va chạm với các nguyên tử Ne thì năng lượng kích thích của nguyên tử He được chuyền cho nguyên tử Ne và kích thích nguyên tử Ne từ trạng thái cơ bản lên trạng thái 2^4S có năng lượng gần với năng lượng chuẩn bền của He. Một năng lượng dư rất nhỏ biến thành động năng của các nguyên tử. Nguyên tử He trở lại trạng thái cơ bản, nguyên tử Ne chuyển lên trạng thái kích thích 2^4S. Sở dĩ nguyên tử Ne không bị kích thích lên trạng thái $2^{10}P$ vì như vậy năng lượng dư quá lớn do sự sai khác lớn giữa hai mức năng lượng: $2^{10}P$ của Ne và mức chuẩn bền của He. 2^3S_1.

- Hiện tượng thứ hai góp phần vào việc hình thành trạng thái nghịch đảo mật độ giữa hai mức 2^4S và mức $2^{10}P$ của nguyên tử Ne là trạng thái $2^{10}P$ có thời gian sống rất nhỏ nên số nguyên tử ở trong trạng thái $2^{10}P$ giảm rất nhanh. Nhờ hai hiện tượng trên mà hình thành trạng thái nghịch đảo mật độ giữa 2^4S và $2^{10}P$ của Ne và xảy ra hiệu ứng laser với bức xạ ứng với chuyển mức cưỡng bức giữa 2^4S xuống $2^{10}P$ của Ne.

Laser He-Ne có thể có chiều dài 1m, hai đầu ống là hai gương: phản xạ toàn phần và bán phản xạ đóng vai trò buồng cộng hưởng Fabry-Perot, như ở hình (3.27).

5. Tính chất đặc trưng của tia laser

a- Tính đơn sắc: Phổ của bức xạ laser có thể gồm một số vạch rất thanh. Độ rộng của các vạch này phụ thuộc độ phẩm chất của buồng cộng hưởng.



Hình 3.27: *Mô hình laser khí He – Ne*

Đối với laser hồng ngọc (bề rộng đó chỉ cỡ 10^6Hz, trong khi đó khoảng cách giữa hai vạch là 10^9Hz).

b- Tính đồng bộ (kết hợp). Tính đồng bộ được đánh giá bởi tính giao thoa. Hai tia tách ra từ một nguồn laser vẫn có thể giao thoa với nhau khi quang lộ có thể tới vài km.

c- Tính định hướng của chùm tia. Góc mở của chùm laser θ phát ra từ mặt gương có đường kính D và bước sóng của chùm tia laser là λ, sẽ là $\theta \cong 1,22\frac{\lambda}{D}$ với laser hồng ngọc $D = 1\text{cm}, \theta \simeq 3'26''$.

d- Công suất phổ năng lượng cao. Vì ánh sáng laser có độ đơn sắc cao nên toàn bộ công suất của bức xạ tập trung vào một dải tần rất hẹp. Ví dụ, laser liên tục phát một năng thông 100W/cm^2, trong dải tần đó năng thông mặt trời chỉ $(10 \div 2)\text{W/km}^2$, nhỏ hơn 10^{14} lần. Những laser rắn thường không có công suất lớn bằng laser khí. Laser khí CO_2 liên tục có thể đạt hàng trăm kW. Laser khí CO_2 ở chế độ xung có thể đạt 100GW, bằng công suất điện của một nước phát triển.

Bài tập chương III

(3-1) Tính bước sóng ngắn nhất và bước sóng dài nhất (bằng Å) đối với dãy Liman của hyđro.

(3-2) Tính năng lượng ion hoá của nguyên tử hyđro biết rằng bước sóng ngắn nhất của dãy Balmerr là 3650Å.

(3-3) Trong một ống phóng điện các nguyên tử hyđro chịu tác dụng của một dòng điện tử năng lượng 12,2 eV. Tìm bước sóng của các vạch do hyđro phát ra.

(3-4) Tính mômen từ của một điện tử chuyển động xung quanh một proton trên một quỹ đạo tròn bán kính r (theo vật lý cổ điển.)

(3-5) Áp dụng kết quả của cơ học lượng tử tính các giá trị có thể có của mômen từ đối với mức $n = 3$. Biết công thức liên hệ giữa mômen động lượng và mômen từ:

$$\vec{\mu}_l = -\frac{e}{2m}\vec{M}_l$$

$\vec{\mu}_l$ - vectơ mômen từ quỹ đạo.

(3-6) Biểu diễn các cách định hướng có thể có của mômen động lượng $\vec{M}_l$ với $l = 0, 1, 2$ và 3; bằng hình vẽ.

(3-7) Trong vật lý thiên văn người ta dùng vạch phổ có bước sóng 21cm để thăm dò vũ trụ. Vạch này được tạo bởi photon phát ra từ nguyên tử hyđro của thiên hà khi hướng của spin của điện tử chuyển từ trạng thái song song sang trạng thái phản song song với spin của proton. Tìm giá trị từ trường tác dung lên điện tử. Biết rằng công thức liên hệ giữa mômen động lượng spin và mômen từ spin là

$$\vec{\mu}_s = -\frac{e}{m}\vec{M}_s$$

Năng lượng tương tác giữa mômen từ $\vec{\mu}$ và từ trường có vectơ cảm ứng từ $\vec{B}$ là

$$E_B = -\vec{\mu}\vec{B}$$

(3-8) Chứng minh rằng các nguyên tử gồm các lớp điền đầy hoàn toàn sẽ có một trạng thái cơ bản $^1S_0$.

(3-9) Thiết lập cấu hình (cấu trúc) điện tử của 5 khí trơ đầu tiên.

Đáp số

(3-1) $\lambda_{max} = 1215Å, \lambda_{min} = 912Å$;

(3-2) $E_i = 13,6eV$;

(3-3) có 3 loại photon với $\lambda_1 = 6563Å, \lambda_2 = 1215Å, \lambda_3 = 1026Å$;

(3-4) $\mu = \frac{e^2}{2}\sqrt{\frac{kr}{m}}$ với $k = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}$;
(3-5) $2,27 \cdot 10^{-23}$J/T; $1,31 \cdots 10^{-23}$J/T; 0
(3-7) $B = 0,051$T.

Chương 4

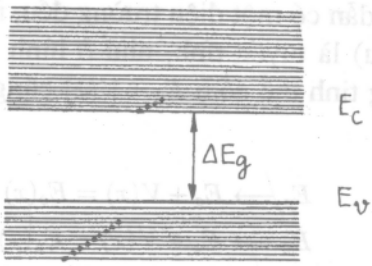
MỘT SỐ VẤN ĐỀ VẬT LÝ BÁN DẪN

Vật liệu bán dẫn là vật liệu chính để chế tạo các linh kiện điện tử, linh kiện quang điện tử. Vì vậy ở đây chúng ta xem xét một số tính chất cơ bản của chúng.

4.1 Điện tử trong tinh thể bán dẫn

Trong chương trước chúng ta mới xét tinh thể chất rắn nói chung. Trong chương này ta xét những tính chất của bán dẫn, chúng ta bắt đầu vấn đề này từ ảnh hưởng của điện trường đến điện tử trong chất bán dẫn.

4.1.1 Sự thay đổi mức năng lượng trong điện trường ngoài. . Chúng ta thấy rằng khi không có điện trường bên ngoài các mức năng lượng trong chất bán dẫn không phụ thuộc vào toạ độ (trong không gian thường) và ta thường biểu diễn nó bằng những đường nằm ngang như ở hình (4.1), trong đó hai



Hình 4.1: *Các mức năng lượng khi không có tác dụng của điện trường.*

mức quan trọng nhất được đặt tên và ký hiệu riêng. Đó là đáy vùng dẫn E_c và đỉnh vùng hoá trị E_v. Năng lượng giữa hai mức đó là bị cấm. Đại lượng $\Delta E_g = E_c - E_v$ gọi là bề rộng vùng cấm, thường tính bằng eV. Các mức năng lượng khác cũng nằm ngang khi không có trường ngoài. Trong vùng dẫn mức E_c được coi là thế năng của điện tử, cũng như thế, trong vùng hoá trị E_v là thế năng của lỗ trống. Điện tử nằm ở mức E_c được coi là có động năng bằng không, khi ở mức cao hơn E_c thì phần $E - E_c$ là động năng của điện tử.

Bây giờ chúng ta xét sự thay đổi của các mức năng lượng khi có điện trường ngoài $\vec{\mathcal{E}}$ tác dụng. Bài toán này đáng lẽ phải được giải bằng cơ học lượng tử nhưng ở đây ta sẽ xem xét nó bằng cơ học cổ điển, theo đó ta có:

$$\frac{d\vec{P}}{dt} = \vec{F}_a = -\nabla V;$$

ở đây $V(\vec{r})$ là thế năng của điện tử trong trường ngoài. Nhân hai vế phương trình này với $\vec{v} = \dfrac{d\vec{r}}{dt}$ ta có

$$\vec{v}\frac{d\vec{P}}{dt} = \frac{\vec{P}}{m}\frac{d\vec{P}}{dt} = \frac{d}{dt}\left(\frac{p^2}{2m}\right) = \frac{d}{dt}E_0(\vec{P}) = -\frac{dV}{d\vec{r}}\frac{d\vec{r}}{dt} = -\frac{dV}{dt}.$$

Từ đây ta có $\dfrac{d(E_0 + V)}{dt} = 0$,

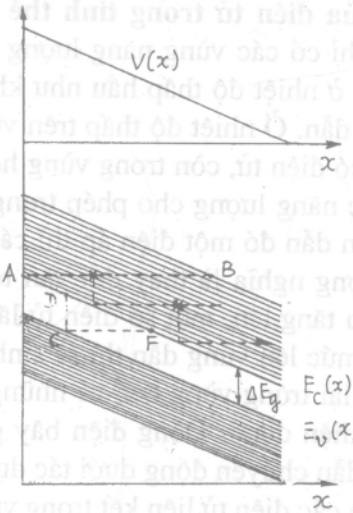
$$E_0(\vec{P}) + V(\vec{r}) = H((\vec{p}, \vec{r}) = \text{const} \tag{4.1}$$

Phương trình (4.1) nói lên rằng chuyển động của điện tử ở trong trường ngoài bao giờ cũng xảy ra sao cho năng lượng toàn phần, gồm năng lượng của điện tử trong tinh thể và thế năng của điện tử trong điện trường ngoài, là một hằng số.

Nếu trong mẫu bán dẫn có một điện trường đều, nghĩa là $V(x)$ (xét trường hợp bài toàn một chiều) là tuyến tính, như ở hình (4.2), thì các mức năng lượng của điện tử trong tinh thể gồm $E_0 + V(x)$ cũng thay đổi tuyến tính. Ví dụ

$$E_c \longrightarrow E_c + V(x) = E_c(x)$$
$$E_v \longrightarrow E_v + V(x) = E_v(x).$$

Điều đó có nghĩa là các mức năng lượng của điện tử dưới tác dụng của trường ngoài sẽ thay đổi theo dáng điệu của thế năng điện tử trong trường đó.



Hình 4.2: *Sự phụ thuộc vào tọa độ của các mức năng lượng*

Tuy nhiên điều kiện (4.1) đòi hỏi $H = E_0 + V = \text{const}$. Nghĩa là một điện tử có toạ độ tại điểm A chỉ có thể dao động trong khoảng AB nếu mẫu là tinh thể lý tưởng.

Nhưng vì mẫu tinh thể không bao giờ là mẫu lý tưởng nên điện tử luôn va chạm với các ion, tạp chất, khuyết tật. Mỗi lần va chạm điện tử lại mất năng lượng (động năng), rồi lại lấy năng lượng của điện trường, lại va chạm cứ thế điện tử dịch chuyển được dọc theo điện trường trong tinh thể (xem hình (4.2)). Trên sơ đồ hình (4.2) ta có thể giải thích hiệu ứng đường ngầm thường có thể xảy ra trong bán dẫn khi điện trường trong mẫu đạt cỡ 10^6V/cm. Ví dụ chúng ta có một điện tử trong vùng hoá trị tại điểm C, vì các mức năng lượng phía trên là cấm, nếu muốn rơi vào vùng dẫn điện tử phải nhận một năng lượng bằng ít nhất là ΔE_g. Tuy nhiên bằng cơ chế hiệu ứng đường ngầm điện tử có thể rơi vào điểm F. Ở đây ta có hàng rào thế hình tam giác với chiều cao hàng rào là ΔE_g, bề dày hàng rào là CF. Trên thực tế hiệu ứng đường ngầm có thể xảy ra trong chất bán dẫn, nhưng thường gặp trong các lớp chuyển tiếp $P-N$, nơi nồng độ hạt dẫn nhỏ và có thể chịu được một điện trường cao như 10^6V/cm.

4.1.2 Chuyển động của điện tử trong tinh thể bán dẫn. Như ta đã nói trên đây, các chất rắn chỉ có các vùng năng lượng điền đầy hoàn toàn hoặc trống hoàn toàn, thì khi ở nhiệt độ thấp hầu như không dẫn điện. Đó là các chất điện môi hoặc bán dẫn. Ở nhiệt độ thấp trên vùng dẫn (vùng trống thấp nhất) hoàn toàn không có điện tử, còn trong vùng hoá trị (vùng điền đầy trên cùng) thì tất cả các mức năng lượng cho phép trong vùng đều điền đầy điện tử. Nếu đặt vào mẫu bán dẫn đó một điện áp thì các điện tử cũng không thể lấy thêm được năng lượng nghĩa là thay đổi vận tốc và tham gia dẫn điện. Nhưng khi nhiệt độ mẫu tăng lên, một số điện tử lấy được đủ năng lượng để từ vùng hoá trị chuyển mức lên vùng dẫn thì sẽ sinh ra các điện tử tự do trên vùng dẫn, đồng thời để lại trong vùng hoá trị những trạng thái trống và chất bán dẫn đã có thể dẫn điện được. Dòng điện bây giờ là do các điện tử gần như tự do ở trong vùng dẫn chuyển động dưới tác dụng của điện trường, đồng thời do chuyển động của các điện tử liên kết trong vùng hoá trị sang các trạng thái trống, làm cho các trạng thái trống này chuyển dịch theo chiều của điện trường.

Từ đây chúng ta thấy rằng đối với chất bán dẫn thì hành vi của điện tử ở lân cận cực tiểu vùng dẫn và cực đại vùng hoá trị là quan trọng hơn cả.

1. Sự phụ thuộc năng lượng vào vectơ sóng $\vec{K}$ tại đáy vùng dẫn và đỉnh vùng hoá trị. Xét $E(\vec{K})$ tại lân cận đáy vùng dẫn. Giả sử năng lượng trong vùng dẫn có cực tiểu tại giá trị vectơ sóng $\vec{K}_0$. Chúng ta phân tích $E(\vec{K})$ vào chuỗi Taylor tại điểm $\vec{K}_0$, ta có

$$E(\vec{K}) = E(\vec{K}_0) + \frac{1}{2}\sum_{ij}\frac{\partial^2 E}{\partial K_i \partial K_j}(K_i - K_{0i})(K_j - K_{0j}) + \cdots \tag{4.2}$$

Chúng ta giới hạn chuỗi này đến số hạng bậc hai, và gần đúng như thế được gọi là gần đúng parabol. Chúng ta ký hiệu đại lượng

$$\frac{1}{\hbar^2}\frac{\partial^2 K}{\partial K_i \partial K_j} = \frac{\partial^2 E}{\partial p_i \partial p_j} = \frac{1}{m_{ij}} \tag{4.3}$$

và viết lại (4.2):

$$E(\vec{K}) = E(\vec{K}_o) + \frac{\hbar^2}{2}\sum_{ij}\frac{1}{m_{ij}}(K_i - K_{0i})(K_j - K_{0j}) + \cdots \tag{4.4}$$

Đại lượng m_{ij}^{-1} có thứ nguyên là nghịch đảo khối lượng và là thành phần

của một tenxơ bậc hai

$$[m_{ij}^{-1}] = \begin{vmatrix} m_{xx}^{-1} & m_{xy}^{-1} & m_{xz}^{-1} \\ m_{yx}^{-1} & m_{yy}^{-1} & m_{yz}^{-1} \\ m_{zx}^{-1} & m_{zy}^{-1} & m_{zz}^{-1} \end{vmatrix}$$

nên được gọi là thành phần ij của tenxơ nghịch đảo khối lượng hiệu dụng.

Tenxơ này có đối xứng chéo góc, nghĩa là

$$m_{ij}^{-1} = \frac{1}{\hbar^2}\frac{\partial^2 K}{\partial K_i \partial K_j} = \frac{1}{\hbar^2}\frac{\partial^2 K}{\partial K_j \partial K_j} = m_{ji}^{-1}$$

và có thể được đưa về dạng đường chéo:

$$[m_{ij}^{-1}] = \begin{vmatrix} m_{xx}^{-1} & 0 & 0 \\ 0 & m_{yy}^{-1} & 0 \\ 0 & 0 & m_{zz}^{-1} \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} m_1^{-1} & 0 & 0 \\ 0 & m_2^{-1} & 0 \\ 0 & 0 & m_3^{-1} \end{vmatrix} \tag{4.5}$$

Khi đó ta có

$$E(\vec{K}) = E(\vec{K}_0) + \frac{\hbar^2(K_x - K_{0x})^2}{2m_1} + \frac{\hbar^2(K_y - K_{0y})^2}{2m_2} + \frac{\hbar^2(K_z - K_{0z})^2}{2m_3} \tag{4.6}$$

Nếu đặt $a_i^2 = \dfrac{2m_i}{\hbar^2}[E - E(\vec{K}_0)]$; $E = \text{const}$, ta có thể viết (4.6) dưới dạng

$$\frac{(K_x - K_{0x})^2}{a_1^2} + \frac{(K_y - K_{0y})^2}{a_2^2} + \frac{(K_z - K_{0z})^2}{a_3^2} = 1 \tag{4.7}$$

Đây là phương trình chính tắc của một mặt ellip trong không gian $\vec{K}$, mà tất cả các điểm trên mặt đó có cùng năng lượng E. Vì thế mặt ellip này gọi là mặt đẳng năng.

Khi năng lượng chỉ phụ thuộc vào giá trị tuyệt đối của K, không phụ thuộc vào hướng của nó, ta có thể viết

$$E(K) = E(K_0) + \frac{1}{2}\frac{\partial^2 E}{\partial K^2}(K - K_0)^2$$

Nếu $K_0 = 0$ thì $E(K) = \dfrac{1}{2}\dfrac{\partial^2 E}{\partial K^2} \cdot K^2$. Khi đó $m_1 = m_2 = m_3 = m^*$ ta có

$$E(\vec{K}) = +\frac{\hbar^2 K^2}{2m^*} \tag{4.8}$$

Mặt đẳng năng có dạng một mặt cầu, m^* khối lượng hiệu dụng là một đại lượng vô hướng và bằng

$$m^* = \frac{\hbar^2}{\frac{\partial^2 E}{\partial K^2}} \tag{4.9}$$

Trong trường hợp tổng quát, với gần đúng parabol mặt đẳng năng trong không gian $\vec{K}$ là một mặt ellip, khối lượng hiệu dụng là một đại lượng tenxơ bậc hai với ba thành phần đường chéo là m_1, m_2, m_3. Khi mặt đẳng năng là mặt cầu, khối lượng hiệu dụng là đại lượng vô hướng. Lân cận điểm cực tiểu năng lượng ta có $m^* > 0$, ngược lại lân cận cực đại năng lượng ta có $m^* < 0$.

2. *Chuyển động của điện tử trong tinh thể dưới tác dụng của trường ngoài. Khái niệm lỗ trống.* a/ Chúng ta xét hành vi của điện tử lân cận điểm cực tiểu năng lượng dưới tác dụng của điện trường $\vec{\mathcal{E}}$.

Theo định luật Newton $\vec{F} = m^*\vec{a}$ trong điện trường ta có $\vec{F} = -e\vec{\mathcal{E}}$ và gia tốc của điện tử ngược chiều điện trường, $\vec{a} = -\dfrac{e\vec{\mathcal{E}}}{m^*}$.

Kết luận: lân cận cực tiểu năng lượng (trong không gian $\vec{K}$) điện tử xử sự như một hạt có khối lượng dương m^* và có điện tích âm $-e$.

b/ Bây giờ xét hành vi của điện tử gần cực đại năng lượng dưới tác dụng của điện trường $\vec{\mathcal{E}}$.

Theo định luật Newton, $\vec{F} = m^*\vec{a} = -e\vec{\mathcal{E}}$ và gia tốc của điện tử $\vec{a} = -\dfrac{e\vec{\mathcal{E}}}{m^*}$. Nhưng tại lân cận cực đại năng lượng ta có

$$m^* = \frac{\hbar^2}{\partial^2 E/\partial K^2} < 0$$

ta có thể viết lại biểu thức của $\vec{a}$

$$\vec{a} = \frac{-e\vec{\mathcal{E}}}{-|m^*|} = \frac{+e\vec{\mathcal{E}}}{|m^*|}$$

Kết luận: lân cận cực đại năng lượng (trong không gian $\vec{K}$) điện tử xử sự như một hạt có khối lượng dương bằng $-m*$ (tại cực đại) và có điện tích dương.

Vậy chuyển động của điện tử liên kết tại lân cận điểm cực đại năng lượng có thể thay thế bằng chuyển động của một hạt mang điện tích dương, $+e$, có khối lượng $|m^*|$ hạt đó được gọi là lỗ trống.

Cần chú ý rằng khái niệm lỗ trống ta đưa ra ở đây không đồng nhất với khái niệm trạng thái điện tử bỏ trống. Các đại lượng đặc trưng cho lỗ trống

thường được thêm chỉ số p vào dưới. Trong khi đó các đại lượng đặc trưng cho điện tử hay trạng thái điện tử thì có chỉ số n hoặc không có chỉ số. Dưới đây ta ghi thêm một số đặc trưng của lỗ trống:

$$\begin{array}{lll} e_p = +e & \vec{P}_p = -\vec{P} & \vec{K}_p = -\vec{K} \\ m_p^* = -m^* = -m_n^* & \vec{v}_p = \vec{v} & E_p(\vec{K}_p) = -E(-\vec{K}). \end{array} \tag{4.10}$$

4.2 Cấu trúc vùng năng lượng của chất bán dẫn

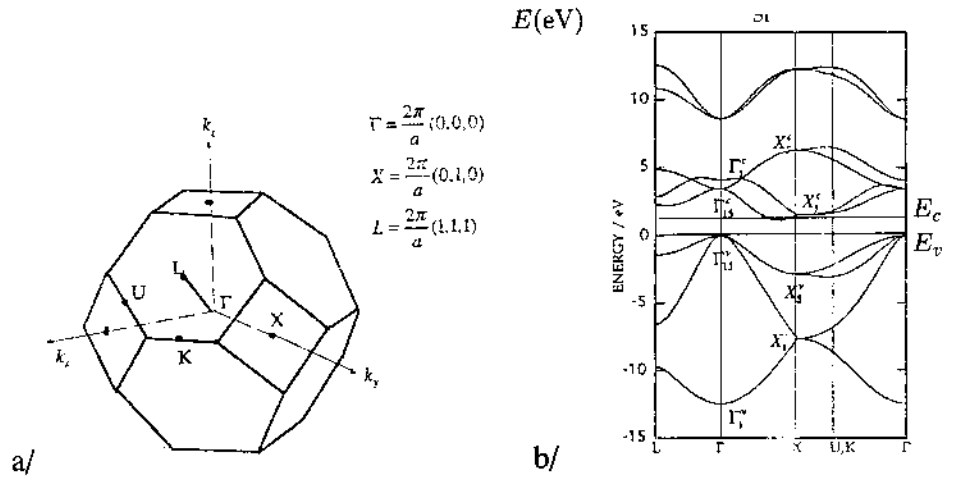
Như đã nói trên đây, đặc điểm chính của cấu trúc vùng năng lượng của chất bán dẫn là chúng chỉ có hai loại vùng năng lượng, ở nhiệt độ thấp, là trống hoàn toàn và điền đầy hoàn toàn. Chúng ta xét bán dẫn silic, vật liệu bán dẫn thông dụng và quan trọng nhất, làm ví dụ.

Cấu trúc vùng năng lượng chính là sự phụ thuộc năng lượng E vào vectơ sóng $\vec{K}$, sự phụ thuộc đó còn được gọi là phổ năng lượng, hay là quy luật tán sắc. Đấy chính là đặc trưng quan trọng nhất, xác định nó bằng lý thuyết kết hợp với thực nghiệm là nội dung quan trọng nhất của vật lý chất rắn.

Như chúng ta đã nhận xét $E(K)$ là một hàm tuần hoàn chẵn trong không gian $\vec{K}$. Đặc biệt là người ta có thể xác định trong không gian $\vec{K}$ một vùng có dạng một khối đa diện (tuỳ thuộc vào loại tinh thể), mà trong đó "chứa" tất cả những giá trị $\vec{K}(K_x, K_y, K_z)$ đặc trưng cho tất cả các trạng thái cho phép của điện tử. Vùng đó được gọi là vùng Brillouin thứ nhất. Cũng có thể xác định các vùng Brillouin bậc cao hơn có cùng thể tích nhưng có hình dạng khác hẳn bao phía ngoài vùng Brillouin thứ nhất. Khái niệm vùng Brillouin là một khái niệm thuần tuý toán học nhưng rất tiện dụng trong vật lý chất rắn.

Đối với silic, có cấu trúc mạng là lập phương tâm mặt. Vùng Brioullin thứ nhất tương ứng là một hình khối được giới hạn bởi 14 mặt: 6 mặt vuông và 8 mặt lục giác như ở hình (4.3a). Tâm của vùng Brillouin nằm tại điểm $\vec{K} = (0, 0, 0)$. Tâm này được ký hiệu bằng chữ Γ. Tâm của mặt hình vuông được ký hiệu bằng chữ X và nằm trên hướng [100] hay các hướng đối xứng tương đương. Tâm của mặt lục giác được ký hiệu bằng chữ L và nằm trên hướng [111] hoặc tương đương. Chúng ta thấy rằng Si cũng như Ge có cấu trúc điện tử trong đó lớp ngoài cùng không đầy: ns^2np^2. Ví dụ đối với Si $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^2$.

Theo cách suy nghĩ đơn giản thì hai trạng thái $3s$ và $3p$ của Si khi vào tinh thể tách thành hai vùng: vùng $3s$ chứa được $2N$ điện tử (điền đầy hoàn toàn) vùng $3p$ chứa được $6N$ điện tử (điền đầy một phần ba vì chỉ có $2N$ điện tử),



Hình 4.3: *Vùng Brillouin thứ I của mạng lập phương tâm mặt, b-Cấu trúc vùng năng lượng của silic.*

nên ta có thể cho rằng silic là một kim loại có chứa một vùng điền đầy một phần.

Trên thực tế Si là một chất bán dẫn điển hình. Đó là vì sự lai hoá giữa hai trạng thái $3s$ và $3p$ tạo nên hai vùng, vùng thấp chứa được $4N$ điện tử điền đầy hoàn toàn trở thành vùng hoá trị, vùng cao hơn cũng chứa được $4N$ điện tử nhưng trống hoàn toàn trở thành vùng dẫn. Chính vì vậy cả vùng dẫn lẫn vùng hoá trị đều có sự suy biến, trong mỗi vùng đều có sự chồng chéo của một số phân vùng.

Sơ đồ vùng năng lượng trên hai phương [111] và [100] được biểu diễn trên hình (4.3b). Từ sơ đồ vùng năng lượng người ta rút ra một số nhận xét sau:

- Vùng dẫn có 1 cực tiểu trên hướng [100] và do đối xứng trên 6 hướng tương đương với [100].

- Mặt đẳng năng lân cận cực tiểu có dạng mặt ellip. Khối lượng hiệu dụng có ba thành phần $m_1 = m_2 = m_t$ với $m_t = 0,19m_0$; $m_3 = m_l = 0,98m_0$. Nghĩa là mặt đẳng năng có dạng ellip tròn xoay với $a_1 = a_2 \neq a_3$

- Vùng hoá trị có cực đại ở tâm vùng Brillouin, tại $\vec{K} = 0$.

- Trong vùng hoá trị có ba phân vùng ứng với ba khối lượng hiệu dụng của lỗ trống khác nhau: Nhánh lỗ trống nặng, nhánh lỗ trống nhẹ và nhánh lỗ trống trung bình. Cực đại của nhánh lỗ trống nặng và nhánh lỗ trống nhẹ

trùng nhau ở tâm vùng Brillouin. Cực đại của nhánh lỗ trống trung bình nằm thấp hơn một khoảng $\Delta E_s = 0,035\text{eV}$

- Ở lân cận cực đại vùng hoá trị mặt đẳng năng có dạng gần như mặt cầu, khối lượng hiệu dụng được xem là đẳng hướng. Lỗ trống nặng $m^*_{Ph} = 0,52m_0$. Lỗ trống nhẹ $m^*_{pl} = 0,16m_0$ lỗ trống trung bình $m^*_{pm} = 0,24m_0$.

- Bề rộng vùng cấm $\Delta E_g(300K) = 1,12\text{eV}$, thay đổi theo nhiệt độ

$$\Delta E_g = \left(1,17 - 2,84 \cdot 10^{-4}T\right) \text{eV}$$

- Cực tiểu vùng dẫn và cực đại vùng hoá trị không cùng nằm trên một điểm của vùng Brillouin. Nên silic được xem là bán dẫn có vùng cấm xiên. Bán dẫn có cực tiểu vùng dẫn và cực đại vùng hóa trị tại một giá trị $\vec{K}$ như nhau (ví dụ GaAs tại tâm vùng Brillouin) gọi là bán dẫn vùng cấm thẳng.

4.3 Nồng độ điện tử và lỗ trống trong điều kiện cân bằng

Nồng độ điện tử trong vùng dẫn được tính theo công thức

$$n_0 = \int_{Ec}^{E\max} 2 \cdot f_0 \cdot g(E) \cdot dE \tag{4.11}$$

trong đó f_0 là hàm phân bố Fermi-Dirac:

$$f_0 = f_{FD} = \frac{1}{e^{\frac{E-E_f}{kT}} + 1} \tag{4.12}$$

Hàm phân bố Fermi Dirac là xác suất điền đầy trạng thái có mức năng lượng E, trong đó E_f là mức năng lượng Fermi. Hàm phân bố Fermi Dirac có tính chất sau:

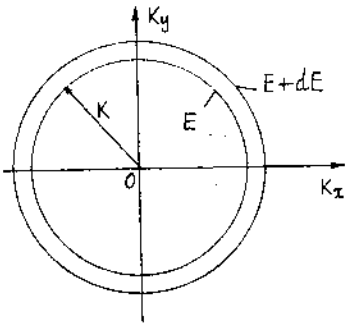
$$\text{Khi} T \to 0 \; f_0 = \begin{cases} o & \text{nếu} \quad E > E_f \\ 1/2 & \text{nếu} \quad E = E_f \\ 1 & \text{nếu} \quad E < E_f \end{cases}$$

Khi $T > 0, f_0$ chỉ có thể thay đổi mạnh ở vùng năng lượng lân cận E_f, nó bằng 1/2 tại $E = E_f$, gần bằng 0 tại các điểm $E \gg E_f$ và gần bằng 1 tại $E \ll E_f$.

Khi $E \gg E_f$ hàm $f_0$có thể xem gần đúng với phân bố Boltzmann $f_0 \simeq e^{-(E-E_f)/kT}$ và khi đó bán dẫn được xem là không suy biến.

$g(E)$ là mật độ trạng thái trong vùng dẫn,

E_c và $E_{\max}$ là năng lượng cực tiểu và cực đại của vùng dẫn.



Hình 4.4: *Dựng các mặt đẳng năng để tính mật độ trạng thái*

Để đơn giản ta giả thiết mặt đẳng năng lân cận cực tiểu ở tâm vùng Brillouin là một mặt cầu, nghĩa là:

$$E = \frac{\hbar^2 K^2}{2m^*} + E_c \tag{4.13}$$

như biểu diễn ở hình (4.4).

Thể tích của hình cầu bán kính K là $V_K = \frac{4\pi}{3}K^3$

Thể tích lớp cầu giữa hai mặt đẳng năng E và $E + dE$ là $dV_K = 4\pi K^2 dK$. Từ (4.13) ta có $KdK = \dfrac{m^*}{\hbar^2}dE$

và $K = \sqrt{\frac{2m^*(E-E_c)}{\hbar^2}}$. Thay vào biểu thức dV_K ta có

$$dV_K = 4\pi\sqrt{\frac{2m^*(E-E_c)}{\hbar^2}}\frac{m^*}{\hbar^2}dE = 2\pi\left(\frac{2m^*}{\hbar^2}\right)^{3/2}(E-E_c)^{1/2}dE$$

Chúng ta nhớ lại rằng mỗi phần tử thể tích không gian$\vec{K}$, $\Delta V_K = \frac{(2\pi)^3}{V}$ đặc trưng một trạng thái. Vì vậy số trạng thái mà năng lượng nằm trong khoảng $E \to E + dE$ là

$$dS_E = \frac{dV_k}{\Delta V_K} = \frac{dV_K}{(2\pi)^3}V \tag{4.14}$$

Lấy $V = 1$ ta có $dS_E = 2\pi(\frac{2m^*}{\hbar^2})^{3/2}\sqrt{E-E_c}dE$

Vì $dS_E = g(E)dE$ nên ta có

$$g(E) = 2\pi(\frac{2m^*}{\hbar^2})^{3/2}\sqrt{E-E_c} \tag{4.15}$$

Thay các giá trị của f_0 và $g(E)$ vào (4.5) và giả thiết hệ điện tử trong bán dẫn là không suy biến (vì n nhỏ) ta có kết quả.

$$n_0 = 2(\frac{2\pi m^* kT}{h^2})^{3/2} e^{-\frac{E_c - E_f}{kT}} = N_C e^{-\frac{E_c - E_f}{kT}} \tag{4.16}$$

Trong đó $N_C = 2(\frac{2\pi m^* kT}{h^2})^{3/2}$ gọi là mật độ trạng thái hiệu dụng của vùng dẫn.

Cũng tính tương tự đối với nồng độ lỗ trống trong vùng hoá trị ta có:

$$p_0 = 2(\frac{2\pi m_p^* kT}{h^2})^{3/2} e^{-\frac{E_f - E_v}{kT}} = N_v e^{-\frac{E_f - E_v}{kT}} \tag{4.17}$$

(Trong đó

$$N_0 = 2\left(\frac{2\pi m_p^* kT}{h^2}\right)^{3/2}$$

gọi là một độ trạng thái hiệu dụng của vùng hóa trị) Nhận xét:

- Trong (4.16) và (4.17) chúng ta chưa biết E_f
- Đối với bán dẫn không suy biến ta luôn có

$$n_0 \cdot p_0 = N_c \cdot N_v \cdot e^{-\frac{E_c - E_v}{kT}} = N_c N_v e^{-\frac{\Delta E_g}{kT}} \tag{4.18}$$

Bây giờ nhờ vào những điều kiện cụ thể ta sẽ tính được nồng độ điện tử và nồng độ lỗ trống cũng như mức Fermi

4.3.1 Bán dẫn riêng (bán dẫn tinh khiết). Dễ dàng nhận thấy rằng trong bán dẫn tinh khiết ta luôn có $n_0 = p_0$ nghĩa là $N_c e^{-\frac{E_c - E_f}{kT}} = N_v e^{-\frac{E_f - E_v}{kT}}$

Nếu $N_c = N_v$ (nghĩa là $m^* = m_p^*$), thì ta có

$$E_f = \frac{E_c + E_v}{2} \tag{4.19}$$

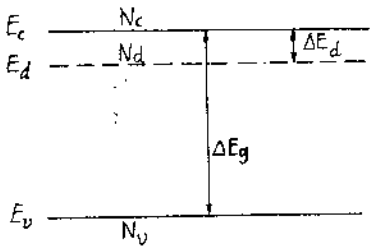
mức Fermi luôn nằm giữa vùng cấm không phụ thuộc vào nhiệt độ.

Nếu $N_c \neq N_v$, ta có:

$$E_f = \frac{E_c + E_v}{2} + \frac{kT}{2} ln(\frac{N_v}{N_c}) \tag{4.20}$$

Trong cả hai trường hợp ta có

$$n_0 = p_0 = n_i = \sqrt{N_c N_v} e^{-\frac{\Delta E_g}{2kT}} \tag{4.21}$$



Hình 4.5: *Sơ đồ năng lượng trong bán dẫn pha tạp đono.*

Như vậy nồng độ điện tử và lỗ trống bằng nhau và phụ thuộc mạnh vào nhiệt độ. Trong trường hợp này n_i được gọi là nồng độ hạt dẫn riêng. Đối với silic ở 300K ta có :

$$N_c = 2,8 \cdot 10^{19}\text{cm}^{-3}; N_v = 1,04 \cdot 10^{19}\text{cm}^{-3}$$

$$n_0 = p_0 = n_i = 1,45 \cdot 10^{10}\text{cm}^{-3}$$

Mức Fermi đối với bán dẫn riêng thường ký hiệu E_i

4.3.2 Bán dẫn chứa một loại tạp chất đono. Nếu trong silic có một nồng độ N_d nguyên tử một nguyên tố nhóm V, ví dụ asen (As) chẳng hạn, thì trong tinh thể sẽ xuất hiện N_d trạng thái định xứ có năng lượng bằng E_d nằm trong vùng cấm gần đáy vùng dẫn. Chúng ta biết rằng trong mạng tinh thể Si mỗi nguyên tử Si có bốn điện tử hoá trị để liên kết với 4 nguyên tử xung quanh. Khi nguyên tử As thay thế nguyên tử Si trong mạng thì 4 điện tử của As sẽ tham gia vào 4 mối liên kết còn thừa một điện tử. Điện tử thứ 5 này liên kết lỏng lẻo với hạt nhân của nó giống như liên kết giữa điện tử và hạt nhân hydro nhưng yếu đi rất nhiều vì nằm trong môi trường Si có hằng số điện môi cao. Tính toán cho thấy mức năng lượng cơ bản E_d nằm cách E_c về phía dưới (hình (4.5)) một khoảng $\Delta E_d \cong 0,01\text{eV}$. Năng lượng ΔE_d gọi là năng lượng ion hoá tạp chất. Vì $\Delta E_d \ll \Delta E_g$ nên các nguyên tử As rất dễ bị ion hóa và cung cấp vào vùng dẫn một điện tử. Chính vì vậy các nguyên tử tương tự như As được gọi là các đono, các nguyên tử cung cấp điện tử (đono là người cho). Vì số lượng các nguyên tử As ít (cỡ một phần triệu nguyên tử Si) nên khoảng cách giữa các nguyên tử As rất lớn, giống như các nguyên tử cô lập nên trạng thái với mức E_d chỉ định xứ trong một vùng rất hẹp của tinh thể.

Trong vùng nhiệt độ từ 150K đến 450K, các nguyên tử As thường nhận được năng lượng nhiệt và bị ion hoá hết mà năng lượng nhiệt này chưa đủ

làm cho điện tử từ vùng hoá trị chuyển lên vùng dẫn đáng kể. Vùng nhiệt độ này được gọi là vùng ion hoá tạp chất.

a- Khi bán dẫn nằm trong vùng nhiệt độ này ta có thể viết

$$n_0 = N_d = N_c e^{-(E_c - E_f)/kT} \tag{4.22}$$

và nếu bán dẫn là không suy biến, ta có:

$$p_0 = \frac{n_i^2}{n_0} = \frac{n_i^2}{N_d} = \frac{N_c N_v}{N_d} \cdot e^{-\Delta E_g/kT} \tag{4.23}$$

Từ (4.22) ta có thể tính được mức Fermi

$$E_f = E_c + kT \ln \frac{N_d}{N_c} \tag{4.24}$$

b- Khi bán dẫn nằm trong vùng nhiệt độ thấp, thấp hơn vùng nhiệt độ ion hoá thì xác suất các nguyên tử đó nhận được năng lượng để ion hoá cung cấp điện tử cho vùng dẫn nhỏ hơn 1 và tăng từ 0 đến 1 theo chiều tăng của nhiệt độ. Kết quả tính toán cho thấy: trong trường hợp vùng nhiệt độ thấp ta có

$$n_0 = \sqrt{\frac{N_c N_d}{2}} \cdot e^{-\frac{\Delta E_d}{2kT}} \tag{4.25}$$

trong đó $\Delta E_d = E_c - E_d$.

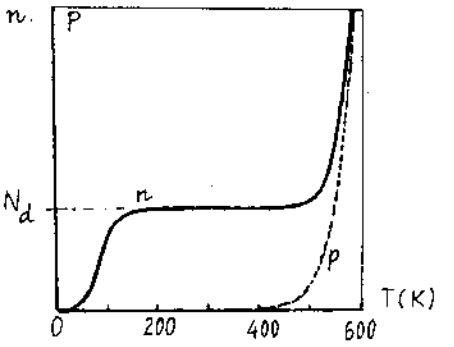
$$E_f = \frac{E_c + E_d}{2} + \frac{kT}{2} \ln \frac{N_d}{2N_c} \tag{4.26}$$

còn nồng độ lỗ trống rất nhỏ.

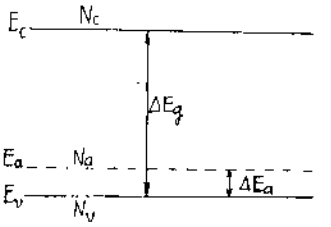
c- Khi bán dẫn nằm trong vùng nhiệt độ cao hơn nhiệt độ ion hoá tạp chất, thì tất cả nguyên tử đono đã bị ion hoá không thể cung cấp thêm điện tử. Tuy nhiên do nhiệt độ cao xác suất các điện tử chuyển mức từ vùng hoá trị lên vùng dẫn là rất cao và tăng dần theo nhiệt độ, nồng độ lỗ trống tăng lên nhanh, xấp xỉ bằng nồng độ điện tử. Ảnh hưởng của các tạp chất bị lu mờ không đáng kể và bán dẫn xử sự như một bán dẫn riêng, nghĩa là

$$n_0 = p_0 = n_i = \sqrt{N_c N_v}\, e^{-\Delta E_g/2kT}$$
$$E_f = \frac{E_c + E_v}{2} + \frac{kT}{2} \ln \frac{N_v}{N_c}.$$

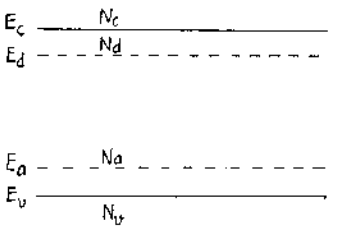
Vì các linh kiện bán dẫn dựa trên tính chất của các bán dẫn pha tạp, ví dụ điôt là một chuyển tiếp P-N, một phần pha tạp đono, một phần pha tạp axepto, nên trong vùng nhiệt độ cao này các linh kiện bán dẫn ngừng hoạt động.



Hình 4.6: *Sự phụ thuộc nồng độ điện tử, lỗ trống vào nhiệt độ trong bán dẫn đono.*



Hình 4.7: *Sơ đồ năng lượng trong bán dẫn pha tạp axepto.*



Hình 4.8: *Sơ đồ năng lượng trong bán dẫn bù trừ.*

Như vậy bán dẫn pha tạp đono trong vùng nhiệt độ ion hoá mới thể hiện đầy đủ tính chất bán dẫn tạp chất, bán dẫn ngoại lai (extrinsic), trong đó $n \gg p$ và điện tử được gọi là hạt dẫn cơ bản(đa số), lỗ trống là hạt dẫn không cơ bản (thiểu số), bán dẫn được gọi là bán dẫn điện tử hay bán dẫn loại n. Sự thay đổi nồng độ điện tử và lỗ trống trong bán dẫn pha tạp đono được biểu diễn một cách định tính trên hình (4.6).

4.3.3 Bán dẫn chứa một loại tạp chất axepto. Nếu trong silic có một nồng độ N_a nguyên tử của một nguyên tố nhóm III, ví dụ nhôm (Al) chẳng hạn thì trong tinh thể sẽ xuất hiện N_a trạng thái định xứ có năng lượng bằng E_a nằm trong vùng cấm gần đỉnh vùng hoá trị. Khi nguyên tử nhôm thay thế nguyên tử Si thì nó thiếu một điện tử để tham gia liên kết với 4 nguyên tử xung quanh, làm xuất hiện một mối liên kết không bão hòa, một trạng thái trống. Các điện tử trong vùng hoá trị dễ dàng chiếm các trạng thái trống này, hay nói cách khác các trạng thái trống nhận lấy điện tử từ vùng hoá trị trở thành ion âm và làm xuất hiện một lỗ trống trong vùng hoá trị.

Bài toán được giải trong ba vùng nhiệt độ như đối với bán dẫn loại n, ứng với các ký hiệu trên hình (4.7).

a- Trong vùng nhiệt độ ion hóa

$$p_0 = N_a = N_v \cdot e^{-(E_F - E_v)/kT} \tag{4.27}$$

$$n_0 = \frac{n_i^2}{p_0} = \frac{N_c N_v}{N_a} e^{-\Delta E_g/kT} \tag{4.28}$$

$$E_f = E_v - kT ln \frac{N_a}{N_v} \tag{4.29}$$

b- Trong vùng nhiệt độ thấp

$$p_0 = \sqrt{\frac{N_v N_a}{2}} \cdot e^{-(\Delta E_a/2kT)} \tag{4.30}$$

$$E_f = \frac{E_v + E_a}{2} - \frac{kT}{2} \ln \frac{N_a}{2N_v} \tag{4.31}$$

c- Vùng nhiệt độ cao bán dẫn axepto trở thành bán dẫn riêng.

4.3.4 Bán dẫn bù trừ, chứa hai loại tạp chất. Khi trong chất bán dẫn chứa cả tạp chất đono với nồng độ N_d và tạp chất axepto với nồng độ N_a thì điện tử từ các trạng tháiE_d sẽ chuyển xuống chiếm các trạng thái trống E_a vì thế ta nói đó là bán dẫn bù trừ như ở hình (4.8).

a- Trường hợp bù trừ toàn phần $N_d = N_a$, tất cả các trạng thái axepto đều bị chiếm bởi điện tử từ trạng thái đono chuyển mức xuống. Trong trường hợp này tất cả tạp chất trở thành ion N_d^+ và N_a^-. Bán dẫn xử sự như bán dẫn riêng. Chính đây là một cách để tạo ra những bán dẫn cao ôm, Bán dẫn có điện trở suất lớn. Người ta thấy rằng trong silic có một số tạp chất rất khó loại bỏ hoàn toàn ví dụ B. Cho nên ta luôn có bán dẫn loại p chứa B có điện trở suất không cao lắm. Khi cần có những bán dẫn cao ôm, như để làm detector hạt nhân, ta có thể pha thêm tạp chất loại đono, như Li để bù trừ tạp axepto B.

Tuy giống bán dẫn riêng $n = p = n_i$ về mặt nồng độ hạt dẫn bán dẫn bù trừ toàn phần vẫn có những tính chất khác với bán dẫn tinh khiết vì trong đó có một nồng độ ion âm và ion dương $N_a^- = N_d^+$, ví dụ độ linh động hạt dẫn nhỏ hơn, do tăng cường sự tán xạ trên các ion.

b- Trường hợp bù trừ một phần, ví dụ $N_d > N_a$.

Khi đó hiệu số nồng độ $N_d - N_a = N'_d$ đóng vai trò như bán dẫn chứa một loại tạp chất, trong thí dụ này bán dẫn là loại n, từ kết quả tính toán trong vùng nhiệt độ ion hóa tạp chất ta có thể viết:

$$n_0 = N_d - N_a = N'_d$$

$$E_f = E_c + kT \ln \frac{N'_d}{N_c}$$

Trong vùng nhiệt độ thấp ta có:

$$n_0 = \frac{N_d - N_a}{2N_a} \cdot N_c \cdot e^{-\Delta E_d/kT} \tag{4.32}$$

$$E_f = E_d + kTln\frac{N_d - N_a}{2N_a} \tag{4.33}$$

Trong vùng nhiệt độ cao bán dẫn trở thành bán dẫn riêng

4.3.5 Bán dẫn suy biến. Như chúng ta đã biết, một hệ suy biến khi nồng độ hạt tương đối cao và mật độ trạng thái nhỏ, phổ năng lượng gián đoạn. Trong bán dẫn nồng độ hạt dẫn trong các vùng cho phép tăng cao chủ yếu là do nồng độ pha tạp và nhiệt độ. Chúng ta cũng thấy từ các công thức tính mức Fermi rằng khi nồng độ tạp chất tăng lên thì mức Fermi tiến dần về phía bờ vùng E_c hoặc E_v.

Tính toán cho thấy rằng có thể quy ước bán dẫn sẽ suy biến bắt đầu từ khi mức Fermi nằm trong vùng cho phép. Trong trường hợp đó để tính nồng độ hạt dẫn người ta phải dùng những công thức khác thích hợp với một hệ suy biến. Những công thức này giống như những công thức đối với điện tử trong kim loại. Ví dụ đối với bán dẫn loại n ta có:

$$n_0 = \frac{8\pi}{3}\left(\frac{2m^*}{h^2}\right)^{3/2}(E_F - E_c)^{3/2} \quad \text{và} \tag{4.34}$$

$$E_F = E_c + \left(\frac{3}{8\pi}\right)^{2/3}\frac{h^2}{2m^*}\cdot n^{2/3} \tag{4.35}$$

đối với bán dẫn loại P:

$$p_0 = \frac{8\pi}{3}\left(\frac{2m_p^*}{h^2}\right)^{3/2}(E_v - E_F)^{3/2} \quad \text{và} \tag{4.36}$$

$$E_F = E_v - \left(\frac{3}{8\pi}\right)^{2/3}\frac{h^2}{2m_p^*}\cdot p^{2/3}. \tag{4.37}$$

Một điều lý thú là ta có thể dễ dàng chứng minh công thức (4.34) từ nguyên lý bất định Heisenberg $\Delta x \cdot \Delta p = h$.

4.4 Nồng độ hạt dẫn không cân bằng

Trên đây chúng ta xét nồng độ hạt dẫn trong điều kiện cân bằng, khi không có tác dụng của các yếu tố bên ngoài. Trong mục này ta xét nồng độ điện tử và lỗ trống khi có tác dụng của các yếu tố bên ngoài như điện trường, bức xạ. Trong chất bán dẫn luôn luôn xẩy ra hai quá trình ngược nhau:

- Quá sinh phát sinh hạt dẫn là quá trình trong đó điện tử từ vùng hóa trị nhận được năng lượng chuyển lên vùng dẫn làm phát sinh một điện tử tự do và một lỗ trống tự do. Nếu quá trình này xẩy ra do các yếu tố kích thích bên ngòai như chiếu sáng, điện trường, thì gọi là quá trình phun hạt dẫn (Injection).

- Quá trình tái hợp là quá trình điện tử trên vùng dẫn chuyển xuống một trạng thái trống ở trong vùng hóa trị, nói cách khác một lỗ trống tự do kết hợp với một điện tử tự do và cả hai biến mất.

Như vậy, khi có hiện tượng phun hạt dẫn thì bán dẫn nằm trong trạng thái không cân bằng, nồng độ điện tử tự do và lỗ trống tự do lớn hơn nồng độ điện tử tự do cân bằng n_0 và nồng độ lỗ trống tự do cân bằng p_0.

Người ta gọi $n = n_0 + \delta n$ là nồng độ điện tử không cân bằng, δn là nồng độ điện tử dư. Tương tự như thế $p = p_0 + \delta p$ là nồng độ lỗ trống không cân bằng, δp là nồng độ lỗ trống dư. Nồng độ điện tử và lỗ trống cân bằng trong bán dẫn không suy biến được biểu diễn bằng các công thức.

$$\begin{aligned} n_0 &= N_c \cdot e^{-(E_c - E_f)/kT} \\ p_0 &= N_v \cdot e^{-(E_f - E_v)/kT} \end{aligned}$$

Nồng độ điện tử và lỗ trống không cân bằng cũng được biểu diễn bằng các công thức tương tự nhưng các mức Fermi được thay bằng chuẩn mức Fermi.

$$\begin{aligned} n &= n_0 + \delta n &= N_c \cdot e^{-(E_c - E^*_{fn})/kT} \\ p &= p_0 + \delta p &= N_v \cdot e^{-(E^*_{fp} - E - v)/kT} \end{aligned}$$

trong đó $E^*_{fn} \neq E_f p^*$ là các chuẩn mức Fermi của điện tử và lỗ trống. Ta cũng thấy rằng

$$n \cdot p = n_0 p_0 \cdot e^{-(E^*_{fn} - E^*_{fp})/kT} = n_i^2 \cdot e^{-(E^*_{fn} - E^*_{fp})}$$

Khi $E^*_{fn} = E_f p^* = E_f$ thì bán dẫn là cân bằng.

Quá trình phát sinh được đặc trưng bởi một đại lượng gọi là tốc độ phát sinh, bằng số cặp điện tử và lỗ trống sinh ra trong một đơn vị thời gian, một đơn vị thể tích.

Quá trình tái hợp được đặc trưng bởi tốc độ tái hợp, bằng số cặp điện tử và lỗ trống tái hợp trong một đơn vị thời gian một đơn vị thể tích. Quá trình tái hợp xảy ra theo nhiều cơ chế khác nhau:

- Tái hợp trực tiếp: điện tử trên vùng dẫn "gặp" trực tiếp lỗ trống dưới vùng hóa trị.

- Tái hợp qua tâm: Tái hợp gián tiếp qua sự "môi giới" của một tâm bắt (một mức năng lượng trong vùng cấm).

Trong trường hợp nồng độ hạt dẫn dư không cao lắm. $\delta n = \delta p \ll n_0, p_0$ ta có thể giả thiết tốc độ tái hợp R tỷ lệ với δn hoặc δp:

$$R_n = \frac{\delta n}{\tau_n};\ R_p = \frac{\delta p}{\tau_p}$$

trong đó τ_n, τ_p được gọi là thời gian sống của điện tử và lỗ trống tương ứng. Đó là khoảng thời gian trung bình mà một hạt dẫn tồn tại từ khi được phát sinh cho đến khi chúng bị tái hợp.

Tương tự như đối với mật độ điện tích chúng ta cũng có thể viết phương trình liên tục đối với nồng độ hạt dẫn, từ phương trình này chúng ta có thể tìm được nồng độ hạt dẫn không cân bằng theo thời gian cũng như theo tọa độ.

Phương trình liên tục trong trường hợp một chiều đối với điện tử có dạng:

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \frac{1}{q}\frac{\partial J_n}{\partial x} + G_n - R_n$$

trong đó G_n tốc độ phát sinh điện tử
R_n tốc độ tái hợp điện tử
J_n mật độ dòng điện tử

Trong trường hợp tổng quát mật độ dòng điện tử gồm hai thành phần.

- Thành phần dòng do chuyển động của điện tử dưới tác dụng của điện trường, gọi là dòng cuốn (frift current)

$$J_{En} = e_n n \mu_n \mathcal{E}$$

- Thành phần thứ hai do chuyển động khuếch tán gây nên từ vùng có nồng độ lớn đến vùng có nồng độ nhỏ và tỷ lệ với grad nồng độ, đó là dòng khuếch tán (diffusion curent).

$$J_{Dn} = -e_n D_n \frac{dn}{dx}$$

Tương tự như trên chúng ta có thể viết phương trình liên tục và các biểu thức mật độ dòng điện cho lỗ trống.

Ở đây D_n là hệ số khuếch tán của điện tử, nó liên hệ với độ linh động của điện tử bằng một hệ thức gọi là hệ thức Einstein:

$$\begin{aligned} D_n &= \left[\frac{kT}{e_n}\right]\mu_n \\ D_p &= \left[\frac{kT}{e_p}\right]\mu_p \end{aligned}$$

Như vậy dòng cuốn phụ thuộc vào nồng độ hạt dẫn và điện trường, còn dòng khuếch tán lại phụ thuộc vào grad nồng độ hạt dẫn.

Để đặc trưng cho quá trình tái hợp và khuếch tán hạt dẫn người ta còn đưa ra một đại lượng gọi là độ dài khuếch tán. Độ dài khuếch tán là quảng đường mà hạt dẫn khuếch tán đi được trong thời gian sống của nó, được ký hiệu là L_{Dn} và L_{Dp}, ta có $L_{Dn} = \sqrt{D_n \tau_n}$; $L_{Dp} = \sqrt{D_p \tau_p}$.

4.5 Độ dẫn điện của chất bán dẫn

Ta có thể sử dụng thuyết điện tử kim loại để tính độ dẫn điện của chất bán dẫn. Tuy nhiên trong trường hợp này ta phải lưu ý rằng: trong chất bán dẫn có sự tham gia dẫn điện của hai loại hạt dẫn khác dấu, điện tử và lỗ trống. Chúng ta cũng hiểu rằng sự dẫn điện của lỗ trống cũng chính là do sự chuyển động của điện tử liên kết. Lỗ trống chỉ là một loại hạt giả định có các tính chất động có thể thay thế tính chất động của các điện tử liên kết. Tuy nhiên từ nay về sau trong những tính toán chúng ta xem lỗ trống như một hạt dẫn thực thụ.

Theo thuyết điện tử kim loại ta có thể tính độ dẫn của chất bán dẫn:

Giả sử trong chất bán dẫn nồng độ điện tử bằng n, nồng độ lỗ trống bằng p. Khi có điện trường tác dụng các hạt dẫn tham gia đồng thời hai chuyển động, chuyển động nhiệt hỗn loạn và chuyển động cuốn theo phương điện trường với vận tốc trung bình v_d. Ta có thể tính một cách gần đúng vận tốc của điện tử v_{dn}.

$v_{dn} = a_n\tau_n$. Trong đó τ_n là thời gian chuyển động tự do trung bình của điện tử, a_n là gia tốc $a_n = \dfrac{e_n\mathcal{E}}{m^*}$.

Khi đó ta có

$$v_{dn} = \frac{e_n\tau_n}{m^*}\mathcal{E} = \mu_n\mathcal{E}$$

Chuyển động có hướng của điện tử gây nên dòng điện với mật độ dòng điện là

$$\begin{aligned} J_n &= e_n n v_{dn} \\ J_n &= e_n\mu_n n\mathcal{E} \end{aligned}$$

Tương tự như vậy J_p là dòng điện do lỗ trống gây nên

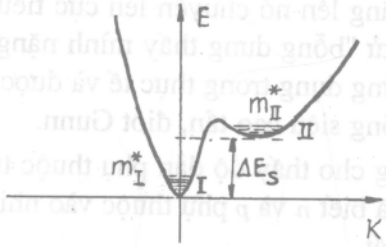
$$J_p = e_p p v_{dp} = e_p\mu_p p\mathcal{E}$$

Dòng điện tổng cộng sẽ là $J = J_n + J_p = \sigma\mathcal{E}$. Cuối cùng ta có biểu thức độ dẫn điện của bán dẫn:

$$\sigma = e_n\mu_n n + e_p\mu_p p$$

$$\sigma = \sigma_n + \sigma_p = \frac{e^2\tau_n}{m^*}n + \frac{e^2\tau_p}{m_p^*}p \tag{4.38}$$

Ở đây các đại lượng $\mu_n = \frac{e\tau_n}{m^*}$ và $\mu_p = \frac{e\tau_p}{m_p^*}$ gọi là độ linh động của điện tử và độ linh động của lỗ trống được đo bằng đơn vị m^2/Vs. Còn τ_n và τ_p được gọi là



Hình 4.9: *Sơ đồ năng lượng vùng dẫn của GaAs.*

thời gian hồi phục của điện tử và lỗ trống, trong mức độ gần đúng nhất định có thể xem chúng bằng thời gian chuyển động tự do trung bình của điện tử và lỗ trống. τ_n và τ_p đặc trưng cho xác suất va chạm (tán xạ) lên các tâm tán xạ của điện tử lỗ trống. Tâm tán xạ có thể là các nguyên tử trung hoà ở nút mạng dao động khỏi vị trí cân bằng, có thể là các nguyên tử, ion tạp chất, các khuyết tật làm sai lệch trường thế tuần hoàn. Một điện tử dưới tác dụng của điện trường nhận được thêm năng lượng (động năng) khi va chạm với tâm tán xạ mất bớt năng lượng. Chính nhờ các va chạm mà điện tử có năng lượng cao (bị kích thích) trở về được trạng thái cân bằng. Thời gian để một hệ trở về trạng thái cân bằng từ trạng thái kích thích gọi là thời gian hồi phục. Vậy nên các đại lượng τ_n, τ_p đặc trưng cho xác suất va chạm, do đó đặc trưng cho quá trình hồi phục, được gọi là thời gian hồi phục.

Độ linh động phụ thuộc trực tiếp vào thời gian hồi phục là lẽ đương nhiên, mặt khác độ linh động còn phụ thuộc vào khối lượng hiệu dụng của hạt dẫn.

Biểu thức (4.38) viết cho trường hợp vùng năng lượng chỉ có một cực trị ở tâm vùng Brillouin. Trong trường hợp cực trị không nằm ở tâm vùng Brillouin mà nằm trên một hướng như [100] đối với silic, chúng ta có cả thảy 6 cực tiểu trên 6 hướng tương đương với mặt đẳng năng là 6 mặt ellip định hướng theo 3 phương khác nhau với ba thành phần m_1, m_2, m_3 khác nhau, ta thấy m^* là một đại lượng tenxơ bậc hai. Vì vậy σ cũng phải là một đại lượng tenxơ bậc hai. σ sẽ là một đại lượng vô hướng trong một số trường hợp riêng mà thôi. Chúng ta cũng biết rằng m^* phụ thuộc vào quy luật tán sắc, nghĩa là phụ thuộc vào $E(\vec{K})$ vì nó tỷ lệ nghịch với đạo hàm bậc hai theo $\vec{K}$ cho nên m^* cũng phụ thuộc vào độ lớn và hướng của $\vec{K}$, vào động năng của hạt dẫn. Trong trường hợp quy luật tán sắc $E(\vec{K})$ có hai cực tiểu gần nhau chẳng hạn như ở hình (4.9), khi điện tử có động năng thấp nó ở cực tiểu I có m^*_I nhỏ,

khi động năng của nó tăng lên nó chuyển lên cực tiểu II có khối lượng m^*_{II} lớn hơn. Nghĩa là điện tử "bỗng dưng thấy mình nặng lên". Hiện tượng này đã được nghiên cứu và ứng dụng trong thực tế và được gọi là hiệu ứng Gunn, là cơ sở của điôt phát sóng siêu cao tần, điôt Gunn.

Biểu thức (4.38) cũng cho thấy độ dẫn phụ thuộc tuyến tính vào nồng độ hạt dẫn n và p. Như ta đã biết n và p phụ thuộc vào nhiều yếu tố như nồng độ tạp chất, nhiệt độ, áp suất...

Đối với bán dẫn đono, $n \gg p$, công thức (4.38) còn lại:

$$\sigma = \frac{e^2\tau_n}{m^*}n \tag{4.39}$$

Đối với bán dẫn axepto $n \ll p$

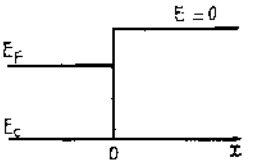
$$\sigma = \frac{e^2\tau_p}{m^*_p}p \tag{4.40}$$

Trong bán dẫn có nhiều cực tiểu tương đương như vùng dẫn của Si, Ge,... nồng độ điện tử ở các cực tiểu năng lượng theo các phương khác nhau có thể khác nhau khi nén tinh thể theo một phương nhất định. Chính hiệu ứng này có thể làm cho điện trở thay đổi theo áp suất, hay đó chính là hiệu ứng áp trở, làm cơ sở cho nhiều loại cảm biến đo áp suất, đo lưu lượng...

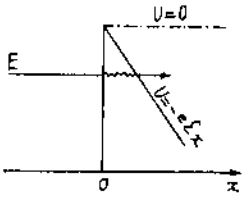
Nếu chúng ta chiếu vào tinh thể bán dẫn một chùm sáng có bước sóng thích hợp có thể làm cho điện tử từ vùng hóa trị chuyển mức lên vùng dẫn. Nồng độ điện tử lỗ trống, do đó tăng lên, làm cho độ dẫn tăng lên. Đó chính là hiệu ứng quang dẫn.

Nồng độ hạt dẫn có thể phụ thuộc vào điện trường (khi điện trường cao) do nhiều cơ chế vật lý ví dụ cơ chế đường ngầm như ta đã xét, cơ chế ion hoá do va chạm giữa điện tử có động năng lớn với các nguyên tử ở nút mạng. Các hiện tượng trên đây có thể làm tăng đột ngột nồng độ hạt dẫn trong bán dẫn, là nguyên nhân của các hiện tượng đánh thủng trong linh kiện bán dẫn, nhưng cũng là cơ sở hoạt động của các loại linh kiện khác như điôt ổn áp Zener, IMPATT điôt (impact ioniziation avalanche transit time) tạm dịch là điôt thời gian vận chuyển ion hoá va chạm hay gọi tắt là điôt thác lũ.

Độ dẫn của chất bán dẫn là một vấn đề rất lớn, rất quan trọng, rất tiếc chúng ta không có thì giờ dùng lại lâu hơn.



Hình 4.10: *Sơ đồ thế năng điện tử trong kim loại.*



Hình 4.11: *Sơ đồ thế năng điện tử khi có trường ngoài tác dụng.*

4.6 Các hiện tượng phát xạ điện tử

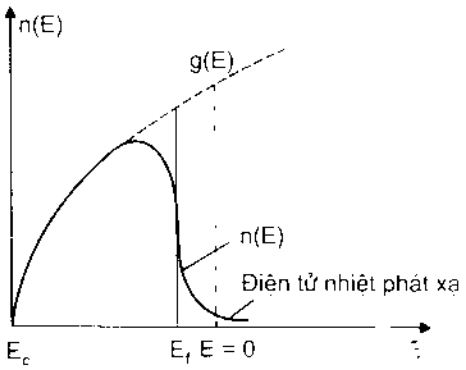
Ta xét một mẫu chất rắn, nếu không có trường ngoài thì thế năng của điện tử ở ngoài mẫu không đổi và bằng không theo quy ước của ta. Ở trong mẫu thế năng của điện tử tự do bằng E_c, đáy của vùng dẫn. Nếu năng lượng toàn phần của điện tử là E thì $(E - E_c) = T$ là động năng của điện tử $T = \frac{m^* v^2}{2} = \frac{p^2}{2m^*}$.

Vì năng lượng toàn phần của điện tử thấp hơn thế năng của điện tử ở ngoài mẫu nên điện tử ở trong mẫu chất rắn không thể ra ngoài mẫu, xem hình (4.10).

Muốn điện tử ra khỏi mẫu chất rắn phải bằng cách nào đó kích thích điện tử lên mức năng lượng cao hơn mức năng lượng ngoài mẫu, nghĩa là $E > 0$.

Hiện tượng điện tử bứt ra khỏi mẫu được gọi là hiện tượng phát xạ điện tử. Tùy thuộc vào cách mà điện tử nhận được năng lượng để bứt ra, để được phát xạ ra, hiện tượng phát xạ điện tử được chia làm nhiều loại:

- Nhiệt phát xạ điện tử.
- Quang phát xạ điện tử.
- Phát xạ điện tử thứ cấp.
- Phát xạ điện tử do bắn phá bằng ion.



Hình 4.12: *Sơ đồ biểu diễn cách tính dòng nhiệt phát xạ điện tử.*

- Phát xạ điện tử nóng.

Nếu ngoài mẫu có điện trường làm cho thế năng của điện tử phía ngoài mẫu giảm xuống như ở hình (4.11), thì trên bề mặt mẫu chất rắn hình thành một hàng rào thế. Nếu điện trường đủ lớn hàng rào thế đủ mỏng để xảy ra hiệu ứng đường ngầm, thì có thể xảy ra hiện tượng phát xạ điện tử ngay đối với các điện tử có năng lượng toàn phần $E < 0$. Do hiệu ứng đường ngầm mà ta có thể gặp một số dạng phát xạ điện tử:

- Tự phát xạ điện tử, (hay là phát xạ điện tử lạnh).

- Nhiệt - tự phát xạ điện tử.

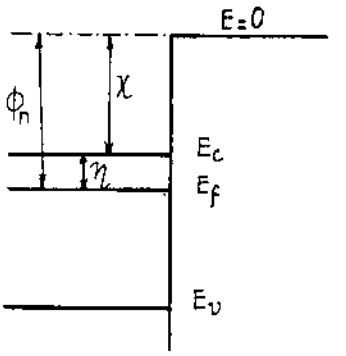
- Quang - tự phát xạ điện tử.

Đây là các hiện tượng phát xạ điện tử do hiệu ứng đường ngầm (tự phát xạ) hoặc do kết hợp với quá trình kích thích bằng nhiệt, quang với hiệu ứng đường ngầm.

Bây giờ chúng ta xét hiện tượng phát xạ điện tử quan trọng nhất: hiện tượng nhiệt phát xạ điện tử.

Chúng ta xét một mẫu kim loại hình lập phương cạnh bằng 1cm và xét bài toán một chiều theo phương x, như ở hình (4.12).

Như ta đã biết, số điện tử trong kim loại có trạng thái nằm trong phần tử



Hình 4.13: *Sơ đồ năng lượng của điện tử, công thoát trong bán dẫn*

thể tích không gian $dK_x \cdot dK_y \cdot dK_z = dV_k$ là:

$$dn = f_0 \frac{2}{(2\pi)^3} \cdot dK_x dK_y dK_z$$

f_0 là hàm phân bố Fermi-Dirac, $(2\pi)^3$ là thể tích phần tử trong không gian $\vec{K}$ đặc trưng cho 1 trạng thái đối với mẫu có thể tích bằng đơn vị $V = 1$.

Ở nhiệt độ không tuyệt đối điện tử sẽ sắp xếp vào các mức năng lượng từ E_c đến E_F. Tất cả các điện tử đều có năng lượng toàn phần âm, không thể thoát ra ngoài mẫu.

Khi nhiệt độ tăng lên cao có thể có những điện tử có năng lượng $E > 0$ và có thể thoát ra ngoài.

Bây giờ chúng ta hãy tìm dòng điện tử thoát ra khỏi mẫu từ mặt phẳng (bề mặt mẫu) vuông góc với trục x. Dễ dàng thấy rằng để điện tử thoát ra khỏi bề mặt động năng của điện tử theo hướng x phải lớn hơn khoảng cách năng lượng từ mức E_c đến mức năng lượng ngoài mẫu mà ta lấy bằng không, khoảng năng lượng đó được gọi là công thoát thực sự ký hiệu là $W_o = -E_c$. Ta có thể viết điều kiện này dưới dạng:

$$\frac{\hbar^2 K_x^2}{2m^*} \geq W_0 = -E_c = \frac{\hbar^2 K_{x\min}^2}{2m^*}$$

Ta có thể viết mật độ dòng nhiệt phát xạ điện tử dưới dạng

$$J_T = 2e \int_{K_{x\min}}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} v_x f_0 \frac{dK_x dK_y dK_z}{(2\pi)^3} \tag{4.41}$$

Để đơn giản bài toán và vì các điện tử có thể tham gia vào hiện tượng phát xạ thường có năng lượng cao nên ta thay hàm phân bố Fermi-Dirac bằng hàm phân bố Maxwell-Boltzmann $f_{MB} = e^{(E_F - E)/kT}$.

Thay $E = E_c + \frac{\hbar^2 K^2}{2m^*} = E_c + \frac{1}{2m^*}(K_x^2 + K_y^2 + K_z^2)$, $v_x = \frac{p_x}{m^*} = \frac{\hbar K_x}{m^*}$, ta có

$$J_T = \frac{e\hbar}{4\pi^3 m^*} e^{\frac{E_f - E_c}{kT}} \int_{-\infty}^{\infty} dK_y \int_{-\infty}^{\infty} dK_z \int_{K_{x\min}}^{\infty} K_x \cdot e^{-\frac{\hbar^2(K_x^2 + K_y^2 + K_z^2)}{2m^* kT}} dK_x$$

Tính toán cụ thể cho ta

$$J_T = \frac{4\pi m^* e}{h^3} k^2 T^2 e^{\frac{E_F}{kT}} = AT^2 e^{-\frac{\Phi}{kT}} \tag{4.42}$$

trong đó $A = \dfrac{4\pi m^* e k^2}{h^3} = 120 \dfrac{m^*}{m_0} \left(\dfrac{A}{m^2 K^2}\right)$ gọi là hệ số Richardson, $\Phi = -E_f$ gọi là công thoát nhiệt động, nó bằng năng lượng cần thiết để đưa một điện tử có năng lượng bằng mức Fermi thoát ra ngoài.

Như vậy công thoát nhiệt động của kim loại, mà ta thường gọi tắt là công thoát của kim loại, bằng khoảng năng lượng từ mức chân không đến mức Fermi

$$\Phi = -E_f \tag{4.43}$$

Công thoát của các chất bán dẫn cũng được tính tương tự mặc dù trên thực tế tại mức năng lượng Fermi thông thường (trong bán dẫn không suy biến) không hề có điện tử. Đó là vì đại lượng $\Phi = -E_f$ đặc trưng sự phân bố thống kê điện tử. Công thoát của bán dẫn được biểu diễn dưới dạng tổng của hai số hạng như ở hình (4.13):

$$\Phi = \mathcal{X} + \eta$$

trong đó $\mathcal{X}$ được xác định bởi tính chất của mạng tinh thể, nó là công thoát thực sự, ái lực hoá học, là khoảng cách năng lượng từ mức chân không đến đáy vùng dẫn, E_c, Còn η là phần phụ thuộc vào nồng độ tạp chất và nhiệt độ.

Đối với bán dẫn riêng, ta có

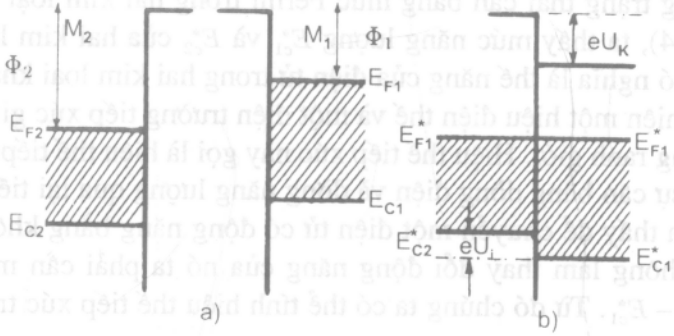
$$\Phi_i = \mathcal{X} + \frac{\Delta E_g}{2} + \frac{kT}{2} \ln \frac{N_v}{N_c} \tag{4.44}$$

Đối với bán dẫn loại n trong vùng nhiệt độ ion hoá tạp chất

$$\Phi_n = \mathcal{X} - kT \ln \frac{N_d}{N_c} \tag{4.45}$$

và bán dẫn loại p:

$$\Phi_p = \mathcal{X} + \Delta E_g + kT \ln \frac{N_a}{N_v} \tag{4.46}$$



Hình 4.14: *Sơ đồ giải thích sự xuất hiện hiệu thế tiếp xúc ngoài.*

4.7 Các hiệu ứng tiếp xúc

Bởi vì trên biên giới của chất rắn có tồn tại một hàng rào thế, cho nên khi hai chất rắn khác nhau tiếp xúc với nhau sẽ hình thành hiệu điện thế tiếp xúc do sự khác nhau của các rào thế đó gây nên.

4.7.1 Hiệu thế tiếp xúc ngoài. Hiệu thế tiếp xúc ngoài xuất hiện giữa hai kim loại tiếp xúc với nhau hoặc trao đổi điện tử với nhau bằng hiệu ứng nhiệt phát xạ điện tử. Giả sử công thoát Φ_1 của kim loại M_1 nhỏ hơn Φ_2 của kim loại M_2, thì dòng nhiệt phát xạ điện tử từ M_1 sang M_2 sẽ lớn hơn dòng nhiệt phát xạ từ M_2 sang M_1. Kết quả là M_1 tích điện dương, M_2 tích điện âm và giữa M_1 và M_2 xuất hiện một hiệu điện thế tiếp xúc, ký hiệu U_K. Quá trình trao đổi điện tử sẽ cân bằng khi dòng điện tử từ M_1 sang M_2 là $\vec{J}_{10}$ bằng dòng điện tử từ M_2 sang M_1 là $\vec{J}_{20}$. Từ công thức dòng nhiệt phát xạ điện tử ta có

$$AT^2e^{-\Phi_1/kT} = AT^2e^{-(\Phi_2+eU_K)/kT}$$

ta rút ra được:

$$U_K = \frac{1}{e}(\Phi_2 - \Phi_1) \tag{4.47}$$

Vì vậy hiệu thế tiếp xúc U_K được xác định bởi hiệu hai công thoát. Vì điện thế trên bề mặt kim loại là đồng đều, nên giữa hai điểm bất kỳ trên hai kim loại đều tồn tại một hiệu điện thế U_K và U_K vì thế được gọi là hiệu thế tiếp xúc ngoài. Hình (4.14) giải thích sự xuất hiện hiệu thế tiếp xúc ngoài.

4.7.2 Hiệu thế tiếp xúc trong giữa hai kim loại. Khi kim loại M_1 và M_2, nằm trong trạng thái cân bằng mức Fermi trong hai kim loại bằng nhau. Từ hình (4.14), ta thấy mức năng lượng E^*_{c1} và E^*_{c2} của hai kim loại khác nhau, điều đó có nghĩa là thế năng của điện tử trong hai kim loại khác nhau. Từ đó mà xuất hiện một hiệu điện thế và một điện trường tiếp xúc giữa hai kim loại trong vùng ranh giới. Hiệu thế tiếp xúc này gọi là hiệu thế tiếp xúc trong đảm bảo cho sự cân bằng dòng điện và dòng năng lượng qua lại tiếp xúc. Từ hình (4.14b) ta thấy để chuyển một điện tử có động năng bằng không từ M_1 sang M_2 mà không làm thay đổi động năng của nó ta phải cần một năng lượng bằng $E^*_{c2} - E^*_{c1}$. Từ đó chúng ta có thể tính hiệu thế tiếp xúc trong

$$U_i = \frac{1}{e}[(E_{c2} - E_{f2}) - (E_{c1} - E_{f1}] \tag{4.48}$$

Từ công thức (4.48), $E_f - E_c = \frac{h^2}{2m^*}\left(\frac{3n}{8\pi}\right)^{2/3}$ ta có thể viết:

$$U_i = \frac{h^2}{2e}\left(\frac{3}{8\pi}\right)^{2/3}\left(\frac{n_2^{2/3}}{m_2^*} - \frac{n_1^{2/3}}{m_1^*}\right) \tag{4.49}$$

Rõ ràng sự tồn tại U_i là để triệt tiêu dòng khuếch tán điện tử qua biên giới do sự chênh lệch nồng độ giữa hai kim loại, nếu $m_1^* = m_2^*$ và $n_1 = n_2$ thì ta có $U_i = 0$. Chính do sự tồn tại hiệu thế tiếp xúc trong U_i mà xuất hiện các hiệu ứng nhiệt điện như hiệu ứng Seebeck, Peltier.

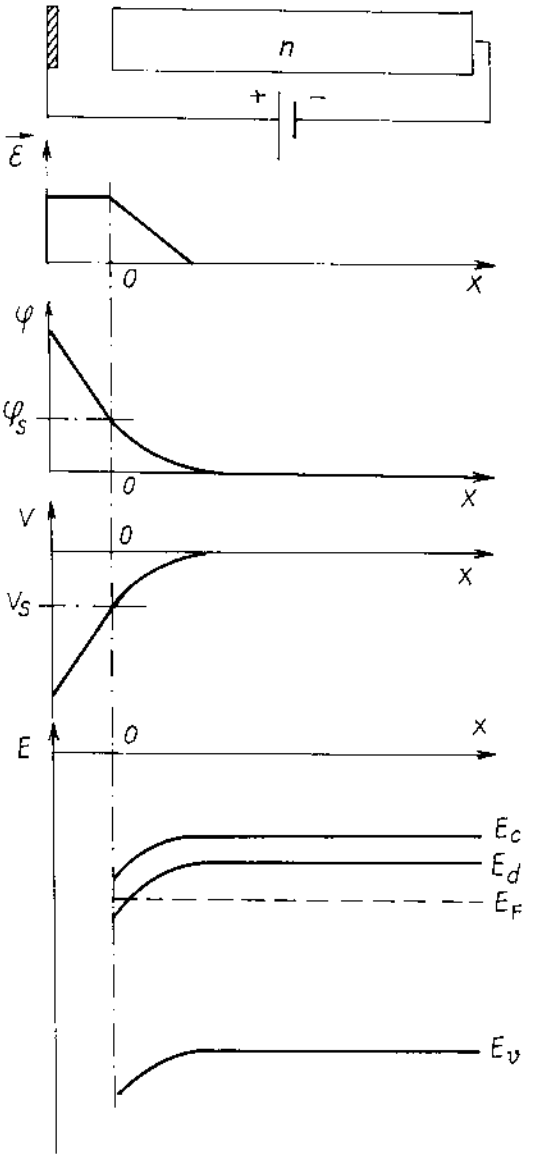
4.7.3 Hiệu ứng trường. Sự uốn cong vùng năng lượng của bán dẫn trong điện trường. Xét một mẫu bán dẫn, ví dụ, loại n, đặt trong điện trường đều của một tụ điện phẳng như ở hình (4.15).

Dưới tác dụng của điện trường, nồng độ hạt dẫn sẽ phân bố lại, làm xuất hiện mật độ điện tích $\rho(\vec{r})$. Mật độ điện tích $\rho(\vec{r})$ phụ thuộc vào cường độ điện trường theo phương trình Poisson

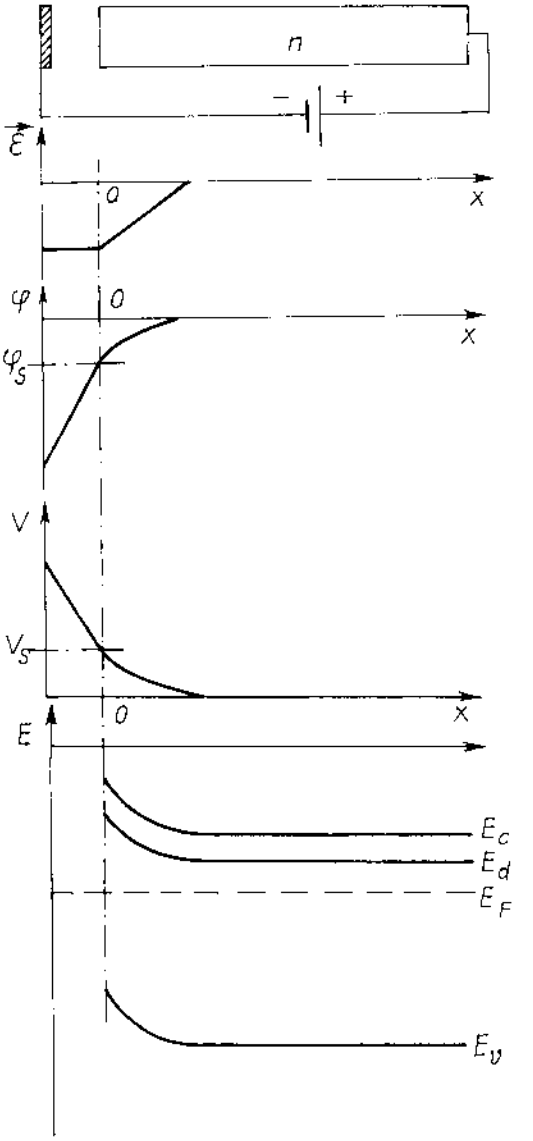
$$\mathrm{div}\epsilon\epsilon_0\vec{\mathcal{E}} = \rho(\vec{r})$$

hay là $\nabla^2\varphi(\vec{r}) = -\frac{\rho(\vec{r})}{\epsilon\epsilon_0}$. Trong đó φ là điện thế, $\vec{\mathcal{E}} = -\nabla\varphi$. Thế năng điện tử được tính bởi công thức $V(\vec{r}) = -e\varphi(\vec{r})$. Từ phần trước chúng ta đã thấy rằng trường thế bên ngoài sẽ làm thay đổi các mức năng lượng $E(\vec{r}) = E + V(\vec{r})$. Tất cả các mức năng lượng đều chịu sự thay đổi như nhau:

$$E_c(\vec{r}) = E_c + V(\vec{r})$$



Hình 4.15: *Sự uốn cong vùng năng lượng của bán dẫn trong điện trường* $\mathcal{E} > 0$.



Hình 4.16: *Sự uốn cong vùng năng lượng của bán dẫn trong điện trường* $\mathcal{E} < 0$.

$$E_v(\vec{r}) = E_v + V(\vec{r})$$
$$E_d(\vec{r}) = E_d + V(\vec{r})$$
$$E_a(\vec{r}) = E_a + V(\vec{r})$$

Nếu chất bán dẫn nằm trong trạng thái cân bằng thì mức Fermi đồng đều trong toàn mẫu. Từ đó suy ra

$$E_c - E_f \longrightarrow E_c + V(\vec{r}) - E_f$$
$$E_f - E_v \longrightarrow E_f - (E_v + V(\vec{r})).$$

Khoảng cách giữa E_c và E_f tăng một lượng $V(\vec{r})$ thì khoảng cách giữa E_f và E_v giảm một lượng $V(\vec{r})$. Sự thay đổi này chỉ ra rằng nồng độ điện tử n và nồng độ lỗ trống p đã thay đổi, dẫn đến sự thay đổi độ dẫn. Đó chính là hiệu ứng trường. Ta xét một cách định lượng hiệu ứng này dưới đây (xem hình (4.15) và(4.16)).

$$n(x) = N_c e^{-(E_c(x)-E_F)/kT} = n_0 e^{-V(x)/kT}$$
$$\rho(x) = e[n_0 - n_0 e^{-V(x)/kT}] = en_0(1 - e^{-V(x)/kT}).$$

Thay vào phương trình Poisson, ta có

$$\frac{d^2\varphi}{dx^2} = -\frac{\rho(x)}{\epsilon\epsilon_0} = -\frac{en_0}{\epsilon\epsilon_0}(1 - e^{-V(x)/kT})$$

Chuyển sang phương trình đối với thế năng, $V(x) = -e\varphi(x)$

$$\frac{d^2V(x)}{dx^2} = \frac{e^2 n_0}{\epsilon\epsilon_0}(1 - e^{-V(x)/kT}) \tag{4.50}$$

Vì $V(x)$ nhỏ hơn kT nên ta có thể phân tích vế phải của (4.50) vào chuỗi Taylor và lấy gần đúng đến số hạng thứ hai, ta có

$$\frac{d^2V(x)}{dx^2} = \frac{e^2 n_0}{\epsilon\epsilon_0}\frac{V(x)}{kT} = \frac{\rho(x)e}{\epsilon\epsilon_0} \tag{4.51}$$

Lấy điều kiện biên $V(0) = V_s$; $V(\infty) = 0$, ta có

$$V(x) = V_s \cdot e^{-x/L_d}, \quad \text{với} \quad L_d = \sqrt{\frac{\epsilon\epsilon_0 kT}{n_0 e^2}} \tag{4.52}$$

Từ đây ta thấy dưới tác dụng của điện trường mức năng lượng bị uốn cong, độ uốn cong trên bề mặt là lớn nhất bằng V_s và giảm theo hàm mũ khi đi vào trong lòng chất bán dẫn. Điện trường chỉ thấm vào trong chất bán dẫn đến một độ sâu đặc trưng bằng L_d phụ thuộc vào nồng độ hạt dẫn cơ bản, L_d là khoảng chắn Debye.

4.7.4 Tiếp xúc kim loại-bán dẫn loại *n*. Cũng giống như tiếp xúc giữa kim loại và kim loại, do kết quả của sự trao đổi điện tử giữa kim loại và bán dẫn xuất hiện một hiệu điện thế tiếp xúc ngoài

$$U_K = \frac{1}{e}(\Phi_M - \Phi_S) \tag{4.53}$$

Tuy nhiên vì điện trường tiếp xúc sẽ thâm nhập vào chất bán dẫn đến một độ sâu nhất định và làm cho vùng năng lượng của bán dẫn ở lớp giáp ranh có sự uốn cong nên tiếp xúc kim loại-bán dẫn có những đặc điểm riêng.

1. Tiếp xúc kim loại-bán dẫn loại n với $\Phi_S < \Phi_M$. Công thoát của bán dẫn nhỏ hơn công thoát kim loại. Vì công thoát bán dẫn nhỏ hơn nên khi tiếp xúc dòng điện tử từ bán dẫn đi sang kim loại nhiều hơn dòng ngược lại và khi cân bằng, bán dẫn tích điện dương, kim loại tích điện âm, xuất hiện trên tiếp xúc một điện trường tiếp xúc hương từ bán dẫn sang kim loại, và thế năng của bán dẫn hạ thấp dần từ mặt phân cách đi sâu vào, hay nói cách khác mức năng lượng của điện tử trên bề mặt cong lên như trong hiệu ứng trường, nồng độ điện tử trong lớp giáp ranh phía bán dẫn giảm xuống. Vì điện tử ở đây là hạt dẫn cơ bản nên độ dẫn của lớp này giảm xuống. Ta nói trong lớp giáp ranh tạo thành lớp nghèo hạt dẫn cơ bản.

Tiếp xúc trong trường hợp này gọi là tiếp xúc đóng. Cần lưu ý rằng mặc dầu mật độ điện tích bề mặt phía kim loại trên biên giới bằng mật độ điện tích bề mặt phía bán dẫn (nhưng trái dấu) bề dày lớp điện tích địa phương bên bán dẫn (ký hiệu W_S) lớn hơn rất nhiều bề dày lớp điện tích bên kim loại (ký hiệu W_M), như ở hình (4.17). Đó là vì nồng độ điện tử trong kim loại lớn hơn rất nhiều nồng độ hạt dẫn trong bán dẫn.

Mật độ điện tích dương trong lớp giáp ranh phía bán dẫn với "gần đúng lớp nghèo" có thể viết.

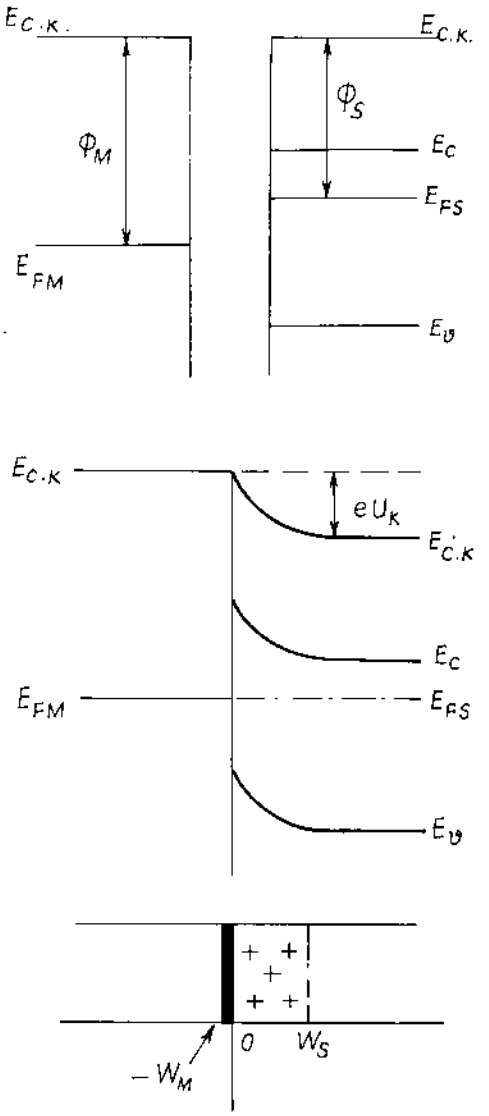
$$\rho = eN_d^+ = eN_d = en_0$$

Phương trình Poisson trong lớp này có thể viết

$$\frac{d^2\varphi}{dx^2} = -\frac{en_0}{\epsilon\epsilon_0} \tag{4.54}$$

Ta có thể thiết lập điều kiện biên như sau:

- Tại $x = W_s : \varphi(W_s) = 0 \quad \vec{\mathcal{E}}(W_s) = -\left.\frac{d\varphi}{dx}\right|_{W_s} = 0.$
- Tại $x = 0 : \varphi(0) = U_K = \frac{1}{e}(\Phi_S - \Phi_M).$



Hình 4.17: *Tiếp xúc kim loại-bán dẫn loại n với* $\Phi_S < \Phi_M$.

Tích phân phương trình (4.54) ta có:

$$\frac{d\varphi}{dx} = [en_0/\epsilon\epsilon_0](W_S - x)$$
$$\varphi = -\frac{en_0}{2\epsilon\epsilon_0}(W_s - x)^2.$$

Ứng dụng điều kiện biên $\varphi(0) = U_K$, ta có

$$W_s = \sqrt{\frac{2\epsilon\epsilon_0 U_K}{en_0}} = \sqrt{\frac{2\epsilon\epsilon_0(\Phi_s - \Phi_M)}{n_0 e^2}} \tag{4.55}$$

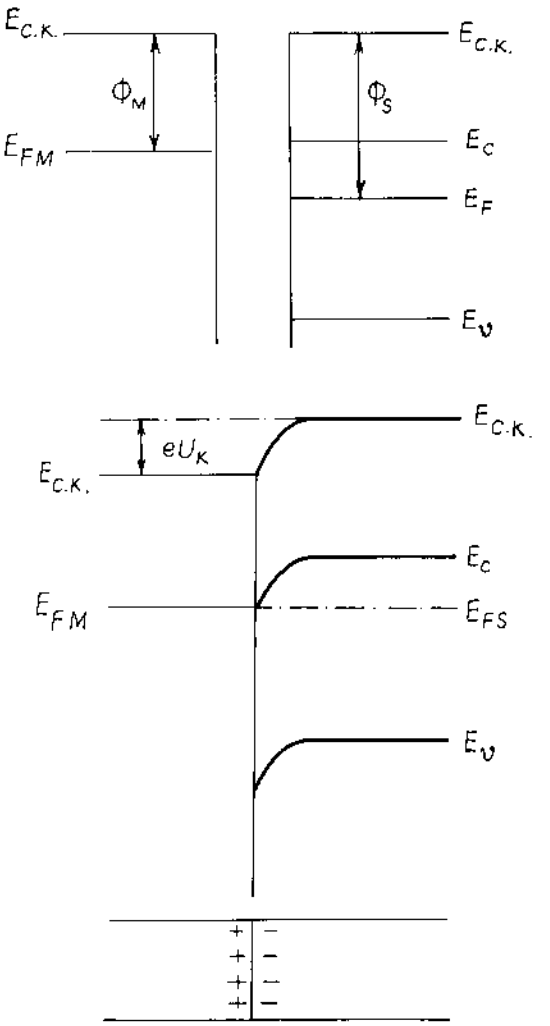
2. *Trường hợp tiếp xúc kim loại-bán dẫn loại n với* $\Phi_s > \Phi_M$. Tiếp xúc được biểu diễn ở hình (4.18). Cũng lý luận tương tự, trong trường hợp này bán dẫn tích điện âm, kim loại tích điện dương. Trường tiếp xúc hướng từ kim loại sang bán dẫn. Thế năng điện tử trong bán dẫn tăng lên. Các mức năng lượng cong xuống. Nồng độ điện tử (hạt cơ bản) trên lớp ranh giới tăng lên. Độ dẫn lớp này tăng lên và tiếp xúc gọi là tiếp xúc mở. Lớp ranh giới phía bán dẫn gọi là lớp giàu hạt dẫn cơ bản bề dày W_s thường không lớn.

4.7.5 Tiếp xúc kim loại-bán dẫn loại *p*. Chúng ta xét tương tự như trên hai trường hợp $\Phi_M < \Phi_S$ và trường hợp $\Phi_M > \Phi_s$ bằng các sơ đồ trên hình (4.19).

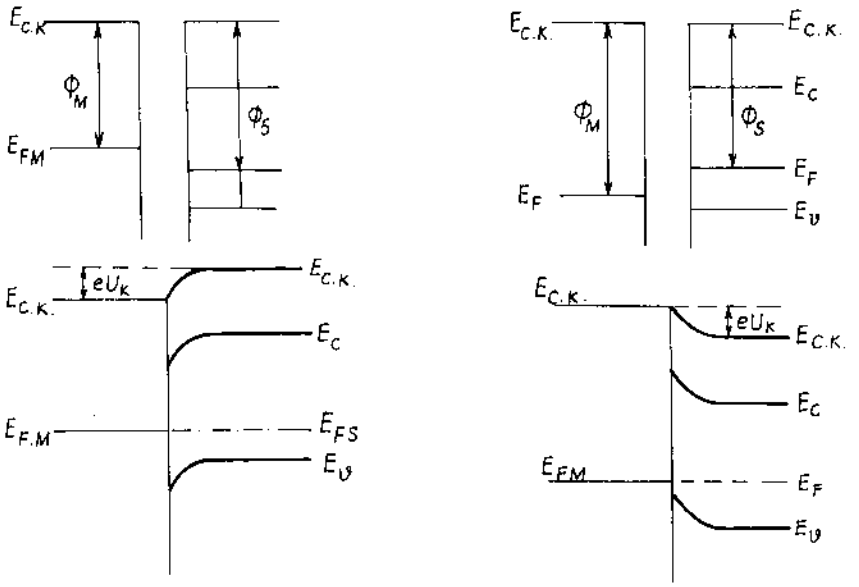
1. *Trường hợp tiếp xúc kim loại-bán dẫn loại p, với* $\Phi_M < \Phi_S$. Ở đây kim loại tích điện dương, bán dẫn tích điện âm, điện trường tiếp xúc hướng từ kim loại sang bán dẫn, thế năng điện tử trong bán dẫn tăng lên, mức năng lượng cong xuống, trên lớp ranh giới phía bán dẫn hình thành lớp nghèo hạt dẫn cơ bản là lỗ trống. Tiếp xúc là tiếp xúc đóng.

2. *Trường hợp tiếp xúc kim loại-bán dẫn loại p với* $\Phi_M > \Phi_S$. Ở đây kim loại tích điện âm, bán dẫn tích điện dương, điện trường tiếp xúc hướng từ bán dẫn sang kim loại, thế năng điện tử trong bán dẫn giảm xuống, mức năng lượng cong lên, trên lớp bán dẫn gần biên giới hình thành lớp giàu hạt dẫn cơ bản, lỗ trống. Tiếp xúc là tiếp xúc mở.

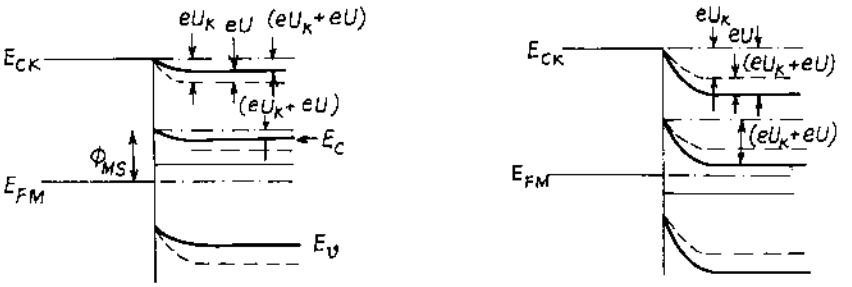
Các tiếp xúc mở có đặc tuyến $V - A$ loại ômic, nghĩa là dòng điện phụ thuộc gần như tuyến tính vào điện áp, các tiếp xúc đóng có đặc tính chỉnh lưu, đặc tuyến $V - A$ không tuyến tính.



Hình 4.18: *Tiếp xúc kim loại-bán dẫn loại n với* $\Phi_S > \Phi_M$.



Hình 4.19: *Tiếp xúc kim loại-bán dẫn loại p: a- $\Phi_S < \Phi_M$, b- $\Phi_S > \Phi_M$.*



Hình 4.20: *Sơ đồ tiếp xúc kim loại-bán dẫn: a- với thiên áp thuận, b- với thiên áp ngược.*

4.7.6 Đặc tuyến V-A của các tiếp xúc đóng kim loại-bán dẫn. Chúng ta xét tính chỉnh lưu, đặc tuyến V-A của tiếp xúc đóng, nghĩa là tiếp xúc kim loại-bán dẫn loại n với $\Phi_M > \Phi_S$, hoặc tiếp xúc kim loại-bán dẫn loại p với $\Phi_M < \Phi_S$.

Có hai lý thuyết chính về đặc trưng V-A của tiếp xúc kim loại-bán dẫn. Thuyết thứ nhất là thuyết điôt ứng dụng cho trường hợp bề dày lớp nghèo W_S mỏng. Trong trường hợp ngược lại W_S dày, người ta dùng thuyết khuếch tán. Tuy nhiên ở đây để đơn giản chúng ta chỉ xét thuyết điôt.

Thuyết điôt dựa trên giả thuyết bề dày lớp nghèo nhỏ hơn quãng đường chuyển động tự do trung bình của điện tử (hay lỗ trống) và cho rằng dòng điện qua lại ranh giới tiếp xúc là dòng nhiệt phát xạ điện tử.

Trong điều kiện cân bằng khi thiên áp (điện áp bên ngoài đặt vào tiếp xúc) bằng không, dòng nhiệt phát xạ điện tử J_{mso} từ kim loại sang bán dẫn bằng dòng nhiệt phát xạ J_{smo} từ bán dẫn sang kim loại, nghĩa là

$$J_{\text{mso}} = J_{\text{smo}}$$

Khi có thiên áp ngoài đặt vào dòng nhiệt phát xạ điện tử từ bán dẫn sang kim loại sẽ là

$$J_{\text{sm}} = AT^2 e^{-(eU_K + eU)}$$

Dòng J_{sm} này phụ thuộc vào chiều cao hàng rào tính từ đáy vùng dẫn E_c (trong bán dẫn loại n), chiều cao hàng rào lại thay đổi theo điện áp ngoài đặt vào U như ở hình (4.20).

Dòng điện tổng cộng theo chiều từ kim loại sang bán dẫn là

$$J = J_{\text{ms}} - J_{\text{sm}} = J_{\text{ms}} - AT^2 e^{-(\frac{eU_K + eU}{kT})}$$

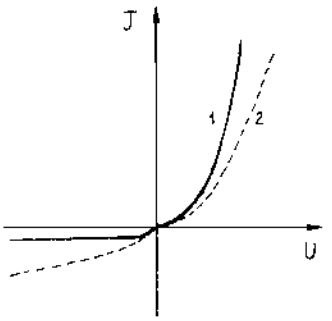
Từ hình (4.20) chúng ta nhận thấy rằng dòng J_{ms} là dòng nhiệt phát xạ điện tử từ kim loại sang bán dẫn, chỉ phụ thuộc vào rào thế Φ_{MS}, mà rào thế này không phụ thuộc vào thiên áp bên ngoài, nên ta có:

$$J_{\text{ms}} = J_{\text{mso}} = J_{\text{smo}} = AT^2 e^{-\frac{eU_K}{kT}}$$

Vậy ta có

$$J = AT^2 e^{-\frac{eU_K}{kT}} - AT^2 e^{-\frac{eU_K + eU}{kT}}$$

$$J = AT^2 e^{-\frac{eU_K}{kT}} (1 - e^{-\frac{eU}{kT}}) = J_S(1 - e^{-\frac{eU}{kT}}) \qquad (4.56)$$



Hình 4.21: *Đặc tuyến V-A của tiếp xúc kim loại bán dẫn.*

Nếu chúng ta chú ý đến chiều của thiên áp và chiều của dòng điện thì có thể viết lại công thức

$$J = J_S(e^{+\frac{eU}{kT}} - 1), \tag{4.57}$$

với $U > 0$ khi kim loại dương, bán dẫn âm. $J_S > 0$ chạy từ kim loại sang bán dẫn là dòng điện tích dương. Đường liền nét (1) hình (4.21) mô tả đặc tuyến V-A lý tưởng theo (4.57). Đường (2) mô tả đặc tuyến V-A thực tế thường gặp. Sự sai lệch này có nhiều nguyên nhân ta không có điều kiện đi sâu. Lý thuyết này cũng không giải thích được một số kết quả thực nghiệm quan trọng:

- Theo lý thuyết hệ số chỉnh lưu cao hơn 10 lần kết quả thực nghiệm.

- Theo lý thuyết mật độ dòng điện qua tiếp xúc phụ thuộc vào kim loại trong tiếp xúc, thực nghiệm cho thấy mật độ dòng ít phụ thuộc vào vật liệu kim loại.

4.8 Bán dẫn không đồng nhất, chuyển tiếp *p-n*

Từ trước đến nay chúng ta chỉ mới xét các bán dẫn đồng nhất, nghĩa là các bán dẫn trong đó thành phần, nồng độ tạp chất các loại đồng đều trong toàn mẫu. Trong mục này chúng ta xét các mẫu bán dẫn trong đó nồng độ tạp chất $N_d(\vec{r})$ hoặc $N_a(\vec{r})$ phụ thuộc vào toạ độ.

Vì nồng độ điện tử và nồng độ lỗ trống phụ thuộc vào nồng độ tạp chất $N_d(\vec{r})$ hoặc $N_a(\vec{r})$ cho nên bản thân nồng độ hạt dẫn cũng phụ thuộc vào toạ độ $n(\vec{r})$ và $p(\vec{r})$. Sự phụ thuộc nồng độ hạt dẫn vào toạ độ dẫn đến sự khuếch tán hạt dẫn. Sự khuếch tán hạt dẫn đưa đến sự hình thành các điện trường $\vec{\mathcal{E}}_i$ trong

mẫu, điện trường này gây nên các dòng điện cuốn làm triệt tiêu các dòng khuếch tán hạt dẫn. Trong điều kiện cân bằng khi mức Fermi đồng đều trong toàn mẫu thì sự tồn tại các điện trường trong mẫu sẽ gây nên sự uốn cong vùng năng lượng mà đáng chú ý nhất là các mức năng lượng E_c, E_v, E_d, E_a...

Trong điều kiện cân bằng, dòng điện tổng cộng trong mẫu bằng không và ta có thể viết

$$\vec{J} = \vec{J}_E + \vec{J}_D = 0 \tag{4.58}$$

Như vậy trong trường hợp nồng độ tạp chất không đồng đều trong mẫu sẽ xuất hiện một điện trường trong $\vec{\mathcal{E}}_i$.

Bây giờ chúng ta xét một trường hợp đặc biệt của bán dẫn không đồng nhất, đó là chuyển tiếp $p-n$.

4.8.1 Lớp chuyển tiếp *p-n*. Lấy một mẫu tinh thể bán dẫn một nửa pha tạp loại n, một nửa pha tạp loại p ta được một chuyển tiếp $p-n$. Trong thực tế chế tạo các linh kiện bán dẫn, ví dụ điôt bán dẫn, lớp chuyển tiếp được chế tạo theo công nghệ sau đây. Lấy một mẫu bán dẫn pha tạp loại p, chẳng hạn, với nồng độ các nguyên tử axepto bằng N_a, sau đó cho khuếch tán vào mẫu bán dẫn tạp chất đono với nồng độ đono $N_d > N_a$ từ một phía bề mặt mẫu. Như vậy trên bề mặt mẫu với độ sâu phụ thuộc vào quá trình khuếch tán ta có một lớp bán dẫn loại n, có nồng độ pha tạp $N'_d = (N_d - N_a)$ đóng vai trò như nồng độ tạp chất loại n. Còn lớp bán dẫn phía dưới là bán dẫn loại p có nồng độ pha tạp là $N'_a = (N_a - N_d)$. Rõ ràng sự phân bố tạp chất trong chuyển tiếp $p-n$ thực tế rất phức tạp. Tuy nhiên để đơn giản bài toán chúng ta sẽ xét một chuyển tiếp lý tưởng với sự phân bố tạp chất N_d và N_a có tính chất đột biến:

$$N_d(x) = \begin{cases} N_d & \text{khi} \quad x < 0 \\ 0 & \text{khi} \quad x > 0 \end{cases} \quad N_a(x) = \begin{cases} 0 & \text{khi} \quad x < 0 \\ N_a & \text{khi} \quad x > 0 \end{cases} \tag{4.59}$$

như biểu diễn trên hình (4.22a). Chuyển tiếp $p-n$ như thế gọi là chuyển tiếp đột biến, là một mô hình lý tưởng chỉ tồn tại trong thực tế một cách gần đúng. Bây giờ chúng ta lần lượt nghiên cứu các đại lượng đặc trưng cho chuyển tiếp.

4.8.2 Sự phân bố điện tích trong chuyển tiếp *p-n* đột biến. Với sự phân bố tạp chất như (4.22a) ta thấy rằng trong phần n của chuyển tiếp nồng độ điện tử lớn, trong phần p nồng độ lỗ trống lớn. Vì thế qua ranh giới có một dòng khuếch tán điện tử từ phần n sang phần p và có một dòng khuếch tán lỗ trống từ phần p sang phần n. Phần n mất bớt điện tử nhận thêm lỗ trống cho

nên tích điện dương, phần p mất bớt lỗ trống nhận thêm điện tử nên tích điện âm. Trong vùng giáp ranh vì thế xuất hiện một điện trường $\vec{\mathcal{E}}_i$ và giữa hai phần hình thành một hiệu điện thế tiếp xúc U_K. Điện trường $\vec{\mathcal{E}}_i$ gây nên dòng cuốn điện tử từ phần p sang phần n và dòng cuốn lỗ trống từ phần n sang phần p, nghĩa là ngược chiều các dòng khuếch tán và làm triệt tiêu các dòng khuếch tán. Trong vùng giáp ranh sẽ tồn tại một vùng điện tích địa phương, vùng này có nồng độ hạt dẫn rất nhỏ, có điện trở suất gần bằng bán dẫn riêng, nên gọi là vùng kém dẫn hay là vùng nghèo. Ta có thể tính được mật độ điện tích trong vùng kém dẫn một cách gần đúng như sau:

$$\begin{array}{lll} \text{Khi} \quad x<0 & \rho^+(x) = e[N_d + \frac{n_i^2}{N_d} e^{\frac{V(x)}{kT}}] & \text{với} \quad V(x)>0 \\ \text{Khi} \quad x>0 & \rho^-(x) = -e[N_a + \frac{n_i^2}{N_a} e^{\frac{-V(x)}{kT}}] & \text{với} \quad V(x)<0 \end{array} \tag{4.60}$$

Trong đó $V(x)$ là độ uốn cong vùng năng lượng do điện trường $\vec{\mathcal{E}}_i$ gây nên, tương tự như trong tiếp xúc kim loại-bán dẫn ở mục 4-5. Trong trường hợp nồng độ tạp chất N_d và N_a lớn ta có thể viết

$$\rho^+(x) = eN_d \quad \text{và} \quad \rho^-(x) = -eN_a \tag{4.61}$$

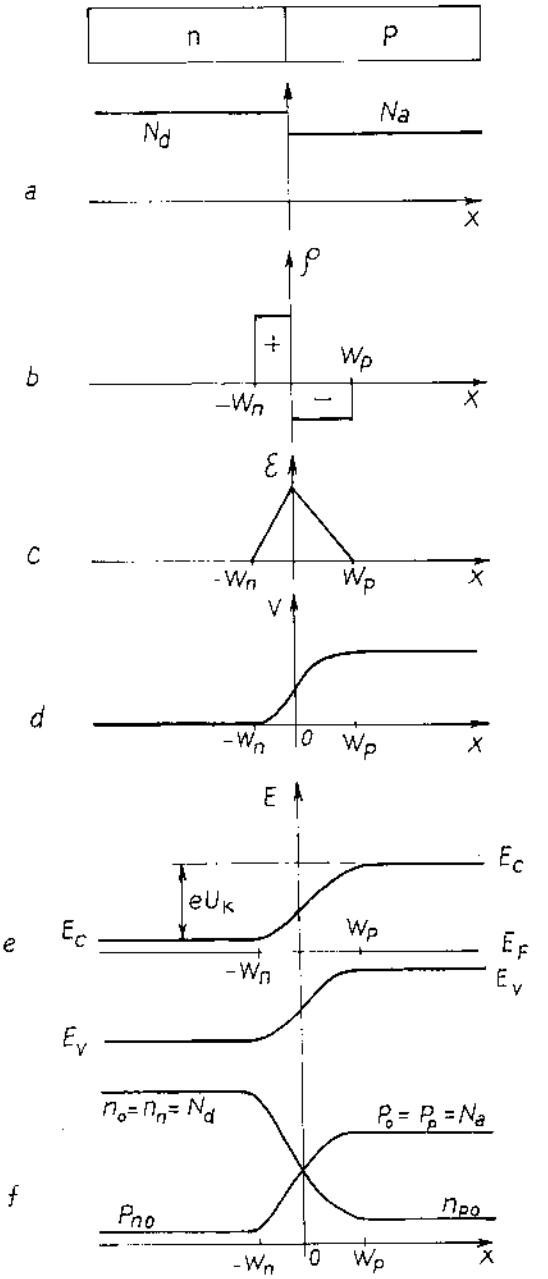
Kết quả cho thấy rằng ta có thể xem mật độ điện tích trong vùng điện tích địa phương là đồng đều và phụ thuộc vào nồng độ pha tạp trong từng phần, như biểu diễn ở hình (4.22b).

4.8.3 Điện trường trong lớp chuyển tiếp *p-n*. Từ việc nghiên cứu tiếp xúc kim loại-bán dẫn chúng ta cũng dễ hiểu rằng điện trường $\vec{\mathcal{E}}_i$ cũng chỉ thâm nhập vào hai phần p và n trong vùng giáp ranh mà thôi. Giả sử bề dày lớp điện tích địa phương trong phần n là W_n và trong phần p là W_p thì chúng ta có thể xem như điện trường ở tại các điểm $x = -W_n$ và $x = W_p$ là bằng không, nghĩa là

$$\left.\frac{dV(x)}{dx}\right|_{x=-W_n} = \left.\frac{dV(x)}{dx}\right|_{x=W_p} = 0 \tag{4.62}$$

Để tìm điện trường $\vec{\mathcal{E}}_i$ ta có thể dựa vào phương trình Poisson dưới dạng:

$$\begin{array}{lll} \dfrac{d^2V(x)}{dx^2} = \dfrac{e\rho^+(x)}{\epsilon\epsilon_0} = \dfrac{e^2}{\epsilon\epsilon_0}N_d, & \text{với} & -W_n < x < 0 \\ \dfrac{d^2V(x)}{dx^2} = \dfrac{e\rho^-(x)}{\epsilon\epsilon_0} = -\dfrac{e^2}{\epsilon\epsilon_0}N_a, & \text{với} & o < x < W_p \end{array} \tag{4.63}$$



Hình 4.22: *Chuyển tiếp p – n.*

Giải các phương trình (4.63) kết hợp với (4.62) ta có

$$\begin{aligned} &\text{khi} \quad -W_n < x < 0, \quad \vec{\mathcal{E}}_i = \frac{1}{e}\frac{dV(x)}{dx} = \frac{eN_d}{\epsilon\epsilon_0}(W_n + x) > 0 \\ &\text{khi} \quad 0 < x < W_p, \quad \vec{\mathcal{E}}_i = \tfrac{1}{e}\tfrac{dV(x)}{dx} = -\tfrac{eN_a}{\epsilon\epsilon_0}(x - W_p) > 0. \end{aligned} \tag{4.64}$$

Chúng ta nhận thấy rằng điện trường trong từng phần của chuyển tiếp thay đổi tuyến tính theo x và cực đại ở ranh giới. Từ điều kiện liên tục của điện trường ta có

$$\frac{eN_d}{\epsilon\epsilon_0}W_n = \frac{eN_a}{\epsilon\epsilon_0}W_p \quad \text{hay} \quad N_dW_n = N_aW_p \tag{4.65}$$

Trên hình (4.22c) biểu diễn sự phụ thuộc của cường độ điện trường $\mathcal{E}_i$ vào toạ độ x. Từ đây chúng ta thấy rằng bề dày của lớp điện tích địa phương trong từng phần của lớp chuyển tiếp $p-n$ tỷ lệ nghịch với nồng độ pha tạp phần đó.

4.8.4 Sơ đồ vùng năng lượng trong chuyển tiếp *p-n*. Khi chuyển tiếp $p-n$ nằm trong trạng thái cân bằng mức Fermi của hai phần p và n phải bằng nhau, nhưng các vùng năng lượng bị uốn cong.

Để xác định được những thay đổi của vùng năng lượng ta cần xác định thế năng $V(x)$. Chúng ta chọn gốc tọa độ của thế năng $V(x)$ là thế năng tại các điểm $x \leq -W_n$. Nghĩa là:

$$V(x) = 0 \quad \text{khi} \quad x \leq -W_n \quad \text{hay} \quad V(-W_n) = 0 \tag{4.66}$$

Với cách chọn gốc toạ độ như vậy ta có thể xác định thế năng tại các điểm $x \geq W_p$, $V(x) = eU_K$ hay $V(W_p) = eU_K$; eU_K chính là chiều cao hàng rào thế năng đối với điện tử từ phần n sang phần p do điện trường $\vec{\mathcal{E}}_i$ gây nên.

Giải phương trình (4.64) ta có:

$$\begin{aligned} V(x) &= \frac{e^2N_d}{2\epsilon\epsilon_0}(W_n + x)^2 + c_1 \quad \text{khi} \quad -W_n \leq x < 0 \\ V(x) &= -\frac{e^2N_a}{2\epsilon\epsilon_0}(x - W_p)^2 + c_2 \quad \text{khi} \quad 0 < x \leq W_p. \end{aligned}$$

Ứng dụng điều kiện biên $V(-W_n) = 0$ và $V(W_p) = eU_K$ ta có thể xác định được hai hằng số tích phân c_1, c_2 và lời giải bài toán là

$$\begin{aligned} V(x) &= \frac{e^2N_d}{2\epsilon\epsilon_0}(W_n + x)^2 = V_n(x) \qquad -W_n < x < 0 \\ V(x) &= -\tfrac{e^2N_a}{2\epsilon\epsilon_0}(x - W_p)^2 + eU_K = V_p(x) \qquad 0 < x < W_p \end{aligned} \tag{4.67}$$

Trên hình (4.22d) biểu diễn sự phụ thuộc của thế năng $V(x)$ trong chuyển tiếp $p-n$.

Từ điều kiện liên tục của $V(x)$ tại $x=0$ ta có thể xác định U_K, hiệu thế tiếp xúc ngoài của chuyển tiếp $p-n$:

$$\frac{e^2N_d}{2\epsilon\epsilon_0}W_n^2 = -\frac{e^2N_a}{2\epsilon\epsilon_0}W_p^2 + eU_K \text{hay là}$$
$$U_K = \frac{e}{2\epsilon\epsilon_0}(N_dW_n^2 + N_aW_p^2). \tag{4.68}$$

Ứng dụng (4.65) ta có

$$U_K = \frac{e}{2\epsilon\epsilon_0}N_dW_n(W_n+W_p) = \frac{e}{2\epsilon\epsilon_0}N_d^2W_n^2\left(\frac{1}{N_d}+\frac{1}{N_a}\right) \tag{4.69}$$

Chúng ta cũng có thể biểu diễn U_K qua công thoát của các phần n và phần p. Thật vậy, chúng ta có thể viết:

$$\begin{aligned} eU_K &= E_c(W_p) - E_c(-W_n) = (\eta_p - \eta_n) \\ &= (\mathcal{X}+\eta_p) - (\mathcal{X}+\eta_n) = \Phi_p - \Phi_n. \end{aligned} \tag{4.70}$$

Vậy độ cao của hàng rào thế năng eU_K bằng hiệu công thoát điện tử từ phần p và từ phần n, U_K chính là hiệu thế tiếp xúc ngoài giữa hai phần p và n. Trên hình (4.22e) biểu diễn vùng năng lượng của chuyển tiếp $p-n$.

4.8.5 Phân bố nồng độ hạt dẫn trong lớp chuyển tiếp *p-n*. Thay các giá trị Φ_p, Φ_n từ (4.46) và (4.45) vào (4.70) ta có:

$$eU_K = \Phi_p - \Phi_n = \Delta E_g + kT\ln\frac{N_a}{N_v} + kT\ln\frac{N_d}{N_c} \tag{4.71}$$

hay là

$$eU_K = \Delta E_g - kT\ln\frac{N_cN_v}{N_aN_d} \tag{4.72}$$

Thay $n_i^2 = N_cN_ve^{-\frac{\Delta E_g}{kT}}$, $\Delta E_g = kTln\frac{N_cN_v}{n_i^2}$.

$$eU_K = kT\ln\frac{N_cN_v}{n_i^2} - kT\ln\frac{N_cN_v}{N_aN_d} = kT\ln\frac{N_aN_d}{n_i^2} \tag{4.73}$$

Chúng ta giả thiết mẫu trong vùng nhiệt độ ion hoá tạp chất cho nên $N_a = p_0 = p_p$; $N_d = n_0 = n_n$, thay vào (4.73) ta có

$$eU_K = kT\ln\frac{n_np_p}{n_i^2} \tag{4.74}$$

Thay $n_i^2 = n_n p_n = p_p n_p$ vào (4.74) ta có

$$eU_K = kT \ln \frac{n_n}{n_p} = kT \ln \frac{p_p}{p_n} \tag{4.75}$$

Từ đây ta thấy hai phần bán dẫn càng pha tạp nhiều thì U_K càng lớn.

Bây giờ chúng có thể biểu diễn nồng độ hạt dẫn không cơ bản qua nồng độ hạt dẫn cơ bản:

$$p_n = p_p \exp(-\frac{eU_K}{kT}); \quad n_p = n_n \exp(-\frac{eU_K}{kT}) \tag{4.76}$$

Trên hình (4.22f) biểu diễn sự phân bố nồng độ hạt dẫn trong chuyển tiếp $p-n$. Nồng độ hạt dẫn chỉ thay đổi trong vùng giáp ranh từ $-W_n$ đến W_p. Vì vậy ta có thể viết hai điều kiện biên:

$$p_n(-W_n) = p_p \exp(-\frac{eU_K}{kT}) \tag{4.77}$$

$$n_p(W_p) = n_n \exp(-\frac{eU_K}{kT}). \tag{4.78}$$

4.8.6 Tính chỉnh lưu của chuyển tiếp *p-n*. Bây giờ chúng ta tìm đặc trưng V-A của chuyển tiếp $p-n$. Để đơn giản bài toán chúng ta đưa ra những giả thiết sau:

- Lớp chuyển tiếp mỏng $L_D > W = (W_n + W_p)$, có nghĩa là hạt dẫn đi qua vùng điện tích địa phương không bị tái hợp, L_D là độ dài khuếch tán của hạt dẫn.

- Hai phần p và n của chuyển tiếp pha tạp mạnh, nghĩa là

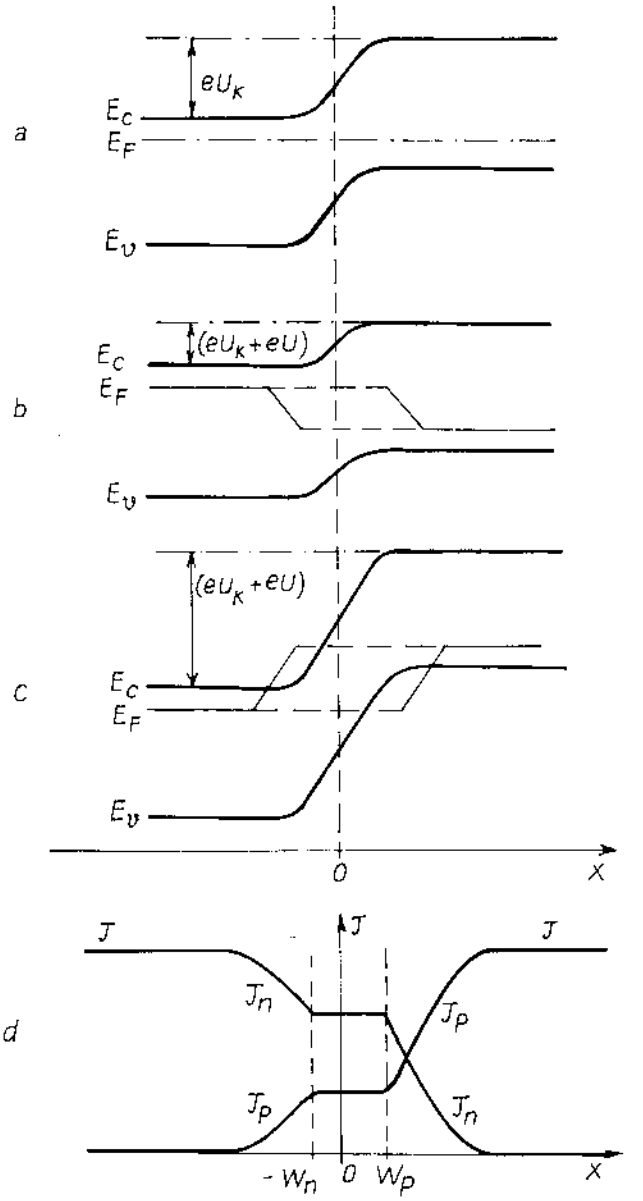
$$p_p = p_0 \gg n_i; \quad n_n = n_0 \gg n_i$$

- Không có hiện tượng tái hợp bề mặt.

- Điện áp đặt vào chuyển tiếp chỉ gây sụt thế trên lớp kém dẫn của chuyển tiếp, các tiếp xúc kim loại với hai phần p, n của chuyển tiếp có tính ômic và không ảnh hưởng đến tính chất của chuyển tiếp.

Trên hình (4.23a) biểu diễn sơ đồ vùng năng lượng trong trường hợp cân bằng, khi chưa đặt điện áp ngoài vào.

Bây giờ chúng ta đặt vào chuyển tiếp $p-n$ một điện áp U, cực âm của nguồn nối với phần n, cực dương nối với phần p. Điện trường ngoài trong trường hợp này ngược chiều với điện trường trong $\vec{\mathcal{E}}_i$ vì thế hàng rào thế năng trên chuyển tiếp giảm xuống một lượng bằng eU. Vì hàng rào thế năng thấp



Hình 4.23: *Chuyển tiếp p – n.*

xuống nên dòng khuếch tán của điện tử và lỗ trống tăng lên. Dòng điện qua chuyển tiếp trong trường hợp này là dòng khuếch tán của hạt dẫn cơ bản (điện tử bên phần n, lỗ trống bên phần p) nên mật độ dòng lớn.

Nếu đặt điện áp ngoài theo chiều ngược lại (cực dương nối với phần n, cực âm nối với phần p) thì hàng rào thế năng sẽ được nâng cao lên, nồng độ hạt dẫn cơ bản sẽ bị đẩy ra xa vùng ranh giới. Khi đó hầu như chỉ có hạt dẫn không cơ bản chuyển động cuốn qua biên giới và gây nên dòng ngược. Nhưng vì nồng độ hạt dẫn không cơ bản rất nhỏ nên dòng ngược rất nhỏ so với dòng thuận. Chính vì vậy chuyển tiếp $p-n$ có tính chỉnh lưu. Trên hình (4.23b,c) biểu diễn trường hợp có thiên áp. Để tìm đặc trưng V-A chúng ta dùng phương trình liên tục trong chế độ dừng và trường hợp bài toán một chiều:

$$\begin{aligned} &\frac{1}{e_p}\frac{\partial J_p}{\partial x} + \frac{\delta p}{\tau_p} = 0 \\ &\frac{1}{e_n}\frac{\partial J_n}{\partial x} + \frac{\delta_n}{\tau_n} = 0. \end{aligned} \tag{4.79}$$

với τ_n, τ_p là thời gian sống của điện tử và lỗ trống, $\delta n, \delta p$ là nồng độ dư của điện tử và lỗ trống với điều kiện biên là:

$$J_p|_{x=W_p} = J_p|_{x=-W_n}; \quad J_n|_{x=-W_n} = J_n|_{x=W_p} \tag{4.80}$$

Bây giờ ta xét riêng thành phần dòng điện do lỗ trống gây nên J_p, trong dạng tổng quát J_p bằng:

$$J_p = e_p p \mu_p \mathcal{E} + e_p D_p \frac{dp}{dx} \tag{4.81}$$

Trong phần p của chuyển tiếp dòng lỗ trống chủ yếu là dòng cuốn vì lỗ trống ở đây là hạt dẫn cơ bản $p_0 = p_p \gg \delta_p$, nghĩa là khi $x > W_p$,

$$J_p = e_p p \mu_p \mathcal{E} \tag{4.82}$$

Ngược lại trong phần n, nồng độ lỗ trống bằng

$$p(x) = p_n + \delta p \tag{4.83}$$

trong đó p_n là nồng độ lỗ trống, hạt dẫn không cơ bản trong trường hợp cân bằng (không có điện áp ngoài), δp là nồng độ lỗ trống dư phun từ phần p sang phần n do đặt điện áp ngoài. Vì p_n rất nhỏ nên trong phần n dòng lỗ trống chủ yếu là dòng khuếch tán và bằng

$$J_p = -e_p D_p \frac{dp}{dx} \quad \text{khi} \quad x < -W_n \tag{4.84}$$

với D_p là hệ số khuếch tán của lỗ trống trong phần n. Trong phần n ta có phương trình liên tục

$$\frac{1}{e_p}\frac{dJ_p}{dx} + \frac{\delta p}{\tau_p} = 0 \quad \text{với} \quad x < -W_n \tag{4.85}$$

Thay (4.84) vào (4.85) ta có

$$\frac{d^2p}{dx^2} - \frac{\delta p}{D_p\tau_p} = 0 \quad \text{với} \quad x < -W_n \tag{4.86}$$

Lời giải tổng quát của phương trình này có dạng:

$$(p(x) - p_n) = \delta p = A\exp(-\frac{x}{L_p}) + B\exp(\frac{x}{L_p}) \tag{4.87}$$

trong đó A, B là hằng số tích phân, $L_p = \sqrt{D_p\tau_p}$ là độ dài khuếch tán. Ta thấy rằng khi $x = -\infty$ thì $\delta p \longrightarrow \infty$ vì thế phải chọn $A = 0$. Khi có điện áp ngoài hàng rào thế năng eU_K trở thành $(eU_K - eU)$ và vì thế nồng độ lỗ trống tại $x = -W_n$ theo (4.77) bằng:

$$p(-W_n) = p_p\exp(-\frac{eU_K - eU)}{kT}) = p_n\exp(\frac{eU}{kT}) \tag{4.88}$$

Ứng dụng điều kiện (4.88) vào (4.87) ta tính được B:

$$B = p_n\left[\exp(\frac{eU}{kT}) - 1\right]\exp\frac{W_n}{L_p} \tag{4.89}$$

Thay giá trị B vào (4.87) ta có

$$p(x) = p_n + \delta p = p_n + p_n[\exp\frac{eU}{kT} - 1]\exp\frac{x + W_n}{L_p}; \text{ với } x < -W_n \tag{4.90}$$

Từ (4.90) ta dễ dàng tính được dòng lỗ trống trong phần n, đó chính là thành phần khuếch tán.

$$J_p = -\frac{e_pD_pp_n}{L_p}\left[\exp(\frac{eU}{kT}) - 1\right]\exp\frac{x + W_n}{L_p} \tag{4.91}$$

Tại $x = -W_n$ ta có

$$J_{p|x=-W_n} = -\frac{e_pD_pp_n}{L_p}\left[\exp(\frac{eU}{kT}) - 1\right] \tag{4.92}$$

Cũng tiến hành tương tự ta cũng tính được mật độ dòng điện tử tại $x = W_p$

$$J_{n|x=W_p} = \frac{-e_n D_n n_p}{L_n}\left[\exp(\frac{eU}{kT}) - 1\right] \tag{4.93}$$

Từ điều kiện (4.80) ta có thể viết được công thức mật độ dòng điện chạy qua chuyển tiếp.

$$J = J_p(-W_n) + J_n(-W_n) = J_p(-W_n) + J_n(W_p) \tag{4.94}$$

Thay các giá trị đã có (4.92) và (4.93) vào (4.94) ta có:

$$J = -e_p\left[\frac{D_n n_p}{L_n} + \frac{D_p p_n}{L_p}\right]\left[\exp(\frac{eU}{kT}) - 1\right] \tag{4.95}$$

Nếu lấy chiều dương của dòng điện là chiều từ p sang n và trục x hướng từ n sang p ta có

$$J = e_p\left[\frac{D_n n_p}{L_n} + \frac{D_p p_n}{L_p}\right]\left[\exp(\frac{eU}{kT}) - 1\right] \tag{4.96}$$

hay là

$$J = J_s\left[\exp(\frac{eU}{kT}) - 1\right] \tag{4.97}$$

trong đó

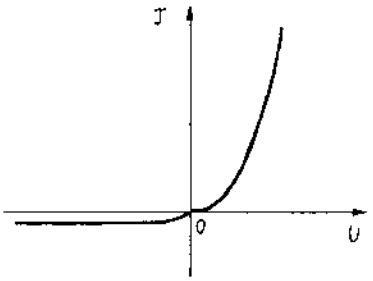
$$J_s = J_{sn} + J_{sp} = e_p\left[\frac{D_n n_p}{L_n} + \frac{D_p p_n}{L_p}\right] = en_i^2\left[\frac{D_n}{L_n p_0} + \frac{D_p}{L_p n_0}\right]$$

$$J_s = e\left[\frac{n_p L_n}{\tau_n} + \frac{p_n L_p}{\tau_p}\right] \tag{4.98}$$

Biểu thức (4.97) chính là đặc trưng V-A của chuyển tiếp $p - n$. Trên hình (4.24) biểu diễn đặc tuyến V-A lý tưởng của chuyển tiếp $p - n$.

4.8.7 Bề dày lớp chuyển tiếp *p-n*. Như trên đây đã nói vùng giáp ranh giữa phần n và phần p của chuyển tiếp $p - n$ có một lớp điện tích địa phương, trong lớp này nồng độ hạt dẫn cơ bản rất thấp nên lớp đó còn gọi là lớp nghèo hay lớp kém dẫn. Bề dày lớp kém dẫn trong phần n là W_n trong phần p là W_p. Bề dày tổng cộng $W = W_n + W_p$. Trong điều kiện cân bằng từ (4.69) ta co thể tính được W:

$$W = W_n + W_p = \sqrt{\frac{2\epsilon\epsilon_0(N_a + N_d)U_K}{e^2 N_a N_d}} \tag{4.99}$$



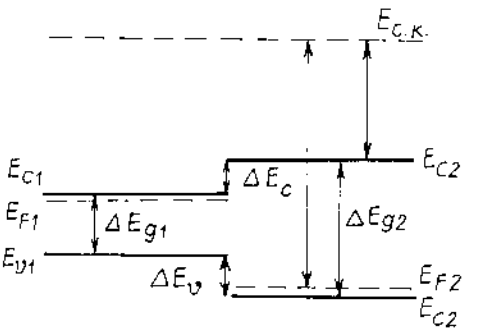
Hình 4.24: *Đặc tuyến V-A của chuyển tiếp $p-n$.*

Trong trường hợp có điện áp ngoài đặt vào hàng rào thế năng eU_K trở thành $e(U_K+U)$, ta có thể tính được bề dày lớp điện tích địa phương

$$W(U)=\sqrt{\frac{2\epsilon\epsilon_0(N_a+N_d)}{e^2N_aN_d}(U_K+U)} \tag{4.100}$$

Chúng ta thấy rằng bề dày lớp kém dẫn phụ thuộc vào điện áp ngoài đặt vào, nó giảm xuống khi đặt thiên áp thuận và tăng lên khi đặt thiên áp ngược. Vì phần n và phần p đều pha tạp mạnh có độ dẫn điện cao, nên lớp chuyển tiếp $p-n$ có thể xem như một tụ điện mà lớp kém dẫn đóng vai trò lớp điện môi. Bề dày lớp kém dẫn có thể thay đổi được bằng cách thay đổi điện áp đặt vào nên lớp chuyển tiếp $p-n$ là tụ điện có điện dung biến đổi được. Tính chất này đã được ứng dụng để chế tạo các varicap, những điôt thông số ứng dụng trong các mạch khuếch đại thông số. Như đã nói ở trên khi điện áp ngược tăng lên, dòng điện dẫn tới một giá trị bão hoà J_S và hầu như không đổi khi điện áp ngược tiếp tục tăng. Khi điện áp ngược tăng lên, bề rộng lớp kém dẫn tăng lên, nhưng điện trường trong lớp đó cũng tăng lên, điện trường đó có thể đánh giá bằng $\mathcal{E}_i=\frac{U}{W}$. Khi điện áp ngược tăng đến một giá trị nhất định U_B thì dòng điện tăng lên rất mạnh đó chính là hiện tượng đánh thủng lớp chuyển tiếp $p-n$. Đánh thủng lớp chuyển tiếp $p-n$ có thể do các nguyên nhân sau:

- Hiện tượng ion hoá do va chạm: hạt dẫn không cơ bản chuyển động cuốn trong vùng điện tích địa phương dưới tác dụng của điện trường cao có thể thu được một năng lượng cao có khả năng gây ra hiện tượng ion hoá do va chạm, phát sinh các hạt dẫn mới. Hiện tượng ion hoá có thể làm phát sinh một nồng độ hạt dẫn tự do lớn theo cơ chế "phản ứng dây chuyền" và được gọi là hiện



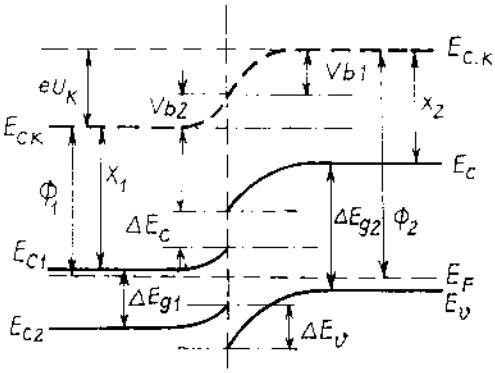
Hình 4.25: *Sơ đồ năng lượng hai tinh thể trước khi tiếp xúc.*

tượng thác lũ (Avalanche Multiplication).

- Hiệu ứng đường ngầm cũng làm tăng vọt nồng độ hạt dẫn tự do khi điện trường trong lớp chuyển tiếp $p-n$ đạt giá trị cực đại $\mathcal{E}_S$. Hiệu ứng đường ngầm đã được nghiên cứu ở chương II và chương III.

- Hiện tượng đánh thủng do nhiệt, đó là hiện tượng phá hủy lớp chuyển tiếp $p-n$ khi nhiệt lượng toả ra ở chuyển tiếp quá lớn không giải thoát được. Dòng ngược qua chuyển tiếp tuy nhỏ nhưng nếu điện áp ngược cao thì công suất dòng điện sinh ra là $(I_{inv} \times U)$ có thể lớn, nếu quá trình phân tán nhiệt không kịp sẽ làm nóng và dẫn đến phá huỷ chuyển tiếp $p-n$.

4.8.8 Chuyển tiếp dị chất. Cho đến nay ta chỉ mới xét loại chuyển tiếp $p-n$ đồng chất, nghĩa là chuyển tiếp mà trong đó phần n và phần p đều từ một đơn tinh thể. Từ năm 1951 người ta bắt đầu nghiên cứu một loại chuyển tiếp $p-n$ mới, đó là chuyển tiếp $p-n$ dị chất. Chuyển tiếp $p-n$ dị chất là chuyển tiếp $p-n$ được cấu tạo từ hai loại tinh thể bán dẫn khác nhau, ví dụ germani loại n với gali-asenua loại p, chuyển tiếp dị chất có nhiều tính chất quan trọng được ứng dụng đặc biệt trong các linh kiện quang điện tử. Chuyển tiếp dị chất thường được chế tạo bằng phương pháp epitaxy. Trong mục này chúng ta chỉ khảo sát những nét cơ bản nhất của chuyển tiếp $p-n$ dị chất. Trên hình (4.25) biểu diễn sơ đồ năng lượng của hai mẫu bán dẫn riêng biệt loại n và loại p (trước khi chúng tiếp xúc với nhau). Hai phần bán dẫn loại n và loại p có bề rộng vùng cấm khác nhau ΔE_{g1} và ΔE_{g2}, có hằng số điện môi tương đối ϵ khác nhau, có ái lực hoá học $\mathcal{X}$ khác nhau, có công thoát điện tử khác nhau.



Hình 4.26: *Sơ đồ năng lượng chuyển tiếp dị chất.*

Độ chênh lệch hai đáy vùng dẫn ký hiệu $\delta E_c = E_{C_2} - E_{C_1}$ và hai đỉnh vùng hoá trị là $\delta E_v = E_{v_2} - E_{v_1}$. Từ hình (4.26) ta thấy

$$\delta E_c = \mathcal{X}_1 - \mathcal{X}_2 \tag{4.101}$$

Hình (4.26) biểu diễn sơ đồ năng lượng của chuyển tiếp $p - n$ dị chất đột biến lý tưởng giữa hai bán dẫn trên. Trong khi dựng sơ đồ này đã chú ý hai điều: mức Fermi đồng đều trong toàn bộ hai phần của chuyển tiếp, mức chân không liên tục và song song với các mức trong vùng năng lượng E_{c_1} và E_{c_2}. Do những điều đòi hỏi trên đây các mức bờ vùng năng lượng E_c và E_v bị gián đoạn bởi một bước nhảy, ΔE_c hay ΔE_v. Hiệu thế tiếp xúc U_K được xác định như sau:

$$eU_K = V_{b_1} + V_{b_2} \tag{4.102}$$

trong đó V_{b_1} và V_{b_2} là độ cong vùng năng lượng của hai phần bán dẫn trong điều kiện cân bằng ở trên mặt tiếp giáp giữa hai phần

Với điều kiện biên dựa trên tính liên tục của véc tơ cảm ứng điện trường $\epsilon_1\vec{\mathcal{E}} = \epsilon_2\vec{\mathcal{E}}$ tại vùng biên giới $x = 0$, giải phương trình Poisson có thể tìm được biểu thức của bề dày lớp điện tích địa phương trong từng phần

$$W_1 = \left[\frac{2N_{a2}\epsilon_1\epsilon_2(eU_K - eU)}{eN_{d1}(\epsilon_1 N_{d1} + \epsilon_2 N_{a2})}\right]^{1/2} \tag{4.103}$$

$$W_2 = \left[\frac{2N_{d1}\epsilon_1\epsilon_2(eU_K - eU)}{eN_{a2}(\epsilon_1 N_{d1} + \epsilon_2 N_{a2})}\right]^{1/2} \tag{4.104}$$

Trong đó U là điện áp đặt vào lớp chuyển tiếp. Điện áp rơi trên hai phần của chuyển tiếp U_1 và U_2 liên quan bởi hệ thức

$$\frac{V_{b1} - eU_1}{V_{b2} - eU_2} = \frac{N_{a2}\epsilon_2}{N_{d1}\epsilon_1} \tag{4.105}$$

trong đó $U_1 + U_2 = U$.

Hiện nay vật liệu tạo chuyển tiếp dị chất là các hợp chất $A_{III}B_V$ như Ga As và dung dịch rắn ba thành phần như $Al_xGa_{1-x}As$, trong đó x có thể thay đổi từ 0 đến 1. Khi $x = 0$, GaAs có $\Delta E_g = 1,42$eV, hằng số mạng $5,6533$Å ở 300K, khi $x = 1$, AlAs có $\Delta E_g = 2,17$,eV hằng số mạng bằng $5,6605$Å.

Bài tập chương IV

(4-1) Nồng độ hạt dẫn trong bán dẫn riêng thay đổi như thế nào khi nhiệt độ chất bán dẫn thay đổi từ 200K đến 300K và bề rộng vùng cấm giả thiết thay đổi theo quy luật $\Delta E_g(T) = (0,785 - \alpha T)$eV.

(4-2) Bằng thực nghiệm người ta xác định được nồng độ điện tử ở 400K là $1,3 \cdot 10^{16}\text{cm}^{-3}$ và ở $350K$ là $6,2 \cdot 10^{16}\text{cm}^{-3}$. Bán dẫn là tinh khiết, hãy tính bề rộng vùng cấm ở nhiệt độ không tuyệt đối nếu biết rằng ΔE_g phụ thuộc vào nhiệt độ theo công thức $\Delta E_g(T) = \Delta E_g(0) - \alpha T$.

(4-3) Tính nồng độ điện tử, lỗ trống, vị trí mức Fermi (so với đỉnh vùng hóa trị) của silic chứa $1,1 \cdot 10^{16}$ nguyên tử B trên 1cm^3 ở nhiệt độ $300K$. Các đại lượng trên sẽ thay đổi như thế nào khi pha thêm vào mẫu các nguyên tử photpho với nồng độ $9 \cdot 10^{15}$ nguyên tử P trên 1cm^2.

Cho biết nồng độ hạt dẫn riêng trong silic ở $300K$ là $n_i = 1,45 \cdot 10^{10}\text{cm}^{-3}$, $\Delta E_g = 1,12$eV, $N_c = 2,8 \cdot 10^{19}\text{cm}^{-3}$; $N_v = 1 \cdot 10^{19}\text{cm}^{-3}$.

(4-4) Hãy chứng minh công thức nồng độ điện tử trong bán dẫn suy biến loại n.

$$n_0 = \frac{8\pi}{3}\left(\frac{2m}{h^2}\right)^{3/2}(E_f - E_c)^{3/2}$$

Xuất phát từ nguyên lý bất định Heisenberg

$$\begin{aligned} \Delta x \cdot \Delta p_x &= h \\ \Delta y \cdot \Delta p_y &= h \\ \Delta z \cdot \Delta p_z &= h \end{aligned}$$

(4-5) Giả sử bán dẫn Si loại n^+ với $N_d = 10^{17}\text{cm}^{-3}$ tiếp xúc với Si loại n với $N_d = 10^{14}\text{cm}^{-3}$. Hãy tính mức Fermi (so với đáy vùng dẫn) trong từng vật liệu nếu giả thiết bán dẫn không suy biến.

Khi cân bằng nhiệt động mức Fermi trong hai vật liệu là bằng nhau, hãy vẽ định tính sơ đồ vùng năng lượng.

Giải bài toán khi mẫu thứ hai là loại p với $N_a = 10^{14}\text{cm}^{-3}$. Cho biết $N_c = 2,8 \cdot 10^{19}\text{cm}^{-3}; N_v = 1 \cdot 10^{19}\text{cm}^{-3}$.

(4-6) Tính độ dẫn của silic tinh khiết ở $300K$. Biết $n_i = 1,45 \cdot 10^{10}\text{cm}^{-3}$. Độ linh động của điện tử $\mu_n = 1450\text{cm}^2/\text{Vs}$; độ linh động của lỗ trống $\mu_p = 450\text{cm}^2\text{Vs}$.

Giải bài toán khi silic được pha thêm một nồng độ asen với nồng độ $1 \cdot 10^{14}$ nguyên tử trên 1cm^{-3}.

Giải bài toán sau khi silic được pha thêm tiếp tục một nồng độ nhôm là $1 \cdot 10^{17}$ nguyên tử trên 1cm^{-3}.

(4-7) Tính hiệu công thoát điện tử giữa hai mẫu silic, mẫu thứ nhất pha tạp loại n với $N_d = 1 \cdot 10^{15}\text{cm}^{-3}$, mẫu thứ 2 pha tạp loại p với $N_a = 1 \cdot 10^{15}\text{cm}^{-3}$. Cho biết ΔE_g bằng $1,12\text{eV}$, nhiệt độ $300K$ với $kT = 0,026\text{eV}$, $N_c = 2,8 \cdot 10^{19}\text{cm}^{-3}$, $N_v = 1 \cdot 10^{19}\text{cm}^{-3}$.

Nếu hai mẫu này tiếp xúc với nhau, trong điều kiện cân bằng tính hàng rào thế năng đối với điện tử giữa hai mẫu.

(4-8) Tính bề dày và điện dung lớp chuyển tiếp $p-n$, biết:

- Thiên áp ngược $U_{ng} = 20\text{V}$.
- Hằng số điện môi tương đối $\epsilon = 16$.
- Nồng độ pha tạp bên phần p là $N_a = 4 \cdot 10^{21}\text{m}^{-3}$.
- Nồng độ pha tạp bên phần n là $N_d = 2 \cdot 10^{21}\text{m}^{-3}$.
- Diện tích lớp chuyển tiếp $S = 10^{-6}\text{m}^2$.
- Hàng rào thế năng khi thiên áp bằng không là $eU_k = 0,5\text{eV}$.

(4-9) Cho một chuyển tiếp $p-n$ trên tinh thể Ge với $\epsilon = 16$, $N_a = 5 \cdot 10^{22}\text{m}^{-3}$, $N_d = 1 \cdot 10^{22}\text{m}^{-3}$. Hỏi với thiên áp ngược bằng bao nhiêu thì xảy ra hiệu ứng đường ngầm qua lớp chuyển tiếp. Biết rằng điện trường tới hạn để xảy ra hiệu ứng đường ngầm là $\mathcal{E}_c = 10^7\text{V/cm}$. Bỏ qua giá trị hiệu thế tiếp xúc U_k.

(4-10) Giả sử grad điện thế trong mẫu silic tinh thể tinh khiết là 400V/cm, độ linh động của điện tử và lỗ trống tương ứng là $0,12\text{m}^2/\text{Vs}$ và $0,025\text{m}^2/\text{Vs}$. Hãy xác định:

a- Tốc độ cuốn của điện tử và lỗ trống.

b- Điện trở suất của silic, giả sử nồng độ hạt dẫn riêng là $2.5 \cdot 10^{16}\text{m}^{-3}$.

c- Dòng cuốn toàn phần, nếu tiết diện ngang của mẫu là $0,03 \cdot 10^{-4}\text{m}^2$.

Đáp số:

(4-1) $\frac{n(300K)}{n(200K)} = 3,6 \cdot 10^3$

(4-2) $\Delta E_g(0) = 0,26\text{eV}$

(4-3) a/ $P_0 = 1,1 \cdot 10^{16}\text{cm}^{-3}$,

$n_0 = 1,91 \cdot 10^4\text{cm}^{-3}, E_f = E_v + 0,177\text{eV}$

b/ Nồng độ lỗ trống, điện tử và mức Fermi là:

$$\begin{aligned} P_0 &= 2 \cdot 10^{15}\text{cm}^{-3} \\ n_0 &= 1 \cdot 10^5\text{cm}^{-3} \\ E_f &= E_v + o,277\text{eV} \end{aligned}$$

(4-5) Mức Fermi trong từng vật liệu là:

$$\begin{aligned} E_{f1} &= E_c - 0,146\text{eV} \\ E_{f2} &= E_c - 0,326\text{eV} \\ E_{f3} &= E_v + o,299\text{eV} = E_c - 0,821\text{eV} \end{aligned}$$

(4-6) Độ dẫn điện trong ba trường hợp là

$$\begin{aligned} a/ \quad \sigma_i &= 4,4 \cdot 10^{-6} \tfrac{1}{\Omega\text{cm}};\ \rho_i = 22,6 \cdot 10^{-5}\Omega\text{cm} \\ b/ \quad \sigma_n &= 2,32 \cdot 10^{-2} \tfrac{1}{\Omega\text{cm}};\ \rho_n = 43,1 \cdot \Omega\text{cm} \\ c/ \quad \sigma_p &= 7,2 \cdot \tfrac{1}{\Omega\text{cm}};\ \rho_p = 0,13 \cdot \Omega\text{cm} \end{aligned}$$

(4-7) Mức Fermi của hai vật liệu và hiệu công thoát là

$$\begin{aligned} E_{f1} &= E_c - 0,266\text{eV} \\ E_{f2} &= E_v + 0,119\text{eV} \\ \Delta\Phi &= eU_k = \Phi_2 - \Phi_1 = 0,735\text{eV} \end{aligned}$$

(4-8) Điện dung lớp chuyển tiếp $C = 88,5\text{pF}$.

(4-9) Thiên áp ngược cần thiết để xảy ra hiệu ứng đường ngầm là $U_{ng} = 21,24V$.

(4-10) a- $v_{nd} = 48\text{m/s}$; $v_{pd} = 10\text{m/s}$.

b- $\rho = 1,724 \cdot 10^3\Omega\text{m}$.

c- $I = 6,96 \cdot 10^{-7}\text{A}$.

Chương 5

NHỮNG CƠ SỞ VẬT LÝ CỦA QUÁ TRÌNH TRUYỀN VÀ XỬ LÝ TÍN HIỆU QUANG

Truyền và xử lý tín hiệu không phải bằng dòng điện hay sóng điện từ vô tuyến mà bằng tia sáng là những vấn đề quan trọng được đặt ra từ những năm 60 của thế kỷ 20, khi mới bắt đầu nhận được những nguồn sáng đồng bộ ổn định bằng laser.

Ngày nay sợi quang đã được dùng rộng rãi thay cho dây kim loại trong viễn thông và một số nhà sản xuất cũng đã bắt đầu chế tạo các mạch quang tích hợp thay cho các mạch tích hợp dùng dòng điện thông thường (để phân biệt ta sẽ gọi là các mạch điện tích hợp). Hệ thống sợi quang - mạch quang tích hợp có nhiều ưu điểm và triển vọng đang được nghiên cứu ứng dụng rất mạnh. Vì vậy trong chương này chúng tôi đề cập những cơ sở vật lý cần thiết để đi sâu nghiên cứu quá trình truyền và xử lý tín hiệu quang.

5.1 Sóng điện từ

Như chúng ta đã biết ánh sáng là sóng điện từ vì vậy trước khi xét đến sự lan truyền ánh sáng trong các hệ đặc biệt như linh kiện dẫn sóng, sợi quang, chúng ta sẽ nhắc lại một số khái niệm cơ bản của sóng điện từ.

5.1.1 Hệ phương trình Maxwell. Maxwell là người có công lớn nhất trong việc xây dựng một lý thuyết thống nhất về các hiện tượng điện từ. Lý thuyết này đã giải thích được tất cả các hiện tượng điện từ trong thời đó và tiên đoán những hiện tượng điện từ mới mà sau này đã được chứng minh .

Hệ quả vĩ đại nhất từ lý thuyết của Maxwell là chỉ ra sự tồn tại sóng điện từ lan truyền bằng vận tốc ánh sáng. Nghiên cứu tính chất sóng điện từ đã

dẫn Maxwell đến việc xây dựng nên lý thuyết điện từ của ánh sáng. Chính các phương trình Maxwell là cơ sở của lý thuyết đó, và nó đóng vai trò như các định luật của Newton trong cơ học.

- Cặp phương trình Maxwell thứ I, như ta biết, đã chỉ ra định luật cảm ứng điện từ và sự không tồn tại của một nguồn từ trường như từ tích, giống như điện tích đối với điện trường:

$$\mathrm{rot}\vec{\mathcal{E}} = \left[\vec{\nabla} \times \vec{\mathcal{E}}\right] = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \tag{5.1}$$

$$\mathrm{div}\vec{B} = \left(\vec{\nabla} \cdot \vec{B}\right) = 0 \tag{5.2}$$

- Cặp phương trình Maxwell thứ II chỉ ra mối liên quan giữa từ trường và dòng điện dịch, dòng điện dẫn, và nguồn gốc của vectơ cảm ứng điện $\vec{D}$ là điện tích

$$\mathrm{rot}\vec{\mathcal{H}} = \left[\vec{\nabla} \times \vec{\mathcal{H}}\right] = \vec{J} + \frac{\partial \vec{D}}{\partial t} \tag{5.3}$$

$$\mathrm{div}\vec{D} = \left(\vec{\nabla} \cdot \vec{D}\right) = \rho \tag{5.4}$$

Hệ 4 phương trình (5.1) đến (5.4) là các phương trình Maxwell dưới dạng vi phân, các phương trình này được trình bày theo kiểu phương trình vectơ. Chúng ta cũng có thể viết chúng theo kiểu vô hướng, theo thành phần của vectơ

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \mathcal{E}_z}{\partial y} - \frac{\partial \mathcal{E}_y}{\partial z} &= -\frac{\partial B_x}{\partial t} \\
\frac{\partial \mathcal{E}_x}{\partial z} - \frac{\partial \mathcal{E}_z}{\partial x} &= -\frac{\partial B_y}{\partial t} \\
\frac{\partial \mathcal{E}_y}{\partial x} - \frac{\partial \mathcal{E}_x}{\partial y} &= -\frac{\partial B_z}{\partial t}
\end{aligned} \tag{5.5}$$

$$\frac{\partial B_x}{\partial x} + \frac{\partial B_y}{\partial y} + \frac{\partial B_z}{\partial z} = 0 \tag{5.6}$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \mathcal{H}_z}{\partial y} - \frac{\partial \mathcal{H}_y}{\partial z} &= j_x + \frac{\partial D_x}{\partial t} \\
\frac{\partial \mathcal{H}_x}{\partial z} - \frac{\partial \mathcal{H}_z}{\partial x} &= j_y + \frac{\partial D_y}{\partial t} \\
\frac{\partial \mathcal{H}_y}{\partial x} - \frac{\partial \mathcal{H}_x}{\partial y} &= j_z + \frac{\partial D_z}{\partial t}
\end{aligned} \tag{5.7}$$

$$\frac{\partial D_x}{\partial x} + \frac{\partial D_y}{\partial y} + \frac{\partial D_z}{\partial z} = \rho \tag{5.8}$$

Như vậy ở đây chúng ta có 8 phương trình trong đó có 12 ẩn số (là 12 thành phần của 4 vectơ $\vec{\mathcal{E}}, \vec{D}, \vec{\mathcal{H}}, \vec{B}$).

Vì số ẩn số nhiều hơn số phương trình cho nên để tính được các ẩn số đó cần phải thêm vào phương trình Maxwell các phương trình liên hệ giữa $\vec{D}, \vec{J}, \vec{\mathcal{E}}$, cũng như các phương trình liên hệ giữa $\vec{\mathcal{H}}$ và $\vec{B}$:

$$\vec{D} = \epsilon_0 \epsilon \vec{\mathcal{E}} \tag{5.9}$$

$$\vec{B} = \mu_0 \mu \vec{\mathcal{H}} \tag{5.10}$$

$$\vec{J} = \sigma \vec{\mathcal{E}} \tag{5.11}$$

Hệ phương trình Maxwell cũng có thể viết dưới dạng tích phân.

5.1.2 Phương trình sóng đối với trường điện từ. Chúng ta biết rằng điện trường thay đổi sẽ sinh ra từ trường và từ trường này cũng là trường thay đổi. Từ trường thay đổi này lại làm nẩy sinh ra điện trường. Vì vậy nếu chúng ta bằng sự dao động của các điện tích làm phát sinh ra được một điện-từ trường thay đổi là sẽ làm lan truyền ra không gian xung quanh một sóng điện từ, trong đó điện trường và từ trường liên tục chuyển đổi cho nhau.

Chúng ta có thể chứng minh sự tồn tại của sóng điện từ từ các phương trình Maxwell. Trong môi trường đồng nhất, trung hoà ($\rho = 0$) và không dẫn điện ($\vec{J} = 0$) với hằng số điện môi ϵ và từ môi μ, chúng ta có:

$$\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} = \mu\mu_0 \frac{\partial \vec{\mathcal{H}}}{\partial t} \tag{5.12}$$

$$(\vec{\nabla} \cdot \vec{B}) = \mu\mu_0 \vec{\nabla} \vec{\mathcal{H}} \tag{5.13}$$

$$\frac{\partial \vec{D}}{\partial t} = \epsilon\epsilon_0 \frac{\partial \vec{\mathcal{E}}}{\partial t} \tag{5.14}$$

$$(\vec{\nabla} \cdot \vec{D}) = \epsilon\epsilon_0 (\vec{\nabla} \cdot \vec{\mathcal{E}}) \tag{5.15}$$

Từ đây ta có thể viết lại các phương trình (5.1)-(5.4):

$$\mathrm{rot}\vec{\mathcal{E}} = [\vec{\nabla} \times \vec{\mathcal{E}}] = -\mu\mu_0 \frac{\partial \vec{\mathcal{H}}}{\partial t} \tag{5.16}$$

$$\mathrm{div}\vec{\mathcal{H}} = (\vec{\nabla} \cdot \vec{\mathcal{H}}) = 0 \tag{5.17}$$

$$\mathrm{rot}\vec{\mathcal{H}} = [\vec{\nabla} \times \vec{\mathcal{H}}] = \epsilon\epsilon_0 \frac{\partial \vec{\mathcal{E}}}{\partial t} \tag{5.18}$$

$$\mathrm{div}\vec{\mathcal{E}} = (\vec{\nabla} \cdot \vec{\mathcal{E}}) = 0 \tag{5.19}$$

Nếu lấy rot hai vế phương trình (5.16) ta có

$$\text{rot} \cdot \text{rot} \cdot \vec{\mathcal{E}} = \left[\vec{\nabla} \times [\vec{\nabla} \times \vec{\mathcal{E}}]\right] = -\mu\mu_0 \left[\vec{\nabla} \times \frac{\partial \vec{\mathcal{H}}}{\partial t}\right] \tag{5.20}$$

Thay $\left[\vec{\nabla} \times \frac{\partial \vec{\mathcal{H}}}{\partial t}\right] = \frac{\partial}{\partial t}[\vec{\nabla} \times \vec{\mathcal{H}}]$ và (5.20) vào (5.18) ta có:

$$\left[\vec{\nabla} \times [\vec{\nabla} \times \vec{\mathcal{E}}]\right] = -\epsilon\epsilon_0\mu\mu_0 \frac{\partial^2 \vec{\mathcal{E}}}{\partial t^2} \tag{5.21}$$

Theo công thức đại số vectơ ta có

$$\left[\vec{\nabla} \times [\vec{\nabla} \times \vec{\mathcal{E}}]\right] = \vec{\nabla}(\vec{\nabla} \cdot \vec{\mathcal{E}}) - \Delta\vec{\mathcal{E}} \tag{5.22}$$

Từ (5.21) số hạng thứ 1 của (5.22) bằng không, phương trình (5.21) có dạng:

$$\Delta\mathcal{E} = \epsilon\epsilon_0\mu\mu_0 \frac{\partial^2 \vec{\mathcal{E}}}{\partial t^2} \tag{5.23}$$

vì $\epsilon_0\mu_0 = 1/c^2$ nên ta có:

$$\Delta\vec{\mathcal{E}} = \frac{\epsilon\mu}{c^2} \frac{\partial^2 \vec{\mathcal{E}}}{\partial t^2} \tag{5.24}$$

hay

$$\frac{\partial^2 \vec{\mathcal{E}}}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \vec{\mathcal{E}}}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \vec{\mathcal{E}}}{\partial z^2} = \frac{\epsilon\mu}{c^2} \frac{\partial^2 \vec{\mathcal{E}}}{\partial t^2} \tag{5.25}$$

Cũng tiến hành tính toán tương tự với phương trình (5.18) ta cũng nhận được phương trình đối với $\vec{\mathcal{H}}$

$$\frac{\partial^2 \vec{\mathcal{H}}}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \vec{\mathcal{H}}}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \vec{\mathcal{H}}}{\partial z^2} = \frac{\epsilon\mu}{c^2} \frac{\partial^2 \vec{\mathcal{H}}}{\partial t^2} \tag{5.26}$$

Hai phương trình (5.25) và (5.26) liên quan chặt chẽ với nhau và chúng đều chứa $\vec{\mathcal{E}}$ và $\vec{\mathcal{H}}$. Hai phương trình đó là hai phương trình sóng điển hình. Bất cứ một hàm nào thỏa mãn phương trình đó đều diễn tả một sóng, trong đó căn bậc hai của đại lượng nghịch đảo của hệ số của đạo hàm bậc hai theo thời gian là vận tốc pha của sóng.

Như vậy các phương trình (5.25) và (5.26) chỉ ra sự tồn tại của sóng điện từ và vận tốc pha của sóng bằng $v = \frac{c}{\sqrt{\epsilon\mu}}$; trong chân không $\epsilon = \mu = 1$ và $v = c, \epsilon\mu = n^2$, n - chiết suất môi trường.

5.1.3 Sóng điện từ phẳng. Xét một sóng điện từ phẳng, lan truyền trong môi trường trung hoà đồng chất, không dẫn điện ($\rho = 0, J = 0, \epsilon = \text{const}, \mu = \text{const}$). Chúng ta chọn trục x vuông góc với mặt sóng (là mặt phẳng vô hạn). Khi đó $\vec{\mathcal{E}}$ và $\vec{\mathcal{H}}$ và các thành phần của nó trên trục toạ độ sẽ không phụ thuộc vào y và z. Phương trình (5.5)và (5.6) sẽ có dạng đơn giản hơn

$$\begin{aligned} 0 &= \mu\mu_0 \frac{\partial \mathcal{H}_x}{\partial t} \\ \frac{\partial \mathcal{E}_z}{\partial x} &= \mu\mu_0 \frac{\partial \mathcal{H}_y}{\partial t} \\ \frac{\partial \mathcal{E}_y}{\partial x} &= -\mu\mu_0 \frac{\partial \mathcal{H}_z}{\partial t} \end{aligned} \tag{5.27}$$

$$\frac{\partial B_x}{\partial x} = \mu\mu_0 \frac{\partial \mathcal{H}_x}{\partial x} = 0 \tag{5.28}$$

Phương trình (5.7) và (5.8) cho ta

$$\begin{aligned} 0 &= \epsilon\epsilon_0 \frac{\partial \mathcal{E}_x}{\partial t} \\ \frac{\partial \mathcal{H}_z}{\partial x} &= -\epsilon\epsilon_0 \frac{\partial \mathcal{E}_y}{\partial t} \\ \frac{\partial \mathcal{H}_y}{\partial x} &= \epsilon\epsilon_0 \frac{\partial \mathcal{E}_z}{\partial t} \end{aligned} \tag{5.29}$$

$$\frac{\partial D_x}{\partial x} = \epsilon\epsilon_0 \frac{\partial \mathcal{E}_x}{\partial x} = 0 \tag{5.30}$$

Hai phương trình $0 = \epsilon\epsilon_0 \frac{\partial \mathcal{E}_x}{\partial t}$ và $0 = \epsilon\epsilon_0 \frac{\partial \mathcal{E}_x}{\partial x}$ nói lên rằng thành phần $\mathcal{E}_x$ không phụ thuộc vào thời gian và không gian. Từ (5.27) và (5.28) ta cũng đi đến kết luận như thế đối với $\mathcal{H}_x$, nghĩa là thành phần $\mathcal{H}_x$ không phụ thuộc vào thời gian và không gian. Điều đó có nghĩa là trường của sóng điện từ không thể có thành phần theo trục x, theo phương truyền sóng. Nói cách khác các vectơ $\vec{\mathcal{E}}$ và $\vec{\mathcal{H}}$ vuông góc với phương truyền sóng và sóng điện từ là sóng ngang. Từ (5.27) và (5.29) ta có thể tổ hợp lại thành hai nhóm độc lập:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathcal{E}_y}{\partial x} &= -\mu\mu_0 \frac{\partial \mathcal{H}_z}{\partial t} \\ \frac{\partial \mathcal{H}_z}{\partial x} &= -\epsilon\epsilon_0 \frac{\partial \mathcal{E}_y}{\partial t} \end{aligned} \tag{5.31}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathcal{E}_z}{\partial x} &= +\mu\mu_0 \frac{\partial \mathcal{H}_y}{\partial t} \\ \frac{\partial \mathcal{H}_y}{\partial x} &= +\epsilon\epsilon_0 \frac{\partial \mathcal{E}_z}{\partial t} \end{aligned} \tag{5.32}$$

Nhóm thứ nhất (5.31) liên hệ giữa $\mathcal{E}_y$ và $\mathcal{H}_z$, nhóm thứ 2 (5.32) liên hệ giữa $\mathcal{E}_z$ và $\mathcal{H}_y$.

Để mô tả sóng điện từ phẳng chỉ cần dùng một trong hai nhóm phương trình và cho các thành phần trường trong nhóm kia bằng không.

Ví dụ ta có thể dùng nhóm thứ nhất, cho $\mathcal{E}_z$ và $\mathcal{H}_y$ bằng không nghĩa là ta dùng các phương trình

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \mathcal{E}_y}{\partial x} &= -\mu\mu_0 \frac{\partial \mathcal{H}_z}{\partial t} \quad \rightarrow \quad \frac{\partial^2 \mathcal{E}_y}{\partial x^2} = -\mu\mu_0 \frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial \mathcal{H}_z}{\partial t}\right) \\
\frac{\partial \mathcal{H}_z}{\partial x} &= -\epsilon\epsilon_0 \frac{\partial \mathcal{E}_y}{\partial t} \quad \rightarrow \quad \frac{\partial}{\partial t}\left(\frac{\partial \mathcal{H}_z}{\partial x}\right) = -\epsilon\epsilon_0 \frac{\partial^2 \mathcal{E}_y}{\partial t^2}
\end{aligned}$$

Nếu chú ý rằng

$$\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial \mathcal{H}_z}{\partial t}\right) = \frac{\partial}{\partial t}\left(\frac{\partial \mathcal{H}_z}{\partial x}\right)$$

ta có

$$\frac{\partial^2 \mathcal{E}_y}{\partial x^2} = \frac{\epsilon\mu}{c^2}\frac{\partial^2 \mathcal{E}_y}{\partial t^2} \tag{5.33}$$

Cũng tiến hành biến đổi tương tự ta có phương trình

$$\frac{\partial^2 \mathcal{H}_z}{\partial x^2} = \frac{\epsilon\mu}{c^2}\frac{\partial^2 \mathcal{H}_z}{\partial t^2} \tag{5.34}$$

Chúng ta thấy rằng trong sóng điện từ ta xét ở đây $\mathcal{E}_y = \mathcal{E}, \mathcal{H}_z = H$, nghĩa là vectơ $\vec{\mathcal{E}}$ và vectơ $\vec{\mathcal{H}}$ vuông góc với nhau và vuông góc với phương truyền sóng. Lời giải của (5.33)và (5.34) sẽ là

$$\mathcal{E}_y = \mathcal{E}_m \cos(\omega t - Kx + \alpha_1) \tag{5.35}$$

$$\mathcal{H}_z = \mathcal{H}_m \cos(\omega t - Kx + \alpha_2) \tag{5.36}$$

trong đó ω - tần số sóng, K - số sóng $= \dfrac{\omega n}{c} = \dfrac{\omega}{v}$, α_1, α_2 pha ban đầu tại điểm $x = 0$.

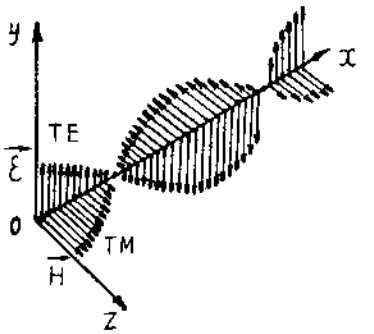
Nếu thay (5.35) và (5.36) vào cặp phương trình (5.31) ta có

$$K\mathcal{E}_m \sin(\omega t - Kx + \alpha_1) = \mu\mu_0\omega\mathcal{H}_m \sin(\omega t - Kx + \alpha_2)$$

$$K\mathcal{H}_m \sin(\omega t - Kx + \alpha_1) = \epsilon\epsilon_0\omega\mathcal{E}_m \sin(\omega t - Kx + \alpha_2).$$

Để nghiệm đúng các phương trình này cần phải thoả mãn các điều kiện sau:

$$\alpha_1 = \alpha_2, \quad K\mathcal{E}_m = \mu\mu_0\omega\mathcal{H}_m, \quad \epsilon\epsilon_0\mathcal{E}_m = K\mathcal{H}_m$$



Hình 5.1: *Hình ảnh sóng điện từ phẳng.*

Nhân hai vế của hai đẳng thức sau ta có:

$$\epsilon\epsilon_0\mathcal{E}_m^2 = \mu\mu_0\mathcal{H}_m^2 \tag{5.37}$$

Vậy dao động của các vectơ điện trường và từ trường trong sóng điện từ xảy ra với pha ban đầu bằng nhau ($\alpha_1 = \alpha_2$) và biên độ liên hệ với nhau bởi hệ thức:

$$\mathcal{E}_m\sqrt{\epsilon\epsilon_0} = \mathcal{H}_m\sqrt{\mu\mu_0} \tag{5.38}$$

Đối với sóng lan truyền trong chân không ta có

$$\frac{\mathcal{E}_m}{\mathcal{H}_m} = \sqrt{\frac{\mu_0}{\epsilon_0}} = \sqrt{4\pi\cdot 10^{-7}\cdot 4\pi\cdot 9\cdot 10^9}\ \ \Omega = 120\pi\Omega \cong 377\Omega$$

Ta có thể viết phương trình sóng điện từ phẳng dưới dạng vectơ bằng cách nhân vectơ đơn vị $\vec{y}$ với $\mathcal{E}_y$ nghĩa là $\vec{\mathcal{E}} = \mathcal{E}_y\cdot\vec{y}$ và vectơ đơn vị $\vec{z}$ với $\mathcal{H}_z$, $\vec{\mathcal{H}} = \mathcal{H}_z\vec{z}$:

$$\vec{\mathcal{E}} = \vec{\mathcal{E}}_m\cos(\omega t - Kx), \quad \vec{\mathcal{H}} = \vec{\mathcal{H}}_m\cos(\omega t - Kx)$$

Trên hình (5.1) biểu diễn một "bức ảnh tức thời" sóng điện từ phẳng.

Chúng ta nhận thấy vectơ $\vec{\mathcal{E}}, \vec{\mathcal{H}}$ tạo thành với phương truyền sóng một hệ "vít phải". Mặt phẳng trong đó $\vec{\mathcal{E}}$ dao động (yox) là mặt phân cực của sóng. Sóng điện ngang được ký hiệu là TE, sóng từ ngang được ký hiệu là TH. Ánh sáng nhìn thấy là sóng điện từ có bước sóng trong khoảng $\lambda = (0,39 - 0,76)\mu$m. hay $\lambda = (3900 - 7600)$Å.

Ánh sáng có bước sóng nhỏ hơn rất nhiều sóng vô tuyến thường dùng, nên ngoài tính chất lan truyền như một sóng thường gặp, ta còn có thể xét chúng như những tia tuân theo những định luật quang học - tia (Ray-optics).

5.2 Sự lan truyền của ánh sáng trong linh kiện dẫn sóng quang

5.2.1 Hệ sợi quang - mạch quang tích hợp và những đặc điểm. Cuối thập kỷ 60, khái niệm "quang học tích hợp" (integrated optics) xuất hiện, trong đó dây điện bằng kim loại hay sóng vô tuyến được thay thế bằng sợi quang hay linh kiện dẫn sóng quang, còn mạch điện tích hợp được thay thế bằng mạch quang tích hợp (optical integrated circuits). Cuối thập kỷ 70, một số thành tựu về quang học tích hợp từ phòng thí nghiệm đã được triển khai ứng dụng, đó là sự phát triển của sợi quang, đầu nối quang ít tổn hao, sự phát minh và chế tạo ra các điôt laser GaAlAs và GaInAsP, sự hiện thực của công nghệ quang khắc các chi tiết có kích thước dưới μm. Sang thập kỷ 80, sợi quang đã được ứng dụng khá rộng rãi trong kỹ thuật viễn thông, một số hãng bắt đầu chế tạo các mạch quang tích hợp để dùng trong một số mục đích khác nhau.

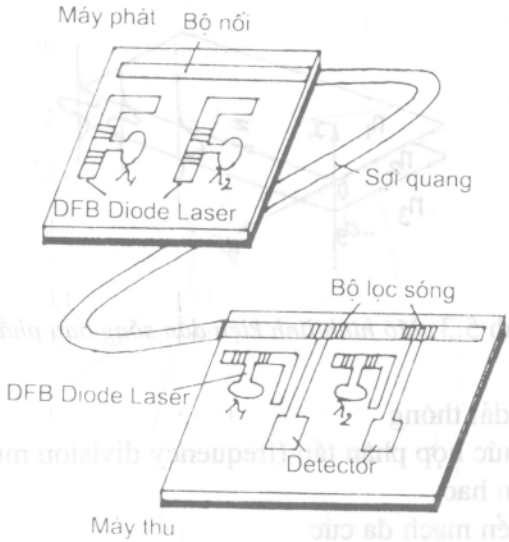
Quang học tích hợp là phương pháp truyền và xử lý tín hiệu bằng tia sáng có nhiều ưu điểm và triển vọng đang được nghiên cứu ứng dụng rộng rãi. Chúng ta có thể so sánh phương pháp quang học tích hợp với các phương pháp truyền thống.

1. So sánh sợi quang với các phương pháp truyền dẫn khác. Từ trước đến nay phương pháp truyền dẫn được thực hiện bằng dây dẫn kim loại hoặc bằng sóng vô tuyến qua không khí . Dưới đây là một số ưu điểm và nhược điểm của phương pháp truyền dẫn bằng sợi quang so với các phương pháp truyền dẫn truyền thống.

Ưu điểm:

- Tránh được sự giao thoa của sóng điện từ
- Tránh được sự chập mạch điện hay bị nối đất.
- An toàn trong truyền tin, tránh được "nghe trộm".
- Tổn hao nhỏ (có thể đạt 0,2dB/km)
- Dải thông rộng, khả năng phức hợp cao.
- Kích thước nhỏ, trọng lượng nhẹ.
- Vật liệu rẻ, dồi dào.

Nhược điểm:



Hình 5.2: *Sơ đồ hệ sợi quang-mạch quang tích hợp.*

- Không chuyển tải được năng lượng điện.

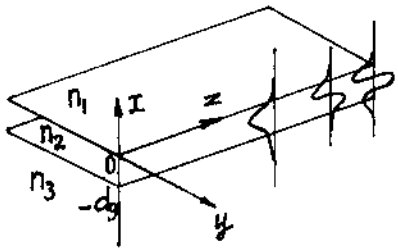
2. So sánh mạch quang tích hợp với mạch điện tích hợp

Trên hình (5.2) trình bày một sơ đồ lý thuyết của hệ sợi quang mạch quang tích hợp dùng trong kỹ thuật quang viễn thông (optical communication).

Trong sơ đồ này máy phát và máy thu đều dùng các mạch quang tích hợp và hai máy được nối với nhau bằng sợi quang.

Nguồn sáng được phát từ các điôt laser loại phản hồi phân tán (DFB, distributed feedback), phát ra ánh sáng có bước sóng khác nhau $\lambda_1, \lambda_2, \ldots$ Để đơn giản ở đây chỉ vẽ 2 điôt với λ_1, λ_2 trên thực tế có thể có hàng trăm điôt laser khác nhau. Ánh sáng được phát ra bởi các điôt laser riêng biệt, có bước sóng khác nhau, được truyền đi nhờ một "sóng mang " quang học thực sự độc lập trong ống dẫn sóng là sợi quang, cho nên có thể truyền đi nhiều tín hiệu một lúc. Trong máy thu, những tín hiệu đó được phân chia nhờ bộ lọc (filter) và được dẫn đến các bộ tách sóng. Ở đây cũng có thể dùng các điôt laser phụ, phát dao động nội tại, để thực hiện việc tách sóng heterodyn (tách sóng tạo phách). Việc truyền dẫn tín hiệu quang trong mạch quang tích hợp được thực hiện nhờ các linh kiện dẫn sóng được chế tạo đồng thời với các linh kiện khác trong mạch theo công nghệ vi điện tử.

Ưu điểm của mạch quang tích hợp



Hình 5.3: *Mô hình linh kiện dẫn sóng bản phẳng.*

- Tăng độ rộng dải thông
- Mở rộng sự phức hợp phân tần (frequency division multiplexing)
- Khớp nối ít tổn hao
- Mở rộng chuyển mạch đa cực
- Kích thước nhỏ, trọng lượng nhẹ, công suất tiêu thụ ít
- Tiết kiệm trong sản xuất.
- Độ lặp lại cao

Nhược điểm:

- Cần đầu tư đổi mới công nghệ cao tốn kém.

Trong mạch quang tích hợp chúng ta thấy cần quan tâm đến các linh kiện sau đây: laser điôt, linh kiện dẫn sóng quang, linh kiện điều biến(modulator), linh kiện tách sóng quang (optical detector). Dưới đây chúng ta sẽ đề cập đến những cơ sở vật lý trong nguyên lý hoạt động của một số những linh kiện dùng trong quang học tích hợp.

5.2.2 Kiểu truyền sóng (mode) trong linh kiện dẫn sóng quang. Linh kiện dẫn sóng quang là thành phần cơ bản của mạch quang tích hợp để nối các linh kiện của mạch, giống như các đường dẫn kim loại trong mạch điện tích hợp. Tuy nhiên, trong khi đường dẫn kim loại tuân theo định luật Ohm, sóng ánh sáng lan truyền trong linh kiện dẫn sóng quang với các mode quang học khác nhau. Mode quang học là cách thức phân bố theo không gian của năng lượng quang trong một hay nhiều chiều toạ độ.

Chúng ta xét một mô hình linh kiện dẫn sóng bản phẳng được biểu diễn ở hình (5.3).

- Linh kiện dẫn sóng bản phẳng được giới hạn bởi các mặt phân cách phẳng song song, vuông góc với trục x và vô hạn theo chiều y và z. Linh kiện dẫn sóng bản phẳng này được gọi là linh kiện dẫn sóng ba lớp có 3 vùng chiết

suất khác nhau. Lớp 1 và 3 là nửa vô hạn theo trục x, lớp 2 có bề dày giới hạn theo trục x là d_g, cả ba lớp đều vô hạn theo hai trục y, z.

- Giả sử ánh sáng lan truyền theo trục z. Chúng ta đã nói: mode là cách thức phân bố theo không gian của năng lượng quang trong một hay nhiều chiều. Về toán học mode là điện trường thoả mãn phương trình sóng Maxwell với những điều kiện biên nhất định. Ta có thể viết phương trình sóng Maxwell dưới dạng:

$$\nabla^2\vec{\mathcal{E}}(\vec{r},t) = \frac{n^2(\vec{r})}{c^2}\frac{\partial^2\vec{\mathcal{E}}(\vec{r},t)}{\partial t^2}; n^2(\vec{r}) = \mu\epsilon \tag{5.39}$$

- Đối với những sóng đơn sắc lời giải của (5.39) có dạng

$$\vec{\mathcal{E}}(\vec{r},t) = \vec{\mathcal{E}}(\vec{r})e^{iwt} \tag{5.40}$$

Thay(5.40) vào (5.39) ta có:

$$\nabla^2\vec{\mathcal{E}}(\vec{r}) + k^2 \cdot n^2(\vec{r}) \cdot \vec{\mathcal{E}}(\vec{r}) = 0 \tag{5.41}$$

với $k = \frac{w}{c} = \frac{2\pi}{\lambda}$ là số sóng

- Giả thuyết sóng lan truyền theo trục z và có dạng:

$$\vec{\mathcal{E}}(\vec{r}) = \vec{\mathcal{E}}(x,y,z) = \vec{\mathcal{E}}(x,y)exp(-i\beta z) \tag{5.42}$$

trong đó β gọi là hệ số lan truyền. Phương trình (5.41) trong trường hợp này có dạng:

$$\frac{\partial^2\vec{\mathcal{E}}(x,y)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\vec{\mathcal{E}}(x,y)}{\partial y^2} + [k^2n^2(\vec{r}) - \beta^2]\vec{\mathcal{E}}(x,y) = 0 \tag{5.43}$$

- Vì linh kiện dẫn sóng được giả thuyết là vô hạn theo y, nên ta có thể viết (5.43) riêng cho ba vùng theo trục x:

$$\begin{aligned}
\text{vùng 1}: &\quad \frac{\partial^2\mathcal{E}(x,y)}{\partial x^2} + (k^2n_1^2 - \beta^2)\mathcal{E}(x,y) = 0\\
\text{vùng 2}: &\quad \frac{\partial^2\mathcal{E}(x,y)}{\partial x^2} + (k^2n_2^2 - \beta^2)\mathcal{E}(x,y) = 0\\
\text{vùng 3}: &\quad \frac{\partial^2\mathcal{E}(x,y)}{\partial x^2} + (k^2n_3^3 - \beta^2)\mathcal{E}(x,y) = 0
\end{aligned} \tag{5.44}$$

trong đó $\mathcal{E}(x,y)$ là những thành phần trong hệ Đề các của $\vec{\mathcal{E}}(x,y) : (\mathcal{E}_x, \mathcal{E}_y, \mathcal{E}_z)$

Trong trường hợp sóng điện ngang (TE) là sóng bản phẳng truyền theo trục z ta có thể giả thuyết $\mathcal{E}_x$ và $\mathcal{E}_z$ bằng không. Thêm vào đó $\mathcal{E}_y$ không phụ thuộc vào y và z vì theo các trục đó các lớp vật liệu là vô hạn nên không có

sự phản xạ, không tạo thành sóng đứng. Tóm lại chúng ta chỉ còn lại thành phần $\mathcal{E}_y(x)$ phụ thuộc vào x. Trong ba vùng trên ta có lời giải

$$\mathcal{E}_y(x) = \begin{cases} A\exp(-qx) & 0 \le x \le \infty \\ B\cos(hx) + C\sin(hx) & -d_g \le x \le 0 \\ D\exp[p(x+d_g)] & -\infty \le x \le -d_g \end{cases} \tag{5.45}$$

trong đó A, B, C, D, q, h và p là các hằng số cần phải xác định từ điều kiện biên, tại đó $\mathcal{E}_y$ và H_z $\left[H_z = (i/\omega\mu\mu_0)\cdot\frac{\partial\mathcal{E}_y}{\partial x}\right]$ phải liên tục. Vì μ và ω được xem là hằng số nên điều kiện thứ hai có nghĩa là $\frac{\partial\mathcal{E}_y}{\partial x}$ phải liên tục tại ranh giới giữa vùng 1 và 2 (tại $x = 0$) và giữa vùng 2 và 3 (tại $x = -d_g$). Các hằng số $A, B, C,$ và D có thể được xác định từ các điều kiện liên tục của $\frac{\partial\mathcal{E}_y}{\partial x}$ tại $x = 0$ và của $\mathcal{E}_y$ tại $x = 0$ và $x = -d_g$ chúng ta có ba phương trình nhưng có 4 ẩn số, nên trong các biểu thức $\mathcal{E}_y(x)$ chỉ còn lại một hằng số duy nhất c'

$$\mathcal{E}_y(x) = \begin{cases} c'\exp(-qx) \\ c'[\cos(hx) - (q/h)\sin(hx)] \\ c'[\cos(hd_g) + (q/h)\sin(hd_g)]\exp[p(x+d_g)] \end{cases} \tag{5.46}$$

Để xác định q, h và p chúng ta thay (5.46) vào (5.44) trong đó $\mathcal{E}(x,y)$ là $\mathcal{E}_y(x)$ ta được:

$$\begin{aligned} q &= (\beta^2 - n_1^2k^2)^{1/2} \\ h &= (k^2n_2^2 - \beta^2)^{1/2} \\ p &= (\beta^2 - n_3^2k^2)^{1/2} \\ k &= \omega/c \end{aligned} \tag{5.47}$$

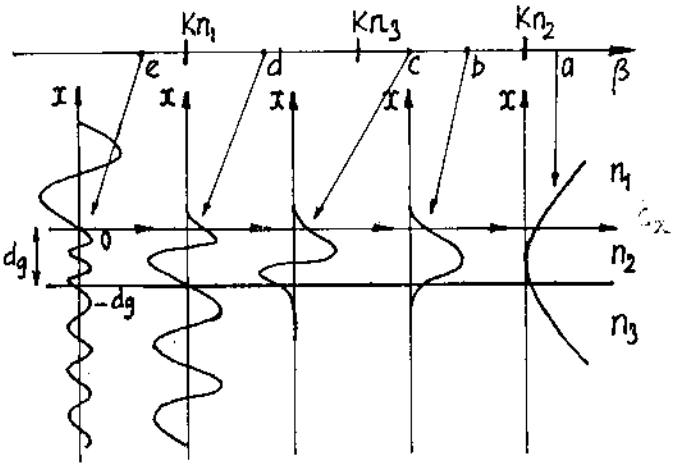
Chúng ta thấy rằng q, h và p đều được biểu diễn qua đại lượng β, hệ số truyền sóng theo trục z. Dùng điều kiện liên tục của $\frac{\partial\mathcal{E}_y}{\partial x}$ tại$x = -d_g$ ta sẽ nhận được điều kiện đối với β

$$-h\sin(-hd_g) - h(q/h)\cos(-hd_g) = p[\cos(hd_g) + (q/h)\sin(hd_g)]$$

hay là

$$\mathrm{tg}(hd_g) = \frac{q+p}{h(1-qp/h^2)} \tag{5.48}$$

Phương trình siêu việt này kết hợp với các phương trình (5.47) được giải bằng phương pháp đồ thị (vẽ hai vế theo β). Không phụ thuộc vào phương pháp giải, kết quả cho ta một tập hợp các giá trị cho phép gián đoạn của β, ứng với các mode cho phép, ký hiệu là β_m. Từ β_m chúng ta tính được q_m, h_m, p_m.



Hình 5.4: *Sự phụ thuộc $\mathcal{E}_y(x)$ vào x trong các mode khác nhau.*

Giá trị c' được xác định từ điều kiện chuẩn hoá theo công suất đi qua trên một đơn vị bề rộng theo trục y.

Đối với trường hợp $n_2 > n_3 > n_1$ ta có thể nhận được những mode có dạng như ở hình (5.4).

Quan hệ $n_2 > n_3 > n_1$ là thường gặp: một linh kiện dẫn sóng làm từ vật liệu có chiết suất n_2 trên đế có chiết suất n_3 và bao quanh là không khí có chiết suất n_1.

Điều kiện cần thiết của linh kiện dẫn sóng là $n_2 > n_1$ và n_3. Từ hình (5.4) ta thấy rằng:

- mode (a) không có ý nghĩa vật lý.

- mode (b) và (c) là sóng được dẫn truyền (guided mode) là sóng ngang của điện trường bậc 0 và bậc 1:TE_0, TE_1

- mode (d) giảm theo exp khi ra ngoài nhưng tồn tại theo hàm sin trong đế và gọi là mode bức xạ đế (substrate radiation mode). Nó không có lợi trong việc truyền tín hiệu, nhưng có thể rất có lợi trong việc dùng để tiếp nối ví dụ trong ghép nối hình nêm (tapered coupler).

- mode (e) là mode không dẫn truyền được trong linh kiện dẫn sóng . Từ đây chúng ta thấy rằng chỉ có những giá trị β nằm trong khoảng $kn_3 < \beta < kn_2$ mới ứng với các mode có thể dẫn truyền được trong linh kiện dẫn sóng. Tuy nhiên như đã nói trên đây trong khoảng từ kn_3 đến kn_2 cũng chỉ có một số

giá trị gián đoạn của β là β_m ứng với các mode cho phép. Các giá trị β_m sẽ cho ta các mode $TE_j, j = 0, 1, 2, \cdots$

Số mode cho phép phụ thuộc vào bề dày d_g của linh kiện dẫn sóng và các đại lượng ω, n_1, n_2 và n_3. Với các giá trị d_g, n_1, n_2, n_3 cho trước sẽ tồn tại một giá trị tần số tới hạn ω_c mà sóng có tần số nhỏ hơn ω_c không thể dẫn truyền được. Tuy nhiên trong thực tế tần số ánh sáng đã được chọn trước như một thông số cố định, vì thế vấn đề đặt ra là: Khi cho trước bước sóng ánh sáng thì chiết suất của các lớp vật liệu trong linh kiện dẫn sóng phải được chọn như thế nào để có thể truyền dẫn một mode cho trước. Đối với loại linh kiện dẫn sóng được gọi là bất đối xứng với$n_1 \ll n_3$ thì điều kiện đối với chiết suất sẽ là

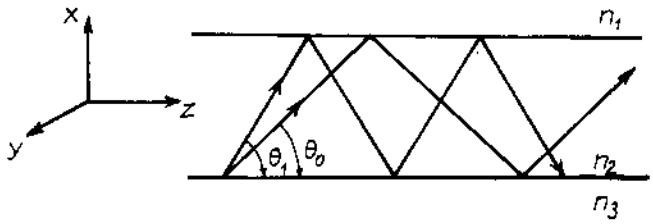
$$\Delta n = n_2 - n_3 \geq (2m+1)^2 \cdot \lambda_0^2/(32 n_2 d_g^2) \tag{5.49}$$

trong đó $m = 0, 1, 2, \cdots$ là số thứ tự mode, λ_0 là bước sóng ánh sáng trong chân không. Sự chênh lệch chiết suất cần thiết để truyền dẫn các mode có số thứ tự mode thấp là rất nhỏ.

Ví dụ trong linh kiện dẫn sóng gali asenua (GaAs) với $n_2 = 3,6; d_g \approx \lambda_0$ thì Δn cần thiết để truyền dẫn mode TE_0 là 10^{-2}.

$\Delta n = n_2 - n_3$ gọi là độ chênh chiết suất tuyệt đối.

5.2.3 Phương thức truyền sóng trong linh kiện dẫn sóng quang theo mô hình quang học tia (ray-optics). Trong mục trên (5-2-2) chúng ta xét sự lan truyền ánh sáng trong linh kiện dẫn sóng như sự lan truyền sóng điện từ, được biểu diễn như là lời giải của phương trình sóng Maxwell, với các điều kiện biên trên mặt phân cách của linh kiện dẫn sóng. Những sóng bản phẳng lan truyền theo trục z trong linh kiện dẫn sóng dưới dạng một hay nhiều mode quang học. Trong các mode đó ánh sáng lan truyền với vận tốc khác nhau, đặc trưng cho mỗi mode. Phương pháp nghiên cứu sự lan truyền ánh sáng như vậy gọi là phương pháp quang học vật lý(quang lý). Một phương pháp nghiên cứu sự lan truyền ánh sáng khác được gọi là phương pháp quang học-tia (ray-optics)cũng có thể mô tả sự lan truyền ánh sáng trong linh kiện dẫn sóng tuy không toàn diện nhưng đơn giản và dễ hiểu hơn. Trong phương pháp quang học-tia sự lan truyền ánh sáng theo trục z được xem như tạo nên bởi sự lan truyền của các sóng bản phẳng theo đường zig-zag trong mặt phẳng x-y do sự phản xạ toàn phần từ các mặt phân cách tạo nên linh kiện dẫn sóng. Các sóng bản phẳng bao gồm những mode chuyển động với cùng một vận



Hình 5.5: *Sơ đồ tia của hai mode TE_0 và TE_1.*

tốc pha. Tuy nhiên do góc phản xạ tạo bởi các đường zig-zag khác nhau đối với từng mode, cho nên thành phần z của vận tốc pha của chúng khác nhau. Sóng bản phẳng nói chung được biểu diễn bằng một tia vẽ vuông góc với các mặt phẳng sóng đồng pha. Chính vì thế phương pháp này được gọi là quang học tia.

1. Sơ đồ tia trong linh kiện dẫn sóng bản phẳng ba lớp

Trên hình vẽ (5.5) vẽ sơ đồ tia ứng với hai mode TE_0và TE_1 lan truyền trong linh kiện dẫn sóng ba lớp với $n_2 > n_3 > n_1$.

Điện trường $\vec{\mathcal{E}}$ của các sóng bản phẳng lan truyền theo các đường zig-zag sẽ cộng vectơ với nhau và cho ta sự phân bố điện trường $\vec{\mathcal{E}}$ của các sóng tạo nên chính hai mode TE_0 và TE_1 trong ví dụ và lan truyền theo trục z như đã được mô tả trong mô hình quang lý. Cả quang học tia và quang lý đều có thể dùng để biểu diễn sóng TE với các thành phần $\mathcal{E}_y, H_z$, và H_x.

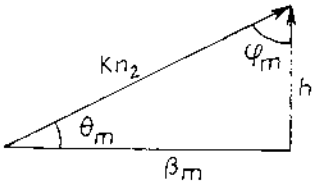
Sự liên quan giữa hai phương pháp đó có thể hiểu rõ nếu để ý đến công thức (5.44). Có thể chỉ ra rằng lời giải của phương trình sóng trong vùng 2 của linh kiện dẫn sóng có dạng

$$\mathcal{E}_y(x,y) \sim \sin(hx + \gamma) \tag{5.50}$$

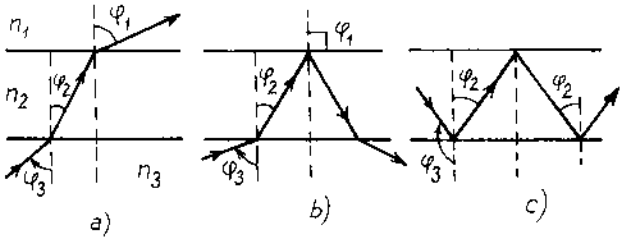
trong đó đã giả thuyết mode là TE, h và γ phụ thuộc vào cấu trúc của linh kiện dẫn sóng. Thay (5.50) vào phương trình (5.44) vùng 2 ta có:

$$\beta^2 + h^2 = k^2 n_2^2$$

trong đó $k = \frac{\omega}{c}$, và có thể thấy rằng β, h và kn_2 đều là các hệ số lan truyền có thứ nguyên $[m^{-1}]$. Một mode với hệ số lan truyền theo trục z là β_m và hệ số lan truyền theo trục x là h, có thể biểu diễn bằng một sóng bản phẳng lan truyền theo phương làm thành góc $\theta_m = \arctan(h/\beta_m)$ với trục z, có hệ số lan



Hình 5.6: *Sơ đồ biểu diễn sự liên quan của các hệ số lan truyền.*



Hình 5.7: *Các mode khác nhau trong mô hình quang học tia.*

truyền kn_2 như ở hình (5.6). Vì tần số không đổi, $kn_2 = (\frac{\omega}{c} \cdot n_2)$ cũng không đổi, trong khi đó θ_m, β_m, h là tất cả những thông số liên quan đến mode thứ m, có giá trị khác nhau đối với từng mode.

Ta xét tia sáng lan truyền trong một linh kiện dẫn sóng ba lớp bằng mô hình quang học tia (hình (5.7)). Tia ở hình (5.7a) ứng với mode bức xạ (mode a), ở hình (5.7b) là mode đế (substrate mode), ở hình (5.7c) là mode được dẫn truyền (guided mode). Các góc tới, góc khúc xạ φ được xác định giữa tia sáng và pháp tuyến của mặt phân cách tuân theo định luật khúc xạ Snell:

$$\sin\varphi_1 / \sin\varphi_2 = \frac{n_2}{n_1} \tag{5.51}$$

$$\sin\varphi_2 / \sin\varphi_3 = \frac{n_3}{n_2} \tag{5.52}$$

Nếu từ giá trị φ_3 rất nhỏ (gần bằng không) và tăng dần φ_3, chúng ta sẽ thấy sự diễn biến sau:

a- Khi φ_3 nhỏ tia sáng sẽ đi xuyên qua cả hai mặt phân cách, chỉ xẩy ra hiện tượng khúc xạ ở các mặt phân cách đó. Trường hợp đó ứng với mode bức xạ (radiation mode) hình (5.7a).

b- Khi φ_3 tăng lên để cho φ_2 đạt đến góc tới hạn của hiện tượng phản xạ toàn phần bên trong ở mặt phân cách $n_2 - n_1$ thì tia sáng đã bị nhốt lại một phần, ứng với mode đế (substrate mode) hình (5.7b). Điều kiện phản xạ toàn phần bên trong là:

$$\varphi_2 \geq \arcsin(n_1/n_2) \tag{5.53}$$

hay là suy ra từ (5.51) và (5.52):

$$\frac{\sin\varphi_1}{\sin\varphi_2} \cdot \frac{\sin\varphi_2}{\sin\varphi_3} = \frac{n_3}{n_1}, \text{hay} \varphi_3 \geq \arcsin(n_1/n_3) \tag{5.54}$$

c- Khi φ_3 tiếp tục tăng lên để cho φ_2 đạt đến góc tới hạn của hiện tượng phản xạ toàn phần bên trong ở mặt phân cách $n_2 - n_3$ thì tia sáng bị nhốt lại hoàn toàn ứng với mode truyền dẫn (giuded mode) như ở hình (5.7c). Trong trường hợp đó góc tới hạn φ_2 được xác định bởi điều kiện :

$$\varphi_2 \geq \arcsin(n_3/n_2) \tag{5.55}$$

Từ (5.55) và (5.52) ta có

$$\varphi_3 \geq \arcsin(1) = 90^0, \quad \varphi_3 \geq 90^0 \tag{5.56}$$

Các điều kiện (5.53)và (5.55) xác định các loại mode có thể duy trì trong linh kiện dẫn sóng theo giá trị φ_2 cũng tương tự như điều kiện (5.44) phụ thuộc vào β.Theo (5.44) mode bức xạ xuất hiện khi $\beta < kn_1$. Từ hình (5.6) ta thấy

$$\sin\varphi_2 = \beta/kn_2 \tag{5.57}$$

Như vậy, nếu $\beta \leq kn_1$ thì

$$\sin\varphi_2 \leq kn_1/kn_2 = n_1/n_2 \tag{5.58}$$

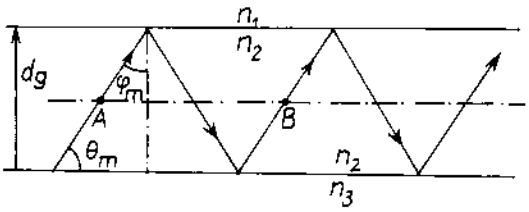
Điều kiện này phù hợp với (5.53). Cũng tương tự như vậy nếu β lớn hơn kn_1 và nhỏ hơn kn_3 thì có thể duy trì mode đế.

Chỉ khi $\beta \geq kn_3$ mới có thể duy trì mode truyền dẫn . Từ hình (5.6) nếu $\beta \geq kn_3$ thì

$$\sin\varphi_2 = \beta/kn_2 \geq (kn_3/kn_2) = n_3/n_2 \tag{5.59}$$

Như vậy kết quả (5.59) [illegible]n được [illegible] lý trùng với kết quả thu được từ quang hình (5.55). Cuối [illegible]ng nếu $\beta > kn_2$ thì

$$\sin\varphi_2 = \beta/kn_2 \geq 1$$



Hình 5.8: *Sơ đồ giải thích các mode được phép dẫn truyền.*

ứng với trường hợp không có ý nghĩa vật lý, mode (a) trên hình (5.4)

Như vậy những kết quả nghiên cứu bằng quang hình và quang lý là phù hợp với nhau.

2. Bản chất gián đoạn của hệ số lan truyền β

Kết quả nghiên cứu phương trình truyền sóng Maxwell trên đây cho thấy chỉ có một số giá trị β_m gián đoạn nằm trong khoảng $kn_3 \leq \beta \leq kn_2$ cho ta những mode dẫn truyền được trong linh kiện dẫn sóng, nghĩa là các mode được phép. Bây giờ chúng ta xét vấn đề này từ góc độ quang học-tia.

Mặt sóng bản phẳng vuông góc với các tia zig-zag được xem là vô hạn, chí ít cũng rộng hơn tiết diện của linh kiện dẫn sóng, ở đây chúng đã bị chặn. Mặt khác chúng cũng không phù hợp với định nghĩa của một sóng bản phẳng, đòi hỏi pha trên mặt sóng phải hoàn toàn như nhau. Ở đây có sự chồng chất các sóng tới và các sóng phản xạ từ mặt phân cách khi chúng lan truyền theo các tia zig-zag. Để tránh sự triệt tiêu năng lượng quang do sự giao thoa của các sóng lệch pha, khi chúng lan truyền trong linh kiện dẫn sóng, cần thỏa mãn điều kiện sau: độ lệch pha tổng cộng giữa hai điểm trên mặt sóng sau hai lần lan truyền và phản xạ qua lại trên mặt phân cách $n_1 - n_2$ và mặt phân cách $n_2 - n_3$ phải bằng một số nguyên lần 2π. Ta gọi điều kiện này là điều kiện giao thoa.

Điều kiện đó có nghĩa là độ lệch pha giữa hai điểm A và B trên hình (5.8) phải bằng $2m\pi, m$ là số nguyên. Từ điều kiện này ta có:

$$\frac{2\pi \cdot 2n_2 d_g}{\lambda_0 \cos\varphi_m} - \delta_{23} - \delta_{21} = 2m\pi \tag{5.60}$$

với $m = 1, 2, 3, \cdots$. hay là

$$\frac{2kn_2 d_g}{\sin\theta_m} - \delta_{23} - \delta_{21} = 2m\pi \tag{5.61}$$

với $\frac{2\pi}{\lambda_0} = k, d_g$ bề dày của linh kiện dẫn sóng, m là số nguyên, δ_{23} và δ_{21} là góc dịch pha khi phản xạ toàn phần. Góc dịch pha δ_{23} và δ_{21} có thể xem như sự

thâm nhập của tia zig-zag vào trong lớp 1 và 3, trước khi phản xạ trở lại. Đối với sóng TE, người ta đã tính được δ_{23} và δ_{21}

$$\mathrm{tg}\delta_{23} = (n_2^2 \sin^2\varphi_2 - n_3^2)^{1/2}/(n_2 \cos\varphi_2) \tag{5.62}$$

$$\mathrm{tg}\delta_{21} = (n_2^2 \sin^2\varphi_2 - n_1^2)^{1/2}/(n_2 \cos\varphi_2) \tag{5.63}$$

Thay (5.62) và (5.63) vào (5.61) ta nhận được một phương trình siêu việt một biến số θ_m (hay φ_m) với

$$\varphi_m = \frac{\pi}{2} - \theta_m$$

Đối với m cho trước có thể tính được n_1, n_2, n_3 và d_g, φ_m,(hay θ_m). Như vậy ta nhận được một số giới hạn các giá trị φ_m gián đoạn ứng với các mode được phép khác nhau, tuy nhiên φ_m phải lớn hơn góc tới hạn của hiện tượng phản xạ toàn phần.

Đối với mỗi mode được phép ta có giá trị β_mtương ứng

$$\beta_m = kn_2 \sin\varphi_m = kn_2 \cos\theta_m$$

Vận tốc lan truyền của ánh sáng theo phương của linh kiện dẫn sóng là:

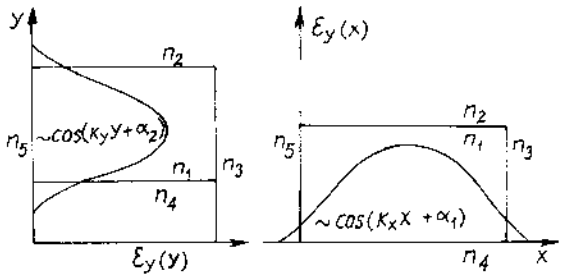
$$v_m = c \sin\varphi_m = c\frac{kn_2}{\beta_m}$$

Chúng ta có thể định nghĩa chiết suất hiệu dụng của linh kiện dẫn sóng là

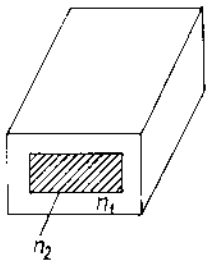
$$n_{eff} = c/v_m = \beta_m/kn_2$$

Ngoài ra ánh sáng lan truyền liên tục phản xạ toàn phần tại mặt biên của lõi. Chính vì vậy tại mặt biên cường độ điện trường phải bằng không do giao thoa giữa ánh sáng tới và ánh sáng phản xạ. Để thỏa mãn điều kiện này phải tồn tại một sóng đứng trong lõi theo trục x (theo hướng biên) như ở hình (5.4). Điều này dẫn đến sự tồn tại một số mode nhất định có thể dẫn truyền trong linh kiện, đó là điều kiện mặt biên ta sẽ xét kỹ hơn trong phần sợi quang sau này.

5.2.4 Cấu trúc linh kiện dẫn sóng quang trong mạch quang tích hợp. Ngoài cấu trúc dẫn sóng quang bản phẳng ba lớp chúng ta vừa mới xét, trong mạch quang tích hợp còn dùng các linh kiện dẫn sóng quang có tiết diện ngang chữ nhật với nhiều kiểu kết cấu và công nghệ chế tạo khác nhau.



Hình 5.9: *Sơ đồ biểu diễn một mode trong không gian ba chiều.*



Hình 5.10: *Sơ đồ linh kiện dẫn sóng dạng kênh.*

Lý thuyết tính toán các mode lan truyền trong loại linh kiện dẫn sóng chữ nhật rất phức tạp vì ở đây kính thước của linh kiện dẫn sóng không chỉ giới hạn theo trục x với bề dày d_g mà còn giới hạn theo trục y.

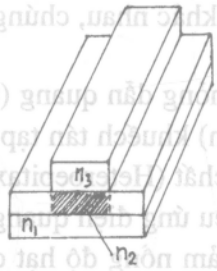
Một sóng điện TE dao động theo trục $y, \mathcal{E}_y$ sẽ tạo thành sóng đứng và có sự phân bố không những chỉ theo trục x như trong cấu trúc phẳng mà còn theo cả trục y. Vì thế một mode truyền dẫn trong linh kiện phải thoả mãn điều kiện dẫn truyền theo trục x và điều kiện theo trục y. Ví dụ mode $\mathcal{E}_{11}^y$ được biểu diễn trên hình (5.9) theo trục x và trục y.

Chúng ta có thể kể ra dưới đây một số kiểu kết cấu linh kiện dẫn sóng khác nhau:

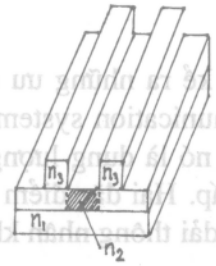
1. Linh kiện dẫn sóng dạng kênh.

Đó là một kênh dẫn sóng có tiết diện ngang hình chữ nhật có chiết suất n_2 được bao quanh bởi một vật liệu có chiết suất n_1 nhỏ hơn n_2. Loại linh kiện dẫn sóng này được gọi là linh kiện dẫn sóng dạng kênh, hay dạng ba chiều; trên hình (5.10) biểu diễn một loại linh kiện dẫn sóng dạng kênh.

2. Linh kiện dẫn sóng dạng có dải phủ (strip-loaded waveguide).



Hình 5.11: *Sơ đồ linh kiên dẫn sóng dạng dải phủ.*



Hình 5.12: *Sơ đồ linh kiện dẫn sóng dạng 2 dải phủ kim loại.*

Linh kiện dẫn sóng này tạo thành bằng cách phủ một dải vật liệu có chiết suất n_3 nhỏ hơn lên phía trên một lớp dẫn sóng bản phẳng với chiết suất n_2, nằm trên đế có chiết suất n_1 nhỏ hơn n_2, như ở hình (5.11)

Như vậy linh kiện dẫn sóng dạng dải phủ này không phải được bao bọc bởi lớp vật liệu có $n_1 < n_2$ trong cả hai chiều x, y như linh kiện dẫn sóng dạng kênh, tuy nhiên ở đây do hiệu ứng tiếp xúc giữa các vật liệu hoặc do điện áp đặt vào dải phủ, chiết suất của lớp nằm phía dưới dải phủ (n_2) sẽ khác với hai phần bên cạnh, tạo nên một kênh dẫn sóng.

Dải phủ có thể không phải là lớp điện môi hay bán dẫn mà là lớp kim loại. Trong trường hợp này 2 dải phủ kim loại được phủ lên bề mặt của lớp dẫn sóng bản phẳng ở hai bên vùng dẫn sóng (vùng nhốt sóng) như ở hình (5.12). Kết cấu linh kiện dẫn sóng này thường dùng trong mạch điều biến điện quang, vì trong mạch đó cần thiết phải có một điện cực kim loại trên bề mặt, dải kim loại làm nhiệm vụ điện cực đó sẽ kiêm thêm vai trò của linh kiện dẫn sóng.

Để tạo các linh kiện dẫn sóng quang, trong công nghệ vi điện tử đã dùng

rất nhiều giải pháp công nghệ khác nhau, chúng ta có thể kể ra dưới đây một số giải pháp đó:

- Phương pháp phủ màng mỏng dẫn quang (thuỷ tinh, nitrit, oxit...)
- Bắn phá bằng ion (cấy ion) khuếch tán tạp chất để tạo lớp dẫn quang.
- Phát triển lớp exitaxy dị chất (Heteroepitaxial growth) dẫn quang.
- Phủ dải kim loại dùng hiệu ứng điện quang tạo lớp dẫn quang.
- Tạo lớp kém dẫn (làm giảm nồng độ hạt dẫn bằng epitaxy, khuếch tán tạp, cấy ion, bù trừ) có tính trước để thay đổi chiết suất tạo lớp dẫn quang.

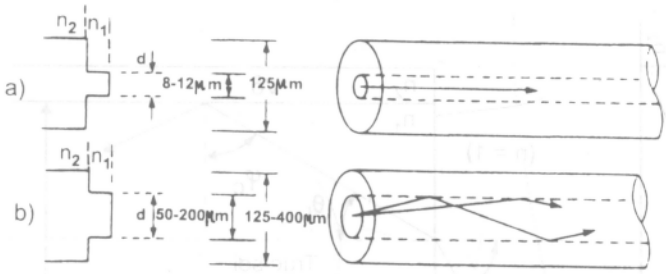
5.3 Sợi quang

Trong mục trước chúng ta đã kể ra những ưu điểm chính của hệ thông tin sợi quang (optical fiber communication system- OFCS), trong đó cần nhấn mạnh hai đặc điểm chính của nó là dung lượng mang thông tin cực cao và sự tổn hao của tín hiệu cực thấp. Hai đặc điểm quan trọng đó đã quyết định giá trị cao của tích số độ rộng dải thông nhân khoảng cách (bandwidth times distance- BWTD- product).

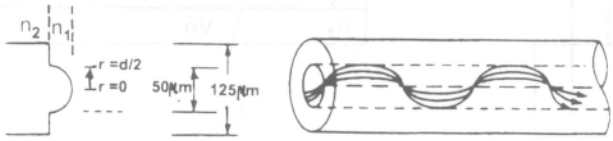
Khả năng đảm bảo một dải thông rộng của OFCS là tần số cao của ánh sáng truyền trong sợi quang. Các thế hệ sợi quang thứ I, II và III của OFCS hoạt động trên ba bước sóng quang tương ứng: $0,85\mu m$, $1,3\mu m$ và $1,5\mu m$. Với ánh sáng có bước sóng $1,5\mu m$ có tần số $2 \cdot 10^{14}$Hz nếu tần số điều biến chiếm 10% tần số mang, thì dải thông tín hiệu của sóng mang $1,5\mu m$ của hệ OFCS sẽ là 20000GHz. Một khả năng mang thông tin khổng lồ như vậy đủ để truyền hàng triệu kênh truyền hình. Ngày nay OFCS mới sử dụng một phần rất nhỏ dải thông đó do sự giới hạn của độ rộng dải thông máy phát và máy thu.

5.3.1 Tính chất, phân loại và công nghệ chế tạo. Năm 1966 Kao và Hockham bắt đầu nghiên cứu truyền thông tin bằng chùm laser trong các sợi thuỷ tinh. Khả năng dùng sợi thuỷ tinh có thể trở thành hiện thực khi sợi quang đạt những tính chất sau

1. Tính chất cần thiết của sợi quang. - Sợi quang phải có độ tổn hao thấp. Độ tổn hao chủ yếu bao gồm hai quá trình: hấp thụ bức xạ và tán xạ bức xạ. Như vậy để giảm tổn hao phải lựa chọn vật liệu và bước sóng tia laser tương ứng sao cho hệ số hấp thụ thấp nhất, phải nâng cao chất lượng vật liệu và thực hiện các phương pháp giảm thiểu sự tán xạ của bức xạ.



Hình 5.13: *Sợi quang giật cấp, a- đơn mode, b- đa mode.*



Hình 5.14: *Sợi quang liên tục.*

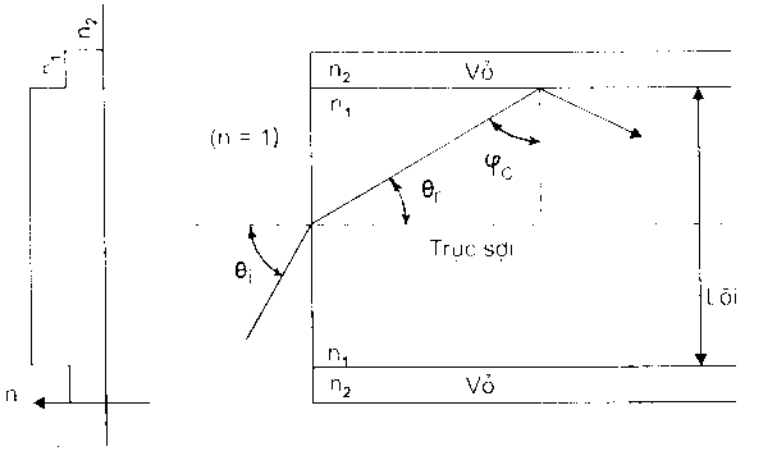
- Sợi quang phải có tính chất cơ học thích hợp, phải có độ bền, độ chịu mỏi do rung động cao

- Sợi quang phảicó tính lão hoá thấp, có thể sử dụng ổn định trong nhiều chục năm.

2. *Cấu tạo và phân loại sợi quang.* Sợi quang được phân loại theo cấu tạo, nghĩa là theo sự phân bố chiết suất quang học trong lõi (n_1) đối với chiết suất quang học của lớp vỏ (n_2), cũng như theo số mode sóng có thể dẫn truyền trong đó.

Sợi quang thường có tiết diện tròn, gồm hai phần : lõi và vỏ, kể cả lõi và vỏ có đường kính khoảng $100 \div 400\mu$m. Lớp vỏ có chiết suất không đổi n_2 nhỏ hơn chiết suất lớp lõi n_1. Chiết suất của lớp lõi có hai dạng: dạng không đổi và dạng có phân bố giảm dần từ trong ra ngoài. Loại thứ nhất gọi là sợi quang giật cấp (sợi quang chiết suất bậc thang), lọai thứ hai là sợi quang liên tục (sợi quang chiết suất giảm dần). Tùy kích thước của lõi sợi quang giật cấp có thể chỉ dẫn truyền một mode và gọi là sợi quang giật cấp đơn mode (như ở hình vẽ (5.13a)), sợi quang giật cấp có đường kính lõi lớn hơn thường dẫn truyền nhiều mode và gọi là sợi quang giật cấp đa mode (như ở hình vẽ 5-13b). Sợi quang liên tục thường dẫn truyền nhiều mode và gọi là sợi quang liên tục đa mode, được trình bày ở hình (5.14).

Trong cấu tạo của sợi quang còn có một thông số quang trọng nữa là độ



Hình 5.15: *Sơ đồ mô tả đại lượng khẩu độ số NA.*

chênh chiết suất $n_1 - n_2$. Người ta biểu diễn độ chênh chiết suất bằng đại lượng Δ được định nghĩa bởi công thức

$$n_2 = n_1(1 - \Delta); \Delta = \frac{n_1 - n_2}{n_1}$$

Đối với sợi quang đa mode $\Delta \approx 0,02$.

Đối với sợi quang đơn mode $\Delta \approx 0,005$.

Cấu tạo của sợi quang còn quyết định giá trị của một thông số quan trọng của nó, đó là khẩu độ số NA (Numerical Aperture). Giá trị của khẩu độ số NA được xác định bởi biểu thức

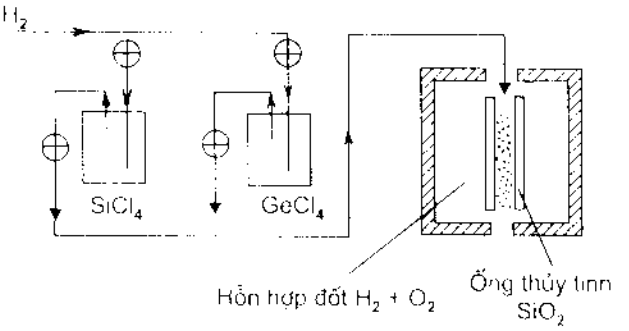
$$NA = \sin\theta_{i_{max}} = (n_1^2 - n_2^2)^{1/2}$$

trong đó $\theta_{i_{max}}$ là góc tới của tia sáng đặc trưng cho hiện tượng phản xạ toàn phần giữa lõi và vỏ của sợi quang. $\theta_{i_{max}}$ là góc tới (góc giữa tia tới với pháp tuyến của mặt tiết diện ngang của sợi quang, như ở hình (5.15)) lớn nhất để tia khúc xạ vào lõi còn gây nên hiện tượng phản xạ toàn phần ở ranh giới lõi và vỏ.

Khi độ chênh chiết suất không quá lớn ta có công thức gần đúng

$$NA = (n_1^2 - n_2^2)^{1/2} \cong n_1(2\Delta)^{1/2} \tag{5.64}$$

Khẩu độ số đặc trưng cho sự ghép nối hiệu quả giữa nguồn laser với sợi quang, nhưng nếu NA quá lớn sẽ làm tăng một hiện tượng không có lợi cho sự truyền



Hình 5.16: *Sơ đồ phương pháp công nghệ CVD.*

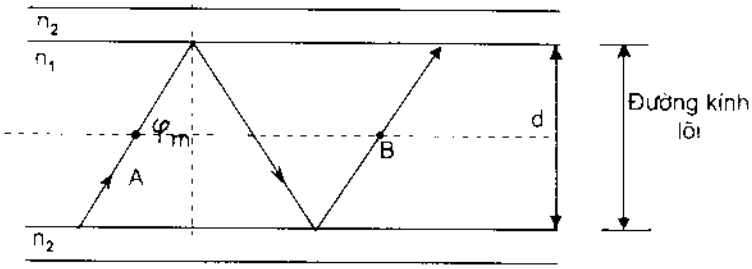
trung thực tín hiệu, đó là hiện tượng tán sắc mà ta sẽ xét sau. Vì vậy cần phải chọn một giá trị độ chênh chiết suất tối ưu.

3. Công nghệ chế tạo sợi quang. Khi mô tả sợi quang chúng ta xem sợi quang được cấu tạo từ hai phần: lõi và vỏ. Tuy nhiên trong công nghệ chế tạo và về mặt vật liệu thì hai phần đó được chế tạo đồng thời và liên tục về mặt vật liệu. Sự khác nhau về chiết suất trong hai phần đó được thực hiện bằng cách thay đổi nồng độ phụ gia (tạp chất trong vật liệu). Công nghệ chế tạo sợi quang được chia làm hai giai đoạn : giai đoạn chế tạo phôi (preform) và giai đoạn kéo sợi.

- Giai đoạn chế tạo phôi. Có hai phương pháp chính để chế tạo phôi đó là phương pháp lắng đọng hoá học từ pha hơi (chemical vapour Deposition-CVD) và phương pháp lắng đọng theo trục từ pha hơi (Vapour axial Deposition-VAD)

Phương pháp CVD có nhiều biến thể, ở đây chúng tôi chỉ trình bày một biến thể để làm ví dụ. Đó là phương pháp CVD trình bày ở hình (5.16)

Ở đây dòng khí mang H_2 thổi qua các bình đựng $SiCl_4$ và $GeCl_4$ để tạo dòng hơi. Dòng hơi hỗn hợp, với thành phần $SiCl_4$ và $GeCl_4$ được khống chế và điều chỉnh, được thổi vào một ống thạch anh (SiO_2)tinh khiết quay tròn đều. Ống thạch anh có chiều dài khoảng 1m đường kính trong khoảng vài cm, khi dòng hơi thổi qua xung quanh ống có dòng khí $H_2 + O_2$ cháy tạo nhiệt làm cháy các hơi $SiCl_4$ và $GeCl_4$ tạo thành HCl và các oxit SiO_2 và GeO_2. Các hạt SiO_2 pha tạp GeO_2 ngưng tụ lên thành ống làm cho thành ống dày lên dần cho tới khi cả ống trở thành một thỏi đặc. Ta có một phôi với sự phân bố chiết suất (sự phân bố tạp GeO_2) cần thiết theo thiết kế.



Hình 5.17: *Sơ đồ giải thích các mode được phép dẫn truyền trong sợi quang.*

- Giai đoạn kéo sợi: Từ các thỏi phôi có phân bố chiết suất xác định người ta kéo ra các sợi quang có phân bố chiết suất theo thiết kế trước. Các thỏi phôi được đặt trong các lò nung để nâng cao nhiệt độ, phôi đặt thẳng đứng, ở đầu cuối của phôi đạt nhiệt độ nóng chảy và từ đó kéo ra sợi quang gồm lõi và vỏ. Sợi quang được kéo xuống phía dưới được bọc lớp bảo vệ polime. Những sợi quang như thế này thường có độ dài từ vài km đến hàng chục km.

Cáp quang được chế tạo từ vài sợi quang đến vài chục sợi quang, có lõi thép để hạn chế độ cong xoắn và có thể có một số dây dẫn điện để tải dòng điện cung cấp cho nguồn của các bộ hồi phục trên đường dây.

5.3.2 Các mode dẫn truyền trong sợi quang giật cấp. Chúng ta có thể chứng minh sự tồn tại các mode sóng gián đoạn được phép dẫn truyền trong sợi quang bằng những lý luận giống như đối với linh kiện dẫn sóng đã trình bày trong mục (5-2-3). Để một mode sóng dẫn truyền được trong sợi quang giật cấp cần thỏa mãn các điều kiện sau:

1. Điều kiện phản xạ toàn phần. Để được dẫn truyền trong sợi quang tia sáng phải có góc tới đáp ứng điều kiện phản xạ toàn phần: $\sin\varphi > \frac{n_2}{n_1}$, nghĩa là $\varphi_m > \varphi_c = \arcsin\frac{n_2}{n_1}$.

2. Điều kiện giao thoa. Để tránh sự triệt tiêu năng lượng quang do sự giao thoa của các sóng tới và sóng phản xạ trên mặt biên của lõi, các tia sáng phải thỏa mãn điều kiện: Độ lệch pha tổng cộng giữa hai điểm A và B (như ở hình (5.17)) phải bằng một số nguyên lần 2π.

Điều kiện này có thể biểu diễn bằng phương trình tương tự (5.60) và gọi là điều kiện giao thoa:

$$\frac{2\pi}{\lambda_0}\cdot\frac{2n_1 d}{\cos\varphi_m} - 2\delta = 2m\pi \quad \text{với} \quad m = 1, 2, 3\ldots \tag{5.65}$$

và được mô tả ở hình (5.17).

Trong công thức này n_1 là chiết suất của lõi, δ là góc dịch pha khi phản xạ, λ_0 - bước sóng ánh sáng trong không khí. Mỗi giá trị φ_m ứng với một mode được phép, xác định bởi công thức suy ra từ (5.65)

$$\cos\varphi_m = \frac{2n_1(d/\lambda_0)}{m + (\delta/\pi)} \tag{5.66}$$

Vì δ rất nhỏ so với 2π còn m có thể rất lớn so với 1, nên ta có thể viết gần đúng:

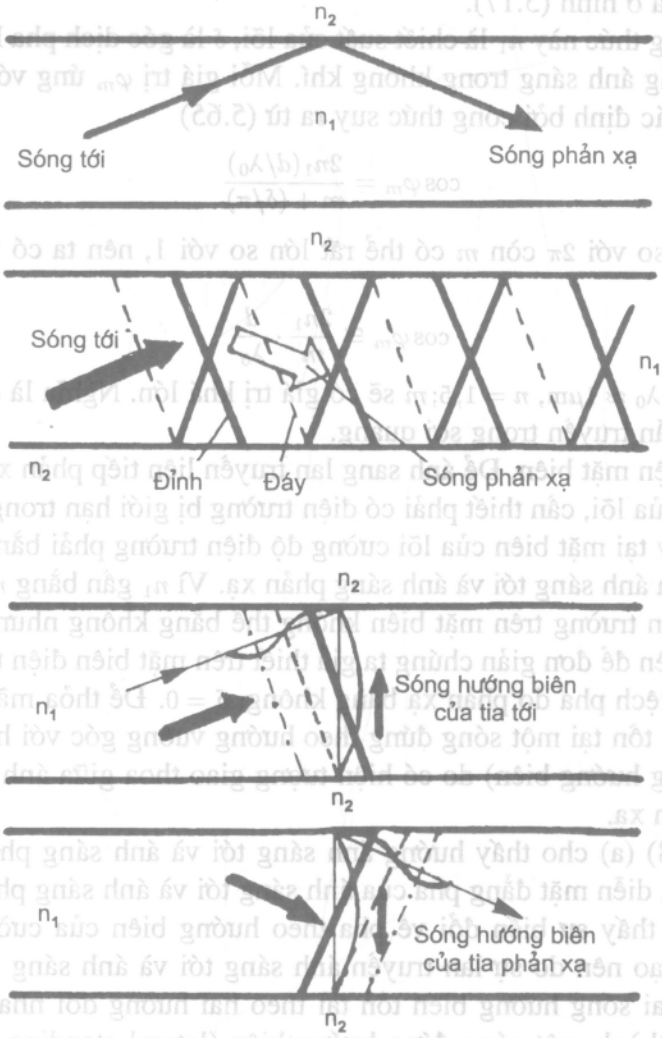
$$\cos\varphi_m \cong \frac{2n_1}{m} \cdot \frac{d}{\lambda_0} \tag{5.67}$$

với $d = 50\mu\text{m}, \lambda_0 \approx 1\mu\text{m}$, $n = 1,5; m$ sẽ có giá trị khá lớn. Nghĩa là có rất nhiều mode được dẫn truyền trong sợi quang.

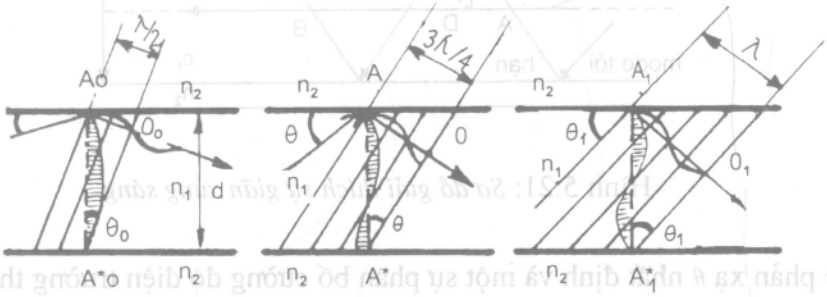
3. Điều kiện mặt biên. Để ánh sang lan truyền liên tiếp phản xạ toàn phần tại mặt biên của lõi, cần thiết phải có điện trường bị giới hạn trong lõi của sợi quang. Vì vậy tại mặt biên của lõi cường độ điện trường phải bằng không do giao thoa giữa ánh sáng tới và ánh sáng phản xạ. Vì n_1 gần bằng n_2 nên trong sợi quang điện trường trên mặt biên không thể bằng không nhưng có giá trị thấp. Tuy nhiên để đơn giản chúng ta giả thiết trên mặt biên điện trường bằng không và độ lệch pha do phản xạ bằng không, $\delta = 0$. Để thỏa mãn điều kiện mặt biên phải tồn tại một sóng đứng theo hướng vuông góc với hai mặt biên (ta gọi là sóng hướng biên) do có hiện tượng giao thoa giữa ánh sáng tới và ánh sáng phản xạ.

Hình (5.18) (a) cho thấy hướng ánh sáng tới và ánh sáng phản xạ, hình (5.18)(b) biểu diễn mặt đẳng pha của ánh sáng tới và ánh sáng phản xạ, hình (5.18)(c) cho thấy sự biến đổi về pha theo hướng biên của cường độ điện trường được tạo nên do sự lan truyền ánh sáng tới và ánh sáng phản xạ. Ở đây ta thấy hai sóng hướng biên tồn tại theo hai hướng đối nhau và chồng lên nhau tạo thành một sóng đứng hướng biên (lateral standing waves). Vì lý do đó sóng đứng hướng biên được tạo nên do phản xạ ở mặt biên có sự biến đổi pha của cường độ điện trường bằng một số nguyên lần π, như ở hình (5.19)(a,c). Trái lại khi góc biến đổi pha $\theta_0 < \theta < \theta_1$ $(\pi < \theta < 2\pi)$ như trên hình (5.19b) thì không tạo ra sóng đứng hướng biên. Từ những điều phân tích trên đây ta thấy các góc phản xạ $\varphi = \frac{\pi}{2} - \theta$ ứng với các mode dẫn truyền trong sợi quang bị giới hạn trong một số giá trị nhất định.

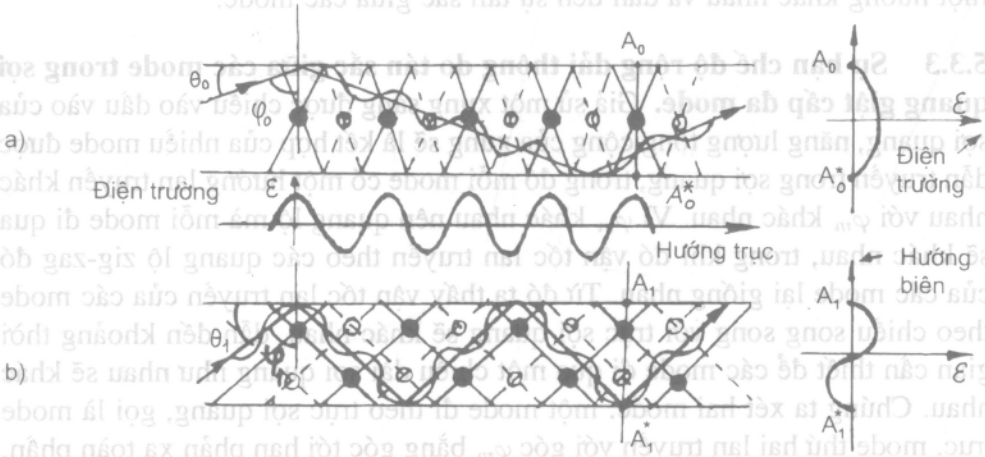
Hình (5.20) cho hai trường hợp giao thoa có cường độ điện trường theo hướng biên biến đổi theo π và 2π. Sóng lan truyền trong sợi quang với một



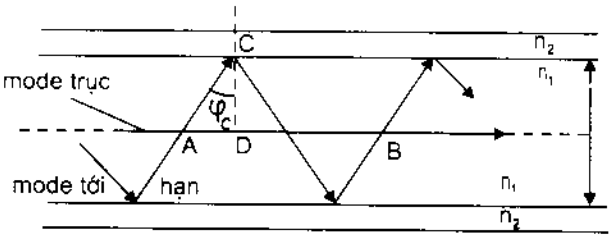
Hình 5.18: *Mô tả sự phản xạ sóng ánh sáng ở mặt biên: a- hướng của sóng tới và sóng phản xạ; b- các mặt đẳng pha của sóng tới và sóng phản xạ ; c- sóng tới và sóng phản xạ được quan sát theo hướng mặt biên.*



Hình 5.19: *Mô tả trường hợp các góc phản xạ tạo nên sóng đứng hướng biên: a- khi ánh sáng với góc tới θ_0 đi một quãng đường $\frac{\lambda}{2}$ pha của điện trường biến đổi một lượng bằng π giữa A_0 và A_0^*, hình thành sóng hướng biên; b- với góc $\theta_0 < \theta < \theta_1$ sóng hướng biên không hình thành; c- với góc θ_1 pha của điện trường biến đổi một lượng bằng 2π giữa A_1 và A_1^* hình thành sóng hướng biên.*



Hình 5.20: *Mô tả sự giao thoa giữa sóng tới và sóng phản xạ có cường độ điện trường theo hướng biên, biến đổi theo π (hình a) và 2π (hình b), tạo nên sóng đứng hướng biên mode bậc không (a) và mode bậc 1 (b). Các chấm đen ứng với đỉnh sóng chồng đỉnh sóng, còn vòng trắng ứng với đáy chồng đáy.*



Hình 5.21: *Sơ đồ giải thích sự giãn xung sáng.*

góc phản xạ θ nhất định và một sự phân bố cường độ điện trường theo hướng biên nhất định được gọi là mode sóng. Số mode sóng dẫn truyền là hữu hạn và được gọi theo thứ tự: mode bậc 0, mode bậc 1, mode bậc 2, ..., mode bậc $N-1$. Điều kiện mặt biên như trên đã phân tích được biểu diễn bằng công thức:

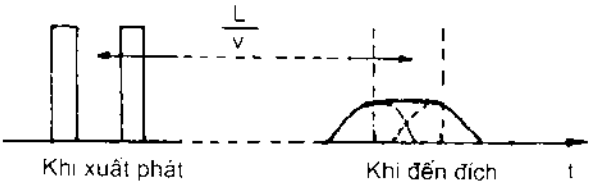
$$d\sin\theta_m = d\cos\varphi_m = m\lambda/2; \quad \text{với} \quad m = 0, 1, 2, \ldots, N-1,$$

m là số thứ tự mode, N là số mode có thể.

Chính vì vậy trong sợi quang có nhiều mode, mỗi mode lan truyền theo một hướng khác nhau và dẫn đến sự tán sắc giữa các mode.

5.3.3 Sự hạn chế độ rộng dải thông do tán sắc giữa các mode trong sợi quang giật cấp đa mode. Giả sử một xung sáng được chiếu vào đầu vào của sợi quang, năng lượng tổng cộng của xung sẽ là kết hợp của nhiều mode được dẫn truyền trong sợi quang, trong đó mỗi mode có một hướng lan truyền khác nhau với φ_m khác nhau. Vì φ_m khác nhau nên quang lộ mà mỗi mode đi qua sẽ khác nhau, trong khi đó vận tốc lan truyền theo các quang lộ zig-zag đó của các mode lại giống nhau. Từ đó ta thấy vận tốc lan truyền của các mode theo chiều song song với trục sợi quang sẽ khác nhau, dẫn đến khoảng thời gian cần thiết để các mode đi qua một chiều dài sợi quang như nhau sẽ khác nhau. Chúng ta xét hai mode: một mode đi theo trục sợi quang, gọi là mode trục, mode thứ hai lan truyền với góc φ_m bằng góc tới hạn phản xạ toàn phần, là mode tới hạn. Xét thời gian hai mode đó lan truyền từ tiết diện A đến tiết diện B của sợi quang như trong hình (5.21). Dễ hiểu rằng thời gian đó sẽ cực tiểu đối với mode trục và cực đại đối với mode tới hạn.

$$t_{\min} = \frac{AB}{v} = \frac{AB \cdot n_1}{c}$$



Hình 5.22: *Minh họa sự giảm dải thông.*

$$t_{\max} = \frac{AB}{v \cdot \sin\varphi} = \frac{AB}{\sin\varphi_c}\frac{n_1}{c};$$

với góc tới hạn, $\sin\varphi_m = \frac{n_2}{n_1}$. Ta có thể gọi $\Delta t = (t_{\max} - t_{\min})$ là độ giãn xung sáng và ta có:

$$\Delta t = \frac{AB \cdot n_1}{c}\left(\frac{1}{\sin\varphi_c} - 1\right) = t_{\min}\left(\frac{n_1}{n_2} - 1\right) \tag{5.68}$$

Như vậy do thời gian mà các mode đi qua cùng một chiều dài sợi quang là khác nhau, nên xung sáng bị giãn ra, hiện tượng đó được gọi là hiện tượng tán sắc giữa các mode. Sự giãn các xung sáng dẫn đến sự giới hạn độ rộng dải thông của sợi quang.

Xét một chiều dài sợi quang L, ký hiệu thời gian lan truyền của mode trục qua chiều dài L là $t_{\min} = \tau$ và gọi là thời gian dẫn truyền. Từ (5.68) ta viết lại công thức của độ giãn xung sáng:

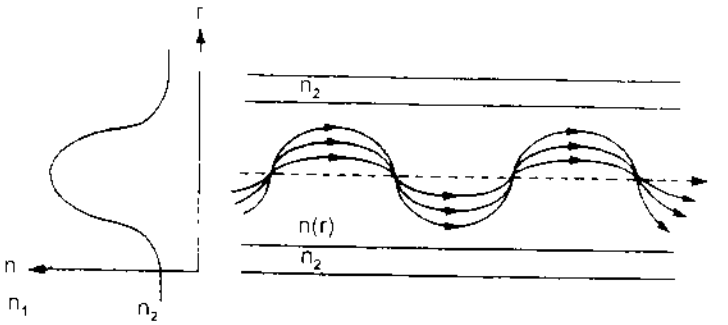
$$\Delta t = \tau\left(\frac{n_1 - n_2}{n_2}\right) = \frac{L \cdot n_1}{C \cdot n_2}(n_1 - n_2) \tag{5.69}$$

Do sự giãn xung sáng nên để tránh các xung chập nhau chúng ta phải truyền các xung thưa ra, nghĩa là tốc độ truyền phải giảm xuống, như minh họa ở hình (5.22), điều đó có nghĩa là độ rộng dải thông giảm xuống. Gọi B là độ rộng dải thông cực đại, người ta chứng minh rằng, giá trị của B bị giới hạn bởi công thức

$$B \leq \frac{1}{4\Delta t} = \frac{c \cdot n_2}{4L \cdot n_1} \cdot \frac{1}{n_1 - n_2} \tag{5.70}$$

với $L = 1\text{km}$, $\Delta = 0,01; n_1 = 1,5, B = 5\text{Mbit/s}$.

Giá trị 5Mbit/s rất nhỏ so với độ rộng dải thông có thể 20.000GHz. Như vậy hiện tượng tán sắc giữa các mode trong sợi quang đa mode giật cấp đã làm cho độ rộng dải thông sử dụng được bị thu hẹp lại đáng kể, làm cho sợi quang



Hình 5.23: *Sợi quang liên tục đa mode.*

không còn tỏ rõ tính ưu việt về độ rộng dải thông của nó so với cáp bọc kim. Từ (5.70) ta thấy để nâng cao B có thể giảm $(n_1 - n_2)$, độ chênh chiết suất. Nhưng giảm Δ sẽ làm giảm khẩu độ của sợi quang, hơn thế nữa việc giảm Δ xuống dưới 1% sẽ gặp khó khăn về mặt công nghệ.

Để giảm sự tán sắc giữa các mode và từ đó nâng cao độ rộng dải thông, người ta chế tạo ra sợi quang liên tục đa mode, trong đó giá trị chiết suất n_1 của lõi thay đổi đến n_2 một cách liên tục.

5.3.4 Sợi quang liên tục đa mode. Sợi quang trong đó chiết suất của lõi n_1 thay đổi liên tục sang chiết suất của vỏ n_2, như ở hình (5.23) gọi tắt là sợi quang liên tục.

Nguồn gốc của hiện tượng tán sắc giữa các mode trong sợi quang giật cấp là việc năng lượng của một xung quang (trong tín hiệu nhị phân) được mang bởi nhiều mode sóng lan truyền theo những quang lộ zig-zag có chiều dài khác nhau nhưng cùng một vận tốc.

Trong sợi quang liên tục đa mode bằng quy luật thay đổi chiết suất của lõi đến chiết suất của vỏ người ta tạo ra một điều kiện để những mode sóng có quang lộ dài sẽ chuyển động với vận tốc cao hơn các mode sóng có quang lộ ngắn. Bằng cách này ta có thể giảm được Δt, giảm được sự sai khác về thời gian dẫn truyền của các mode khác nhau qua một chiều dài sợi quang nhất định. Chúng ta biết rằng vận tốc lan truyền của ánh sáng $v = \frac{c}{n}$, cho nên nếu ta thay đổi chiết suất một cách liên tục như ở hình (5-20) thì các mode có quang lộ dài sẽ chuyển động trong vùng có chiết suất nhỏ và do đó vận tốclớn hơn. Theo tính toán quy luật chiết suất thay đổi theo bán kính có dạng parabol sẽ làm giảm Δt đến tối thiểu, quy luật đó đã được thực hiện trong các

loại sợi quang thương mại. Tuy nhiên việc khống chế quy luật thay đổi chiết suất một cách chính xác trong công nghệ là một việc khó, nên người ta chưa thể khắc phục hoàn toàn hiện tượng tán sắc giữa các mode.

5.3.5 Sợi quang giật cấp đơn mode. Để mô tả sự lan truyền của sóng quang học trong sợi quang một cách chính xác, chúng ta phải giải phương trình sóng Maxwell trong toạ độ trụ với các điều kiện biên thích hợp tại mặt phân cách lõi - vỏ của sợi. Tuy nhiên những tính toán đó sẽ công kềnh phức tạp hơn trường hợp linh kiện dẫn sóng bản phẳng mà ta đã nghiên cứu trong mục (5-2)

1. Điều kiện đơn mode. Đối với sợi quang giật cấp đơn mode chúng ta quan tâm đến điều kiện để cho một sợi quang giật cấp chỉ truyền dẫn một mode sóng duy nhất. Những kết quả nghiên cứu bằng phương trình sóng Maxwell cho phép biểu diễn điều kiện đơn mode của sợi quang giật cấp qua một thông số của sợi gọi là tần số chuẩn hoá, được ký hiệu bằng V.

Tần số chuẩn hoá V, còn được gọi là số V hay thông số V (V-number, V–parameter) của sợi quang giật cấp, được định nghĩa là

$$V = \frac{2\pi d}{\lambda_0}(n_1^2 - n_2^2)^{1/2} \tag{5.71}$$

Trong đó d - đường kính lõi, n_1 và n_2 là chiết suất của lõi và vỏ, λ bước sóng ánh sáng trong lõi.

Điều kiện đơn mode trong sợi sợi quang giật cấp là

$$V = \frac{2\pi d}{\lambda_0}(n_1^2 - n_2^2)^{1/2} \leq 2,405 \tag{5.72}$$

Nếu $V > 2,405$ thì trong sợi quang được dẫn truyền nhiều hơn một mode đối với bước sóng λ_0. Ứng dụng 5.72, chúng ta có thể xác định được bước sóng cắt (cut-off wavelength) λ_c, (nếu $\lambda_0 < \lambda_c$ ta có đa mode)

$$\lambda_c = \frac{2\pi d}{2,405}(n_1^2 - n_2^2)^{1/2} \tag{5.73}$$

Chúng ta có thể tìm được điều kiện đơn mode và bước sóng cắt từ điều kiện dẫn truyền các mode theo quang học tia: $d\sin\theta_m = m\lambda/2$ và điều kiện phản xạ toàn phần $\sin\theta_{imax} = \sin\theta_c n_1$, trong đó $\sin\theta_{imax} = NA = \sqrt{n_1^2 - n_2^2}$ là khẩu độ số của sợi quang. Từ đây ta có $\sin\theta_c = \sqrt{n_1^2 - n_2^2}/n_1$. Gọi N là số mode có thể dẫn truyền được trong sợi quang thì ta có: $d\sin\theta_c \geq N\lambda/2$, vì $\lambda = \frac{\lambda_0}{n_1}$ nên

$$d\sin\theta_c \geq \frac{N\lambda_0}{2n_1} \quad \text{và} \quad N \leq \frac{2n_1}{\lambda_0}d\sin\theta_c = \frac{2n_1}{\lambda_0}d\frac{\sqrt{n_1^2 - n_2^2}}{n_1}$$

nghĩa là $N \leq \frac{2d}{\lambda_0}\sqrt{n_1^2 - n_2^2}$.

Công thức này và các công thức trên đây đều được tính cho linh kiện dẫn sóng bản phẳng, trong đó các mặt biên phản xạ là mặt phẳng. Đối với trường hợp sóng quang, lõi có tiết diện tròn công thức này có dạng:

$$N \leq \frac{2\pi d}{2,405\lambda_0}\sqrt{n_1^2 - n_2^2}$$

và điều kiện đơn mode thu được khi $N = 1$ nghĩa là:

$$2,405 \leq \frac{2\pi d}{\lambda_0}\sqrt{n_1^2 - n_2^2}$$

bước sóng cắt là $\lambda_c = \frac{2\pi d}{2,405}\sqrt{n_1^2 - n_2^2}$.

2. *Cấu tạo.* Điều kiện (5.73) có nghĩa là một sợi quang giật cấp sẽ là sợi quang đơn mode đối với bước sóng lớn hơn hoặc bằng λ_c và sẽ là sợi quang đa mode đối với bước sóng nhỏ hơn λ_c. Nếu lấy $n_1 = 1,53$, độ chênh chiết suất là 0,002 thì $(n_1^2 - n_2^2)^{1/2} \approx 0,08$, từ đó ta thấy để có được sợi quang giật cấp đơn mode cần thoả mãn điều kiện $\frac{d}{\lambda_0} \leq 6$, hay là $d \leq 6\lambda_0$.

Vì điều kiện này, thế hệ sợi quang thứ nhất hoạt động ở bước sóng $\lambda_0 = 0,8\mu\text{m}$ đã không thích hợp do một số nguyên nhân sau:

- Nguồn sáng LED có độ rộng phổ lớn gây nên sự tán sắc (chromatic dispersion).
- Sự tổn hao lớn.
- Vì kích thước lõi nhỏ ($4\mu\text{m}$) khó chế tạo.

Ngày nay sợi quang giật cấp đơn mode hoạt động ở bước sóng $1,3\mu\text{m}$ hay $1,5\mu\text{m}$, $d = 6 - 10\mu\text{m}$, vỏ ngoài có kích thước $125\mu\text{m}$.

3. *Hiện tượng tán sắc trong sợi quang giật cấp đơn mode.* Theo định nghĩa, sợi quang đơn mode không gặp hiện tượng tán sắc giữa các mode. Tuy nhiên trong sợi quang đơn mode người ta gặp một số hiện tượng tán sắc khác, ví dụ hiện tượng tán sắc do phổ nguồn (chromatic dispersion) ta sẽ gọi hiện tượng này đơn giản là tán sắc (vì thuật ngữ chromatic dispersion mới đúng nghĩa là tán sắc trong tiếng việt).

Hiện tượng tán sắc là do nguồn sáng có độ rộng phổ nhất định, khác không, sự phân tán trong bước sóng λ của phổ sẽ dẫn đến sự phân tán xung quang khi nó dẫn truyền trong sợi quang. Sự tồn tại độ rộng phổ nguồn dẫn đến hai loại tán sắc: sự tán sắc do linh kiện dẫn sóng và sự tán sắc do vật liệu gây nên.

- Trong sợi quang thực tế, chiết suất n_1 của lõi có giá trị phụ thuộc vào bước sóng, nghĩa là $n_1 = n_1(\lambda)$ điều này dẫn đến vận tốc lan truyền sóng trong lõi phụ thuộc vào λ, sự phụ thuộc này sẽ gây nên sự giãn xung sáng, khi nguồn sáng có một độ rộng phổ khác không. Hiện tượng giãn xung sáng này được gọi là hiện tượng tán sắc do vật liệu (material chromatic dispersion).

- Chúng ta biết rằng trong sợi quang, góc truyền được phép xác định bởi công thức (5.67)

$$\cos\varphi_m = \frac{2n_1}{m}\frac{d}{\lambda_0}$$

Nếu như trong nguồn sáng có một tập hợp bước sóng là $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3, \cdots$ thì mỗi bước sóng sẽ có một giá trị φ_m Như vậy là có bao nhiêu bước sóng trong xung sáng sẽ có bấy nhiêu hướng lan truyền liên quan đến mode m. Kết quả là sự tán sắc do mode giống như trong sợi quang đa mode. Tuy nhiên hiện tượng tán sắc này là do bản chất của linh kiện dẫn sóng gây nên, cho nên nó được gọi là tán sắc do linh kiện dẫn sóng (waveguide chromatic dispersion).

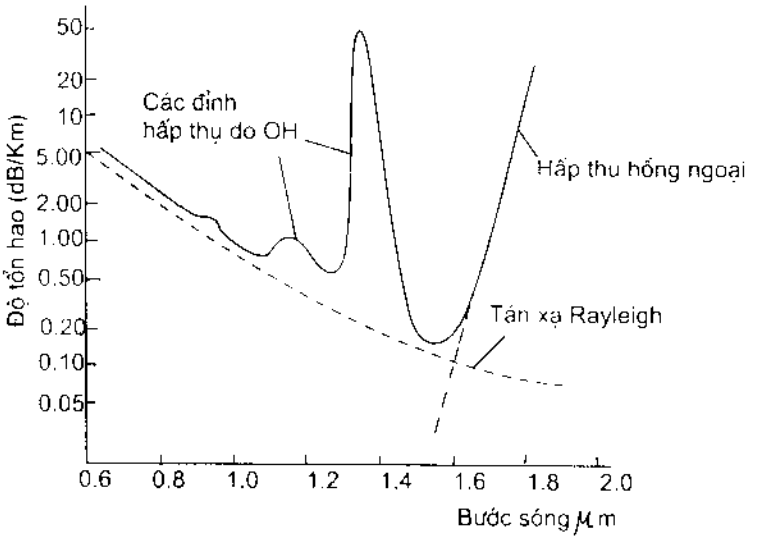
5.3.6 Tổn hao trong sợi quang. Tổn hao trong sợi quang có thể chia làm hai loại: tổn hao do cơ cấu và tổn hao do vật liệu.

Tổn hao do cơ cấu có thể có các nguyên nhân sau:

- Do uốn cong sợi quang (microbending losses)
- Do khớp nối (coupling losses)
- Do hàn nối (splicing losses)

Tổn hao do vật liệu chủ yếu do hai nguyên nhân: hấp thụ và tán xạ.

1. Hấp thụ bức xạ hồng ngoại. Bức xạ laser thường có bước sóng ở vùng hồng ngoại $(0,7 - 1,7\mu\text{m})$, vì vậy đây cũng là dải tần được nghiên cứu kỹ về hệ số hấp thụ. Nguyên nhân hấp thụ thường gồm ba loại chủ yếu: hấp thụ riêng do các chuyển mức của điện tử; hấp thụ do các tạp chất, các gốc OH và các ion nguyên tố thuộc lớp chuyển tiếp, ...hấp thụ do kích thích các mức dao động của liên kết Si-O. Tuy nhiên trong sợi quang các gốc OH có vai trò quan trọng hơn cả đối với hệ số hấp thụ trong dải hồng ngoại. Trên hình (5.24) biểu diễn sự phụ thuộc độ tổn hao vào bước sóng của bức xạ hồng ngoại. Các mũi cực đại của độ tổn hao sẽ mất đi nếu hàm lượng OH rất thấp (<0,04ppm). Ta thấy có hai cực tiểu của độ tổn hao ở bước sóng $\lambda \approx 1,3\mu\text{m}$ và $\lambda \approx 1,55\mu\text{m}$. Đó cũng chính là hai bước sóng được dùng nhiều trong thông tin bằng sợi quang.



Hình 5.24: *Sự phụ thuộc độ tổn hao của bức xạ hồng ngoại vào bước sóng.*

2. *Tán xạ gây tổn hao trong sợi quang.* Tán xạ của bức xạ điện từ truyền trong sợi quang cũng gây tổn hao đáng kể. Có hai loại tán xạ: tán xạ tuyến tính và tán xạ phi tuyến.

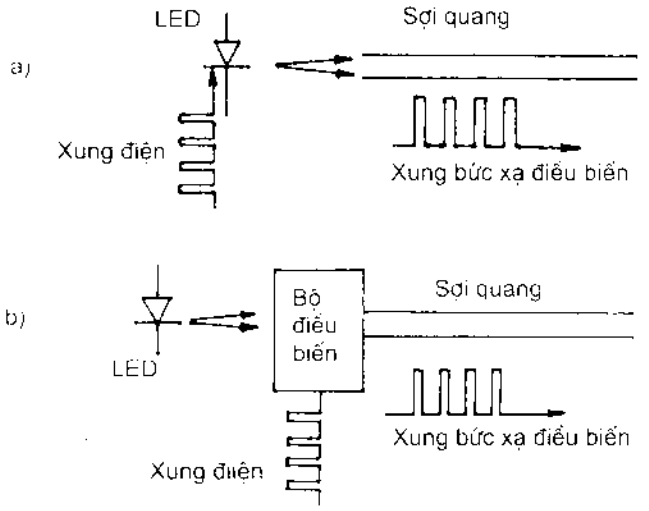
Tán xạ tuyến tính lại phân thành hai loại: Đó là tán xạ trên các bất hoàn hảo của sợi quang như các mặt biên giữa lõi và vỏ có độ gồ ghề (về sự phân bố chiết suất) và gây ra tán xạ. Loại tán xạ tuyến tính thứ hai là tán xạ trên các bất đồng nhất trong vật liệu sợi quang tức là tán xạ do các thăng giáng của chiết suất, loại tán xạ này được gọi là tán xạ Rayleigh. Đây là loại tán xạ quan trọng nhất.

Tán xạ phi tuyến là các quá trình nhiều photon hoặc có sự thay đổi năng lượng photon tức là thay đổi tần số của photon.

Nghiên cứu các quá trình hấp thụ và tán xạ gây tổn hao trong sợi quang giúp ta chọn bước sóng quang làm việc thích hợp chọn công nghệ và vật liệu chế tạo sợi quang tối ưu nhất.

5.4 Nguyên lý điều biến quang

Bức xạ của điôt phát quang (LED) hoặc laser điôt phát vào sợi quang đóng vai trò sóng mang. Muốn đưa thông tin vào các sóng mang đó để truyền đi xa thì phải điều biến chúng, đó là điều biến quang.



Hình 5.25: *Sơ đồ nguyên lý điều biến, a- điều biến trực tiếp, b- điều biến ngoài.*

Điều biến quang trong thời kỳ đầu thực hiện bằng cách dùng xung điện của tín hiệu cần truyền cho tác động trực tiếp vào mạch điện làm việc của điôt phát quang hoặc laser, qua đó làm điều biến ánh sáng mà chúng phát ra. Cách làm đó có nhược điểm lớn là gây tác động mất ổn định chế độ làm việc của nguồn bức xạ sóng mang. Bởi vậy ngày nay người ta nghiên cứu chuyển sang điều biến ngoài. Trong phương pháp điều biến ngoài, bức xạ nguồn phát ra chưa được điều biến, trước khi truyền vào sợi quang, được đi qua một hệ điều biến. Trên hình (5.25) trình bày nguyên lý hai phương pháp điều biến nói trên: điều biến trực tiếp và điều biến ngoài.

Cũng như điều biến sóng vô tuyến, điều biến quang cũng có ba cách khác nhau: điều biên, điều pha và điều tần. Trong phương pháp điều biên (còn gọi là khoá dịch biên - Amplitude shift keyed, ASK) thì tín hiệu điều biến được truyền đi có dạng

$$\mathcal{E}(t) = A(t)\cos(\omega t + \varphi) \tag{5.74}$$

trong đó biên độ $A(t)$ mang thông tin bằng cách lấy giá trị "0" hoặc "1" trong chu kỳ của một bit. Nếu truyền theo điều biên ASK đa mức thì $A(t)$có thể lấy nhiều giá trị trong một chu kỳ bit.

Trong phương pháp điều pha (còn gọi là khoá dịch pha - Phase shift keyed - PSK) tín hiệu bức xạ được truyền đi có dạng

$$\mathcal{E}(t) = A \cdot \cos\{\omega t + (\varphi \pm \delta t)\} \tag{5.75}$$

trong đó biên độ A giữ không đổi, còn pha $\varphi(t)$ lấy hai giá trị "0" hoặc "π" trong một chu kỳ bit. Trong phương pháp điều tần (còn gọi là khoá dịch tần - Frequency shift keyed - FSK) tín hiệu bức xạ được truyền đi có dạng

$$\mathcal{E}(t) = A \cdot \cos\{(\omega \pm \delta)t + \varphi\} \tag{5.76}$$

trong đó biên độ A, pha φ, không đổi, tần số sẽ tăng lên δ hoặc giảm xuống δ ứng với giá trị "0", "1" trong một chu kỳ bit.

Từ (5.76) ta có thể viết

$$\mathcal{E}(t) = A\cos\{\omega t + (\varphi \pm \delta t)\} \tag{5.77}$$

Công thức (5.77) tương đương công thức (5.75) vì vậy bộ điều biến ngoài dùng PSK cũng có thể dùng cho FSK Trong nhiều trường hợp một linh kiện điều biến có thể làm cả chức năng một chuyển mạch (Swich) nghĩa là một linh kiện làm thay đổi vị trí tia sáng hoặc đóng (ngắt), mở tia sáng. Hai chức năng điều biến và chuyển mạch (modulator và swich) về một số phương diện nào đó có những điểm chung.

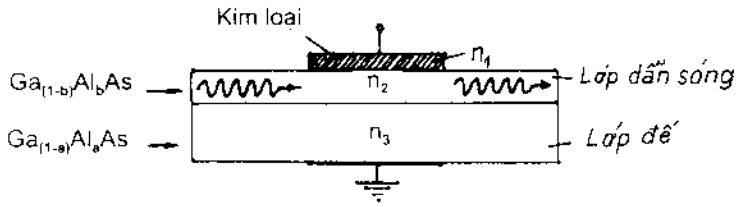
Các phương pháp điều biến khác nhau đòi hỏi các phương pháp giải điều (demodulation) thích hợp: giải điều biên, giải điều pha, giải điều tần.

Theo cơ chế vật lý và phương pháp thực hiện điều biến có thể chia làm hai loại chính: điều biến điện quang và điều biến cơ-quang(hay âm-quang)

5.4.1 Nguyên lý điều biến điện quang.

1. Hiện tượng điện quang: Hiện tượng điện quang được sử dụng trong nguyên lý điều biến là sự phụ thuộc của chiết suất của vật liệu vào điện trường đặt vào tinh thể. Trong phương trình sóng Maxwell chúng ta đã thấy rằng vận tốc truyền sóng phụ thuộc vào các thông số vật liệu ϵ, μ. Sự phụ thuộc của chiết suất vào điện trường có thể do nhiều nguyên nhân, tuy nhiên trong các vật liệu thường dùng như GaAs, GaP, $LiNbO_3$, $LiTaO_3$, thạch anh là những tinh thể không có tâm đối xứng, thì nguyên nhân chính là do hiệu ứng tuyến tính Pockels. Nội dung của hiệu ứng Pockels là sự ảnh hưởng của điện trường ngoài đặt vào tinh thể đến phổ năng lượng của điện tử và qua đó ảnh hưởng hằng số điện môi, chiết suất của vật liệu quang.

2. Các cơ cấu linh kiện điều biến điện-quang.



Hình 5.26: *Sơ đồ linh kiện điều biến dẫn sóng.*

Dựa trên hiện tượng điện quang người ta đã chế tạo các linh kiện điều biến khác nhau về cơ cấu và nguyên tắc hoạt động . Có thể phân thành hai loại chính: linh kiện điều biến dạng dẫn sóng và linh kiện điều biến nhiễu xạ.

a- Linh kiện điều biến dẫn sóng

Một linh kiện điều biến điện quang dạng dẫn sóng có thể là một linh kiện dẫn sóng bản phẳng như ở hình (5.26) hay một linh kiện dẫn sóng dạng kênh.

Linh kiện điều biến dẫn sóng trên hình (5.26) gồm một lớp đế $Ga_{1-a}Al_aAs$, một lớp dẫn sóng $Ga_{1-b}Al_bAs$, với $b < a$, trên cùng là lớp điện cực kim loại.

Chiết suất của không khí hoặc lớp kim loại nhỏ hơn n_2 chiết suất của $Ga_{1-b}Al_bAs$ rất nhiều, trong khi đó chiết suất của $Ga_{1-a}Al_aAs$, n_3 với $(b < a)$ chỉ nhỏ hơn n_2 một ít.

Dễ dàng thấy rằng lớp kim loại tạo thành với lớp $Ga_{1-b}Al_bAs$ một tiếp xúc Schottky. Khi đặt vào cực kim loại một điện áp ngược U thì một phần của lớp dẫn sóng sẽ là lớp nghèo của tiếp xúc Schottky. Nếu thay đổi giá trị U ta thay đổi được chiết suất n_2 của lớp dẫn sóng.

Chúng ta biết rằng điều kiện dẫn truyền mode sóng phụ thuộc vào độ chênh chiết suất Δn_{23}. Độ chênh chiết suất Δn_{23} gồm ba thành phần sau:

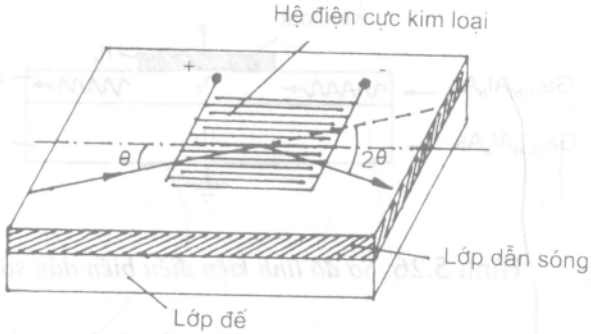
$$\Delta n_{23} = n_2 - n_3 = \Delta n_{ch} + \Delta n_{cc} + \Delta n_{E\cdot O} \tag{5.78}$$

trong đó Δn_{ch} - độ chênh do sự khác nhau về thành phần hoá học

Δn_{cc} - độ chênh do sự giảm nồng độ hạt dẫn trong lớp nghèo theo hiệu ứng Schottky

$\Delta n_{E.O}$ - độ chênh do hiệu ứng điện-quang Pockels

Từ đây ta thấy khi điện áp tín hiệu điện đặt lên điện cực kim loại thay đổi, thì độ chênh chiết suất Δn_{23} thay đổi, dẫn đến thay đổi chế độ dẫn truyền của mode sóng, thay đổi các đặc trưng sóng như biên độ, pha, vectơ phân cực. Bằng cơ cấu điều biến dẫn sóng người ta có thể thực hiện điều biên, điều pha, điều biến phân cực.



Hình 5.27: *Sơ đồ linh kiện điều biến nhiễu xạ.*

b- Linh kiện điều biến nhiễu xạ

Linh kiện điều biến nhiễu xạ cũng dựa trên hiệu ứng điện quang. Trong các linh kiện này bằng những cơ cấu điện cực thích hợp ta có thể làm thay đổi sự phân bố chiết suất của lớp dẫn sóng từ đó làm thay đổi điều kiện giao thoa, nhiễu xạ và phản xạ của sóng. Trên hình (5.27) trình bày một cơ cấu linh kiện điều biến nhiễu xạ điển hình: điều biến Bragg

Linh kiện này là một linh kiện dẫn sóng bản phẳng gồm một lớp dẫn sóng trên một lớp đế (ZnO trên saphia hay $LiNb_xTa_{1-x}O_3$ trên $LiTaO_3$). Mặt trên của lớp dẫn sóng bằng phương pháp bay hơi trong chân không và quang khắc được chế tạo một hệ điện cực kim loại tinh vi có dạng hai cái lược cài vào nhau. Giữa hai hệ điện cực đặt một thiên áp một chiều. Do hiệu ứng điện quang, chiết suất phía dưới điện cực trong lớp dẫn sóng tạo thành một hệ cách tử nhiễu xạ, với độ rộng khe cách tử bằng d. Qua cách tử ánh sáng tới sẽ bị nhiễu xạ, phương của ánh sáng nhiễu xạ được xác định từ định luật nhiễu xạ Bragg:

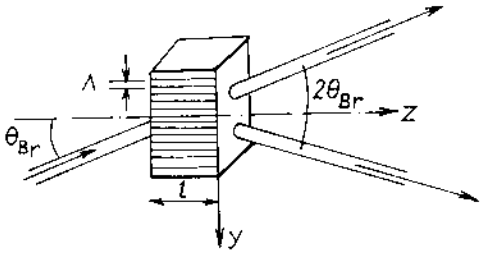
$$2d\sin\theta = \frac{\lambda_0}{n_g}$$

trong đó d là độ rộng bước cách tử, n_g chiết suất hiệu dụng của lớp dẫn sóng .

Cường độ ánh sáng nhiễu xạ phụ thuộc vào điện áp đặt vào hệ điện cực của linh kiện tuân theo công thức

$$\frac{I}{I_0} = \sin^2(B \cdot U)$$

trong đó I cường độ ánh sáng nhiêu xạ khi có điện áp U đặt vào điện cực, I_0



Hình 5.28: *Sơ đồ linh kiện điều biến cơ-quang Bragg.*

là cường độ ánh sáng được dẫn truyền khi $U = 0$, B là hằng số phụ thuộc vào chiết suất hiệu dụng của lớp dẫn sóng. Nếu đặt các xung điện của tín hiệu vào hệ điện cực ta có thể điều biến được sóng ánh sáng dẫn truyền trong lớp dẫn sóng. Đó chính là nguyên lý hoạt động của linh kiện điều biến điện-quang Bragg

5.4.2 Nguyên lý điều biến cơ-quang.

1. Hiệu ứng cơ-quang.

Hiệu ứng cơ-quang hay còn gọi là hiệu ứng quang đàn hồi là sự phụ thuộc chiết súât vào sự biến dạng của tinh thể. Hiệu ứng này được đặc trưng bởi một tenxơ bậc 4 gọi là tenxơ quang đàn hồi, tenxơ này liên hệ giữa tenxơ đàn hồi bậc ba với chiết suất ánh sáng. Sự thay đổi chiết suất Δn liên quan đến công suất sóng đàn hồi p_a bằng biểu thức:

$$\Delta n = \sqrt{n^6 p^2 10^7 Pa/2\rho v_a^3 A}$$

trong đó:

n - chiết suất của vật liệu chưa biến dạng

p - một phần tử của tenxơ quang - đàn hồi

Pa - công suất toàn phần của sóng âm (đo bằng w)

ρ - mật độ vật liệu

v_a - vận tốc sóng âm

A - tiết diện ngang mà sóng đi qua

Đối với vật liệu thường sử dụng để làm đế trong mạch quang tích hợp, hiệu ứng quang đàn hồi thường rất nhỏ, ví dụ $\Delta n \approx 10^{-4}$ khi công suất âm là $100\mathrm{W/cm^2}$.

2. Cơ cấu linh kiện điều biến cơ-quang.

Trong linh kiện điều biến nhiễu xạ dựa trên hiện tượng điện-quang, nhờ sự biến đổi tuần hoàn chiết suất của lớp dẫn sóng bằng hiện tượng điện quang, hình thành một hệ cách tử. Một hệ cách tử tương tự cũng có thể tạo nên nhờ sóng âm bằng hiệu ứng cơ-quang. Các linh kiện điều biến cơ-quang thường ứng dụng sóng đàn hồi chạy chứ không phải sóng đứng, nghĩa là cấu trúc cách tử được gây nên do sự thay đổi chiết suất bằng sóng âm ở trong trạng thái chuyển động so với tia sáng. Tuy nhiên sự chuyển động của sóng âm không gây nên một hiệu ứng nào đáng kể vì tần số sóng âm nhỏ hơn tần số ánh sáng nhiều bậc.

Trên hình (5.28) biểu diễn một loại linh kiện điều biến cơ-quang điển hình để làm ví dụ, linh kiện điều biến cơ quang Bragg.

Trong linh kiện này sóng âm lan truyền theo trục y, ánh sáng lan truyền theo phương vuông góc, trục z. Bước sóng của sóng âm λ đóng vai trò độ rộng bước cách tử. Chiều dài tương tác giữa tia sáng và sóng âm, bề dày cuả linh kiện là l, với $l \gg \lambda$. Góc tới của tia sáng thường được chọn bằng góc Bragg

$$\sin\theta_{Br} = \frac{\lambda}{2\Lambda}$$

trong đó θ_{Br} là góc Bragg, λ là bước sóng ánh sáng, Λ là bước sóng âm.

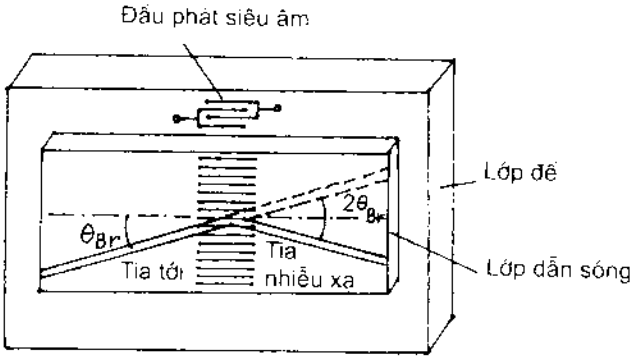
Tia nhiễu xạ bậc 1 làm thành với tia tới một góc $2\theta_{Br}$. Thông thường trong linh kiện điều biến Bragg người ta thu tia nhiễu xạ bậc không ở lối ra và độ sâu điều biến được xác định bằng công thức

$$\frac{I_0 - I}{I_0} = \sin^2\left(\frac{\Delta\varphi}{2}\right)$$

trong đó I_0 cường độ tia sáng khi không có sóng âm, I là cường độ tia nhiễu xạ bậc không khi có sóng âm, $\Delta\varphi$ là độ dịch pha của sóng ánh sáng khi có tác dụng của sóng âm.

Trong linh kiện điều biến cơ-quang Bragg người ta thường dùng đế bằng thạch anh có hệ số áp điện lớn, có chiết suất cỡ 1,73. Phía trên là một hệ cực kim loại để làm đầu phát siêu âm như được trình bày trên hình (5.29)

Sóng đàn hồi được tạo nên trên bề mặt đế thạch anh, do tiếp xúc cơ học giữa lớp dẫn sóng và đế tốt, sóng âm được lan sang lớp dẫn sóng tạo nên trong đó một cách tử nhờ hiệu ứng cơ-quang. Người ta sử dụng sóng siêu âm với bước sóng $\Lambda = 16\mu$m, ($f_a = 191$MHz) bước sóng ánh sáng 6328Å đạt được độ sâu điều biến 70%. Linh kiện điều biến Bragg có thể sử dụng như một linh kiện chuyển mạch bởi vì có thể thay đổi góc nhiễu xạ θ_{Br}.



Hình 5.29: *Sơ đồ một loại điều biến cơ-quang Bragg.*

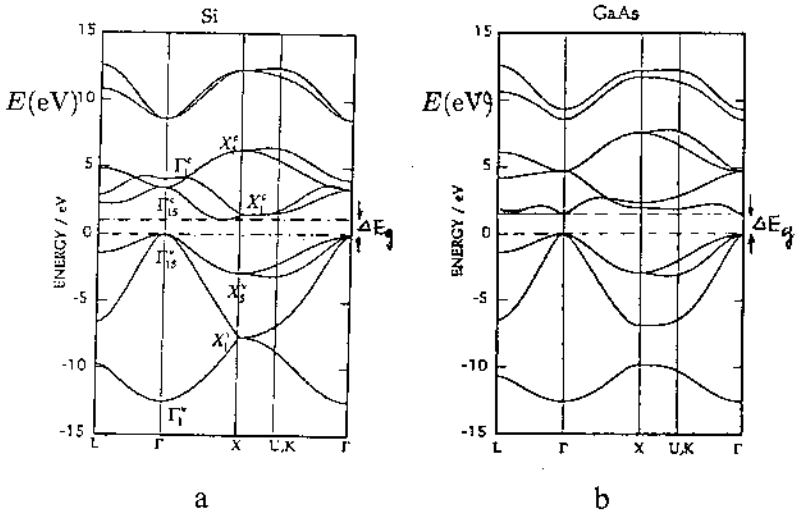
5.5 Những nguyên lý cơ bản của các linh kiện phát quang bán dẫn

Trong hệ sợi quang - mạch quang tích hợp, linh kiện quan trọng bậc nhất là linh kiện phát quang, đó là các điôt phát quang và laser bán dẫn. Trong mục này chúng ta nghiên cứu những nguyên lý cơ bản nhất trong hoạt động của các linh kiện đó.

5.5.1 Đặc điểm cấu trúc vùng năng lượng của chất bán dẫn. Như chúng ta đã nhận xét trong chương III, bán dẫn là những chất có phổ năng lượng, ở nhiệt độ thấp, gồm các vùng cho phép điền đầy hoàn toàn và các vùng cho phép trống hoàn toàn. Trong đó vùng trống hòan tòan thấp nhất là vùng dẫn, mức năng lượng cực tiểu của vùng dẫn gọi là đáy vùng dẫn, được ký hiệu là E_c. Vùng điền đầy hoàn toàn cao nhất là vùng hoá trị, mức năng lượng cực đại vùng hoá trị gọi là đỉnh vùng hoá trị, được ký hiệu là E_v. Khoảng cách năng lượng $\Delta E_g = E_c - E_v$ gọi là bề rộng vùng cấm.

Trạng thái của điện tử trong các vùng năng lượng cho phép được đặc trưng bởi năng lượng E và vectơ sóng $\vec{K}(K_x, K_y, K_z)$ Tuy nhiên sự phụ thuộc giữa năng lượng E và vectơ sóng $\vec{K}$ trong các vùng năng lượng cho phép rất phức tạp. Lân cận các điểm cực tiểu của vùng dẫn và cực đại của vùng hoá trị sự phụ thuộc $E(\vec{K})$ có thể xem gần đúng có dạng một hàm bậc hai, tương ứng như sau

$$E(K) = E_c + \frac{\hbar^2 K^2}{2m^*} \text{ đối với điện tử}$$



Hình 5.30: *Phổ năng lượng của bán dẫn, a- Silic, b- GaAs.*

$$E(K) = E_v - \frac{\hbar^2 K^2}{2m_p^*} \text{ đối với lỗ trống}$$

Trong trường hợp tổng quát m^*, m_p^* khối lượng hiệu dụng của điện tử và lỗ trống là những đại lượng tenxơ phụ thuộc vào hướng trong tinh thể.

Đặc điểm thứ hai là, vùng dẫn và vùng hóa trị đều bao gồm một số phân vùng chồng lên nhau, nghĩa là trong mỗi vùng năng lượng cho phép có thể có nhiều quy luật tán sắc $E(K)$ khác nhau.

Cực tiểu vùng dẫn trong không gian vectơ sóng $\vec{K}$ có thể nằm ở một điểm $\vec{K} = (0,0,0)$, hoặc có thể nằm ở một điểm $K \neq 0$ và trên một phương tinh thể nào đó ví dụ phương [100] như Si, phương [111] như Ge. Cực đại vùng hoá trị thông thường nằm ở điểm có vectơ sóng $\vec{K} = (0,0,0)$.

Từ đây người ta phân biệt hai loại bán dẫn theo cấu trúc vùng năng lượng: Bán dẫn vùng cấm thẳng và bán dẫn vùng cấm xiên.

Bán dẫn vùng cấm thẳng là bán dẫn có cực tiểu vùng dẫn và cựcđại vùng hóa trị cùng ở tại một điểm trong không gian K, ví dụ $\vec{K} = (0,0,0)$ Bán dẫn vùng cấm xiên là bán dẫn có cực tiểu vùng dẫn và cực đại vùng hóa trị tại hai điểm khác nhau trong không gian $\vec{K}$, ví dụ cực tiểu nnvùng dẫn tại một điểm $\vec{K} \neq 0$, còn cực đại vùng hóa trị tại điểm $\vec{K} = (0,0,0)$.

Trên hình (5.30) trình bày cấu trúc vùng năng lượng của một số bán dẫn: Từ đây chúng ta thấy Si là bán dẫn vùng cấm xiên, GaAs là bán dẫn vùng cấm thẳng .

5.5.2 Chuyển mức năng lượng, quá trình hấp thụ. Khi chiếu sáng chất bán dẫn bằng ánh sáng có tần số thích hợp, các photon có thể bị hấp thụ bởi các điện tử và gây ra chuyển mức năng lượng của điện tử từ mức thấp đến mức cao. Trong chất bán dẫn có thể xẩy ra nhiều dạng chuyển mức năng lượng khác nhau, ví dụ chuyển mức giữa các mức tạp chất với vùng dẫn, chuyển mức giữa vùng hoá trị với các mức tạp chất, chuyển mức giữa các phân vùng trong vùng dẫn hay trong vùng hoá trị. Tuy nhiên quan trọng nhất và đáng chú ý nhất là chuyển mức của điện tử từ vùng hóa trị lên vùng dẫn chuyển mức này được gọi là chuyển mức vùng - vùng, hay chuyển mức cơ bản.

Chuyển mức cơ bản có thể xẩy ra theo hai cơ chế khác nhau: Chuyển mức thẳng và chuyển mức xiên. Chuyển mức thẳng là chuyển mức mà trong đó xung lượng, hay vectơ sóng của điện tử gần như không thay đổi và không có sự tham gia của phonon, dao động mạng tinh thể.

Chuyển mức xiên là chuyển mức mà trong đó xung lượng, hay vectơ sóng của điện tử phải thay đổi đáng kể và bắt buộc phải có sự tham gia của phonon, dao động mạng tinh thể.

Quá trình chuyển mức phải tuân theo các định luật bảo toàn năng lượng và định luật bảo toàn xung lượng, đồng thời chuyển mức chỉ có thể xẩy ra khi trạng thái mà điện tử sẽ chuyển đến là còn trống.

Gọi năng lượng của photon bị hấp thụ là $h\nu_{phot}$, năng lượng của điện tử ở trạng thái đầu là E_1, ở trạng thái cuối là E_2, vectơ sóng của photon là $\vec{q}_{phot}$, vectơ sóng của điện tử ở trạng thái đầu là $\vec{K}_1$ ở trạng thái cuối là $\vec{K}_2$.

- Trường hợp chuyển mức thẳng:

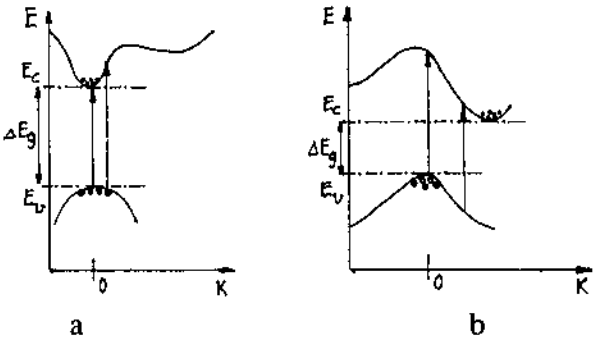
Vì vectơ sóng của photon rất nhỏ so với vectơ sóng của điện tử nên theo định luật bảo toàn vectơ sóng ta có

$$\vec{K}_1 + \vec{q}_{phot} = \vec{K}_2 \rightarrow \vec{K}_1 \simeq \vec{K}_2$$

Điều kiện này có nghĩa là trong chuyển mức thẳng do đòi hỏi của định luật bảo toàn vectơ sóng, vectơ sóng của điện tử gần như không thay đổi.

Theo định luật bảo toàn năng lượng ta có

$$E_1 + h\nu_{phot} = E_2$$



Hình 5.31: *Sơ đồ chuyển mức thẳng, a- trong bán dẫn vùng cấm thẳng, b- trong bán dẫn vùng cấm xiên.*

Vì trạng thái đầu của điện tử ở trong vùng hóa trị nên $E_1 \leq E_v$, trạng thái cuối của điện tử ở trong vùng dẫn nên $E_2 \geq E_c$, do $E_c - E_v = \Delta E_g$, nên theo định luật bảo toàn năng lượng ta có:

$$h\nu_{phot} = E_2 - E_1 \geq \Delta E_g$$

Vậy photon muốn được hấp thụ thì phải thỏa mãn điều kiện

$$h\nu_{phot} \geq \Delta E_g$$

Giá trị $\nu_0 = \frac{\Delta E_g}{h}$ được gọi là tần số ngưỡng hấp thụ cơ bản.

Trên hình (5.31) biểu diễn bằng mũi tên các chuyển mức thẳng từ vùng hoá trị lên vùng dẫn trong hai loại bán dẫn:

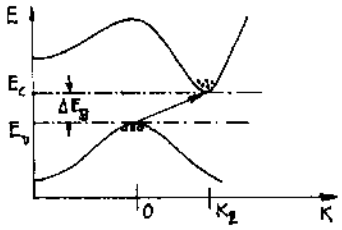
a- bán dẫn vùng cấm xiên,

b- bán dẫn vùng cấm thẳng.

- Trường hợp chuyển mức xiên:

Từ hình (5.31b) chúng ta thấy rằng trong trường hợp bán dẫn vùng cấm xiên, nếu chỉ có chuyển mức thẳng thì photon với tần số ngưỡng hấp thụ $\nu_0 = \frac{\Delta E_g}{h}$ sẽ quá nhỏ để được hấp thụ.

Tuy nhiên người ta thấy rằng trong những trường hợp đó có thể xảy ra hấp thụ với chuyển mức xiên. Chuyển mức xiên đòi hỏi phải có sự tham gia của phonon dao động mạng tinh thể. Trên hình (5.32) biểu diễn bằng mũi tên chuyển mức từ đỉnh vùng hóa trị lên đáy vùng dẫn một quá trình hấp thụ chuyển mức xiên. Trong chuyển mức xiên ta thấy $K_1 = 0$ và $K_2 \neq 0$. Để bảo



Hình 5.32: *Sơ đồ chuyển mức xiên.*

toàn vectơ sóng nhất thiết phải có sự tham gia của một hạt thứ ba, đó chính là phonon dao động mạng tinh thể.

Định luật bảo toàn vectơ sóng sẽ là:

$$\vec{K_1} + \vec{q}_{phot} \pm \vec{q}_{phon} = \vec{K_2}$$

nhưng vì $\vec{q_{phot}}$ vectơ sóng của photon rất nhỏ hơn vectơ sóng của điện tử nên ta có thể bỏ qua, và định luật bảo toàn vectơ sóng sẽ là:

$$\vec{K_1} \pm \vec{q_{phon}} = \vec{K_2}$$

Trong đó $\vec{q}_{phon}$ là vectơ sóng của phonon, dấu cộng ứng với trường hợp phát xạ phonon, dấu trừ ứng với trường hợp hấp thụ phonon.

Vì phonon mang một năng lượng bằng $\hbar\omega_{phon}$ nên định luật bảo toàn năng lượng trong trường hợp hấp thụ chuyển mức xiên sẽ là

$$E_1 + h\nu_{phot} \pm \hbar\omega_{phon} = E_2$$

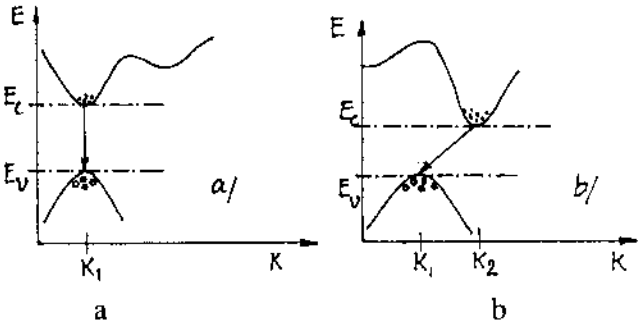
Từ đây ta thấy điều kiện để phonton được hấp thụ với chuyển mức xiên sẽ là

$$h\nu_{phot} \geq \Delta E_g \mp \hbar\omega_{phon}$$

Vậy ngưỡng hấp thụ với chuyển mức xiên sẽ có tần số

$$\nu_0 = \frac{\Delta E_g}{h} - \frac{\omega_{phon}}{2\pi}$$

Khi điện tử chuyển mức từ vùng hoá trị lên vùng dẫn nếu mức năng lượng cuối $E_2 > E_c$ thì điện tử có một động năng nhất định bằng $(E_2 - E_c)$ tuy nhiên do tán xạ với các tâm tán xạ trong quá trình hồi phục, động năng của điện tử giảm xuống và chiếm mức năng lượng lân cận cực tiểu của vùng dẫn E_c.



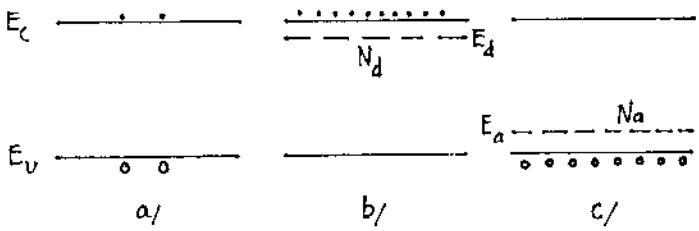
Hình 5.33: *Sơ đồ tái hợp bức xạ: a- chuyển mức thẳng, b- chuyển mức xiên.*

5.5.3 Tái hợp bức xạ tự phát. Điôt phát quang (LED). Các điện tử ở lân cận cực tiểu vùng dẫn sau một thời gian tồn tại ở đây có thể chuyển mức xuống một trạng thái trống trong vùng hoá trị và phát bức xạ ra một photon. Đó chính là quá trình tái hợp bức xạ tự phát, bức xạ phát ra trong trường hợp này gọi là bức xạ tái hợp tự phát, hay bức xạ tự phát. Bức xạ này gọi là tự phát vì nó xảy ra hoàn toàn ngẫu nhiên không phụ thuộc vào mật độ phổ năng lượng của bức xạ điện từ bên ngoài.

Tuy nhiên quá trình chuyển mức này chỉ có thể xẩy ra khi trạng thái mà điện tử chuyển xuống trong vùng hóa trị là trống và phải tuân theo định luật bảo toàn vectơ sóng cũng như định luật bảo toàn năng lượng. Chuyển mức tái hợp bức xạ cũng có thể xẩy ra theo cơ chế chuyển mức thẳng (như ở hình (5.33a)) và cơ chế chuyển mức xiên (như ở hình (5.33b)).

Thông thường điện tử trong vùng dẫn chủ yếu tập trung ở lân cận cực tiểu, lỗ trống trong vùng hóa trị chủ yếu ở lân cận cực đại, cho nên trong bán dẫn có vùng cấm thẳng xác suất xẩy ra chuyển mức thẳng rất lớn, xác suất này trong bán dẫn có vùng cấm xiên là rất nhỏ, vì các trạng thái ứng với cùng giá trị $\vec{K}_2$ ở trong vùng hóa trị thường không trống. Trong bán dẫn vùng cấm xiên có thể xẩy ra chuyển mức tái hợp bức xạ theo cơ chế chuyển mức xiên với sự tham gia của phonon dao động mạng tinh thể. Tuy nhiên xác suất chuyển mức xiên thường rất nhỏ vì nó đòi hỏi phải có sự tham gia của ba hạt: điện tử, lỗ trống và phonon. Chính vì những điều vừa phân tích trên đây trong các linh kiện phát quang thông thường chỉ sử dụng các bán dẫn vùng cấm thẳng như GaAs.

Quá trình tái hợp bức xạ chỉ xẩy ra mạnh khi trên vùng dẫn có nhiều điện

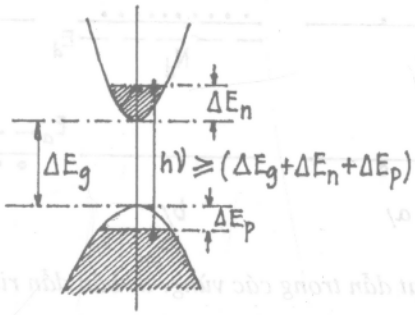


Hình 5.34: *Nồng độ hạt dẫn trong các vùng: a- bán dẫn riêng, b- bán dẫn loại n, c- bán dẫn loại p.*

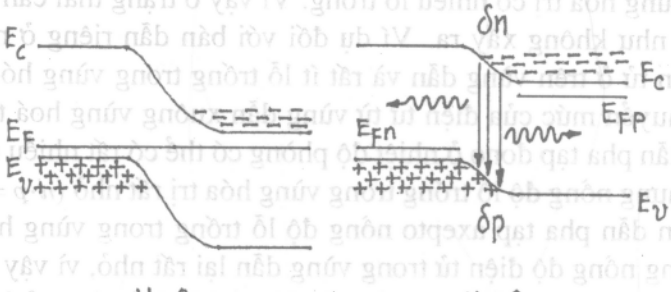
tử và dưới vùng hóa trị có nhiều lỗ trống. Vì vậy ở trạng thái cân bằng tái hợp bức xạ hầu như không xẩy ra. Ví dụ đối với bán dẫn riêng ở nhiệt độ thấp có rất ít điện tử ở trên vùng dẫn và rất ít lỗ trống trong vùng hóa trị cho nên quá trình chuyển mức của điện tử từ vùng dẫn xuống vùng hoá trị là rất nhỏ. Trong bán dẫn pha tạp đono ở nhiệt độ phòng có thể có rất nhiều điện tử trong vùng dẫn nhưng nồng độ lỗ trống trong vùng hóa trị rất nhỏ ($n \cdot p = n_i^2$). Ngược lại trong bán dẫn pha tạp axepto nồng độ lỗ trống trong vùng hoá trị có thể rất lớn, nhưng nồng độ điện tử trong vùng dẫn lại rất nhỏ, vì vậy chuyển mức bức xạ rất ít và các photon bức xạ ra thường lại bị hấp thụ trở lại. Quá trình hấp thụ trở lại được gọi là tái hấp thụ. Kết quả là trong trường hợp bán dẫn ở trong điều kiện cân bằng (như ở hình (5.34)) quá trình tái hợp bức xạ hầu như không xẩy ra. Để có được bức xạ (phát quang) của chất bán dẫn chúng ta phải bằng cách nào đó kích thích chất bán dẫn, đưa nó ra khỏi trạng thái cân bằng. Nghĩa là làm sao để cho nồng độ điện tử trên vùng dẫn và nồng độ lỗ trống trong vùng hoá trị vượt quá giá trị cân bằng của chúng, nói cách khác tạo ra một nồng độ hạt dẫn dư (điện tử dư và lỗ trống dư so với giá trị cân bằng). Quá trình tạo nên nồng độ điện tử và lỗ trống dư đó được gọi là quá trình bơm(pumping).

Quá trình bơm có thể thực hiện bằng phương pháp quang học, nghĩa là chiếu sáng mẫu bằng ánh sáng có $h\nu$ lớn hơn bề rộng vùng cấm để thực hiện chuyển mức của điện tử từ vùng hóa trị lên vùng dẫn. Phương pháp này gọi là phương pháp bơm quang học, được trình bày trên hình (5.35).

Từ hình (5.35) chúng ta nhận thấy rằng khi trong vùng dẫn có một nồng độ điện tử lớn chiếm những trạng thái thấp nhất gần cực tiểu trong một khoảng năng lượng ΔE_n và trong vùng hóa trị có một nồng độ lỗ trống lớn chiếm những giá trị trên cùng lân cận điểm cực đại trong một khoảng năng lượng



Hình 5.35: *Sơ đồ năng lượng trong bán dẫn kích thích.*



Hình 5.36: *Sự phân bố điện tử lỗ trống trong chuyển tiếp p – n: a- khi cân bằng, b- khi có thiên áp thuận.*

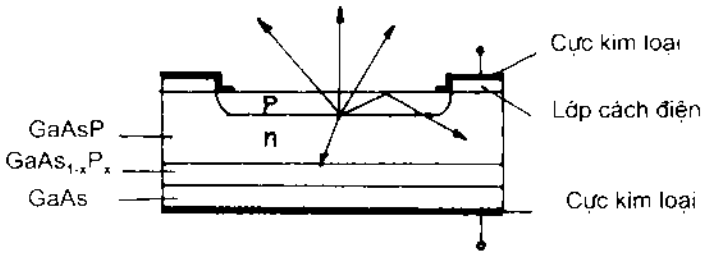
ΔEp, thì điều kiện để một photon được hấp thụ không phải $h\nu \geq \Delta Eg$ mà là:

$$h\nu \geq \Delta E_g + \Delta E_n + \Delta E_p$$

Điều này nói lên rằng điều kiện hấp thụ photon phụ thuộc vào nồng độ hạt dẫn dư trong quá trình bơm quang học.

Phương pháp bơm đơn giản hơn và thường dùng hơn trong các linh kiện quang - điện tử là phương pháp bơm điện, sử dụng tính chất điện của các chuyển tiếp $p - n$.

Chúng ta biết rằng nồng độ điện tử và lỗ trống trong hai phần (phần n và phần p) của chuyển tiếp $p - n$ trong điều kiện cân bằng (khi thiên áp ngoài bằng không) đều tuân theo hệ thức $n_0p_0 = n_np_n = p_pp_n = n_i^2$. Bên phần n có nồng độ điện tử rất lớn, bên phần p có nồng độ lỗ trống rất lớn (như ở hình (5.36)) nhưng chỉ có một lượng rất nhỏ hạt dẫn có thể vượt qua hàng rào thế



Hình 5.37: *Sơ đồ LED chỉ thị.*

năng ở lớp chuyển tiếp.

Khi ta đặt thiên áp thuận (cực âm vào phần n, cực dương vào phần p) hàng rào thế năng bị hạ thấp, điện tử được phun (injection) từ phần n sang phần p và lỗ trống được phun từ phần p sang phần n.

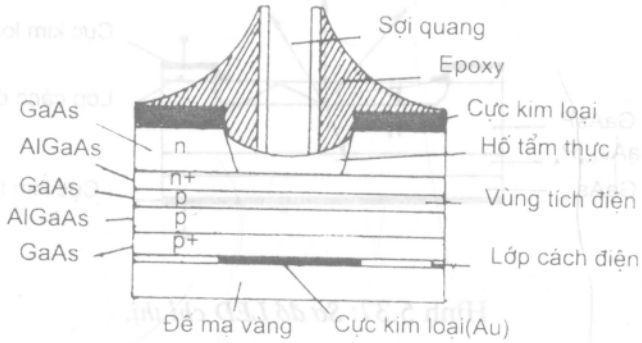
Bằng cách này ta tạo nên được nồng độ điện tử dư δn và nồng độ lỗ trống dư, δptái hợp bức xạ được tăng cường, lớp chuyển tiếp phát sáng. Đó là hiện tượng tái hợp bức xạ hay là hiện tượng huỳnh quang. Hiện tượng tái hợp bức xạ trong các bán dẫn có vùng cấm thẳng thường mạnh hơn rất nhiều so với trong các bán dẫn có vùng cấm xiên vì chuyển mức xiên có xác suất rất nhỏ so với chuyển mức thẳng và trong bán dẫn có vùng cấm xiên quá trình tái hợp có thể xẩy ra bằng các dạng chuyển mức gián tiếp, không bức xạ.

Sự tái hợp bức xạ xẩy ra trong lớp chuyển tiếp $p - n$ chính là nguyên lý hoạt động của điôt phát quang (Light Emitting Diode - LED)

Cấu trúc cơ bản của điôt phát quang là một điôt mặt như trình bày ở hình (5.37) được mắc theo chiều thuận.

Điôt phát quang chế tạo trên đế gali-asenua, bán dẫn vùng cấm thẳng, phát ánh sáng màu đỏ. Điôt phát quang chế tạo trên đế gali-photphua, bán dẫn vùng cấm xiên có bề rộng vùng cấm lớn hơn, phát ánh sáng màu da cam, vàng, xanh. Trong cấu trúc hình (5.37) lớp GaAs là lớp đế.

Lớp dung dịch rắn liên tục $GaAs_{1-x}P_x$ có bề rộng vùng cấm phụ thuộc giá trị x được phủ lên đế bằng phương pháp epitaxy là lớp đệm để tránh sự sai khác quá lớn về hằng số mạng giữa lớp GaAsP và GaAs. Trong lớp dung dịch rắn GaAsP loại n bằng phương pháp khuếch tán tạo lên trên bề mặt một lớp GaAsP loại p. Lớp chuyển tiếp $p - n$ gầnbề mặt là phần chính của điôt phát quang. Điôt có một cực tiếp xúc với đế còn cực thứ hai có dạng một hình vành khăn ở trên bề mặt lớp bán dẫn loại p như ví dụ ở hình (5.37). Loại điôt



Hình 5.38: *Sơ đồ LED hồng ngoại.*

phát quang trình bày ở đây thường được dùng làm đèn chỉ thị. Điôt phát ánh sáng hồng ngoại có bước sóng cỡ $0,9\mu m$ được chế tạo từ GaAs; các hợp chất $A^{III}B^{V}$ khác như $(Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y})$ được dùng để chế tạo các điôt phát quang có bước sóng nằm trong khoảng từ $1,1$ đến $1,6\mu m$.

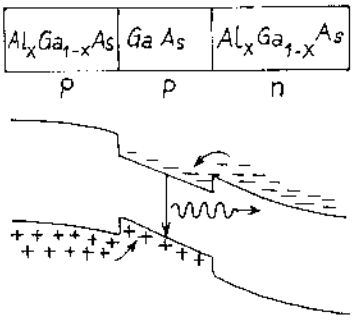
Điôt phát ánh sáng hồng ngoại có một ứng dụng quan trọng là làm nguồn phát sóng quang trong việc chuyền tín hiệu bằng sợi quang trong kỷ thuật viễn thông.

Một linh kiện điôt phát quang dùng trong thông tin sợi quang thường có cấu trúc một điôt mặt, gắn với sợi quang như trình bày ở hình (5.38)

Cấu trúc này có những điểm đặc biệt sau đây: để giảm hiện tượng hấp thụ sóng quang khi ánh sáng đi từ bề mặt phát quang vào sợi quang người ta giảm đến mức tối thiểu lớp bán dẫn phía trên (cỡ $10\mu m$). Việc giảm bề dày lớp bán dẫn này cho phép đầu vào của sợi quang tiếp xúc gần với bề mặt phát quang. Dùng chuyển tiếp dị thể GaAs và $Al_xGa_{1-x}As$ sẽ làm tăng hiệu suất phát quang do kết quả của hiệu ứng "nhốt hạt dẫn" (confinement of carrier) bởi các lớp có bề rộng vùng cấm lớn (như $Al_xGa_{1-x}As$) bao quanh vùng tái hợp phát xạ (như GaAs). Chuyển tiếp dị thể còn đóng vai trò như một của sổ quang học đối với bức xạ tái hợpvì các lớp có bề rộng vùng cấm lớn không có khả năng hấp thụ bức xạ tái hợp trong vùng có bề rộng vùng cấm nhỏ hơn. Hiệu ứng vừa xét trên đây được trình bày giải thích trên hình (5.39).

Từ trên hình (5.37) chúng ta có thể thấy một số hiện tượng gây tổn hao ánh sáng phát quang:

- Do hấp thụ tia sáng phát xạ khi xuyên qua lớp bán dẫn loại p.



Hình 5.39: *Sơ đồ chuyển tiếp dị thể dùng trong laser.*

- Do hiện tượng phản xạ một phần trên bề mặt phân cách giữa không khí và lớp bán dẫn.

- Do hiện tượng phản xạ toàn phần trên bề mặt phân cách.

Trong cơ cấu của điôt phát quang người ta đã thực hiện nhiều giải pháp kỹ thuật công nghệ để làm giảm tối thiểu các tổn hao nói trên.

Độ rộng phổ của bức xạ phát ra từ điôt phát quang phụ thuộc vào nhiều yếu tố, trong đó quan trọng nhất là độ sạch của vật liệu. Với bán dẫn có độ sạch cao, độ rộng phổ của bức xạ LED nằm trong khoảng $\Delta\lambda = (200 - 300)$Å, có cực đại phổ tại điểm ứng với năng lượng photon gần bằng bề rộng vùng cấm ΔE_g. Với bán dẫn có độ sạch cao cực đại phổ của bức xạ LED phụ thuộc vào nồng độ đono hoặc axepto.

5.5.4 Tái hợp bức xạ kích thích. Laser bán dẫn. Laser bán dẫn cũng tương tự như laser hồng ngọc và laser khí He-Ne là có ánh sáng phát ra là đơn sắc, đồng bộ và có độ song song cao. Tuy nhiên laser bán dẫn có kích thước rất nhỏ, chiều dài laser chỉ tính bằng $0,1$mm và dễ dàng điều biến ánh sáng phát ra bằng cách điều biến thiên áp nuôi điôt laser. Chính vì những điểm đặc biệt đó mà laser bán dẫn trở thành một loại nguồn sáng quan trọng trong thông tin bằng sợi quang.

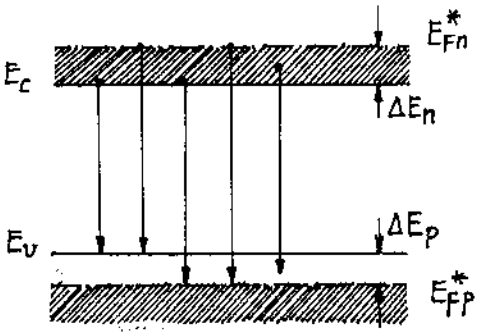
Nguyên lý hoạt động của laser bán dẫn, cũng giống như của laser hồng ngọc, laser khí, nghĩa là dựa trên cơ sở quá trình phát xạ kích thích (cưỡng bức) trong môi trường nghịch đảo mật độ, môi trường hoạt chất. Chúng ta xét một chuyển tiếp $p - n$ được đặt vào một thiên áp theo chiều thuận, tạo nên trên mặt tiếp giáp một nồng độ điện tử dư trên vùng dẫn, một nồng độ lỗ trống dư dưới vùng hoá trị. Photon sinh ra do quá trình bức xạ tự phát khi lan

truyền trong tinh thể có thể bị tái hấp thụ như đã mô tả ở mục trên. Tuy nhiên nếu photon lại "bắt gặp" một cặp điện tử lỗ trống với khoảng cách năng lượng thích hợp, nó có thể kích thích quá trình tái hợp của chúng. Trong trường hợp này, photon mới phát sinh về mọi mặt giống hệt photon kích thích đã gây nên quá trình tái hợp bức xạ đó. Hai photon giống hệt nhau về năng lượng (tần số) về hướng, pha và mặt phân cực. Quá trình này được gọi là phát xạ kích thích, nó đóng góp thêm vào bức xạ tự phát. Như vậy cường độ bức xạ lúc này sẽ gồm hai phần, một phần không phụ thuộc vào bức xạ bên ngoài (bức xạ tự phát), một phần tỷ lệ thuận với mật độ bức xạ bên ngoài (bức xạ kích thích). Thuật ngữ bức xạ bên ngoài chỉ bức xạ do cả quá trình phát xạ tự nhiên và quá trình phát xạ kích thích gây nên. Trừ trường hợp được đảm bảo bởi một điều kiện đặc biệt, thông thường bức xạ kích thích nhỏ hơn bức xạ tự phát rất nhiều. Tuy nhiên có thể tạo ra những điều kiện cần thiết để tăng cường bức xạ kích thích, đó chính là dùng quá trình bơm để tạo ra môi trường nghịch đảo mật độ như đã nghiên cứu trong mục (3.7) của chương III. Trong trường hợp tinh thể bán dẫn, điều kiện đó chính là làm cho thật nhiều điện tử chiếm các trạng thái ở đáy vùng dẫn và thật nhiều mức trống (lỗ trống) ở đỉnh vùng hoá trị. Với tình huống đó, photon có nhiều khả năng kích thích các cặp điện tử lỗ trống tái hợp bức xạ hơn là bản thân nó bị hấp thụ và tạo nên cặp điện tử, lỗ trống tự do.

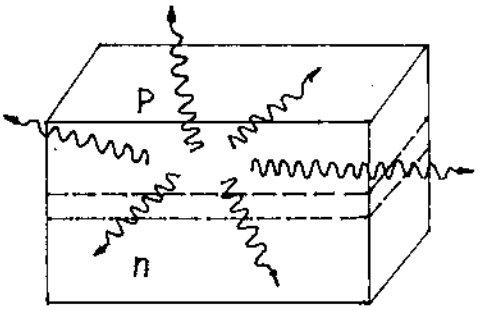
Điều kiện thứ hai để làm cho bức xạ kích thích thắng thế là tăng cường mật độ photon có năng lượng thích hợp trong mẫu. Điều này có thể thực hiện được nhờ phương pháp hồi tiếp dương quang học bằng cách dùng gương phản xạ hay một phương pháp phản xạ khác. Trong mục (3-7) chúng ta nghiên cứu quá trình phát xạ kích thích bằng mô hình hai mức năng lượng gián đoạn E_1 và E_2. Mô hình đó không hoàn toàn hợp với trường hợp bán dẫn, vì ở đây điện tử trong vùng dẫn chiếm một khoảng năng lượng nhất định ΔE_n ở gần đáy vùng dẫn, chứ không phải một mức E_c, lỗ trống cũng tương tự như vậy, chúng chiếm một khoảng năng lượng ΔE_p lân cận E_v, chứ không phải một mức E_v. Trong bán dẫn với mức phun cao, nồng độ điện tử và lỗ trống nằm trong điều kiện không cân bằng và được đặc trưng bởi các chuẩn mức Fermi E^*_{fn} và E^*_{fp}, $E^*_{fn} > E_c$ và$F^*_{fp} < E_v$, như trình bày ở hình (5.40).

Từ hình (5.40) ta thấy tồn tại trạng thái nghịch đảo mật độ và quá trình phát xạ kích thích thắng thế quá trình hấp thụ chỉ đối với photon có năng lượng trong khoảng

$$\Delta E_g \leq h\nu \leq E^*_{fn} - F^*_{fp}$$



Hình 5.40: *Sơ đồ giải thích phổ bức xạ tái hợp.*



Hình 5.41: *Sơ đồ giải thích nguyên lý laser bán dẫn.*

Khi cả hai điều kiện : điều kiện trạng thái đảo và điều kiện mật độ photon cao thoả mãn, thì quá trình bức xạ kích thích được tăng cường, chiếm ưu thế và mẫu hoạt động trong chế độ phát xạ kích thích.

Một laser rời rạc là một chuyển tiếp $p-n$ có dạng hình hộp, chiều dài l cỡ $300\mu m$ chiều rộng W cỡ $50\mu m$, hai mặt bên phẳng, được tạo bằng cách chẻ tinh thể tạo nên hai mặt gương phản xạ của cấu trúc một buồng cộng hưởng Fabry-Perot. Một cấu trúc như vậy sẽ phát ánh sáng laser nếu công suất bơm vượt quá giá trị ngưỡng. Sơ đồ laser bán dẫn được biểu diễn ở hình (5.41)

Nếu tăng dần công suất bơm từ thấp lên cao, số photon do tái hợp bức xạ tự phát tăng dần. Khi công suất chỉ mới vượt qua giá trị cần thiết để tạo ra chế độ nghịch đảo mật độ thì bức xạ phát ra chủ yếu là bức xạ tự phát theo mọi hướng gần như nhau như ở hình (5.41). Tuy nhiên đa số các photon này nhanh chóng rời khỏi vùng đảo mật độ không gây ra phát xạ kích thích. Một

số ít lan truyền theo mặt phẳng của lớp chuyển tiếp trong đó có vùng nghịch đảo mật độ sẽ gây nên phát xạ kích thích trước khi ra khỏi laser.

Đối với một bề rộng vùng cấm cho trước và một sự phân bố điện tử, lỗ trống cho trước, thường có một chuyển mức ứng với một khoảng năng lượng thích hợp có xác suất lớn hơn các chuyển mức với khoảng năng lượng nhỏ hơn hoặc lớn hơn. Dễ dàng thấy rằng khoảng năng lượng thích hợp đó là năng lượng tại cực đại của phân bố phổ bức xạ tự phát. Vì tại cực đại của sự phân bố phổ, số photon có năng lượng thích hợp đó là lớn nhất, nên bức xạ cưỡng bức tại giá trị năng lượng đó là mạnh nhất, vạch phổ bức xạ vì thế mà tăng cao và độ rộng phổ thu hẹp lại. Sự gia tăng cường độ bức xạ tại cực đại phổ được gọi là hiệu ứng khuếch đại. Nếu cường độ bức xạ không phải tăng tỷ lệ với công suất bơm mà nhanh hơn sự tăng công suất bơm thì bức xạ đó được gọi là bức xạ vượt trội. Tuy nhiên bức xạ vượt trội vẫn còn là bức xạ không đồng bộ, bởi vì quá trình khuếch đại xẩy ra đối với tất cả bức xạ có pha khác nhau.

Để tạo nên bức xạ đồng bộ cần phải có những điều kiện đặc biệt trong hệ để tách ra một bức xạ có pha nhất định, nghĩa là cần phải có một buồng cộng hưởng.

1. Laser bán dẫn với buồng cộng hưởng Fabry-Perot.

Phần quan trọng nhất của buồng cộng hưởng Fabry-Perot là hai mặt phẳng phản xạ ở hai đầu cuối, nó quyết định sự cộng hưởng của các mode trong buồng đó. Những mode cộng hưởng trong buồng cộng hưởng Fabry-Perot là các bức xạ có bước sóng đáp ứng điều kiện:

$L = m\frac{\lambda}{2}, m$ là số nguyên; λ bước sóng của ánh sáng trong môi trường $\lambda = \frac{\lambda_0}{n_r}, n_r$ là chiết suất tương đối của vật liệu.

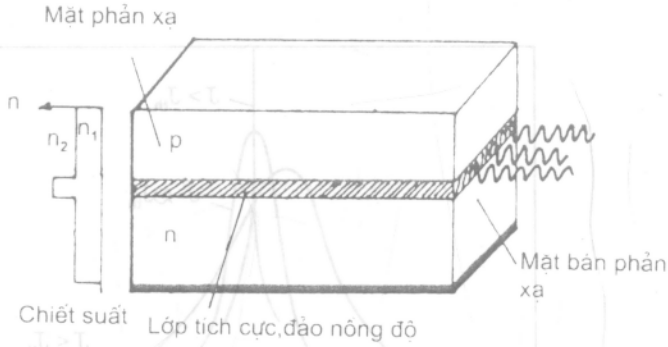
Độ cách giữa các mode ổn định là $\Delta\lambda_0$ có thể tính được từ

$$\begin{aligned} \lambda_0 &= \frac{2n_r L}{m} \\ m &= \frac{2n_r L}{\lambda_0} \end{aligned}$$

Lấy vi phân hai vế ta có

$$\Delta\lambda_0 = \frac{\lambda^2 \Delta m}{2n_r L\left[1 - \frac{\lambda}{n_r}\left(\frac{dn_r}{d\lambda}\right)\right]}$$

Buồng cộng hưởng Fabry-Perot có hai mặt phản xạ ở hai đầu cuối là các mặt bóng, phẳng. Còn các mặt bên khác không cần bóng, phẳng để không



Hình 5.42: *Laser bán dẫn với buồng cộng hưởng Fabry-Perot.*

phản xạ ánh sáng. Các mode cộng hưởng tồn tại trong buồng phải là bức xạ kích thích. Một điều quan trọng là làm sao để cho sóng quang học có khả năng cao nhất tồn tại trong vùng đảo mật độ. Với mục đích này người ta thiết kế laser sao cho có thể nhốt sóng quang học vào vùng đảo mật độ theo chiều z bằng cách thay đổi chiết suất của vật liệu như ở hình (5.42). Đó là các laser kép dị thể (DH- Laser, Double Heterostructure Laser).

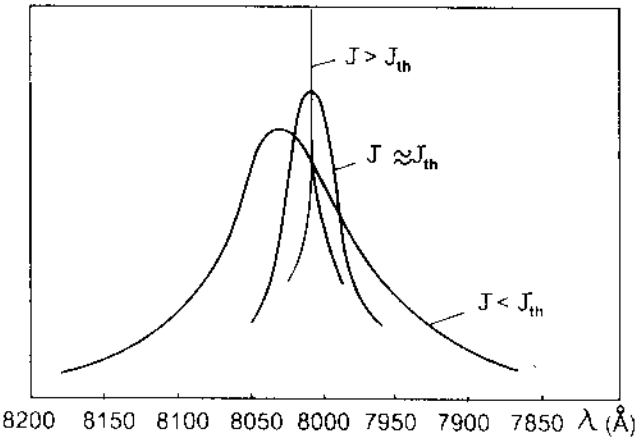
Các laser kép dị thể có cấu trúc gần như một linh kiện dẫn sóng quang dạng phẳng ba lớp, trong đó lớp dẫn sóng quang chính là lớp có đảo mật độ. Laser kép dị thể cũng có thể có cấu trúc như linh kiện dẫn sóng quang dạng dải phủ. Trong đó dùng hai dải phủ (có thể tạo ra bằng phương pháp bắn phá ion) để thu hẹp lớp dẫn sóng quang vào giữa hai dải phủ đó làm cho tia laser thu được tập trung hơn.

Hai đặc trưng chính của laser là:

- Mật độ dòng ngưỡng. Đó là mật độ dòng điện nhỏ nhất chạy qua laser để phát được bức xạ laser. Như chúng ta đã nói trên đây khi mật độ dòng thuận qua điôt còn nhỏ trong điôt chủ yếu chỉ có phát xạ tự phát đi mọi phía. Khi mật độ dòng tăng lên, nghĩa là phân bố đảo mật độ tăng lên hệ số khuếch đại g (hay là hệ số hấp thụ âm α) tăng lên cho đến khi đạt được giá trị ngưỡng; nghĩa là khi cường độ ánh sáng từ một điểm gốc 0 là $I(0)$ qua hai lần phản xạ ở hai gương của buồng cộng hưởng và trải qua một quảng đường $2L$ có giá trị $I(2L) \geq I(0)$. Giá trị mật độ dòng tương ứng với điều kiện $I(2L) = I(0)$ được gọi là mật độ dòng ngưỡng và ký hiệu là J_{th}.

Lý thuyết và thực nghiệm chứng tỏ rằng Jth giảm khi:

- Hiệu suất lượng tử η tăng, hiệu suất lượng tử là số hạt dẫn sinh ra khi



Hình 5.43: *Bề rộng vạch phổ của laser trong các trường hợp khác nhau.*

một photon bị hấp thụ (trong quá trình phát sinh hạt dẫn).

+ Hiệu ứng nhốt hạt dẫn tăng lên.

+ Chiều dài buồng cộng hưởng L tăng lên .

+ Hệ số phản xạ của hai gương của buồng cộng hưởng tăng lên.

+ Bề dày lớp hoạt tính d giảm xuống.

+ Hệ số tổn hao do cơ chế hấp thụ và tán xạ giảm xuống.

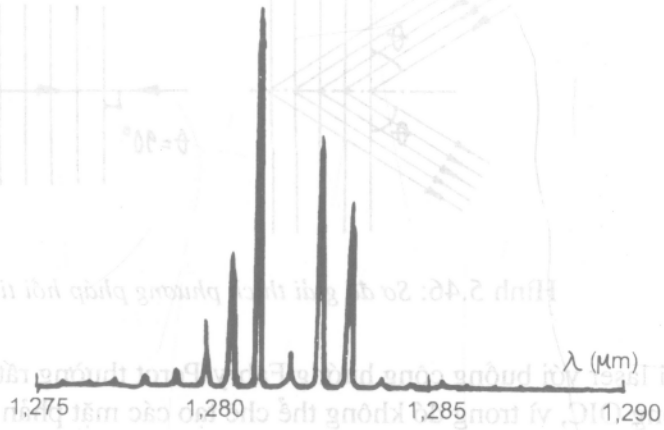
+ Khi nhiệt độ giảm. $J_{th} \sim \exp(\frac{T}{T_0})$.

- Phổ phát xạ laser

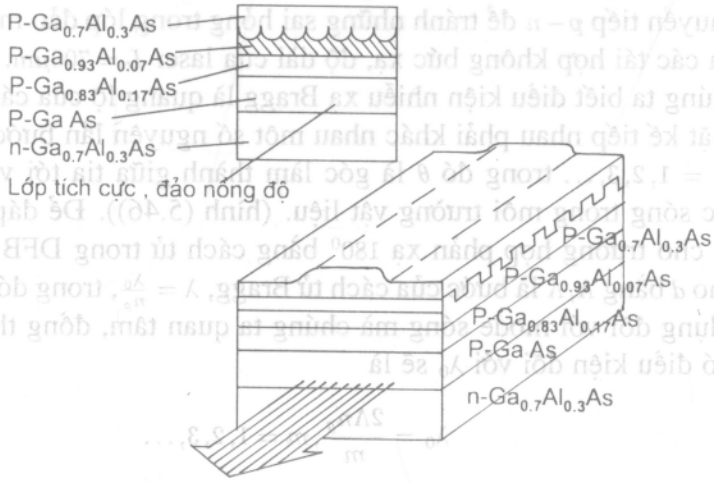
Khi mật độ dòng nhỏ hơn mật dộ dòng ngưỡng, bức xạ phát ra là bức xạ tự phát với bề rộng phổ rất lớn cỡ $100 \div 500$Å (xem hình (5.43)). Khi mật độ dòng đạt xấp xỉ mật độ dòng ngưỡng J_{th} bề rộng phổ thu hẹp lại, khi mật độ dòng vượt quá mật độ dòng ngưỡng J_{th} bề rộng phổ trở nên rất hẹp cỡ $1 \div 10$ Å (xem hình (5.43)).

Tuy nhiên trong buồng cộng hưởng Fabry-Perot có thể tồn tại một số mode với độ cách về bước sóng là $\Delta\lambda_0$, cho nên phổ phát xạ của laser bán dẫn có thể gồm một số vạch phổ cách nhau trong một dải cỡ 50Å như ở hình (5.44). Chỉ có trong những laser đặc biệt với buồng cộng hưởng tách ghép (C^3-cleaved-coupled-cavity) có thể đạt được phổ phát xạ gần như đơn sắc.

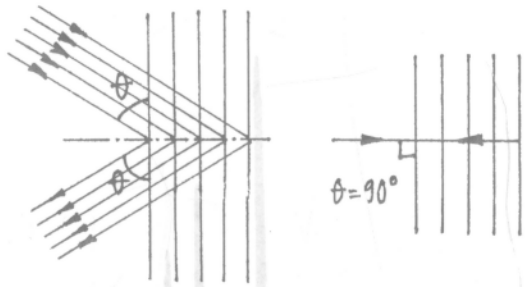
2. Laser phản hồi phân tán



Hình 5.44: *Các vạch phổ phát xạ của laser bán dẫn.*



Hình 5.45: *Laser phản hồi phân tán.*



Hình 5.46: *Sơ đồ giải thích phương pháp hồi tiếp.*

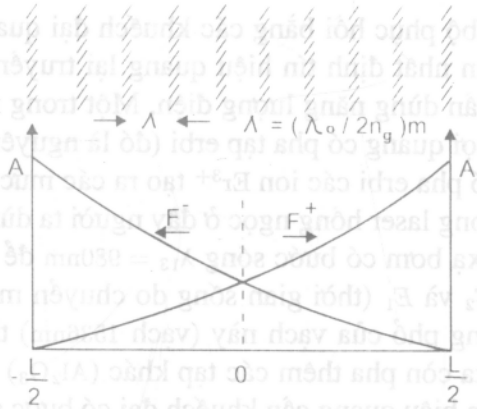
Loại laser với buồng cộng hướng Fabry-Perot thường rất khó chế tạo đồng thời trong OIC, vì trong đó không thể chế tạo các mặt phản xạ ở hai đầu laser mà không bẻ các phiến silic, làm khó khăn trong việc chế tạo đường dẫn điện và việc thoát nhiệt của mạch.

Để khắc phục nhược điểm đó người ta đã thiết kế chế tạo các laser phản hồi phân tán nhờ cách tử Bragg (Distributed Feedback Laser, DFB Laser). Trong DFB laser, cách tử Bragg được tạo nên bằng cách làm nhăn (corrugating) lớp biên phân cách giữa hai lớp bán dẫn cấu thành laser. Trên hình (5.45) biểu diễn sơ đồ một DFB laser. Trong sơ đồ này lớp nhăn tạo cách tử nằm ngoài lớp chuyển tiếp $p-n$ để tránh những sai hỏng trong lớp đảo mật độ, nó có thể gây ra các tái hợp không bức xạ, độ dài của laser $L = 700\mu$m.

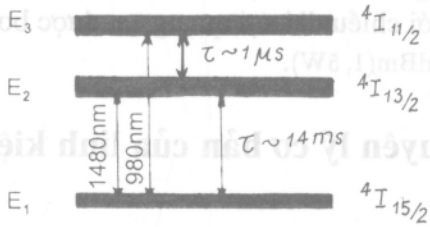
Chúng ta biết điều kiện nhiễu xạ Bragg là quang lộ của các tia phản xạ từ các mặt kế tiếp nhau phải khác nhau một số nguyên lần bước sóng $2d\sin\theta = m\lambda; m = 1, 2, 3, \ldots$ trong đó θ là góc làm thành giữa tia tới và mặt phản xạ, λ bước sóng trong môi trường vật liệu. (hình (5.46)). Để đáp ứng điều kiện Bragg cho trường hợp phản xạ 180^0 bằng cách tử trong DFB laser, chúng ta cần cho d bằng Λ, Λ là bước của cách tử Bragg, $\lambda = \frac{\lambda_0}{n_g}$, trong đó n_g là chiết suất hiệu dụng đối với mode sóng mà chúng ta quan tâm, đồng thời cho $\theta = 90^0$. Khi đó điều kiện đối với λ_0 sẽ là

$$\lambda_0 = \frac{2\Lambda n_g}{m}, m = 1, 2, 3, \ldots$$

Mặc dầu có thể có phản xạ một số mode sóng khác nhau ứng với các giá trị m khác nhau, tuy nhiên thường người ta chọn một mode sóng thích hợp cho công nghệ chế tạo, ví dụ mode sóng với $m = 3$. Phần công suất quang phản xạ phụ thuộc vào nhiều yếu tố cấu thành cách tử và laser. Chúng ta có thể hình



Hình 5.47: *Sơ đồ giải thích sự lan truyền sóng quang trong DFB Laser.*



Hình 5.48: *Sơ đồ các mức năng lượng của ion erbi Er^{3+}.*

hình dung sự lan truyền của sóng quang trong DFB laser như trong hình vẽ (5.47). Dọc theo vùng đảo mật độ sóng lan truyền theo hai chiều (sóng tới và sóng phản xạ) được khuếch đại như ở hình (5.47). Sóng phát ra từ hộp cộng hưởng Fabry Perot cũng như trong DFB laser là

sóng kết hợp, có độ song song cao, nghĩa là có tính định hướng cao.

3. Khuếch đại quang. Trong kỹ thuật truyền thông tin bằng sợi quang, dù có độ tổn hao rất thấp, trên một khoảng đường dài tín hiệu vẫn bị giảm xuống cần được phục hồi để truyền tiếp tục. Chính vì vậy trên đường truyền cần có các bộ phục hồi (repeater). Các bộ phục hồi này cần được cung cấp năng lượng điện. Vấn đề cung cấp năng lượng điện trên đường truyền nhiều khi rất phức tạp (ví dụ đường truyền trên biển). Chính vì vậy người ta đã

nghĩ đến thay các bộ phục hồi bằng các khuếch đại quang, nghĩa là sau một khoảng cách truyền nhất định tín hiệu quang lại truyền qua một bộ khuếch đại quang không cần dùng năng lượng điện. Một trong những bộ khuếch đại quang như vậy là sợi quang có pha tạp erbi (đó là nguyên tố đất hiếm $z = 68$). Trong sợi quang có pha erbi các ion Er^{3+} tạo ra các mức như trình bày ở hình (5.48) cũng như trong laser hồng ngọc ở đây người ta dùng phương pháp bơm 3 mức. Dùng bức xạ bơm có bước sóng $\lambda_{13} = 980\text{nm}$ để tạo phân bố đảo mật độ giữa hai mức E_2 và E_1 (thời gian sống do chuyển mức này quyết định là $\tau_{23} = 14\text{ms}$). Bề rộng phổ của vạch này (vạch 1536nm) thường rất hẹp vì vậy ngoài Er ra người ta còn pha thêm các tạp khác (Al_2O_3) để làm cho vạch phổ này rộng ra. Khi tín hiệu quang cần khuếch đại có bước sóng $\approx 1536\text{nm}$ đi qua trong sợi quang có pha Er như trên sẽ được khuếch đại theo hiệu ứng laser. Đó chính là sợi khuếch đại quang pha tạp Er (Erbium Doped Fiber Amplifier - EDFA). Cùng với Al_2O_3 pha tạp Er^{3+} với hàm lượng 1000ppm, có thể đạt được sợi khuếch đại quang EDFA có hệ số khuếch đại lớn nhất là $31,5\text{dB}$ trong một dải tần rộng 35nm với chiều dài sợi quang 1m được bơm bởi bức xạ 950nm với công suất bơm $31,8\text{dBm}(1,5\text{W})$.

5.6 Những nguyên lý cơ bản của linh kiện thu quang (photođêtectơ)

Linh kiện thu quang, photođêtectơ là những linh kiện bán dẫn có thể chuyển đổi tín hiệu quang thành tín hiệu điện. *Nguyên lý hoạt động của các linh kiện này có thể bao gồm 3 khâu sau:*

- Phát sinh hạt dẫn bởi ánh sáng tới.

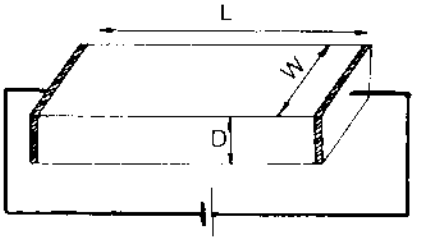
- Vận chuyển hạt dẫn và khuếch đại dòng hạt dẫn bằng một cơ chế nào đó có thể.

- Cho dòng điện tác dụng vào mạch ngoài gây ra tín hiệu điện ở lối ra.

Photođêtectơ được sử dụng trong rất nhiều lĩnh vực từ các cảm biến hồng ngoại đến các bộ thu trong thông tin quang.

Photođêtectơ có nhiều đặc tính quý.

+ Độ nhạy cao
+ Thời gian đáp ứng ngắn
+ Mức nhiễu thấp
+ Gọn nhẹ.
+ Nguồn nuôi (dòng, điện áp) nhỏ.



Hình 5.49: *Sơ đồ quang trở.*

+ Tiện dụng.

Photodêtectơ gồm nhiều loại, dưới đây ta điểm qua nguyên lý hoạt động của chúng.

5.6.1 Linh kiện quang dẫn hay quang trở. Một quang trở đơn giản gồm một phiến bán dẫn hai đầu có hai điện cực kim loại với tiếp xúc omic, như ở hình (5.49). Khi chiếu ánh sáng lên bề mặt mẫu bán dẫn trong mẫu sẽ phát sinh các điện tử và lỗ trống có thể bởi chuyển mức vùng-vùng (chuyển mức cơ bản), chuyển mức giữa vùng với các mức trong vùng cấm, kết quả làm tăng độ dẫn của mẫu .

Đối với bán dẫn riêng (intrinsic) ta có $\Delta\sigma = e(\mu_n\delta n + \mu_p\delta p)$ và sự tăng độ dẫn chủ yếu là do tăng nồng độ hạt dẫn. Chúng ta có thể *xác định bước sóng ngưỡng* phía sóng dài

$$\lambda_c = \frac{1,24}{\Delta E_g}\mu\text{m}$$

Ánh sáng có bước sóng dài hơn λ_c sẽ không gây nên được hiệu ứng quang dẫn trong bán dẫn riêng.

Đối với bán dẫn pha tạp (extrinsic) quá trình quang kích thích có thể xảy ra bằng chuyển mức giữa một bờ vùng (E_c, E_v) và một mức năng lượng tạp chất, trong vùng cấm. Trong trường hợp này bước sóng ngưỡng thường dài hơn và bằng:

$$\lambda_c = \frac{1,24}{E_{\text{ext}} - E_t}\mu\text{m}$$

trong đó E_{ext} - mức năng lượng của bờ vùng, E_t - mức năng lượng trong vùng cấm.

Chúng ta hãy xét nguyên lý hoạt động của quang trở. Giả sử ở thời điểm $t = 0$ số hạt dẫn phát sinh trong một đơn vị thể tích do tác dụng của một thông

lượng photon đã cho là δn_0. Tại thời điểm t sau đó, số hạt dẫn $\delta n(t)$ trong một đơn vị thể tích giảm do tái hợp theo quy luật:

$$\delta n(t) = \delta n_0 \exp(\frac{-t}{\tau})$$

τ là thời gian sống của hạt dẫn. Đại lượng $\frac{\delta n}{\tau}$ chính là *tốc độ tái hợp* ($\frac{d\delta n}{dt} = \frac{\delta n}{\tau}$).

Giả sử thông lượng photon dọi xuống toàn bộ diện tích bề mặt $A = WL$ đồng đều, tổng số photon đến bề mặt trong một đơn vị thời gian là $P_{\text{opt}}/h\nu$, P_{opt} là công suất ánh sáng tới và $h\nu$ là năng lượng photon.

Trong trạng thái dừng tốc độ phát sinh phải bằng tốc độ tái hợp. Nếu bề dày mẫu bán dẫn là D lớn hơn độ sâu thâm nhập của ánh sáng $(1/\alpha)$ với α là hệ số hấp thụ ánh sáng, thì tốc độ phát sinh hạt dẫn trong một đơn vị thể tích mẫu sẽ là

$$G = \frac{\delta n}{\tau} = \frac{\eta(P_{\text{opt}}/h\nu)}{WLD} \longrightarrow \delta n = \frac{\eta(P_{\text{opt}}/h\nu)}{WLD}\tau$$

Trong đó η là hiệu suất lượng tử (số hạt dẫn phát sinh khi một photon bị hấp thụ) và δn là số hạt dẫn dư trên một đơn vị thể tích. Dòng quang dẫn chạy qua hai cực là

$$I_p = \sigma\mathcal{E}WD = (e\mu_n\delta n\mathcal{E})WD = (e\delta n v_d)WD$$

Trong đó $\mathcal{E}$ là cường độ điện trường, v_d là vận tốc cuốn của hạt dẫn. Thay giá trị δn vào ta có

$$I_p = e\left[\eta\frac{P_{\text{opt}}}{h\nu}\right]\frac{\mu_n\tau\mathcal{E}}{L}$$

Giả sử chúng ta ký hiệu dòng quang dẫn sơ cấp là

$$I_{\text{ph}} \equiv \left[\eta\frac{P_{\text{opt}}}{h\nu}\right]$$

thì hệ số khuếch đại dòng quang dẫn sẽ là

$$g \equiv \frac{I_{\text{p}}}{I_{ph}} = \frac{\mu_n\tau\mathcal{E}}{L} = \frac{\tau}{t_r}$$

Trong đó $t_r \equiv L/v_d$ là thời gian chuyển vận. Như vậy hệ số khuếch đại dòng quang dẫn là tỷ số giữa thời gian sống và thời gian chuyển vận của hạt dẫn.

Nếu thời gian sống của hạt dẫn trong mẫu lớn, khoảng cách giữa hai điện cực nhỏ ta có thể đạt được giá trị hệ số khuếch đại dòng g rất cao, có những mẫu đạt đến 10^6. Thời gian đáp ứng của quang dẫn được xác định bởi thời gian chuyển vận t_r. Để giảm t_r ta có thể tăng $\mathcal{E}$ và giảm L, thời gian đó nằm trong khoảng $10^{-3} \div 10^{-10}$ giây.

5.6.2 Photođiôt. Một photođiôt đơn giản là *một chuyển tiếp $p-n$ mắc thiên áp ngược*. Khi có tín hiệu quang tác dụng lên photođiôt vùng nghèo sẽ phân li các cặp điện tử lỗ trống phát sinh ra trong đó và một dòng điện sẽ chạy ở mạch ngoài, gọi chúng là đáp ứng quang. Khi tin hiệu quang có tần số cao, vùng nghèo cần phải hẹp để giảm thời gian vận chuyển hạt dẫn. Mặt khác để tăng hiệu suất lượng tử phải giữ cho lớp nghèo đủ dày để cho phần lớn ánh sáng được hấp thụ trong lớp nghèo. Như vậy ở đây có vấn đề cần phải cân nhắc giữa tốc độ đáp ứng và hiệu suất lượng tử.

Hiệu suất lượng tử. Hiệu suất lượng tử là số cặp điện tử-lỗ trống phát sinh trên một photon tới

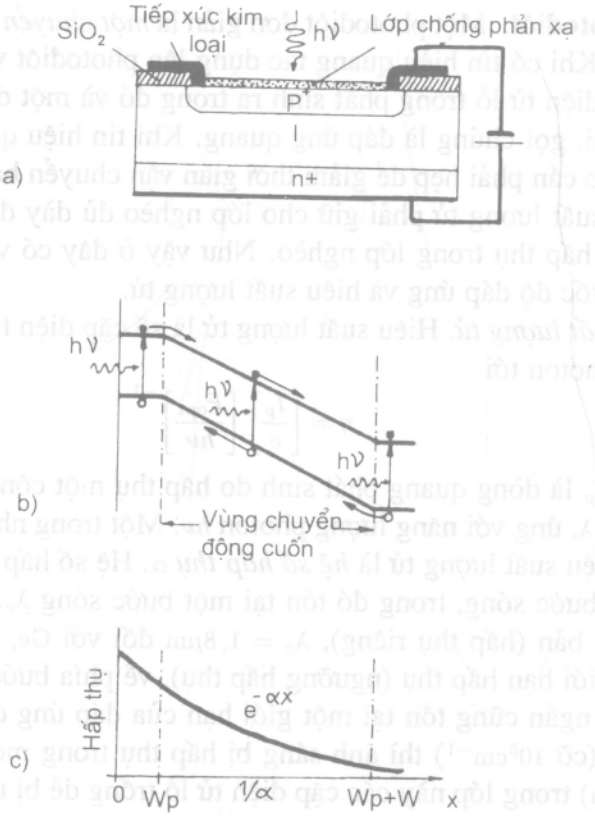
$$\eta = \left[\frac{I_p}{e}\right]\left[\frac{P_{\text{opt}}}{h\nu}\right]^{-1}$$

Trong đó I_p là dòng quang phát sinh do hấp thụ một công suất quang P_{opt} ở bước sóng λ, ứng với năng lượng photon $h\nu$. Một trong những yếu tố chủ yếu chi phối hiệu suất lượng tử là *hệ số hấp thụ* α. Hệ số hấp thụ α phụ thuộc rất mạnh vào bước sóng, trong đó tồn tại một bước sóng λ_c, *bước sóng ngưỡng* hấp thụ cơ bản (hấp thụ riêng), $\lambda_c = 1,8\mu\text{m}$ đối với Ge, $\lambda_c = 1,1\mu\text{m}$ đối với Si. Đó là giới hạn hấp thụ (ngưỡng hấp thụ), về phía bước sóng dài. Về phía bước sóng ngắn cũng tồn tại một giới hạn của đáp ứng quang. Đó là vì khi α quá lớn (cỡ 10^5cm^{-1}) thì ánh sáng bị hấp thụ trong một lớp rất mỏng (cỡ $\frac{1}{\alpha} \approx 10^{-5}\text{cm}$) trong lớp này các cặp điện tử lỗ trống dễ bị tái hợp vì nhiều tâm môi giới (gọi là tâm tái hợp) và thời gian sống của các cặp điện tử-lỗ trống rất nhỏ. Hiệu suất lượng tử phụ thuộc rất mạnh và cấu trúc và vật liệu chế tạo photođiôt.

Tốc độ đáp ứng. Tốc độ đáp ứng do các yếu tố sau đây quyết định.

- Sự khuếch tán hạt dẫn.
- Thời gian sống của hạt dẫn trong lớp nghèo.
- Điện dung của lớp nghèo.

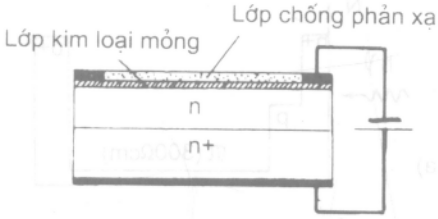
Nếu hạt dẫn sinh ra ngoài lớp nghèo rồi khuếch tán vào lớp nghèo thì thời gian trễ sẽ lớn nghĩa là tốc độ đáp ứng nhỏ. Để giảm thời gian trễ lớp chuyển tiếp $p-n$ phải được tạo nên rất gần bề mặt mẫu. Phần lớn photon sẽ được hấp thụ trong lớp nghèo nếu lớp nghèo dày, tuy nhiên khi lớp nghèo dày thì thời gian vận chuyển lại tăng thêm và hạn chế tần số của đáp ứng. Lớp nghèo cũng không quá mỏng vì khi đó điện dung lớp nghèo sẽ lớn và làm cho hằng



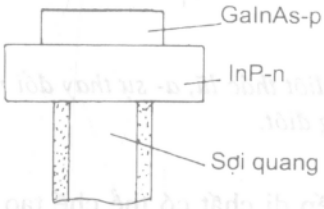
Hình 5.50: *Sơ đồ một Photođiôt P.I.N, a- cấu tạo P.I.N; b- sơ đồ vùng năng lượng của P.I.N; c- sơ đồ mô tả quá trình hấp thụ theo độ sâu.*

số thời gian RC (thời gian phóng điện của tụ) sẽ lớn. Độ dày lớp nghèo tối ưu được chọn sao cho thời gian vận chuyển qua lớp đó vào cỡ một nửa chu kỳ điều biến tín hiệu quang. Ví dụ tần số điều biến là 2GHz với vận tốc cuốn của hạt dẫn 10^7cm/s thì bề rộng lớp nghèo cỡ 25μm ($T = \frac{1}{2\cdot 10^9} = 5\cdot 10^{-10}$s, $\tau_r = 10^{-7}W/$cms, $W = \frac{1}{2}5\cdot 10^{-10}\cdot 10^7 cm = 25\mu$m). Với những lập luận trên đây người ta đã thiết kế chế tạo các loại photođiôt sau.

1. Photođiôt P.I.N. Đây là loại photođiôt thông dụng nhất, được biểu diễn ở hình (5.50)(a) nó gồm có 3 lớp chính: n^+ pha tạp loại n với nồng độ cao, I lớp bán dẫn riêng (intrinsic) có bề dày tối ưu để có hiệu suất lượng tử và tốc độ đáp ứng thích hợp, p^+ lớp pha tạp loại p với nồng độ cao trên cùng là lớp



Hình 5.51: *Sơ đồ Photođiôt kim loại-bán dẫn.*

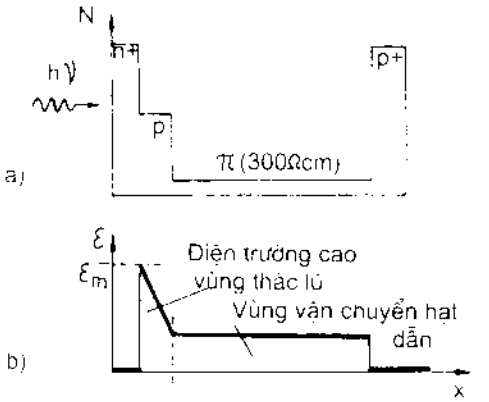


Hình 5.52: *Sơ đồ Photođiôt dị chất.*

điện môi trong suốt để giảm phản xạ ánh sáng. Hai cực kim loại được tiếp xúc với lớp n^+ và p^+. Hình (5.50b) biểu diễn sơ đồ vùng năng lượng và giải thích quá trình phát sinh và chuyển vận hạt dẫn khi chiếu sáng. Hình (5.50c) biểu diễn quá trình hấp thụ ánh sáng trong mẫu, nghĩa là sự phụ thuộc cường độ ánh sáng vào độ sâu.

2. Photođiôt kim loại-bán dẫn, (điôt Schottky). Đây là một tiếp xúc kim loại bán dẫn mắc theo chiều ngược. Nó gồm lớp bán dẫn n^+ trên đó là lớp bán dẫn loại n pha tạp ít hơn, trên lớp này là lớp điện cực kim loại mỏng (100 Å) cho phép ánh sáng truyền qua được trên cùng là lớp giảm phản xạ, (xem hình (5.51)). Photođiôt loại này chủ yếu dùng trong vùng ánh sáng khả kiến và tử ngoại. Trong vùng này α thường lớn ($\cong 10^4 \text{cm}^{-1}$) vì vậy vùng photon chủ yếu bị hấp thụ chỉ dày khoảng 1μm.

3. Photođiôt dị chất. Đó là một photođiôt gồm một đế bán dẫn có vùng cấm rộng ΔE_{g_1} được phủ bằng phương pháp nuôi ghép (epitaxy) một lớp bán dẫn vùng cấm hẹp $\Delta E_{g_2} < \Delta E_{g_1}$. Tín hiệu quang được chiếu từ phía đế. Ở đây không cần quan tâm nhiều đến bề dày lớp đế có vùng cấm rộng ΔE_{g_1} vì nếu $h\nu$ của photon ánh sáng nhỏ hơn ΔE_{g_1} thì nó không bị hấp thụ trong đế này.



Hình 5.53: *Sơ đồ Photođiôt thác lũ, a- sự thay đổi nồng độ tạp chất trong điôt; b- phân bố điện trường trong điôt.*

Hơn thế nữa chuyển tiếp dị chất có thể chế tạo bằng bán dẫn hợp chất sao cho hiệu suất lượng tử và tốc độ đáp ứng đạt tối ưu đối với sóng ánh sáng có bước sóng cho trước. Thông thường người ta dùng:

- $Al_x\ Ga_{1-x}As$ trên GaAs cho $\lambda = (0,65 \div 0,85)\mu m$.
- $Ga_{0,47}In_{0,53}As$ ($\Delta E_g = 0,73eV$) hoặc $Ga_{0,27}I_{0,73}As_{0,63}P_{0,37}$ ($\Delta Eg = 0,95eV$) trên InP cho $\lambda = 0,96\mu m$ và $1,6\mu m$ với $\eta = 55\%$.

Trong các điôt này ánh sáng được dọi (từ sợi quang) từ dưới đế lên, (xem hình (5.52)).

4. Photođiôt thác lũ (Avalanche Photodiôt) (APD). Photođiôt thác lũ làm việc ở chế độ phân cực ngược lớn đủ để gây ra hiện tượng ion hoá va chạm tức là hiệu ứng thác lũ. Loại photođiôt này có thể cho hệ số khuếch đại nội (trong điốt) cao, đồng thời có tốc độ đáp ứng cao ví dụ với tín hiệu ánh sáng điều biến bởi bức xạ vi ba.

Photôđiốt thác lũ có cấu trúc gồm các chuyển tiếp $p - n$ đột biến cấu tạo bởi các lớp $n^+ - p - \pi - p^+$ với phân bố ở hình (5.53a) và phân bố điện trường ở hình (5.53b). Trong đó vùng điện trường cao n^+p là vùng xẩy ra hiện tượng thác lũ vùng tiếp theo là vùng chuyển vận. Ở đây có thể đạt được η bằng 100%.

Bài tập chương V

(5-1) Chứng minh công thức tính khẩu độ số (NA - Numerical Aperture).

$$NA = (n_1^2 - n_2^2)^1/2 \simeq n_1(2\Delta)^{1/2}$$

(5-2) Từ điều kiện các mode dẫn truyền trong sợi quang giật cấp đa mode, bỏ qua sự dịch chuyển pha do phản xạ ở mặt phân cách lõi - vỏ, đánh giá số lượng các mode đó cho $d = 10\lambda_0, n_1 = 1,5$ độ chênh chiết suất $\Delta = 0,02$.

(5-3) Cho sợi quang giật cấp đa mode có độ chênh chiết suất $\Delta = 0,01$, chiết suất của lõi 1,5, bước sóng ánh sáng $\lambda = 1,5\mu$m. Tính độ giãn xung sáng, đánh giá bề rộng dải thông và khẩu độ số (tính góc $\theta_{zi_{max}}$) cho khoảng cách 10km.

(5-4) Cho một bán dẫn vùng cấm thẳng tinh khiết có bề rộng vùng cấm $\Delta E_g = 1,5$eV, giả sử khối lượng hiệu dụng của điện tử và lỗ trống là đẳng hướng, bằng nhau và bằng $\frac{m_0 g}{10} = 9,1 \cdot 10^{-32}$kg .

a- Tính bước sóng ngưỡng hấp thụ.

b- Người ta thấy rằng khi cường độ ánh sáng kích thích quá lớn bán dẫn trở nên trong suốt với ánh sáng có bước sóng ngưỡng trên đây. Hãy giải thích hiện tượng này.

c- Nếu mật độ trạng thái trong vùng dẫn và vùng hóa trị được tính theo công thức

$$g(E) = 2\pi \left(\frac{2m^*}{h^2}\right)^{3/2} \sqrt{E - E_c}$$

và nếu cho nồng độ điện tử và nồng độ lỗ trống do quang phát sinh là 10^{18}cm^{-3} hãy tính bước sóng ngưỡng trong trường hợp này.

(5-5) Một mẫu bán dẫn đơn tinh thể silic có bề dày $0,25\mu$m được chiếu sáng bằng ánh sáng đơn sắc có $h\nu = 3$eV với công suất $10mW$. Tìm năng lượng tổng cộng mà mẫu hấp thụ trong 1 giây, năng lượng nhiệt chuyển cho mạng tinh thể trong 1s và số photon sinh ra do tái hợp bức xạ riêng (vùng - vùng) cho hệ số hấp thụ ở bước sóng đang xét là $4 \cdot 10^4$cm^{-1}, $\Delta E_g = 1,12$eV.

(5-6) Một mẫu GaAs được chiếu sáng bởi ánh sáng có bước sóng $\lambda = 0,6\mu$m. Công suất tia tới là 15mW. Nếu 1/3 công suất đó bị phản xạ trở lại và 1/3 thoát ra từ mặt sau của mẫu thì bề dày của mẫu bằng bao nhiêu. Tìm năng lượng nhiệt được truyền cho mạng tinh thể trong một giây. Biết hệ số hấp thụ $\alpha(0,6\mu\text{m}) = 5 \cdot 10^4\text{cm}^{-1}$, $\Delta E_g = 1,42$eV.

(5-7) Một quang dẫn có kích thước $L = 6$mm, $W = 2$mm, $D = 1$mm được chiếu bởi bức xạ đồng đều. Do hấp thụ ánh sáng dòng điện tăng lên $2,83$mA.

Điện áp đặt lên 2 cực là 10V. Khi ngắt nguồn sáng đột ngột dòng điện giảm với vận tốc ban đầu là $23,6\text{A/s}$. Cho biết $\mu_n = 3600\text{cm}^2/\text{Vs}$, $\mu_p = 1700\text{cm}^2/\text{Vs}$. Tìm:

a) số các điện tử lỗ trống phát sinh trong chế độ dừng;

b) thời gian sống của hạt dẫn không cơ bản;

c) nồng độ hạt dẫn dư tồn tại sau khi ngắt nguồn sáng $1ms$.

Đáp số

(5-2) $N = 6$ mode.

(5-3) $\Delta t = 5 \cdot 10^{-7}s$; $B \cong 5 \cdot 10^5\text{bit/s}$; $\theta_{\text{max}} = 12°25$; $NA = 0,212$.

(5-4) a. $\lambda_{th} = 0,827\mu\text{m}$; c. $\lambda_{th} = 0,788\mu\text{m}$.

(5-5) Năng lượng truyền cho mạng là $3,9 \cdot 10^{-3}\text{W}$; năng lượng bức xạ do tái hợp là $2,4 \cdot 10^{-3}\text{W}$; số phô tôn tái hợp bức xạ trong một giây là $1,3 \cdot 10^{16}\text{phot/s}$.

(5-6) Năng lượng truyền cho mạng trong một giây là $1,559\text{mW}$.

(5-7) a. $n_{st} = 1 \cdot 10^{13}\text{cm}^{-3}$; b. $\tau = 0,12 \cdot 10^{-3}s$; c. $n(t) = 2,4 \cdot 10^9\text{cm}^{-3}$.

Phụ lục

Một số hằng số vật lý

Tên đại lượng và ký hiệu	Giá trị
- Đơn vị Angstrong Å	10^{-10}m = 10^{-8}m = $10^{-4}\mu$m
- Số Avogadro N_{AVO}	$6,02204 \cdot 10^{23} \cdot$ mole^{-1}.
- Hằng số Boltzmann k	$1,38066 \cdot 10^{-23}$J/K =
	$8,6167 \cdot 10^{-5}$eV/K
- Hằng số khí $R = k \cdot N_{AVO}$	1,98719/moleK
- Hệ số Stefan-Botlzmann, σ	$0,56687 \cdot 10^{-8}$W/m^{2}K^4
- Năng lượng kT ở nhiệt độ 300K	0,0259eV
- Điện tích của điện tử, e	$1,60218 \cdot 10^{-19}$C.
- Điện tử vôn, eV	$1,60218 \cdot 10^{-19}$G
- Hằng số Planck h	$6,62617 \cdot 10^{-34}$Js
- Vận tốc ánh sáng trong chân không c	$2,99792 \cdot 10^{8}$m/s
- Khối lượng nghỉ của điện tử m_0	$0,91095 \cdot 10^{-30}$kg
- Năng lượng nghỉ của điện tử $E_0 = m_0c^2$	$0,510976 \cdot 10^{6}$eV
- Bước sóng ánh sáng ứng với	
năng lượng photon 1eV, λ	$1,23977 \cdot 10^{-6}$m = $12,3977 \cdot 10^{3}$Å
- Tần số ánh sáng ứng với	
năng lượng photon 1eV, ν	$2,418357 \cdot 10^{14}$s^{-1}
- Năng lượng photon ứng với	
vectơ sóng của ánh sáng là 1cm^{-1}	$1,985742 \cdot 10^{-23}$J
- Bán kính nguyên tử Bohr A_B	0,529187Å
- Khối lượng nghỉ của proton, M_p	$1,67264 \cdot 10^{-27}$kg
- Bước sóng Compton , $\frac{h}{m_0c}$	$2,42621 \cdot 10^{-12}$m
- Hằng số Ridberg, $R_\infty = \frac{m_0e^4}{4\pi h^2c}$	$1,0973731 \cdot 10^{7}$m^{-1}
- Hằng số điện môi của chân không ϵ_0	$8,85418 \cdot 10^{-12}$F/m
- Độ từ thẩm của chân không, μ_0	$1,25663 \cdot 10^{-6}$H/m
- Magneton Bohr của điện tử $\mu_B \frac{e\hbar}{2m_0c}$	$9,2732 \cdot 10^{-24}$J/T $\approx 5,7910^{-5}$eV/T

Bội số và ước số của đơn vị

exa	E	10^{18}	atto	a	10^{-18}
peta	P	10^{15}	femto	f	10^{-15}
tera	T	10^{12}	pico	p	10^{-12}
giga	G	10^{9}	nano	n	10^{-9}
mega	M	10^{6}	micro	μ	10^{-6}
kilo	k	10^{3}	mili	m	10^{-3}
hecto	h	10^{2}	centi	c	10^{-2}
deka	dk	10	deci	d	10^{-1}

Hệ số chuyển đổi giữa một số đơn vị đo

- Đơn vị đo lực, niutơn, N	10^5đin
- Đơn vị áp suất, N/m^2	10đin/cm^2 $= 10^{-5} = \frac{1}{133,322}$mHg
- Đơn vị năng lượng, Jun	10^7ec
- Đơn vị công suất, oat	10^7ec/s
- Đơn vị cảm ứng từ, tesla, T	10^4 gaoxơ $= 10^4$Wb/cm^2
- Đơn vị cường độ từ trường, A/m	$4\pi \cdot 10^{-3}$Oe
- Đơn vị từ thông, vebe, Wb	10^8maxwell
- Đơn vị độ cảm ứng, henri, H	$10^9 cm$
- Đơn vị nhiệt độ, K	$t°C + 273,15$

Một số đặc trưng quan trọng của các bán dẫn ở nhiệt độ $300K$

Chất bán dẫn	Bề rộng vùng cấm ΔEg(eV)	Loại vùng cấm (*)	Độ linh động (cm^2/Vs)		Hằng số điện môi
			μ_n	μ_p	
Ge	0,66	I	3900	1900	16,0
Si	1,12	I	1450	450	11,9
SiC	2,99	I	400	50	10,0
AlSb	1,58	I	200	420	14.4
GaAs	1,42	D	8500	400	13,1
GaP	2,26	I	110	75	11,1
GaSb	0,72	D	5000	850	15,7
InAs	0,36	D	33000	460	14,6
InP	1,35	D	4600	150	12,4
InSb	0,17	D	80000	1250	17,7
CdS	2,42	D	340	50	5,4
CdTe	1,56	D	1050	100	10,2
ZnO	3,35	D	200	180	9,0
ZnS	3,68	D	165	5	5,2
PbS	0,41	I	600	700	17,0
PbTe	0,31	I	6000	4000	30,0

(*) I - Loại bán dẫn vùng cấm xiên (Indirect)
D - Loại bán dẫn vùng cấm thẳng (Direct)

Chữ cái Hylạp thường dùng

Alpha	α	A	Nu	ν	N
Beta	β	B	Xi	ξ	Ξ
Gamma	γ	Γ	Omicron	o	O
Delta	δ	Δ	Pi	π	Π
Epsilon	ϵ	E	Rho	ρ	P
Zeta	ζ	Z	Sigma	σ	Σ
Eta	η	H	Tau	τ	T
Theta	θ	Θ	Upsilon	υ	Υ
Iota	ι	I	Phi	ϕ	Φ
Kappa	κ	K	Chi	χ	X
Lambda	λ	Λ	Psi	ψ	Ψ
Mu	μ	M	Omega	ω	Ω

Tài liệu tham khảo

[1] V.I.Gaponov. *Electronics*, vol. 1, Physmat edition. Moscow. 1960.

[2] David Bohm. *Quantum Theory*, Prentice Hall edition. New York. 1960.

[3] Douglas C. Giancoly. *Physics for scientists and Engineers with moderns physics*, second edition. Prentice Hall. 1989.

[4] C. Kittel. *Introduciton to Solid State Physics*, 6th edition. Wiley, New York. 1986.

[5] P.C. Kireev. *Semiconductor Physics*. Moscow. 1969.

[6] K. Seeger. *Semiconductor Physics*, 5the edition. Springer-Verlag. 1991.

[7] S.M. Sze. *Semiconductor Device Physics and Technology*. John Wiley, New York. 1985.

[8] Jasprit Singh. *Semiconductor optoelectronics physics and Technology*. Mc Graw-Hill International. Edition 1992.

[9] R.G. Hunsperger. *Integrated Optics Theory and Technology*. Third edition. Springer-Verlag. 1990.

[10] C.M. Levitski. *Worked examples in physical electronics*. Kiev. 1964.

[11] P. Linch and A. Nicolaides. *Worked examples in Physical electronics*. Harrap London. 1972.

[12] Ronald Gautreau and William Savin. *Theory and Problems of Modern Physics*. Mc Graw-Hill. Edition 1983.

[13] J. Gowar. *Optical Communication System*, second edition. Prentice-Hall. 1993.

[14] G. Keiser. *Optical Fibre Communications*, second edition. Mc Grawo-Hill. New York. 1992.

[15] I. V. Savelyev. *Physics. A General Course*, volume III. Mir Publishers, Moscow. 1981.

GS PHÙNG HỒ

GIÁO TRÌNH

VẬT LÝ ĐIỆN TỬ

Chịu trách nhiệm xuất bản: PGS. TS TÔ ĐĂNG HẢI
Biên tập: ĐẶNG VĂN SỬ - NGUYỄN THỊ NGỌC KHUÊ
Sửa bông TS PHÙNG HỒ HẢI
Vẽ bìa: HƯƠNG LAN

NHÀ XUẤT BẢN KHOA HỌC VÀ KỸ THUẬT
70 TRẦN HƯNG ĐẠO - HÀ NỘI

In 700 cuốn khổ 16 x 24cm tại Công ty cổ phần In Hàng không
Quyết định xuất bản số: 730-2006/CXB/11-59/KHKT
In xong và nộp lưu chiểu tháng 1/2007

207013

Giá: 45.000đ