

TRƯỜNG ĐẠI HỌC MỎ - ĐỊA CHẤT



BÁO CÁO HỌC THUẬT

NĂM HỌC 2025 – 2026

**TRAO ĐỔI NỘI DUNG BÀI GIẢNG “CHƯƠNG 2. TÍNH CHẤT ĐIỆN CỦA VẬT
LIỆU” CỦA HỌC PHẦN TÍNH CHẤT VÀ ỨNG DỤNG CỦA VẬT LIỆU**

Người báo cáo: Nguyễn Thị Diệu Thu

Đơn vị: Bộ môn Vật lý

Hà Nội, 6/ 2026

MỤC LỤC

MỞ ĐẦU	1
CHƯƠNG 2. TÍNH CHẤT ĐIỆN CỦA VẬT LIỆU (ELECTRICAL PROPERTIES)	3
2.1. Các đại lượng đặc trưng cơ bản.....	3
2.1.1. Điện trở và điện trở suất	3
2.1.2. Độ dẫn điện (Conductivity)	4
2.1.3. Mật độ dòng điện và Độ linh động của hạt tải điện	6
2.2. Cơ chế dẫn điện tử	8
2.3. Cấu trúc vùng năng lượng trong vật rắn.....	9
2.4. Tính dẫn điện liên quan với mô hình vùng và liên kết nguyên tử	13
2.5. Hàm phân bố Fermi-Dirac	13
2.6. Phân loại vật liệu theo tính chất dẫn điện.....	17
2.6.1. Vật liệu dẫn điện (Conductors).....	17
2.6.2. Vật liệu cách điện / Điện môi (Insulators / Dielectrics)	18
2.6.3. Vật liệu bán dẫn (Semiconductors)	18
2.6.4. Vật liệu siêu dẫn (Superconductors)	19
2.7. Các tính chất điện đặc biệt khác.....	19
2.7.1. Tính áp điện (Piezoelectricity):.....	19
2.7.2. Tính sắt điện (Ferroelectricity):	19
2.7.3. Tính quang điện (Photoelectricity):	19
2.8. Ứng dụng tính chất điện của vật liệu	19
2.8.1. Vật liệu dẫn điện (Conductive Materials).....	19
2.8.2. Vật liệu cách điện / Điện môi (Insulating Materials / Dielectrics)	20
2.8.3. Vật liệu bán dẫn (Semiconductors)	20
2.8.4. Vật liệu siêu dẫn (Superconductors):	21
2.8.5. Vật liệu có tính chất điện đặc biệt	21
TÀI LIỆU THAM KHẢO	22

MỞ ĐẦU

Nghiên cứu tính chất vật liệu là nền tảng cốt lõi trong khoa học và kỹ thuật vật liệu, đóng vai trò cầu nối giữa quy trình tổng hợp và định hướng ứng dụng thực tế. Mỗi loại vật liệu với cấu trúc bên trong riêng biệt sẽ thể hiện những phản ứng khác nhau trước các tác động vật lý, hóa học hoặc cơ học từ môi trường.

Học phần "Tính chất và ứng dụng của vật liệu" là học phần thuộc môn cơ sở ngành của ngành "Kỹ thuật vật liệu". Kỹ thuật vật liệu là một ngành mới của trường, các môn học bắt đầu được giảng dạy, để cho nội dung bài giảng phù hợp với ngành đào tạo, số tín chỉ của môn học, báo cáo này tôi sẽ trình bày nội dung "Chương 2. Tính chất điện của vật liệu" của học phần "Tính chất và ứng dụng của vật liệu" với mong muốn nhận được sự góp ý, trao đổi để nội dung bài giảng của học phần tốt nhất.

Nội dung của chương 2 được trình bày chi tiết gồm 7 phần:

- 2.1. Các đại lượng đặc trưng cơ bản
- 2.2. Cơ chế dẫn điện tử
- 2.3. Cấu trúc vùng năng lượng trong vật rắn
- 2.4. Tính dẫn điện liên quan với mô hình vùng và liên kết nguyên tử
- 2.5. Hàm phân bố Fermi- Dirac
- 2.6. Phân loại vật liệu theo tính chất dẫn điện
- 2.7. Các tính chất điện đặc biệt khác

CHƯƠNG 2. TÍNH CHẤT ĐIỆN CỦA VẬT LIỆU (ELECTRICAL PROPERTIES)

Tính chất điện của vật liệu phản ánh phản ứng của vật liệu đó khi đặt dưới tác dụng của một điện trường ngoài. Đây là cơ sở cốt lõi để phân loại và ứng dụng vật liệu trong các ngành công nghiệp điện tử, bán dẫn và năng lượng.

2.1. Các đại lượng đặc trưng cơ bản

Để định lượng tính chất điện của một vật liệu, người ta sử dụng các thông số vật lý sau:

2.1.1. Điện trở và điện trở suất

- Điện trở (*Resistance*), (R) là một đại lượng vật lý đặc trưng cho mức độ cản trở dòng điện của một **vật dẫn điện**.

Nếu một vật có điện trở càng lớn thì dòng điện đi qua nó càng nhỏ, và ngược lại.

Biểu thức định luật Ohm

$$R = \frac{U}{I}$$

-Điện trở suất (*Resistivity*): (ρ) là một đại lượng vật lý đặc trưng cho khả năng cản trở dòng điện của từng **loại vật liệu**.

Vật liệu có điện trở suất càng nhỏ thì dẫn điện càng tốt (như đồng, bạc). Ngược lại, vật liệu có điện trở suất càng lớn thì cản trở dòng điện càng mạnh và dẫn điện càng kém (như cao su, sứ).

Các yếu tố ảnh hưởng đến điện trở suất

Điện trở suất không phải là một hằng số cố định tuyệt đối mà nó phụ thuộc vào hai yếu tố chính:

- **Bản chất của vật liệu:** Mỗi chất khác nhau cấu tạo từ các nguyên tử/phân tử khác nhau, dẫn đến khả năng cản trở electron khác nhau.
- **Nhiệt độ:**
 - * Đối với **kim loại (vật liệu dẫn điện)**: Khi nhiệt độ tăng, các ion kim loại dao động mạnh hơn, làm cản trở chuyển động của electron nhiều hơn $\Rightarrow$ **Điện trở suất tăng**.

* Đối với **chất bán dẫn/chất cách điện**: Khi nhiệt độ tăng, các electron dễ giải phóng hơn $\Rightarrow$ **Điện trở suất giảm**.

Bảng điện trở suất của một số chất phổ biến (ở 20°C)

Vật liệu	Điện trở suất ρ ($\Omega \cdot m$)	Khả năng ứng dụng
Bạc (Ag)	1.59×10^{-8}	Dẫn điện tốt nhất (nhưng đắt tiền)
Đồng (Cu)	1.68×10^{-8}	Dẫn điện rất tốt (làm lõi dây điện phổ biến)
Nhôm (Al)	2.65×10^{-8}	Dẫn điện tốt, nhẹ (làm dây cáp điện cao thế)
Sắt (Fe)	9.71×10^{-8}	Dẫn điện trung bình
Thủy tinh	10^{10} đến 10^{14}	Chất cách điện cực tốt
Cao su	khoảng 10^{13}	Chất cách điện (làm vỏ bọc dây điện)

Phân biệt điện trở và điện trở suất:

+ **Điện trở (R)**: Là đặc tính của **một vật thể cụ thể** (phụ thuộc vào cả hình dáng, chiều dài, độ dày và chất liệu của vật đó).

+ **Điện trở suất (ρ)**: Là đặc tính riêng của **bản chất chất liệu** làm nên vật đó (không phụ thuộc vào hình dáng hay kích thước).

Mối liên hệ giữa điện trở và điện trở suất

$$R = \rho \frac{l}{S}$$

2.1.2. Độ dẫn điện (Conductivity)

Độ dẫn điện: độ dẫn điện riêng (σ), độ dẫn điện của một vật dẫn (G) là đại lượng vật lý đặc trưng cho **khả năng cho dòng điện đi qua** của một chất hoặc một vật liệu.

Nói một cách đơn giản, nó đo lường mức độ "dễ dàng" mà các hạt mang điện (như electron hoặc ion) có thể di chuyển xuyên qua vật liệu đó khi có một điện trường đặt vào.

Độ dẫn điện của một đoạn mạch (G)

Là đại lượng tỷ lệ nghịch với điện trở (R) của đoạn mạch đó:

$$G = \frac{1}{R}$$

Đơn vị đo: Siemens (S) (hoặc có thể viết là Ω^{-1}).

Độ dẫn điện riêng của vật liệu (σ), Là đại lượng tỷ lệ nghịch với điện trở suất (ρ) của chất đó:

$$\sigma = \frac{1}{\rho}$$

Đơn vị đo: Siemens trên mét (S/m).

Phân loại vật liệu dựa trên độ dẫn điện

Dựa vào khả năng dẫn điện, các chất trong tự nhiên thường được chia thành 3 nhóm chính:

Nhóm vật liệu	Đặc điểm	Ví dụ
Vật liệu dẫn điện	Có độ dẫn điện rất cao nhờ sở hữu lượng lớn các hạt mang điện tự do (electron).	Bạc (dẫn điện tốt nhất), đồng, nhôm, sắt, nước muối...
Vật liệu bán dẫn	Có độ dẫn điện ở mức trung bình. Khả năng dẫn điện có thể thay đổi linh hoạt dựa vào nhiệt độ, ánh sáng hoặc tạp chất pha vào.	Silicon (Si), Germanium (Ge).
Vật liệu cách điện	Có độ dẫn điện cực kỳ thấp (gần như bằng 0) vì các electron bị liên kết chặt chẽ, không có hạt mang điện tự do.	Nhựa, cao su, thủy tinh, gỗ khô, nước tinh khiết.

Các yếu tố ảnh hưởng đến độ dẫn điện

- Bản chất của chất: Mỗi chất có cấu trúc nguyên tử và mật độ hạt mang điện tự do khác nhau.
- Nhiệt độ:

* Đối với kim loại: Nhiệt độ tăng làm các nguyên tử dao động mạnh, cản trở chuyển động của electron $\Rightarrow$ độ dẫn điện giảm.

* Đối với chất bán dẫn và chất điện phân: Nhiệt độ tăng giúp giải phóng nhiều hạt mang điện hơn $\Rightarrow$ độ dẫn điện tăng.

- Tạp chất: Đối với kim loại, tạp chất làm giảm độ dẫn điện. Ngược lại, đối với chất bán dẫn, việc pha thêm tạp chất (quá trình doping) lại làm tăng mạnh độ dẫn điện.

2.1.3. Mật độ dòng điện và Độ linh động của hạt tải điện

- Mật độ dòng điện (Current Density) (J)

Nếu như cường độ dòng điện (I) cho biết tổng lượng điện tích dịch chuyển qua một tiết diện trong một đơn vị thời gian, thì Mật độ dòng điện (J) cho biết dòng điện đó phân bố "dày đặc" hay "thưa thớt" như thế nào trên một đơn vị diện tích của tiết diện đó.

- Định nghĩa: Là đại lượng vector có trị số bằng thương số giữa cường độ dòng điện (I) và diện tích tiết diện thẳng (S) mà dòng điện chạy qua.
- Công thức đại số:

$$J = \frac{I}{S}$$

- Công thức vi mô (Vector):

$$J = n \cdot q \cdot v_d$$

n: Mật độ hạt tải điện (số hạt trên một đơn vị thể tích, m^{-3}).

q: Điện tích của một hạt tải điện

v_d : Vận tốc trôi (drift velocity) của các hạt tải điện dưới tác dụng của điện trường.

Đơn vị đo: Ampe trên mét vuông (A/m^2).

- Độ linh động của hạt tải điện (Carrier Mobility) (μ)

Khi không có điện trường, các hạt tải điện (như electron tự do hay lỗ trống) chuyển động hỗn loạn nhiệt. Khi có điện trường $\vec{E}$ đặt vào, chúng sẽ bị gia tốc và chuyển động có hướng với vận tốc trôi trung bình là v_d . **Độ linh động (μ)** chính là đại lượng

đo lường xem hạt tải điện đó "nhảy bén" và di chuyển dễ dàng như thế nào dưới tác dụng của điện trường.

- **Định nghĩa:** Là tỉ số giữa vận tốc trôi của hạt tải điện và cường độ điện trường tác dụng lên nó.
- **Công thức:**

$$\mu = \frac{v_d}{E}$$

Đơn vị đo: $\text{m}^2/(\text{V.s})$

Ý nghĩa thực tế: Độ linh động càng cao đồng nghĩa với việc các hạt tải điện di chuyển càng nhanh trong linh kiện, giúp thiết bị (như chip xử lý, transistor) có tốc độ đóng ngắt nhanh hơn và hiệu suất cao hơn. Thường thì độ linh động của electron sẽ lớn hơn độ linh động của lỗ trống.

Mối quan hệ giữa Mật độ dòng điện và Độ linh động

Hai đại lượng này liên kết với nhau thông qua **Định luật Ohm dạng vi phân**.

Từ công thức mật độ dòng điện:

$$J = n \cdot q \cdot v_d$$

Thay $v_d = \mu E$ vào, ta được:

$$J = nq\mu E$$

Mà theo định luật Ohm vi phân, $J = \sigma E$ (với σ là độ dẫn điện riêng). Từ đó ta rút ra công thức:

$$\sigma = nqv_d$$

Ý nghĩa của mối liên hệ:

- **Mật độ dòng điện (J) tỉ lệ thuận với độ linh động μ .** Nếu các hạt tải điện càng linh động, chúng sẽ di chuyển càng nhanh dưới cùng một điện trường, tạo ra một mật độ dòng điện lớn hơn.
- **Ứng dụng trong chất bán dẫn:** Trong chất bán dẫn dòng điện được tạo ra bởi cả electron (n) và lỗ trống (p), do đó tổng mật độ dòng điện sẽ là:

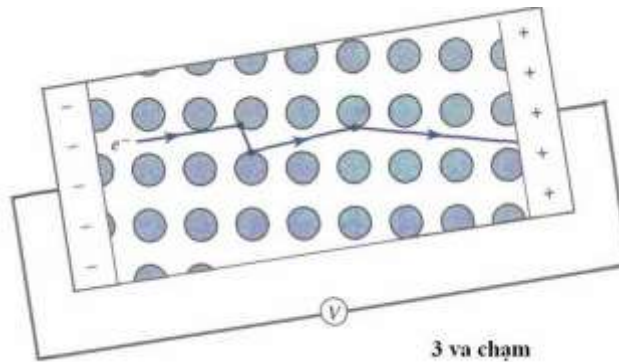
$$J = (ne\mu_n + pe\mu_p)E$$

Tóm lại bằng một hình ảnh ẩn dụ:

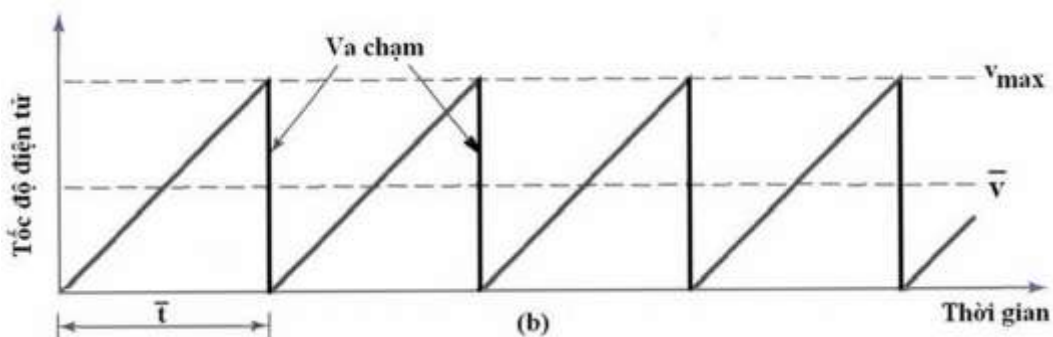
- **Độ linh động (μ)** Giống như tốc độ tối đa và độ mượt mà của một chiếc xe chạy trên đường.
- **Điện trường (E):** Giống như độ dốc của con đường thúc đẩy xe chạy.
- **Mật độ hạt (n):** Giống như số lượng xe có trên đường.
- **Mật độ dòng điện (J):** Giống như tổng lưu lượng xe chạy qua một trạm thu phí trong một khoảng thời gian. Đường càng nhiều xe (n), xe chạy càng nhanh (μ) và dốc càng lớn (E) thì lưu lượng (J) sẽ càng khủng khiếp.

2.2. Cơ chế dẫn điện tử

Để đơn giản xem điện tử như các hạt rắn. Khi có điện trường áp đặt thì điện tử sẽ được tăng tốc để đi về phía cực dương. Điện tử sẽ có gia tốc không đổi cho đến khi nó va chạm với nhân của một nguyên tử. Giả sử khi đó tốc độ điện tử = 0. Sau khi va chạm, điện tử lại tăng tốc và tiếp tục thực hiện chu kỳ tăng tốc – va chạm.



(a)



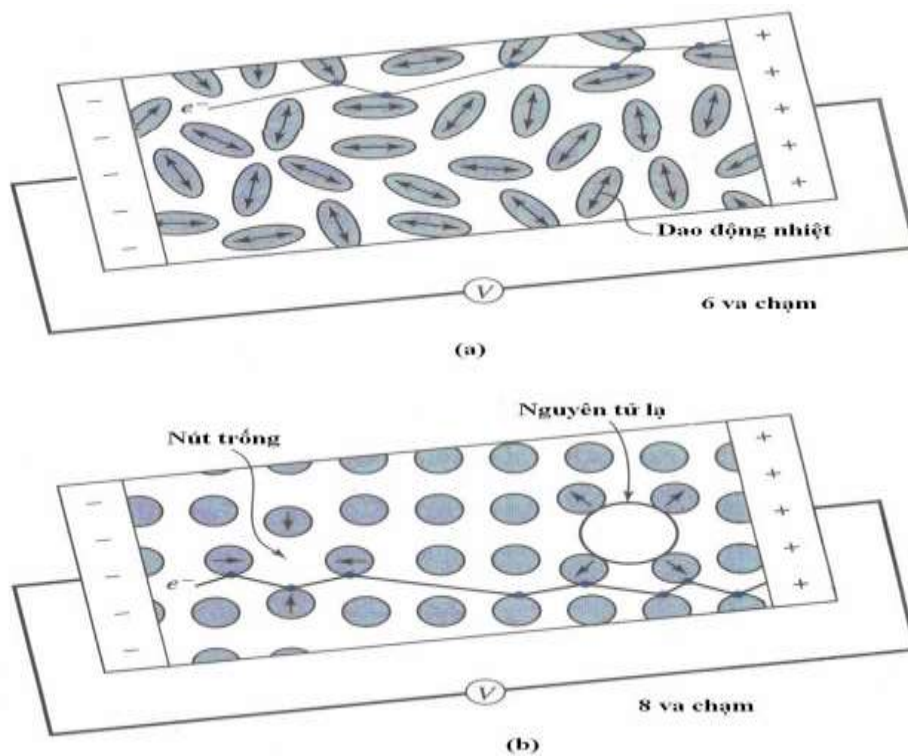
Hình 2.1

Tốc độ trung bình của điện tử $\bar{v} = a\bar{t}$ với $\bar{t}$ là thời gian trung bình giữa các va chạm và a là gia tốc điện tử trong điện trường. Do gia tốc tỉ lệ với cường độ điện trường,

nên $\bar{v}$ cũng sẽ tỉ lệ với cường độ điện trường E [V/m]. Hệ số tỉ lệ chính là độ chuyển dịch điện tử μ . $\bar{v} = \mu E = a\bar{t}$

Khi $E = \text{const} \rightarrow a = \text{const}$, μ sẽ tỉ lệ với thời gian trung bình giữa hai va chạm $\bar{t}$

Khi nhiệt độ tăng, nguyên tử sẽ nhận nhiệt năng, động năng và bắt đầu dao động quanh vị trí cân bằng. Nhiệt độ càng tăng, biên độ dao động càng lớn sẽ làm tăng sự rối loạn trong cấu trúc tinh thể, làm giảm thời gian trung bình giữa hai va chạm, từ đó giảm μ . Vì vậy khi nhiệt độ tăng thì độ dẫn điện của chất dẫn điện tử giảm (hình 2a). Tăng các khuyết tật của mạng (điểm, đường, mặt) sẽ làm tăng sự rối loạn cấu trúc, giảm μ và giảm σ (hình 2b).



Hình 2.2

2.3. Cấu trúc vùng năng lượng trong vật rắn

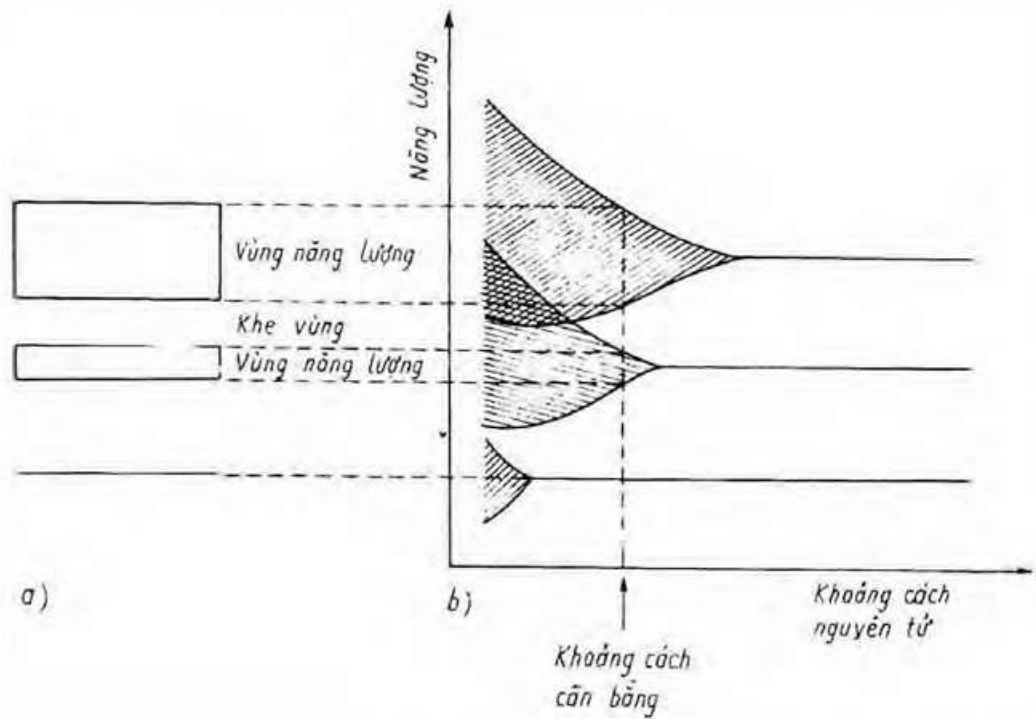
Trong tất cả các chất dẫn điện, bán dẫn và trong nhiều vật liệu điện môi, chỉ tồn tại sự dẫn điện bằng điện tử và độ dẫn điện này phụ thuộc mạnh vào số lượng các điện tử có khả năng tham gia dẫn điện. Tuy nhiên, không phải mọi điện tử trong nguyên tử đều được gia tốc khi có mặt điện trường. Trong một loại vật liệu đã cho, số điện tử có khả năng dẫn điện liên quan với sự sắp xếp các trạng thái điện tử (hay là

các mức năng lượng điện tử) và còn với cách thức mà các điện tử chiếm lĩnh trong các trạng thái đó.

Trong riêng mỗi nguyên tử tồn tại các mức năng lượng gián đoạn. Các điện tử sắp xếp thành các tầng (cùng với các số lượng tử chính $n = 1, 2, 3$, và các lớp được chỉ bởi các chữ s, p, d và f (ứng với các số lượng tử quỹ đạo $l = 0, 1, 2$ và $3, \dots$) Trong mỗi lớp lại có tương ứng $2l + 1 = 1, 3, 5$ và 7 "quỹ đạo" khác nhau. Trong số các nguyên tử, điện tử chiếm lĩnh các trạng thái có năng lượng thấp nhất, cứ hai điện tử có spin đối song chiếm một "quỹ đạo", phù hợp với nguyên lý loại trừ Pauli. Cấu hình điện tử của một nguyên tử cô lập biểu thị sắp xếp điện tử vào các trạng thái cho phép.

Một chất có thể xem như cấu tạo bởi một số lớn, giả sử là N nguyên tử được đưa vào sắp xếp với nhau có trật tự trong một mạng tinh thể. Ở những khoảng cách tương đối xa, mỗi nguyên tử là độc lập với các nguyên tử khác và sẽ có các mức năng lượng trong nguyên tử và cấu hình điện tử giống như nguyên tử đứng cô lập. Tuy nhiên, khi các nguyên tử càng xích lại gần nhau thì các điện tử càng bị kích thích (hay là bị nhiễu loạn) bởi các điện tử và các hạt nhân của các nguyên tử lân cận. Ảnh hưởng này làm cho mỗi một trạng thái điện tử trong nguyên tử riêng biệt bị phân tách thành một loạt các trạng thái điện tử nằm sát nhau, hình thành nên một vùng năng lượng điện tử. Sự giãn (mở rộng) từ một mức năng lượng điện tử trong nguyên tử thành một vùng năng lượng trong vật rắn tùy thuộc vào khoảng cách giữa các nguyên tử. Sự giãn này bắt đầu từ các điện tử ngoài cùng của nguyên tử bởi vì chúng bị nhiễu loạn trước tiên khi các nguyên tử liên kết lại với nhau (hình 2.3). Trong mỗi vùng các mức năng lượng vẫn là gián đoạn, tuy nhiên khoảng cách giữa các mức kề nhau là hết sức nhỏ, ở khoảng cách nguyên tử cân bằng (**Khoảng cách nguyên tử cân bằng** (hay còn gọi là *khoảng cách liên kết cân bằng*) là khoảng cách giữa tâm của hai hạt nhân nguyên tử khi lực hút và lực đẩy giữa chúng đạt trạng thái **cân bằng hoàn hảo**, khiến hệ có mức **năng lượng tối thiểu (ổn định nhất)**), sự tạo thành vùng năng lượng có thể xảy ra với các lớp điện tử ở gần hạt nhân nhất, như minh họa trên hình 2.3b. Ngoài ra, giữa các vùng kề nhau có thể tồn tại những khe năng lượng (hay còn gọi là những vùng cấm): bình thường thì các điện tử không được phép chiếm lĩnh

những mức năng lượng nằm trong các khe này. Cách thức thông thường để biểu diễn cấu trúc vùng năng lượng điện tử trong vật rắn như chỉ trên hình 2.3a.



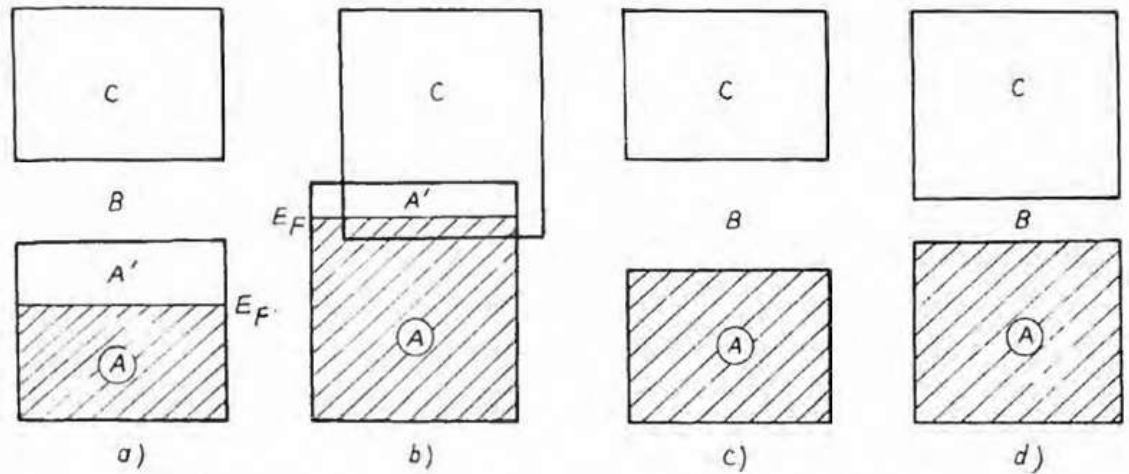
Hình 2.3

Số các trạng thái năng lượng điện tử (hay là số các mức năng lượng điện tử) trong mỗi vùng sẽ bằng tổng số tất cả những trạng thái do N nguyên tử đóng góp. Chẳng hạn vùng s ($l = 0$) sẽ chứa N trạng thái, còn vùng p ($l = 1$) chứa $3N$ trạng thái. Mỗi một trạng thái năng lượng có thể chứa được hai điện tử, chúng phải có spin đối song. Khi xếp tất cả điện tử vào các mức năng lượng sẽ xuất hiện những vùng còn trống và cũng có thể xuất hiện những vùng chỉ bị lấp đầy một phần.

Các tính chất điện của vật liệu rắn phụ thuộc vào cấu trúc vùng năng lượng điện tử của nó, cụ thể là vào sự sắp xếp các vùng ngoài cùng và cách thức lấp đầy chúng bởi các điện tử. Theo quan điểm này, vùng chứa các điện tử có năng lượng cao nhất (hay các điện tử hóa trị) được gọi là **vùng hóa trị**. Còn vùng dẫn sẽ là vùng có năng lượng cao hơn kề trên đó mà trong đa số các trường hợp, về cơ bản là bỏ trống. Ở nhiệt độ OK, có thể có bốn kiểu cấu trúc vùng khác nhau:

Ở loại thứ nhất (hình 2.4a), vùng hóa trị chỉ mới bị lấp đầy một phần. Năng lượng ứng với mức cao nhất bị chiếm ở OK được gọi là năng lượng Fermi F_f . Đây là

cấu trúc vùng điện hình cho các kim loại, đặc biệt là các kim loại có một điện tử hóa trị s đứng đơn lẻ (ví dụ Natri, Na có số hiệu nguyên tử $Z = 11$, cấu hình electron là $1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$). Mỗi nguyên tử Na có một điện tử $3s$. Vùng $3S$ có khả năng chứa tối $2N$ điện tử. Như vậy chỉ mới có một nửa số mức năng lượng có trong vùng hóa trị $3s$ là bị lấp đầy.



Hình 2.4. Các cấu trúc vùng điện tử khác nhau có thể có trong các vật rắn ở OK; A- vùng hóa trị đã được lấp đầy ; A' - vùng hóa trị còn trống, B - khe vùng, C- vùng dẫn còn trống ; E_F - năng lượng Fermi

Ở loại cấu trúc vùng thứ hai, cũng tìm thấy trong các kim loại (hình 2.4b), vùng hóa trị bị lấp đầy và còn phủ lên cả vùng dẫn; vùng này nếu như không bị phủ thì hoàn toàn còn trống. Magiê có cấu trúc vùng kiểu này. Mỗi nguyên tử Mg có hai điện tử hóa trị $3s$ nhưng khi tạo thành vật rắn thì các vùng $3s$ và $3p$ phủ lên nhau. Trong trường hợp này ở OK, năng lượng Fermi được chấp nhận là mức mà dưới đó có N nguyên tử, N trạng thái bị chiếm, cứ hai điện tử chiếm một trạng thái

Hai cấu trúc vùng (hình 2.4c,d) tương tự như nhau : ở mỗi cấu trúc tất cả các trạng thái trong vùng hóa trị đều bị điện tử chiếm hết. Tuy nhiên ở đây không có sự dính phủ với vùng dẫn còn trống ; điều này tạo ra một khe năng lượng xen ở giữa. Đối với các kim loại rất tinh khiết, các điện tử không thể có năng lượng ở trong khe này. Sự khác nhau giữa hai cấu trúc vùng là ở độ lớn của khe năng lượng. Đối với các vật liệu cách điện, khe vùng tương đối rộng (hình 2.4c) còn trong các bán dẫn thì lại hẹp (hình 2.4d). Năng lượng Fermi đối với hai cấu trúc vùng này nằm ở gần chính giữa khe.

2.4. Tính dẫn điện liên quan với mô hình vùng và liên kết nguyên tử

Chỉ có những điện tử nào có năng lượng lớn hơn mức Fermi thì mới chịu tác dụng và được gia tốc khi có mặt điện trường. Đây là những điện tử tham gia vào quá trình dẫn điện, chúng được gọi là những điện tử tự do. Trong các chất bán dẫn và chất cách điện còn tìm thấy một thực thể điện tử khác gọi là lỗ trống, có năng lượng thấp hơn E_f và cũng tham gia dẫn điện bằng điện tử. Như sau này sẽ thấy, độ dẫn điện là một hàm số trực tiếp của số điện tử tự do và lỗ trống. Thêm nữa, sự phân biệt giữa các chất dẫn điện và không dẫn điện (cách điện và bán dẫn) nằm ở các hạt tải điện (điện tử tự do hoặc lỗ trống).

2.5. Hàm phân bố Fermi-Dirac

Hàm phân bố Fermi-Dirac biểu diễn xác suất để một mức năng lượng bị chiếm bởi một điện tử ở nhiệt độ T (K)

$$f(E) = \frac{1}{e^{\frac{E-E_f}{kT}} + 1}$$

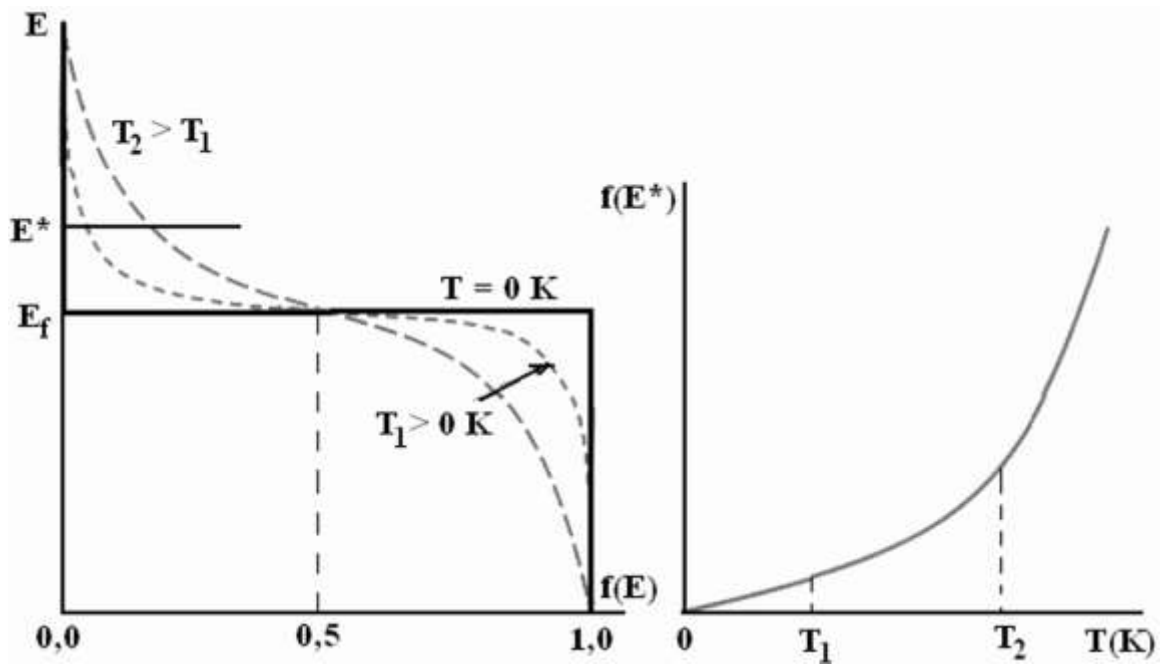
$f(E)$: Xác suất chiếm chỗ của electron ở mức năng lượng E (giá trị từ 0 đến 1).

E : Mức năng lượng của trạng thái lượng tử đang xét (eV hoặc J).

E_f : **Năng lượng Fermi**, là mức năng lượng có xác suất được chiếm chỗ chính xác bằng 50% tại mọi nhiệt độ lớn hơn 0K.

k_B : Hằng số Boltzmann ($\sim 1.38 \cdot 10^{-23}$ J/K hoặc $\sim 8.617 \cdot 10^{-5}$ eV/K).

T : Nhiệt độ tuyệt đối tính theo Kelvin (K).



Hình 2.5

Các trường hợp có thể xảy ra:

a) Miền hóa trị đã điền đầy một phần

- Khi $T = 0 \text{ K}$: với E_f là mức năng lượng cao nhất bị chiếm chỗ.

- $E < E_f$: $f(E) = 1 \Rightarrow$ Tất cả mức năng lượng $< E_f$ đều bị chiếm chỗ
- $E > E_f$: $f(E) = 0 \Rightarrow$ Tất cả mức năng lượng $> E_f$ đều bị bỏ trống

- Khi $T > 0 \text{ K}$

$E > E_f$: $f(E) \neq 0 \Rightarrow$ mức năng lượng $> E_f$ có thể bị chiếm chỗ

$E < E_f$: $f(E) \neq 1 \Rightarrow$ mức năng lượng $< E_f$ có thể bị bỏ trống

- $f(E > E_f)$ ở $T_1 < f(E > E_f)$ ở T_2 với $T_1 < T_2 \Rightarrow$ Xác suất chiếm chỗ một mức năng lượng $E > E_f$ sẽ tăng khi tăng nhiệt độ

→ **Để một điện tử chiếm chỗ một mức năng lượng ở nhiệt độ cho trước:**

- Xác suất chiếm chỗ phải $\neq 0$
- Mức năng lượng này không được nằm trong miền cấm

b) Miền hóa trị đã bão hòa (có tồn tại miền cấm): E_f sẽ nằm giữa miền cấm

- $T = 0 \text{ K}$: Theo hàm Fermi-Dirac thì phân nửa miền cấm có $E < E_f$ sẽ bị chiếm chỗ, nhưng do là miền cấm, nên các mức năng lượng sẽ không bị chiếm chỗ
- $T > 0 \text{ K}$: Với $E > E_f$ thì $f(E) \neq 0$ nhưng do là miền cấm nên sẽ không bị chiếm chỗ.

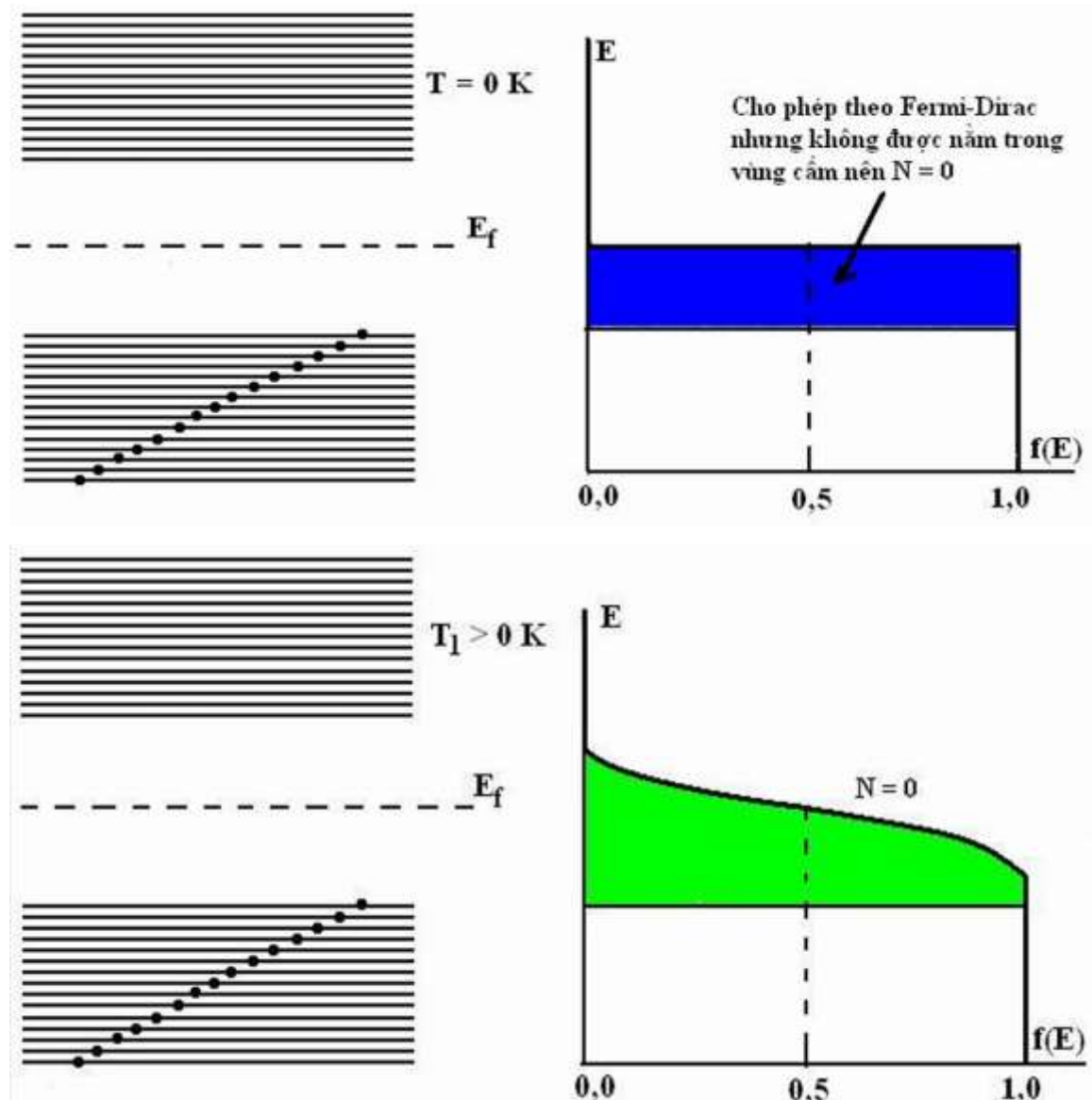
- $T_2 > T_1$: Mức năng lượng thấp nhất trong miền dẫn có $f(E) \neq 0$ nên có thể bị chiếm chỗ. Mức năng lượng cao nhất trong miền hóa trị có $f(E) \neq 1$ nên có thể bị bỏ trống.
→ tại một nhiệt độ thích hợp, sẽ có một xác suất cho phép điện tử nhận năng lượng và nhảy từ miền hóa trị sang miền dẫn.

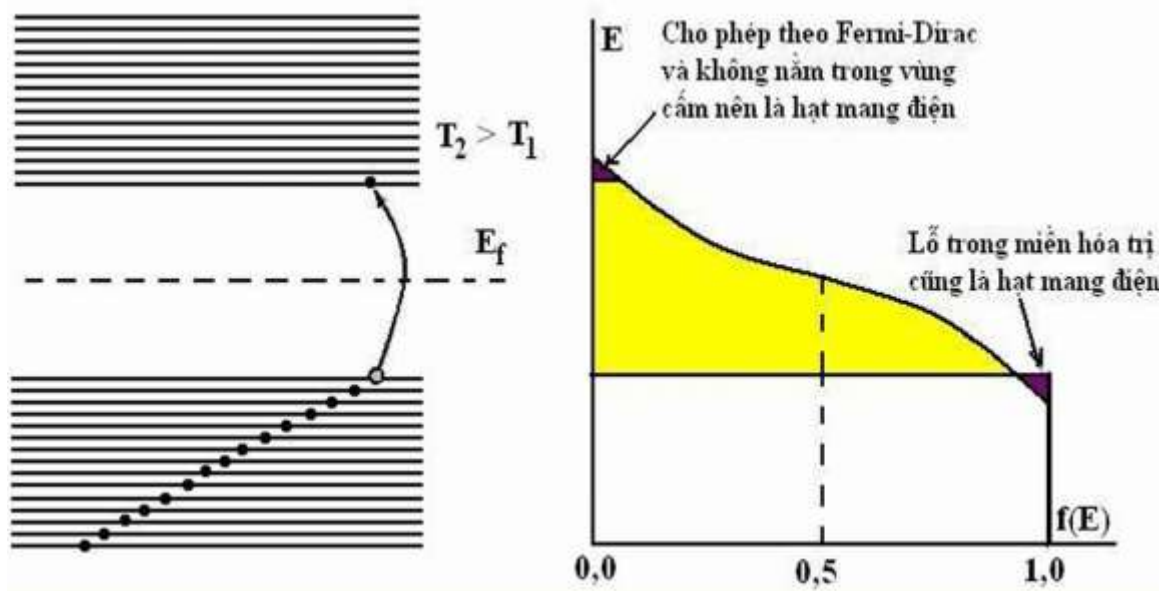
- Đối với vật liệu có tồn tại miền cấm thì số điện tử trong miền dẫn/ m^3 sẽ tính theo:
 $n = N_0 \exp(-E_g / 2kT)$

N_0 : Hằng số vật liệu

- Điện trở suất là nghịch đảo của độ dẫn, sẽ tăng khi nhiệt độ tăng. Đối với hầu hết chất dẫn điện, sự phụ thuộc điện trở suất theo nhiệt độ là:

$$\rho(T_2) = \rho(T_1)[1 + \alpha(T_2 - T_1)]$$





□ **Sự khác biệt với hạt Cổ điển (Maxwell-Boltzmann):** Hạt cổ điển không phân biệt và không tuân theo nguyên lý Pauli, hạt có thể tụ tập vô hạn ở cùng một mức năng lượng.

□ **Giới hạn Boltzmann:** Khi năng lượng E lớn hơn rất nhiều so với E_f ($E - E_f \gg k_B T$), số 1 ở mẫu số trở nên không đáng kể. Công thức Fermi-Dirac sẽ tiệm cận về dạng:

$$f(E) \approx e^{-\frac{E-E_F}{k_B T}}$$

Đây chính là dạng của **phân bố Boltzmann** cổ điển. Điều này giải thích vì sao ở năng lượng rất cao hoặc nhiệt độ rất cao, các electron trong chất bán dẫn hành xử giống như các hạt cổ điển.

Hàm phân bố Fermi-Dirac là nền tảng cốt lõi của **Vật lý bán dẫn** và **Vật lý chất rắn**:

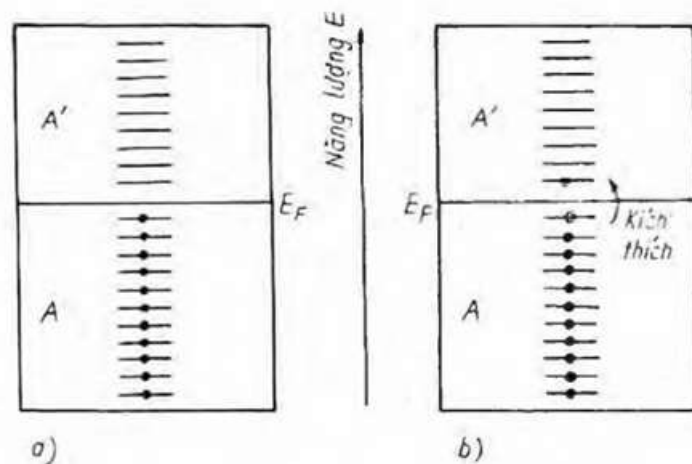
- Tính toán nồng độ electron tự do và lỗ trống trong chất bán dẫn (n và p).
- Giải thích tính dẫn điện, dẫn nhiệt của kim loại và chất bán dẫn.
- Ứng dụng thiết kế các linh kiện điện tử như Transistor, Diode, dòng điện trong tiếp giáp P-N.

2.6. Phân loại vật liệu theo tính chất dẫn điện

Dựa trên cấu trúc vùng năng lượng (Band Theory), vật liệu được chia thành 4 nhóm chính:

2.6.1. Vật liệu dẫn điện (Conductors)

Để cho điện tử trở nên tự do, cần phải kích thích nó lên một trong những trạng thái năng lượng cho phép và còn trống ở trên E_F . Đối với các kim loại có các cấu trúc vùng như trên hình 2.4a hoặc 2.4b đã có sẵn các mức năng lượng trống nằm sát kề ngay mức bị chiếm cao nhất tại E_F . Do vậy chỉ cần một năng lượng rất nhỏ để đưa điện tử lên các trạng thái trống nằm dưới như nêu trên hình 2.6. Nói chung năng lượng do một điện trường cung cấp là đủ để kích thích được một số lớn điện tử lên những trạng thái dẫn điện này.



Hình 2.6. Sự chiếm các trạng thái điện tử trong kim loại (a) trước và (b) sau kích thích điện tử

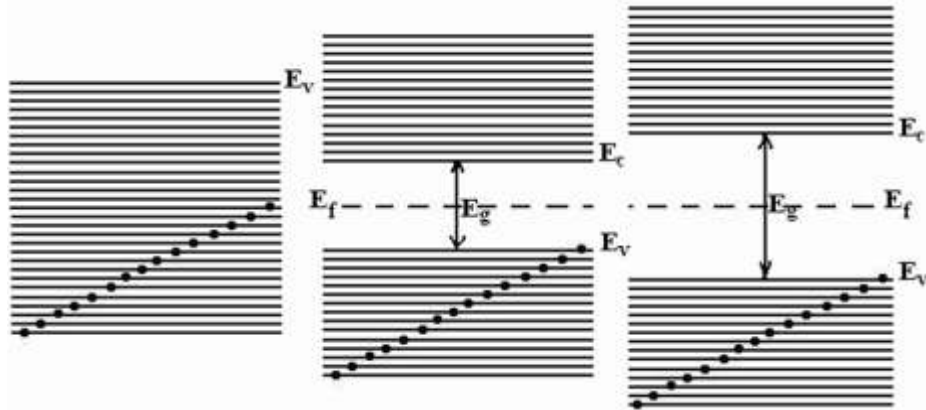
Theo mô hình liên kết kim loại, tất cả điện tử hóa trị đều có thể chuyển động tự do, chúng tạo thành "khí điện tử" phân bố đồng đều khắp trong mạng lưới các lõi ion dương. Mặc dù những điện tử này không bị liên kết định xứ với bất cứ một nguyên tử riêng rẽ nào, chúng vẫn phải nhờ một kích thích nhất định mới có thể trở thành điện tử dẫn thực sự tự do. Khi đó chỉ một bộ phận bị kích thích cũng sẽ gây nên một số "tương đối lớn" điện tử tự do và hậu quả là có mật độ dẫn điện cao.

Sự phụ thuộc nhiệt độ: Khi nhiệt độ tăng, các ion nút mạng dao động mạnh làm tăng sự tán xạ electron, dẫn đến **điện trở tăng (độ dẫn điện giảm)**.

2.6.2. Vật liệu cách điện / Điện môi (Insulators / Dielectrics)

Ở 0 K miền hóa trị đã bão hòa nhưng giữa miền hóa trị và miền dẫn là miền cấm với độ rộng E_g

- $E_g \leq 2,5 \text{ eV}$: Chất bán dẫn (E_g nhỏ, ở T cao hoặc dưới E, e có thể lên miền dẫn)
- $E_g > 2,5 \text{ eV}$: Chất cách điện (E_g lớn nên điện tử không thể đi lên miền dẫn).
- Tuy nhiên, nếu dùng điện thế rất cao để cung cấp năng lượng cho điện tử đi lên miền dẫn thì chất cách điện trở thành dẫn điện (gọi là điện thế xuyên thủng).



2.6.3. Vật liệu bán dẫn (Semiconductors)

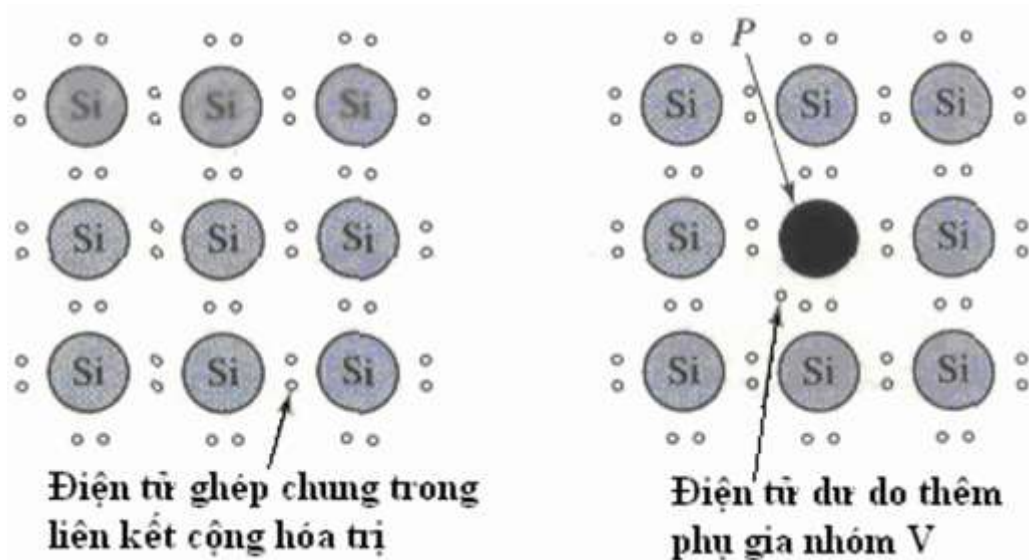
Đặc điểm: Có độ dẫn điện trung gian, có thể thay đổi linh hoạt bằng cách kích thích nhiệt, ánh sáng hoặc pha tạp chất.

Cơ chế: Vùng cấm hẹp ($0.1 \text{ eV} < E_g < 3 \text{ eV}$).

Phân loại:

* *Bán dẫn tinh khiết (Intrinsic)*: Dẫn điện nhờ sự kích thích nhiệt tạo ra cặp electron - lỗ trống.

* *Bán dẫn pha tạp (Extrinsic)*: Loại n (dư electron) và loại p (dư lỗ trống).



Sự phụ thuộc nhiệt độ: Ngược lại với kim loại, khi nhiệt độ tăng, các electron nhận được năng lượng vượt qua vùng cấm dễ dàng hơn nên **điện trở giảm (độ dẫn điện tăng)**.

2.6.4. Vật liệu siêu dẫn (Superconductors)

Đặc điểm: Khi làm lạnh xuống dưới một nhiệt độ tới hạn (T_c), điện trở của vật liệu đột ngột giảm về bằng 0.

Hiệu ứng đặc trưng: Hiệu ứng Meissner (kháng từ hoàn toàn, đẩy mọi từ trường ra khỏi lòng vật liệu).

2.7. Các tính chất điện đặc biệt khác

2.7.1. Tính áp điện (Piezoelectricity):

Hiện tượng vật liệu sinh ra điện tích trên bề mặt khi bị biến dạng cơ học (nén, kéo) và ngược lại (thạch anh, titanat bari).

2.7.2. Tính sắt điện (Ferroelectricity):

Vật liệu có khả năng tự phân cực điện ngay cả khi không có điện trường ngoài, và hướng phân cực có thể đảo ngược bằng điện trường.

2.7.3. Tính quang điện (Photoelectricity):

Sự thay đổi tính chất điện (giảm điện trở hoặc sinh dòng điện) khi vật liệu được chiếu sáng (ứng dụng trong pin mặt trời, cảm biến quang).

2.8. Ứng dụng tính chất điện của vật liệu

2.8.1. Vật liệu dẫn điện (Conductive Materials)

Vật liệu dẫn điện có điện trở suất rất nhỏ, cho phép dòng điện chạy qua một cách dễ dàng.

- **Dẫn điện thông thường (Đồng, Nhôm):**

- * Làm lõi dây cáp điện, hệ thống đường dây tải điện cao thế và hạ thế.

- * Làm các cuộn dây trong máy biến áp, động cơ điện, máy phát điện.

- **Dẫn điện đặc biệt (Vàng, Bạc, Đồng tinh khiết):** Do khả năng dẫn điện cực tốt và ít bị oxy hóa, chúng được dùng làm bề mặt tiếp điểm (contact) trong các switch cao cấp, vi mạch điện tử, CPU, và các đầu kết nối âm thanh/tín hiệu chất lượng cao.

2.8.2. Vật liệu cách điện / Điện môi (Insulating Materials / Dielectrics)

Vật liệu cách điện ngăn chặn dòng điện chạy qua, bảo vệ con người và thiết bị, hoặc dùng để tích trữ năng lượng dưới dạng điện trường.

- **Cách điện an toàn và đường dây:** Nhựa PVC, cao su, thủy tinh, sứ cách điện được dùng làm vỏ bọc dây điện, thanh cách điện trên cột điện cao thế, vỏ thiết bị điện gia dụng.

- **Ứng dụng trong linh kiện (Tụ điện):** Các chất điện môi như gốm (ceramic), mica, màng nhựa (film) được đặt giữa hai bản cực của tụ điện để tăng khả năng tích trữ điện tích.

- **Cách điện trong môi trường công nghiệp:** Dầu máy biến áp (vừa cách điện vừa làm mát), khí SF₆ (trong các trạm biến áp và ngắt mạch cao áp).

2.8.3. Vật liệu bán dẫn (Semiconductors)

Đây là "trái tim" của toàn bộ nền công nghệ hiện đại. Tính chất dẫn điện của vật liệu bán dẫn (như Silicon, Germanium, Gallium Arsenide) có thể thay đổi được bằng cách pha tạp chất hoặc tác động điện trường/ánh sáng.

- **Linh kiện điện tử cơ bản:** Diode (cho dòng điện đi qua một chiều), Transistor (khuếch đại hoặc đóng ngắt tín hiệu – nền tảng của mọi con chip máy tính).

- **Công nghệ Optoelectronics (Quang điện tử):**

- * **LED (Light Emitting Diode):** Biến đổi điện năng thành quang năng (đèn chiếu sáng, màn hình TV/điện thoại).

* **Tế bào quang điện (Pin mặt trời):** Biến đổi quang năng từ ánh sáng mặt trời trực tiếp thành điện năng.

- **Cảm biến (Sensors):** Cảm biến nhiệt độ, cảm biến ánh sáng trong các thiết bị thông minh.

2.8.4. Vật liệu siêu dẫn (Superconductors):

Khi ở nhiệt độ cực thấp, điện trở của chúng bằng 0. Ứng dụng trong máy chụp cộng hưởng từ (MRI), tàu đệm từ trường (Maglev), và các máy gia tốc hạt.

2.8.5. Vật liệu có tính chất điện đặc biệt

Bên cạnh 3 nhóm cơ bản trên, khoa học vật liệu hiện đại còn ứng dụng các hiệu ứng điện đặc biệt khác:

- **Vật liệu áp điện (Piezoelectric):** Sinh ra điện áp khi bị nén/kéo dãn cơ học, và ngược lại (co dãn khi có dòng điện vào).
 - *Ứng dụng:* Đầu dò siêu âm (trong y tế), bật lửa điện, cảm biến áp suất, loa thạch anh, máy quét kính hiển vi lực nguyên tử.
- **Vật liệu sắt điện (Ferroelectric):** Có khả năng tự phân cực điện và đảo cực khi có điện trường ngoài.
 - *Ứng dụng:* Chế tạo bộ nhớ RAM không mất dữ liệu khi ngắt điện (FeRAM), tụ điện dung tích cực lớn.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

- [1] Lê Công Dưỡng, Vật liệu học, NXB Khoa học và kỹ thuật Hà Nội- 2000.
- [2] Nghiêm Hùng, Vật liệu học Cơ sở, NXB Khoa học và kỹ thuật Hà Nội- 2002.