

VẬT LÝ CHẤT RẮN

TS. Ngô Văn Thanh
Viện Vật Lý

Hà Nội - 2016

Tài liệu tham khảo

- [1] Charles Kittel, Introduction to Solid State Physics, 8th Eds. (John Wiley & Sons, 2005)
- [2] Đào Trần Cao, Cơ sở vật lý chất rắn, (NXB ĐHQG Hà Nội, 2007).
- [3] Charles Kittel, Mở đầu vật lý chất rắn, (Đặng Mộng Lân và Trần Hữu Phát dịch), (NXB KHKT Hà Nội, 1984).
- [4] Nguyễn Ngọc Long, Vật lý chất rắn, (NXB ĐHQG Hà Nội, 2007).
- [5] Lê Khắc Bình, Nguyễn Nhật Khanh, Vật lý chất rắn, (NXB ĐHQG TP. HCM, 2002)

Website : <http://iop.vast.ac.vn/~nvthanh/cours/vatlychatran/>

Email : nvthanh@iop.vast.ac.vn

CHƯƠNG 3. LIÊN KẾT TINH THỂ

1. Tinh thể khí trơ
2. Tinh thể ionic
3. Tinh thể cộng hoá trị
4. Kim loại

1. Tinh thể khí trơ

❖ Khí trơ

▪ Tính chất

- Có dạng tinh thể đơn giản nhất
- Các điện tử phân bố gần giống như điện tử của nguyên tử tự do
- Tinh thể trong suốt, cách điện, liên kết yếu, nhiệt độ nóng chảy thấp
- Năng lượng ion hóa cao, lớp điện tử ngoài cùng được lấp đầy hoàn toàn
- Phân bố của các điện tử trong nguyên tử tự do có dạng đối xứng cầu.
- Các nguyên tử khí trơ trong tinh thể được xếp chặt tối đa với nhau

	Khoảng cách NN	Năng lượng dính kết		Nhiệt độ nóng chảy K	Thế năng ion hóa (eV)	Thế Lennard-Jones	
		<i>kJ/mol</i>	<i>eV/atom</i>			ϵ 10^{16} erg	σ Å
He	Trạng thái lỏng ở áp suất zero				24.58	14	2.56
Ne	3.13	1.88	0.02	24.56	21.56	50	2.74
Ar	3.76	7.74	0.080	83.81	15.76	167	3.40
Kr	4.01	11.2	0.116	115.8	14.00	225	3.65
Xe	4.35	16.0	0.17	161.4	12.13	320	3.98

1. Tinh thể khí trơ

❖ Tương tác Van der Waals - London

- Xét 2 nguyên tử khí trơ giống nhau, cách nhau 1 khoảng R
- $R \gg$ so với bán kính nguyên tử
- Nếu như phân bố của các nguyên tử là cố định thì tương tác giữa các nguyên tử bằng zero do tương tác tĩnh điện triệt tiêu lẫn nhau giữa điện tử và hạt nhân
- Các nguyên tử sinh ra moment lưỡng cực điện trong mỗi nguyên tử, và moment do lực hút giữa các nguyên tử

➤ Mô hình:

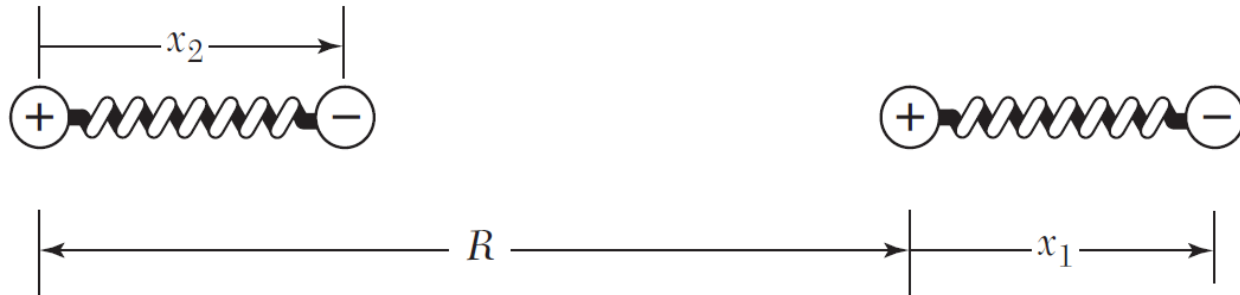
- Xét 2 dao động tử điều hòa giống hệt nhau, mỗi dao động tử có 2 điện tích là $\pm e$ cách nhau một khoảng là x_1 và x_2 .
- Hamiltonian của hệ không nhiễu loạn

$$\mathcal{H}_0 = \frac{1}{2m}p_1^2 + \frac{1}{2}Cx_1^2 + \frac{1}{2m}p_2^2 + \frac{1}{2}Cx_2^2$$

- p, m, C : xung lượng, khối lượng và hằng số lực
- Giả thiết, ω_0 là tần số hấp thụ ánh sáng mạnh nhất của của dao động tử

=> hằng số lực : $C = m\omega_0^2$

1. Tinh thể khí trơ



➤ *Tương tác Coulomb – tương tác cặp*

$$\mathcal{H}_1 = \frac{e^2}{R} + \frac{e^2}{R + x_1 - x_2} - \frac{e^2}{R + x_1} - \frac{e^2}{R - x_2}$$

▪ Giả thiết gần đúng $R \gg |x_1|, |x_2|$, khai triển bậc thấp nhất :

$$\mathcal{H}_1 \approx -\frac{2e^2 x_1 x_2}{R^3}$$

▪ Biểu thức biến đổi kiểu trực giao để chéo hóa hamiltonian

$$x_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}(x_s + x_a), \quad x_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}(x_s - x_a)$$

$$p_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}(p_s + p_a), \quad p_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}(p_s - p_a)$$

▪ Các chỉ số s và a là chuyển động đối xứng và phản đối xứng

1. Tinh thể khí trơ

- Hamiltonian toàn phần của hệ :

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_1 = \left[\frac{1}{2m} p_s^2 + \frac{1}{2} \left(C - \frac{2e^2}{R^3} \right) x_s^2 \right] + \left[\frac{1}{2m} p_a^2 + \frac{1}{2} \left(C + \frac{2e^2}{R^3} \right) x_a^2 \right]$$

- Có hai tần số dao động

$$\omega = \sqrt{\left(C \pm \frac{2e^2}{R^3} \right) / m} = \omega_0 \left[1 \pm \frac{1}{2} \left(\frac{2e^2}{CR^3} \right) - \frac{1}{8} \left(\frac{2e^2}{CR^3} \right)^2 + \dots \right]$$

với $\omega_0 = \sqrt{C/m}$

- Năng lượng điểm zero của hệ : $\frac{1}{2} \hbar (\omega_s + \omega_a)$
 - Do tương tác, năng lượng này giảm một lượng : $2 \cdot \frac{1}{2} \hbar \omega_0$
- Tương tác Van der Waals :

$$\Delta U = \frac{1}{2} \hbar (\Delta \omega_s + \Delta \omega_a) = -\hbar \omega_0 \frac{1}{8} \left(\frac{2e^2}{CR^3} \right)^2 = -\frac{A}{R^6}$$

- Còn gọi là tương tác London hoặc tương tác cảm ứng lưỡng cực-lưỡng cực
- Tương tác này là một hiệu ứng lượng tử : $\hbar \rightarrow 0 \Rightarrow \Delta U \rightarrow 0$