

ĐẠI HỌC QUỐC GIA THÀNH PHỐ HỒ CHÍ MINH
TRƯỜNG ĐẠI HỌC KHOA HỌC TỰ NHIÊN

Cơ sở

Vật lý Chất rắn

GS.TS. Lê Khắc Bình

2006

NỘI DUNG MÔN HỌC

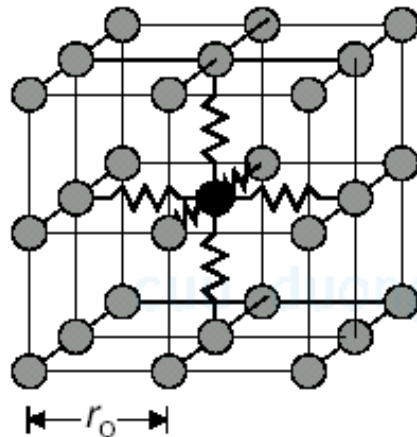
1. tính thể chất rắn.
2. liên kết trong tinh thể chất rắn.
3. dao động của mạng tinh thể.
4. tính chất nhiệt của chất rắn.
5. khí electron tự do trong kim loại.
6. năng lượng của electron trong tinh thể chất rắn.
7. các chất bán dẫn điện.
8. tính chất từ của chất rắn.
9. siêu dẫn.

Tính chất vật lý của chất rắn

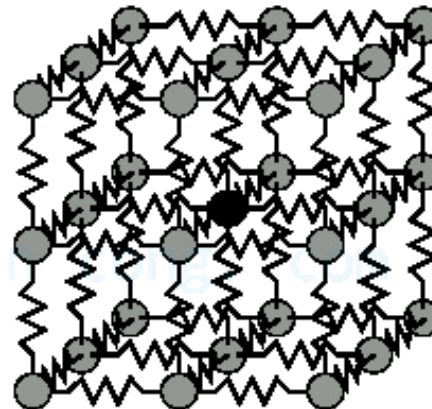
2 cách tiếp cận :

1. Xây dựng mô hình đơn giản và dựa vào các định luật cơ bản đã biết để suy ra tính chất.

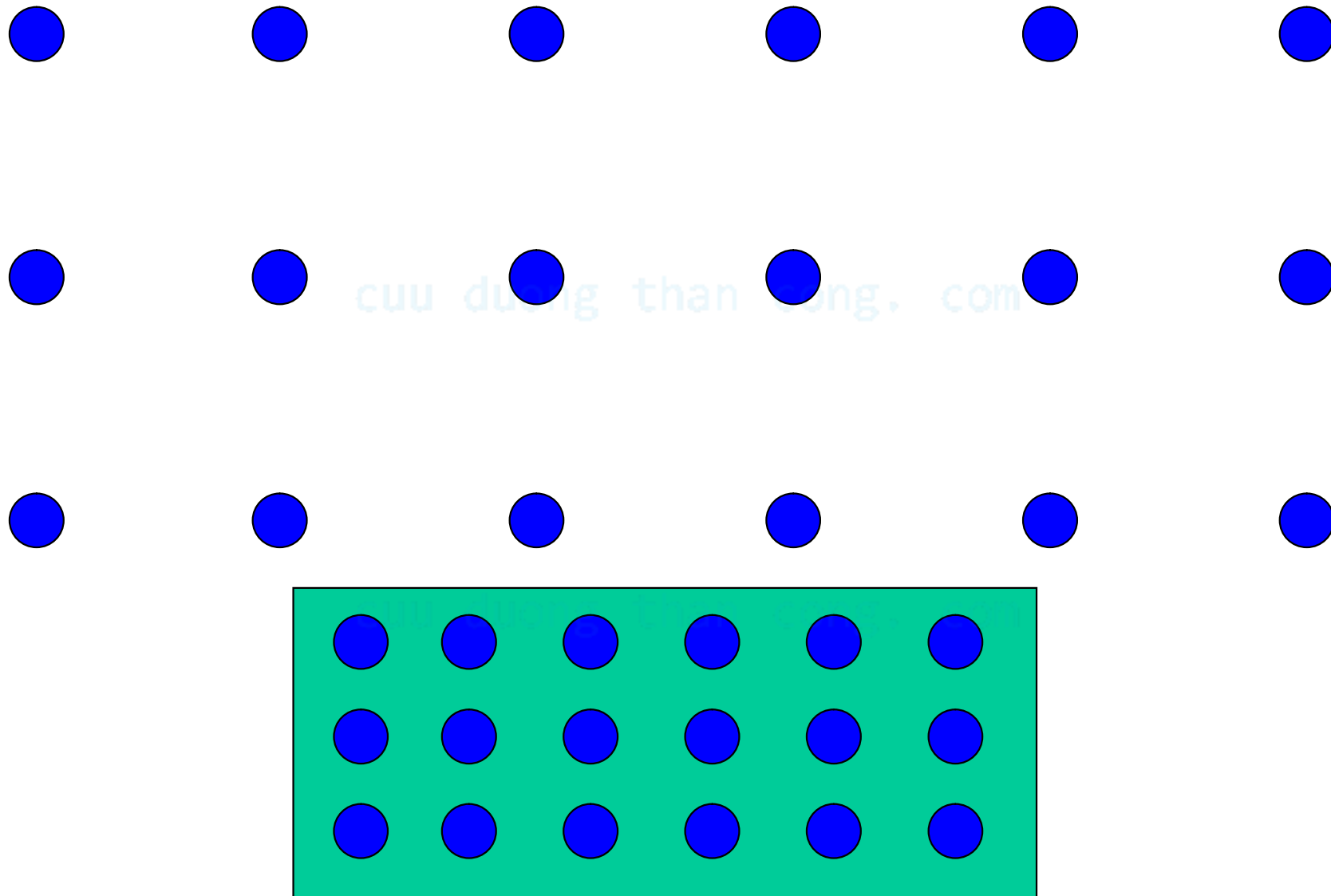
(a)



(b)



2. Xuất phát từ tính chất đã biết của các nguyên tử riêng lẻ và xét xem các tính chất đó thay đổi như thế nào khi đưa các nguyên tử lại gần nhau để tạo thành chất rắn.



SÁCH THAM KHẢO

1. Christman J. R., *Fundamentals of Solid State Physics*, John Wiley & Son , 1988
2. Kittel Charles , *Introduction to Solid State Physics*, Seventh Edition, John Wiley & Son Inc., 1996

cuu duong than cong. com



Bài 1

TÍNH THỂ CHẤT RẮN

-
- 1) *Mạng tinh thể.*
 - 2) *Cấu trúc tinh thể của một số tinh thể đơn giản.*
 - 3) *Phân tích cấu trúc tinh thể bằng phương pháp nhiễu xạ tia X.*

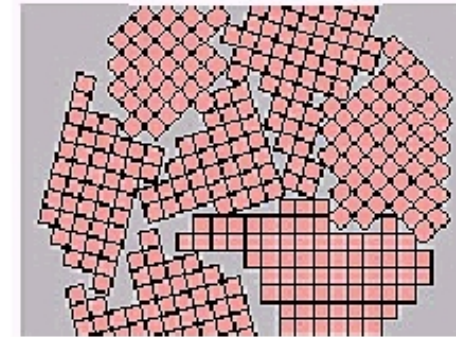
Các loại chất rắn

Vật liệu kết tinh: các nguyên tử sắp xếp tuần hoàn trong không gian

•* **Đơn tinh thể:** các nguyên tử sắp xếp tuần hoàn trong toàn không gian của vật liệu

•* **Đa tinh thể:** gồm nhiều tinh thể nhỏ hoặc **hạt**

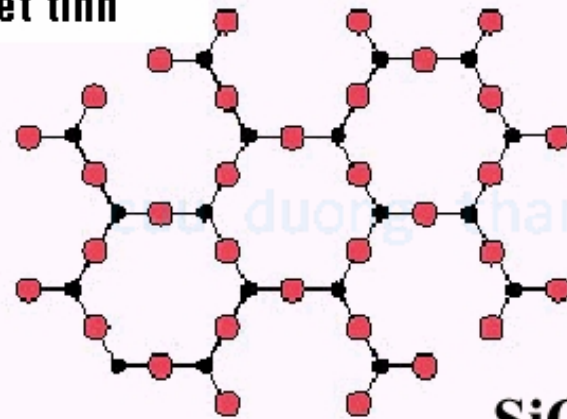
• **Vật liệu vô định hình:** các nguyên tử sắp xếp không tuần hoàn trong không gian



Đa tinh thể



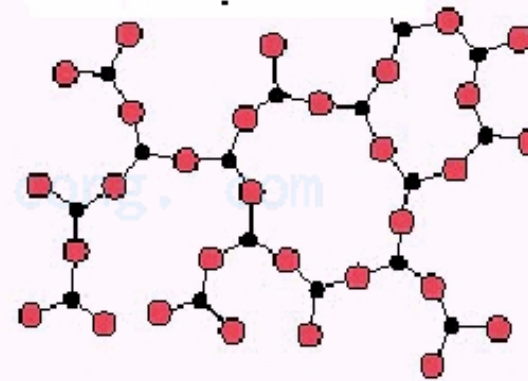
Kết tinh



(a)



Vô định hình

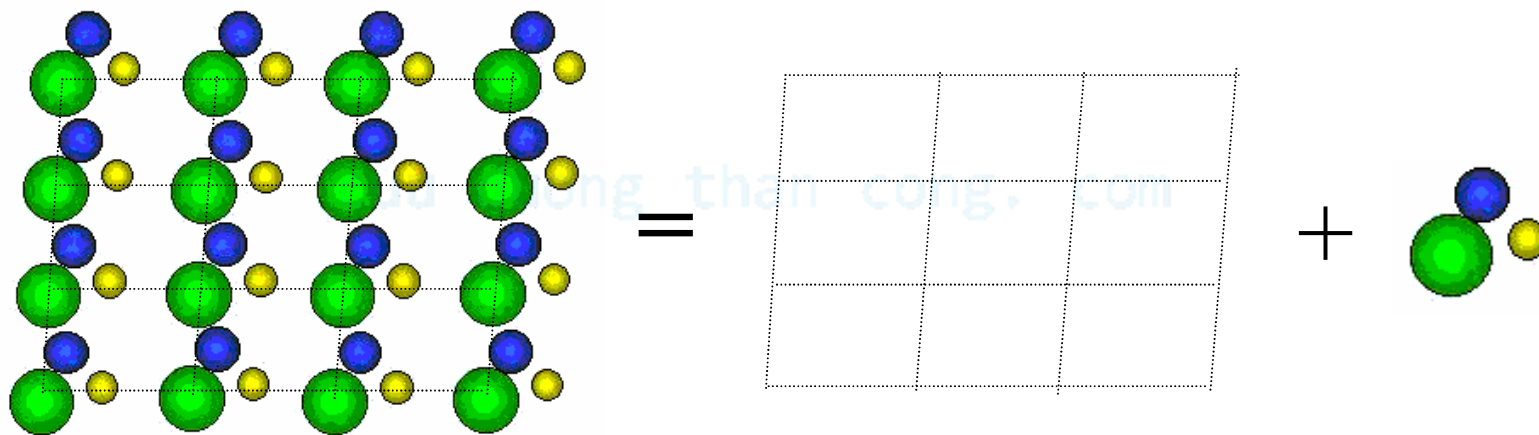


(b)

CƠ SỞ VẬT LÝ CHẤT RẮN

I. Cấu trúc tinh thể

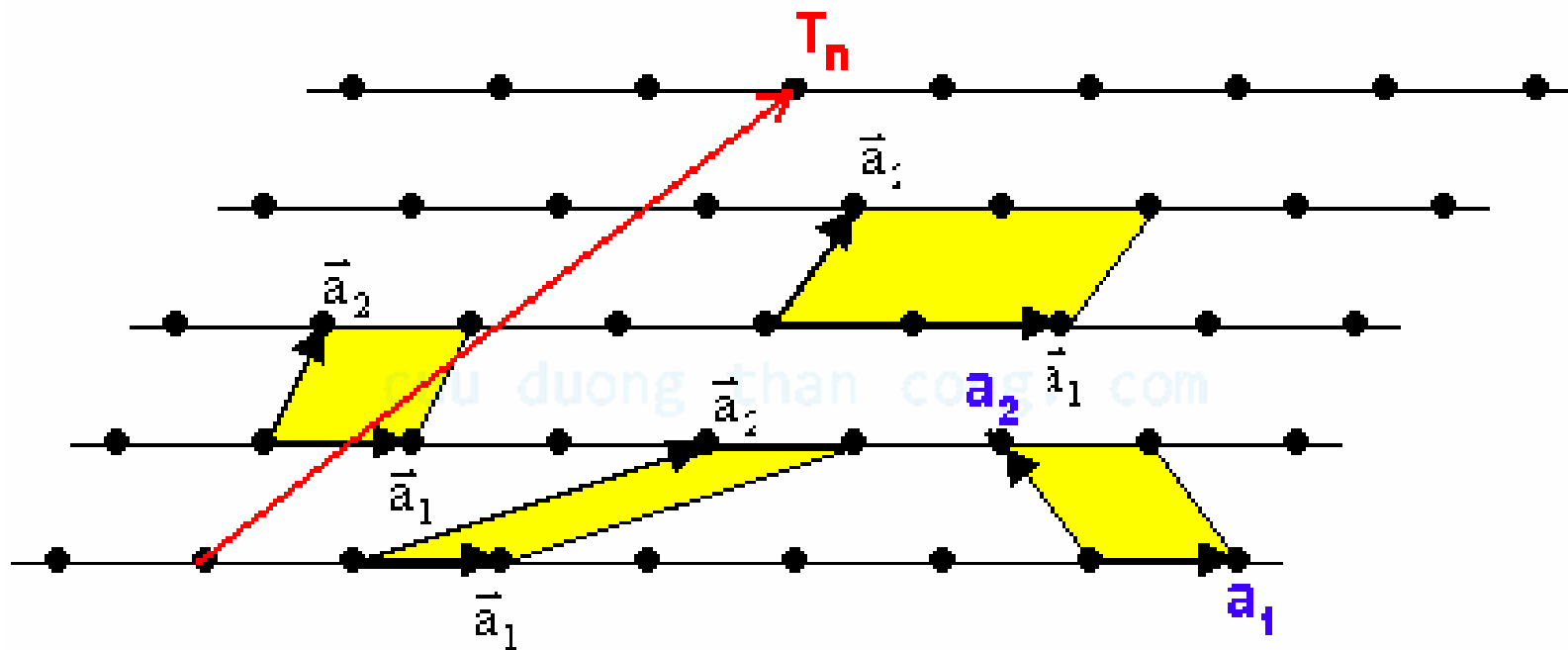
Tinh thể là sự sắp xếp tuần hoàn trong không gian của các nguyên tử hoặc phân tử



Cấu trúc tinh thể = mạng tinh thể + cơ sở

CƠ SỞ VẬT LÝ CHẤT RẮN

II. Mạng tinh thể



\vec{a}_1 \vec{a}_2 \vec{a}_3 - vectơ tịnh tiến cơ sở
có thể chọn tùy ý

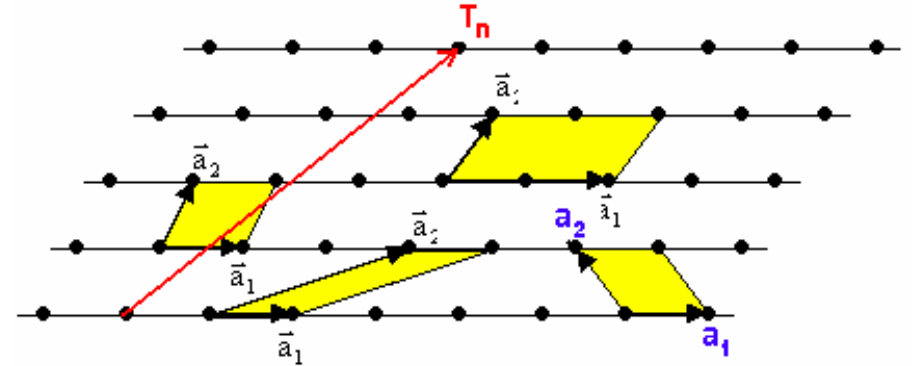
CƠ SỞ VẬT LÝ CHẤT RẮN

1) Mô tả Mạng tinh thể

Cách 1 :

$$\vec{r}_n = n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2 + n_3 \vec{a}_3$$

vectơ tịnh tiến của mạng tinh thể



Tùy cách chọn $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$

n_1, n_2 và n_3 có thể là số nguyên hoặc số phân

❖ Tất cả n_1, n_2 và n_3 đều là số nguyên :

các vectơ $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$ - vectơ tịnh tiến nguyên tố

❖ Chỉ một trong các số n_1, n_2 và n_3 không phải số nguyên :

các vectơ $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$ - vectơ tịnh tiến đơn vị

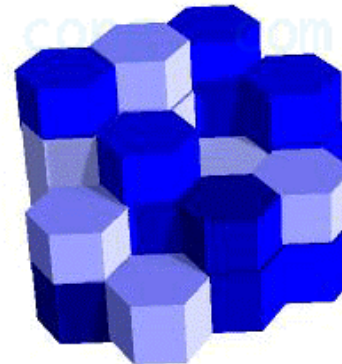
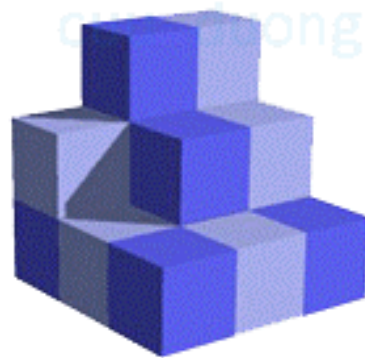
CƠ SỞ VẬT LÝ CHẤT RẮN

Mô tả Mạng tinh thể

Cách 2 : Ô nguyên tố và ô đơn vị

Ô nguyên tố được tạo thành từ các vectơ nguyên tố $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$.

Ô đơn vị từ các vectơ đơn vị $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$.



- ❖ Ô nguyên tố chỉ chứa một nút mạng.
- ❖ Ô nguyên tố có thể có các dạng hình học khác nhau nhưng luôn có thể tích nhỏ nhất và bằng nhau.

CƠ SỞ VẬT LÝ CHẤT RẮN

2) Sự đối xứng của mạng tinh thể

Yếu tố đối xứng : phép biến đổi không gian làm cho mạng tinh thể trùng lại với chính nó.

- ❖ **Đối xứng tịnh tiến**
- ❖ **Các trục quay C_1 , C_2 , C_3 , C_4 và C_6 .**
- ❖ **Mặt phẳng phản xạ gương m.**
- ❖ **Tâm đảo I .**

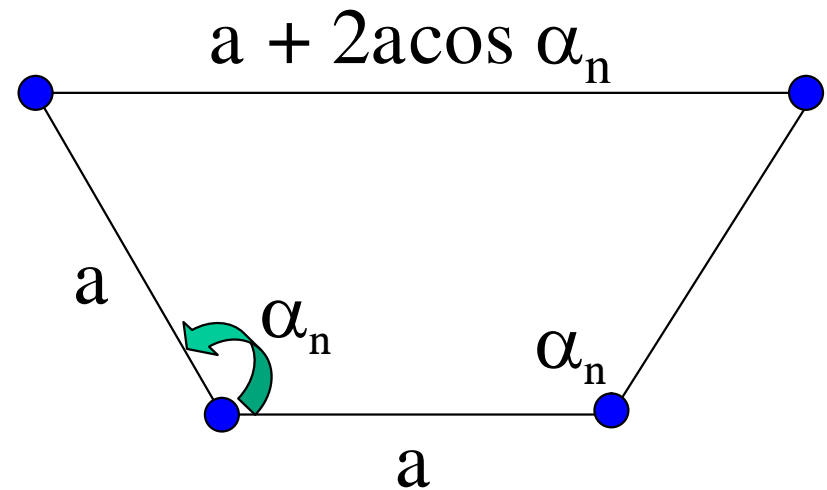
CƠ SỞ VẬT LÝ CHẤT RẮN

5 trục quay trong tinh thể

Trục quay cấp n :
quay quanh trục góc

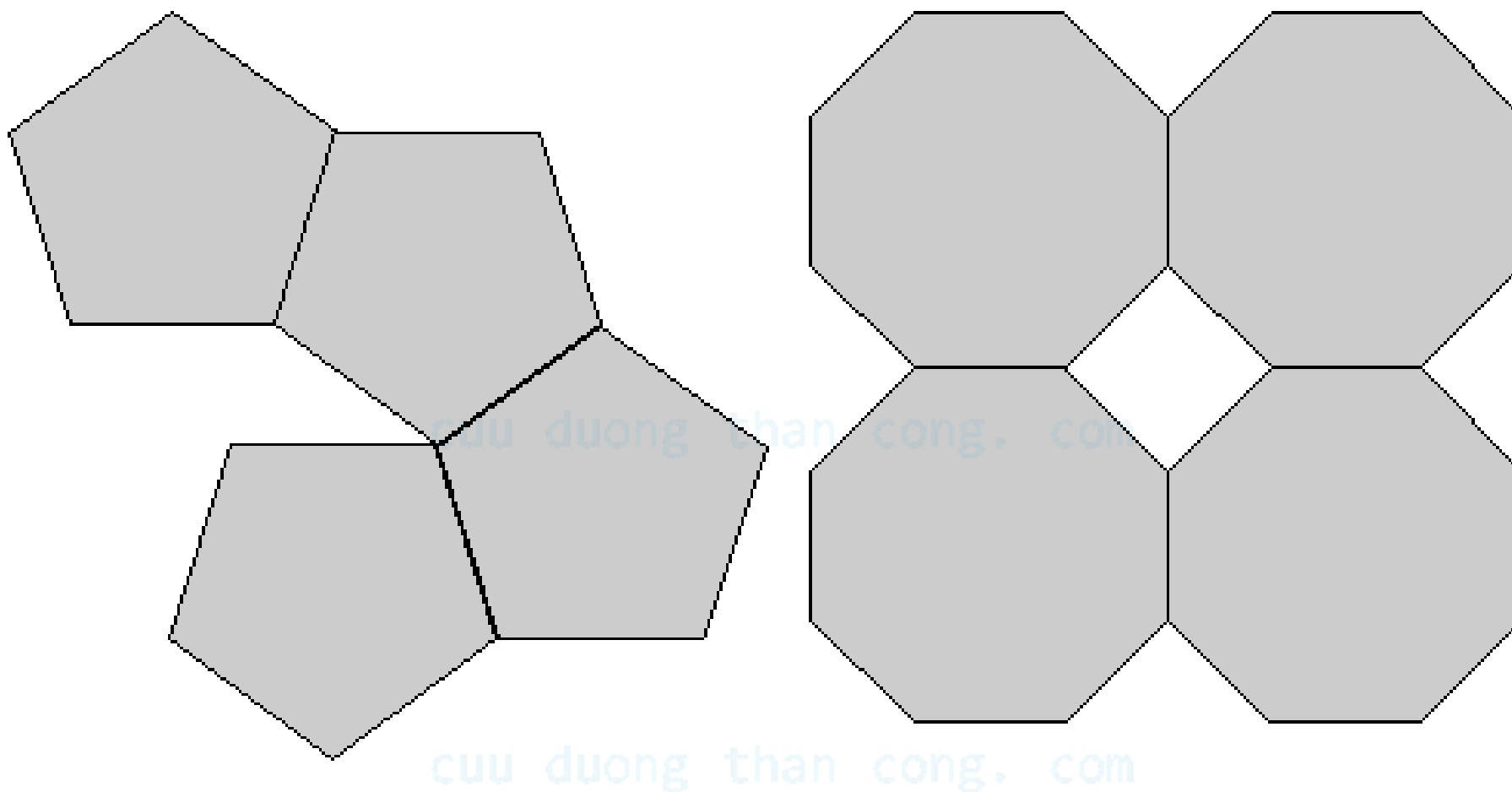
$$\alpha_n = \frac{2\pi}{n}$$

mạng tinh thể trùng với chính nó



$$1 + 2\cos\alpha_n = \text{số nguyên} \quad \text{hay} \quad 2\cos\alpha_n = \text{số nguyên}$$

$\cos\alpha_n$	α_n	C_n
-1	$2\pi/2$	C_2
-0,5	$2\pi/3$	C_3
0	$2\pi/4$	C_4
0,5	$2\pi/6$	C_6
1	$2\pi/1$	C_1



Vì sao không có trục 5 và trục 7 trong tinh thể chất rắn ?

7 Hệ tinh thể

Mỗi hệ tinh thể có một tập tối thiểu của các yếu tố đối xứng

Hệ tinh thể	Số yếu tố đối xứng tối thiểu
Tam tà	C_1 (không)
Đơn tà	C_2 hoặc ($C_2 + I$)
Trực thoi	3 trục C_2 hoặc ($C_2 + I$)
Ba phương	C_3 hoặc ($C_3 + I$)
Bốn phương	C_4 hoặc ($C_4 + I$)
Sáu phương	C_6 hoặc ($C_6 + I$)
Lập phương	4 trục C_3

3) Các mạng tinh thể cơ bản . Mạng Bravais

Cách chọn các vectơ $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$ của Bravais :

1. Ô có tính đối xứng cao nhất của hệ mà tinh thể được xếp vào .
2. Ô có số góc vuông lớn nhất hoặc số cạnh bằng nhau và số góc bằng nhau nhiều nhất.
3. Ô có thể tích nhỏ nhất (ô nguyên tố)

Nếu không thể thỏa mãn đồng thời 3 tính chất đó thì chọn các vectơ $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$ theo thứ tự ưu tiên 1, 2, 3.

Chỉ có 7 dạng ô đơn vị có thể dùng để lấp đầy không gian của mạng tinh thể.

CƠ SỞ VẬT LÝ CHẤT RẮN

Mạng tinh thể hai chiều

Mạng

Đặc điểm của ô

Mạng nghiêng

$$a_1 \neq a_2 ; \gamma \neq 90^\circ$$

Mạng lục giác

$$a_1 = a_2 ; \gamma = 120^\circ$$

Mạng vuông

$$a_1 = a_2 ; \gamma = 90^\circ$$

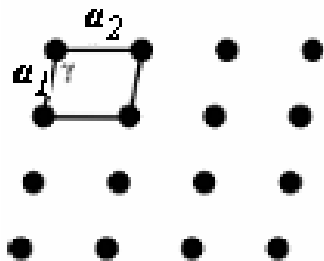
Mạng chữ nhật

$$a_1 \neq a_2 ; \gamma = 90^\circ$$

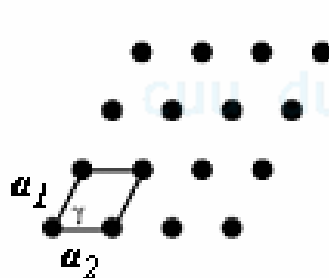
Mạng chữ nhật tâm mặt

$$a_1 \neq a_2 ; \gamma = 90^\circ$$

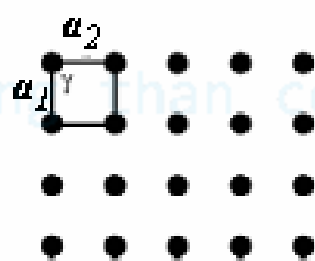
Mạng nghiêng



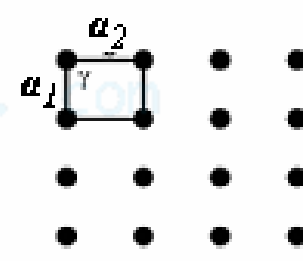
Mạng lục giác



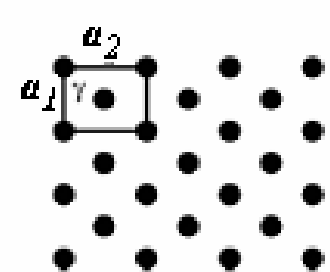
Mạng vuông



Mạng chữ nhật



Mạng chữ nhật tâm mặt

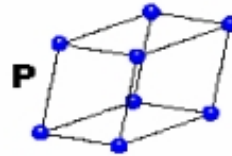


CƠ SỞ VẬT LÝ CHẤT RẮN

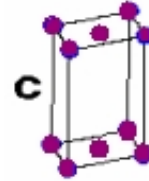
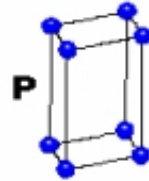
Tinh thể ba chiều

14 ô Bravais

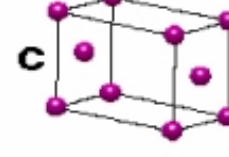
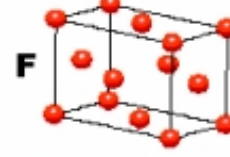
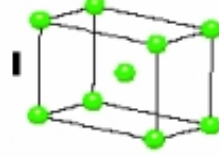
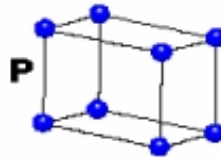
Hệ tam tà



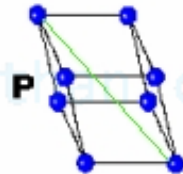
Hệ đơn tà



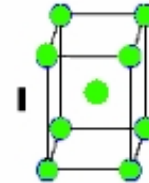
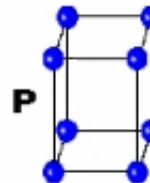
Hệ trực thoi



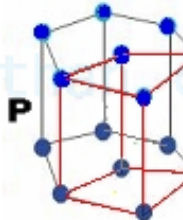
Hệ ba phương



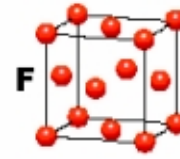
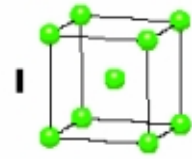
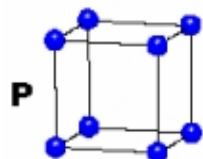
Hệ bốn phương



Hệ sáu phương

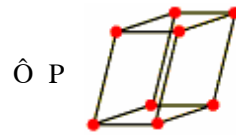


Hệ lập phương



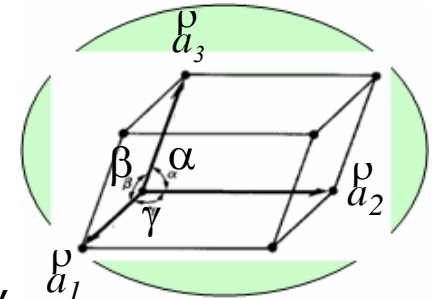
Mạng tinh thể ba chiều

Hệ tam tà

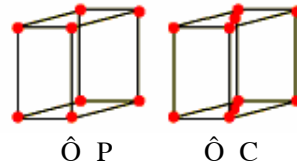


$$a_1 \neq a_2 \neq a_3 ;$$

$$\alpha \neq \beta \neq \gamma$$



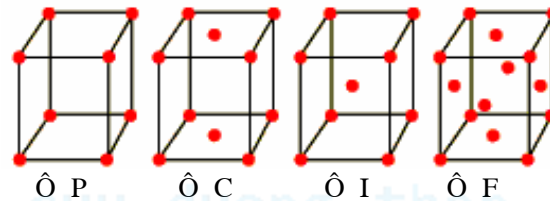
Hệ đơn tà



$$a_1 \neq a_2 \neq a_3 ;$$

$$\alpha = \beta = 90^\circ \neq \gamma$$

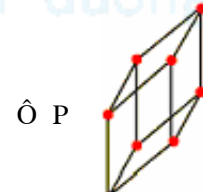
Hệ trực thoi



$$a_1 \neq a_2 \neq a_3 ;$$

$$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$

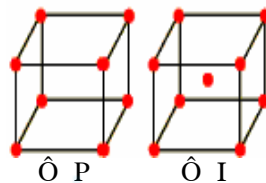
Hệ ba phương



$$a_1 = a_2 = a_3 ;$$

$$\alpha = \beta = \gamma < 120^\circ, \neq 90^\circ$$

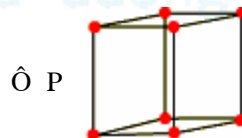
Hệ bốn phương



$$a_1 = a_2 \neq a_3 ;$$

$$\alpha = \beta = 90^\circ ; \gamma = 120^\circ$$

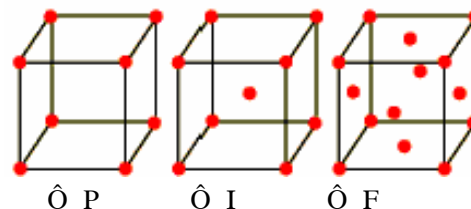
Hệ sáu phương



$$a_1 = a_2 \neq a_3 ;$$

$$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$

Hệ lập phương

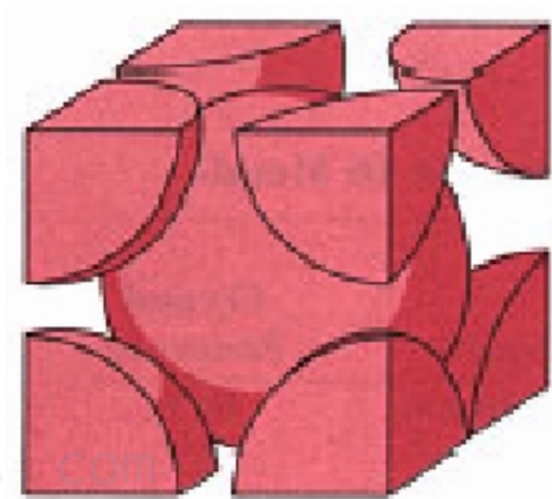
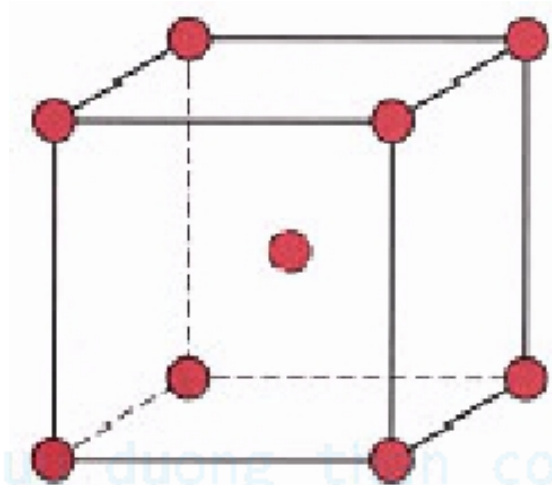


$$a_1 = a_2 = a_3 ;$$

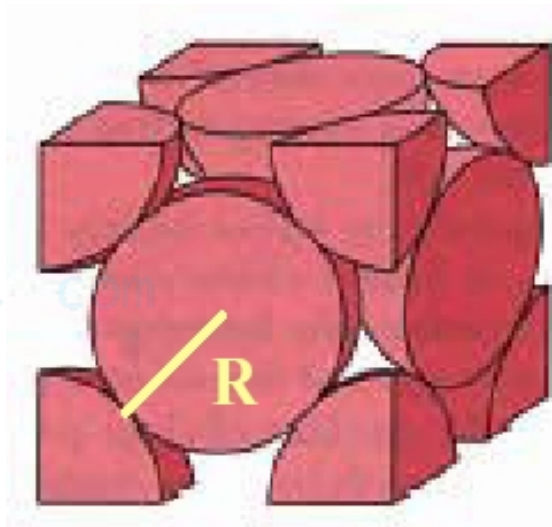
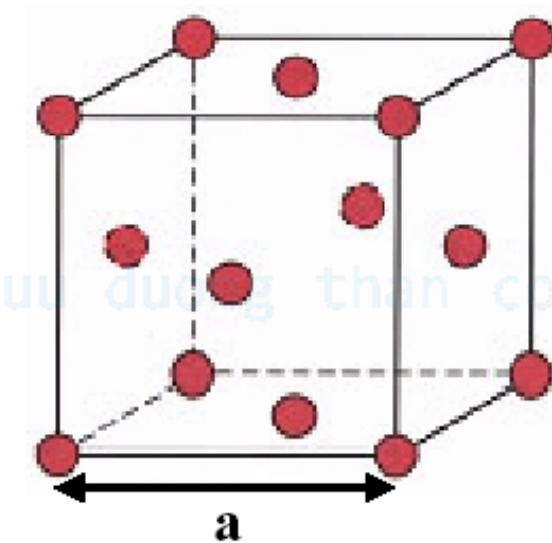
$$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$

Số nút trong ô đơn vị

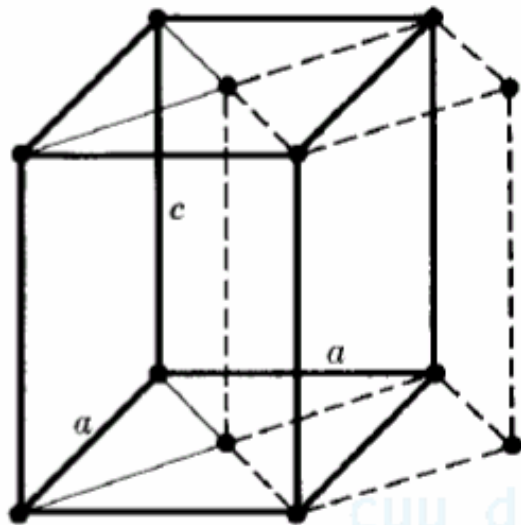
LP I : 2 nút



LP F : 4 nút

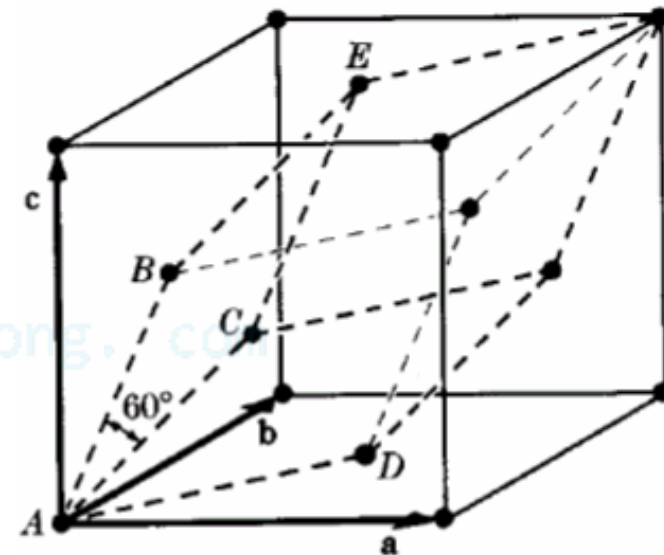


CƠ SỞ VẬT LÝ CHẤT RẮN



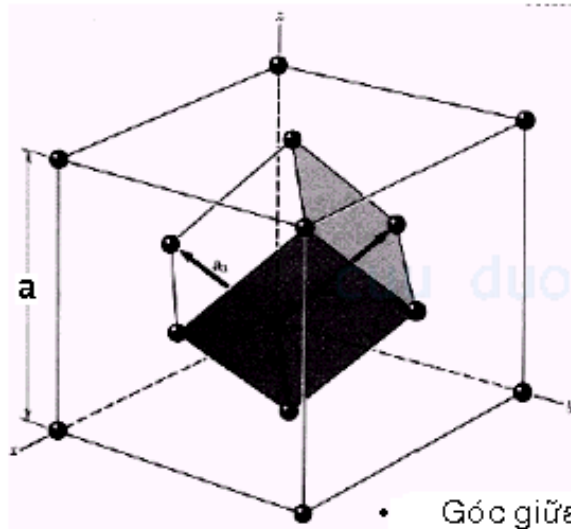
**Ô C thuộc hệ bốn phương
có thể được mô tả bởi ô P
của hệ bốn phương.**

**Mạng lập phương tâm mặt
có thể được lấp đầy bởi các
ô lập phương hoặc ô mặt
thoi.**



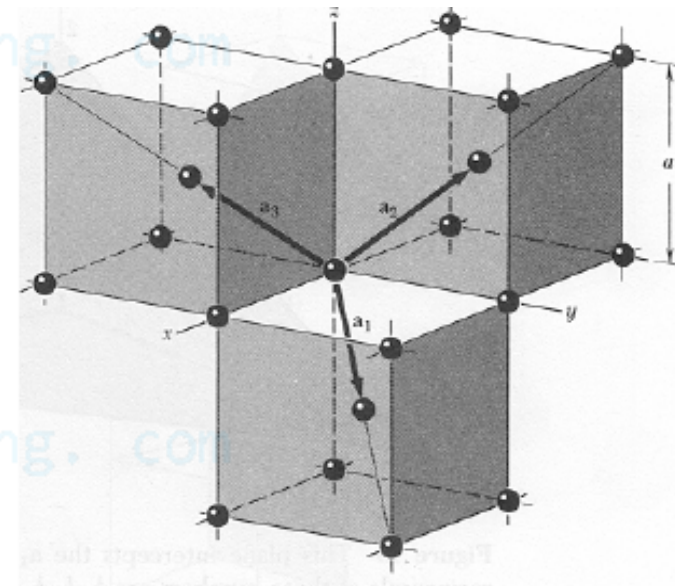
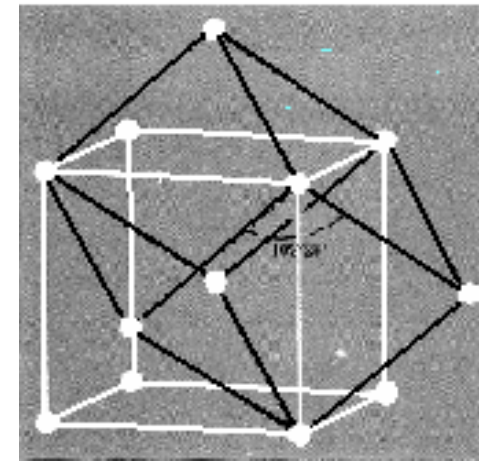
CƠ SỞ VẬT LÝ CHẤT RẮN

Lập phương tâm mặt trong không gian thuận



• Góc giữa a_1, a_2, a_3 : 60°

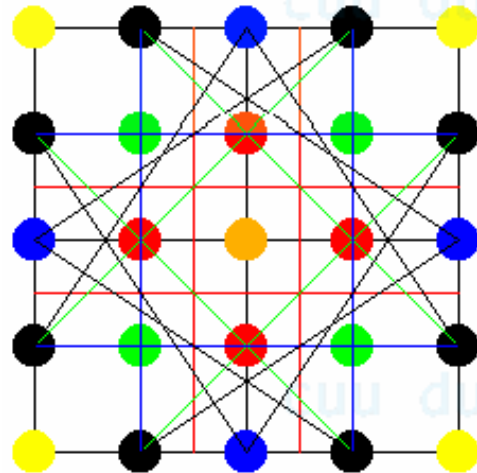
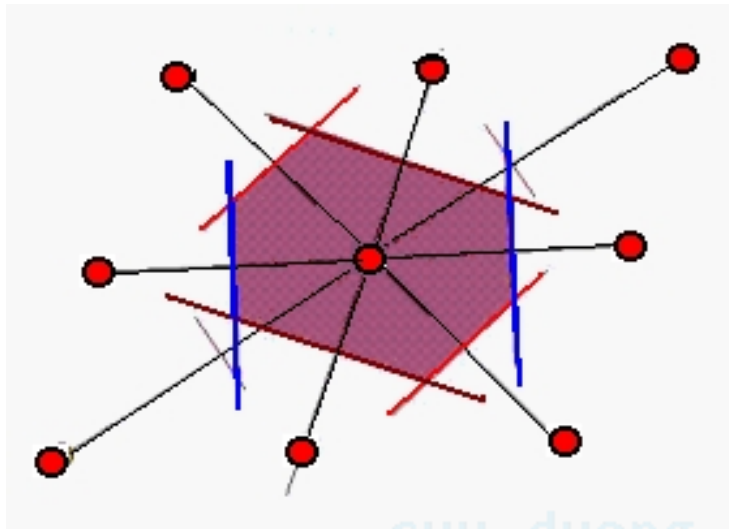
$$a_1 = \frac{1}{2}a(\hat{x} + \hat{y}) ; \quad a_2 = \frac{1}{2}a(\hat{y} + \hat{z}) ; \quad a_3 = \frac{1}{2}a(\hat{z} + \hat{x}) .$$



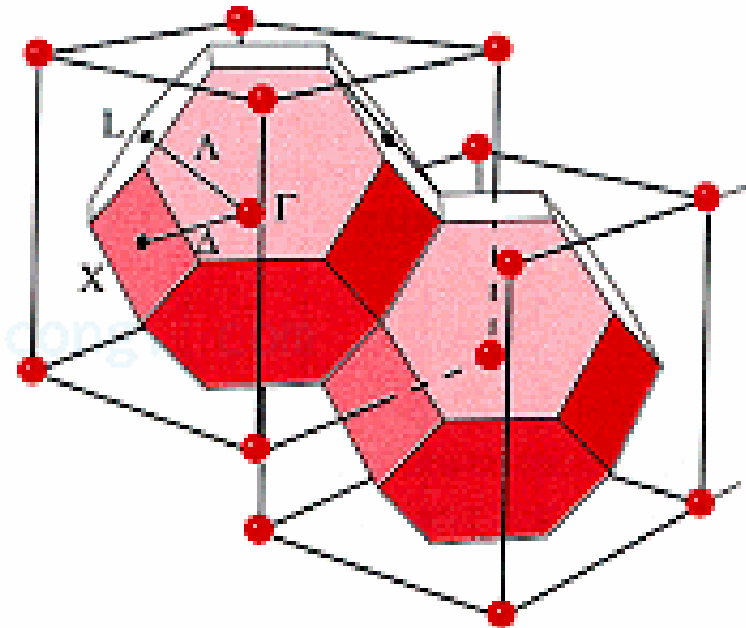
$$a_1 = \frac{1}{2}a(\hat{x} + \hat{y} - \hat{z}) ; \quad a_2 = \frac{1}{2}a(-\hat{x} + \hat{y} + \hat{z}) ; \\ a_3 = \frac{1}{2}a(\hat{x} - \hat{y} + \hat{z}) .$$

CƠ SỞ VẬT LÝ CHẤT RẮN

Ô nguyên tố Wigner-Seitz



Cách vẽ ô Wigner-Seitz



Ô Wigner-Seitz của
mạng lập phương I

CƠ SỞ VẬT LÝ CHẤT RẮN

4) Chỉ số Miller

1. Chỉ số Miller của nút mạng tinh thể

Vị trí của 1 nút nào đó của mạng, đối với gốc toạ độ đã chọn, được xác định bởi 3 toạ độ x , y , z của nó. Các toạ độ đó được viết bằng

$$x = h a_1, y = k a_2 \text{ và } z = l a_3$$

trong đó a_1 , a_2 , a_3 là các thông số của mạng và h , k và l là các số nguyên.

Nếu lấy a_1 , a_2 , a_3 làm đơn vị đo độ dài dọc theo các trục của mạng thì toạ độ của nút sẽ là các số h , k và l . Các số đó được gọi là chỉ số của nút và được ký hiệu là $[[h \ k \ l]]$ hay hkl .

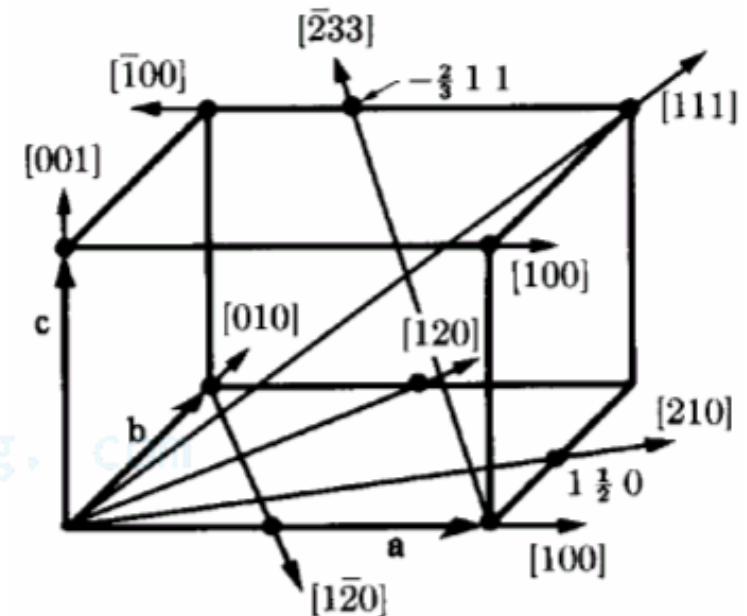
CƠ SỞ VẬT LÝ CHẤT RẮN

2. Chỉ số Miller của chiều trong tinh thể

Chiều của một đường trong mạng có thể xác định bằng cách vẽ đường song song với đường đó qua gốc.

Chỉ số Miller của đường là tọa độ của điểm đầu tiên mà đường đi qua.

Nếu tọa độ của điểm đó là u, v, w thì chiều của đường sẽ là $[uvw]$.



Theo quy ước, người ta dùng *tập các số nguyên nhỏ nhất*.

$[1/2 \ 1/2 \ 1]$, $[1 \ 1 \ 2]$ và $[2 \ 2 \ 4]$ chỉ các chiều tương đương, nhưng người ta dùng $[1 \ 1 \ 2]$.

Các chỉ số âm được viết với dấu ngang ở trên đầu.

CƠ SỞ VẬT LÝ CHẤT RẮN

3. Chỉ số Miller của các mặt trong tinh thể

Vị trí của một mặt được xác định bởi 3 điểm mà mặt đó cắt 3 trục tọa độ.

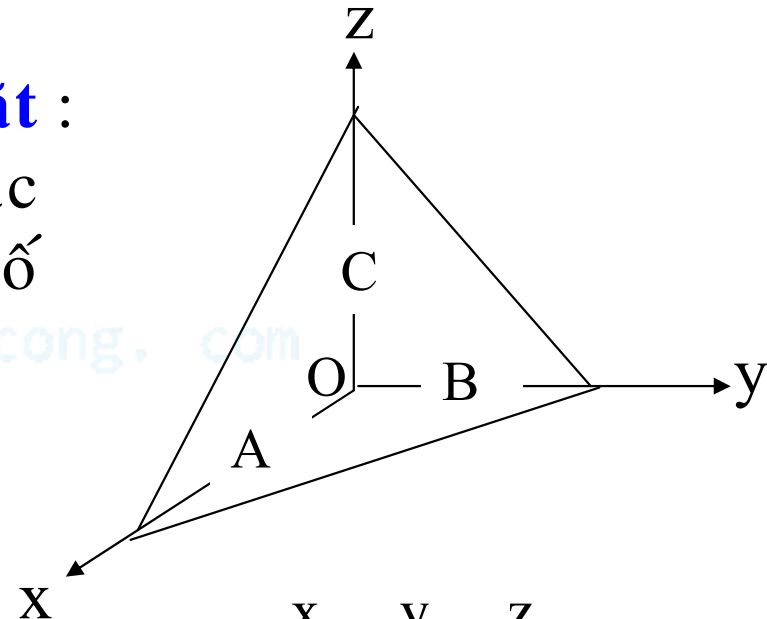
Cách xác định chỉ số Miller cho mặt :

- biểu thị độ dài từ gốc tọa độ đến các giao điểm đó theo đơn vị của thông số mạng : A , B và C.

- lập nghịch đảo
- quy đồng mẫu số . Giả sử mẫu số chung nhỏ nhất là D.

- các số nguyên

$h = D / A$, $k = D / B$ và $l = D / C$
là các chỉ số Miller của mặt và được ký hiệu bằng **(h k l)**.



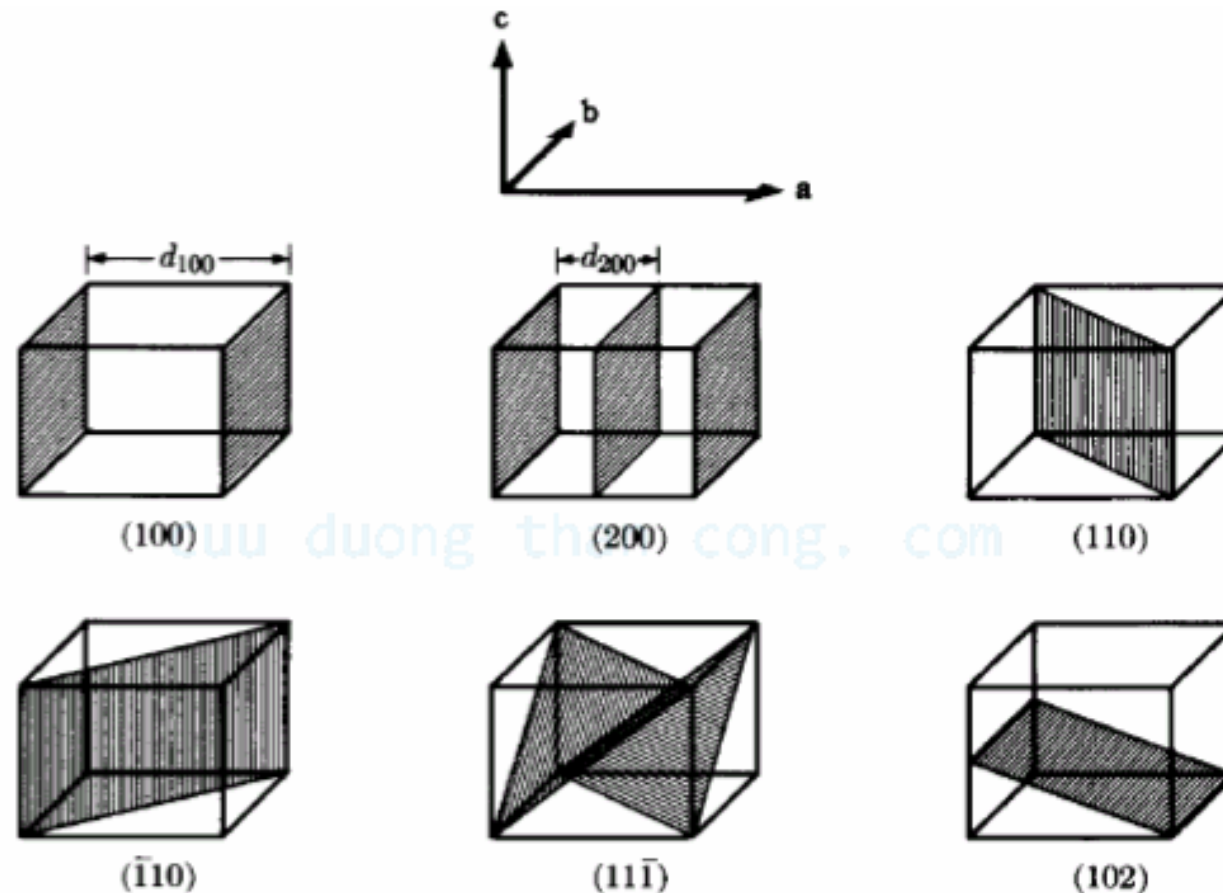
$$\frac{x}{A} + \frac{y}{B} + \frac{z}{C} = 1$$

$$hx + ky + lz = D$$

$$D = hA = kB = lC$$

CƠ SỞ VẬT LÝ CHẤT RẮN

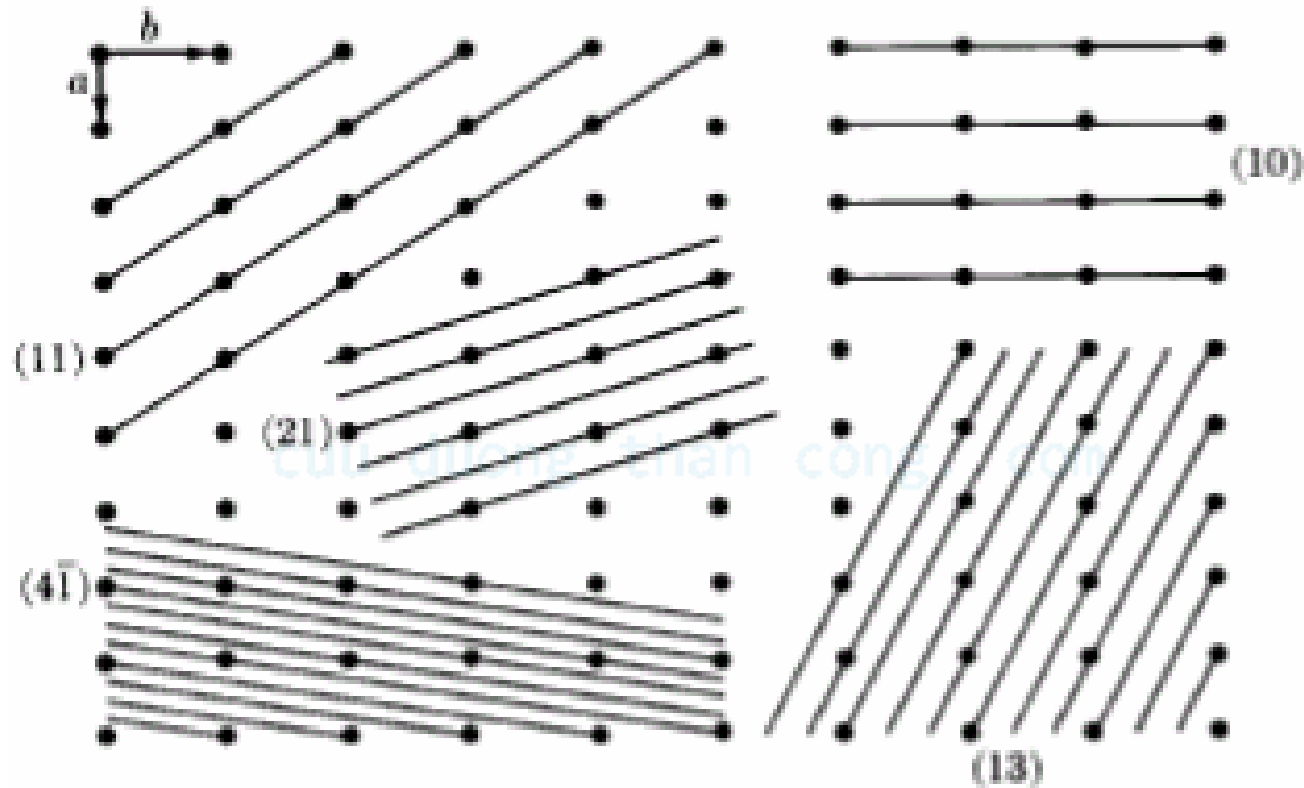
Chỉ số Miller của các mặt trong tinh thể



Một họ mặt song song và cách đều nhau được biểu thị bằng các chỉ số Miller như nhau.

CƠ SỞ VẬT LÝ CHẤT RẮN

Khoảng cách giữa các mặt (hkl)



Họ mặt có chỉ số Miller càng nhỏ có khoảng cách giữa hai mặt kế nhau càng lớn và có mật độ các nút mạng càng lớn

CƠ SỞ VẬT LÝ CHẤT RẮN

Một vài tính chất đáng nhớ :

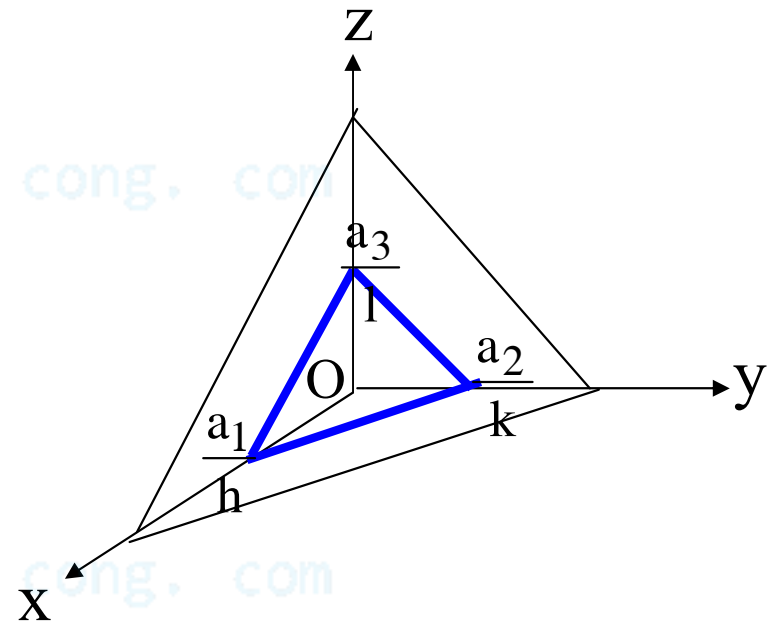
- * (hkl) biểu thị cho một *họ mặt song song với nhau*
- * Mặt (hkl) gần gốc tọa độ nhất cắt các trục tọa độ ở

$$\frac{a_1}{h} \quad \frac{a_2}{k} \quad \frac{a_3}{l}$$

Với hệ lập phương :

+ [hkl] vuông góc với (hkl)

$$d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}$$

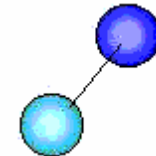
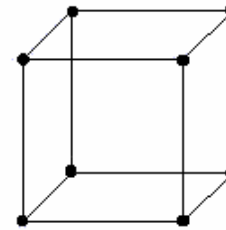
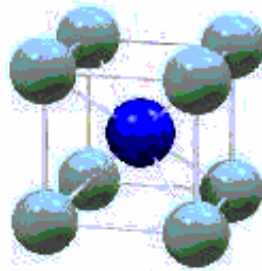


CƠ SỞ VẬT LÝ CHẤT RẮN

III. Cấu trúc tinh thể của một số tinh thể đơn giản

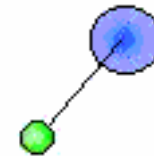
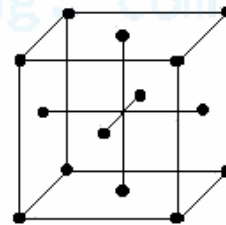
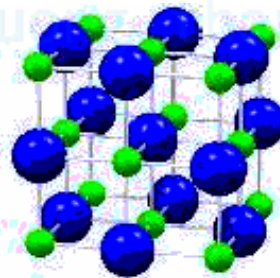
Tinh thể = Mạng Bravais + cơ sở

ClCs



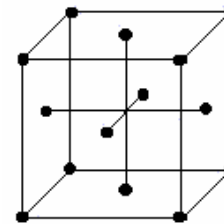
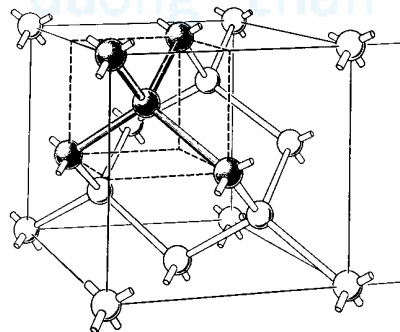
000 & $\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2}$

ClNa



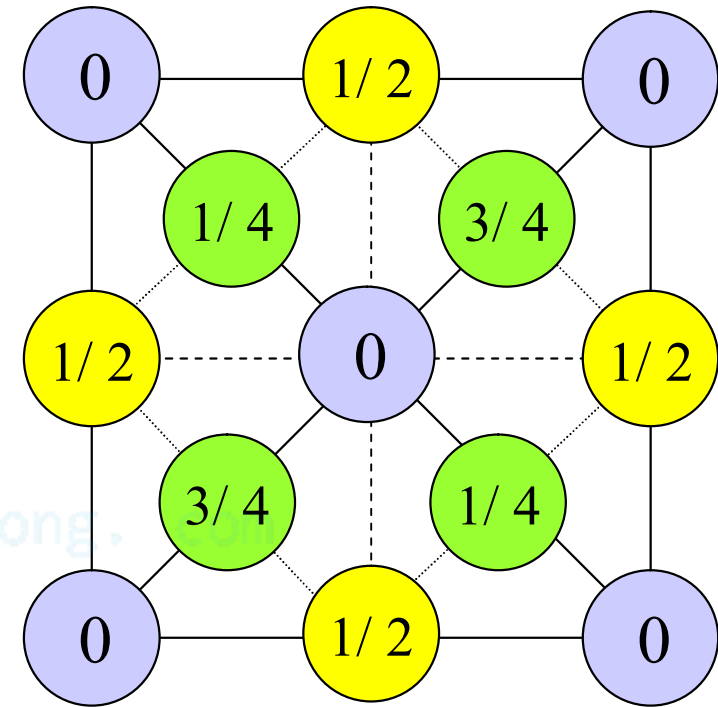
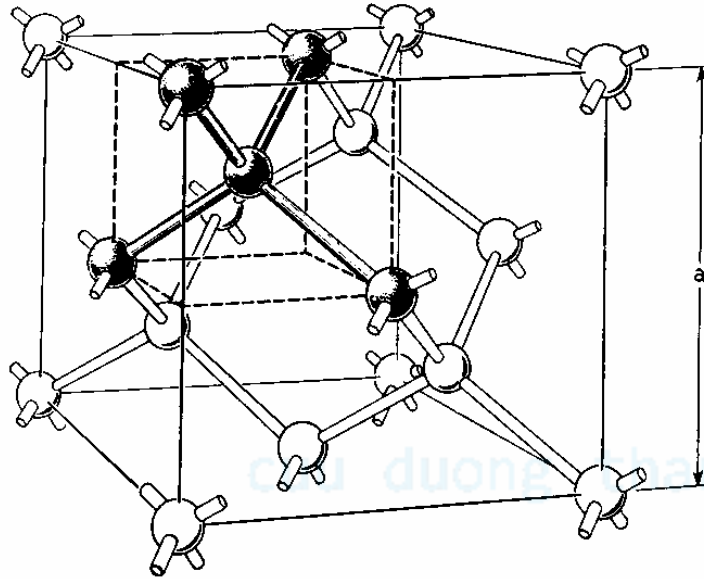
000 & $\frac{1}{2}00$

Kim cương



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

Mô tả cấu trúc Kim cương



Mạng Bravais : lập phương tâm mặt F

Cơ sở : gồm 2 nguyên tử ở $(0,0,0)$ và $(1/4,1/4,1/4)$

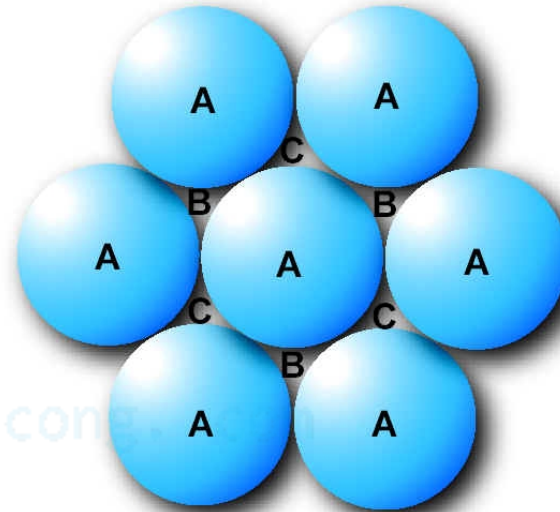
Ô đơn vị chứa 8 nguyên tử

Hệ số lấp đầy : 0, 34 : mạng kim cương không thuộc loại mạng xếp chặt

Số phối trí $k = 4$

Kết tinh theo mạng kim cương có C , Si , Ge ,thiếc xám ...

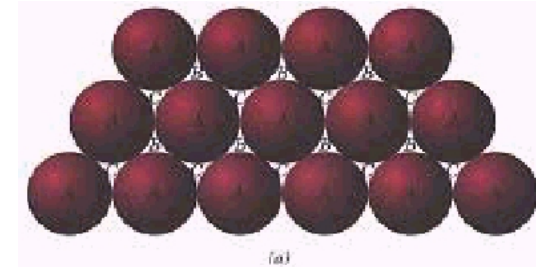
Cấu trúc xếp chặt



Các cách sắp xếp các quả cầu rắn như nhau trong không gian sao cho phần trống còn lại giữa chúng là nhỏ nhất : Ở lớp dưới cùng, các quả cầu được xếp chặt trên một mặt phẳng khi mỗi quả cầu tiếp xúc với 6 quả cầu xung quanh

Cấu trúc xếp chặt

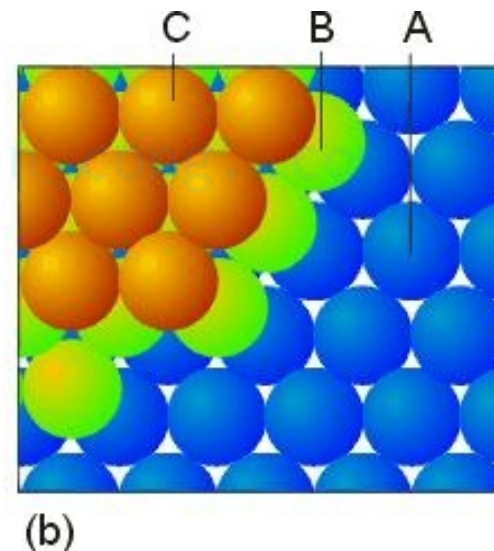
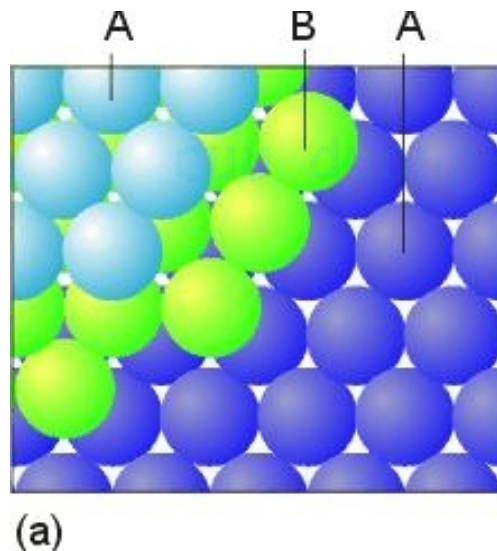
Lớp dưới cùng : lớp A



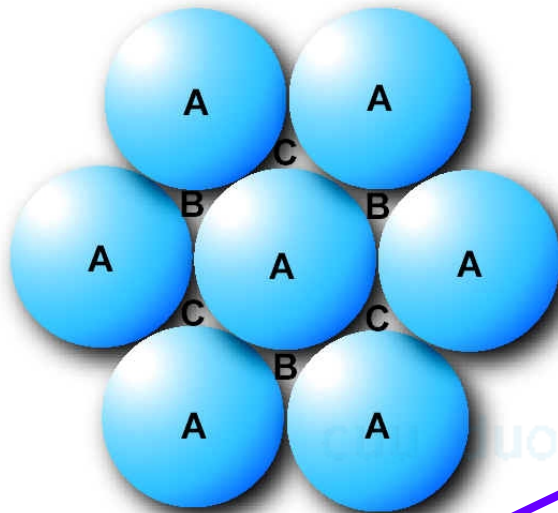
Lớp thứ hai : Lớp B



Có hai cách xếp lớp thứ ba :

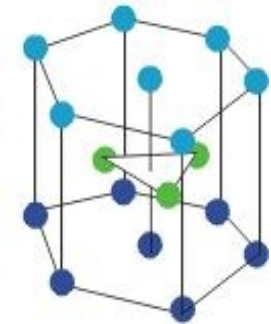


Cấu trúc xếp chặt

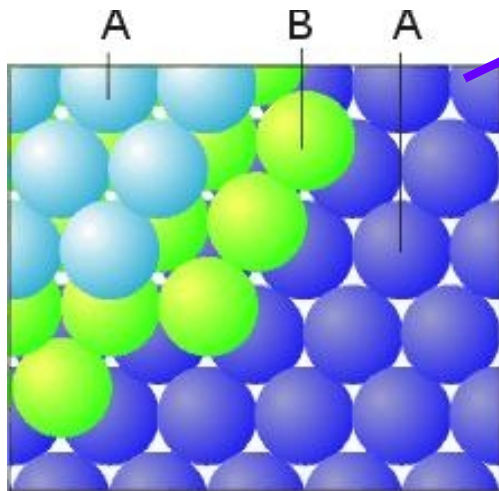


ABABAB...

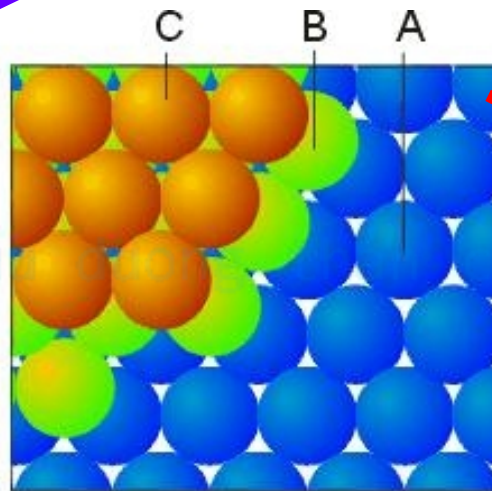
Lục giác xếp chặt



(a)



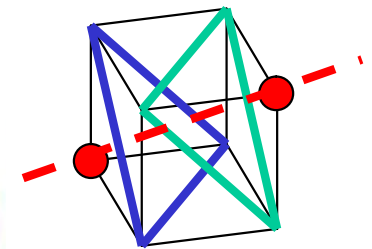
(a)



(b)



(b)

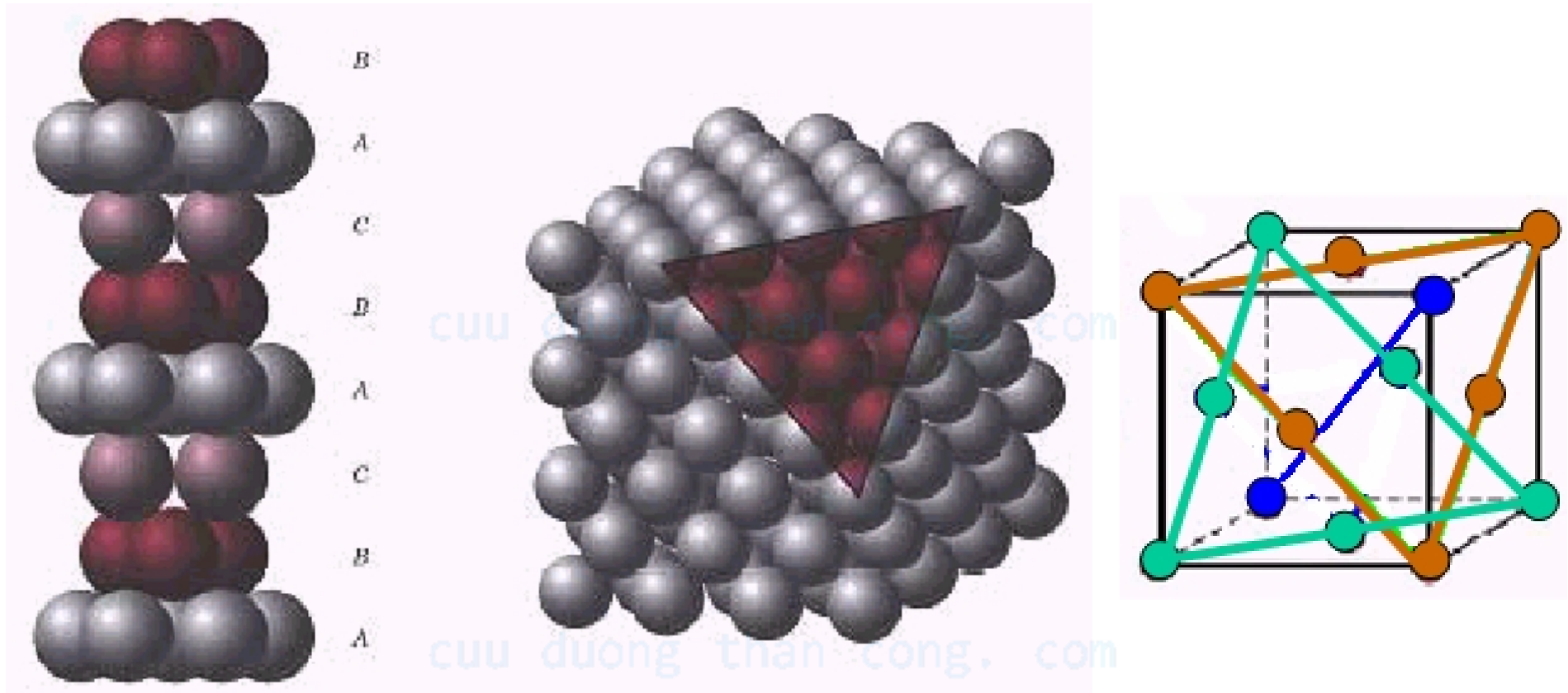


ABCABCABC...

Lập phương tâm mặt

Cấu trúc xếp chặt : FCC

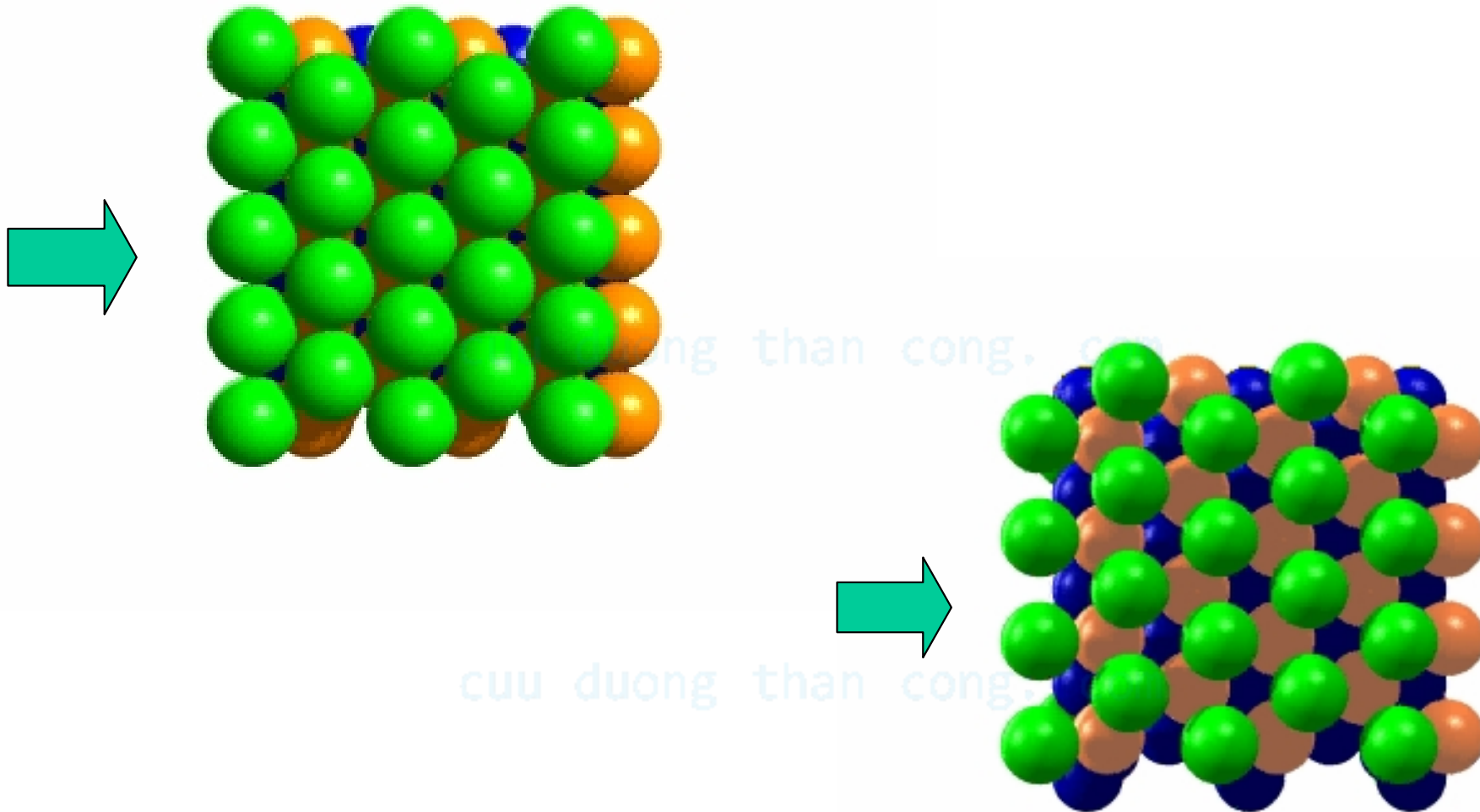
FCC: Thứ tự sắp xếp ABCABCABC...



Mặt thứ ba được đặt trên các chỗ lõm của mặt thứ nhất mà mặt thứ hai không chiếm.

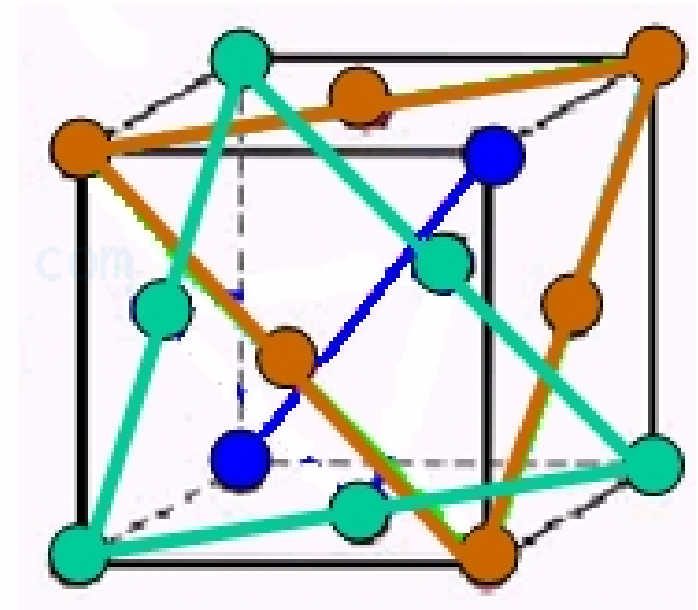
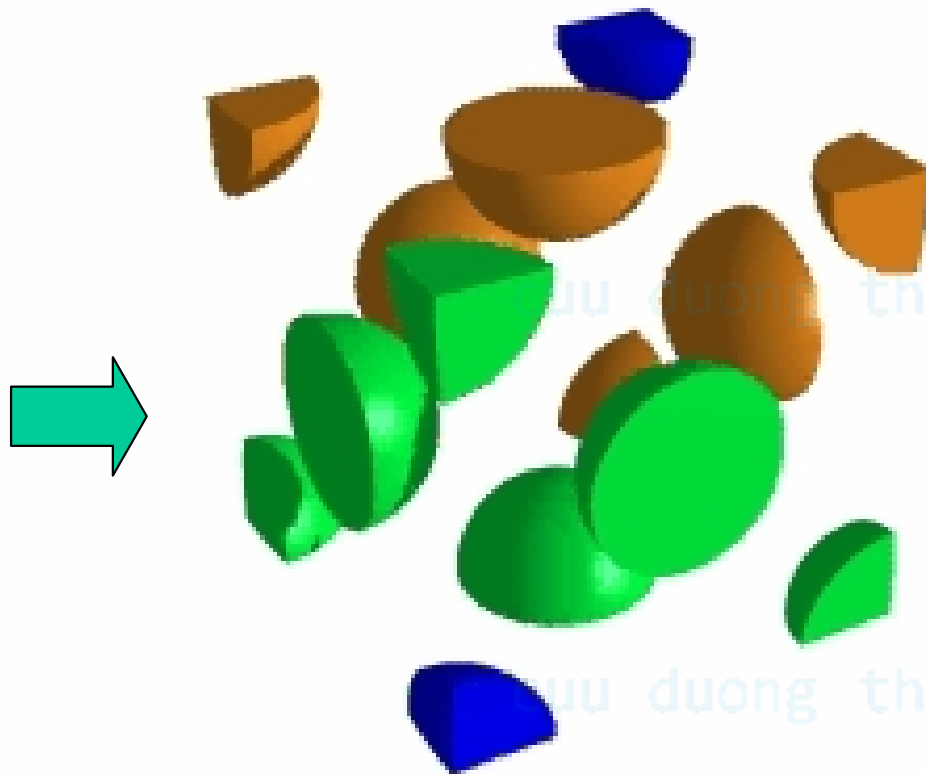
CƠ SỞ VẬT LÝ CHẤT RẮN

Cấu trúc xếp chặt : FCC



CƠ SỞ VẬT LÝ CHẤT RẮN

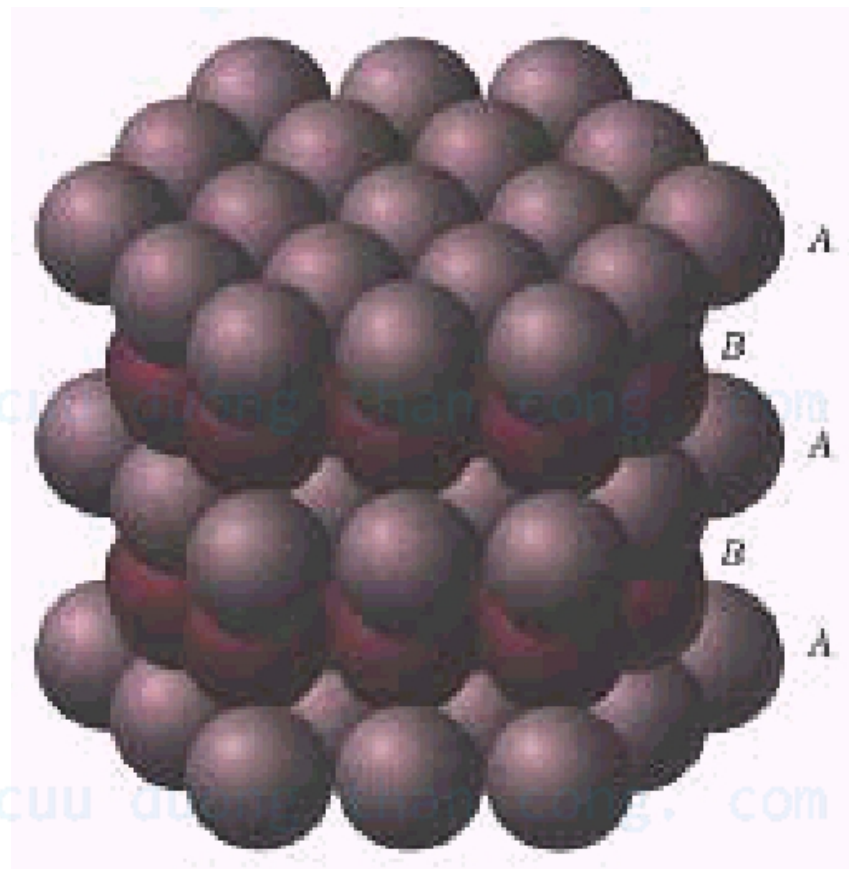
Cấu trúc xếp chặt : FCC



CƠ SỞ VẬT LÝ CHẤT RẮN

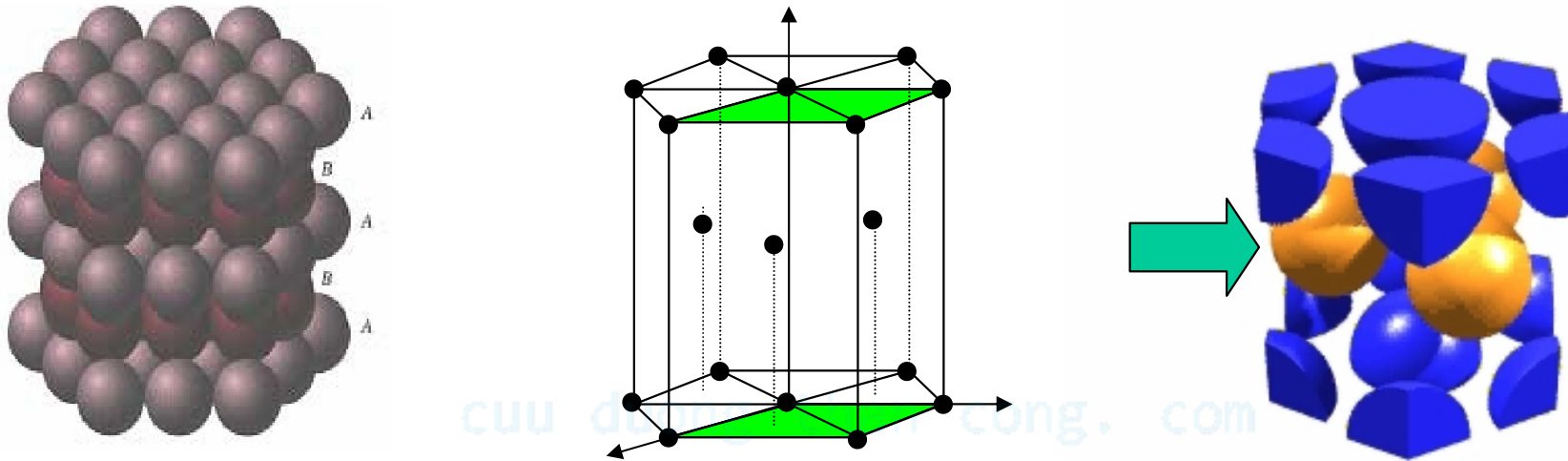
Cấu trúc lục giác xếp chặt : HCP

HCP: Thứ tự sắp xếp ABABAB...



Mặt phẳng thứ ba được đặt thẳng trên mặt đầu tiên của các nguyên tử

Mô tả cấu trúc Lục giác xếp chặt



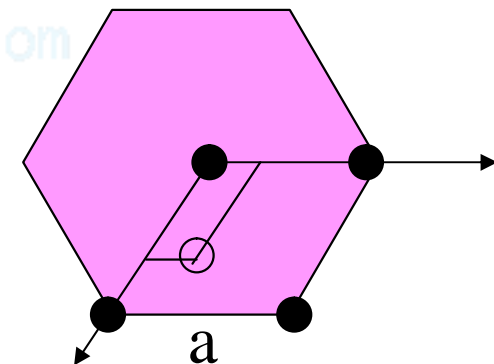
Mạng Bravais : lục giác P

Cơ sở : gồm 2 nguyên tử như nhau ở $(0,0,0)$ và $(2/3,1/3,1/2)$

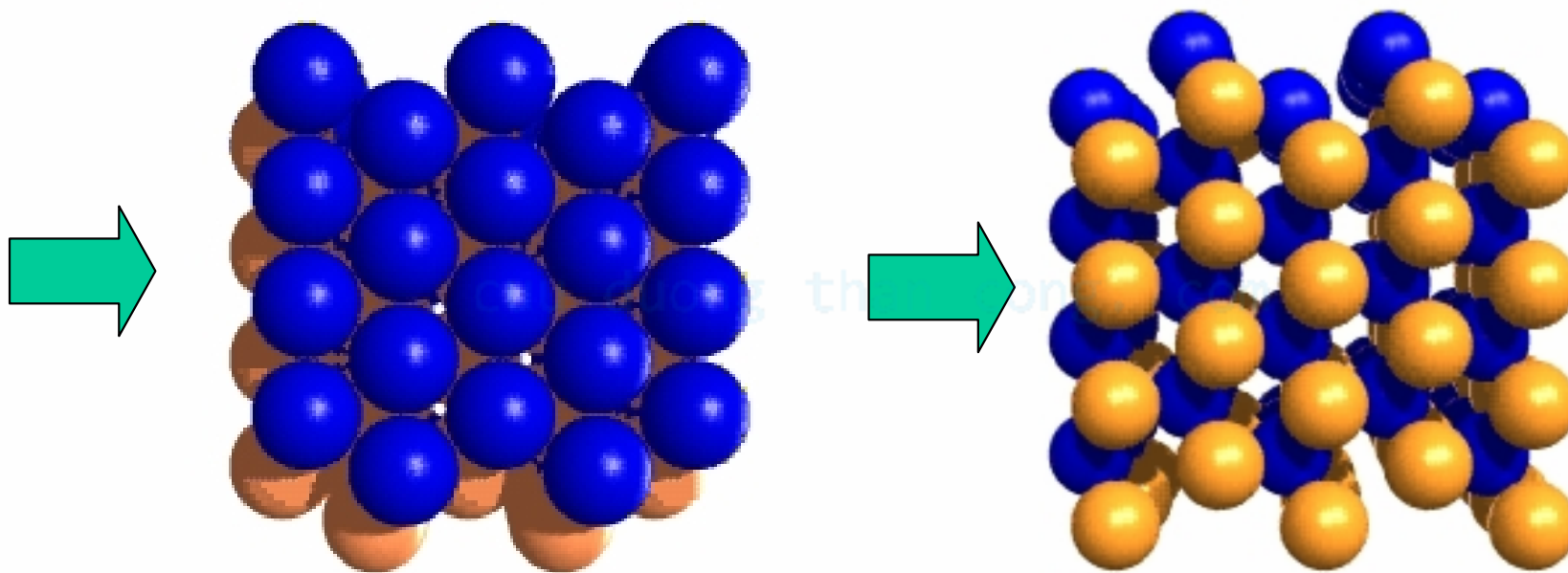
Hệ số lấp đầy (bởi các quả cầu) : 0,74.

Tỷ số $a_3/a_1 = (c/a) = 1,633$

Số phối trí : $k = 12$.

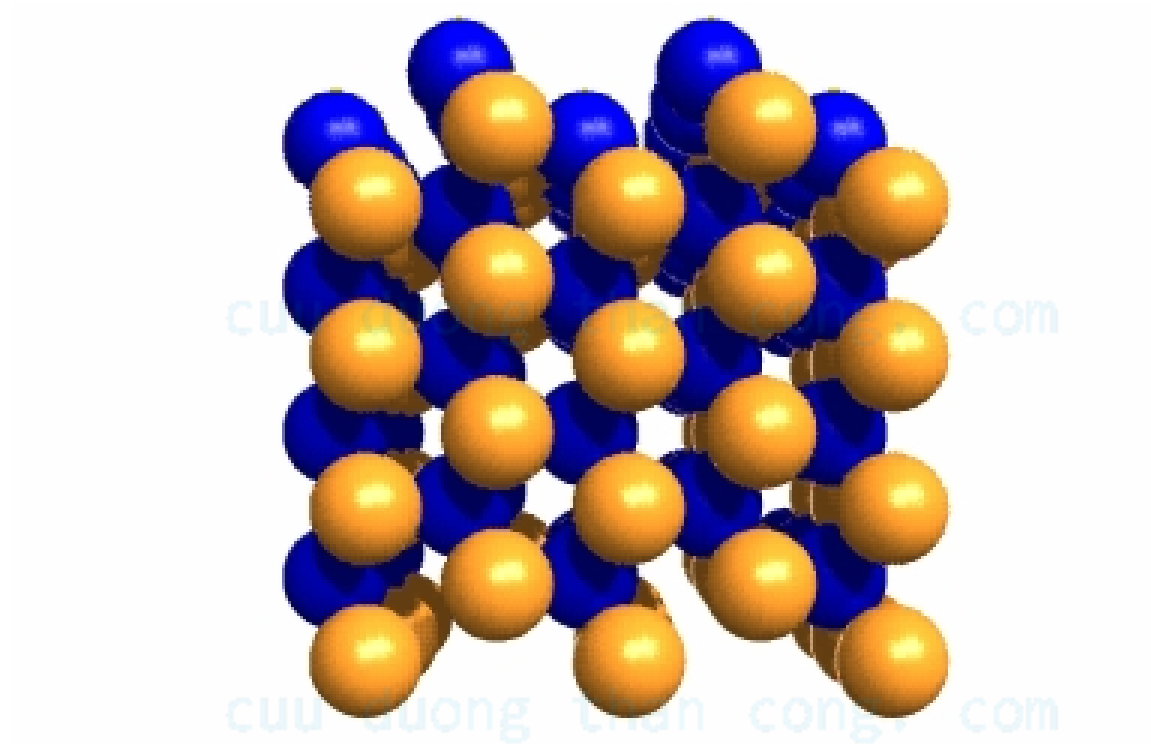


Cấu trúc lục giác xếp chặt : HCP



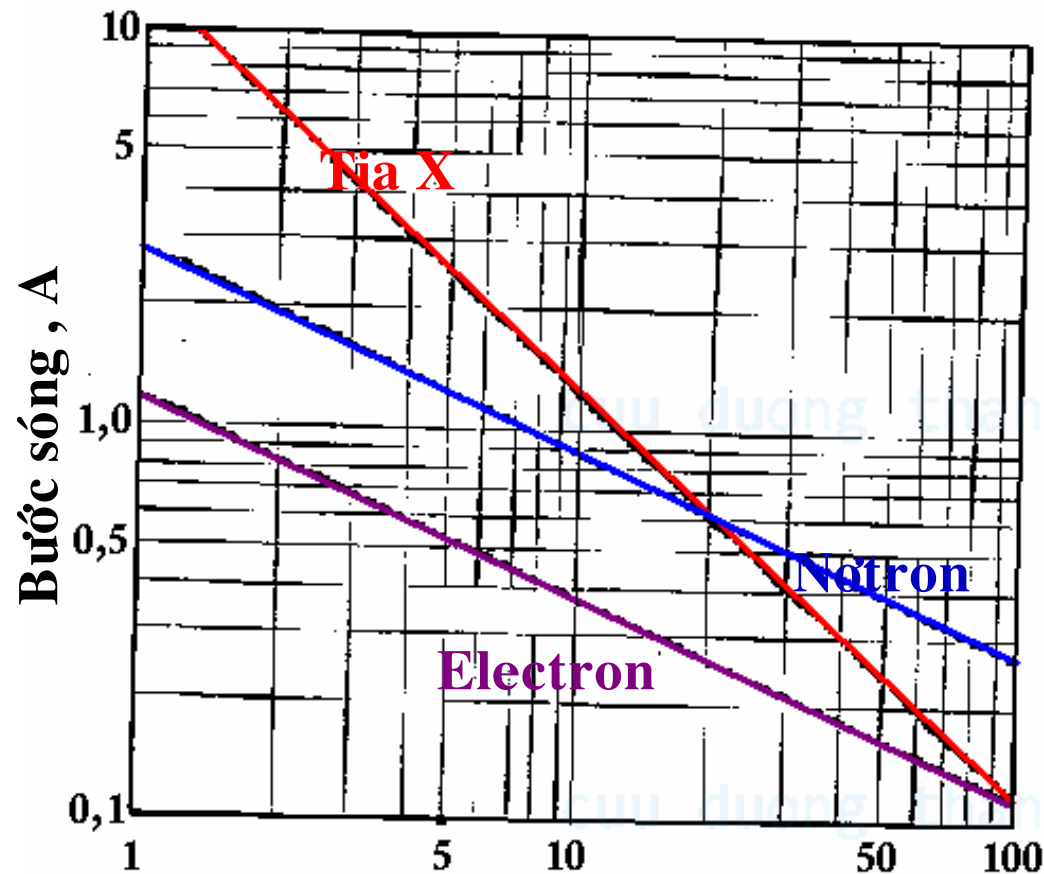
CƠ SỞ VẬT LÝ CHẤT RẮN

Cấu trúc lục giác xếp chặt : HCP



CƠ SỞ VẬT LÝ CHẤT RẮN

IV. Phân tích cấu trúc tinh thể bằng phương pháp nhiễu xạ tia X



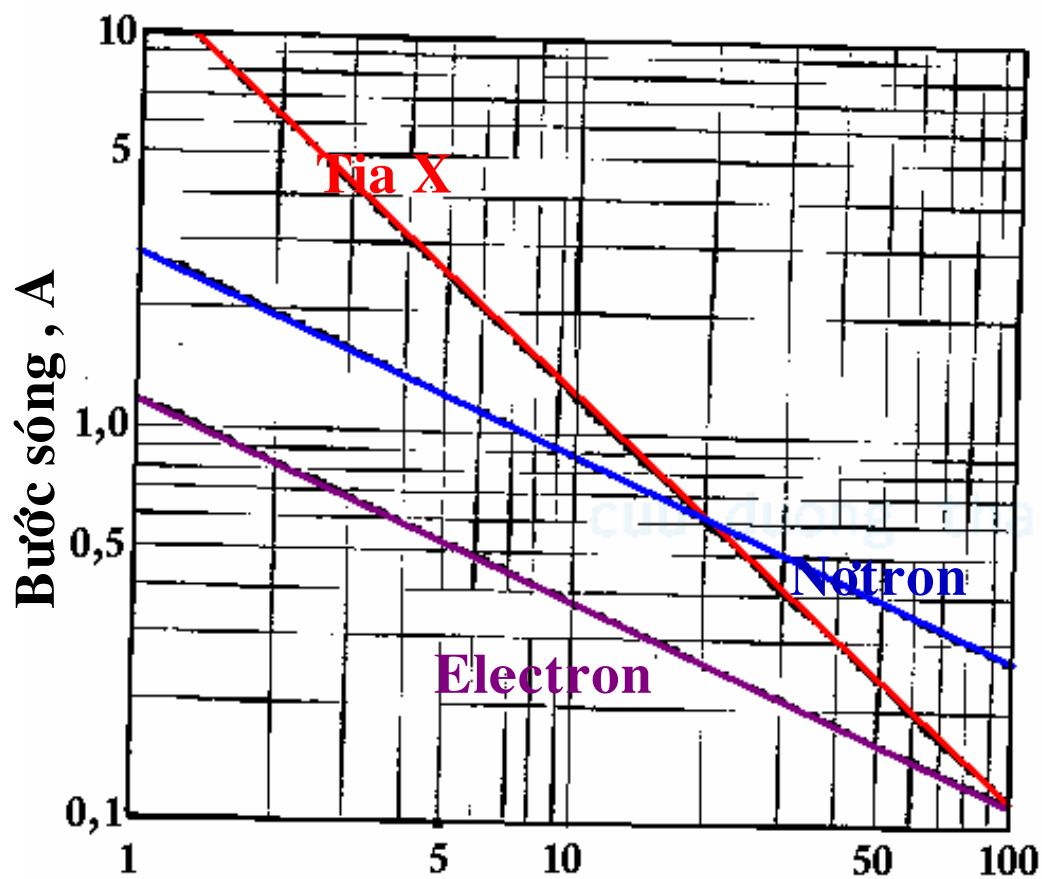
Năng lượng photon X , keV

Năng lượng nơtron , 0,01 eV

Năng lượng electron ,100 eV

Không thể phân biệt được các chi tiết bé hơn bước sóng của bức xạ mà ta dùng để quan sát chúng. Khoảng cách của các nguyên tử trong tinh thể chỉ vào khoảng Å .

Muốn quan sát được cấu trúc bên trong tinh thể cần dùng những bức xạ có bước sóng cỡ Å.



Năng lượng photon X , keV

Năng lượng nơtron , 0,01 eV

Năng lượng electron ,100 eV

Tia X :

$$\lambda(A^0) = \frac{12,4}{E(keV)}$$

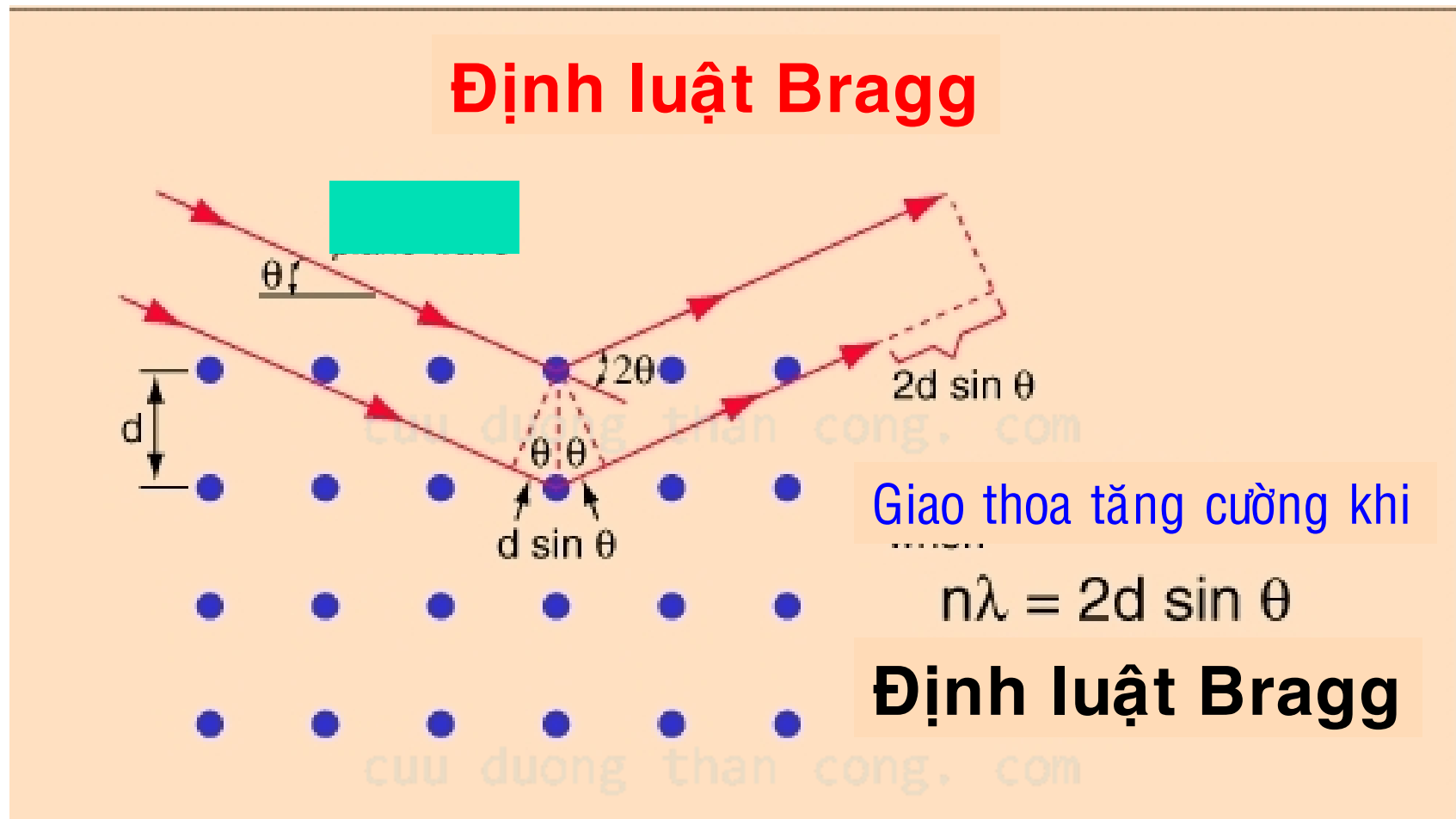
Với chùm neutron

$$\lambda(A^0) = \frac{0,28}{\sqrt{E(eV)}}$$

Với chùm electron

$$\lambda(A^0) = \frac{12}{\sqrt{E(eV)}}$$

1) Sự nhiễu xạ từ một họ mặt của mạng tinh thể



Công thức Bragg : hệ quả của tính chất cơ bản của tinh thể là tính tuần hoàn mà không liên quan gì đến thành phần hóa học của tinh thể cũng như cách sắp xếp của các nguyên tử trong những mặt phẳng phản xạ.

Năm 1915 hai cha con nhà họ Bragg được giải thưởng Nobel về những đóng góp trong lĩnh vực phân tích cấu trúc tinh thể bằng phương pháp nhiễu xạ tia X.

Năm đó W.L. Bragg mới 25 tuổi, là người trẻ nhất được giải thưởng lớn này.



William Lawrence Bragg
sinh viên trường Cambridge

- Chiếu tinh thể với tia X đơn sắc thường không cho các tia nhiễu xạ vì để thỏa mãn công thức Bragg cần chiếu tia X theo một chiều nhất định với bước sóng xác định mới có nhiễu xạ từ một họ mặt nào đó.

- Dựa vào công thức Bragg $2d\sin\theta = n\lambda$

có thể sử dụng các phương pháp sau :

- giữ nguyên góc tới , thay đổi bước sóng :

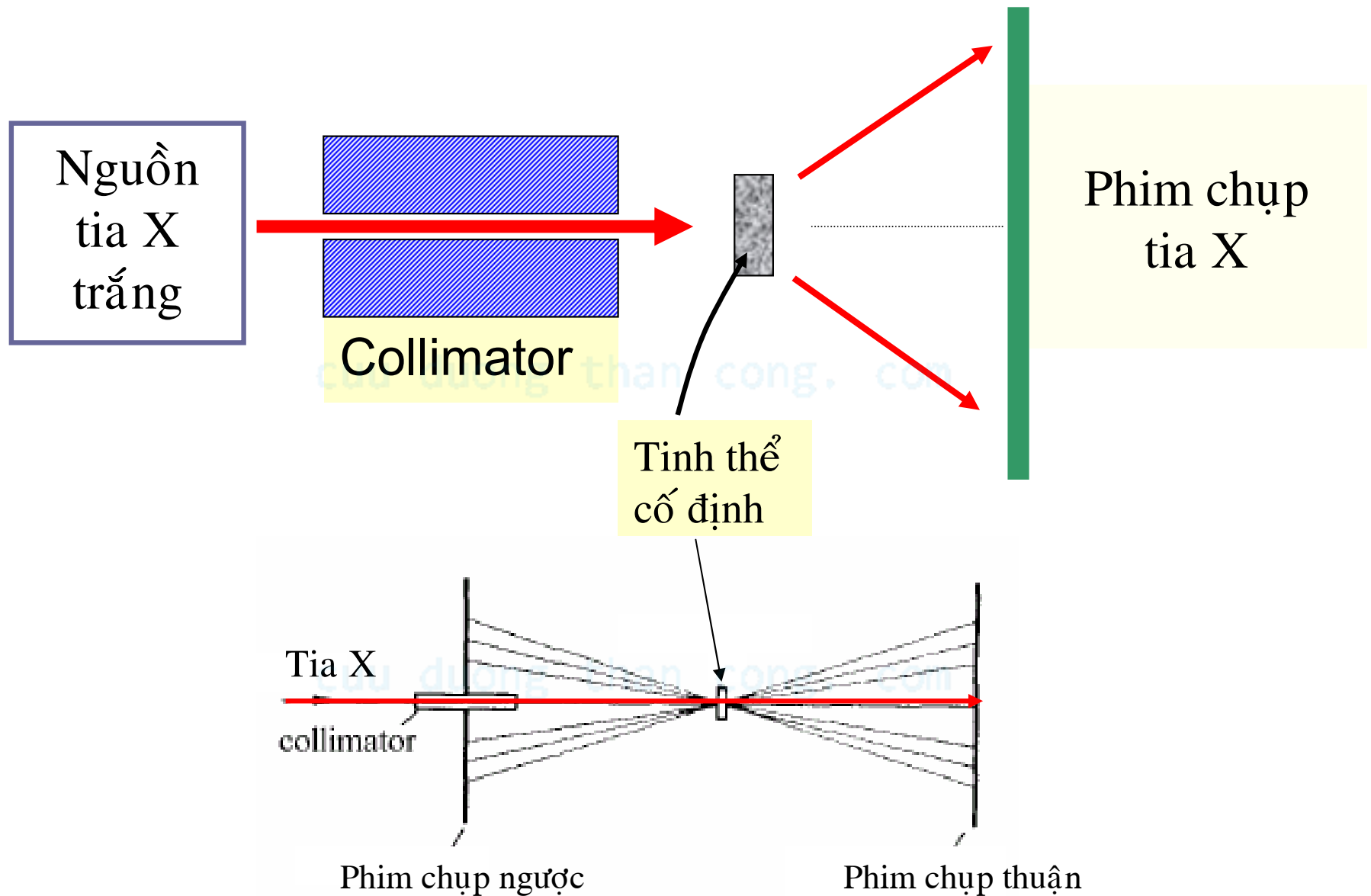
Phương pháp Laue

- Giữ nguyên bước sóng, thay đổi góc tới :

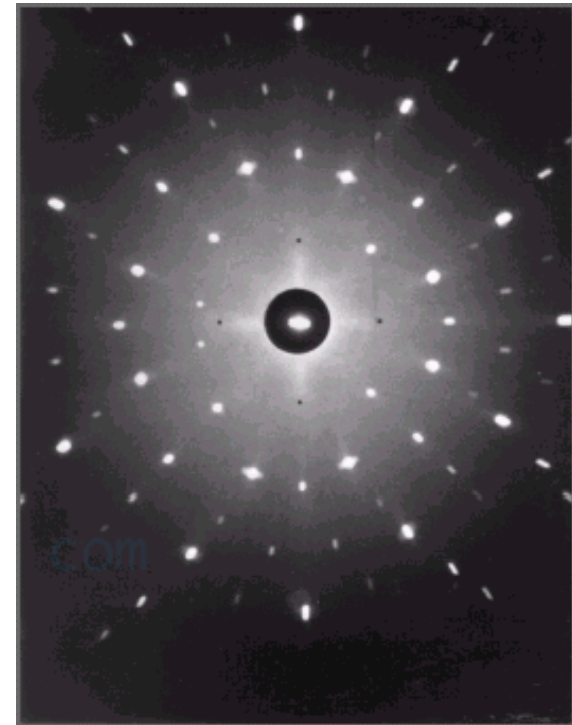
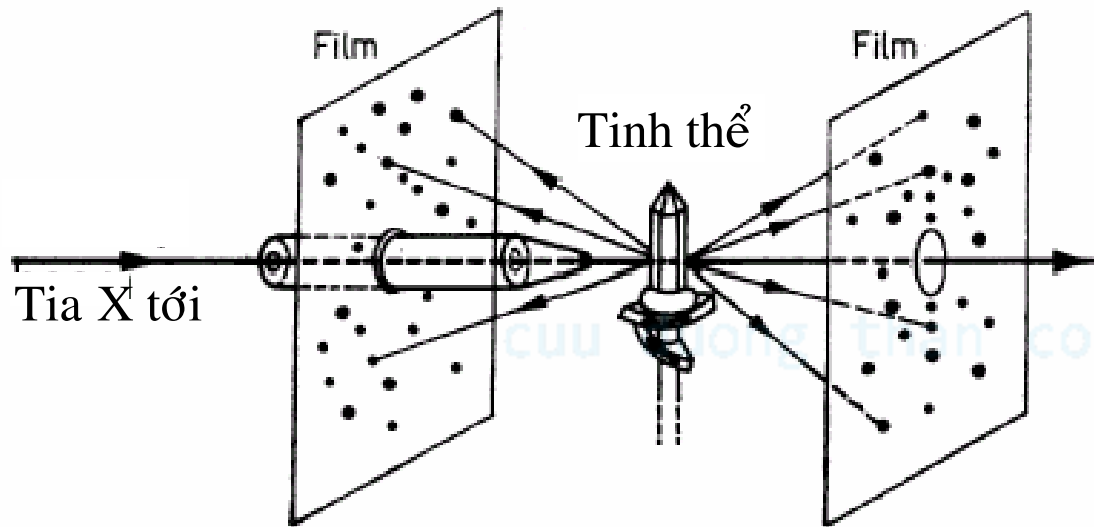
Phương pháp tinh thể quay

Phương pháp Debye – Scherrer (phương pháp bột)•

2) Phương pháp Laue



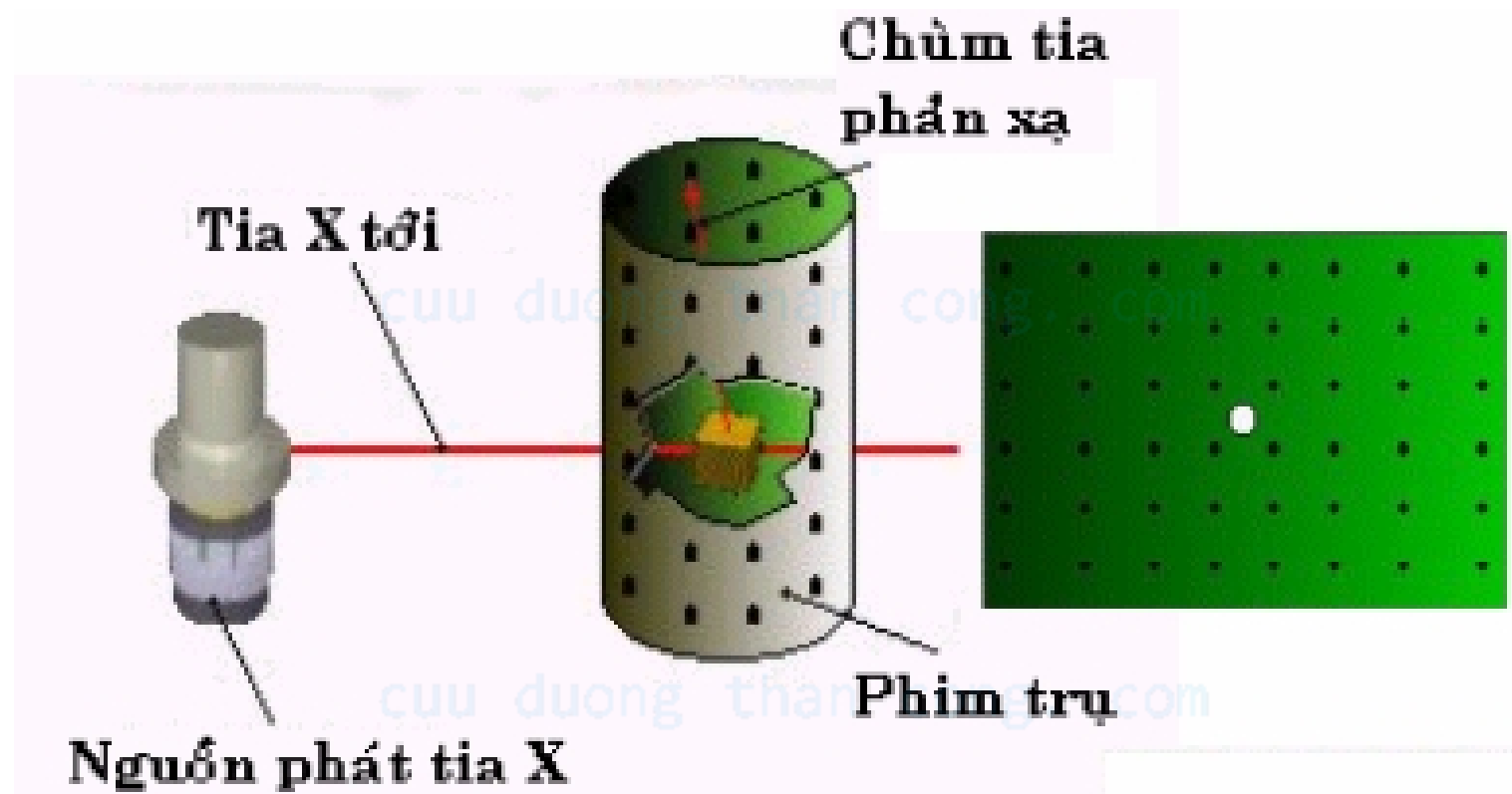
Phương pháp Laue

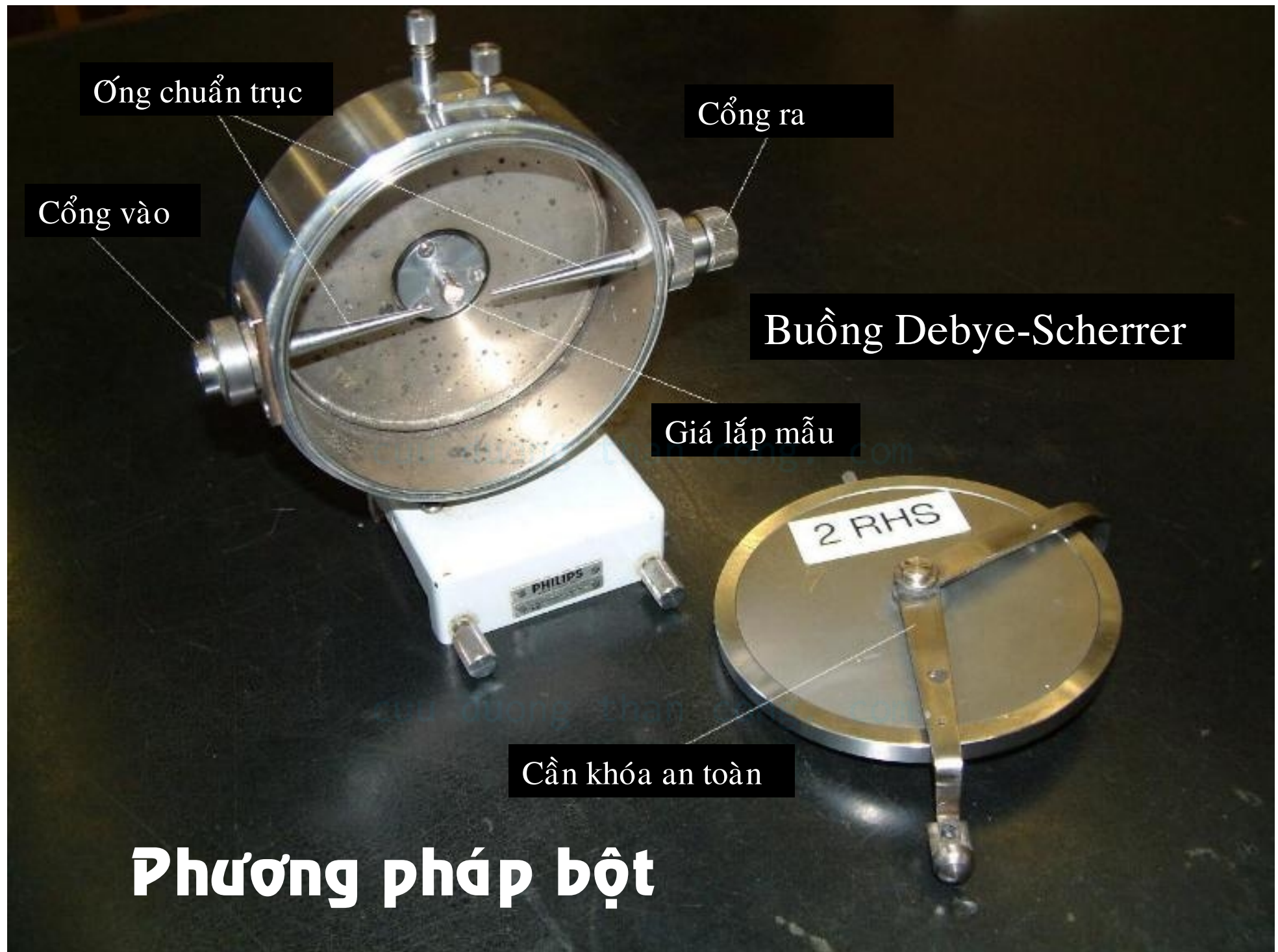


Ảnh nhiễu xạ Laue của Si
theo chiều [001]

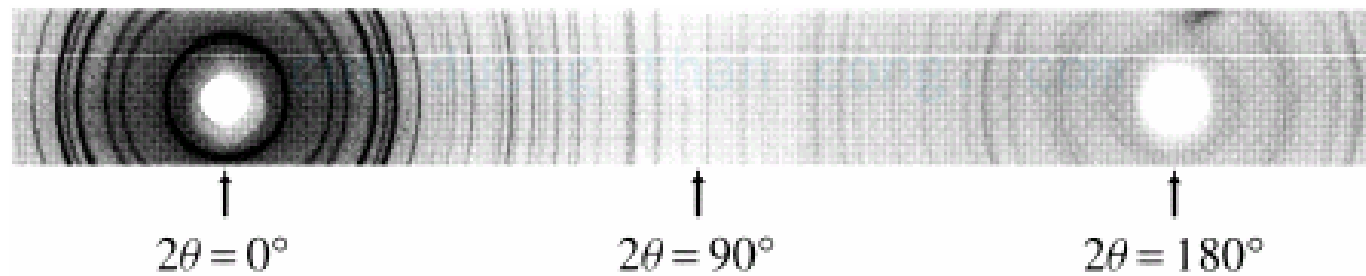
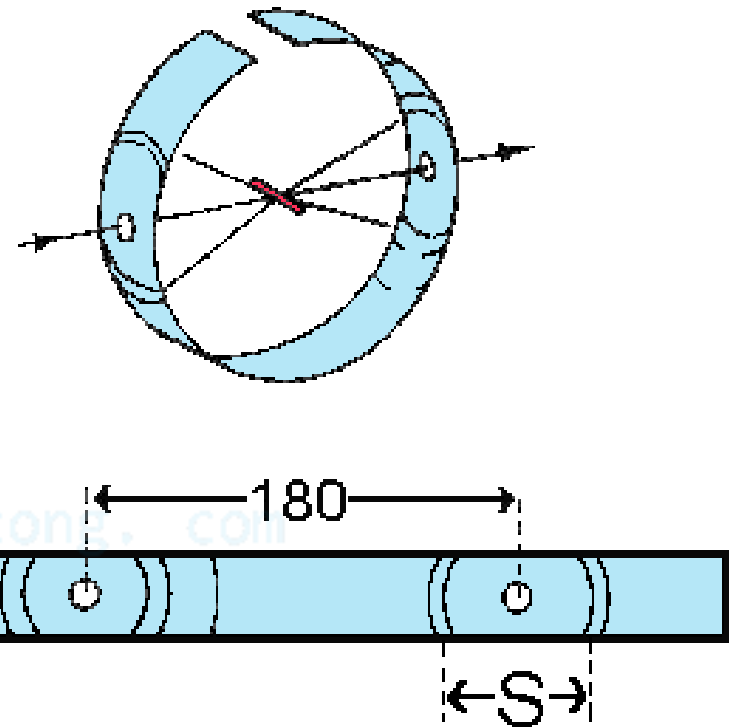
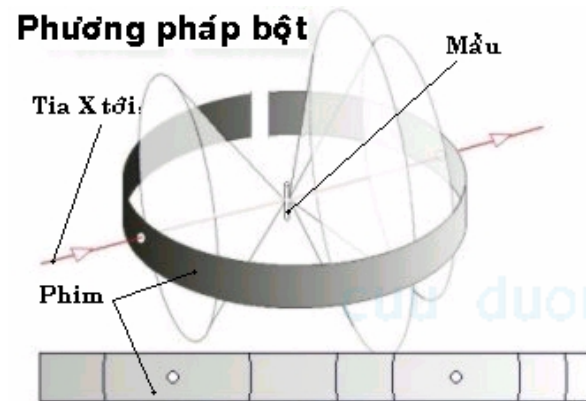
Một điểm tương ứng với một họ mặt tinh thể

3) Phương pháp tinh thể quay





4) Phương pháp bột



Phương pháp bột

