

CHƯƠNG 2

CÁC KHÁI NIỆM CƠ BẢN VỀ MẠNG TINH THỂ

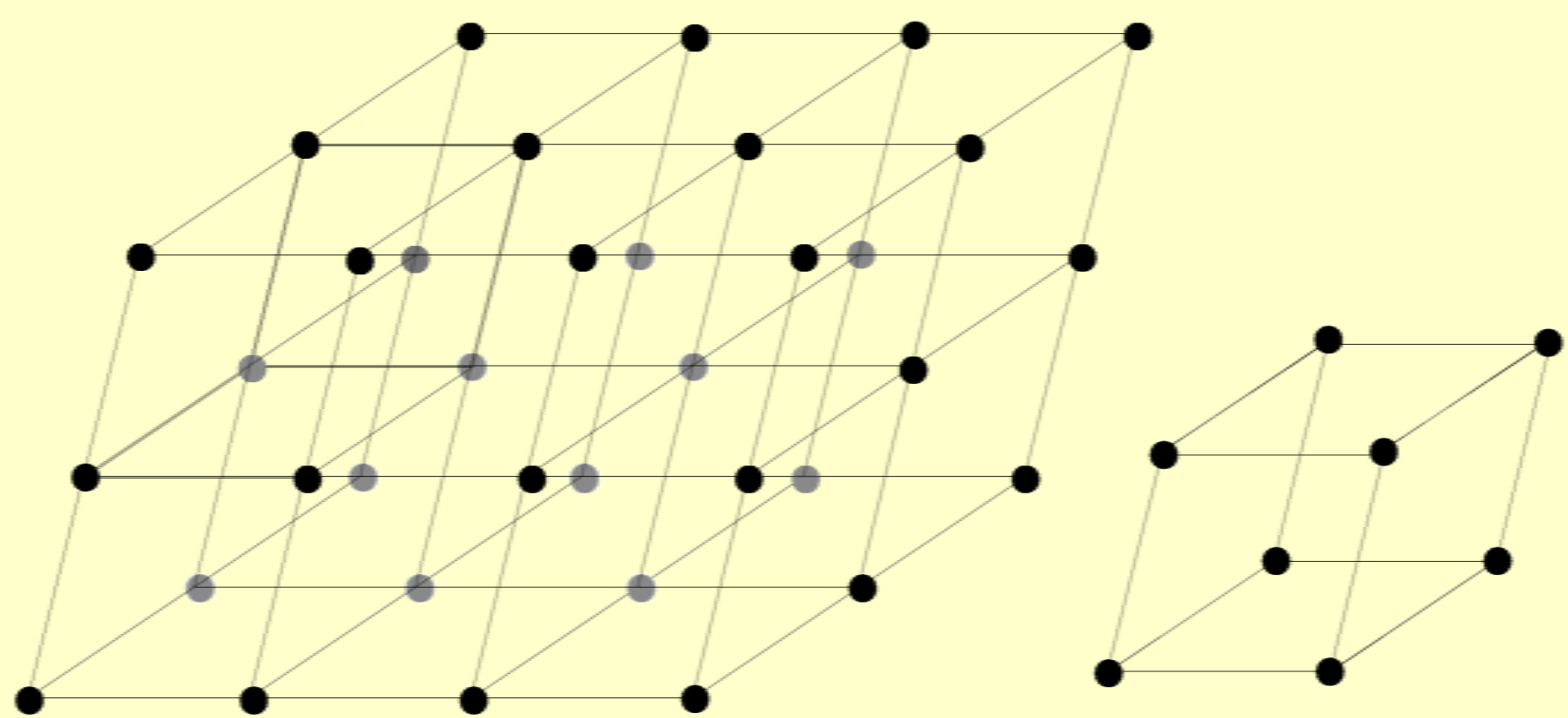
2.1 Sự sắp xếp các nguyên tử trong chất rắn

- Tinh thể chất rắn được đặc trưng bởi sự sắp xếp các nguyên tử một cách đều đặn và có chu kỳ.
- Nếu sự sắp xếp đều đặn này kéo dài trên một khoảng cách lớn, ta có tinh thể lý tưởng, hoặc đơn tinh thể.
- Tinh thể lý tưởng ít gặp trong thực tế mà phải được chế tạo bằng phương pháp đặc biệt.
- Nếu các nguyên tử cũng sắp xếp đều đặn và có chu kỳ nhưng tinh thể có chứa một số lớn khuyết tật ta có tinh thể thực. Dạng này thường gặp trong thực tế.
- Tinh thể thực thường có cấu trúc đa tinh thể: được tạo thành từ một số lớn các vi tinh thể liên kết với nhau qua các vùng biên giới hạt.

2.2 Mạng tinh thể, ô cơ sở

2.2.1 Mạng tinh thể

- Mạng tinh thể là một tập hợp vô hạn các nút (nguyên tử, phân tử hoặc ion) sắp xếp theo một trật tự nhất định.
- Mạng nhận được bằng cách tịnh tiến trong không gian ba vectơ không đồng phẳng. Các vectơ này xác định phương và khoảng cách giữa các nút của mạng.



2.2.2 Đặc điểm mạng tinh thể

- Có sự lặp lại một cách chu kỳ của các nút theo phương bất kỳ trong không gian.
→ khoảng cách giữa các nút gần nhất sẽ giống nhau trên phương chứa hai nút và các phương khác song song với phương đó.
- Mỗi nút mạng đều được bao quanh bởi một số lượng bằng nhau của các nút gần nhất với khoảng cách như nhau.

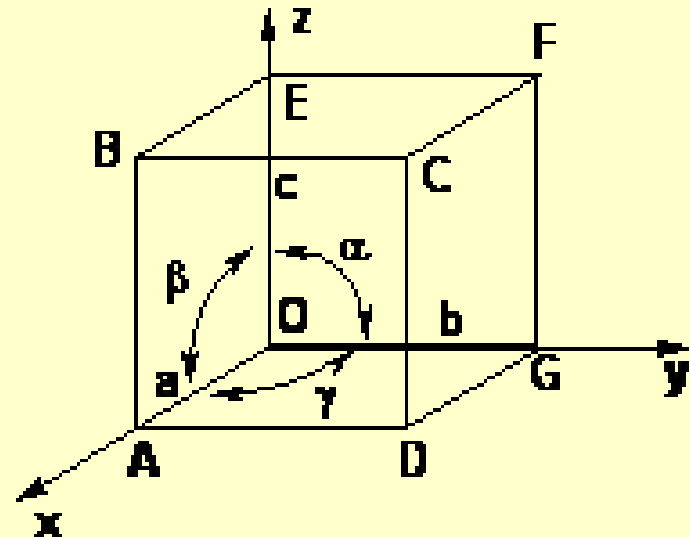
2.2.3 Ô cơ sở

- Mạng có thể xem như được tạo thành bằng cách sắp xếp liên tiếp theo các cạnh a , b , c những hình khối giống nhau gọi là ô cơ sở
- Cách sắp xếp các nút trong ô cơ sở là đại diện chung cho toàn mạng.
- Nguyên tắc chung để lựa chọn ô cơ sở là:
 - Tính đối xứng của ô cơ sở phải là tính đối xứng của tinh thể
 - Có thể tích ô nhỏ nhất hoặc các cạnh bên ngắn nhất
 - Số cạnh bằng nhau và số góc bằng nhau của ô phải nhiều nhất
 - Số góc vuông (nếu có) phải nhiều nhất
 - Ô cơ sở đặc trưng bởi 3 vector $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$ và các góc giữa chúng α, β, γ

$$\alpha = \vec{b} \wedge \vec{c}, \beta = \vec{a} \wedge \vec{c}, \gamma = \vec{a} \wedge \vec{b}$$

$|a|, |b|, |c|$: hằng số mạng

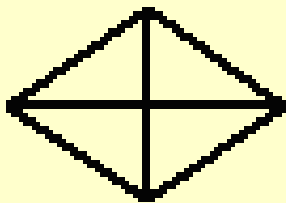
- Thường người ta chọn 3 trục x, y, z định hướng theo các vector $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$ của ô cơ sở. Điểm gốc O được qui ước đặt ở mặt sau bên trái của hình



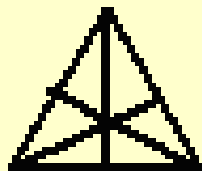
2.3 Các loại cấu trúc tinh thể

2.3.1 Các yếu tố đối xứng

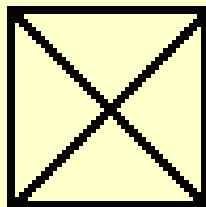
- Yếu tố đối xứng đơn vị E
- Tâm đối xứng i
- Mặt đối xứng
 - σ_v (chứa trục đối xứng chính)
 - σ_h (vuông góc với trục đối xứng chính)
 - σ_d (chứa trục đối xứng chính nhưng nằm giữa hai trục C_2 vuông góc với trục chính)
- Trục đối xứng C_n : Là 1 đường thẳng có trong hình mà khi quay hình quanh trục một góc α với α thì hình được lặp lại đều đặn.
 α là góc quay và n là số lần lặp lại \rightarrow trục bậc n: C_n .



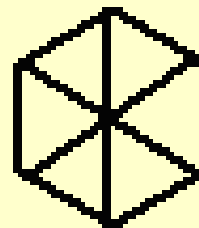
C_2



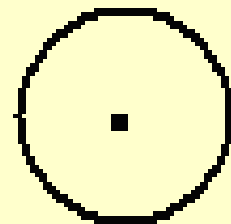
C_3



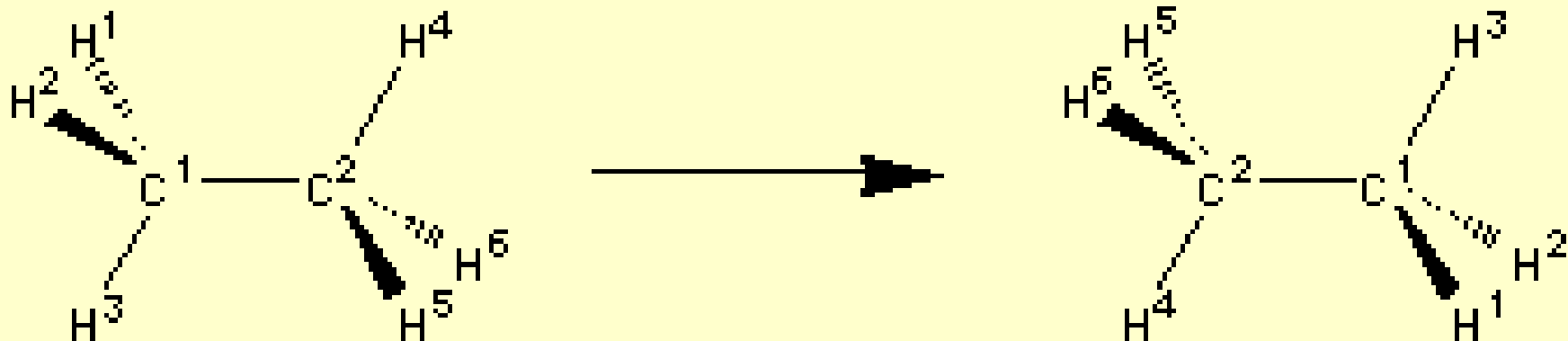
C_4



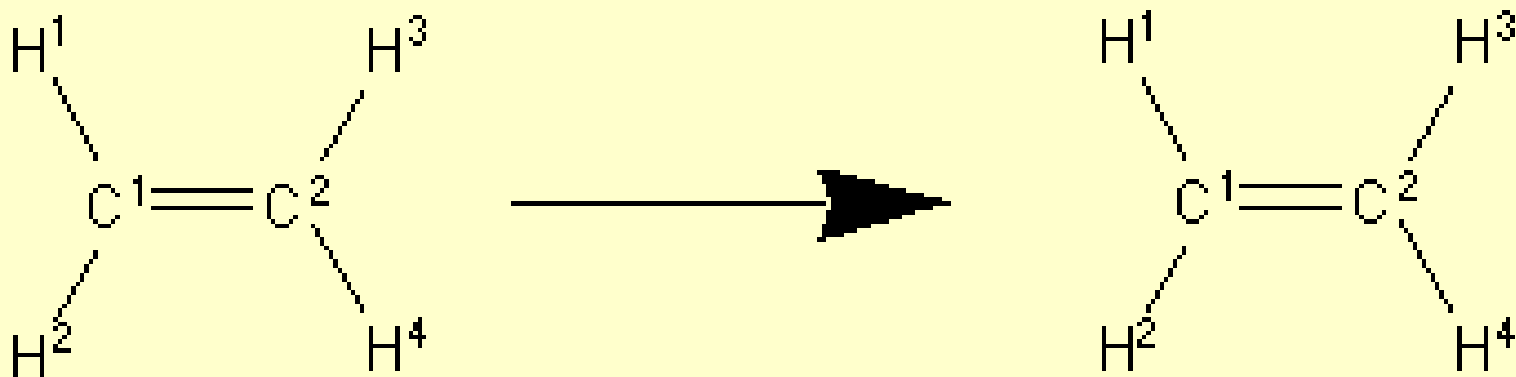
C_6



C_∞

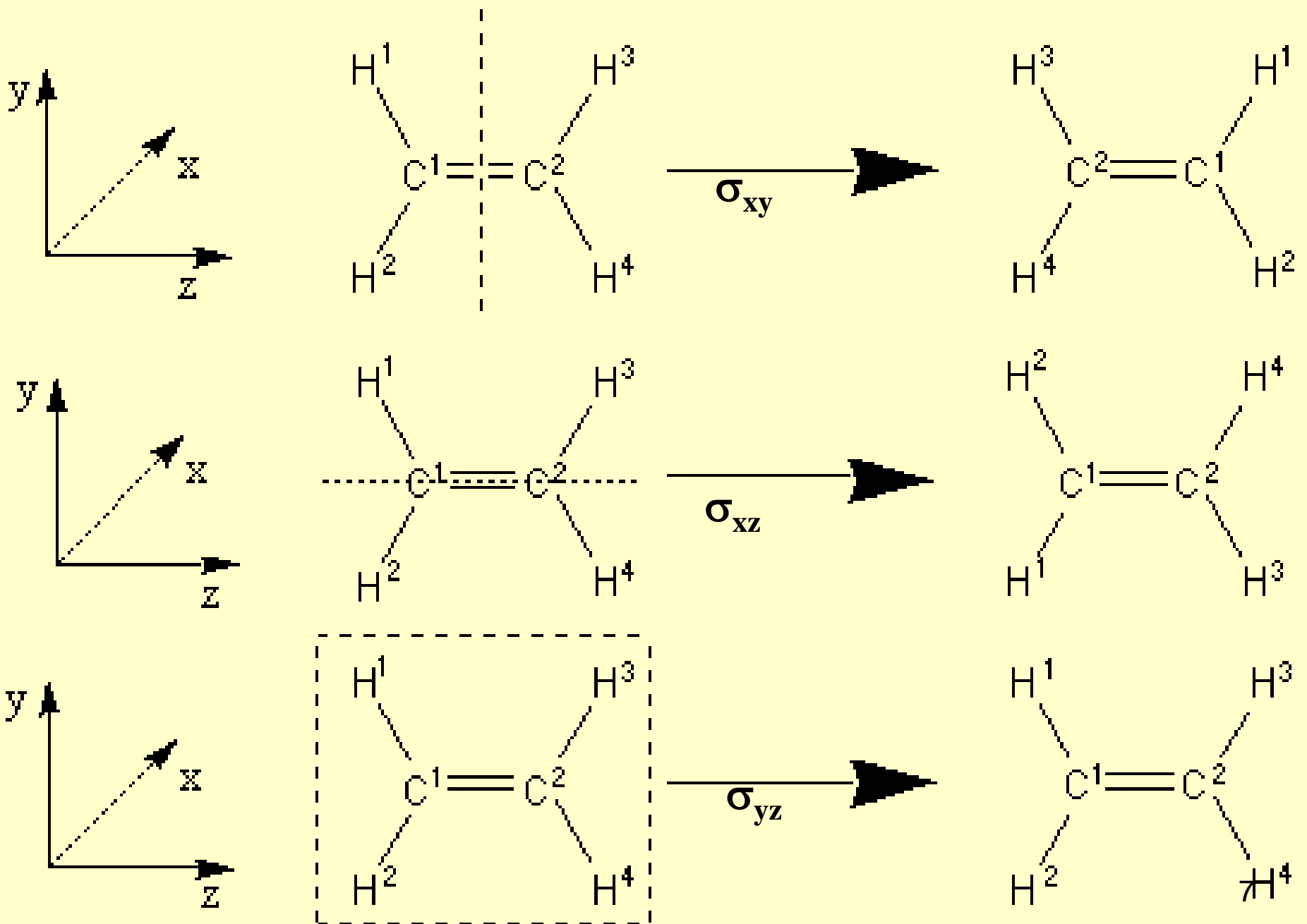


Phép đối xứng tâm i trong methane

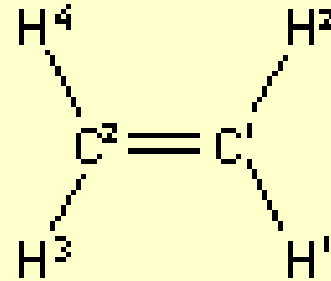
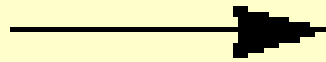
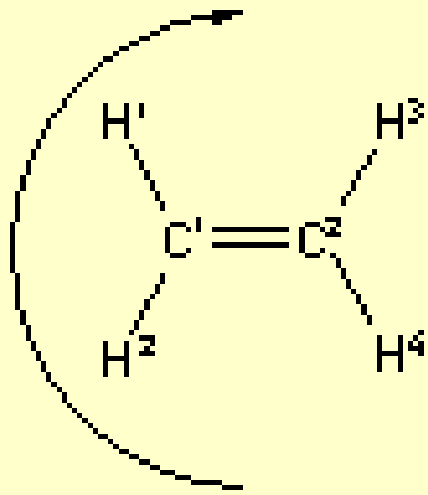


Phép đối xứng đơn vị E trong methane

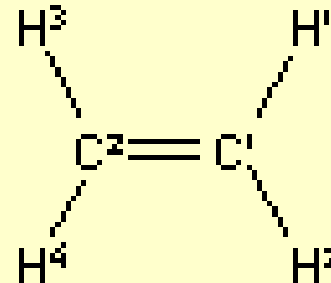
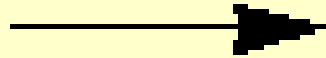
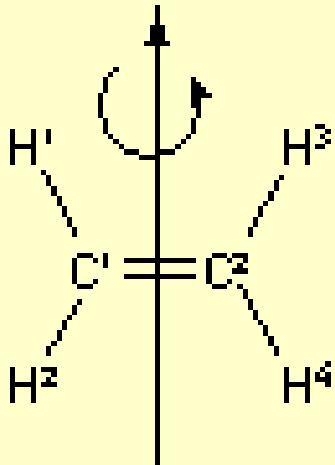
Phép đối xứng mặt σ



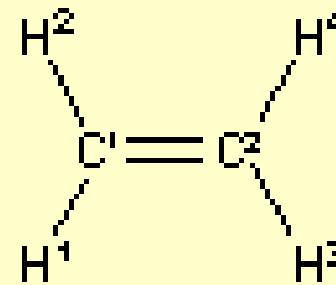
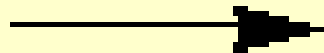
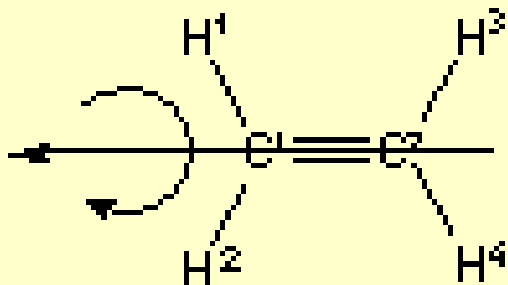
Quay 180° quanh trục x trong ethylene



Quay 180° quanh trục y trong ethylene



Quay 180° quanh trục z trong ethylene

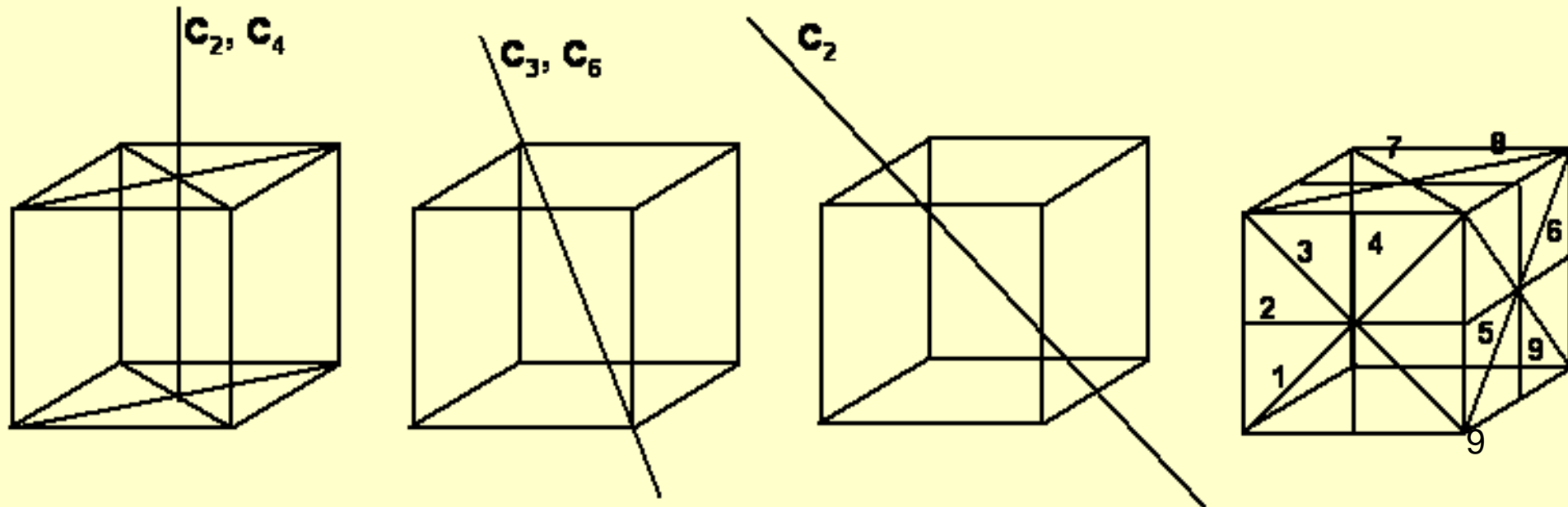


Trong hình lập phương có các yếu tố đối xứng sau:

- Yếu tố đối xứng đơn vị E
- Các trục đối xứng: $3C_2$, $3C_4$ (đường nối tâm các mặt đối nhau); $4C_3$, $4C_6$ (đường nối tâm các đỉnh đối nhau), $6C_2$ (đường nối tâm các cạnh đối nhau)
- Mặt đối xứng: 9 mặt đối xứng

Hình lập phương có các thông số sau:

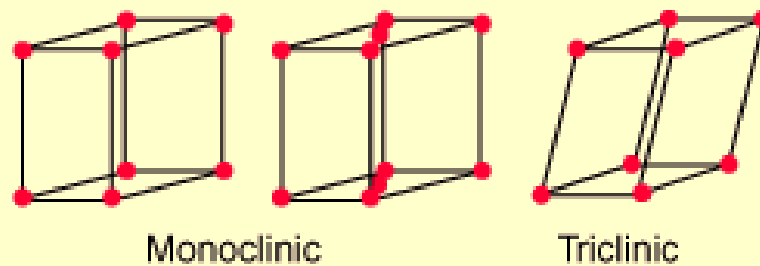
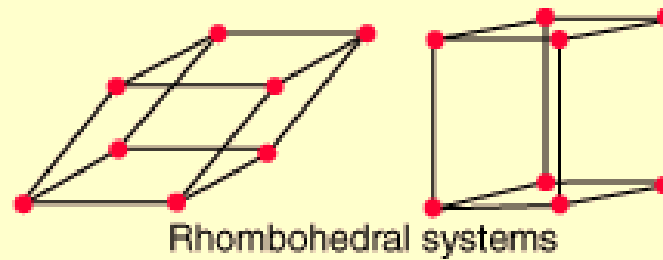
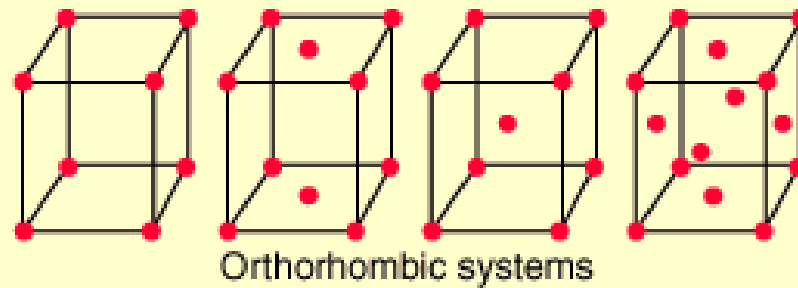
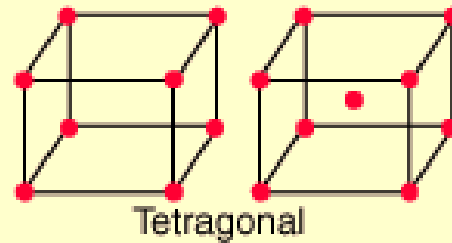
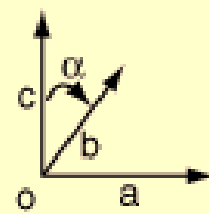
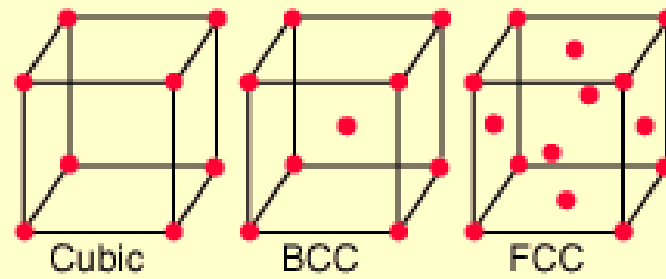
- 6 mặt bên
- Cạnh bên: dài a, số lượng 12
- Đường chéo mặt: dài $a\sqrt{2}$, số lượng 12
- Đường chéo khối: dài $a\sqrt{3}$, số lượng 4



2.3.2 Hệ tinh thể

- Tùy thuộc vào cách sắp xếp giữa ba vector \vec{a} , \vec{b} , \vec{c} mà có tất cả 7 hệ tinh thể
- Từ 7 hệ tinh thể này, tùy cách phân bố các nút mà có 14 kiểu ô mạng Bravais.

| STT | Tên hệ | Đặc trưng hình học | | Yếu tố đx tiêu biểu | Ô góc | Tâm đáy | Tâm khối | Tâm mặt |
|-----|------------------------------|--------------------|--|------------------------------|-------|------------|-------------|------------|
| 1 | Triclinic (Tam tà) | $a \neq b \neq c$ | $\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^0$ | C_1 | x | | | |
| 2 | Monoclinic (Đơn tà) | $a \neq b \neq c$ | $\alpha = \gamma = 90^0 \neq \beta$ | C_2 | x | x | | |
| 3 | Rhombohedral (Mặt thoi) | $a = b = c$ | $\alpha = \beta = \gamma \neq 90^0$ | C_3 | x | | | |
| 4 | Tetragonal (Chính phương) | $a = b \neq c$ | $\alpha = \beta = \gamma = 90^0$ | C_4 | x | | x | |
| 5 | Hexagonal (Lục giác) | $a = b \neq c$ | $\alpha = \beta = 90^0,$ $\gamma = 120^0$ | C_6 | | x | | |
| 6 | Orthorhombic (Tà phương) | $a \neq b \neq c$ | $\alpha = \beta = \gamma = 90^0$ | $3C_2$ | x | x | x | x |
| 7 | Cubic (Lập phương) | $a = b = c$ | $\alpha = \beta = \gamma = 90^0$ | $4C_3$ | x | | x | 10 x |



2.4 Ký hiệu phương, mặt theo chỉ số Miller

2.4.1 Ký hiệu phương tinh thể [uvw]

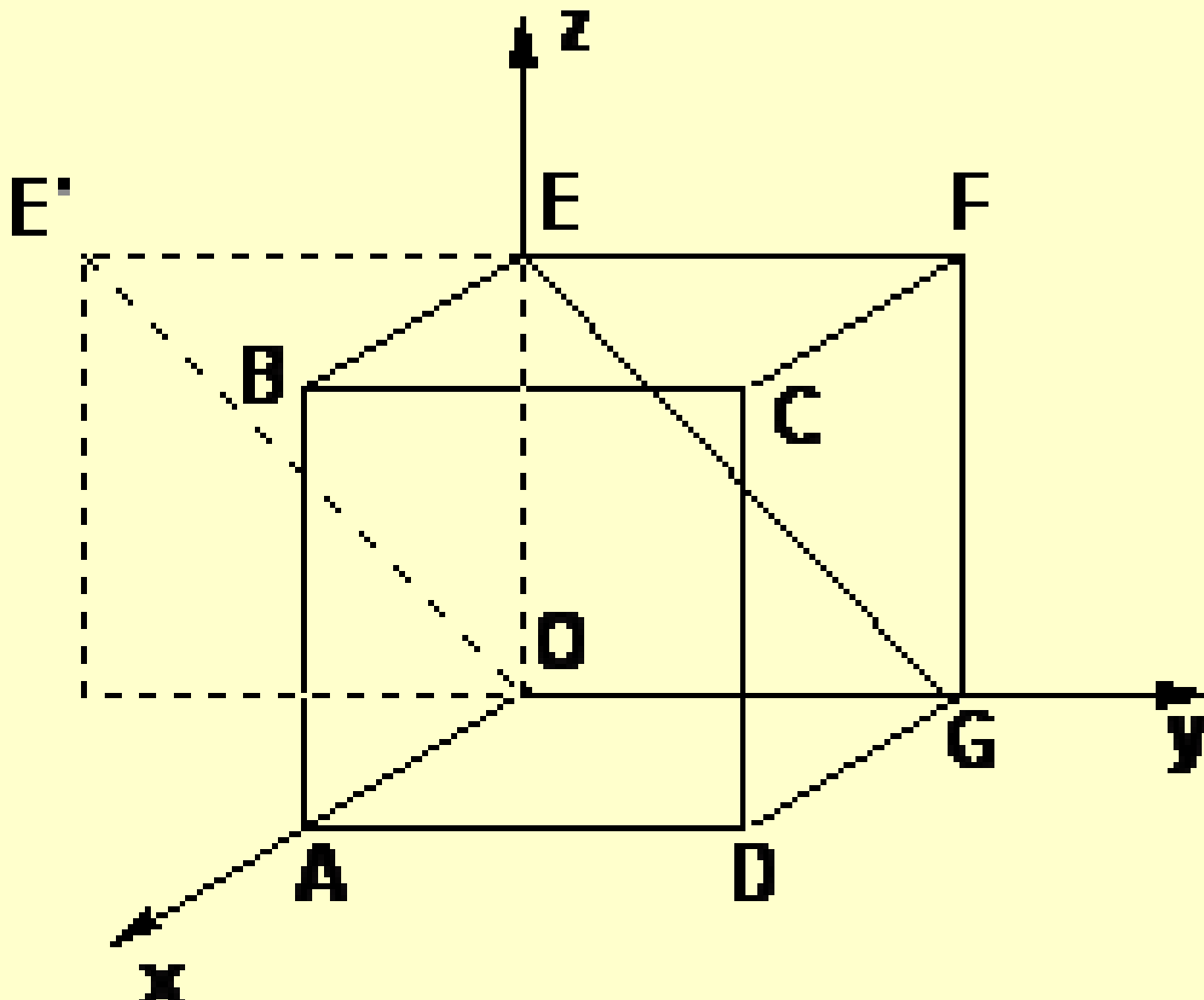
Mọi đường thẳng song song đều có cách sắp xếp các nút giống nhau và được đại diện bằng ký hiệu phương tinh thể đi qua gốc trục và song song với phương cần xác định.

Cách tìm và ví dụ

- Từ gốc trục tọa độ vẽ đường thẳng song song với phương cần xác định
- Tìm tọa độ nút mạng gần gốc trục nhất trên đường thẳng đó. Nếu tọa độ nút mạng là (p, q, r) thì ký hiệu phương là $[pqr]$
- Nếu tọa độ là phân số thì qui đồng mẫu số. Tử số là u, v, w thì ký hiệu là $[uvw]$
- Nếu tọa độ có dấu âm thì trên đầu chỉ số tương ứng ghi dấu –

Hệ phương và ví dụ

- $[uvw]$ là ký hiệu của phương $[uvw]$ và các phương khác song song với phương này.
- Trong hệ đối xứng cao (lập phương), nhiều phương không song song, có ký hiệu khác nhau, nhưng lại có cách sắp xếp các nút giống nhau nên được coi là cùng nằm trong một hệ phương và ký hiệu $\langle uvw \rangle$.
- Các phương trong một hệ có các trị tuyệt đối uvw giống nhau và có thể hoán vị chỗ cho nhau.



2.4.2 Ký hiệu mặt tinh thể (hkl)

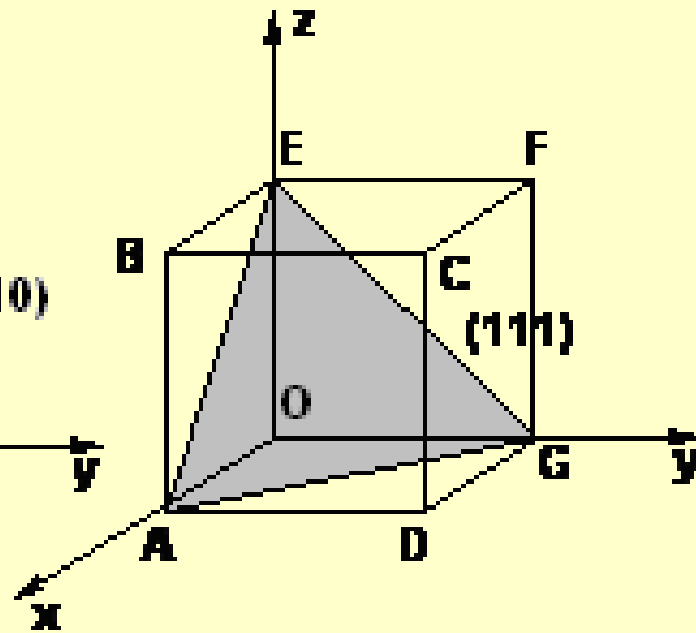
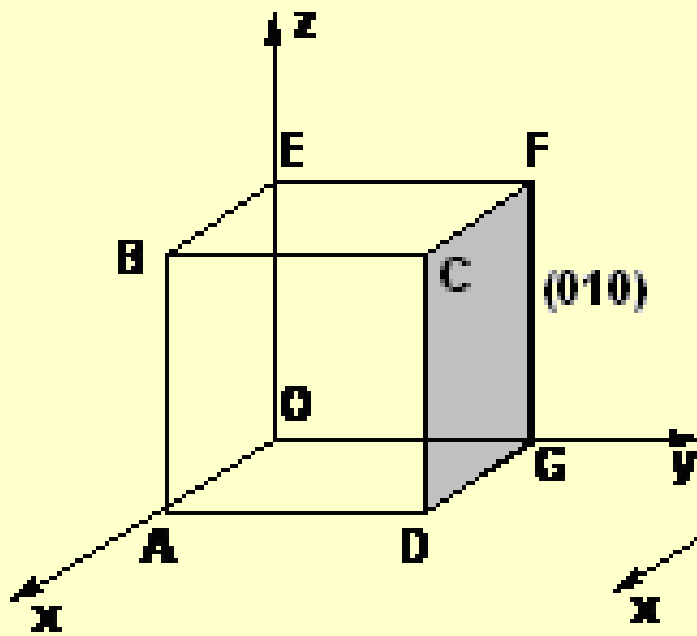
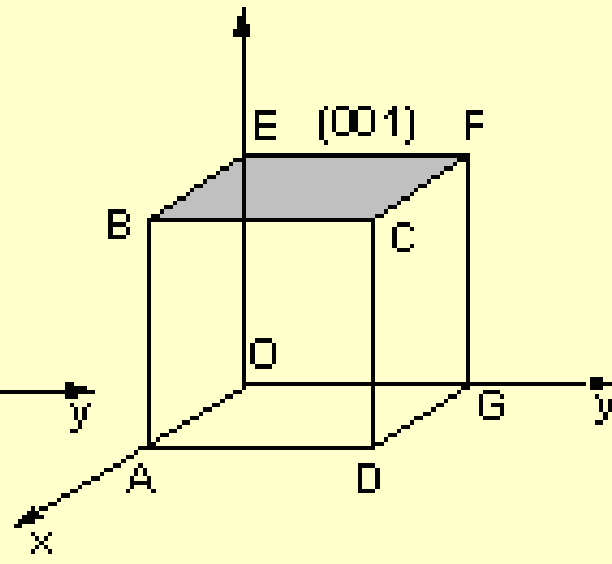
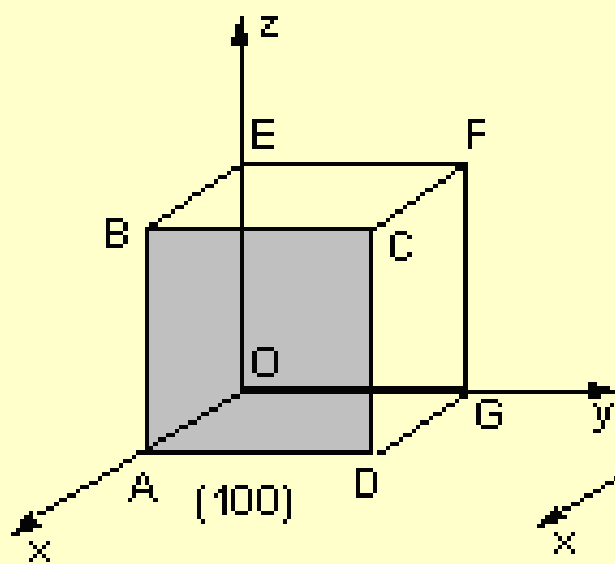
Các mặt song song đều có cách sắp xếp các nút giống nhau và được đại diện bằng ký hiệu một mặt gần gốc trục nhất (nằm trong ô cơ sở) trong số các mặt song song đó. Như vậy các mặt song song sẽ có ký hiệu giống nhau hoặc có thừa số chung.

Cách tìm và ví dụ

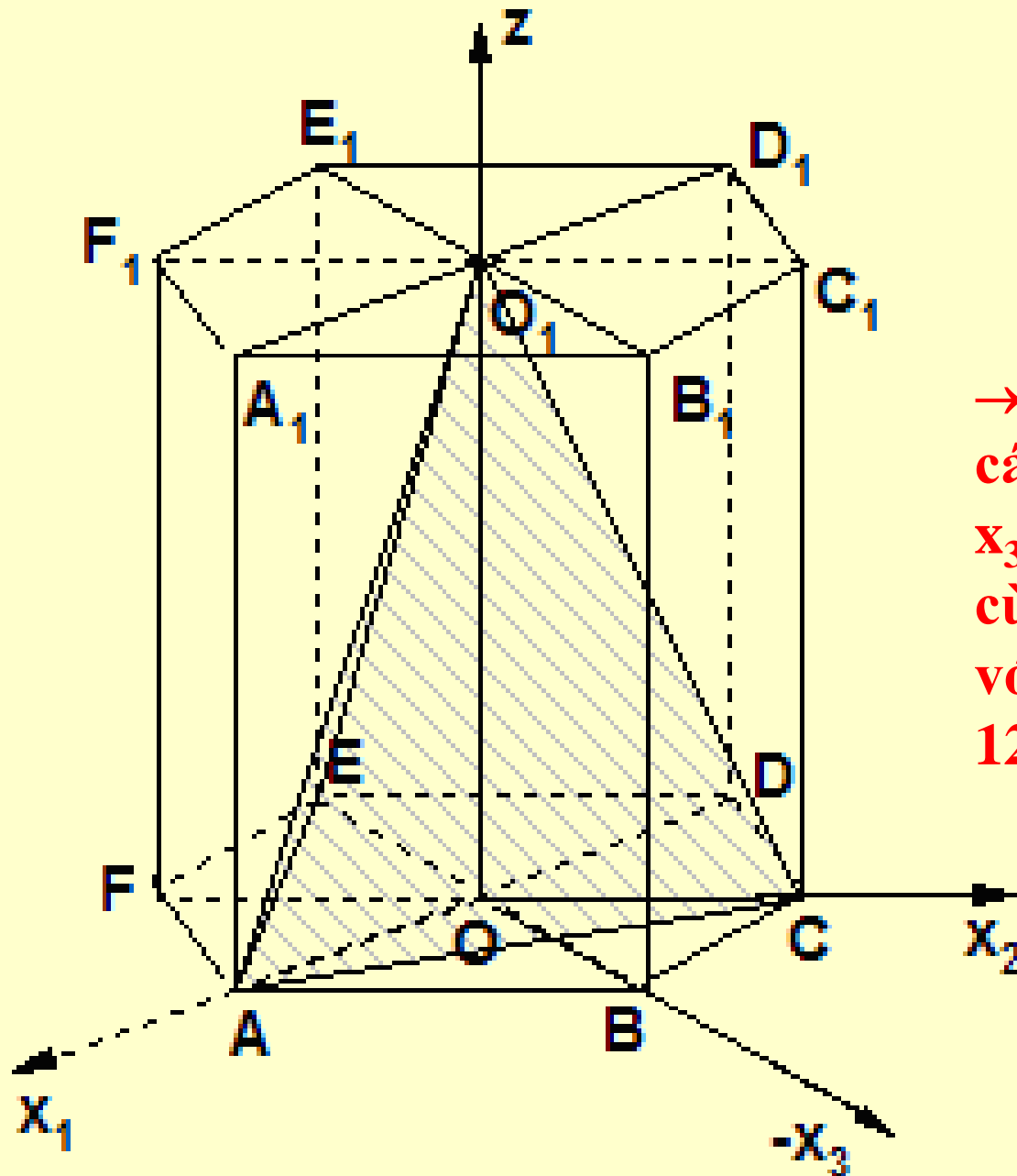
- Tìm giao điểm mặt với 3 trục x, y, z .
- Nếu mặt đi qua gốc trục, chọn mặt khác gần gốc trục nhất (nằm trong ô cơ sở) và song song với mặt đã cho. Tọa độ 3 giao điểm là $(p,0,0)$ $(0,q,0)$ $(0,0,r)$.
- Lấy rồi qui đồng mẫu số. Tử số là h, k, l thì ký hiệu mặt là (hkl)
- Nếu tọa độ có dấu trừ thì đặt dấu $-$ ở trên đầu chỉ số tương ứng

Hệ mặt và ví dụ

- (hkl) là ký hiệu của mặt (hkl) và các mặt phẳng khác song song với mặt phẳng này.
- Ngoài ra do tính đối xứng cao nên nhiều mặt không song song, có ký hiệu khác nhau, nhưng có cùng cách sắp xếp các nút sẽ tạo thành hệ mặt; ký hiệu $\{hkl\}$ ₁₄



2.4.3 Ký hiệu trong hệ sáu phương

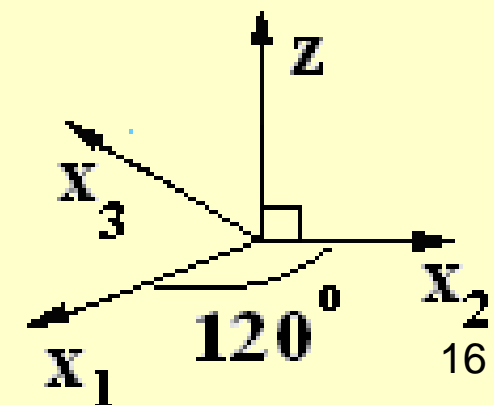


$O_1AC: (111)$

$O_1AE: (1\bar{2}1)$

→ không cùng hệ

→ Bravais bổ sung bằng cách dùng bốn trục x_1, x_2, x_3, z với x_1, x_2, x_3 nằm trên cùng mặt phẳng vuông góc với trục z và cách nhau 120° .



Ký hiệu phương [uvw]

p, q, r là tọa độ điểm trong hệ x, y, z thì u, v, w xác định theo:

$$u' = \frac{2p - q}{3}, v' = \frac{2q - p}{3}, w' = -\frac{p + q}{3}, r' = r$$

Ví dụ: Tìm phương x_1 : A có tọa độ (1,0,0) trong hệ xyz

$$u' = \frac{2 \cdot 1 - 0}{3} = \frac{2}{3}, v' = \frac{2 \cdot 0 - 1}{3} = -\frac{1}{3}, w' = -\frac{0 + 1}{3} = -\frac{1}{3},$$

$$r = r' = 0 \Rightarrow 2, -1, -1, 0 \Rightarrow [2 \bar{1} \bar{1} 0]$$

$$x_2 [\bar{1} 2 \bar{1} 0] \quad x_3 [11 \bar{2} 0] \quad z[0001]$$

Ký hiệu mặt (hkil)

(tìm như với ký hiệu của Miller), khi đó

$$O_1AC \quad (11 \bar{2} 1) \quad O_1AE \quad (1 \bar{2} 11) \Rightarrow \text{cùng hệ}$$

$$ABA_1B_1 \quad (10 \bar{1} 0)$$

2.4.4 Khoảng cách mặt (interplanar spacing)

- Khoảng cách mặt là khoảng cách gần nhất giữa các mặt tinh thể song song,
- chính là khoảng cách từ gốc đến mặt nằm gần gốc trực nhất (hkl) và bằng đoạn thẳng vuông góc hạ từ gốc trục đến mặt (hkl)

$$d_{hkl} = \frac{1}{\sqrt{\left(\frac{h}{a}\right)^2 + \left(\frac{k}{b}\right)^2 + \left(\frac{l}{c}\right)^2}}$$

Trong hệ chính phương $a = b$

$$d = \frac{1}{\sqrt{\frac{h^2 + k^2}{a^2} + \frac{l^2}{c^2}}}$$

Trong hệ lập phương $a = b = c$

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

2.4.5 Góc giữa hai phương cho trước

Giả sử có 2 phương $L_1 [u_1 v_1 w_1]$, $L_2 [u_2 v_2 w_2]$. Tính góc giữa hai phương

$$\cos \varphi = \frac{1}{N_1 \cdot N_2} (a^2 \cdot u_1 u_2 + b^2 \cdot v_1 v_2 + c^2 \cdot w_1 w_2)$$

$$N_i = \sqrt{u_i^2 a^2 + v_i^2 b^2 + w_i^2 c^2}$$

Đối với hệ lập phương $\cos \varphi = \frac{1}{N'_1 N'_2} (u_1 u_2 + v_1 v_2 + w_1 w_2)$

$$N'_i = \sqrt{u_i^2 + v_i^2 + w_i^2}$$

3.4.6 Góc giữa phương và mặt tinh thể

Tìm góc giữa phương $L [uvw]$ và mặt $P (hkl)$

$$\cos \varphi = \frac{1}{M \cdot N} (hu + kv + lw) \quad M = \sqrt{\frac{h^2}{a^2} + \frac{k^2}{b^2} + \frac{l^2}{c^2}}$$

$$N = \sqrt{u^2 a^2 + v^2 b^2 + w^2 c^2}$$

Đối với hệ lập phương

$$\cos \varphi = \frac{1}{M' N'} (hu + kv + lw)$$

$$M' = \sqrt{h^2 + k^2 + l^2}$$

$$N' = \sqrt{u^2 + v^2 + w^2}$$