ĐẠI HỌC QUỐC GIA THÀNH PHỐ HỒ CHÍ MINH

TRƯỜNG ĐẠI HỌC KHOA HỌC TỰ NHIÊN

BỘ MÔN VẬT LÝ CHẤT RẮN

BÀI GIẢNG MÔN

CƠ SỞ VẬT LÝ CHẤT RẮN

3 TÍN CHỈ (45TIẾT: 30 TIẾT LÝ THUYẾT + 15 TIẾT BÀI TẬP)

CÁN BỘ GIẢNG DẠY: **Ths. Vũ Thị Phát Minh**

GIÁO TRÌNH SỬ DỤNG CHO MÔN HỌC: **VẬT LÝ CHẤT RẮN**

CỦA TÁC GIẢ: **LÊ KHẮC BÌNH – NGUYỄN NHẬT KHANH**

NỘI DUNG MÔN HỌC

I. TINH THỂ CHẤT RẮN.
II. LIÊN KẾT TRONG TINH THỂ CHẤT RẮN.
III. DAO ĐỘNG MẠNG TINH THỂ.
IV. TÍNH CHẤT NHIỆT CỦA CHẤT RẮN.
V. KHÍ ĐIỆN TỬ TỰ DO TRONG KIM LOẠI.
VI. NĂNG LƯỢNG CỦA ĐIỆN TỬ TRONG TINH THỂ CHẤT RẮN.
VII. CÁC CHẤT BÁN DẪN ĐIỆN.

CHƯƠNG I. TINH THỂ CHẤT RẮN

A.LÝ THUYẾT

Phần I. ĐẠI CƯƠNG VỀ TINH THỂ

I. CÁC TRẠNG THÁI CƠ BẢN CỦA VẬT CHẤT TRONG TỰ NHIÊN.

II. MẠNG TINH THỂ

Phần II. PHÂN TÍCH CẤU TRÚC TINH THỂ BẰNG PHƯƠNG PHÁP NHIỄU XẠ TIA X.

I. CÔNG THỨC NHIỄU XẠ CỦA VULF – BRAGG

II. CẦU PHẢN XẠ CỦA EWALD

III. CÁC PHƯƠNG PHÁP CHỤP TINH THỂ BẰNG TIA X

B.BÀI TẬP

Chương I- TINH THỂ CHẤT RẮN

PHẦN I - ĐẠI CƯƠNG VỀ TINH THỂ

I. CÁC TRẠNG THÁI CƠ BẢN CỦA VẬT CHẤT TRONG TỰ NHIÊN.

II. MẠNG TINH THỂ.

I. CÁC TRẠNG THÁI CƠ BẢN CỦA VẬT CHẤT TRONG TỰ NHIÊN

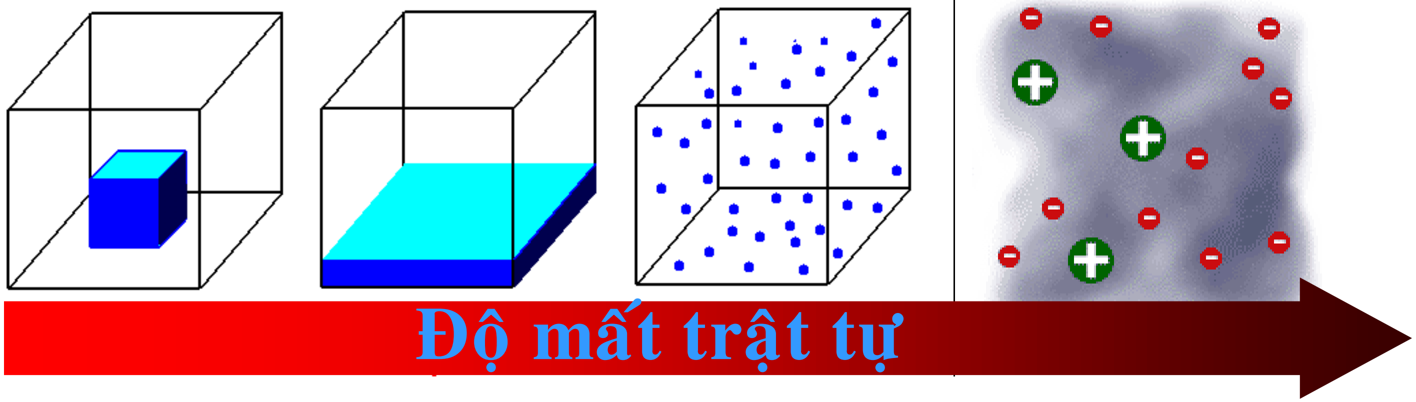
- Trong tự nhiên vật chất tồn tại dưới 3 trạng thái cơ bản (các trạng thái ngưng tụ của vật chất):

RẮN - LỎNG - KHÍ

Rắn = Tinh thể + vô định hình

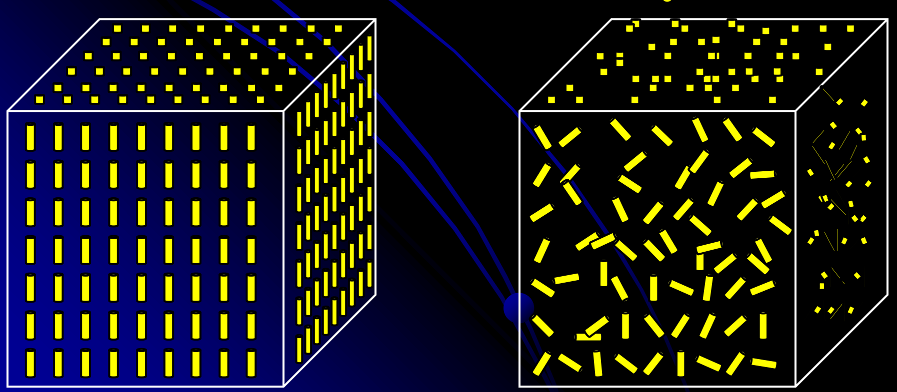
- **Cấu trúc :**
  - Tinh thể : cấu trúc có độ trật tự cao nhất.
  - Khí : cấu trúc hoàn toàn mất trật tự.
  - Lỏng: phân tích cấu trúc bằng tia X, tia e^- và nơtron với phương pháp chủ yếu của Debye và Laue $\Rightarrow$ cấu trúc lỏng gần với tinh thể hơn khí.

Các trạng thái của vật chất



Thể RẮN — Thể LỎNG — Thể KHÍ — Thể PLASMA

Tinh thể **Vô định hình** **Chất lưu**



MỘT SỐ TINH THỂ TRONG TỰ NHIÊN

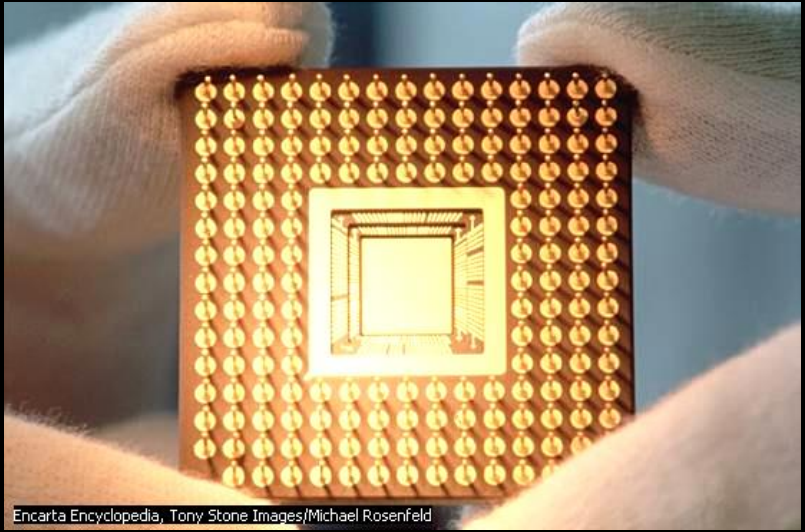
Đường

Thạch anh

Kim cương

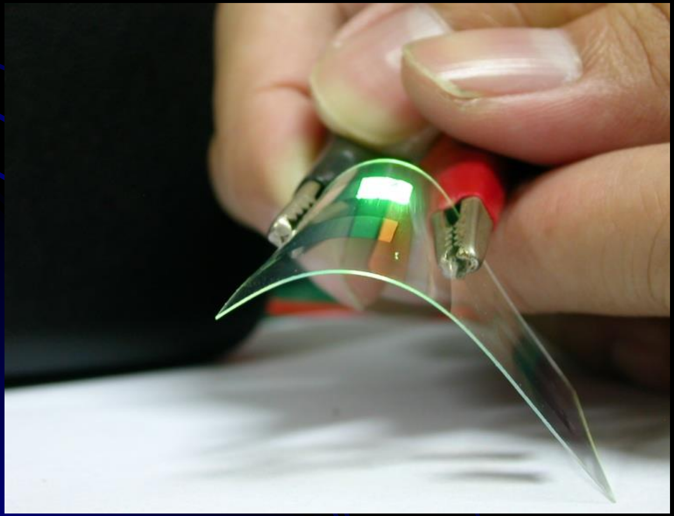
Pyrite

MỘT SỐ ỨNG DỤNG

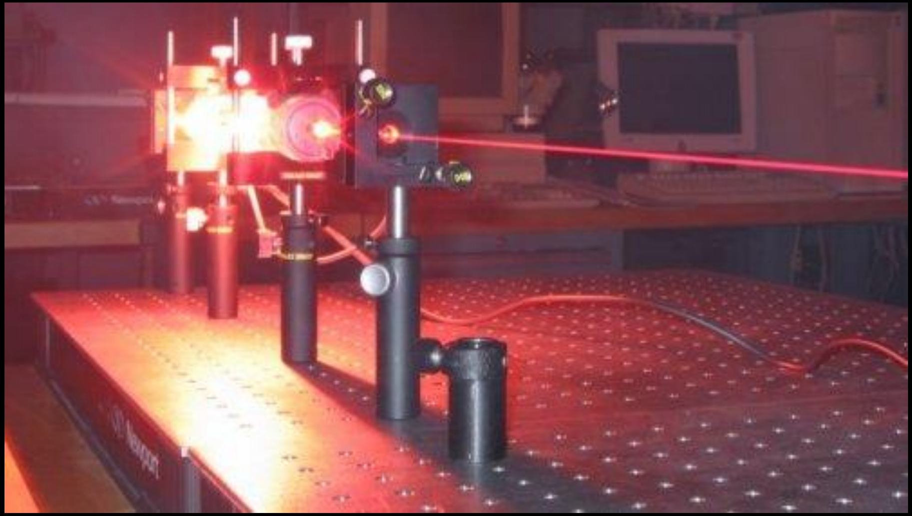


Bán dẫn

Siêu dẫn



Màn hiển thị



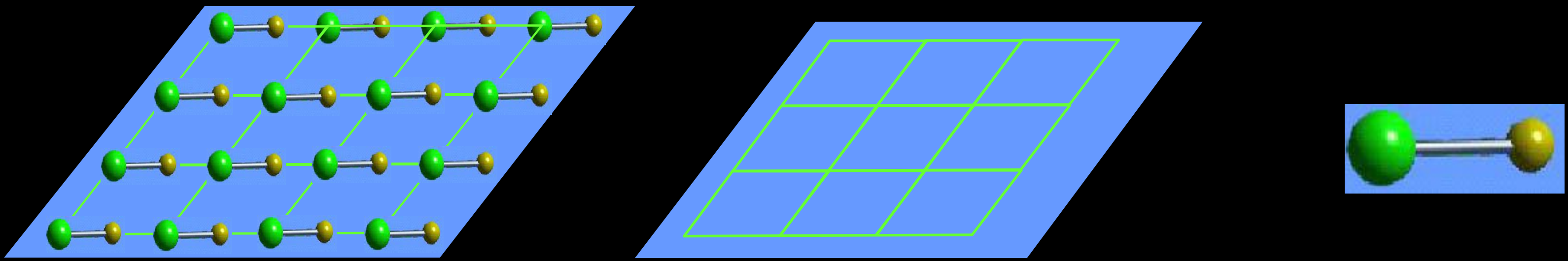
Laser

II. MẠNG TINH THỂ

A. CẤU TRÚC TINH THỂ

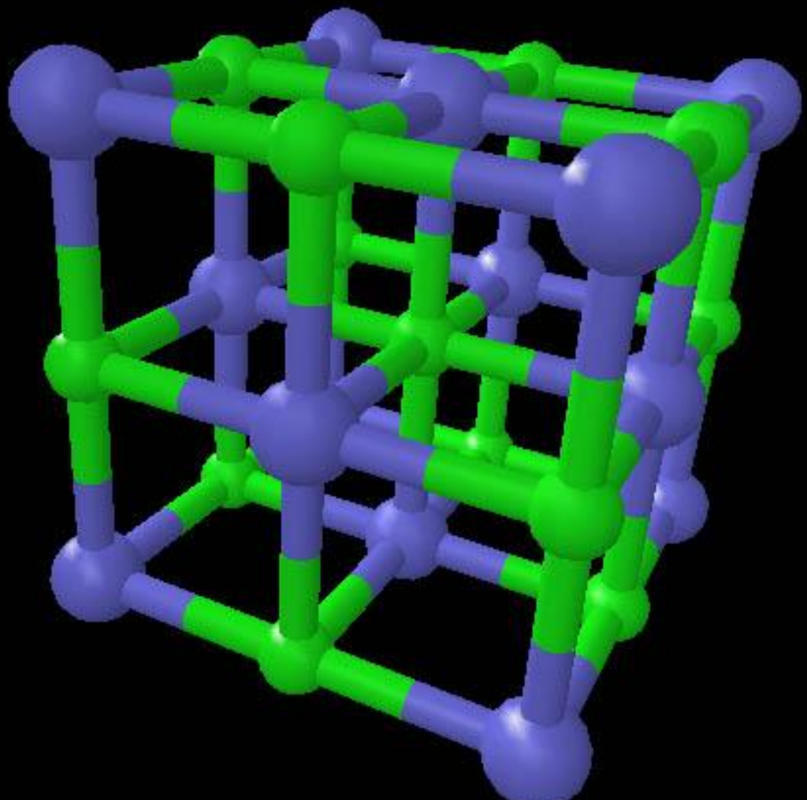
- Mạng tinh thể dùng mô tả cấu trúc tinh thể.

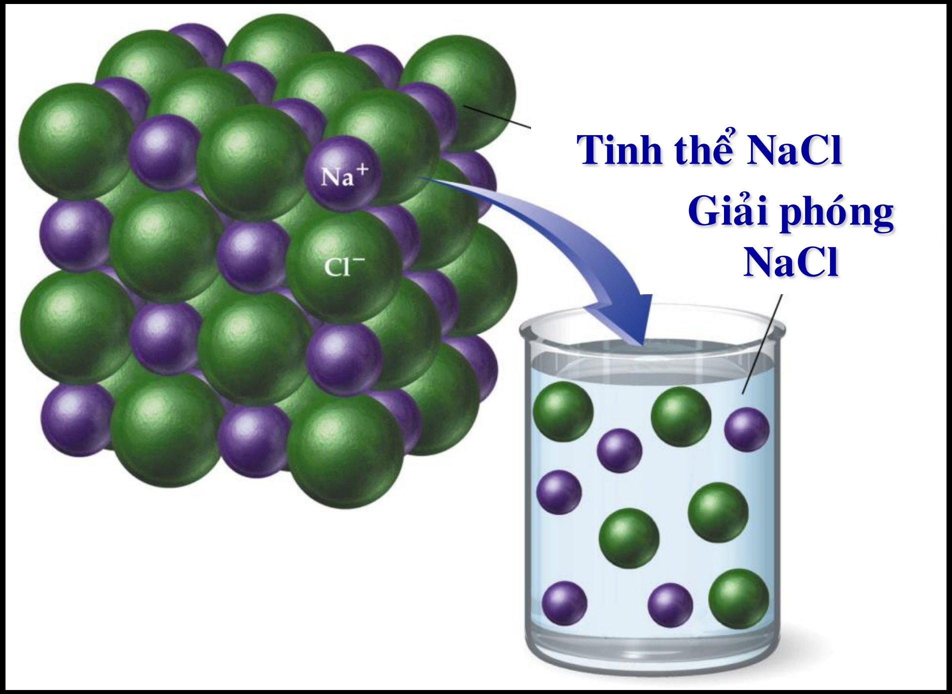
Cấu trúc tinh thể = mạng tinh thể + cơ sở

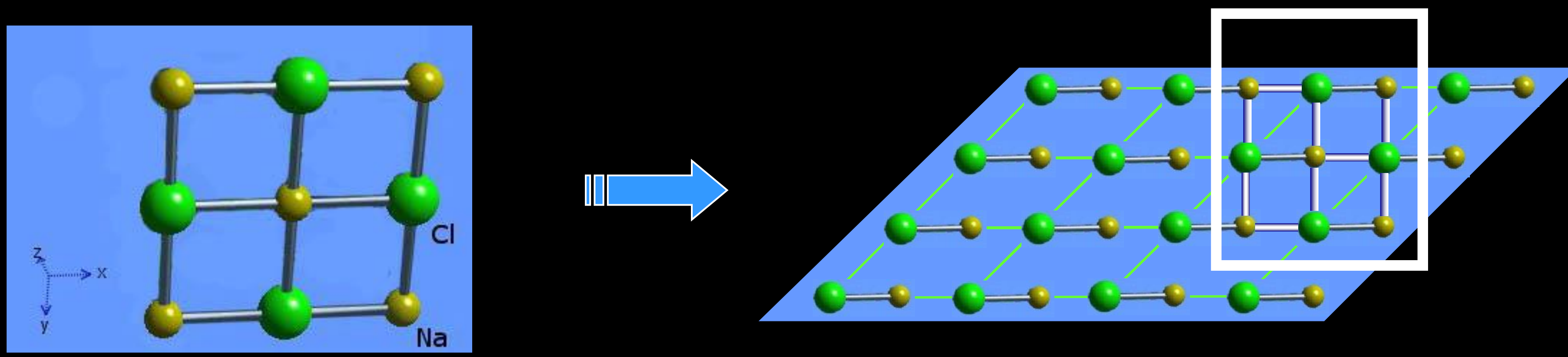


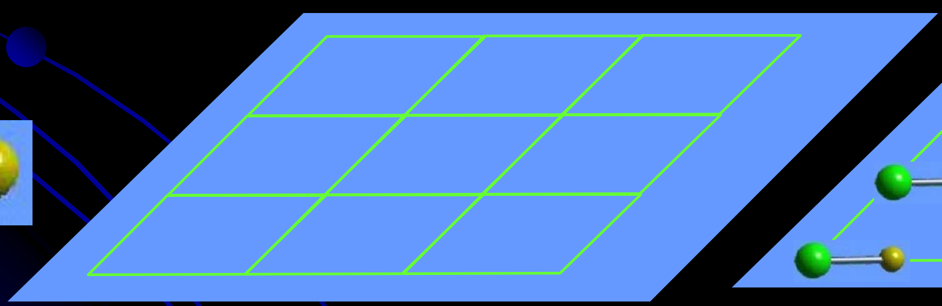
- Tinh thể lí tưởng = sự sắp xếp đều đặn trong không gian các đơn vị cấu trúc giống hệt nhau.
- Đơn vị cấu trúc = cơ sở = một nguyên tử, một nhóm nguyên tử hay các phân tử (có thể tới hàng trăm nguyên tử hay phân tử. VD: chất hữu cơ)

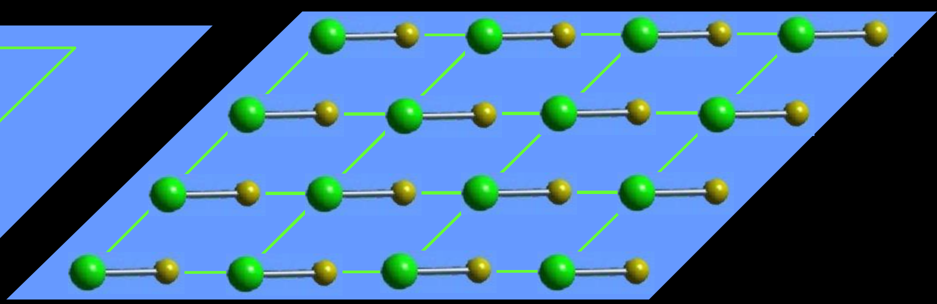
MẠNG TINH THỂ NaCl











Cơ sở + Mạng tinh thể = Cấu trúc tinh thể

B- BIỂU DIỄN MẠNG TINH THỂ

1. TÍNH TUẦN HOÀN MẠNG

- **Mọi nút của mạng đều suy được từ một nút gốc bằng những phép tịnh tiến :**

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

$\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$ **là 3 vectơ tịnh tiến không đồng phẳng =** ***Véc tơ tịnh tiến cơ sở.***

$\vec{T}$ **= véctơ tịnh tiến bảo toàn mạng tinh thể.**

n_1, n_2, n_3 là những số nguyên hay phân số nào đó.

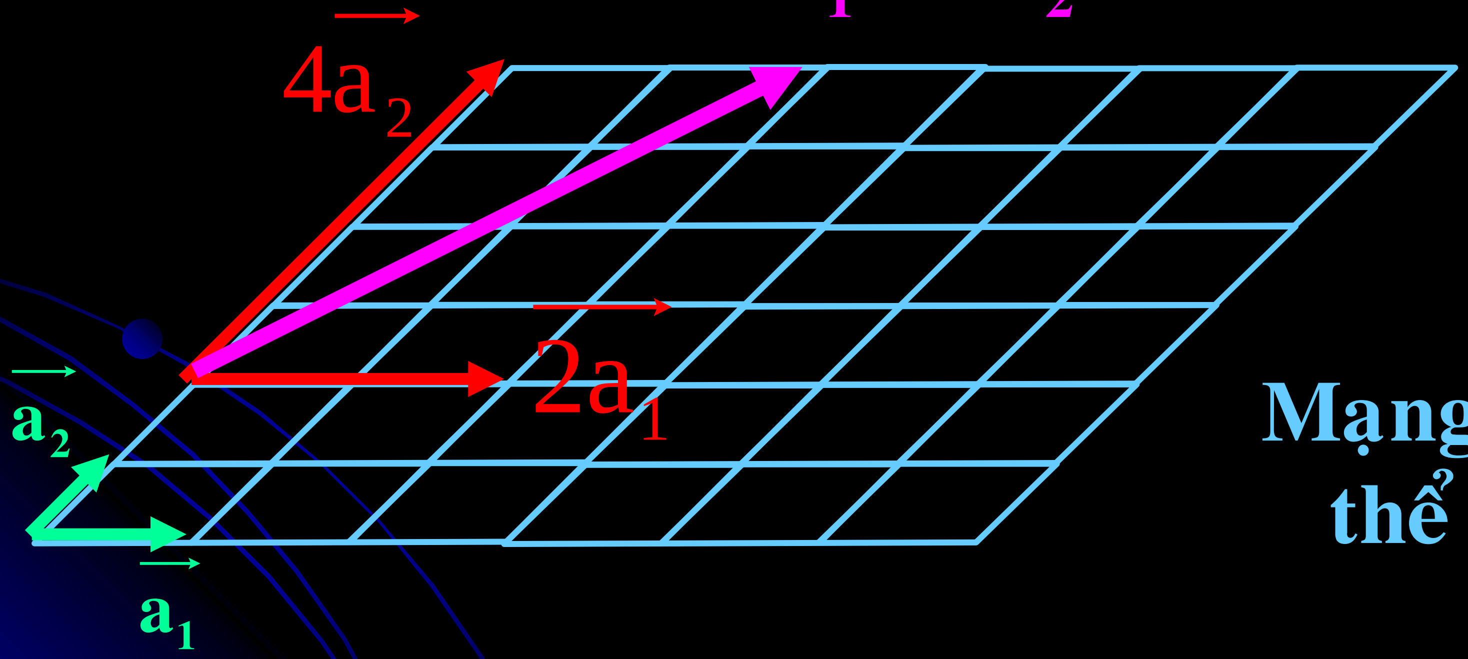
Nếu n_1, n_2, n_3 = ***số nguyên*** **thì** $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$ **là** ***véctơ nguyên tố*** **(hay véctơ cơ sở).**

Nếu n_1, n_2, n_3 = ***phân số*** **thì** $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$ **là** ***véctơ đơn vị.***

VÉCTƠ NGUYÊN TỐ (VÉCTƠ CƠ SỞ)

$n_1 = 2; n_2 = 4$

$$\vec{T} = 2\overrightarrow{a_1} + 4\overrightarrow{a_2}$$

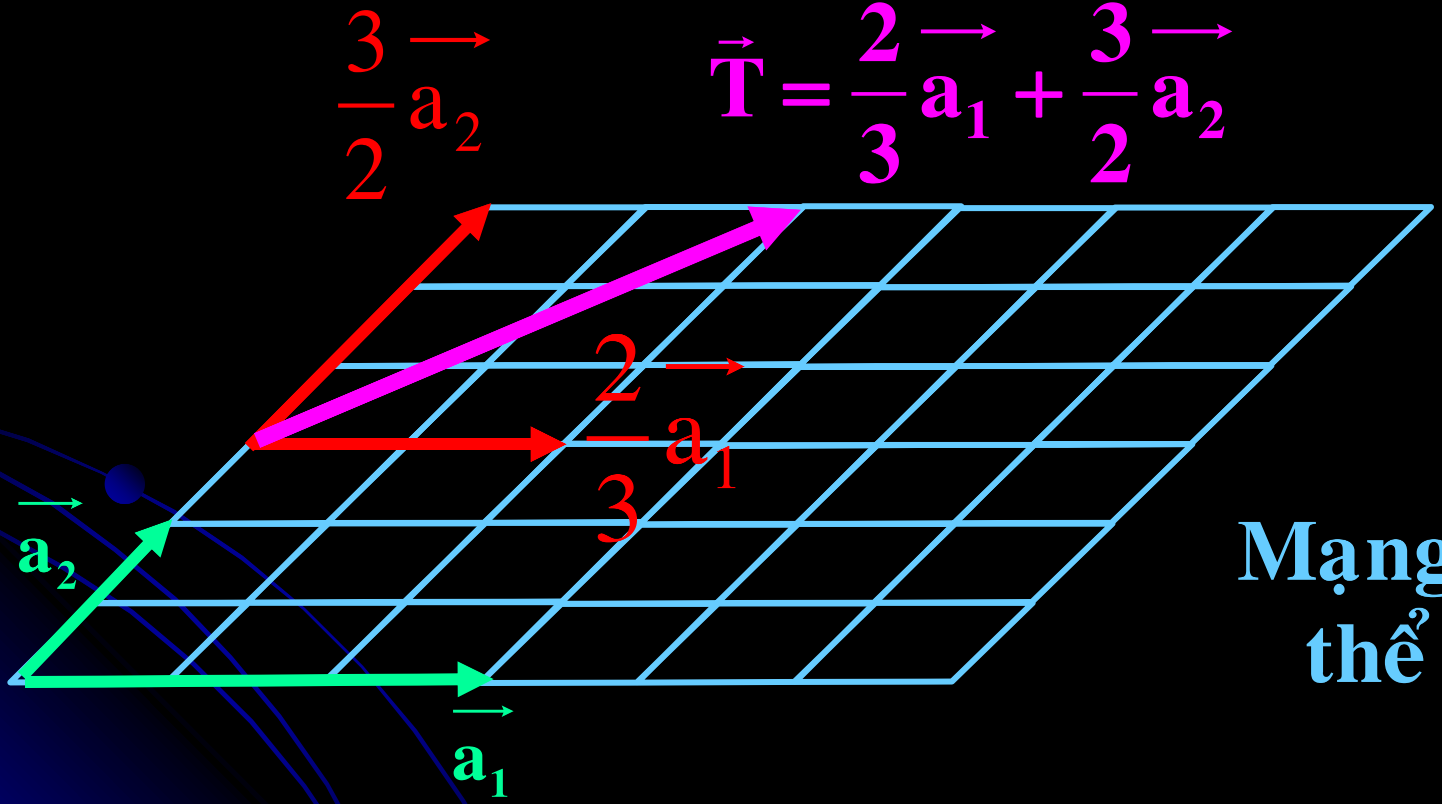


Mạng tinh thể 2D

VÉCTƠ ĐƠN VỊ

$N_1 = 2/3; n_2 = 3/2$

$$\vec{T} = \frac{2}{3}\vec{a_1} + \frac{3}{2}\vec{a_2}$$

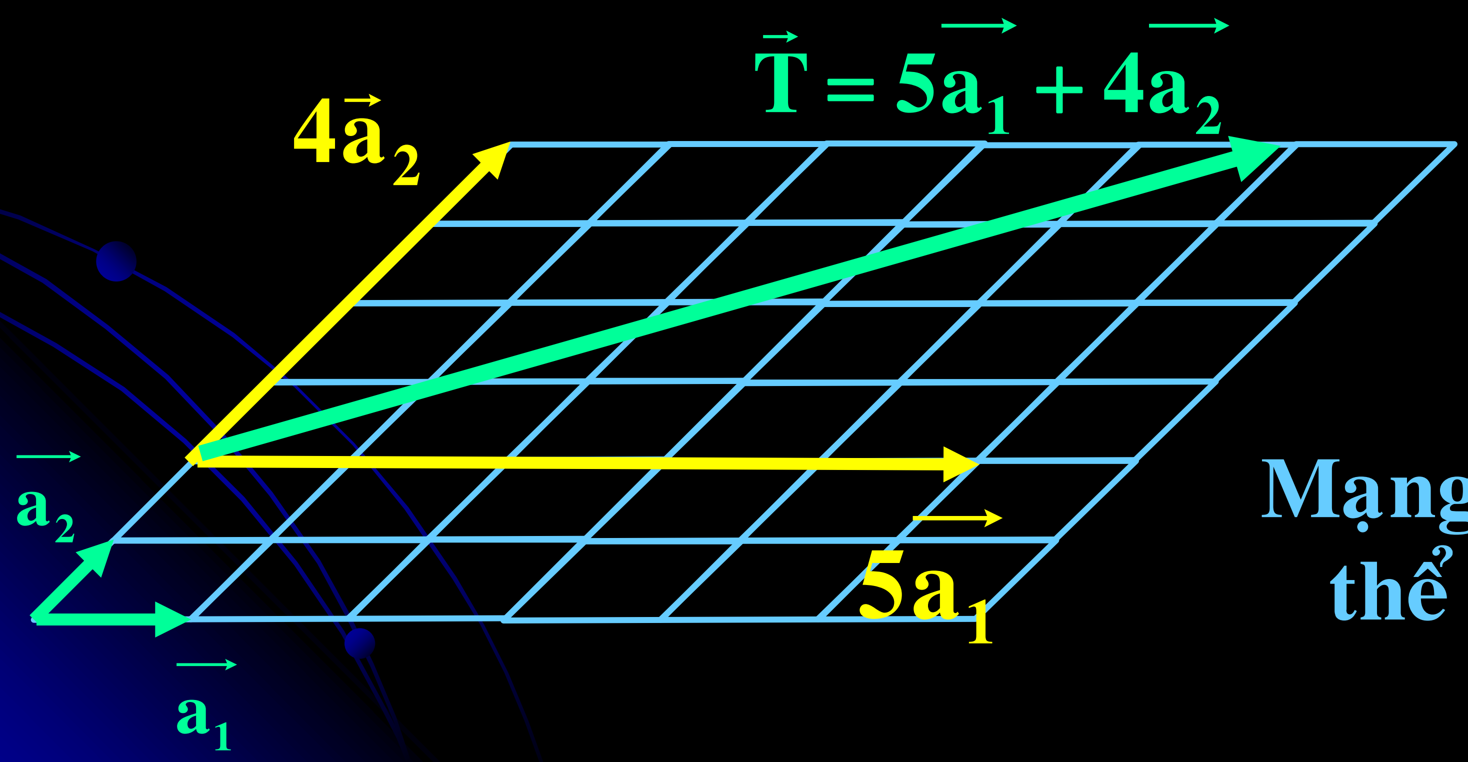


Mạng tinh thể 2D

VECTƠ TỊNH TIẾN BẢO TOÀN MẠNG TINH THỂ

$$\vec{T} = n_1\boxed{\vec{a}_1} + n_2\boxed{\vec{a}_2} + n_3\boxed{\vec{a}_3}$$

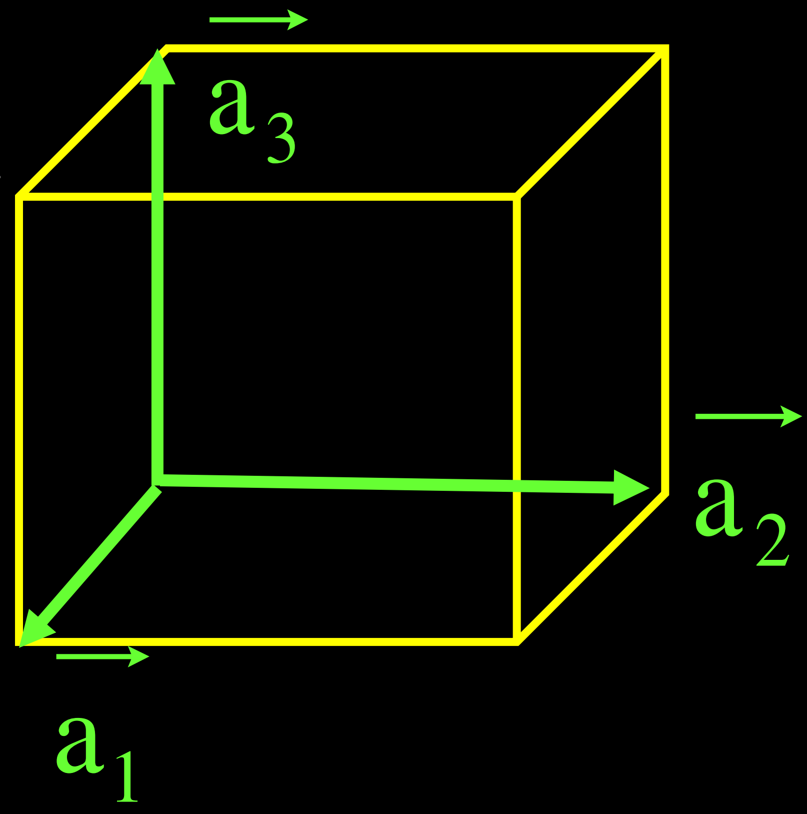
Vectơ tịnh tiến cơ sở (3D)



Mạng tinh thể 2D

2. Ô MẠNG TINH THỂ

- Qua ba vectơ không đồng phẳng hoàn toàn xác định một mạng, đó là một hệ thống vô hạn các nút. Chúng chiếm vị trí đỉnh của các hình hộp nhỏ xác định bởi ba cạnh a_1, a_2, a_3.
- Các hình hộp chồng khít lên nhau và kéo dài vô hạn trong không gian ⇒ *Ô mạng.*



- ***Có rất nhiều cách chọn a_1; a_2; a_3 ⇒ nhiều cách chọn ô mạng khác nhau.***

Ô ĐƠN VỊ

- Ô đơn vị là ô được xác định từ 3 véctơ đơn vị a_1, a_2, a_3.
- Thể tích của ô đơn vị:

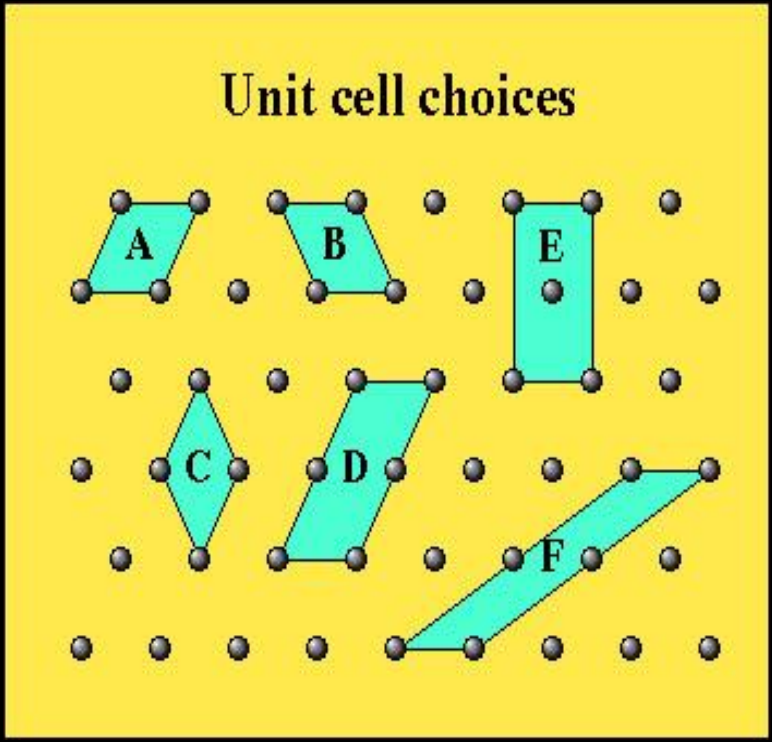
$$V = \vec{a}_1.\left[\vec{a}_2 \times \vec{a}_3\right] = \vec{a}_2.\left[\vec{a}_3 \times \vec{a}_1\right] = \vec{a}_3.\left[\vec{a}_1 \times \vec{a}_2\right]$$

- Ô đơn vị có thể chứa nhiều hơn một nút.

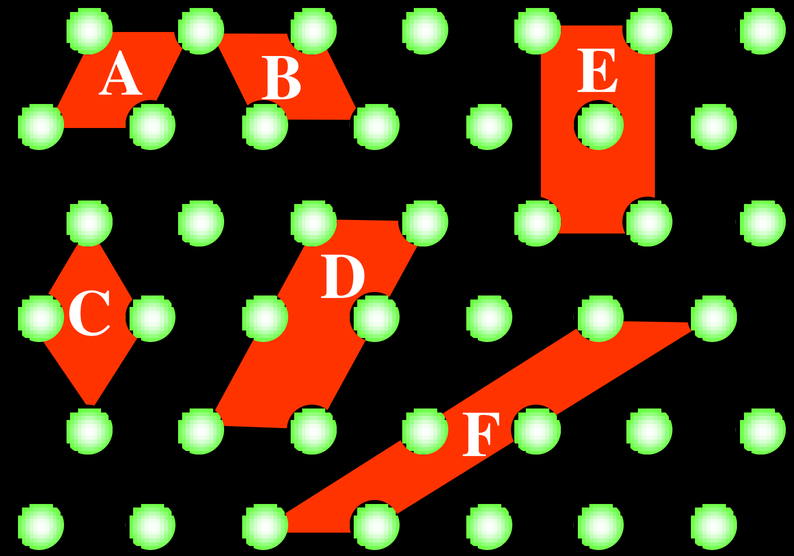
Ô NGUYÊN TỐ

Ô nguyên tố là ô được xác định từ 3 véctơ nguyên tố a_1, a_2, a_3.

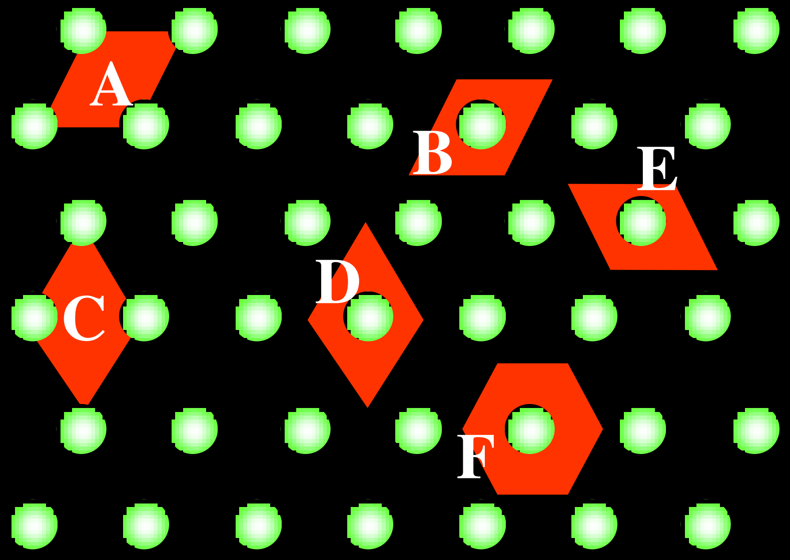
- Ô nguyên tố chỉ chứa 1 nút mạng.



Một số cách chọn Ô đơn vị



Một số cách chọn ô nguyên tố



Ô CƠ SỞ (Ô BRAVAIS)

Là ô nguyên tố thỏa mãn các điều kiện :

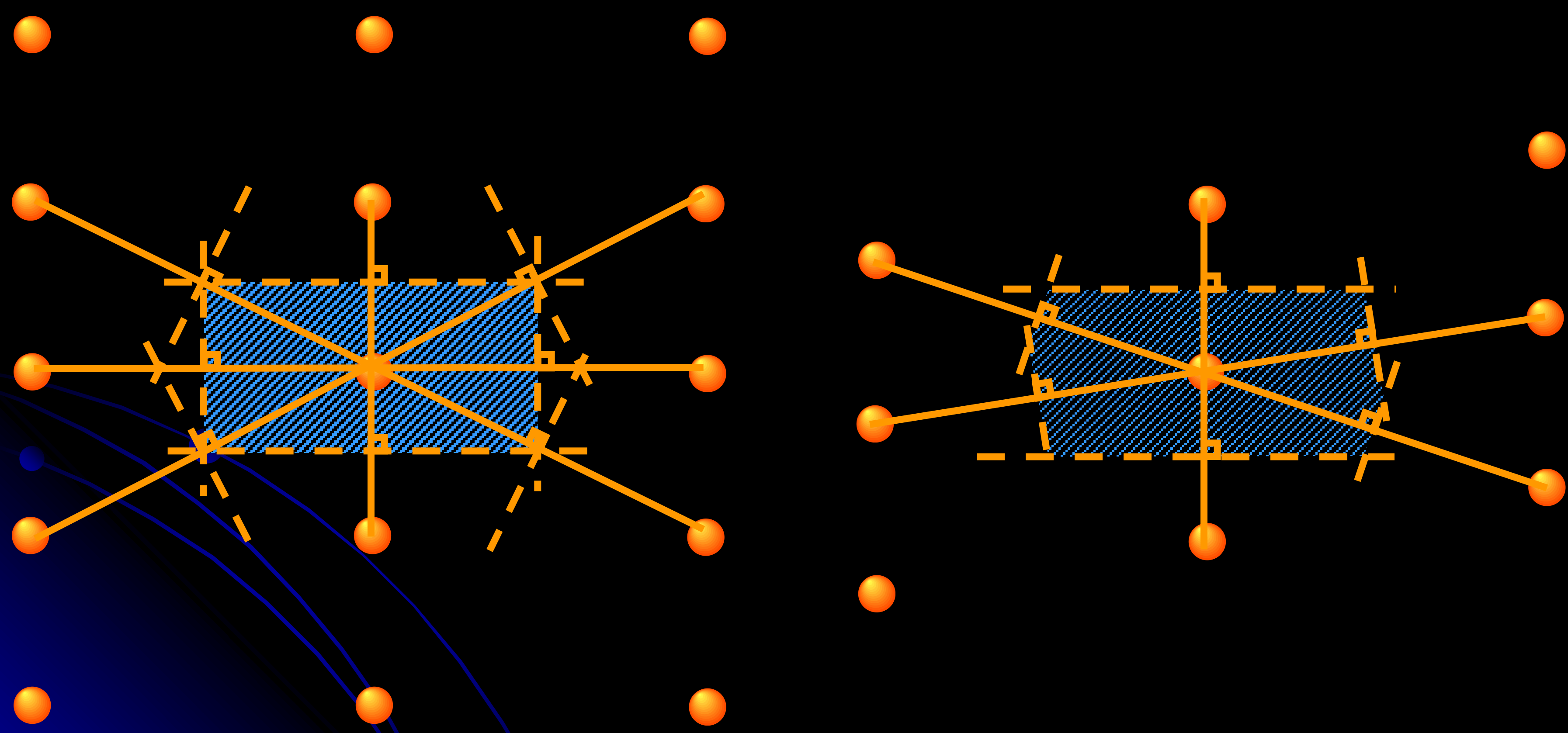
- **Cùng hệ với hệ của toàn mạng (tức hệ tinh thể).**
- **Số cạnh bằng nhau và số góc (giữa các cạnh) bằng nhau của ô mạng phải nhiều nhất.**
- **Nếu có góc vuông giữa các cạnh thì số góc đó phải nhiều nhất.**
- **Sau khi thỏa mãn các điều kiện trên, thì phải thỏa mãn điều kiện thể tích ô mạng là nhỏ nhất.**

Ô WIGNER – SEITZ

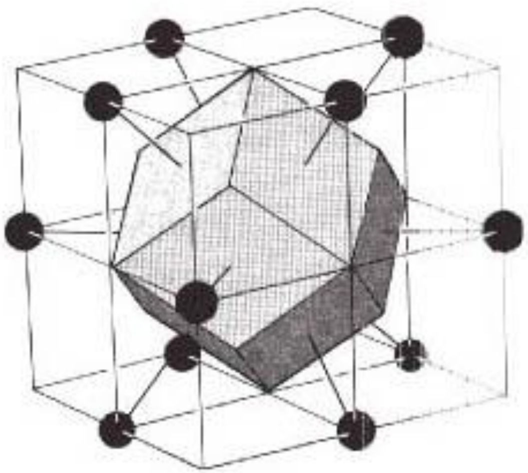
Ô Wigner – Seitz là một ô nguyên tố được vẽ sao cho nút mạng nằm ở tâm ô.

- **Cách vẽ ô Wigner – Seitz 2 chiều:**
  - **Chọn một nút mạng bất kì làm gốc O.**
  - **Nối O với các nút lân cận gần nhất ta được một số đoạn thẳng bằng nhau.**
  - **Vẽ các mặt phẳng trung trực của các đoạn thẳng đó ta thu được họ mặt thứ nhất ⇒ tạo một miền không gian kín bao quanh O.**
  - **Tương tự, từ O nối với các nút lân cận tiếp theo và vẽ các mặt phẳng trung trực của các đoạn thẳng đó ta thu được họ mặt thứ hai.**
  - **Nếu họ mặt thứ hai nằm ngoài miền không gian bao bởi họ thứ nhất, tức họ thứ nhất xác định miền thể tích nhỏ nhất và đó là ô Wigner – Seitz.**
  - **Ngược lại thì ô Wigner – Seitz được xác định đồng thời cả hai loại mặt sao cho ô có thể tích nhỏ nhất.**

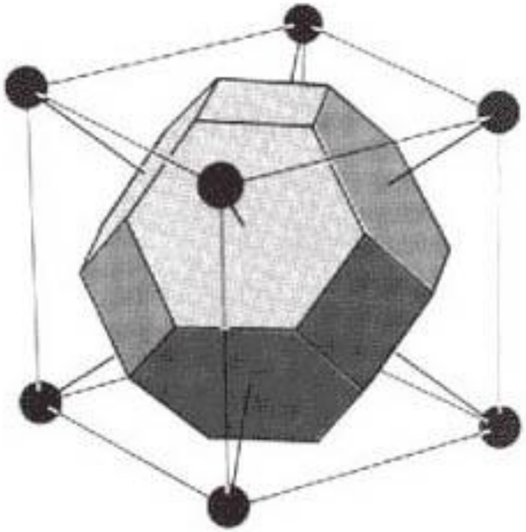
CÁCH VẼ Ô WIGNER – SEITZ CHO MẠNG 2 CHIỀU



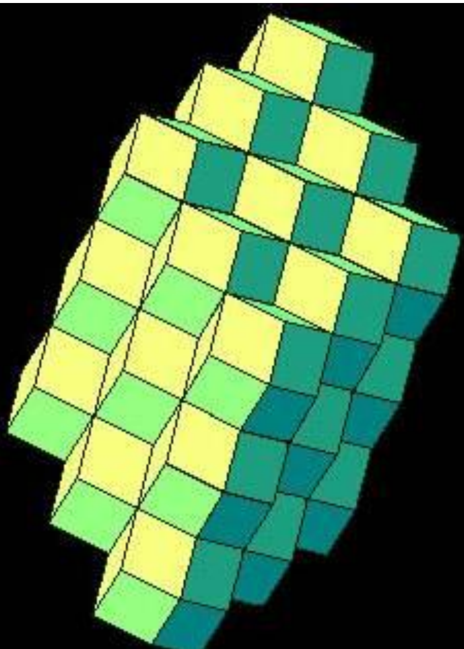
Ô Wigner-Seitz của mạng lập phương

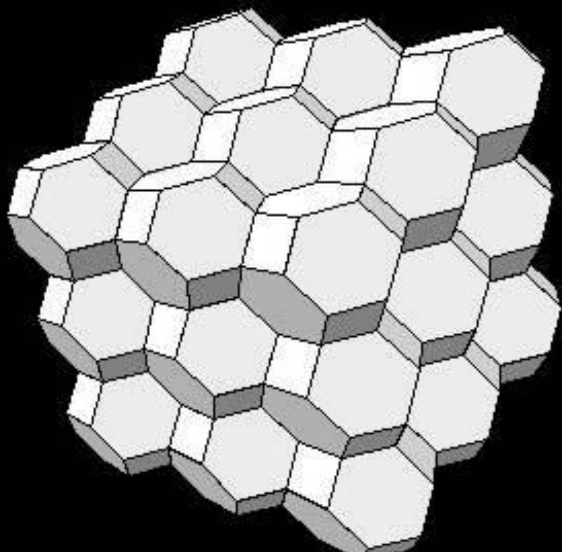


Ô Wigner-Seitz của mạng lập phương tâm mặt



Ô Wigner-Seitz của mạng lập phương tâm khối





3. SỰ ĐỐI XỨNG CỦA MẠNG TINH THỂ

a. YẾU TỐ ĐỐI XỨNG

Phép biến đổi không gian làm cho mạng tinh thể trùng lại với chính nó gọi là yếu tố đối xứng.

b. CÁC LOẠI YẾU TỐ ĐỐI XỨNG

- ***Phép tịnh tiến bảo toàn mạng T.***
- **Mặt phẳng đối xứng P (m).**
- **Tâm đối xứng C.**
- **Trục đối xứng L_n**

PHÉP TỊNH TIẾN BẢO TOÀN MẠNG

Khi tịnh tiến tinh thể đi một véctơ $\vec{T}$

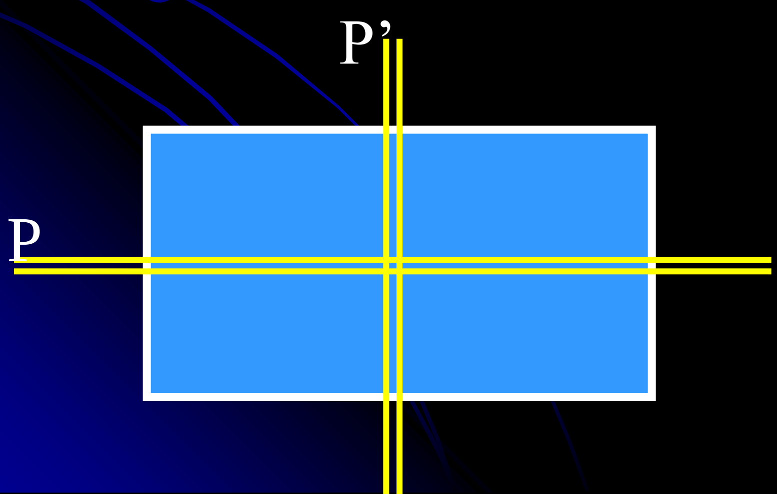
thì tinh thể trùng lại với chính nó.

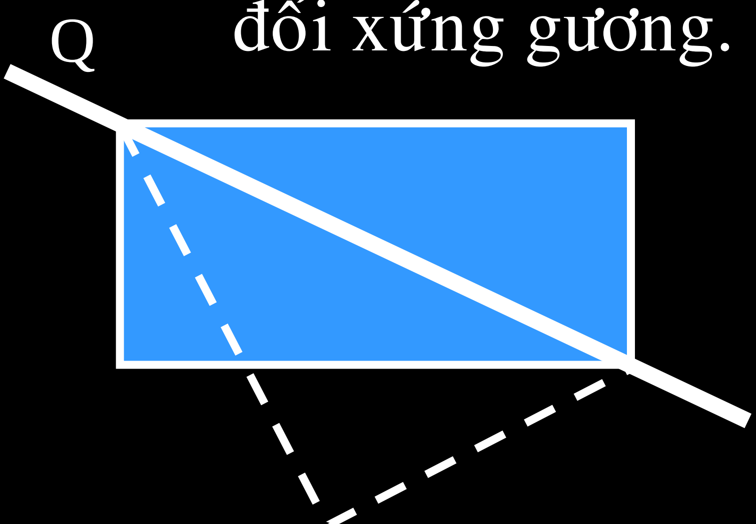
MẶT ĐỐI XỨNG GƯƠNG P (m)

Mặt phẳng chia tinh thể làm hai phần bằng nhau với điều kiện phần này như ảnh của phần kia qua mặt gương đặt tại P.

P, P’: mặt đối xứng gương.

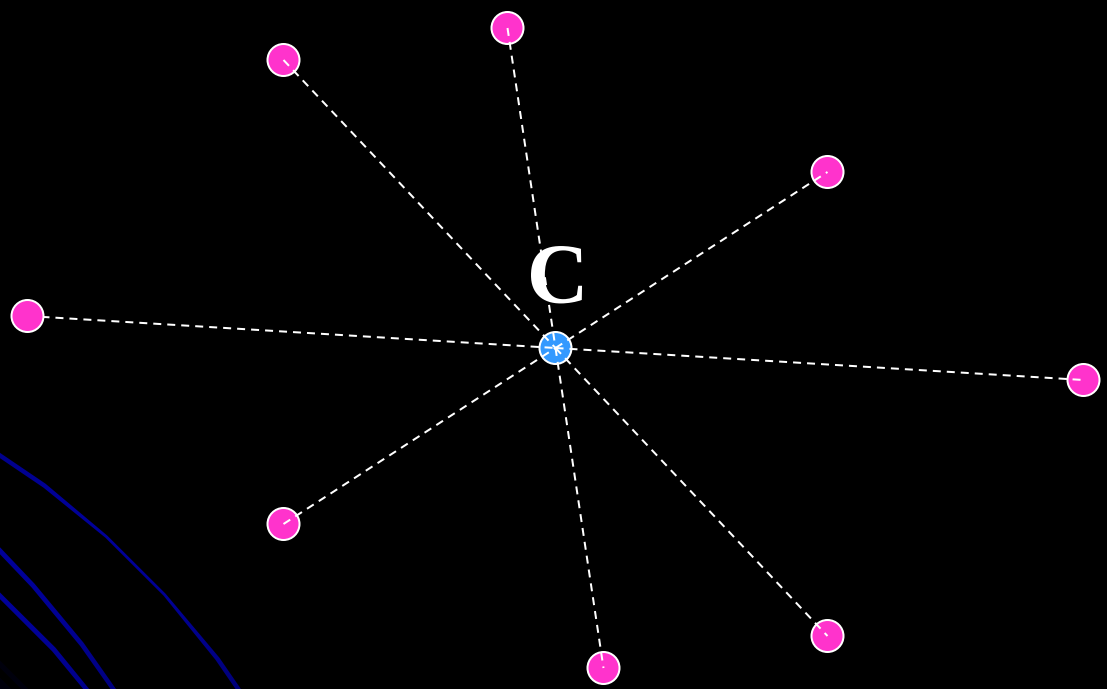
Q : không phải mặt đối xứng gương.

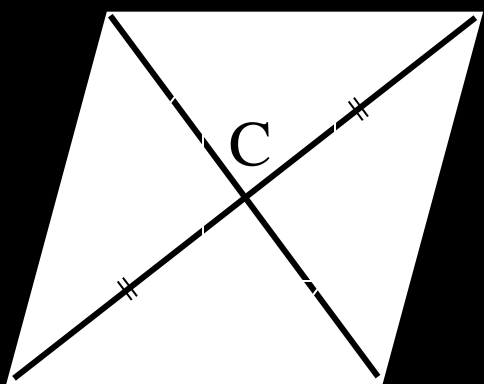




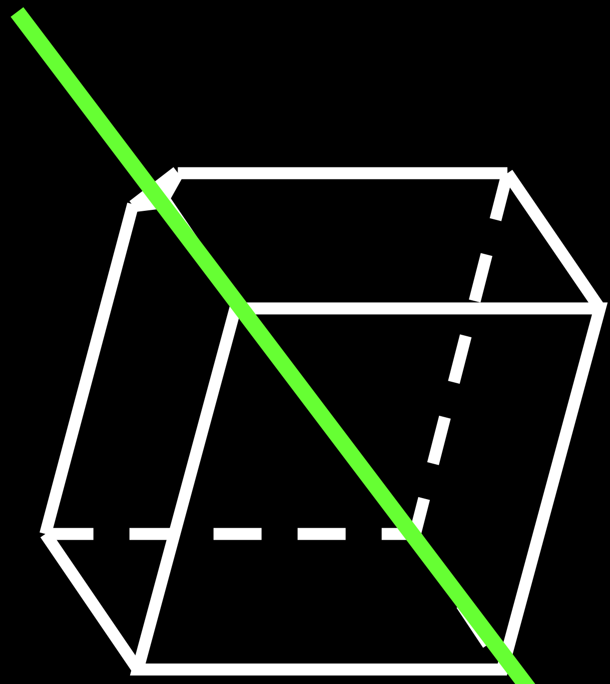
TÂM ĐỐI XỨNG C = $\bar{1}$

Là một điểm C nằm bên trong tinh thể có đặc tính một phần tử bất kỳ trong tinh thể qua nó cũng có điểm đối xứng với nó qua C.

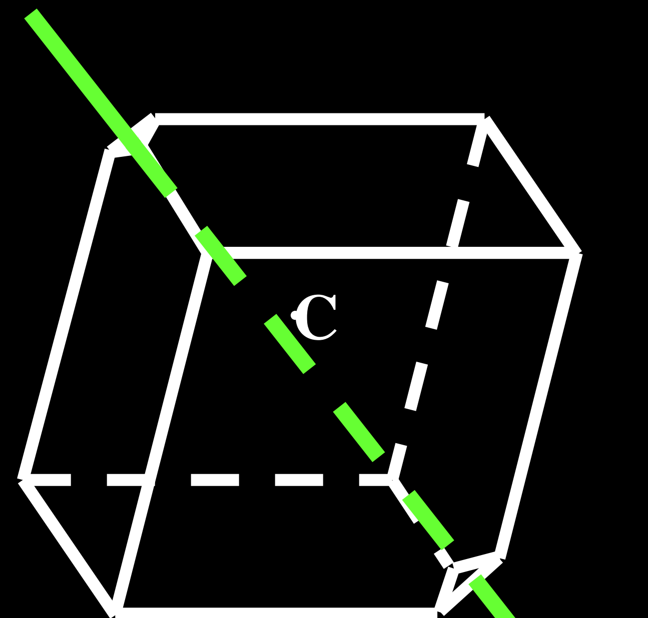




Có tâm đối xứng



Không tâm đối xứng



Có tâm đối xứng

TRỤC ĐỐI XỨNG XOAY L_n

- **Trục đối xứng là một đường thẳng khi quay quanh nó tinh thể trở lại trùng với chính nó.**
- **Góc bé nhất α để tinh thể trở lại trùng với chính nó gọi là *góc xoay cơ sở của trục*.**

$$\alpha_n = \frac{360^o}{n}$$

với n bậc của trục.

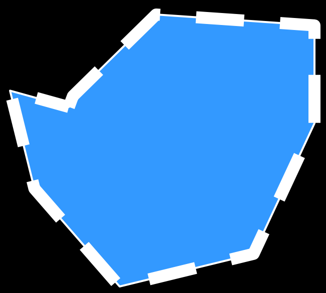
- Nguyên tử hay phân tử khi riêng lẻ n = 1,2, 3 ... bất kì.
- Trong tinh thể n = 1, 2, 3, 4, 6.

$L_1 : \alpha_1 = 360^o$ $L_2 : \alpha_2 = 360^o/ 2 = 180^o$

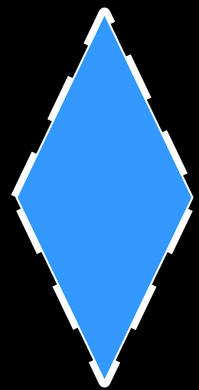
$L_3 : \alpha_3 = 360^o/ 3 = 120^o$ $L_4 : \alpha_4 = 360^o/ 4 = 90^o$

$L_6 : \alpha_6 = 360^o/ 6 = 60^o$

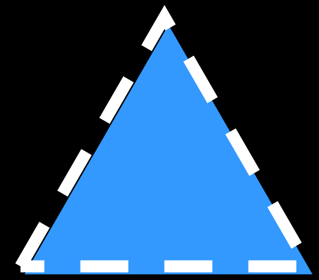
Các trục đối xứng



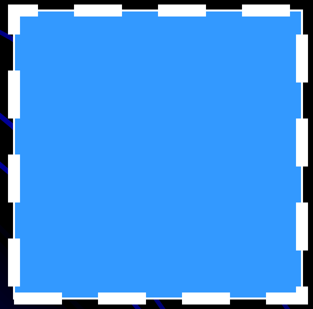
Trục bậc 1 (360^o)



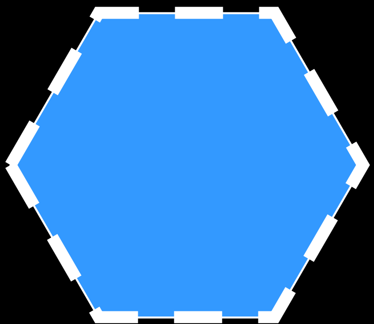
Trục bậc 2 (180^o)



Trục bậc 3 (120^o)



Trục bậc 4 (90^o)



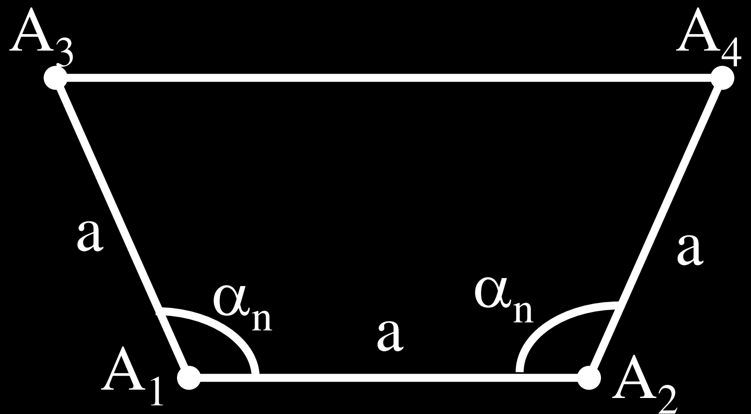
Trục bậc 6 (60^o)

ĐỊNH LÝ

Trong tinh thể chỉ có các trục đối xứng bậc 1, 2, 3, 4, 6 (do tính chất tịnh tiến tuần hoàn của mạng không gian)

CHỨNG MINH

Xét một nút mạng A_1, qua phép tịnh tiến một đoạn a ta suy được nút A_2.
Sau đó áp dụng phép quay quanh một trục đối xứng L_n, ta suy được 2 nút A_3 và A_4 như hình 1.3.

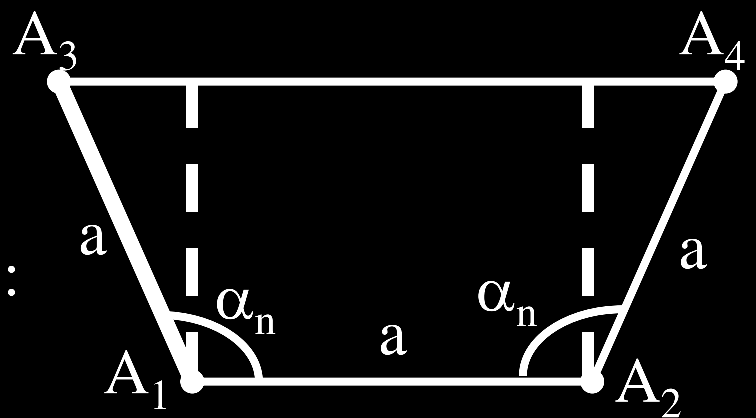


Hình 1.3

$A_3\ A_4 = a + 2\ a\sin(\ \alpha_n - \pi/2)$

$\sin(\alpha_n - \pi/2) = -\cos\alpha_n$

$\Rightarrow A_3A_4 = a\ (1 - 2\cos\alpha_n)(1)$



Hình 1.3

Vì A_3, A_4 là 2 nút mạng tinh thể

nên khoảng cách giữa chúng phải bằng:

$A_3A_4 = k.a$, với $k \in Z$ (2)

Từ (1) và (2) suy ra:

$1 - 2\cos\alpha_n = k$

Suy ra:

$-1 \leq \cos\alpha_n = (1 - k)/2 \leq 1$

$\Rightarrow -1 \leq k \leq 3$

$k = -1, 0, 1, 2, 3$

Do đó:

- Khi $k = -1$: $\cos\alpha_n = 1 \Rightarrow \alpha_n = \alpha_1 = 360^o \Rightarrow$ Trục đối xứng L_1
- Khi $k = 0$: $\cos\alpha_n = 1/2 \Rightarrow \alpha_n = \alpha_6 = 60^o \Rightarrow$ Trục đối xứng L_6
- Khi $k = 1$: $\cos\alpha_n = 0 \Rightarrow \alpha_n = \alpha_4 = 90^o \Rightarrow$ Trục đối xứng L_4
- Khi $k = 2$: $\cos\alpha_n = -1/2 \Rightarrow \alpha_n = \alpha_3 = 120^o \Rightarrow$ Trục đối xứng L_3
- Khi $k = 3$: $\cos\alpha_n = -1 \Rightarrow \alpha_n = \alpha_2 = 180^o \Rightarrow$ Trục đối xứng L_2

TRỤC ĐỐI XỨNG NGHỊCH ĐẢO L_{in}

- Trục đối xứng nghịch đảo (trục nghịch đảo) $L_{in} = \overline{n}$

- đó là một đường thẳng mà tinh thể sau khi quay quanh nó một góc α_n rồi cho đối xứng điểm chính giữa của tinh thể thì tinh thể trở lại vị trí tương tự với vị trí ban đầu.

$$L_{in} = L_n * C$$

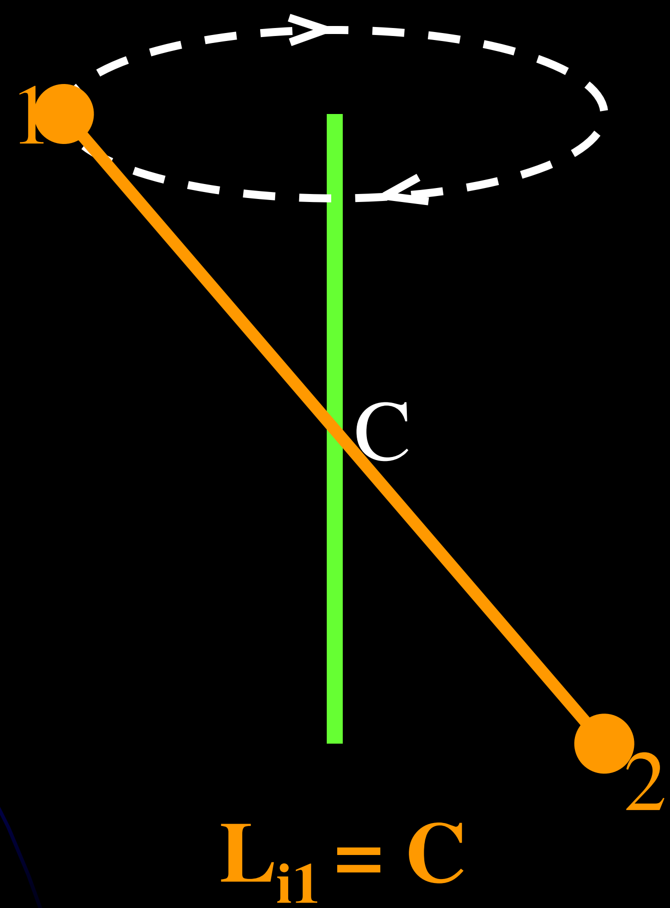
- Các loại trục nghịch đảo :

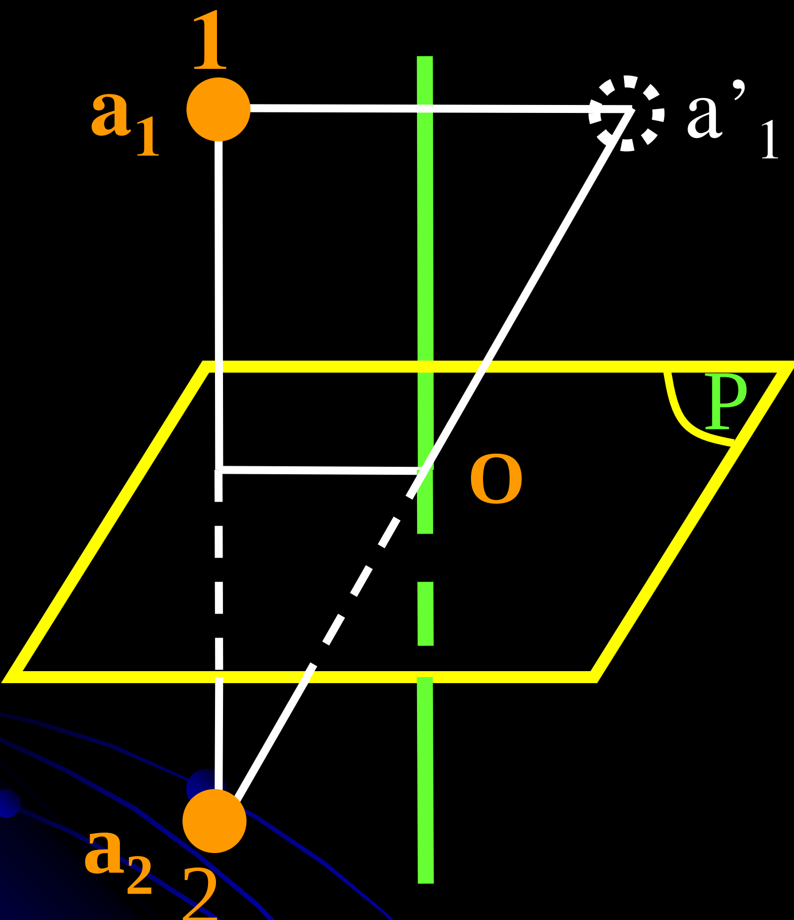
  $L_{i1} = C$, $L_{i2} = P$, $L_{i3} = L_3C$, $L_{i6} = L_3P$ và L_{i4}.

- *Tóm lại, trong tinh thể vĩ mô có thể thấy các yếu tố đối xứng sau : C, P, L_1, L_2, L_3, L_4, L_6, L_{i4}, L_{i6} .*

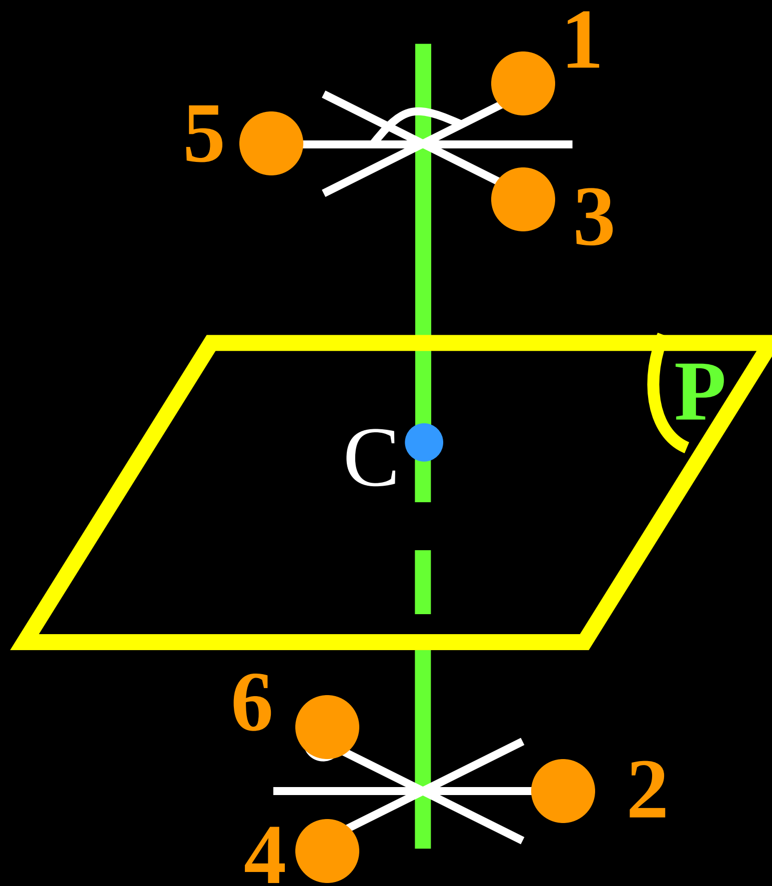
TÂM NGHỊCH ĐẢO $\bar{1}$

Phép đối xứng qua tâm đối xứng C tương đương với phép quay một góc 360^0 quanh một trục đi qua C + phép đối xứng qua C ⇒ Tâm nghịch đảo.

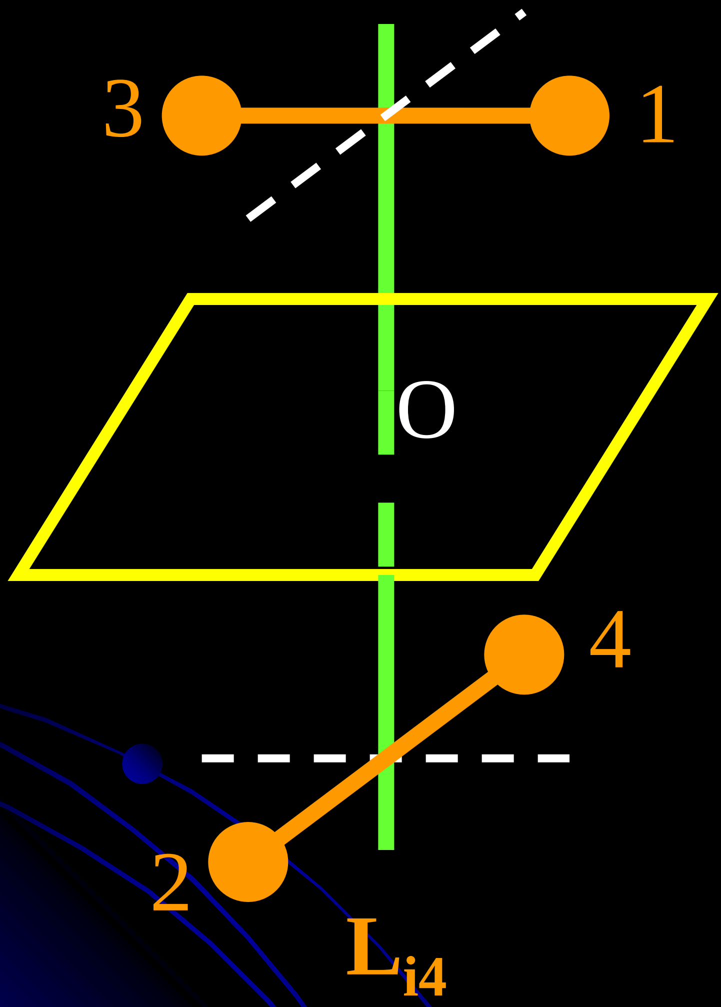


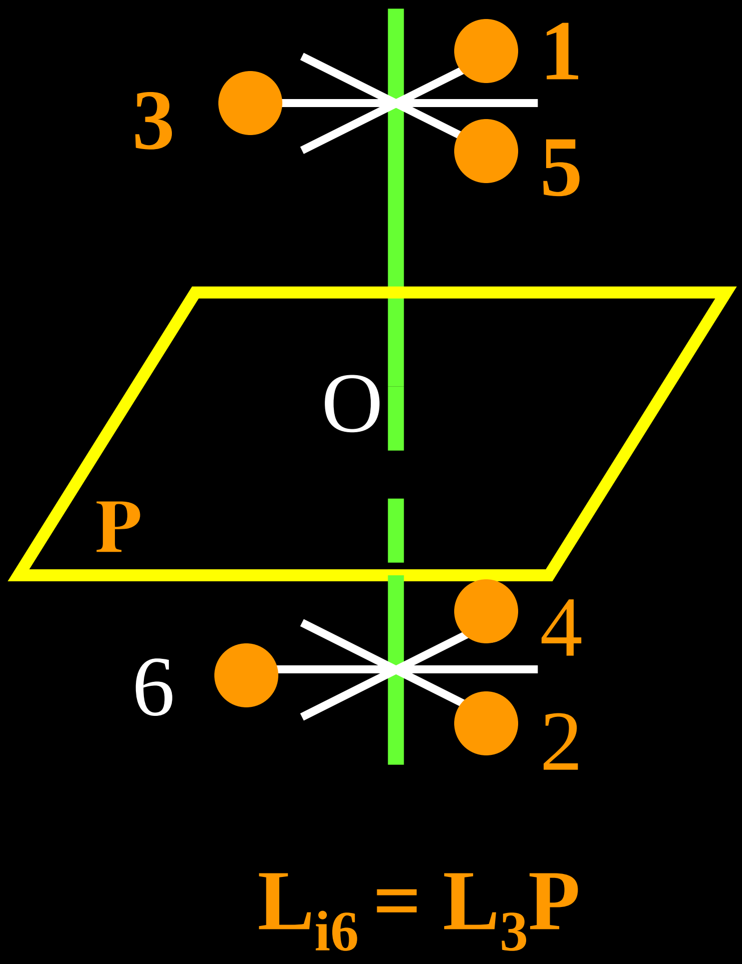


$L_{i2} = P$



$L_{i3} = L_3C$


3
1
O
4
2
L_{i4}


1
3
5
O
P
4
6
2
$L_{i6} = L_3P$

4. HẠNG – HỆ TINH THỂ

NHÓM ĐIỂM

Tập hợp các yếu tố đối xứng gồm tâm đối xứng, mặt phẳng đối xứng và các trục đối xứng có được trong một tinh thể ⇒ ***nhóm đối xứng điểm.***

Có 32 nhóm điểm

7 HỆ – 3 HẠNG TINH THỂ

Hệ ba nghiêng- Hệ một nghiêng - Hệ trực thoi – Hệ ba phương - Hệ bốn phương - Hệ sáu phương - Hệ lập phương.

- ***Hạng thấp:*** **hệ ba nghiêng, hệ một nghiêng, hệ trực thoi.**
- ***Hạng trung:*** **hệ ba phương, hệ bốn phương, hệ sáu phương.**
- ***Hạng cao:*** **hệ lập phương.**

Nếu kết hợp thêm phép tịnh tiến bảo toàn mạng thì ta được nhóm đối xứng không gian. ***Có 230 nhóm không gian.***

5. CÁC LOẠI MẠNG CƠ BẢN (MẠNG BRAVAIS)

a. Ô MẠNG BRAVAIS

- Mỗi hệ tinh thể sẽ có một ô cơ sở $\Rightarrow$ 7 ô cơ sở của các mạng thuộc bảy hệ tinh thể khác nhau $\Rightarrow$ ***Ô Bravais.***
- **3 điều kiện để chọn ô Bravais:**
  - Ô phải mang tính đối xứng cao nhất của hệ tinh thể.
  - Ô có số góc vuông lớn nhất hoặc số cạnh bằng nhau và số góc bằng nhau phải nhiều nhất.
  - Ô có thể tích nhỏ nhất.

Nếu không đồng thời thỏa mãn 3 điều kiện trên thì việc chọn Ô Bravais theo thứ tự ưu tiên 1, 2, 3.

KIỂU Ô MẠNG BRAVAIS

- ***Trường hợp 3 chiều ⇒ 14 kiểu ô mạng Bravais.***
- ***Trường hợp 2 chiều ⇒ 5 kiểu ô mạng Bravais.***

Các loại ô mạng Bravais

- Loại nguyên thủy (ký hiệu P).

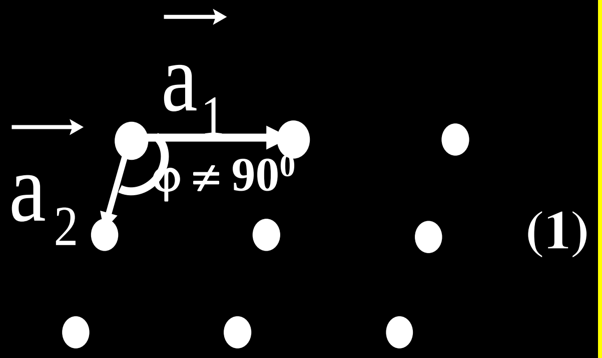
  Nút mạng chỉ phân bố ở đỉnh của ô mạng.
- Loại tâm đáy (A, B, hay C).
- Nút mạng phân bố ở vị trí đỉnh + tâm của hai đáy nào đó của ô mạng.
- Loại tâm khối I.

  Nút mạng phân bố ở vị trí đỉnh + tâm của tâm của ô cơ sở.
- Loại tâm mặt F

  Nút mạng phân bố ở vị trí đỉnh + tâm của các mặt.

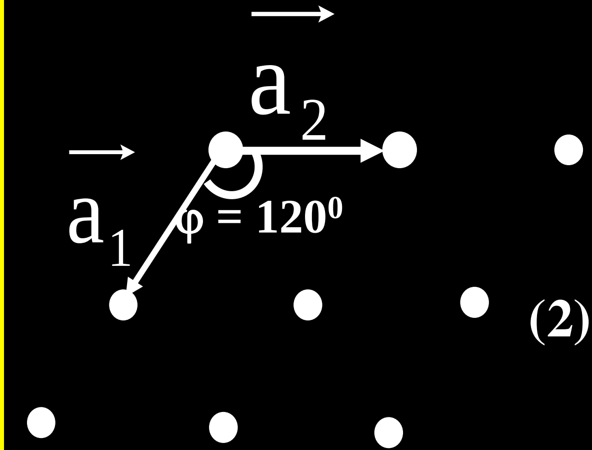
5 KIỂU MẠNG BRAVAIS 2 CHIỀU

Mạng	Đặc điểm của ô mạng
Mạng nghiêng (1)	$a_1 \neq a_2, \varphi \neq 90^0$
Mạng lục giác (2)	$a_1 = a_2, \varphi = 120^0$
Mạng vuông (3)	$a_1 = a_2, \varphi = 90^0$
Mạng chữ nhật (4) Mạng chữ nhật tâm mặt (5)	$a_1 \neq a_2, \varphi = 90^0$



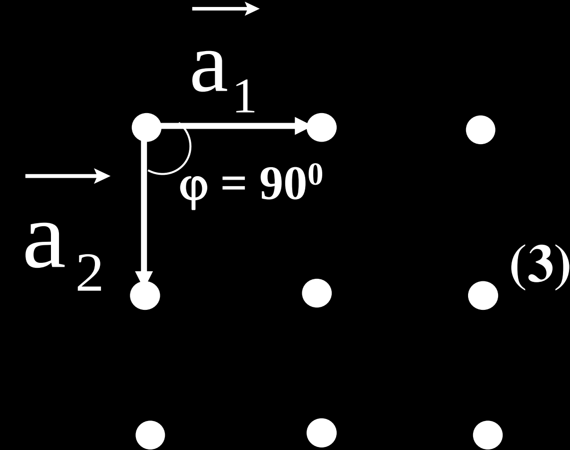
Mạng nghiêng

$a_1 \neq a_2$, $\varphi \neq 90^0$



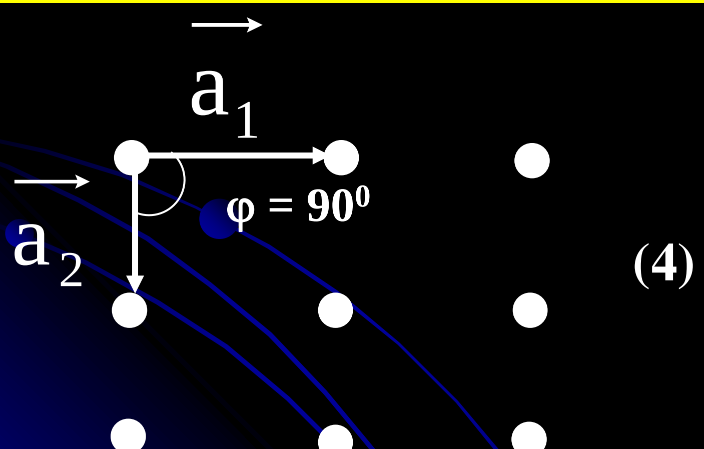
Mạng lục giác

$a_1 = a_2$, $\varphi = 120^0$



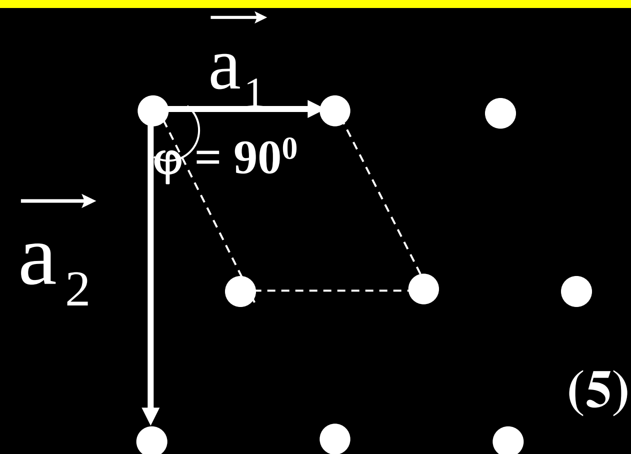
Mạng vuông

$a_1 = a_2$, $\varphi = 90^0$



Mạng chữ nhật

$a_1 \neq a_2$, $\varphi = 90^0$

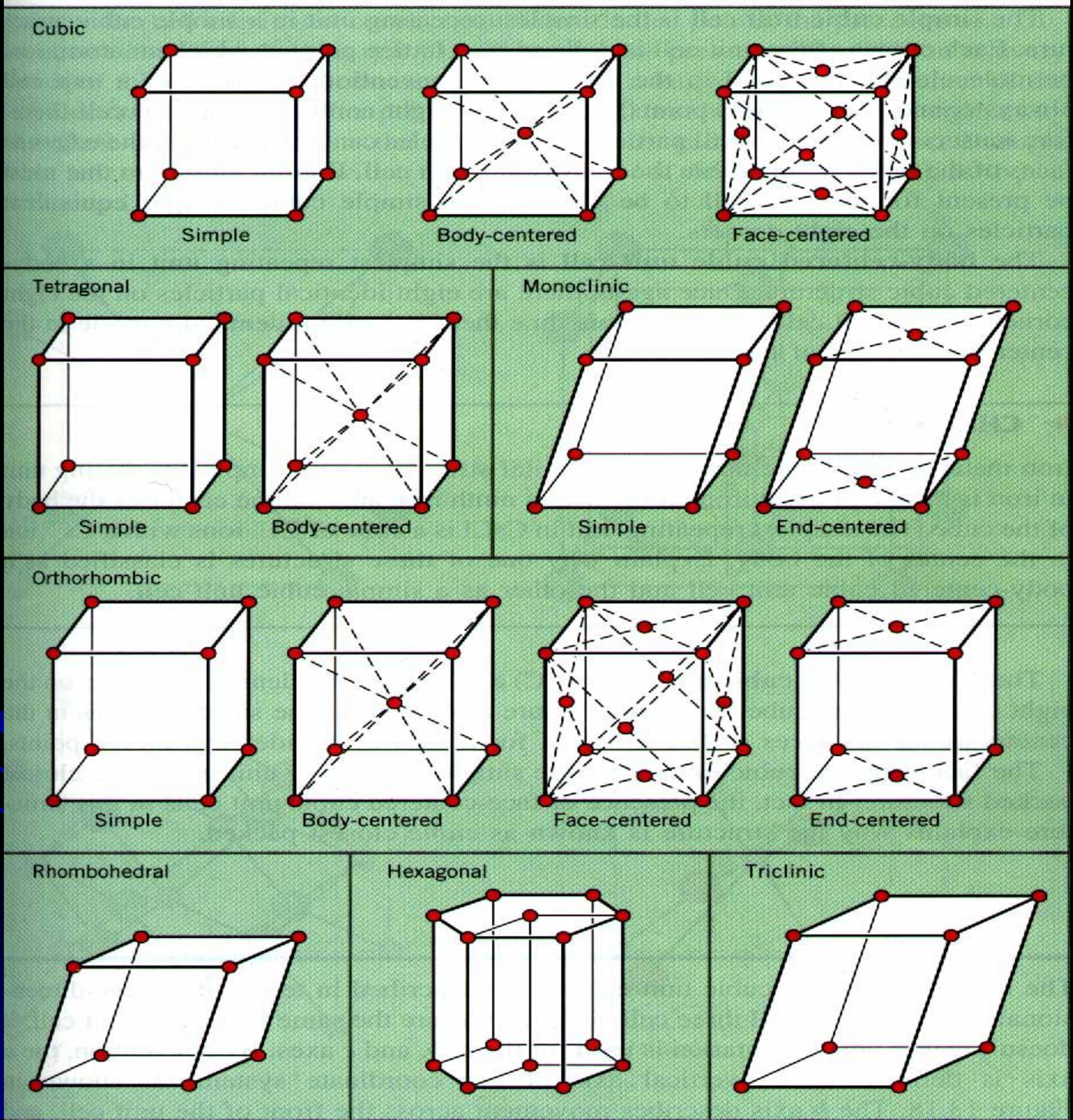


Mạng chữ nhật tâm mặt

$a_1 \neq a_2$, $\varphi = 90^0$

14 KIỂU MẠNG BRAVAIS 3 CHIỀU

Hệ tinh thể	*Trục đối xứng*	*Kiểu mạng Bravais*	*Đặc điểm của ô mạng Bravais*
Ba nghiêng	L_1	P	$a_1 \neq a_2 \neq a_3,\ \alpha \neq \beta \neq \gamma$
Một nghiêng	L_2	P,C	$a_1 \neq a_2 \neq a_3,\ \alpha = \beta = 90^0 \neq \gamma$
Trực thoi	$3L_2$	P, C, I, F	$a_1 \neq a_2 \neq a_3,\ \alpha = \beta = \gamma = 90^0$
Ba phương	L_3	P	$a_1 = a_2 = a_3,\ \alpha = \beta = \gamma \neq 90^0$
Bốn phương	L_4	P, I	$a_1 = a_2 \neq a_3,\ \alpha = \beta = \gamma = 90^0$
Sáu phương	L_6	P	$a_1 = a_2 \neq a_3,\ \alpha = \beta = 90^0,$ $\gamma = 120^0$
Lập	4L	P, F, I	$a_1 = a_2 = a_3,\ \alpha = \beta = \gamma = 90^0$

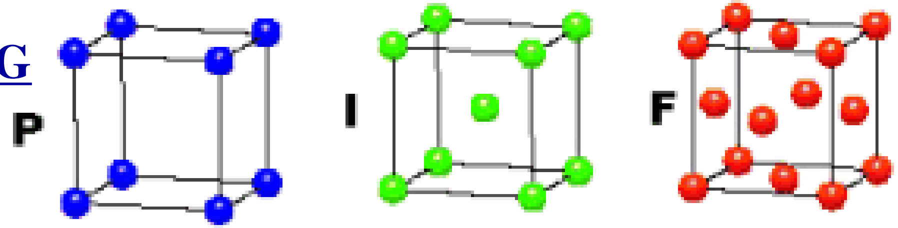


Cubic
Simple
Body-centered
Face-centered
Tetragonal
Simple
Body-centered
Monoclinic
Simple
End-centered
Orthorhombic
Simple
Body-centered
Face-centered
End-centered
Rhombohedral
Hexagonal
Triclinic

HỆ LẬP PHƯƠNG

a = b = c

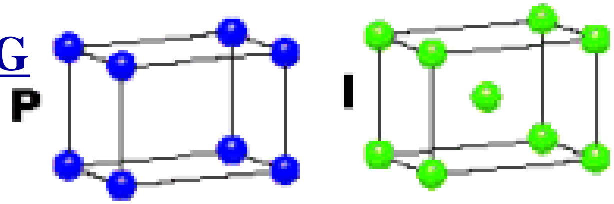
$\alpha = \beta = \gamma = 90°$



HỆ BỐN PHƯƠNG

a = b ≠ c

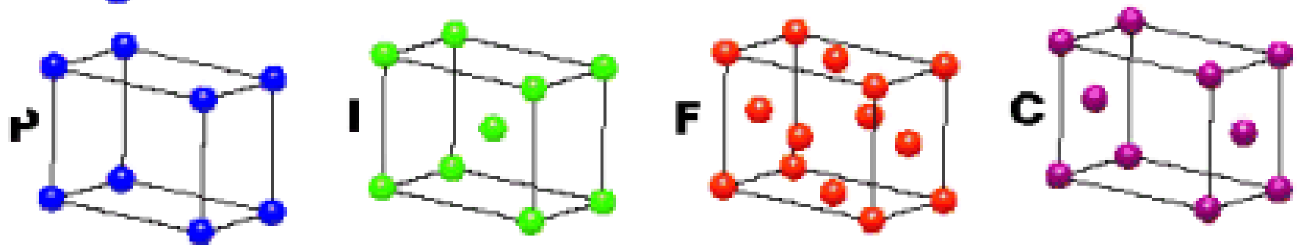
$\alpha = \beta = \gamma = 90°$



HỆ TRỰC THOI

a ≠ b ≠ c

$\alpha = \beta = \gamma = 90°$

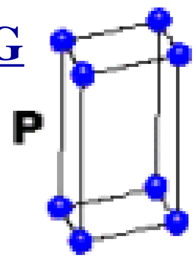


HỆ SÁU PHƯƠNG

a = b ≠ c

$\alpha = \beta = 90°$

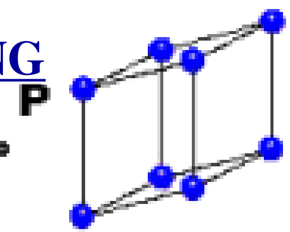
$\gamma = 120°$



HỆ BA PHƯƠNG

a = b = c

$\alpha = \beta = \gamma \neq 90°$

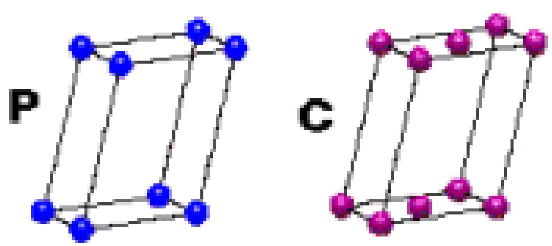


HỆ ĐƠN TÀ

a ≠ b ≠ c

$\alpha = \gamma = 90°$

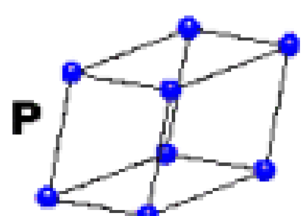
$\beta \neq 120°$



HỆ TAM TÀ

a ≠ b ≠ c

$\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90°$



4 KIỂU Ô ĐƠN VỊ

P : NGUYÊN TỐ

I : TÂM KHỐI

F : TÂM MẶT

C : TÂM Ở 2 MẶT ĐỐI

+

7 HỆ TINH THỂ

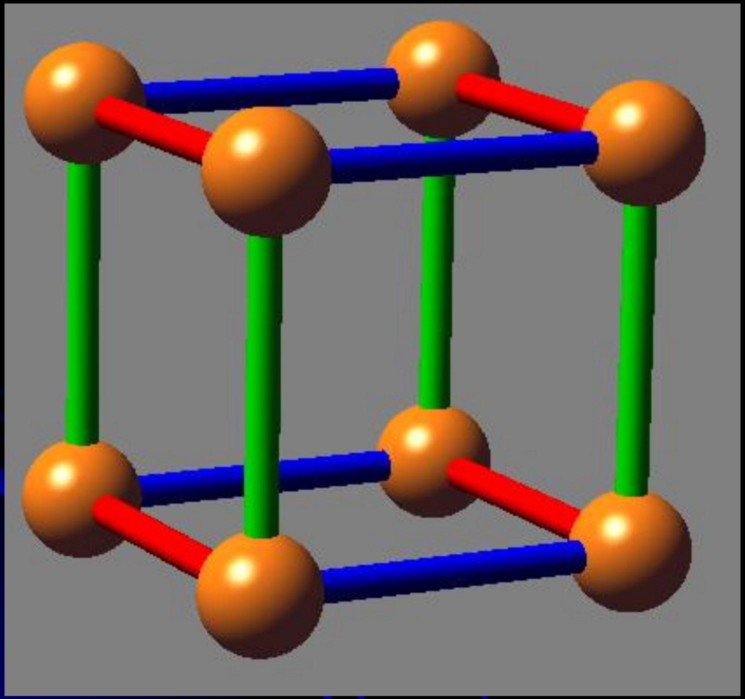
⇒ 14 LOẠI MẠNG BRAVAIS

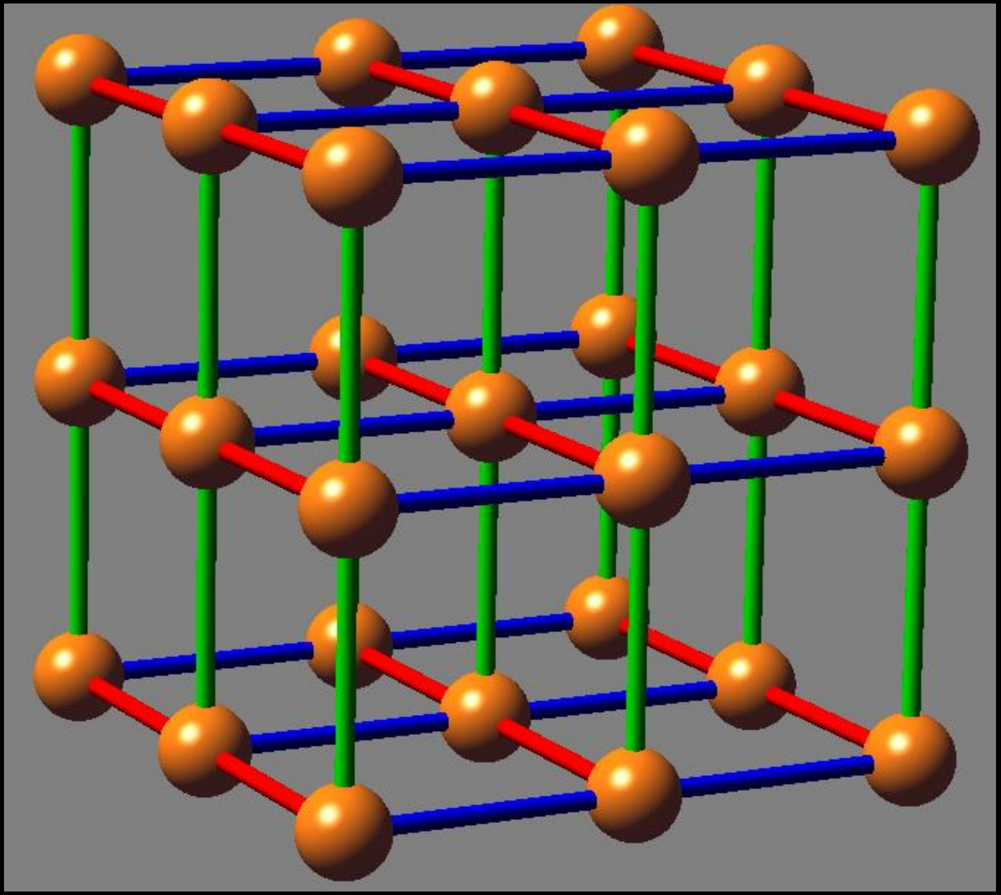
SỐ NÚT CHỨA TRONG MỘT Ô MẠNG

- ***Mạng nguyên thủy :*** 8 nút × 1/8 = 1 nút
- ***Mạng tâm khối :*** 8 nút × 1/8 + 1 nút = 2 nút
- ***Tâm mặt :*** 8 nút × 1/8 + 6 nút × 1/2 = 4 nút
- ***Tâm đáy :*** 8 nút × 1/8 + 2 nút × 1/2 = 2 nút

MẠNG NGUYÊN THỦY

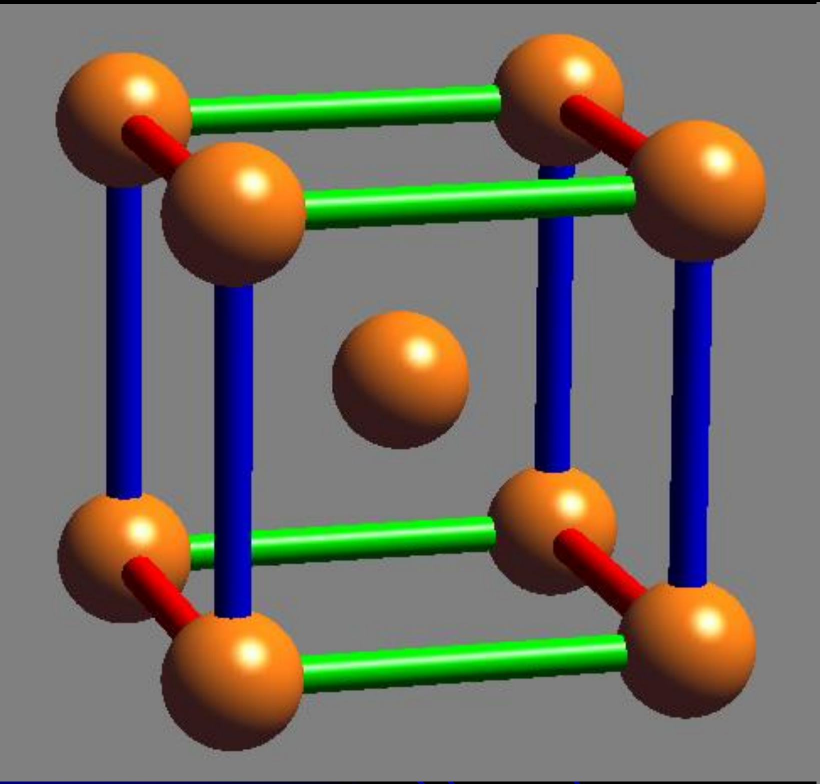
$$8 \text{ nút} \times \frac{1}{8} = 1 \text{ nút}$$

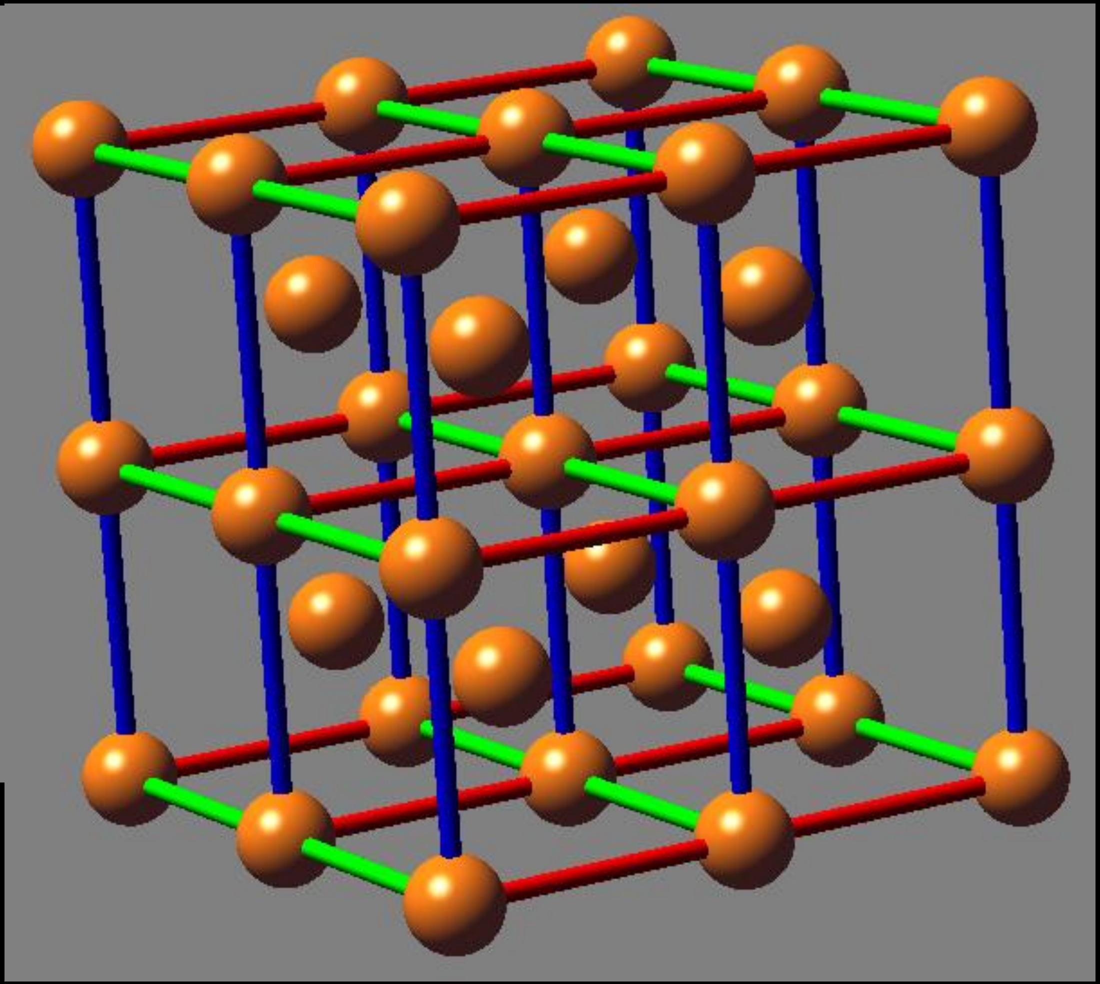




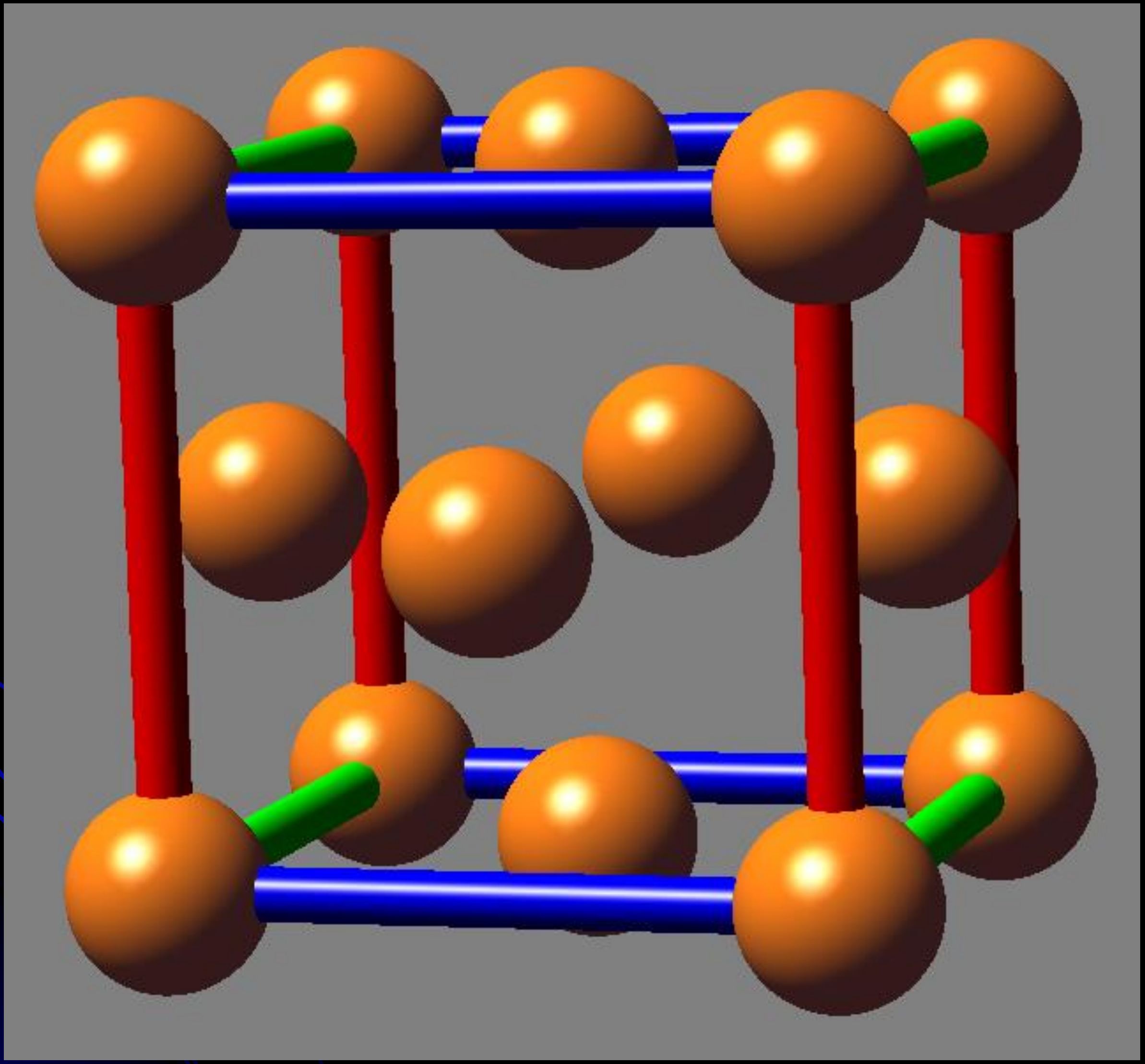
MẠNG TÂM KHỐI

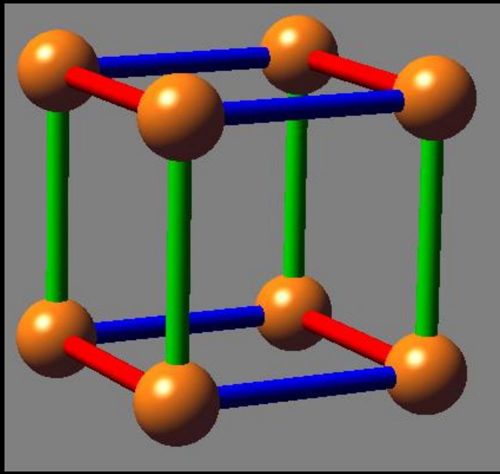
$$8 \text{ nút} \times \frac{1}{8} + 1 \text{ nút} = 2 \text{ nút}$$





- Tâm mặt : 8 nút $\times \frac{1}{8}$ + 6 nút $\times \frac{1}{2}$ = 4 nút





HỆ SỐ LẤP ĐẦY

$$\text{Hệ số lấp đầy} = \frac{\text{Thể tích vật chất chứa trong ô mạng}}{\text{Thể tích ô mạng}}$$

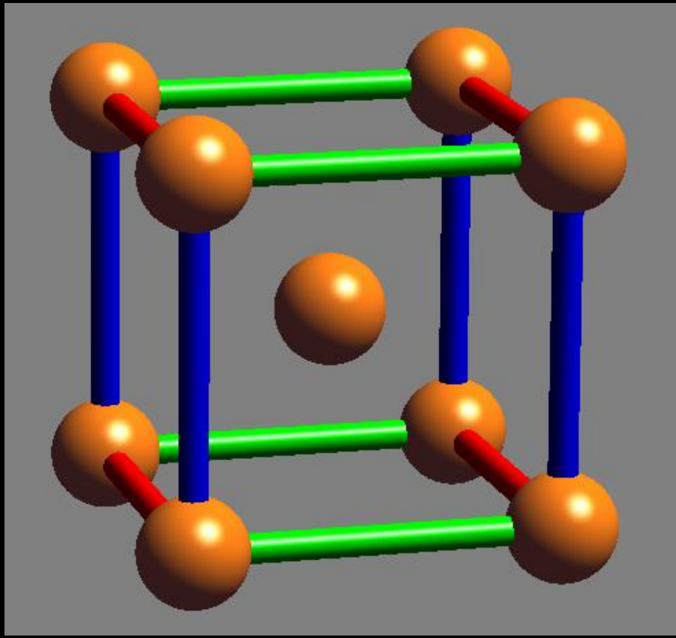
$$L = \frac{V_{\text{vật chất}}}{V_{\text{Ô mạng}}}$$

TRƯỜNG HỢP HỆ LP THỦY P

- $V_{\text{Ô mạng}} = a^3$
- $V_{\text{vật chất}} = V_{\text{1 nguyên tử}} = \frac{4}{3}\pi R^3 = \frac{4}{3}\pi\left(\frac{a}{2}\right)^3 = \frac{\pi}{6}a^3$

$$\Rightarrow L = \frac{\pi}{6} \approx 0{,}52$$

TRƯỜNG HỢP HỆ LẬP PHƯƠNG TÂM KHỐI I



- $V_{\text{ô mạng}} = a^3$
- $V_{\text{vật chất}} = V_{\text{2 nguyên tử}} = 2.\dfrac{4}{3}\pi R^3$

Với $R = \dfrac{\sqrt{3}}{4}a$

$$V_{\text{vật chất}} = \frac{4}{3}\pi\left(\frac{\sqrt{3}}{4}a\right)^3 = \frac{\sqrt{3}}{8}\pi a^3$$

$\Rightarrow$ Hệ số lấp đầy $= \dfrac{\sqrt{3}}{8}\pi = 0{,}68$

BIỂU DIỄN CÁC NÚT - CHUỖI - MẶT TINH THỂ – CHỈ SỐ MILLER

a. Ký hiệu một nút

Một nút bất kỳ của mạng liên hệ với gốc bằng một vectơ tịnh tiến :

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

Tọa độ của nút đó trên ba trục tọa độ là : n_1a_1, n_2a_2, n_3a_3.

Nếu a_1, a_2, a_3 là độ dài đơn vị trên ba trục thì tọa độ của nút là n_1, n_2, n_3

$\Rightarrow$ ký hiệu nút đó là [[n_1 n_2 n_3]] hay $n_1n_2n_3$.

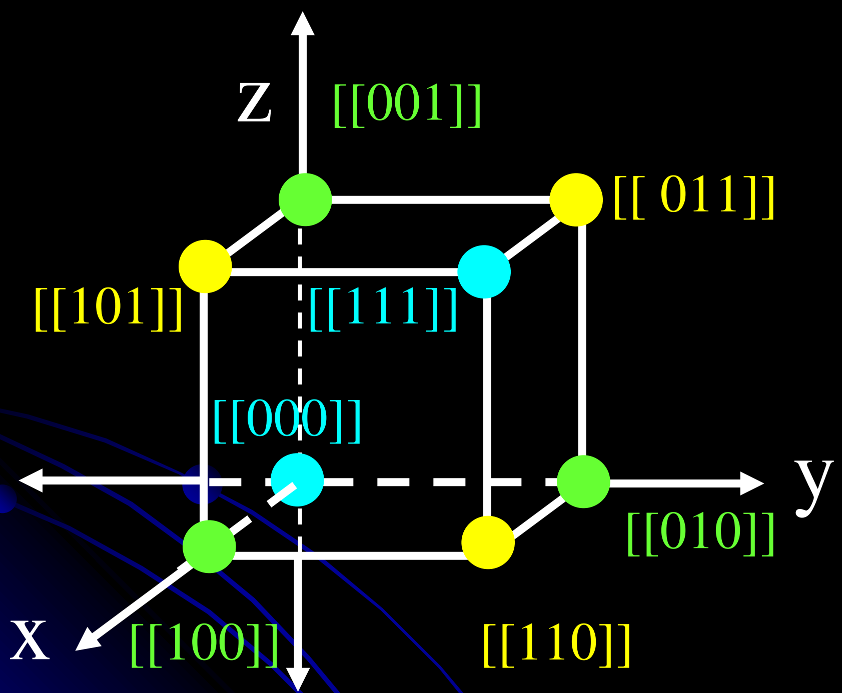
Nếu $n_i < 0 \Rightarrow$ ký hiệu $\bar{n}_i$ với i = 1, 2, 3.

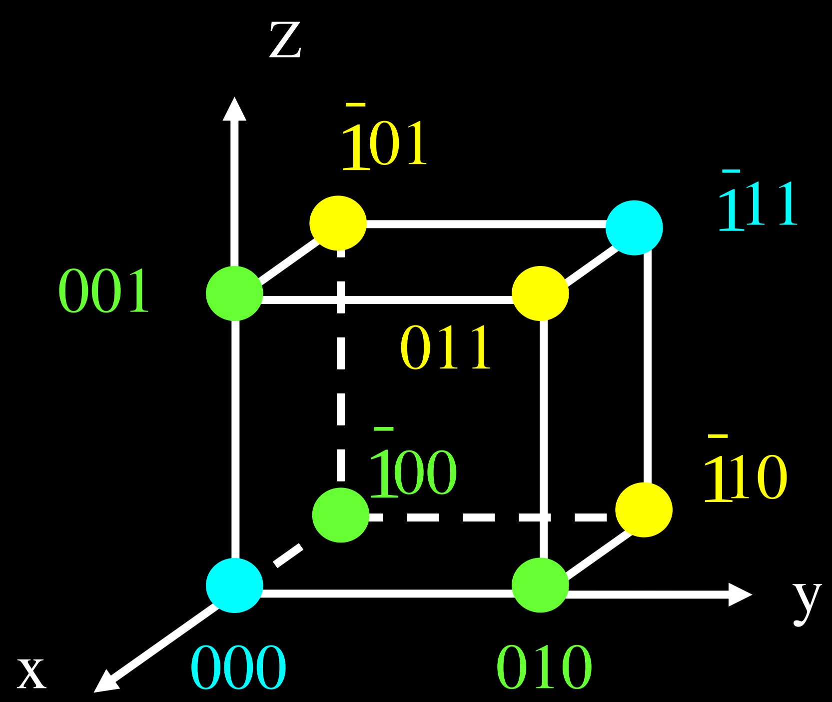
Ví dụ:

Một nút mạng có tọa độ thỏa: $\vec{T} = -3\vec{a}_1 + 2\vec{a}_2 - \vec{a}_3$

$\Rightarrow$ ký hiệu nút đó là [[$\bar{3}2\bar{1}$]].

MỘT SỐ NÚT CƠ BẢN
TRONG TINH THỂ LẬP PHƯƠNG

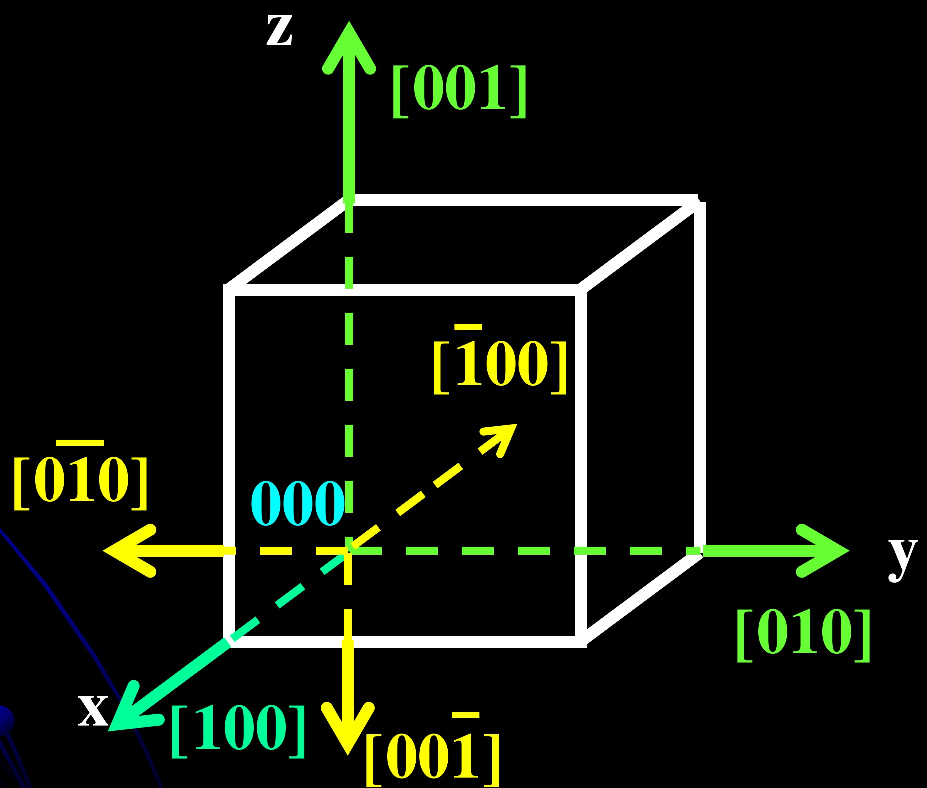


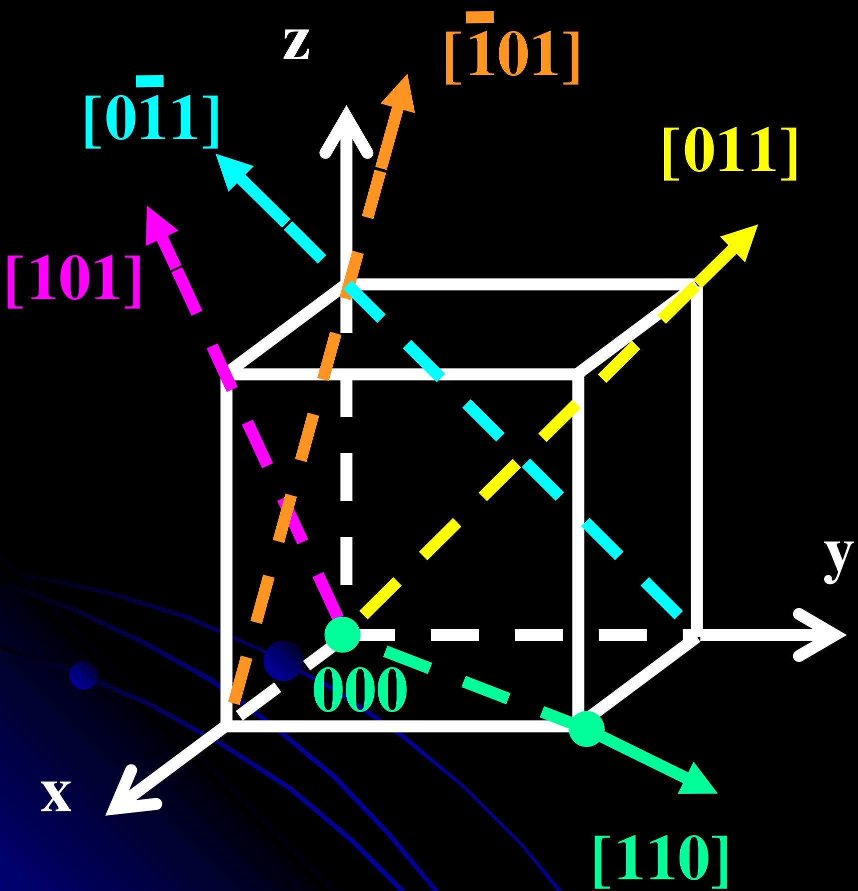


b. Ký hiệu một chuỗi (chiều) trong tinh thể

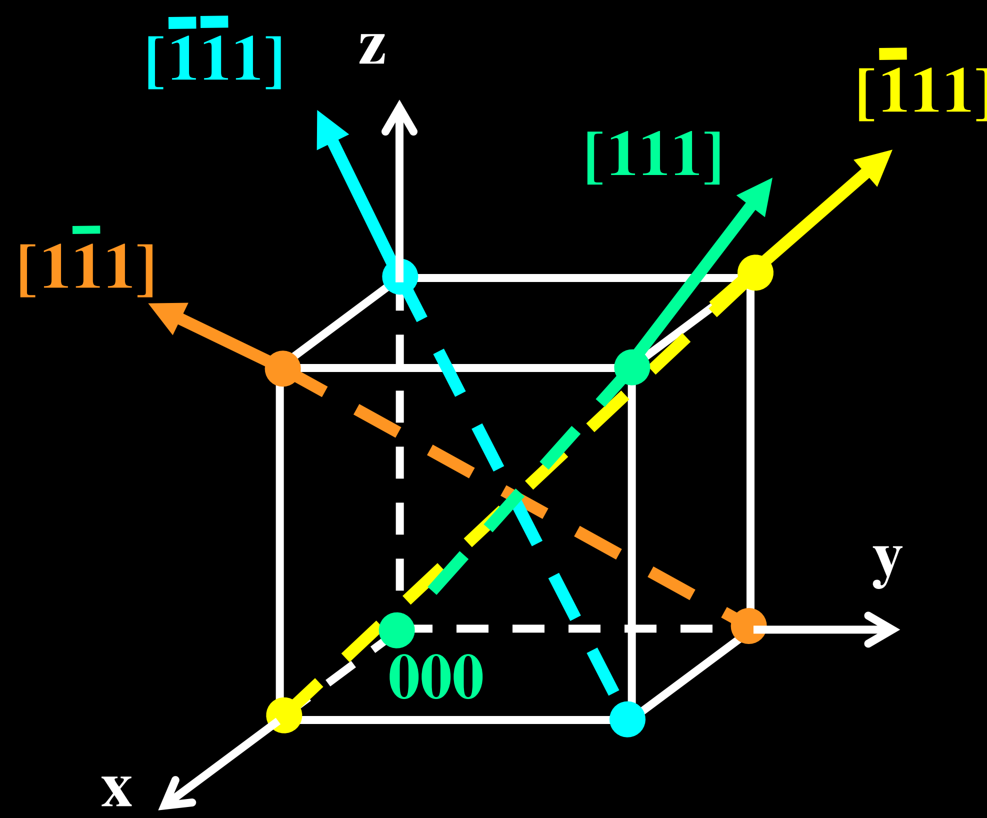
- Qua gốc kẻ đường thẳng song song với chuỗi nói trên. Ngoài gốc ra, nút gần gốc nhất nằm trên đường thẳng có ký hiệu [[uvw]] thì chuỗi mạng này có ký hiệu [uvw].

MỘT SỐ CHIỀU CƠ BẢN TRONG TINH THỂ LẬP PHƯƠNG





z
[$\bar{1}$01]
[0$\bar{1}$1]
[011]
[101]
y
000
x
[110]



[$\bar{1}\bar{1}$1]
z
[$\bar{1}$11]
[111]
[1$\bar{1}$1]
y
000
x

c. Ký hiệu một mặt mạng

Để ký hiệu cho một mặt mạng hay một họ mặt mạng song song nhau, ta chọn mặt nào đó nằm trong họ này gần gốc nhất. Giả sử mặt này cắt ba trục tọa độ theo thông số n_1a_1, n_2a_2, n_3a_3.

Ta lập tỉ số kép :

$$\frac{a_1}{n_1a_1} : \frac{a_2}{n_2a_2} : \frac{a_3}{n_3a_3} = \frac{1}{n_1} : \frac{1}{n_2} : \frac{1}{n_3} = \frac{n_2n_3}{n_1n_2n_3} : \frac{n_1n_3}{n_1n_2n_3} : \frac{n_1n_2}{n_1n_2n_3}$$

- Đặt $h : k : l = n_2n_3 : n_1n_3 : n_1n_2$
- $\Rightarrow$ chỉ số Miller (do Miller đề xuất): (h k l)

VÍ DỤ

Một họ mặt mạng song song nhau có mặt mạng gần trục tọa độ nhất cắt trục tọa độ tại:

$$x = 2a_1, y = a_2, z = 3a_3$$

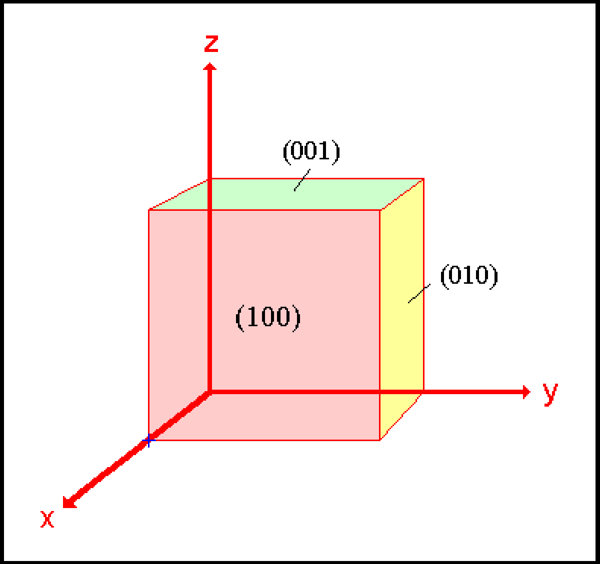
Ta lập tỉ số kép :

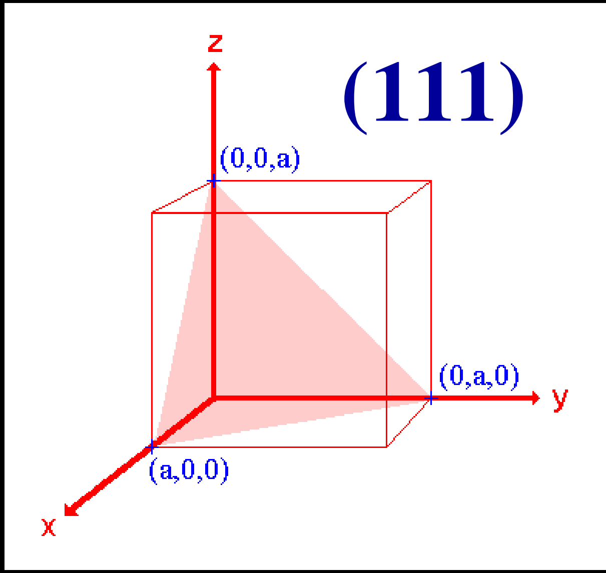
$$\frac{a_1}{n_1a_1} : \frac{a_2}{n_2a_2} : \frac{a_3}{n_3a_3} = \frac{1}{2} : \frac{1}{1} : \frac{1}{3} = \frac{3}{6} : \frac{6}{6} : \frac{2}{6} = 3:6:2$$

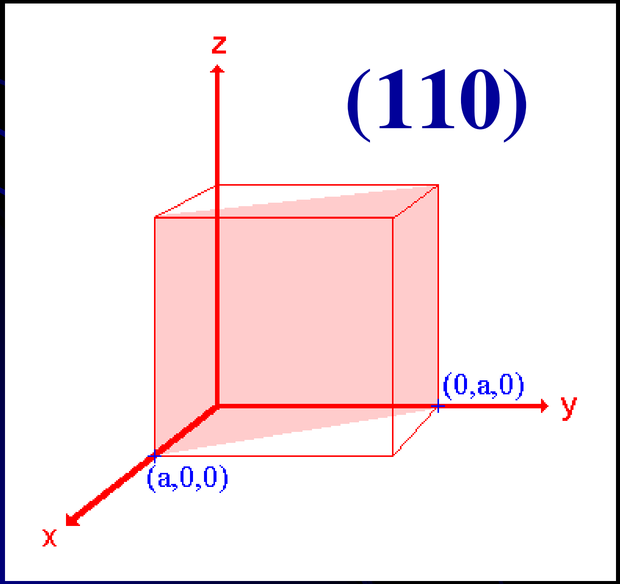
Đặt h : k : l = 3:6:2

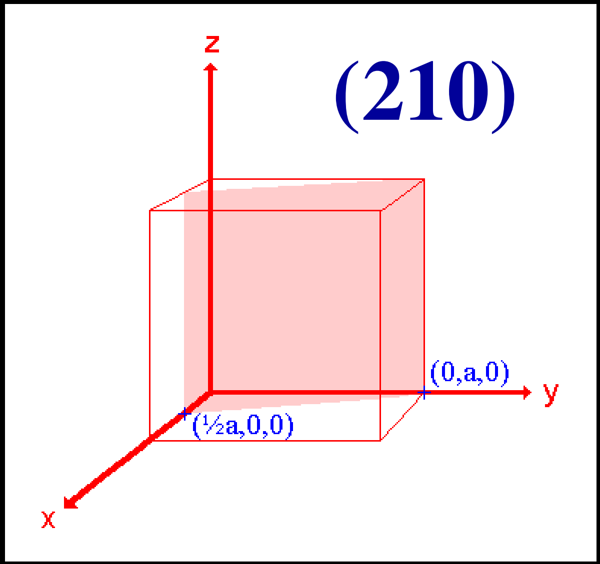
$\Rightarrow$ chỉ số Miller = (362)

Các mặt cơ bản trong tinh thể lập phương

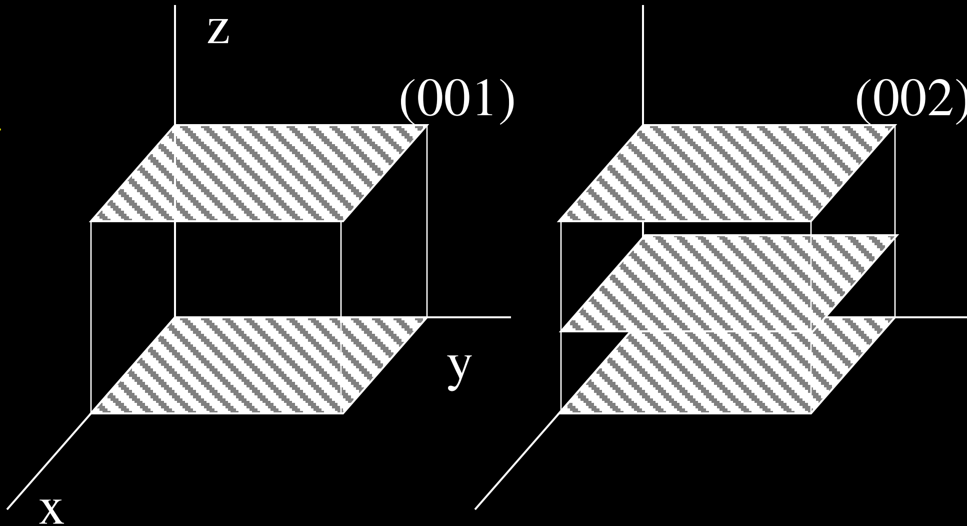








Ý NGHĨA CỦA KÍ HIỆU MẶT MẠNG



- Trong một họ mặt mạng, khoảng cách giữa hai mặt lân cận nhau được gọi là thông số mặt mạng và được ký hiệu d. Họ mặt mạng có ký hiệu (h k l) thì thông số mạng là d_{hkl}.

- Ký hiệu mặt mạng thể hiện:

➢Vị trí tương đối của mặt mạng đối với các trục của tinh thể.

➢Số mặt song song cắt trục trong phạm vi của mỗi đơn vị dài trên trục

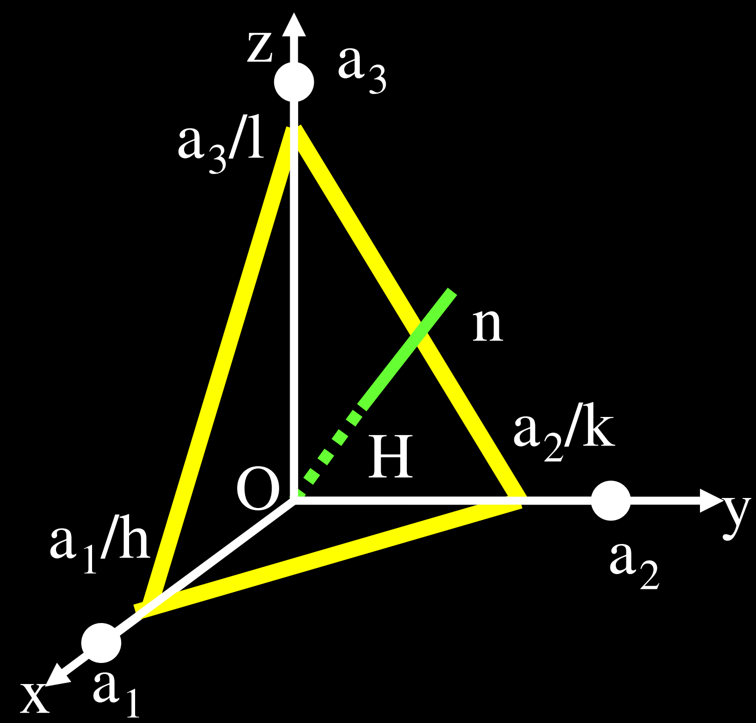
CÔNG THỨC LIÊN HỆ GIỮA d_{hkl} VỚI hkl VÀ a_1, a_2, a_3

d_{hkl} là đại lượng quan trọng trong các phép tính toán cấu trúc.

Xét trường hợp Ox ⊥ Oy ⊥ Oz; thông số của họ mặt hkl là d_{hkl}.

hkl cắt ba trục tọa độ theo độ dài a_1/h, a_2/k, a_3/l kể từ O.

a_1, a_2, a_3 : độ dài đơn vị.



Phương trình của mặt phẳng (h k l) :

$$\frac{h}{a}x + \frac{k}{b}y + \frac{l}{c}z = 1$$

hay $Ax + By + Cz = 1$

Phương trình của đường thẳng kẻ từ O⊥mặt phẳng (h k l)

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

$\Rightarrow x = mA,\ y = mB,\ z = mC$

H∈ và H∈ mp hkl ⇒ thỏa cả hai phương trình : tọa độ $H(x_H, y_H, z_H)$:

$$\Rightarrow \quad Ax_H + By_H + Cz_H = 1$$

$$x_H = mA,\ y_H = mB,\ z_H = mC$$

$$\Rightarrow mA^2 + mB^2 + mC^2 = 1$$

$$\Rightarrow m = \frac{1}{A^2 + B^2 + C^2}$$

$$x_H = \frac{A}{A^2 + B^2 + C^2} \quad y_H = \frac{B}{A^2 + B^2 + C^2} \quad z_H = \frac{C}{A^2 + B^2 + C^2}$$

$$d_{hkl} = OH = \sqrt{x_H^2 + y_H^2 + z_H^2} = \sqrt{\frac{A^2 + B^2 + C^2}{\left(A^2 + B^2 + C^2\right)^2}}$$

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

Trường hợp hệ lập phương:

$$a_1 = a_2 = a_3 = a$$

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

Trường hợp hệ bốn phương:

$$a_1 = a_2 \neq a_3$$

$$d_{hkl} = \frac{a_1}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2\left(\frac{a_1}{a_3}\right)^2}}$$

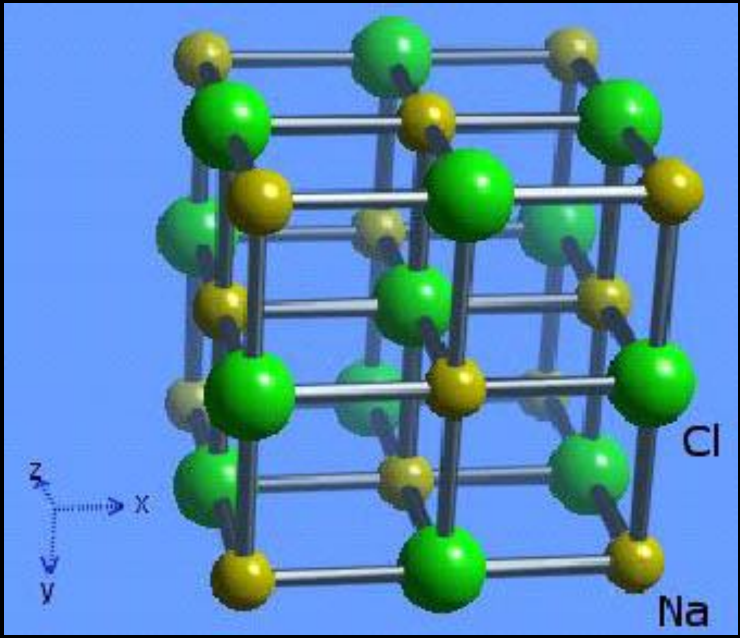
Trường hợp hệ ba phương và sáu phương:

$$a_1 = a_2 \neq a_3;\ \alpha = \beta = 90^0,\ \gamma = 120^0$$

$$d_{hkl} = \frac{a_1}{\sqrt{\frac{4}{3}(h^2 + k^2 + hk) + l^2\left(\frac{a_1}{a_3}\right)^2}}$$

7. CẤU TRÚC TINH THỂ CỦA MỘT SỐ TINH THỂ ĐƠN GIẢN

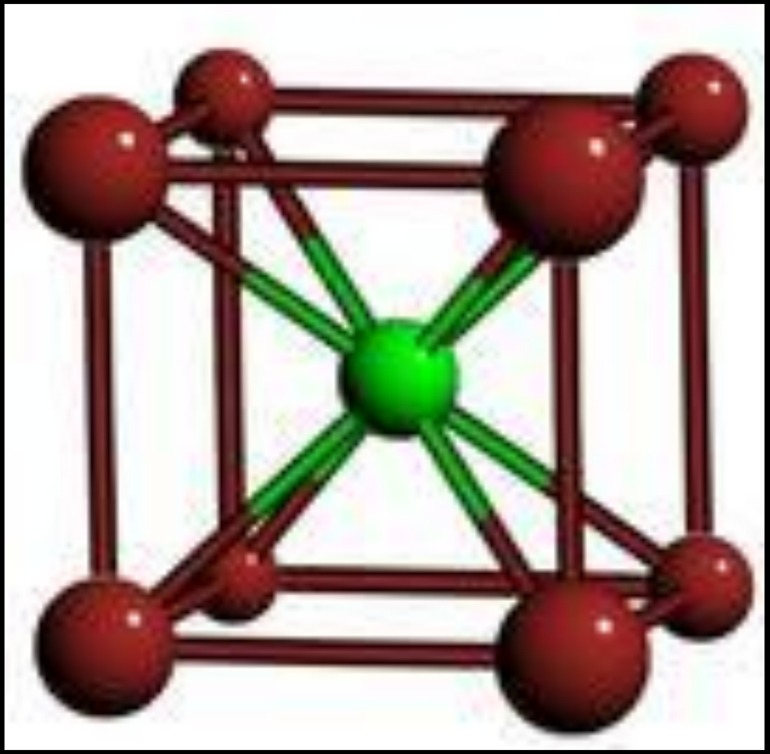
a. Cấu trúc của NaCl



- Mạng Bravais: mạng lập phương tâm mặt F (cfc)
- Cơ sở của ô mạng gồm:
- một ion Na^+ [[000]] và một ion Cl^- [[½00]] cách nhau ½ cạnh của ô mạng hình lập phương.
- Hay: ion Na^+ [[000]] và ion Cl^- [[½, ½, ½]].

b. Cấu trúc của CsCl:

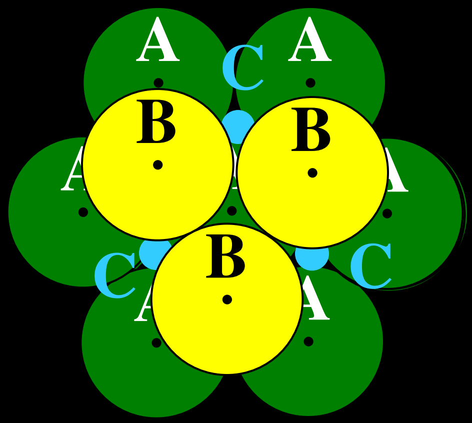
- ***Mạng Bravais:*** Thuộc mạng lập phương nguyên thủy P với mỗi ô mạng có hai nguyên tử cơ sở.
- Cơ sở của ô mạng gồm:
- **Cs : [[000]]; Cl : [[½, ½ , ½]]**



Cấu trúc tinh thể CsCl

c. Cấu trúc lục giác xếp chặt

- ***Lớp thứ nhất:*** Mỗi quả cầu được bao xung quanh bởi 6 quả cầu khác ⇒ vị trí A.
- có sáu vị trí hõm vào của lớp thứ nhất thuộc hai loại B và C.

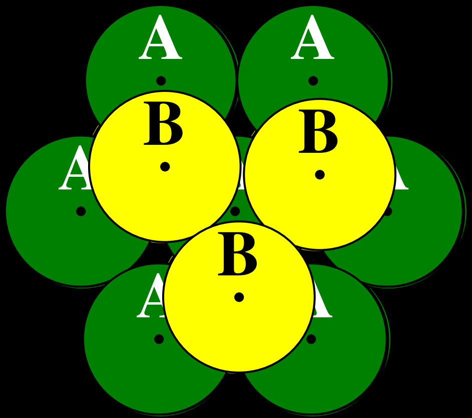


-***Lớp thứ hai:*** Có thể đặt các quả cầu lớp thứ hai vào vị trí B hay C sao cho mỗi quả cầu lớp thứ 2 tiếp xúc với 3 quả cầu của lớp thứ nhất.

-Giả sử lớp thứ hai chiếm các vị trí B.

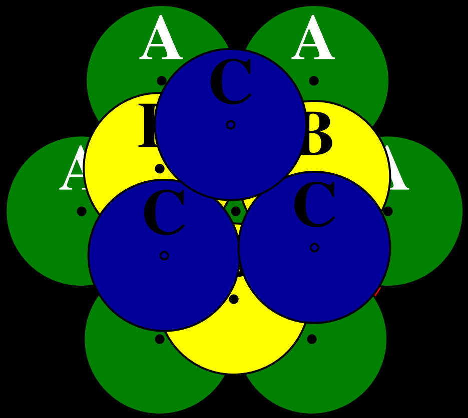
Lớp thứ 3: có 2 cách xếp:

+ ***Cách 1:*** Đặt các quả cầu lên vị trí A, rồi lớp tiếp theo là B và cứ thế tạo thành các lớp liên tiếp ABABAB...⇒ *Cấu trúc lục giác xếp chặt.*

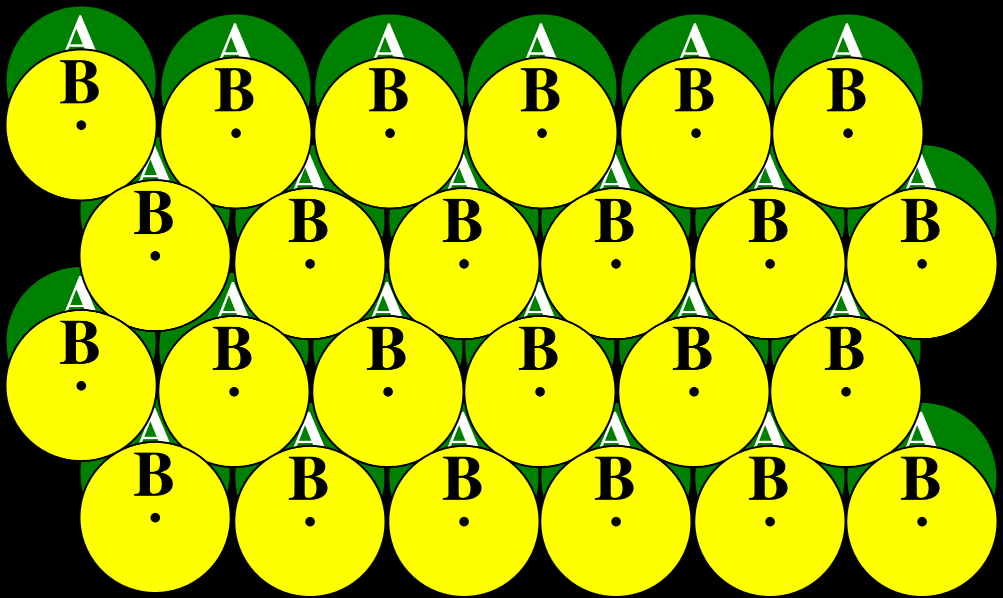


+ ***Cách 2:*** Đặt các quả cầu lên vị trí C, rồi lớp tiếp theo là A và cứ thế tạo thành các lớp liên tiếp ABCABC ...

⇒ *Cấu trúc lập phương tâm mặt.*

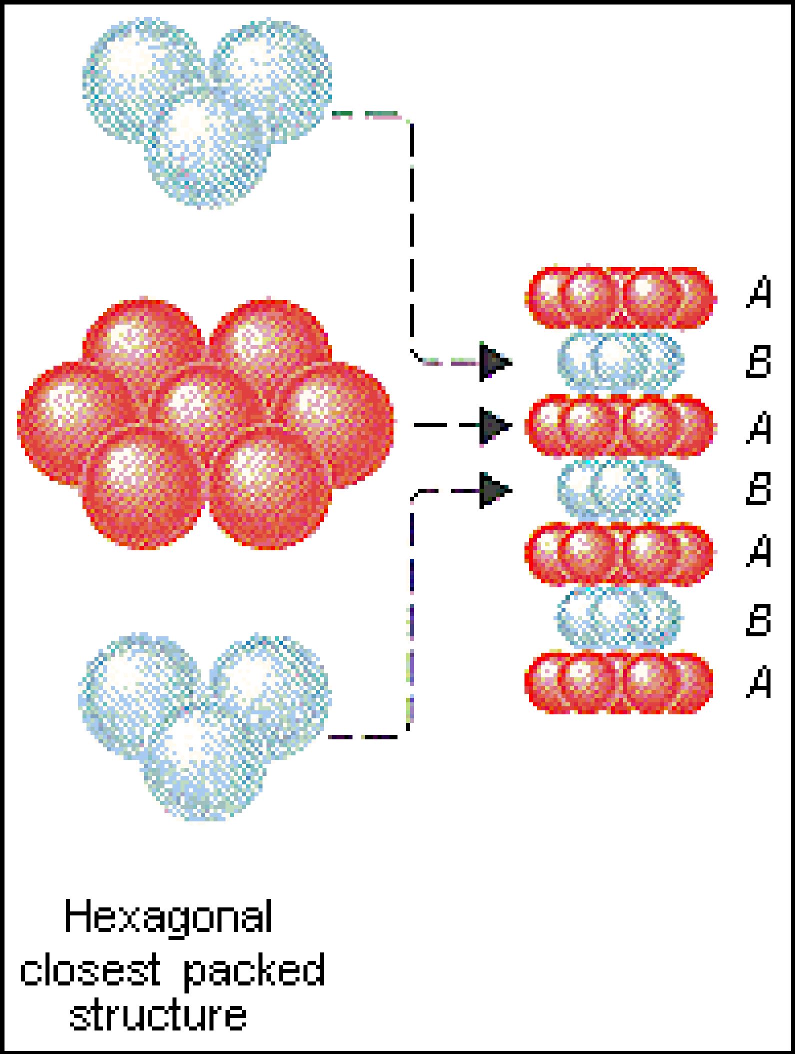


CẤU TRÚC LỤC GIÁC XẾP CHẶT

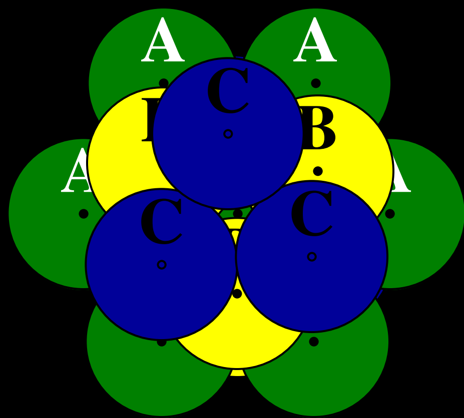


Cấu trúc lục giác xếp chặt ABABAB...

Mạng lục giác xếp chặt có ô mạng Bravais lục giác loại P.

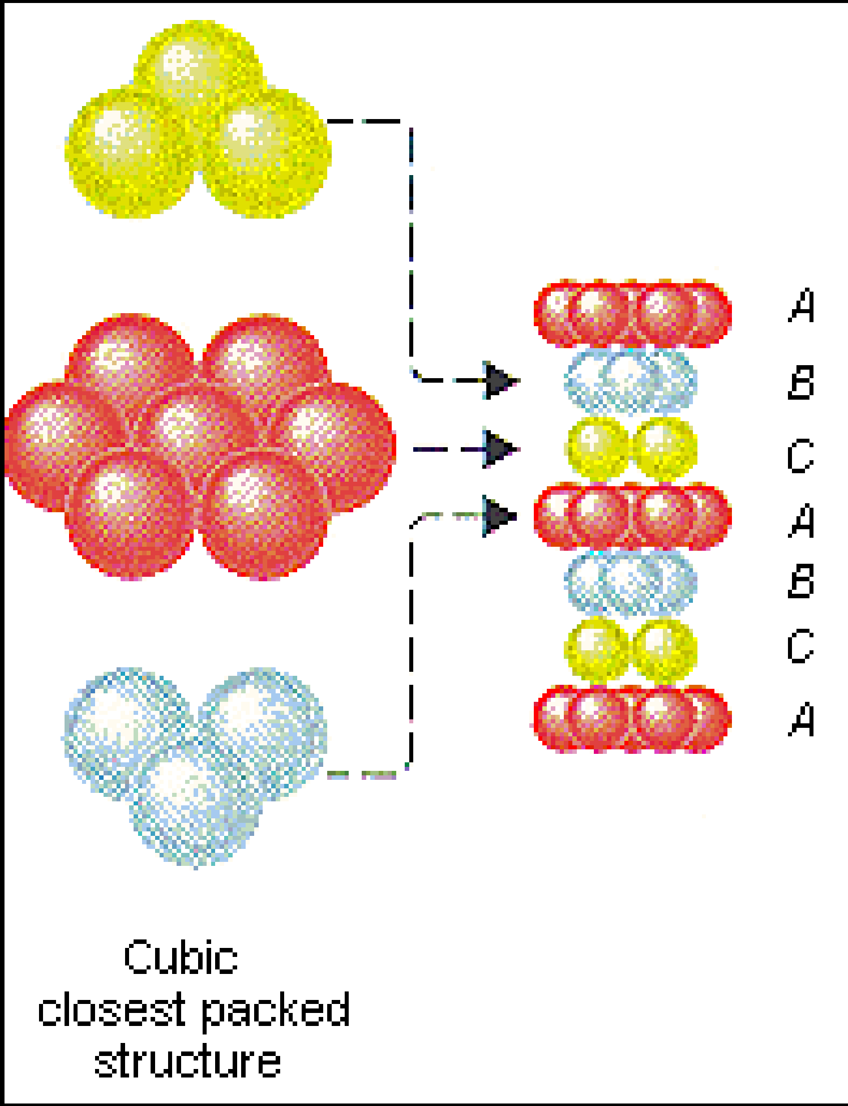


CẤU TRÚC XẾP CHẶT KIỂU LP TÂM MẶT



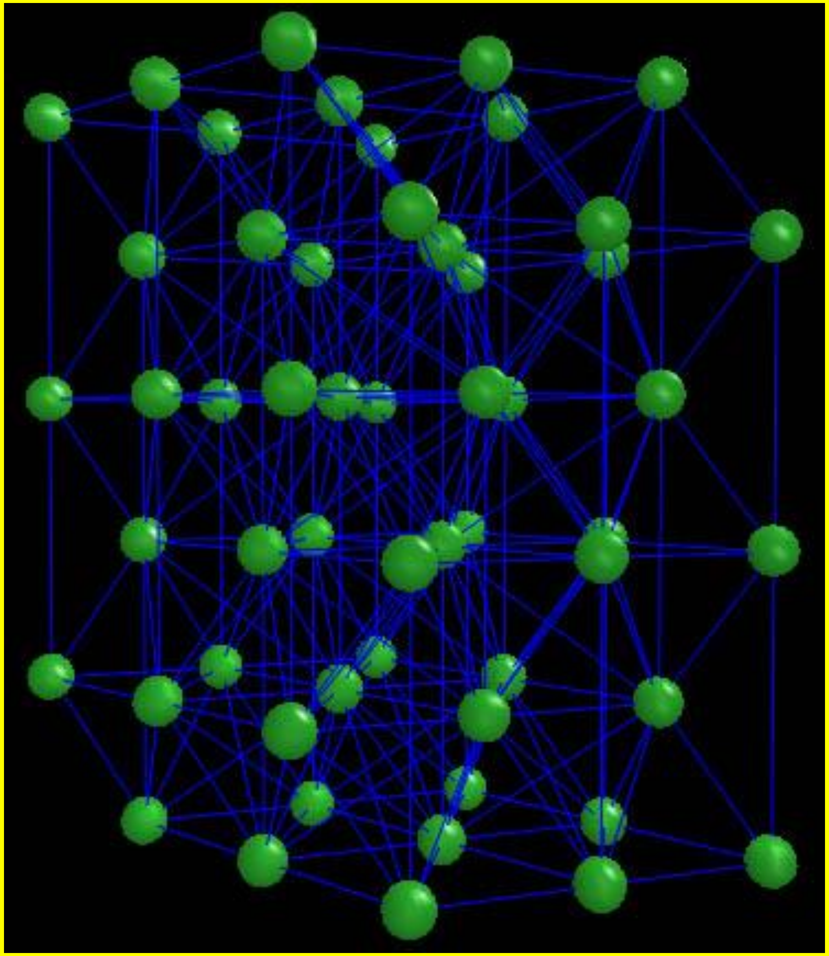
Cấu trúc xếp chặt ABCABC

Mạng lập phương tâm mặt với mặt xếp chặt là (111).

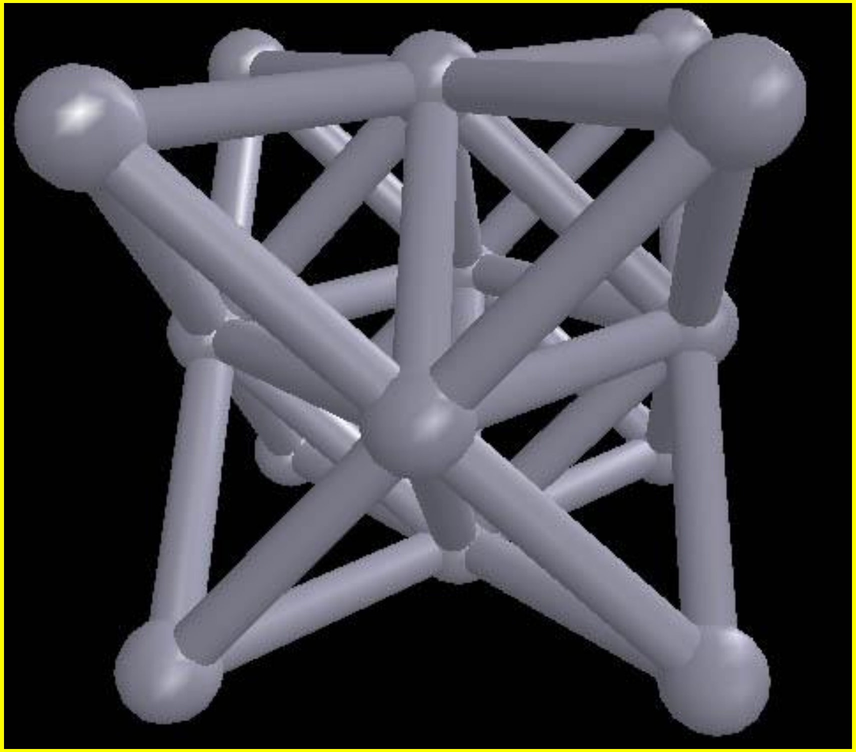


Cấu trúc xếp chặt dẫn đến mạng lập phương tâm mặt

CÁC CHẤT KẾT TINH THEO MẠNG LỤC GIÁC



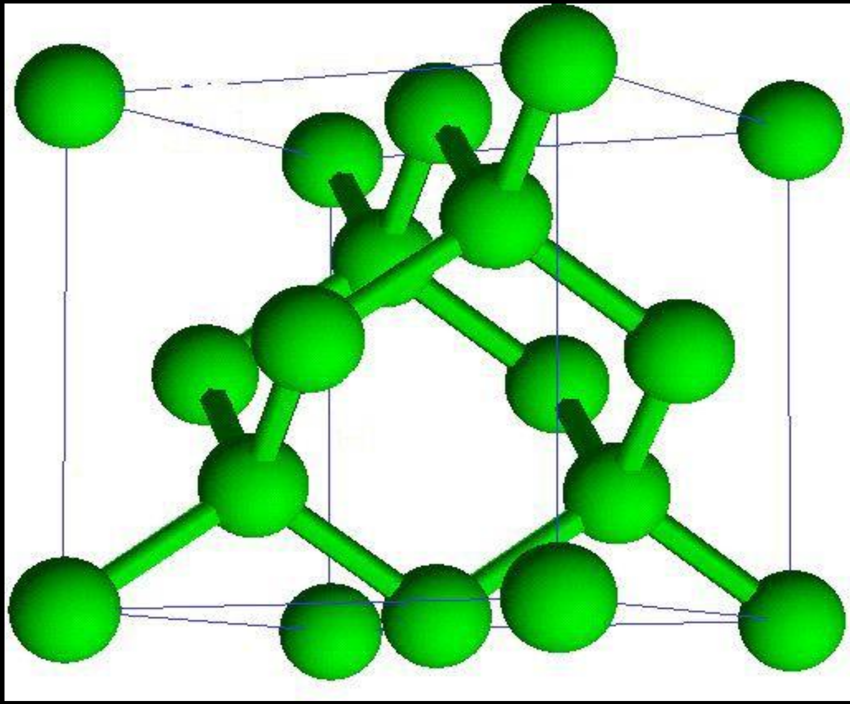
Cấu trúc lục giác xếp chặt (Mg)



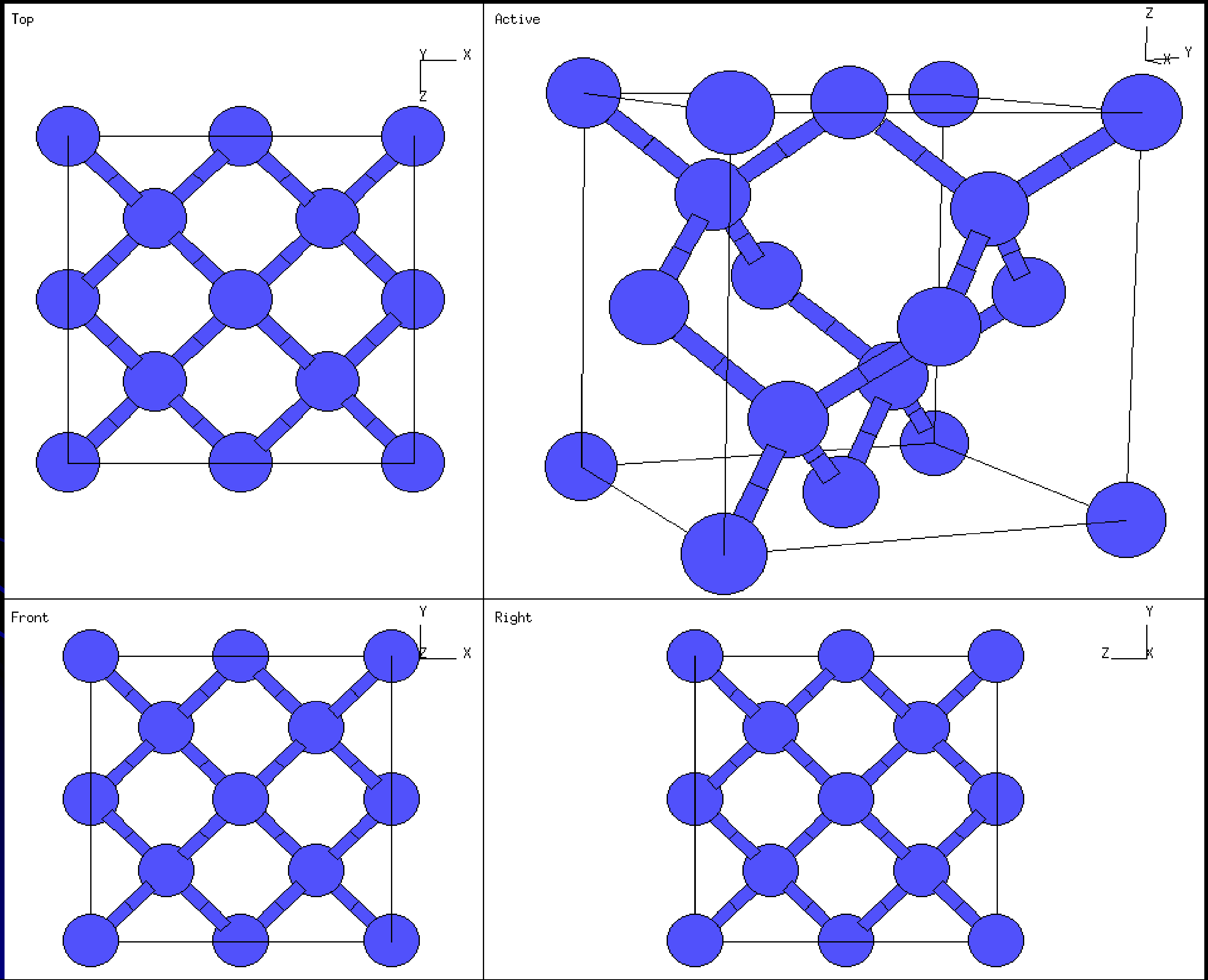
Cấu trúc xếp chặt dẫn đến mạng lập phương tâm mặt (Ca)

d. Cấu trúc của kim cương

- ***Mạng Bravais:*** Lập phương tâm mặt F.
- ***Cơ sở:*** hai nguyên tử carbon ở vị trí nút [[000]] và [[1/4 1/4 1/4]].
- ***Ô đơn vị chứa 8 nguyên tử.*** Cấu trúc kim cương có thể được mô tả bằng hai mạng lập phương tâm mặt, dịch chuyển với nhau theo đường chéo chính một đoạn bằng 1/4 đường chéo đó.
- ***Hệ số lấp đầy:*** *0,34.* Không thuộc mạng xếp chặt.



Ô MẠNG TINH THỂ KIM CƯƠNG DƯỚI CÁC GÓC NHÌN KHÁC NHAU



8. MẠNG ĐẢO (MẠNG NGƯỢC)

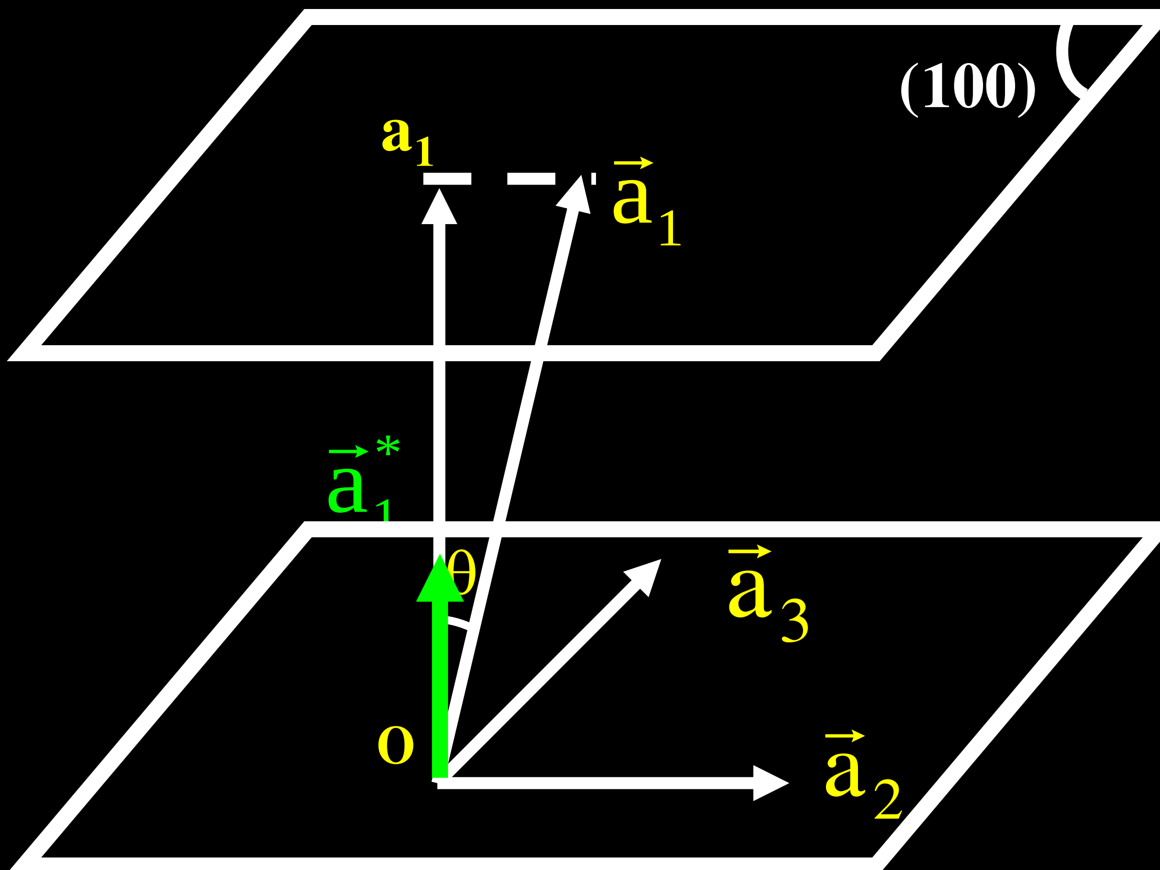
a. ĐỊNH NGHĨA

Cho một mặt thuận có ba vectơ cơ sở $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$

Ta biểu diễn họ mặt mạng song song mặt $(\vec{a}_2, \vec{a}_3)$ tức họ mặt (100) bằng một vectơ $\vec{a}_1^*$ vuông góc mặt phẳng $(\vec{a}_2, \vec{a}_3)$ và $a_1^* = 2\pi/d_{100}$.

Gọi Oa_1 là hình chiếu của $\vec{a}_1$ trên pháp tuyến của mặt (100) tức $Oa_1' = d_{100}$, ta có:

$$a_1^*.\ Oa_1 = 2\pi$$



Tất cả các điều kiện trên cho phép ta có :

$$\vec{a}_1^{\,*}.\vec{a}_1 = 2\pi; \quad \vec{a}_1^{\,*}.\vec{a}_2 = 0; \quad \vec{a}_1^{\,*}.\vec{a}_3 = 0$$

Tương tự ta thành lập các vectơ $\vec{a}_2^{\,*}; \vec{a}_3^{\,*}$ sao cho:

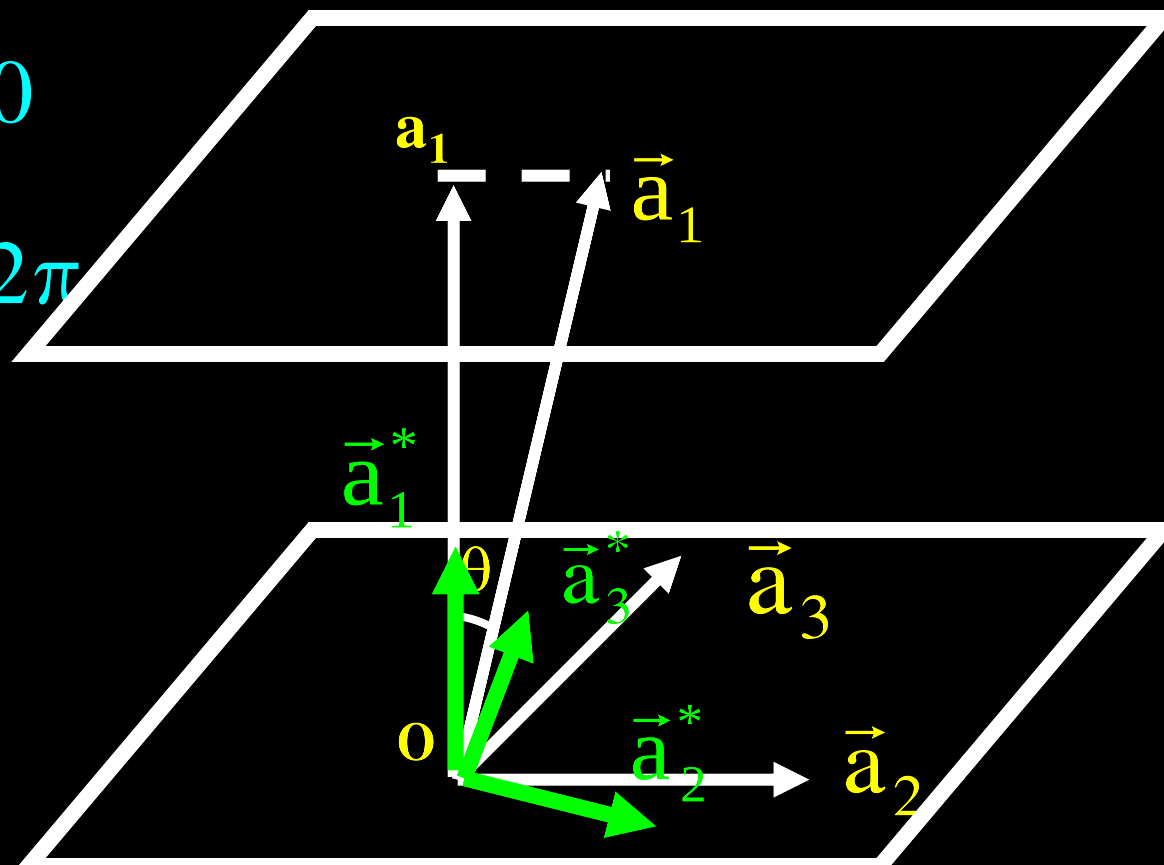
$$\vec{a}_2^{\,*}.\vec{a}_1 = 0 \qquad \vec{a}_3^{\,*}.\vec{a}_1 = 0$$

$$\vec{a}_2^{\,*}.\vec{a}_2 = 2\pi \qquad \vec{a}_3^{\,*}.\vec{a}_2 = 0$$

$$\vec{a}_2^{\,*}.\vec{a}_3 = 0 \qquad \vec{a}_3^{\,*}.\vec{a}_3 = 2\pi$$

$$\vec{a}_i^{\,*}.\vec{a}_j = 2\pi\delta_{ij}$$

$$\delta ij = \begin{cases} 1 \text{ nếu } i = j \\ 0 \text{ nếu } i \neq j \end{cases}$$



Mạng được xây dựng trên ba vectơ $\overrightarrow{a_1^*}, \overrightarrow{a_2^*}, \overrightarrow{a_3^*}$ được gọi là mạng ngược của mạng thuận đã cho.

Các nút của mạng ngược có thể xác định bởi véctơ:

$$\overrightarrow{G_{hkl}} = h.\overrightarrow{a_1^*} + k.\overrightarrow{a_2^*} + l.\overrightarrow{a_3^*} \quad ; h, k, l \in Z$$

MỘT SỐ TÍNH CHẤT CỦA MẠNG ĐẢO (MẠNG NGƯỢC)

1. Gọi V là thể tích của ô mạng thuận; V* thể tích của ô mạng ngược, ta có:

$$V = \vec{a}_1.(\vec{a}_2 \wedge \vec{a}_3)$$

$$V^* = \vec{a}_1^*.(\vec{a}_2^* \wedge \vec{a}_3^*)$$

Suy ra: $V.V^* = (2\pi)^3$

2. Nếu $\vec{a}_1 \perp \vec{a}_2 \perp \vec{a}_3$ thì $\vec{a}_1^* \perp \vec{a}_2^* \perp \vec{a}_3^*$

Và $\vec{a}_1^* // \vec{a}_1; \vec{a}_2^* // \vec{a}_2; \vec{a}_3^* // \vec{a}_3$

3. Ích lợi của mạng ngược : nếu nối gốc tọa độ với một nút (h k l) của mạng ngược được biểu diễn bằng vectơ tức là :

$$\vec{G}_{hkl} = h.\vec{a}^* + k.\vec{b}^* + l.\vec{c}^*$$

$\Rightarrow$ $\vec{G}_{hkl}$ phải vuông góc mặt mạng (h k l) của mạng thuận và có độ dài :

$$G_{hkl} = \frac{2\pi}{d_{hkl}}$$

$\Rightarrow$ *có thể biểu diễn một họ mạng thuận bằng một nút của mạng ngược.*

$\Rightarrow$ *mỗi nút của mạng ngược có thể biểu diễn cho một họ mạng thuận (tức mạng tinh thể) về hướng và thông số mặt mạng.*

VÍ DỤ

Nút [[312]] của mạng ngược biểu diễn họ mặt mạng (312) của mạng thuận.

Họ (312) có hướng vuông góc với $\vec{G}_{312}$ là hướng của vectơ nối từ gốc O đến nút [[312]] của mạng ngược và có thông số:

$$d_{312} = \frac{2\pi}{G_{312}}$$

4. Mạng ngược của một mạng ngược là mạng thuận.

5. Nút của mạng ngược mà ký hiệu là [nh, nk, nl] tương đương với một họ mạng thuận (nh, nk, nl) và có thông số n lần nhỏ hơn thông số của họ (h k l) .

VÍ DỤ

Nút [[111]] được biểu diễn bởi véc tơ G_{111} trong mạng ngược sẽ biểu diễn cho họ mạng (111) có thông số d_{111} trong mạng thuận.

Nút [[222]] được biểu diễn bởi véc tơ G_{222} trong mạng ngược sẽ biểu diễn cho họ mạng (222) có thông số d_{222} trong mạng thuận.

Ta có: $G_{222} = 2G_{111} \Rightarrow d_{222} = \dfrac{2\pi}{G_{222}} = \dfrac{2\pi}{2G_{111}} = \dfrac{d_{111}}{2}$

$$\Rightarrow d_{222} = \frac{d_{111}}{2}$$