

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
- III. CẤU TRÚC TINH THỂ CỦA MỘT SỐ TINH THỂ ĐƠN GIẢN

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

- I. CÔNG THỨC NHIỀU XẠ CỦA VULF – BRAGG
- II. CẦU PHẢN XẠ CỦA EWALD
- III. CÁC PHƯƠNG PHÁP CHỤP TINH THỂ BẰNG TIA X

B. BÀI TẬP

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):

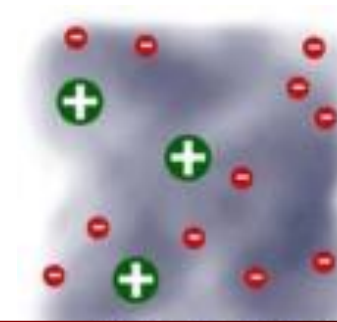
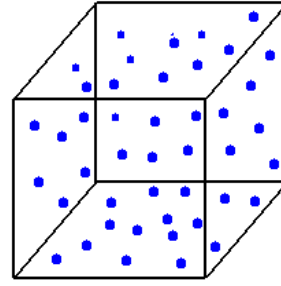
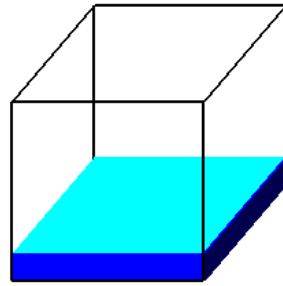
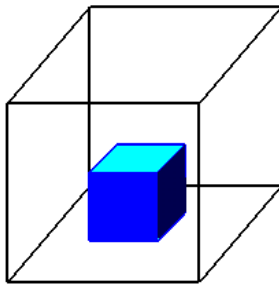
RẮN - LỎNG - KHÍ

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



Độ mất trật tự

Thể
RẮN

Thể
LỎNG

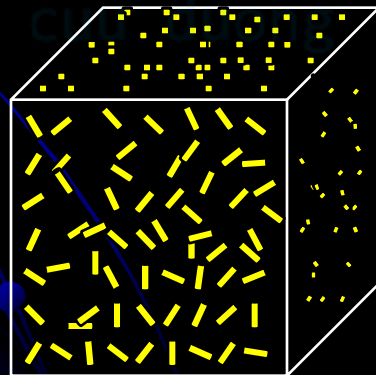
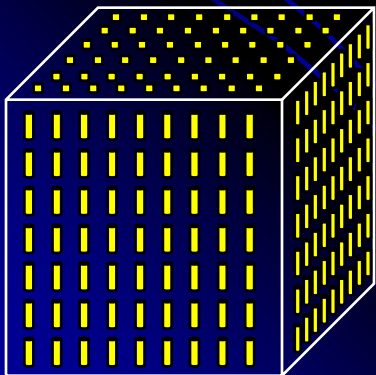
Thể
KHÍ

Thể
PLASMA

Tinh thể

Vô định hình

Chất lưu



Các loại chất rắn

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

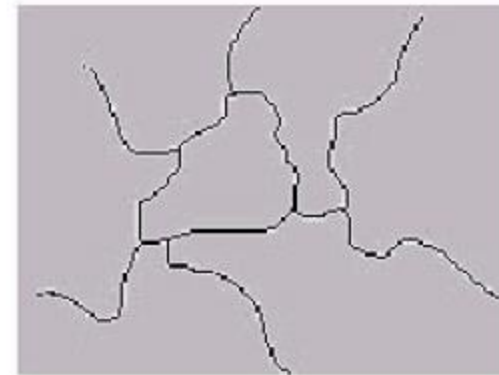
- **Đơn tinh thể:** Các nguyên tử sắp xếp tuần hoàn trong toàn bộ không gian của vật liệu

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

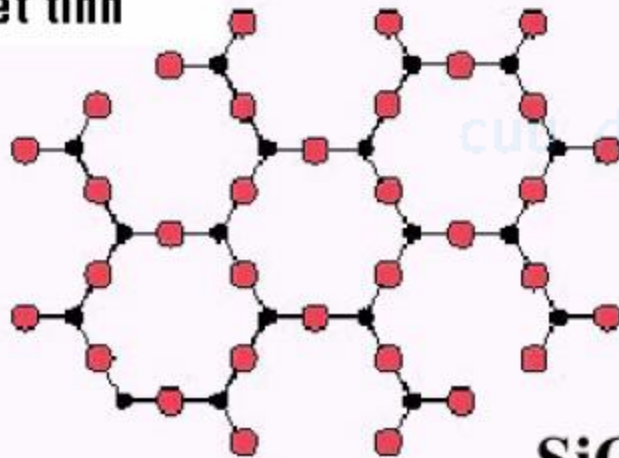
Vật liệu vô định hình: các nguyên tử không sắp xếp tuần hoàn trong không gian



Đa tinh thể



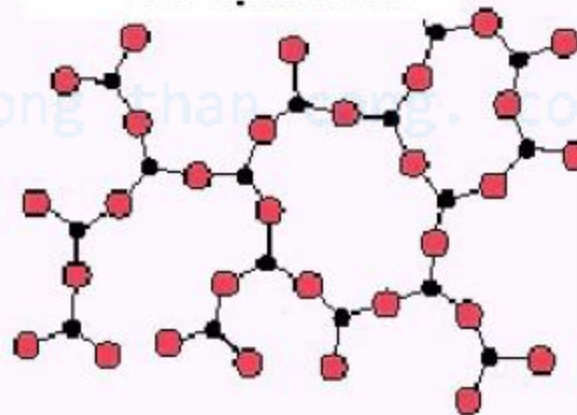
Kết tinh



(a)



Vô định hình



(b)

MỘT SỐ TINH THỂ TRONG TỰ NHIÊN



Đường

cuu duong than cong. com



Thạch anh

CuuDuongThanCong.com



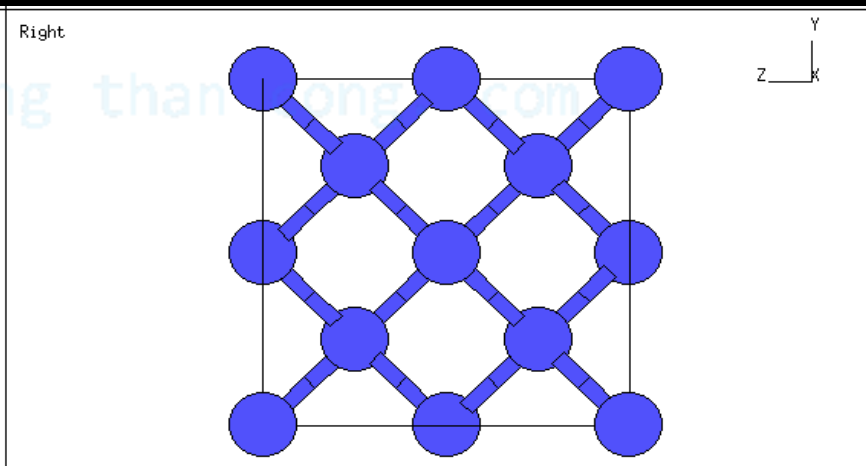
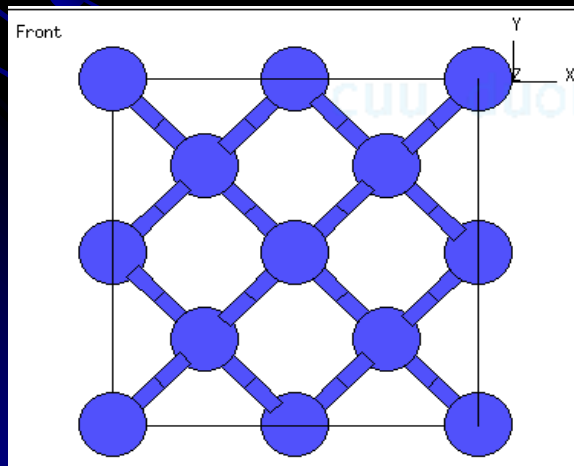
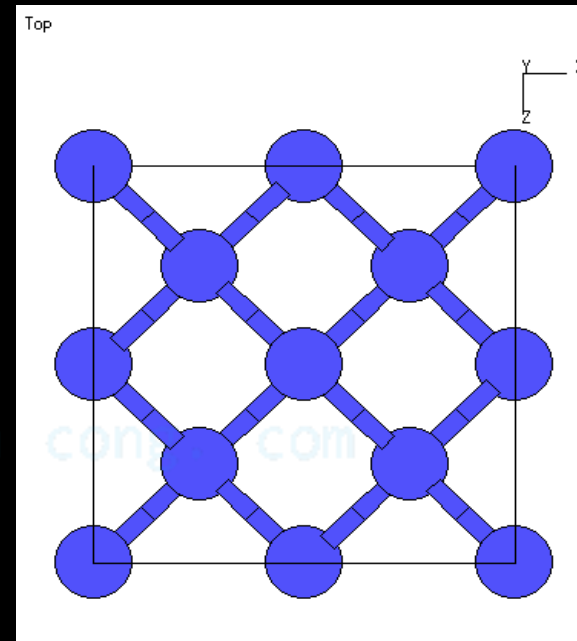
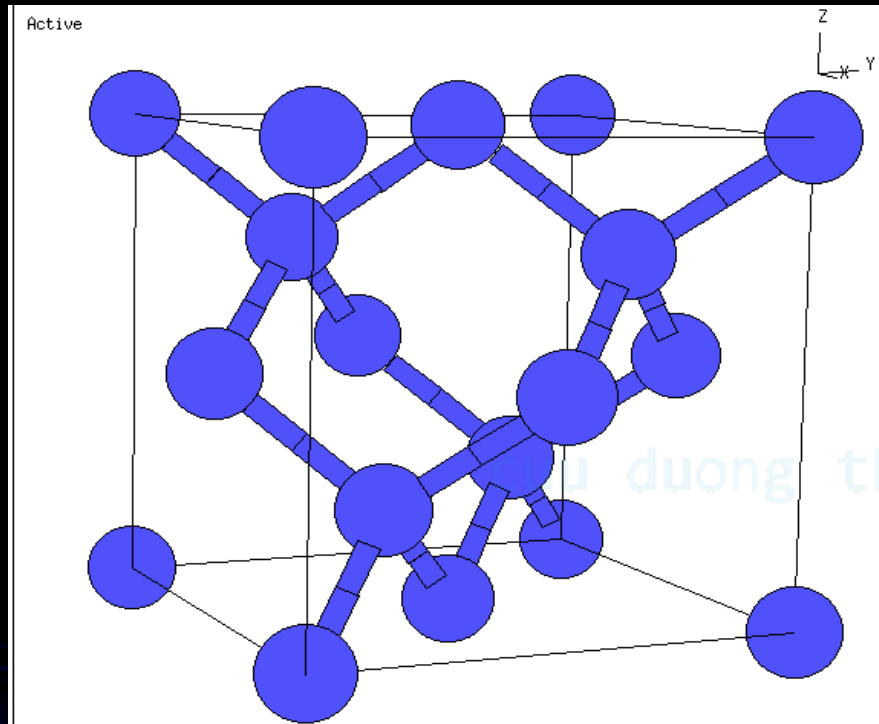
Kim cương



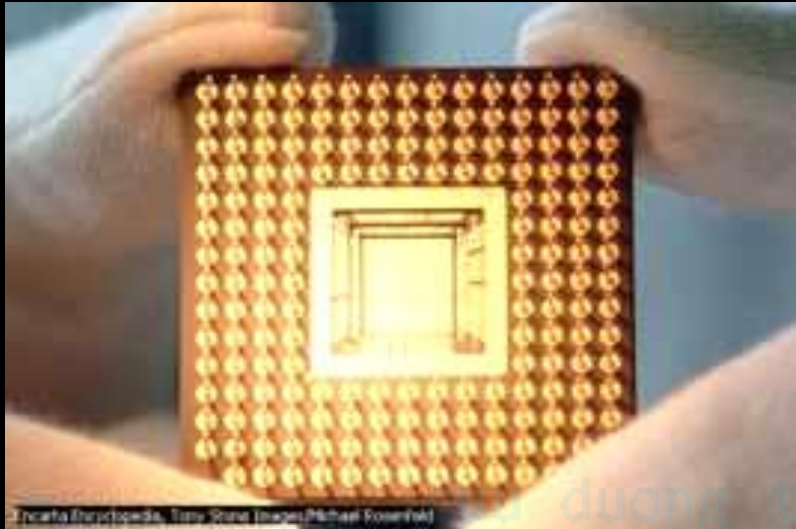
Pyrite

<https://fb.com/tailieudientucntt>

VD: Sự sắp xếp tuần hoàn của các ngử trong mạng tinh thể kim cương



MỘT SỐ ỨNG DỤNG



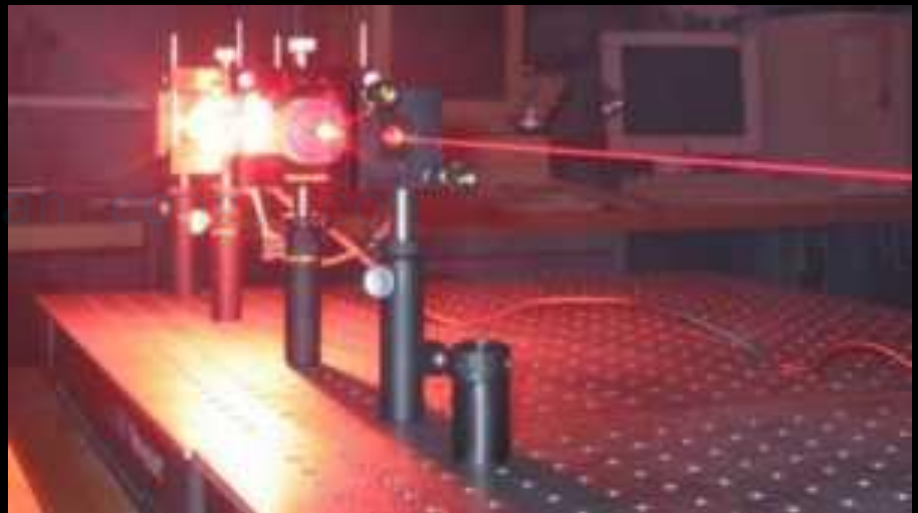
Bán dẫn



Siêu dẫn



Màn hiển thị



Laser

II. MẠNG TINH THỂ

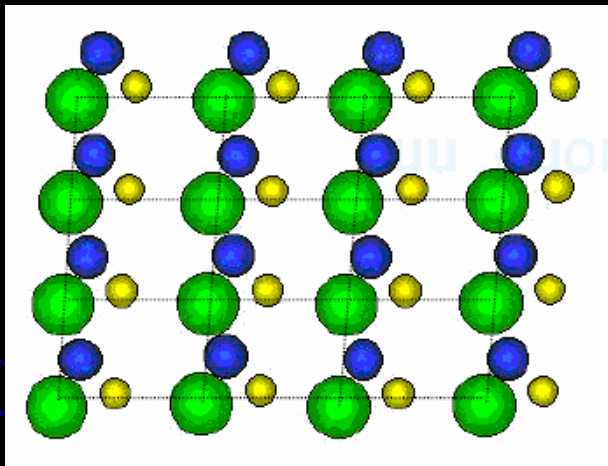
Khái niệm:

- Để mô tả cấu trúc tinh thể (sự sắp xếp của các ngử) người ta dùng khái niệm *mạng tinh thể*.
- Có thể quan niệm tinh thể lý tưởng được tạo thành bằng cách sắp xếp đều đặn trong không gian các *đơn vị cấu trúc giống hệt nhau*.
- Trong các tinh thể đơn giản nhất là các tinh thể kim loại với đơn vị cấu trúc chỉ có một nguyên tử.

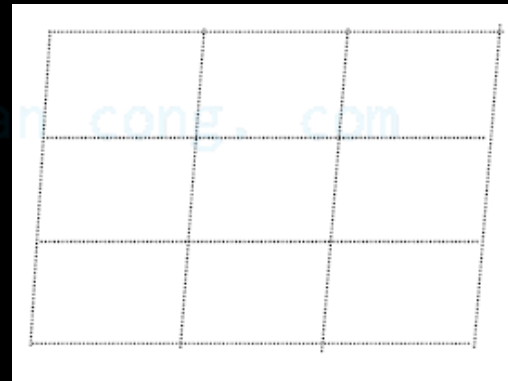
II. MẠNG TINH THỂ

II.1. Cấu trúc tinh thể

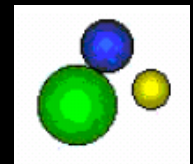
Cấu trúc tinh thể = mạng tinh thể + cơ sở



=



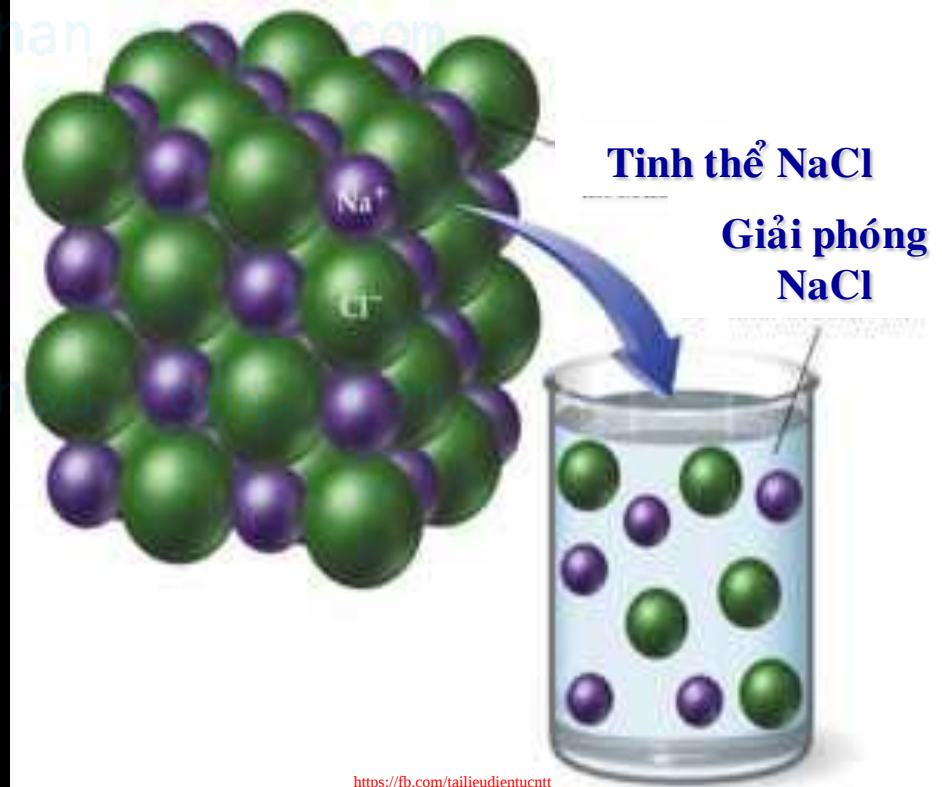
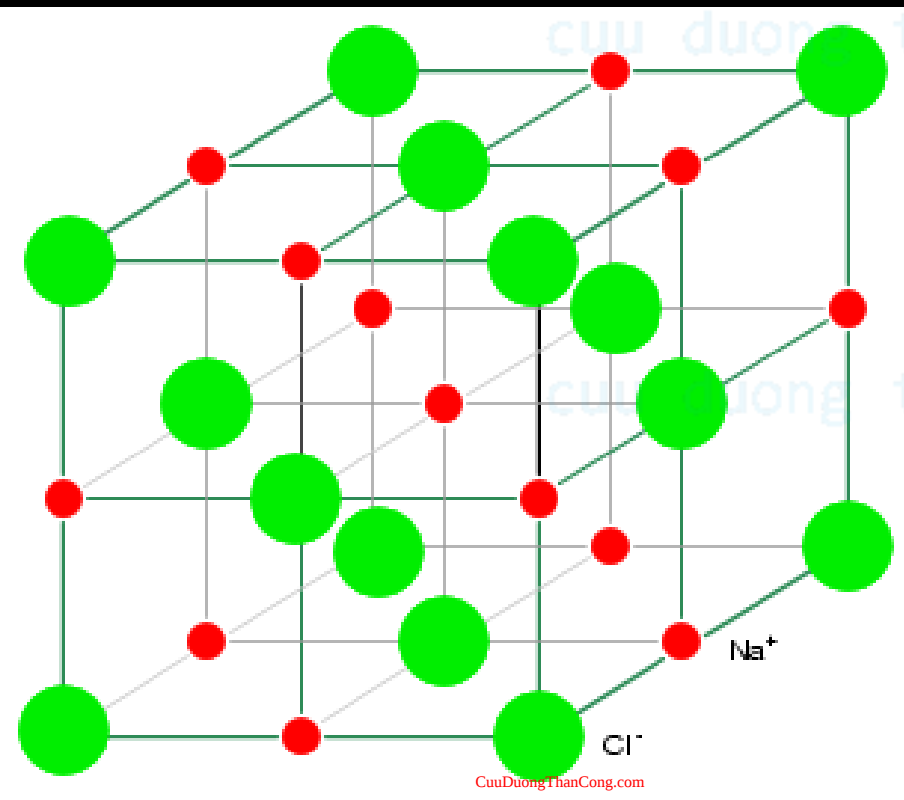
+

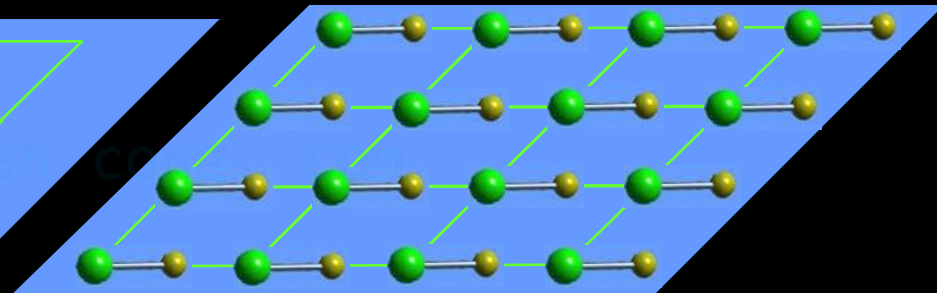
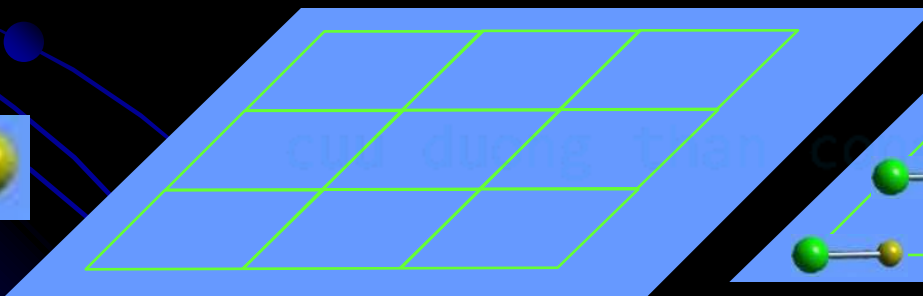
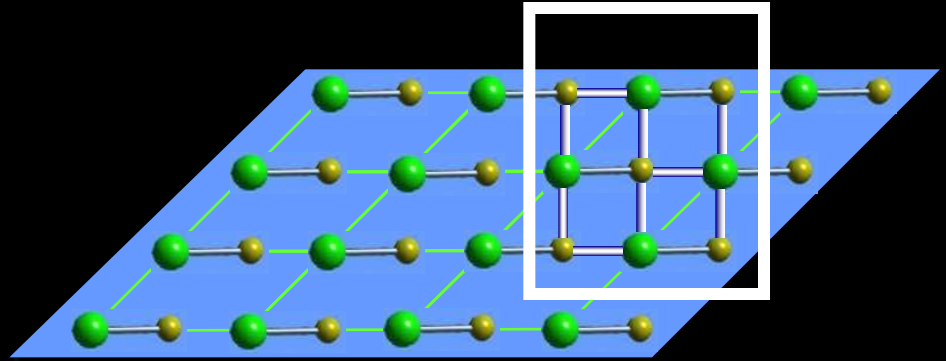
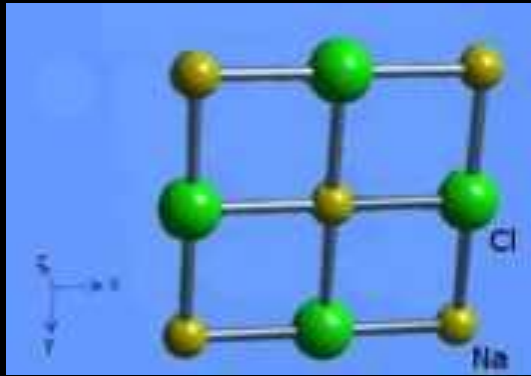


cuu duong than cong. com

• **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**.

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

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

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

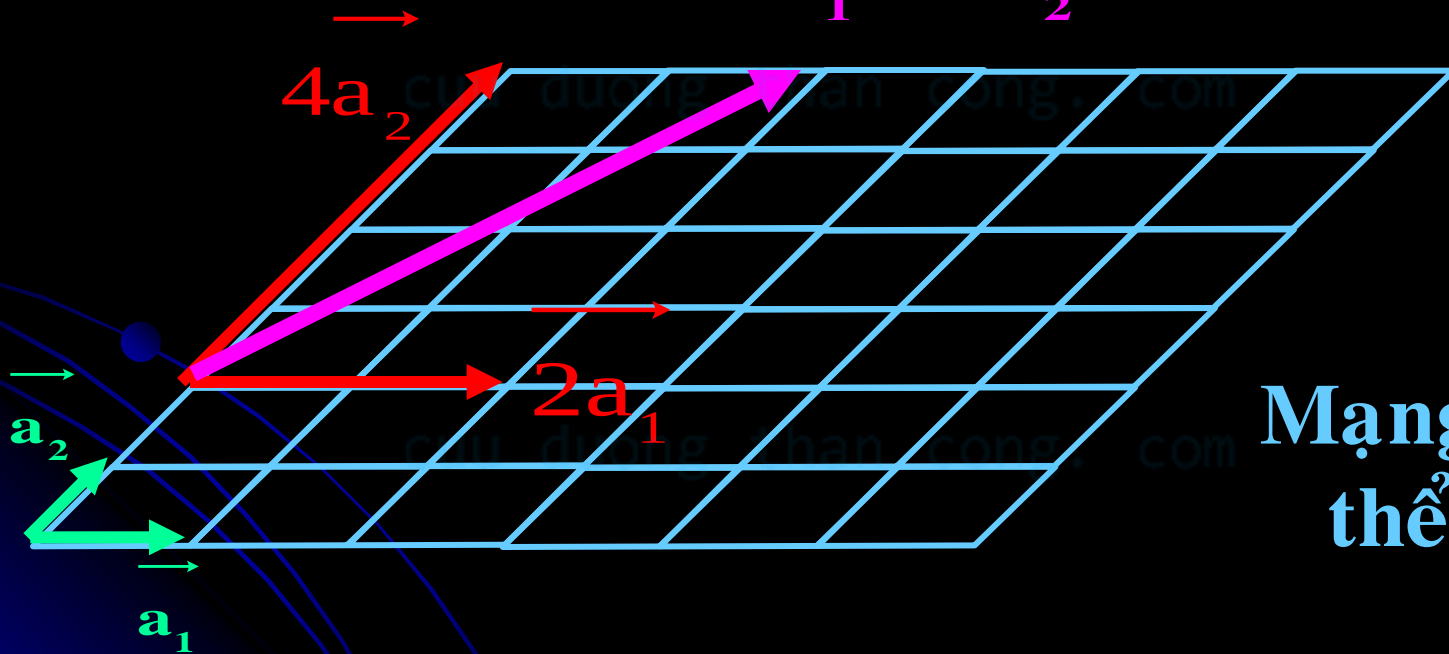
Nếu $n_1, n_2, n_3 = \text{phân số}$ thì $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$ là **véc tơ đơn vị**.

VÉCTƠ NGUYÊN TỐ (VÉCTƠ CƠ SỞ)

$$n_1 = 2; n_2 = 4$$

$$\vec{T} = 2\vec{a}_1 + 4\vec{a}_2$$

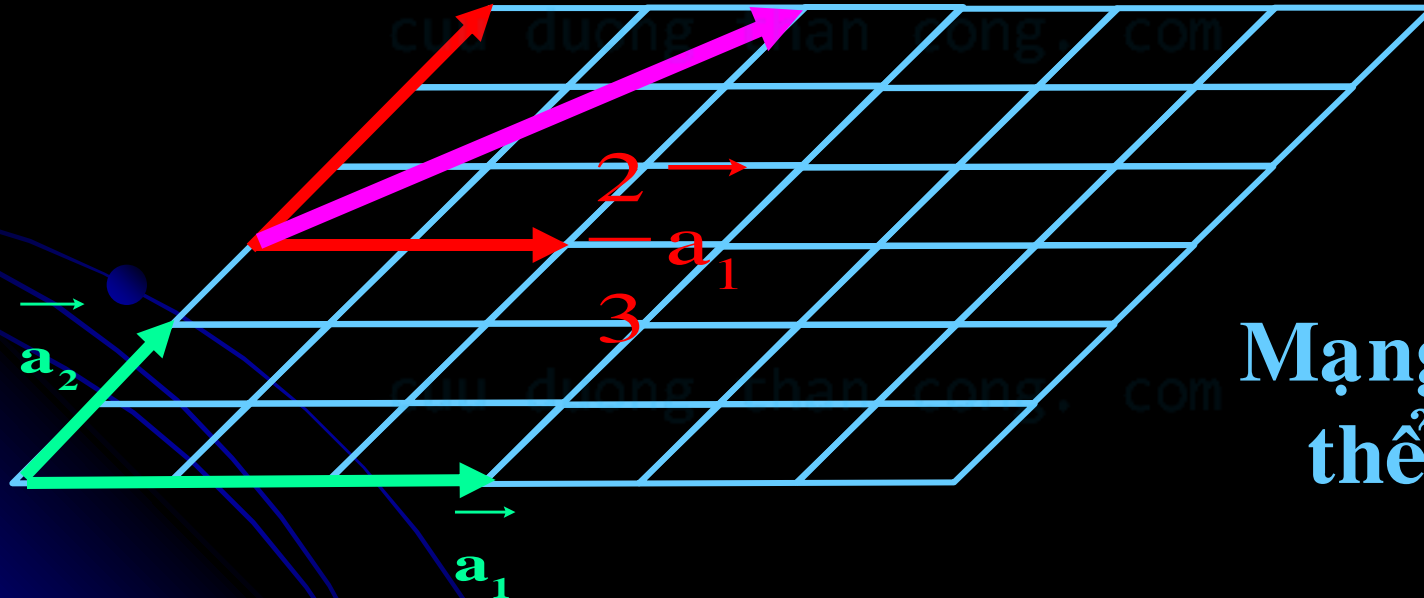
Mạng tinh
thể 2D



VÉCTƠ ĐƠN VỊ

$$n_1 = 2/3; n_2 = 3/2$$

$$\vec{T} = \frac{2}{3}\vec{a}_1 + \frac{3}{2}\vec{a}_2$$

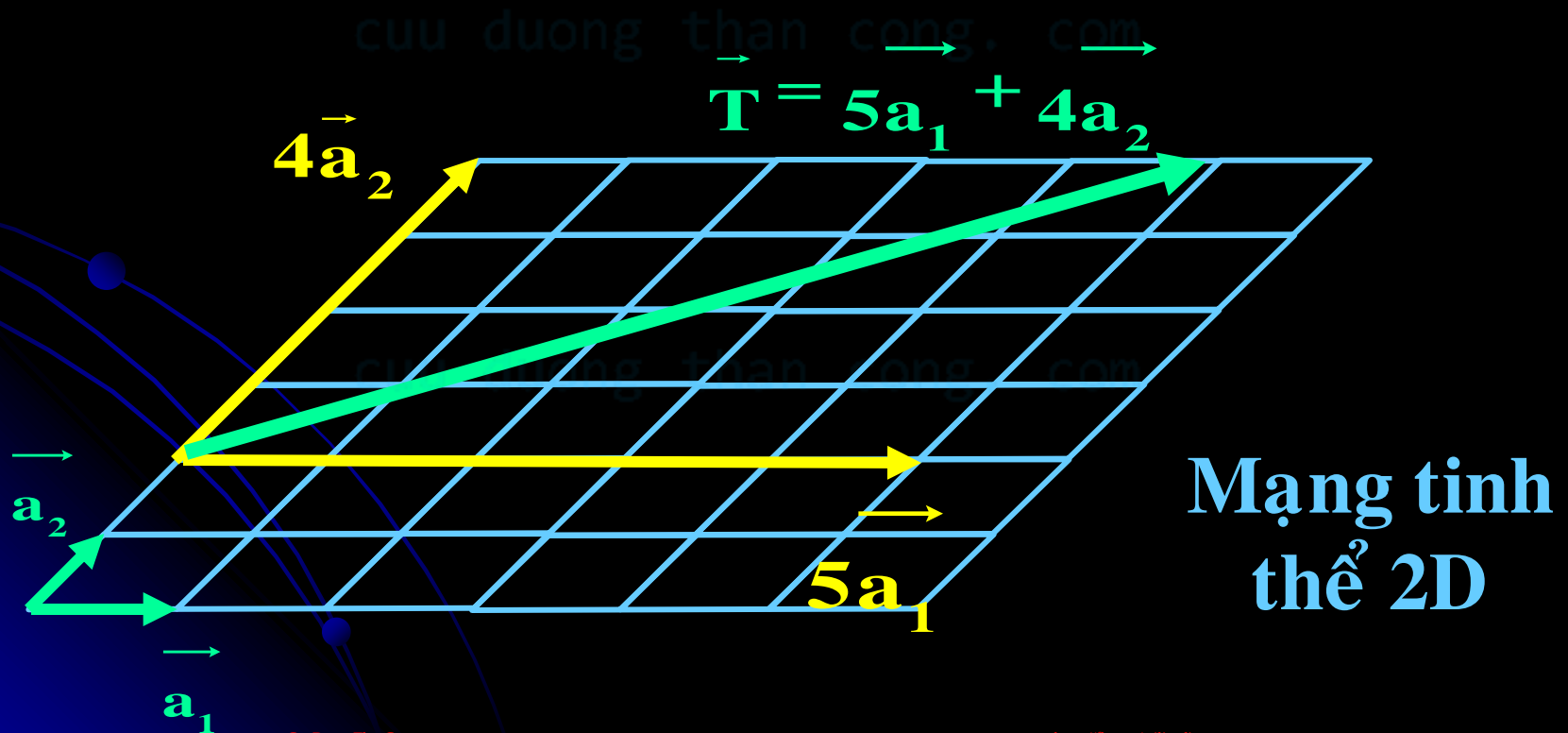


Mạng tinh
thể 2D

VECTƠ TỊNH TIẾN BẢO TOÀN MẠNG TINH THỂ

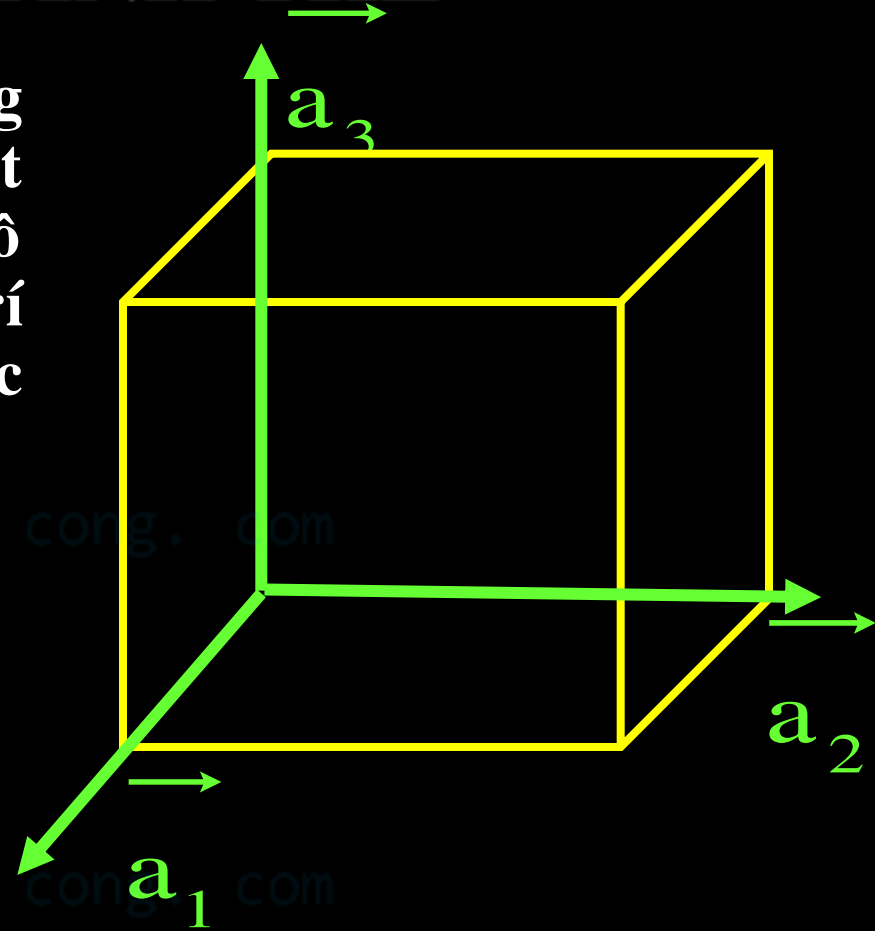
$$\vec{T} = n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2 + n_3 \vec{a}_3$$

Vectơ tịnh tiến cơ sở
(3D)



2. Ô MẠNG TÌNH 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 $\mathbf{a}_1$, $\mathbf{a}_2$, $\mathbf{a}_3$.
- Các hình hộp chồng khít lên nhau và kéo dài vô hạn trong không gian $\Rightarrow$ **Ô mạng**.



- *Có rất nhiều cách chọn $\mathbf{a}_1$; $\mathbf{a}_2$; $\mathbf{a}_3 \Rightarrow$ nhiều cách chọn ô mạng khác nhau.*

Ô ĐƠN VỊ

- Ô đơn vị là ô được xác định từ 3 vectơ đơn vị $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$.

- Thể tích của ô đơn vị:

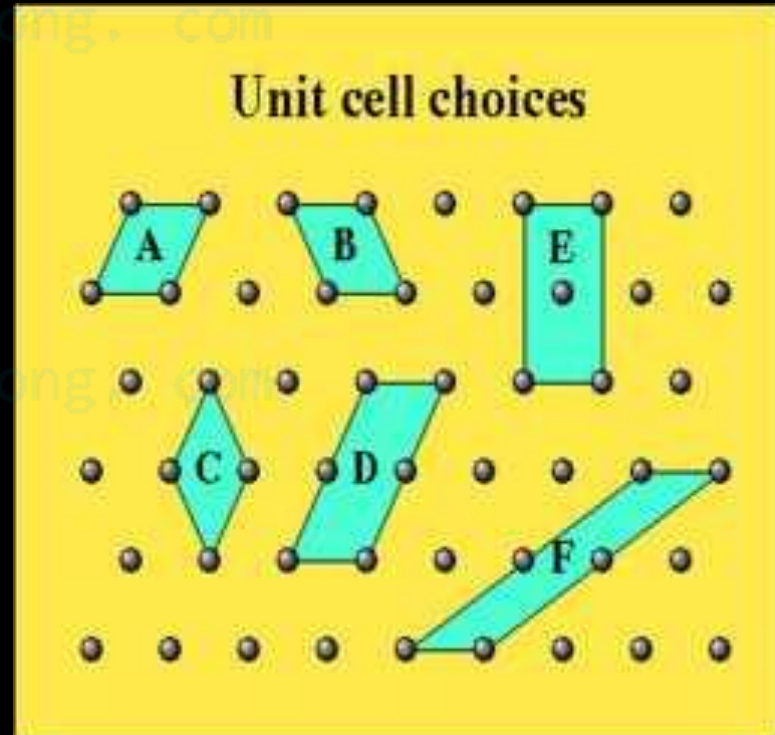
$$V = \vec{a}_1 \cdot \vec{a}_2 \times \vec{a}_3 = \vec{a}_2 \cdot \vec{a}_3 \times \vec{a}_1 = \vec{a}_3 \cdot \vec{a}_1 \times \vec{a}_2$$

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

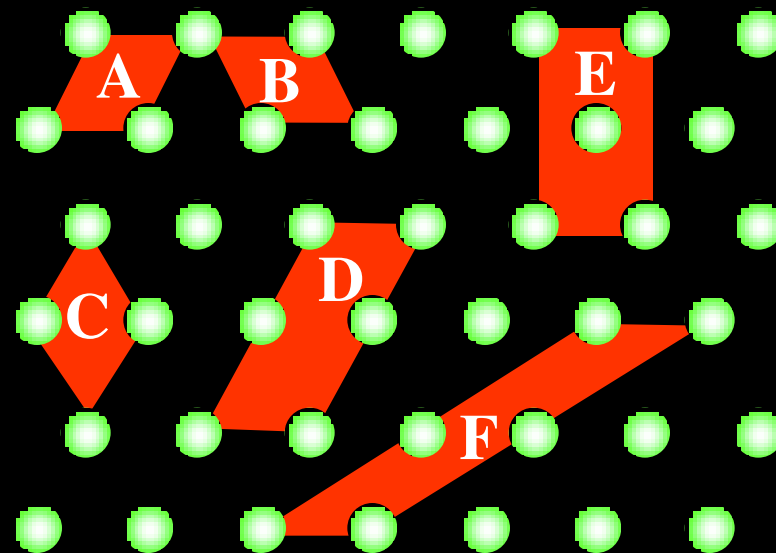
Ô NGUYÊN TỐ

Ô nguyên tố là ô được xác định từ 3 vectơ nguyên tố $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$.

- Ô nguyên tố chỉ chứa 1 nút mạng.

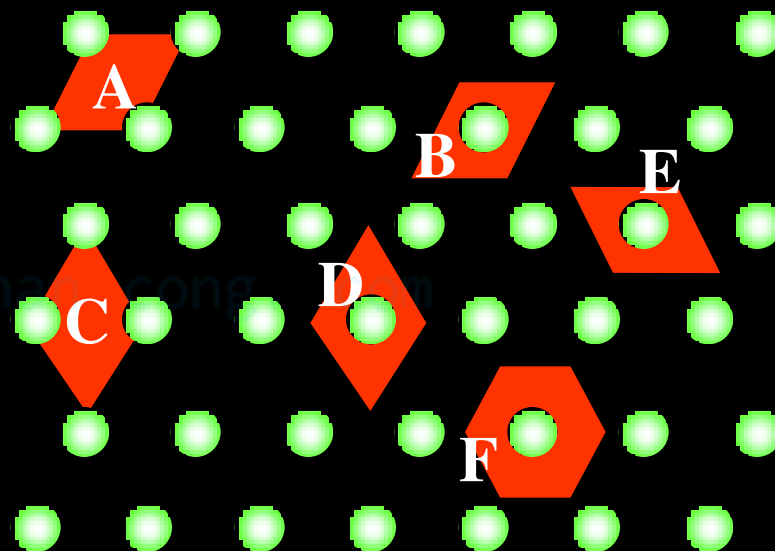


Một số cách chọn Ô đơn vị



cuu duong than cong. com

Một số cách chọn ô nguyên tố



Ô CƠ SỞ (Ô BRAVAIS)

Là *ô nguyên tố* thỏa mãn các điều kiện :

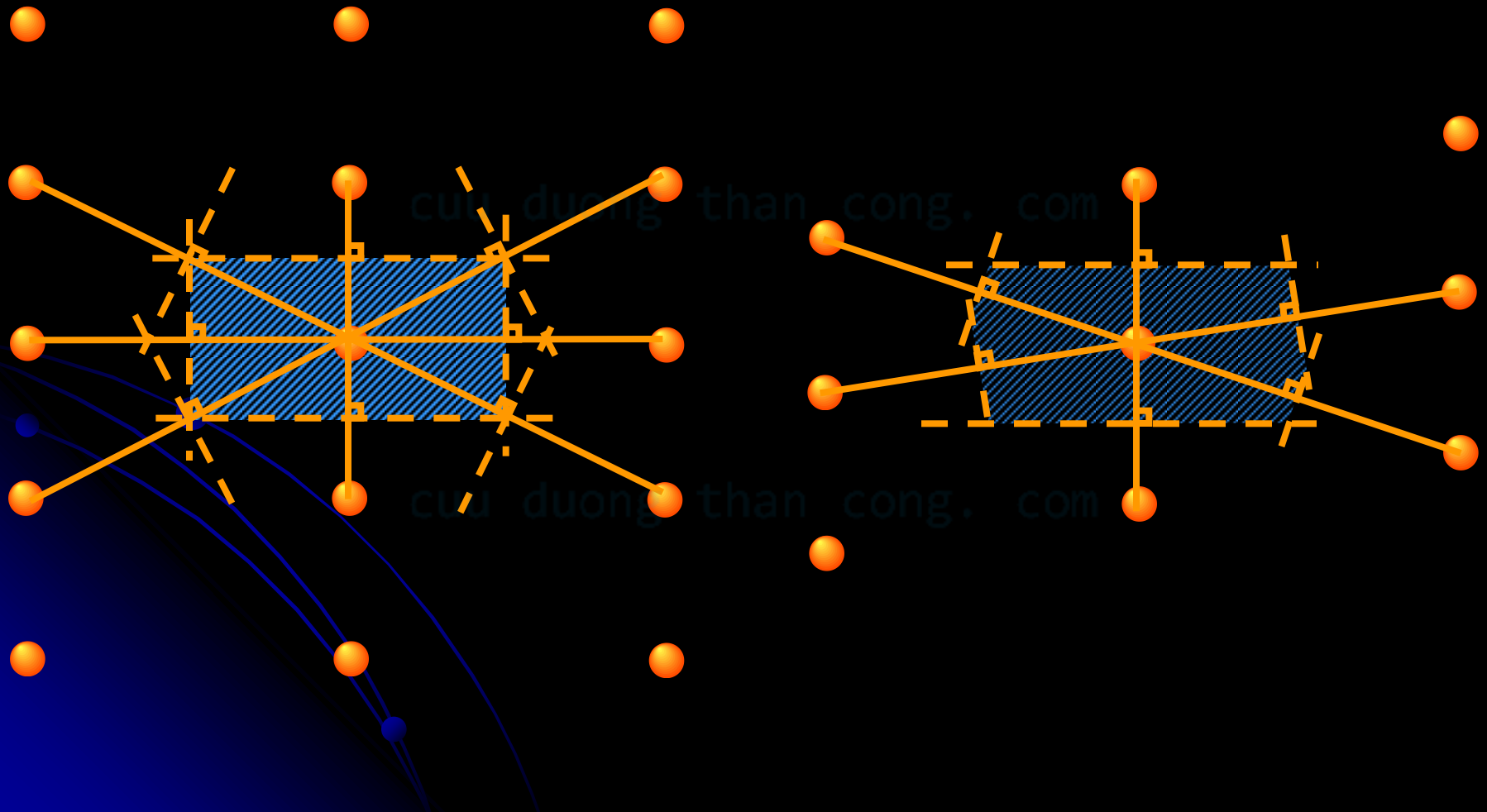
- Cùng *hệ với hệ của toàn mạng* (tức hệ tinh thể).
- Số *cạnh bằng nhau* và số *góc* (giữa các cạnh) *bằng nhau* của ô mạng phải *nhiều nhất*.
- Nếu có *góc vuông* giữa các cạnh thì số góc đó phải *nhiều nhất*.
- Sau khi thỏa mãn các điều kiện trên, thì phải thỏa mãn điều kiện *thể tích ô mạng là nhỏ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

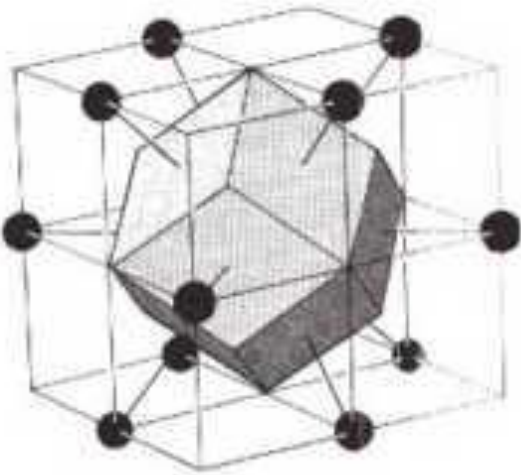
Ô WIGNER – SEITZ

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

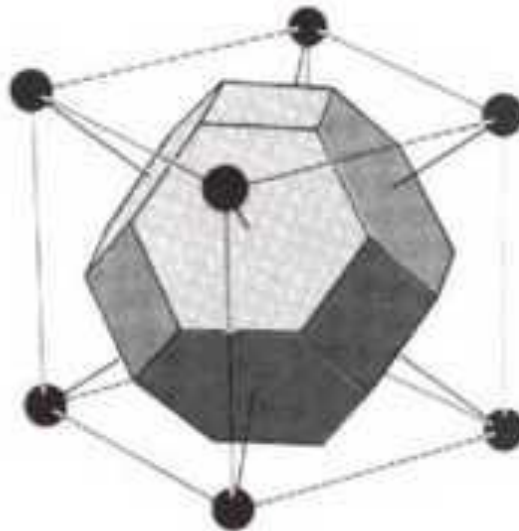
- Cách vẽ ô Wigner – Seitz 2 chiều:
 - Chọn một nút mạng bất kỳ làm gốc O.
 - Nối O với các nút lân cận gần nhất ta được một số điểm trung bình nhau.
 - Vẽ các mặt phẳng trung trực của các điểm trung bình đó ta thu được hệ mặt thứ nhất
⇒ tạo một miền không gian kín bao quanh O.
 - Tương tự, từ O nối với các nút lân cận tiếp theo và vẽ các mặt phẳng trung trực của các điểm trung bình đó ta thu được hệ mặt thứ hai.
 - Nếu hệ mặt thứ hai nằm ngoài miền không gian bao bên ngoài hoặc trùng với miền trước thì miền thừa tích vào hệ mặt thứ nhất và là ô Wigner – Seitz.
 - Ngược lại thì ô Wigner – Seitz được xác định bằng cách hai mặt sao cho ô có thể tích nhỏ nhất.

CÁCH VẼ Ô WIGNER – SEITZ CHO MẠNG 2 CHIỀU



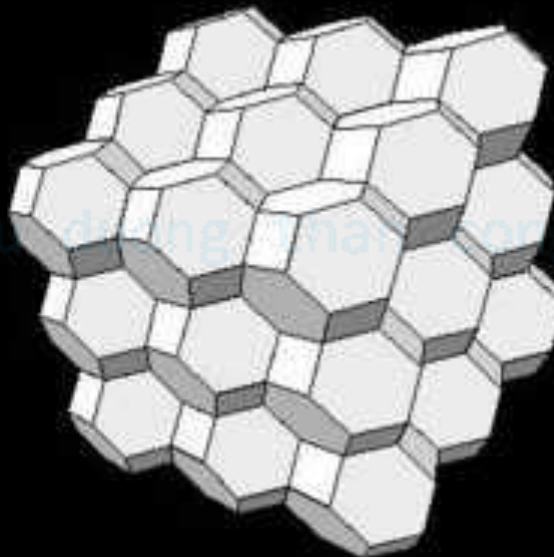
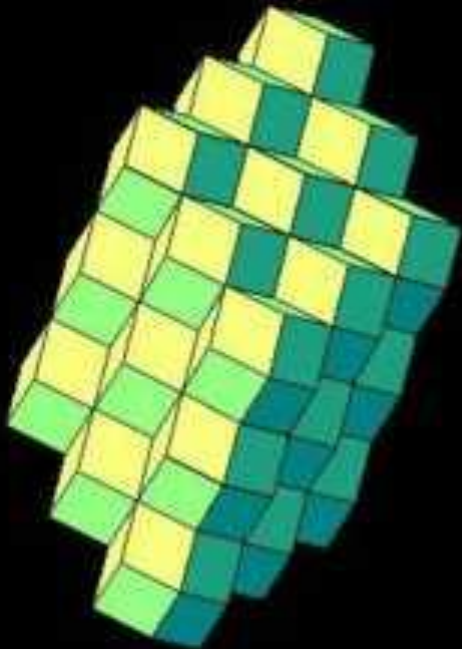


Ô Wigner-Seitz của mạng lập phương tâm mặt



Ô Wigner-Seitz của mạng lập phương tâm khối

Ô Wigner-Seitz của mạng lập phương



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.

cuuduongthancong.com

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

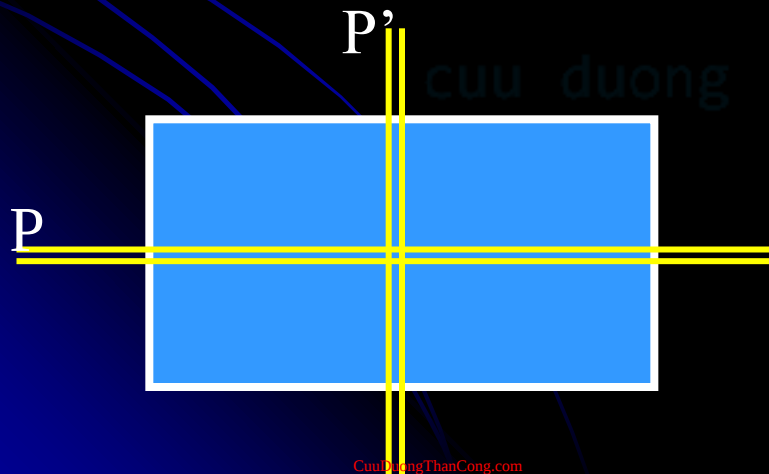
PHÉP TỊNH TIẾN BẢO TOÀN MẠNG

Khi tịnh tiến tinh thể đi một vectơ $\vec{T}$ thì tinh thể trùng lại với chính nó.

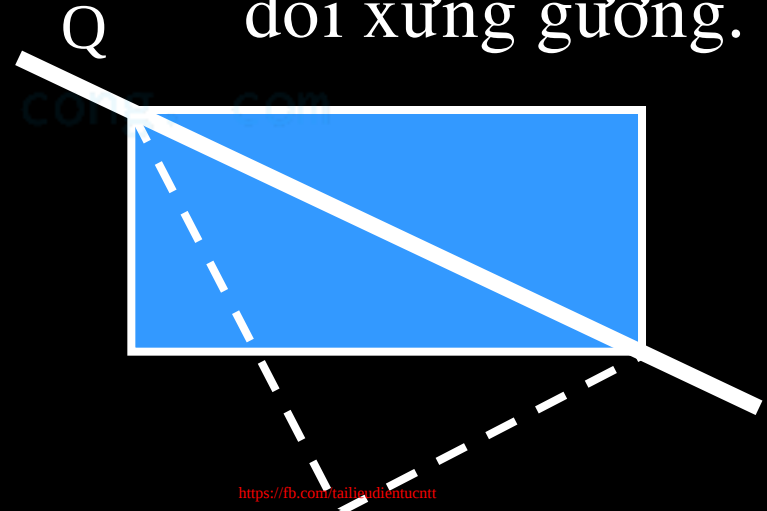
MẶT ĐỐI XỨNG GƯƠNG P (m)

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.

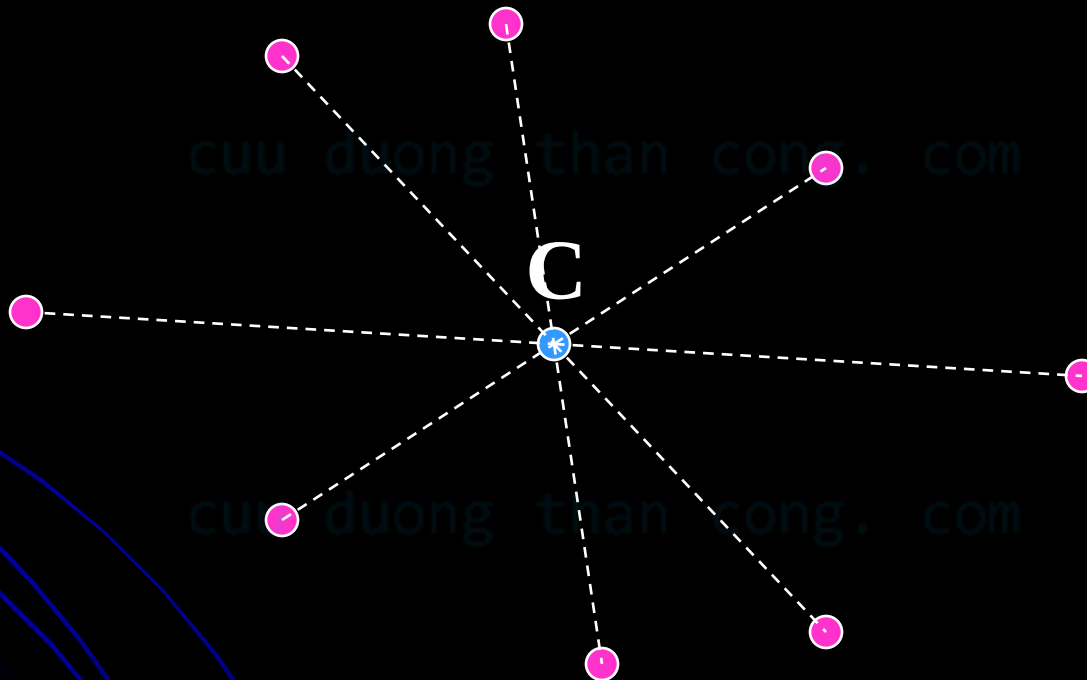


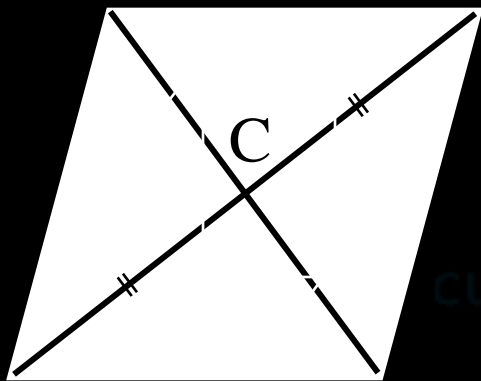
Q : không phải mặt đối xứng gương.



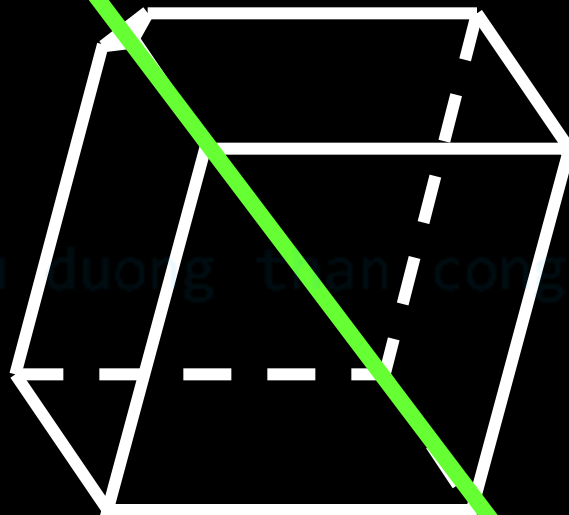
TÂM ĐỐI XỨNG $C = \bar{1}$

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 .

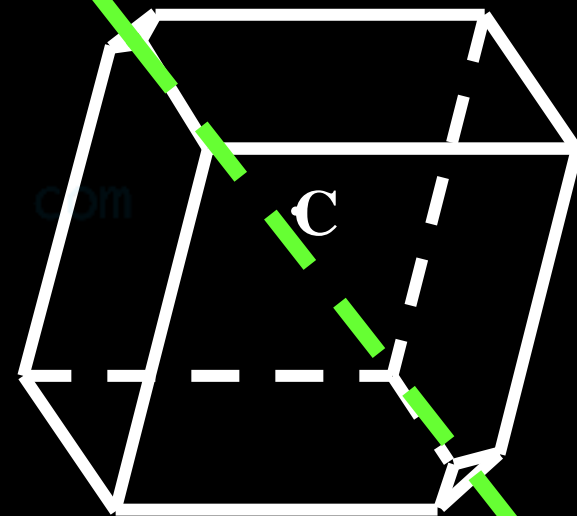




**Có tâm đối
xứng**



**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***.

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

với n bậc của trục.

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

$$L_1 : \alpha_1 = 360^\circ$$

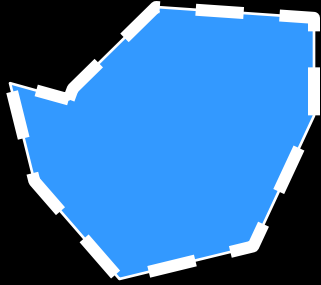
$$L_2 : \alpha_2 = 360^\circ / 2 = 180^\circ$$

$$L_3 : \alpha_3 = 360^\circ / 3 = 120^\circ$$

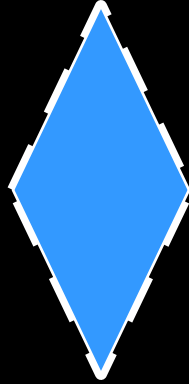
$$L_4 : \alpha_4 = 360^\circ / 4 = 90^\circ$$

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

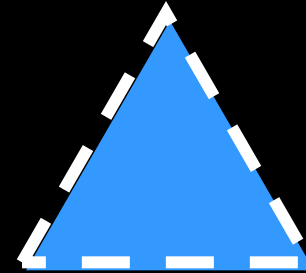
Các trục đối xứng



Trục bậc 1
(360°)



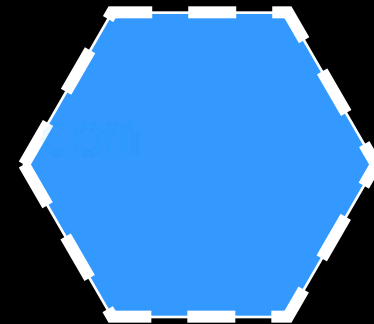
Trục bậc 2
(180°)



Trục bậc 3
(120°)



Trục bậc 4 **(90°)**



Trục bậc 6 **(60°)**

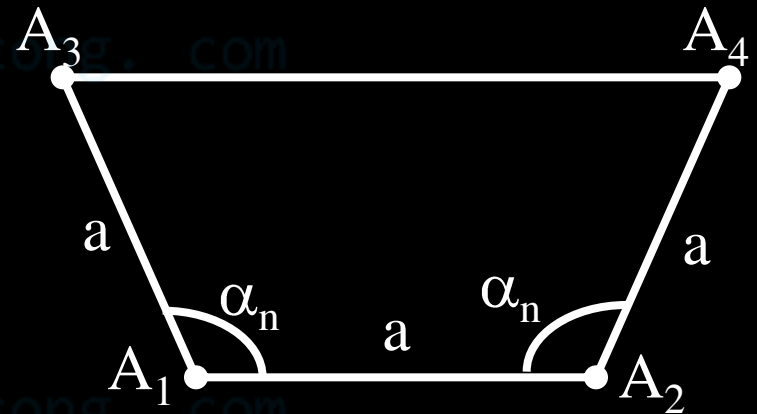
ĐỊNH LÝ

*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

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

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

$$\Rightarrow A_3 A_4 = a (1 - 2 \cos \alpha_n) \quad (1)$$

Vì A_3, A_4 là 2 nút mạng tinh thể nên khoảng cách giữa chúng phải bằng:

$$A_3 A_4 = k.a, \text{ với } k \in \mathbb{Z} \quad (2)$$

Từ (1) và (2) suy ra:

$$1 - 2 \cos \alpha_n = k$$

Suy ra:

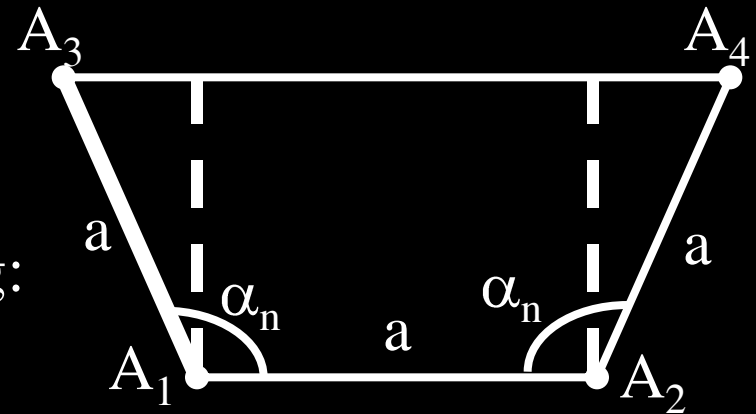
$$-1 \leq \cos \alpha_n = (1 - k)/2 \leq 1$$

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

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

Do đó:

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



Hình 1.3

TRỤC ĐỐI XỨNG NGHỊCH ĐẢO L_{in}

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

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

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

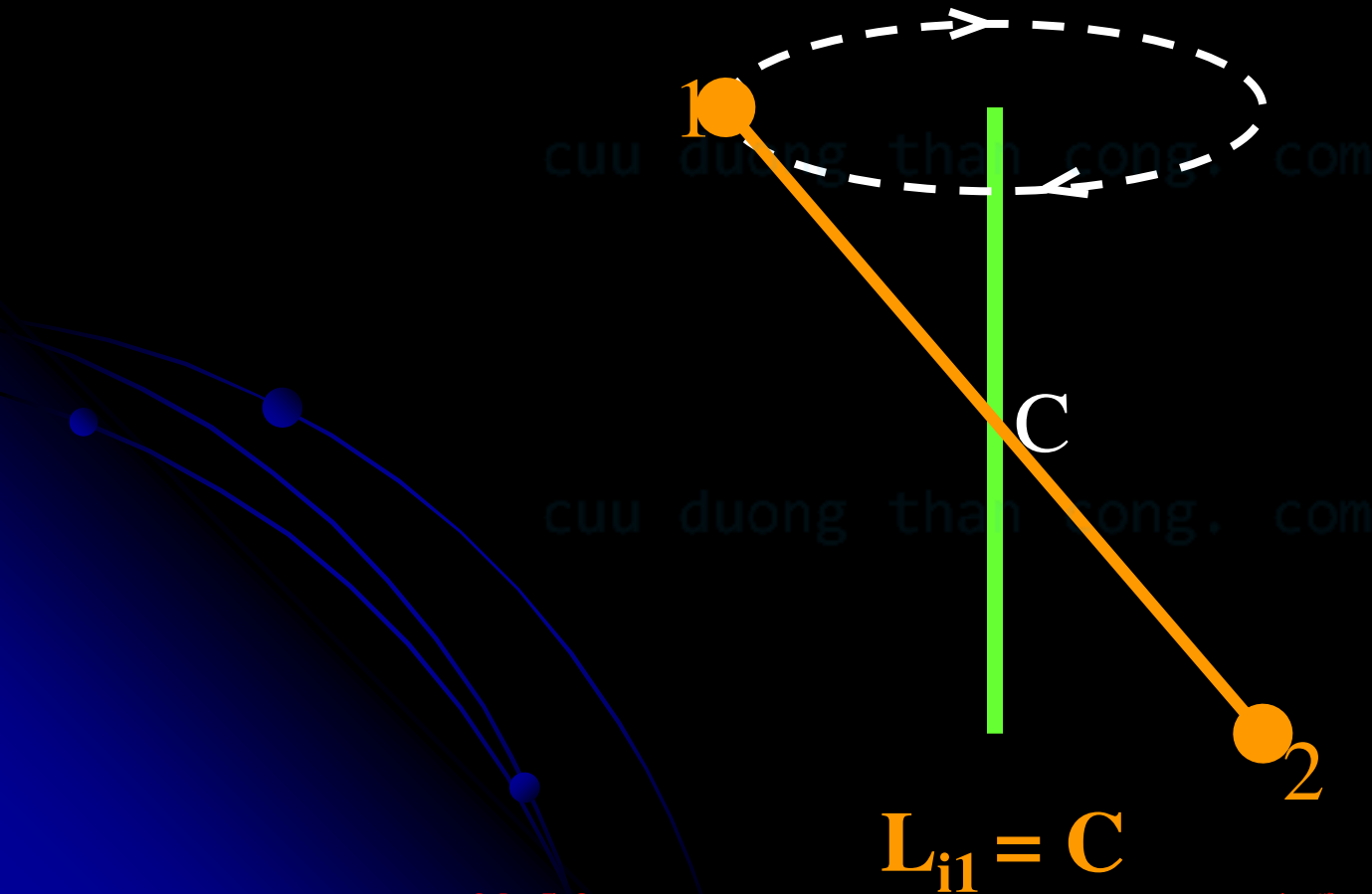
- Các loại trục nghịch đảo :

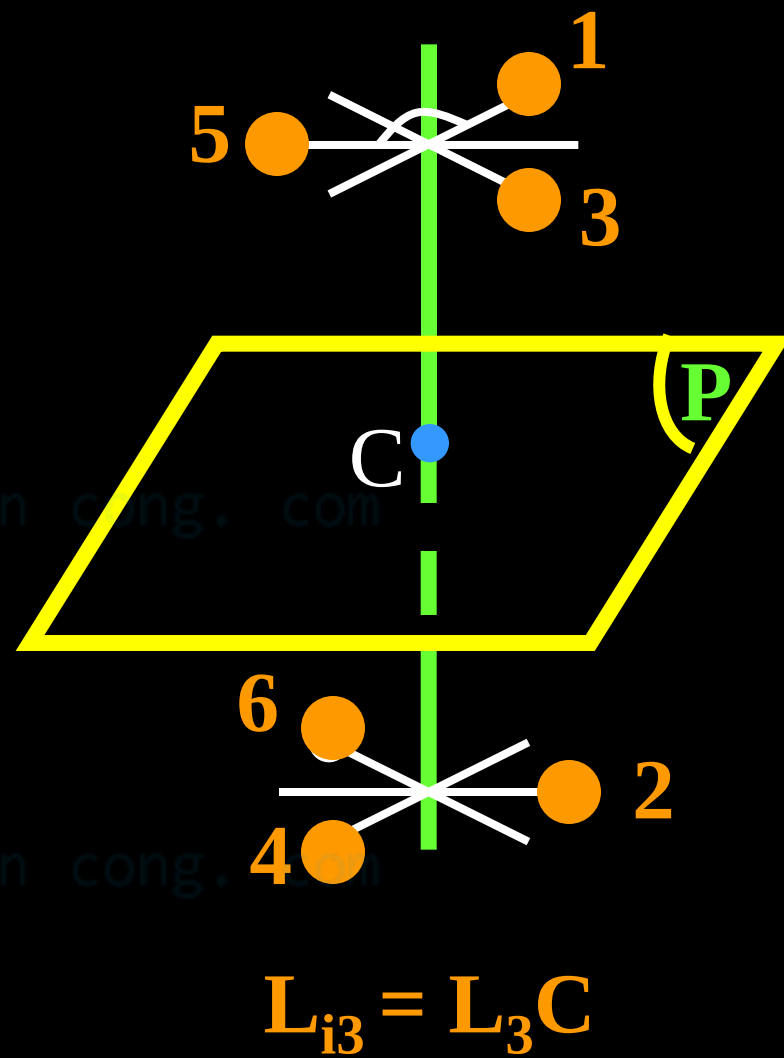
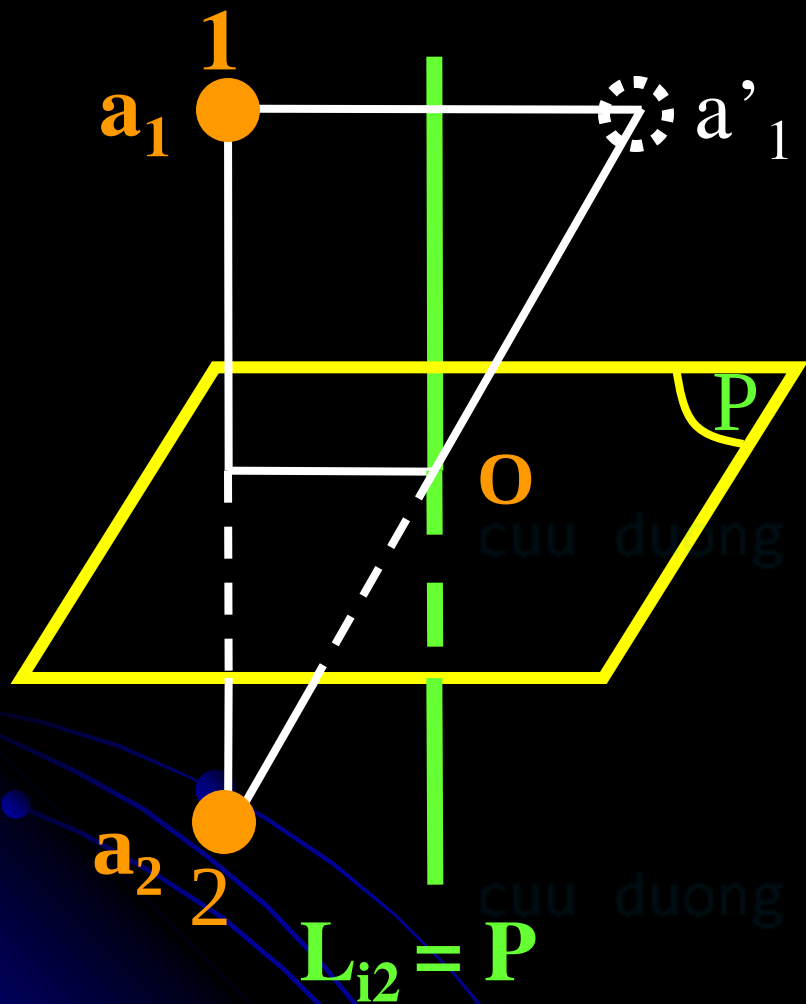
$$L_{i1} = C, L_{i2} = P, L_{i3} = L_3C, L_{i6} = L_3P \text{ và } L_{i4}.$$

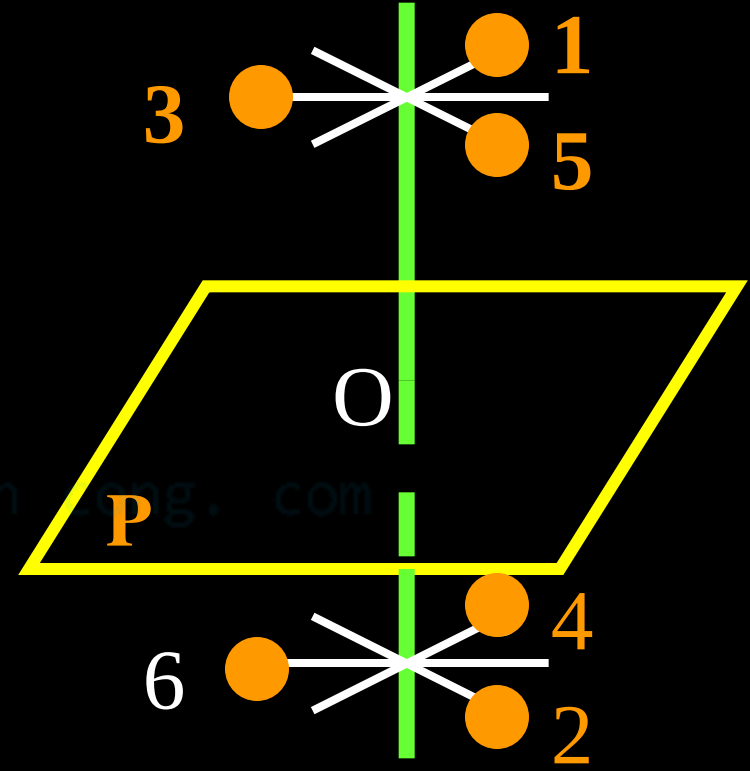
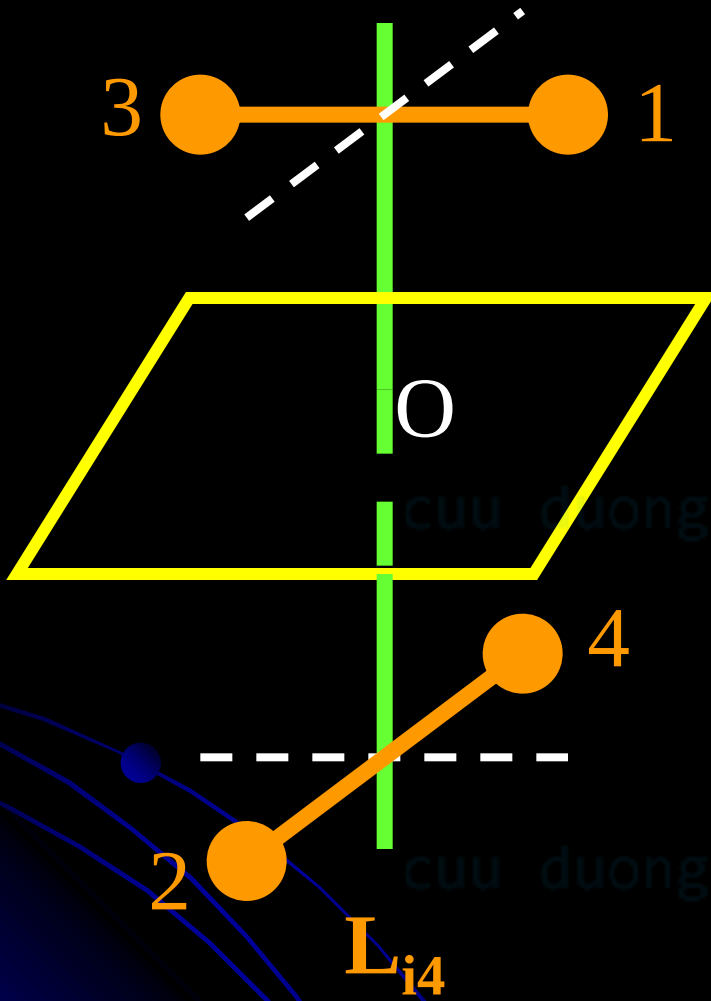
- *Tóm lại, trong tinh thể vĩ mô có thể thấy các yếu tố đối xứng sau $C, P, L_1, L_2, L_3, L_4, L_6, L_{i4}, L_{i6}$.*

TÂM NGHỊCH ĐẢO $\bar{1}$

Phép đối xứng qua tâm đối xứng C tương đương với phép quay một góc 360° quanh một trục đi qua C + phép đối xứng qua C $\Rightarrow$ Tâm nghịch đảo.







$$L_{i6} = L_3P$$

4. HẠNG – HỆ TÍNH 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 $\Rightarrow$ ***nhóm đối xứng điểm.***

Có 32 nhóm điểm

7 HỆ – 3 HẠNG TÍNH THỂ

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

- ***Hạng thấp:*** hệ ba nghiêng, hệ một nghiêng, hệ trục 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

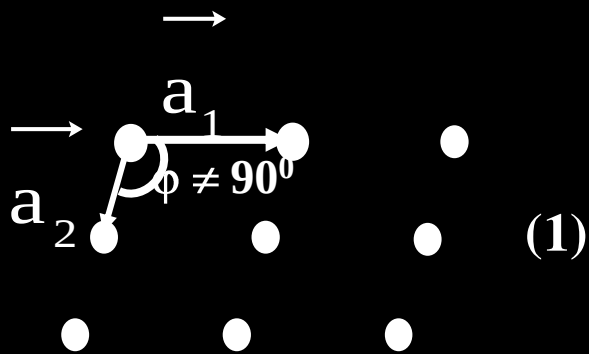
- *Trường hợp 3 chiều $\Rightarrow$ 14 kiểu ô mạng Bravais.*
- *Trường hợp 2 chiều $\Rightarrow$ 5 kiểu ô mạng Bravais.*

Các loại ô mạng Bravais

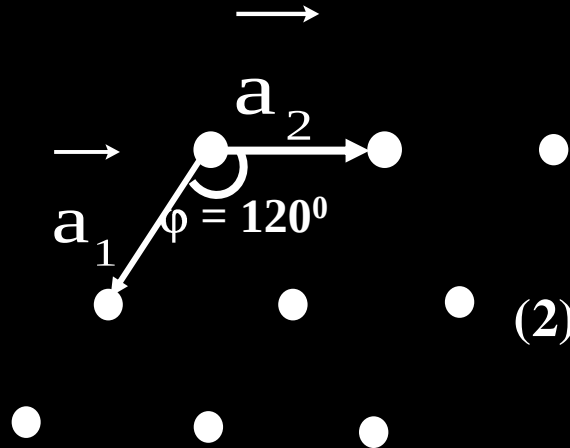
- *Loại nguyên thủy (ký hiệu P).*
Nút mạng chỉ phân bố ở **đỉnh** của ô mạng.
- *Loại tâm đáy (A, B, hay C).*
- *Nút mạng phân bố ở vị trí **đỉnh + tâm** của hai đáy nào đó của ô mạng.*
- *Loại tâm khối I.*
Nút mạng phân bố ở vị trí **đỉnh + tâm** của tâm của ô cơ sở.
- *Loại tâm mặt F*
Nút mạng phân bố ở vị trí **đỉnh + tâm** của các mặt.

5 KIỂU MẠNG BRAVAIS 2 CHIỀU

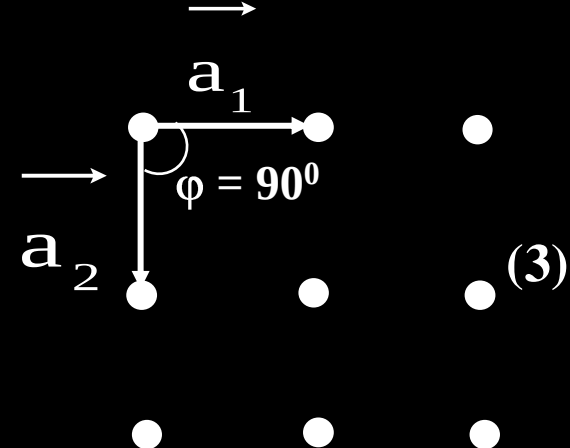
Mạng	Đặc điểm của ô mạng
Mạng nghiêng (1)	$a_1 \neq a_2, \varphi \neq 90^\circ$
Mạng lục giác (2)	$a_1 = a_2, \varphi = 120^\circ$
Mạng vuông (3)	$a_1 = a_2, \varphi = 90^\circ$
Mạng chữ nhật (4) Mạng chữ nhật tâm mặt (5)	$a_1 \neq a_2, \varphi = 90^\circ$



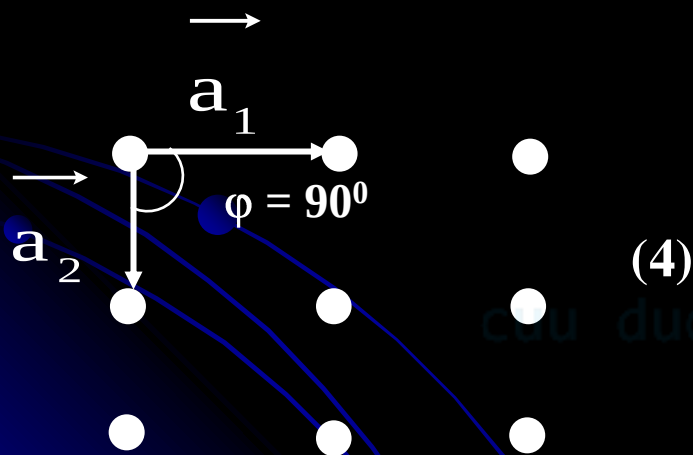
Mạng nghiêng
 $a_1 \neq a_2, \phi \neq 90^\circ$



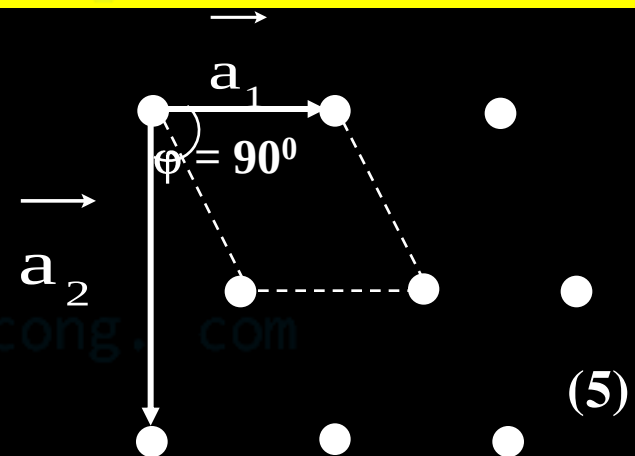
Mạng lục giác
 $a_1 = a_2, \phi = 120^\circ$



Mạng vuông
 $a_1 = a_2, \phi = 90^\circ$



Mạng chữ nhật
 $a_1 \neq a_2, \phi = 90^\circ$

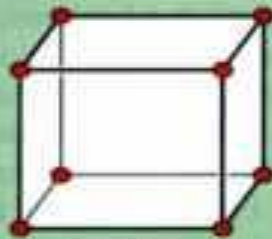


Mạng chữ nhật tâm mặt
 $a_1 \neq a_2, \phi = 90^\circ$

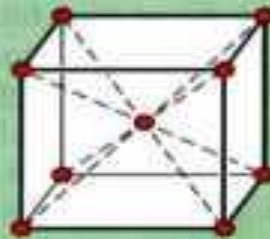
14 KIỂU MẠNG BRAVAIS 3 CHIỀU

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

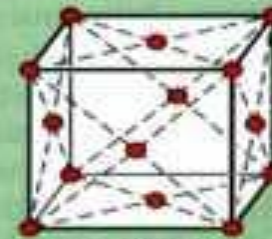
Cubic



Simple

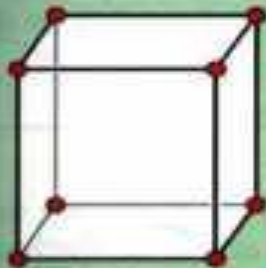


Body-centered

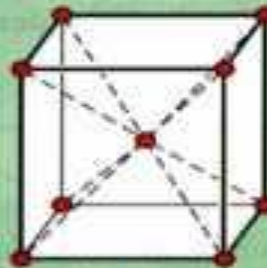


Face-centered

Tetragonal

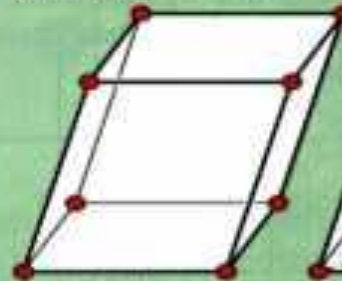


Simple

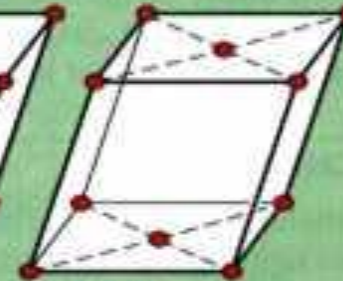


Body-centered

Monoclinic

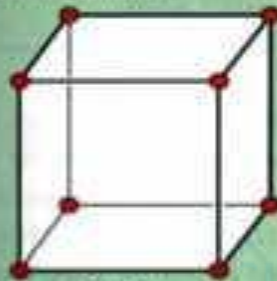


Simple

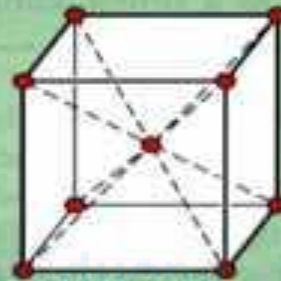


End-centered

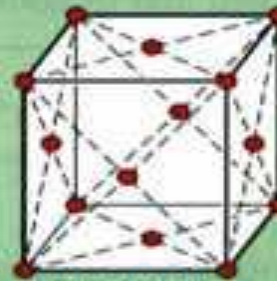
Orthorhombic



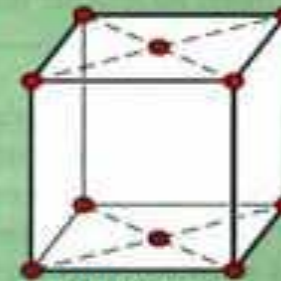
Simple



Body-centered

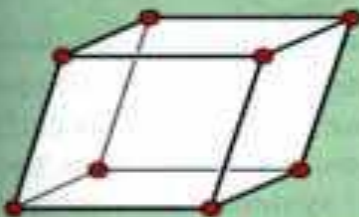


Face-centered

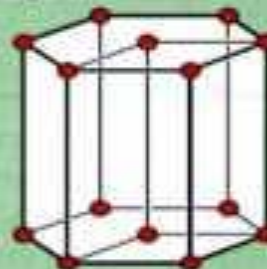


End-centered

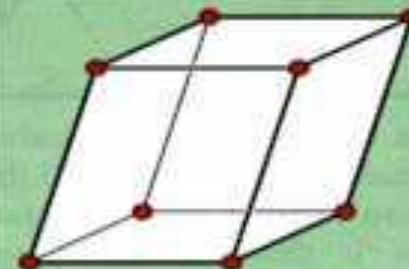
Rhombohedral



Hexagonal



Triclinic

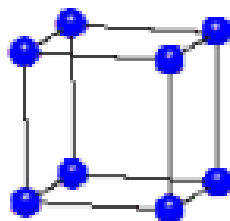


HỆ LẬP PHƯƠNG

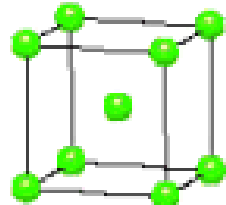
$$a = b = c$$

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

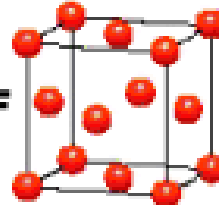
P



I



F

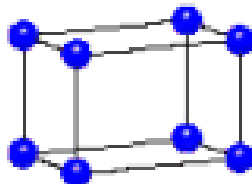


HỆ BỐN PHƯƠNG

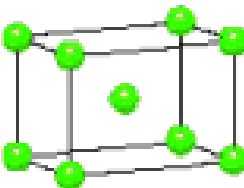
$$a = b \neq c$$

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

P



I

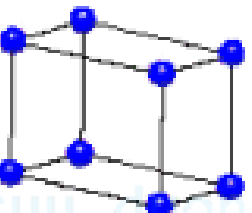


HỆ TRỤC THOI

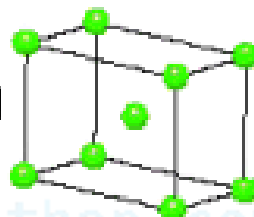
$$a \neq b \neq c$$

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

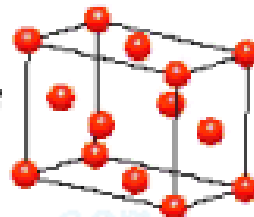
P



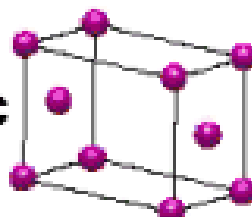
I



F



C



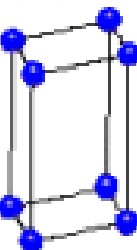
HỆ SÁU PHƯƠNG

$$a = b \neq c$$

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

$$\gamma = 120^\circ$$

P

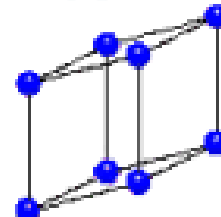


HỆ BA PHƯƠNG

$$a = b = c$$

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

P



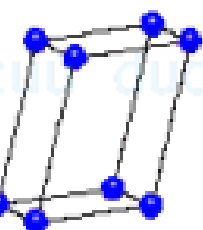
HỆ ĐƠN TÀ

$$a \neq b \neq c$$

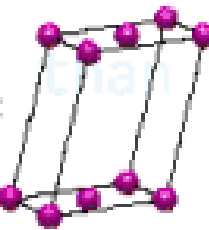
$$\alpha = \gamma = 90^\circ$$

$$\beta \neq 120^\circ$$

P



C

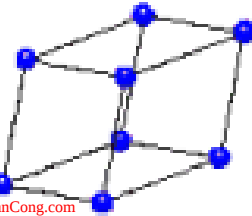


HỆ TAM TÀ

$$a \neq b \neq c$$

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

P



4 KIỂU Ô ĐƠN VỊ

P : NGUYÊN TỐ

I : TÂM KHỐI

F : TÂM MẶT

C : TÂM Ở 2 MẶT ĐỐI

+

7 HỆ TÍNH THỂ

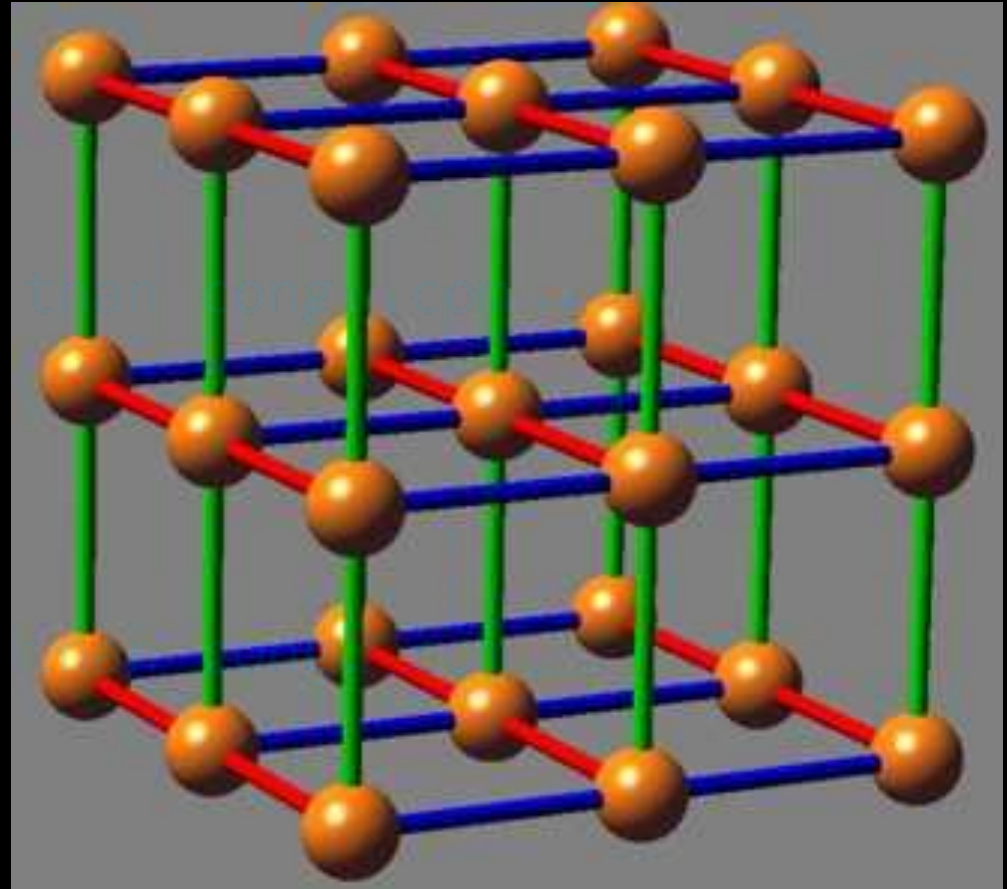
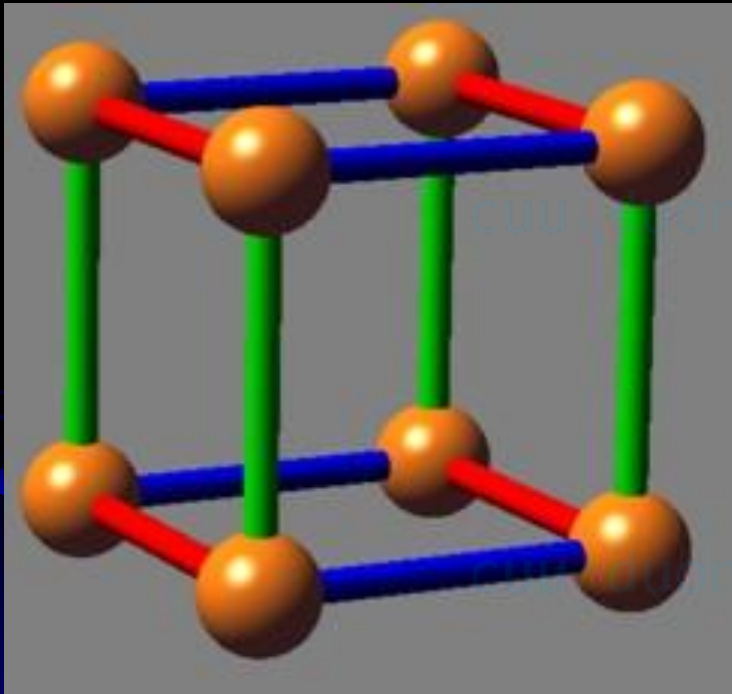
⇒ 14 LOẠI MẠNG BRAVAIS

SỐ NÚT CHỨA TRONG MỘT Ô MẠNG

- **Mạng nguyên thủy** : $8 \text{ nút} \times 1/8 = 1 \text{ nút}$
- **Mạng tâm khối** : $8 \text{ nút} \times 1/8 + 1 \text{ nút} = 2 \text{ nút}$
- **Tâm mặt** : $8 \text{ nút} \times 1/8 + 6 \text{ nút} \times 1/2 = 4 \text{ nút}$
- **Tâm đáy** : $8 \text{ nút} \times 1/8 + 2 \text{ nút} \times 1/2 = 2 \text{ nút}$

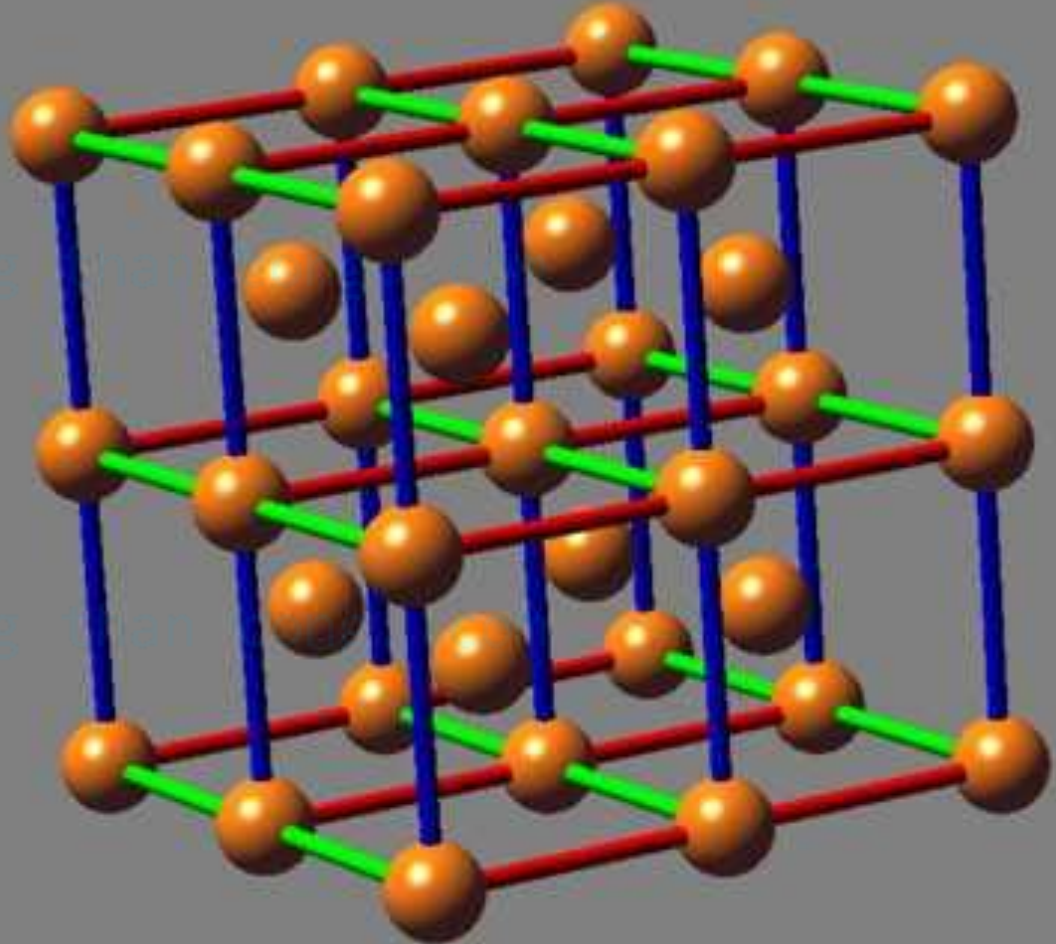
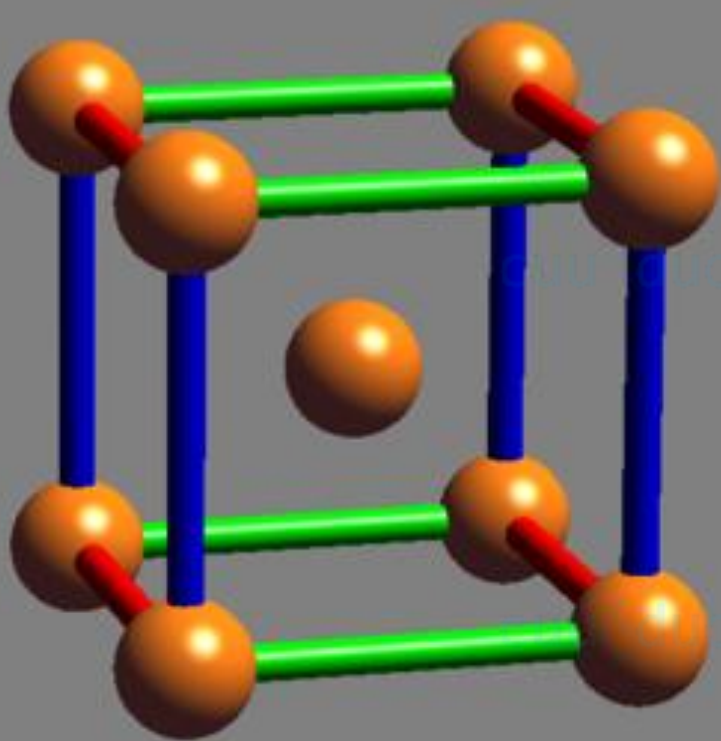
MẠNG NGUYÊN THỦY

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

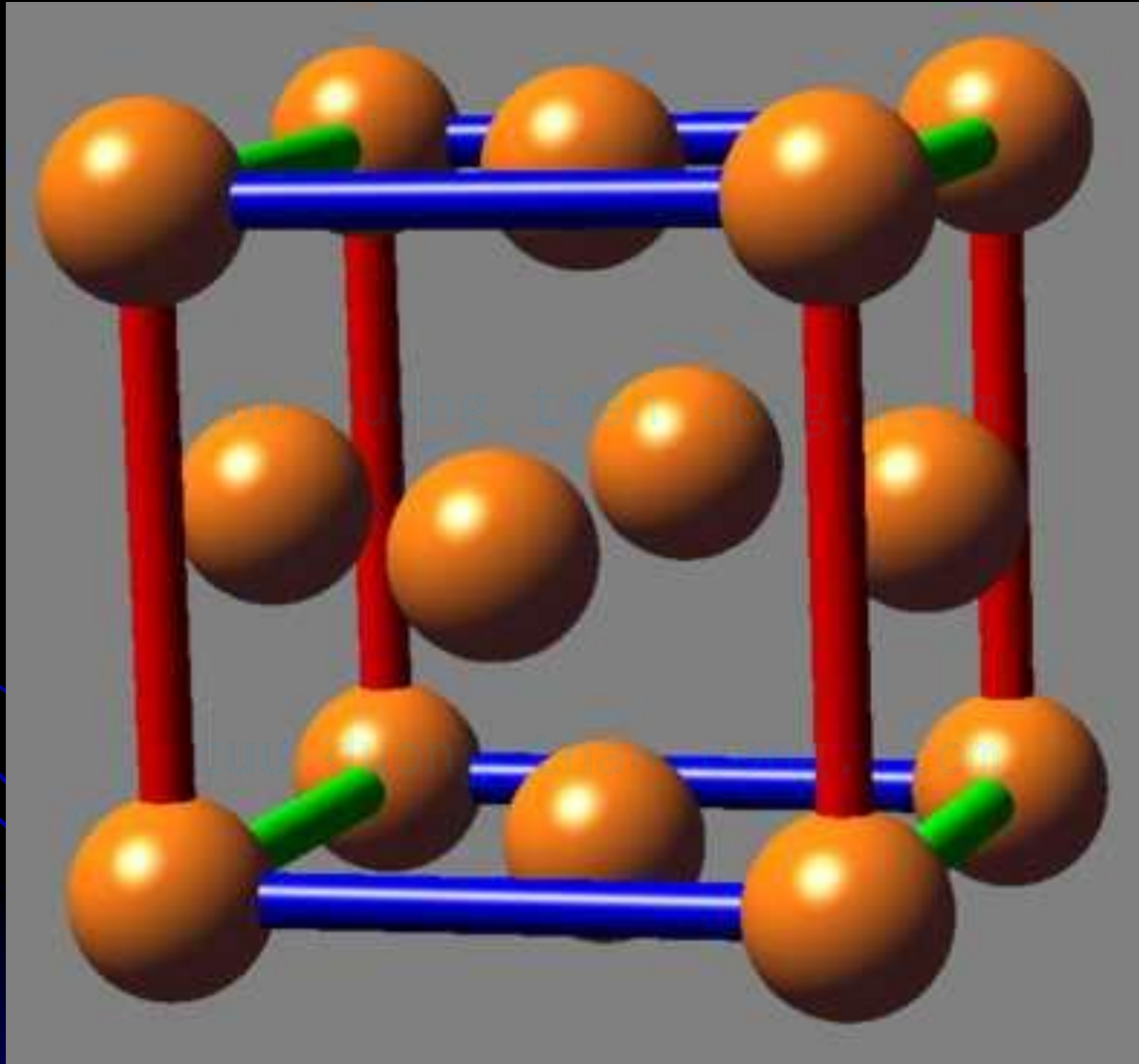


MẠNG TÂM KHỐI

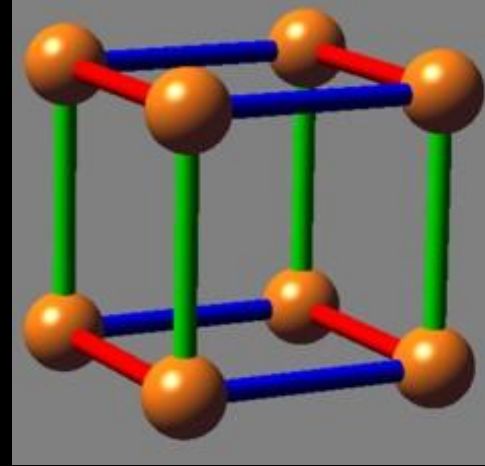
$$8 \text{ nút} \times \frac{1}{8} + 1 \text{ nút} = 2 \text{ nút}$$



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



HỆ SỐ LẮP ĐẦY



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

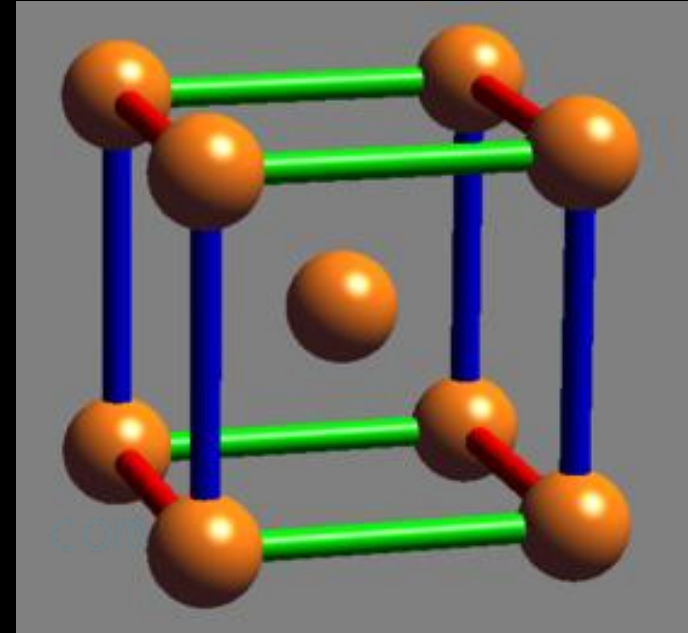
- $V_{\text{ô mạng}} = a^3$

- $V_{\text{vật chất}} = V_{2 \text{ nguyên tử}} = 2 \cdot \frac{4}{3} \pi R^3$

Với $R = \frac{\sqrt{3}}{4} a$

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

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



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: $n_1 a_1, n_2 a_2, n_3 a_3$.

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 $n_1 n_2 n_3$.

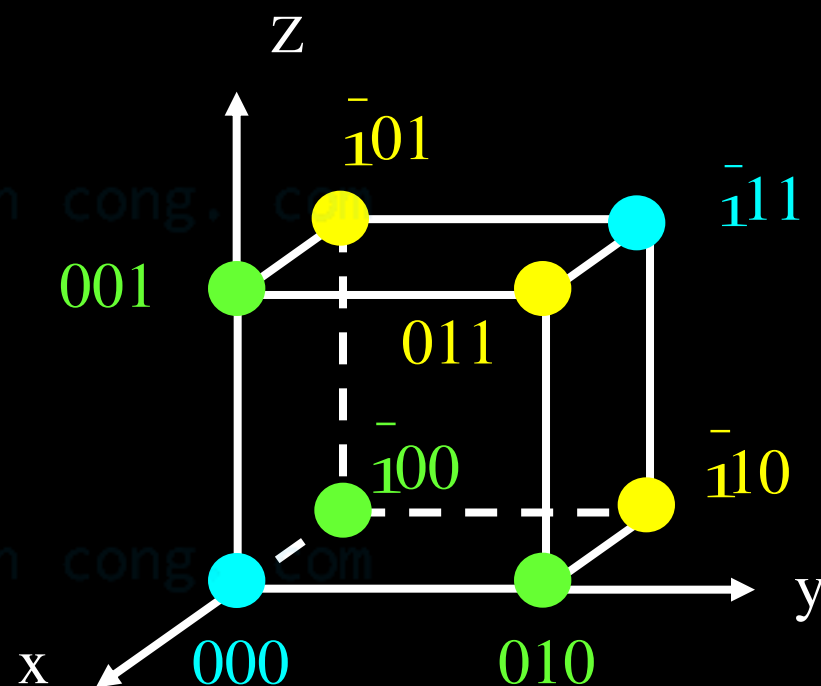
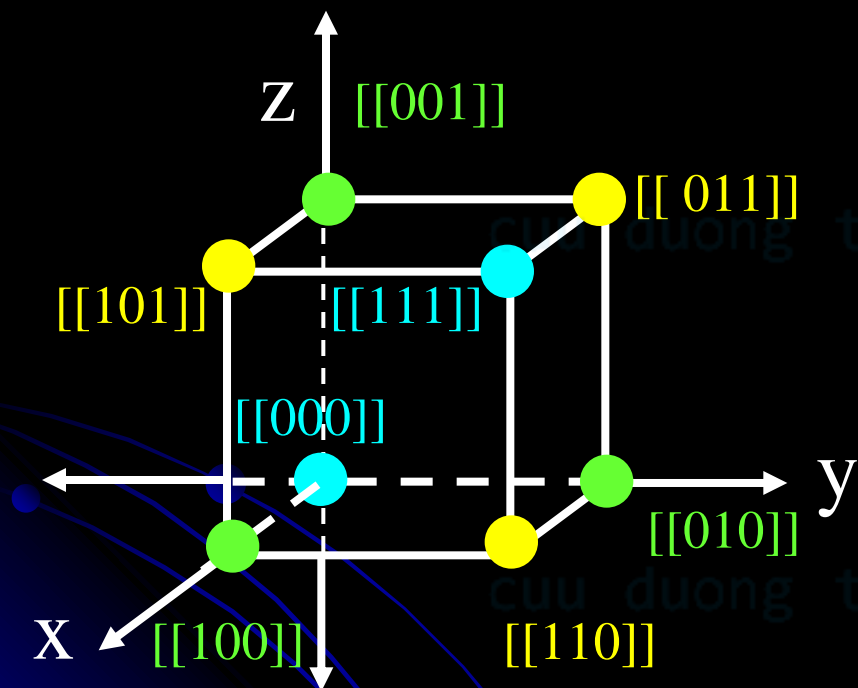
Nếu $n_i < 0 \Rightarrow$ ký hiệu $\overline{n_i}$ với $i = 1, 2, 3$.

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 $[[\overline{3} \ 2 \ \overline{1}]]$.

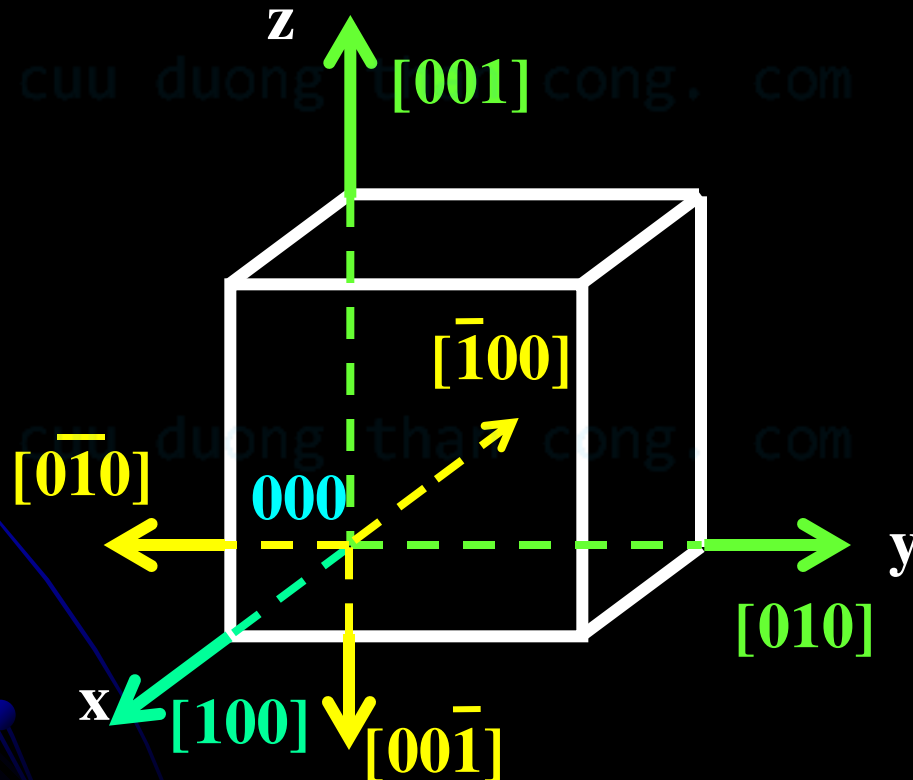
MỘT SỐ NÚT CƠ BẢN TRONG TINH THỂ LẬP PHƯƠNG

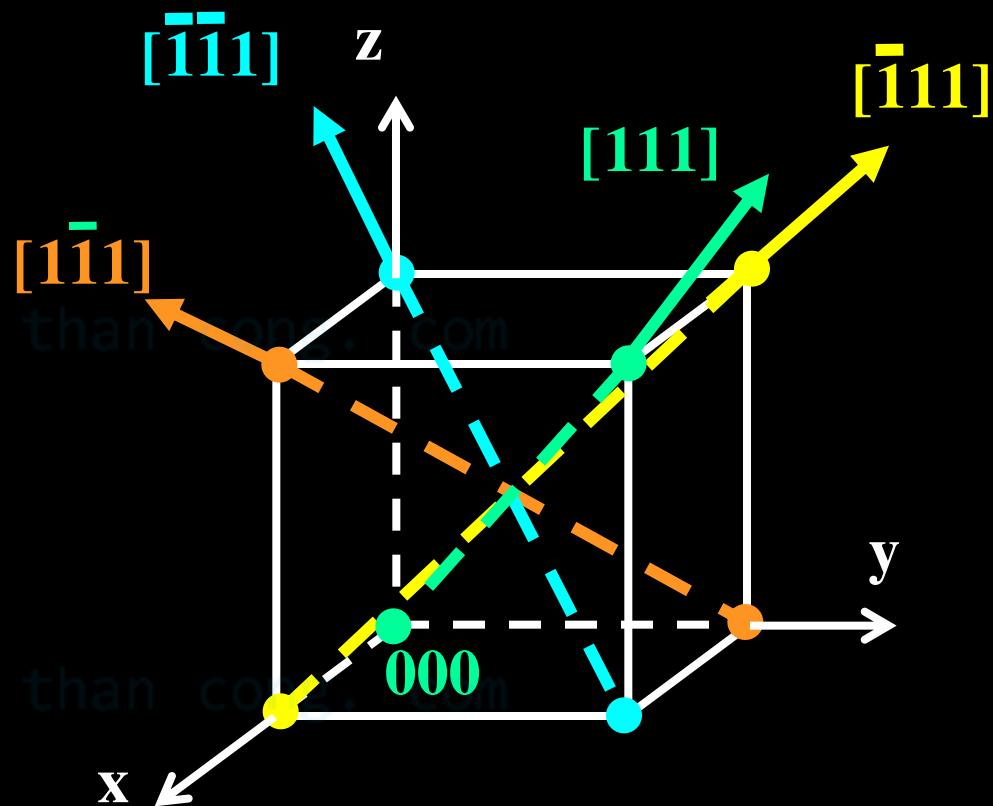
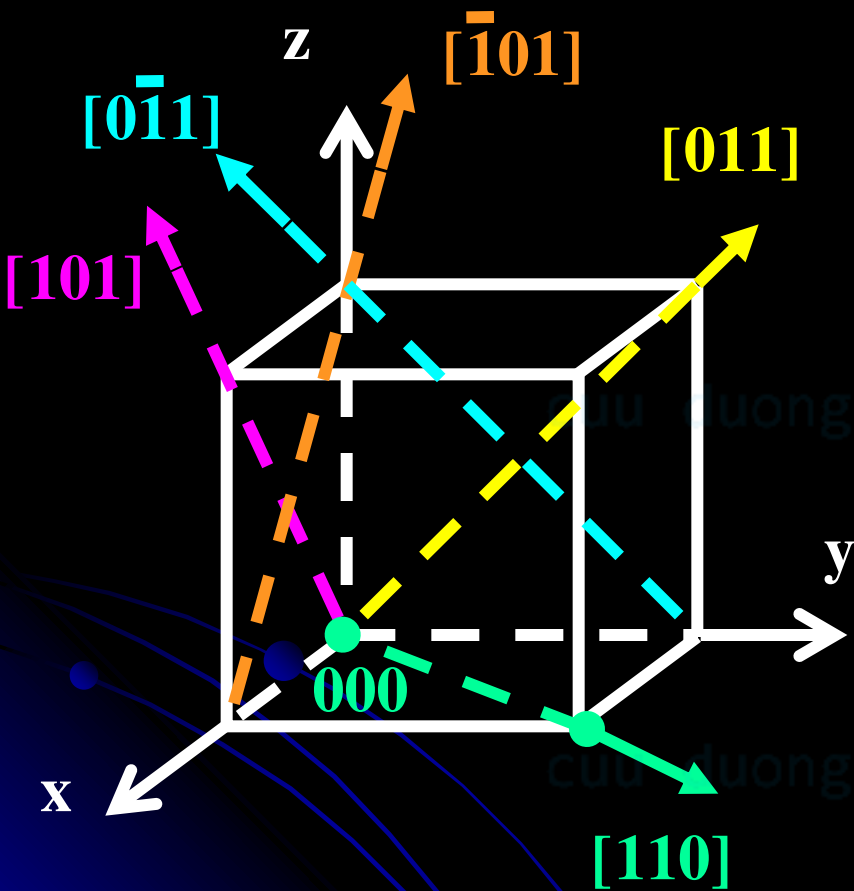


b. Ký hiệu một chuỗi (chiều) trong tinh thể

- 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





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:

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

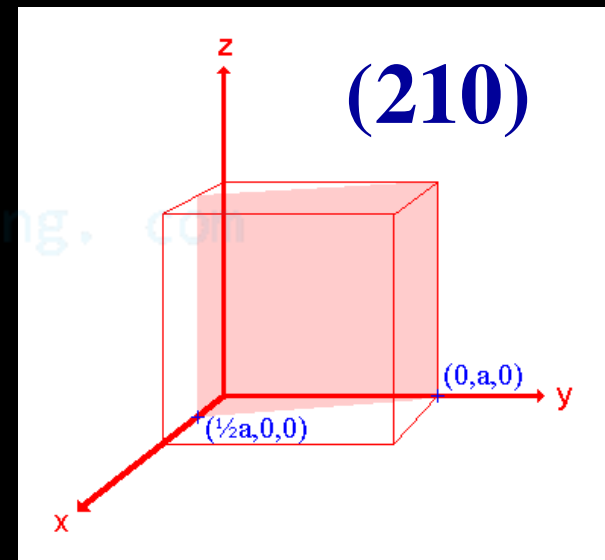
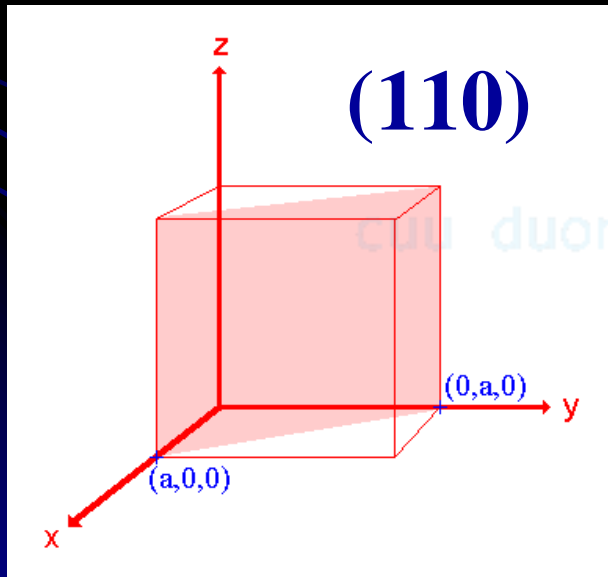
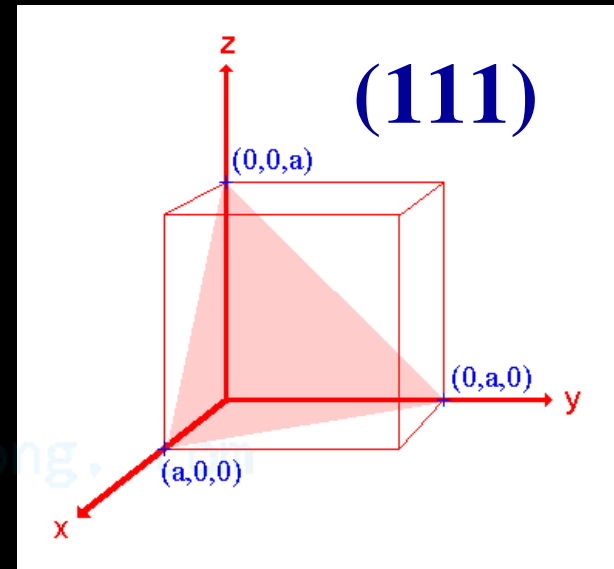
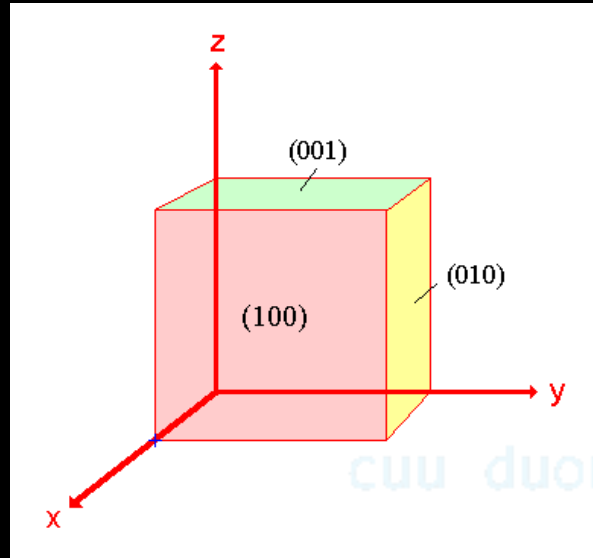
Ta lập tỉ số kép :

$$\frac{a_1}{n_1 a_1} : \frac{a_2}{n_2 a_2} : \frac{a_3}{n_3 a_3} = \frac{1}{2} : \frac{1}{1} : \frac{1}{3} = \frac{3}{6} : \frac{6}{6} : \frac{2}{6} = 3 : 6 : 2$$

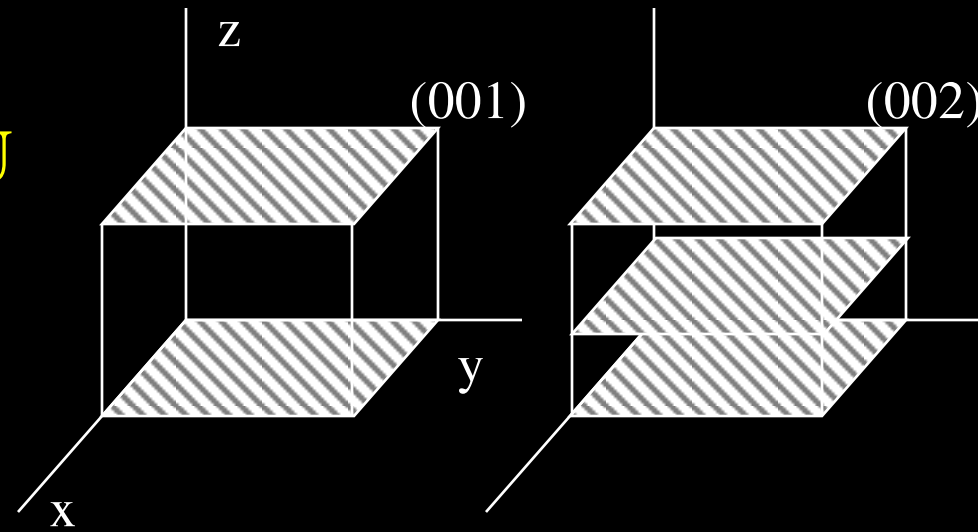
$$\text{Đặt } h : k : l = 3 : 6 : 2$$

$$\Rightarrow \text{chỉ số Miller} = (362)$$

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

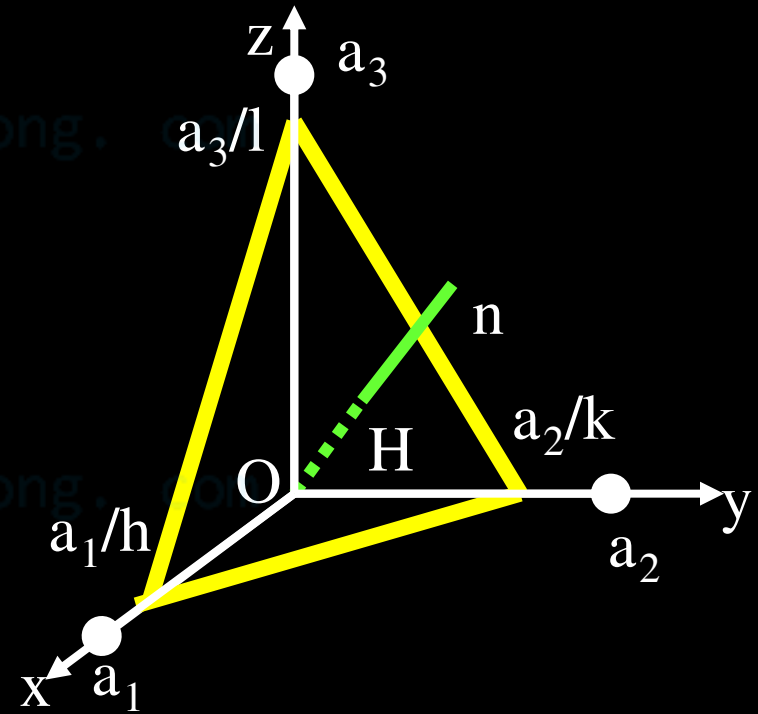
➤ d_{hkl} là đại lượng quan trọng trong các phép tính toán cấu trúc.

➤ Xét trường hợp $Ox \perp Oy \perp Oz$

➤ 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.



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:

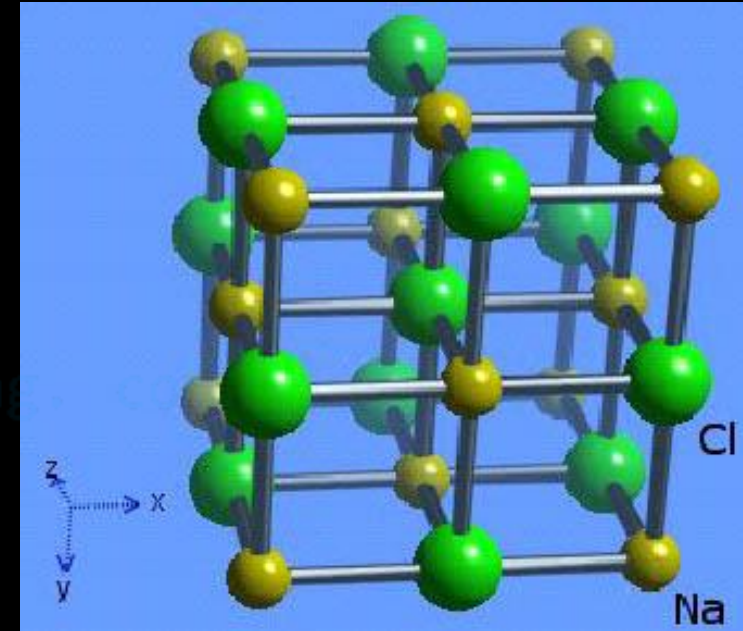
$$a_1 = a_2 \neq a_3; \alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$$

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

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

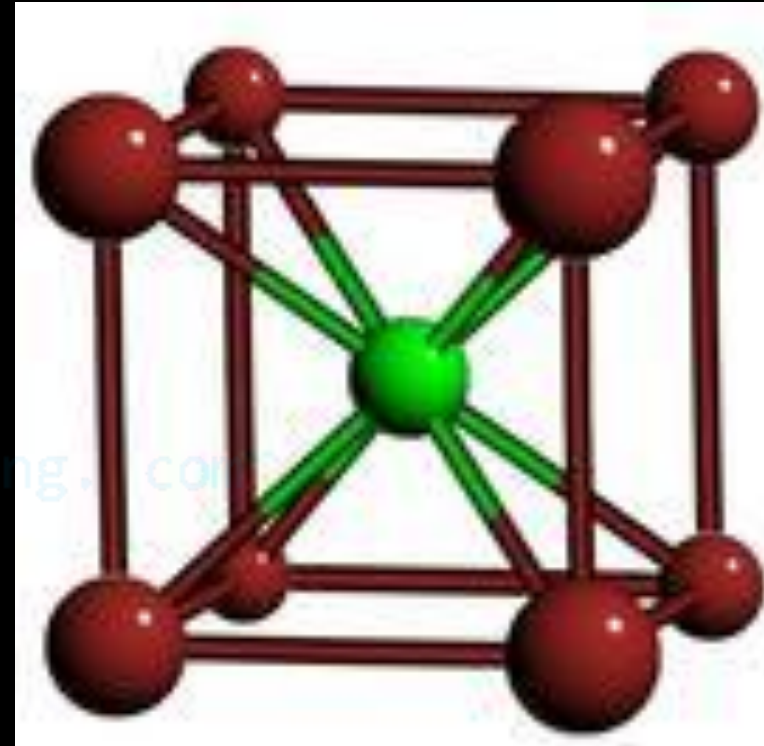
a. Cấu trúc của NaCl

- **Mạng Bravais:** mạng lập phương tâm mặt **F (cfc)**
- **Cơ sở của ô mạng gồm:**
- một ion **Na^+ $[[000]]$** và một ion **Cl^- $[[\frac{1}{2}00]]$** cách nhau $\frac{1}{2}$ cạnh của ô mạng hình lập phương.
- Hay: ion **Na^+ $[[000]]$** và ion **Cl^- $[[\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}]]$** .



b. Cấu trúc của CsCl:

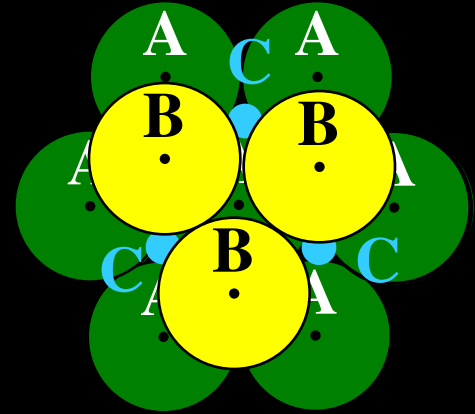
- **Mạng Bravais:** Thuộc mạng lập phương nguyên thủy P với mỗi ô mạng có hai nguyên tử cơ sở.
- **Cơ sở của ô mạng gồm:**
- **Cs :** $[[000]]$; **Cl :** $[[\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}]]$



Cấu trúc tinh thể CsCl

c. Cấu trúc lục giác xếp chặt

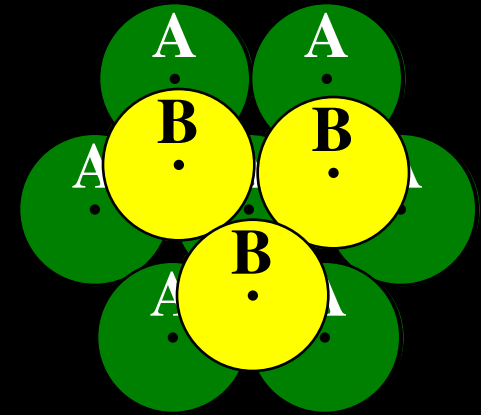
- **Lớp thứ nhất:** Mỗi quả cầu được bao xung quanh bởi 6 quả cầu khác $\Rightarrow$ vị trí A.
- có sáu vị trí hõm vào của lớp thứ nhất thuộc hai loại B và C.



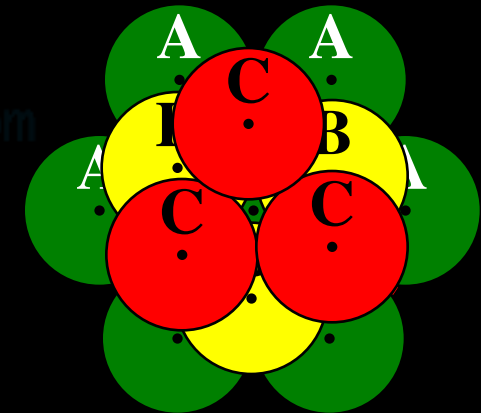
- **Lớp thứ hai:** Có thể đặt các quả cầu lớp thứ hai vào vị trí B hay C sao cho mỗi quả cầu lớp thứ 2 tiếp xúc với 3 quả cầu của lớp thứ nhất.
- Giả sử lớp thứ hai chiếm các vị trí B.

Lớp thứ 3: có 2 cách xếp:

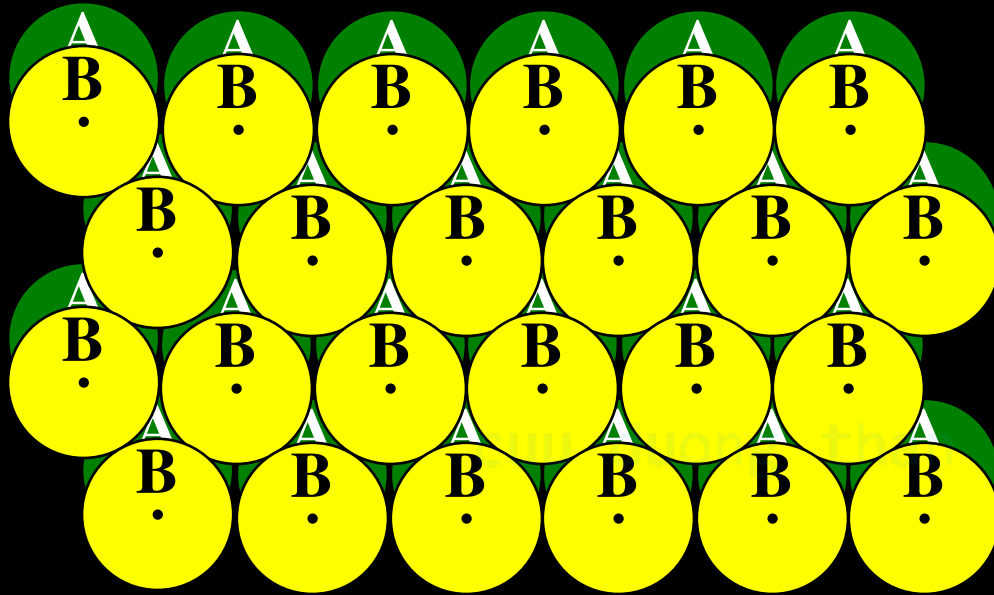
+ **Cách 1:** Đặt các quả cầu lên vị trí A, rồi lớp tiếp theo là B và cứ thế tạo thành các lớp liên tiếp ABABAB... $\Rightarrow$ **Cấu trúc lục giác xếp chặt.**



+ **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... $\Rightarrow$ **Cấu trúc lập phương tâm mặt.**

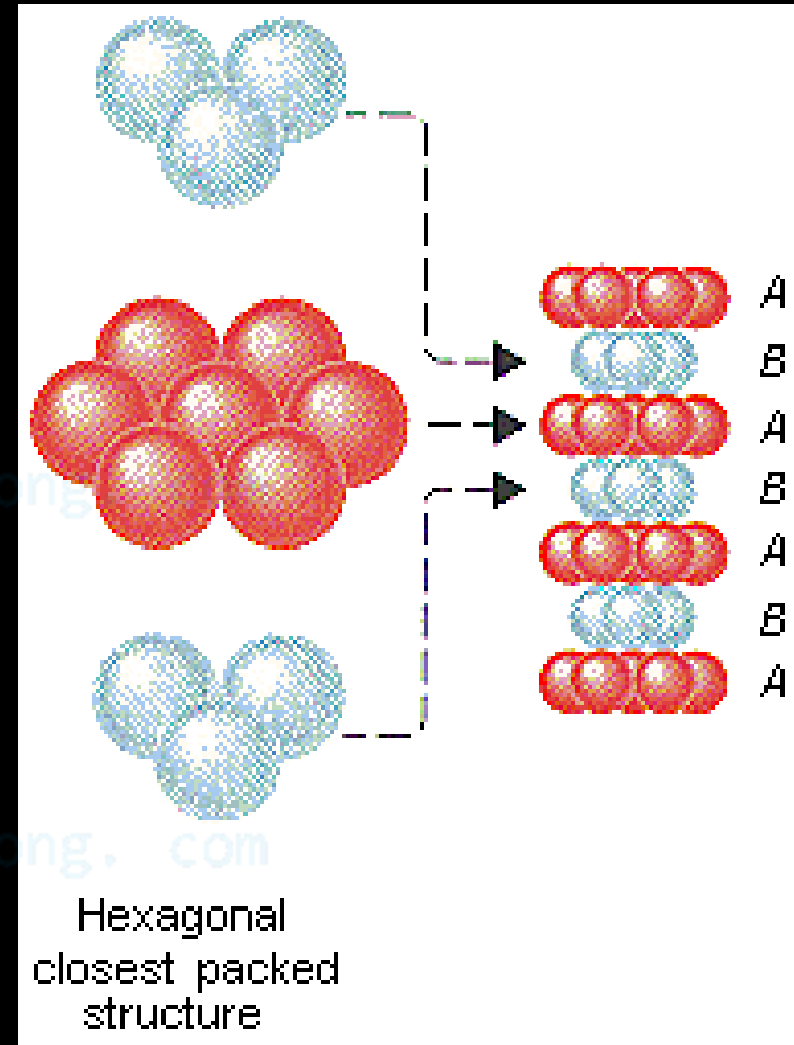


CẤU TRÚC LỤC GIÁC XẾP CHẶT

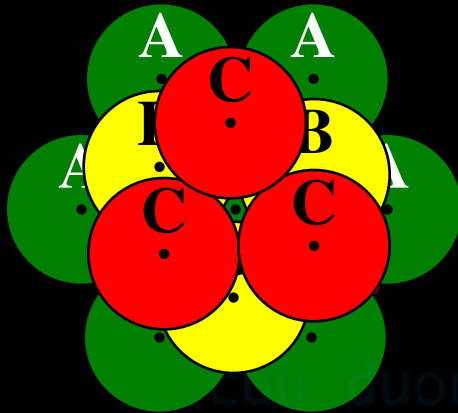


Cấu trúc lục giác xếp chặt
ABABAB...

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

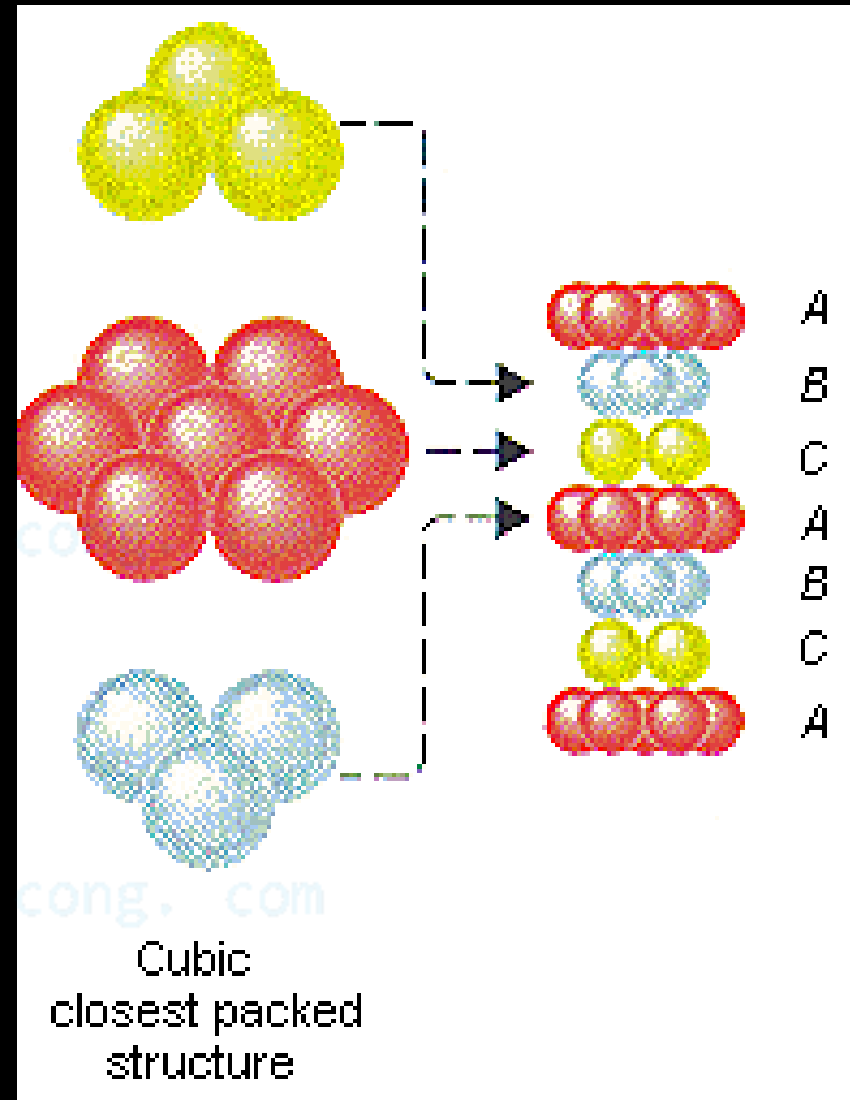


CẤU TRÚC XẾP CHẶT KIỂU LP TÂM MẶT



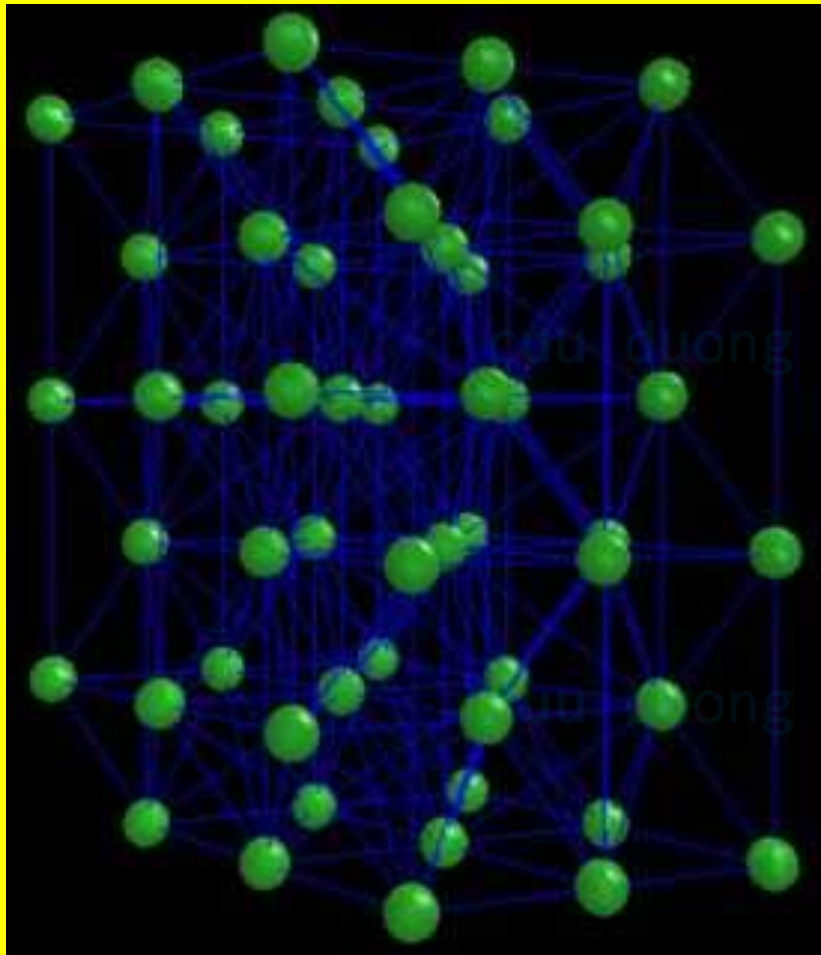
Cấu trúc xếp chặt ABCABC

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

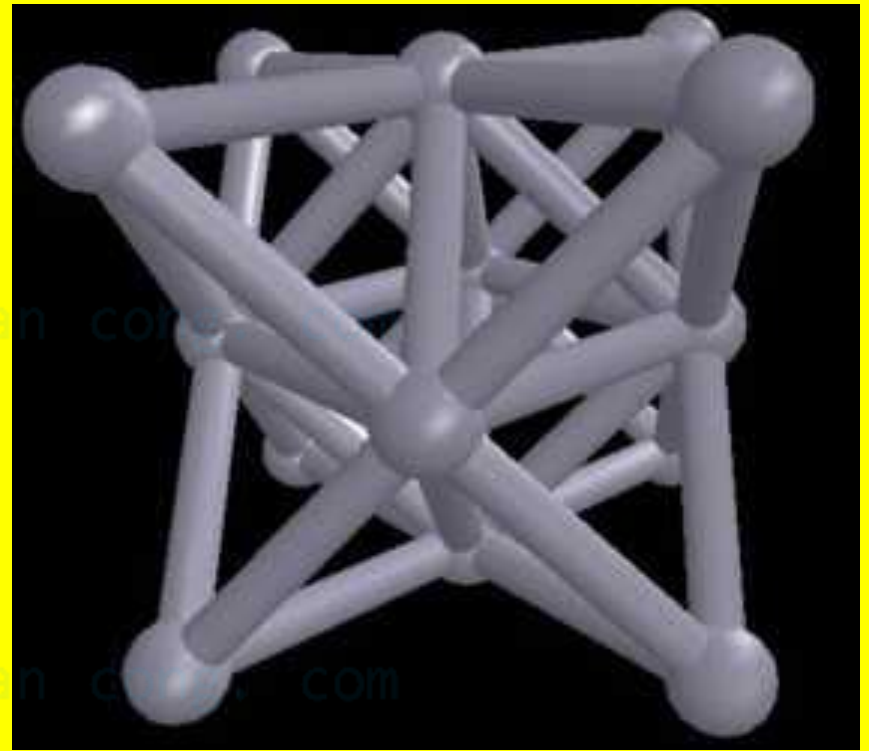


Cấu trúc xếp chặt dẫn đến
mạng lập phương tâm mặt

CÁC CHẤT KẾT TINH THEO MẠNG LỤC GIÁC



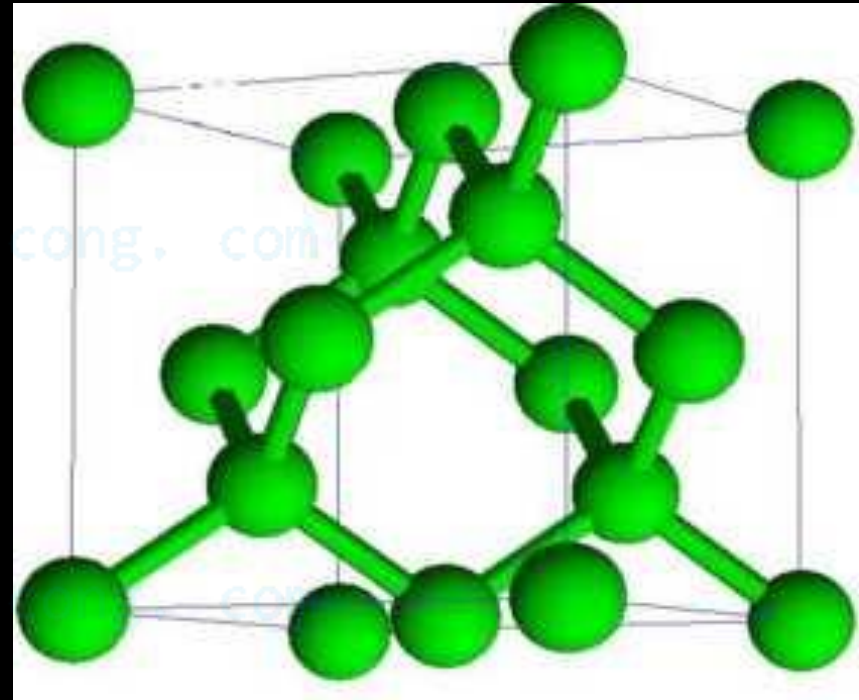
Cấu trúc lục giác xếp chặt (Mg)



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

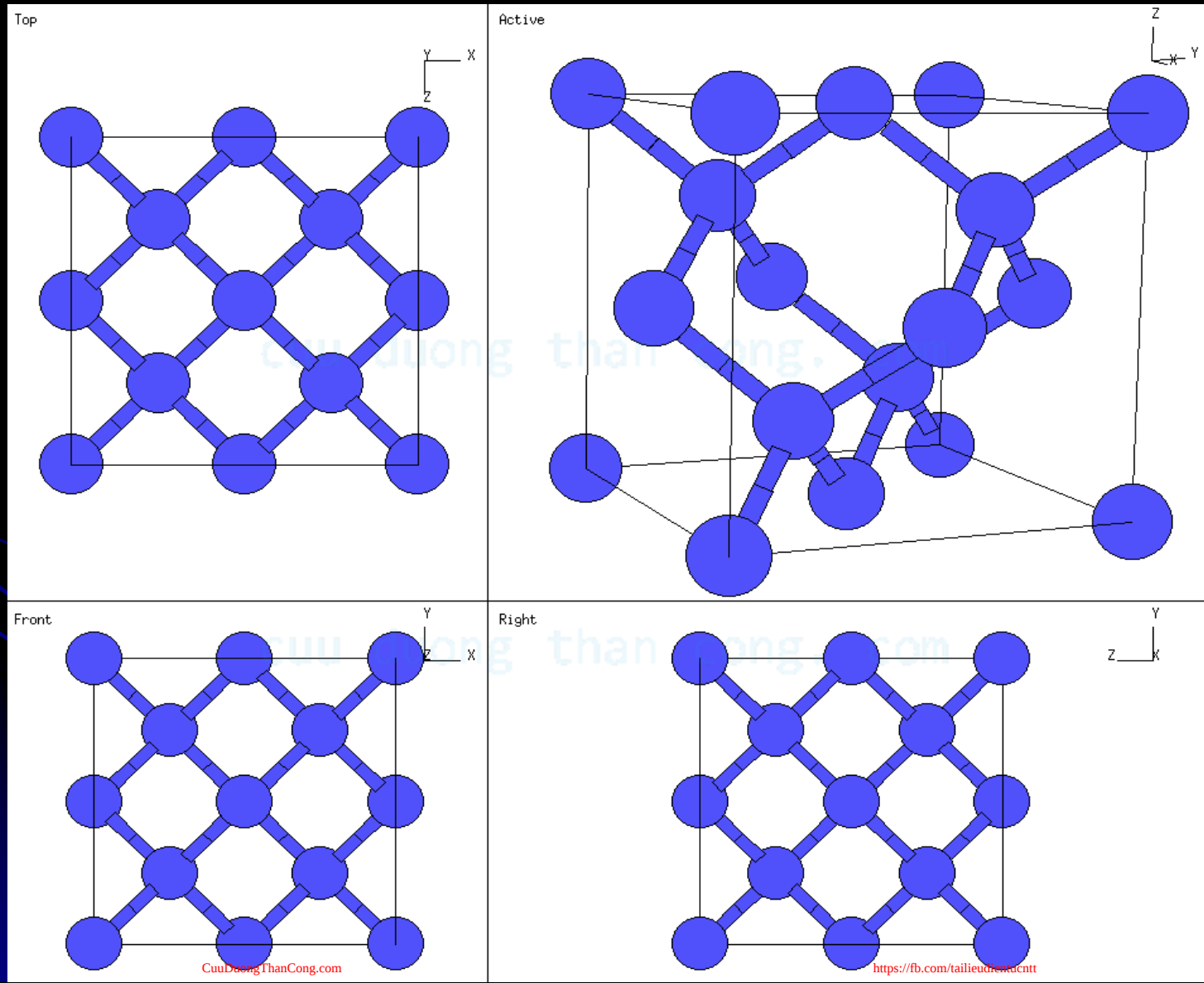
d. Cấu trúc của kim cương

- **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 CƯỜNG

DƯỚI CÁC GÓC NHÌN KHÁC NHAU



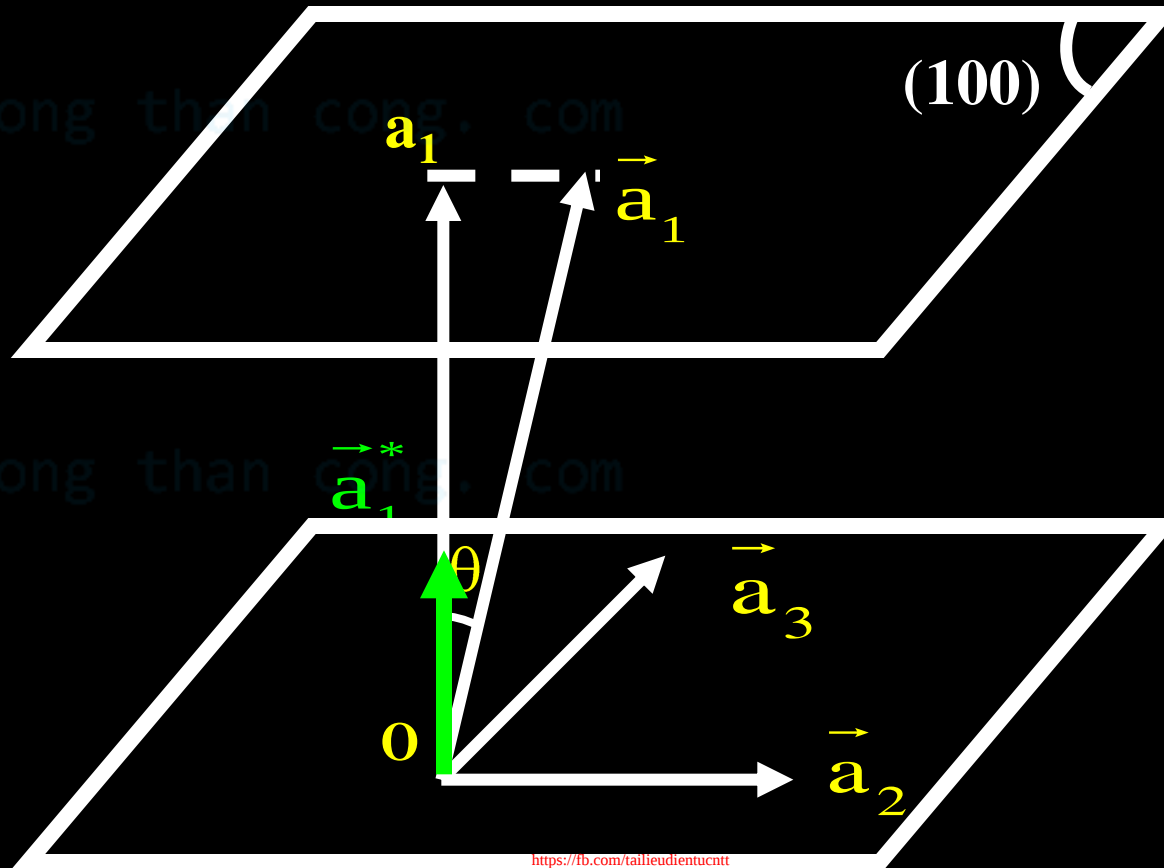
8. MẠNG ĐẢO (MẠNG NGƯỢC)

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:

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



Tất cả các điều kiện trên cho phép ta có :

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

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

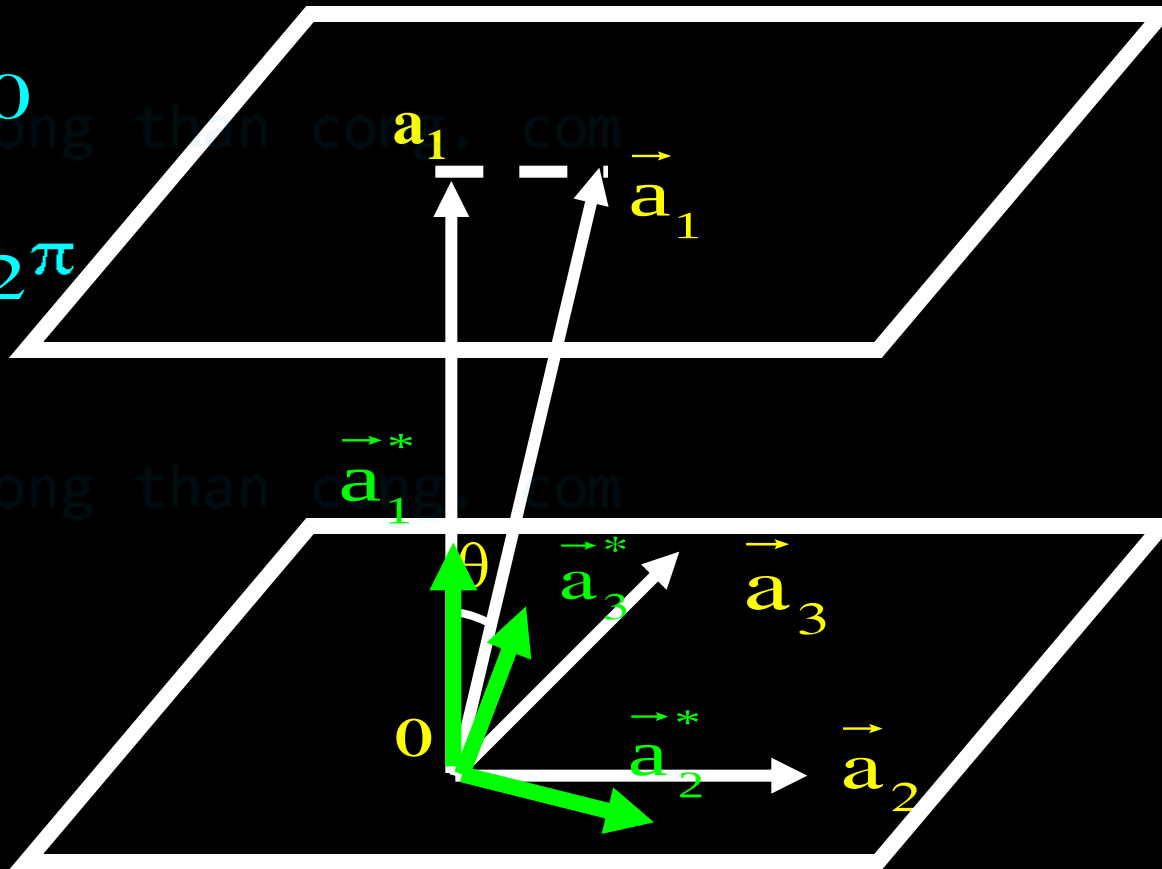
$$\vec{a}_2^* \cdot \vec{a}_1 = 0 \quad \vec{a}_3^* \cdot \vec{a}_1 = 0$$

$$\vec{a}_2^* \cdot \vec{a}_2 = 2\pi \quad \vec{a}_3^* \cdot \vec{a}_2 = 0$$

$$\vec{a}_2^* \cdot \vec{a}_3 = 0 \quad \vec{a}_3^* \cdot \vec{a}_3 = 2\pi$$

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

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



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

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

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

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:

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

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

Suy ra:

$$V \cdot V^* = (2\pi)^3$$

• 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 $\vec{a}_1^* \parallel \vec{a}_1$; $\vec{a}_2^* \parallel \vec{a}_2$; $\vec{a}_3^* \parallel \vec{a}_3$

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 :

$$|\vec{G}_{hkl}| = \frac{2\pi}{d_{hkl}}$$

$\Rightarrow$ 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:

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

cuu duong than cong. com

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.

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

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