CHƯƠNG 3: HÌNH HỌC TINH THỂ CỦA CHẤT RẮN

3.1. 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.

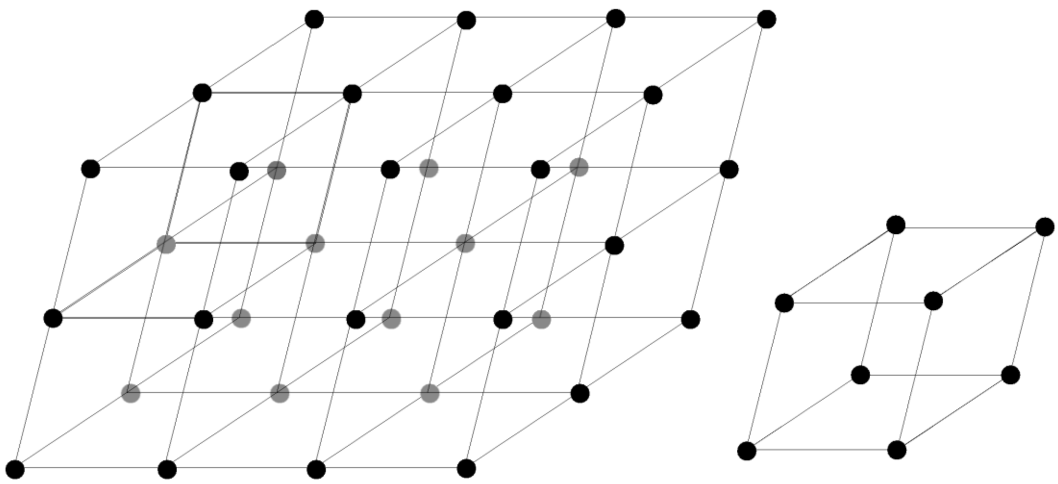
Nếu các nguyên tử cũng sắp xếp đều đặn và có chu kỳ nhưng tinh thể có chứa một số lớn khuyết tật ta có tinh thể thực. Dạng này thường gặp trong thực tế.

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.

3.2. Mạng tinh thể, ô cơ sở

3.2.1. Định nghĩa

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 $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$. Các vec tơ này xác định phương và khoảng cách giữa các nút của mạng.



3.2.2. Đặc điểm

- Có sự lặp lại một cách chu kỳ của các nút theo phương bất kỳ trong không gian. Vì vậy 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.

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. Các khối này gọi là ô cơ sở và cách sắp xếp các nút trong ô cơ sở là đại diện chung cho toàn mạng.

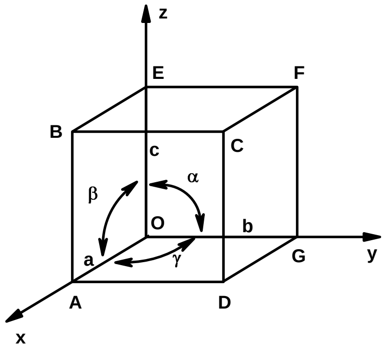
Nguyên tắc chung để lựa chọn ô cơ sở là:

- 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 vectơ $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$ 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 vectơ $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$ của ô cơ sở. Điểm gốc O được qui ước đặt ở mặt sau bên trái của hình.



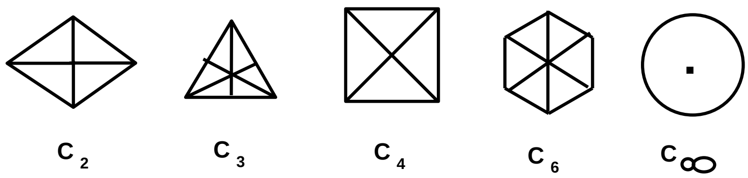
3.3. Các loại cấu trúc tinh thể

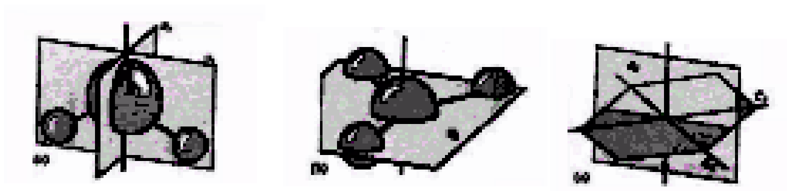
3.3.1. Các yếu tố đối xứng

Trục đối xứng C_n: Là 1 đường thẳng có trong hình mà khi quay hình quanh trục 1 góc α với $\alpha = \frac{360}{n}$ thì hình được lặp lại đều đặn.

α là góc quay và n là số lần lặp lại $\rightarrow$ trục bậc n: L_n.

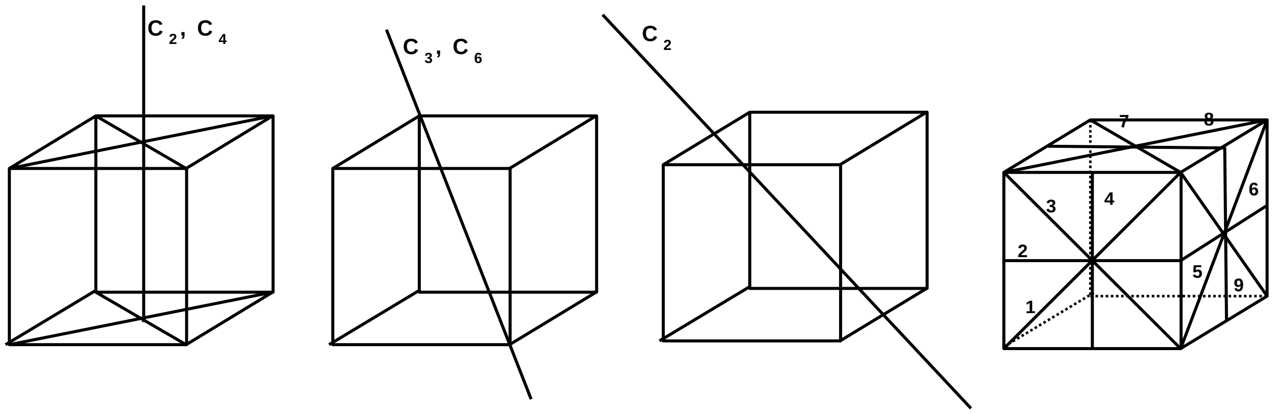
Ngoài trục đối xứng, còn có những yếu tố đối xứng khác như yếu tố đối xứng đơn vị E, tâm đối xứng i; mặt đối xứng σ_v (chứa trục đối xứng chính), σ_h (vuông góc với trục đối xứng chính), σ_d (chứa trục đối xứng chính nhưng nằm giữa hai trục C_2 vuông góc với trục chính); và trục đối xứng nghịch đảo S_n (quay quanh trục C_n rồi phản chiếu qua mặt phẳng vuông góc với C_n).





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



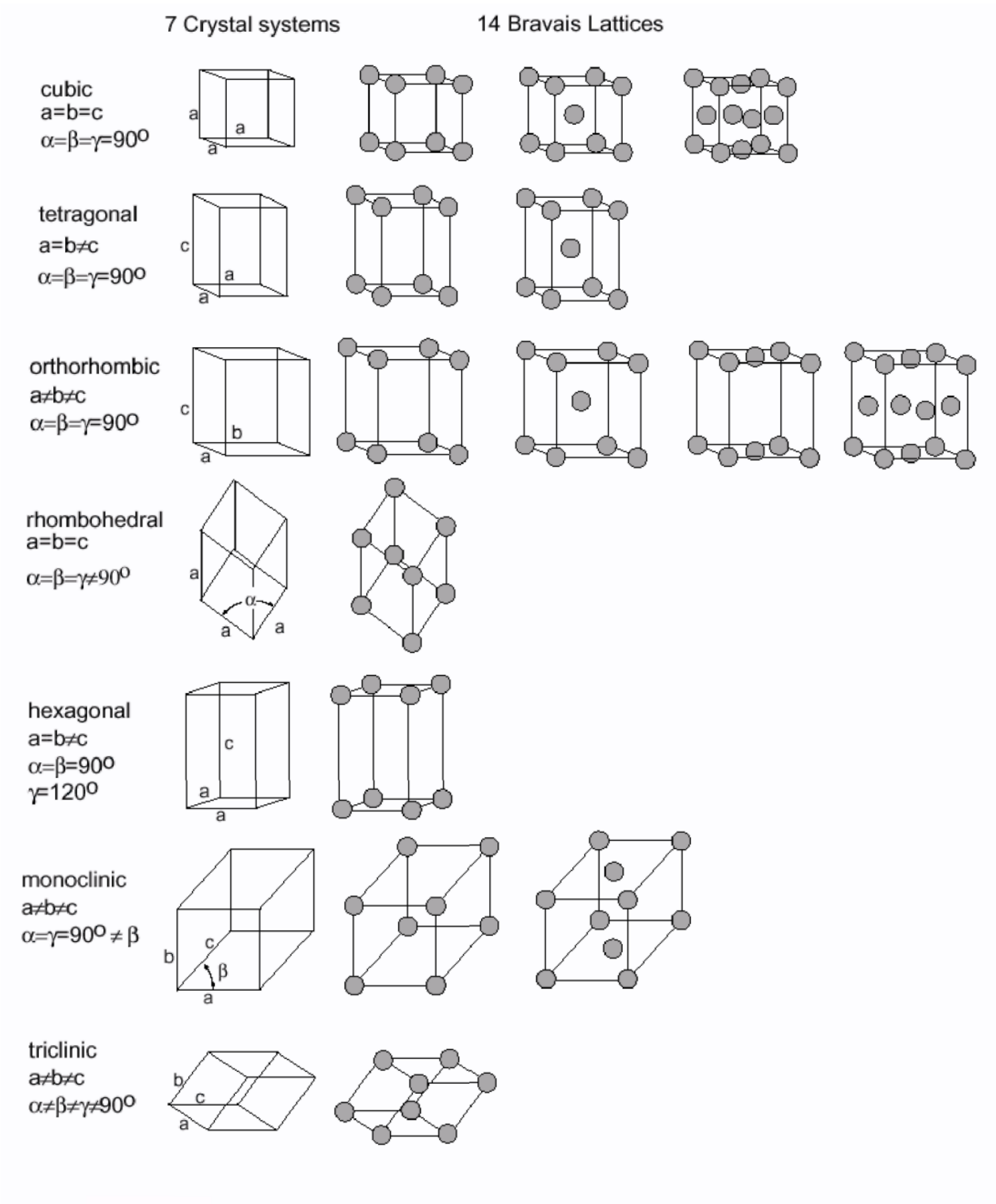
Hình lập phương có các thông số sau:

- 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

3.3.2. Hệ tinh thể

Tùy thuộc vào cách sắp xếp giữa ba vectơ $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$ 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 đối xứng tiêu biểu	Ô gốc	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	x



The 7 crystal systems and the 14 Bravais lattices

3.4. Ký hiệu phương, mặt theo chỉ số Miller

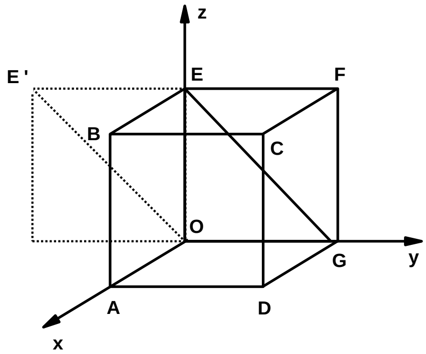
3.4.1. Ký hiệu phương tinh thể [uvw]

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.

<u>Cách tìm:</u>

- 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 –

Ví dụ: Trong hệ lập phương thì các trục x, y, z có ký hiệu [100], [010], [001] vì đi qua các điểm (1,0,0), (0,1,0), (0,0,1). OC có ký hiệu [111] vì qua C(1,1,1). OB có ký hiệu [101] vì qua B(1,0,1). EG có ký hiệu $[0\bar{1}1]$ vì E'(0,-1,1) trên OE'// EG.



Như vậy [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 <uvw>. Các phương trong một hệ có các trị tuyệt đối uvw giống nhau và có thể hoán vị chỗ cho nhau.

Ví dụ: [100] [010] [001] thuộc hệ <100 >

[111] $[\bar{1}11]$ $[1\bar{1}1]$ $[11\bar{1}]$ thuộc hệ <111>

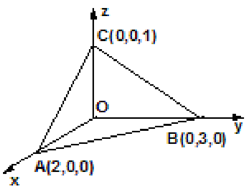
3.4.2. Ký hiệu mặt tinh thể (hkl)

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.

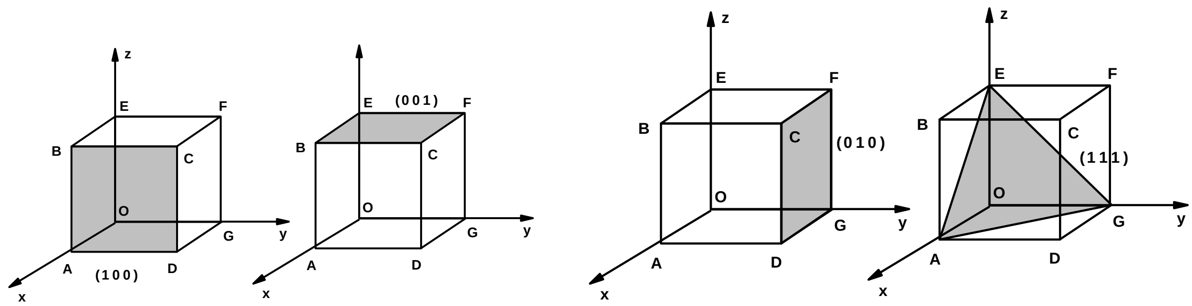
Cách tìm:

- 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 $\frac{1}{p}, \frac{1}{q}, \frac{1}{r}$ 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

Ví dụ: hệ lập phương



$$\frac{1}{2}, \frac{1}{3}, \frac{1}{1} \rightarrow \frac{3}{6}, \frac{2}{6}, \frac{6}{6} \Rightarrow \text{ABC (326)}$$

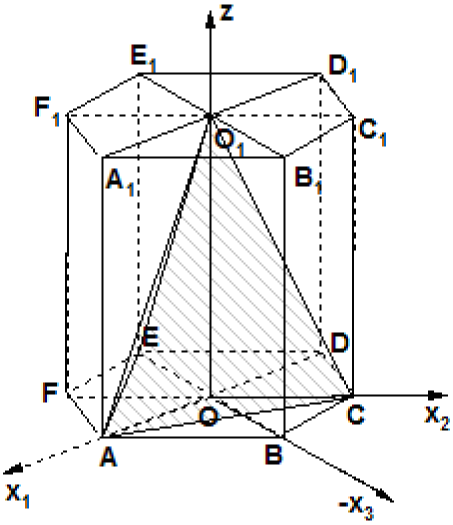


Như vậy (hkl) là ký hiệu của mặt (hkl) và các mặt phẳng khác song song với mặt phẳng này. Ngoài ra do tính đối xứng cao nên nhiều mặt không song song, có ký hiệu khác nhau, nhưng có cùng cách sắp xếp các nút sẽ tạo thành hệ mặt; ký hiệu {hkl}.

Ví dụ: (100) (010) (001) thuộc hệ {100}

(110) (101) (011) $(\bar{1}10)$ $(\bar{1}01)$ $(0\bar{1}1)$ thuộc hệ {110}

3.4.3. Ký hiệu trong hệ sáu phương



Theo Miller O_1AC và O_1AE có cùng cách sắp xếp các nút nhưng có ký hiệu (111) và $(1\bar{2}1)$ sẽ không cùng hệ. Bravais bổ sung bằng cách dùng 4 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 120^0.

Ký hiệu phương [uvwr]

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

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

Qui đồng mẫu số thì tử số là u, v, w, r và ký hiệu phương là [uvwr]

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

$$u' = \frac{2.1 - 0}{3} = \frac{2}{3},\ v' = \frac{2.0 - 1}{3} = -\frac{1}{3},\ w' = -\frac{0 + 1}{3} = -\frac{1}{3},\ r = r' = 0 \Rightarrow 2, -1, -1, 0 \Rightarrow [2\bar{1}\bar{1}0]$$

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

Ký hiệu mặt (hkil) (tìm như với ký hiệu của Miller)

Khi đó

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

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

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

3.4.5. Góc giữa hai phương cho trước

Giả sử có 2 phương L_1 $[u_1v_1w_1]$, L_2 $[u_2v_2w_2]$. Tính góc φ giữa hai phương

$$\cos\varphi = \frac{1}{N_1.N_2}(a^2.u_1u_2 + b^2.v_1v_2 + c^2.w_1w_2)$$

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

Đối với hệ lập phương

$$\cos\varphi = \frac{1}{N_1^{'}N_2^{'}}(u_1u_2 + v_1v_2 + w_1w_2) \qquad N_i^{'} = \sqrt{u_i^2 + v_i^2 + w_i^2}$$

3.4.6. Góc giữa phương và mặt tinh thể

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

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

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

Đối với hệ lập phương

$$\cos\varphi = \frac{1}{M'N'}(hu + kv + lw) \qquad M' = \sqrt{h^2 + k^2 + l^2}$$

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