

TINH THỂ HỌC

cuu duong than cong, com

CÁN BỘ GIẢNG DẠY

NGUYỄN BÁ TÀI

BM: CSKHVL

cuu duong than cong, com

KHOA: CÔNG NGHỆ VẬT LIỆU

NỘI DUNG MÔN HỌC GỒM 2 PHẦN CHÍNH

TINH THỂ HỌC

- HÌNH HỌC HÌNH THÁI VÀ CẤU TRÚC TINH THỂ
- HÓA HỌC TINH THỂ
- SAI HỒNG MẠNG TINH THỂ
- TINH THỂ HỌC VẬT LÝ

PHÂN TÍCH CẤU TRÚC TINH THỂ

- PHÉP ĐO BẰNG GIÁC KẾ
- NGHIÊN CỨU TINH THỂ BẰNG TIA X

PHẦN 1

HÌNH HỌC HÌNH THÁI VÀ CẤU TRÚC TINH THỂ

- Mạng không gian và mạng tinh thể
- Ô cơ sở, các kí hiệu tinh thể học
- 7 hệ tinh thể và 14 kiểu mạng Bravais
- Cơ sở ô mạng tinh thể (basis)
- Tính đối xứng của tinh thể

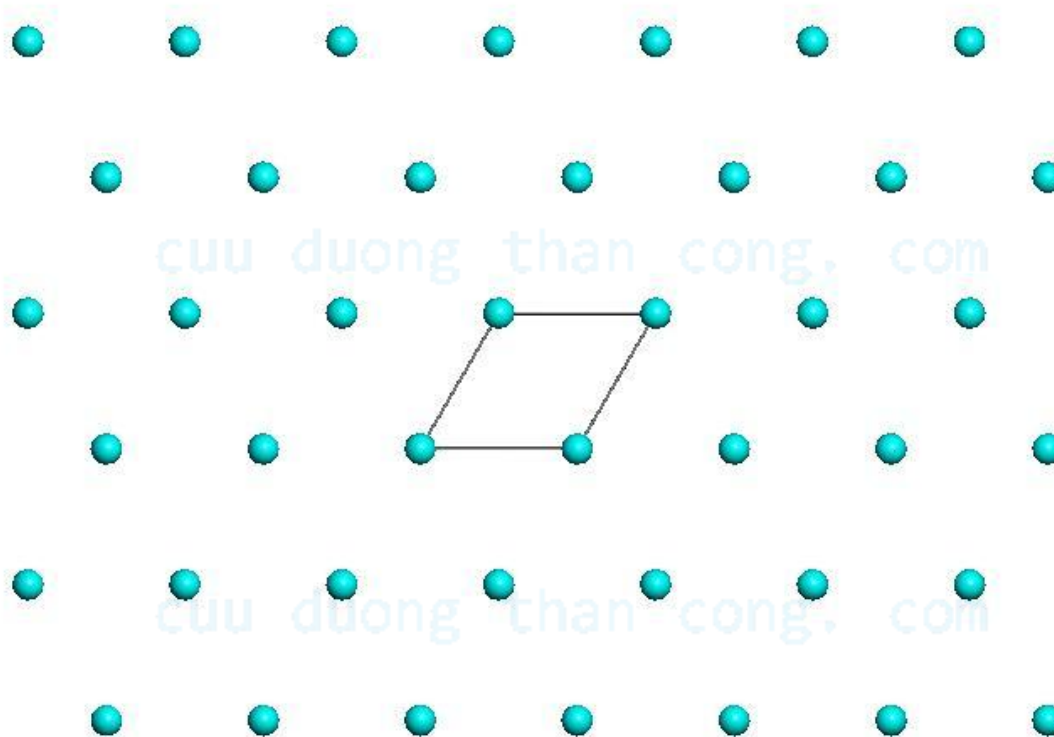
MẠNG KHÔNG GIAN VÀ MẠNG TINH THỂ

- Từ một điểm trong không gian bằng một vectơ tịnh tiến R

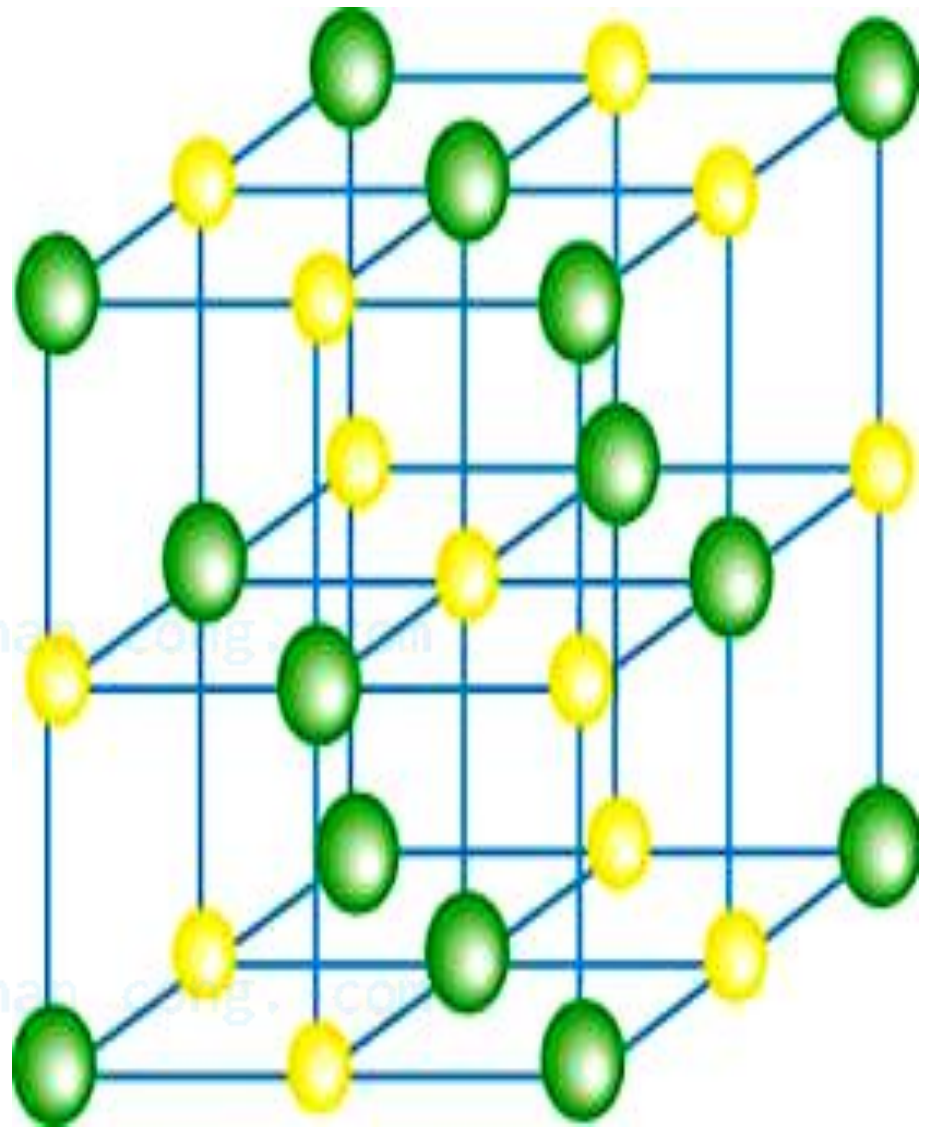
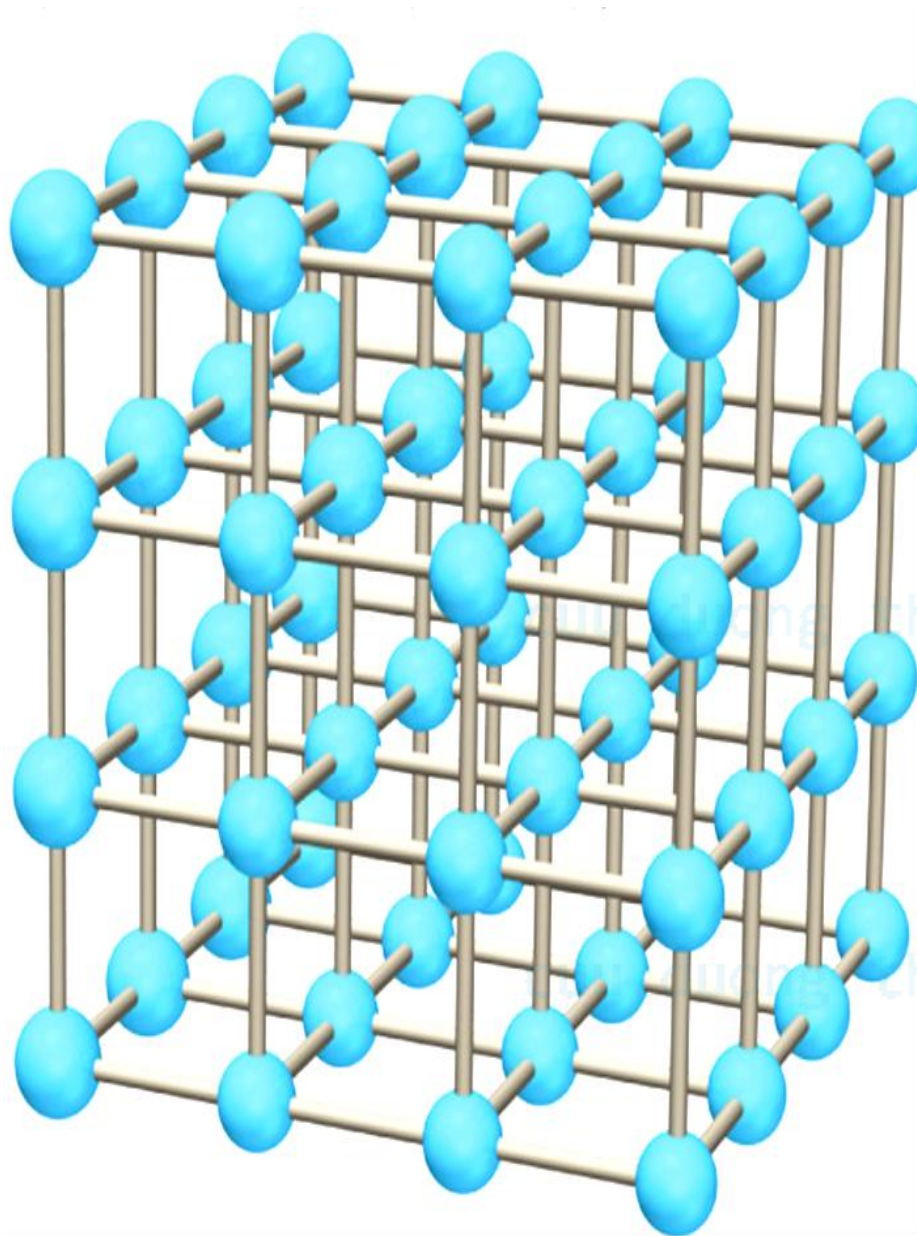
$$\vec{R} = n_1 \vec{a} + n_2 \vec{b} + n_3 \vec{c}$$

với n_1, n_2, n_3 là những số nguyên và a, b, c không cùng nằm trên một mặt phẳng ta sẽ có một *mạng không gian* tuần hoàn lý tưởng

- Các vectơ a , b , c được gọi là các vectơ cơ sở và các điểm giao nhau của các vectơ gọi là *nút mạng không gian*

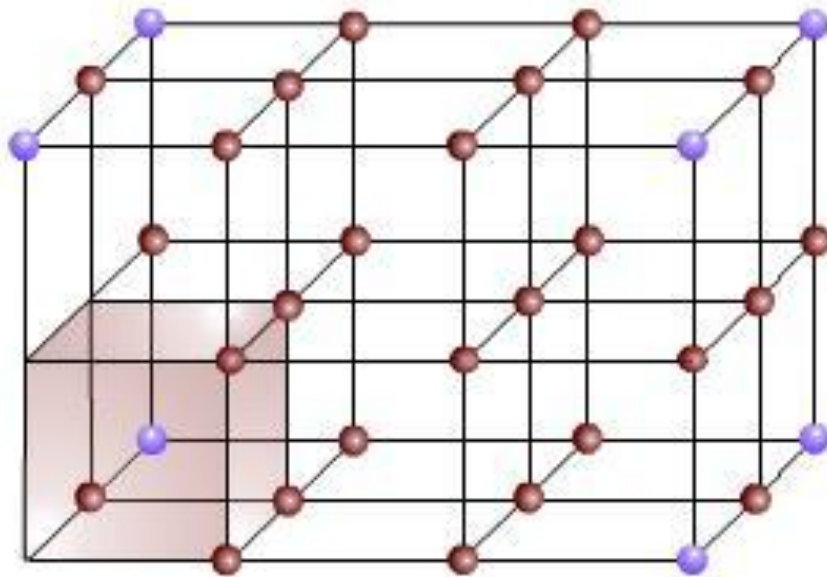


- ***Mạng không gian*** là một mạng vô tận trong không gian
- Nếu các nguyên tử, phân tử hay ion thuộc một hay nhiều loại được xếp vào mạng lý tưởng sao cho lân cận mỗi điểm nút mạng bất kỳ đều có một nhóm các nguyên tố bố trí giống hệt nhau ta có ***mạng tinh thể***
- Như vậy ***mạng tinh thể*** cũng là vô tận khác với các tinh thể thực trên thực tế đều có kích thước hữu hạn

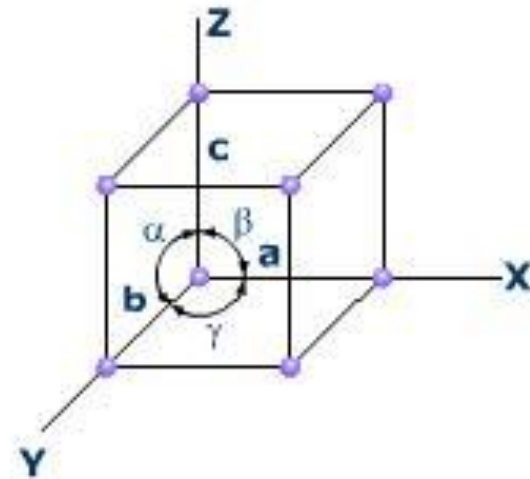


Ô CƠ SỞ

- Là ô mạng thể hiện đầy đủ nhất tính đối xứng của mạng đồng thời là đơn vị tuần hoàn nhỏ bé nhất của mạng
- Ô cơ sở phải thỏa mãn các điều kiện sau đây:
 1. cùng hệ với hệ của toàn mạng
 2. Số cạnh và số góc giữa các cạnh bằng nhau nhiều nhất
 3. Số góc vuông (nếu có) phải nhiều nhất
 4. Thể tích của ô mạng phải nhỏ nhất



Representation of space
lattice and unit cell



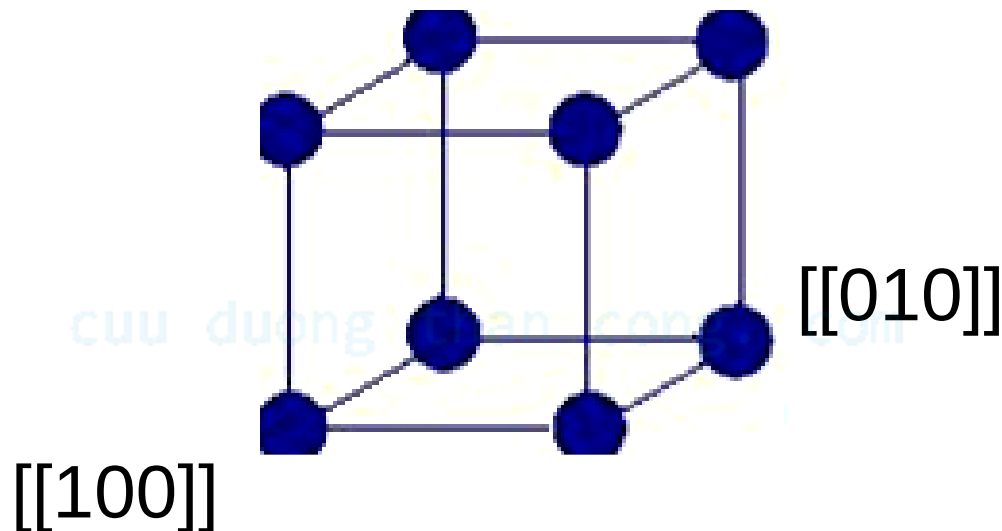
Representation of dimensions
of a unit cell

- Ô cơ sở được đặc trưng bởi 3 vectơ cơ sở :
và 3 góc giữa chúng

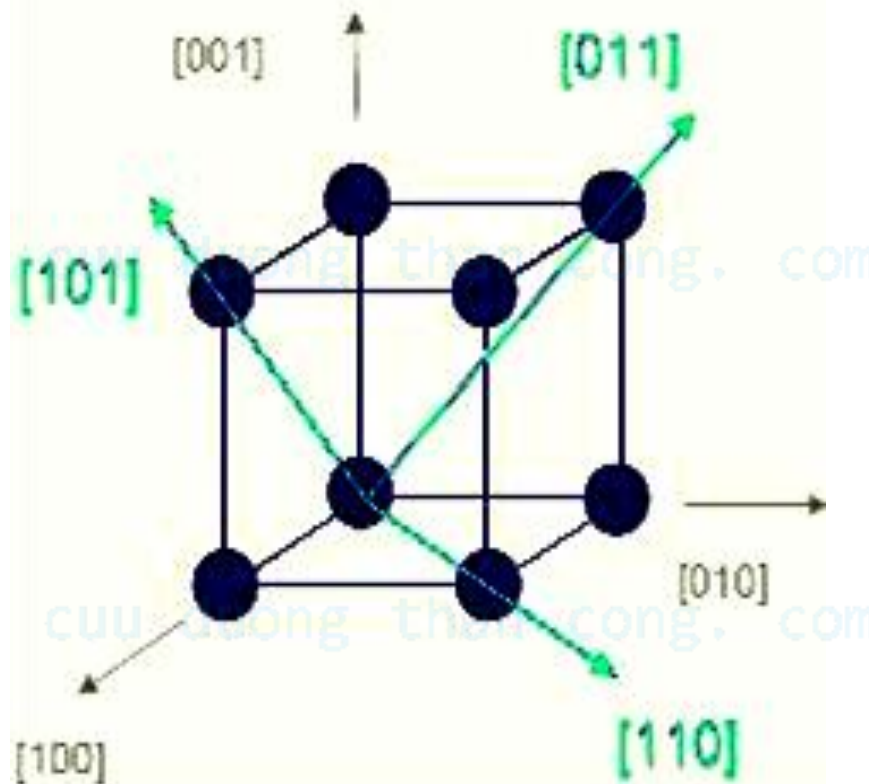
$$\begin{array}{ccc} \rightarrow & \rightarrow & \rightarrow \\ a, & b, & c \\ \alpha, & \beta, & \gamma \end{array}$$

KÍ HIỆU NÚT, PHƯƠNG TINH THỂ

- Chỉ số nút mạng được kí hiệu bằng 3 số tương ứng với tọa độ của nút trong hệ trục tọa độ đã chọn đặt trong ngoặc vuông kép $[[...]]$, giá trị âm được kí hiệu bằng dấu (-) trên tọa độ tương ứng, ví dụ $[[100]]$, $[[0_1 0]]$



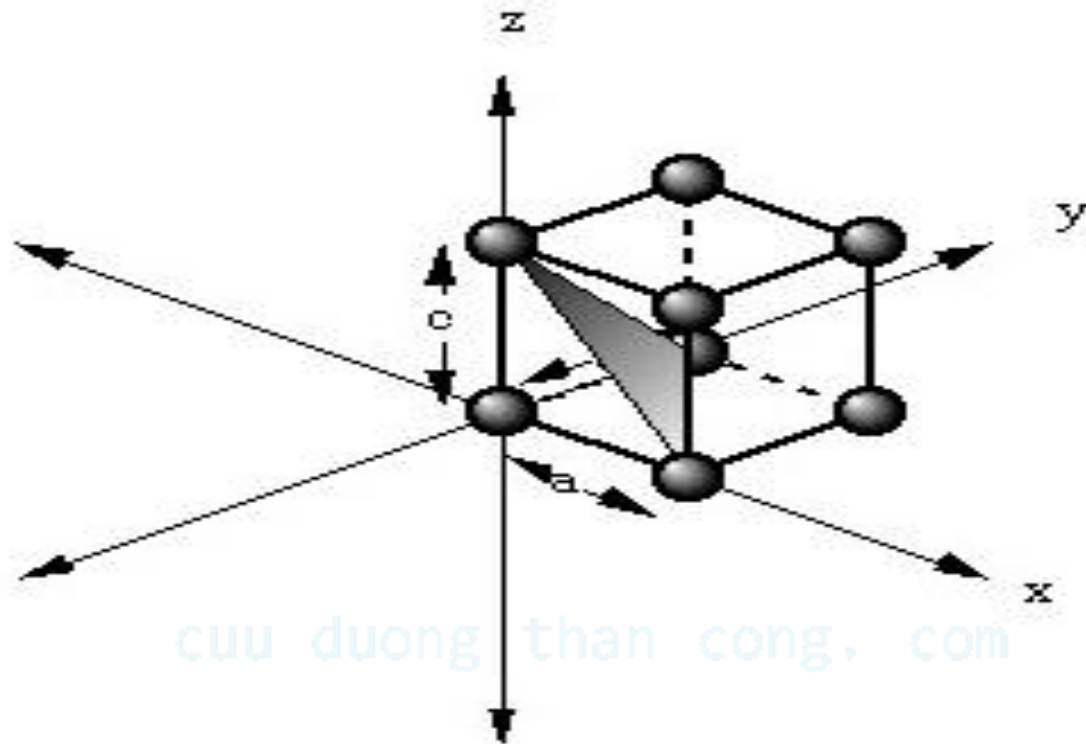
- Chỉ số phương tinh thể được kí hiệu $[uvw]$ trong đó u, v, w là tọa độ của nút trên phương đó và nằm gần gốc tọa độ nhất.



- Các *phương song song* và có tính chất giống nhau tạo thành một *hệ phương* cũng được kí hiệu là $[uvw]$
- Các *phương không song song* nhưng có tính chất giống nhau tạo thành một *họ phương* được kí hiệu là $\langle uvw \rangle$
- Chỉ số âm có kí hiệu (-) ở phía trên tọa độ đó

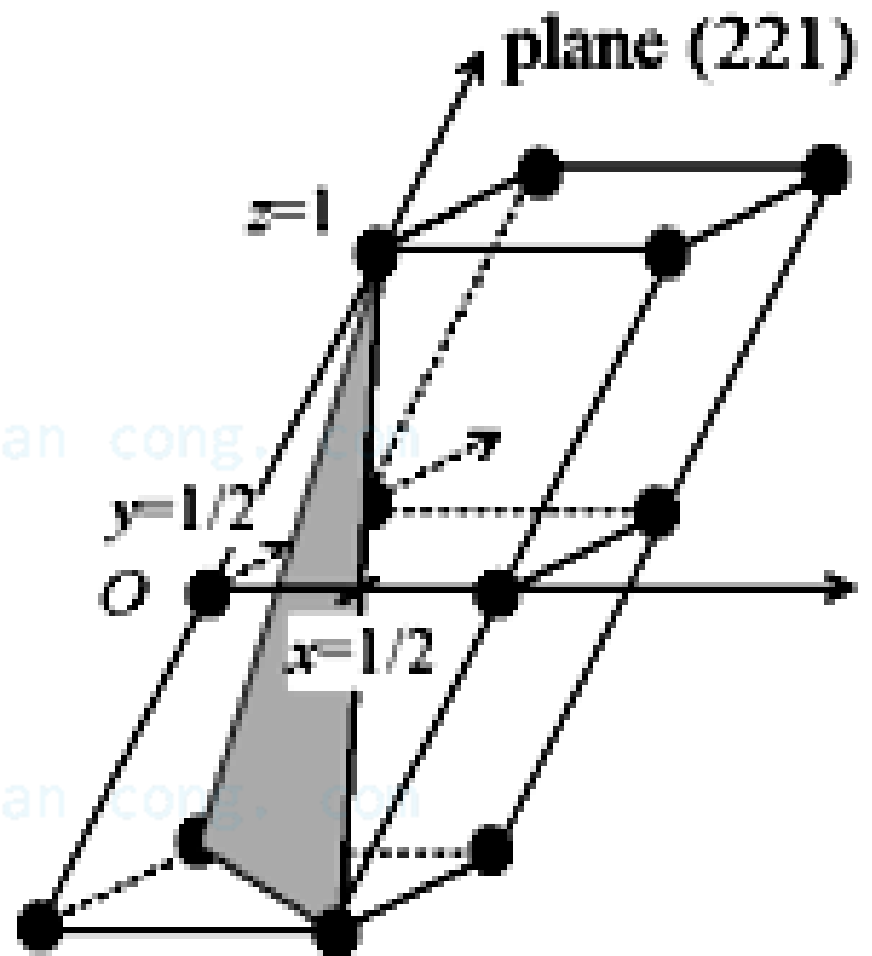
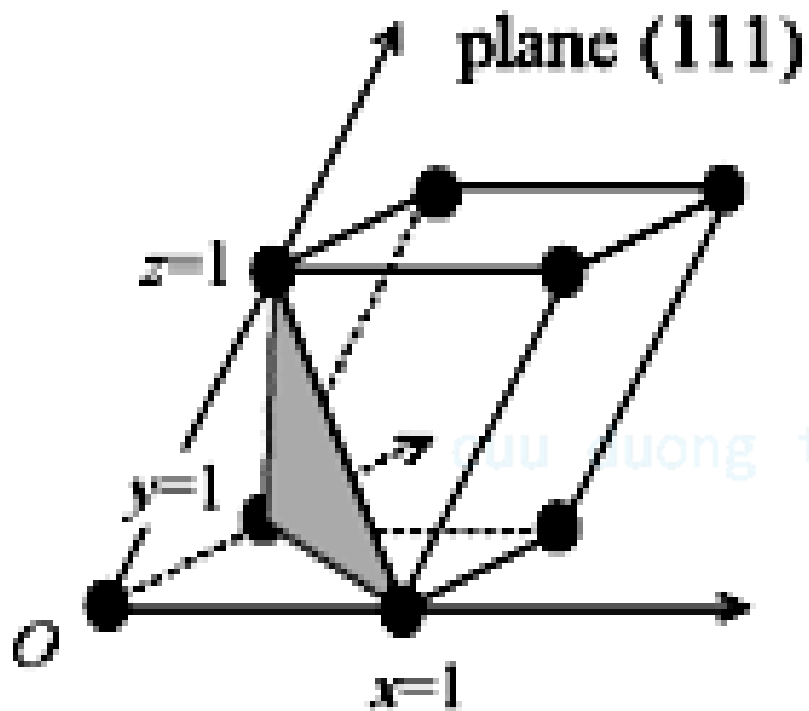
CHỈ SỐ MILLER CỦA MẶT TINH THỂ

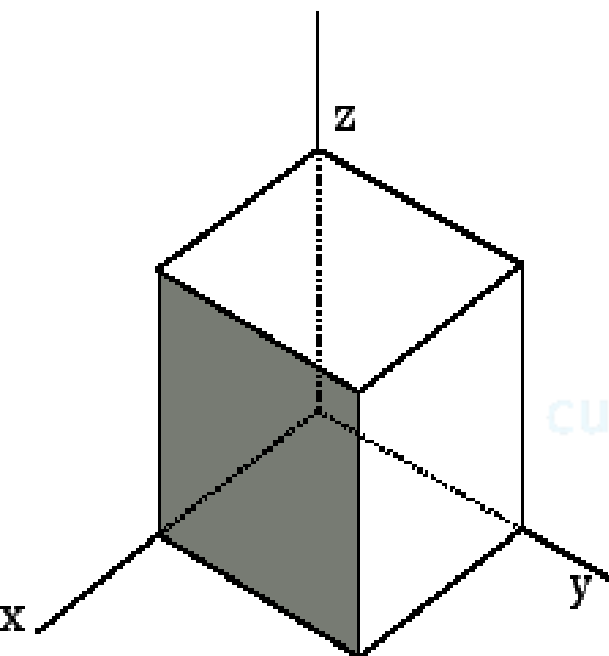
- *Chỉ số Miller* của mặt phẳng tinh thể được kí hiệu là h, k, l tỷ lệ nghịch với những đoạn thẳng, kể từ gốc tọa độ đến giao điểm mặt phẳng đó với các trục tọa độ tương ứng
- Kí hiệu mặt tinh thể tương ứng là (hkl)
- Các mặt phẳng tinh thể song song và có tính chất giống nhau tạo thành *hệ mặt* cũng được kí hiệu là (hkl) và là chỉ số của mặt nằm gần gốc tọa độ nhất



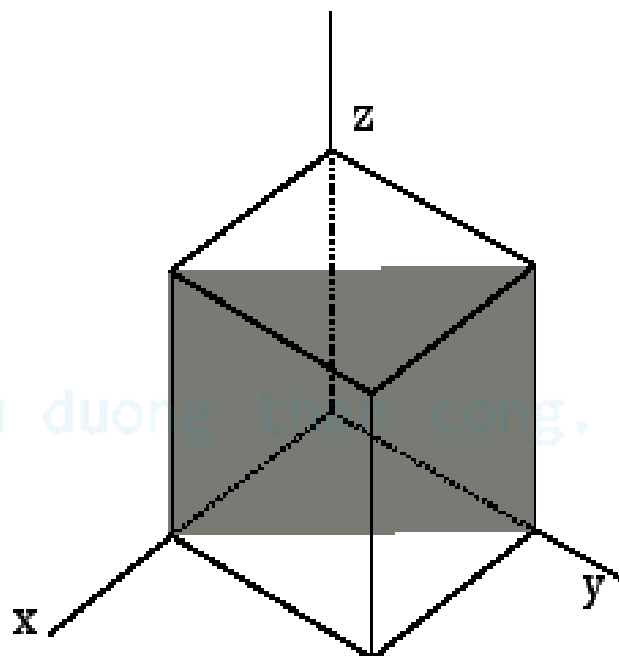
cuu duong than cong. com

	a	b	c
intercept length	1	1	1
reciprocal	$\frac{1}{1}$	$\frac{1}{1}$	$\frac{1}{1}$
cleared fraction	1	1	1
Miller indice	(111)		

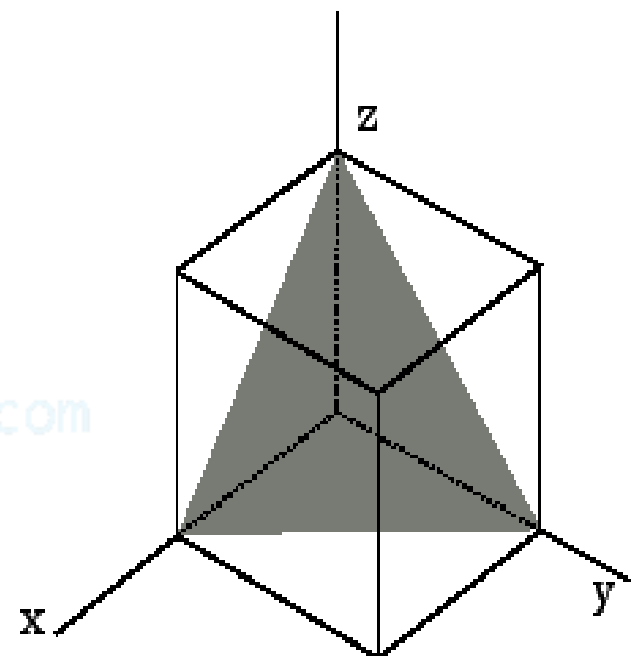




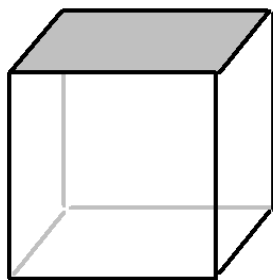
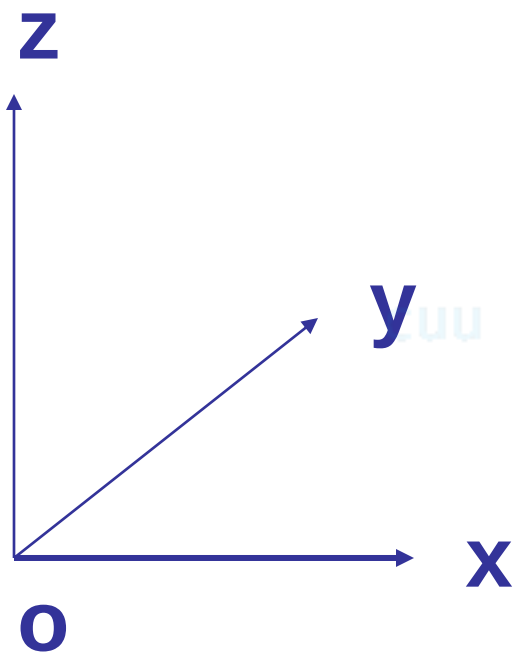
(100)



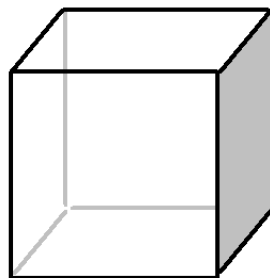
(110)



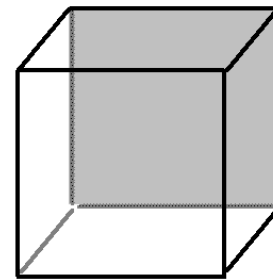
(111)



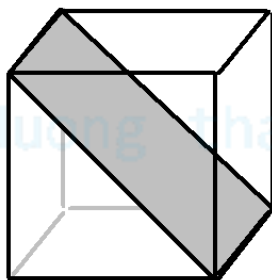
(001)



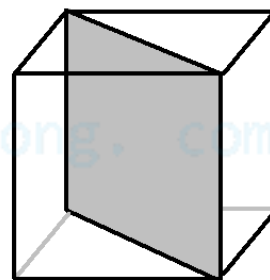
(100)



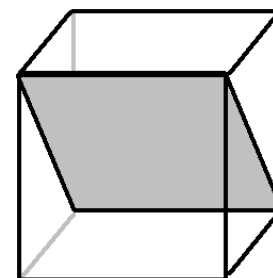
(010)



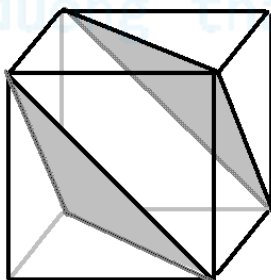
(101)



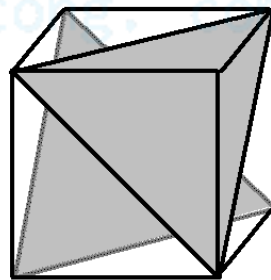
(110)



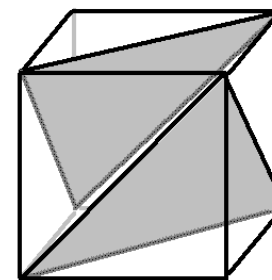
(011)



(111)



(1 $\bar{1}$ 1)



($\bar{1}$ 11)

7 HỆ TINH THỂ

Dựa vào mối quan hệ giữa a, b, c , các góc α, β, γ ta có 7 hệ tinh thể như sau:

- Hệ 3 nghiêng

Triclinic

$$a \neq b \neq c$$

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

- Hệ một nghiêng - monoclinic

Monoclinic

$$a \neq b \neq c$$

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

- Hệ trực thoi - orthorhombic

Orthorhombic

$$a \neq b \neq c$$

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

- Hệ ba phương - rhombohedral

(Rhombohedral) ($a = b = c; \alpha = \beta = \gamma$)

- Hệ bốn phương – tetragonal

Tetragonal

$$a = b \neq c$$

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

- Hệ sáu phương – hexagonal

Hexagonal

$$a = b \neq c$$

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

- Hệ lập phương – cubic

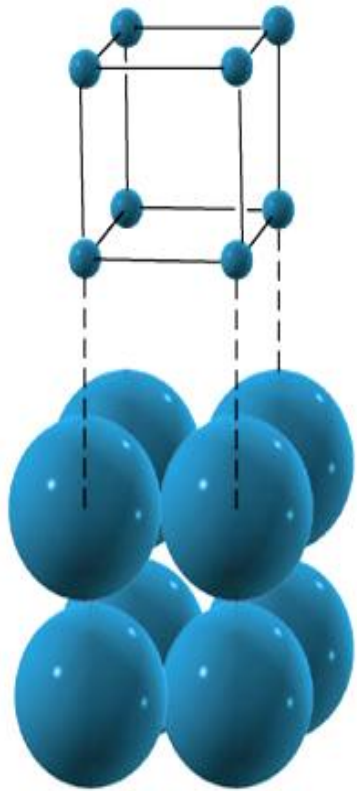
Cubic

$$a = b = c$$

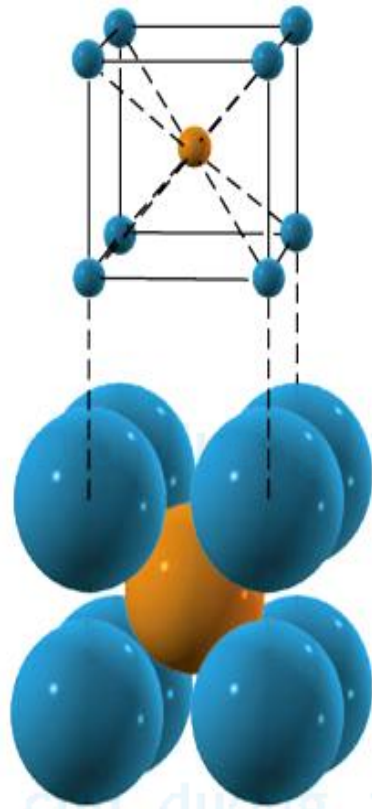
$$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$

14 KIỂU MẠNG BRAVAIS

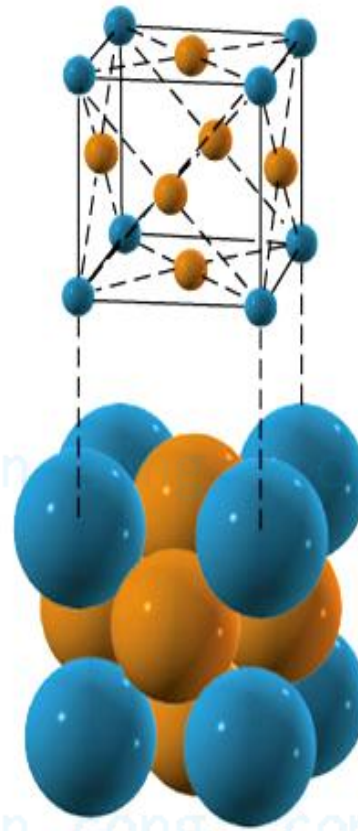
- Các đơn vị cấu trúc (nguyên tử, phân tử, ion...) còn có thể chiếm các vị trí ngoài nút mạng tinh thể sao cho không làm thay đổi tính đối xứng của tinh thể tạo thành 14 kiểu mạng thuộc 7 hệ tinh thể gọi là 14 kiểu mạng Bravais
- Các vị trí có thể chiếm mà không làm thay đổi tính đối xứng là: tâm mặt (face center), tâm đáy (base-center, side-center), tâm khối (body-center)
- Tất cả các mạng tinh thể của vật liệu tinh thể được tổ hợp, lồng ghép từ 14 kiểu mạng này



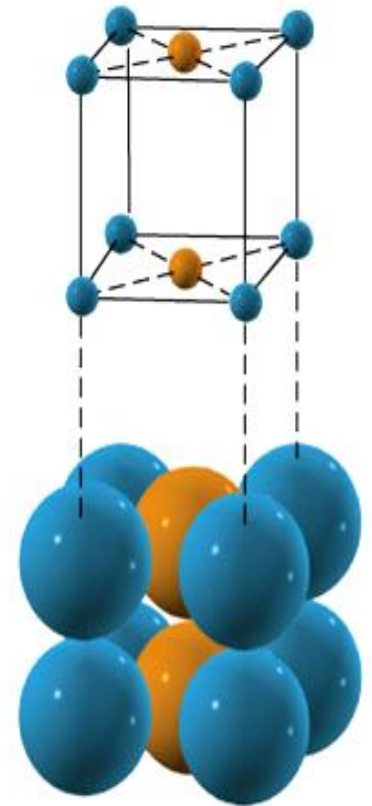
Primitive



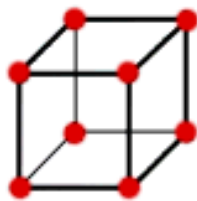
Body-centered



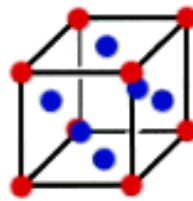
Face-centered



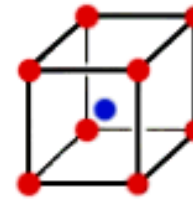
Side-centered



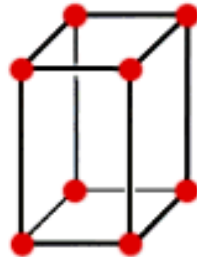
**Simple
cubic**



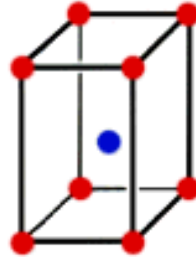
**Face-centered
cubic**



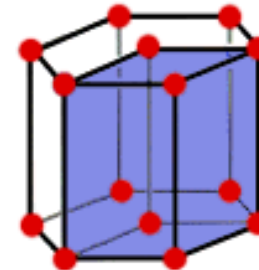
**Body-centered
cubic**



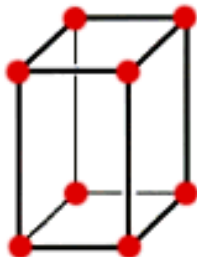
**Simple
tetragonal**



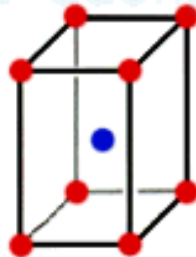
**Body-centered
tetragonal**



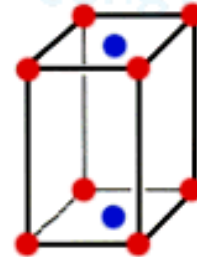
Hexagonal



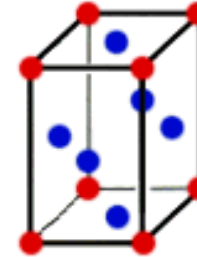
**Simple
orthorhombic**



**Body-centered
orthorhombic**



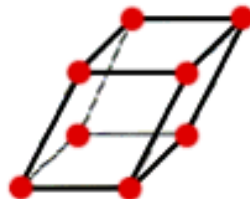
**Base-centered
orthorhombic**



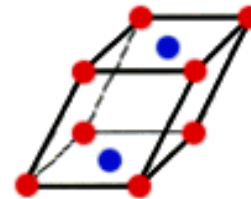
**Face-centered
orthorhombic**



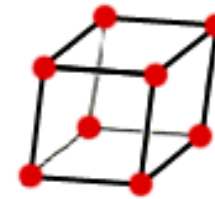
Rhombohedral



**Simple
Monoclinic**



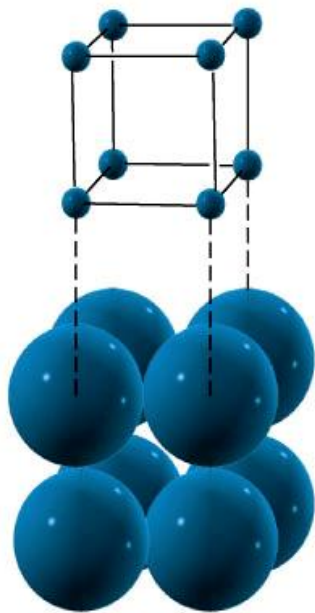
**Base-centered
monoclinic**



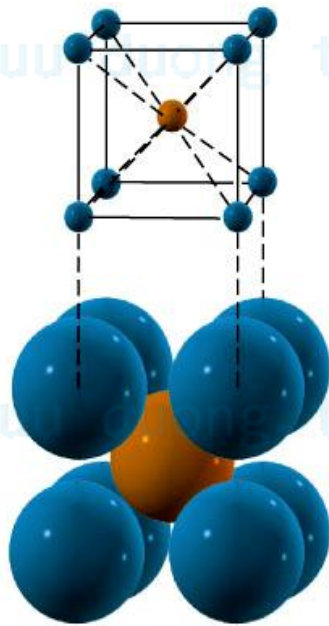
Triclinic

CƠ SỞ Ô MẠNG - BASIS

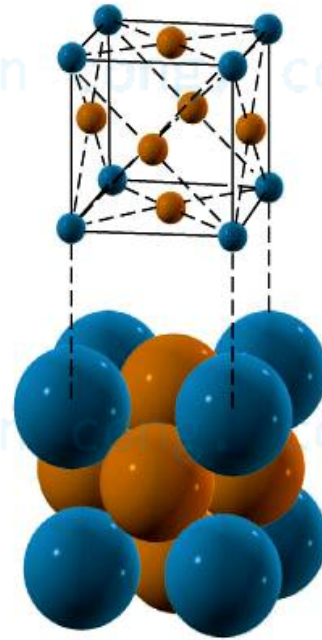
- Cơ sở ô mạng là tập hợp tất cả các nút không giống nhau về mặt tịnh tiến
- Thường gặp 4 dạng ô mạng sau đây:



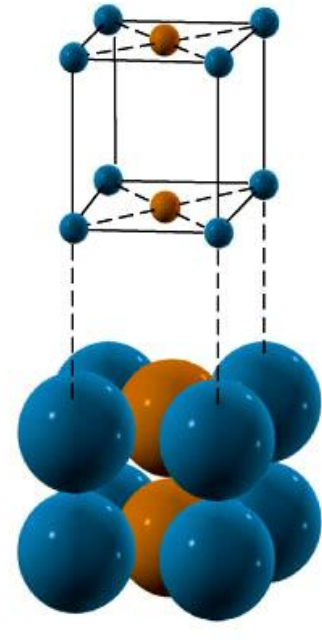
Primitive



Body-centered



Face-centered

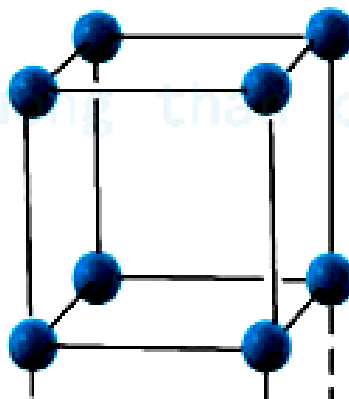


Side-centered

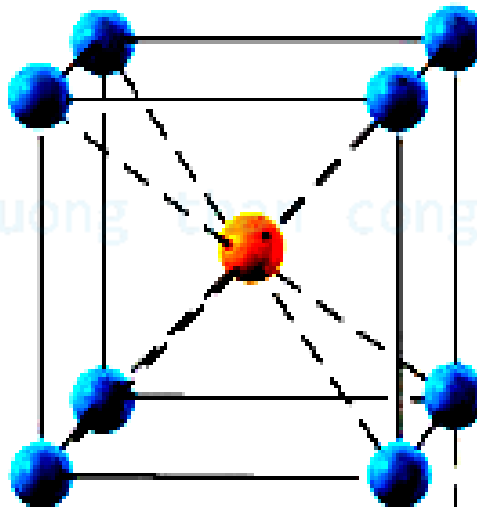
- Đối với *dạng ô đơn giản* tất cả các đơn vị cấu trúc (nguyên tử, phân tử, ion...) đều đặt tại vị trí nút mạng, chúng đều giống nhau về mặt tịnh tiến vì đều được suy ra từ vec tơ tịnh tiến R

Cơ sở ô mạng là $[[000]]$

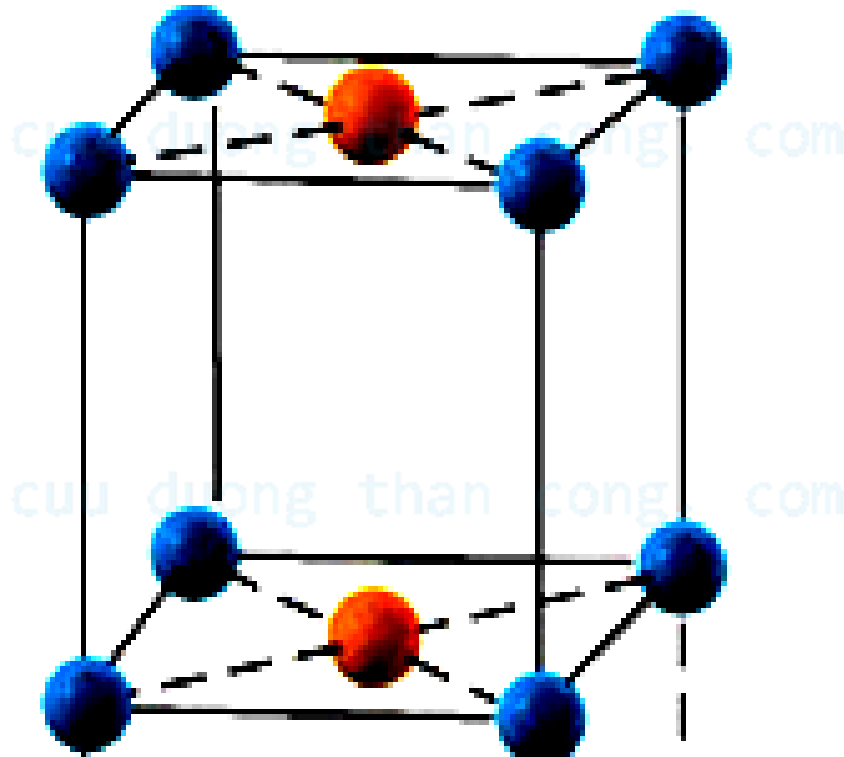
Từ nút này bằng vec tơ tịnh tiến R suy ra toàn bộ các nút còn lại của mạng tinh thể



- Đối với *dạng ô tâm khối* cơ sở ô mạng sẽ gồm có 2 nút $[[000]]$ và $[[\frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2}]]$ do các đơn vị cấu trúc nằm ở tâm của ô mạng không thể được suy ra từ vec tơ R mà phải bằng một phép tịnh tiến khác qua vec tơ R' có độ lớn bằng nửa đường chéo không gian của ô cơ sở

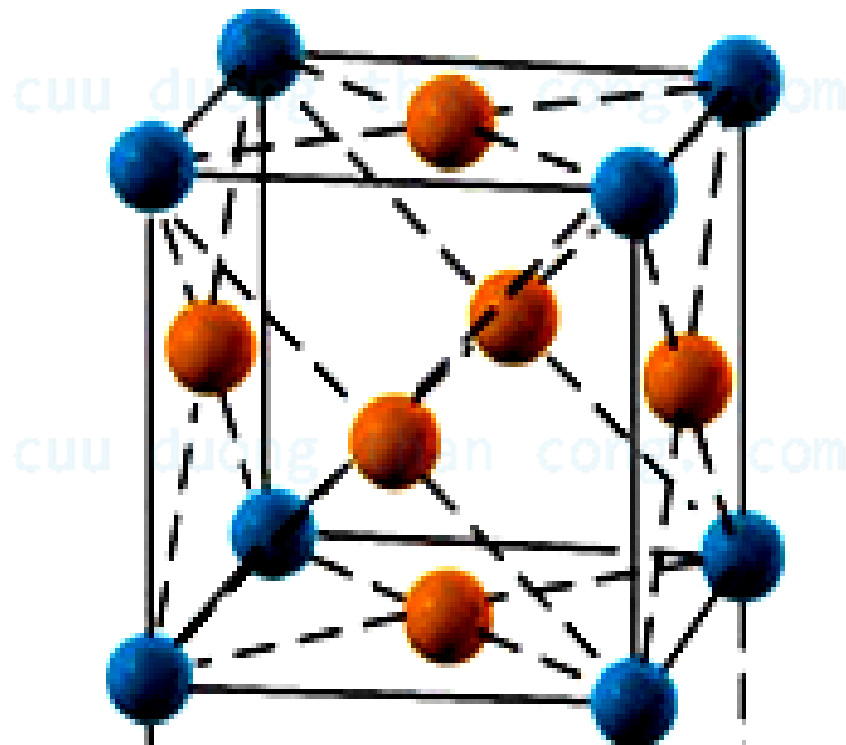


- Đối với *dạng ô tâm đáy* cơ sở ô mạng sẽ gồm 2 nút: $[[000]]$ và $[[\frac{1}{2} \frac{1}{2} 0]]$ cũng được lý luận tương tự như trên, độ lớn của vec tơ R' bằng nửa đường chéo mặt bị chiếm



- Cũng lý luận tương tự đối với *dạng ô tâm mặt* cơ sở ô mạng gồm 4 nút:

$$[[000]], \left[\left[\frac{1}{2} \frac{1}{2} 0 \right] \right], \left[\left[\frac{1}{2} 0 \frac{1}{2} \right] \right], \left[\left[0 \frac{1}{2} \frac{1}{2} \right] \right]$$

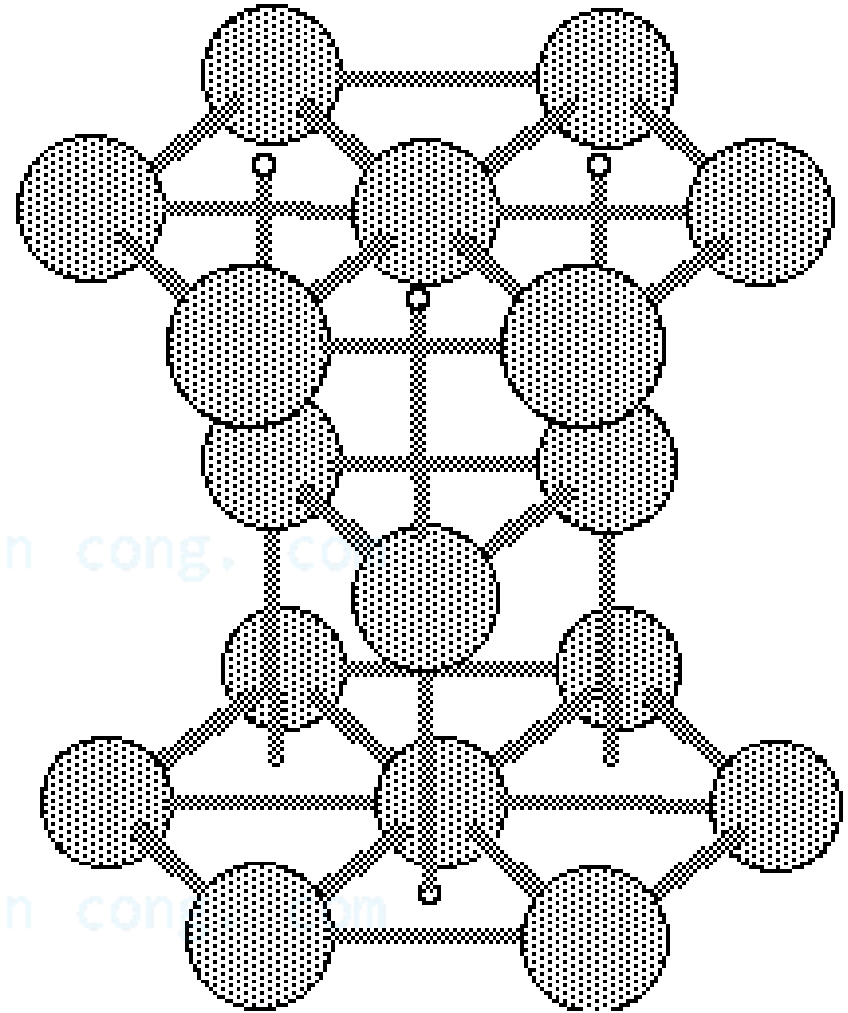


PHƯƠNG PHÁP XÁC ĐỊNH CƠ SỞ Ô MẠNG

- Trên thực tế ô mạng của chất tinh thể có cấu tạo rất phức tạp nhưng đều tuân theo một quy luật chung đó là sự lồng ghép của 4 dạng ô mạng trên (đơn giản, tâm khối, tâm đáy, tâm mặt), hay tổng quát hơn đó là sự lồng ghép của các ô mạng Bravais vào nhau

- Đối với ô mạng được tạo nên bởi một loại cấu trúc, việc xác định số nút cơ sở được suy ra từ tổng số các ô mạng lồng ghép vào nhau.

VD1: cơ sở ô mạng của sáu phương xếp chặt gồm 2 nút do sự lồng ghép của 2 ô 6 phương đơn giản vào nhau (mỗi ô đơn giản là một nút)

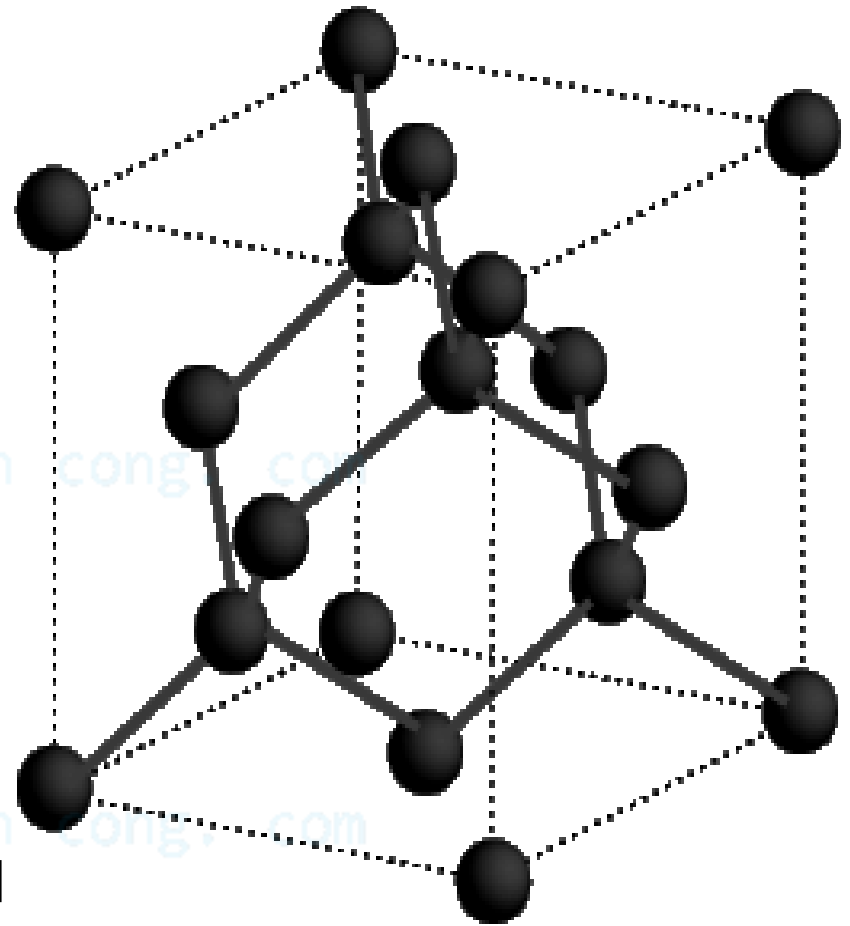


$$[[000]], \left[\left[\frac{2}{3} \frac{1}{3} \frac{1}{2} \right] \right]$$

VD2: cơ sở ô mạng của kim cương gồm 8 nút do sự lồng ghép của 2 ô lập phương tâm diện vào nhau (một ô tâm diện là 4 nút)

$$[[000]], \left[\left[\frac{1}{2} \frac{1}{2} 0 \right] \right], \left[\left[\frac{1}{2} 0 \frac{1}{2} \right] \right], \left[\left[0 \frac{1}{2} \frac{1}{2} \right] \right]$$

$$\left[\left[\frac{1}{4} \frac{1}{4} \frac{1}{4} \right] \right], \left[\left[\frac{1}{4} \frac{3}{4} \frac{3}{4} \right] \right], \left[\left[\frac{3}{4} \frac{3}{4} \frac{1}{4} \right] \right], \left[\left[\frac{3}{4} \frac{1}{4} \frac{3}{4} \right] \right]$$

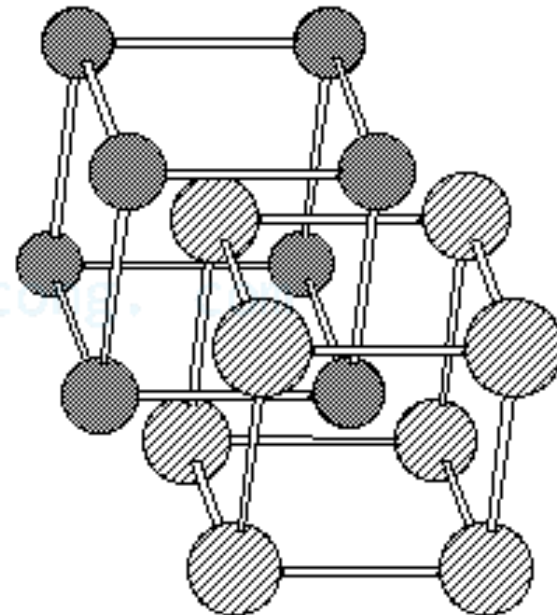
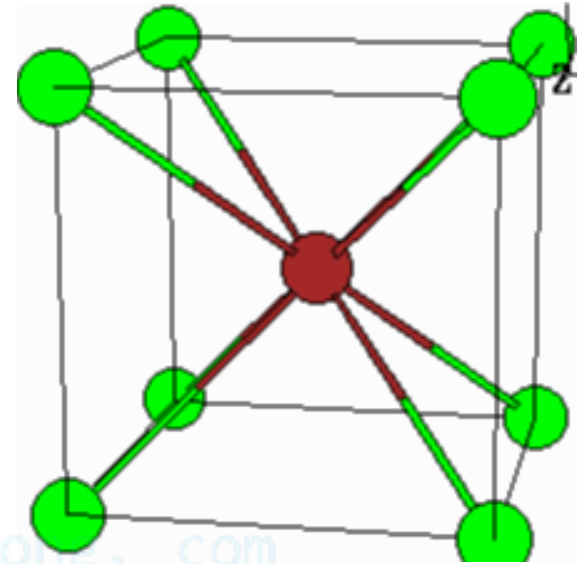


- Ô mạng được tạo nên bởi nhiều loại đơn vị cấu trúc khác nhau theo công thức hóa học $A_xB_yC_z...$ chính là sự lồng ghép các mạng của A, B, C... vào nhau. Cơ sở ô mạng được xem xét tùy theo các dạng ô mạng được tạo nên bởi A, B, C... riêng biệt...và được ghi tách riêng ra đối với từng loại đơn vị cấu trúc khác nhau

- VD1: cơ sở ô mạng của CsCl gồm 2 nút:
Cl: $[[000]]$

$$\text{Cs: } \left[\left[\frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2} \right] \right]$$

do có sự lồng ghép của hai ô lập phương đơn giản của Cl và Cs vào nhau (mỗi ô đơn giản 1 nút)

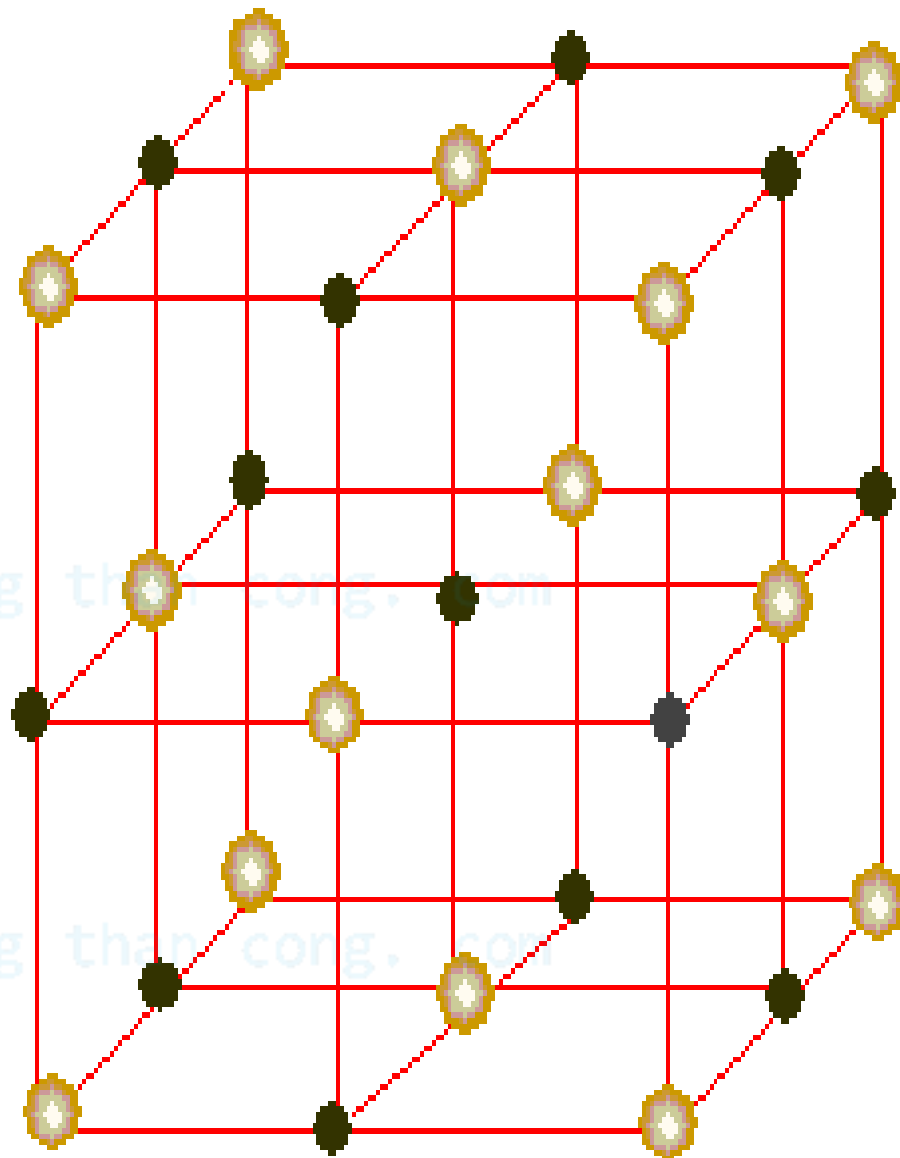


- VD2: cơ sở ô mạng của NaCl gồm có 8 nút do sự lồng ghép của 2 ô lập phương tâm diện vào nhau (mỗi ô tâm diện 4 nút) một ô của Cl và một ô của Na. Cơ sở ô mạng như sau:

$$Cl : \left[\begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \right], \left[\begin{bmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0 \end{bmatrix} \right], \left[\begin{bmatrix} \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} \end{bmatrix} \right], \left[\begin{bmatrix} 0 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{bmatrix} \right]$$

$$Na : \left[\begin{bmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{bmatrix} \right], \left[\begin{bmatrix} 1 & 1 & \frac{1}{2} \end{bmatrix} \right], \left[\begin{bmatrix} 1 & \frac{1}{2} & 1 \end{bmatrix} \right], \left[\begin{bmatrix} \frac{1}{2} & 1 & 1 \end{bmatrix} \right]$$

- Na^+ (Sodium ion)
- Cl^- (Chloride ion)

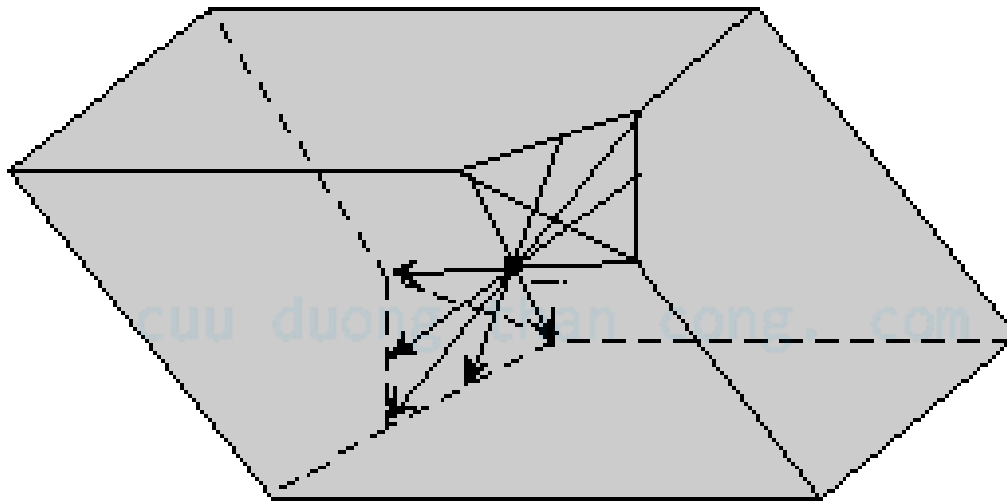


TÍNH ĐỐI XỨNG CỦA TINH THỂ

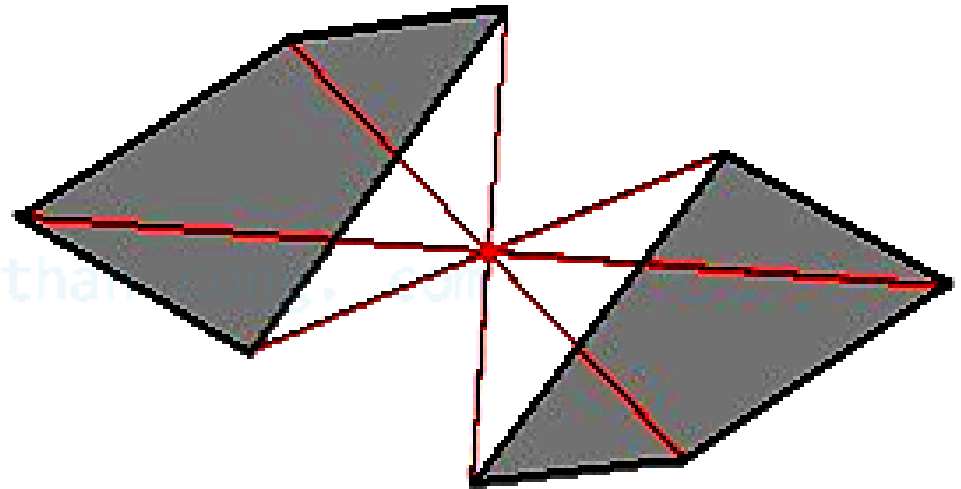
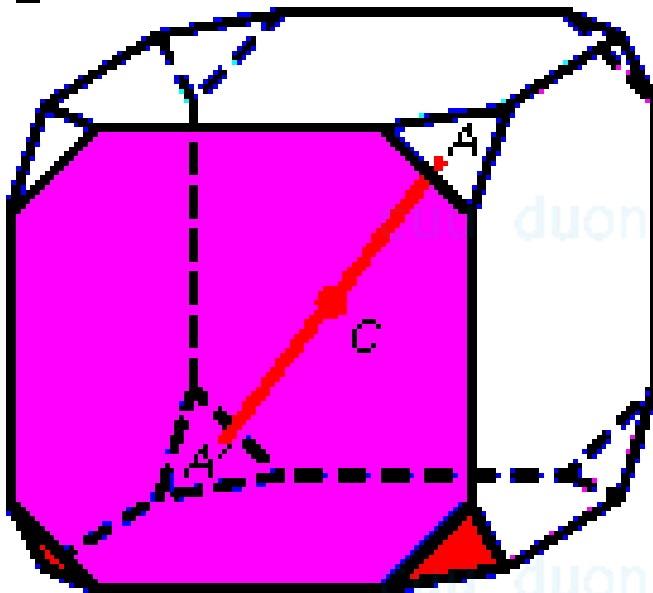
- Ngoài các vectơ cơ sở a, b, c và góc giữa chúng α, β, γ tinh thể còn được đặc trưng bởi tính đối xứng của chúng
- Tính đối xứng của tinh thể được thể hiện qua các yếu tố đối xứng như: tâm đối xứng C , mặt đối xứng P (hoặc m), trục đối xứng L_n (hoặc n)

TÂM ĐỐI XỨNG C

- Còn được gọi là tâm nghịch đảo là một điểm nằm bên trong hình có đặc tính: một đường thẳng bất kỳ qua nó bao giờ cũng cắt hình ở hai điểm cách đều hai bên nó



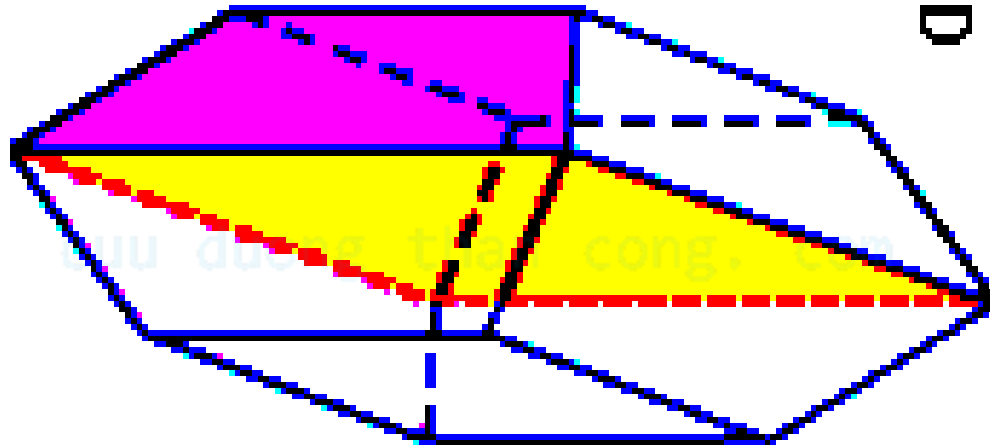
C

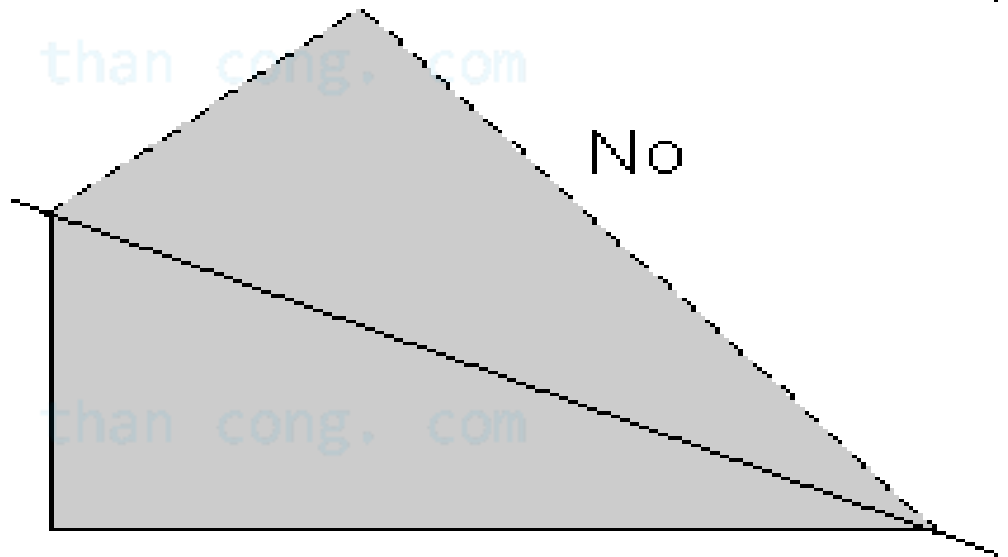
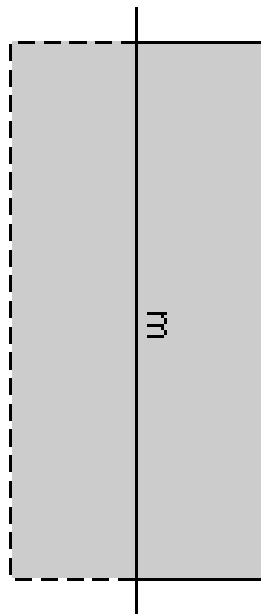
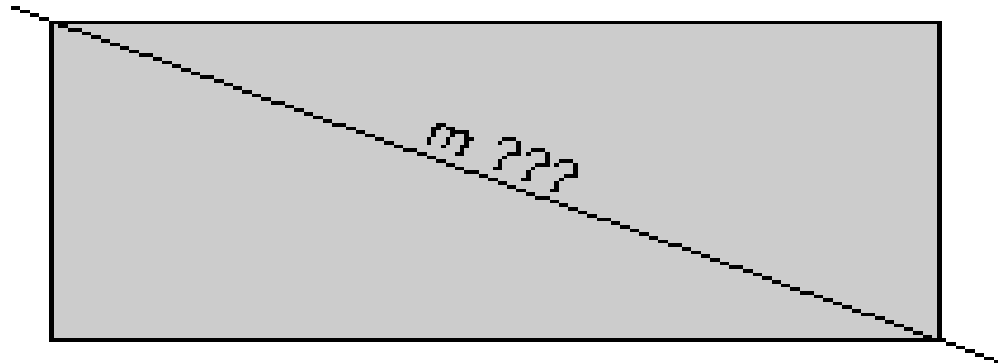
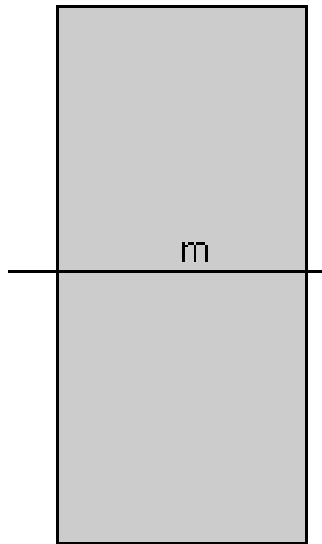
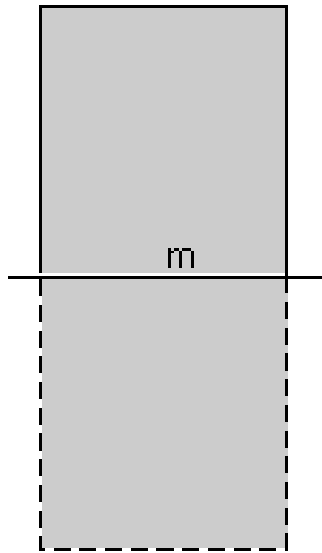


center of symmetry

MẶT ĐỐI XỨNG

- Được ký hiệu là P hoặc m là mặt phẳng chia tinh thể làm hai phần bằng nhau và đối xứng gương với nhau qua mặt đối xứng đó





TRỤC ĐỐI XỨNG

- Được ký hiệu là L_n (hoặc n) là một trục mà khi tinh thể xoay quanh nó một góc

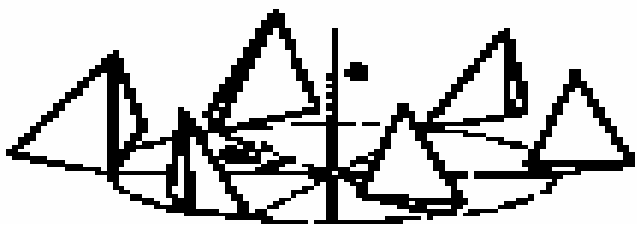
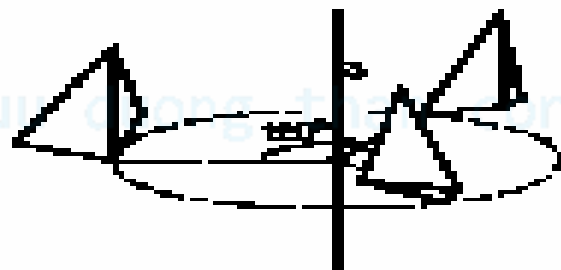
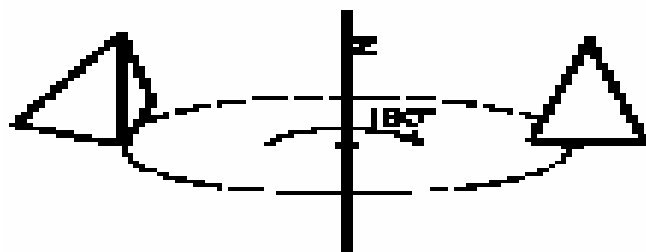
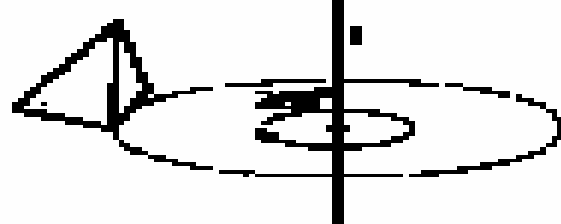
$$\alpha = \frac{360}{n}$$

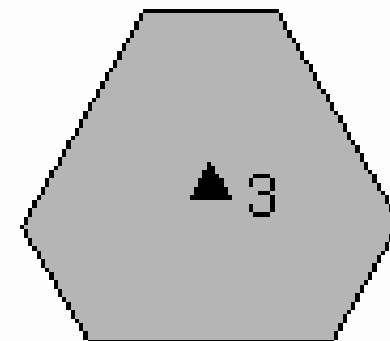
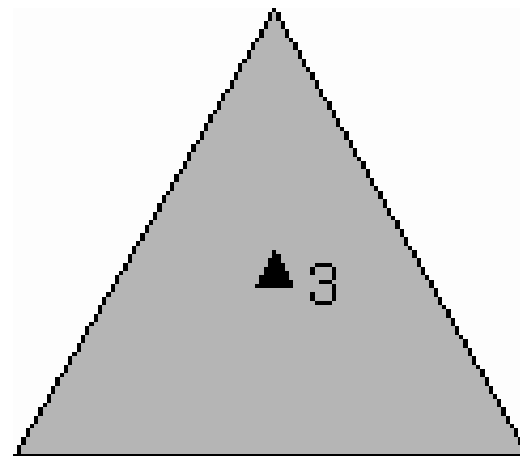
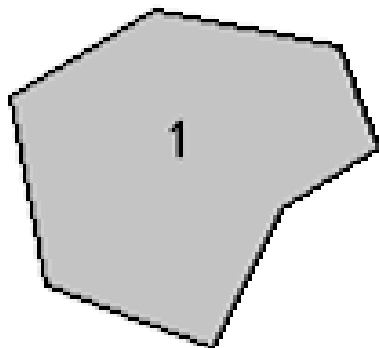
tinh thể lại trùng với chính nó

n được gọi là bậc của trục

n chỉ có thể có các giá trị: 1, 2, 3, 4, 6 tương ứng với góc quay $\alpha = 360^\circ, 180^\circ, 120^\circ, 90^\circ, 60^\circ$

Như vậy chỉ tồn tại các trục đối xứng L_1, L_2, L_3, L_4, L_6

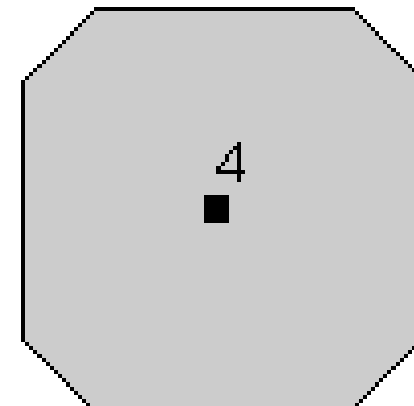
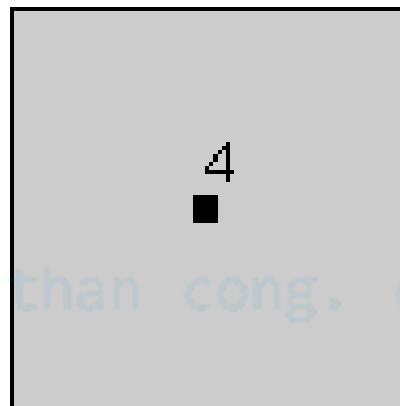


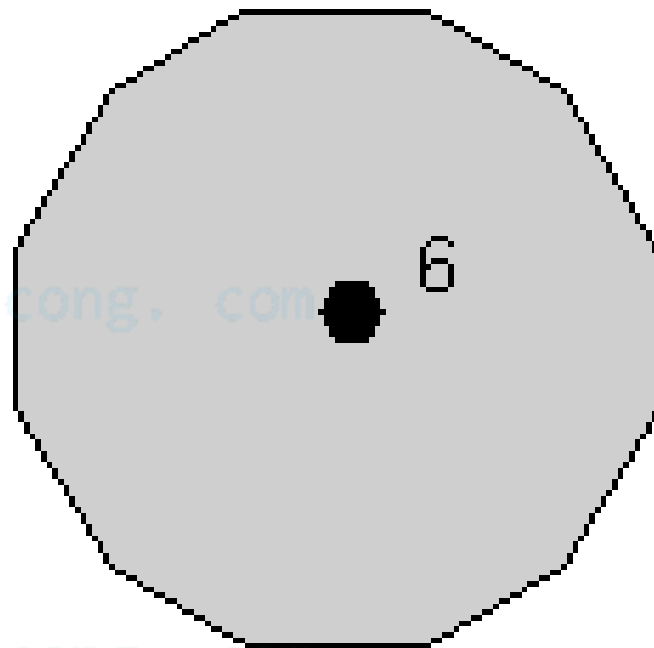
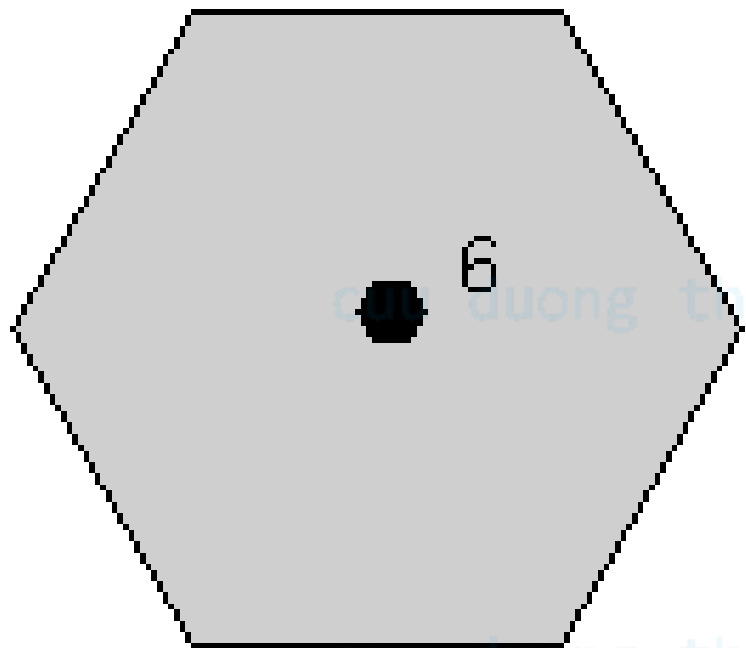


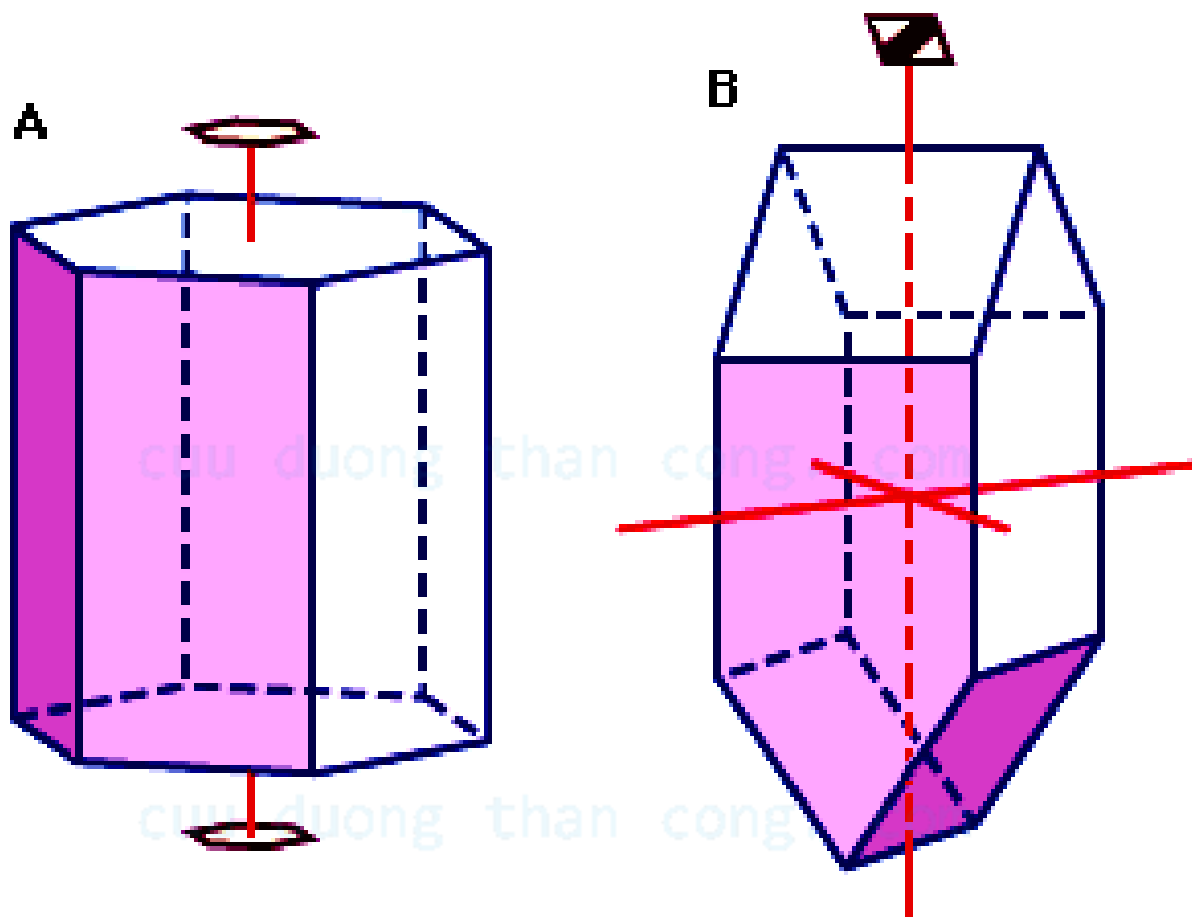
cuu duong than cong. com

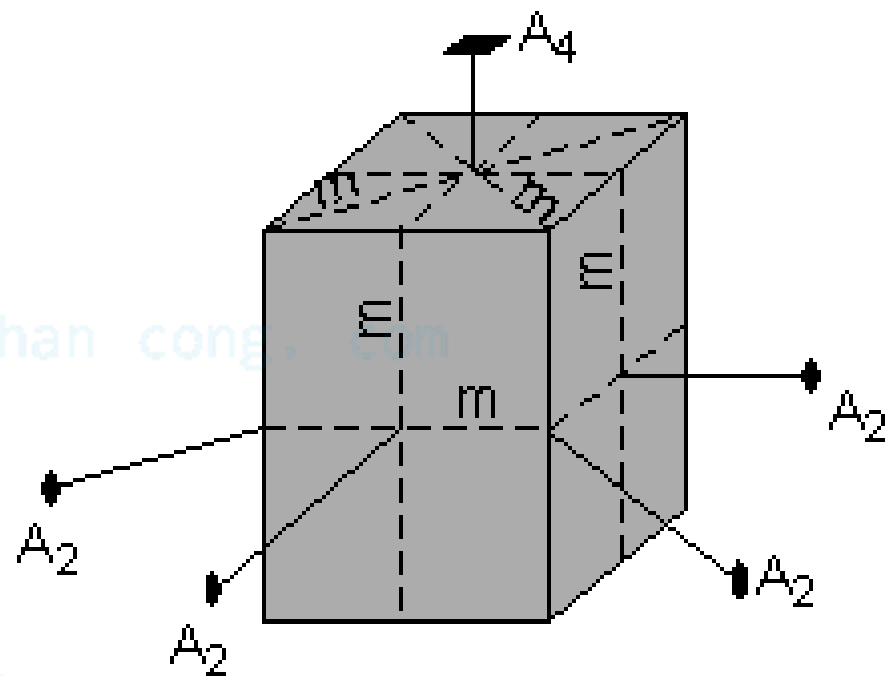
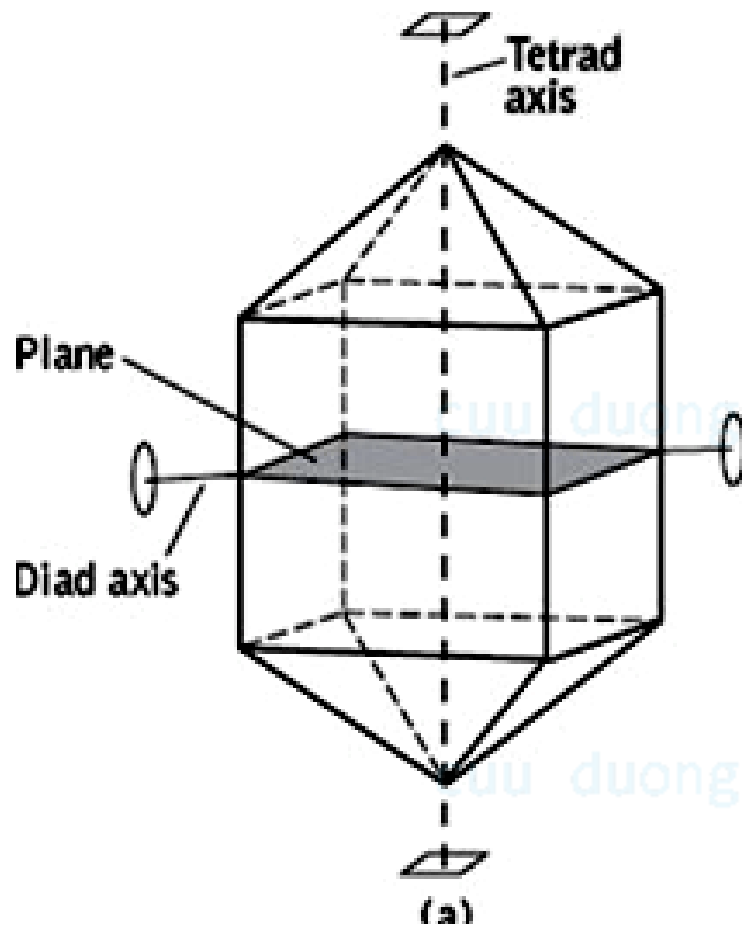


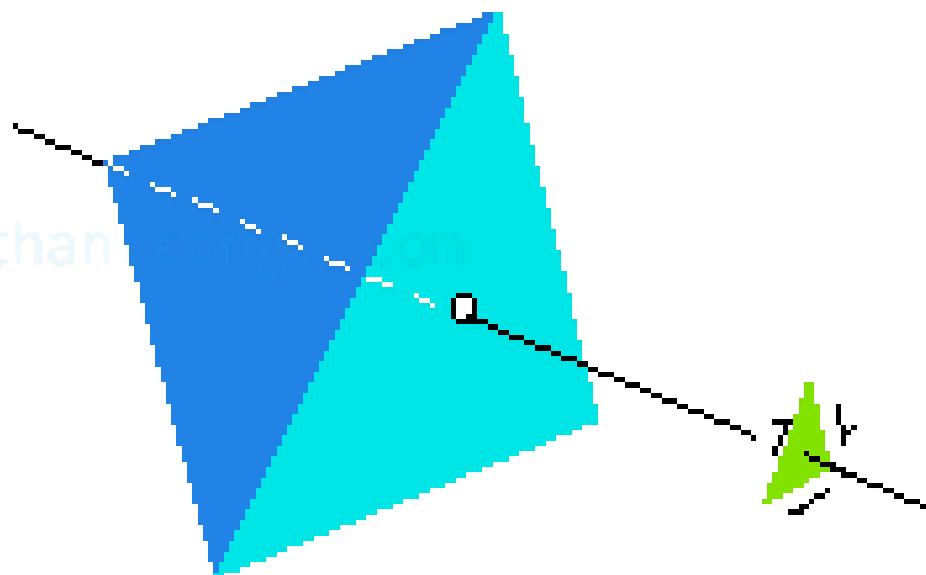
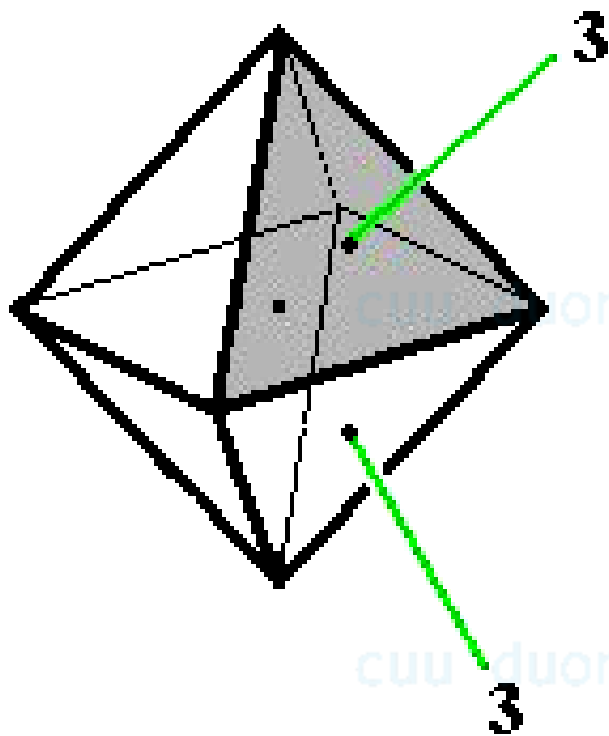
cuu duong than cong. com











Hãy tự xác định tính đối xứng
của các kiểu mạng Bravais?

cuu duong than cong, com