

www.mientayvn.com

Dịch tiếng anh chuyên ngành khoa học tự nhiên và kĩ thuật.

Dịch các bài giảng trong chương trình học liệu mở của học viện MIT, Yale.

Tìm và dịch tài liệu phục vụ cho sinh viên làm seminar, luận văn.

Tại sao mọi thứ đều miễn phí và chuyên nghiệp ???

Trao i tr c tuy n t i:

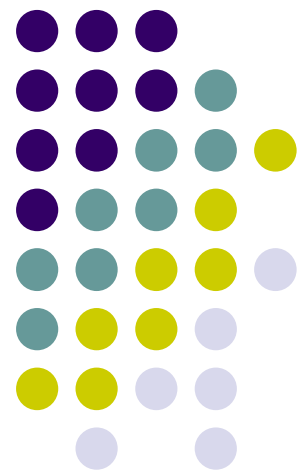
http://www.mientayvn.com/chat_box_li.html

CÔNG NGHỆ và KHOA HỌC VẬT LI CÔNG NGHỆ

Nguyễn Minh Tuấn

Chương III

Cấu trúc các Cấu trúc tinh thể

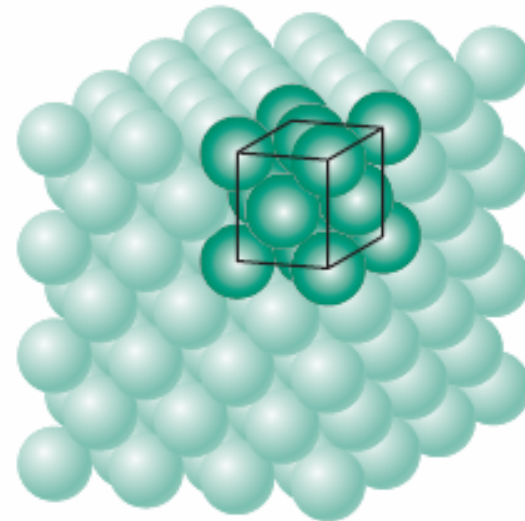
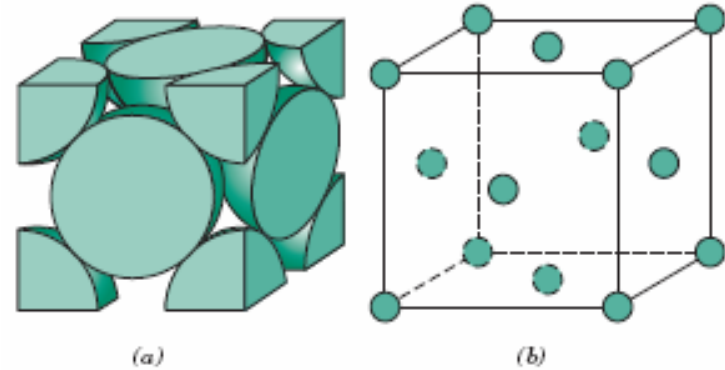


T ỉ sao l ị ph ị nghiên c ứ u

C ứ trúc tinh th ể



- Các v ậ t li ệ u c ứ c p ố t ỉ là đ ể ng ch ế tr ậ n
- T ỉnh ch ế t các v ậ t li ệ u liên quan tr ố c t ỉ p ố n c ứ trúc tinh th ể c ả chúng – Là tinh th ể ho ặ c là không tinh th ể
- Các tinh th ể n ế ch ế t (c ả m ộ t nguyên t ố thành p ố n) và các tinh th ể h ộ p ch ế t (g ộ m nhi ề u nguyên t ố thành p ố n)
- C ứ trúc và k ếch th ể c ả các tinh th ể , các biên h ế t

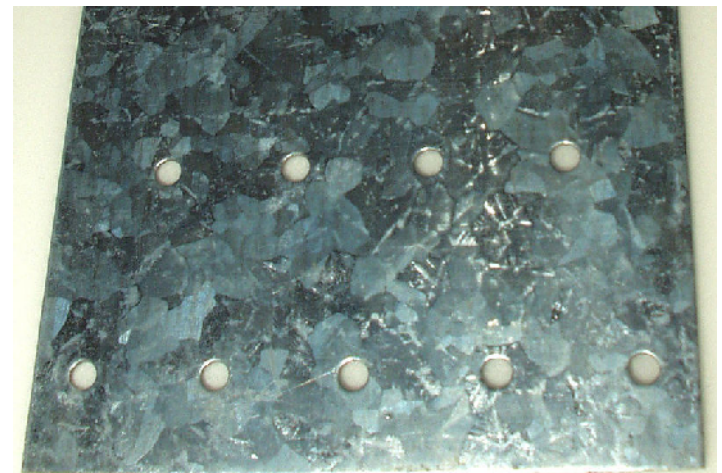
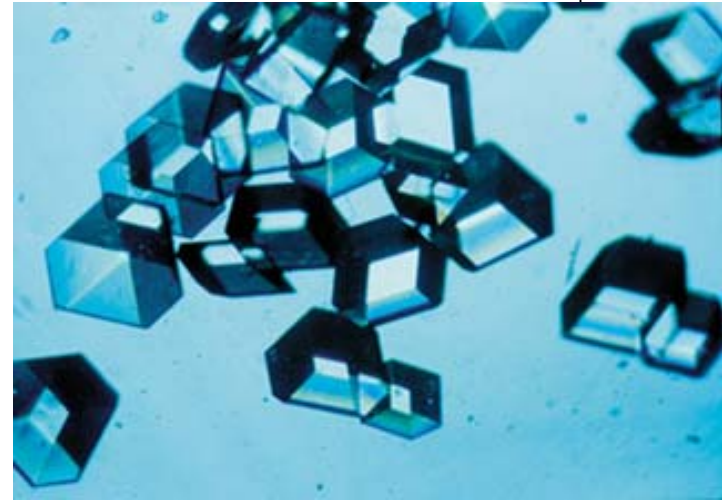


T i sao l i ph i nghiên c u

C u trúc tinh th



- Ch t r n: n tinh th , a tinh th , vô nh hình, gi tinh th
- các ch t n tinh th , các hi u ng c a s s p x p các nguyên t trong tinh th th ng d dàng quan sát m t cách v mô, do hình d ng t nhiên c a tinh th th ng ph n ánh c u trúc s p x p nguyên t
- Các sai h ng tinh th nh h ng r t rõ r t lên các tính ch t v t lý và hóa h c c a v t li u. Các ki n th c v c u trúc tinh th là r t quan tr ng hi u rõ v các sai h ng trong tinh th

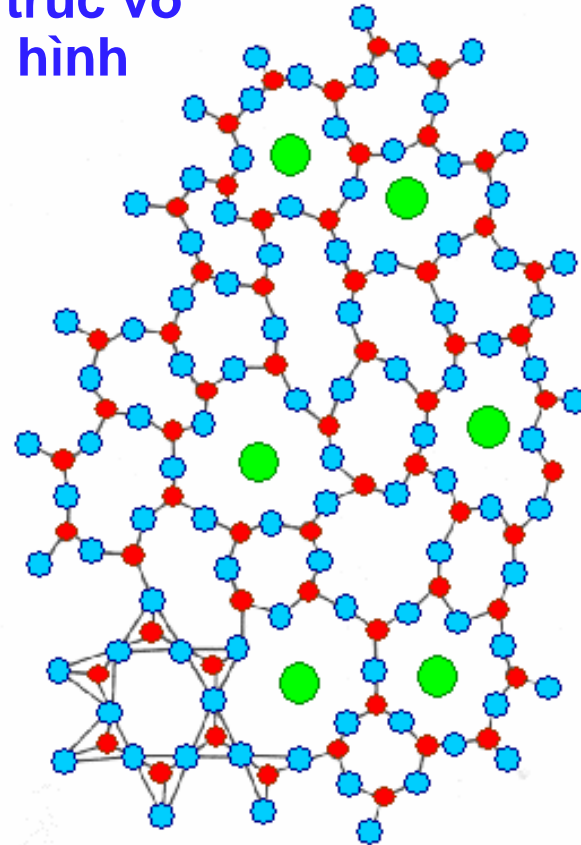
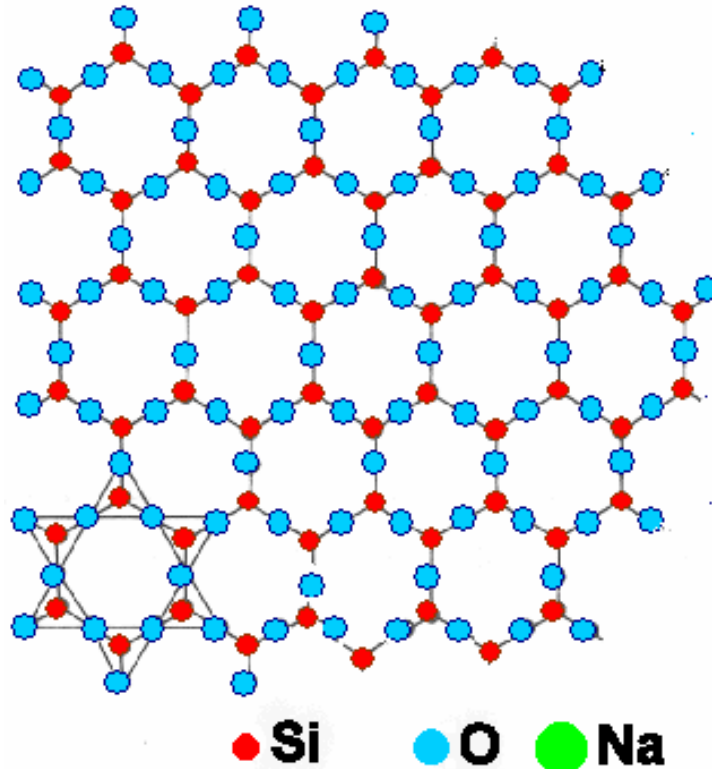


Ti sao li ph i nghiên c u

C u trúc tinh th



- C u trúc n
- C u trúc vô nh hình



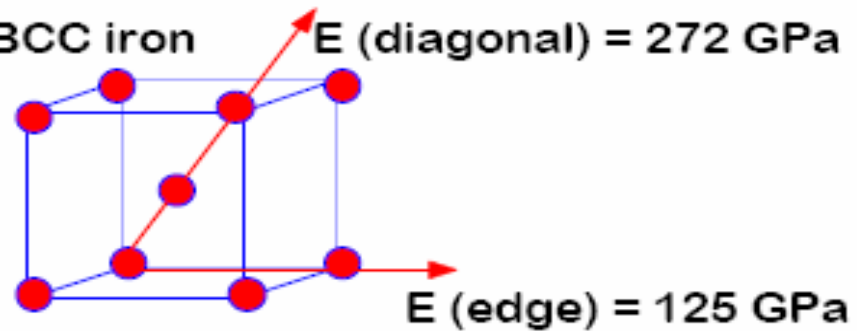
Tài liệu nghiên cứu Cấu trúc tinh thể



- Single crystals

Properties vary with direction \Rightarrow “Anisotropic” material

Example of anisotropy: BCC iron E (diagonal) = 272 GPa



- Polycrystals

Properties may/may not vary with direction

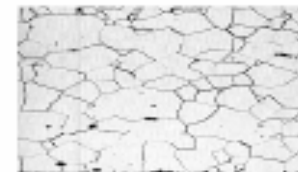
Example: Common steel is polycrystalline.

If grains are random

\Rightarrow isotropic ($E \sim 210$ GPa)

If grains are “textured”

\Rightarrow anisotropic.



random grain orientation

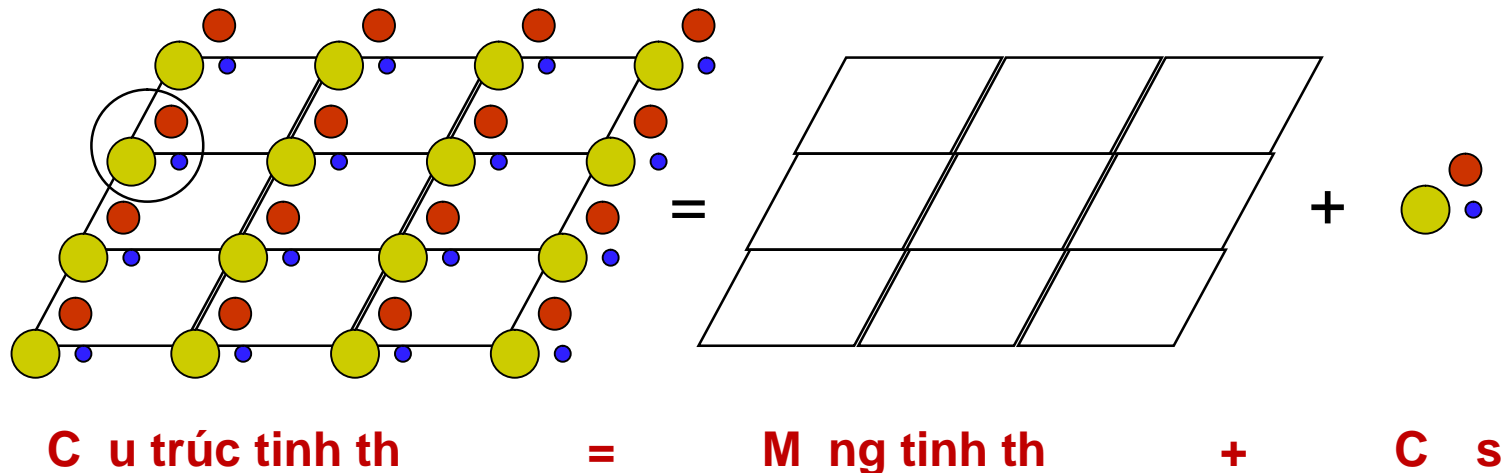


“textured” (from rolling)



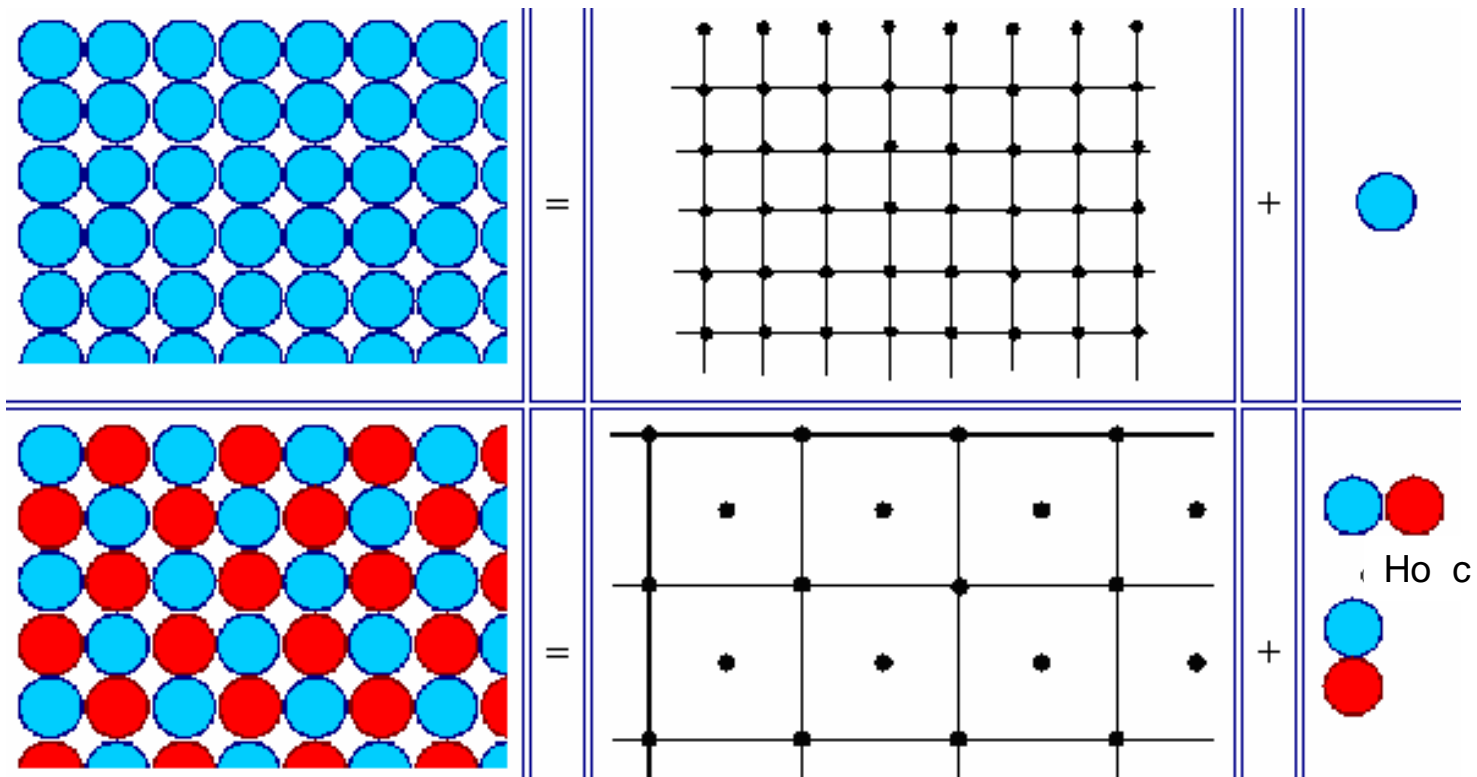
Cấu trúc Tinh thể *thi*

- Tinh thể là sắp xếp tuần hoàn trong không gian của các nguyên tử hoặc phân tử, các nhóm nguyên tử hoặc phân tử
- Sắp xếp tuần hoàn lặp lại theo cả 3 chiều không gian
- Trong kỹ thuật, có thể tạo ra tinh thể, trong đó tất cả các nguyên tử trong chất rắn đều trong cùng một cấu trúc





Cấu trúc Tinh thể



C u trúc tinh thể

=

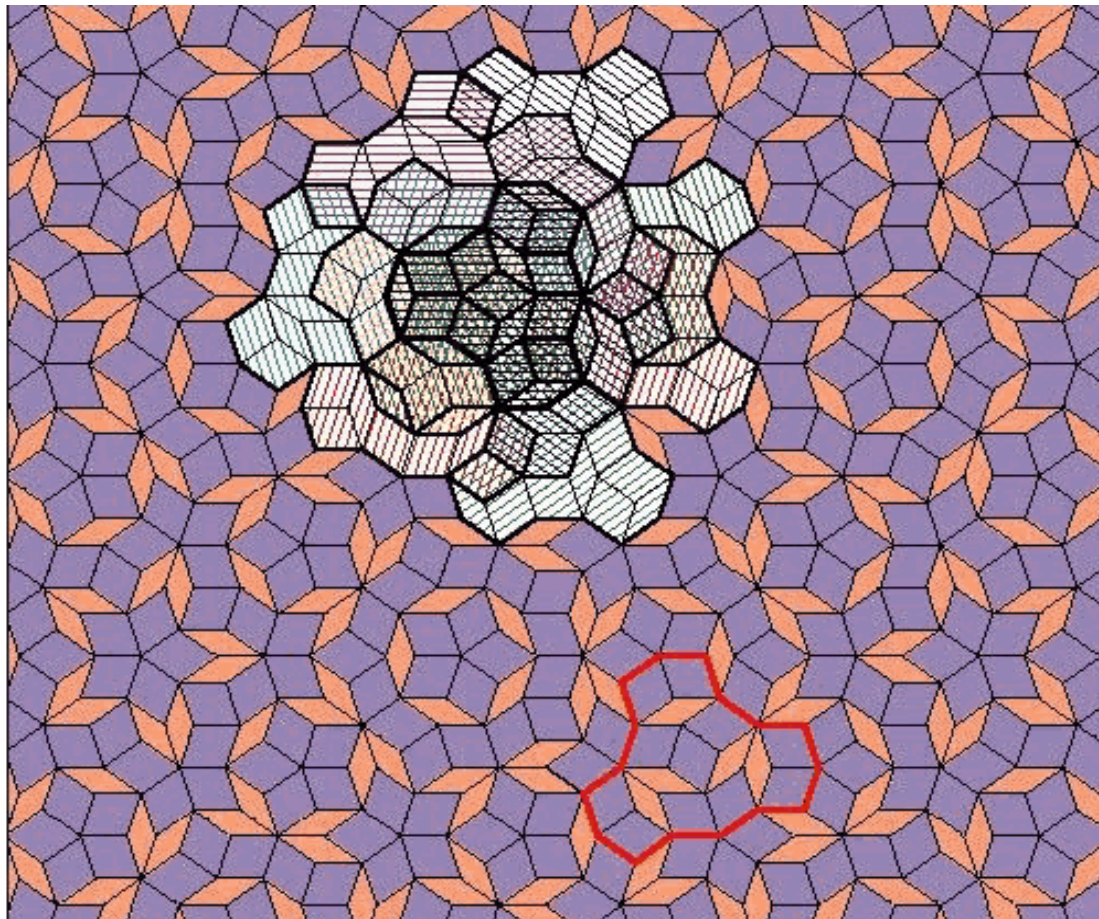
Mạng tinh thể

+

C s



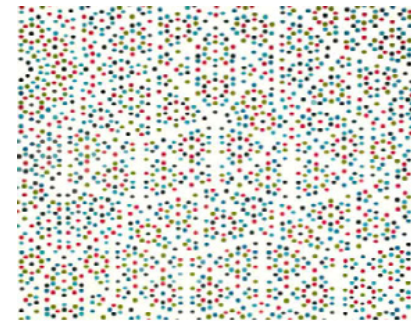
Giới thiệu - Quasicrystals





Gi Tinh th - Quasicrystals

- Gi tinh th là m t d ng t n t i khác bi t c a ch tr n trong ó các nguyên t s p x p d ng nh là u n nh ng không có s l p l i
- c c p t i và nghiên c u l n u tiên b i Dan Shechtman n m 1982
- H u h t các gi tinh th thu c cho th y u là h p kim c a Nhôm (Al-Ni-Co, Al-Pd-Mn, Al-Cu-Fe), m t s các h p kim khác g m có (Ti-Zr-Ni, Zn-Mg-Ho)
- T Gi tinh th c dùng ch các m u có tr t t xa nh ng không tu n hoàn
- Các v t li u có c u trúc tu n hoàn ã c nghiên c u nhi u. Còn ít quan tâm t i các v t li u gi tu n hoàn (quasiperiodic) ho c b t tu n hoàn (aperiodic)

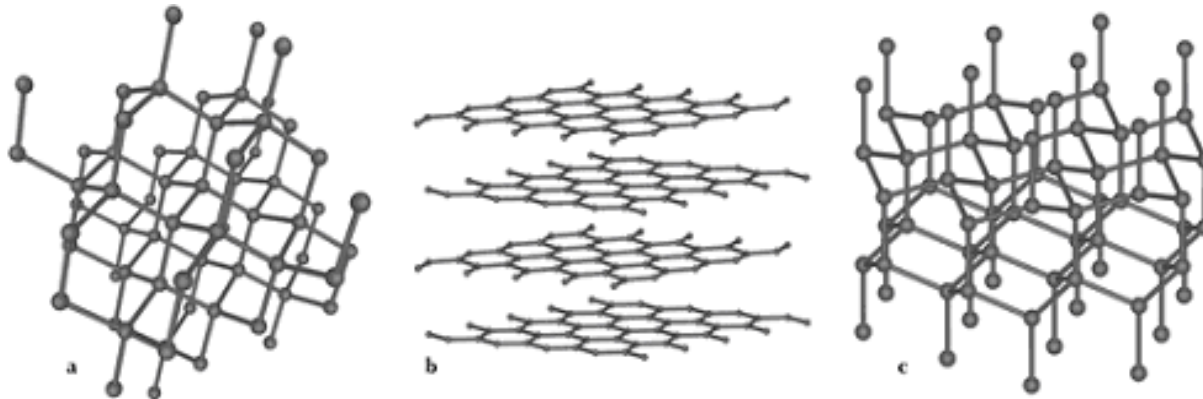


"Triacorn Shadowing" by Clark Richert



a hình và thù hình

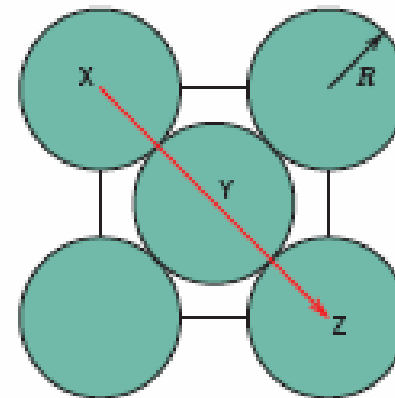
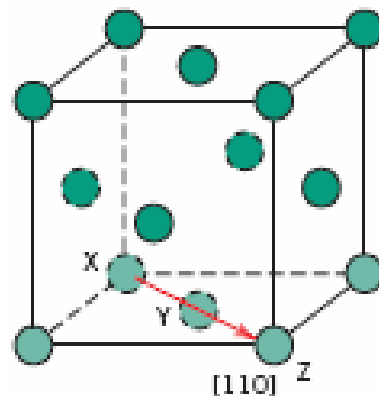
- Một số vật liệu có thể tồn tại nhiều hơn một loại cấu trúc tinh thể - chúng là **tính a hình** (polymorphism)
- Nếu vật liệu đó là một chất rắn cùng một nguyên tố - chúng là có **tính thù hình**, tính khác hình (allotropy)
- Một ví dụ cho allotropy là nguyên tố carbon – có thể tồn tại nhiều dạng như kim cương, than chì, carbon nanotubes, C_{60} , C_{70} ... và carbon vô định hình ...





Tính đa hình

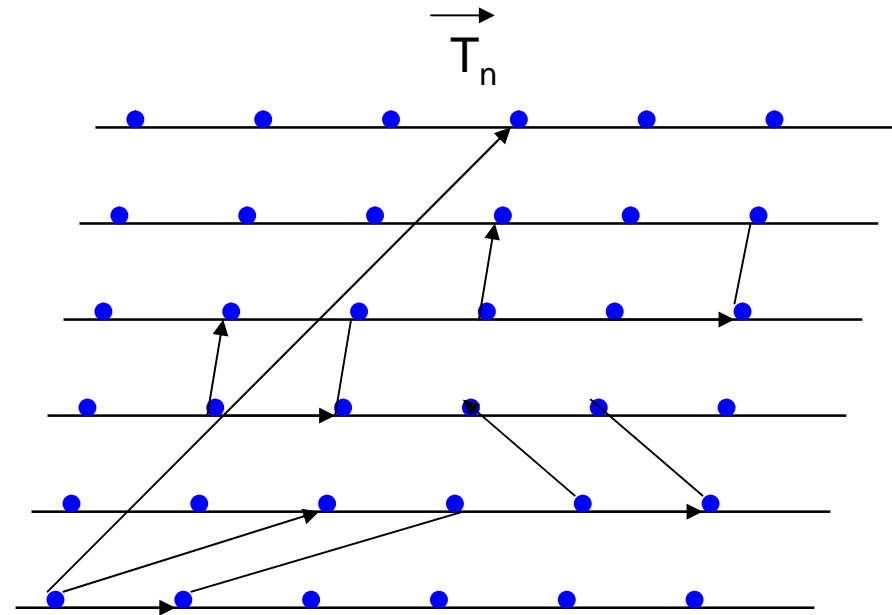
- Các chi u khác nhau trong m t tinh th có s x p x p khác nhau – d n n khác nhau v m t s tính ch t v t lý và hóa h c
- Ví d các nguyên t d c theo c nh c a ô FCC cách xa nhau h n so v i h ng chéo
- D h ng v i x ng trong không gian d n n d h ng v nhi u tính ch t c b n
- Trong a tinh th , s nh h ng các h t là hoàn toàn ng u nhiên → tính ch t c a v t li u là ng h ng
- M t s v t li u có các h t v i chi u ưu tiên





Mô tả Mạng Tinh thể

- Mô tả mạng tinh thể
- Các vectơ tinh thể cơ sở : $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$ – có thể chọn tùy ý
- Vectơ tinh thể của mạng tinh thể :
$$\vec{T} = n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2 + n_3 \vec{a}_3$$





Mô t M ng Tinh th

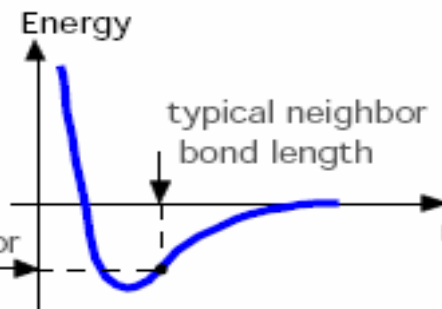
N NG L NG VÀ S S P X P NGUYÊN T

X p x p
nguyên
t có c u
trúc x p
ch t có
m c n ng
l ng
th p h n

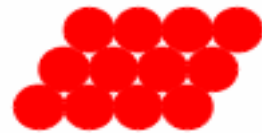
non dense, random packing



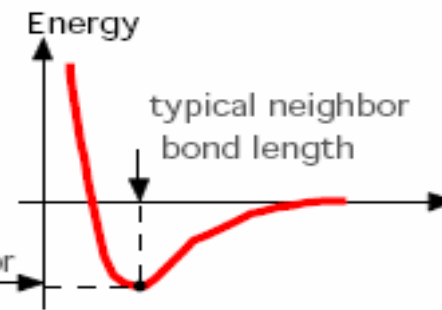
typical neighbor
bond energy



dense, regular packing



typical neighbor
bond energy



Dense, regular packed structures tend to
have lower energy

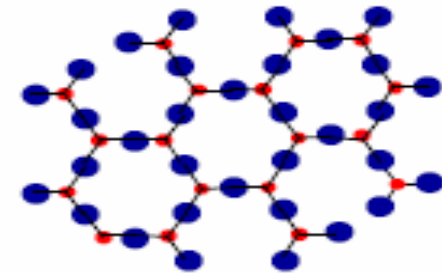


Mô t M ng Tinh th

CÁC LO IV T LI U VÀ S S P X P NGUYÊN T

Crystalline

- atoms pack in periodic, 3D arrays
- typical of: -metals
-many ceramics
-some polymers

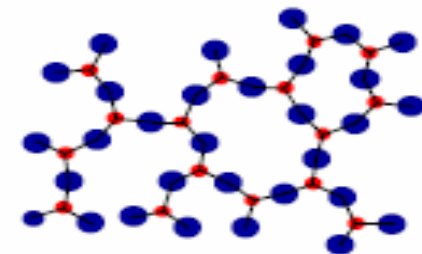


crystalline SiO₂

Noncrystalline (amorphous)

- atoms have no periodic packing
- occurs for:
 - complex structures
 - rapid cooling

• Si • Oxygen

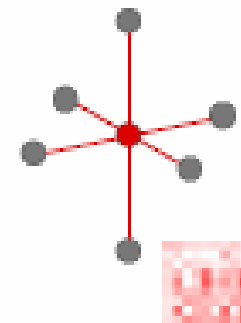
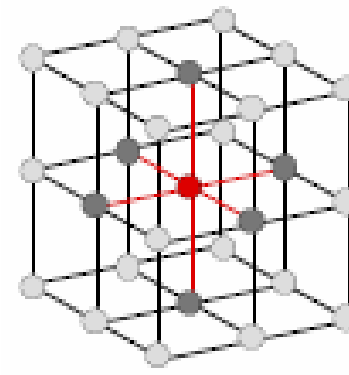
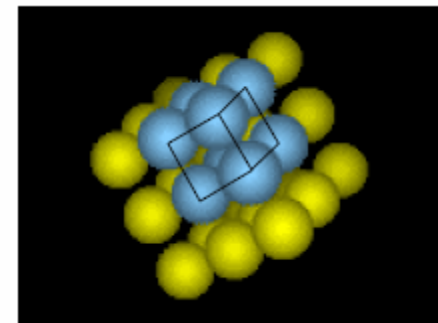
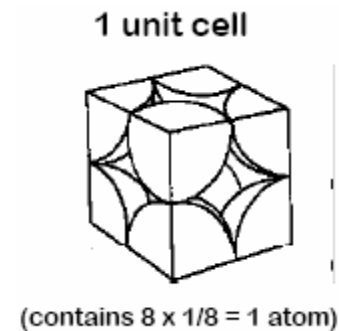


Noncrystalline SiO₂



Điểm mạng Tinh thể

- Phép điểm mạng: phép biến đổi không gian làm cho mạng tinh thể trùng với chính nó
 - Các điểm mạng tinh thể
 - Các trục quay C_1 , C_2 , C_3 , C_4 và C_6
 - Mật độ xếp chồng mạng M
 - Tâm đối



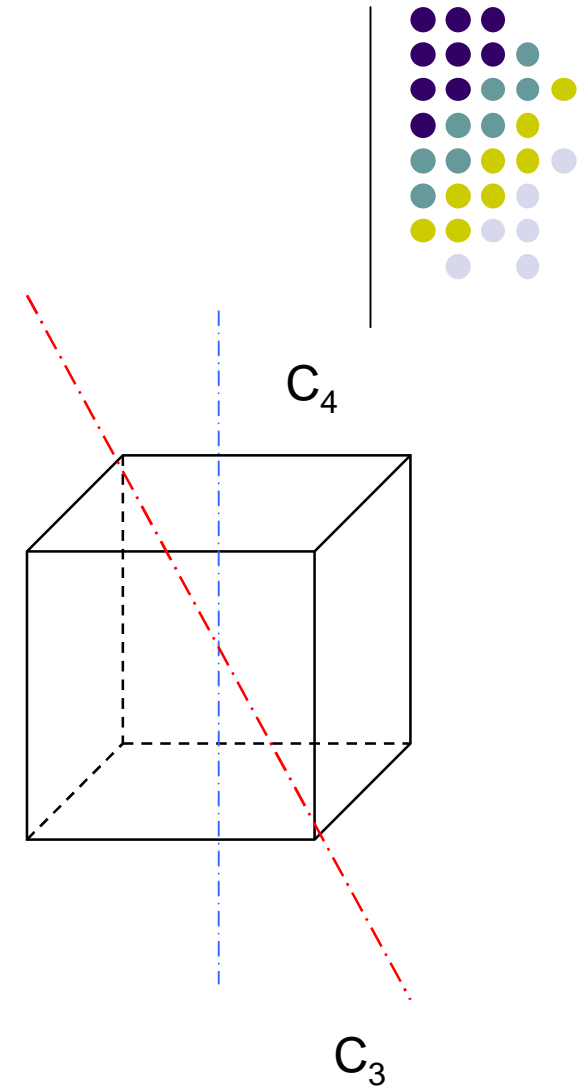
Trục quay trong Tinh thể

- Trục quay cấp n (C_n) trục quay quanh góc

$$\alpha_n = \frac{2}{n}$$

mạng tinh thể trùng với chính nó
 $1 + 2\cos\alpha_n = s$ nguyên

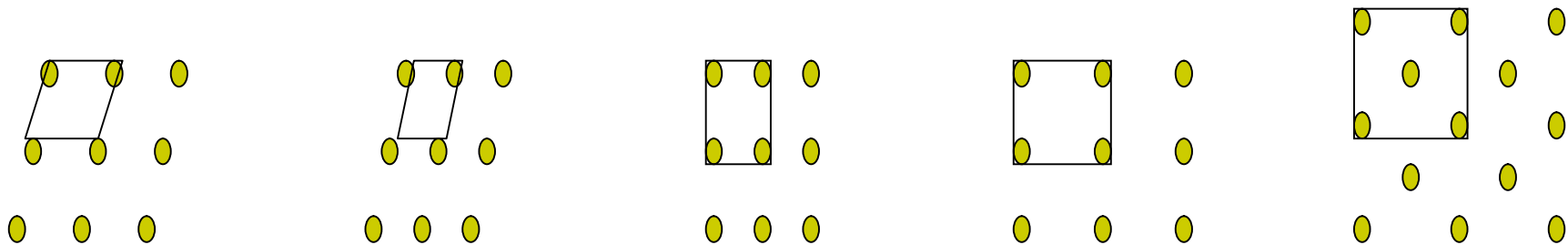
$\cos\alpha_n$	α_n	C_n
-1	$2\pi/2$	C_2
-0,5	$2\pi/3$	C_3
0	$2\pi/4$	C_4
0,5	$2\pi/6$	C_6
1	$2\pi/1$	C_1





5 Mạng Tinh thể hai chiều

Mạng	Đặc trưng
Mạng nghiêng	$a_1 \neq a_2, \varphi \neq 90^\circ$
Mạng lục giác	$a_1 = a_2, \varphi = 120^\circ$
Mạng vuông	$a_1 = a_2, \varphi = 90^\circ$
Mạng chữ nhật	$a_1 \neq a_2, \varphi = 90^\circ$
Mạng chữ nhật tâm	$a_1 \neq a_2, \varphi = 90^\circ$



Mạng Tinh thể ba chiều 7 hệ tinh thể



- Mạng tinh thể có mặt thể p t i thi u các y u t i x ng

Hệ tinh thể	Số yếu tố đối xứng tối thiểu
Ba nghiêng	C_1 (không)
Một nghiêng	C_2 hoặc (C_2+I)
Trực thoi	3 trục C_2 hoặc (C_2+I)
Ba phương	C_3 hoặc (C_3+I)
Bốn phương	C_4 hoặc (C_4+I)
Sáu phương	C_6 hoặc (C_6+I)
Lập phương	4 trục C_3

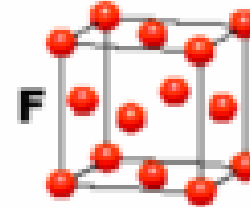
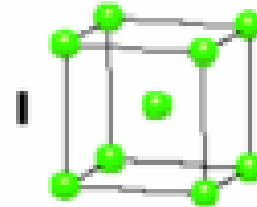
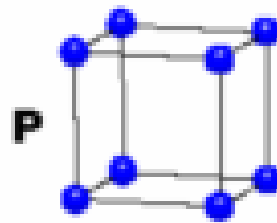
Mạng Tinh thể ba chiều 7 hệ tinh thể



CUBIC

$$a = b = c$$

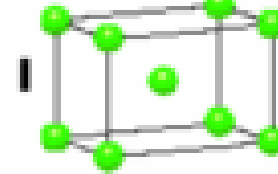
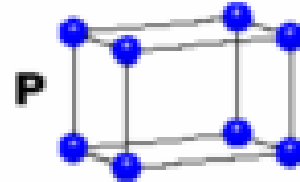
$$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$



TETRAGONAL

$$a = b \neq c$$

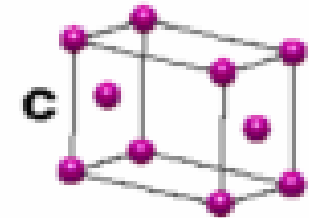
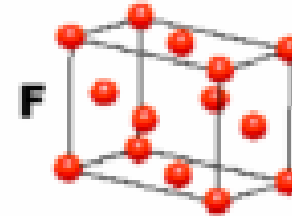
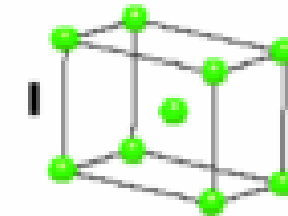
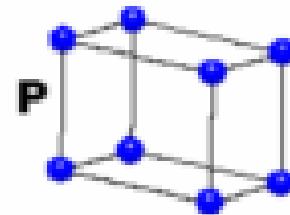
$$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$



ORTHORHOMBIC

$$a \neq b \neq c$$

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



Mạng Tinh thể ba chiều 7 hệ tinh thể

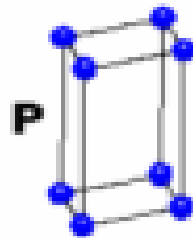


HEXAGONAL

$$a = b \neq c$$

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

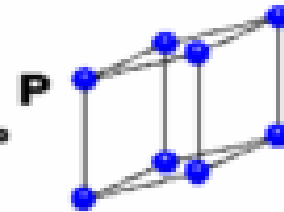
$$\gamma = 120^\circ$$



TRIGONAL

$$a = b = c$$

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

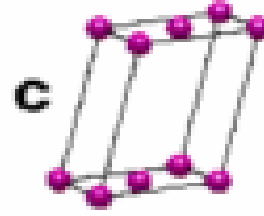
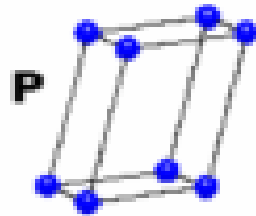


MONOCLINIC

$$a \neq b \neq c$$

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

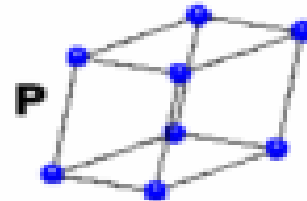
$$\beta \neq 120^\circ$$



TRICLINIC

$$a \neq b \neq c$$

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



4 Types of Unit Cell

P = Primitive

I = Body-Centred

F = Face-Centred

C = Side-Centred

+

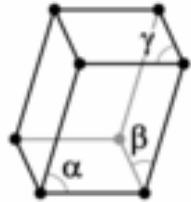
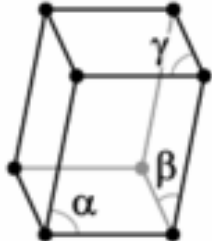
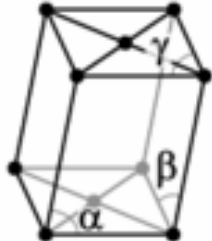
7 Crystal Classes

→ 14 Bravais Lattices

Mạng Tinh thể ba chiều 7 hệ tinh thể



- Tinh thể là sắp xếp tuần hoàn trong không gian của các nguyên tử hoặc phân tử, các nhóm nguyên tử hoặc phân tử
- Sắp xếp tuần hoàn lặp lại theo 3 chiều không gian
- Trong kỹ thuật, có thể tạo thành tinh thể, vị trí của các nguyên tử trong cấu trúc cùng mạng tinh thể

<p>triclinic Ba nghiêng</p>	<p>$\alpha, \beta, \gamma \neq 90^\circ$</p> 	
<p>monoclinic Một nghiêng</p>	<p>simple</p> <p>$\alpha \neq 90^\circ$ $\beta, \gamma = 90^\circ$</p> 	<p>base-centered</p> <p>$\alpha \neq 90^\circ$ $\beta, \gamma = 90^\circ$</p> 

Mạng Tinh thể ba chiều 7 hình tinh thể



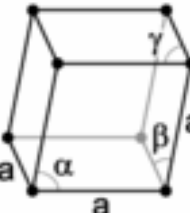
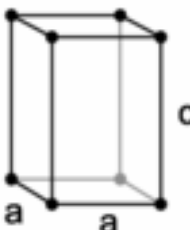
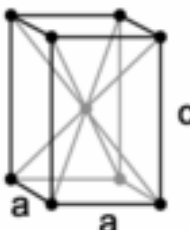
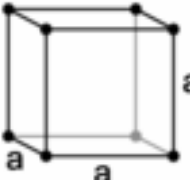
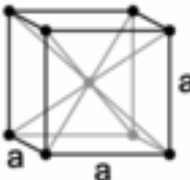
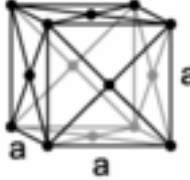
	simple	base-centered	body-centered	face-centered
orthorhombic Tríc phương (Tríc thoi)	$a \neq b \neq c$ 	$a \neq b \neq c$ 	$a \neq b \neq c$ 	$a \neq b \neq c$
hexagonal Sáu phương	$a \neq c$ 			

Mạng Tinh thể ba chiều

7 hình tinh thể



- Tinh thể là sắp xếp tuần hoàn trong không gian của các nguyên tử hoặc phân tử, các nhóm nguyên tử hoặc phân tử
- Sắp xếp tuần hoàn lặp lại theo các chiều không gian
- Trong điều kiện tự nhiên, có thể tạo thành 7 hình tinh thể, vị trí của các nguyên tử trong cấu trúc mạng tinh thể

<p>rhombohedral (trigonal) Ba phương</p>	<p>$\alpha, \beta, \gamma \neq 90^\circ$</p> 		
<p>tetragonal Bốn phương</p>	simple	body-centered	
	<p>$a \neq c$</p> 	<p>$a \neq c$</p> 	
<p>cubic (isometric) Lập phương</p>	simple	body-centered	face-centered
			

Mạng Tinh thể ba chiều 7 hình tinh thể



- Tính các ô mạng Bravais có tính như sau

Crystal system	Volume
Triclinic	$abc\sqrt{1 - \cos^2 \alpha - \cos^2 \beta - \cos^2 \gamma + 2 \cos \alpha \cos \beta \cos \gamma}$
Monoclinic	$abc \sin \beta$
Orthorhombic	abc
Tetragonal	$a^2 c$
Rhombohedral	$a^3 \sqrt{1 - 3 \cos^2 \alpha + 2 \cos^3 \alpha}$
Hexagonal	$\frac{3\sqrt{3} a^2 c}{2}$
Cubic	a^3

Các Mạng Tinh thể Cubic Mạng Bravais (Bravais Lattice)



Cách chọn các vectơ $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$ của mạng Bravais

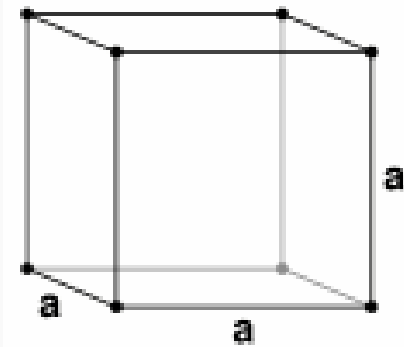
- Ô có tính đối xứng cao nhất của hệ mà tinh thể được xếp vào
- Ô có số góc vuông lớn nhất hoặc số cạnh bằng nhau và số góc bằng nhau nhiều nhất
- Ô có thể tích nhỏ nhất (ô nguyên tố, ô cơ sở)

Nếu không thể chọn được tinh thể nào thỏa mãn các yêu cầu trên thì chọn các vectơ $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$ theo thứ tự ưu tiên 1, 2, 3

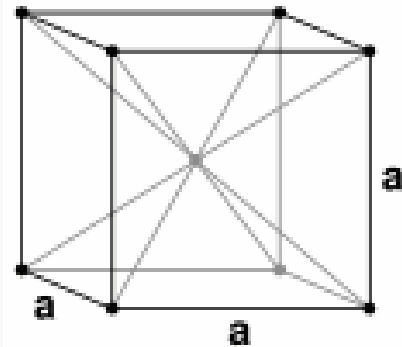
→ Chỉ **có 7 dạng ô cơ sở** có thể dùng để xây dựng không gian mạng tinh thể



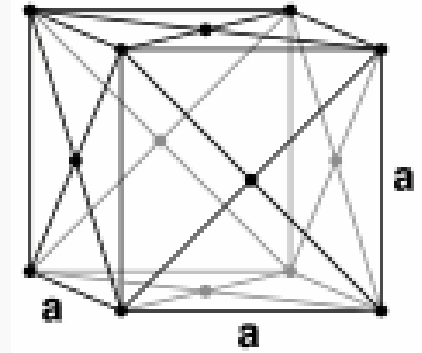
Số nút trong một ô lập phương



Simple cubic



Body-centered cubic



Face-centered cubic

1 nút

2 nút

4 nút

Hệ sắp xếp tinh thể APF trong tinh thể



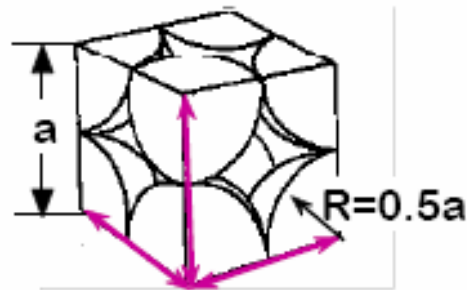
Atomic Packing Factor (APF)

Hệ sắp xếp nguyên tử APF

$$APF = \frac{\text{Volume of atoms in unit cell}^*}{\text{Volume of unit cell}}$$

*assume hard spheres

For simple cubic structure. . .



close-packed directions

contains $8 \times 1/8 = 1$ atom/unit cell

APF = 0.52 for simple cubic

$$APF = \frac{\text{atom unit cell} \cdot \frac{4}{3} \pi (0.5a)^3}{a^3}$$

Labels in the diagram:
 - **atom unit cell** (green) points to the '1' in the numerator.
 - **volume atom** (brown) points to $\frac{4}{3} \pi (0.5a)^3$.
 - **volume unit cell** (blue) points to a^3 .

Chức năng Miller của nút Mạng Tinh thể



Cách xác định chức năng của nút mạng trong tinh thể

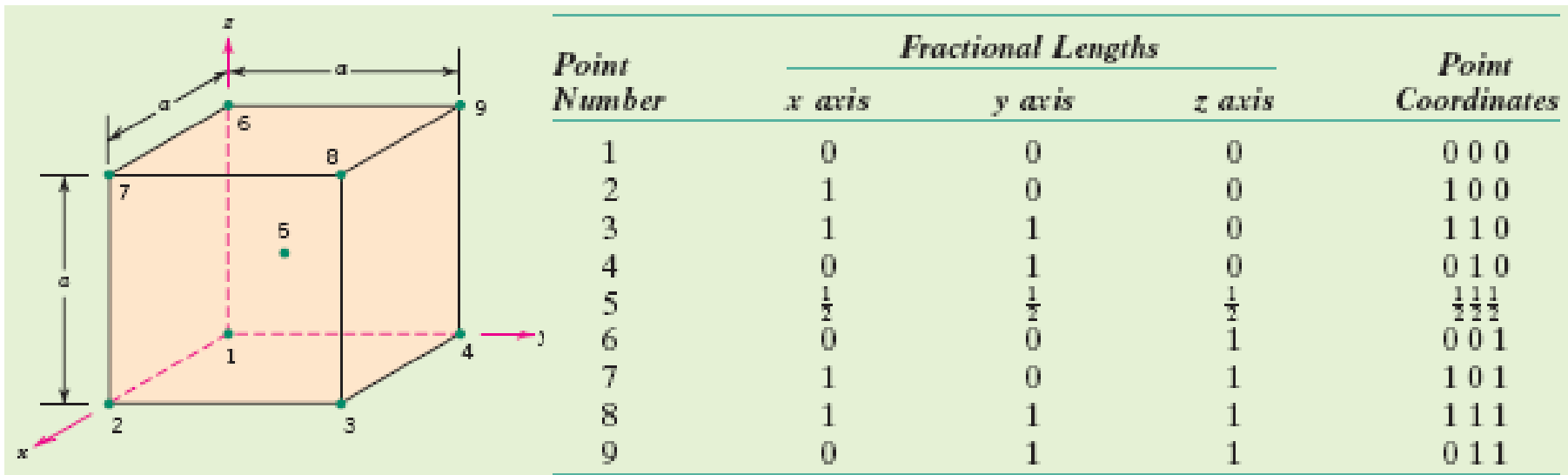
Chức năng Miller là mô tả các nút mạng, các mặt, các hướng trong tinh thể

- Vị trí của một nút mạng nào đó trong tinh thể đã chọn có thể xác định bằng tọa độ x, y, z . Các tọa độ có thể viết: $x = ha_1, y = ka_2$, và $z = a_3$ – trong đó a_1, a_2 và a_3 là các thông số của mạng và h, k là các số nguyên
- Nếu lấy a_1, a_2 và a_3 là những đơn vị dọc theo các trục của mạng thì tọa độ của nút là các số h, k . Các số đó có thể gọi là các chỉ số của nút và ký hiệu là $[hk]$ hay hk .

Chức năng Miller của nút Mạng Tinh thể



Cách xác định chức năng của nút mạng trong tinh thể



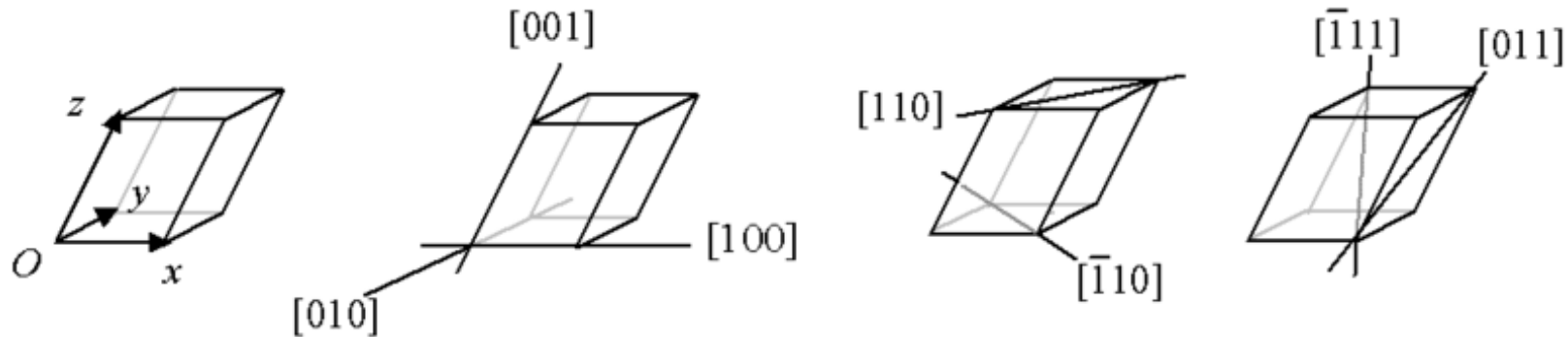
Chỉ số Miller của các mặt trong Tinh thể



Cách xác định ba chỉ số Miller của các mặt trong tinh thể

Chỉ số Miller của các mặt trong tinh thể có thể xác định bằng cách vẽ các đường song song với trục tọa độ qua các trục cắt của mặt. Chỉ số Miller của mặt là tỉ lệ của các trục cắt này qua trục tọa độ. Nếu các trục cắt là u, v, w thì chỉ số Miller của mặt là $[uvw]$. Các chỉ số cho các trục theo mặt Miller ($u \times a, v \times b, w \times c$) nên các chỉ số này không có nghĩa để chuyển đổi lẫn nhau.

- Theo quy tắc Miller dùng các số nguyên nhỏ nhất $[\frac{1}{2}\frac{1}{2}1], [112], [224]$ để các chỉ số Miller dùng $[112]$
- Các chỉ số âm của ký hiệu có dấu gạch ngang trên $[\bar{1}12]$

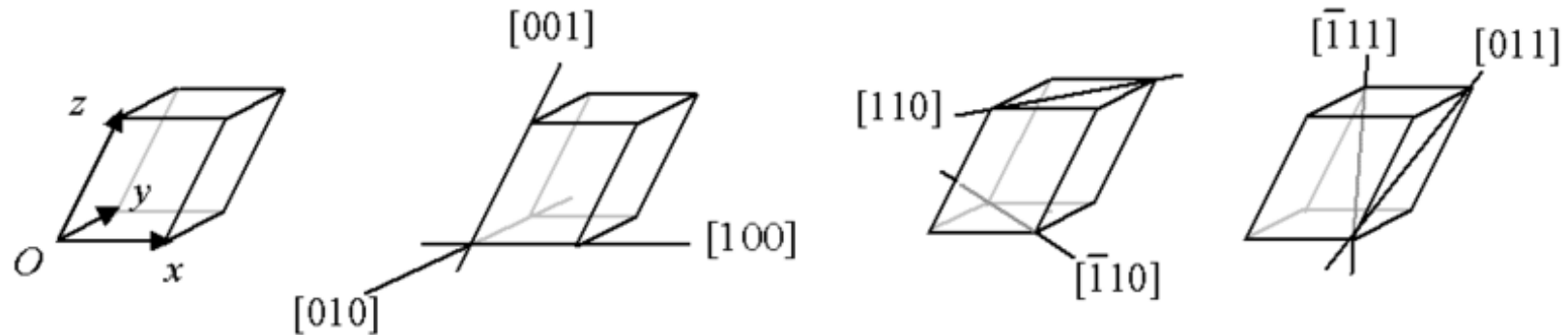


Chỉ số Miller của các trục trong Tinh thể



Cách xác định ba chỉ số trục trong tinh thể

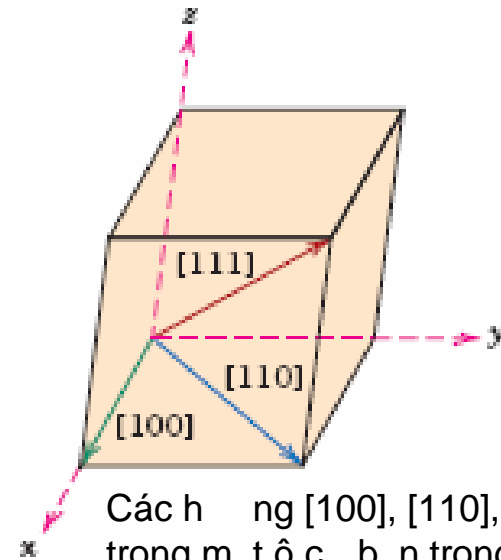
1. Véc tơ có dài thích hợp để tạo cho nó qua gốc tọa độ. Mỗi véc tơ trục có thể dịch chuyển trong mạng tinh thể mà không làm nó thay đổi vì nó duy trì song song.
2. Xác định chỉ số dài của hình chiếu véc tơ lên 3 trục: *thang đo theo n v c* của ô c s *a, b* và *c*.
3. Bằng 3 số này nhân hoặc chia bởi cùng một thừa số (quy định mẫu số) rút gọn chúng về *b* các số nguyên nhỏ nhất.
4. Bằng 3 chỉ số cho vào trong móc vuông không phân cách bởi dấu phẩy $[uvw]$. Rút gọn về các số nguyên u, v, w bằng cách vẽ hình chiếu theo các trục x, y và z .



Chỉ số Miller của các trục trong Tinh thể



- Vector hình vẽ đi qua gốc tọa độ, do đó không cần phải tính tỉ lệ. Hình chiếu của vectơ lên các trục x , y , và z lần lượt là $a/2$, b , and $0c$, các trục này tương ứng với $1/2$, 1 , and 0 theo thông số của ô mạng đơn vị (tức là khi chiếu xuống a , b , và c). Quy ước mà sử dụng các số này về mặt hình học các số nguyên bằng cách nhân mỗi trục với cùng giá trị 2. Kết quả là các số nguyên 1, 2, và 0, số này đóng trong ngoặc vuông **[120]**

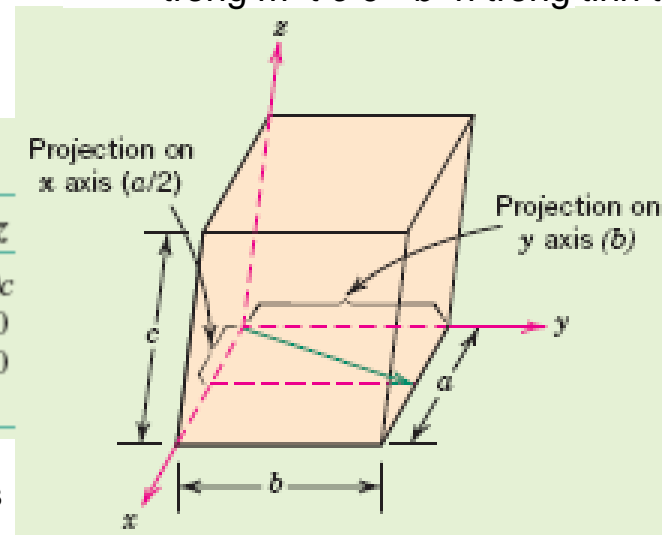


Các hình ảnh [100], [110], và [111] trong một ô mạng đơn vị trong tinh thể

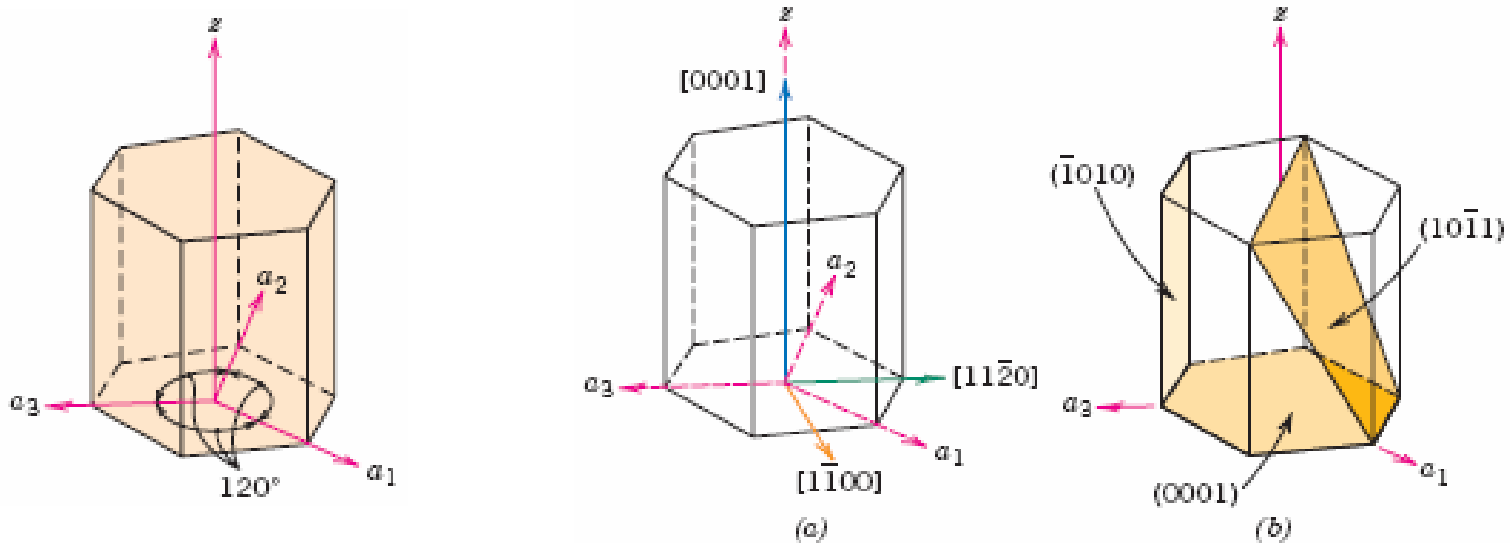
This procedure may be summarized as follows:

Các bước thể hiện như sau

		x	y	z
Projections	Các hình chiếu	$a/2$	b	$0c$
Projections (in terms of a , b , and c)		$\frac{1}{2}$	1	0
Reduction	Quy ước mà sử dụng	1	2	0
Enclosure	Đóng trong dấu ngoặc vuông		[120]	



Chỉ số Miller của các trục tinh thể



Vị trí tinh thể lập góc, $\underline{\quad}$
 (a) Các trục $[0001]$, $[\underline{1}100]$, and $[\underline{1}1\bar{2}0]$
 (b) Các mặt (0001) , $(10\bar{1}1)$, and (1010)

Ch 3 Miller c 3 a chi u trong Tinh th



$$u' = 1 \quad v' = 1 \quad w' = 1$$

Also, from Equations 3.6a, 3.6b, 3.6c, and 3.6d

$$u = \frac{1}{3}(2u' - v') = \frac{1}{3}[(2)(1) - 1] = \frac{1}{3}$$

$$v = \frac{1}{3}(2v' - u') = \frac{1}{3}[(2)(1) - 1] = \frac{1}{3}$$

$$t = -(u + v) = -\left(\frac{1}{3} + \frac{1}{3}\right) = -\frac{2}{3}$$

$$w = w' = 1$$

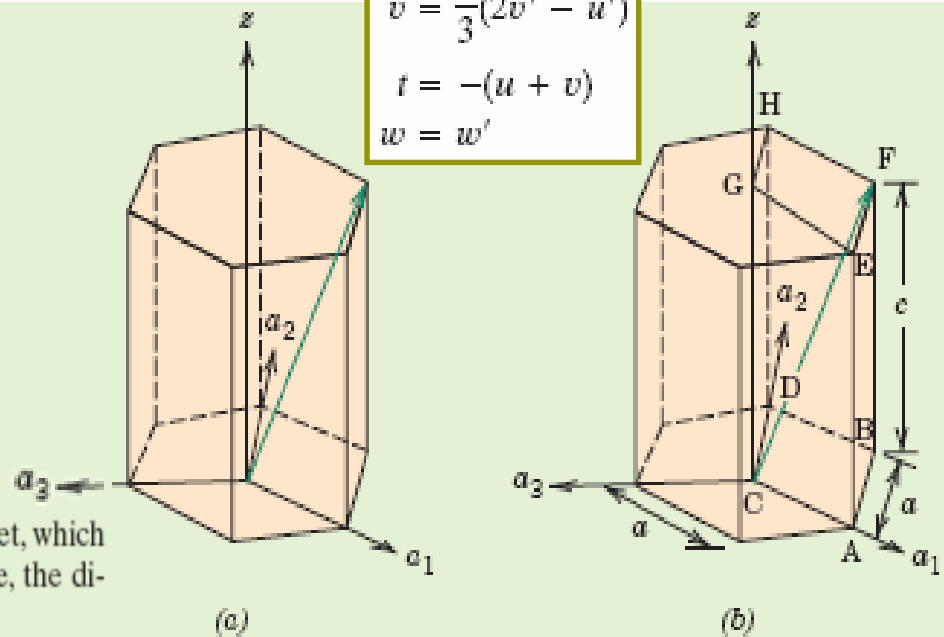
Multiplication of the above indices by 3 reduces them to the lowest set, which yields values for $u, v, t,$ and w of 1, 1, -2 and 3, respectively. Hence, the direction shown in the figure is $[11\bar{2}3]$.

$$u = \frac{1}{3}(2u' - v')$$

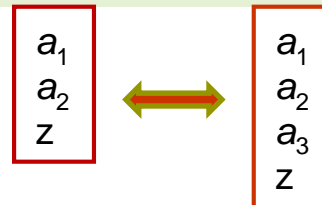
$$v = \frac{1}{3}(2v' - u')$$

$$t = -(u + v)$$

$$w = w'$$



Chuy n t h 3 ch s sang h 4 ch s $u', v', w' \rightarrow u, v, t, w$



Ch 3 Miller c 1 a chi u trong Tinh th



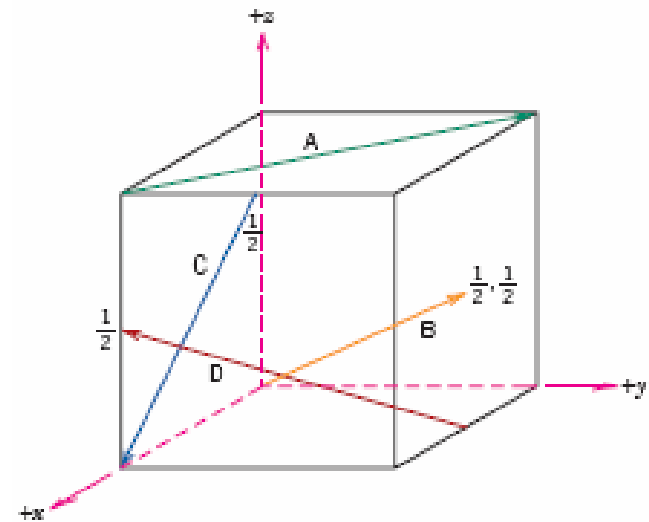
Questions and Problems 3.32

A	x	y	z
Các hình chi u	-1	1	0
Quy ng m u s	-1	<u>1</u>	0
t trong d u ngo c		[110]	

B	x	y	z
Các hình chi u	$\frac{1}{2}$	1	$\frac{1}{2}$
Quy ng m u s	1	2	1
t trong d u ngo c		[121]	

C	x	y	z
Các hình chi u	0	$-\frac{1}{2}$	-1
Quy ng m u s	0	<u>-1</u>	-2
t trong d u ngo c		[012]	

D	x	y	z
Các hình chi u	$\frac{1}{2}$	-1	$\frac{1}{2}$
Quy ng m u s	1	<u>-2</u>	1
t trong d u ngo c		[121]	



Chú ý chi u c 1 a directions

Ch 3 Miller c 1 a chi u trong Tinh th



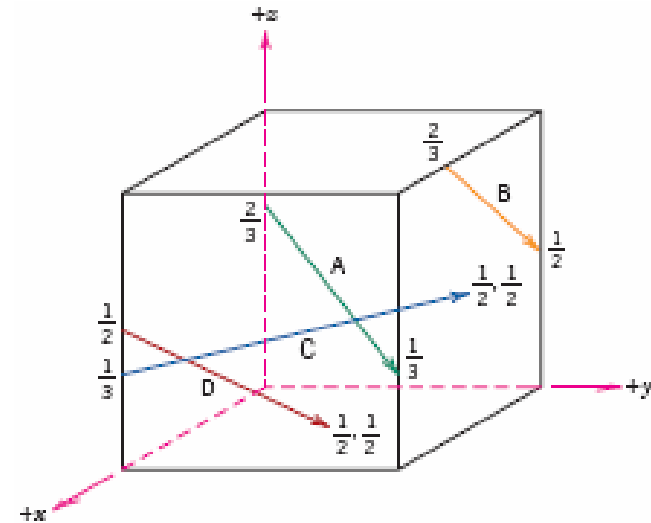
Questions and Problems 3.33

A	x	y	z
Các hình chi u	1	1	-1/3
Quy ng m u s	3	3	-1
t trong d u ngo c		[331]	

B	x	y	z
Các hình chi u	-2/3	0	-1/2
Quy ng m u s	-4	0	-3
t trong d u ngo c		[403]	

C	x	y	z
Các hình chi u	-1/2	1	1/6
Quy ng m u s	-3	6	1
t trong d u ngo c		[361]	

D	x	y	z
Các hình chi u	-1/2	1/2	-1/2
Quy ng m u s	-1	1	-1
t trong d u ngo c		[111]	



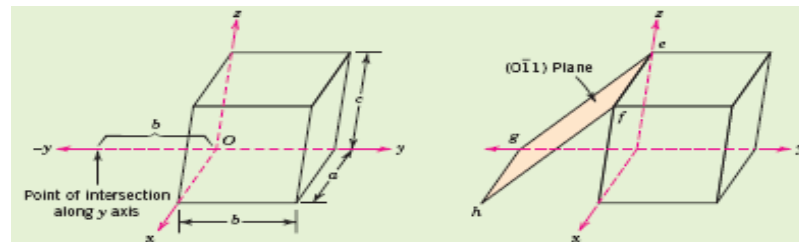
Chú ý chi u c 1 a directions

Chỉ số Miller của các mặt trong Tinh thể



Cách xác định ba chỉ số (hkl) của mặt trong tinh thể

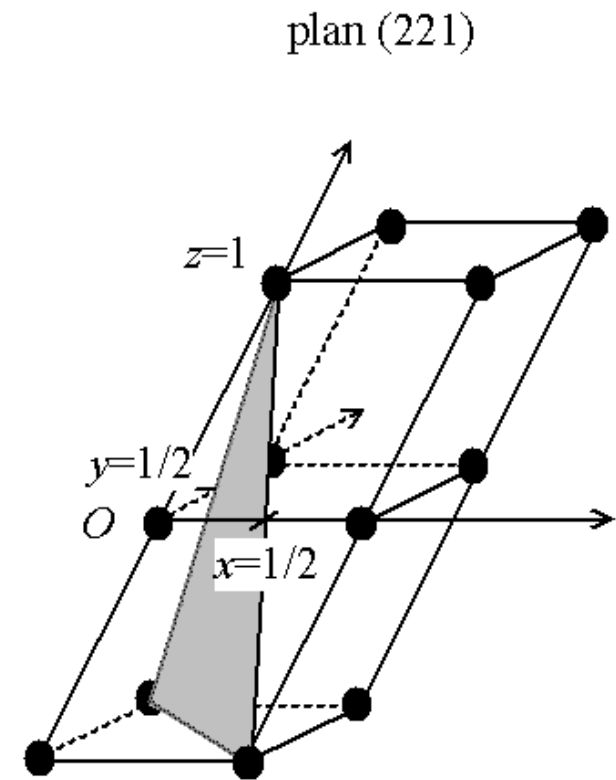
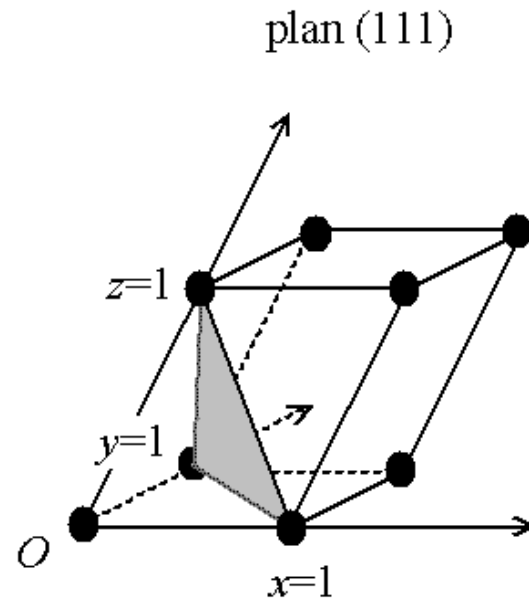
1. Nếu mặt phẳng đi qua gốc tọa độ, hoặc là coi như mặt khác song song với nó thì tỉ lệ trong cùng mặt đó sẽ hoặc là dùng mặt gốc tọa độ mà đi cắt ở các trục khác
2. Mặt phẳng trong cấu trúc tinh thể hoặc bất kỳ trục tọa độ, hoặc song song với trục tọa độ; dài các mặt cắt trục để tìm tỉ lệ các trục xác định các thông số a , b và c
3. Nghịch đảo các số này, nếu mặt phẳng song song với các trục tọa độ, có thể coi là cắt vô hạn \rightarrow và do đó chỉ số sau khi nghịch đảo sẽ là zero (0)
4. Dựa vào các số rút gọn (quy ước m.u.s) và dựa vào nguyên nhân thì tỉ lệ, bằng cách nhân hoặc chia bởi cùng một số
5. Cuối cùng, các số nguyên này sẽ có trong ngoặc tròn không dùng dấu phẩy phân cách, \rightarrow ta có (hkl)



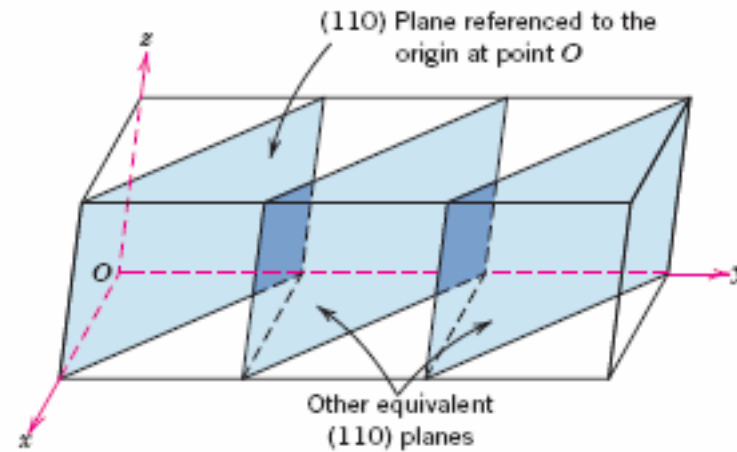
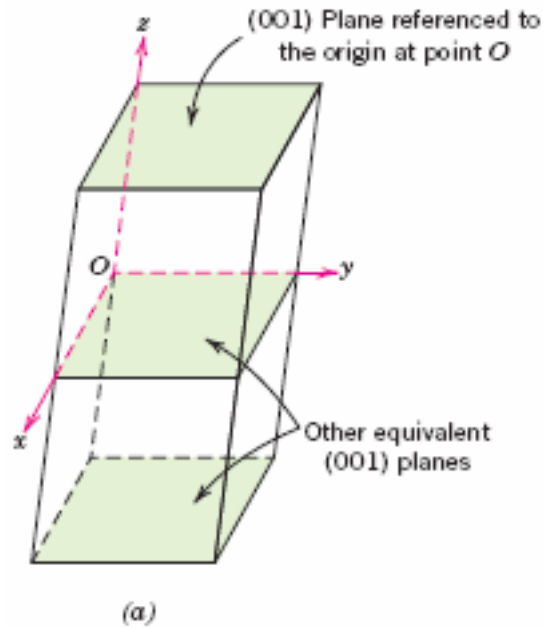
Chỉ số Miller của các mặt trong Tinh thể



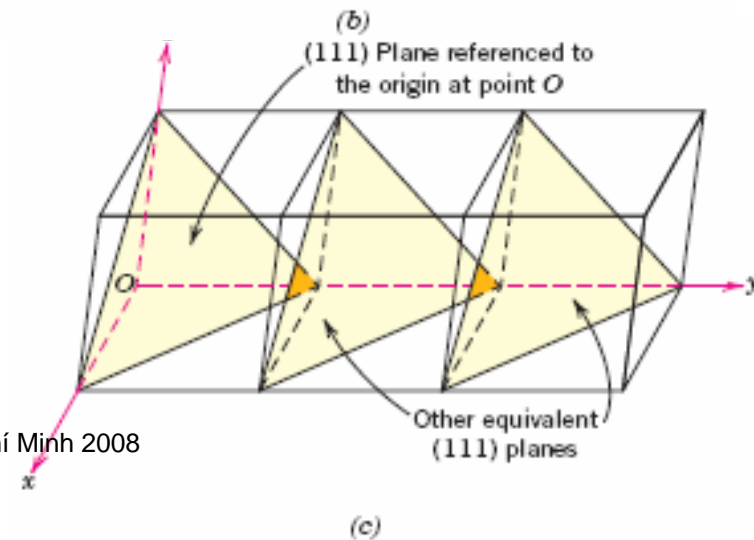
Chỉ số Miller và vị trí của các mặt trong tinh thể xác định bởi 3 trục mà mặt đó cắt 3 trục tại



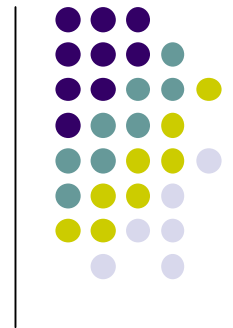
Chỉ số Miller của các mặt trong Tinh thể



- Trình bày các hình mặt (a) (001), (b) (110), và (c) (111) của các mặt trong tinh thể

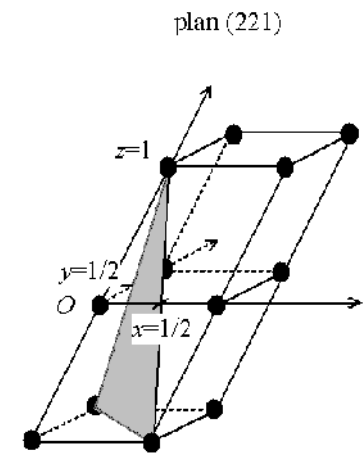
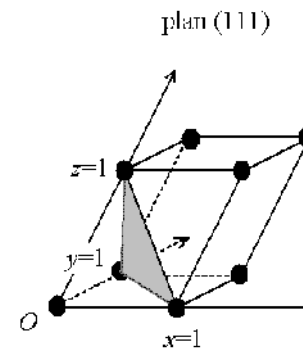


Chỉ số Miller của các mặt trong Tinh thể



Chỉ số Miller và trí của mặt mặt trong tinh thể xác định bởi 3 trục mà mặt đó cắt 3 trục tọa độ

- Xác định dài trục tọa độ và các giao điểm theo trục thông số mạng A , B và C
- Thực hiện phép nghịch đảo
- Quy đồng mẫu số. Gi số mẫu số chung nhỏ nhất là D
- Các số nguyên $h = D/A$, $k = D/B$ và $l = D/C$ là các chỉ số Miller của mặt và ký hiệu là (hkl)
- $hx + ky + lz = D$, $hA = kB = lC = D$



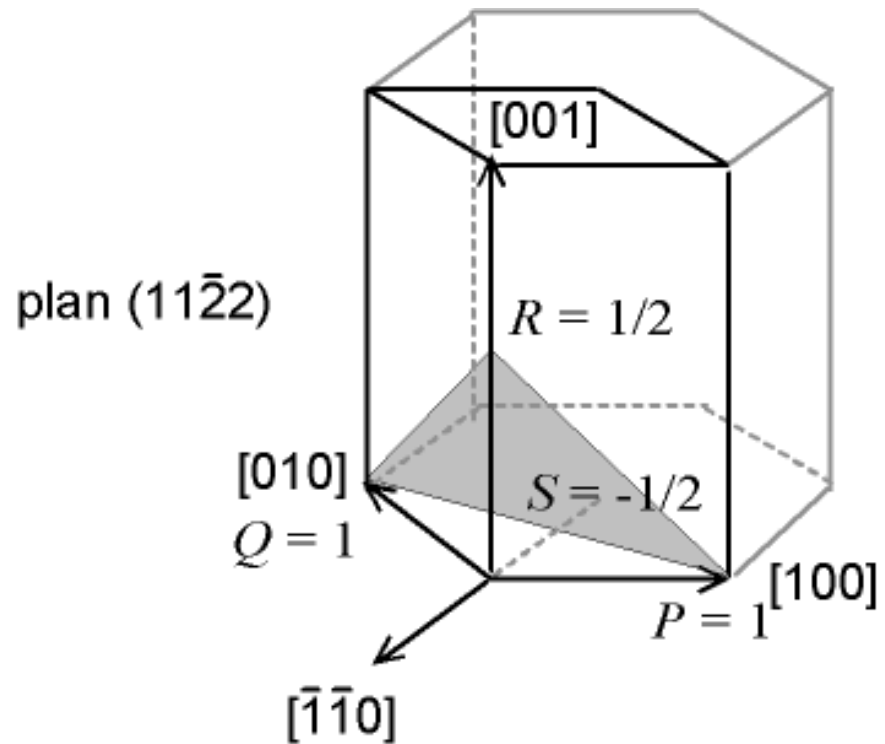
$$\frac{x}{A} + \frac{y}{B} + \frac{z}{C} = 1$$

Chỉ số Miller của các mặt trong Tinh thể



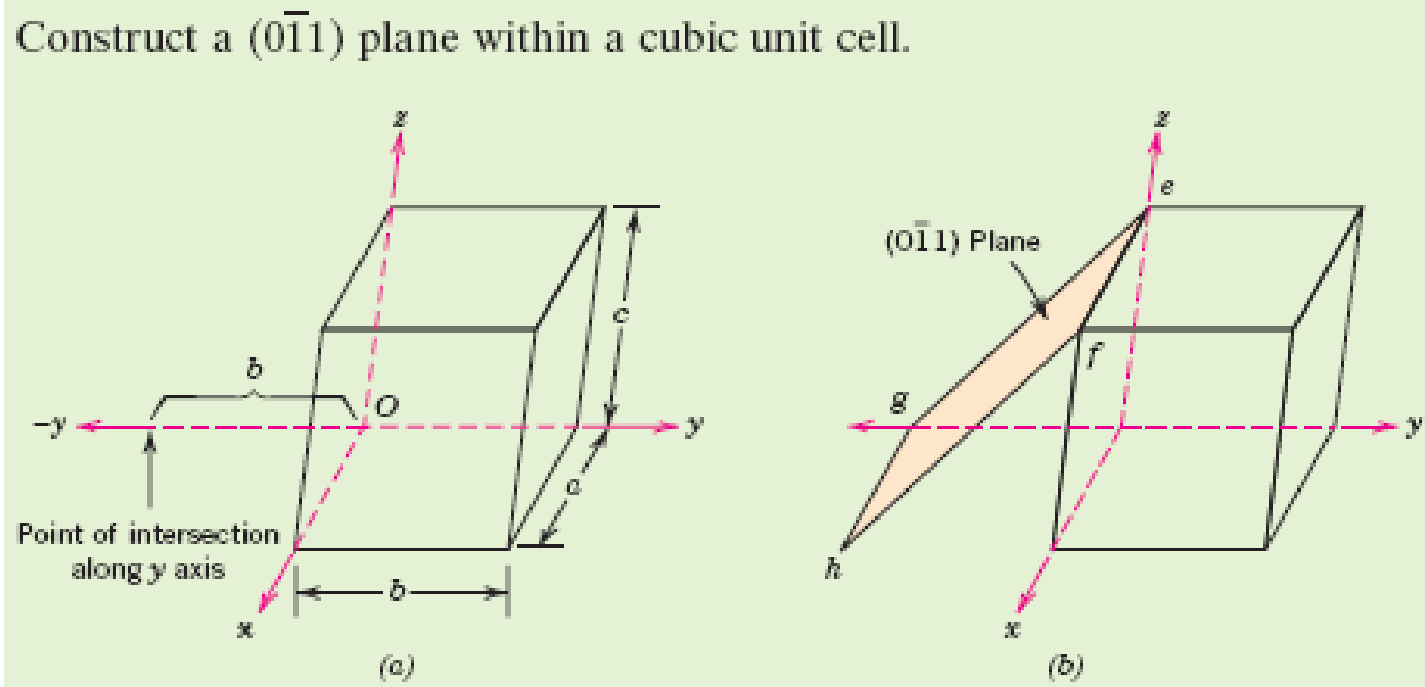
Chỉ số Miller và cách xác định các mặt trong tinh thể lập phương đơn giản

- Xác định các trục tọa độ và các giao điểm theo trục x , y và z thông qua các trục A , B và C
- Thực hiện phép nghịch đảo
- Quy đồng mẫu số. Giá trị chung nhất là D
- Các số nguyên $h = D/A$, $k = D/B$ và $l = D/C$ là các chỉ số Miller của mặt và ký hiệu là (hkl)
- $hx + ky + lz = D$, $hA = kB = lC = D$



$$\frac{x}{A} + \frac{y}{B} + \frac{z}{C} = 1$$

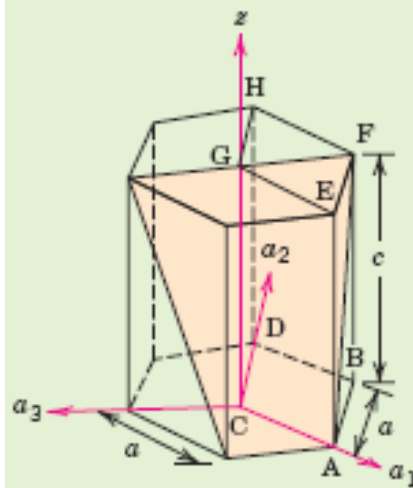
Chapter Miller Construct a plane in Tinh th



Chapter 3 Miller indices in the hexagonal unit cell



Determine the Miller–Bravais indices for the plane shown in the hexagonal unit cell.



To determine these Miller–Bravais indices, consider the plane in the figure referenced to the parallelepiped labeled with the letters A through H at its corners. This plane intersects the a_1 axis at a distance a from the origin of the a_1 - a_2 - a_3 - z coordinate axes system (point C). Furthermore, its intersections with the a_2 and z axes are $-a$ and c , respectively. Therefore, in terms of the lattice parameters, these intersections are 1, -1 , and 1. Furthermore, the reciprocals of these numbers are also 1, -1 , and 1. Hence

$$h = 1$$

$$k = -1$$

$$l = 1$$

and, from Equation 3.7

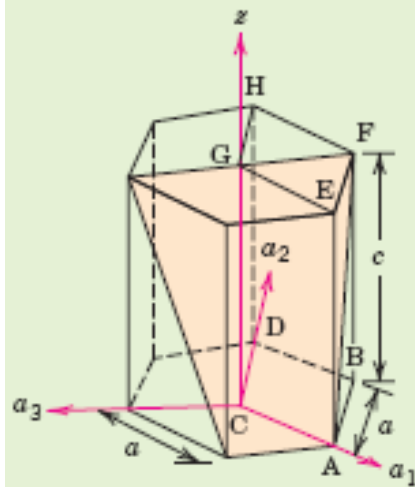
$$\begin{aligned} i &= -(h + k) \\ &= -(1 - 1) = 0 \end{aligned}$$

Therefore the (hki) indices are $(1\bar{1}01)$.

Chapter Miller c a các m t trong Tinh th



Determine the Miller-Bravais indices for the plane shown in the hexagonal unit cell.



	a_1	a_2	z
Miller indices	x	y	z
Miller indices	1	-1	1
Miller indices	1	-1	1
Miller indices	1	$\bar{1}$	1
Miller indices		(1101)	

$$h = 1$$

$$k = -1$$

$$l = 1$$

and, from Equation 3.7

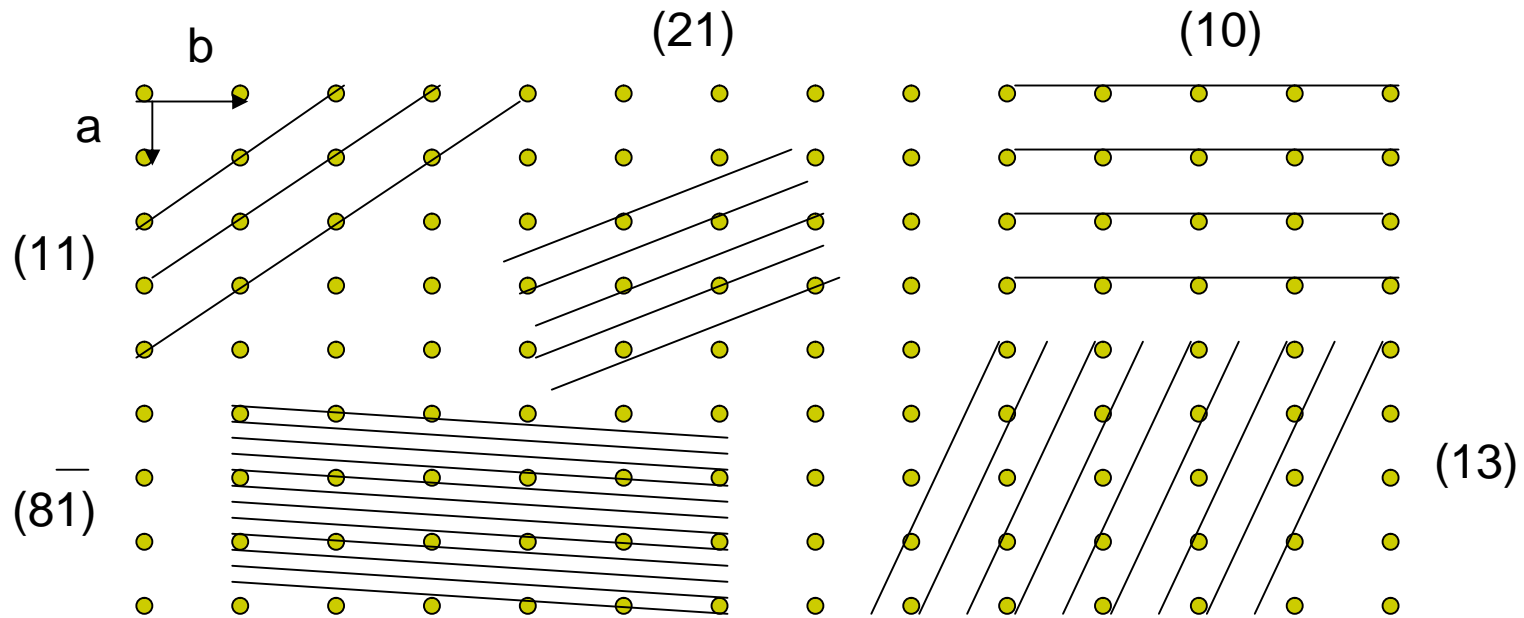
$$i = -(h + k) = -(1 - 1) = 0$$

Therefore the $(hkil)$ indices are $(1\bar{1}01)$.

Khoảng cách giữa các mặt trong Tinh thể (hkl)



Hệ mặt có chỉ số Miller càng nhỏ thì khoảng cách giữa hai mặt kế nhau càng lớn và mật độ các nút mạng càng lớn



Khoảng cách giữa các mặt trong Tinh thể (hkl)



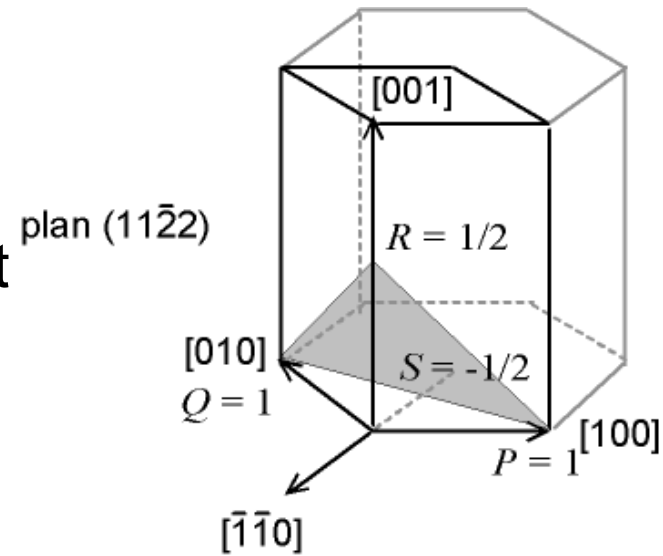
Chỉ số Miller

- $(h\bar{k}l)$ biểu thị cho mặt phẳng song song với nhau
- Mặt $(h\bar{k}l)$ giao nhau tại các trục tọa độ

$$\frac{a_1}{h}, \frac{a_2}{k}, \frac{a_3}{l}$$

- Ví dụ lập phương $[h\bar{k}l]$ vuông góc với $(h\bar{k}l)$

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

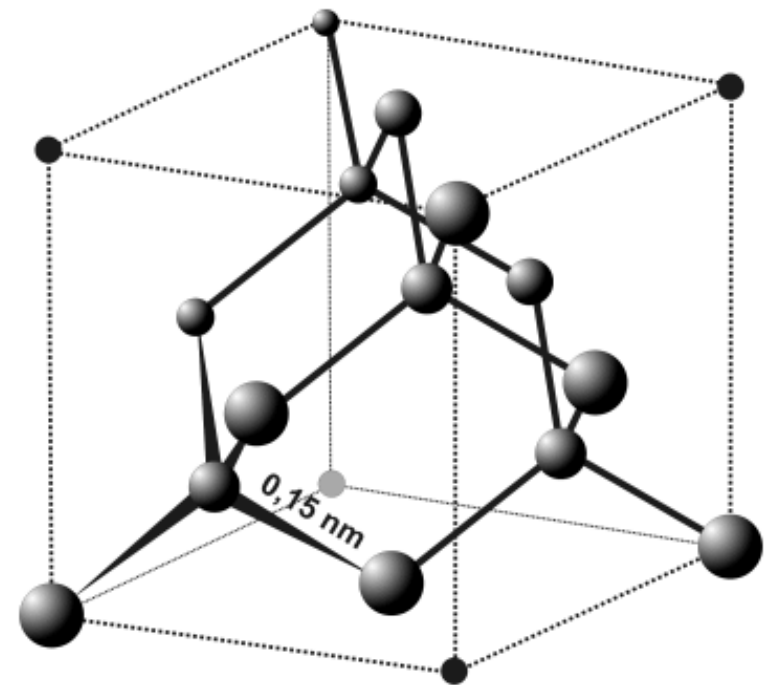




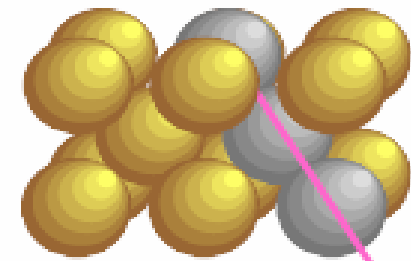
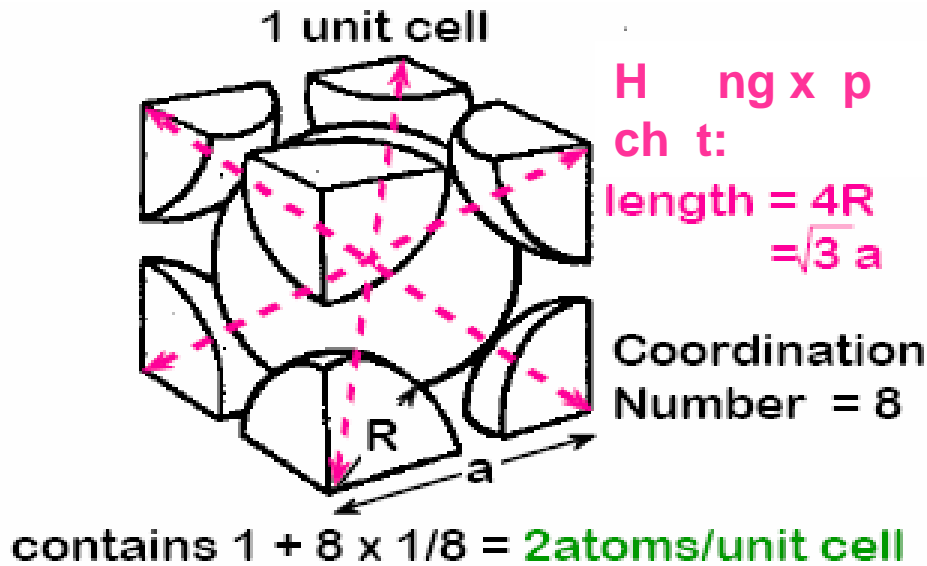
Cấu trúc của Kim cương

Mạng Bravais: Lập phương tâm mặt F

- Các vị trí nguyên tử C (0,0,0) và $(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4})$
- Số nguyên tử 8
- Hệ lập phương: 0,34
- Số phối trí: k=4
- Kết tinh theo mạng kim cương còn có C, Si, Ge, thiếc xám



Cấu trúc Lattice lập phương tâm khối (BCC)



One of 4
Hệ thống trục tọa độ:

$$\text{APF} = \frac{\text{atoms/unit cell} \times \text{volume/atom}}{\text{volume/unit cell}} = \frac{2 \times \frac{4}{3} \pi \left(\frac{\sqrt{3}a}{4}\right)^3}{a^3}$$

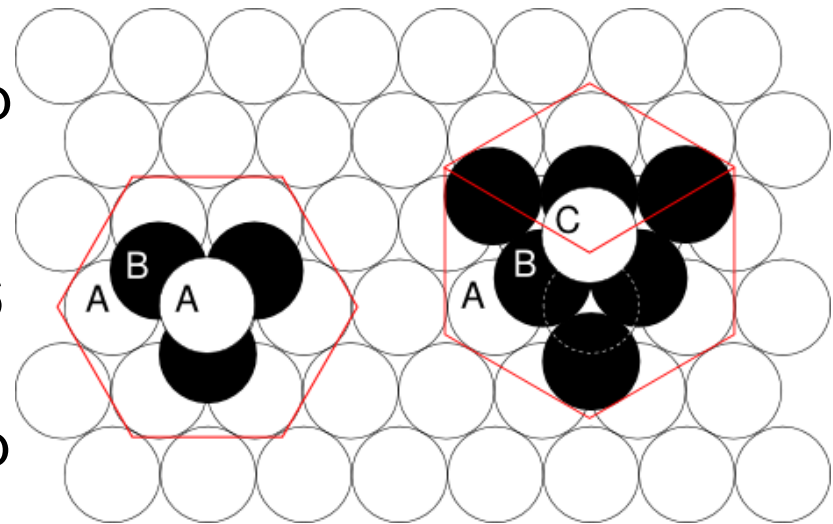
APF = 0.68 for BCC

Cấu trúc xếp chặt (Close Packed - CP)



Các cách xếp các qu cầu r n nh nhau trong không gian sao cho phần trống còn lại là gì? Chúng là nh nh t: lập d i cùng, các qu cầu c x p ch t trên m t m t ph ng khi m i qu cầu tiếp xúc v i 6 qu cầu xung quanh

- Cấu trúc xếp chặt nh g p nh t là: FCC và HCP
 - HCP: **ABABABA**
 - FCC: **ABCABCA**

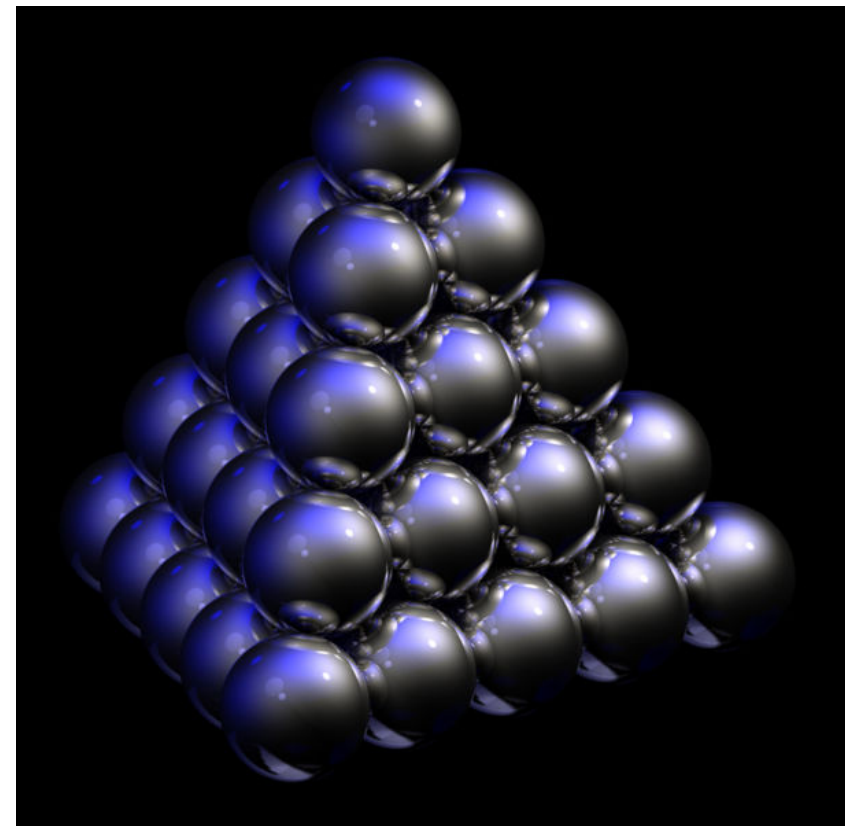




Cấu trúc xếp chặt (HCP)

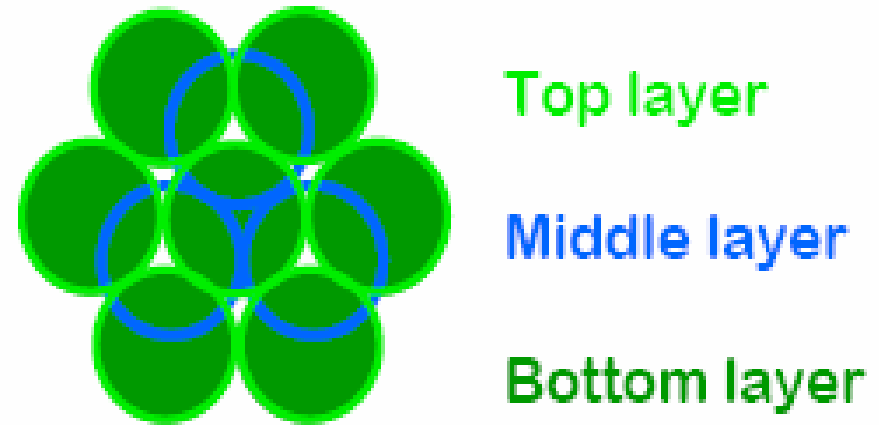
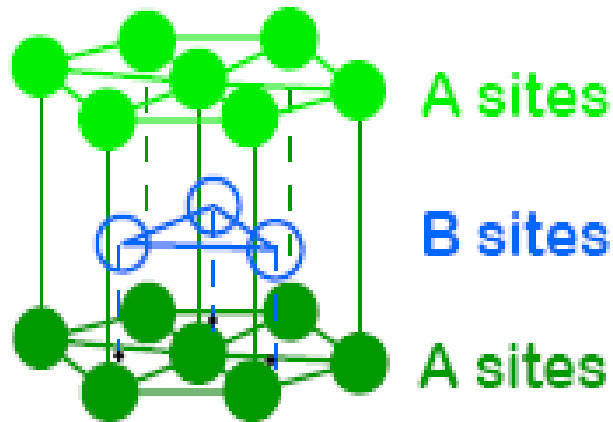
HCP: **ABABABA**

- Lớp nguyên tử thứ ba đặt thẳng hàng trên lớp nguyên tử thứ nhất
- Mạng Bravais: Lục giác P
- Cấu trúc gồm 2 nguyên tử nh nhau $(0,0,0)$ và $(2/3,1/3,1/2)$
- Hệ số lấp đầy các qu cầu: 0,74
- Tỷ số c/a : 1,633
- Số phối trí: $k=12$





Cấu trúc xếp chặt (HCP)



Coordination Number = 12

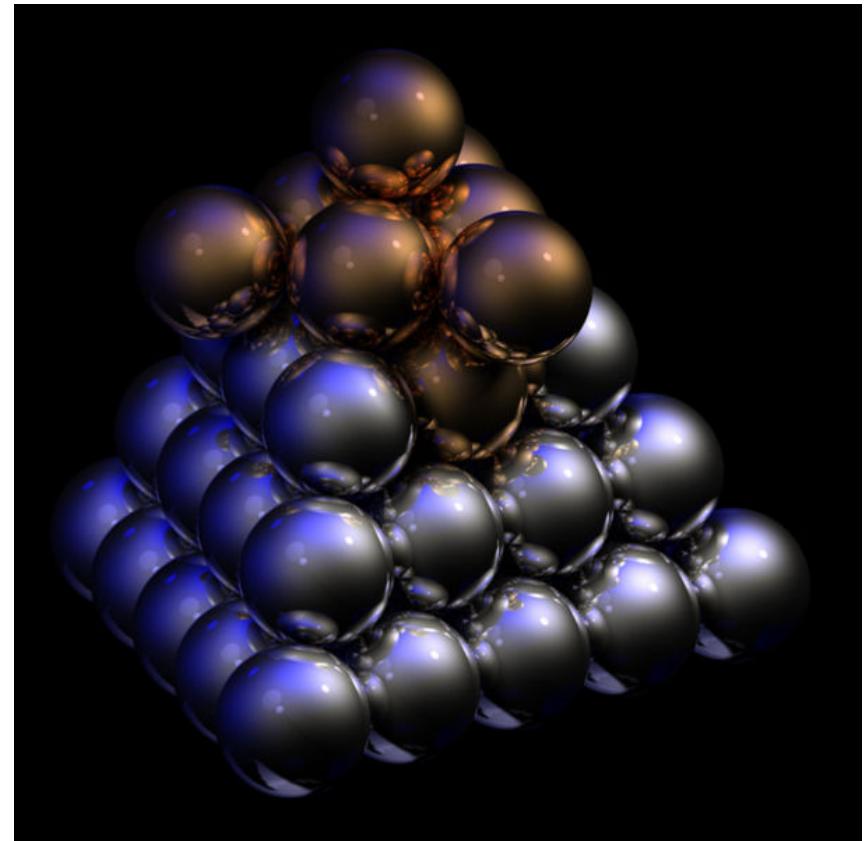
APF = 0.74 for HCP



Cấu trúc xếp chặt (FCC)

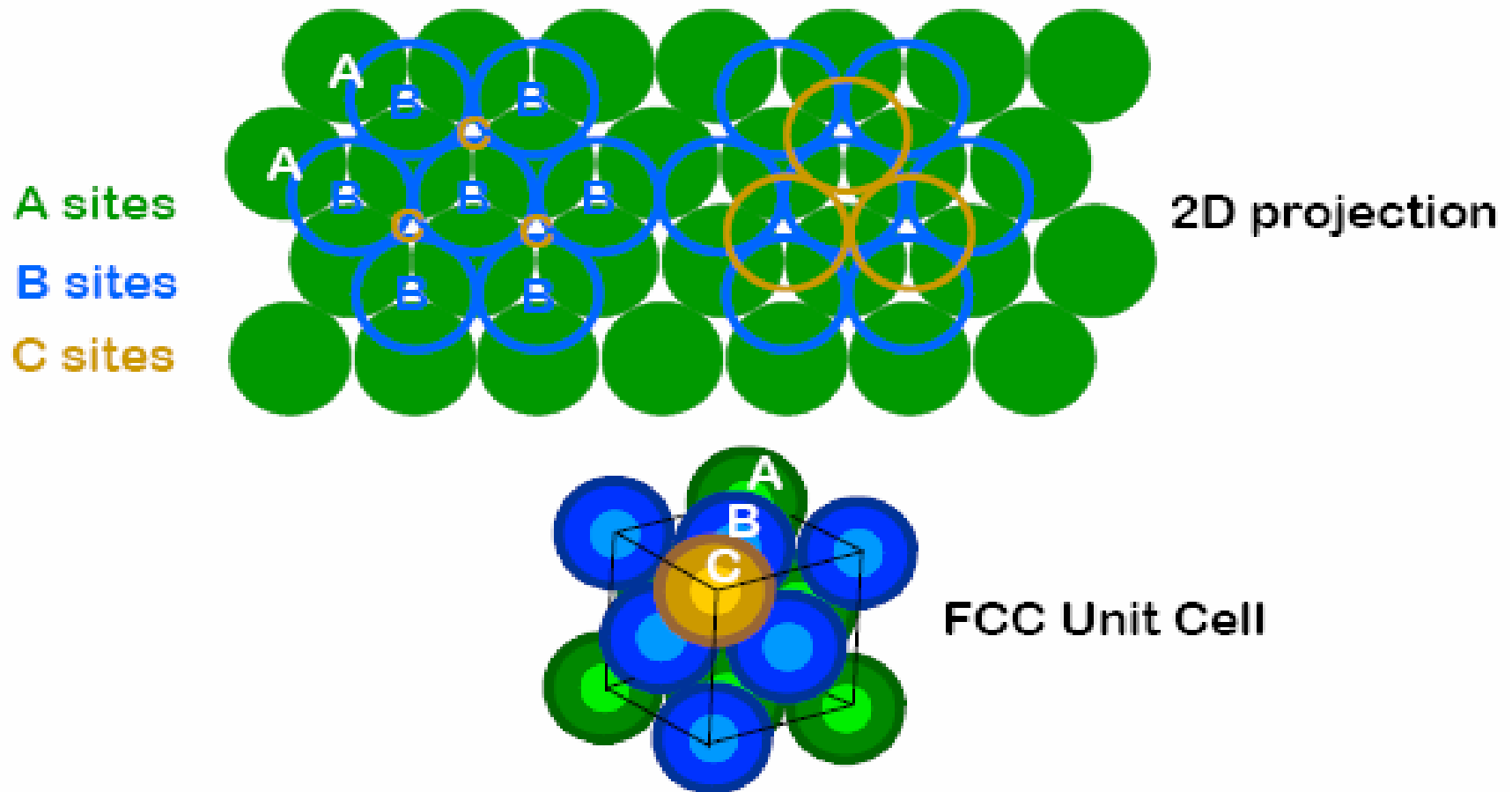
FCC: **ABCABCA**

- M t th ba c t trên các ch lõm c a m t th nh t mà m t th hai không chỉ m ch
- Ô c s ch a 4 nguyên t
- H s l p y: 0,74
- S ph i trí: $k=12$



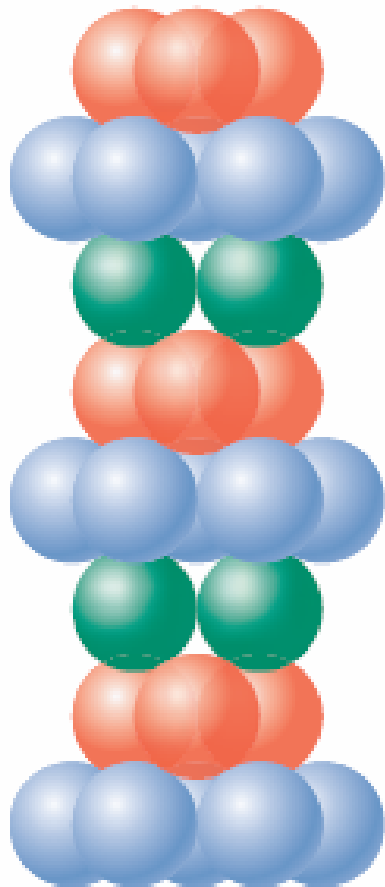


Cấu trúc xếp chặt (FCC)

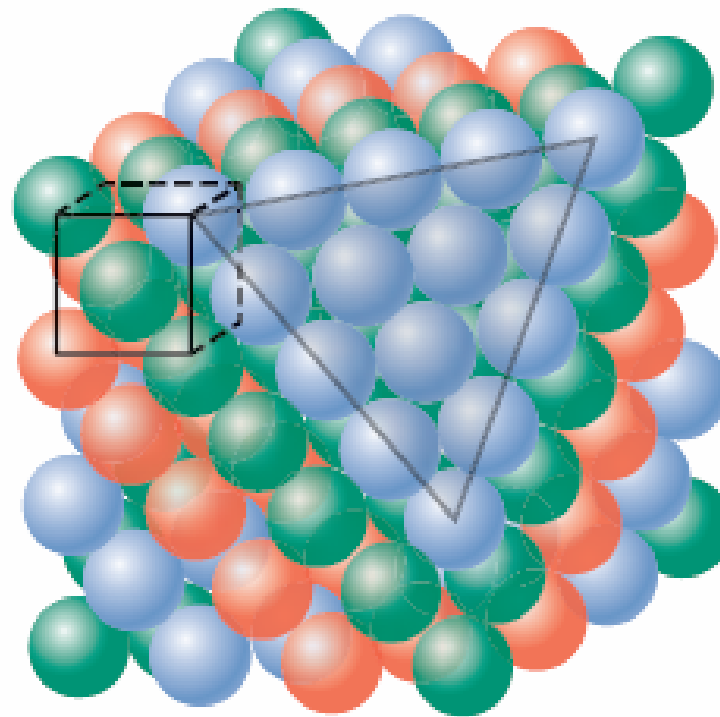




Cấu trúc xếp chặt (FCC)



B
A
C
B
A
C
B
A



Cấu trúc xếp chặt (FCC)



Hình xếp
chặt:

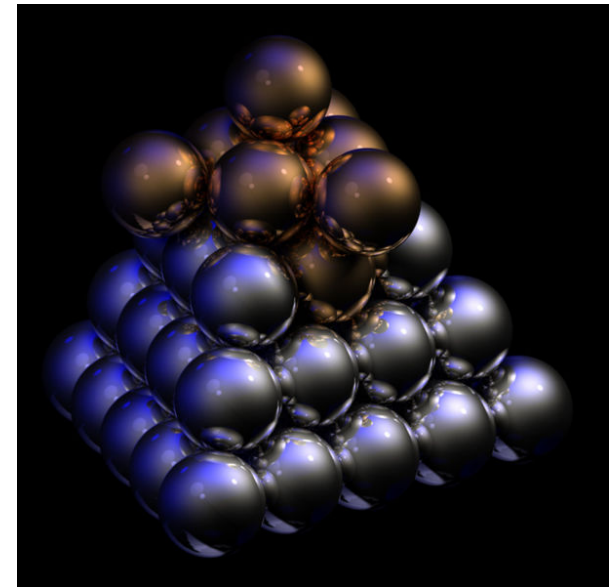


Cấu trúc xếp chặt (CP)

FCC: **ABCABCA**

HCP: **ABABABA**

- Cấu trúc tinh thể FCC và HCP có hệ số lấp đầy là 0,74 (là giá trị cực đại có thể đạt được)
- Cấu trúc tinh thể FCC và HCP có số phối tử là 12
- Sự khác nhau giữa hai cấu trúc là thứ tự sắp xếp của các lớp nguyên tử liên tiếp





M t ρ

M t c a v t l i u - ρ

atoms/unit cell

$$\rho = \frac{n A}{V_c N_A}$$

Atomic weight (g/mol)
(units = mass/volume)

Volume/unit cell
(cm³/unit cell)

Avogadro's number
(6.023 X 10²³ atoms/mol)

Example: Copper

from Table inside from cover of Callister (see next slide):

- crystal structure = FCC ⇒ 4 atoms/unit cell
- atomic weight = 63.55 g/mol (1 amu = 1 g/mol)
- Atomic radius R = 0.128 nm (1nm = 10⁻⁷ cm)

$$V_c = a^3 ; \text{ For FCC } \Rightarrow a = 4R / \sqrt{2} ; \Rightarrow V_c = 4.75 \times 10^{-23} \text{ cm}^3$$

Result: theoretical $\rho_{Cu} = 8.89 \text{ g/cm}^3$

actual: 8.94 g/cm³





M t ρ

$$\rho_{\text{metals}} \geq \rho_{\text{ceramics}} \geq \rho_{\text{polymers}}$$

Why?

Metals have...

- close-packing (metallic bonding)
- large atomic masses

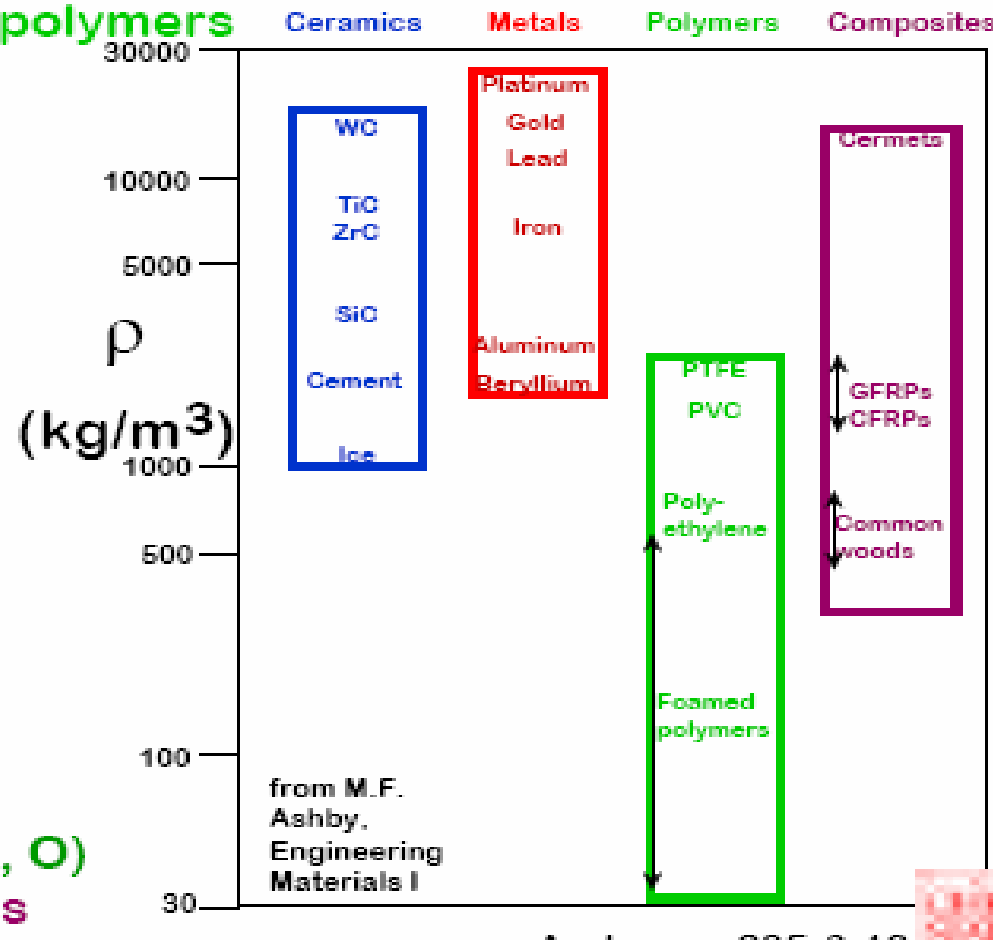
Ceramics have...

- less dense packing (covalent bonding)
- often lighter elements (oxygen, carbon)

Polymers have...

- poor packing (often amorphous)
- lighter elements (C, H, O)

Composites-average values



M t ρ



- ❖ M t theo hướng - linear density (LD)
- ❖ M t theo mặt - planar density (PD)

$$LD = \frac{\text{number of atoms centered on direction vector}}{\text{length of direction vector}} = \frac{S \text{ các nguyên tử trên cùng một vectơ hướng}}{\text{Chiều dài của vectơ hướng}}$$

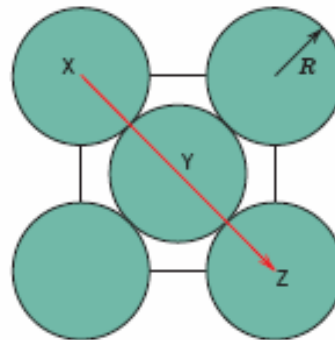
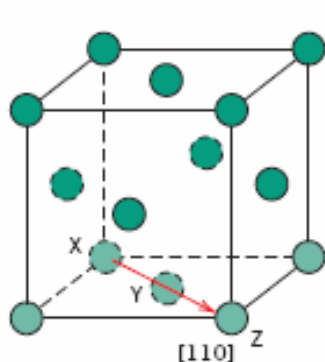
$$PD = \frac{\text{number of atoms centered on a plane}}{\text{area of plane}} = \frac{S \text{ các nguyên tử trên cùng một mặt}}{\text{Diện tích của mặt}}$$



Mật độ ρ

Mật độ theo hướng - linear density (LD) và mật độ theo mặt - planar density (PD)

Ví dụ: Xác định mật độ theo hướng $[110]$ của cấu trúc tinh thể FCC. Ô cơ bản của cấu trúc FCC (hình có các quai tụ như hình vẽ) và hướng $[110]$ chỉ ra trên hình vẽ. Trên hình vẽ mặt đáy của ô cơ bản có 5 nguyên tử; tia hướng $[110]$ là vectơ tâm của nguyên tử X qua nguyên tử Y và kết thúc tâm của nguyên tử Z. Theo số lượng các nguyên tử, cần xác định những nguyên tử chung với ô cơ bản. Mỗi nguyên tử góc X và Z là chung với ô cơ bản dọc theo hướng $[110]$ (tức là có 1,5 của mỗi nguyên tử đó là thuộc về ô cơ bản xét), trong khi nguyên tử Y nằm trọn vẹn trong ô cơ bản. Do đó, có 2 nguyên tử tương ứng dọc theo hướng vectơ $[110]$ trong ô cơ bản. Vậy, chiều dài của vectơ như hình vẽ là $4R$ (theo hình vẽ); \rightarrow mật độ nguyên tử theo hướng $[110]$ cho cấu trúc FCC là:



$$LD_{110} = \frac{2 \text{ atoms}}{4R} = \frac{1}{2R}$$

$$PD_{110} = \frac{2 \text{ atoms}}{8R^2\sqrt{2}} = \frac{1}{4R^2\sqrt{2}}$$



Các thông số cơ bản

Characteristics of Selected Elements (inside cover-Callister)

Element	Symbol	At. Weight (amu)	Density @20C g/cm ³	Crystal Structure @20C	Atomic radius (nm)
Aluminum	Al	26.98	2.71	FCC	0.143
Argon	Ar	39.95	-----	-----	-----
Barium	Ba	137.33	3.5	BCC	0.217
Beryllium	Be	9.012	1.85	HCP	0.114
Boron	B	10.81	2.34	Rhomb	-----
Bromine	Br	79.90	-----	-----	-----
Cadmium	Cd	112.41	8.65	HCP	0.149
Calcium	Ca	40.08	1.55	FCC	0.197
Carbon	C	12.011	2.25	Hex	0.071
Cesium	Cs	132.91	1.87	BCC	0.265
Chlorine	Cl	35.45	-----	-----	-----
Chromium	Cr	52.00	7.19	BCC	0.125
Cobalt	Co	58.93	8.9	HCP	0.125
Copper	Cu	63.55	8.94	FCC	0.128
Flourine	F	19.00	-----	-----	-----
Gallium	Ga	69.72	5.90	Ortho.	0.122
Germanium	Ge	72.59	5.32	Dia. cubic	0.122
Gold	Au	196.97	19.32	FCC	0.144
Helium	He	4.003	-----	-----	-----
Hydrogen	H	1.008	-----	-----	-----

Anderson 205-3-15



Tóm tắt về tính chất và cấu trúc tinh thể



- Atoms may pack in
 - periodic arrays (crystals)
 - nonperiodic (amorphous) structures
- Theoretical density can be calculated based on:
 - crystal structure
 - atomic radius
- The ranking of density generally follows...
 - metals: largest**
 - ceramics: intermediate**
 - polymers: smallest**
 - composites: intermediate**
- Single crystals: generally anisotropic.
- Polycrystals w/randomly oriented crystals: isotropic