

[www.mientayvn.com](http://www.mientayvn.com)

Dịch tiếng anh chuyên ngành khoa học tự nhiên và kỹ 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](http://www.mientayvn.com/chat_box_li.html)

TRƯỜNG ĐẠI HỌC QUỐC GIA THÀNH PHỐ HỒ CHÍ MINH

TRƯỜNG ĐẠI HỌC KHOA HỌC TÀI NGUYÊN

BOI MÔN VẬT LÝ CHẤT RẮN

---

BAI GIANG MÔN

# CÔ SÔU VẬT LÝ CHẤT RẮN

4 TÍN CHẾ (60 TIẾT: 45 TIẾT LÝ THUYẾT + 15 TIẾT BÀI TẬP)

CAI N BOI GIANG DAY: Ths. Vuõ Thò Phat Minh

GIANG TRINH SÖU DUING CHO MÔN HÖC: VẬT LÝ CHẤT RẮN

CUA TAC GIAI LE KHAC BINH - NGUYEN NHAT KHANH

---

# NOI DUNG MOAN HOIC

- I. TINH THEACHAT RAAN.
- II. LIEN KEAT TRONG TINH THEACHAT RAAN.
- III. DAO NONG MANG TINH THEA
- IV. TINH CHAT NHIEAT CUA CHAT RAAN.
- V. KHINIEAN TOUOIDO TRONG KIM LOAI.
- VI. NANG LOONG CUA NIEAN TOUOITRONG TINH THEACHAT RAAN.
- VII. CAIC CHAT BAN DAN NIEAN.

# CHÖÔNG I. TINH THỂ CHẤT RẮN

---

## A. LÝ THUYẾT

### Phần I. NHỮNG CÔNG VIỆC VỀ TINH THỂ

- I. CÁC TRẠNG THẠİ CƠ BẢN CỦA VẬT CHẤT TRONG TÖI NHİÊN.
- II. MẠİNG TINH THỂ

### Phần II. PHÂN TÍCH CẤU TRÚC TINH THỂ BẰNG PHÖÔNG PHÁP NHİỂU XẠ TIA X.

- I. CÔNG THÖC NHİỂU XẠ CỦA VULF – BRAGG
- II. CẤU PHÂN XẠ CỦA EWALD
- III. CÁC PHÖÔNG PHÁP CHỤP TINH THỂ BẰNG TIA X

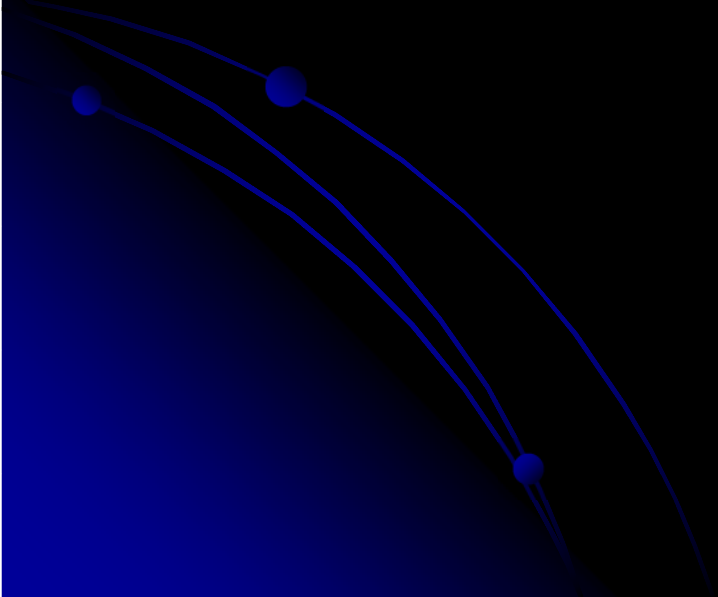
## B. BÀI TẬP

# Chương I - TINH THỂ CHẤT RẮN

## PHẦN I - NẪI CÔNG VỀ TINH THỂ

I. CÁC TRẠNG THẠÌ CƠ BẢN CỦA VẬT CHẤT TRONG TỒN NHIÊN.

II. MẠNG TINH THỂ



# I. CÁC TRẠNG THẠÌ CƠ BẢN CỦA VẬT CHẤT TRONG TỒI NHIÊN

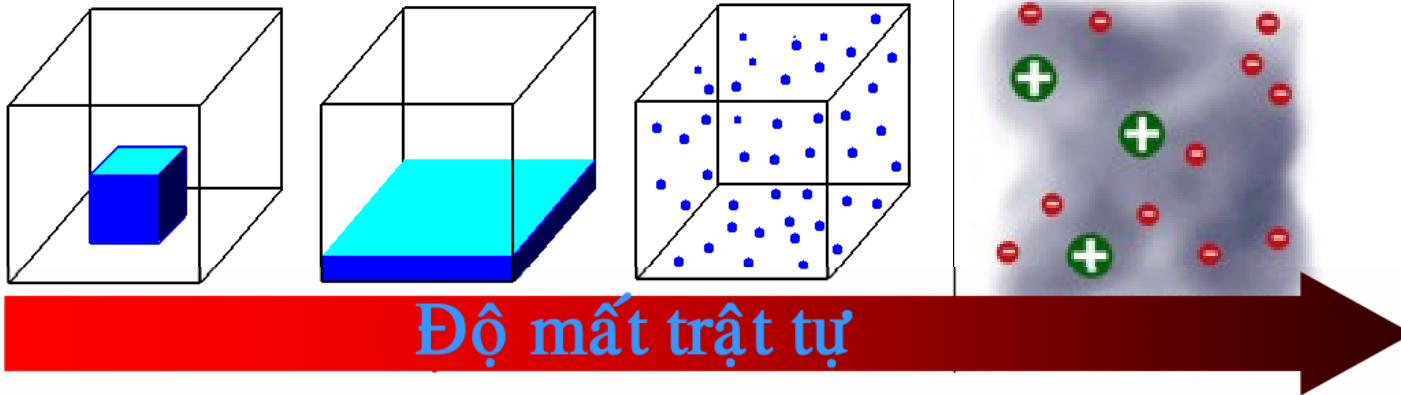
- Trong tời nhiên vật chất tồn tại döôi 3 trạng thạì cơ bản (các trạng thạì ngöng tui của vật chất):

RAÍN - LÖNG - KHÍ

Raín = Tinh thể + vô ñhình hình

- Cấu trúc :
  - Tinh thể: cấu trúc có ñoã trạì tời cao nhất.
  - Khí : cấu trúc hoàn toàn mất trạì tời.
  - Löng: phân tích cấu trúc bằng tia X, tia e<sup>-</sup> và nơtron với phương pháp chủ yếu của Debye và Laue ⇒ cấu trúc löng gần với tinh thể ñôn khí.

# Các trạng thái của vật chất



Theo  
RẮN

Theo  
LỎNG

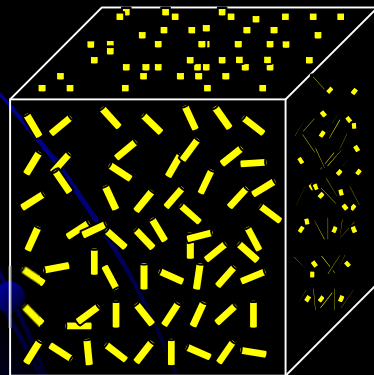
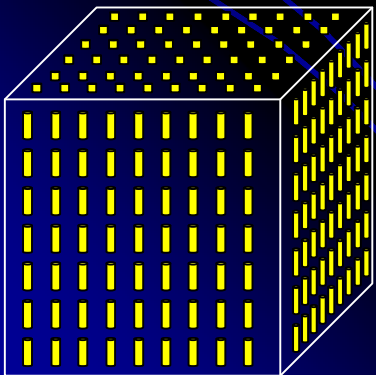
Theo  
KHÍ

Theo  
PLASMA

Tinh thể

Voãn hình

Chất lỏng



# MOẬT SỐ TÍNH THEÁT TRONG TÔI NHIÊN



Ñông



Thạch anh



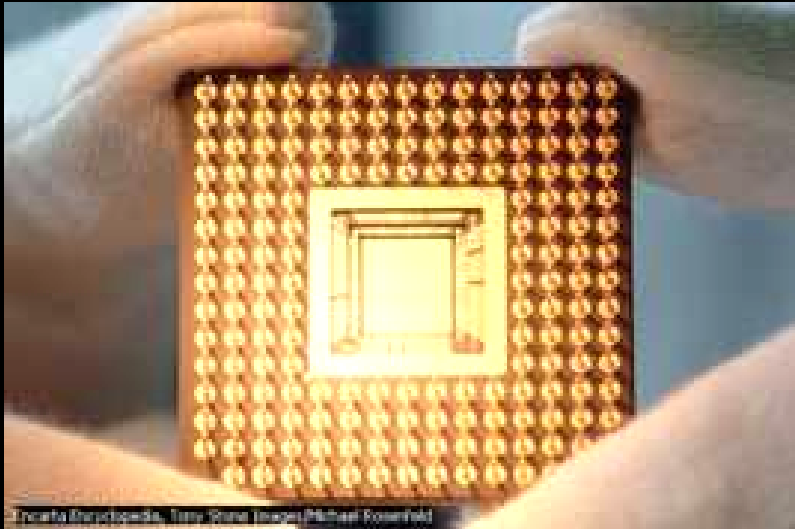
Kim công



Pyrite



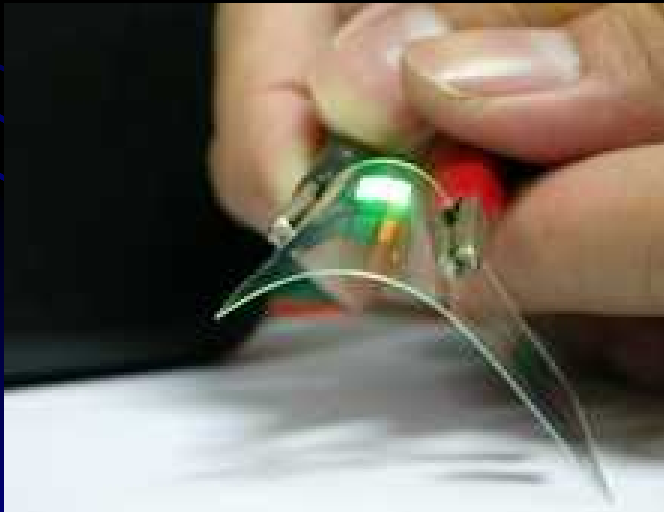
# MOẬT SỐ ỒNG DÙNG



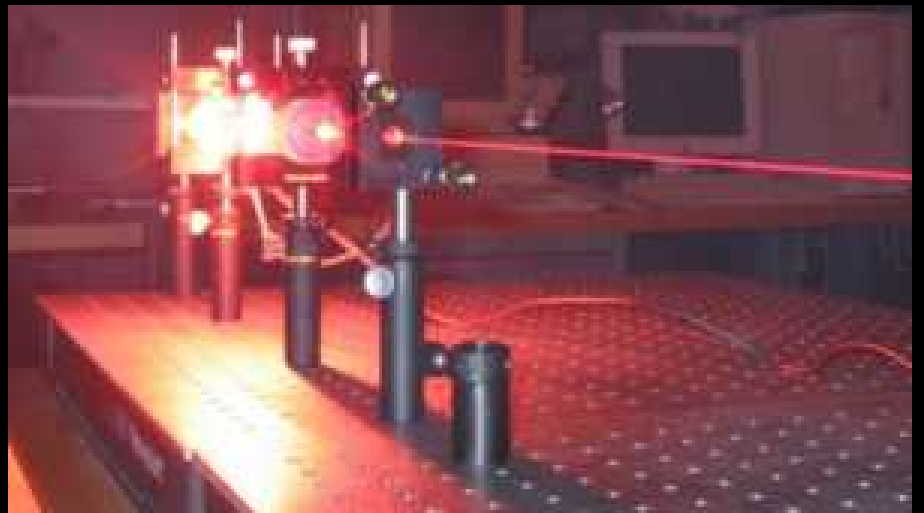
Bản dẫn



Sieù dẫn



Man hiên thò



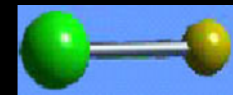
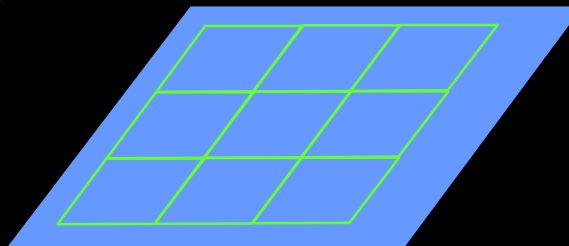
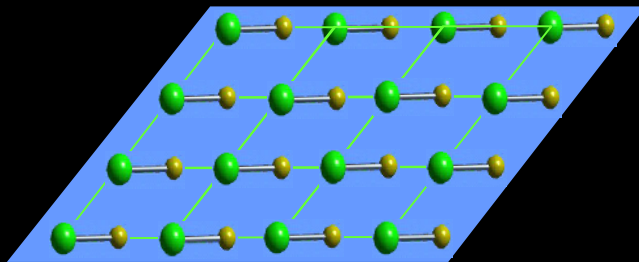
Laser

# II. MẠNG TINH THỂ

## A. CẤU TRÚC TINH THỂ

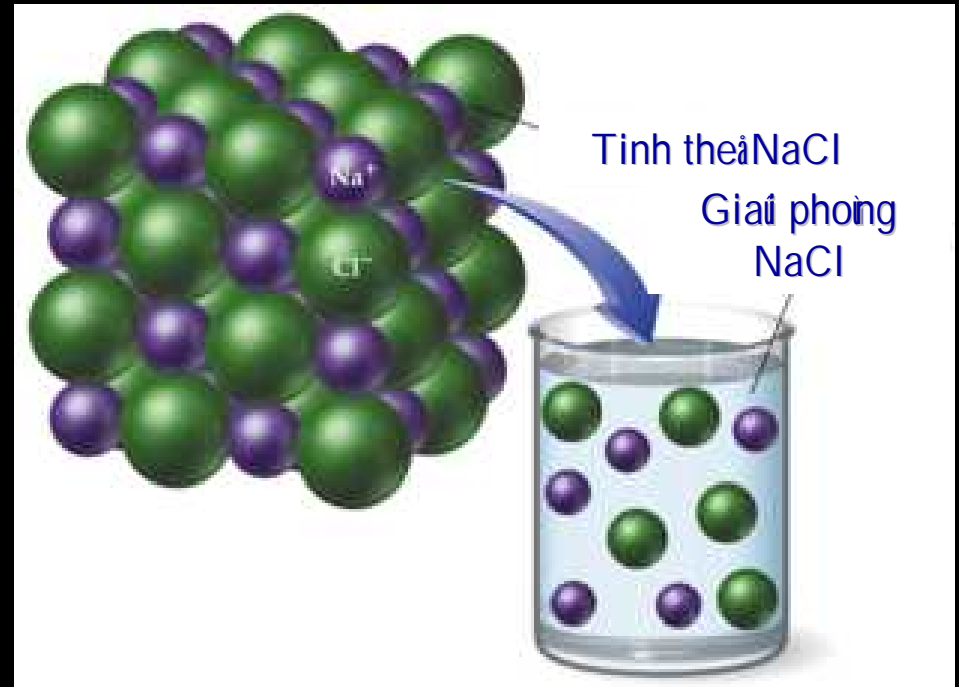
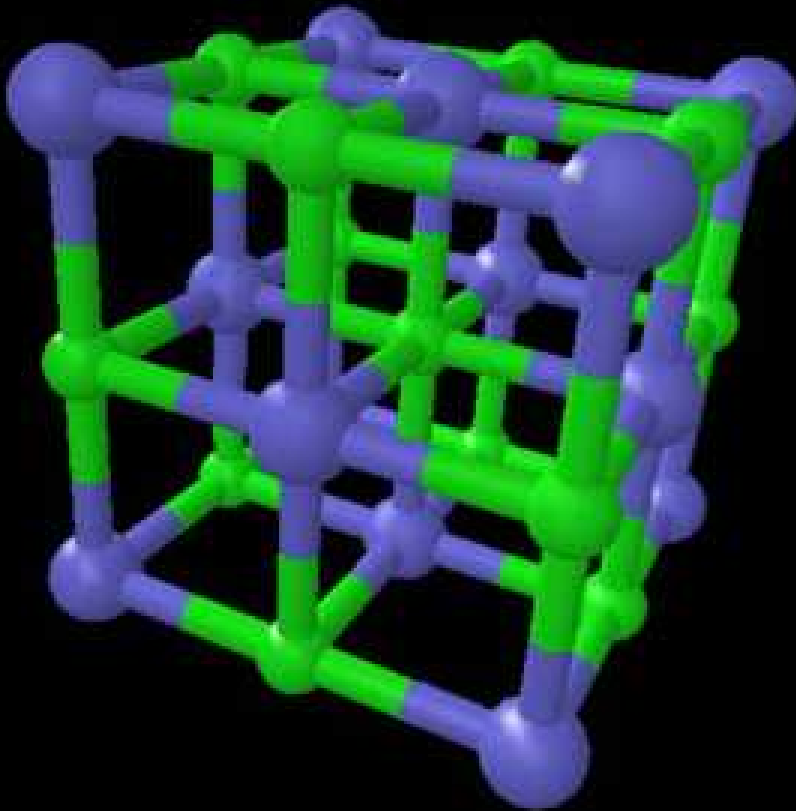
- Mạng tinh thể dùng mô tả cấu trúc tinh thể

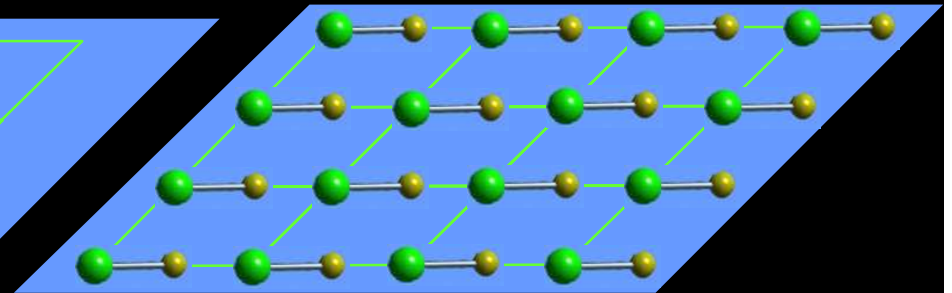
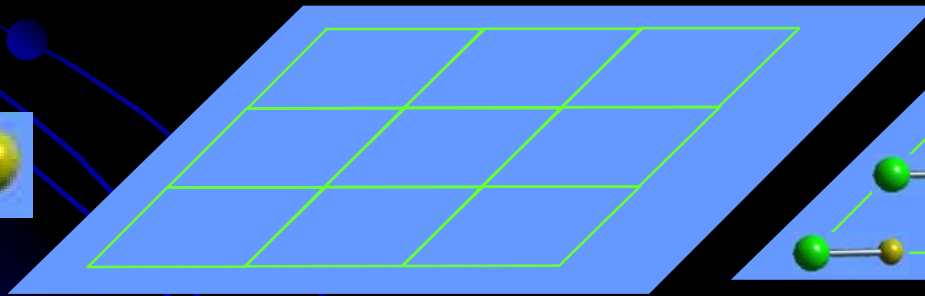
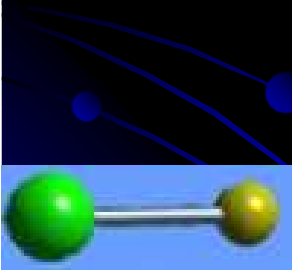
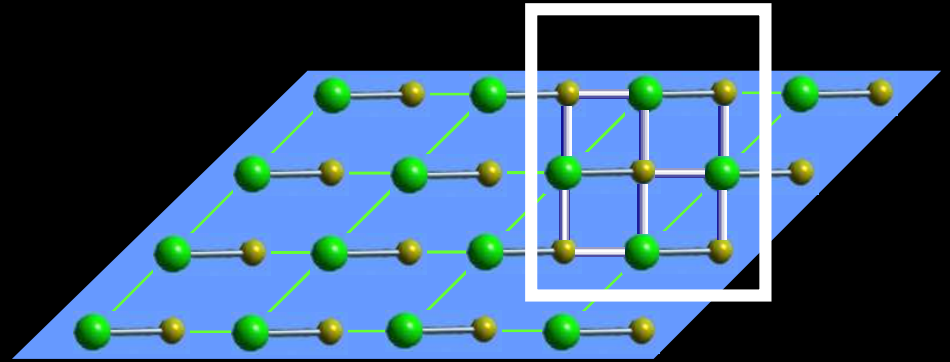
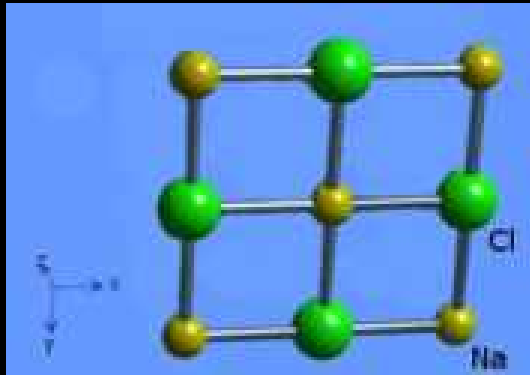
Cấu trúc tinh thể = mạng tinh thể + cô sô



- **Tinh thể lí tưởng** = sô sắp xếp đều đặn trong không gian các ãn và cấu trúc giống hệt nhau.
- **Ñôn và cấu trúc** = cô sô = một nguyên tử một nhóm nguyên tử hay các phân tử (có thể là hàng trăm nguyên tử hay phân tử VD: chất hữu cơ)

# MAIÑG TINH THEIÑ NaCl





C sôu + M<sub>1</sub> ng tinh thể = Cấu trúc tinh thể

# B- BI U DI N MAÏNG TINH THEA

## 1. TÍNH TUÀN HOAN MAÏNG

- Mọi nút của mạng đều suy ra 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 = Vectơ tịnh tiến cơ sở

$\vec{T}$  = vectơ tịnh tiến bất toàn mạng tinh thể

$n_1, n_2, n_3$  là những số nguyên hay phân số nào

Nếu  $n_1, n_2, n_3 =$  số nguyên thì

$\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$  là vectơ nguyên toạ

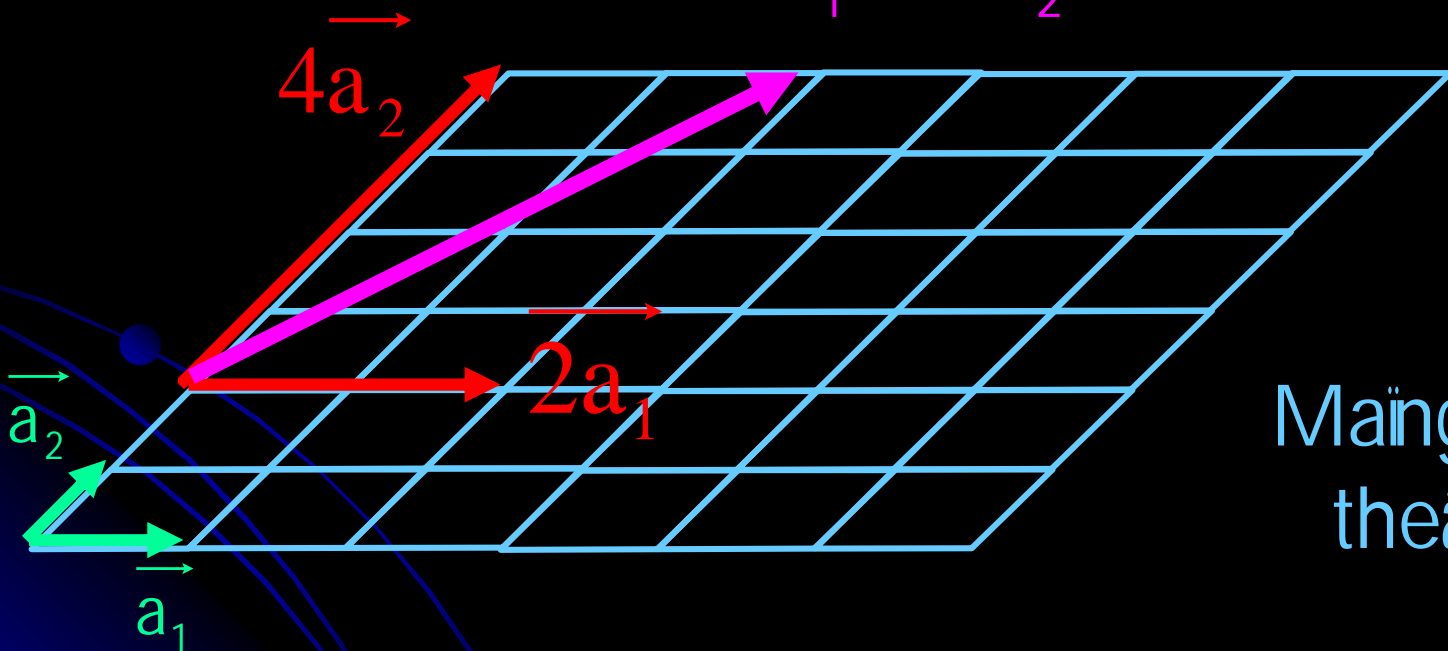
(hay vectơ cơ sở).

Nếu  $n_1, n_2, n_3 =$  phân số thì  $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$  là vectơ non vô.

# VECTƠ NGUYÊN TOÁ (VECTƠ CÔ SÔ)

$$n_1 = 2; n_2 = 4$$

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

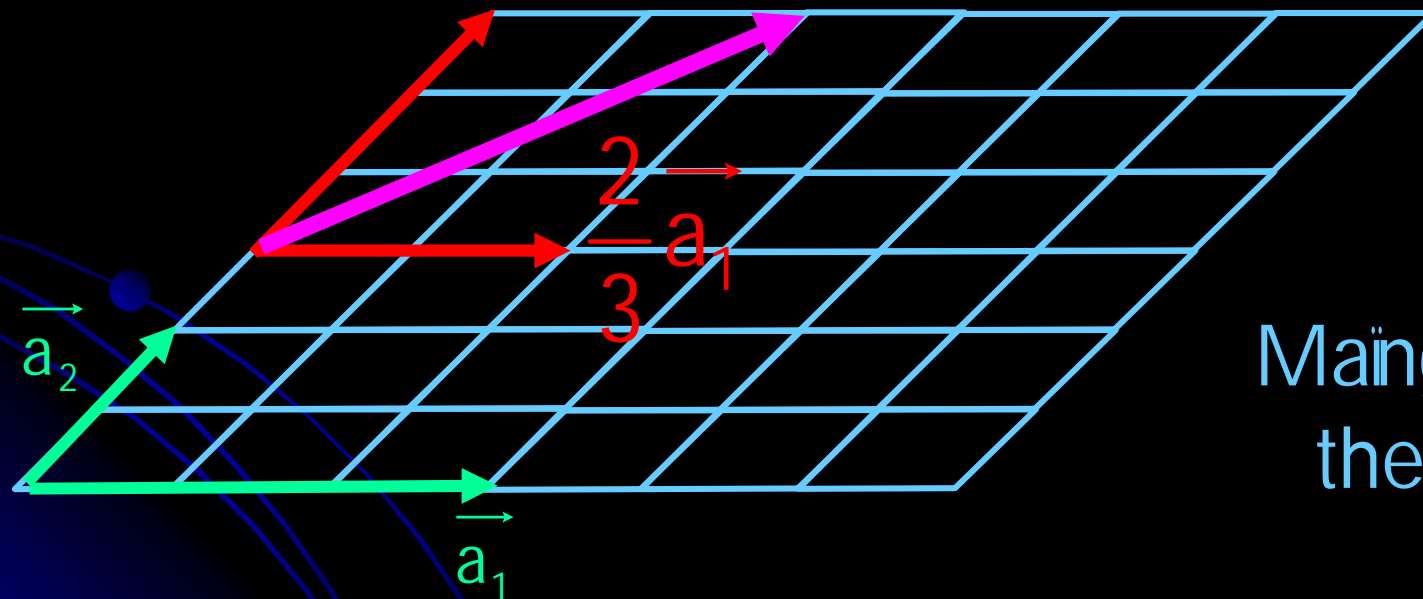


Mạng tinh  
thể 2D

# VECTƠ ÑÔN VÒ

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

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

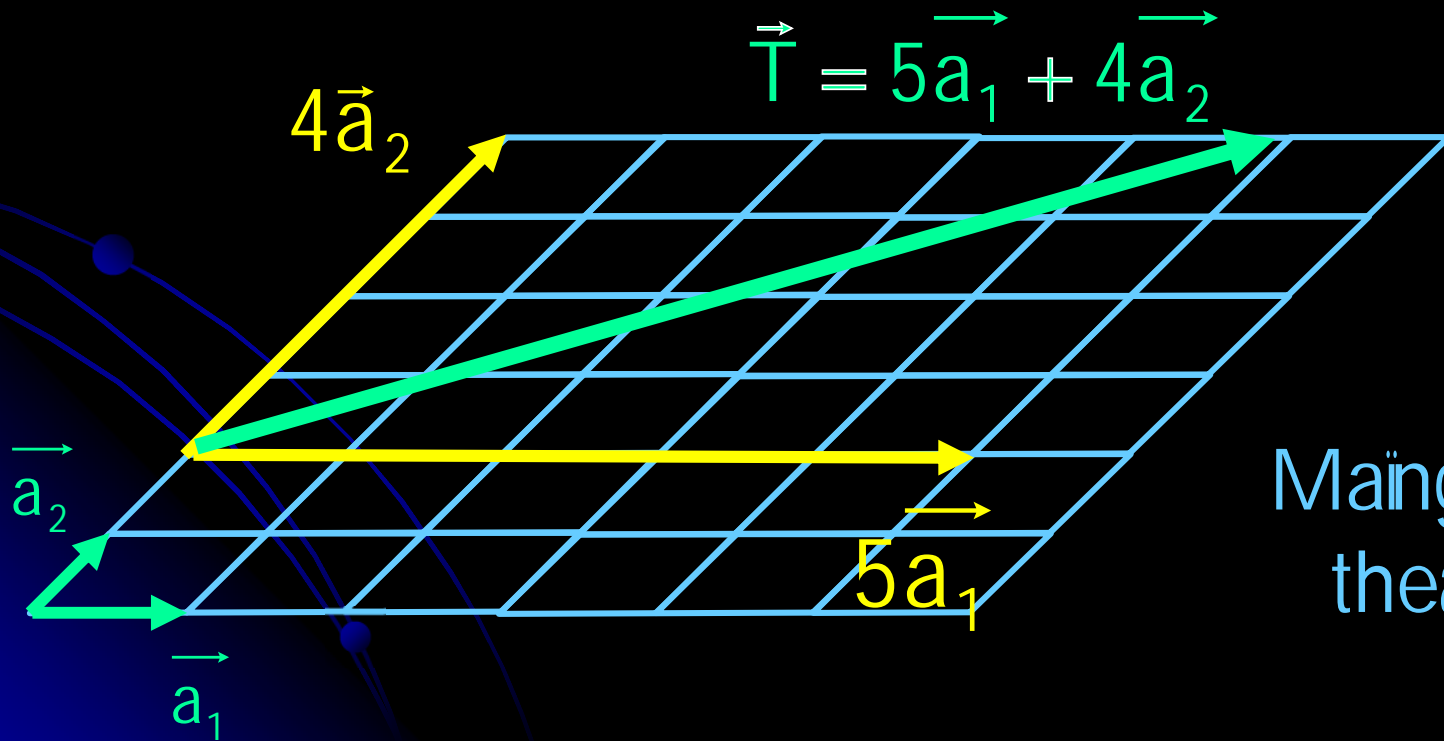


Maõng tinh  
thể 2D

# VECTÔ TỜNH TIẾN BẢO TOÁN MÃNG TINH THỂ

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

Vectô tờnh tiến cõ sũu  
(3D)

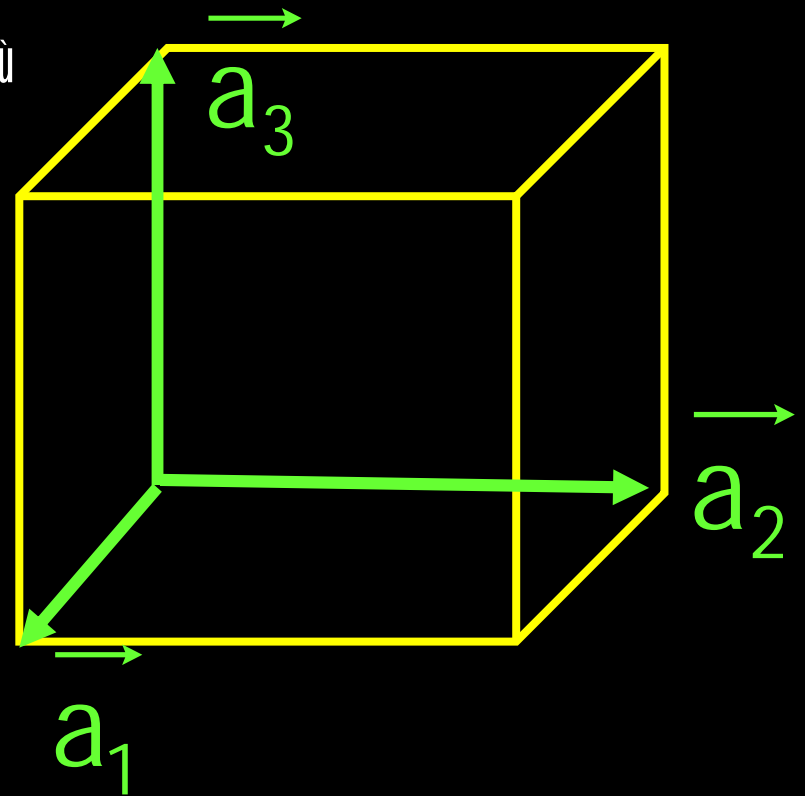


Maõng tinh  
thể 2D



## 2. ÔMẠNG TINH THỂ

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



- Có rất nhiều cách chọn  $a_1, a_2, a_3 \Rightarrow$  nhiều cách chọn ô mạng khác nhau.

# OÃN V

- OÃn v la oÃn oÃc xac ñnh tõ 3 vectô ñn v  $a_1, a_2, a_3$ .

- Theátích của oÃn v:

$$\mathbf{v} = \vec{a}_1 \cdot [\vec{a}_2 \times \vec{a}_3] = \vec{a}_2 \cdot [\vec{a}_3 \times \vec{a}_1] = \vec{a}_3 \cdot [\vec{a}_1 \times \vec{a}_2]$$

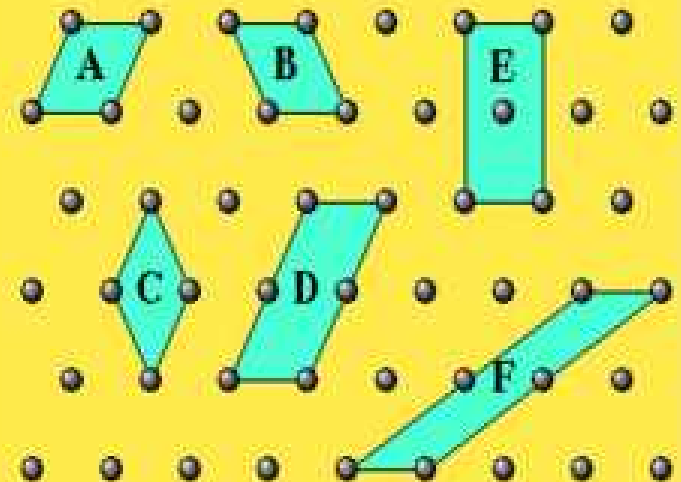
- OÃn v cũ theát chõa nhieu hõn một nút.

# OÃNGUYEÂN T

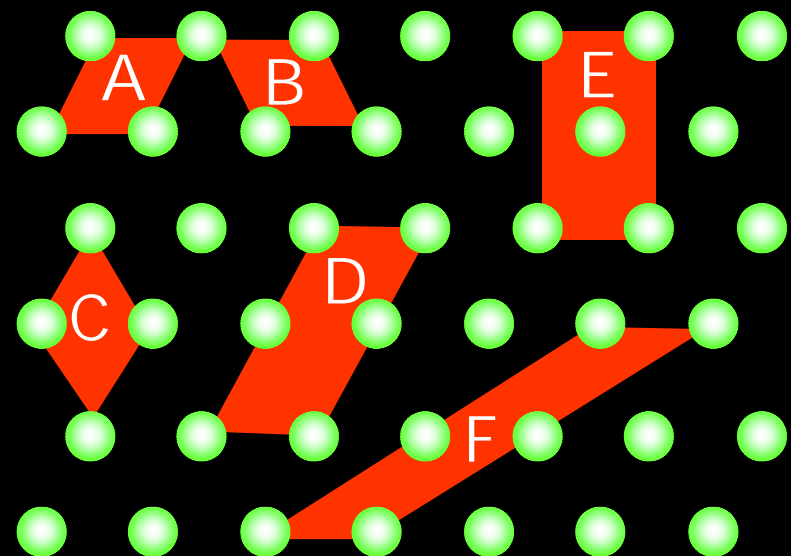
OÃnguyên toá la oÃn oÃc xac ñnh tõ 3 vectô nguyên toá  $a_1, a_2, a_3$ .

- OÃnguyên toá chæt chõa 1 nút mạng.

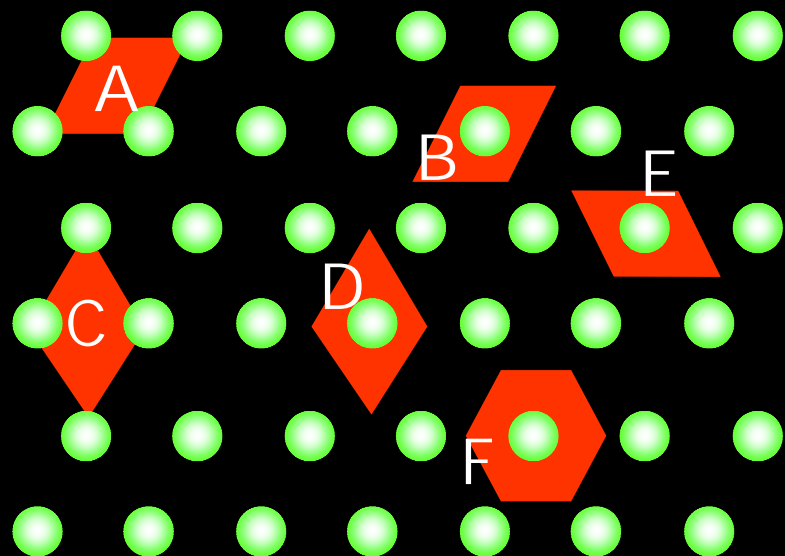
Unit cell choices



Một số cách chọn  
Ôñôn vò



Một số cách chọn  
ôñguyên toá



# OÂCÔ SÔÛ(OÂBRAVAIS)

Laøônguyên toáthoà mãĩ các ñieũ kieĩn :

- Cung heãvõĩ heãcuũ toan mãĩng (tõĩc heãtinh theã).
- Soãcaĩnh baĩng nhau vaøsoãgoĩc (giõũ các caĩnh) baĩng nhau cuũ oãmãĩng phãĩ nhiều nhaũ.
- Neũ coũgoĩc vuõĩng giõũ các caĩnh thì soãgoĩc ñõũphãĩ nhiều nhaũ.
- Sau khi thoã mãĩ các ñieũ kieĩn treĩn, thì phãĩ thoã mãĩ ñieũ kieĩn theãtĩch oãmãĩng laønhõũnhaũ.

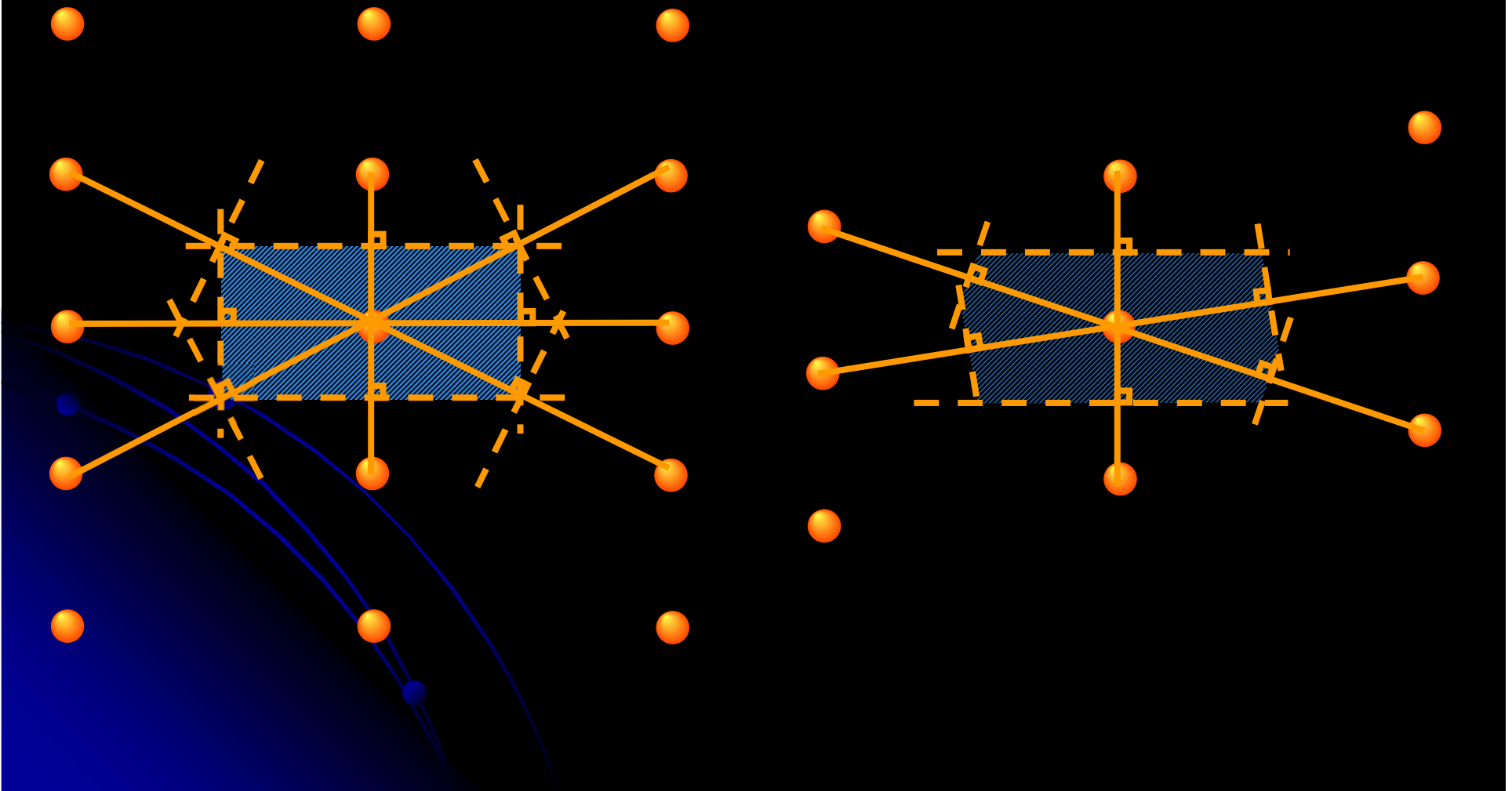
# OÂWIGNER – SEITZ

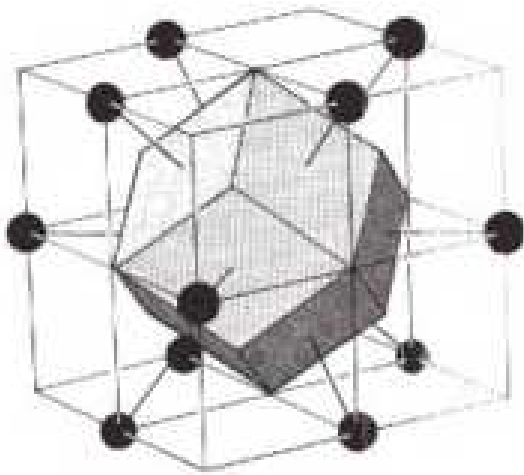
OÂWigner – Seitz là một nguyên toán học về sao cho nút mạng nằm ở tâm ô

- 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 đoạn thẳng bằng nhau.
  - Vẽ các mặt phẳng trung trực của các đoạn thẳng nối ta thu được hình một thể nhất  $\Rightarrow$  đó là một miền không gian kín bao quanh O.
  - Tương tự, từ O nối với các nút lân cận tiếp theo và vẽ các mặt phẳng trung trực của các đoạn thẳng nối ta thu được hình một thể hai.
  - Nếu hình một thể hai nằm ngoài miền không gian bao bởi hình thể nhất, tức hình thể nhất xác định miền thể tích nhỏ nhất vào đó là ô Wigner – Seitz.
  - Ngược lại, thì ô Wigner – Seitz được xác định hình thể nhất của hai loại mặt sao cho ô thể tích nhỏ nhất.

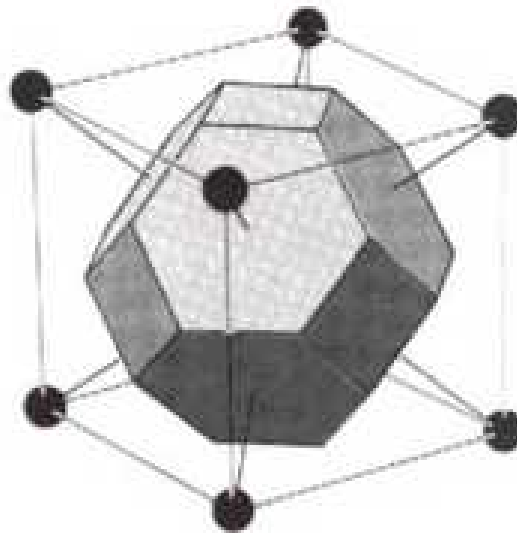
# CÁCH VẼ Ô WIGNER – SEITZ CHO MẠNG 2 CHIỀU

---

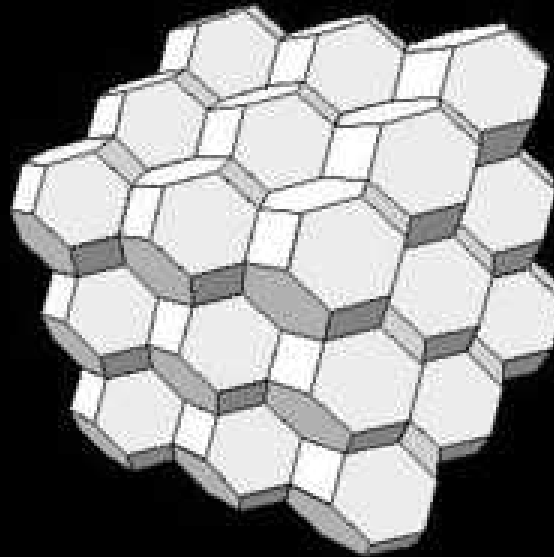
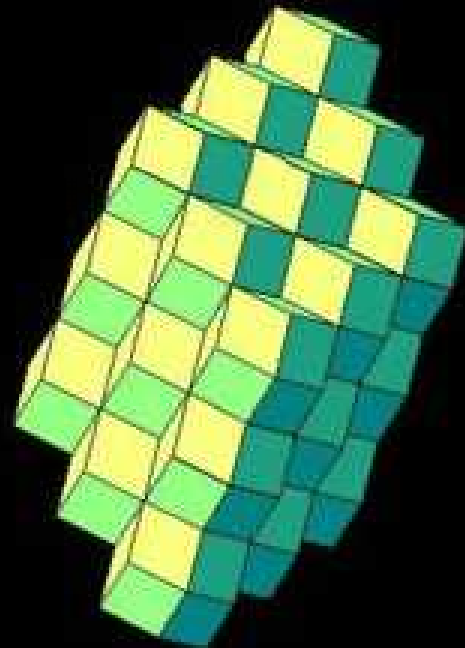




O<sup>^</sup>Wigner-Seitz của mạng lập phương tâm mặt



O<sup>^</sup>Wigner-Seitz của mạng lập phương tâm khối



O<sup>^</sup>Wigner-Seitz của mạng lập phương

### 3. SƠ LƯỢC XÖÔNG CỦA MĂNG TINH THỂ

#### a. YẾU TỐ SƠ LƯỢC XÖÔNG

Phương pháp biến đổi không gian làm cho măng tinh thể trung tâm với chính nó gọi là yếu tố sơ lược xöông.

#### b. CÁC LOẠI YẾU TỐ SƠ LƯỢC XÖÔNG

- Phương trình tiến bản toán măng T.
- Mặt phẳng sơ lược xöông P (m).
- Tâm sơ lược xöông C.
- Trục sơ lược xöông  $L_n$



# PHEP TONH TIEN BAU TOAN MAING

Khi tonh tien tinh theani mot vecto  $\vec{T}$

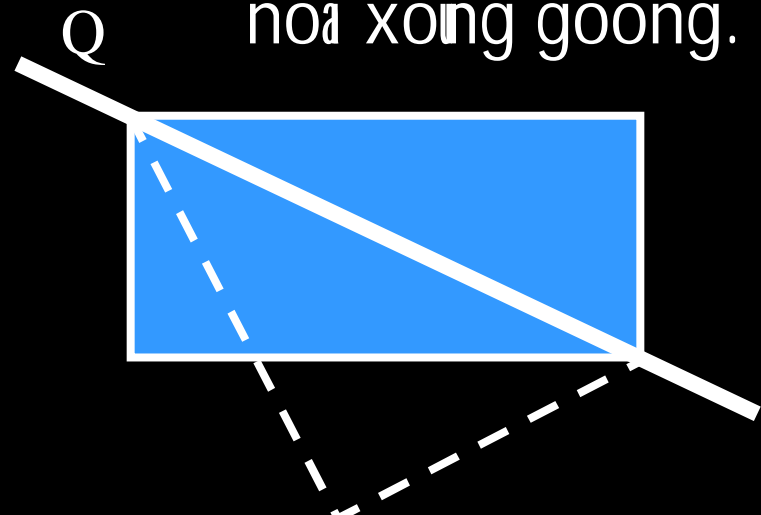
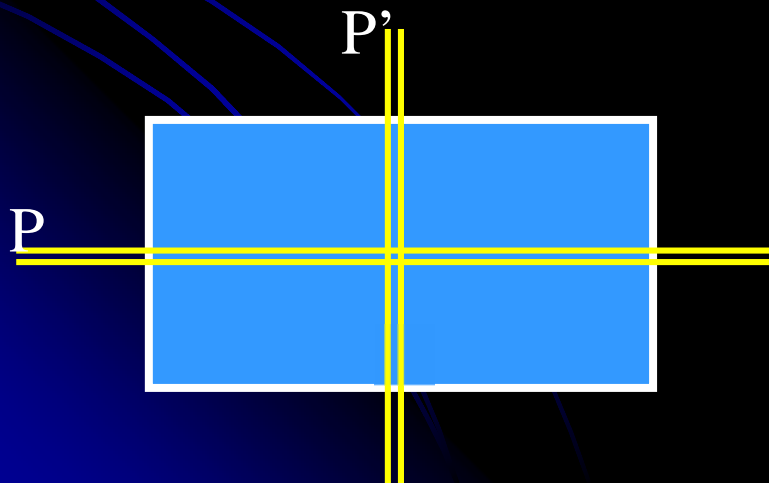
thi tinh theatrong lai voi ching noi

## MAIT NOA XONG GONG P (m)

Mat phang chia tinh thealam hai phan bang nhau voi  
nien kien phan nay no anh cua phan kia qua mat  
gong nat tai P.

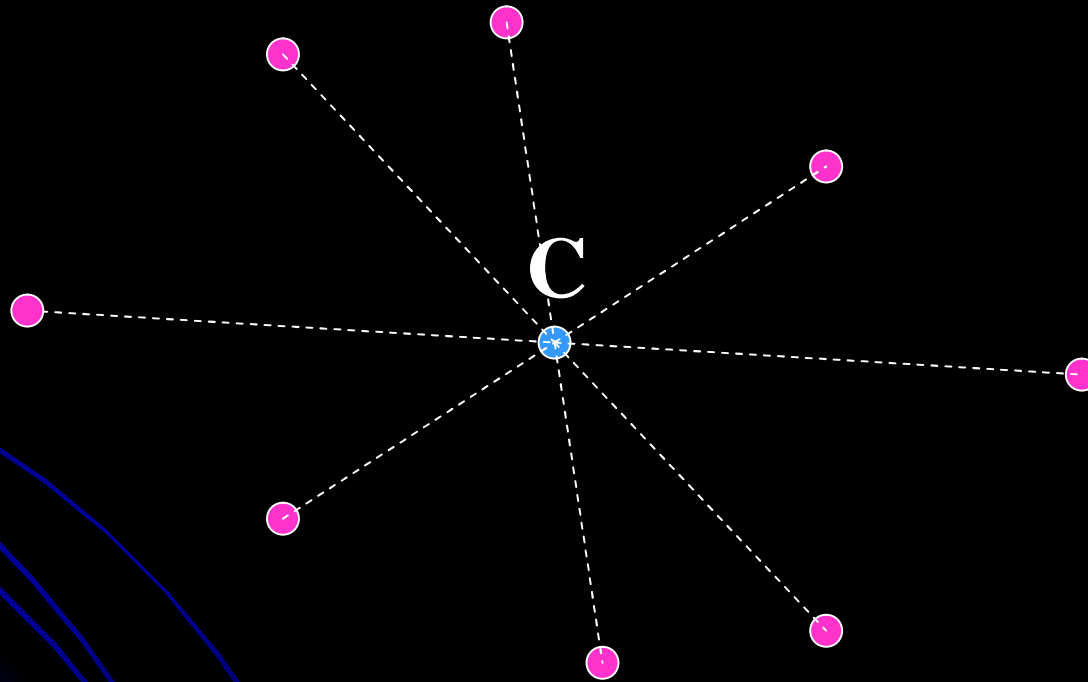
P, P': mat noa xong gong.

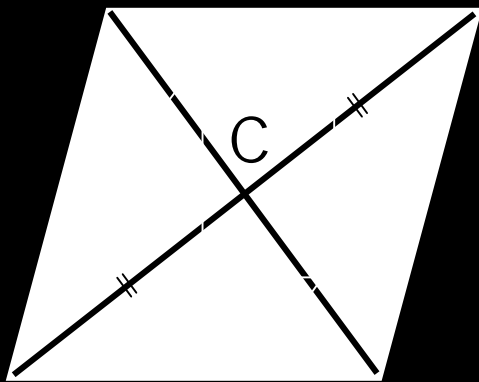
Q : khong phai mat  
noa xong gong.



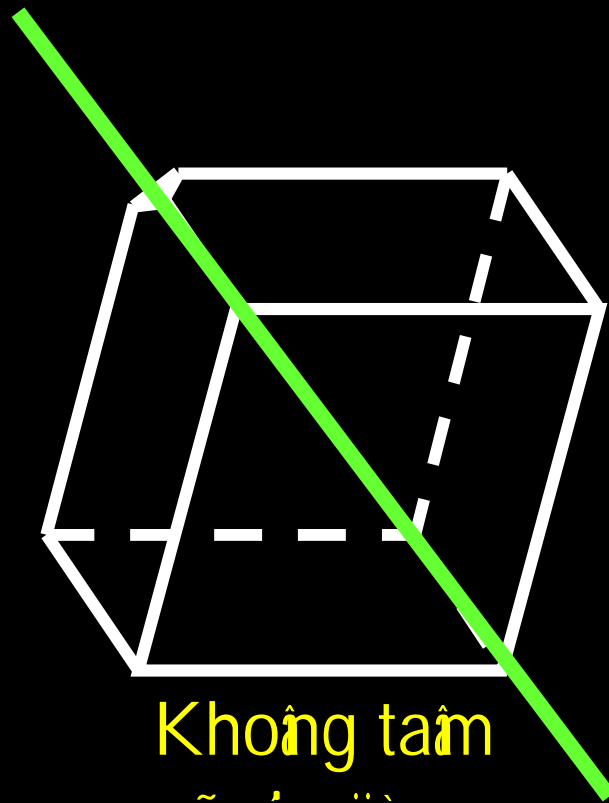
# TÂM NỘI XÖÔNG $C = \bar{1}$

Là một ñiểm  $C$  nằm bên trong tinh thể có ñể tính một phần tử bất kỳ trong tinh thể qua ñường nối ñiểm ñó với  $C$ .

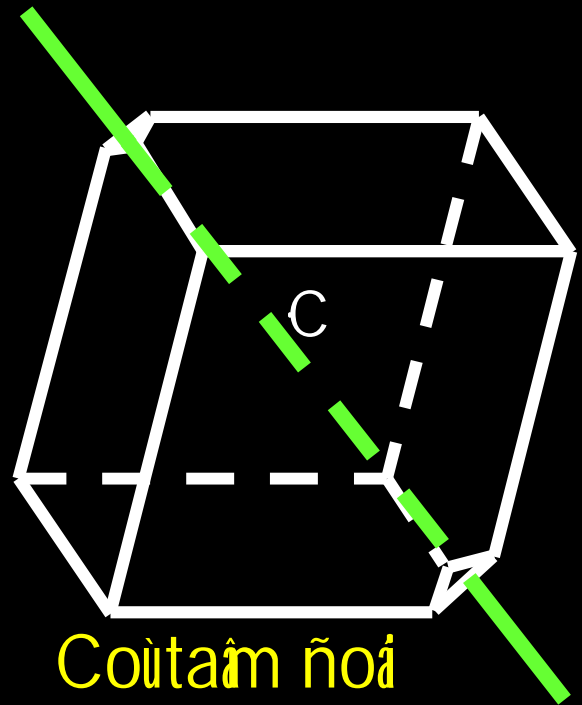




Có tâm đối xứng



Không tâm đối xứng



Có tâm đối xứng

# TRỤC NỐI XÒNG XOAY $L_n$

➤ Trục nối xòng là một ñông thẳng khi quay quanh ñi trục ñi trung với chính ñi

➤ Góc ñi  $\alpha$  ñi ñi trung với chính ñi ñi góc xoay ñi của trục.

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

với  $n$  ñi của trục.

- Nguyên ñi hay ñi ñi riêng ñi = 1, 2, 3 ... ñi ñi.

- Trong ñi ñi = 1, 2, 3, 4, 6.

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

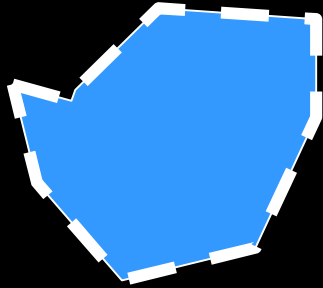
$$L_2 : \alpha_2 = 360^\circ / 2 = 180^\circ$$

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

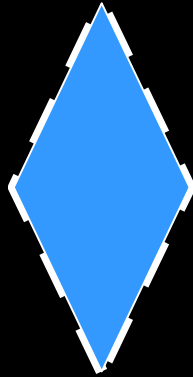
$$L_4 : \alpha_4 = 360^\circ / 4 = 90^\circ$$

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

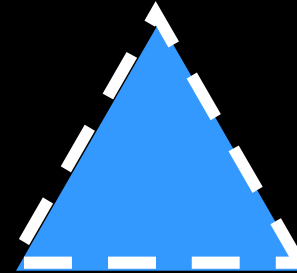
# Các trục đối xứng



Trục bậc 1  
( $360^\circ$ )



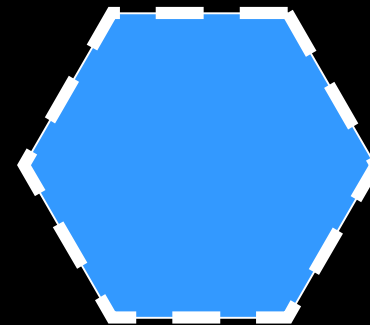
Trục bậc 2  
( $180^\circ$ )



Trục bậc 3  
( $120^\circ$ )



Trục bậc 4 ( $90^\circ$ )



Trục bậc 6 ( $60^\circ$ )

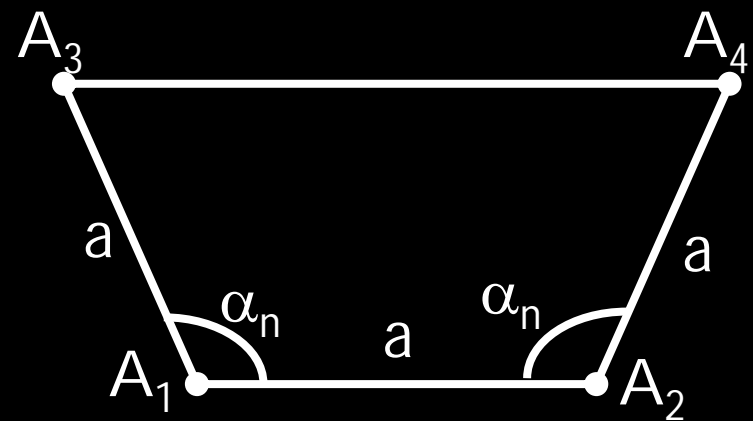
# ÃỒNH LYÙ

Trong tinh thể ch¸c c¸c tr¸c ñ¸ x¸ng b¸c 1, 2, 3, 4, 6  
(do t¸nh ch¸t t¸nh ti¸n tu¸n ho¸n c¸a m¸ng kh¸ng gian)

## CH¸NG MINH

X¸t m¸t nút m¸ng  $A_1$ , qua  
ph¸p t¸nh ti¸n m¸t ñ¸o¸n  $a$   
ta suy ñ¸¸c nút  $A_2$ .

Sau ñ¸¸i¸p d¸ng ph¸p quay  
qu¸nh m¸t tr¸c ñ¸¸ x¸ng  
 $L_n$ , ta suy ñ¸¸c 2 nút  $A_3$  v¸  
 $A_4$  nh¸ 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:

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

Từ (1) và (2) suy ra:

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

Suy ra:

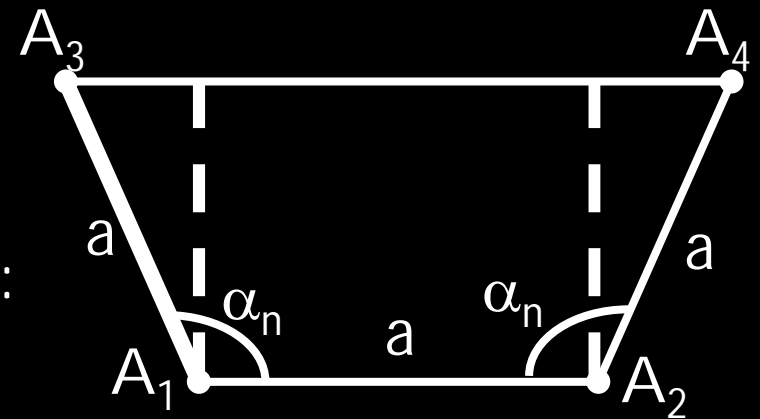
$$-1 \leq \cos \alpha_n = (1 - k)/2 \leq 1$$

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

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

Do ãn

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



Hình 1.3

## TRỤC ÑOÁ XỜNG NGHỊCH ÑAÙ $L_{in}$

- Trục ñoá xờng nghịch ñaù (trục nghịch ñaù)  $L_{in} = \bar{n}$
- Ñoù là một ñông thẳng mà tinh thể sau khi quay quanh ñoù một góc  $\alpha_n$  rồi cho ñoá xờng ñiểm chính giữa của tinh thể thì tinh thể trở lại vị trí tổng thể với vị trí ban đầu.

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

- Các loại trục nghịch ñaù :

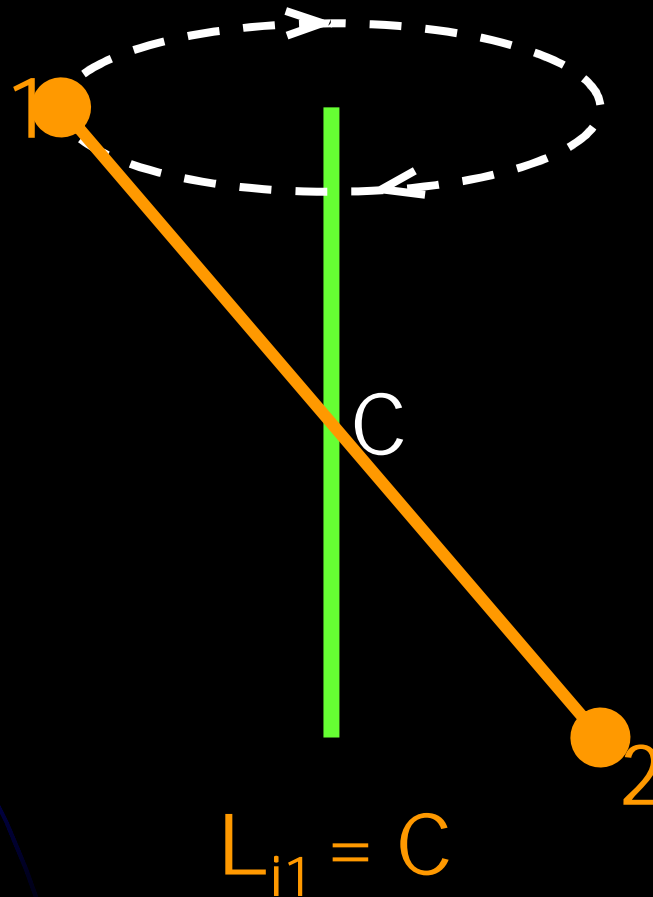
$$L_{i1} = C, L_{i2} = P, L_{i3} = L_3 C, L_{i6} = L_3 P \text{ và } L_{i4}.$$

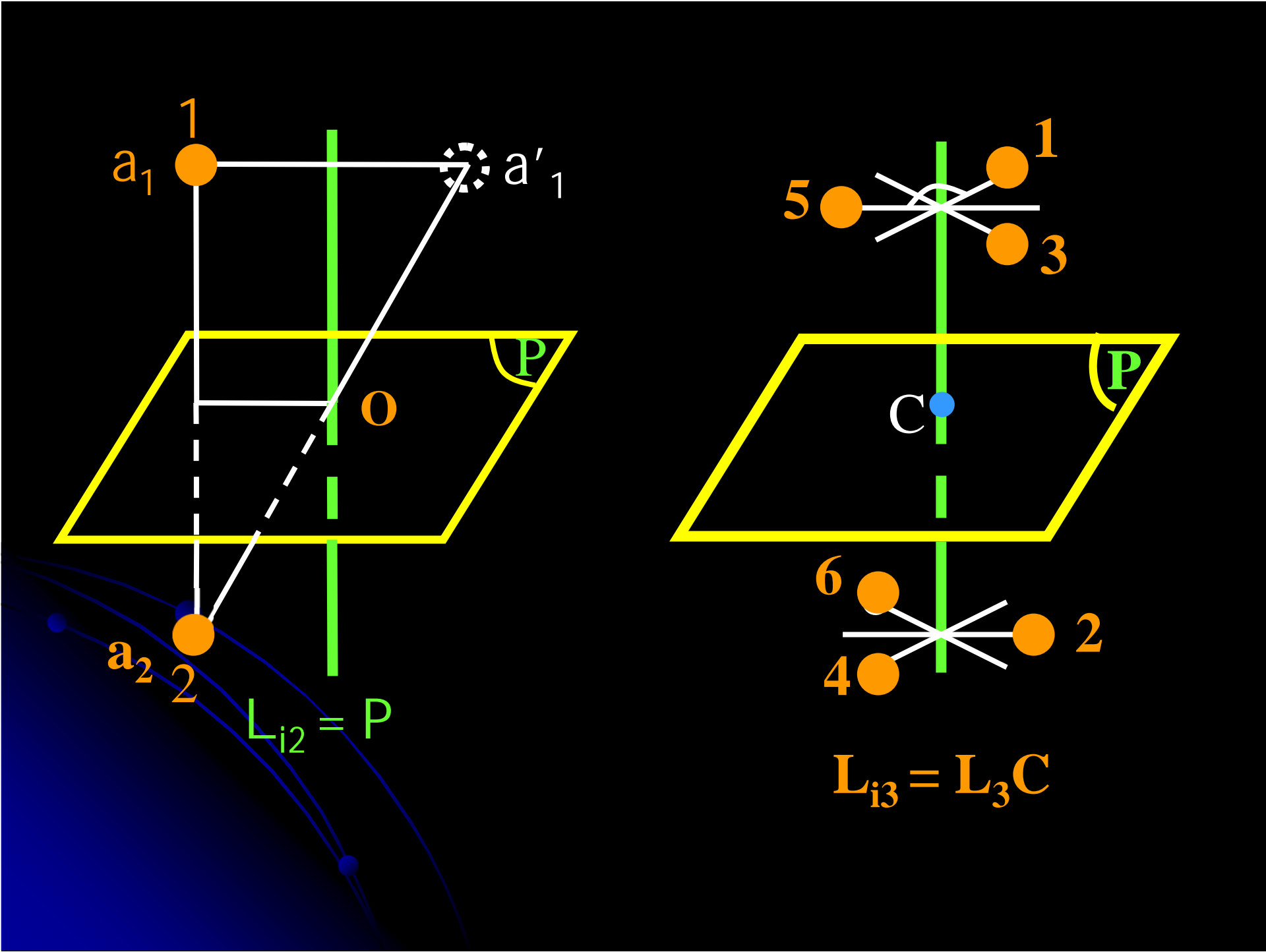
- Tóm lại, trong tinh thể vô môcù thể thấy các yếu tố ñoá xờng sau :  $C, P, L_1, L_2, L_3, L_4, L_6, L_{i4}, L_{i6}$ .

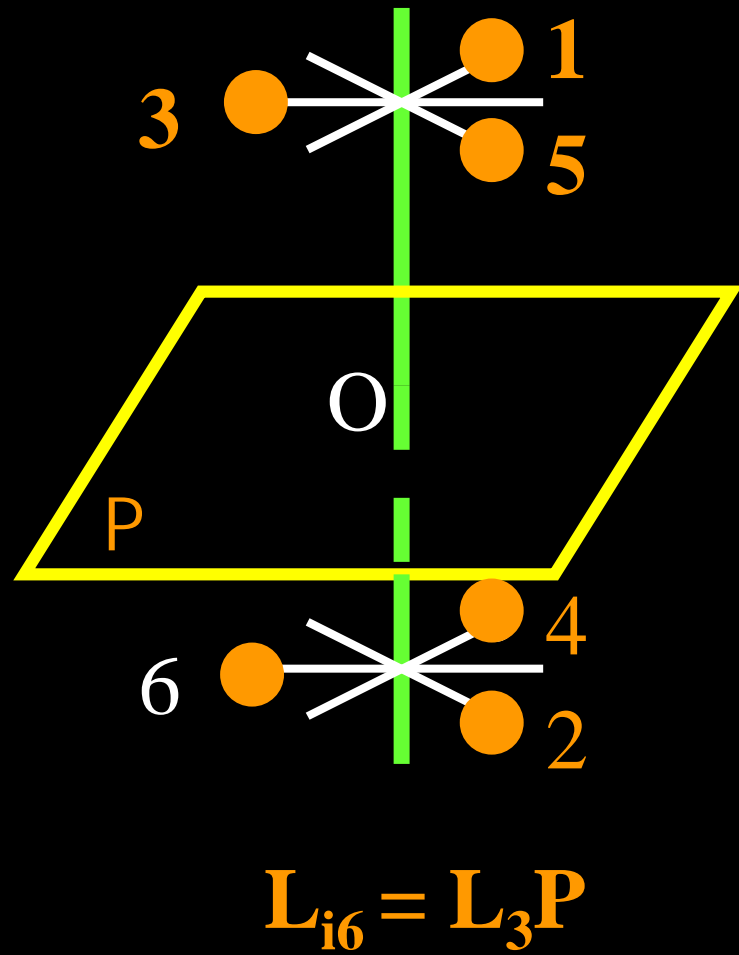
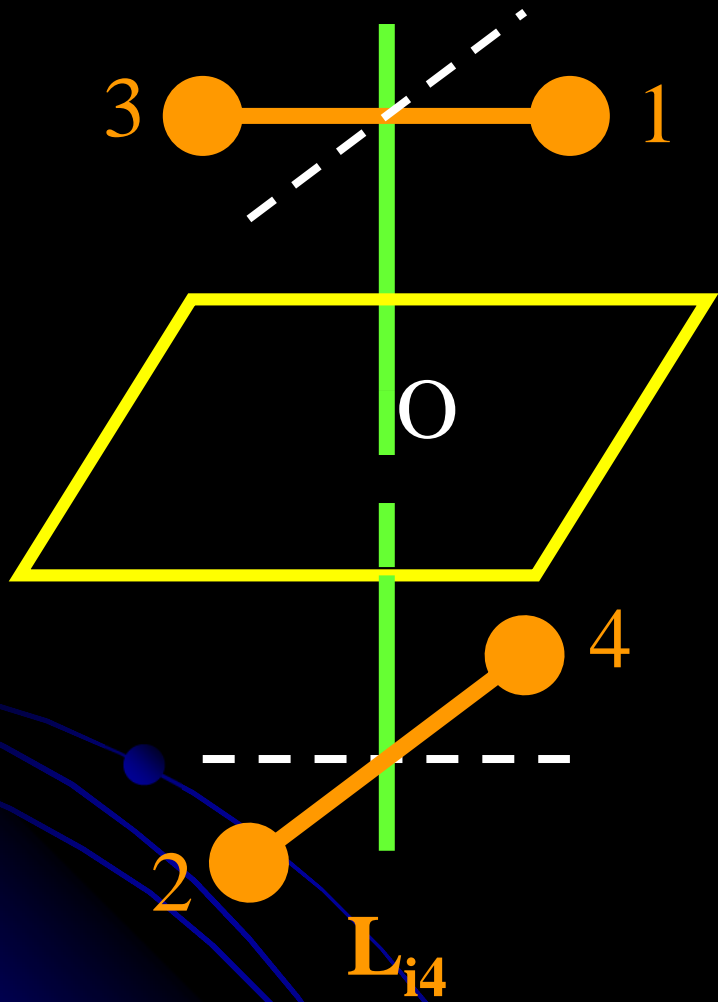


# TÂM NGHỊCHÃI 1

Phep ñoá xöing qua tâm ñoá xöing C töông ñöông vöi phep quay möt goic 360<sup>0</sup> quanh möt trục ñi qua C + phep ñoá xöing qua C  $\Rightarrow$  Tâm nghöch ñaü.







## 4. HÀNG – HẸTINH THEẢ

### NHOÌM ÑIẾM

Tập hợp các yếu tố nào cũng gồm tâm nào cũng, mặt phải nào cũng và các trục nào cũng có mặt trong một tinh thể

⇒ **nhóm nào cũng điểm.**

Có 32 nhóm điểm

## 7 HẸ – 3 HÀNG TINH THEẢ

Heả nghiêng - Heả một nghiêng - Heả trục thoi - Heả ba phương - Heả bốn phương - Heả sáu phương - Heả lập phương.

- **Hàng thấp:** heả nghiêng, heả một nghiêng, heả trục thoi.
- **Hàng trung:** heả ba phương, heả bốn phương, heả sáu phương.
- **Hàng cao:** heả lập phương.

Nếu kết hợp thêm phép tịnh tiến vào toán mạng thì ta có nhóm nào cũng không gian. Có 230 nhóm không gian.

# 5. CÁC LOẠI MÃNG CÔ BÀN (MÃNG BRAVAIS)

## a. Ô MÃNG 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 ômaing Bravais

- Trường hợp 3 chiều  $\Rightarrow$  14 kiểu ômaing Bravais.
- Trường hợp 2 chiều  $\Rightarrow$  5 kiểu ômaing Bravais.

## Các loại ômaing Bravais

- Loại nguyên thủy (ký hiệu P).

Nút mạng chæ phân bố ôvò trí của ômaing.

- Loại tâm ãy (A, B, hay C).

- Nút mạng phân bố ôvò trí ãy + tâm của hai ãy nào ãy của ômaing.

- Loại tâm khối I.

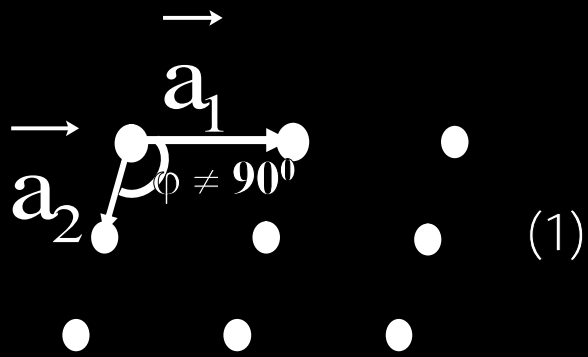
Nút mạng phân bố ôvò trí ãy + tâm của tâm của ô cô sô.

- Loại tâm mặt F

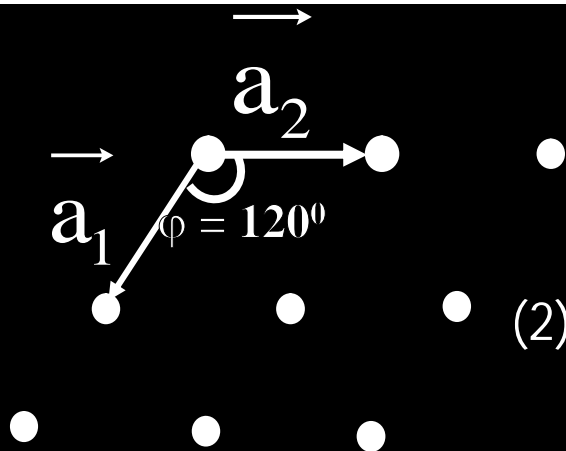
Nút mạng phân bố ôvò trí ãy + tâm của các mặt.

# 5 KIỂU MẠNG BRAVAIS 2 CHIỀU

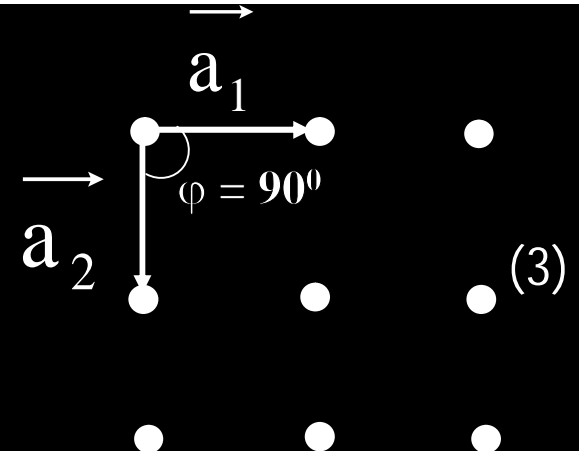
Mạng	Điều kiện của ô mạng
Mạng nghiêng (1)	$a_1 \neq a_2, \varphi \neq 90^\circ$
Mạng lục giác (2)	$a_1 = a_2, \varphi = 120^\circ$
Mạng vuông (3)	$a_1 = a_2, \varphi = 90^\circ$
Mạng chữ nhật (4) Mạng chữ nhật tâm (5)	$a_1 \neq a_2, \varphi = 90^\circ$



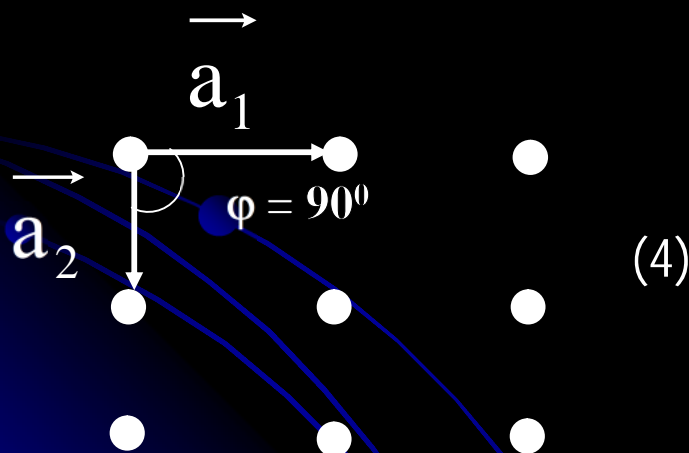
Ma $\grave{n}$ g nghi $\acute{e}$ ng  
 $a_1 \neq a_2, \varphi \neq 90^\circ$



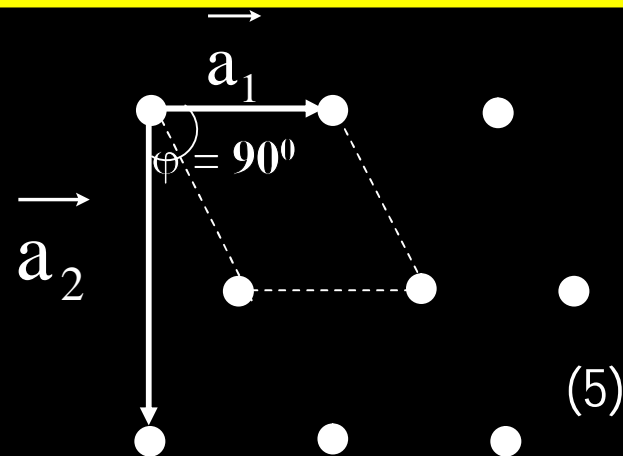
Ma $\grave{n}$ g lục gi $\acute{a}$ c  
 $a_1 = a_2, \varphi = 120^\circ$



Ma $\grave{n}$ g vu $\acute{o}$ ng  
 $a_1 = a_2, \varphi = 90^\circ$



Ma $\grave{n}$ g ch $\acute{o}$ nh $\grave{a}$ t  
 $a_1 \neq a_2, \varphi = 90^\circ$



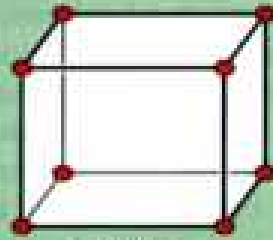
Ma $\grave{n}$ g ch $\acute{o}$ nh $\grave{a}$ t t $\grave{a}$ m m $\grave{a}$ t  
 $a_1 \neq a_2, \varphi = 90^\circ$



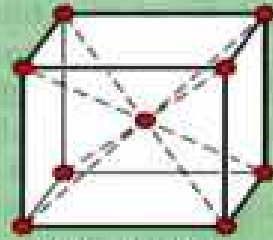
# 14 KIỂU MẠNG BRAVAIS 3 CHIỀU

Hệ tinh thể	Trục nối xông	Kiểu mạng Bravais	Điều kiện của ô mạng Bravais
Ba nghiêng	$L_1$	P	$a_1 \neq a_2 \neq a_3, \alpha \neq \beta \neq \gamma$
Một nghiêng	$L_2$	P, C	$a_1 \neq a_2 \neq a_3, \alpha = \beta = 90^\circ \neq \gamma$
Trực thoi	$3L_2$	P, C, I, F	$a_1 \neq a_2 \neq a_3, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
Ba phương	$L_3$	P	$a_1 = a_2 = a_3, \alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$
Bốn phương	$L_4$	P, I	$a_1 = a_2 \neq a_3, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
Sáu phương	$L_6$	P	$a_1 = a_2 \neq a_3, \alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$
Lập phương	$4L_3$	P, F, I	$a_1 = a_2 = a_3, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$

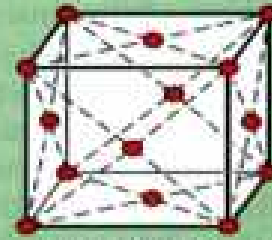
Cubic



Simple

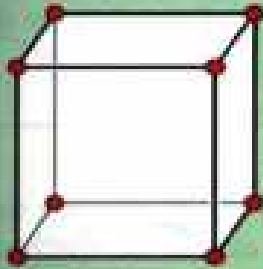


Body-centered

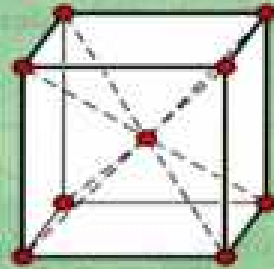


Face-centered

Tetragonal

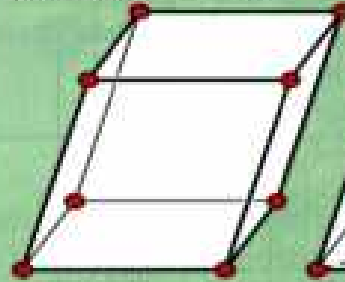


Simple

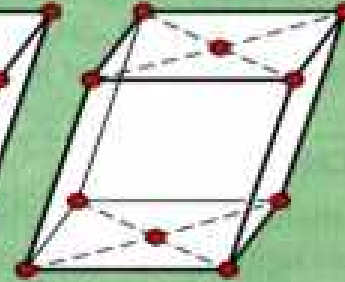


Body-centered

Monoclinic

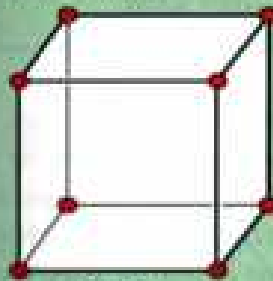


Simple

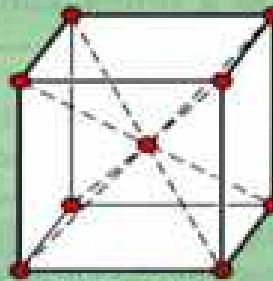


End-centered

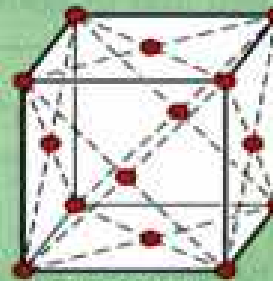
Orthorhombic



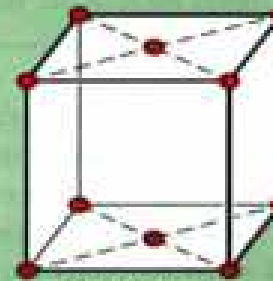
Simple



Body-centered

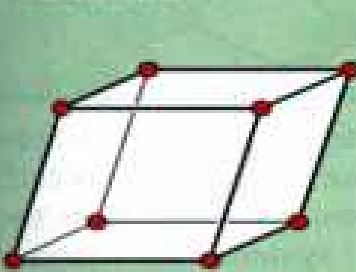


Face-centered

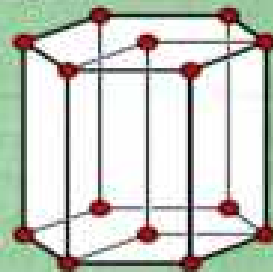


End-centered

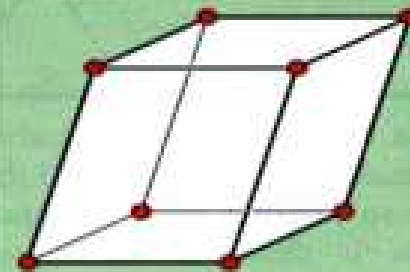
Rhombohedral



Hexagonal

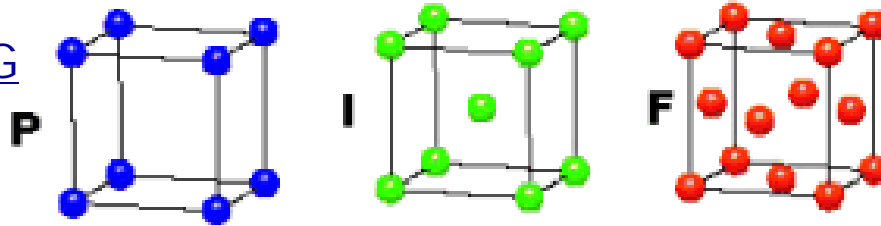


Triclinic



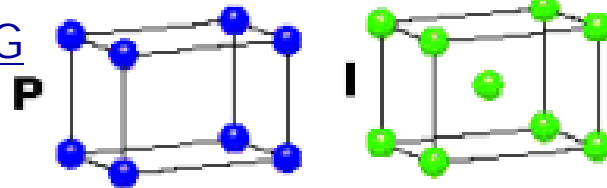
### HEİLÁP PHỒNG

$$a = b = c$$
$$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$



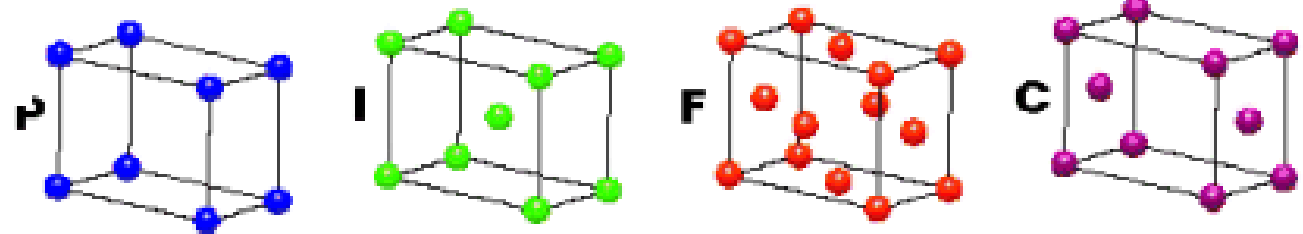
### HEİLÔNG PHỒNG

$$a = b \neq c$$
$$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$



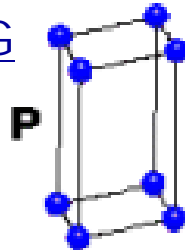
### HEİLỚC THOI

$$a \neq b \neq c$$
$$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$



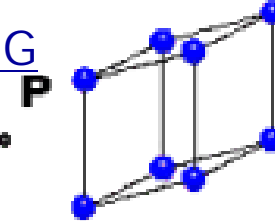
### HEİLAIU PHỒNG

$$a = b \neq c$$
$$\alpha = \beta = 90^\circ$$
$$\gamma = 120^\circ$$



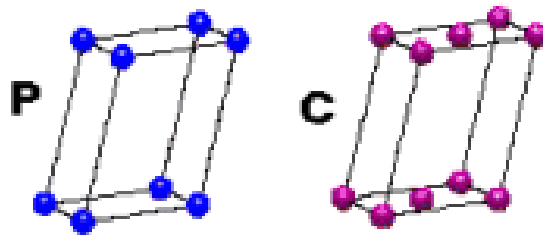
### HEİLBA PHỒNG

$$a = b = c$$
$$\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$$



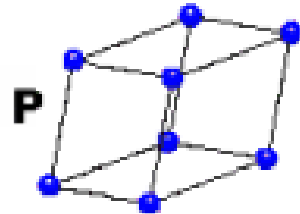
### HEİLÔNG TAI

$$a \neq b \neq c$$
$$\alpha = \gamma = 90^\circ$$
$$\beta \neq 120^\circ$$



### HEİLAM TAI

$$a \neq b \neq c$$
$$\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$$



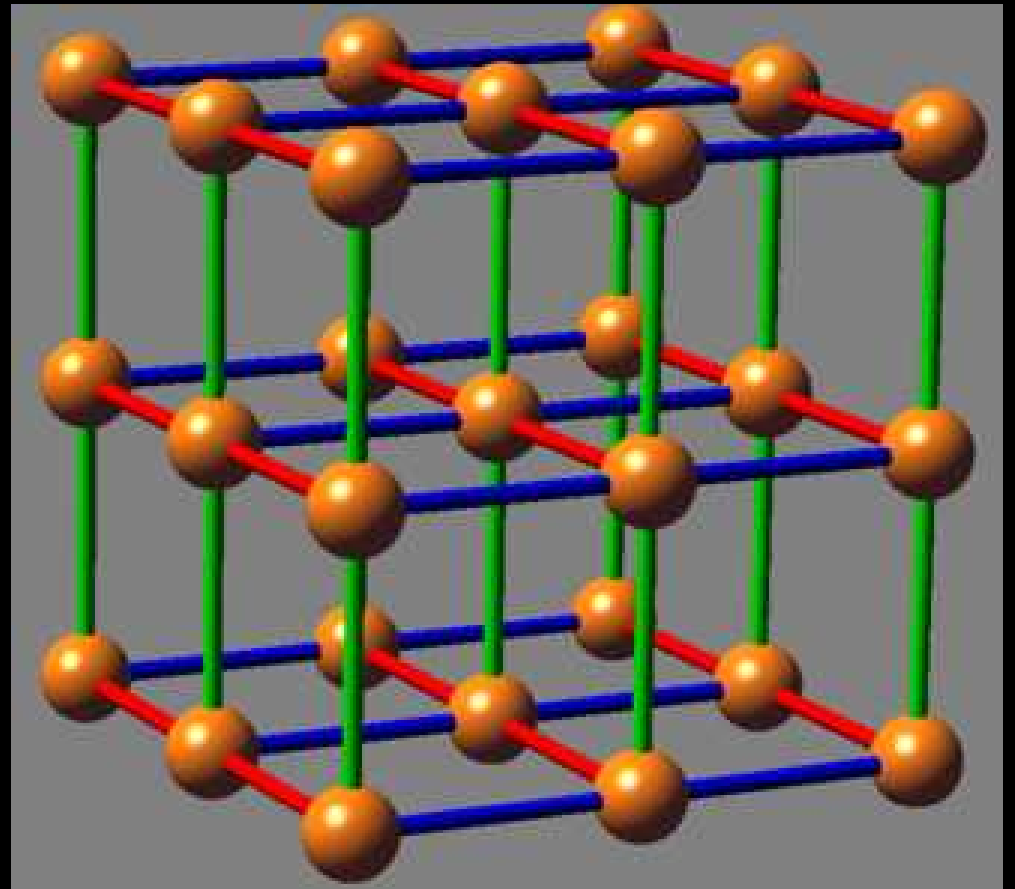
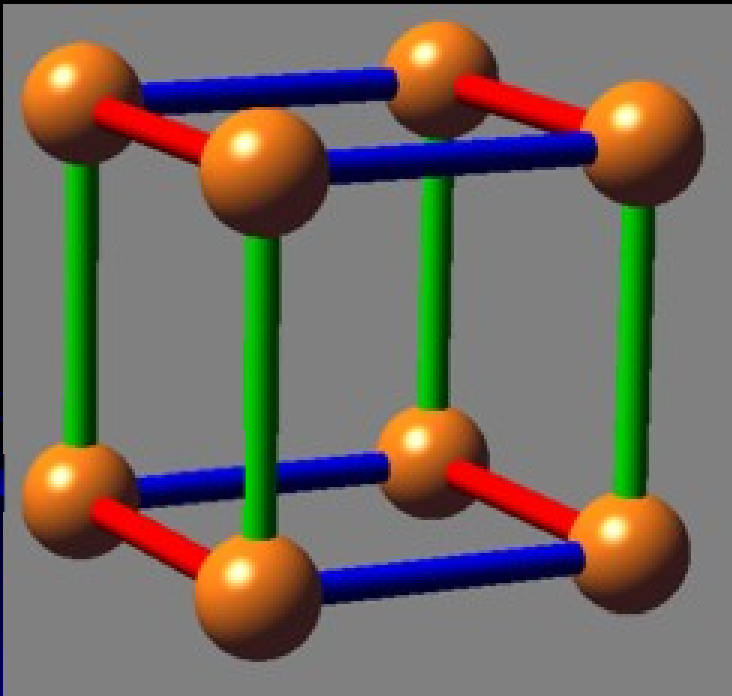
4 KIEU OÃN VÒ  
P : NGUYÊN TỎ  
I : TÂM KHOÁ  
F : TÂM MÃT  
C : TÂM ÔU2 MÃT NỎ  
+  
7 HEİLINH THEA  
⇒ 14 LOÃI MÃNG BRAVAIS

## SOÁN ƯỚT CHỜIA TRONG MỐT OÂMÃĨNG

- Mãĩng nguyên thuỹ :  $8 \text{ nũt} \times 1/8 = 1 \text{ nũt}$
- Mãĩng tâm khoỏ :  $8 \text{ nũt} \times 1/8 + 1 \text{ nũt} = 2 \text{ nũt}$
- Tâm mặt :  $8 \text{ nũt} \times 1/8 + 6 \text{ nũt} \times 1/2 = 4 \text{ nũt}$
- Tâm ãũũ :  $8 \text{ nũt} \times 1/8 + 2 \text{ nũt} \times 1/2 = 2 \text{ nũt}$

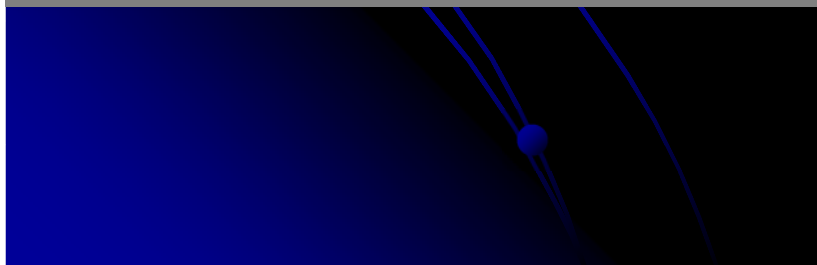
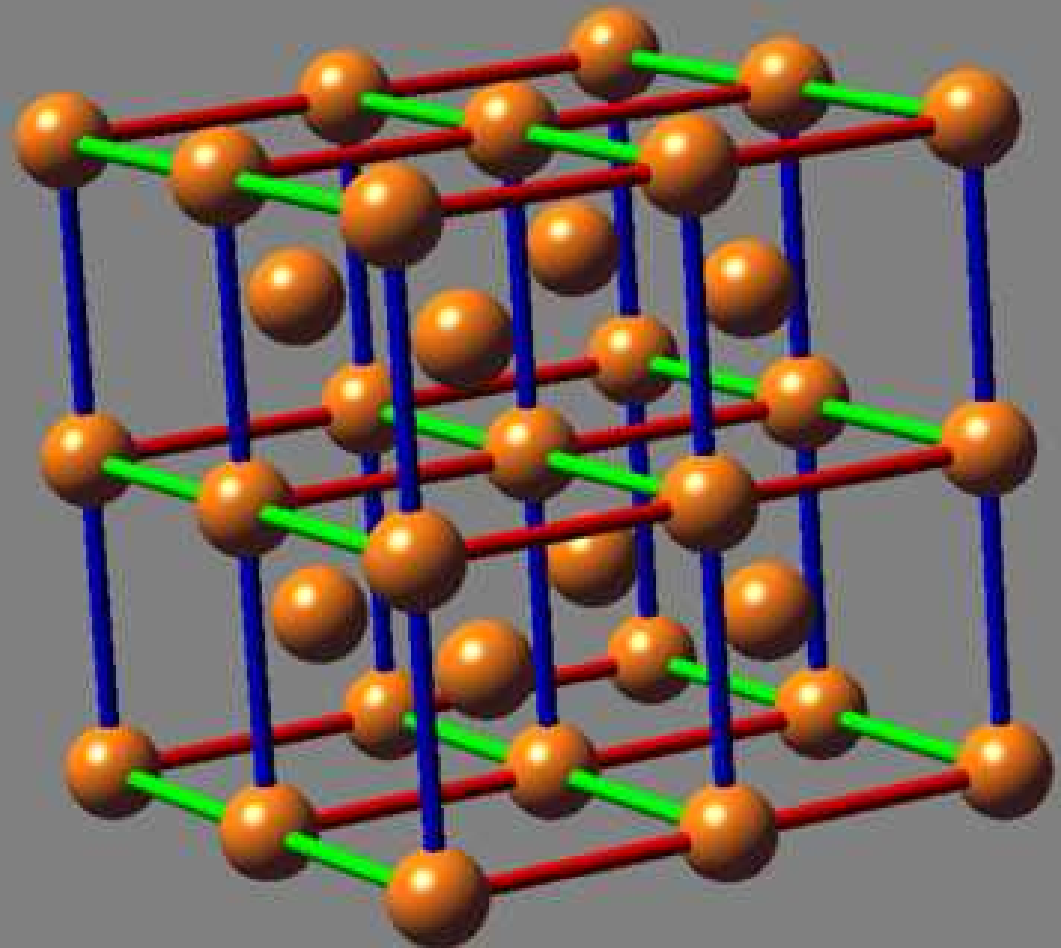
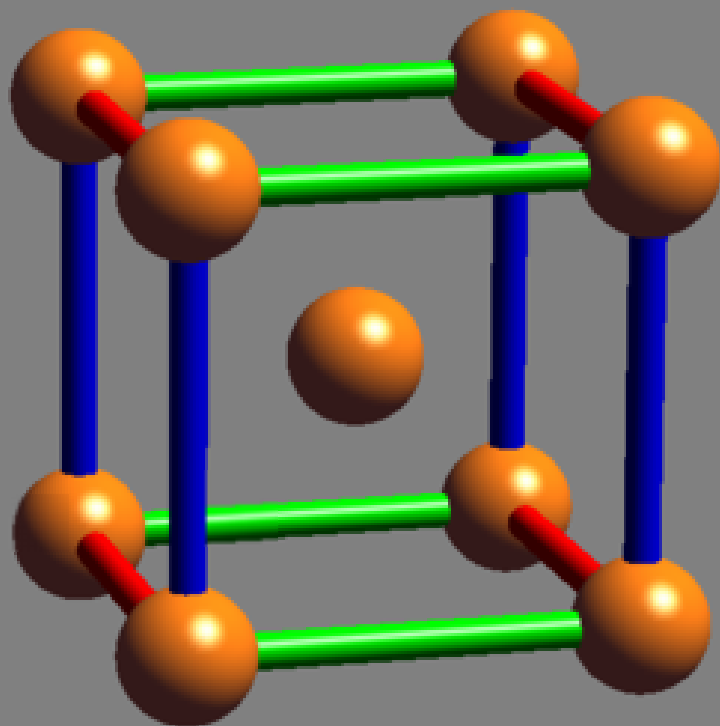
# MAIING NGUYEN THUY

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

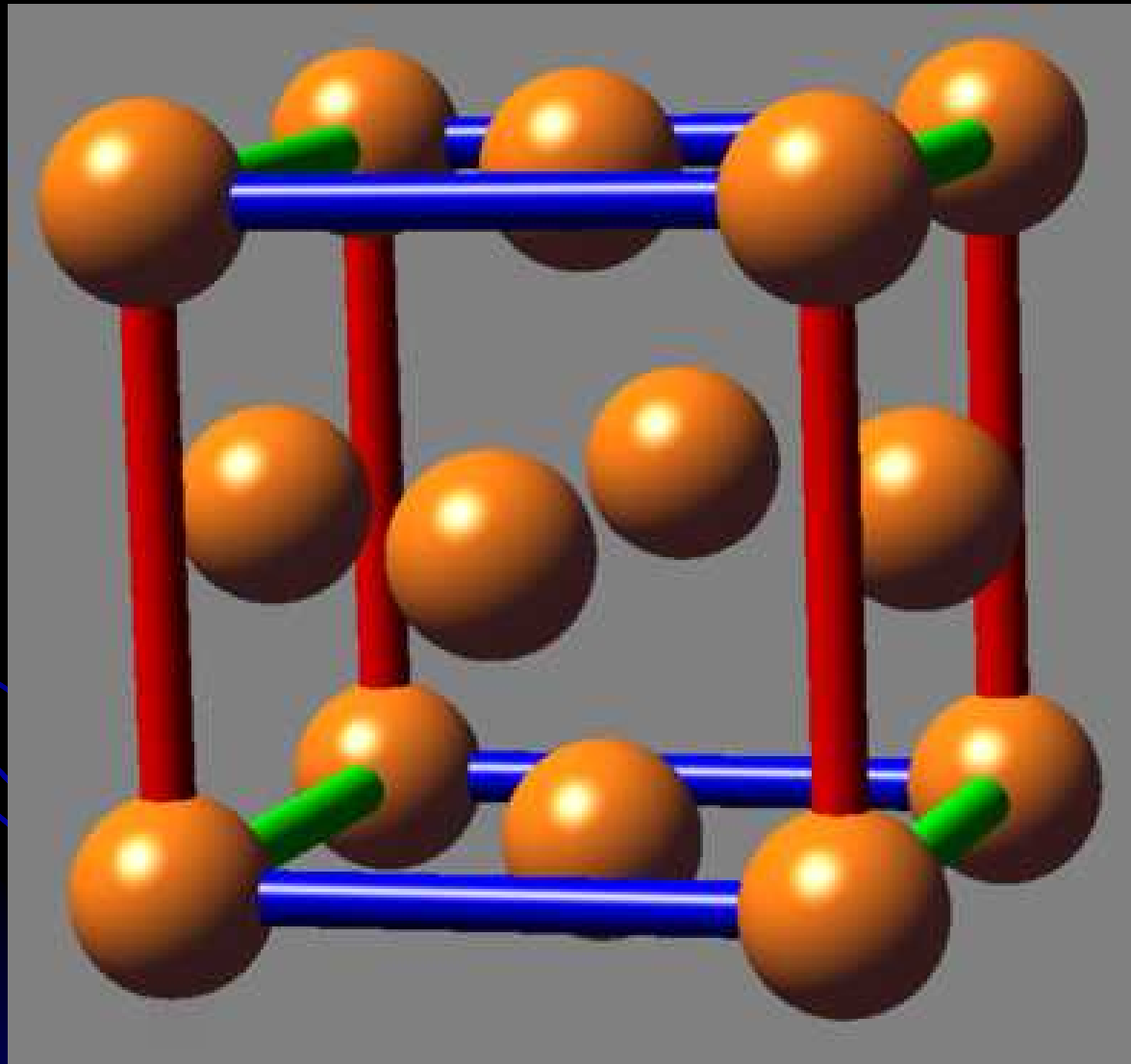


# MAÏNG TÂM KHOÁ

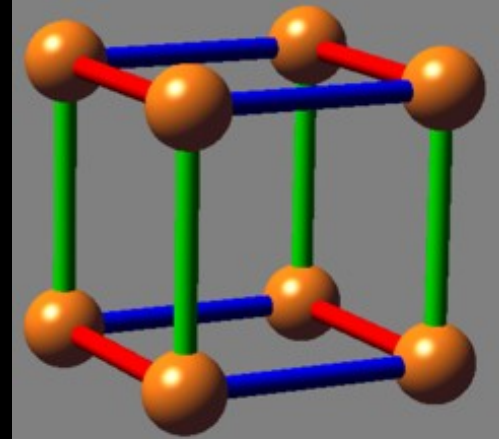
$$8 \text{ nút} \times \frac{1}{8} + 1 \text{ nút} = 2 \text{ nút}$$



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



# HEÏSOÁLÁP ÑÀY



Heïsoálap ñày =  $\frac{\text{Theätích vật chất chứa trong ômaing}}{\text{Theätích ômaing}}$

$$L = \frac{V_{\text{vật chất}}}{V_{\text{ômaing}}}$$

## TRÖÔNG HÖP HEÏLP THUÏY P

•  $V_{\text{ômaing}} = a^3$

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

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

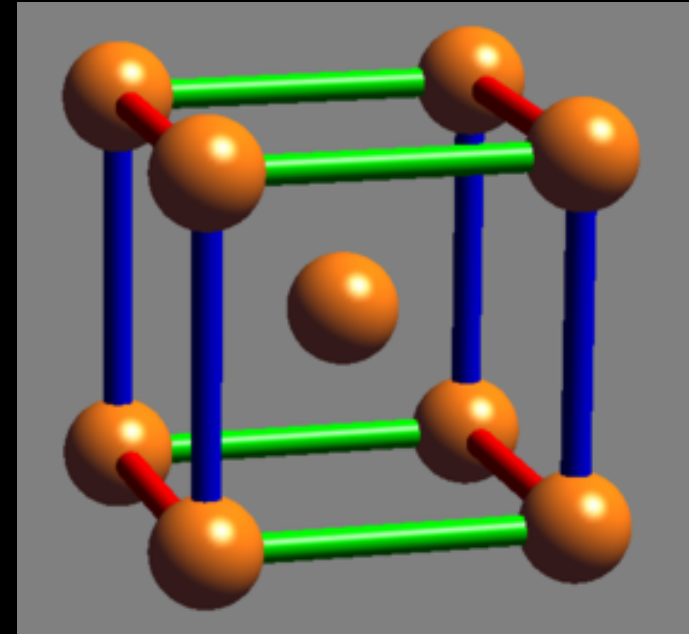


# TRƯỜNG HỢP HEİLÁP PHỒNG TÂM KHỐI I

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

$$\text{Với } R = \frac{\sqrt{3}}{4} a$$

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



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

# BIEU DIEN CAIC NUOT - CHUOI - MAIT TINH THEA- CHE SOAMILLER

## a. Kyhieü mot nut

Mot nut bat kyocua mang lien heä vöi goc bang mot vecto tinh tien :

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

Toä noäcua nut noätreä ba truc toä noäla:  $n_1 \vec{a}_1, n_2 \vec{a}_2, n_3 \vec{a}_3$ .

Neü  $a_1, a_2, a_3$  la noädaä ñon vö treä ba truc thì toä noäcua nut la  $n_1, n_2, n_3$

⇒ kyhieü nut noäla  $[[n_1 \ n_2 \ n_3]]$  hay  $n_1 n_2 n_3$ .

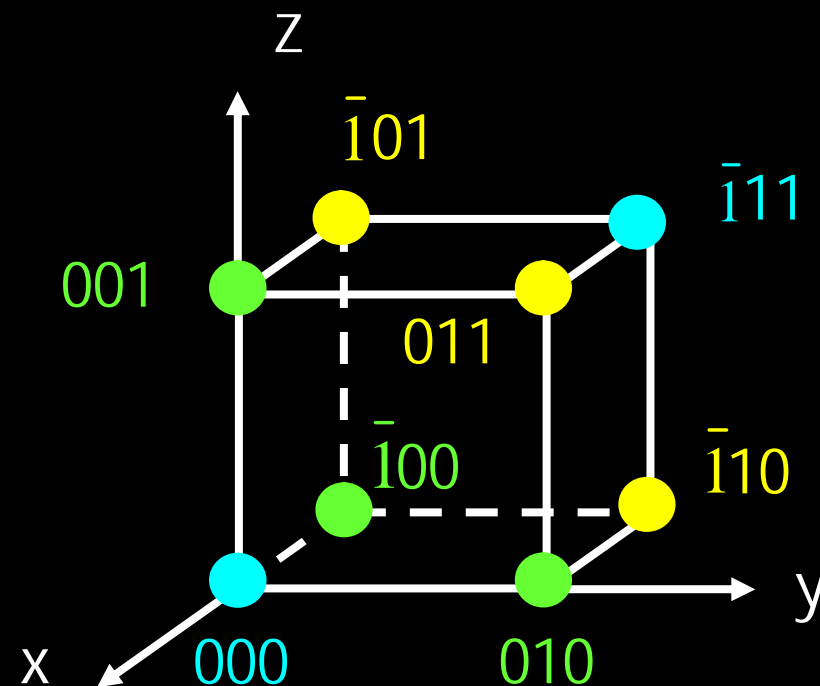
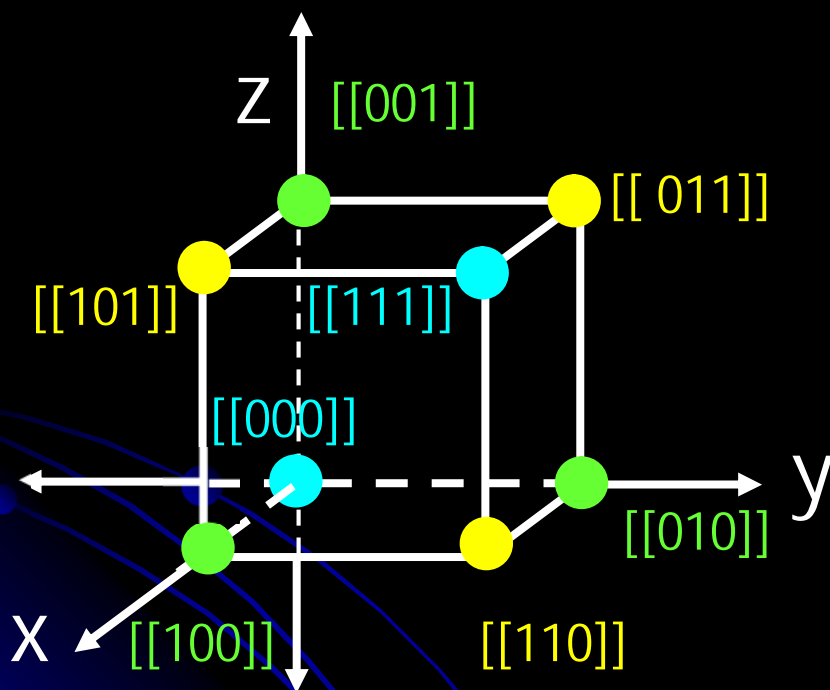
Neü  $n_i < 0 \Rightarrow$  kyhieü  $\bar{n}_i$  vöi  $i = 1, 2, 3$ .

Ví dui:

Mot nut mang coä toä noäthoä:  $\vec{T} = -3\vec{a}_1 + 2\vec{a}_2 - \vec{a}_3$

⇒ kyhieü nut noäla  $[[\bar{3} \ 2 \ \bar{1}]]$ .

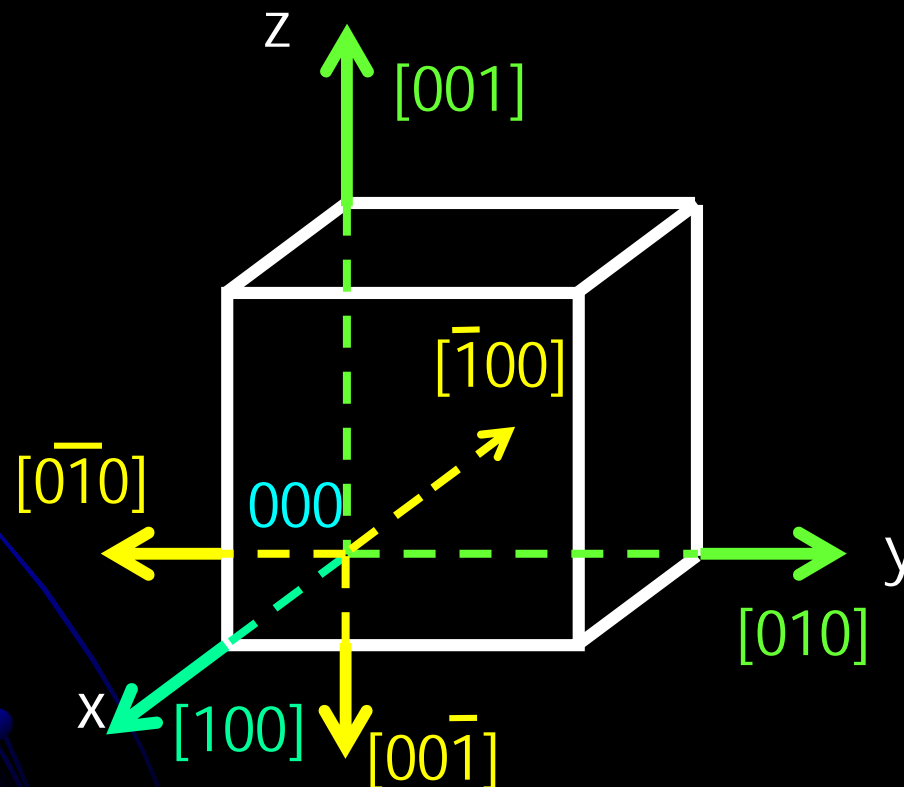
# MOẬT SỐ NỤT CÔ BÃN TRONG TINH THỂ LẬP PHƯƠNG

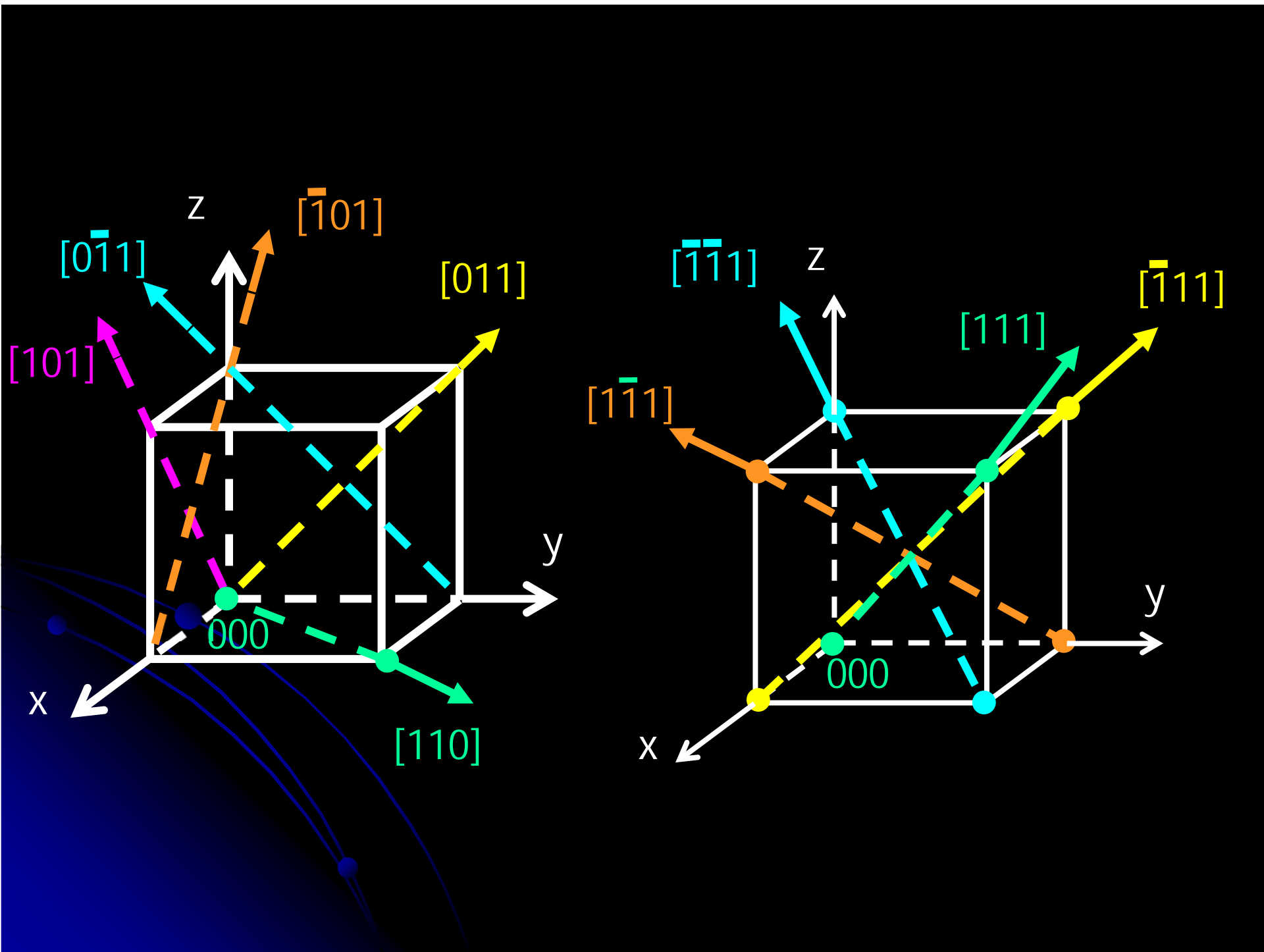


## b. Ký hiệu mặt chuoá (chiều) trong tinh thể

- Qua góc keú ñông thẳng song song với chuoá ñi trên. Ngoài góc ra, nút gần góc nhất trên ñông thẳng có ký hiệu  $[[uvw]]$  thì chuoá máng này có ký hiệu  $[uvw]$ .

### MOÁT SỐ CHIEÀU CÔ BÀN TRONG TINH THỂ LẬP PHỒNG





## c. Kyùhieäu möt maät maäng

Ñeäkyùhieäu cho möt maät maäng hay möt höi maät maäng song song nhau, ta chöin maät naö ñöünaem trong höi nay gaän goác nhaät. Giaüsöümaät nay caät ba trüic töä ñöätheo thông số  $n_1a_1$ ,  $n_2a_2$ ,  $n_3a_3$ .

Ta läp tæ số keíp :

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

- Ñät  $h : k : l = n_2n_3 : n_1n_3 : n_1n_2$
- $\Rightarrow$  chæ số Miller (do Miller ñeäxuat):  $(h \ k \ l)$

## VÍ DỤ

Một hệ mặt mạng song song nhau có mặt mạng gần trục tọa độ nhất có trục tọa độ là:

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

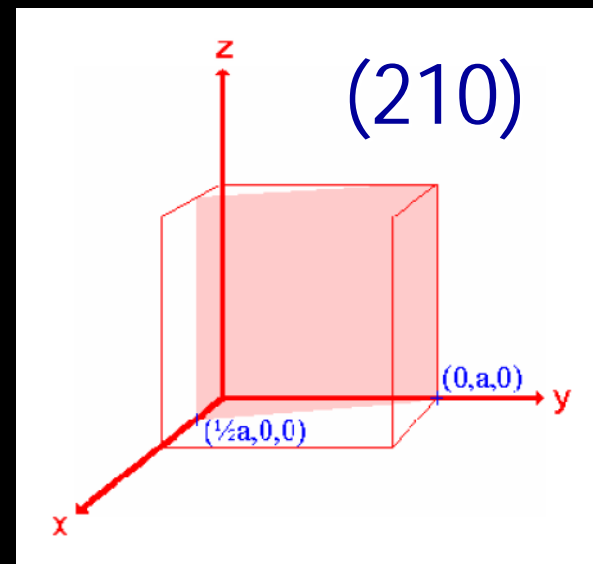
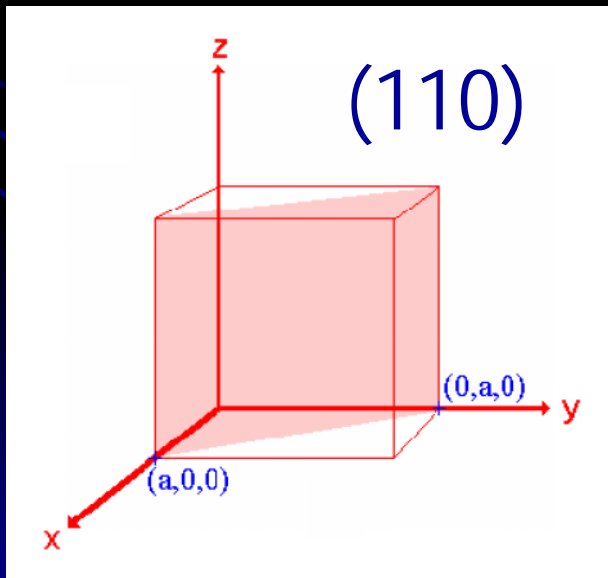
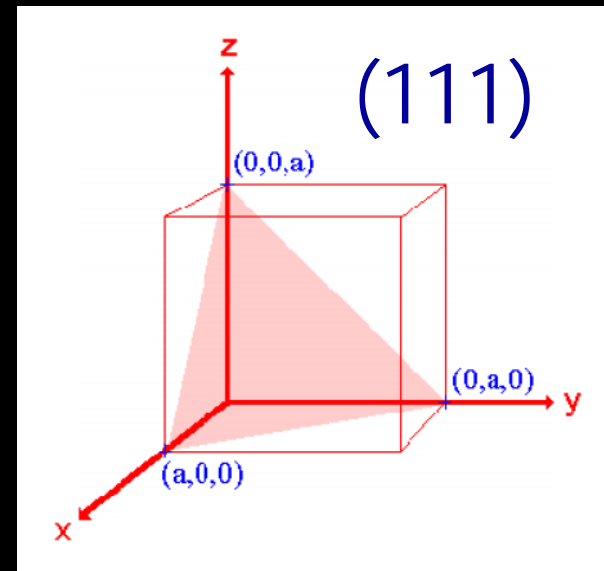
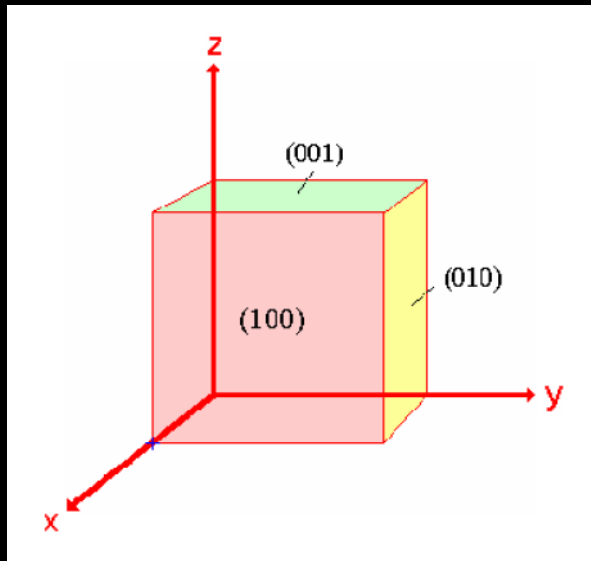
Ta lập tỉ số các:

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

$$\text{Hệ } h : k : l = 3:6:2$$

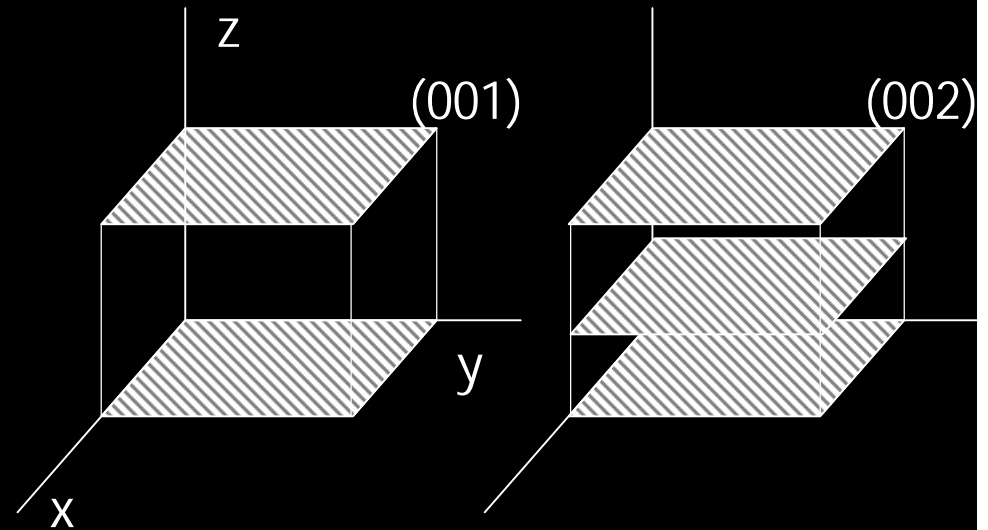
$$\Rightarrow \text{chỉ số Miller} = (362)$$

# Các mặt cơ bản trong tinh thể lập phương





# YÙNGHÓA CÙA KÍ HIEÛ MAËT MAÏNG



- Trong một hoi mặt maing, khoảng cách giữa hai mặt lân cận nhau ñoïc gọi là ñông số mặt maing và ñoïc ký hiệu d. Hoi mặt maing có ký hiệu  $(h k l)$  thì ñông số maing là

$d_{hkl}$ .

- Ký hiệu mặt maing thể hiện:

- Vị trí ñông ñoi của mặt maing ñoi với các trục của tinh thể
- Số mặt song song cắt trục trong phạm vi của mỗi ñôn vị dài trên trục

# CÔNG THỨC LIÊN HỆ GIỮA $d_{hkl}$ VỚI $h, k, l$ VÀ $a_1, a_2, a_3$

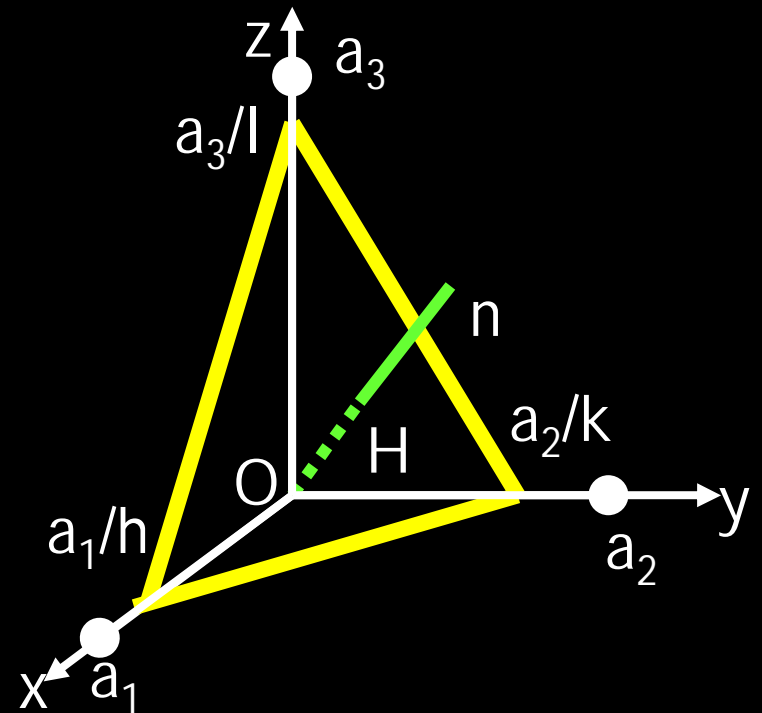
➤  $d_{hkl}$  là hằng số liên quan trong các phép tính toán cấu trúc.

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

➤ Thông số của hoi 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 trục.



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 vắn sai phương:

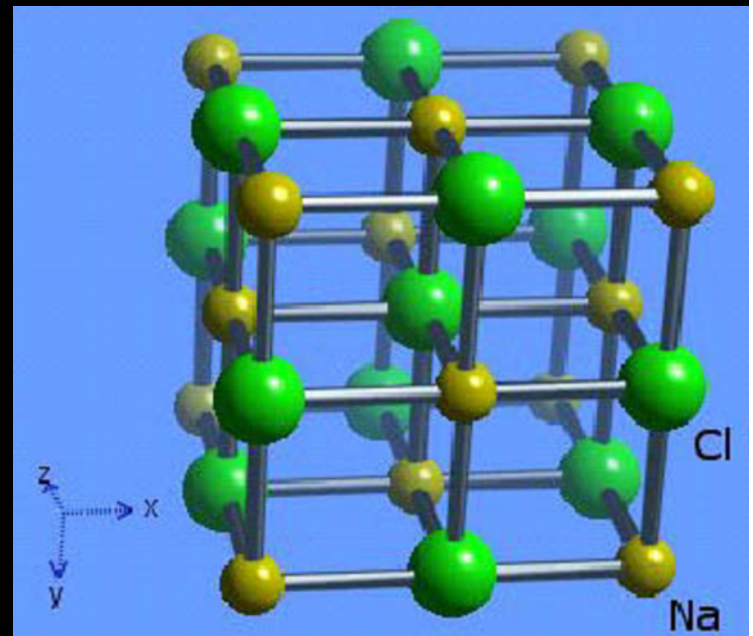
$$a_1 = a_2 \neq a_3; \alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$$

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

# 7. CẤU TRÚC TINH THỂ CỦA MỘT SỐ TINH THỂ NHƠN GIẢN

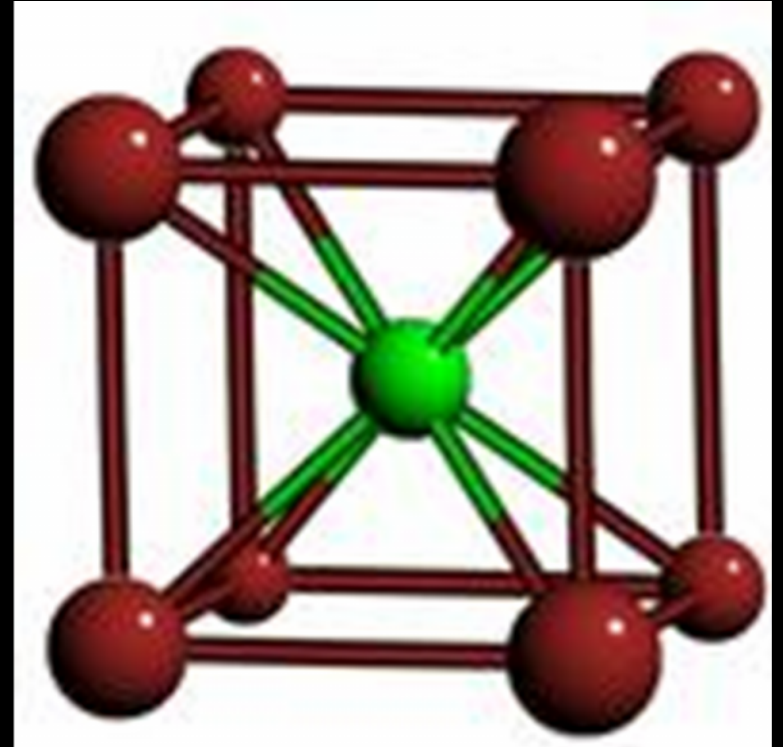
## a. Cấu trúc của NaCl

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



## b. Cấu trúc của CsCl:

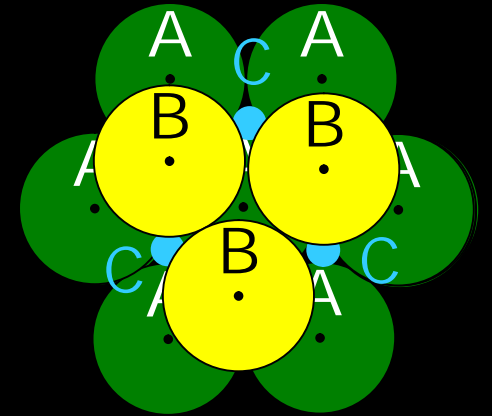
- **Mạng Bravais:** Thuộc mạng lập phương nguyên thủy P với mỗi ô mạng có hai nguyên tử ở tâm
- **Công thức của ô mạng gồm:**
- **Cs :**  $[[000]]$ ; **Cl :**  $[[\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}]]$



Cấu trúc tinh thể CsCl

## c. Cấu trúc lục giác xếp chặt

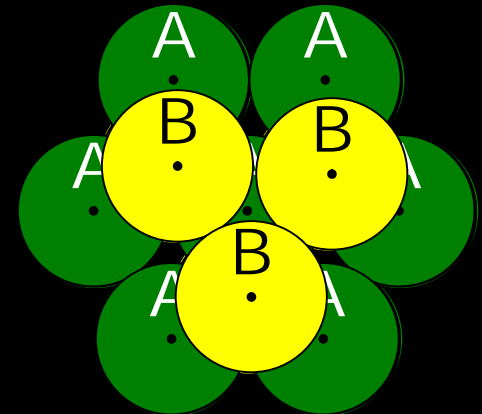
- **Lớp thòinhất:** Mỗi quả cầu ãoõic bao xung quanh bởi 6 quả cầu khác  $\Rightarrow$  vị trí A.
- Còn sáu vị trí hõm vào của lớp thòinhất thuộc hai loại B và C.



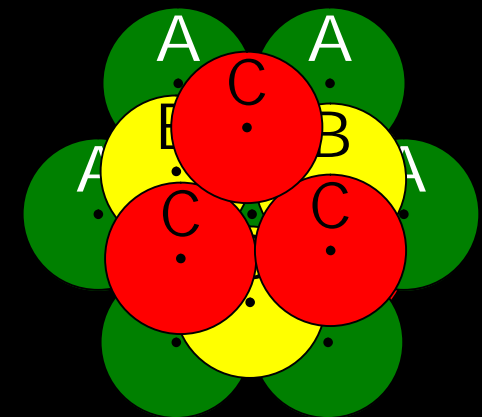
- **Lớp thòinhai:** Còn thể ãnhất các quả cầu lớp thòinhai vào vị trí B hay C sao cho mỗi quả cầu lớp thòinhai tiếp xúc với 3 quả cầu của lớp thòinhất.
- Giữa số lớp thòinhai chiếm các vị trí B.

Lôp thòi 3: còi 2 cách xếp:

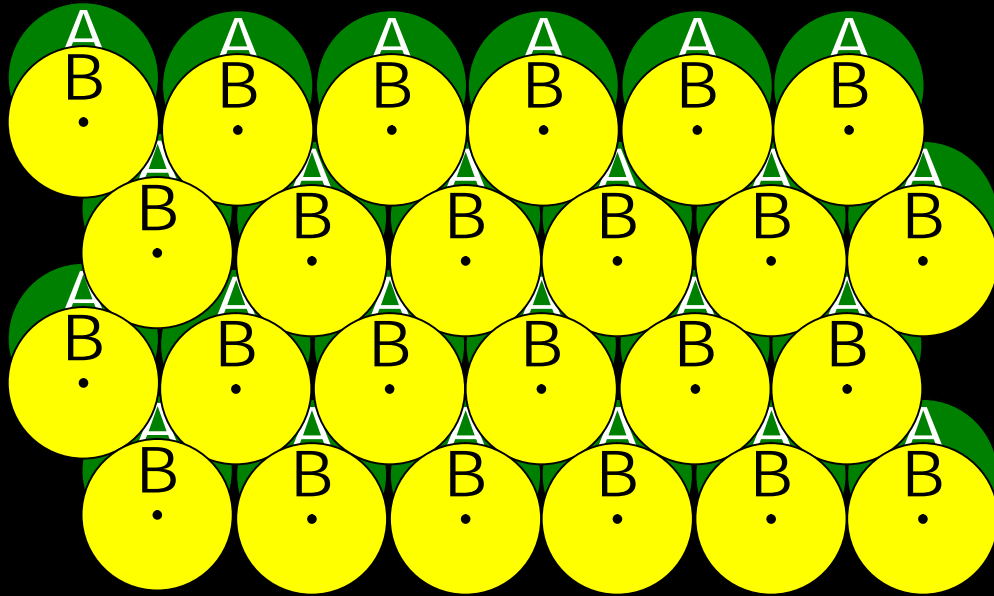
+ **Cách 1:** Nắt các quả cầu lên vị trí A, rồi lóp tiếp theo là B và còi thể tạo thành các lóp liên tiếp ABABAB...  $\Rightarrow$  **Cấu trúc lục giác xếp chặt.**



+ **Cách 2:** Nắt các quả cầu lên vị trí C, rồi lóp tiếp theo là A và còi thể tạo thành các lóp liên tiếp ABCABC...  $\Rightarrow$  **Cấu trúc lập phương tâm mặt.**

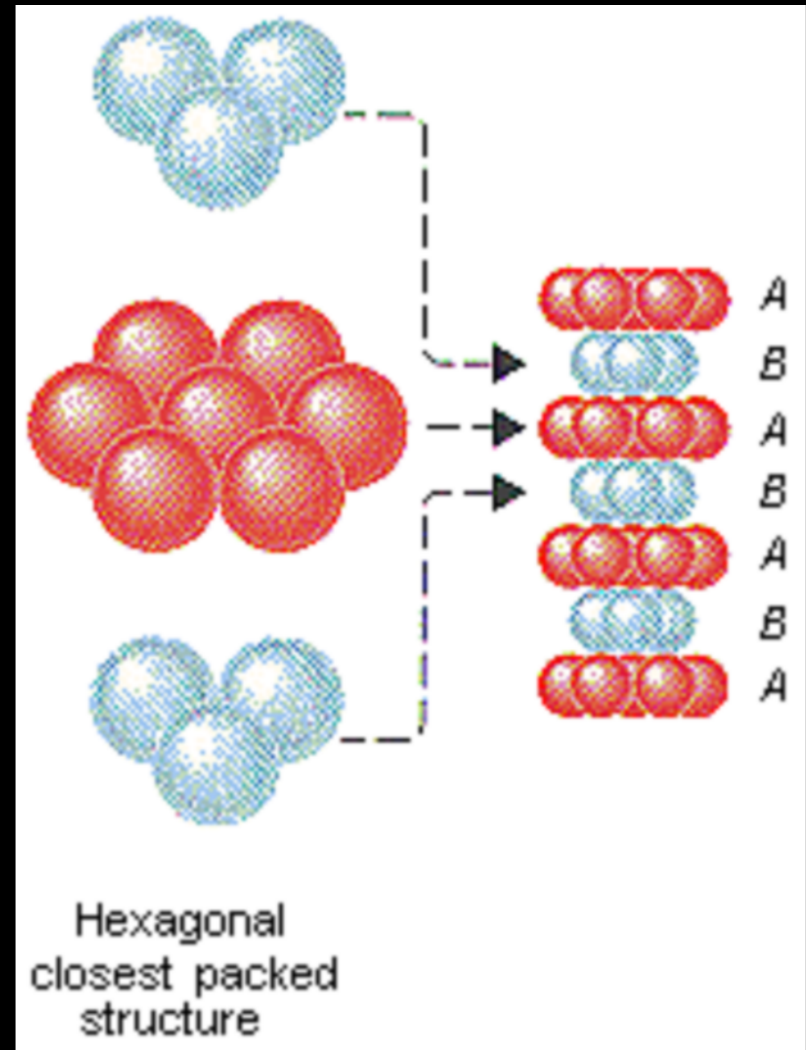


# CAU TRUC LUC GIAIC XEP CHAT



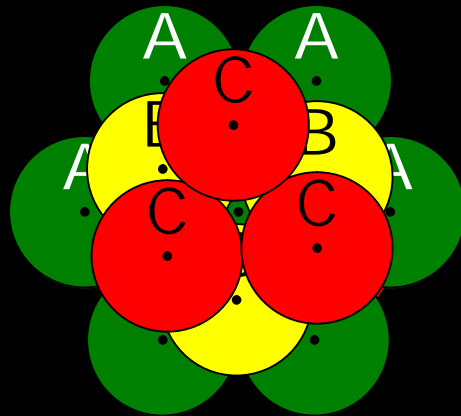
Cấu trúc lục giác xếp chặt  
ABABAB...

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



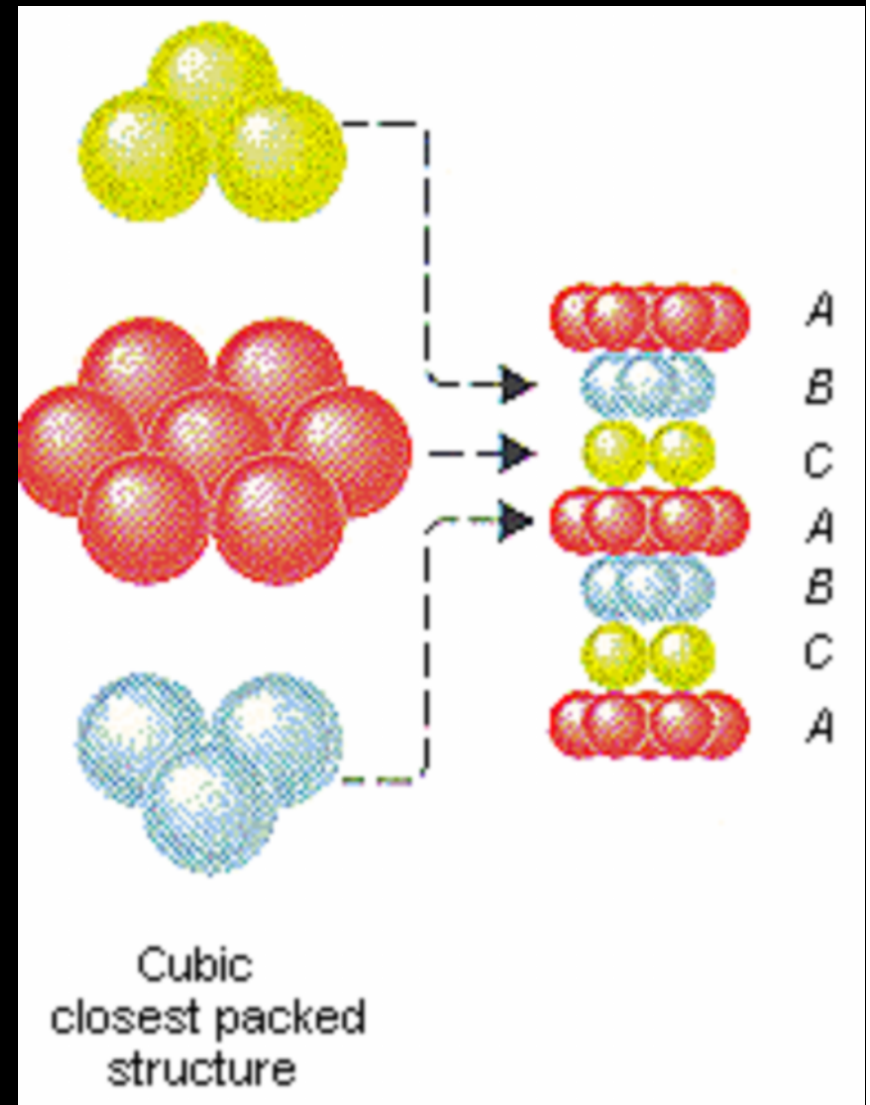


# CAU TRUC XEP CHAT KIEU LP TAM MAET



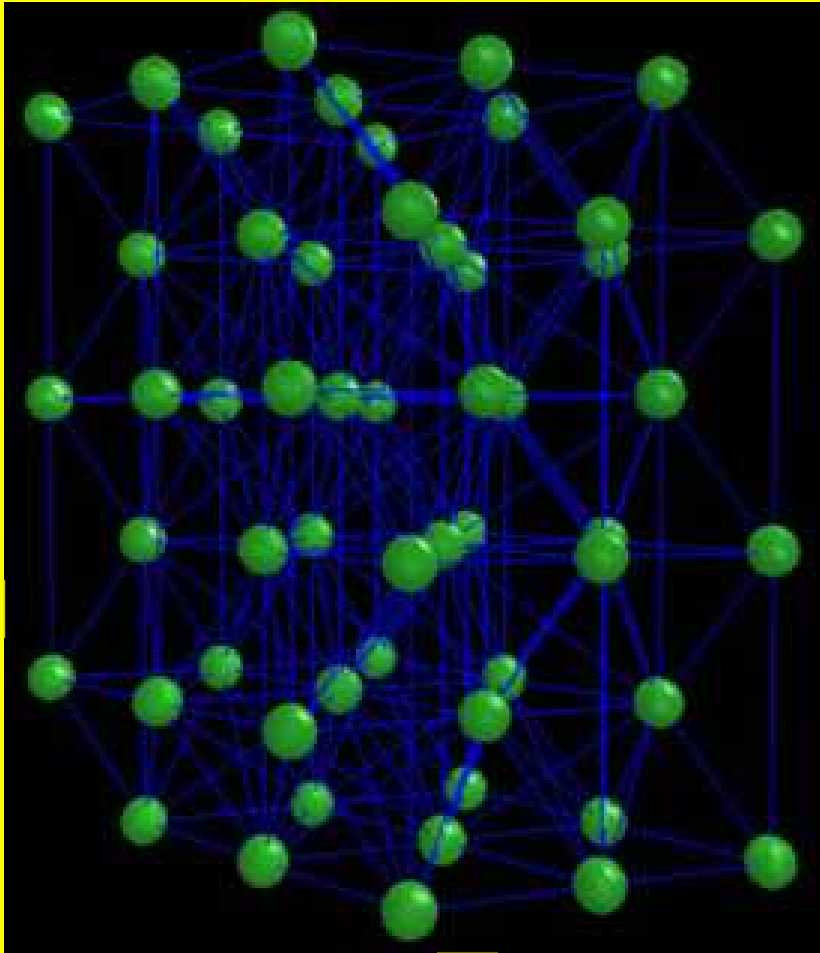
Cau truc xep chat ABCABC

Maing lap phong tam maet voi maet xep chat la  $(111)$ .

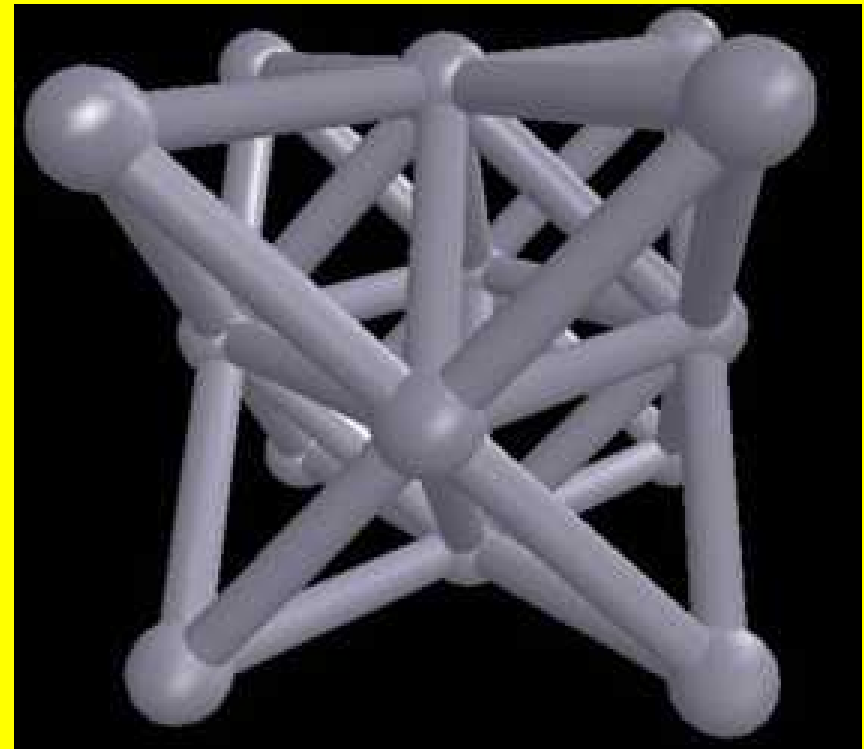


Cau truc xep chat dan nen maing lap phong tam maet

# CAI CHAT KEAT TINH THEO MAING LUIC GIAIC



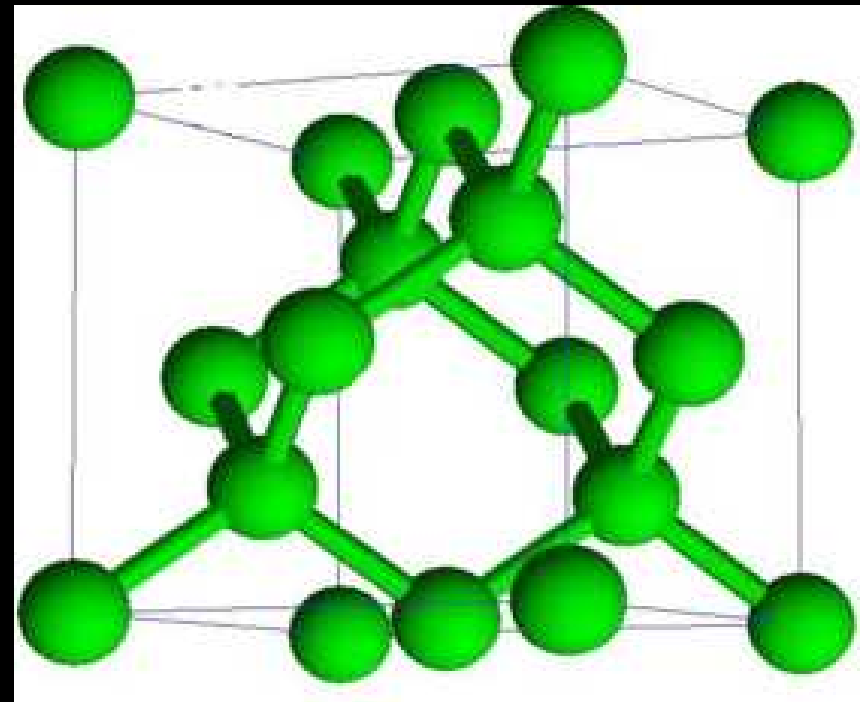
Cau truc luic giai xep chat (Mg)



Cau truc xep chat dan nen  
maing lap phong tam mat  
(Ca)

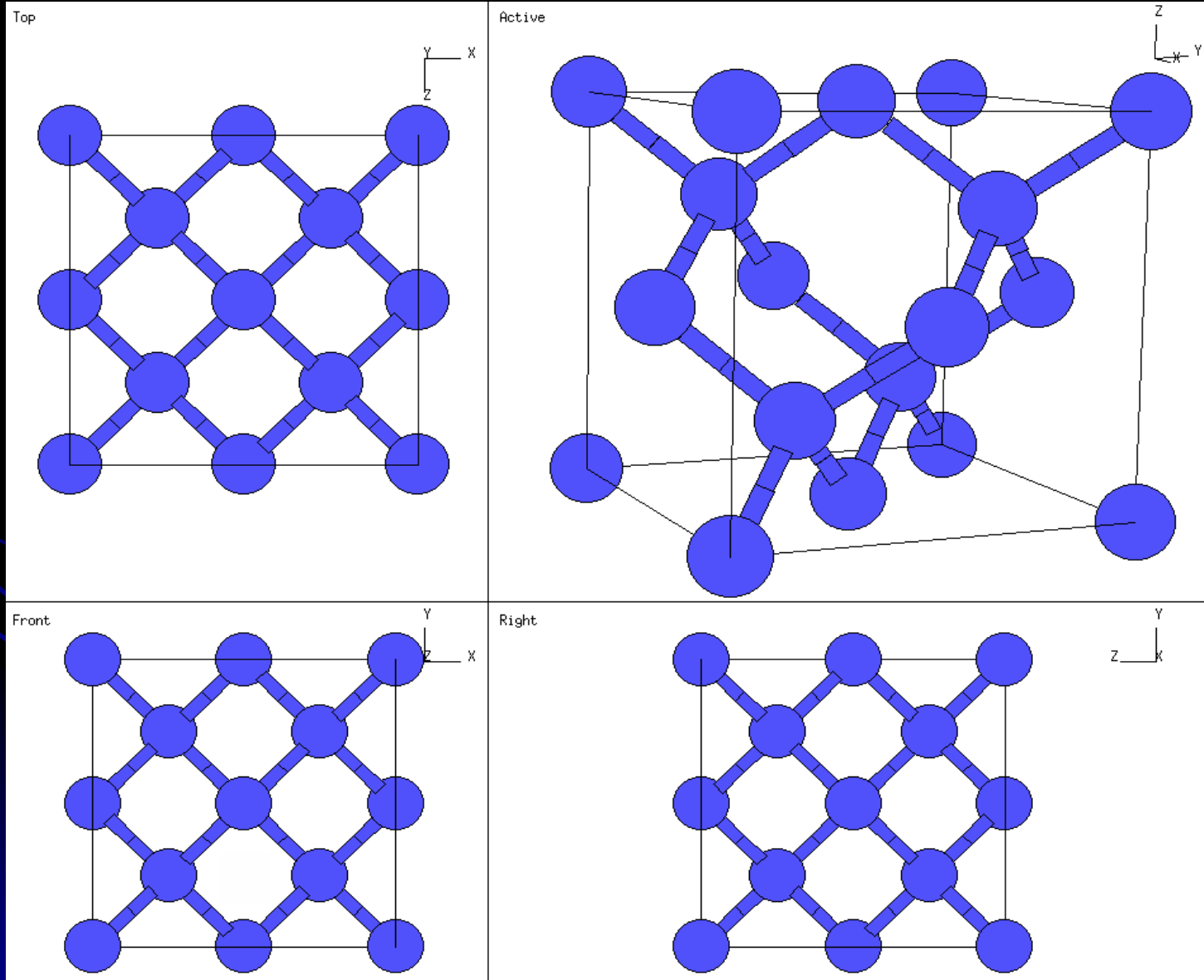
## d. Cấu trúc của kim cương

- Mạng Bravais: Lập phương tâm mặt  $F$ .
- Có số hai nguyên tử carbon ở vị trí nút  $[[000]]$  và  $[[1/4 1/4 1/4]]$ .
- Oằn và chĩa 8 nguyên tử  
Cấu trúc kim cương có thể hiểu mô tả bằng hai mạng lập phương tâm mặt, dịch chuyển với nhau theo hướng chéo chính một đoạn bằng  $1/4$  hướng chéo nối
- Hệ số lấp đầy: 0,34.  
Không thuộc mạng xếp chặt.



# OÃMÃNG TINH THỂ KIM CÕNG

## DÕI CÃI GÕC NHÌN KHÃC NHAU



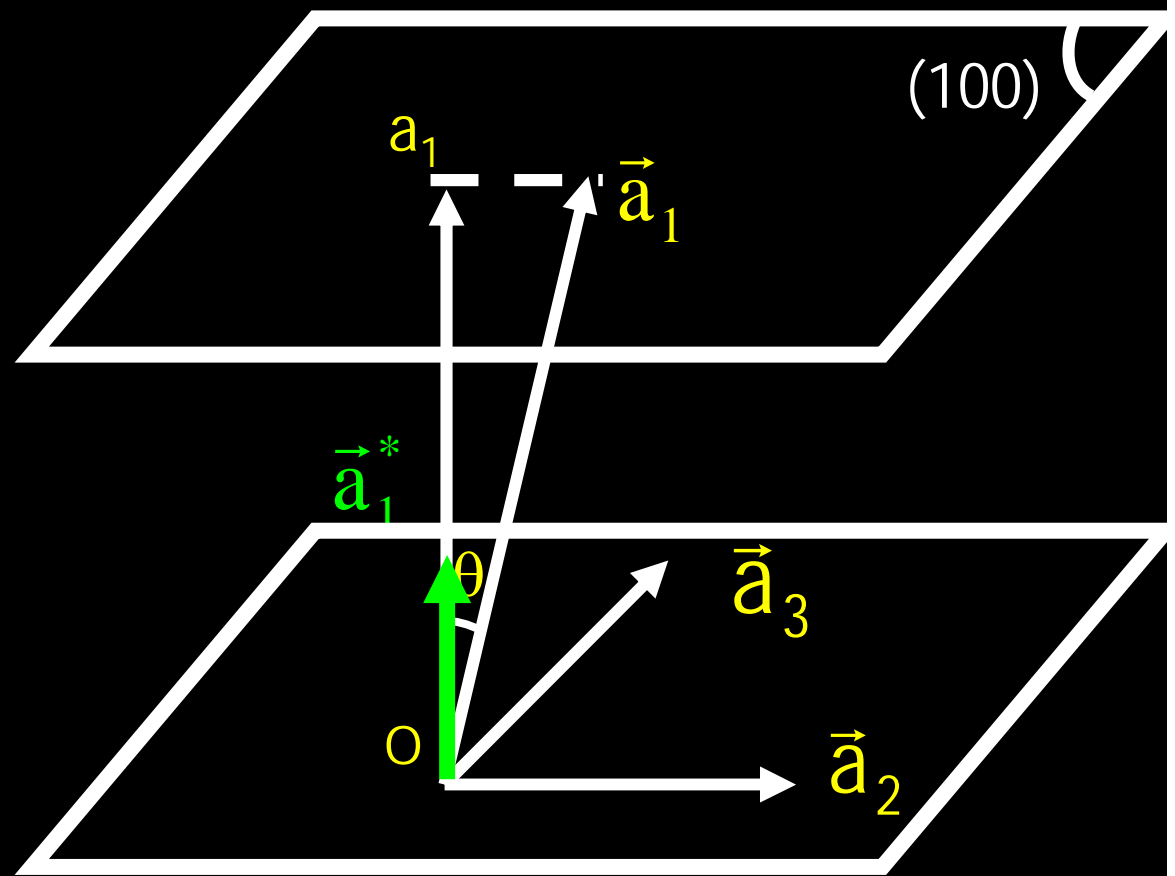
# 8. MÀNG ÑAÛ (MÀNG NGÕÕC)

## a. ÑÒNH NGHÓA

Cho một mặt thuận có ba vectơ cơ sở  $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$   
Ta biểu diễn hai mặt màng song song mặt  $(\vec{a}_2, \vec{a}_3)$  tức hai 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:

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

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

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

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

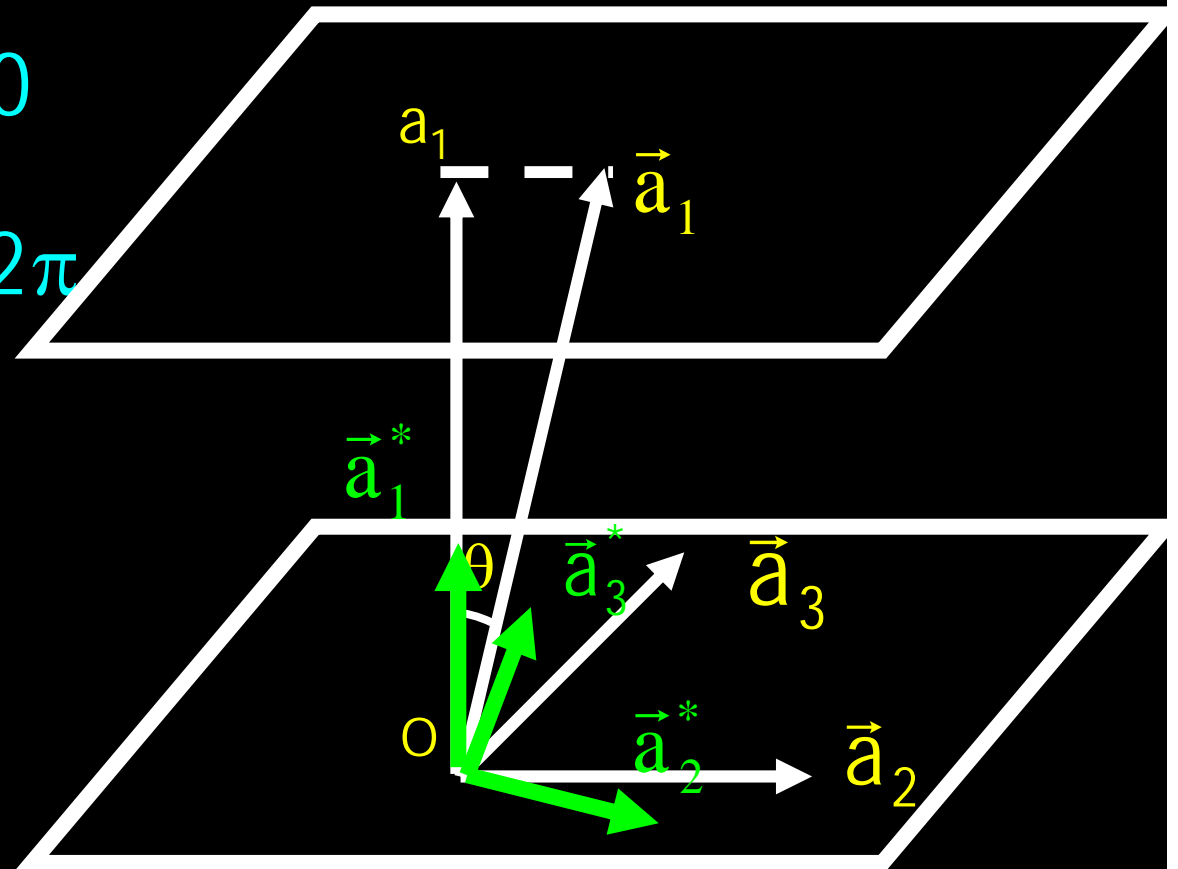
$$\vec{a}_2^* \cdot \vec{a}_3 = 0 \quad \vec{a}_3^* \cdot \vec{a}_3 = 2\pi$$

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

1 nếu  $i = j$

$\delta_{ij} =$

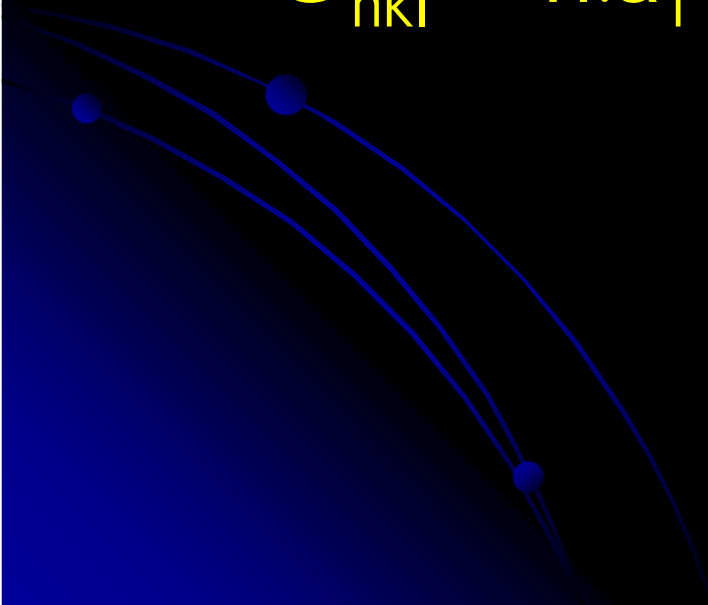
0 nếu  $i \neq j$



Mañng ñöôc xaây döng trên ba vectô  $\vec{a}_1^*, \vec{a}_2^*, \vec{a}_3^*$  ñöôc goii laø mañng ngöôc của mañng thuañ ñaõcho.

Caic nút của mañng ngöôc coù theå xaic ñönh böü vectô:

$$\vec{G}_{hkl} = h.\vec{a}_1^* + k.\vec{a}_2^* + l.\vec{a}_3^* \quad ; h, k, l \in \mathbb{Z}$$



# MOẬT SỐ TÍNH CHẤT CỦA MẠNG ÑAÏU (MẠNG NGÖÖÏC)

1. Goi  $V$  laø theätích của ôa mạng thuận;  $V^*$  theätích của ôa mạng ngöôïc, ta coi

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

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

Suy ra:

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

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

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



3. Ích lôii của maĩng ngöôic : nếu noĩ goĩc toĩa ñoĩa vöi möĩ nút (h k l) của maĩng ngöôic ñöôic bieũ dieĩn baĩng vectô töic laø:

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

⇒  $\vec{G}_{hkl}$  phải vuông goĩc maĩt maĩng (h k l) của maĩng thuaĩn vaø coũ ñoĩa daĩ :

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

⇒ coũ theĩ bieũ dieĩn möĩ hoĩ maĩng thuaĩn baĩng möĩ nút của maĩng ngöôic.

⇒ möĩ nút của maĩng ngöôic coũ theĩ bieũ dieĩn cho möĩ hoĩ maĩng thuaĩn (töic maĩng tinh theĩ) veĩ hoĩng vaø thoĩng soũ maĩt maĩng.

## VÍ DỤ

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

Hõ  $(312)$  cõ hõ ãng vuông góc với  $\vec{G}_{312}$  là hõ ãng của vectõ nĩa tõ gốc  $O$  ãn nút  $[[312]]$  của mạng ngược và cõ ãng thoãg số

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

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

5. Mặt của mạng ngược mà ký hiệu là  $[nh, nk, nl]$  tương ứng với một hệ mặt thuận  $(nh, nk, nl)$  và có thông số là  $\frac{1}{n^2 + k^2 + l^2}$  của hệ  $(h k l)$ .

### VÍ DỤ

Mặt  $[111]$  sẽ biểu diễn bởi vectơ  $G_{111}$  trong mạng ngược sẽ biểu diễn cho hệ mặt  $(111)$  có thông số  $d_{111}$  trong mạng thuận.

Mặt  $[222]$  sẽ biểu diễn bởi vectơ  $G_{222}$  trong mạng ngược sẽ biểu diễn cho hệ mặt  $(222)$  có thông số  $d_{222}$  trong mạng thuận.

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

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