VẬT LÝ CHẤT RẮN

TS. Ngô Văn Thanh

Viện Vật Lý

Hà Nội - 2016

Tài liệu tham khảo

[1] Charles Kittel, Introduction to Solid State Physics, 8th Eds. (John Wiley & Sons, 2005)

[2] Đào Trần Cao, Cơ sở vật lý chất rắn, (NXB ĐHQG Hà Nội, 2007).

[3] Charles Kittel, Mở đầu vật lý chất rắn, (Đặng Mộng Lân và Trần Hữu Phát dịch), (NXB KHKT Hà Nội, 1984).

[4] Nguyễn Ngọc Long, Vật lý chất rắn, (NXB ĐHQG Hà Nội, 2007).

[5] Lê Khắc Bình, Nguyễn Nhật Khanh, Vật lý chất rắn, (NXB ĐHQG TP. HCM, 2002)

Website : http://iop.vast.ac.vn/~nvthanh/cours/vatlychatran/

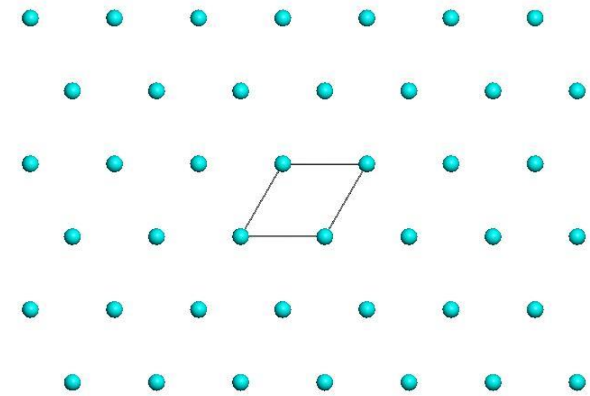
Email : nvthanh@iop.vast.ac.vn

CHƯƠNG 1. CẤU TRÚC TINH THỂ

1. Sự sắp xếp tuần hoàn của các nguyên tử
2. Các loại mạng cơ bản
3. Bộ chỉ số mặt tinh thể
4. Một số cấu trúc tinh thể đơn giản
5. Cấu trúc tinh thể thực

1. Sự sắp xếp tuần hoàn của các nguyên tử

❖ Vector tịnh tiến mạng



➢ *Tinh thể*

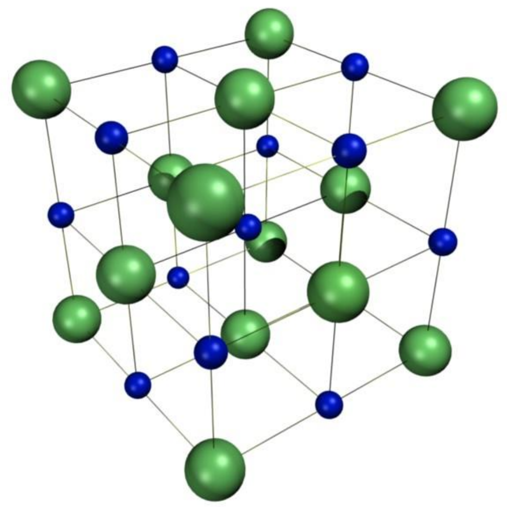
- Tinh thể lý tưởng được tạo bởi các nhóm giống nhau các nguyên tử, sắp xếp lặp đi lặp lại trong không gian theo một trình tự nhất định
- Cơ sở (basic): nhóm nguyên tử
- Nút (point) : được gắn bởi một cơ sở
- Mạng (lattice): tập hợp các nút

➢ *Vector tịnh tiến*

- Mạng trong không gian 3D được định nghĩa bởi bộ ba vector tịnh tiến : $\vec{a}_1,\ \vec{a}_2,\ \vec{a}_3$
  - Mọi nút của mạng đều có thể được xác định từ một nút bất kỳ $\vec{r}$

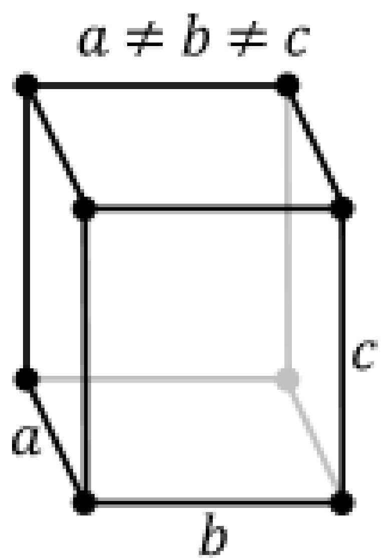
$$\vec{r'} = \vec{r} + u_1\vec{a}_1 + u_2\vec{a}_2 + u_3\vec{a}_3$$

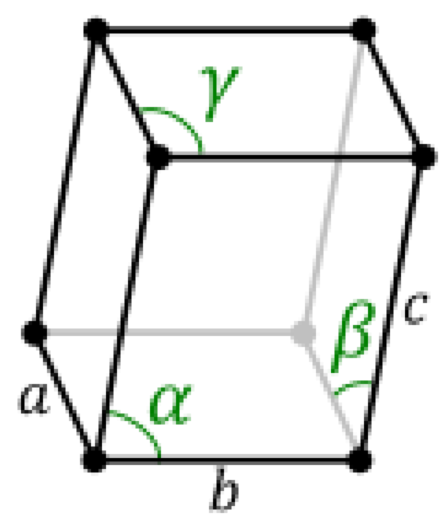
  - u_1, u_2, u_3 : các số nguyên bất kỳ
- Tập hợp các điểm $\vec{r'}$ xây dựng nên mạng



1. Sự sắp xếp tuần hoàn của các nguyên tử

- *Tối giản – gốc (primitive)*
  - Mạng được gọi là tối giản nếu như sự sắp xếp của các nguyên tử dựa trên hai nút bất kỳ là như nhau và luôn thỏa mãn phép biến đổi tịnh tiến.
    - Các vectors $\vec{a}_i$ được gọi là vector tịnh tiến tối giản
  - Cấu trúc tinh thể được xây dựng bởi các hình khối,
    hình khối có thể tích nhỏ nhất : $\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)$
  - Trục tinh thể : được xác định qua các vector tịnh tiến tối giản
    - Thường là 3 cạnh kề của một hình hộp





1. Sự sắp xếp tuần hoàn của các nguyên tử

❖ Ô cơ sở và cấu trúc tinh thể

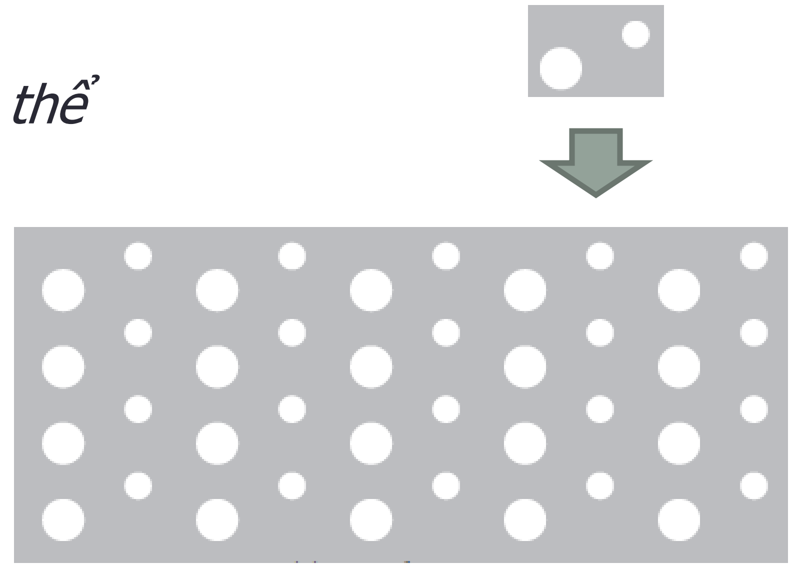
➢ *Ô cơ sở : được xây dựng từ các trục tinh thể*

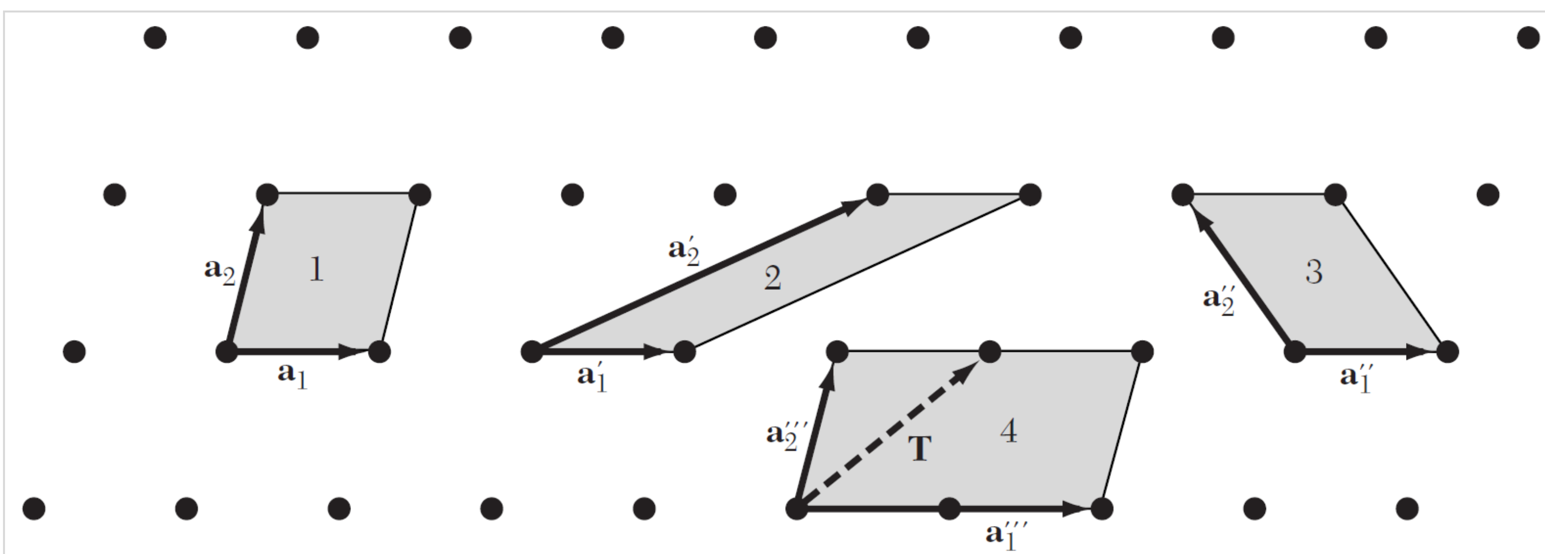
- Có thể có một hoặc nhiều nguyên tử
- Vị trí của các nguyên tử (tại tâm – center)

$$\vec{r}_j = x_j\vec{a}_1 + y_j\vec{a}_2 + z_j\vec{a}_3$$

- Gốc tọa độ có thể điều chỉnh sao cho

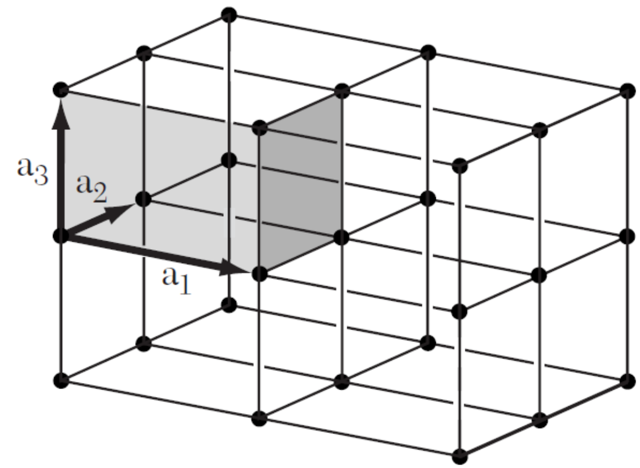
$$0 \le x_j,\ y_j,\ z_j \le 1$$



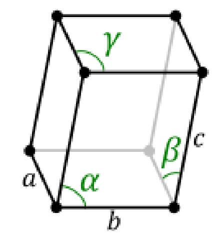


1. Sự sắp xếp tuần hoàn của các nguyên tử

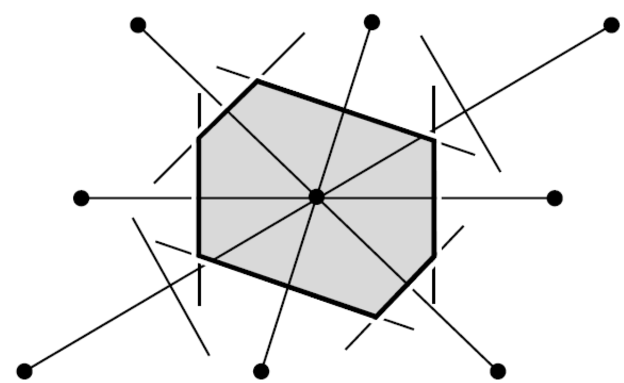
❖ Ô mạng tối giản



- *Được tạo bởi 3 trục tối giản*
  - Còn được gọi là ô đơn vị (unit cell)
  - Ô tối giản có thể tích bé nhất
  - Có nhiều cách chọn trục tối giản và ô tối giản
  - Số lượng nguyên tử của một ô tối giản hoặc ô cơ sở là như nhau.

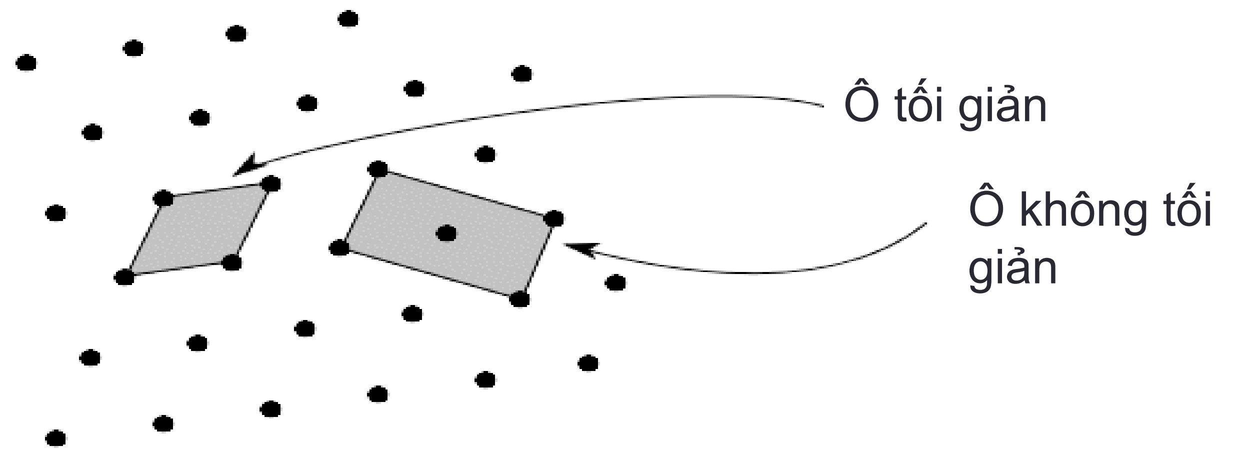


- *Trung bình : mỗi một ô tối giản có 1 nút mạng*
  - Xét hình hộp có 8 nút mạng tại các đỉnh
    - 8 nút mạng này được dùng chung cho 8 ô tối giản
    - Trung bình là : $8 \times \dfrac{1}{8} = 1$
  - Thể tích hình hộp $V_c = |\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)|$

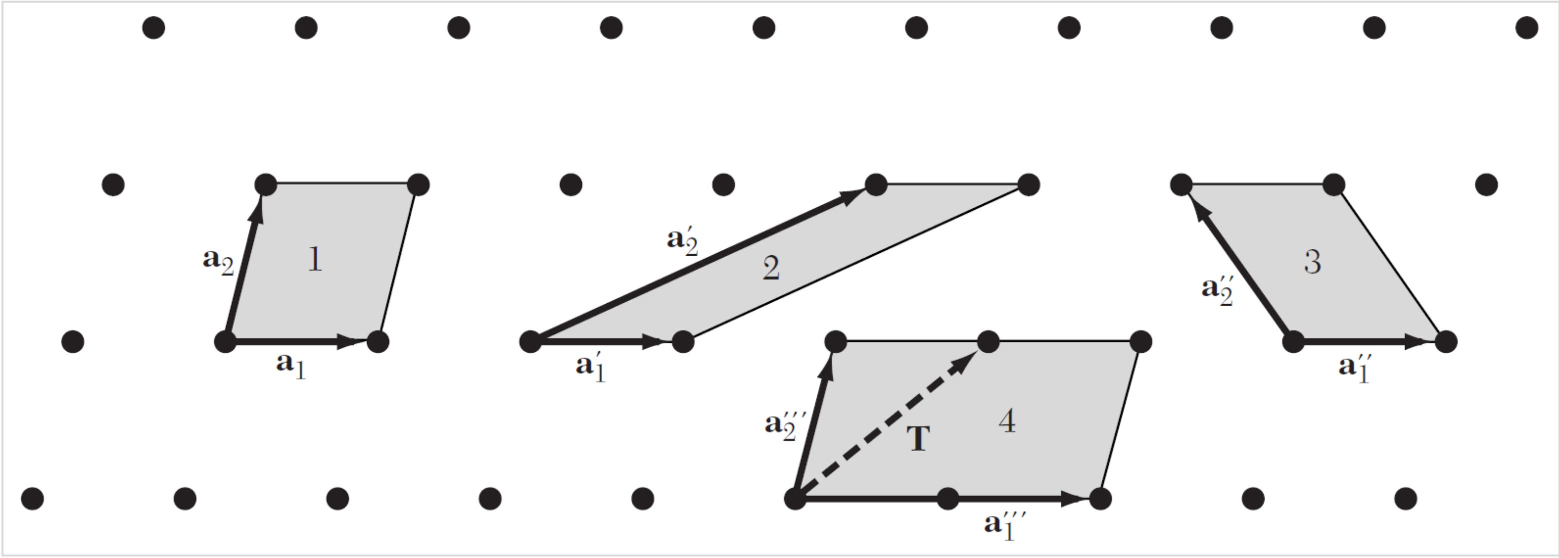


- *Wigner-Seitz cell*
  - Là một cách chọn ô tối giản thường được sử dụng

1. Sự sắp xếp tuần hoàn của các nguyên tử



- Ô mạng 4 không phải là ô tối giản

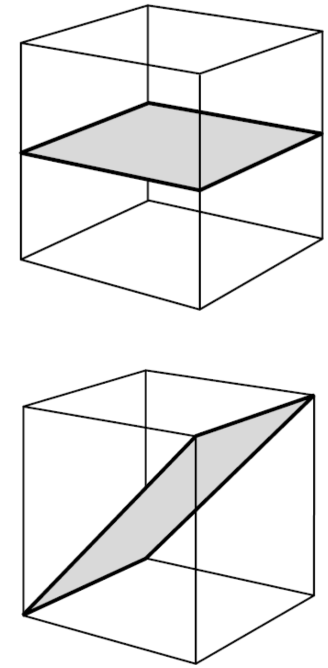


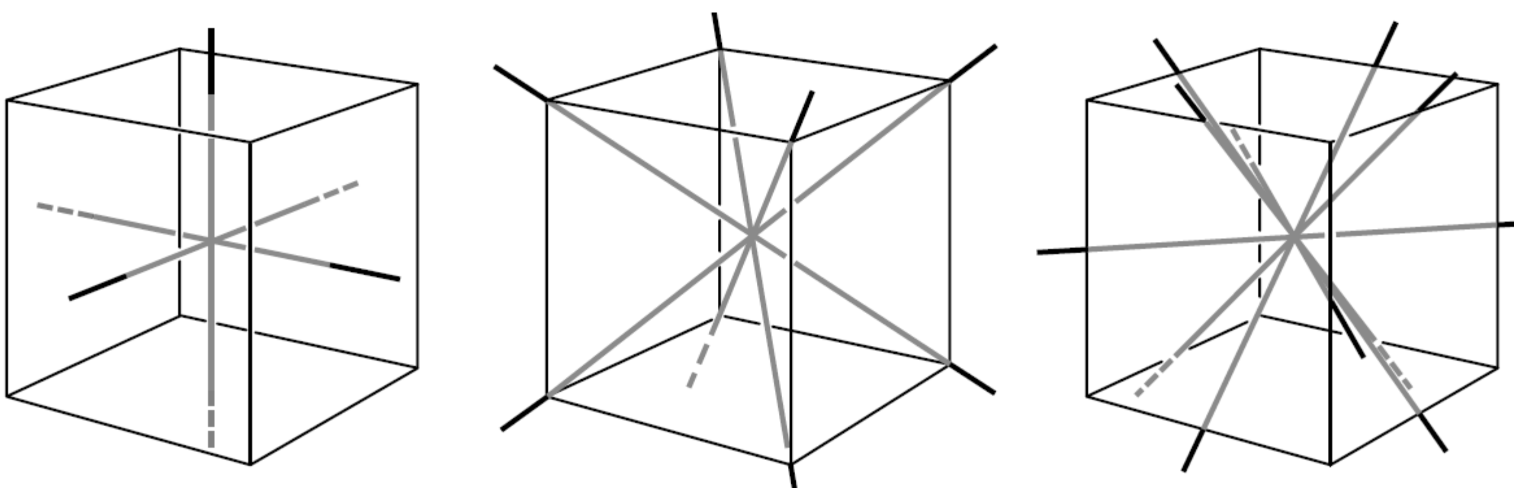
2. Các loại mạng cơ bản

❖ Fundamental types of lattices

➢ *Toán tử đối xứng quay*

- Quay quanh 1 trục (trục đi qua các nút mạng)
- 5 trục quay được ký hiệu : trục quay nhóm 1, 2, 3, 4 và 6
  - Các góc quay tương ứng : $2\pi,\ 2\pi/2,\ 2\pi/3,\ 2\pi/4,\ 2\pi/6$
- Toán tử tịnh tiến mạng $\vec{T}$: mạng tinh thể được mở rộng
- Toán tử quay : mạng tinh thể trở lại chính nó
- Đối xứng mặt : mặt song song, mặt chéo
- Đối xứng quay : trục nhóm 4, nhóm 3 và nhóm 2





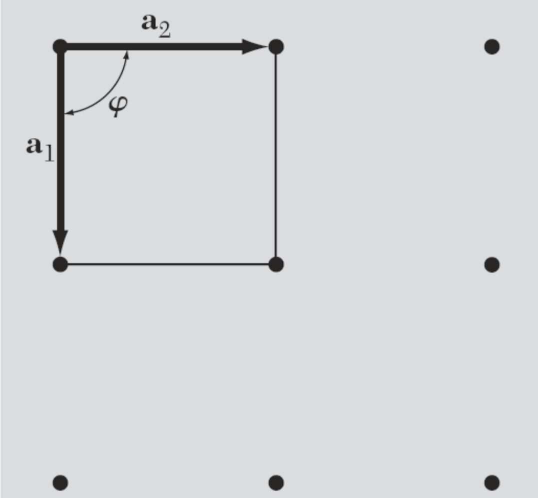
2. Các loại mạng cơ bản

❖ Các loại mạng 2 chiều

➢ *Mạng Bravais :*

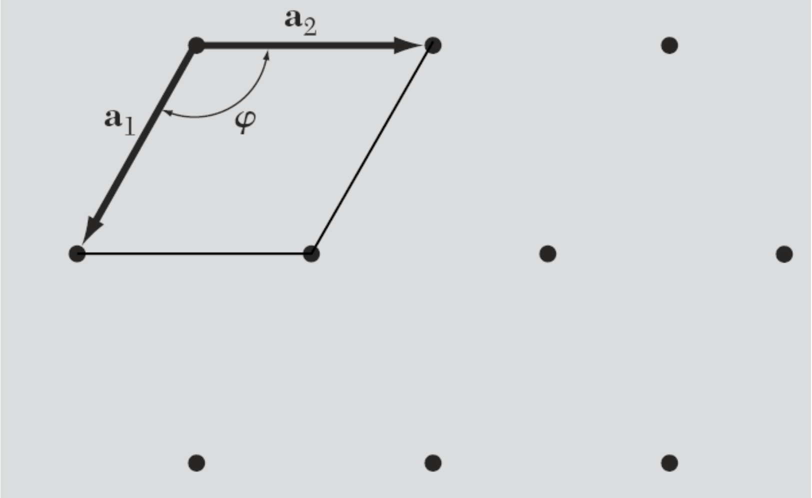
- Phân loại các mạng tinh thể
- Phụ thuộc vào tính bất biến dưới tác dụng của các toán tử đối xứng
- Có 5 loại mạng 2 chiều Bravais (1 loại tổng quát và 4 loại đặc biệt)

Mạng vuông (square)



$$|\vec{a}_1| = |\vec{a}_2|$$
$$\varphi = 90^\circ$$

Mạng lục giác (hexagonal)



$$|\vec{a}_1| = |\vec{a}_2|$$
$$\varphi = 120^\circ$$