PHƯƠNG PHÁP MẠNG CON TRỰC GIAO ĐỀ NGHIÊN CỨU BIÊN HẠT TRONG HỆ SÁU PHƯƠNG

Nguyễn An, Đỗ Thái Hưng

1. Mở đầu :

Biên hạt đóng vai trò quan trọng trong cơ chế hoạt động của nhiều linh kiện điện tử như pin mặt trời, Varistor, linh kiện màng mỏng v.v... Chúng cũng ảnh hưởng mạnh đến các tính chất điện quang của bán dẫn [1, 2, 3].

Trên cơ sở lý thuyết mạng trùng [4, 5] người ta đã nhận được nhiều kết quả lý thú trong mạng lập phương [6, 7, 12, 13], cũng như trong mạng sáu phương [8, 9, 10].

Trong [11] chúng tôi đã đưa ra phương pháp mạng con trực giao đề nghiên cứu mạng trùng của biên hạt thuộc hệ tinh thể bất kỳ. Trong công trình này trình bày việc áp dụng phương pháp đó đề xác định các thông số của biên hạt cho hệ lập phương và đặc biệt cho hệ sáu phương.

2. Biểu thức giải tích của các thông số đặc trưng cho biên hạt :

Ứng với một trục quay $\vec{C}$ xác định, biên hạt được đặc trưng bởi góc quay θ mức độ trùng Σ. Để nghiên cứu cấu hình biên hạt ta còn đưa vào véctơ $\vec{b}_0$ chỉ hướng biên giả đối xứng trong mặt phẳng quay và véctơ $\vec{a}_0$ chỉ pháp tuyến của biên đó. Các véctơ $\vec{a}_0$, $\vec{b}_0$, và $\vec{C}$ lập thành cơ sở của mạng trùng trực giao. Trong [11] đã chứng minh, đối với một cấu trúc bất kỳ có thể xây dựng mạng trùng trực giao cho biên hạt khi biết mạng con trực giao $\vec{q}$, $\vec{p}$, $\vec{c}$.

Từ (6) và (7) của [11] ta suy ra :

$$\vec{p} = [0 \ \sum_{\beta} g_{3\beta} u_{\beta} - \sum g_{2\beta} u_{\beta}] \tag{1}$$

còn

$$\vec{q} = [\vec{p} \times \vec{h}] \tag{2}$$

Vì $\vec{p}$ và $\vec{h}$ đều biểu diễn trong không gian tinh thể, nên $\vec{q}$ – kết quả của phép nhân hữu hướng sẽ được biểu diễn trong không gian mạng đảo. Khi biểu diễn $\vec{q}$ trong không gian mạng tinh thể ta được :

$$\begin{aligned}
q_1 &= g_{11}^{-1} \sum_{\beta} (g_{3\beta} U_{\beta} U_3 + g_{2\beta} U_{\beta} U_2) - g_{12}^{-1} \sum_{\beta} g_{2\beta} U_{\beta} U_1 - g_{13}^{-1} \sum_{\beta} g_{3\beta} U_{\beta} U_1 \\
q_2 &= g_{21}^{-1} \sum_{\beta} (g_{3\beta} U_{\beta} U_3 + g_{2\beta} U_{\beta} U_2) - g_{22}^{-1} \sum_{\beta} g_{2\beta} U_{\beta} U_1 - g_{23}^{-1} \sum_{\beta} g_{3\beta} U_{\beta} U_1 \\
q_3 &= g_{31}^{-1} \sum_{\beta} (g_{3\beta} U_{\beta} U_3 + g_{2\beta} U_{\beta} U_2) - g_{32}^{-1} \sum_{\beta} g_{2\beta} U_{\beta} U_1 - g_{33}^{-1} \sum_{\beta} g_{3\beta} U_{\beta} U_1 .
\end{aligned} \tag{3}$$

Từ (22) của [11] ta có:

$$\operatorname{Sin}\theta = \frac{(-n_1m_2 + n_2m_1)/\vec{h}/}{\sqrt{(n_1^2 + m_1^2 h^2)(n_2^2 + m_2^2 h^2)}} \tag{4}$$

và

$$\Sigma = \sqrt{(n_1^2 + m_1^2 h^2)(n_2^2 + m_2^2 h^2)} \tag{5}$$

trong đó n_1, n_2, m_1, m_2 được xác định bởi điều kiện trùng [11].

$$l_1^2 (n_1^2 + m_1^2 h^2) = l_2^2 (n_2^2 + m_2^2 h^2) \tag{6}$$

Biên sẽ là giả đối xứng nếu $m_1 = -m_2$ và $n_1 = n_2 = n$. Nói cách khác, khi cho trước trục quay $\vec{h}$ mọi tổ hợp 2 giá trị n, m bất kỳ đều ứng với một biên giả đối xứng. Đồng thời

$$\operatorname{Sin}\theta_{sym} = \frac{2nm/\vec{h}/}{n^2 + m^2 h^2} \tag{4.a}$$

và

$$\Sigma_{sym} = n^2 + m^2 h^2 \tag{5.a}$$

còn véctơ:

$$\vec{d} = n\vec{p} + m\vec{q} \tag{7}$$

sẽ là ngắn nhất và được chọn làm véctơ $\vec{b_0}$. Tức là:

$$\vec{b_0} = n\vec{p} + m\vec{q} \tag{8}$$

và

$$\vec{a_0} = [\vec{b_0} \times \vec{h}] = n\vec{q} - mh^2\vec{p} \tag{9}$$

3. Áp dụng cho hệ sáu phương:

Đối với hệ sáu phương:

$$g_{sp} = a^2 \begin{vmatrix} 1 & -1/2 & 0 \\ -1/2 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & C^2/a^2 \end{vmatrix} \tag{10}$$

Khi chú ý đến (10) biểu thức (1) và (3) có dạng:

$$\begin{aligned} p_1 &= 0 \\ p_2 &= 2\mu U_3 \\ p_3 &= \nu(U_1 - 2U_2) \end{aligned} \tag{11}$$

$$\begin{aligned} q_1 &= 4d - 3\nu U_1^2 \\ q_2 &= 2d - 3\nu U_1 U_2 \\ q_3 &= -3\nu U_1 U_3 \end{aligned} \tag{12}$$

$$/h/^2 = \frac{/q/^2}{/p/^2} = \frac{3d}{\mu} \tag{13}$$

trong đó:

$$\frac{\mu}{\nu} = \frac{C^2}{a^2} \tag{14}$$

$$d = \nu U_1^2 + \nu U_2^2 + \mu U_3^2 - \nu U_1 U_2 \tag{15}$$

Điều kiện trùng (6) bây giờ có dạng:

$$l_1^2\left(\mu n_1^2 + 3dm_1^2\right) = l_2^2\left(\mu n_2^2 + 3dm_2^2\right) \tag{16}$$

Từ (13) và (4) suy ra:

$$\sin\theta = \frac{(-n_1m_2 + n_2m_1)\sqrt{3d\mu}}{\sqrt{\mu n_1^2 + 3dm_1^2}\sqrt{\mu n_2^2 + 3dm_2^2}} \tag{17}$$

Đối với biên giả đối xứng ta có:

$$\mathrm{Sin}\,\theta_{sym} = \frac{2mn\sqrt{3d\mu}}{\mu n^2 + 3dm^2} \tag{17.a}$$

và

$$\Sigma = \mu n^2 + 3dm^2 \tag{18}$$

Nếu lấy véctơ $\vec{p}' = 3\vec{p}$ (điều kiện này không làm thay đổi ý nghĩa hình học của biên) thì hệ thức (13) trở thành:

$$/h/^2 = \frac{d}{3\mu} \tag{13.a}$$

và phương trình (17.a) có dạng:

$$\mathrm{Cos}\,\theta = \frac{3\mu n^2 - dm^2}{3\mu n^2 + dm^2} \tag{19}$$

Còn $\Sigma = 3\mu n^2 + dm^2$ (18.a)

Các biểu thức (13.a) và (19) hoàn toàn phù hợp với các kết quả của [9].

Khi thay các giá trị của $\vec{p}$ (11) và $\vec{q}$ (12) vào các phương trình (8) và (9) ta sẽ nhận được biểu thức giải tích đối với các thành phần của các véctơ $\vec{b}_o$ và $\vec{a}_o$

Thảo luận kết quả:

Điều kiện trùng (16) cho phép ta tìm được một tập các giá trị n_i, m_i ứng với một trục quay xác định $\vec{h}$. Trong bảng 1 ta đưa vào tổ hợp các giá trị n_i, m_i ứng với các trục quay khác nhau [001], [120] của hệ sáu phương với tỷ số trục

$$c/a = 1{,}55 \text{ hay } \frac{c^2}{a^2} = \frac{12}{5}.$$

Khi so sánh các phương trình (17) và (17.a) ta suy ra rằng, ứng với một cặp giá trị n, m xác định tùy ý ta luôn luôn tìm được một tập cặp các giá trị n_i^*, m_i^* (với i = 1,2) đồng thời thỏa mãn phương trình:

$$\frac{2nm}{\mu n^2 + 3dm^2} = \frac{-n_1^* m_2^* + n_2^* m_1^*}{\sqrt{\mu n_1^{*2} + 3dm_1^{*2}}\sqrt{\mu n_2^{*2} + 3dm_2^{*2}}} \tag{20}$$

Tức là tồn tại những đoạn biên định hướng khác nhau ứng với cùng một trục quay $\vec{h}$ và góc quay θ. Trong bảng 2 ta đưa vào những biên như vậy.

Nếu gọi φ_f là góc giữa véctơ định hướng $\vec{b}$ của đoạn biên bất kỳ với véctơ định hướng $\vec{b}_o$ của đoạn biên giả đối xứng thì giá trị của φ_f có thể được tính trực

Bảng 1 **— Các thông số mạng trùng ứng với các trục quay khác nhau**

N°	n	m	$\vec{b}_0$	$\vec{a}_0$	Σ	θ
1	2	1	[230]	$[4\bar{1}0]$	7	81.75
2	3	2	[450]	3 [210]	7	81.75
3	4	1	[250]	[810]	19	46.81
4	5	1	2 [130]	2 [510]	7	38.25
5	1	2	[430]	$[2\bar{5}0]$	13	32.17
6	1	3	2 [320]	$2\,[1\bar{4}0]$	7	21.75
7	1	5	[530]	$[1\bar{7}0]$	19	65.67
8	3	5	2 [540]	$6\,[1\bar{2}0]$	7	38.25
9	5	1	2 [120]	$2\,[5\bar{4}0]$	7	38.25

$\vec{C} = [001]$ $\quad\vec{p} = [010]$ $\quad\vec{q} = [210]$

$h^2 = \dfrac{5}{4}$ $\quad\Sigma = 4n^2 + 5m^2$

$\vec{b}_0 = [2m \; m+n \; 0]$ $\quad\vec{a}_0 = [2n - 3m + n \; 0]$

N°	n	m	$\vec{b}_0$	$\vec{a}_0$	Σ	θ
24	1	1	$[30\bar{1}]$	[405]	19	31.75
25	1	2	$[60\bar{1}]$	2 [205]	32	18.25
26	3	1	$3\,[10\bar{1}]$	[12.0.5]	17	36.10
27	3	2	$3\,[20\bar{1}]$	2 [605]	16	38.75
28	2	1	$[30\bar{2}]$	[805]	31	37.50

$\vec{C} = [120]$ $\quad\vec{p} = [001]$ $\quad\vec{q} = [300]$

$\mu = 12$ $\quad\nu = 5$ $\quad d = 15$

$h^2 = \dfrac{15}{4}$ $\quad\Sigma = 4n^2 + 15m^2$

$\vec{b}_0 = [3m \; 0 \; \bar{n}]$ $\quad\vec{a}_0 = [4n \; 0 \; 5m]$

tiếp từ các chỉ số của chúng. Từ cột cuối cùng của bảng 2, ta có thể thấy, giống như hệ lập phương, trong hệ sáu phương phổ giá trị của φ_f không phụ thuộc vào góc quay θ mà chỉ phụ thuộc vào chỉ số của trục quay $\vec{h}$. Đồng thời phổ các giá trị của φ_f cũng thỏa mãn hệ thức:

$$\mathrm{tg}\,\varphi_f = |\vec{h}| . \frac{M}{N} \tag{21}$$

trong đó M, N là những số nguyên.

Trong bảng 3 đưa vào phổ giá trị của φ_f đối với các trục quay khác nhau khi tính theo công thức (21). Vì trục $\vec{h} = [001]$ là trục quay cấp 6 và có 6 mặt đối xứng đi qua nó, nên ta nhận được 6 đoạn biên đối xứng. Chẳng hạn các biên N° 2, 3, 5, 7, 9, 10 trong bảng 1. Khác với hệ lập phương chỉ số các mặt thuộc hai nửa tinh thể của biên đối xứng không nhất thiết thuộc cùng một họ ký hiệu. Chẳng hạn đối với biên Σ = 7 khi $\vec{b}_1$ = [310] thì $\vec{b}_2$ = [320]; với biên Σ = 13 khi $\vec{b}_1$ = [130] thì $\vec{b}_2$ = [110].

Các trục [100] và [120] là các trục cấp 2 và đều nằm trong mặt đối xứng, do vậy theo [11] ta có thể tìm được 2 đoạn biên đối xứng vuông góc với nhau. Khi đó $\vec{a}_0$ sẽ là pháp tuyến của đoạn biên định hướng theo $\vec{b}_0$, và ngược lại, $\vec{b}_0$ là pháp tuyến của đoạn biên đối xứng theo $\vec{a}_0$. Theo Friedel [15] phép quay 180° xung quanh một hướng thích hợp trong tinh thể làm xuất hiện song tinh trong cấu trúc, tức là làm xuất hiện mạng trùng. Bởi vậy $\vec{a}_0$ và $\vec{b}_0$ đều là những

Bảng 2 — Các đoạn biên khác nhau ứng với $\vec{C}$ = [001]

$\vec{b}_0$ = [230]; $\vec{a}_0$ = [410]

n_1	m_1	$\vec{b}_1$	$\vec{a}_1$	n_2	m_2	$\vec{b}_2$	$\vec{a}_2$	φ_f	M	N
−1	3	2[310]	2[1$\bar{5}$0]	5	1	2[1.3.0]	2[5.1.0]	60,0°	1	1
−1	5	[10.1.0]	8.$\overline{19}$.0]	8	3	[6.11.0]	[16.$\bar{1}$.0]	40,89°	1	2
−1	1	14[100]	2[$\bar{1}$.$\bar{2}$.0]	11	5	2[5.8.0]	[11.2.0]	30,00°	1	3
−13	11	2[11.$\bar{1}$.0]	2[13.23.0]	17	9	2[9.13.0]	2[17.5.0]	19,10°	1	5
1	4	[8.5.0]	[2.$\overline{11}$.0]	1	0	[010]	[2.10.2]	73.89°	2	1
3	5	2[5.1.0]	6[1.2.0]	9	−1	2[$\bar{1}$.4.0]	6[3.2.0]	79.10°	3	1
5	6	[12.11.0]	[10.13.0]	11	−2	[$\bar{1}$.9.0]	[22.17.0]	83.71°	5	1

Bảng 3 — $\operatorname{tg} \varphi_f = /\vec{h}/ \dfrac{M}{N}$

N°	M	N	φ_f [001]	φ_f [100]	φ_f [120]
1	1	1	60,0	48,19°	62,68°
2	1	2	40,89	29,20°	44,07°
3	1	3	30,00°	20,44°	32,84°
4	1	4	23,41°	15,61°	25,83°
5	2	1	73,89°	65,90°	75,52°
6	3	1	79,10°	73,39°	80,23°
7	4	1	81,78°	77,39°	82,64°
8	5	1	83,41°	79,85°	84,10°
9	6	1	84,50°	81,52°	85,08°

Bảng 4 — **Các mạng tương ứng với trục quay và góc quay khác nhau.**

:/a	Σ / μ|ν	7	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	1
ıy ý	$\vec{a}_o$ $\vec{b}_o$ $\vec{c}$ θ	310 510 001 21.75					410 720 001 27.75						52 81 00 13.
.60	18/7						211 12.6.7 010 85°60				421 637 0.1.0 49°66		
,62	21/8		212 14.7.4 010 56°25				302 704 1.2.0 85°60		214 14.7.2 010 29°92		304 702 120 49°66		
.63	8/3			201 403 120 78°41	101 803 120 62°92			203 401 120 44°41			211 16.8.9 010 26°66	423 843 010 75°92	
.64	27/10												2 10. 0 86
,66	11/4					102 1102 120 33°60		212 22.11 6 010 38°40	101 1104 010 62°16				

trục quay của các phép quay 180°. Kết quả đó phù hợp với nhận xét của P. Delavignette [10].

Bảng 4 đưa vào các thông số của mạng trùng của các biên hạt trong kim loại hoặc các bán dẫn hợp chất thuộc hệ sáu phương với các tỷ số trục c/a khác nhau. Trong mỗi ô của bảng, từ trên xuống ta ghi các thông số mạng trùng $\vec{a}_o$, $\vec{b}_o$, $\vec{c}$, θ. Khi chú ý đến sự tương đương trong việc mô tả các phép quay 180° bằng các véctơ $\vec{a}_o$ và $\vec{b}_o$ thì các kết quả của bảng 4 hoàn toàn phù hợp với các bảng mạng trùng trong [8, 9, 10].

5. Kết luận:

Bằng phương pháp mạng con trực giao đã xác định được các thông số mạng trùng của hệ sáu phương. Đã thiết lập bảng mạng trùng cho một số kim loại và bán dẫn. Cũng đã chứng minh được rằng, giống như trong hệ lập phương, cấu hình biên hạt (phổ giá trị của φ_f) trong hệ sáu phương không phụ thuộc vào góc quay θ mà chỉ phụ thuộc vào chỉ số của trục quay $\vec{h}$.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

1. Matare. H.F., Laakso C.W., J. appl. phys. **40**, 476 (1969).
2. Pike G.E., Seager C.H., J. appl. Phys. **50**, 3414 (1969).
3. Collogue international sur les semiconductors polycrystallins, Parpignan (France), Journ. Phys. **43**, C — 4 (1982).
4. Ranganathan S., Acta Crystal. **A22**, 197 (1966).
5. Grimmer H. Scr. Metall **7**, 1295 (1973)
6. Karakotas Th., Bleris G. L., Antonopoules J. Phys. stat. sol (a), **55** 801, 1979.
7. Andreeva A.V., Fionova L.K. Fiz. Metallow i Metallovedenie **44**, 395 (1977).
8. Bonnet R., Cousineau E., Warrington D.H. Acta Cryst **A37**, 184 (1981).
9. Bleris G.L., Nouet G., Hagège S., Delavignette P. Acta Cryst, **A38**, 550 (1982).
10. Delavignette, P. Journ. Phys **43**, C 6 — 1 (1982).
11. Nguyễn An, Rothkirch L., Herrmann R. Crysta. Res Technol. **20**, 683 (1985).
12. Nguyễn An, Worm G., Herrmann R. Phys. stat. sol. (b) **114**, 349 (1982).
13. Nguyễn An, Herrmann R., Worm G., phys. stat. sol. (b) **116**, 501 (1983).
14. Herrmann R., Nguyễn An, Worm G., Crystal Rer. Technol **19**, 1607 (1984).
15. Friedel G., Lecons de Cristallographie, Blauchard, Paris (Reprinted 1964).

Нгуен Ан, До Тхай Хынг

МЕТОД ОРТОГОНАЛЬНОЙ ПОДРЕШЁТКИ ДЛЯ ИЗУЧЕНИЙ ГРАНИЦ ЗЕРН В ГЕКСАГОНАЛЬНЫХ КРИСТАЛЛАХ

Метод ортогональной подрещётки применялся для изучений гексагонального кристалла.

Созданы таблицы совпадающих ориентаций для различных осевых отношений с разумными значениями $(c/a)^2$

Nguyen An, Đo Thai Hưng

THE ORTHOGINAL SUBLATTICE METHOD FOR THE INVESTIGATION OF THE GRAIN BOUNDARIES IN THE HEXAGONAL CRYSTAL

A method of the orthogonal sublattice is prororsed for hoxagonal crystals. The tables of coincidence orientation are established for different axial ratios with rational values of $(C/a)^2$

Bộ môn Vật lý chất rắn
Trường Đại học Tổng hợp Hà nội

Nhận bài ngày 25-10-1986