

TRƯỜNG ĐẠI HỌC MỎ - ĐỊA CHẤT



BÁO CÁO HỌC THUẬT

NĂM HỌC 2025 – 2026

XÂY DỰNG BÀI GIẢNG CHI TIẾT CHƯƠNG 2 MÔN VẬT LÝ CHẤT RẮN: NHIỄU XẠ VÀ MẠNG ĐẢO

Người báo cáo: Nguyễn Thị Diệu Thu

Đơn vị: Bộ môn Vật lí

Hà Nội, 06/ 2026

MỞ ĐẦU

Học phần "Vật lý chất rắn" là môn học thuộc môn cơ sở ngành của ngành "Kỹ thuật vật liệu". Kỹ thuật vật liệu là một ngành mới, các môn học bắt đầu được giảng dạy, để cho nội dung bài giảng phù hợp với ngành đào tạo, số tín chỉ của môn học, báo cáo này sẽ trình bày nội dung "Chương 2. Nhiễu xạ và mạng đảo" của học phần "Vật lý chất rắn".

Nội dung của chương 2 được trình bày chi tiết gồm 4 phần:

- A- Mạng đảo
- B- Sóng tinh thể
- C- Nhiễu xạ
- D- Cách xây dựng của Ewald về điều kiện Laue

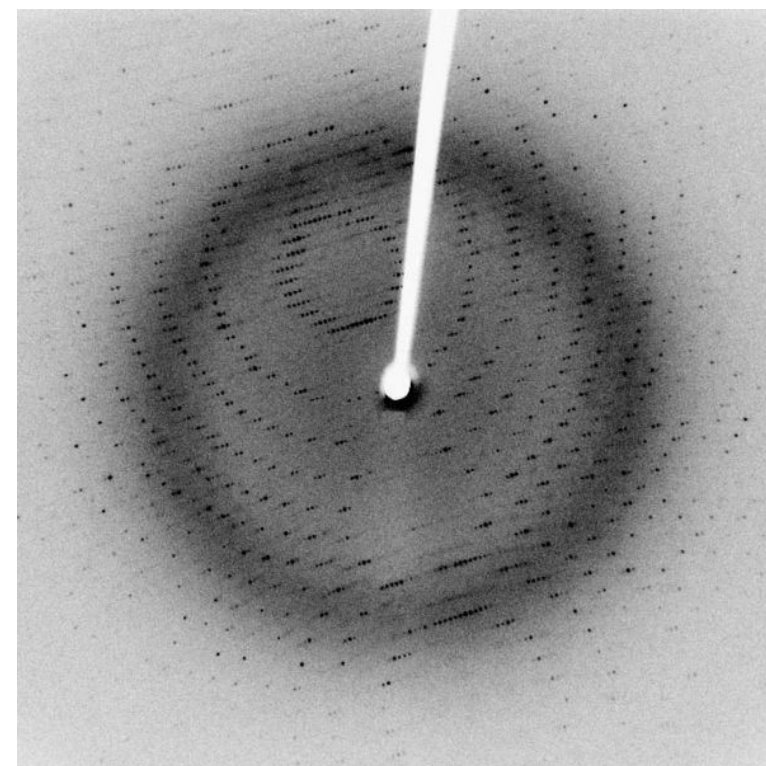
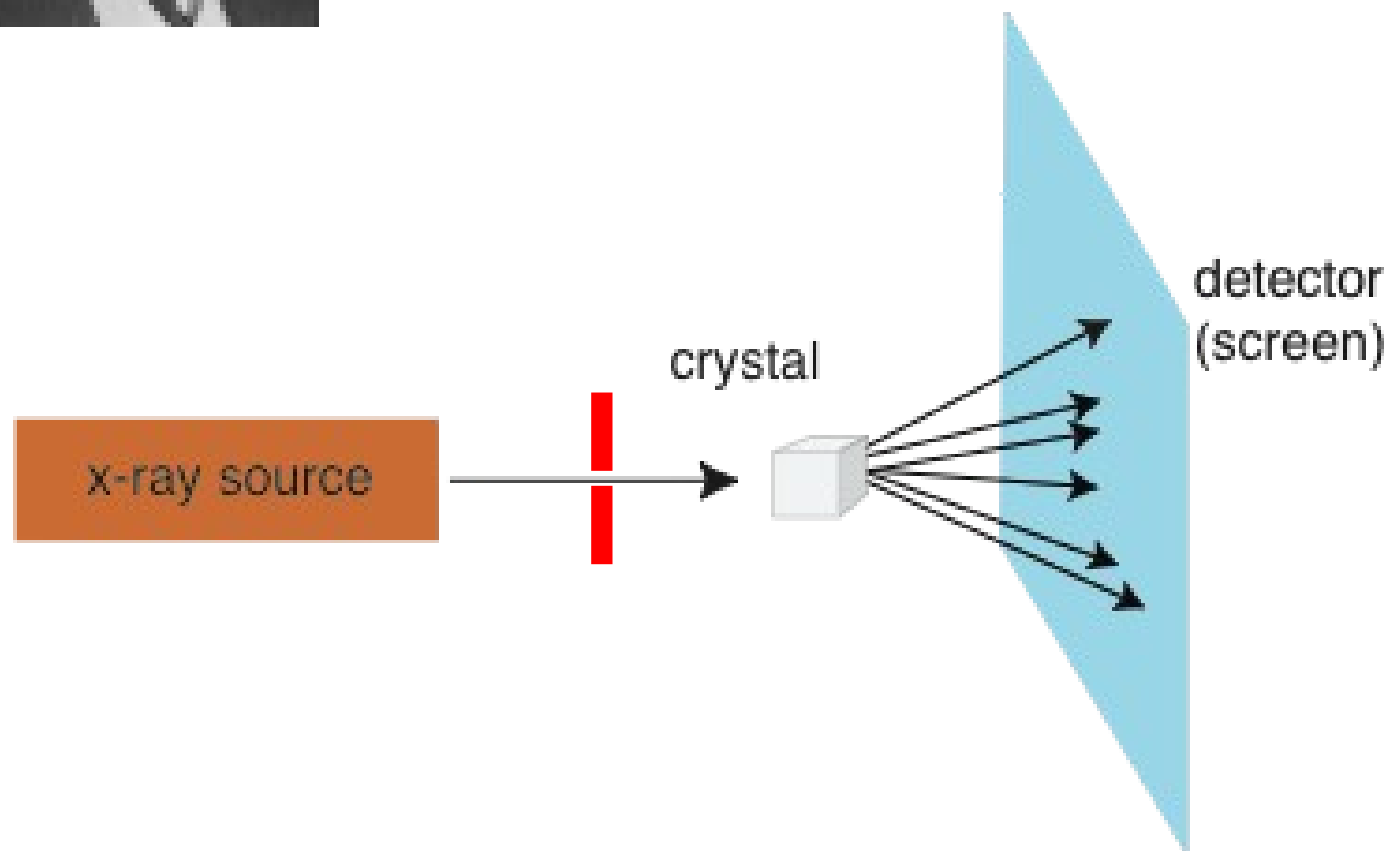
Nhiễu xạ tia X (X-ray diffraction)

- Cấu trúc nguyên tử của tinh thể không thể được quan sát qua kính hiển vi quang học do bước sóng của ánh sáng quá lớn (khoảng 400 nm).
- Để quan sát được cấu trúc nguyên tử người ta phải sử dụng các bước sóng ngắn như tia X, điện tử, neutron ...
- Do đó, người ta sử dụng nhiễu xạ tia X để quan sát cấu trúc vật liệu.

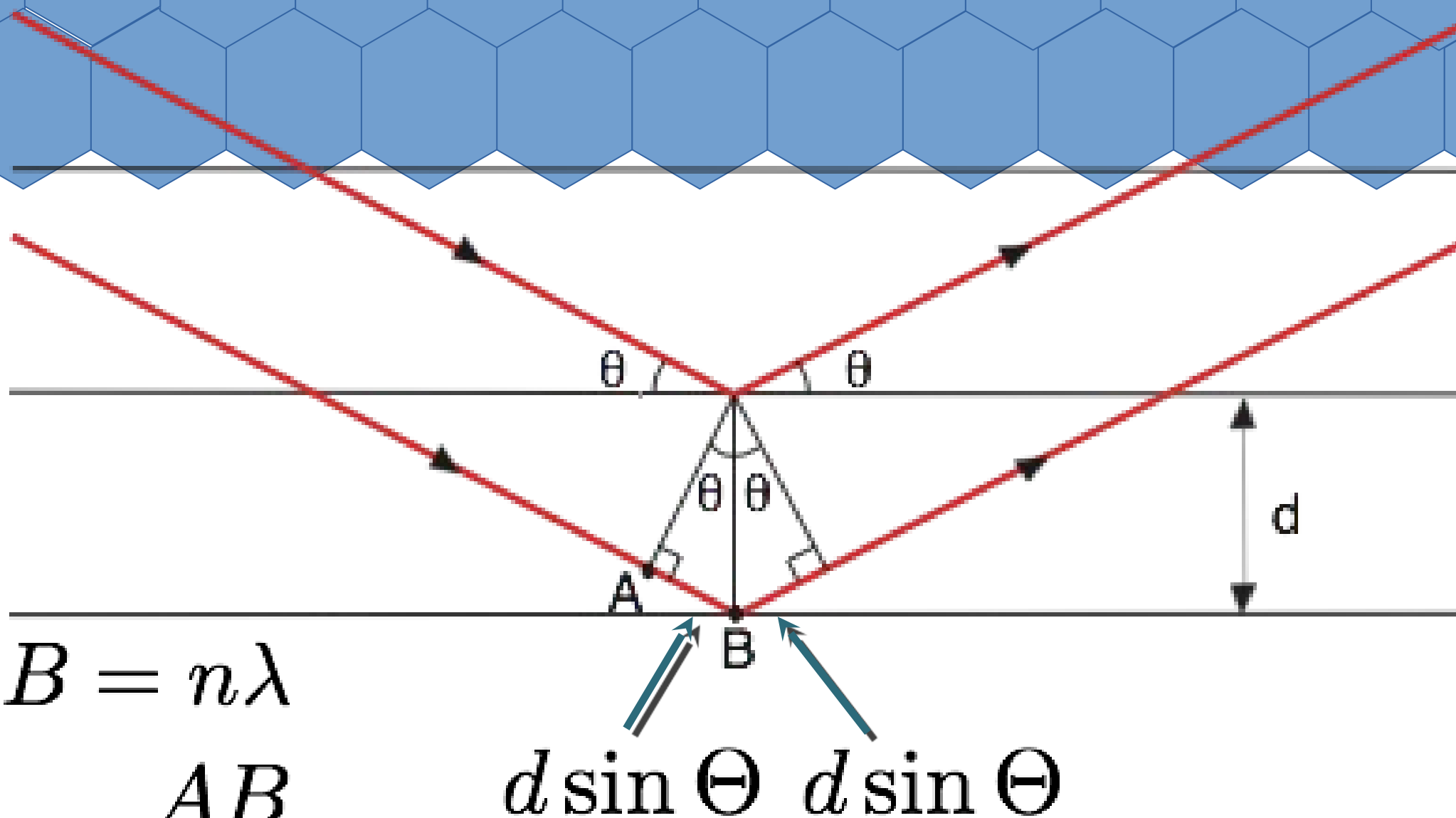
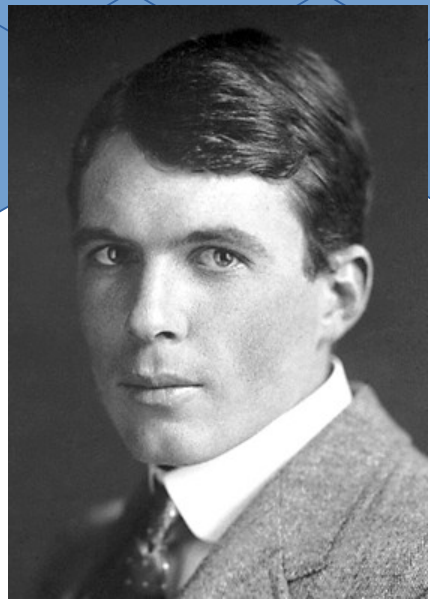
Nhiều xạ tia X (X-ray diffraction)



Von Laue, 1912



Điều kiện nhiễu xạ của Bragg(1912)



$$2AB = n\lambda$$

$$\sin \Theta = \frac{AB}{d}$$

$$n\lambda = 2d \sin \Theta$$

chú ý:

$$\lambda < 2d$$

- giao thoa tăng cường trên tất cả các mặt phẳng song song nhau

Chương 2: Mạng đảo và nhiễu xạ (Reciprocal lattice and diffraction) A- Mạng đảo

I. Phân tích hàm tuần hoàn theo chuỗi Fourier

- Tinh thể chất rắn có cấu trúc tuần hoàn theo véc tơ dịch chuyển mạng: $\mathbf{T} = n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2 + n_3 \mathbf{a}_3$
- Tính chất vật lý cũng có tính tuần hoàn với cùng chu kỳ $\mathbf{T}$ và được mô tả bởi các hàm tuần hoàn,

vd: hàm mật độ điện tử là hàm tuần hoàn theo chu kỳ $\mathbf{T}$,

$$n(\mathbf{r}) = n(\mathbf{r} + \mathbf{T})$$

Chương 2: Mạng đảo và nhiễu xạ (Reciprocal lattice and diffraction)

A- Mạng đảo

I. Phân tích hàm tuần hoàn theo chuỗi Fourier

1. Khai triển Fourier cho mạng tinh thể 1 chiều, véc tơ cơ sở a , véc tơ dịch chuyển mạng $T = pa$, p là số nguyên.

- Giả sử hàm $n(x)$ mô tả tính chất vật lý của mạng 1 chiều tuần hoàn, $n(x) = n(x+pa)$

- Phân tích hàm $n(x)$ theo chuỗi Fourier 1 chiều:
$$n(x) = \sum_p n_p \exp(i2\pi px/a)$$

↖ ảnh Fourier

- Ảnh Fourier của hàm $n(x)$ được biểu diễn như sau:
$$n_p = a^{-1} \int_0^a dx n(x) \exp(-i2\pi px/a)$$

Chương 2: Mạng đảo và nhiễu xạ (Reciprocal lattice and diffraction)

A- Mạng đảo

I. Phân tích hàm tuần hoàn theo chuỗi Fourier

1. Khai triển Fourier cho mạng tinh thể 1 chiều, véc tơ cơ sở a , véc tơ dịch chuyển mạng $T = pa$, p là số nguyên.

• Sử dụng tính chất của hàm Delta: $\delta(x - \alpha) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ip(x-\alpha)} dp = 1$ nếu $x = a$

= 0 trong trường hợp còn lại

• Đưa vào khái niệm **véc tơ mạng đảo 1 chiều**: $g = pb = p \frac{2\pi}{a}$, trong đó b là véc tơ cơ sở của mạng đảo. p là số nguyên bất kỳ.

Chương 2: Mạng đảo và nhiễu xạ (Reciprocal lattice and diffraction)

A- Mạng đảo

I. Phân tích hàm tuần hoàn theo chuỗi Fourier

2. Tinh thể tùy ý 3 chiều có 3 véc tơ cơ sở a, b, c không nhất thiết trực giao nhau

- Khai triển Fourier tương tự cho trường hợp 3 chiều, ta thu được ảnh Fourier 3 chiều:

$$n_{\mathbf{G}} = V_c^{-1} \int_{\text{cell}} dV n(\mathbf{r}) \exp(-i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r})$$

Chương 2: Mạng đảo và nhiễu xạ (Reciprocal lattice and diffraction)

A- Mạng đảo

Véc tơ dịch chuyển mạng tinh thể:

$$\mathbf{R} = m\mathbf{a}_1 + n\mathbf{a}_2 + o\mathbf{a}_3$$

Mối liên hệ giữa véc tơ dịch chuyển mạng và mạng đảo :

$$\mathbf{R} \cdot \mathbf{G} = 2\pi l \quad \text{hoặc} \quad e^{i\mathbf{G} \cdot \mathbf{R}} = 1$$

Véc tơ dịch chuyển mạng đảo có dạng:

$$\mathbf{G} = m'\mathbf{b}_1 + n'\mathbf{b}_2 + o'\mathbf{b}_3$$

Chương 2: Mạng đảo và nhiễu xạ (Reciprocal lattice and diffraction)

A- Mạng đảo

$$\mathbf{R} = m\mathbf{a}_1 + n\mathbf{a}_2 + o\mathbf{a}_3$$

$$\mathbf{G} = m'\mathbf{b}_1 + n'\mathbf{b}_2 + o'\mathbf{b}_3$$

Véc tơ cơ sở mạng đảo được biểu diễn như sau:

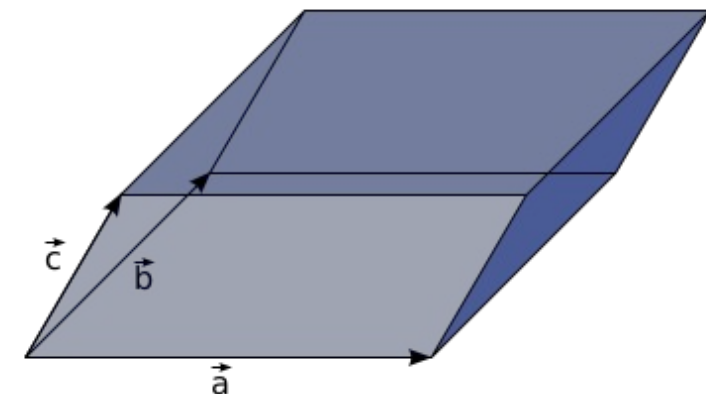
$$\mathbf{b}_1 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3}{\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)} \quad \mathbf{b}_2 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1}{\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)} \quad \mathbf{b}_3 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2}{\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)}$$

Mối liên hệ tổng quát giữa véc tơ cơ sở mạng đảo và mạng tinh thể :

$$\mathbf{a}_i \cdot \mathbf{b}_j = 2\pi\delta_{ij}$$

Vì vậy, ta có:

$$\mathbf{R} \cdot \mathbf{G} = 2\pi l$$



Chương 2: Mạng đảo và nhiễu xạ (Reciprocal lattice and diffraction)

A- Mạng đảo

Ví dụ mạng đảo 2 chiều

$$\mathbf{R} = m\mathbf{a}_1 + n\mathbf{a}_2$$

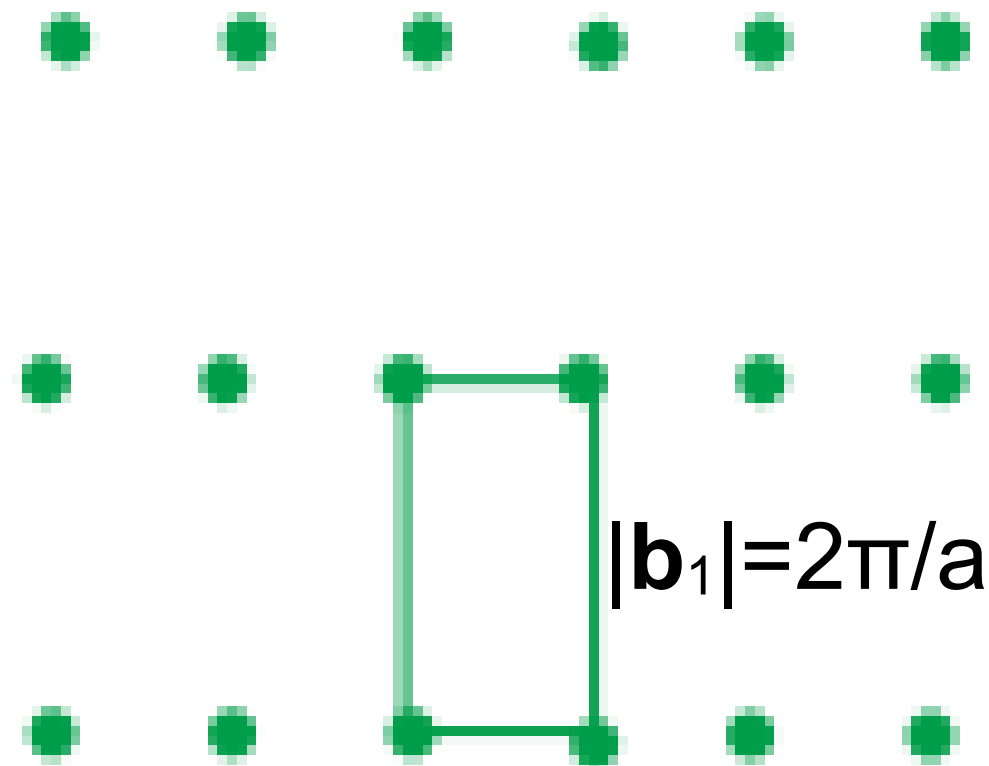
$$\mathbf{G} = m\mathbf{b}_1 + n\mathbf{b}_2$$

$$\mathbf{a}_i \cdot \mathbf{b}_j = 2\pi\delta_{ij}$$



$$|\mathbf{a}_2|=b$$

$$|\mathbf{a}_1|=a$$



$$|\mathbf{b}_1|=2\pi/a$$

$$|\mathbf{b}_2|=2\pi/b$$

Chương 2: Mạng đảo và nhiễu xạ (Reciprocal lattice and diffraction)

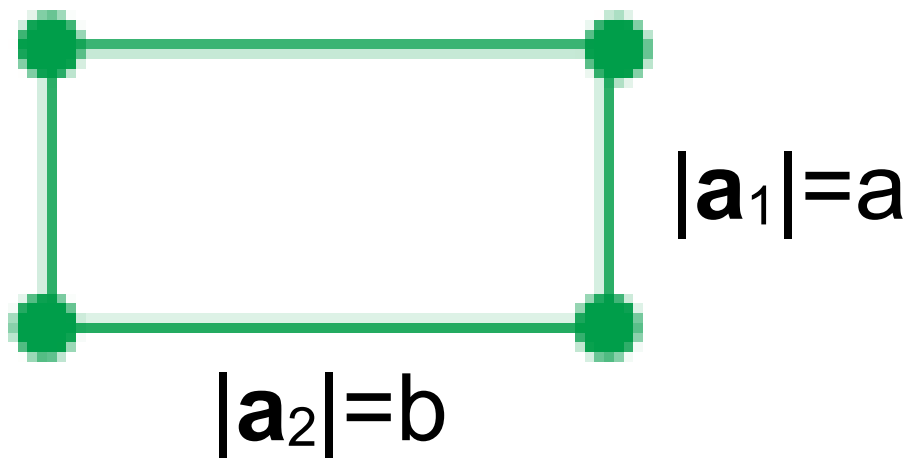
A- Mạng đảo

$$\mathbf{R} = m\mathbf{a}_1 + n\mathbf{a}_2$$

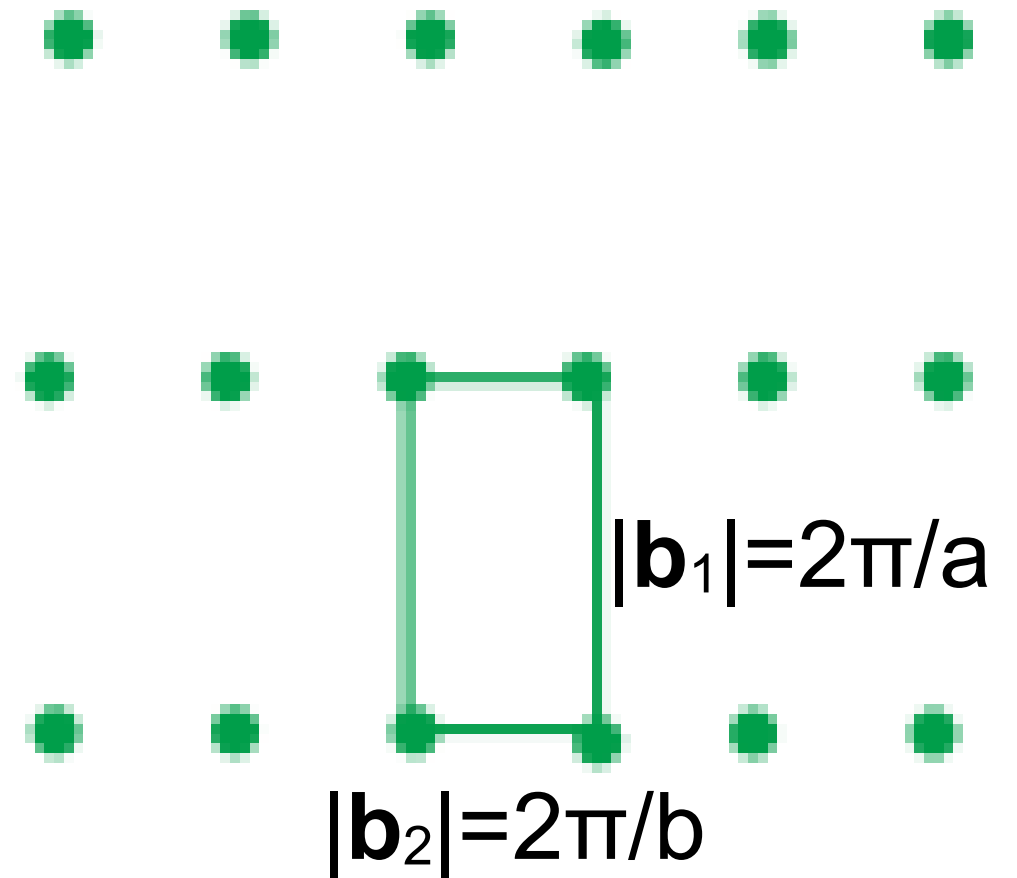
$$\mathbf{G} = m\mathbf{b}_1 + n\mathbf{b}_2$$

$$\mathbf{a}_i \cdot \mathbf{b}_j = 2\pi\delta_{ij}$$

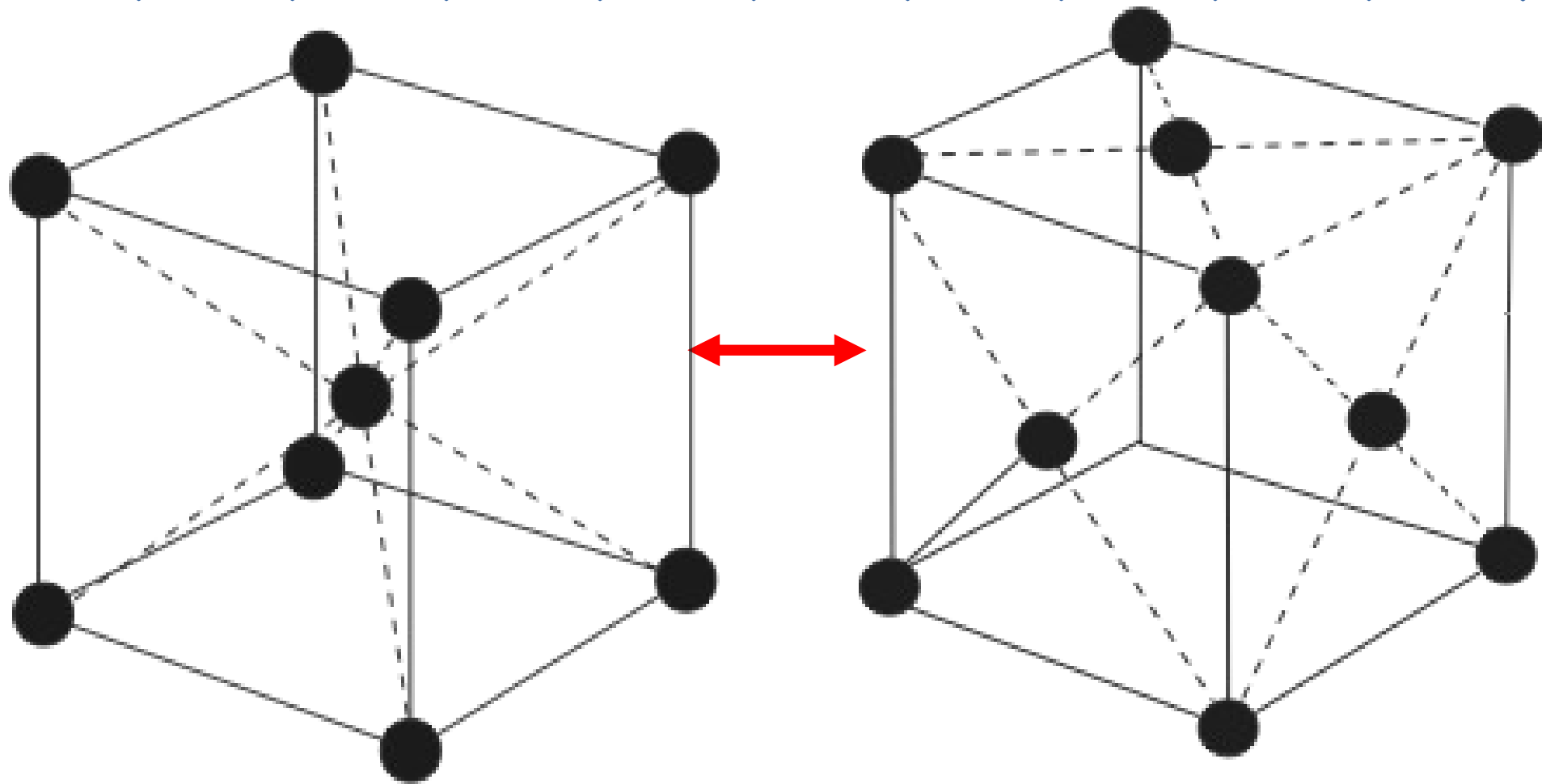
Mạng tinh thể thực



Mạng đảo



Một số ví dụ về mạng đảo trong không gian 3 chiều



$$\mathbf{b}_1 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3}{\mathbf{a}_1(\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)}$$

$$\mathbf{b}_2 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1}{\mathbf{a}_1(\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)}$$

$$\mathbf{b}_3 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2}{\mathbf{a}_1(\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)}$$

Mạng đảo của mạng lập phương tâm khối là lập phương tâm mặt và ngược lại

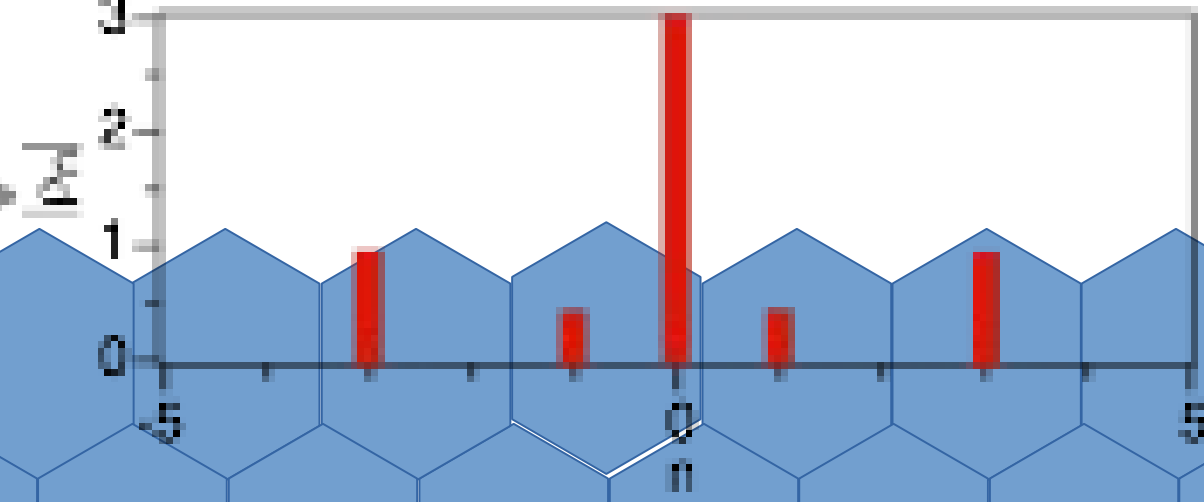
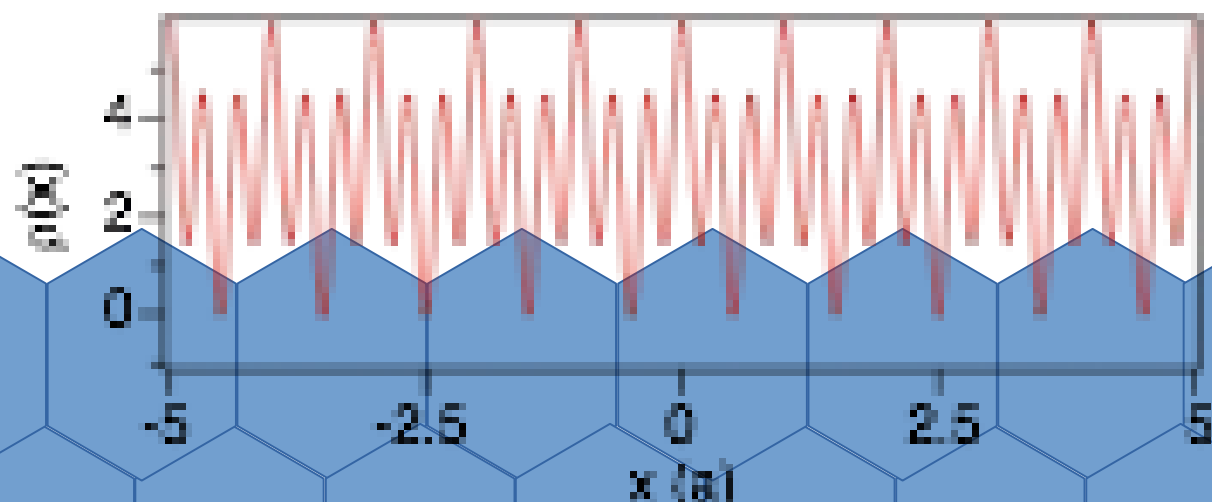
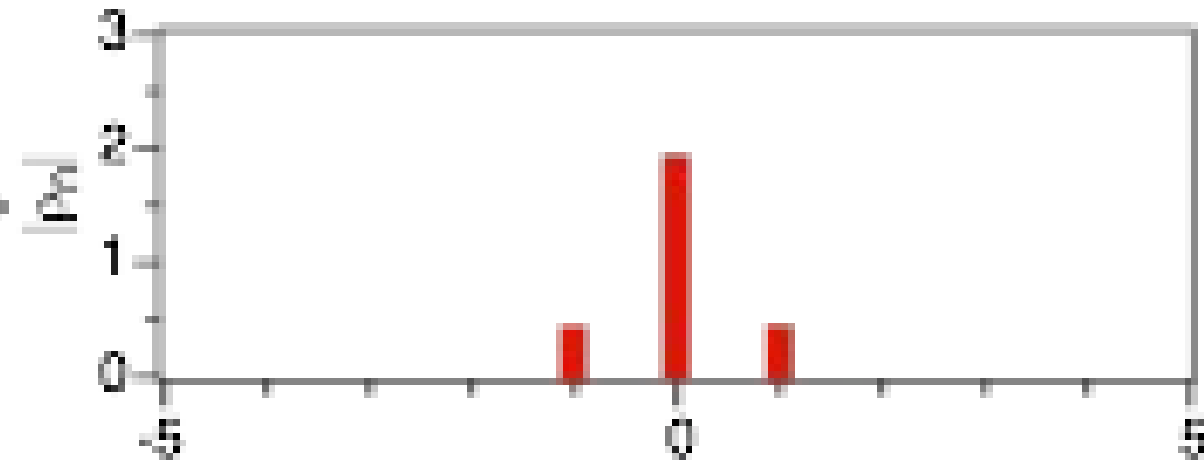
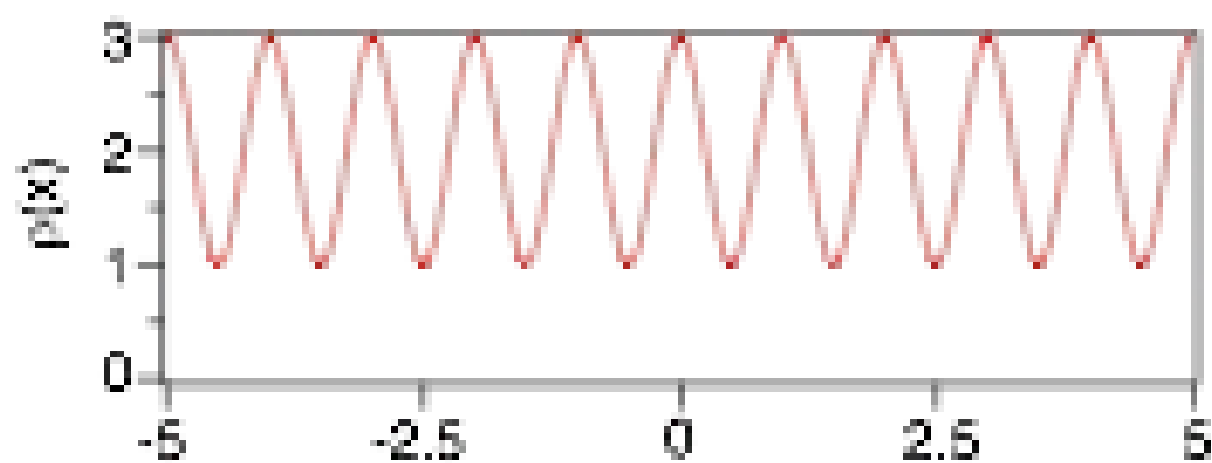
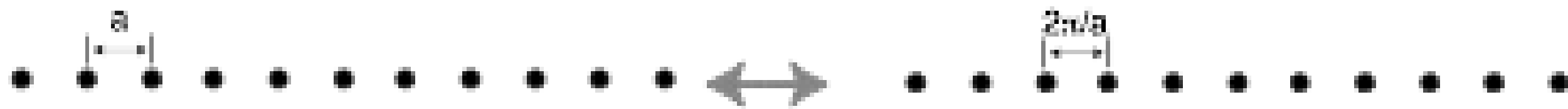
Ứng dụng của mạng đảo một chiều

$$\rho(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \rho_n e^{inx2\pi/a}$$

real space

$$g = n \frac{2\pi}{a}$$

reciprocal space



Chương 2: Mạng đảo và nhiễu xạ (Reciprocal lattice and diffraction)

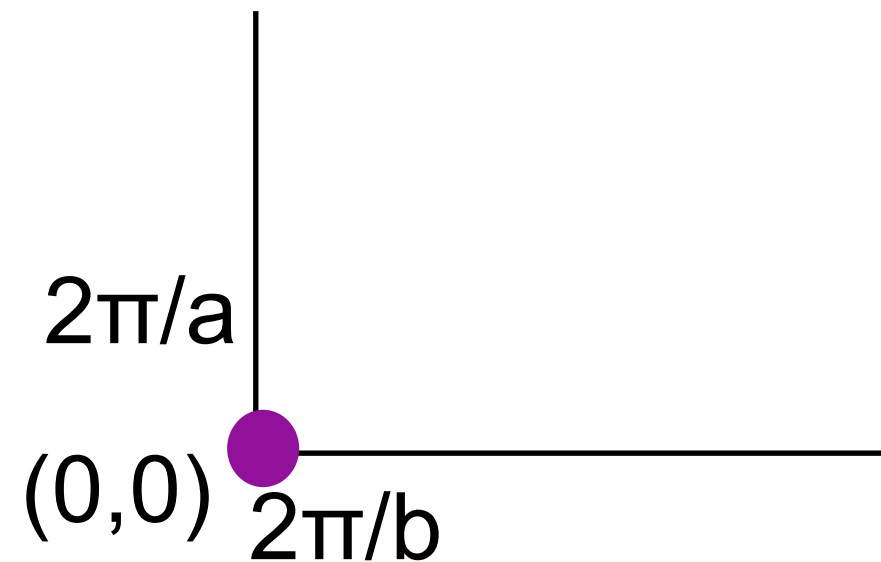
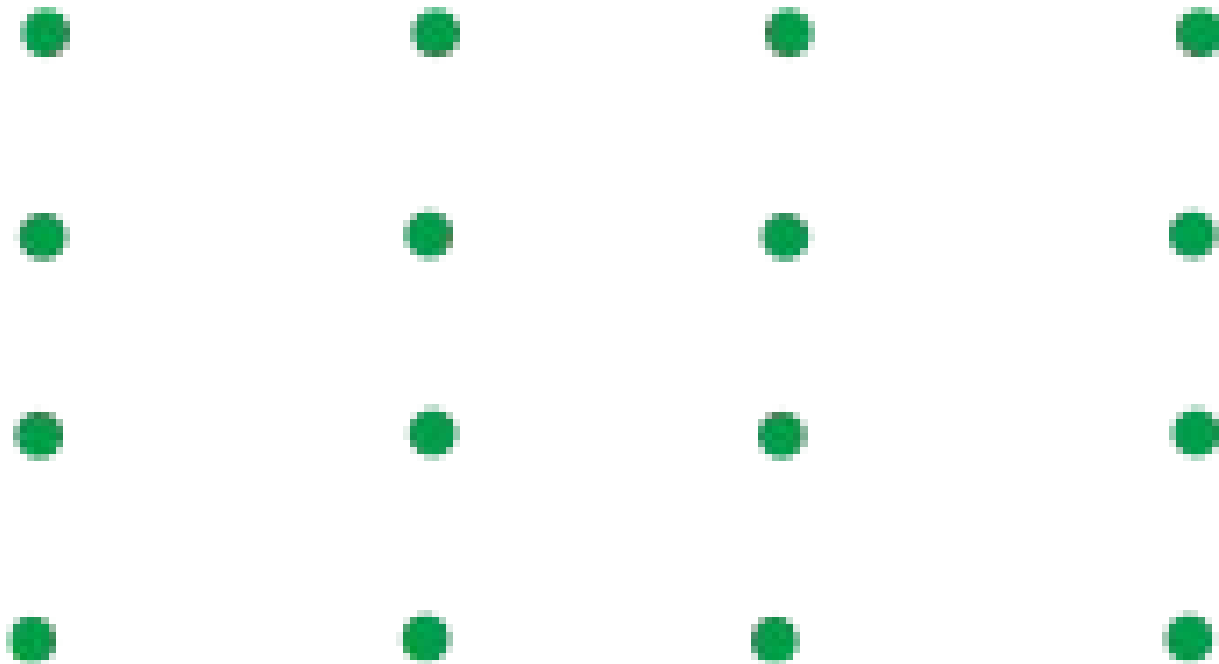
B- Sóng tinh thể (Lattice wave)

Mạng tinh thể thực

Mạng đảo

b

a

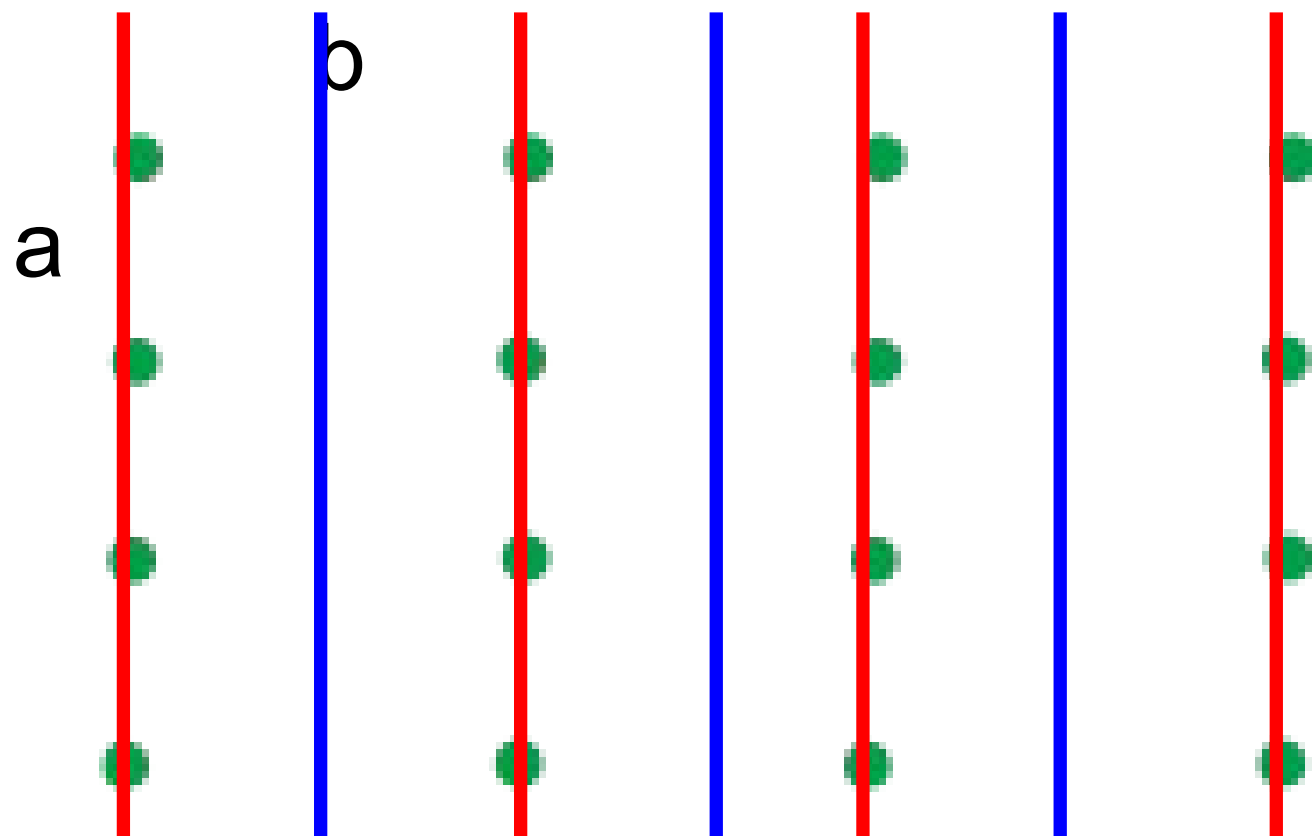


$$e^{i\mathbf{G}\mathbf{r}} = e^{i\mathbf{G}\mathbf{r}} e^{i\mathbf{G}\mathbf{R}} = e^{i\mathbf{G}(\mathbf{r}+\mathbf{R})}$$

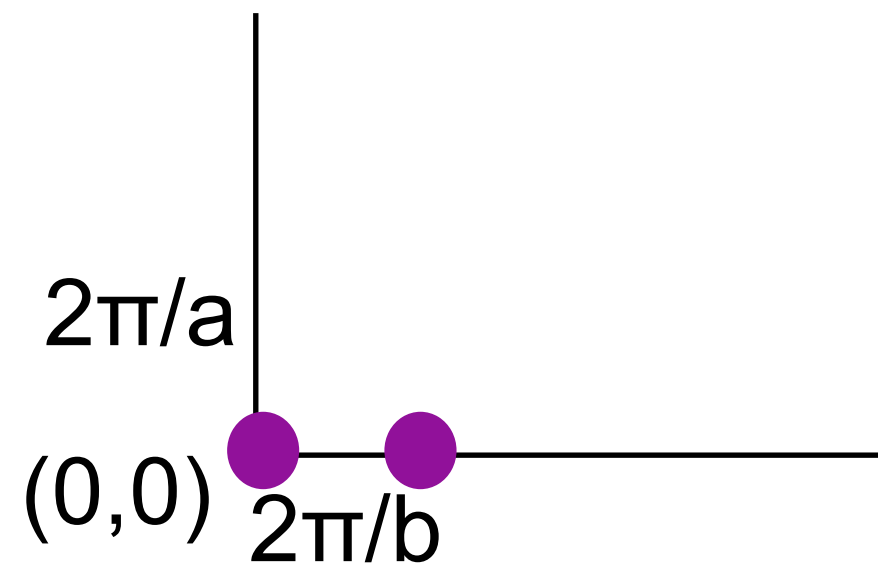
Chương 2: Mạng đảo và nhiễu xạ (Reciprocal lattice and diffraction)

A- Sóng tinh thể (Lattice wave)

Mạng tinh thể thực



Mạng đảo



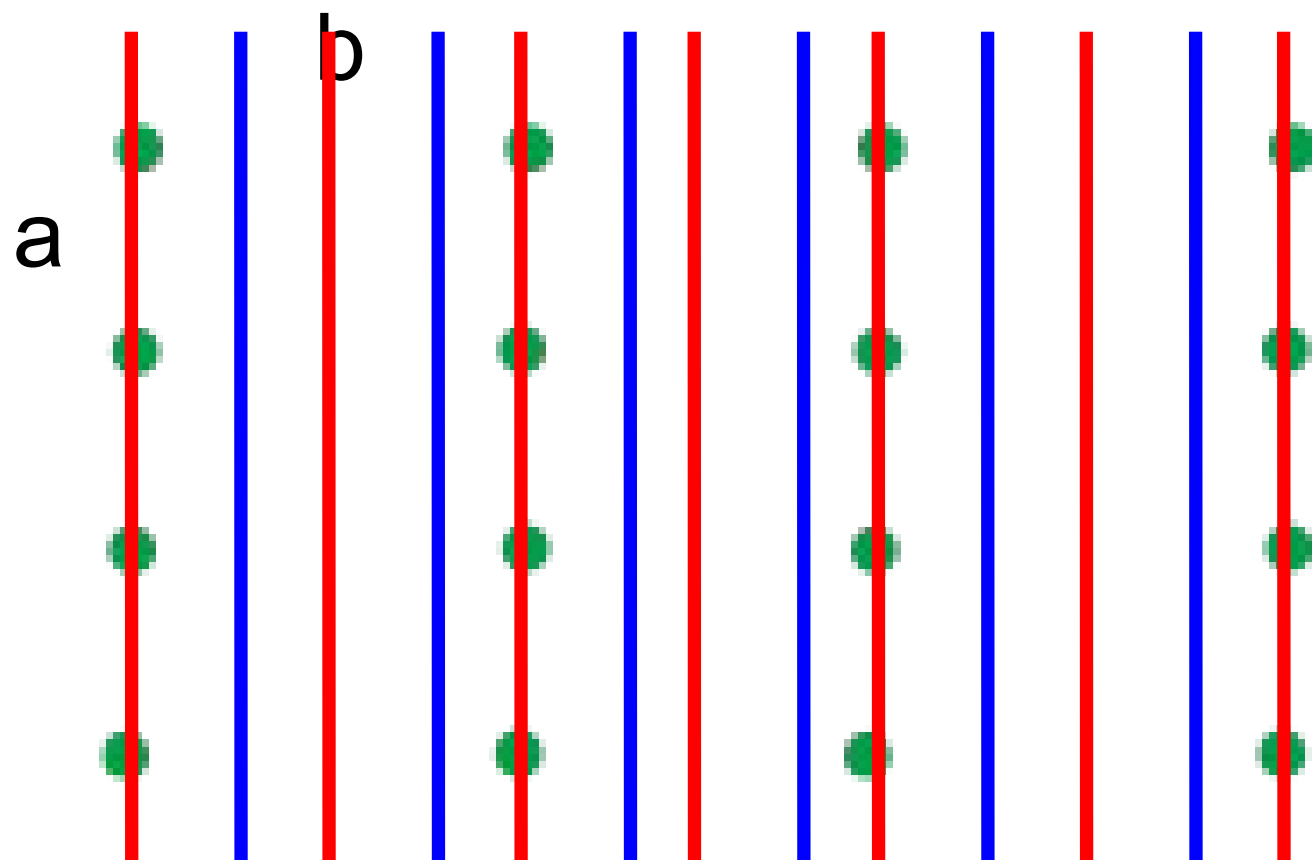
Sóng tinh thể (lattice wave) với véc tơ sóng $\mathbf{G}$ (wave vector)

$$e^{i\mathbf{G}\mathbf{r}} = e^{i\mathbf{G}\mathbf{r}} e^{i\mathbf{G}\mathbf{R}} = e^{i\mathbf{G}(\mathbf{r}+\mathbf{R})}$$

Chương 2: Mạng đảo và nhiễu xạ (Reciprocal lattice and diffraction)

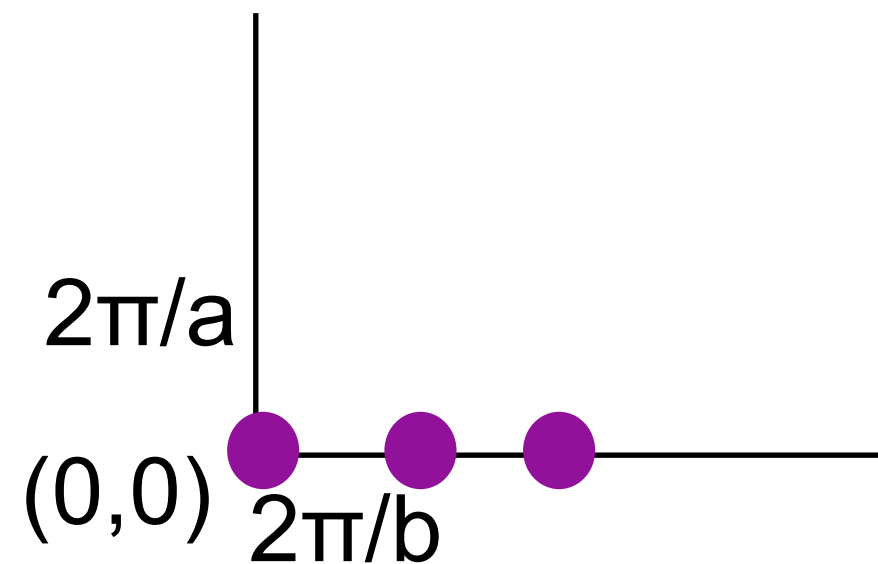
A- Sóng tinh thể

Mạng tinh thể thực



Mạng đảo

$$\mathbf{G} = m\mathbf{b}_1 + n\mathbf{b}_2$$

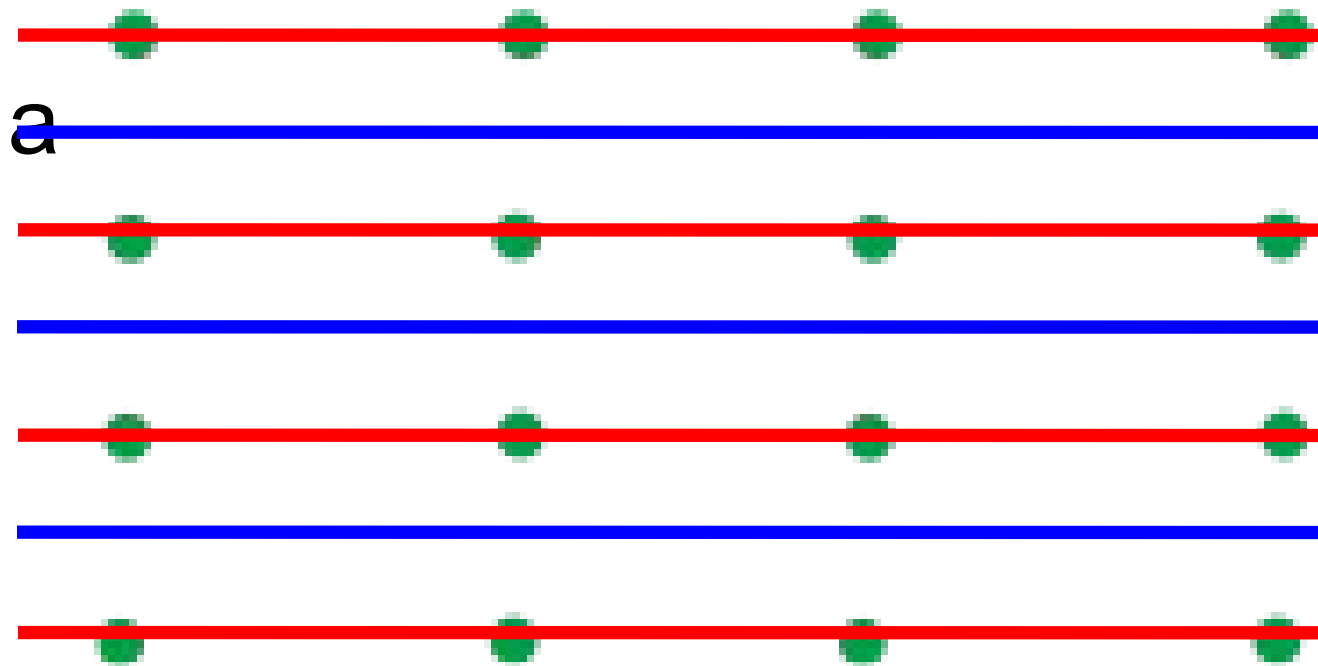


$$e^{i\mathbf{G}\mathbf{r}} = e^{i\mathbf{G}\mathbf{r}} e^{i\mathbf{G}\mathbf{R}} = e^{i\mathbf{G}(\mathbf{r}+\mathbf{R})}$$

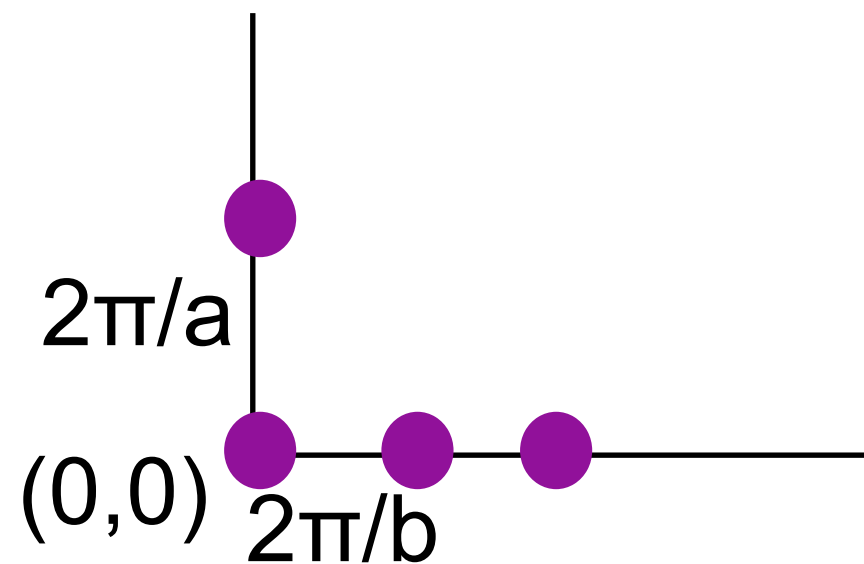
Chương 2: Mạng đảo và nhiễu xạ B- Sóng tinh thể

Mạng tinh thể thực

b



Mạng đảo

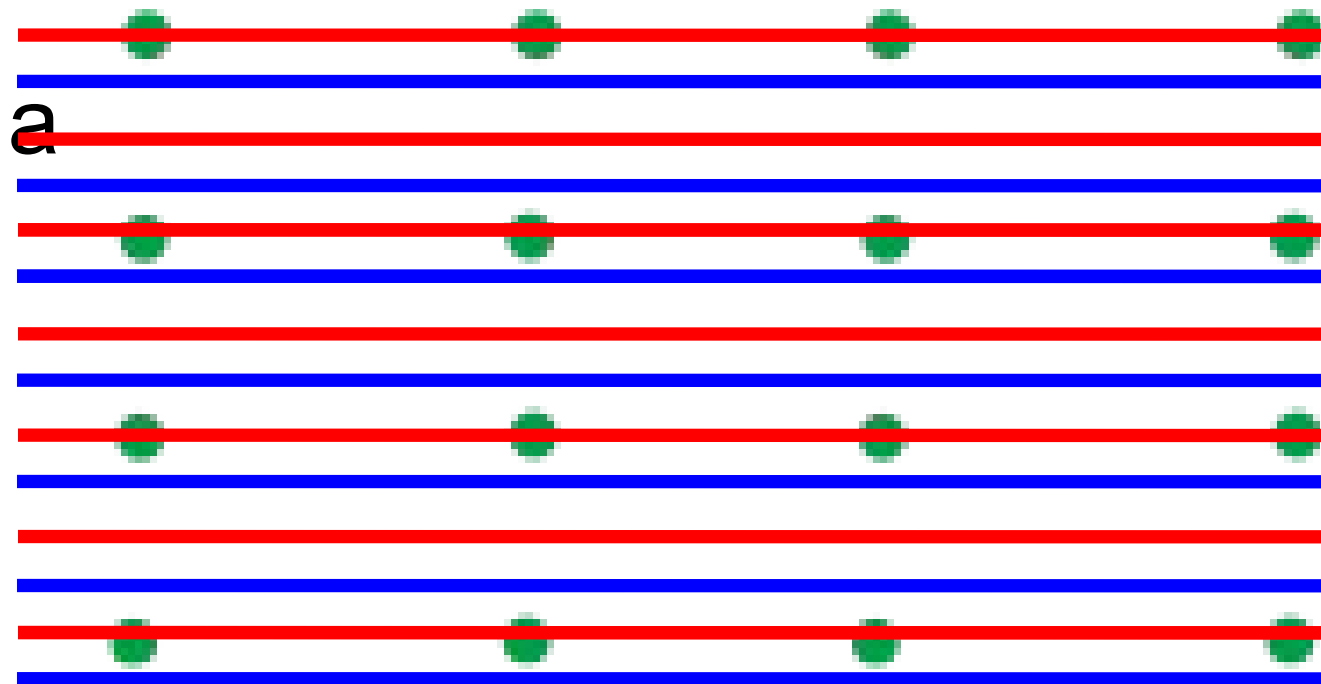


$$e^{i\mathbf{G}\mathbf{r}} = e^{i\mathbf{G}\mathbf{r}} e^{i\mathbf{G}\mathbf{R}} = e^{i\mathbf{G}(\mathbf{r}+\mathbf{R})}$$

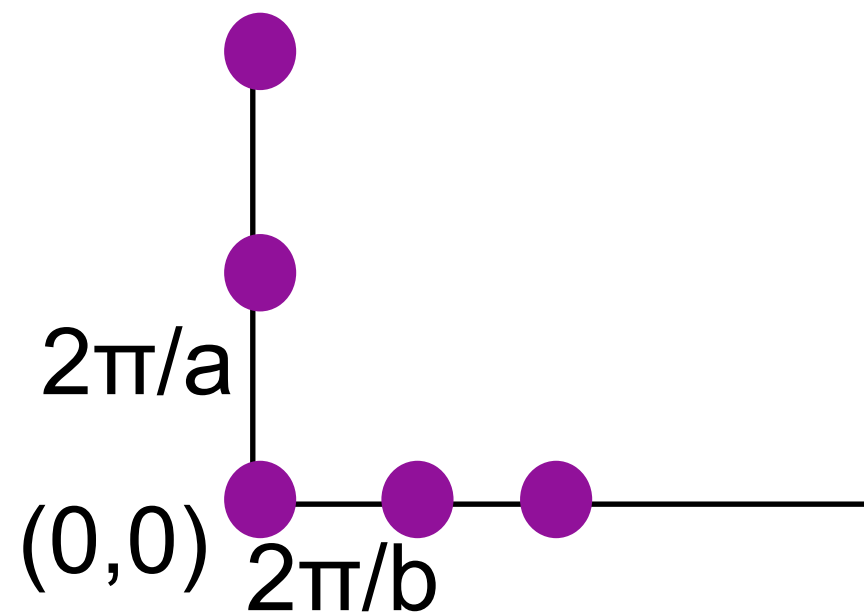
Chương 2: Mạng đảo và nhiễu xạ B- Sóng tinh thể

Mạng tinh thể thực

b



Mạng đảo

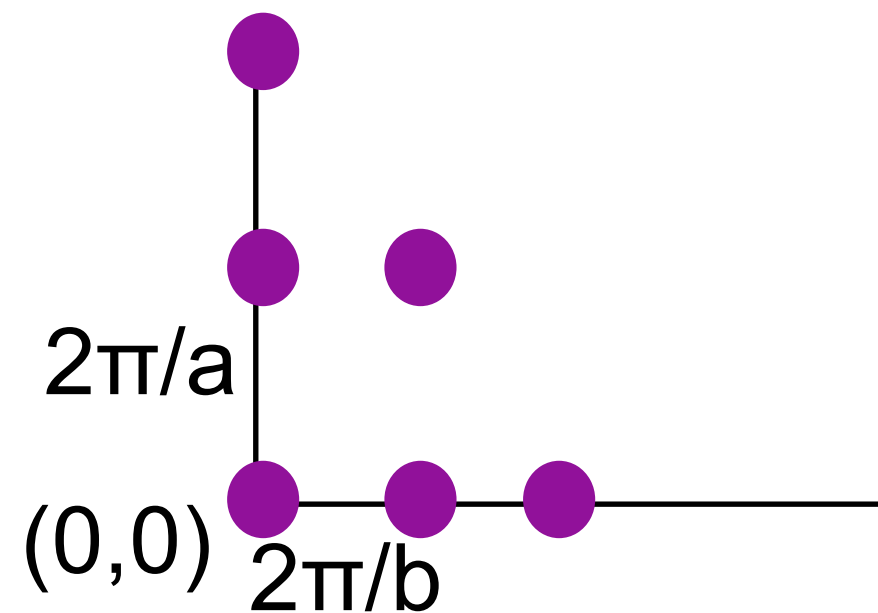
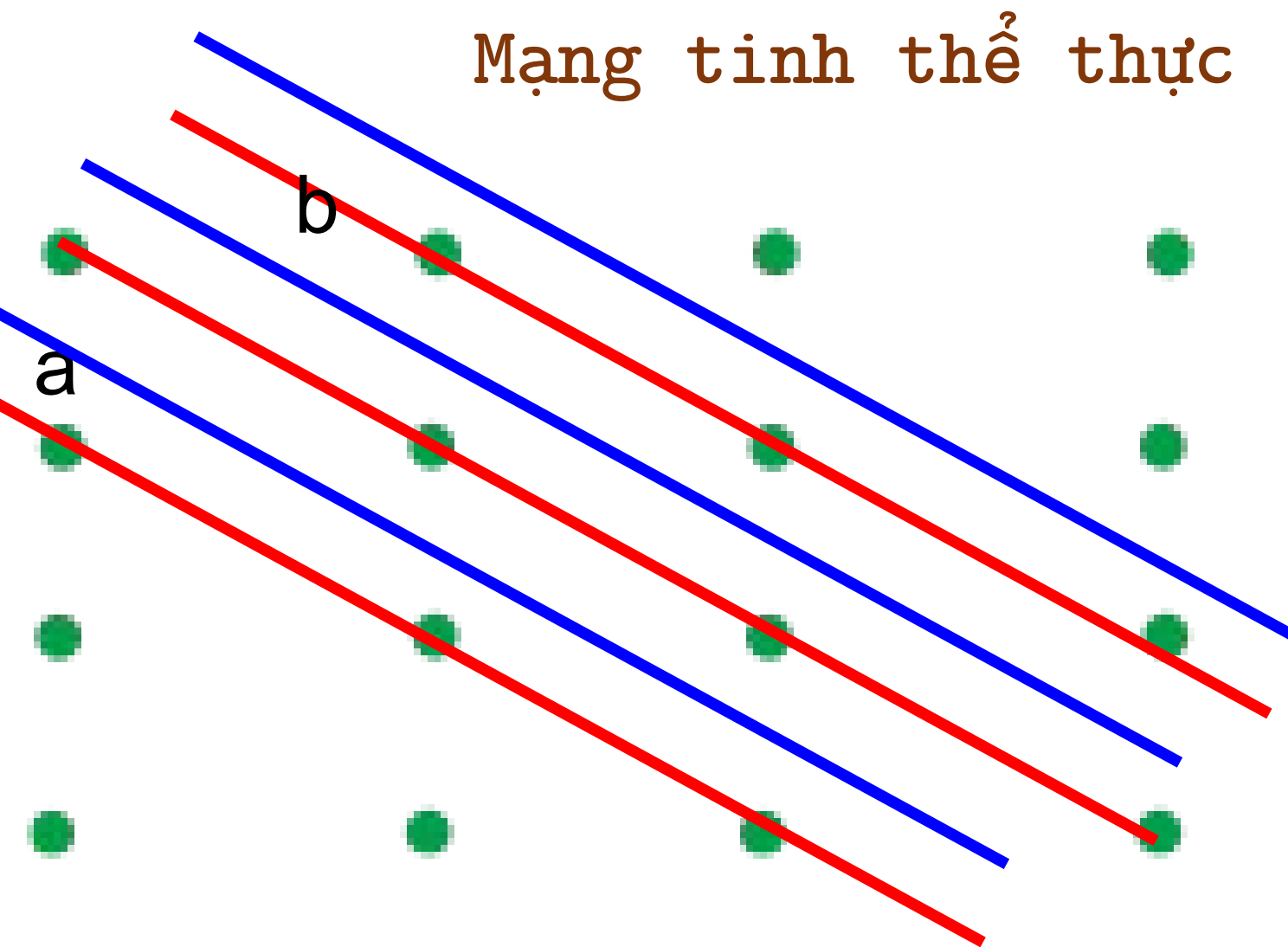


$$e^{i\mathbf{G}\mathbf{r}} = e^{i\mathbf{G}\mathbf{r}} e^{i\mathbf{G}\mathbf{R}} = e^{i\mathbf{G}(\mathbf{r}+\mathbf{R})}$$

Chương 2: Mạng đảo và nhiễu xạ B- Sóng tinh thể

Mạng tinh thể thực

Mạng đảo



$$e^{i\mathbf{G}\mathbf{r}} = e^{i\mathbf{G}\mathbf{r}} e^{i\mathbf{G}\mathbf{R}} = e^{i\mathbf{G}(\mathbf{r}+\mathbf{R})}$$

Chương 2: Mạng đảo và nhiễu xạ C- Nhiễu xạ (Diffraction)

- Nhắc lại kiến thức về sóng

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{A}_0 e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - i\omega t} \quad |\mathbf{k}| = \frac{2\pi}{\lambda}$$

$$\mathbf{A}_0 \cdot \mathbf{k} = 0$$

$$\lambda = 1 \text{ \AA}$$

$$h\nu = 12 \text{ keV}$$

complex notations

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{A}_0 \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t) = \Re [\mathbf{A}_0 e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - i\omega t}]$$

(for real $\mathbf{A}_0$)

$$e^{i\phi} = \cos \phi + i \sin \phi$$

C-Nhiều xạ

X-ray diffraction, on Laue description

- Mô tả của Von Laue về nhiễu xạ tia X trong tinh thể:

- Sóng tới (incoming wave) với véc tơ sóng (wave vector) $\mathbf{k}$, truyền đến vị trí $\mathbf{r}$.

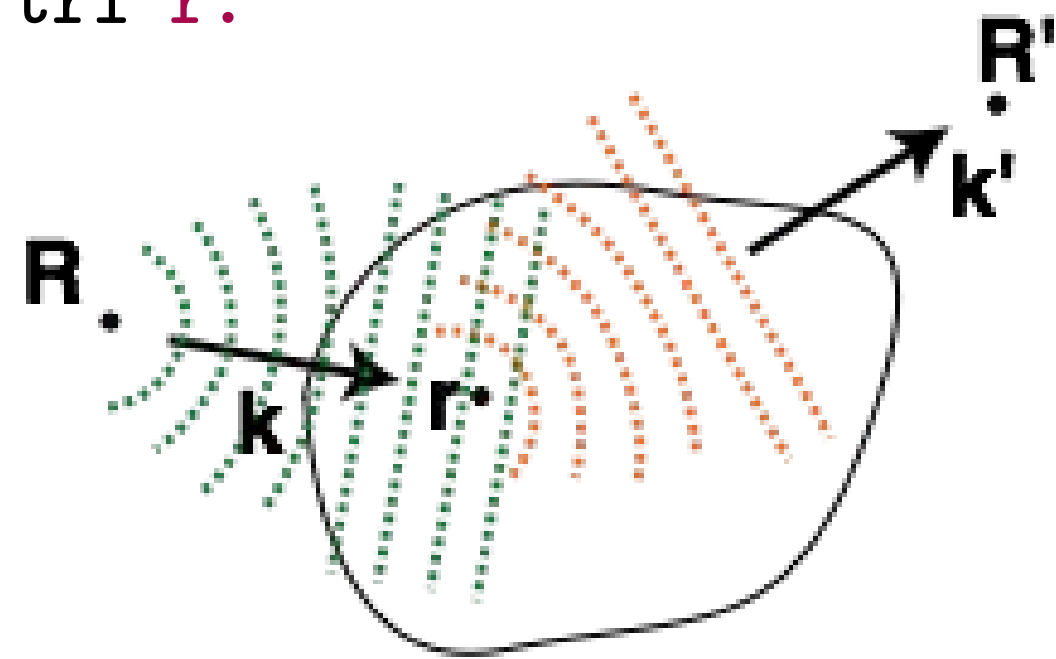
$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) \propto e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{R})} e^{-i\omega t}$$

- Sóng phản xạ với véc tơ sóng $\mathbf{k}'$ tại vị trí $\mathbf{r}$.

$$\mathbf{E}(\mathbf{R}', t) \propto \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) \rho(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k}' \cdot (\mathbf{R}' - \mathbf{r})}$$

$$\mathbf{E}(\mathbf{R}', t) \propto e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{R})} \rho(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k}' \cdot (\mathbf{R}' - \mathbf{r})} e^{-i\omega t}$$

$$= e^{i(\mathbf{k}' \cdot \mathbf{R}' - \mathbf{k} \cdot \mathbf{R})} \rho(\mathbf{r}) e^{i(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \cdot \mathbf{r}} e^{-i\omega t}$$



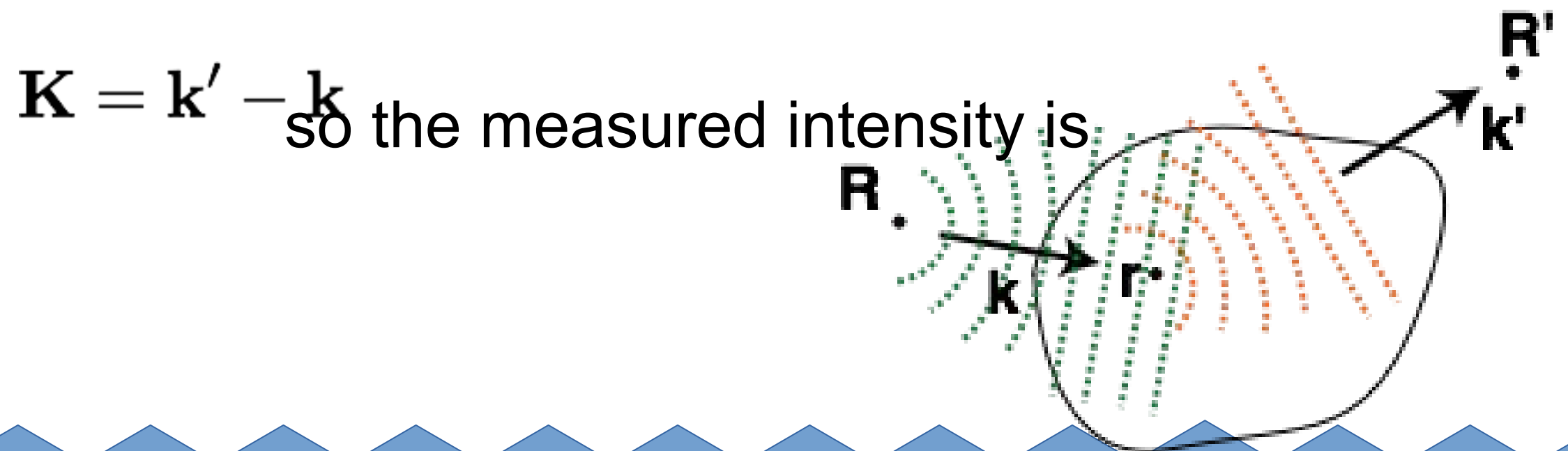
- Xét cho toàn bộ tinh thể

$$\mathbf{E}(\mathbf{R}', t) \propto e^{-i\omega t} \int_V \rho(\mathbf{r}) e^{i(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \cdot \mathbf{r}} dV$$

C- Nhiễu xạ (X-ray diffraction)

- Cường độ tán xạ (intensity) của tia X tại vị trí R' :

$$I(\mathbf{K}) \propto \left| \int_V \rho(\mathbf{r}) e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \cdot \mathbf{r}} dV \right|^2 = \left| \int_V \rho(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}} dV \right|^2$$



C- Nhiễu xạ (X-ray diffraction)

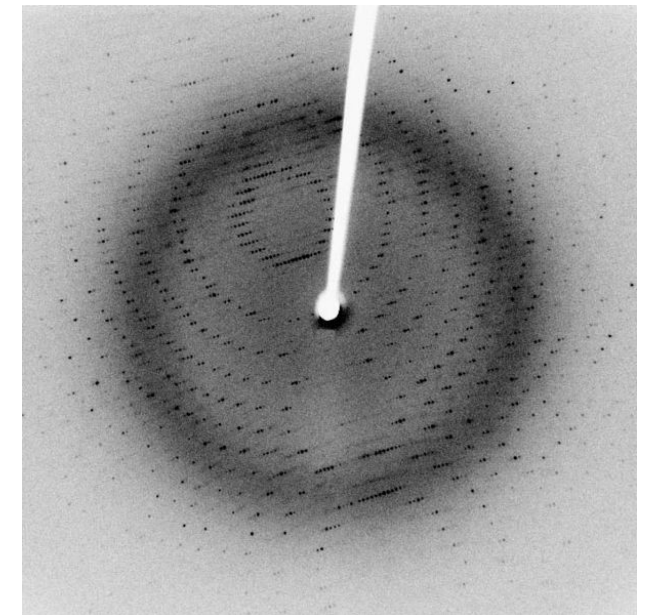
$$I(\mathbf{K}) \propto \left| \int_V \rho(\mathbf{r}) e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \cdot \mathbf{r}} dV \right|^2 = \left| \int_V \rho(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}} dV \right|^2$$

with

$$\mathbf{K} = \mathbf{k}' - \mathbf{k}$$

use

$$\rho(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{G}} \rho_{\mathbf{G}} e^{i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}}$$



$$I(\mathbf{K}) \propto \left| \sum_{\mathbf{G}} \rho_{\mathbf{G}} \int_V e^{i(\mathbf{G}-\mathbf{K}) \cdot \mathbf{r}} dV \right|^2$$

Điều kiện giao thoa tăng cường
(Constructive interference)

$$\mathbf{K} = \mathbf{k}' - \mathbf{k} = \mathbf{G}$$

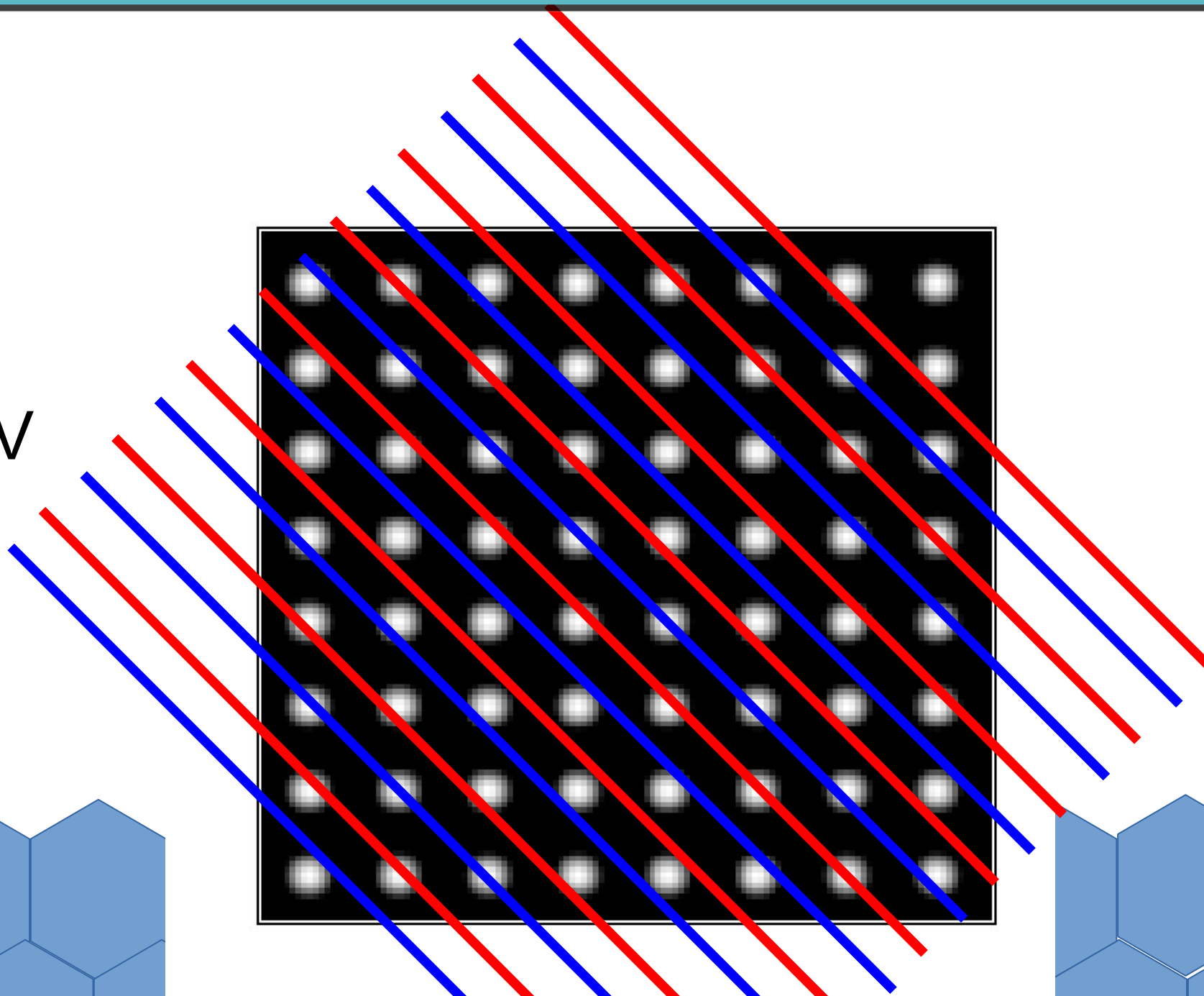
Điều kiện nhiễu xạ
của Laue

C-Nhiều xạ

X-ray diffraction, von Laue description

$$I(\mathbf{K}) \propto \left| \int_V \rho(\mathbf{r}) e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \cdot \mathbf{r}} dV \right|^2 = \left| \int_V \rho(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}} dV \right|^2$$

$\rho(\mathbf{r})$ in
Volume V



C-Nhiều xạ

X-ray diffraction, von Laue description

$$I(\mathbf{K}) \propto \left| \int_V \rho(\mathbf{r}) e^{i(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \cdot \mathbf{r}} dV \right|^2 = \left| \int_V \rho(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}} dV \right|^2$$

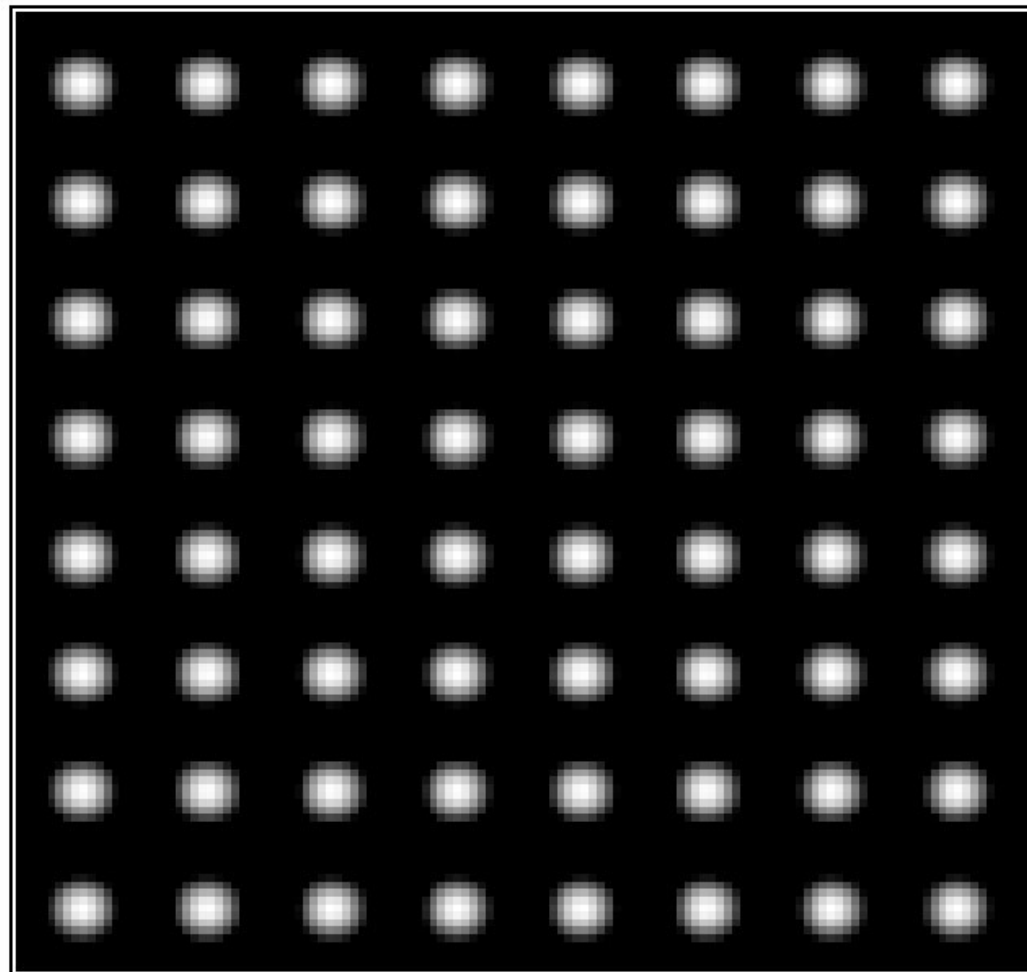
with

$$\mathbf{K} = \mathbf{k}' - \mathbf{k}$$

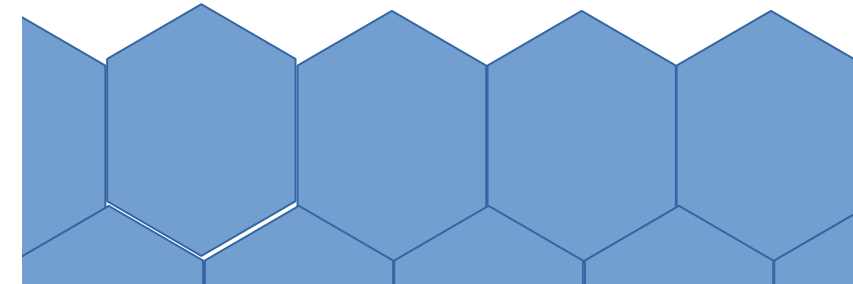
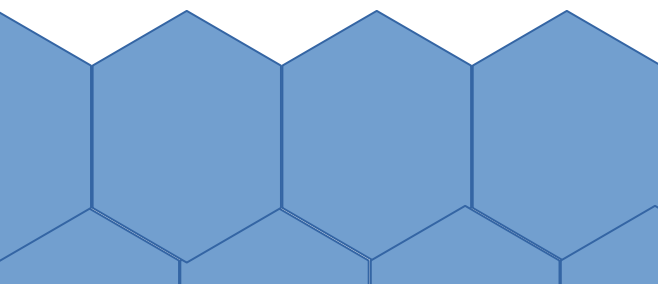
$\rho(\mathbf{r})$ in
Volume V



$\mathbf{k}$



$\mathbf{k}'$

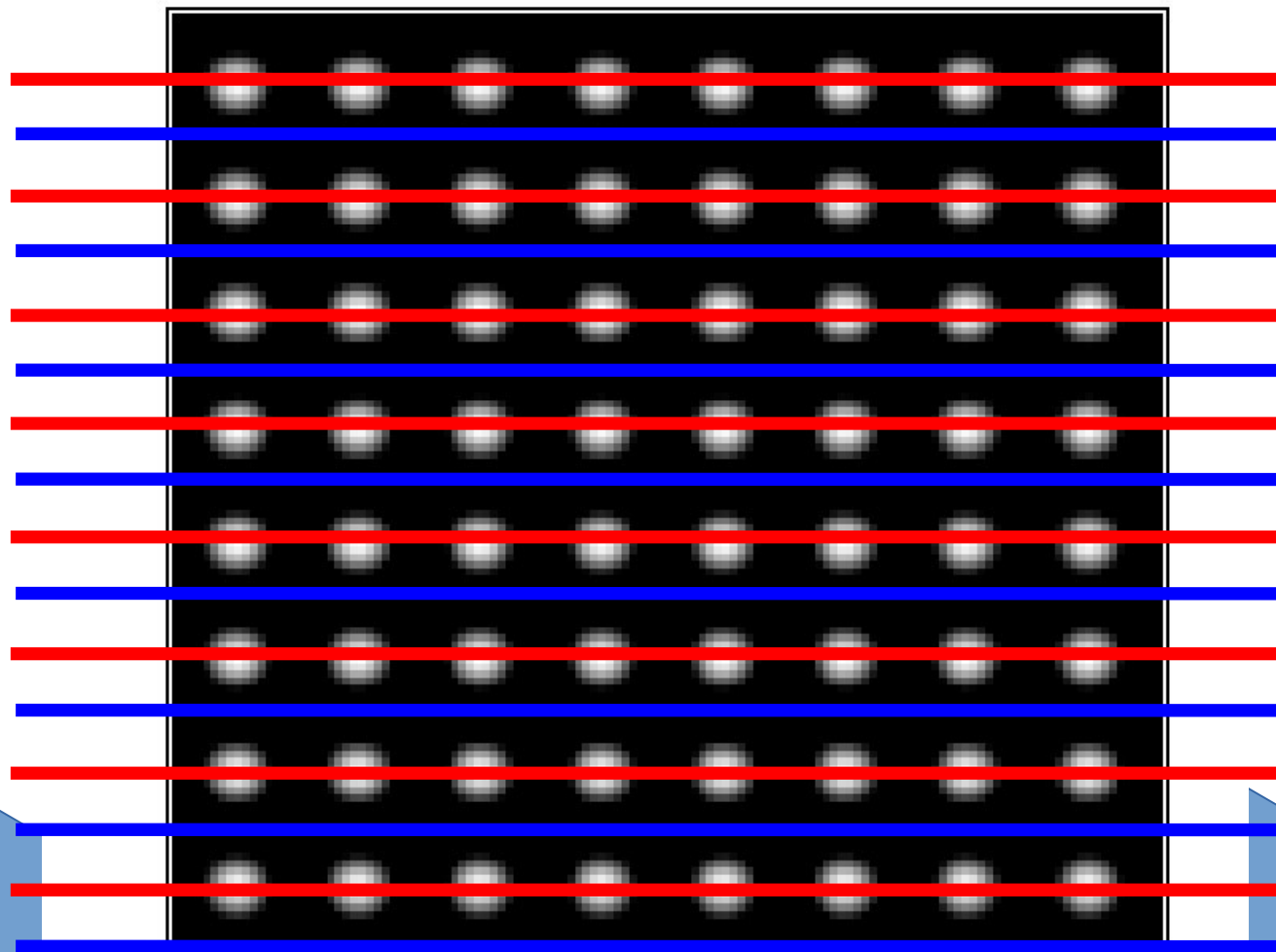


C-Nhiều xạ

X-ray diffraction, von Laue description

$$I(\mathbf{K}) \propto \left| \int_V \rho(\mathbf{r}) e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \cdot \mathbf{r}} dV \right|^2 = \left| \int_V \rho(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}} dV \right|^2$$

$\rho(\mathbf{r})$ in
Volume V

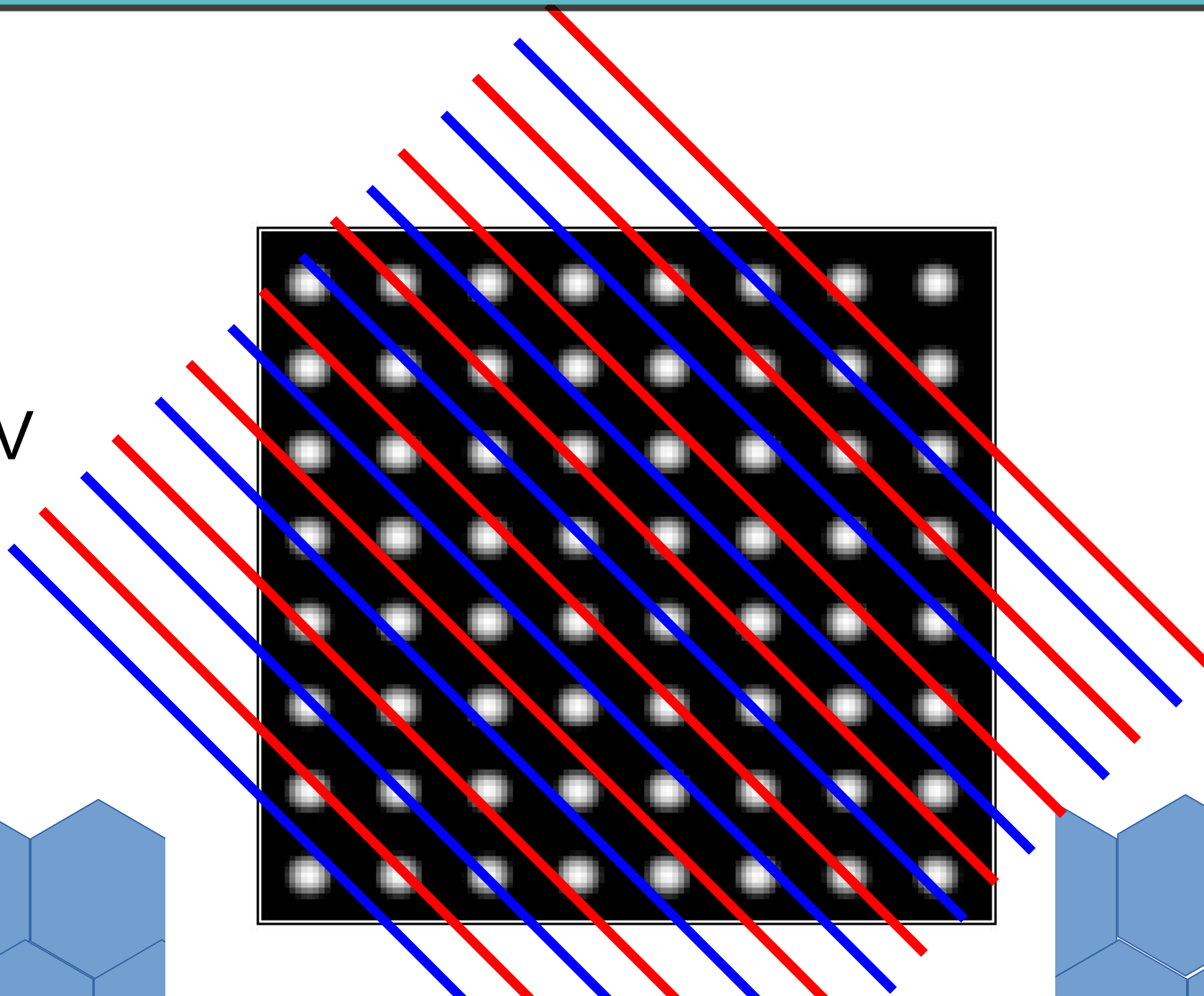


C-Nhiều xạ

X-ray diffraction, von Laue description

$$I(\mathbf{K}) \propto \left| \int_V \rho(\mathbf{r}) e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \cdot \mathbf{r}} dV \right|^2 = \left| \int_V \rho(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}} dV \right|^2$$

$\rho(\mathbf{r})$ in
Volume V

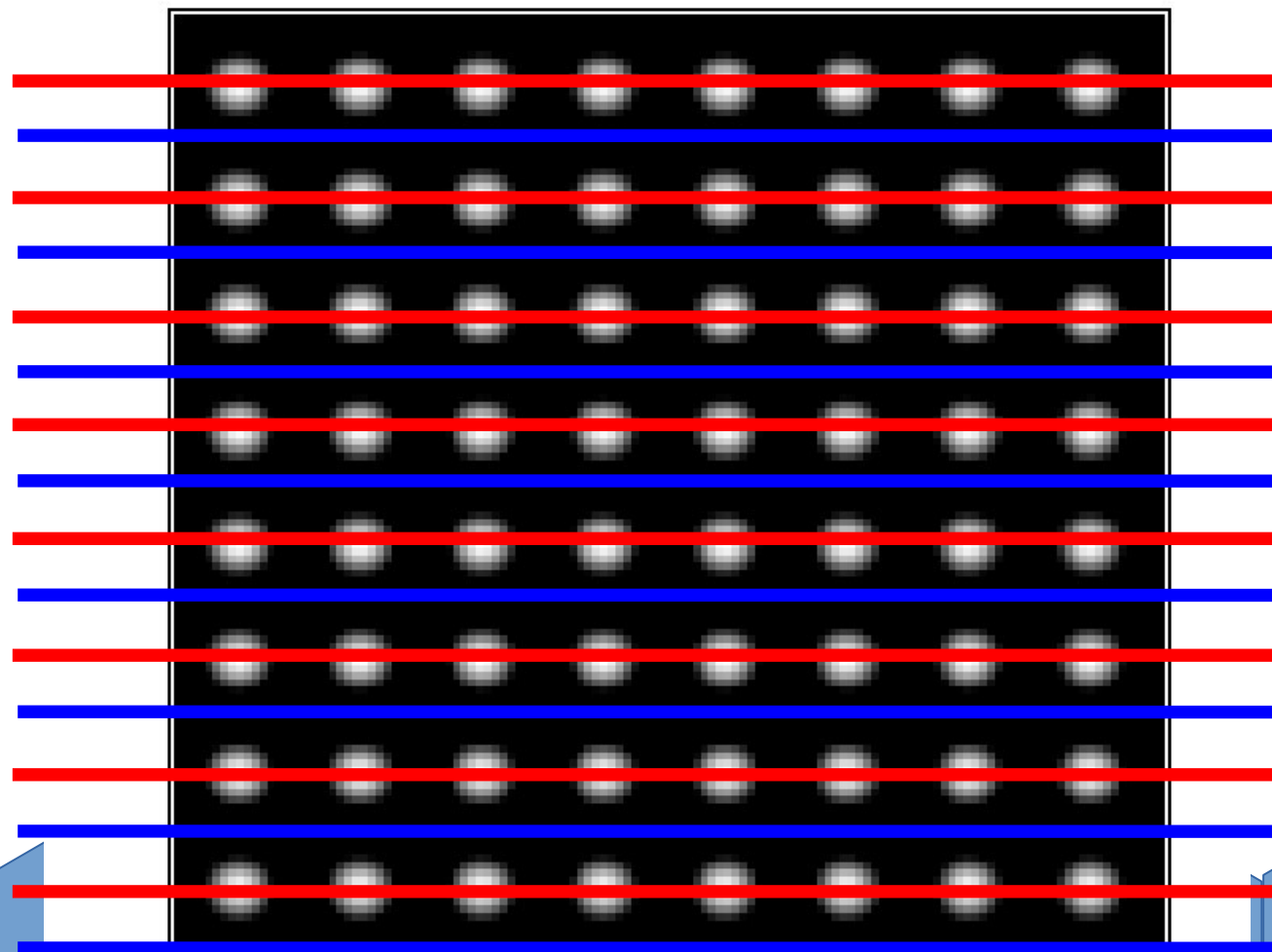


X-ray diffraction, von Laue description

so the measured intensity is

$$I(\mathbf{K}) \propto \left| \int_V \rho(\mathbf{r}) e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \cdot \mathbf{r}} dV \right|^2 = \left| \int_V \rho(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}} dV \right|^2$$

Volume
V



K=G

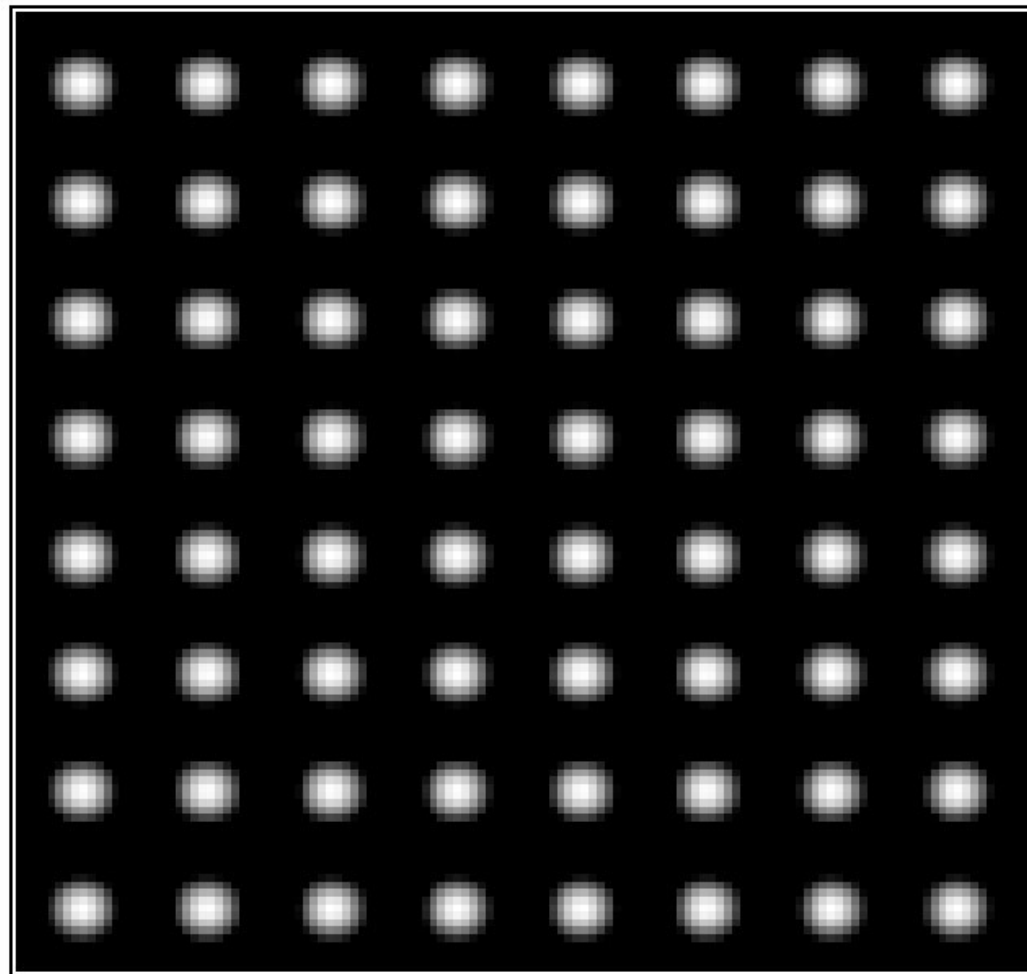
X-ray diffraction, von Laue description

so the measured intensity is

$$I(\mathbf{K}) \propto \left| \int_V \rho(\mathbf{r}) e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \cdot \mathbf{r}} dV \right|^2 = \left| \int_V \rho(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}} dV \right|^2$$

$$\mathbf{K} = \mathbf{k}' - \mathbf{k} = \mathbf{G}$$

Volume
 V

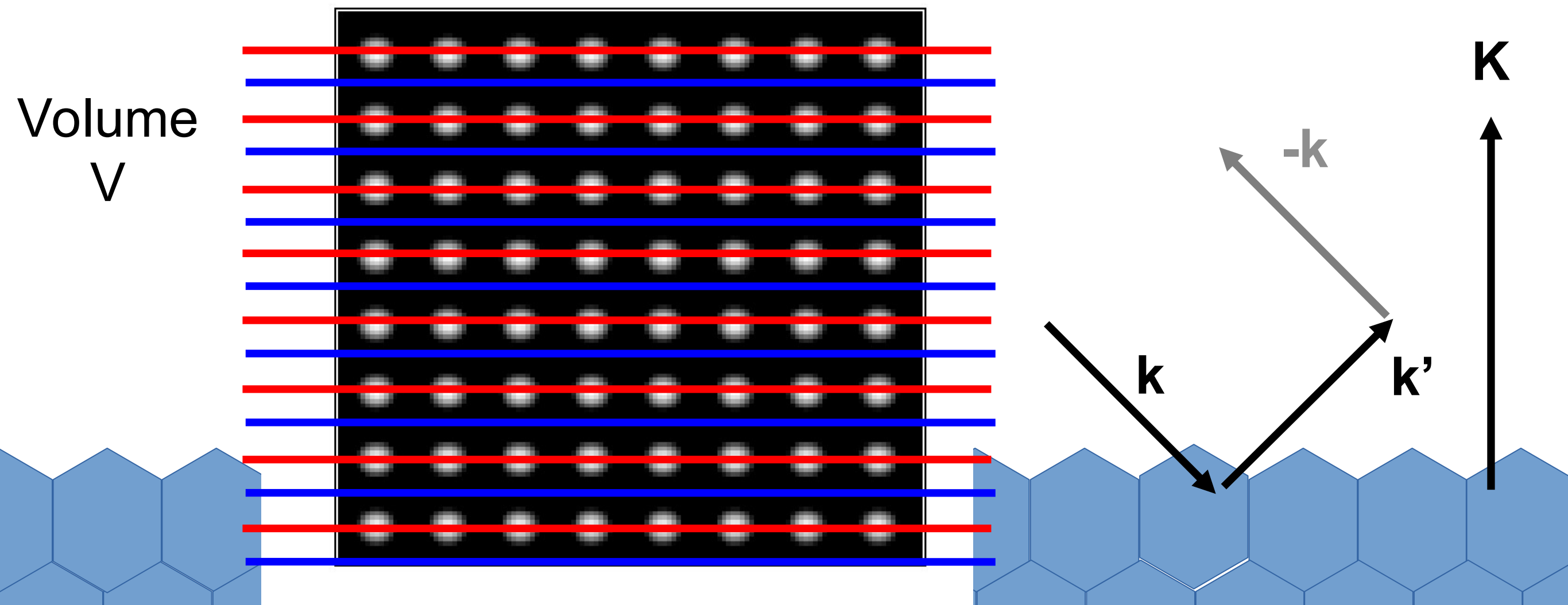


X-ray diffraction, von Laue description

so the measured intensity is

$$I(\mathbf{K}) \propto \left| \int_V \rho(\mathbf{r}) e^{i(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \cdot \mathbf{r}} dV \right|^2 = \left| \int_V \rho(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}} dV \right|^2$$

$$\mathbf{K} = \mathbf{k}' - \mathbf{k} = \mathbf{G}$$



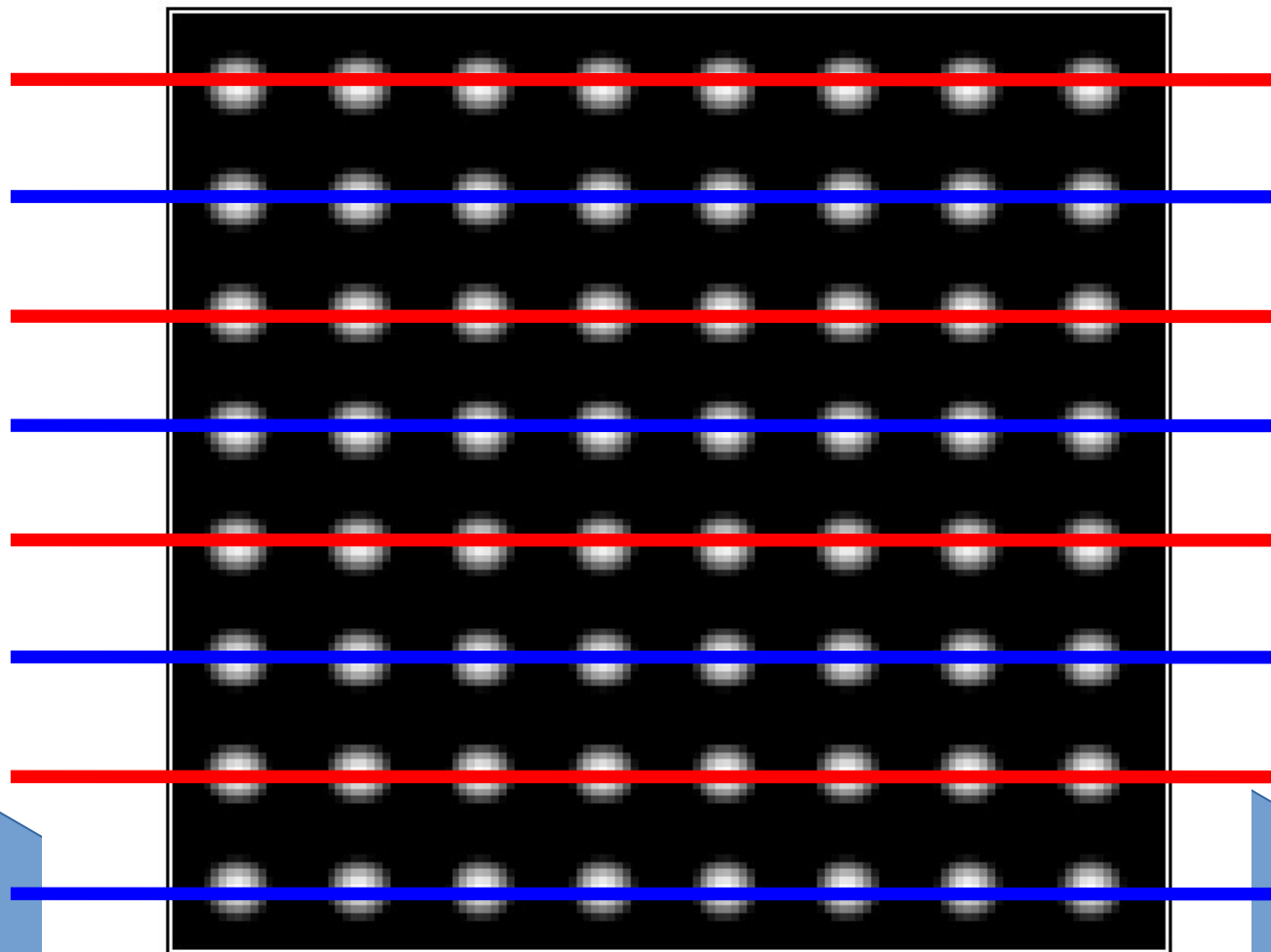
X-ray diffraction, von Laue description

so the measured intensity is

$$I(\mathbf{K}) \propto \left| \int_V \rho(\mathbf{r}) e^{i(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \cdot \mathbf{r}} dV \right|^2 = \left| \int_V \rho(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}} dV \right|^2$$

$$\mathbf{K} = \mathbf{k}' - \mathbf{k} = \mathbf{G}$$

Volume
 V



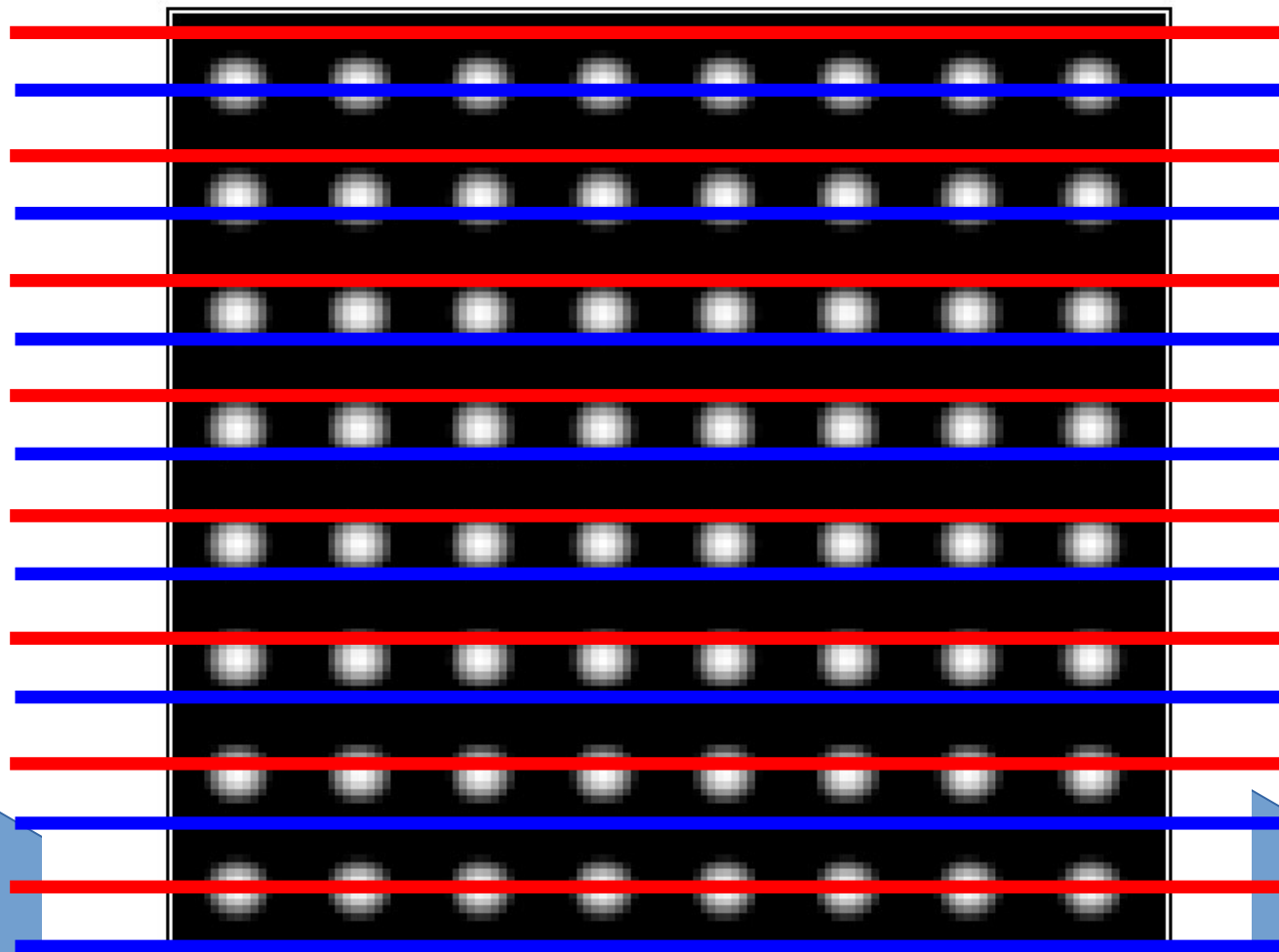
X-ray diffraction, von Laue description

so the measured intensity is

$$I(\mathbf{K}) \propto \left| \int_V \rho(\mathbf{r}) e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \cdot \mathbf{r}} dV \right|^2 = \left| \int_V \rho(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}} dV \right|^2$$

$$\mathbf{K} = \mathbf{k}' - \mathbf{k} = \mathbf{G}$$

Volume
 V



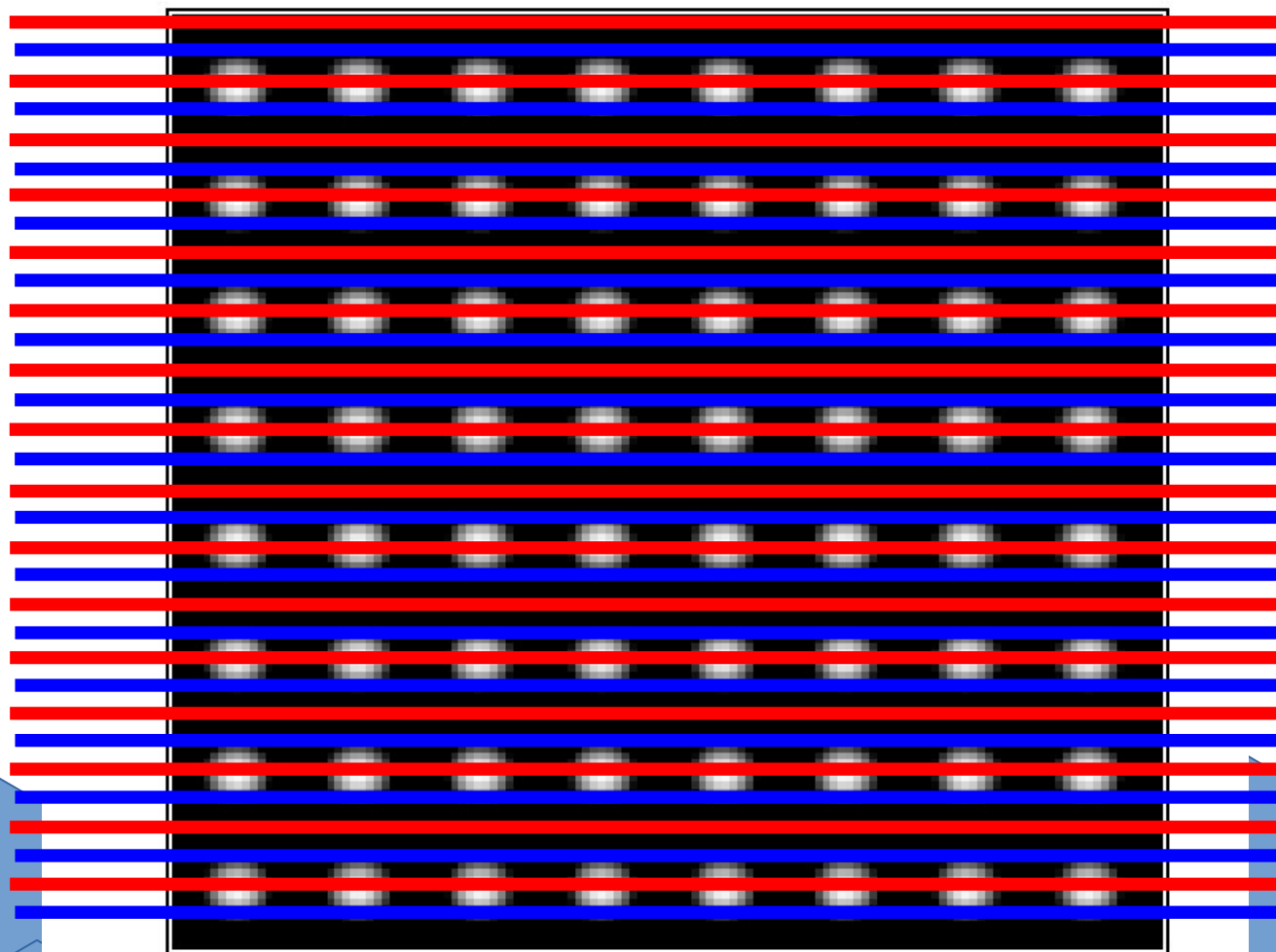
X-ray diffraction, von Laue description

so the measured intensity is

$$I(\mathbf{K}) \propto \left| \int_V \rho(\mathbf{r}) e^{i(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \cdot \mathbf{r}} dV \right|^2 = \left| \int_V \rho(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}} dV \right|^2$$

$$\mathbf{K} = \mathbf{k}' - \mathbf{k} = \mathbf{G}$$

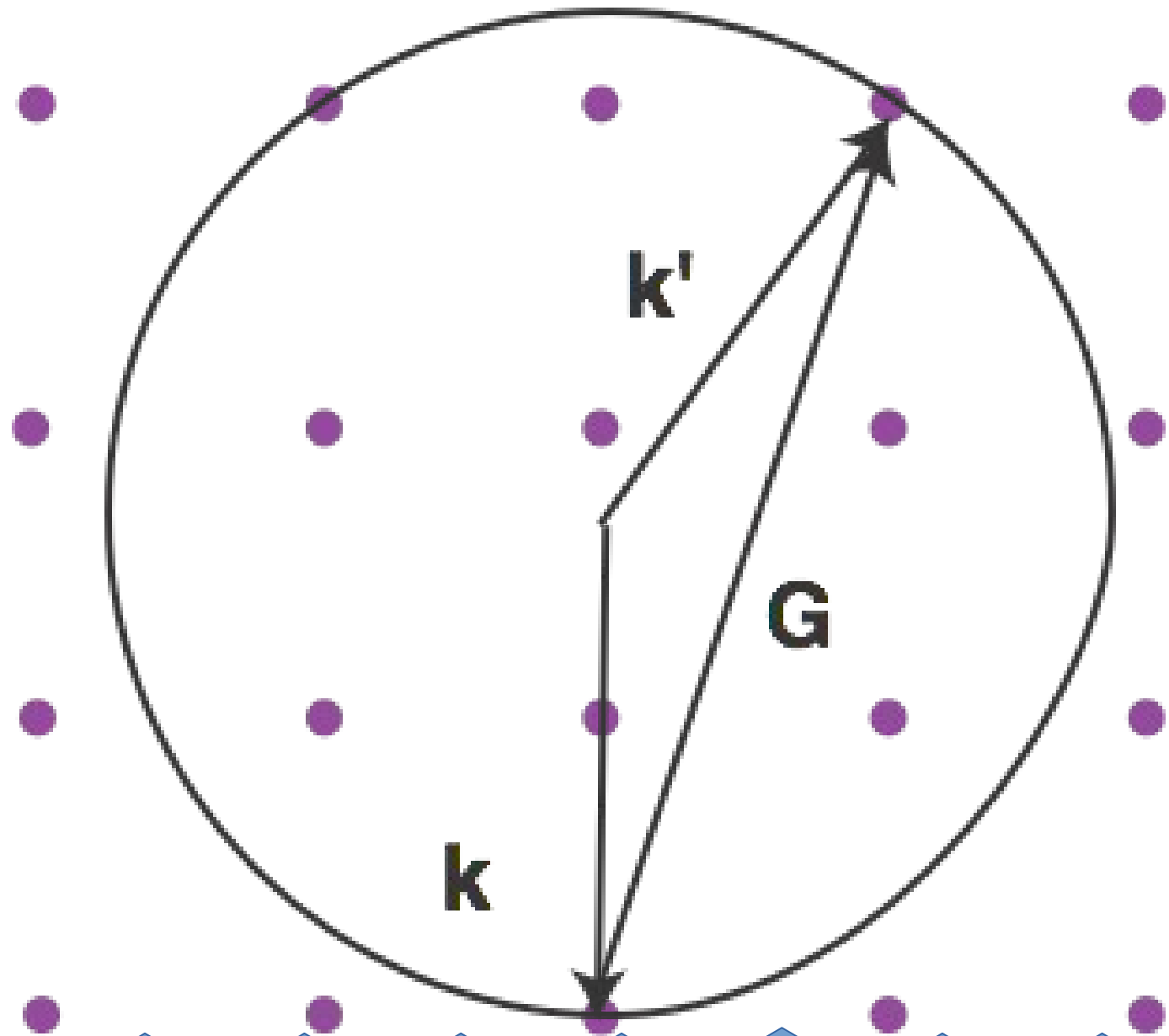
Volume
V



D- Cách xây dựng của Ewald về điều kiện Laue

Điều kiện Laue: $\mathbf{K} = \mathbf{k}' - \mathbf{k} = \mathbf{G}$

- Vẽ mạng đảo như hình vẽ
- Vẽ một véc tơ $\mathbf{k}$ bất kỳ tương ứng với tia tới, có đầu véc tơ trùng với nút mạng đảo.
- Vẽ một hình tròn bán kính k với tâm là gốc của véc tơ $\mathbf{k}$.
- Tất cả các véc tơ $\mathbf{k}'$ có gốc trùng với tâm hình tròn và đầu của véc tơ $\mathbf{k}'$ nằm trên hình tròn đi qua nút mạng đảo, sẽ thỏa mãn điều kiện Laue.

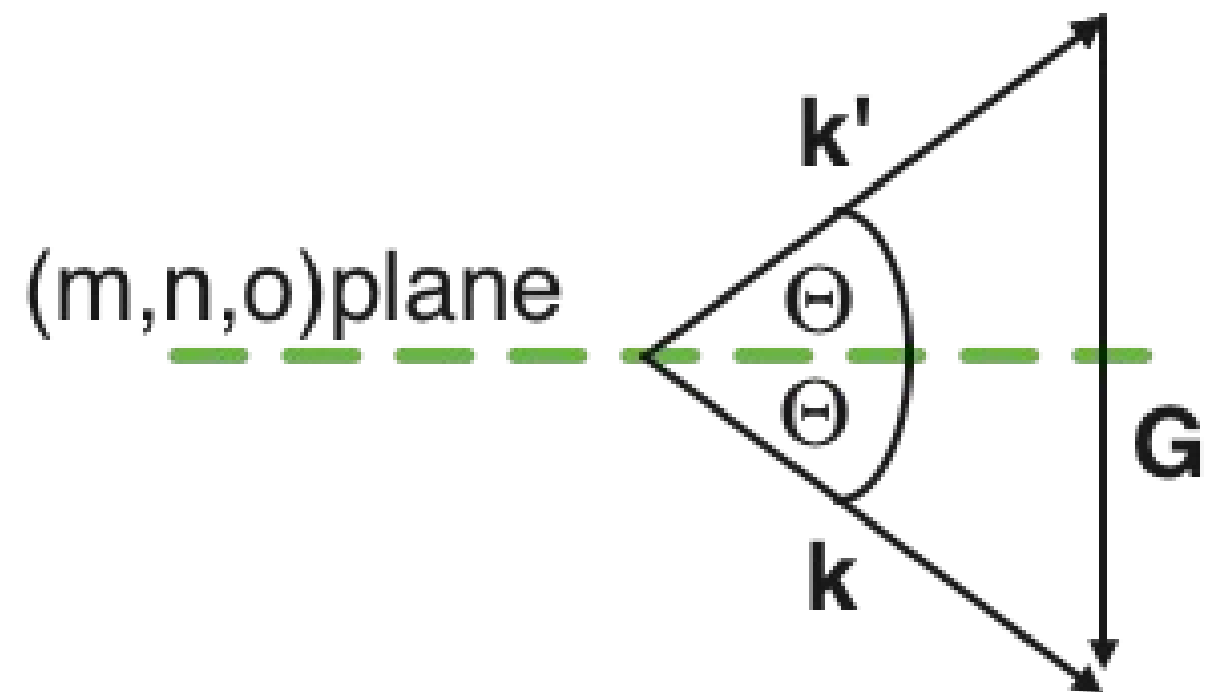


- Mọi liên hệ giữa mang đảo và chỉ số Miller

Véc tơ mạng đảo G được biểu diễn như sau

$$\mathbf{G} = m\mathbf{b}_1 + n\mathbf{b}_2 + o\mathbf{b}_3$$

sẽ vuông góc với mặt phẳng có chỉ số Miller là (m,n,o)



$$\mathbf{k} - \mathbf{k}' = \mathbf{G}$$