Phân loại các nhóm điểm tinh thể học

Bởi:

Nguyễn Văn Hiệu

Các phân tử chứa nhiều nguyên tử cùng một loại và các tinh thể chất rắn thường có tính chất đối xứng thể hiện ở chỗ có những phép quay, phép phản xạ gương, phép nghịch đảo, phép tịnh tiến, hoặc những tổ hợp của các phép biến đổi này, mà sau khi thực hiện các phép biến đổi đó thì các nguyên tử cùng loại trong phân tử hoặc trong tinh thể đổi chỗ cho nhau, nhưng phân tử hoặc tinh thể thì lại chuyển đến một vị trí trùng khít với vị trí ban đầu. Các phép biến đổi nói trên có chung một tính chất: khoảng cách giữa hai điểm bất kỳ của một phân tử hoặc một tinh thể chất rắn (mà chỉ làm cho các nguyên tử cùng một loại đổi chỗ cho nhau) được gọi là **phép đối xứng** của thể tạo thành một nhóm với định nghĩa tích của hai phép biến đổi là sự thực liên tiếp hai phép biến đổi đó, nghịch đảo của một phép biến đổi là phép biến đổi ngược với nó. Nhóm đó đươợ gọi là **nhóm đối xứng** của phân tử hoặc của tinh thể.

Một thí dụ về nhóm đối xứng của tinh thể là nhóm tịnh tiến. Vì trong tinh thể có sự sắp đặt tuần hoàn các nguyên tử mỗi loại, cho nên tinh thể (vô hạn) có tính đối xứng đối với các phép tịnh tiến

$T_R : r \rightarrow r + R$

trong đó vectơ tịnh tiến R có dạng

$R = n_1a_1 + n_2a_2 + n_3a_3$,

với a_1, a_2, a_3 là ba vectơ không nằm trong cùng một mặt phẳng, còn n_1, n_2, n_3 là ba số nguyên. Ta chọn a_1, a_2, a_3 là các vectơ ngắn nhất theo mỗi hướng đã cho mà các phép tịnh tiến theo các vectơ này là các phép đối xứng của tinh thể, và gọi là các vectơ này là các vectơ tịnh tiến cơ sở. Điểm cuối của các vectơ R với các giá trị nguyên tuỳ ý của n_1, n_2, n_3 tạo thành một mạng gọi là mạng Bravais.

Trong một phép tịnh tiến của không gian tất cả các điểm đều dịch chuyển, không có điểm nào là bất động cả. Trái lại, trong mỗi phép quay, mỗi phép phản xạ gương và mỗi phép nghịch đảo đều có ít nhất một điểm bất động: điểm bất kỳ trên trục quay, điểm bất kỳ trên mặt phẳng gương và tâm của phép nghịch đảo. Xét các phép biến đổi cứng tạo thành một nhóm đối xứng của phân tử hoặc của tinh thể. Nếu tất cả các phép đối xứng của nhóm đó đều giữ cố định cùng một điểm, thì nhóm này được gọi là **nhóm điểm**. Nói khác đi, mỗi nhóm điểm là một nhóm các biến đổi cứng mà tất cả các yếu tố của nó đều có chung một điểm cố định. Mỗi yếu tố của nhóm điểm được gọi là một **biến đổi điểm** hoặc **yếu tố đối xứng điểm**.

Một thí dụ về nhóm điểm là nhóm C_n, các phép quay quanh một trục cố định với các góc quay bằng một số nguyên lần góc $\frac{2\pi}{\pi}$, trong đó n là một số nguyên dương. Giá trị $n = 1$ là một trường hợp đặc biệt: nhóm C_1 chỉ gồm các phép quay một số nguyên lần góc 2π, nghĩa là chỉ gồm có một yếu tố là biến đổi đồng nhất E. Mọi nhóm C_n với các số nguyên dương $n > 1$ đều có thể là nhóm đối xứng của một hình hữu hạn nào đó (thí dụ như hình trụ thẳng đứng mà đáy là hình n-giác đều) hoặc của một phân tử nào đó, nhưng không phải nhóm C_n nào cũng có thể là nhóm đối xứng của tinh thể, bởi vi tinh thể có cấu trúc hoàn toàn. Thực vậy, ta sẽ chứng minh rằng do tính chất đối xứng của tinh thể đối với các phép tịnh tiến T_R, với R là các vectơ mà điểm cuối của chúng tạo thành mạng Bravais, nhóm C_n chỉ có thể là nhóm đối xứng của tinh thể nếu có năm giá trị nguyên dương sau đây:

$n = 1, 2, 3, 4, 6.$

Để chứng minh ta hãy chọn xOy là mặt phẳng chứa các nguyên tử đổi chỗ cho nhau trong các phép quay của nhóm C_n. Chọn trục Oz làm trục quay. Khi đó các nút của mạng Bravais trên mặt phẳng xOy tạo thành một mạng tinh thể hai chiều đối xứng đối với các phép tịnh tiến T_R với mọi vectơ R có dạng,

$$\boldsymbol{R} = n_1\boldsymbol{a} + n_2\boldsymbol{b}, \qquad (1)$$

a và b là hai vectơ tịnh tiến cơ sở trên mặt phẳng xOy. Ta quy ước chọn chúng thế nào để a là vectơ tịnh tiến ngắn nhất của mạng Bravais. Khi đó mọi vectơ tịnh tiến khác không R đều phải thoả mãn điều kiện

$$|R|^2 \geq |a|^2. \qquad (2)$$

Ta chọn trục Ox theo hướng của vectơ a và có

$$a_x = a,\ a_y = 0 \qquad (3)$$

Bây giờ ta thực hiện phép quay một góc φ quanh trục Oz. Trong phép quay này vectơ $a$chuyển thành vectơ a' với thành phần

$$a'_x = a\cos\varphi,\ a'_y = a\sin\varphi \qquad (4)$$

Nếu phép quay này là một phép đối xứng của tinh thể thì vectơ *a***'** cũng là một vectơ tịnh tiến cuủatinh thể và do đó hai vectơ $a \pm a'$ phải là hai vectơ tịnh tiến của tinh thể nếu chúng khác không. Xét vectơ *a – a'*. Nếu vectơ này bằng không thì ta có

$$\varphi = 0 \qquad (5)$$

còn nếu nó khác không thì phải thoả mãn điều kiện (2), nghĩa là

$$|a - a'|^2 \geq |a|^2 \qquad (6)$$

Dùng các biểu thức (3) và (4) của các thành phần của *a* và *a*', ta suy ra

$\cos \varphi \frac{1}{2}$

và do đó

$$\frac{\pi}{3} \leq \varphi \leq \frac{5\pi}{3}. \qquad (7)$$

Xét vectơ *a + a'*. Nếu vectơ này bằng không thì ta có

$$\varphi = \pi, \qquad (8)$$

còn nếu nó khác không thì phải thoả mãn điều kiện (2), nghĩa là

$$|a + a'|^2 \geq |a|^2. \qquad (9)$$

Dùng các biểu thứ (3) và (4) của các thành phần của *a* và *a'*, ta suy ra

$\cos \varphi - \frac{1}{2}$

và do đó φ phải thoả mãn một trong hai điều kiện sau đây

$$0 \leq \varphi \leq \frac{2\pi}{3} \text{ hoặc } \frac{4\pi}{3} \leq \varphi \leq 2\pi \qquad (10)$$

Đồng thời với phép quay một góc φ quanh trục *Oz* nhóm *Cn* còn chứa phép quay góc -φ. Trong phép quay này vectơ *a* chuyển thành vectơ *a''* với các thành phần

$$a''_x = a\cos\varphi,\ a''_y = -a\sin\varphi. \qquad (11)$$

Đó cũng chính là một vectơ tịnh tiến. Do đó vectơ *a' + a''* phải bằng không, hoặc là một vectơ tịnh tiến khác không và thoả mãn điều kiện (2), nghĩa là

$$|a'+a''|^2 \geq |a|^2 . \qquad (12)$$

Dùng các biểu thức (4) và (11) của các thành phần của các vectơ a' và a'', ta thấy rằng a'+a'' triệt tiêu khi φ có một trong hai giá trị sau đây

$$\varphi = \frac{\pi}{2} \qquad (13)$$

và

$$\varphi = \frac{3\pi}{2} . \qquad (14)$$

Còn nếu *a'+a''* khác không thì từ bất đẳng thức (12) suy ra

$\cos^2\varphi\frac{1}{4}$,

do đó φ phải thoả mãn một trong ba điều kiện sau đây:

$$0 \leq \varphi \leq \frac{\pi}{3} \text{ hoặc } \frac{2\pi}{3} \leq \varphi \leq \frac{4\pi}{3} \text{ hoặc } \frac{5\pi}{3} \leq \varphi \leq 2\pi \qquad (15)$$

Tóm lại, phép quay một góc φ chỉ có thể là một phép đối xứng của một tinh thể nếu góc φ hoặc là bằng một trong bốn giá trị (5), (8), (13), (14), hoặc là phải thoả mãn đồng thời điều kiện (7), một trong hai điều kiện (10) và một trong ba điều kiện (15). Các giá trị này là

$\varphi = 0, \frac{\pi}{3}, \frac{\pi}{2}, \frac{2\pi}{3}, \pi, \frac{4\pi}{3}, \frac{3\pi}{2}, \frac{5\pi}{3}$.

Đó là các góc quay của các nhóm C_n với

$n = 1, 2, 3, 4, 6$.

Chúng ta đã thấy rằng không phải mọi nhóm điểm đều có thể là một nhóm đối xứng của một tinh thể nào đó. Một nhóm điểm nếu đồng thời là một nhóm đối xứng của tinh thể thì nhóm điểm đó được gọi là **nhóm điểm tinh thể học**. Để trình bày vắn tắt về các nhóm điểm tinh thể học ta dùng các thuật ngữ sau đây. Trục quay của nhóm *Cn* được gọi là trục quay bậc *n*. Khi ta nói một điểm có một trục quay bậc *n* tức là nói rằng nhóm điểm đó chứa một nhóm con C_n. Giả sử rằng phép quay góc $\frac{2\pi}{n}$quanh một trục nào đó không phải là phép đối xứng của một tinh thể hoặc phân tử nào đó, nhưng tổ hợp của phép quay này với phép phản xạ gương qua một mặt phẳng trực giao với trục quay, ký hiệu là S_n, lại là phép đối xứng. Ta gọi S_n là phép quay - phản xạ gương và gọi trục quay thẳng góc với mặt phẳng phản xạ gương nói trên là trục quay - nhóm S_n . Tương tự như phép quay - phản xạ gương, tổ hợp của một phép quay quanh một trục và phép nghịch đảo đối với một điểm trên trục quay được gọi là phép quay - nghịch đảo, còn trục quay bây giờ là trục quay - nghịch đảo. Để diễn tả một nhóm điểm ta chỉ cần cho biết nhóm điểm đó có những trục quay nào, có những mặt phẳng phản xạ gương nào, có những trục quay - phản xạ gương nào và có tâm nghịch đảo hay không. Ta có các nhóm điểm tinh thể học sau đây:

Nhóm C_n : Chỉ có một trục quay bậc *n*. Các giá trị của *n* là 1, 2, 3, 4, 6.

Nhóm C_i : Gồm phép nghịch đảo *i* và yếu tố đơn vị *E*.

Nhóm C_{nh} : Có một trục quay bậc *n* và một mặt phẳng phản xạ gương trực giao với trục quay (nằm ngang). Các giá trị của *n* là 1, 2, 3, 4, 6. Với *n* = 2, 4, 6 thì nhóm *Cnh* chứa phép nghịch đảo.

Nhóm C_{nv} : Có một trục quay bậc *n* và *n* mặt phẳng phản xạ gương chứa trục quay (thẳng đứng). Các giá trị của *n* là 2, 3, 4, 6.

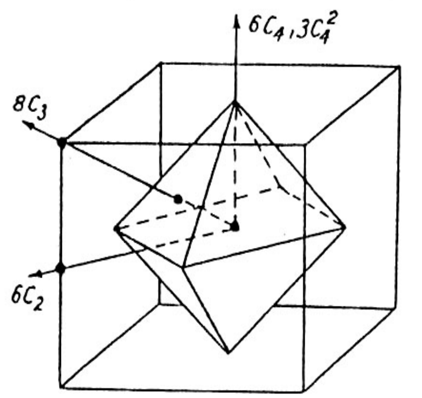
Nhóm S_n : Chỉ có một trục quay - phản xạ gương bậc *n*. Các giá trị của *n* ứng với nhóm là *n* = 4, 6, vì rằng các nhóm S_2 và S_3 trùng với C_i và C_{3h}.

Nhóm D_n : Có một trục quay bậc n và na trục quay bậc 2 trực giao với trục quay bậc *n*. Các giá trị của *n* là 2, 3, 4, 6.

Nhóm D_{nd} : Thu được từ nhóm *Dn* bằng cách thêm *n* mặt phẳng phản xạ gương σ_d, mỗi mặt phẳng là mặt phân giác của góc giữa hai trục bậc 2. Các giá trị của *n* là 2, 3.

Nhóm D_{nh} : Thu được từ nhóm *Dn* bằng cách thêm vào mặt phẳng phản xạ gương trực giao với trục bậc *n* (nằm ngang). Các giá trị của *n* là 2, 3, 4, 6. Với *n* = 2, 4, 6 thì nhóm D_{nh} chứa phép nghịch đảo.

Nhóm *O* : Nhóm bao gồm các phép quay là phép đối xứng của hình lập phương. Nhóm này có 24 yếu tố: yếu tố đơn vị là 23 phép quay thật sự. Các phép quay đó là: $6C_2$, $8C_3$, $6C_4$ và $3C_4^3$ (hình 3.1).

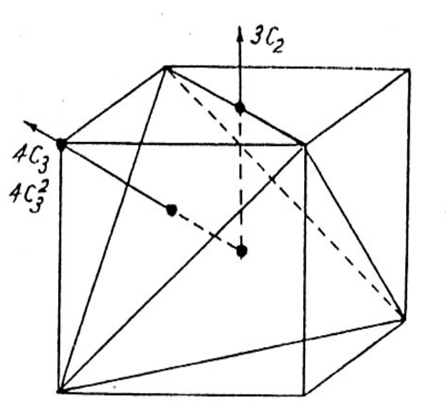


Hình 3.1

Nhóm O_h: Nhóm gồm tất cả các phép đối xứng của hình lập phương và gọi là nhóm bát diện, thu được từ nhóm O bằng cách thêm nghịch đảo. Ta có

$O_h = O \otimes Ci$.

Nhóm T: Nhóm gồm các phép quay là phép đối xứng của hình tứ diện đều. Nhóm này có 12 yếu tố: yếu tố đơn vị và 11 phép quay thực sự. Các phép quay đó là: $3C_2$, $4C_3$ và C_3^2 (hình 3.2).



Hình 3.2

Nhóm T_h :

$T_h = T \quad C_i$.

Chú ý rằng tứ diện không đối xứng đối với phép nghịch đảo, cho nên T_h không phải là một nhóm đối xứng của hình tứ diện đều.

Nhóm T_d: nhóm tất cả các phép đối xứng của hình tứ diện đều và gọi là nhóm tứ diện, thu được bằng cách thêm $6iC_4$ và $6\sigma_d$vào nhóm T.

Đó là tất cả 32 nhóm điểm tinh thể học. Các yếu tố của các nhóm điểm được gọi là các biến đổi điểm.

Ngoài các nhóm tịnh tiến và các nhóm điển hình tinh thể học, các tinh thể chất rắn còn có thể có tính chất đối xứng đối vứoi các nhóm có cá yếu tố là các tổ hợp của phép tính tiến và phép biến đổi điểm mà nếu xét riêng biệt thì phép tịnh tiến và phép biến đổi điểm này không phải là phép đối xứng. Các nhóm đối xứng của tinh thể gọi là các **nhóm không gian**. Có tất cả 230 nhóm không gian.

Các ký hiệu về các nhóm điểm viết ở trên được gọi là các ký hiệu Schönfies. Ngoài các ký hiệu này người ta còn dùng một cách ký hiệu khác, gọi là ký hiệu quốc tế hay ký hiệu Herman-Manguin, quy ước như sau:

- trục quay bậc n ký hiệu là n ;

- mặt phẳng phản xạ gương ký hiệu là m ;

- trục quay - phản xạ gương bậc n ký hiệu là n/m ;

- trục quay - nghịch đảo bậc n ký hiệu là $\bar{n}$.

Các trục quay, các trục quay - phản xạ gương, các mặt phẳng phản xạ gương và tâm nghịch đảo được gọi là các yếu tố đối xứng của nhóm điểm.

Hai yếu tố đối xứng cùng một loại của một nhóm điểm (hai trục quay cùng một bậc, hai trục quay - phản xạ gương cùng một bậc, hai mặt phản xạ gương) được gọi là **tương đương** với nhau nếu có một phép biến đổi của nhóm đang xét chuyển một yếu tố thành yếu tố kia. Trong Chương I, khi nghiên cứu về nhóm quay $SO(3)$, chúng ta đã chứngminh rằng hai phép quay cùng một góc quanh hai trục quay khác nhau liên hợp với nhau. Bằng những lập luận tương tự chúng ta cũng có thể chứng minh rằng **trong một nhóm điểm hai phép quay cùng một góc quanh hai trục quay tương đương, hai phép quay - phản xạ gương cùng một góc quanh hai trục quay - phản xạ gương tương đương hoặc hai phép phản xạ gương qua hai mặt phẳng phản xạ gương tương đương là hai yếu tố liên hợp với nhau**. Chúng ta sẽ áp dụng các dấu hiệu nói trên về hai yếu tố liên hợp với nhau của một nhóm điểm khi phân chia các yếu tố của mỗi nhóm điểm thành các lớp các yếu tố liên hợp.