

Mở đầu

* khoa học vật liệu nghiên cứu mối quan hệ giữa cấu trúc và tính chất của vật liệu



Vật liệu là gì?

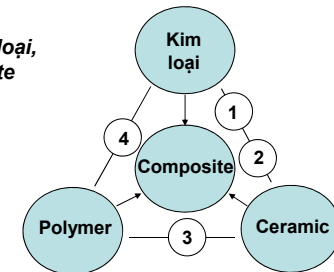
→ là các vật rắn có thể sử dụng để chế tạo các dụng cụ, máy móc, thiết bị, xây dựng các công trình.....



Mở đầu

4 nhóm vật liệu chính: VL kim loại, Ceramic, Polymer và Composite

- 1- VL bán dẫn
- 2- VL siêu dẫn
- 3- VL silicon
- 4- VL polymer dẫn điện



Mở đầu (tiếp theo)

Vai trò của vật liệu:

Đối tượng của vật liệu học cho chuyên ngành cơ khí:

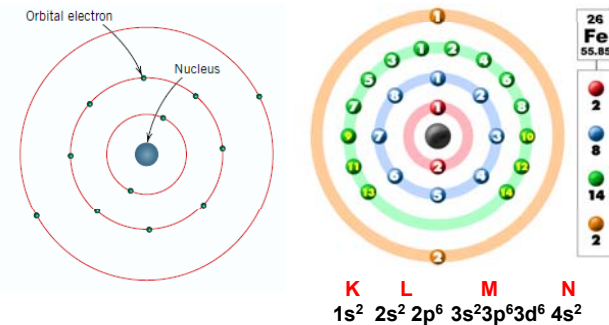
→ nghiên cứu mối quan hệ giữa tính chất và cấu trúc của vật liệu

- Tính chất:**
- cơ học (cơ tính)
 - vật lý (lý tính)
 - hóa học (hoá tính)
 - công nghệ và sử dụng
- Cấu trúc:**
- nghiên cứu tổ chức tế vi
 - cấu tạo tinh thể

Chương 1: Cấu trúc tinh thể và sự hình thành

1.1 Cấu tạo và liên kết nguyên tử:

Cấu tạo nguyên tử: các e chuyển động bao quanh hạt nhân (p+n)

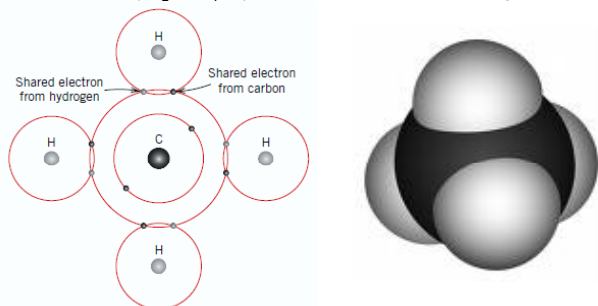


Chương 1: Cấu trúc tinh thể và sự hình thành

1.1 Cấu tạo và liên kết nguyên tử:

Các dạng liên kết trong chất rắn:

* **Liên kết đồng hoá trị:** hình thành do các nguyên tử góp chung điện tử hoá trị $\rightarrow$ liên kết (Cl_2 , CH_4 ...). Liên kết có tính định hướng

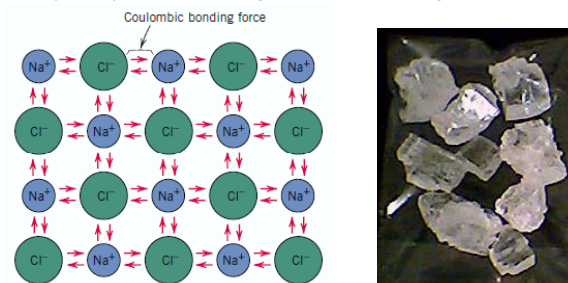


Chương 1: Cấu trúc tinh thể và sự hình thành

1.1 Cấu tạo và liên kết nguyên tử:

Các dạng liên kết trong chất rắn:

* **Liên kết ion:** hình thành do lực hút giữa các nguyên tử dễ nhường e hoá trị (tạo ion dương) với các nguyên tử dễ nhận e hoá trị (tạo ion âm) $\rightarrow$ liên kết (LiF ...). Liên kết không có tính định hướng



Chương 1: Cấu trúc tinh thể và sự hình thành

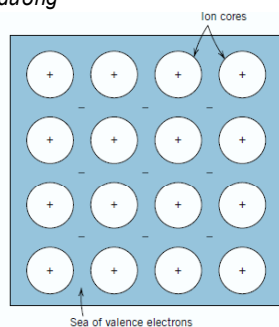
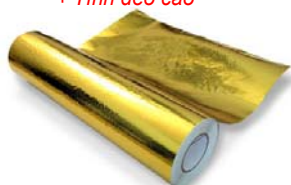
1.1 Cấu tạo và liên kết nguyên tử:

Các dạng liên kết trong chất rắn:

* **Liên kết kim loại:** hình thành do sự tương tác giữa các e tự do chuyển động trong mạng tinh thể là các ion dương

Tính kim loại:

- + Ánh kim
- + Dẫn điện, dẫn nhiệt
- + Tính dẻo cao



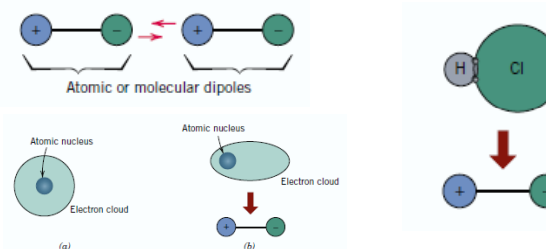
Chương 1: Cấu trúc tinh thể và sự hình thành

1.1 Cấu tạo và liên kết nguyên tử:

Các dạng liên kết trong chất rắn:

* **Liên kết hỗn hợp:** hình thành do trong vật liệu tồn tại nhiều loại liên kết khi có sự góp mặt của nhiều loại nguyên tử

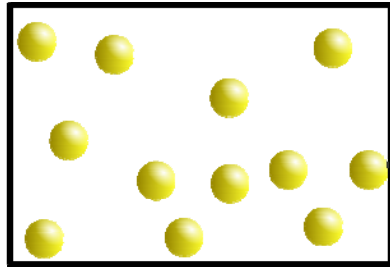
* **Liên kết yếu (Van de Waals):** do có sự tương tác giữa các phần tử bị phân cực



1.1 Cấu tạo và liên kết nguyên tử:

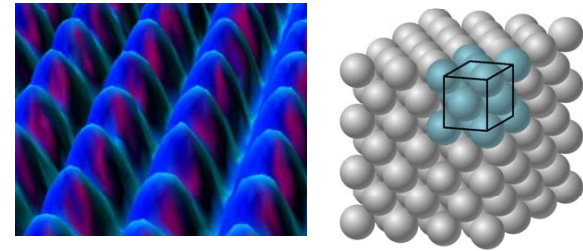
Sự sắp xếp các nguyên tử trong vật chất

Chất khí: các nguyên tử, phân tử chuyển động hỗn loạn

**1.1 Cấu tạo và liên kết nguyên tử:**

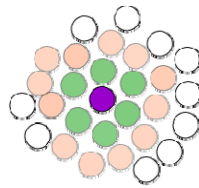
Sự sắp xếp các nguyên tử trong vật chất

Chất rắn tinh thể: các nguyên tử có vị trí hoàn toàn xác định (có trật tự gần và trật tự xa)

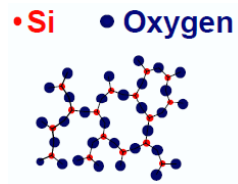
**1.1 Cấu tạo và liên kết nguyên tử:**

Sự sắp xếp các nguyên tử trong vật chất

Chất lỏng: có trật tự gần, không có trật tự xa



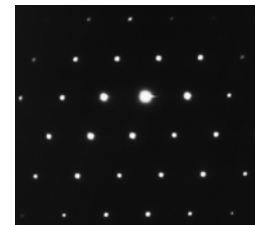
Chất rắn vô định hình: cấu trúc giống chất lỏng trước khi đông đặc



Chất rắn vi tinh thể: có cấu trúc tinh thể ở trạng thái cỡ hạt nano

1.2 Khái niệm về mạng tinh thể

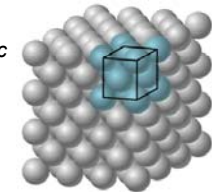
Nối tâm các nguyên tử bằng các đường thẳng tưởng tượng
→ **Mạng tinh thể**



Ô cơ sở:

→ là hình không gian thể tích nhỏ nhất nhỏ nhất đặc trưng cho tính đối xứng của mạng tinh thể

→ Tinh thể ô cơ sở theo ba chiều không gian sẽ xây dựng được toàn bộ mạng tinh thể

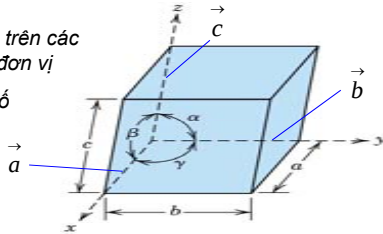


Ô cơ sở và cách biểu diễn

3 véc tơ a , b và c lần lượt nằm trên các trục Ox , Oy và $Oz \rightarrow 3$ véc tơ đơn vị

Độ lớn a , b và $c \rightarrow$ các hằng số mạng

Các góc α , β và γ là góc tạo bởi các véc tơ đơn vị



Các hệ tinh thể khác nhau phụ thuộc vào mối quan hệ giữa cạnh và góc

Ba nghiêng (tam tà)	$a \neq b \neq c$	$\alpha \neq \beta \neq \gamma$
Một nghiêng (đơn tà)	$a \neq b \neq c$	$\alpha = \beta = 90^\circ \neq \gamma$
Trực thoi	$a \neq b \neq c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
Ba phương (mặt thoi)	$a = b = c$	$\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$
Sáu phương (lục giác)	$a = b \neq c$	$\alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$
Chính phương (bốn phương)	$a = b = c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
Lập phương	$a = b = c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$

Nút mạng $[[x,x,x]]$: dùng để biểu thị tọa độ của các nguyên tử

A $[[1,1,0]]$

B $[[1,1,1]]$

C $[[0,1,1]]$

Chỉ số phương $[uvw]$:

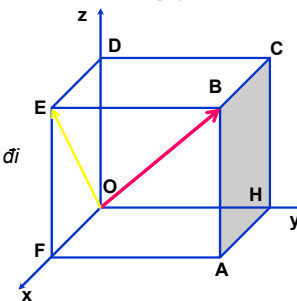
$\rightarrow$ biểu diễn phương của đường thẳng đi qua hai nút mạng

$\rightarrow$ Hai phương // có cùng chỉ số

OH $[010]$

OB $[111]$

OE $[101]$



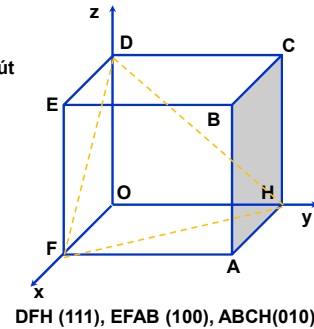
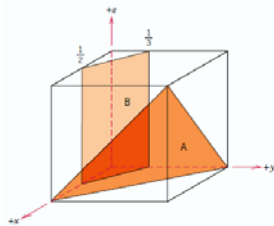
Họ phương, ký hiệu $\langle uvw \rangle$: các phương có giá trị tuyệt đối u, v, w giống nhau không kể thứ tự có cùng quy luật sắp xếp nguyên tử.

Chỉ số mặt (chỉ số Miller) (hkl) :

Mặt tinh thể: Mặt phẳng chứa các nút mạng, không đi qua gốc tọa độ.

• Hai mặt tinh thể // có cùng chỉ số

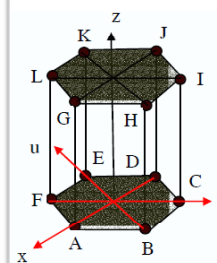
Cách xác định chỉ số mặt:



Họ mặt, ký hiệu $\{hkl\}$: các mặt có giá trị tuyệt đối u, v, w giống nhau không kể thứ tự có cùng quy luật sắp xếp nguyên tử.

Chỉ số mặt (chỉ số Miller-Bravais) $(hkil)$:

$$i = -(h+k)$$



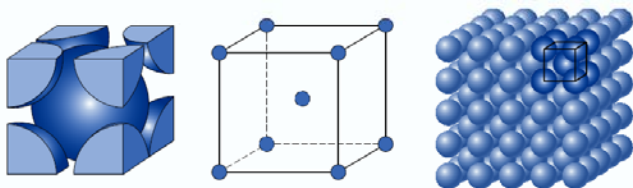
mặt	chỉ số Miller	chỉ số Miller - Bravais
ABHG	(100)	(10 $\bar{1}$ 0)
BCIH	(010)	(01 $\bar{1}$ 0)
AGLF	(110)	(11 $\bar{2}$ 0)
ABCDEF	(001)	(0001)
ACIG		(11 $\bar{2}$ 0)

1.3. Một số cấu trúc tinh thể điển hình của vật rắn

1.3.1. Mạng tinh thể điển hình của vật liệu kim loại

a) Lập phương tâm khối (A2)

Ô cơ sở : Khối lập phương cạnh bằng a .



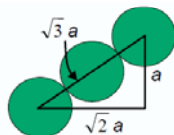
Số nguyên tử trong một ô cơ sở: $N_0 = 2$

Bán kính nguyên tử: $r_{nt} = a \cdot \sqrt{3}/4$

Mật xếp chặt nhất: $\{110\}$

Phương xếp chặt nhất: $\langle 111 \rangle$

$M_v = v_{nt}/V_0 = 68\%$



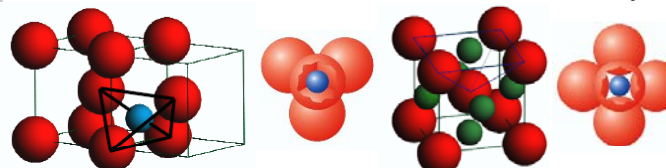
1.3.1. Mạng tinh thể điển hình của vật liệu kim loại

a) Lập phương tâm khối (A2)

Lỗ hổng : Không gian trống giữa các nguyên tử;

Kích thước lỗ hổng = đường kính quả cầu lớn nhất đặt lọt trong lỗ hổng

Lỗ hổng 4 mặt: $\frac{1}{4}$ trên cạnh nối điểm giữa 2 cạnh đối diện, $d_{lh} = 0,291d_{ng,t}$



Lỗ hổng 8 mặt: tâm các mặt bên + giữa các cạnh, $d_{lh} = 0,154d_{ng,t}$

Kim loại có kiểu mạng A2: Fe $_{\alpha}$, Cr, Mo, W.....

1.3.1. Mạng tinh thể điển hình của vật liệu kim loại

a) Lập phương tâm khối (A2)

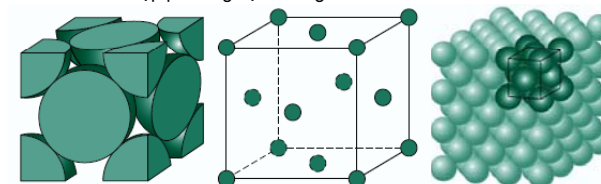
Kim loại có kiểu mạng A2: Fe $_{\alpha}$, Cr, Ti $_{\beta}$, Mo, W, V.....



1.3.1. Mạng tinh thể điển hình của vật liệu kim loại

b) Lập phương tâm mặt (A1)

Ô cơ sở : Khối lập phương cạnh bằng a .



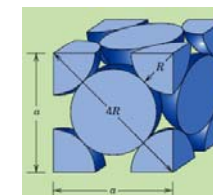
Số nguyên tử trong một ô cơ sở: $N_0 = 4$

Bán kính nguyên tử: $r_{nt} = a \cdot \sqrt{2}/4$

Mật xếp chặt nhất: $\{111\}$

Phương xếp chặt nhất: $\langle 110 \rangle$

$M_v = v_{nt}/V_0 = 74\%$



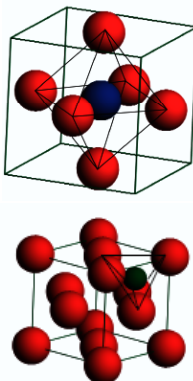
1.3.1. Mạng tinh thể điển hình của vật liệu kim loại

Lập phương tâm mặt (A1)

Lỗ hổng 8 mặt: tâm khối + giữa các cạnh, $d=0,414d_{ng,t}$



Lỗ hổng 4 mặt: $\frac{1}{4}$ trên các đường chéo khối tính từ đỉnh, $d=0,225d_{ng,t}$



1.3.1. Mạng tinh thể điển hình của vật liệu kim loại

b) Lập phương tâm mặt (A1)

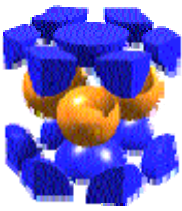
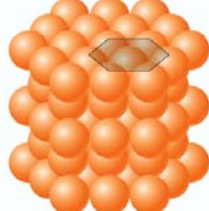
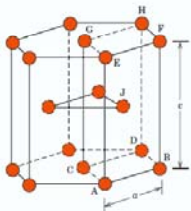
Kim loại có kiểu mạng A1: Fe, Au, Ag, Al, Cu, Ni,...



1.3.1. Mạng tinh thể điển hình của vật liệu kim loại

c) Sáu phương xếp chặt (A3)

Ô cơ sở: Khối lục lăng cạnh đáy a, chiều cao c.



Số nguyên tử trong một ô cơ sở: $N_0 = 6$

Bán kính nguyên tử: $r_{nt} = a/2$; $c/a = 1,633$

Mặt xếp chặt nhất: (0001)

Phương xếp chặt nhất: $\langle 1120 \rangle$

$M_v = v_{nt}/V_0 = 74\%$

1.3.1. Mạng tinh thể điển hình của vật liệu kim loại

Sáu phương xếp chặt (A3)

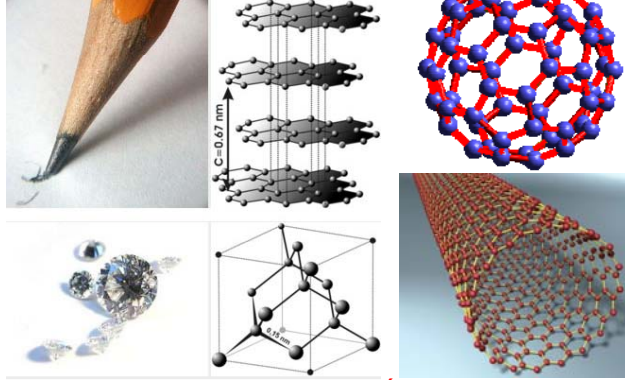
Kim loại có kiểu mạng A3: Ti, Zn, Mg, Mg, Be, Cd, Zr



1.3. Một số cấu trúc tinh thể điển hình của vật rắn

1.3.2. Một số mạng tinh thể của vật liệu phi kim

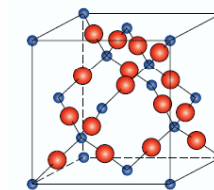
a) Chất rắn có liên kết cộng hóa trị



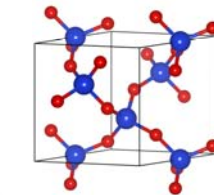
Kim cương, graphit, fullerene, và ống nano cacbon

1.3.2. Một số mạng tinh thể của vật liệu phi kim

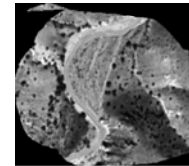
a) Chất rắn có liên kết cộng hóa trị



Thạch anh

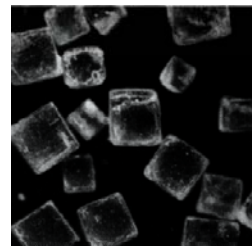
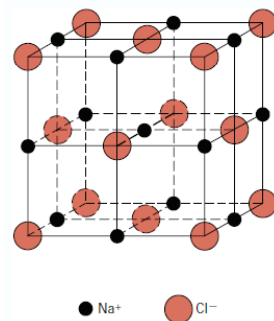


Cristobalit



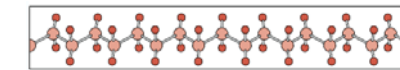
1.3.2. Một số mạng tinh thể của vật liệu phi kim

b) Chất rắn có liên kết ion

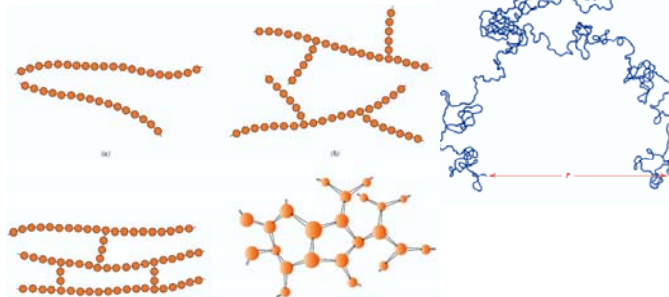


1.3.2. Một số mạng tinh thể của vật liệu phi kim

c) Cấu trúc của polyme

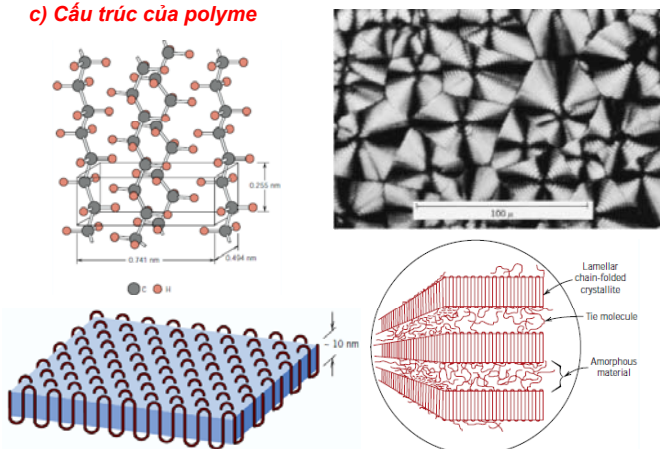


● C ● H



1.3.2. Một số mạng tinh thể của vật liệu phi kim

c) Cấu trúc của polyme



1.3.3. Dạng thù hình

Tồn tại nhiều cấu trúc tinh thể khác nhau của cùng một nguyên tố
Ký hiệu: α , β , γ , δ ... tăng dần theo nhiệt độ.



$Fe_{\alpha} - A2, T < 911^{\circ}C$



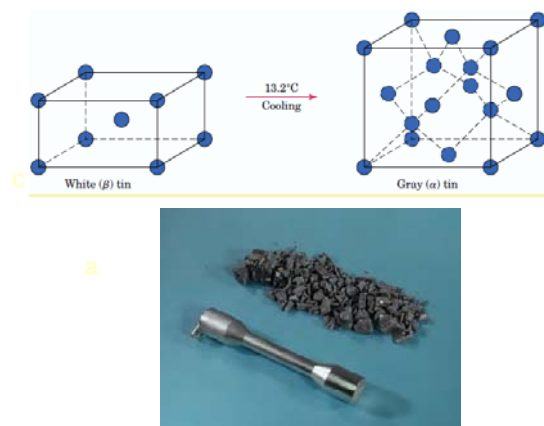
$Fe_{\gamma} - A1, T = 911 \div 1392^{\circ}C$



$Fe_{\delta} - A2, T = 1392 \div 1539^{\circ}C$

→ Tính chất khác nhau

1.3.3. Dạng thù hình



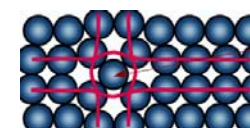
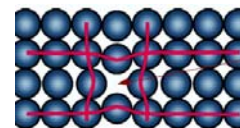
1.4. Các sai lệch trong mạng tinh thể

K/n: các nguyên tử nằm sai vị trí quy định → ảnh hưởng tính chất

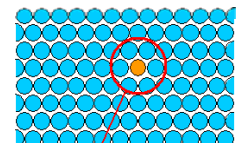
Phân loại: Sai lệch điểm, Sai lệch đường, Sai lệch mặt

Sai lệch điểm: kích thước rất nhỏ (nguyên tử) theo 3 chiều không gian

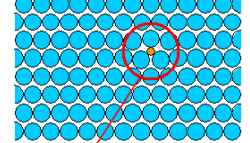
Nút trống và nguyên tử xen kẽ: nguyên tử chuyển động bứt khỏi nút mạng



Nguyên tử tạp chất



thay thế

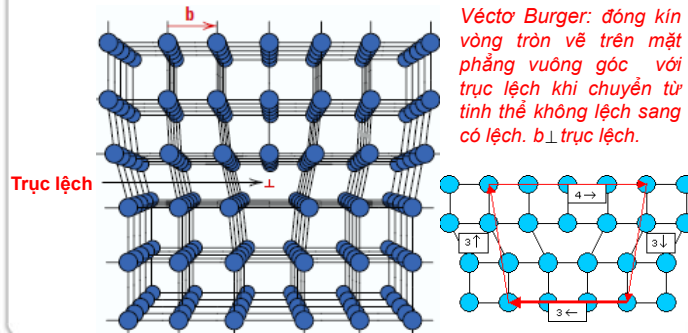


xen kẽ

1.4. Các sai lệch trong mạng tinh thể

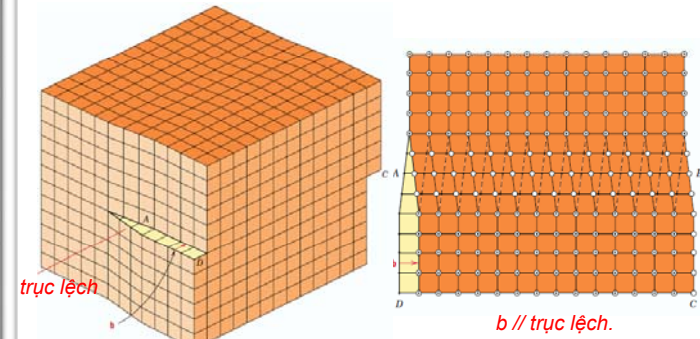
Sai lệch đường – lệch: kích thước rất nhỏ (nguyên tử) theo 2 chiều và lớn theo chiều thứ ba.

Lệch biên: chèn thêm bán mặt vào nửa trên của mạng tinh thể lý tưởng.



1.4. Các sai lệch trong mạng tinh thể

Lệch xoắn: hai phần của mạng tinh thể trượt tương đối so với nhau một hằng số mạng. Các nguyên tử trong vùng lệch sắp xếp theo hình xoắn ốc.



1.4. Các sai lệch trong mạng tinh thể

Đặc trưng về hình thái lệch

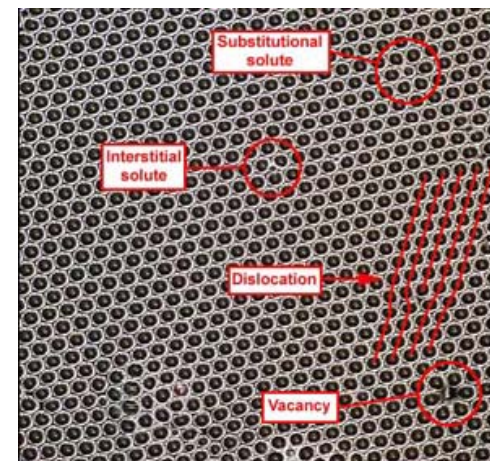
$$\text{Mật độ lệch } \rho : \frac{\sum l_{\text{lech}}}{V} = \left[\frac{\text{cm}}{\text{cm}^3} \right] = [\text{cm}^{-2}]$$

- + Phụ thuộc độ sạch và trạng thái gia công
- Kim loại sạch ở trạng thái ủ $\rho = 10^8 \text{ cm}^{-2}$
- Hợp kim và kim loại sau biến dạng nguội : $\rho = 10^{10} - 10^{12} \text{ cm}^{-2}$

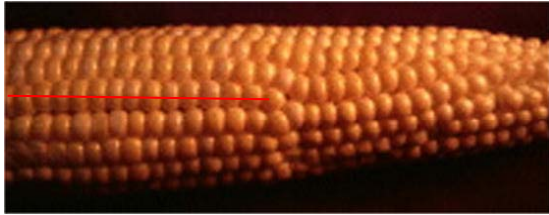
Ý nghĩa của lệch:

- + Lệch biên có ảnh hưởng rất lớn đến quá trình biến dạng dẻo
- + Lệch xoắn giúp cho mầm phát triển nhanh khi kết tinh

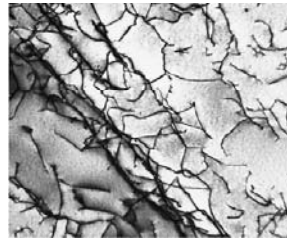
Mô hình bong bóng xà phòng



Lệch trong thực tế

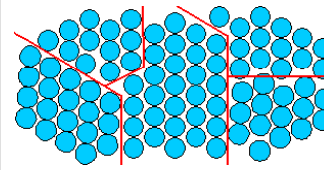


Hợp kim Titan
50000 lần

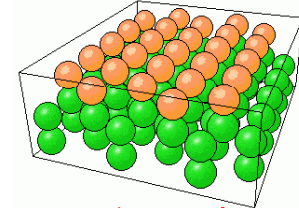


1.4. Các sai lệch trong mạng tinh thể

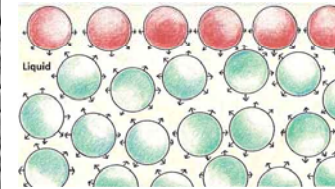
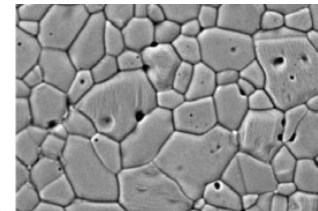
Sai lệch mặt : kích thước lớn theo hai chiều đo và nhỏ theo chiều thứ ba, tức có dạng của một mặt.



biên giới hạt và siêu hạt



bề mặt tinh thể.



1.5. Đơn tinh thể và đa tinh thể

Đơn tinh thể: → là một khối đồng nhất có cùng kiểu mạng và hằng số mạng, có phương không đổi trong toàn bộ thể tích

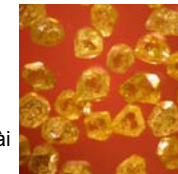
- + bề mặt ngoài nhẵn, hình dáng xác định
- + các đơn tinh thể kim loại không tồn tại trong tự nhiên, muốn có phải dùng công nghệ "nuôi" đơn tinh thể.



1.5. Đơn tinh thể và đa tinh thể

Đơn tinh thể:

- + có tính dị hướng
- + ứng dụng:



Hạt mài



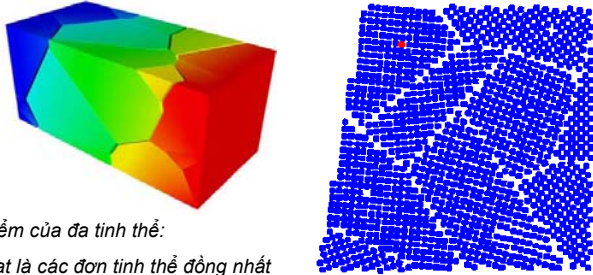
Vật liệu bán dẫn



Tuốc bin động cơ phản lực

1.5. Đơn tinh thể và đa tinh thể

Đa tinh thể: → là tập hợp của nhiều đơn tinh thể có cùng cấu trúc thông số mạng nhưng định hướng khác nhau

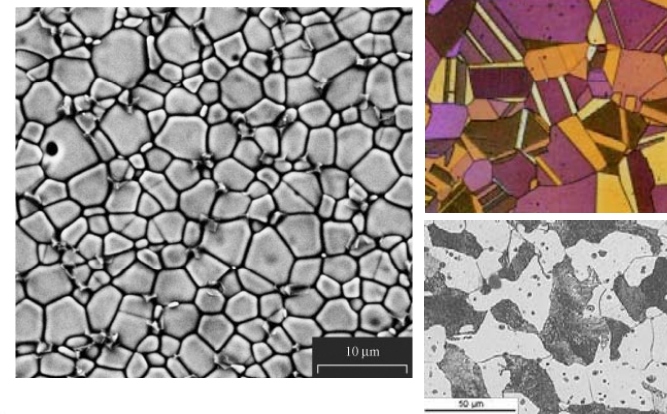


Đặc điểm của đa tinh thể:

- các hạt là các đơn tinh thể đồng nhất
- các đơn tinh thể (hạt) ngăn cách nhau bởi các biên giới hạt
- biên hạt luôn bị xô lệch không tuân theo quy luật sắp xếp như trong tinh thể
- không có sự đồng nhất về phương mạng trong toàn khối → tính đẳng hướng

1.5. Đơn tinh thể và đa tinh thể

Quan sát được cấu trúc đa tinh thể qua tổ chức tế vi



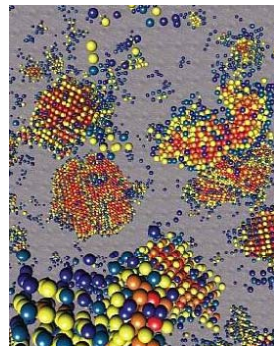
1.6. Sự kết tinh và hình thành tổ chức kim loại



1.6.1. Điều kiện kết tinh

a) Cấu trúc ở trạng thái lỏng:

- + có trật tự gần, cân bằng động
- + cấu trúc gần với trạng thái rắn
- + các đám nguyên tử là tâm mầm kt



1.6. Sự kết tinh và hình thành tổ chức kim loại

1.6.1. Điều kiện kết tinh

b) Biến đổi năng lượng khi kết tinh

$$+ T > T_0 \rightarrow G_L < G_R$$

$$+ T < T_0 \rightarrow G_L > G_R$$

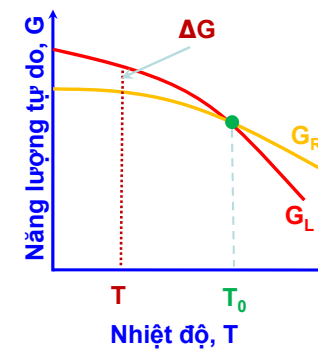
+ $T = T_0$ → Quá trình kết tinh chưa xảy ra.

T_0 - nhiệt độ kết tinh (đồng đặc)

c) Độ quá nguội :

$$\Delta T = T - T_0 < 0 \quad (1-2^\circ\text{C} \div 1000^\circ\text{C})$$

Điều kiện kết tinh : $\Delta T < 0$ ($\Delta G < 0$)



1.6.2. Hai quá trình của sự kết tinh

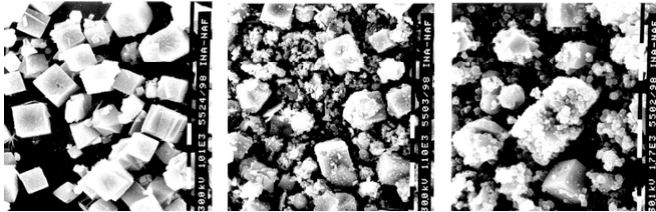
a) Tạo mầm

Mầm : phần tử rắn có cấu trúc tinh thể, kích thước đủ lớn phát triển lên thành hạt tinh thể.

Mầm tự sinh: $r > r_{th} = 2\sigma/\Delta G_v$ (ΔT tăng $\rightarrow \Delta G_v$ tăng $\rightarrow r_{th}$ giảm).

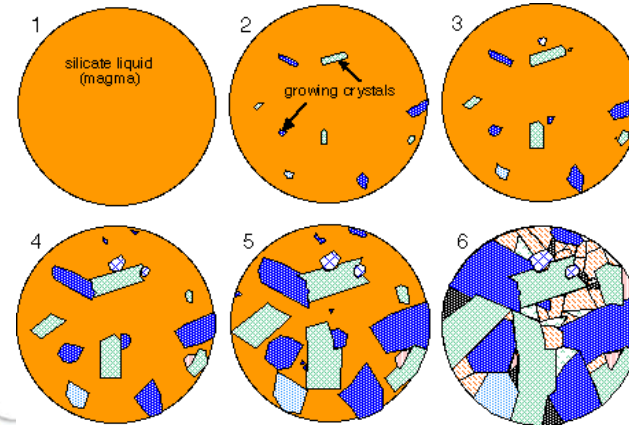
Mầm ký sinh: các hạt rắn lơ lửng trong chất lỏng, nhấp nhô bề mặt khuôn đúc.

b) Phát triển mầm: nguyên tử chất lỏng bám lên bề mặt mầm, đặc biệt ở những bậc lệch xoắn



1.6. Sự kết tinh và hình thành tổ chức kim loại

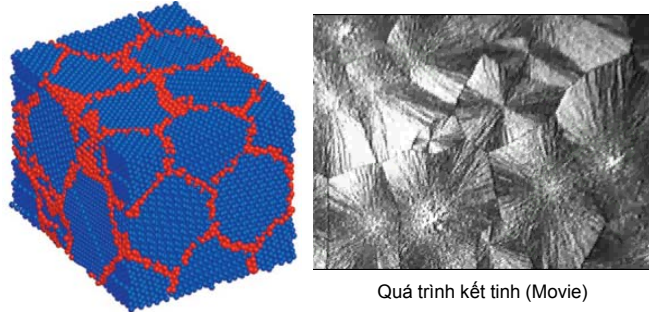
1.6.2. Hai quá trình của sự kết tinh



1.6. Sự kết tinh và hình thành tổ chức kim loại

1.6.3. Sự hình thành hạt tinh thể

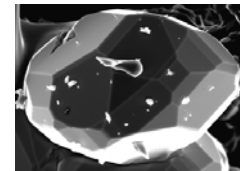
- + Mỗi mầm phát triển thành 1 hạt, hạt phát triển trước to hơn
- + Các hạt định hướng ngẫu nhiên, không đồng hướng
- + Vùng biên hạt có mạng tinh thể bị xô lệch $\rightarrow$ sai lệch mặt



Quá trình kết tinh (Movie)

1.6.3. Sự hình thành hạt tinh thể

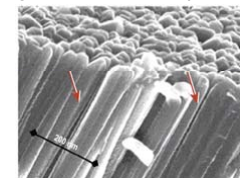
Hình dạng hạt tinh thể phụ thuộc phương thức làm nguội



+ Nguội đều theo mọi phương



+ Nguội nhanh theo hai phương



+ Nguội nhanh theo một phương



+ Nguội nhanh khi nhiệt luyện

1.6. Sự kết tinh và hình thành tổ chức kim loại

1.6.4. Các phương pháp tạo hạt nhỏ khi đúc

Kích thước hạt A phụ thuộc tốc độ sinh mầm (n) và phát triển mầm (v)

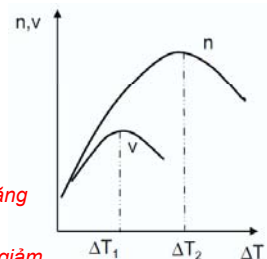
$$A = 1,1 \sqrt[4]{\left(\frac{v}{n}\right)^3}$$

+ $\Delta T < \Delta T_1$ (10^3 °C/s) : ΔT tăng $\rightarrow n, v$ tăng $\rightarrow$ kích thước hạt nhỏ;

+ $\Delta T_1 < \Delta T < \Delta T_2$: ΔT tăng $\rightarrow n$ tăng, v giảm $\rightarrow$ vật liệu nano;

+ $\Delta T > \Delta T_2$: ΔT tăng $\rightarrow n$ giảm, v giảm $\rightarrow$ VL vô định hình;

VD : Đúc khuôn cát vs khuôn kim loại



1.6. Sự kết tinh và hình thành tổ chức kim loại

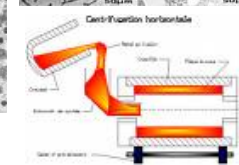
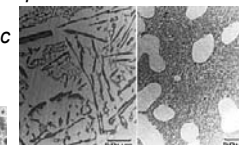
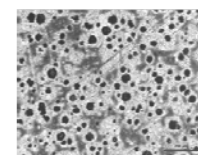
1.6.4. Các phương pháp tạo hạt nhỏ khi đúc

Biến tính: thêm vào kim loại lỏng lượng ít chất biến tính làm nhỏ hạt, thay đổi hình dạng hạt.

Tạo mầm ngoại lai: Kim loại có kiểu mạng tương tự (Ti), hoặc chất tạo oxyt, nitrit Al_2O_3 , AlN , khi đúc thép.

Hấp phụ: Na (0,01%) cho hợp kim nhôm đúc

Cầu hóa: Mg, Ce, các nguyên tố đất hiếm



Tác động vật lý : rung, siêu âm, đúc ly tâm, ...

1.6. Sự kết tinh và hình thành tổ chức kim loại

1.6.5. Cấu tạo thỏi đúc

a) Ba vùng tinh thể của thỏi đúc

+ Lớp vỏ ngoài, hạt nhỏ mịn

+ Vùng tiếp theo hạt lớn hình trụ vuông góc với thành khuôn

+ Vùng ở giữa có các hạt lớn đẳng trục

b) Khuyết tật của vật đúc:

+ Rỗ co và lõm co do khi kết tinh kim loại co lại, không được bù

+ Rỗ khí do khí hòa tan không kịp thoát ra

+ Thiên tích : sự không đồng nhất về thành phần và tổ chức do tạp chất tích tụ.

