

MỤC LỤC

MUC LUC.....	1
LỜI NÓI ĐẦU.....	6
Từ khi loài người biết dùng lửa để sưởi ấm, biết hái lượm săn bắn để đảm bảo sự tồn tại của mình cho đến nay, khoa học kỹ thuật đã có những bước phát triển vượt bậc làm thay đổi căn bản cuộc sống của con người. Ngày nay khoa học kỹ thuật chủ yếu tập trung vào năm lĩnh vực lớn là: công nghệ thông tin, cơ khí-tự động hóa, điện tử viễn thông, công nghệ sinh học và công nghệ vật liệu. Trong đó công nghệ vật liệu đang có những bước phát triển quan trọng tạo ra nhiều loại vật liệu có tính năng ưu việt ứng dụng trong mọi lĩnh vực của đời sống và kỹ thuật.....	6
PHẦN I.....	7
VẬT LIỆU HỌC CƠ SỞ.....	7
Chương 1.....	7
Cấu trúc tinh thể của vật liệu.....	7
1.1. Cấu tạo và liên kết nguyên tử	7
1.1.1. Khái niệm cơ bản về cấu tạo nguyên tử	7
Bán kính van der Waals của nguyên tử là khoảng của điện tử xa nhất đến hạt nhân của nguyên tử (trong trường hợp nguyên tử độc lập) hoặc đến trung tâm của phân tử.....	7
+ Proton.....	9
+ Neutron.....	9
1.1.2. Mô hình nguyên tử.....	9
Trong lịch sử của ngành hoá học các nhà khoa học đã đưa ra nhiều mô hình về cấu trúc nguyên tử, điển hình là các mô hình của Dalton, Thompson, Rutherford và mô hình lượng tử về nguyên tử. Đặc biệt khi con người đã phát hiện ra các proton và neutron.	9
Mô hình nguyên tử được chấp nhận ngày nay như sau:.....	11
1.1.3. Các dạng liên kết nguyên tử trong chất rắn	12
1.2. Sự sắp xếp nguyên tử trong vật chất.....	16
1.2.1. Chất khí.....	16
1.2.2. Chất rắn tinh thể.....	16
1.2.3. Chất lỏng, chất rắn vô định hình và vi tinh thể.....	17
1.3. Khái niệm mạng tinh thể.....	18
1.3.1. Khái niệm và tính chất của mạng tinh thể.....	18
1.3.2. Các yếu tố đối xứng định hướng hay các yếu tố đối xứng trong hình hữu hạn.....	19
1.3.3. Các yếu tố đối xứng vị trí hay các yếu tố đối xứng trong hình vô hạn.....	19
1.3.4. Các ô mạng cơ sở và 14 kiểu mạng tinh thể.....	20
1.3.5. Ảnh hưởng của kiểu liên kết đến cấu trúc và tính chất tinh thể.....	23
1.4. Một số kiểu mạng tinh thể điển hình của kim loại	24
1.5. Sai lệch mạng tinh thể lệch	25
1.5.1. Các sai lệch điểm trong mạng tinh thể.....	25
1.5.2. Lệch đường, lệch mặt và tác dụng của lệch trong tinh thể.....	26
1.6. Đơn tinh thể và đa tinh thể.....	27

1.6.1. Tính có hướng của tinh thể.....	27
1.6.2. Đơn tinh thể và đa tinh thể.....	28
1.6.2.1. Đơn tinh thể.....	28
1.6.2.2. Đa tinh thể.....	28
Chương 2.....	30
Sự kết tinh và hình thành tổ chức của kim loại.....	30
2.1. Cơ sở chung của sự kết tinh.....	30
2.1.1 Điều kiện xảy ra khi kết tinh.....	30
2.1.2. Chuyển biến xảy ra khi kết tinh.....	31
2.1.2. Sự thải nhiệt.....	32
2.1.3. Tổ chức tế vi khi kết tinh.....	34
2.2. Hai quá trình của sự kết tinh.....	35
2.2.1. Quá trình tạo mầm	35
2.2.1.1. Quá trình tạo mầm đồng thể (mầm nội sinh).....	35
2.2.1.2. Quá trình tạo mầm dị thể (mầm ngoại sinh).....	36
2.2.2. Quá trình phát triển mầm.....	39
2.2.3. Sự tạo mầm trong chất rắn.....	39
2.3. Sự hình thành hạt.....	40
2.4. Cấu tạo tinh thể thối đúc.....	41
Phần II.....	42
HỢP KIM VÀ TỔ CHỨC.....	42
Chương 3	42
Hợp kim và giản đồ pha.....	42
3.1. Cấu trúc tinh thể của hợp kim.....	42
3.1.1.Khái niệm về hợp kim.....	42
3.1.2. Các dạng cấu tạo của hợp kim.....	42
3.1.2.1.Dung dịch rắn.....	43
3.1.2.2. Hợp chất hóa học.....	44
3.1.2.3. Hỗn hợp cơ học.....	45
3.2. Giản đồ pha của hệ hai cấu tử.....	46
3.2.1.Quy tắc pha và công dụng.....	46
3.2.2. Các giản đồ pha và công dụng.....	46
3.2.2.1. Giản đồ loại 1.....	47
3.2.2.2. Giản đồ loại 2.....	49
3.2.2.3. Giản đồ loại 3.....	49
3.3. Giản đồ sắt-cacbon và các tổ chức.....	50
3.3.1.Giản đồ pha Fe-Fe ₃ C.....	51
3.3.2. Các tổ chức của hợp kim Fe-C.....	52
Chương 4.....	56
Nhiệt luyện thép.....	56
4.1. Khái niệm nhiệt luyện	56
4.1.1. Đặc điểm của nhiệt luyện.....	56
4.1.2. Tác dụng của nhiệt luyện trong nhà máy cơ khí.....	56
4.2. Các chuyển biến xảy ra khi nung nóng.....	58
4.2.1. Cơ sở xác định chuyển biến khi nung nóng.....	58
4.2.2. Đặc điểm của chuyển biến pec lit thành austenit.....	59

4.2.3. Chuyển biến xảy ra khi giữ nhiệt.....	60
4.2.4. Chuyển biến của austenit khi làm nguội chậm.....	61
4.2.7. Chuyển biến khi nung nóng thép đã tôi (khi ram).....	66
4.2.7.2. Các chuyển biến xảy ra khi ram.....	66
4.3. Các dạng nhiệt luyện thép và hợp kim.....	68
4.3.1. Ủ thép.....	68
4.3.2. Thường hóa thép.....	69
4.3.3. Tôi thép.....	70
4.3.4. Ram thép.....	74
4.4. Các khuyết tật xảy ra khi nhiệt luyện thép.....	75
4.4.1. Biến dạng và nứt.....	75
4.4.2. Oxy hóa và thoát cacbon.....	76
4.4.3. Độ cứng không đạt.....	76
4.5. Hóa nhiệt luyện.....	76
4.5.1. Thấm cacbon.....	77
4.5.2. Thấm ni tơ cho thép.....	79
4.5.3. Thấm đồng thời bề mặt thép bằng cacbon và ni tơ.....	79
PHẦN 3.....	80
CÁC LOẠI VẬT LIỆU.....	80
Chương 5.....	80
Thép và gang.....	80
5.1. Khái niệm chung về thép cacbon và thép hợp kim.....	80
5.1.1. Thép cacbon	80
5.1.2. Thép hợp kim	83
5.2. Thép xây dựng.....	85
5.2.1. Đặc điểm chung và phân loại.....	85
5.2.2. Thép thông dụng.....	85
5.2.3. Thép hợp kim thấp độ bền cao	87
5.2.4. Thép làm cốt bê tông.....	87
5.4. Thép chế tạo máy.....	87
5.4.1. Các yêu cầu chung.....	87
5.4.2. Các nhóm thép chế tạo máy.....	88
5.5. Thép dụng cụ	88
5.5.1. Các yêu cầu chung.....	88
5.5.2. Các nhóm thép dụng cụ.....	89
5.6. Thép đặc biệt.....	92
5.6.1. Đặc điểm chung và phân loại.....	92
5.6.2. Thép không rỉ.....	92
5.6.3. Thép bền nóng.....	94
5.7. Gang	95
5.7.1. Đặc điểm chung của các loại gang	95
5.7.2. Gang xám.....	96
5.7.3. Gang cầu.....	97
5.7.4. Gang dẻo.....	99
Chương 6.....	101
6.1. Nhôm và hợp kim nhôm.....	101

6.1.1. Nhôm nguyên chất và phân loại hợp kim nhôm.....	101
6.1.2. Hợp kim nhôm biến dạng.....	102
6.1.3. Hợp kim nhôm đúc.....	103
6.2. Đồng và hợp kim đồng.....	105
6.2.1. Đồng nguyên chất và các đặc tính của hợp kim đồng.....	105
6.2.2. Phân loại hợp kim đồng.....	105
6.3. Các hợp kim ổ trượt.....	107
6.3.1. Yêu cầu đối với hợp kim làm ổ trượt.....	107
6.3.2. Hợp kim ổ trượt có nhiệt độ chảy thấp.....	107
6.3.3. Hợp kim nhôm làm ổ trượt.....	108
Chương 7.....	109
Vật liệu polyme.....	109
7.1. Khái niệm	110
7.1.1. Định nghĩa.....	110
7.1.2. Phân loại polyme.....	110
7.2. Cấu trúc phân tử polyme và tính chất.....	112
7.2.1. Cấu trúc phân tử polyme.....	112
7.2.2. Sự kết tinh của polyme.....	116
Vật liệu Polymer có thể tồn tại ở dạng tinh thể nhưng nút mạng là các phân tử.....	116
Kích thước phân tử lớn và phức tạp nên Polymer chỉ kết tinh một phần (0-95%).....	116
Khối lượng riêng của Polymer tinh thể lớn hơn so với vô định hình.....	116
Các yếu tố ảnh hưởng đến độ kết tinh của polyme	116
7.2.3. Tính chất cơ học của polyme.....	117
7.3. Một số phương pháp gia công polyme.....	120
7.3.1. Công nghệ cán.....	120
7.3.2. Công nghệ đùn.....	121
7.3.3. Công nghệ đúc áp lực (hay còn gọi là đúc phun).....	121
7.3.4. Công nghệ thổi vật rỗng.....	122
7.4. Các loại vật liệu polyme chính và công dụng.....	123
7.4.1. Các loại nhựa nhiệt dẻo thông dụng.....	123
+ Polyetylen.....	123
+ Polypropylen.....	124
+ Polystyren.....	125
+ Polyvinylclorua.....	126
+ Polytetrafloetylen.....	126
7.4.2. Các loại nhựa nhiệt rắn thông dụng.....	127
7.4.3. Elastome tổng hợp.....	127
Chương 8.....	128
8.1. Khái niệm chung.....	128
8.1.1. Định nghĩa.....	129
8.2. Vật liệu Polyme Compozit	131
8.2.1. Thành phần của vật liệu	131
8.2.3. Chất độn và phụ gia.....	139
8.2.4. Đặc điểm tính chất sử dụng của vật liệu polyme compozit.....	142
8.3. Một số phương pháp chế tạo kết cấu từ vật liệu polyme compozit.....	143
8.3.1. Đặc trưng chung của công nghệ.....	143

<u>8.3.2. Một số phương pháp gia công chế tạo kết cấu từ composit.....</u>	<u>143</u>
<u>+ Công nghệ khuôn chân không ô tôcla: Phương pháp này được áp dụng để sản xuất các sản phẩm có kích thước lớn với cấu trúc phức tạp, với những đòi hỏi và ổn định về tiêu chuẩn cơ lý hóa khi khai thác sử dụng chúng và với số lượng sản phẩm lớn. Quá trình chế tạo sản phẩm được thực hiện dưới sự chênh lệch áp lực lên màng đàn hồi diapham trong bình otocla. Nhiệt độ trong bình được làm tăng lên sau khi đưa khuôn có vật liệu vào. Các túi chân không đàn hồi diapham có tác dụng phân bố đồng đều áp suất lên khuôn. Dưới tác dụng của nhiệt độ và áp lực ép của túi chân không vật liệu đóng rắn thành sản phẩm mong muốn.....</u>	<u>147</u>
<u>8.4. Ứng dụng của vật liệu polyme composit.....</u>	<u>147</u>
<u>8.4.1. Ứng dụng trong chế tạo ô tô và các phương tiện giao thông trên mặt đất.....</u>	<u>148</u>
<u>8.4.2. Ứng dụng trong lĩnh vực đóng tàu.....</u>	<u>148</u>
<u>8.4.3. Ứng dụng trong hàng không và vũ trụ.....</u>	<u>148</u>
<u>8.4.4. Các ứng dụng quan trọng khác của vật liệu polyme compozit.....</u>	<u>149</u>

LỜI NÓI ĐẦU

Từ khi loài người biết dùng lửa để sưởi ấm, biết hái lượm săn bắn để đảm bảo sự tồn tại của mình cho đến nay, khoa học kỹ thuật đã có những bước phát triển vượt bậc làm thay đổi căn bản cuộc sống của con người. Ngày nay khoa học kỹ thuật chủ yếu tập trung vào năm lĩnh vực lớn là: công nghệ thông tin, cơ khí-tự động hóa, điện tử viễn thông, công nghệ sinh học và công nghệ vật liệu. Trong đó công nghệ vật liệu đang có những bước phát triển quan trọng tạo ra nhiều loại vật liệu có tính năng ưu việt ứng dụng trong mọi lĩnh vực của đời sống và kỹ thuật.

Vì vật liệu có tầm quan trọng như thế cho nên việc sử dụng vật liệu như thế nào cho thích hợp với yêu cầu và điều kiện làm việc là vấn đề hết sức quan trọng. Mỗi một loại vật liệu lại có những đặc điểm riêng về tính chất và giá thành do đó để có thể lựa chọn vật liệu cho phù hợp không hề đơn giản. Trong lĩnh vực cơ khí và đóng tàu không thể không liên quan đến vật liệu, vì thế một yêu cầu tối thiểu đối với kỹ sư cơ khí và đóng tàu là phải nắm được tính chất của một số loại vật liệu để có thể lựa chọn và sử dụng chúng trong những điều kiện làm việc cụ thể của các kết cấu và chi tiết máy. Muốn thế phải hiểu được những kiến thức hết sức cơ bản về một số loại vật liệu đang được sử dụng phổ biến hiện nay, đó là vật liệu kim loại, vật liệu polyme và vật liệu composit. Đó là những nội dung chủ yếu của bài giảng này.

Hiện nay các nhà khoa học vật liệu liên tục nghiên cứu tìm tòi và đã phát minh ra rất nhiều loại vật liệu mới làm biến đổi sâu sắc các loại vật liệu truyền thống, có những loại vật liệu được biến tính để áp dụng trong những chi tiết, các kết cấu làm việc trong những điều kiện khắc nghiệt. Tuy nhiên do thời gian và tư liệu có hạn chắc chắn bài giảng này chưa cung cấp được những vấn đề mới nhất, tác giả sẽ cố gắng hoàn thiện và liên tục bổ sung những vấn đề mới về khoa học vật liệu trong thời gian sớm nhất

Cuối cùng, tác giả xin chân thành cảm ơn các thầy giáo trong bộ môn cơ học-vật liệu, khoa kỹ thuật tàu thủy, đặc biệt là PGS.TS Quách Đình Liên trường đại học Nha Trang đã có những đóng góp quý báu cho bài giảng này.

PHẦN I

VẬT LIỆU HỌC CƠ SỞ

Chương 1

Cấu trúc tinh thể của vật liệu

1.1. Cấu tạo và liên kết nguyên tử

1.1.1. Khái niệm cơ bản về cấu tạo nguyên tử

Như chúng ta đã biết ở các môn học vật lý và hóa học đại cương, cấu tạo nguyên tử là hệ thống gồm hạt nhân mang điện tích dương, xung quanh hạt nhân là các điện tử mang điện tích âm bao quanh, ở trạng thái bình thường nguyên tử trung hoà về điện.

Nguyên tử là phần tử của [vật chất](#) không phân chia nhỏ hơn được trong các [phản ứng hóa học](#). Mỗi loại nguyên tử có tính chất [vật lý](#) và [hóa học](#) đặc trưng và tạo nên một [nguyên tố hóa học](#). Mỗi nguyên tố có một [nguyên tử số](#) xác định. Các thông số cơ bản của nguyên tử thể hiện ở bảng 1-1.

Bảng 1-1. Các thông số cơ bản của nguyên tử

Khối lượng	$\approx 1.67 \times 10^{-27}$ to 4.52×10^{-25} kg
Điện tích	Bằng không (nếu có số điện tử trên quỹ đạo bằng số proton trong nguyên tử)
Đường kính	50 pm (H) đến 520 pm(Cs)
Số nguyên tử có thể quan sát được trong vũ trụ	$\sim 10^{80}$

Kích thước của nguyên tử phải nói là rất nhỏ, đường kính của phân tử hydro có độ lớn vào khoảng hai lần bán kính Van de Van ([van der Waals radius](#)).

Bán kính van der Waals của nguyên tử là khoảng của điện tử xa nhất đến hạt nhân của nguyên tử (trong trường hợp nguyên tử độc lập) hoặc đến trung tâm của phân tử.

Sở dĩ nó có tên là bán kính van der Waals là để kỷ niệm Johannes Diderik van der Waals khi ông được nhận giải thưởng Nobel vào năm 1910. Kích thước của một số nguyên tử thể hiện ở bảng

Bảng 1-2 Kích thước của một số nguyên tử

Nguyên tố	Bán kính (Å)
Hydro	1,20
Cac bon	1,70
Ni tơ	1,55
Ô xy	1,52
Flo	1,35
Phốt pho	1,90
Lưu huỳnh (sulphur)	1,85
Clo (chlorine)	1,8

Nếu so sánh kích thước của nguyên tử với các sợi tóc của người thì mỗi sợi tóc có khoảng 1 triệu nguyên tử cac bon, còn một giọt nước chứa khoảng 2×10^{21} nguyên tử ôxy và hai lần lớn hơn là số lượng nguyên tử hydro. Còn hạt bụi trung bình chứa 3×10^{12} (3 tỉ) nguyên tử. Số nguyên tử trong 12 gam than củi vào khoảng 6×10^{23} nhiều hơn 1.400.000 thời gian tuổi của vũ trụ được tính bằng giây.

Nguyên tử -phần tử luôn giữ nguyên- là phần tử nhỏ nhất không phân chia được trong các phản ứng hóa học, từ đó nó có tên gọi nguyên tử. Tuy nhiên, trong một số tương tác vật lý, nguyên tử có thể được tách ra thành các thành phần nhỏ bé hơn, gọi là các hạt hạ nguyên tử.

Do nguyên tử là trung hòa về điện, mà điện tử lại có điện tích âm nên cần phải có một điện tích dương tồn tại trong nguyên tử. Hơn nữa, vì khối lượng của điện tử rất nhỏ so với khối lượng của nguyên tử nên cần phải có một thực thể nào đó tạo ra khối lượng lớn của nguyên tử. Các kết quả thực nghiệm cho thấy nguyên tử có thể bị phân chia và đó là cơ sở cho mô hình nguyên tử.

Cấu tạo của hạt nhân nguyên tử gồm có hạt mang điện tích dương gọi là proton và hạt không mang điện gọi là notron. Các điện tử phân bố quanh hạt nhân theo các mức năng lượng từ thấp đến cao.

+ **Electron** là hạt hạ nguyên tử đầu tiên được tìm ra dựa vào tính chất điện của vật chất. Vào cuối thập kỷ đầu tiên của thế kỷ thứ 19, người ta đã nghiên cứu Ống chùm ca-tốt (cathode ray tube). Ống chùm ca-tốt là một ống thuỷ tinh, bên trong có chứa khí có áp suất thấp, một đầu của ống là cực dương, và đầu kia là cực âm. Hai cực đó được nối với một nguồn có điện thế khác nhau, nguồn này tạo ra một dòng hạt có thể đi qua khí bên trong ống. Người ta giả thiết rằng có một chùm hạt phát ra từ cực dương đi về phía cực âm và làm cho ống phát sáng. Chùm đó được gọi là chùm ca-tốt. Khi đặt một vật chướng ngại nhẹ trong ống thì vật đó bị di chuyển từ cực dương về cực âm, người ta kết luận hạt đó có khối lượng. Khi đặt một từ trường vào thì dòng hạt bị dịch chuyển, người ta kết luận hạt đó có điện tích.

Năm 1897, nhà vật lý người Anh Joseph John Thomson (1856-1940) đã kiểm chứng hiện tượng này bằng rất nhiều thí nghiệm khác nhau, ông đã đo được tỷ số giữa khối lượng của hạt và điện tích của nó bằng độ lệch hướng của chùm tia trong các từ trường và điện trường khác nhau. Thomson dùng rất nhiều các kim loại khác nhau làm cực dương và cực âm đồng

thời thay đổi nhiều loại khí trong ống. Ông thấy rằng độ lệch của chùm tia có thể tiên đoán bằng công thức [toán học](#). Thomson tìm thấy tỷ số điện tích/khối lượng là một [hằng số](#) không phụ thuộc vào việc ông dùng vật liệu gì. Ông kết luận rằng tất cả các chùm ca-tốt đều được tạo thành từ một loại hạt mà sau này nhà vật lý người [Ái Nhĩ Lan](#) [George Johnstone Stoney](#) đặt tên là "electron", vào năm [1891](#).

Các nhà khoa học cũng xác định được khối lượng và điện tích của các electron. Theo đó, điện tích của electron là $-1,602 \cdot 10^{-9}$ C và khối lượng của nó là $9,1 \cdot 10^{-31}$ kg. Electron có đường kính khoảng 10^{-7} Å. Mặc dù có kích thước và khối lượng rất nhỏ nhưng electron chuyển động trong một không gian chung quanh hạt nhân lớn gấp hàng tỷ lần thể tích hạt nhân

+ Proton

Năm 1911 Rutherford đã sử dụng radi phóng ra một chùm hạt α mang điện tích dương, có khối lượng gấp khoảng 7500 lần khối lượng của electron, hướng vào một lá vàng mỏng L. Ông dùng màn huỳnh quang theo dõi đường đi của hạt. Kết quả thí nghiệm cho thấy là hầu hết các hạt α đều xuyên thẳng qua lá vàng nhưng có một số rất ít đi lệch hướng ban đầu hoặc bị bật trở lại sau khi gặp lá vàng. Điều này giải thích là ngoài các electron tạo thành lớp vỏ nguyên tử, trong nguyên tử còn hạt nhân mang điện tích dương tập trung hầu hết khối lượng của nguyên tử nhưng có kích thước rất nhỏ so với thể tích nguyên tử.

Năm [1913](#), nhà vật lý người Anh [Henry Gwyn Jeffreys Moseley](#) ([1887-1915](#)) thấy rằng mỗi nguyên tố có một điện tích dương duy nhất tại hạt nhân của nguyên tử. Do đó hạt nhân phải chứa một loại hạt mang điện tích dương được gọi là [proton](#). Số proton trong hạt nhân được gọi là nguyên tử số hay còn gọi là số hiệu nguyên tử

+ Neutron

Người ta thấy rằng nguyên tử lượng của [hydro](#) lớn hơn tổng khối lượng của một proton và một điện tử chính vì vậy phải tồn tại một loại hạt khác trong hạt nhân đóng góp vào khối lượng của nguyên tử. Vì nguyên tử trung hòa về điện nên hạt này phải không mang điện tích. Đó chính là các hạt neutron do vật lý người Pháp [Irene Joliot-Curie](#) ([1897-1956](#)) và nhà vật lý người Anh [James Chadwick](#) ([1891-1974](#)) phát hiện ra. Các phát hiện này giúp con người hiểu biết sâu sắc hơn về cấu trúc của nguyên tử, mở ra nhiều hướng nghiên cứu cho năng lượng nguyên tử sau này. Đồng thời hoàn thiện mô hình cấu trúc của nguyên tử. Điển hình là mô hình nguyên tử của Rutherford lúc đó là: proton và neutron tạo nên hạt nhân nguyên tử, điện tử chuyển động xung quanh và chiếm phần lớn thể tích của nguyên tử đó. Khối lượng của điện tử rất nhỏ so với khối lượng của hạt nhân nguyên tử.

1.1.2. Mô hình nguyên tử

Trong lịch sử của ngành hoá học các nhà khoa học đã đưa ra nhiều mô hình về cấu trúc nguyên tử, điển hình là các mô hình của Dalton, Thompson, Rutherford và mô hình lượng tử về nguyên tử. Đặc biệt khi con người đã phát hiện ra các proton và neutron.

Dựa trên một số giả thuyết do [Lord Kelvin \(1824-1907\)](#) đưa ra và các kết quả của Millikan, năm 1902, Năm 1903 Thomson nhà vật lý học người Anh đã đưa ra mẫu nguyên tử gồm các ion tích điện dương và các điện tử gọi là thuyết ion-điện tử. Mô hình này cho rằng các điện tử mang điện tích âm được trộn lẫn trong vật chất mang điện tích dương, giống như các quả mận nhỏ được trộn lẫn trong bánh, mô hình này còn được gọi là mô hình *bánh mận* (tiếng Anh: *plum pudding*). Nếu một điện tử bị xô dịch thì nó sẽ bị kéo về vị trí ban đầu. Điều này làm cho nguyên tử trung hòa về điện và ở trạng thái ổn định Theo ông, mỗi nguyên tử gồm các ion tích điện dương trong đó có các điện tử xâm nhập vào đủ để đảm bảo tính trung hòa điện. Mẫu ion điện tử không giải thích được hiện tượng bức xạ α qua lá kim loại mỏng mà Rutherford đã thực hiện trong thí nghiệm của ông.

Cùng khoảng thời gian đó, một nhà vật lý [người Nhật bản](#) là [Hantaro Nagoaka](#) đưa ra mô hình [Sao Thổ](#) của ông vào năm 1904. Mô hình này cho rằng vật chất mang điện tích dương của nguyên tử giống như [sao Thổ](#), còn các điện tử mang điện tích âm thì chuyển động giống như các vòng đai của sao Thổ. Mô hình này sẽ không bền vì điện tử sẽ mất năng lượng và rơi vào tâm của nguyên tử.

Mô hình của Thomson được thừa nhận hơn mô hình của Nagoaka nhưng nó cũng chỉ đứng vững được vài năm cho đến khi nhà vật lý [người New Zealand](#) là [Ernest Rutherford \(1871-1937\)](#) đưa ra mô hình nguyên tử của ông. Cùng với đồng nghiệp là [Hans Geiger](#) và [Ernest Marsden](#), Rutherford đã dùng một chùm [hạt alpha](#) bắn phá một lá [vàng](#) mỏng trong [thí nghiệm mang tên ông](#). Hạt alpha là một hạt mang điện dương (+2), có khối lượng khoảng bốn lần khối lượng nguyên tử [hydrogen](#). Kết quả thu được cho thấy hầu hết các hạt alpha đi qua lá vàng mà không bị lệch hướng, một số hạt (1/8000 so với số hạt đi thẳng) bị lệch hướng và một số ít hạt bị bật ngược trở lại. Kết quả này cho phép kết luận như sau: nguyên tử có cấu tạo rỗng, các [electron](#) bao quanh một hạt có kích thước rất nhỏ so với kích thước nguyên tử (ta cứ tưởng tượng nếu hạt nhân nguyên tử lớn cỡ một nắm tay hoặc một mét thì nguyên tử của chúng ta phải to bằng cả cái nhà ba tầng hoặc sẽ rộng tới 10km). Trên lá kim loại các phân tử mang điện tích dương phân bố rất thưa thớt vì thế các hạt alpha đi qua lá kim loại dễ dàng. Một số hạt đi gần với các hạt tích điện dương và các hạt này tích điện lớn nên đẩy hạt alpha đi lệch hướng ban đầu hoặc ngược hướng ban đầu. Do lực Coulomb [tỷ lệ nghịch](#) với [bình phương khoảng cách](#) nên hạt nhân cần có kích thước nhỏ để đạt [lực](#) đẩy lớn tại các khoảng cách nhỏ giữa hạt alpha và hạt nhân Ông gọi đó là [hạt nhân](#). Hạt nhân có các điện tử quay xung quanh giống như các [hành tinh](#) quay xung quanh [Mặt Trời](#), tuy thế tích hạt nhân rất nhỏ so với nguyên tử nhưng phần lớn khối lượng nguyên tử lại tập trung ở đó. Mô hình này còn có cái tên là mẫu [hành tinh nguyên tử](#). Trên cơ sở này Rutherford đã xây dựng nguyên tử kiểu hành tinh mang tên ông có nội dung như sau:

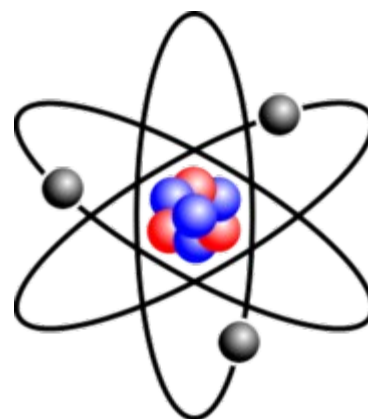
- + Mỗi nguyên tử gồm một hạt nhân tích điện dương có kích thước rất nhỏ so với kích thước nguyên tử, xung quanh hạt nhân có các điện tử chuyển động trên các quỹ đạo khác nhau
- + Nguyên tử trung hòa điện nên số điện tử trong nguyên tử bằng trị số điện tích hạt nhân của nguyên tử đó.

Trong mẫu hành tinh nguyên tử, **hạt nhân** mang **điện tích dương** rất nhỏ bé, tập trung phần lớn **khối lượng** của nguyên tử ở trung tâm; còn các **điện tử** mang **điện tích âm** quay chung quanh hạt nhân trên các quỹ đạo giống như các **hành tinh** quay chung quanh **Mặt Trời**.

Mẫu hành tinh nguyên tử của Rutherford không giải thích được tính bền của nguyên tử. Khi điện tử chuyển động trong trường hạt nhân, theo thuyết điện động học thì hệ sẽ bức xạ năng lượng liên tục, kết quả điện tử sẽ chuyển động trên đường xoắn ốc, cuối cùng rơi vào hạt nhân.

Hiện nay hai mô hình hiện được sử dụng để mô tả cấu trúc cũng như giải thích các mối liên kết trong nguyên tử là mô hình của Bohr và mô hình nguyên tử được xây dựng trên cơ sở của thuyết **cơ học lượng tử**. Dựa trên cơ học lượng tử, người ta thay đổi mô hình nguyên tử của Bohr để xây dựng lên mô hình hiện đại về nguyên tử.

Quỹ đạo xác định trong mô hình Bohr được thay bằng một quỹ đạo xác suất, trên đó điện tử có thể được tìm thấy với một xác suất nhất định. *Quỹ đạo khả dĩ* hay là *trạng thái khả dĩ* của điện tử được đặc trưng bởi bốn số lượng tử. Sự sắp xếp của các điện tử trong nguyên tử tuân theo **nguyên lý Aufbau**, tức là các điện tử sẽ chiếm các trạng thái có năng lượng thấp nhất. Nhưng chúng phải thỏa mãn **nguyên lý loại trừ Pauli** nói rằng không thể có nhiều hơn hai điện tử trong nguyên tử ở các trạng thái năng lượng có bốn số lượng tử giống nhau. Sau đó chúng phải thỏa mãn **quy tắc Hund** phát biểu rằng các điện tử sẽ chiếm quỹ đạo sao cho có số quỹ đạo nhiều nhất đối với một điện tử. Quy tắc Hund được **Friedrich Hund (1896-1997)** đưa ra khi tính đến lực đẩy tĩnh điện giữa các điện tử trên một quỹ đạo.



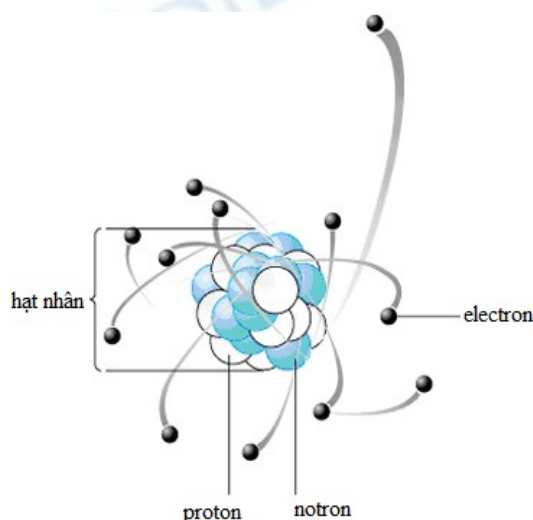
Hình 1.1 mẫu hành tinh nguyên tử của Rutherford đối với Liti

Mô hình nguyên tử được chấp nhận ngày nay như sau:

- Nguyên tử được tạo thành từ một **hạt nhân** mang điện tích dương nằm ở tâm nguyên tử và các **điện tử** mang điện tích âm chuyển động xung quanh.
- Hạt nhân được tạo thành từ các hạt **proton** mang điện tích dương và các hạt **neutron** không mang điện. Mỗi **nguyên tố** chỉ có một số proton duy nhất nhưng có thể có số neutron khác nhau (các nguyên tố này được gọi là các **đồng vị**). Hạt nhân và điện tử chiếm một vùng không gian rất nhỏ bé so với kích thước của nguyên tử (nếu ta coi kích thước của nguyên tử bao gồm không gian của quỹ đạo các đám mây điện tử). Nếu coi hạt nhân là một quả cầu bán kính 1 **m** đặt tại **Hà Nội** thì điện tử to bằng hạt cát ở gần nhất cũng cách đó 100 **km**, tức là ở **Hải Phòng**.
- Các điện tử chuyển động xung quanh hạt nhân trên các **quỹ đạo** có bán kính xác định tuân theo điều kiện lượng tử. Sự sắp xếp của các quỹ đạo trong nguyên tử được gọi là **cấu hình điện tử**. Mỗi quỹ đạo được đặc trưng bởi ba **số lượng tử** là: **số lượng tử chính**, **số lượng tử phương vị** và **số lượng tử từ**. Trên mỗi quỹ đạo có thể có hai điện tử, nhưng hai điện tử này phải có một số lượng tử thứ tư là **spin** khác nhau. Khi điện tử chuyển động trên các quỹ đạo nó không bức xạ hay hấp thụ năng lượng. Những quỹ đạo này gọi là quỹ đạo dừng. Sự hấp thụ hay bức xạ năng lượng chỉ khi điện tử

chuyển dời từ quỹ đạo này sang quỹ đạo khác. Ý nghĩa của các số lượng tử trong mô hình nguyên tử hiện đại như sau:

- + Ý nghĩa của số lượng tử chính đặc trưng cho mức năng lượng orbitan.
 - + Ý nghĩa số lượng tử orbitan đặc trưng cho hình dạng orbitan và mômen động lượng orbitan. Nghĩa là mỗi giá trị l , orbitan có hình dạng xác định và mômen động lượng có giá trị xác định
 - + Ý nghĩa của số lượng tử từ đặc trưng cho sự định hướng của orbitan trong không gian
 - + Ý nghĩa của số lượng tử spin đặc trưng cho sự chuyển động quay xung quanh trục riêng của nó.
- Các quỹ đạo của điện tử không phải là những đường cố định mà là sự phân bố xác suất mà các điện tử có thể có mặt.
 - Các điện tử sẽ chiếm các quỹ đạo có năng lượng thấp nhất (các quỹ đạo gần hạt nhân nhất). Chỉ có các điện tử ở lớp ngoài cùng mới có khả năng tham gia để tạo các liên kết hóa học.



Hình 1.2 Mô hình nguyên tử cấu tạo nguyên tử Na, hạt nhân bao gồm 11 proton và 12 notron, 11 điện tử xung quanh hạt nhân chia làm ba lớp, 2 ở trong, 8 ở giữa và 1 ở ngoài cùng. theo quan điểm hiện đại của cơ học lượng tử

1.1.3. Các dạng liên kết nguyên tử trong chất rắn

Trong vật liệu tồn tại rất nhiều các dạng liên kết khác nhau, chính vì sự khác nhau trong liên kết này mà cơ tính của các loại vật liệu khác nhau sẽ khác nhau. Sau đây chúng ta sẽ xem xét một số dạng liên kết cơ bản trong vật liệu.

a. Liên kết cộng hoá trị

Liên kết cộng hoá trị là loại liên kết được tạo thành khi hai hoặc nhiều nguyên tử góp chung các điện tử hoá trị của mình để số điện tử ở lớp ngoài cùng có đủ 8 điện tử hoá trị (qui tắc bát tử) giống vỏ điện tử của nguyên tố khí trơ bền vững.

Một cặp điện tử dùng chung giữa hai nguyên tử sẽ tạo nên một liên kết cộng hoá trị. Tùy thuộc vào bản chất của các nguyên tố hay nói cụ thể hơn là tùy thuộc vào độ âm điện của các nguyên tố dùng chung điện tử mà ta có các loại liên kết cộng hoá trị sau:

+ Liên kết cộng hoá trị không phân cực hình thành từ các nguyên tố có độ âm điện tương đương nhau. Các cặp điện tử dùng chung phân bố đối xứng giữa hai nguyên tử. Phân tử có liên kết cộng hoá trị kiểu này không bị phân cực.

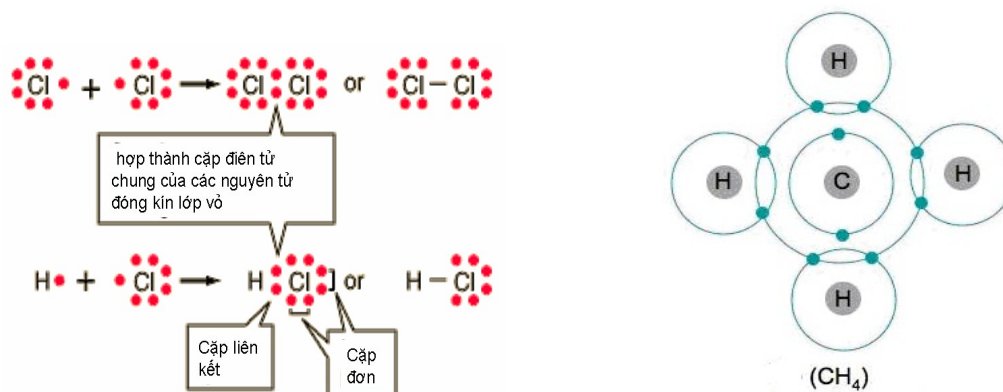
+ Liên kết cộng hoá trị phân cực hình thành từ các nguyên tố có độ âm điện khác nhau (có bản chất hoá học khác nhau) khi đó cặp điện tử dùng chung có xu hướng chuyển dịch không hoàn toàn về phía nguyên tử có độ âm điện lớn hơn.

+ Liên kết cộng hoá trị phối hợp hình thành từ cặp điện tử do một nguyên tố đóng góp

Để có thể hiểu rõ hơn về bản chất của liên kết cộng hoá trị ta xem xét một số ví dụ về liên kết cộng hoá trị như sau: Phân tử Hidro được tạo thành từ hai nguyên tử Hidro, mỗi một nguyên tử góp chung một điện tử để làm cho lớp điện tử của nguyên tử nào cũng đủ hai điện tử giống lớp điện tử ngoài cùng của các nguyên tố khí hiếm.

Phân tử clo được tạo thành từ hai nguyên tử clo, nguyên tử clo có bảy điện tử lớp ngoài cùng, để tạo thành liên kết cộng hoá trị mỗi nguyên tử clo góp chung một điện tử để làm cho lớp điện tử ngoài cùng của mỗi nguyên tử clo có đủ tám điện tử.

Phân tử HCl tạo thành từ hai nguyên tố có độ âm điện khác nhau, nguyên tử Hidro có một điện tử lớp ngoài cùng trong khi đó nguyên tử clo có 7 điện tử lớp ngoài cùng, mỗi một nguyên tử góp chung một điện tử để tạo thành liên kết cộng hoá trị tuy nhiên do Clo có độ âm điện lớn hơn hidro nên cặp điện tử này bị lệch về phía nguyên tử clo, đó chính là liên kết cộng hoá trị phân cực trong phân tử HCl.



Hình 1.3 mô tả việc các nguyên tử dùng chung các điện tử để tạo thành liên kết cộng hoá trị, tạo thành HCl (a) và CH₄ (b)

Nói chung liên kết cộng hoá trị là liên kết mạnh, tuy nhiên cường độ của nó phụ thuộc rất nhiều vào đặc tính liên kết giữa điện tử hóa trị với hạt nhân.

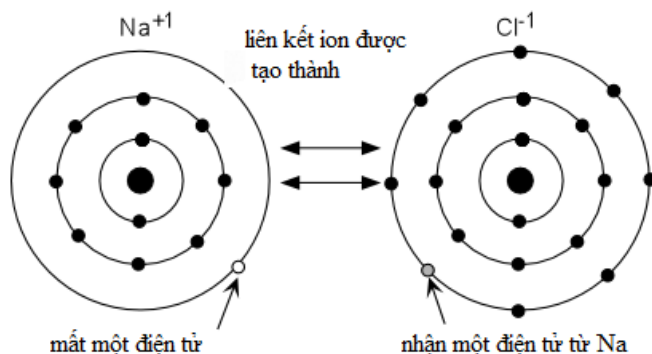
b. Liên kết ion

Liên kết ion là liên kết được tạo thành do lực hút tĩnh điện giữa các ion mang điện trái dấu nhờ sự trao đổi điện tử từ nguyên tử này sang nguyên tử khác.

Bình thường các nguyên tử trung hoà về điện tuy nhiên các phản ứng hoá học các nguyên tử có thể nhận thêm các điện tử để tạo thành ion âm và mất đi các điện tử để tạo

thành ion dương. Các ion mang điện trái dấu này sau đó sẽ hút nhau bằng lực hút tĩnh điện. Hình vẽ sau đây mô tả sự cho nhận điện tử giữa Na và Cl để tạo thành phân tử muối ăn NaCl bằng liên kết ion.

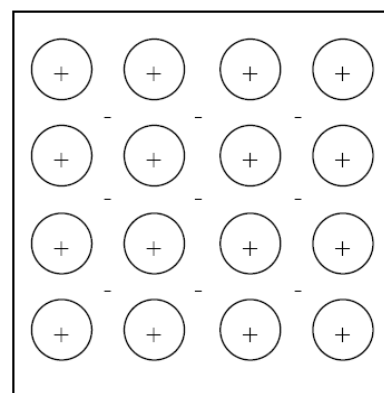
Bản chất của liên kết ion là lực tĩnh điện gây nên bởi trường tĩnh điện đối xứng trong không gian (đối xứng cầu) không bão hoà của ion trung tâm. Vì vậy, liên kết ion không có tính chất bão hoà và tính chất định hướng.



Hình 1.4 Nguyên tử Na nhường 1e để trở thành Na^+ , nguyên tử Cl nhận 1e trở thành Cl^- . Lực hút tĩnh điện tạo thành liên kết giữa hai ion Na^+ và Cl^-

c. Liên kết kim loại

Các điện tử hoá trị trong kim loại có tính linh động rất lớn, khi kim loại ở trạng thái tinh thể các điện tử này bị tách ra khỏi nguyên tử. Nguyên tử bị tách ra sẽ trở thành ion dương nằm lại các nút mạng lưới tinh thể, còn các điện tử sau khi bị tách sẽ di động tạo thành đám khí điện tử di động trong toàn bộ mạng lưới. Đám khí này bao bọc các ion dương kim loại tạo thành liên kết giữa chúng. Liên kết hoá học như vậy gọi là liên kết kim loại. Một đặc điểm cơ bản của liên kết kim loại là liên kết kim loại không có tính định hướng, tính chất bão hoà hoá trị.



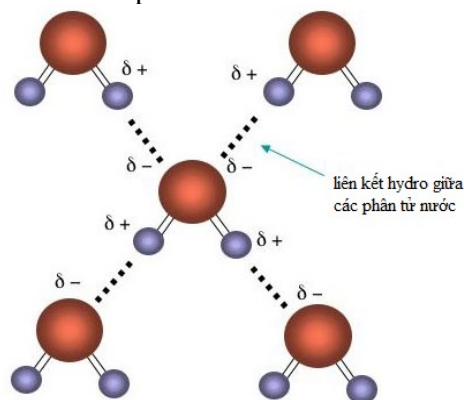
Hình 1.5. Liên kết kim loại với đám mây điện tử không định cư

Do liên kết đặc biệt như vậy nên tạo cho kim loại các tính chất điển hình đặc trưng của kim loại như tính dẫn điện dẫn nhiệt tốt, ánh kim hay tính dẻo của kim loại

- Ánh kim hay vẻ sáng: Bề mặt kim loại sáng khi bị ánh sáng chiếu vào, điện tử tự do nhận năng lượng và bị kích thích, có mức năng lượng cao hơn song không ổn định, khi trở về mức cũ sẽ phát ra sóng ánh sáng.
- Dẫn nhiệt và dẫn điện tốt: Nhờ có điện tử tự do rất dễ chuyển động định hướng dưới một hiệu điện thế làm kim loại có tính dẫn điện cao. Tính dẫn nhiệt của kim loại được giải thích bằng sự truyền động năng của các điện tử tự do và ion dương.
- Tính dẻo cao: Đây là tính chất rất quan trọng, nhờ có nó mà kim loại có thể cán dẹt mỏng hay kéo rất thuận lợi cho vận chuyển gia công và sử dụng. Nguyên nhân chính làm kim loại có tính dẻo đó là các ion dương kim loại rất dễ dịch chuyển giữa các lớp đệm là mây điện tử dưới tác dụng cơ học hơn nữa khi kim loại biến hình liên kết kim loại vẫn được bảo tồn do vị trí tương quan giữa các ion dương và điện tử tự do không thay đổi.

c. Liên kết thứ cấp

+Liên kết hydro: Trong các phân tử có các liên kết O-H, N-H, F-H, tuy H đã bão hoà hoá trị nhưng vẫn có khả năng hình thành liên kết với một số nguyên tử có độ âm điện mạnh của các phân tử khác gọi là liên kết hydro. Liên kết hydro có bản chất tương tác tĩnh điện mang một phần tính chất của liên kết cho nhận (không cho nhận hoàn toàn electron mà chỉ dịch chuyển một phần điện tích đám mây của electron). Liên kết hydro thường gặp trong các chất lỏng, tinh thể, các chất cao phân tử.



Hình 1.6. Sự tạo thành liên kết hydro giữa các phân tử nước do sự khác nhau về độ âm điện của nguyên tố oxi và hidro

+ Liên kết Van der Waals: Liên kết ion, liên kết cộng hoá trị chỉ được dùng để giải thích cấu tạo bên trong một phân tử. Lực tương tác giữa các nguyên tử trong các liên kết đó là lực hoá trị mang tính chất bão hoà và có hiệu ứng năng lượng lớn (liên kết bền).

Nhiều trường hợp lực hoá trị không giải thích được tại sao có sự tương tác giữa các phân tử hoàn toàn trung hoà về điện. Các quá trình dẫn nổ, ngưng tụ, hấp phụ, hoà tan hình thành các tinh thể phân tử xảy ra được là nhờ có lực tương tác giữa các phân tử và được gọi là lực Van der Waals

Lực Van der Waals có ba nguồn gốc sau đây:

+ **Lực định hướng:** Lực định hướng sinh ra giữa các phân tử có moment lưỡng cực vĩnh cửu μ . Lực này làm cho các phân tử định hướng tương hỗ với nhau. Năng lượng tương tác định hướng được xác định theo công thức:

$$\frac{m}{r^{12}} U_{dh} = -\frac{2m^4}{3r^6kT}$$

Trong đó:

T là nhiệt độ tuyệt đối

r là khoảng cách giữa các phân tử, k là hằng số Boltzmann

+ **Lực cảm ứng:** Giả sử phân tử A phân cực có moment lưỡng cực không đổi là μ , phân tử A không phân cực có độ phân cực là α . Khi chúng gần nhau, do tác động cảm ứng của phân tử A mà phân tử B bị phân cực với sự xuất hiện moment lưỡng cực cảm ứng (phân cực hoá cảm ứng)

Năng lượng tương tác cảm ứng được xác định theo công thức:

$$U_c = -\frac{2\alpha m^2}{r^6}$$

+ **Lực khuếch tán:** Lực này xuất hiện trong trường hợp hai phân tử đều không phân cực ($\mu=0$). Do các electron có thể chuyển động lệch khỏi vị trí cân bằng làm cho sự phân bố điện tích trong các phân tử mất tính chất đối xứng và do đó là xuất hiện các trọng tâm điện tích

dương và âm, nghĩa là làm xuất hiện các moment lưỡng cực tức thời. Giữa chúng có tương tác với nhau với năng lượng:

$$U_{kt} = -\frac{3I\alpha^2}{4r^6}$$

I là thế ion hoá của phân tử hay nguyên tử.

Qua sự phân tích trên ta thấy cả ba lực định hướng, cảm ứng và khuếch tán đều có cùng một bản chất là tương tác tĩnh điện hợp thành lực Van der Waals với năng lượng hút:

$$U_h = U_{dh} + U_c + U_{kt} = -\frac{2\mu^4}{3r^6kT} - \frac{2\alpha m^2}{r^6} - \frac{3I\alpha^2}{4r^6}$$

Đặt $n = -\frac{2\mu^4}{3r^6kT} - \frac{2\alpha m^2}{r^6} - \frac{3I\alpha^2}{4r^6}$ ta có $U_h = -\frac{n}{r^6}$

Khi ở khoảng cách nhỏ, giữa các phân tử còn có lực đẩy của các vỏ electron và cách hạt nhân với thế năng đẩy xác định theo công thức:

$$U_d = \frac{m}{r^{12}}$$

Vậy tương tác đẩy toàn phần giữa các phân tử sẽ là :

$$U = U_d + U_h = \frac{m}{r^{12}} - \frac{n}{r^6}$$

1.2. Sự sắp xếp nguyên tử trong vật chất

1.2.1. Chất khí

Trong chất khí sự sắp xếp nguyên tử một cách hỗn loạn, thực chất là hoàn toàn không có trật tự. Khoảng cách giữa các nguyên tử không cố định mà hoàn toàn phụ thuộc vào thể tích của bình chứa, tức là có thể chịu nén.

Trong chất khí năng lượng chuyển động của các phân tử lớn hơn nhiều so với năng lượng tác động tương hỗ giữa các phân tử. Ở trạng thái khí khi lực hút tương hỗ không có khả năng chống lại chuyển động nhiệt, các phân tử khí chuyển động hỗn loạn (chuyển động tịnh tiến, chuyển động quay và chuyển động dao động). Ở điều kiện bình thường khoảng cách trung bình giữa các nguyên tử khá lớn so với kích thước chính phân tử. Do đó mật độ phân tử bé nên chất khí không có hình thù riêng và dễ dàng biến đổi thể tích khi thay đổi nhiệt độ.

1.2.2. Chất rắn tinh thể

Ngược lại với chất khí, trong chất rắn tinh thể mỗi nguyên tử có vị trí hoàn toàn xác định không những với các nguyên tử bên cạnh hay ở gần-trật tự gần mà còn có cả với nguyên tử khác bất kỳ xa hơn-trật tự xa. Như vậy chất rắn tinh thể có cả trật tự gần lẫn trật tự xa (trong khi đó chất khí hoàn toàn không có trật tự, tức là không có cả trật tự gần lẫn trật tự xa)

Do có sắp xếp trật tự nên chất rắn tinh thể có cấu trúc tinh thể được xác định bằng kiểu mạng tinh thể xác định, tức các nguyên tử của nó được xếp thành hàng, lối với qui luật nhất định. Nối tâm các nguyên tử sắp xếp theo qui luật bằng các đường thẳng tưởng tượng sẽ cho ta hình ảnh của mạng tinh thể, trong đó nơi giao nhau của các đường thẳng được gọi

là nút mạng. Ví dụ, trên hình sau đây trình bày một phần của mạng tinh thể với kiểu sắp xếp trong đó các nguyên tử nằm ở các đỉnh của hình lập phương. Nút mạng được quan niệm như một điểm của mạng, tương ứng với nó chỉ có một nguyên tử như ở mạng tinh thể kim loại. Trong mạng tinh thể hợp chất hoá học với các liên kết ion hay đồng hoá trị, ứng với một nút của mạng tinh thể có thể là phân tử, lúc đó gọi là ion nút phức.

1.2.3. Chất lỏng, chất rắn vô định hình và vi tinh thể

a. Chất lỏng

Chất lỏng có cấu trúc giống chất rắn tinh thể ở chỗ nguyên tử có xu hướng tiếp xúc nhau trong những nhóm nhỏ của một không gian hình cầu khoảng 0,25nm, do vậy không có tính chịu nén (thể tích co lại) như chất khí.

Còn sự khác nhau với chất rắn tinh thể là ở những điểm sau:

+ Vị trí nguyên tử không xác định tức là trong không gian nhỏ các nguyên tử tuy có sắp xếp trật tự nhưng không ổn định, luôn luôn bị phá vỡ do dao động nhiệt rồi lại hình thành với nguyên tử khác và ở nơi khác... Cấu trúc như vậy là có trật tự gần (nhưng luôn ở trạng thái động). Đối với kim loại lỏng, cấu trúc trật tự gần với những nhóm nhỏ nguyên tử xít nhau một cách có trật tự như vậy có ý nghĩa rất quan trọng khi kết tinh, khi bị làm nguội chúng cố định lại (không bị tan đi), lớn dần lên và tạo nên trật tự xa bằng cách lặp lại vị trí theo qui định, tức là cấu trúc tinh thể. Do chỉ có trật tự gần, không có trật tự xa nên chất lỏng có tính đẳng hướng.

b. Chất rắn vô định hình

Ở một số chất, trạng thái lỏng có độ sệt cao, các nguyên tử không đủ linh hoạt để sắp xếp lại theo chuyển pha lỏng-rắn; chất rắn tạo thành không có cấu trúc tinh thể và được gọi là chất rắn vô định hình. Về mặt cấu trúc có thể coi vật thể vô định hình là các chất lỏng rắn lại. Thủy tinh là chất rắn vô định hình rất điển hình nên đôi khi còn dùng từ này để chỉ trạng thái vô định hình của các vật liệu thường có cấu trúc tinh thể.

Như vậy về mặt cấu trúc, các chất rắn thường được chia thành hai nhóm tinh thể và không tinh thể (vô định hình). Phần lớn các chất rắn có cấu tạo tinh thể trong đó bao gồm toàn bộ kim loại, hợp kim và phần lớn các chất vô cơ, rất nhiều polyme. Sự phân chia này cũng chỉ là qui ước không hoàn toàn tuyệt đối vì nó chỉ phù hợp với điều kiện sản xuất (chủ yếu là làm nguội) thông thường và không có nghĩa bất biến, không thể đổi chỗ cho nhau.

Trong điều kiện làm nguội bình thường thủy tinh lỏng, các phân tử SiO_2 không đủ thời gian sắp xếp lại, nó chỉ giảm ba động nhiệt tạo nên thủy tinh vô định hình. Còn khi làm nguội vô cùng chậm các phân tử SiO_2 có đủ thời gian sắp xếp lại theo trật tự xa sẽ được thủy tinh có cấu trúc tinh thể.

c. Chất rắn vi tinh thể

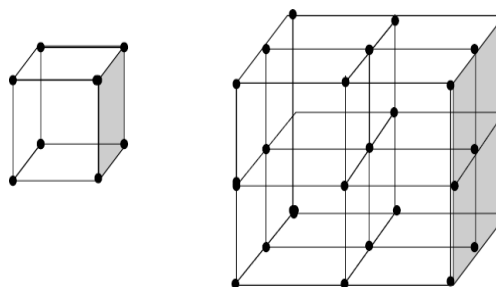
Cũng với vật liệu tinh thể kể trên khi làm nguội từ trạng thái lỏng rất nhanh (trên dưới 1000°C/s) sẽ được cấu trúc tinh thể nhưng với kích thước hạt rất nhỏ, đó là vật liệu có tên gọi vi tinh thể

1.3. Khái niệm mạng tinh thể

1.3.1. Khái niệm và tính chất của mạng tinh thể.

Tinh thể là vật rắn, nếu kết tinh tốt có dạng nhiều mặt, cân đối hình học. Bên trong các hạt vật chất nhỏ bé phân bố một cách có trật tự và tuần hoàn trong mạng không gian. Để có khái niệm về mạng không gian ta hình dung một hệ thống gồm vô hạn những hộp giống hệt nhau, sắp xếp cùng chiều và khít với nhau sao cho mỗi đỉnh trở thành đỉnh chung của 8 hộp, mỗi cạnh là cạnh chung của 4 hộp.

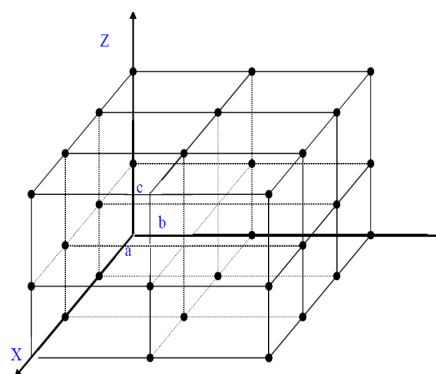
Hình 1.7. Ô mạng cơ sở của tinh thể



Hộp con này có tên là ô mạng cơ sở, ô mạng cơ sở là đơn vị tuần hoàn bé nhất của mạng, thể hiện đầy đủ tính đối xứng của mạng. Tất cả các đỉnh đều là các nút mạng, tập hợp các nút mạng này tạo thành mạng không gian. Các nút trên một đường thẳng làm thành một hàng mạng (2 nút bất kỳ của mạng xác định một hàng mạng). Khoảng cách giữa hai nút mạng cạnh nhau trên một hàng mạng có một giá trị cố định và được gọi là thông số của hàng mạng đó. Các hàng mạng song song nhau sẽ có cùng thông số hàng. Ba nút không cùng trên một hàng mạng sẽ xác định một mặt mạng. Tất cả mặt mạng song song nhau sẽ có cùng mật độ nút và hợp thành một họ mặt mạng. Khoảng cách giữa hai mặt mạng cạnh nhau là một hằng số đối với cả họ mặt gọi là thông số của họ mặt hay gọi tắt là thông số mặt mạng. Cấu trúc của một tinh thể bao giờ cũng thể hiện như một mạng không gian hay một số mạng không gian có cùng kích thước lồng vào nhau

Khoảng cách giữa các hạt cạnh nhau trong đa số các tinh thể rất nhỏ chỉ một vài Å, nghĩa là trên 1cm chiều dài của không gian tinh thể có 10^8 hạt tương ứng với 10^8 nút. Do vậy trong thực tế người ta thường coi mạng như một hệ thống gồm vô hạn các nút.

Để hiểu rõ hơn về mạng không gian ta có thể tịnh tiến 3 vectơ a , b , c không đồng phẳng xuất phát từ nút gốc của mạng một cách tuần hoàn theo 3 chiều không gian ta sẽ nhận được một hệ thống nút, chính là đỉnh của một hệ thống vô hạn mà ta gọi là những ô mạng cơ sở trên với 3 cạnh a , b , c .



Hình. 1.8 các nút mạng được suy ra từ nút mạng gốc bằng phép tịnh tiến

Tất cả các nút mạng đều suy ra được từ nút mạng gốc bằng phép tịnh tiến.

$$T = n_1 a + n_2 b + n_3 c$$

Trong đó n_1, n_2, n_3 là những số nguyên nào đó, nói cách khác hai nút bất kỳ của mạng có thể di chuyển tới chỗ của nhau bằng một phép tịnh tiến T . Khi chúng tới chỗ của nhau các nút còn lại của mạng cũng thế chỗ cho nhau. Vì mọi nút mạng đều hoàn toàn tương đương nhau do đó sau khi cho mạng tịnh tiến như vậy ta không thể phân biệt được vị trí cuối cùng và vị trí đầu tiên của mạng.

Trong mạng tinh thể chính sự sắp xếp của vật chất theo qui luật mạng không gian đã tạo nên những tính chất đặc trưng cho tinh thể đó là tính đồng nhất và tính dị hướng.

+ Tính đồng nhất: Tinh thể có tính đồng nhất nghĩa là trên toàn bộ thể tích của mạng không gian tại những điểm khác nhau có tính chất tương tự nhau, nói rõ hơn nếu nghiên cứu tinh thể theo những phương song song với nhau tại những điểm khác nhau ta thấy chúng có cùng tính chất.

+ Tính dị hướng: Xét theo các phương khác nhau, tinh thể có tính chất khác nhau. Tính dị hướng là hậu quả tất nhiên của việc phân bố các hạt theo qui luật mạng không gian

1.3.2. Các yếu tố đối xứng định hướng hay các yếu tố đối xứng trong hình hữu hạn

+ Tâm đối xứng C : Là một điểm trong hình có tính chất là bất kỳ đường thẳng nào qua nó đều cắt hình tại hai điểm cách đều hai bên nó. Cách nhận biết tâm đối xứng: Một đa diện có tâm C khi mỗi mặt bất kỳ của đa diện có một mặt tương ứng xuyên tâm đối, song song bằng nhau và trái chiều đối với nhau.

+ Mặt đối xứng P : Mặt đối xứng là một mặt phẳng chia hình ra làm hai phần bằng nhau, phần này đối với phần kia là ảnh của nhau

+ Trục đối xứng L_n : Đó là những đường thẳng đi qua tâm điểm của hình mà khi xoay hình quanh nó đủ một vòng 360° bao giờ hình cũng chiếm những vị trí tương tự như vị trí đầu tiên một số nguyên lần, lúc đó n được gọi là bậc trục, góc xoay nhỏ nhất để hình trở lại vị trí tương tự như vị trí đầu tiên gọi là góc xoay cơ sở của trục. Nếu gọi góc xoay cơ sở là α thì bao giờ ta cũng có $\alpha = 360^\circ/n$. Nghĩa là một vòng xoay 360° bao giờ cũng chứa một số nguyên lần góc α .

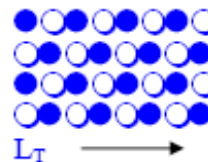
1.3.3. Các yếu tố đối xứng vị trí hay các yếu tố đối xứng trong hình vô hạn

Để nghiên cứu cấu trúc bên trong của tinh thể được thuận lợi, mạng tinh thể được coi là những hình vô hạn, trong hình này đối với mỗi yếu tố đối xứng trên có vô số yếu tố đối xứng cùng loại song song nhau.

Ví dụ trong mạng tinh thể NaCl.

Ta có vô số các trục L_4 và P nữa song song với nhau khi đi qua các ion Na^+ và Cl^- . Tuy nhiên ở hình vô hạn có những yếu tố đối xứng mà ở trong hình vô hạn không thể có được. Đó là trục tịnh tiến, mặt ảnh trượt, trục xoắn ốc.

+ Trục tịnh tiến L_t : Là 1 phương trong hình mà khi ta tịnh tiến hình một đoạn thẳng nhất định song song với phương đó thì hình sẽ trở về vị trí tương tự vị trí cũ trong không gian và đoạn thẳng đó được gọi là bước tịnh tiến hay chu kỳ tịnh tiến.

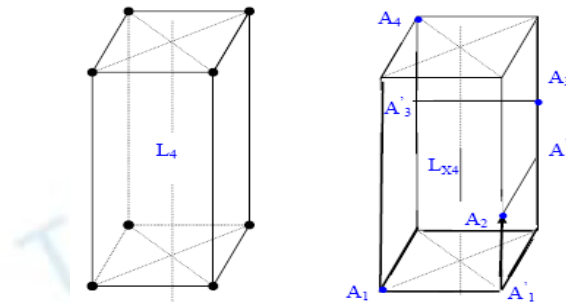


Ví dụ trong mạng tinh thể NaCl khi tịnh tiến toàn bộ mạng tinh thể NaCl từ trái sang phải theo phương L_t một đoạn T bằng khoảng cách giữa hai ion Na^+ hoặc Cl^- liền nhau thì mạng sẽ trùng với vị trí cũ.

+ Mặt ảnh trượt P_t : Là một tập hợp gồm một mặt đối xứng và phép tịnh tiến song song với mặt đối xứng đó, chúng tác động không riêng lẻ mà đồng thời. Ở đây việc chuyển dịch bằng một nửa đoạn tịnh tiến cơ sở.

+ Trục xoắn ốc: L_{xn} : Là tập hợp gồm một trục đối xứng và một phép tịnh tiến song song với trục đối xứng đó, chúng tác dụng không riêng lẻ mà đồng thời.

Ví dụ cho một hình gồm các hệ thống điểm A_1, A_2, A_3, A_4, A_5 như hình vẽ

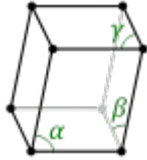


Hình 1.9 trục xoắn ốc bậc 4 L_{x4}

Ta có thể thấy hình trên có trục xoắn ốc bậc 4 L_{x4} vì khi làm theo định nghĩa, quay hình quanh trục L_{x4} một góc 90° thì A_1, A_2, A_3, A_4, A_5 sẽ lần lượt ở các vị trí $A'_1, A'_2, A'_3, A'_4, A'_5$. Sau đó tịnh tiến tiếp bước T thì A'_1 đến A_2, A'_2 đến A_3 ... Như vậy các điểm A_1, A_2, A_3 qua L_{x4} sẽ chuyển động theo một đường xoắn ốc.

1.3.4. Các ô mạng cơ sở và 14 kiểu mạng tinh thể

Tất cả có 7 ô mạng cơ sở tương ứng với 7 mạng tinh thể như sau:

<p>+ Hệ 3 nghiêng: mức đối xứng hạng thấp, ô mạng cơ sở hình bình hành lệch $a \neq b \neq c; \alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$,</p>	<p>$\alpha, \beta, \gamma \neq 90^\circ$</p> 
<p>+ Hệ một nghiêng: mức đối xứng hạng thấp Ô mạng cơ sở là lăng trụ đáy hình bình hành hay hình hộp lệch $a \neq b \neq c, \alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta$,</p>	<p>$\alpha \neq 90^\circ$ $\beta, \gamma = 90^\circ$</p> 