

MỞ ĐẦU

Trong lịch sử phát triển của xã hội loài người chúng ta đã sử dụng rất nhiều loại vật liệu khác nhau, với tính năng sử dụng của chúng càng ngày càng cao hơn. Đầu tiên là thời kỳ đồ đá, sau đó tiến đến thời đại đồ đồng, đồ sắt.v.v. Cho đến ngày nay là một loạt các loại vật liệu mới như : composit, ceramit, pôlyme. v.v. Các loại vật liệu này (đặc biệt là kim loại & hợp kim, cùng với các loại vật liệu mới) đã góp phần thúc đẩy sự phát triển của xã hội loài người một cách nhanh chóng.

Ngày nay trong các lĩnh vực công nghiệp, quốc phòng, đời sống...đòi hỏi vật liệu sử dụng cần phải có rất nhiều tính chất khác nhau. Ví dụ : khi thì cần có tính dẫn điện rất cao để dùng trong ngành điện lực, lúc lại yêu cầu có độ cứng lớn để làm các loại dụng cụ cắt gọt kim loại, khi lại cần có độ bền lớn để làm các cấu kiện xây dựng, hoặc phải có tính dẻo cao để cán, dập, kéo nguội, hay cần độ bền cao nhưng khối lượng riêng nhỏ để dùng trong công nghiệp hàng không...Tất cả các yêu cầu này đều có thể được đáp ứng bởi vật liệu kim loại cũng như các loại vật liệu mới.

Môn vật liệu học sẽ trang bị cho sinh viên những kiến thức cơ bản của các loại vật liệu chính : tinh thể, các hợp kim, bán dẫn và ion, cộng hóa trị ... cũng như kiến thức về xử lý nhiệt của chúng. Mục đích của môn học này giúp cho sinh viên hiểu rõ các loại vật liệu khác nhau dựa trên mối quan hệ giữa cấu trúc (liên kết hóa học, kiểu mạng tinh thể) và cơ lý tính, thực hành được các thí nghiệm cơ bản để xác định cơ tính của vật liệu và biết lựa chọn vật liệu phù hợp nhất đáp ứng nhu cầu sử dụng sau này. Khi nghiên cứu một vật liệu bất kỳ chúng ta đều dựa vào bốn cực cơ bản sau đây : Kết cấu của cấu trúc, các tính chất, sự tổng hợp các phương pháp gia công và hiệu quả sử dụng của nó. Một sản phẩm có thể gồm hàng chục loại vật liệu khác nhau tạo nên. Ví dụ ô tô RENAULT CLIO 1,2 RN của Pháp gồm mười một loại vật liệu sau đây tạo nên :

1- Thép tấm	40,9%	2-Thép hình	10,9%
2-Gang	11,3%	4-Hợp kim nhôm	4,2%
5-Các kim loại màu khác	3,9%		
6-Chất dẻo	10,2%	7-Chất dẻo đàn hồi	3,4%
8-Vật liệu hữu cơ khác	3,4%		
9-Thủy tinh	4,2%	10-Sơn	1,7%
11-Chất lỏng	5,9%		

Yêu cầu của người kỹ sư các ngành cơ điện tử ngoài khả năng hiểu biết về chuyên môn sâu của ngành học, còn phải nắm được những tính chất cơ bản của các loại vật liệu để từ đó có thể sử dụng một cách hợp lý nhất nhằm nâng cao tuổi thọ của máy móc, công trình, hạ giá thành sản phẩm ...

Môn học này kế thừa kiến thức của khá nhiều các lĩnh vực khác nhau : tinh thể học, cơ lượng tử, lý thuyết lệch, vật lý tia rơn ghen, ăn mòn và bảo vệ kim loại ...do đó khối lượng kiến thức khá lớn và có nhiều mặt. Vì vậy đòi hỏi người học phải nắm vững các kiến thức cơ bản về vật liệu và thực hành nghiêm túc các thí nghiệm. Khi nghiên cứu môn học này phải nắm chắc mối quan hệ giữa thành phần hóa học, cấu trúc và tính chất của vật liệu. Bất kỳ sự thay đổi nào của thành phần hóa học và cấu trúc sẽ dẫn tới sự biến đổi của tính chất vật liệu.

1.1.2. Các loại liên kết nguyên tử thường gặp :

Trong chất rắn thường gặp bốn loại liên kết sau đây : liên kết đồng hóa trị, liên kết ion, liên kết kim loại, liên kết hỗn hợp và liên kết Vanderval.

1-Liên kết đồng hóa trị :

Liên kết này tạo ra khi hai hoặc nhiều nguyên tử góp chung nhau một số điện tử để có đủ tám điện tử ở lớp ngoài cùng (điện tử hóa trị). Ví dụ liên kết đồng hóa trị giữa hai nguyên tử clo trong phân tử Cl_2 . Hai nguyên tử này có số điện tử lớp ngoài cùng là 7. Do vậy chúng phải góp chung hai điện tử lớp ngoài cùng để đủ tám điện tử.

Đặc điểm của liên kết đồng hóa trị :

1-Liên kết có tính định hướng, nghĩa là xác suất tồn tại các điện tử liên kết lớn nhất theo phương nối tâm các nguyên tử.

2-Cường độ liên kết phụ thuộc rất mạnh vào đặc tính liên kết giữa các điện tử hóa trị với hạt nhân. Ví dụ các bon ở dạng đa hình kim cương có liên kết đồng hóa trị rất mạnh vì bốn điện tử hóa trị (trong số sáu điện tử) liên kết hầu như trực tiếp với hạt nhân. Do vậy nhiệt độ nóng chảy của nó cao hơn $3550^\circ C$. Trong khi đó thiếc (Sn) có liên kết đồng hóa trị rất yếu vì bốn điện tử hóa trị (trong số 50 điện tử) nằm xa hạt nhân nên lực liên kết yếu đối với hạt nhân do đó nhiệt độ nóng chảy thấp $270^\circ C$.

3-Liên kết đồng hóa trị có thể xảy ra giữa các nguyên tử cùng loại (của một nguyên tố hóa học trong các nhóm từ IVA đến VIIA), gọi là *liên kết đồng hóa trị đồng cực*. Ví dụ trong phân tử Cl_2 hay các tinh thể kim cương, si líc, gécmani ...Liên kết đồng hóa trị giữa các nguyên tử khác loại (các nguyên tố hóa học nhóm IIIA với nhóm VIA) gọi là *liên kết đồng hóa trị dị cực*.

2-Liên kết ion :

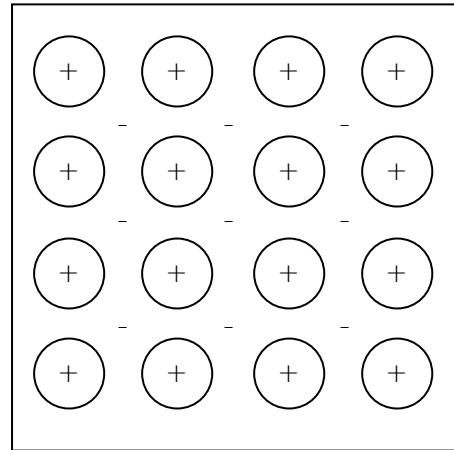
Đây là loại liên kết mạnh, các nguyên tử cho bớt điện tử lớp ngoài cùng và trở thành ion dương hay nhận thêm điện tử để bão hòa lớp ngoài cùng và trở thành ion âm. Ví dụ : trong liên kết LiF, Li cho bớt một điện tử lớp ngoài cùng trở thành Li^+ , còn F nhận thêm một điện tử và trở thành F^- .

Liên kết ion thường tạo nên giữa các nguyên tố có nhiều điện tử hóa trị (nhóm VIB, VIIB) với các nhóm nguyên tố có ít điện tử hóa trị (nhóm IB, IIB). Các ô xyt kim loại Al_2O_3 , MgO , CaO , Fe_3O_4 có liên kết chủ yếu là liên kết ion.

Liên kết ion càng bền vững (càng mạnh) khi các nguyên tử chứa càng ít điện tử, nghĩa là các điện tử cho và nhận nằm gần hạt nhân. Liên kết ion là loại liên kết không định hướng. Ví dụ : hydro tạo với F, Cl, Br, I các hợp chất HF, HCl, HBr, HI có năng lượng liên kết lần lượt là 5,81; 4,44; 3,75 và 3,06 eV/mol.

3-Liên kết kim loại :

Các ion dương kim loại tạo thành mạng xác định, đặt trong không gian điện tử tự do chung. Năng lượng liên kết là tổng hợp lực đẩy và hút tĩnh điện giữa các ion dương và mây điện tử tự do. Liên kết kim loại thường được tạo nên từ những nguyên tử có ít điện tử hóa trị. Ví dụ : các nguyên tử ở nhóm IA trong bảng tuần hoàn Mendêlêep với một điện tử hóa trị có tính kim loại điển hình. Càng đi về bên phải của bảng tuần hoàn tính chất đồng hóa trị trong liên kết càng cao. Các chất rắn có liên kết kim loại trong cấu trúc tinh thể của nó có tính đối xứng cao.



Hình 1.1- Liên kết kim loại.

4-Liên kết hỗn hợp :

Liên kết đồng hóa trị thuần túy chỉ có được trong trường hợp liên kết đồng cực (giữa các nguyên tử của cùng một nguyên tố hóa học). Trong trường hợp liên kết dị cực (giữa các nguyên tử của các nguyên tố khác nhau) điện tử hóa trị tham gia liên kết chịu hai ảnh hưởng trái ngược :

- Bị hút bởi hạt nhân của nó
- Bị hút bởi hạt nhân của nguyên tử thứ hai để tạo điện tử chung.

Khả năng của hạt nhân hút điện tử hóa trị được gọi là tính âm điện của nguyên tử. Sự khác nhau về tính âm điện giữa các nguyên tử trong liên kết đồng hóa trị làm đám mây điện tử "chung" bị biến dạng và tạo thành ngẫu cực điện, đó là tiền tố của liên kết ion. Tính ion của liên kết sẽ càng lớn nếu sự khác nhau về tính âm điện của các nguyên tử càng lớn. Ví dụ : Na có tính âm điện bằng 0,9 còn Cl có tính âm điện bằng 3,0. Do vậy trong liên kết NaCl gồm khoảng 58% liên kết ion và 48% liên kết đồng hóa trị. Tất cả những liên kết dị cực đều mang tính chất hỗn hợp giữa liên kết ion và đồng hóa trị

5-Liên kết yếu (liên kết Val der Val) :

Liên kết đồng hóa trị cho phép giải thích sự tạo thành các phân tử như nước (H_2O) hay polyetylen (C_2H_4)_n nhưng không thể giải thích sự tạo thành một số vật rắn từ những phân tử trung hòa như nước đá, polyme...

Trong nhiều phân tử có liên kết đồng hóa trị, do sự khác nhau về tính âm điện của các nguyên tử, trọng tâm điện tích dương và điện tích âm không trùng nhau sẽ tạo thành ngẫu cực điện và phân tử bị phân cực. Liên kết Val der Val là liên kết do hiện tượng hút nhau giữa các nguyên tử hoặc phân tử bị phân cực ở trạng thái rắn . Đây là loại liên kết yếu, rất dễ bị phá hủy do ba động nhiệt. Do vậy các chất rắn trên cơ sở liên kết Val der Val có nhiệt độ nóng chảy thấp.

1.2.CẤU TẠO MẠNG TINH THỂ LÝ TƯỞNG :

1.2.1.Các khái niệm cơ bản :

1-Mặt tinh thể : trong kim loại các nguyên tử sắp xếp có trật tự , tức là chúng đều nằm trên những mặt phẳng song song và cách đều nhau gọi là mặt tinh thể . Tập hợp vô số các mặt như vậy tạo nên mạng tinh thể .

2-Khối cơ sở (còn gọi là ô cơ bản) :là phần nhỏ nhất đặc trưng cho một loại mạng tinh thể .Có thể xem như mạng tinh thể là do vô số các khối cơ sở xếp liên tiếp nhau tạo nên.


3-Thông số mạng (còn gọi là hằng số mạng) : là khoảng cách giữa hai nguyên tử trên một cạnh của khối cơ sở .Thông số mạng là kích thước cơ bản của mạng tinh thể, từ đó có thể suy ra các khoảng cách bất kỳ trong mạng .Đơn vị đo thông số mạng là kx (nano mét) hay ăngstrông , với $1kx = 1,00202A^{\circ} = 1,00202.10^{-8} \text{ cm}$. Theo thông số mạng ta có thể tính được đường kính nguyên tử kim loại . Thông số mạng thường ký hiệu là a .

1.2.2.Các kiểu mạng tinh thể thường gặp :

Trong các kim loại thông dụng thường gặp ba kiểu mạng tinh thể sau đây :

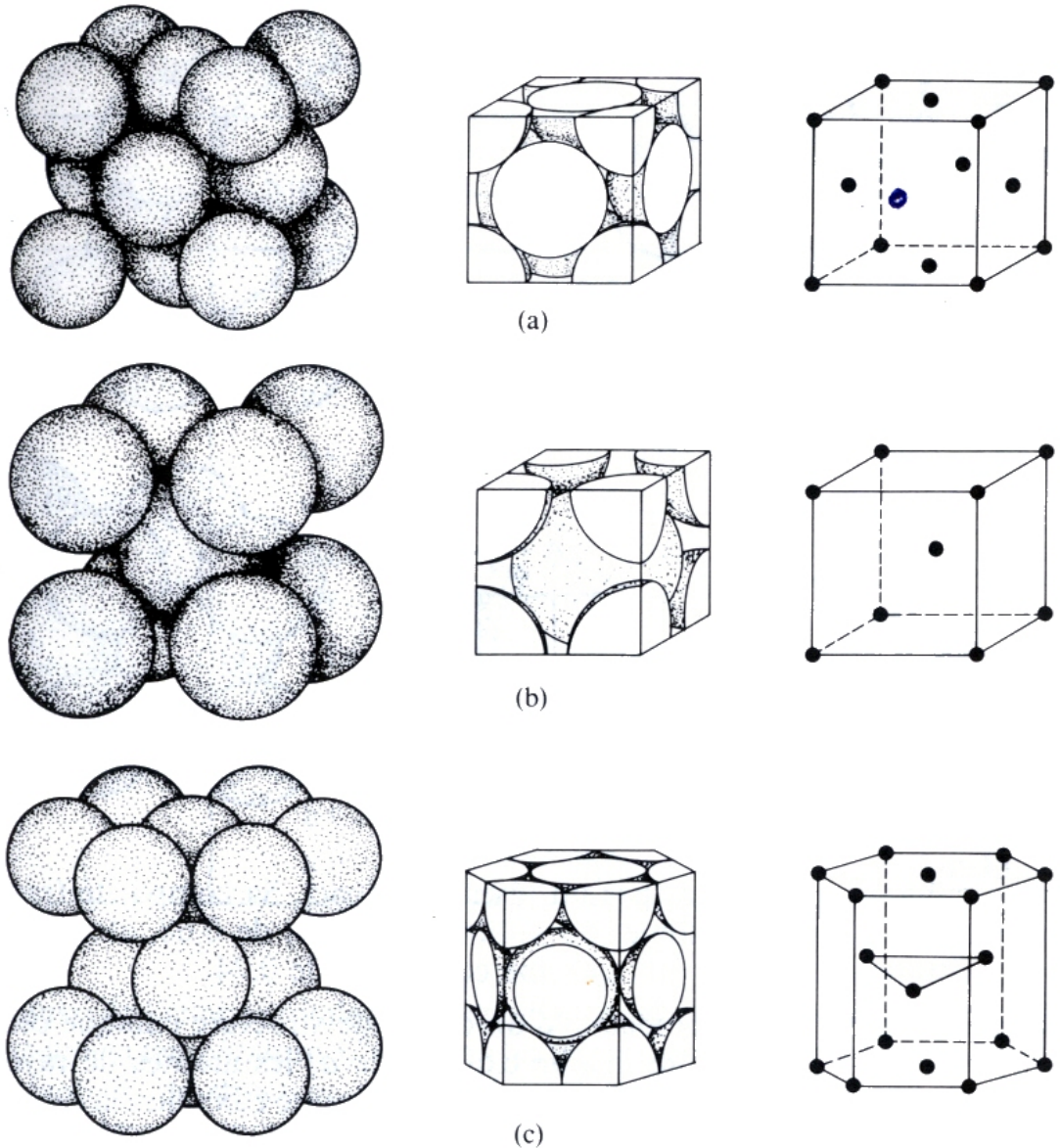
1-Lập phương tâm khối A2 (thể tâm) : Các nguyên tử nằm ở các đỉnh và ở trung tâm của khối lập phương . Nếu coi các nguyên tử là hình cầu và biểu diễn gần như thật thì các nguyên tử nằm ở các đỉnh chéo nhau thì tiếp xúc với nhau qua nguyên tử ở trung tâm .Các nguyên tử còn lại không tiếp xúc với nhau . Kiểu mạng này có trong các kim loại Fe_{α} Cr, Mo, V. Khoảng cách gần nhất giữa hai nguyên tử là $d = \frac{a\sqrt{3}}{2}$ và $r = \frac{a\sqrt{3}}{4}$. Kiểu mạng này có một thông số mạng là a . Kiểu mạng này có số sắp xếp là K8, nghĩa là bất kỳ nguyên tử nào cũng có tám nguyên tử cách đều nó một khoảng gần nhất.

2- Lập phương tâm mặt A1 (diện tâm) : Các nguyên tử nằm ở các đỉnh và tâm của các mặt bên . Nếu coi các nguyên tử là hình cầu và biểu diễn gần như thật thì nguyên tử nằm ở đỉnh và tâm của các mặt bên thì tiếp xúc với nhau .Các nguyên tử còn lại không tiếp xúc với nhau . Khoảng cách gần nhất giữa hai nguyên tử là $d = \frac{a\sqrt{2}}{2}$ và $r = \frac{a\sqrt{2}}{4}$. Kiểu mạng này chỉ có một thông số mạng là a . Thường gặp trong các kim loại Fe_{γ} , Cu, Ni, Al, Pb...Số sắp xếp của mạng A1 là K12.

3-Sáu phương xếp chặt A3 (lục giác xếp chặt) : Các nguyên tử nằm ở các đỉnh và ở tâm hai mặt đáy của hình lăng trụ lục giác đều .Ba nguyên tử nằm ở trung tâm ba lăng trụ tam giác cách nhau .Sáu phương xếp chặt có hai thông số mạng là a và c , tỉ số c/a gọi là hệ số xếp chặt .Trong trường hợp lý tưởng $\frac{c}{a} = \sqrt{\frac{8}{3}} \approx 1,633$ ng thực tế tỉ số c/a không đúng là 1,633 mà dao động trong khoảng $1,57 \div 1,64$ và cũng được coi là xếp chặt . Các kim loại có kiểu mạng này là : Zn, Cd, Co_{α} , Mg, Ti, Ru...

4-Chính phương tâm khối (thể tâm) : Trong tổ chức của thép sau khi tôi (mactexit) còn có kiểu mạng chính phương tâm khối . Có thể coi kiểu mạng này là lập phương tâm khối được kéo dài theo một chiều . Nó có hai thông số mạng là a và c , tỉ số c/a gọi là độ chính phương .

Trong thực tế sự sắp xếp của các nguyên tử trong kim loại theo xu hướng dày đặc nhất . Do đó không có kim loại nào có kiểu mạng đơn giản chính phương tâm khối cả .



Hình 1.2- Mô hình và các sắp xếp nguyên tử trong khối cơ sở.

- a) Lập phương tâm mặt
- b) Lập phương tâm khối
- c) Sau phương xếp chặt

1.3.CẤU TẠO MẠNG TINH THỂ THỰC TẾ :

1.3.1.Phân loại các sai lệch trong mạng tinh thể :

Các cấu trúc trình bày ở trên gọi là cấu trúc của tinh thể lý tưởng vì khi xem xét đã bỏ qua dao động nhiệt và các sai hỏng trong trật tự sắp xếp của các nguyên tử (ion, phân tử). Các sai hỏng đó gọi là sai lệch mạng tinh thể hay khuyết tật mạng. Hành vi của tinh thể dưới tác dụng của ngoại lực (biến cứng, biến dạng dẻo), độ dẫn điện, tính cách điện và tính bán dẫn ... sẽ bị ảnh hưởng rất lớn do sai lệch mạng tinh thể. Dựa vào kích thước theo ba

chiều sai lệch mạng được phân ra làm ba loại : sai lệch điểm, sai lệch đường, sai lệch mặt và khối.

1.Sai lệch điểm :

Sai lệch điểm là các sai lệch có kích thước rất nhỏ theo ba chiều đo không gian (cỡ kích thước nguyên tử). Có các dạng sau : nút trống, nguyên tử xen kẽ và nguyên tử tạp chất.

a-Nút trống và nguyên tử xen kẽ : Trong tinh thể nguyên tử luôn luôn dao động nhiệt xung quanh vị trí cân bằng của mình. Tại nhiệt độ xác định, năng lượng dao động của mỗi nguyên tử tuân theo lý thuyết thống kê Mác xoen - Bol zơ man nên không giống nhau. Khi một số nguyên tử nào đó có năng lượng cao, với biên độ dao động lớn, chúng có khả năng rời bỏ nút mạng và để lại nút không có nguyên tử, đó là nút trống. Sau đó nguyên tử có thể chuyển sang vị trí giữa các nút (cơ chế tạo nút trống Frenken) tạo ra sai lệch điểm dạng nguyên tử xen kẽ . Khi nguyên tử rời khỏi vị trí cân bằng đi ra bề mặt tinh thể gọi là cơ chế nút trống Sôtky

Sự xuất hiện nút trống và nguyên tử xen kẽ luôn làm xuất hiện trường ứng suất hình cầu (kéo xung quanh nút trống và nén xung quanh nguyên tử xen kẽ). Nồng độ nút trống thực tế lớn hơn nhiều so với nguyên tử xen kẽ vì năng lượng tạo nút trống nhỏ hơn nhiều so với nguyên tử xen kẽ. Mật độ nút trống biểu diễn theo công thức :

$$\frac{n}{N} = \exp\left(-\frac{Q}{KT}\right)$$

Trong đó : -n,N : số nút trống và số nút mạng.

-Q : năng lượng tạo nút trống

-K : hằng số Bolzoman

-T : nhiệt độ tuyệt đối.

Qua công thức trên ta thấy rằng nồng độ nút trống tăng nhanh theo nhiệt độ và có giá trị lớn nhất ở kim loại lỏng.

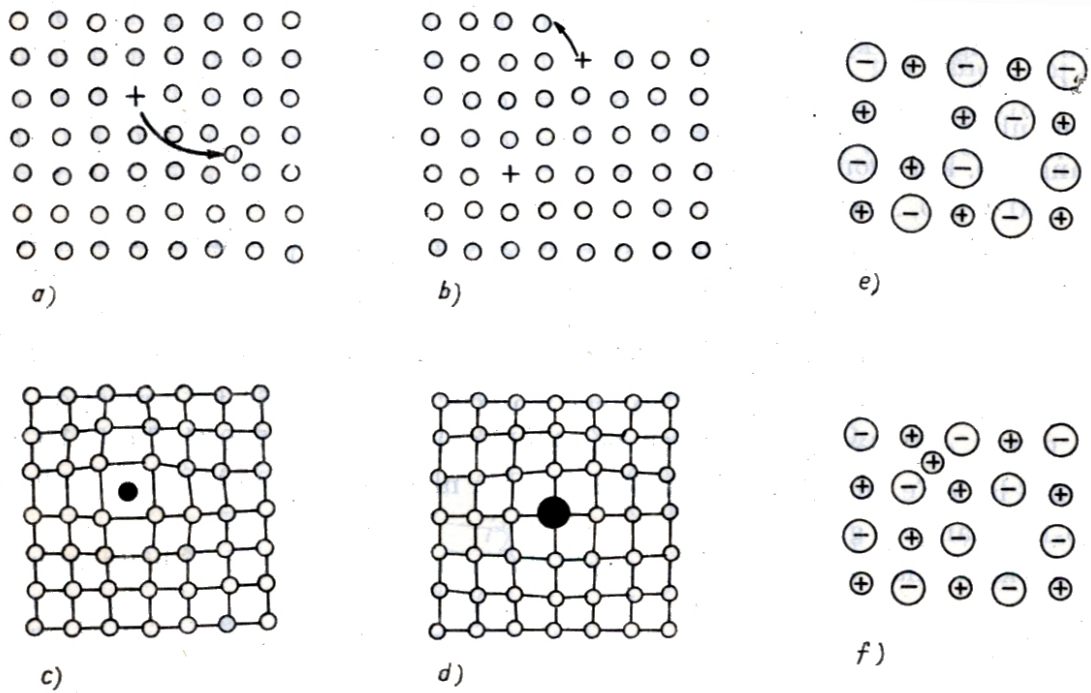
b-Nguyên tử tạp chất : Trong thực tế không thể có vật liệu kim loại nguyên chất tuyệt đối. Với công nghệ nấu luyện hiện đại ngày nay có thể đạt độ sạch đến 99,99999%. Do vậy trong kim loại luôn có tạp chất. Tùy theo kích thước nguyên tử mà tạp chất có thể thay thế vào vị trí nguyên tử kim loại trên nút mạng hay xen giữa các nút . Xung quanh các nguyên tử tạp chất luôn có trường ứng suất hình cầu.

2-Sai lệch đường - Lệch

Sai lệch đường là loại sai lệch có kích thước nhỏ (kích cỡ nguyên tử) theo hai chiều đo và rất lớn theo chiều thứ ba trong tinh thể (sẽ gọi là lệch).

Lý thuyết về lệch là cơ sở lý thuyết nền trong vật lý kim loại. Nhờ có lý thuyết lệch ta có thể giải thích được nhiều vấn đề về cơ tính, lý tính của kim loại và hợp kim. Trên cơ sở đó chế tạo các kim loại và hợp kim đặc biệt : siêu bền, siêu dẻo...

a-Lệch đường : Gài thêm vào phía trên mạng tinh thể lý tưởng một nửa mặt phẳng nguyên tử ABCD. Phần nửa phía trên của tinh thể (trên đường AB) sẽ chịu ứng suất nén, nửa dưới chịu ứng suất kéo . Đường AB dài hàng nghìn hàng vạn thông số mạng gọi là trục lệch. AB là biên giới phía trong của nửa mặt ABCD nên gọi là lệch biên. Nếu nửa mặt nguyên tử nằm phía trên gọi là lệch dương, ký hiệu \perp , nằm phía dưới gọi là lệch âm, ký hiệu T.

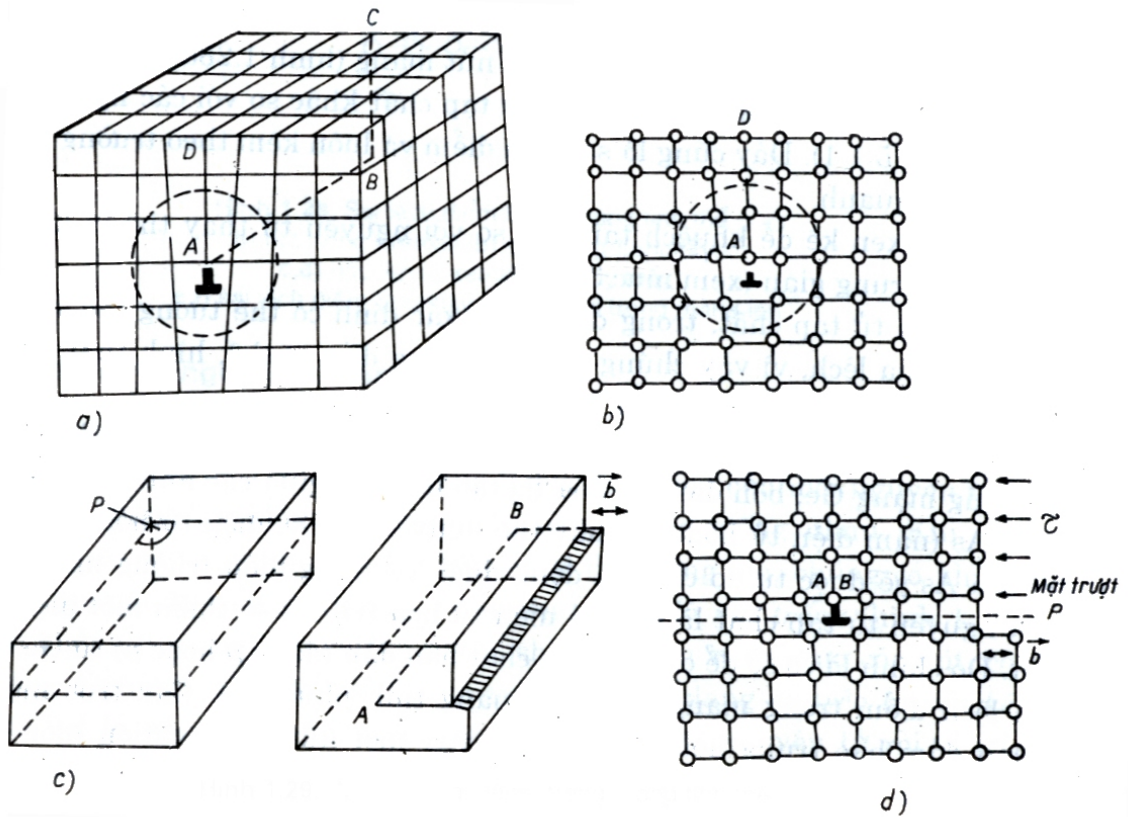


Hình 1.3 - Các dạng sai lệch điểm trong mạng tinh thể

a) Nút trống Frenkel; b) Nút trống Schottky

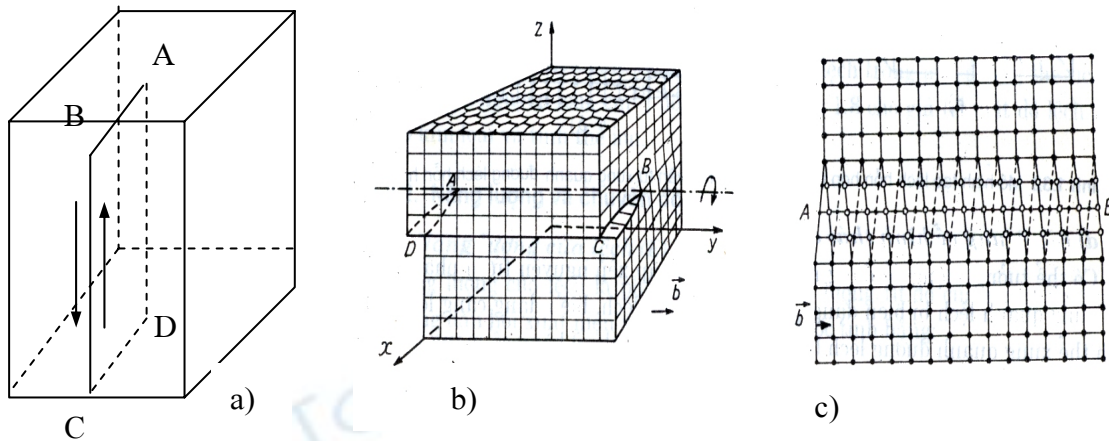
c,d) Nguyên tử xen kẽ và thay thế

e,f) Sai lệch điểm Schottky và Frenkel trong ion



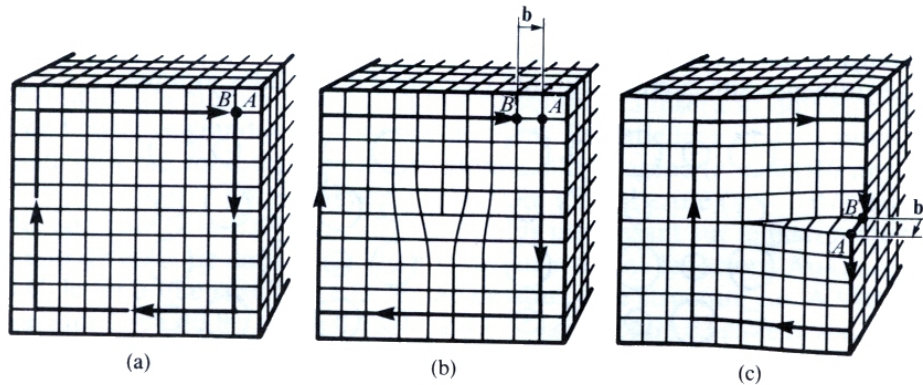
Hình 1.4- Mô hình tạo lệch đường trong mạng tinh thể

b-Lệch xoắn : ta có thể hình dung lệch xoắn như sau : cắt mạng tinh thể lý tưởng bằng nửa mặt phẳng ABCD, sau đó xô dịch hai mép ngoài ngược chiều nhau sao cho các nguyên tử mặt ngoài sẽ xô dịch một đoạn bằng một thông số mạng theo đường CD. Do đó các nguyên tử sẽ sắp xếp lại quanh AB theo đường xoắn ốc và ta có lệch xoắn. AB gọi là trục lệch xoắn. Nếu đường xoắn ốc nguyên tử xung quanh trục lệch theo chiều kim đồng hồ gọi là lệch xoắn phải, ký hiệu ngược lại gọi là lệch xoắn trái, ký hiệu .



Hình 1.5- Lệch xoắn: mô hình tạo thành (a), mô hình không gian (b) và sự sắp xếp nguyên tử trong vùng lệch (c)

c-Lệch hỗn hợp : Trong nhiều trường hợp một lệch có đặc trưng của cả lệch biên và lệch xoắn gọi là lệch hỗn hợp.



Hình 1.6- Cách xác định vectơ trượt (Burgers)

- a) Trong tinh thể hoàn chỉnh
- b) trong lệch đường
- c) Trong lệch xoắn

3-Sai lệch mặt : Sai lệch mặt là các sai lệch có kích thước lớn theo hai chiều đo và nhỏ theo chiều đo thứ ba. Gồm có các loại : biên giới hạt, biên giới siêu hạt, mặt ngoài tinh thể ...

a-Biên giới hạt : là vùng tiếp giáp giữa các hạt trong đa tinh thể. Các nguyên tử ở vùng biên giới hạt không sắp xếp theo trật tự mạng và có thể coi như vùng cấu trúc vô định hình. Chiều dày biên giới hạt phụ thuộc vào độ sạch của vật liệu, có thể đạt hàng trăm thông số mạng. Kim loại càng tinh khiết chiều dày biên giới hạt càng mỏng.

b-Biên giới siêu hạt : Siêu hạt (blóc) là những vùng tinh thể nhỏ (kích thước trung bình cỡ $10^2 - 10^4$ nm, với cấu trúc tinh thể khá hoàn chỉnh, định hướng lệch nhau một góc nhỏ, ngăn cách bằng biên giới siêu hạt. Biên giới siêu hạt thực chất là những tường lệch, tạo nên do những lệch cùng dấu tương tác lẫn nhau khi chúng trượt trên những mặt trượt song song và giữ nhau ở vị trí cân bằng. Hai siêu hạt lân cận định hướng lệch nhau một góc bằng : $\theta = \frac{b}{D}$ $\theta = \frac{b}{D}$.

D - khoảng cách trung bình giữa các lệch biên cùng dấu trên trường lệch.

b - véc tơ trượt (Bure).

Biên giới các siêu hạt thường xuất hiện trong quá trình kết tinh lại, có tác dụng cản trở trượt và tương tác với các loại sai lệch điểm khác nên cũng đóng vai trò trong tính dẻo của vật liệu.

c-Sai lệch xếp : Sai lệch xếp (còn gọi là khuyết tật xếp) là sự phá vỡ trật tự xếp chặt của tinh thể. Giả sử mạng A1 có trật tự sắp xếp là ABCABCABC, vì lý do nào đó, trật tự đó bị phá vỡ, chẳng hạn thừa một lớp xếp chặt để có sai lệch xếp thừa ABACA...Nếu trong trật tự xếp thiếu một lớp sẽ tạo sai lệch xếp thiếu ABCABABC...

Sai lệch xếp đặc trưng bằng năng lượng γ_{SLX} gọi là năng lượng của sai lệch xếp. Ở điều kiện cân bằng độ rộng của sai lệch xếp là :

$$d_0 = \frac{G(b_2 b_3)}{2\pi\gamma_{SLX}}$$

Trong đó :

G - mô đun trượt

$b_2 b_3$ - véc tơ trượt của các lệch không hoàn chỉnh giới hạn SLX

γ_{SLX} - năng lượng của sai lệch xếp.

Sai lệch xếp có vai trò rất lớn trong lĩnh vực hóa bền vật liệu, đây là một trong những phương hướng quan trọng nâng cao độ bền là hợp kim hóa, làm tăng độ rộng d_0 , làm giảm γ_{SLX} , tức là tăng cản trở chuyển động của lệch bằng sai lệch xếp.

d-Cấu trúc mặt ngoài tinh thể : Mặt ngoài tinh thể có hình thái tồn tại khác so với những mặt phẳng tinh thể ở bên trong. Có thể hình dung dễ dàng rằng đối với các nguyên tử ở mặt ngoài (mặt giới hạn tinh thể) không có đủ số sắp xếp như nguyên tử bên trong. Vì vậy ở mặt ngoài chúng không sắp xếp theo trật tự quy định của tinh thể và tạo thành vùng sai lệch. Sức căng bề mặt tinh thể (năng lượng bề mặt) đặc trưng phần gia tăng năng lượng tự do để giữ các nguyên tử bề mặt ở trạng thái ổn định. Do đặc điểm cấu trúc sai lệch cho nên lớp mặt ngoài tinh thể cũng có những tương tác đặc biệt với các sai lệch khác.

4-Sai lệch khối :

Những sai lệch có kích thước lớn theo ba chiều trong mạng tinh thể gọi là sai lệch khối. Sai lệch khối vĩ mô là những sai hỏng sinh ra khi nấu, đúc hợp kim như rỗ co, tạp trung xỉ, tạp chất trong vật đúc. Trên khía cạnh vi mô có thể coi sai lệch khối như các pha

thứ hai tồn tại trên nền hợp kim. Ví dụ như graphit trong gang, các pha thứ hai tạo thành khi tiết pha từ dung dịch rắn. Các sai lệch này là cố ý tạo ra để nâng cao độ bền, cải thiện tính chất theo ý muốn. Tùy thuộc vào cấu trúc, hình thái tồn tại, kích thước mà hiệu quả hóa bền của những pha thứ hai này khác nhau.

1.3.2. Vai trò của sai lệch đối với tính chất :

Sự có mặt của sai lệch trong mạng tinh thể và tương tác giữa chúng ảnh hưởng đến tính chất của vật liệu. Để giải thích tính chất cơ học (độ bền, độ cứng, tính dẻo...) phải dựa vào lý thuyết bền trong đó các mô hình cấu trúc vi mô được áp dụng để giải thích kết quả thực tế. Ở đây ta xem xét sự tương tác của lệch với nhau và ảnh hưởng của chúng đến cơ tính của vật liệu.

1-Tương tác giữa các lệch và khái niệm hóa bền :

Ta xét quá trình trượt khi biến dạng dẻo, tốc độ biến dạng dẻo theo công thức Orowan $\dot{\epsilon} = \rho \cdot b \cdot v$. (Trong đó : ρ là mật độ lệch, b là trị số véc tơ Burgers, v là tốc độ chuyển động của lệch). Trong quá trình biến dạng sẽ có hai hiệu ứng ngược nhau xảy ra

-Mật độ lệch tăng do các nguồn khác nhau hoạt động như biên giới hạt, Frank - Rit làm tăng tốc độ biến dạng.

-Nhưng khi tăng mật độ lệch tương tác giữa lệch với nhau và với các sai lệch khác tăng mạnh làm giảm đáng kể tốc độ chuyển động của lệch. Vì vậy muốn duy trì tốc độ biến dạng là không đổi cần phải tăng ứng suất bên ngoài thêm một lượng $d\sigma$. Đây chính là hiệu ứng hóa bền biến dạng. Hệ số hóa bền biến dạng $\frac{d\sigma}{d\epsilon}$ đặc trưng bởi góc nghiêng đường cong $\sigma - \epsilon$ trên biểu đồ thử kéo vật liệu.

Cơ sở của các phương pháp hóa bền vật liệu tinh thể là làm giảm tốc độ chuyển động của lệch. Tương tác giữa các lệch xảy ra nhờ trường ứng suất đàn hồi của chúng. Khi một lệch trượt gặp các lệch trong mặt trượt giao nhau khác, trên mỗi lệch hình thành một bậc lệch. Bậc cản trở chuyển động lệch hoặc khi cùng chuyển động với lệch sẽ sinh ra khuyết tật điểm hoặc các vòng lệch ở phía sau nó gây ra hóa bền (hình 1.41 Lê)

2-Tương tác giữa lệch và sai lệch điểm :

Kết quả tương tác giữa lệch và sai lệch điểm làm cho các nguyên tử tạp chất (hay nút trống) tích tụ xung quanh đường lệch, tạo ra những đám mây nguyên tử tạp chất (khí quyển Côtren, Snuk, Suzuki...). Để chuyển động lệch cần phải bổ sung thêm năng lượng từ bên ngoài ($d\sigma$) nhằm giải thoát khỏi những đám mây đó.

Trong các hợp kim tồn tại ở dạng dung dịch rắn (thay thế, xen kẽ) các nguyên tử hợp kim có thể coi như những sai lệch điểm cố ý, hiệu quả hóa bền sẽ tăng lên rất nhiều. Nguyên tố hợp kim làm thay đổi độ rộng của sai lệch xếp, đây là một trong các chướng ngại rất mạnh cản trở chuyển động của lệch. Trong các kiểu mạng A1, A3 khi hợp kim hóa sẽ làm giảm năng lượng của sai lệch xếp, tức là tăng độ rộng của nó, do vậy làm tăng hiệu quả hóa bền. Đó chính là hóa bền bằng dung dịch rắn.

3-Tương tác lệch và biên giới hạt :

Khi trong hạt có một nguồn Frank - Rit hoạt động sẽ có vô số lệch trượt cho đến khi dừng lại cạnh biên giới hạt, tạo ra một tập hợp có n lệch (hình 1.45 Lê). Tập hợp này sẽ tạo ra trường ứng suất đàn hồi vừa tác dụng ngược lại, phong tỏa nguồn lệch ở trong hạt,

vừa kích thích nguồn ở các hạt lân cận hoạt động trong quá trình biến dạng. Biên giới hạt cản trở chuyển động của lệch là do :

-Tại biên giới có cấu trúc không trật tự

-Hai hạt đa tinh thể liền nhau có định hướng khác nhau vì vậy lệch rất khó thay đổi đột biến mặt trượt khi vượt qua biên giới hạt. Vì vậy lệch chỉ có thể chuyển động tự do trong hạt. Kích thước hạt càng nhỏ, quãng đường chuyển động tự do càng ngắn, do đó hiệu quả hóa bền càng cao. Đó chính là sự hóa bền bằng biên giới hạt.

4-Tương tác giữa lệch và pha thứ hai :

Pha thứ hai tạo ra trong hợp kim do quá trình chuyển biến pha cũng có thể xem là dạng sai lệch cố ý. Tùy theo vào bản chất, nồng độ, kích thước của pha thứ hai, hiệu quả hóa bền của chúng cũng khác nhau.

a-Pha thứ hai không liền mạng, cứng hơn nền : Muốn vượt qua loại chướng ngại này ứng suất tiếp tác dụng lên lệch phải đạt giá trị: $\tau = \frac{2GB}{L}$, trong đó L là khoảng cách trung bình giữa các phần tử pha thứ hai. Sau khi vượt qua lệch để lại vòng lệch dư xung quanh pha thứ hai.

b-Pha thứ hai liền mạng, mềm hơn nền : Trường hợp này lệch sẽ cắt pha thứ hai bằng cách đi xuyên qua nó để tạo ra sai lệch xếp ở hai mép . Vì vậy sau mỗi lần lệch vượt qua sức cản của pha thứ hai tăng thêm do các vòng lệch dư hoặc sai lệch xếp. Đó là quá trình hóa bền bằng pha thứ hai (còn gọi là hóa bền cấu trúc).

5-Tích tụ lệch và phá hủy :

Khi lệch bị hãm lại bên chướng ngại, chúng sẽ tích tụ dần, làm tăng ứng suất cục bộ cho đến khi đạt giá trị cao hơn giới hạn bền của mạng, liên kết bị phá vỡ, vết nứt đầu tiên sẽ xuất hiện. Các lệch tiếp theo trượt đến và giải thoát trên bề mặt vết nứt tế vi làm nó lớn dần lên và trở thành vết nứt vĩ mô. Lúc này sẽ xảy ra phá hủy.

1.3.3.Đơn tinh thể và đa tinh thể :

1-Đơn tinh thể : Nếu vật tinh thể có mạng thống nhất và phương không thay đổi trong toàn bộ thể tích gọi là đơn tinh thể. Để dễ hình dung ta lấy một ô cơ sở (khối cơ sở) tịnh tiến nó theo ba trục tọa độ với những đoạn bằng chu kỳ tuần hoàn mạng sẽ được đơn tinh thể.

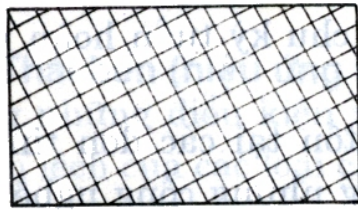
Để có được đơn tinh thể kim loại ta phải áp dụng công nghệ đặc biệt nuôi đơn tinh thể. Có hai phương pháp : Zôcranxki và phương pháp flux (thành phần khác nhau). Tính chất điển hình của đơn tinh thể là tính dị hướng do theo các phương khác nhau có mật độ nguyên tử khác nhau. Công dụng của đơn tinh thể là sử dụng trong công nghiệp bán dẫn và kỹ thuật điện.

2-Đa tinh thể : Đa tinh thể gồm rất nhiều tinh thể nhỏ gọi là hạt tinh thể. Những hạt này có cùng cấu trúc mạng nhưng định hướng ngẫu nhiên nên khác nhau, liên kết với nhau bằng biên giới hạt . Vật liệu sử dụng chủ yếu là đa tinh thể.

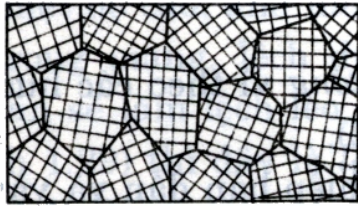
a-Độ hạt của đa tinh thể : Từ khái niệm nêu trên ta thấy cấu trúc của đa tinh thể gồm hai phần sau :

-Các hạt có định hướng khác nhau.

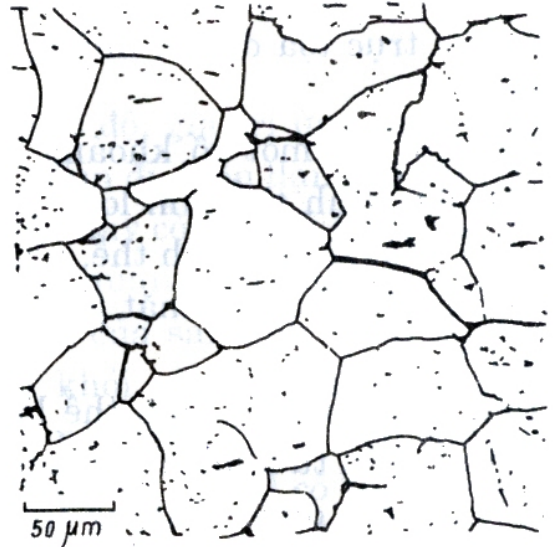
-Biên giới hạt có cấu trúc không trật tự liên kết các hạt với nhau



a)



b)



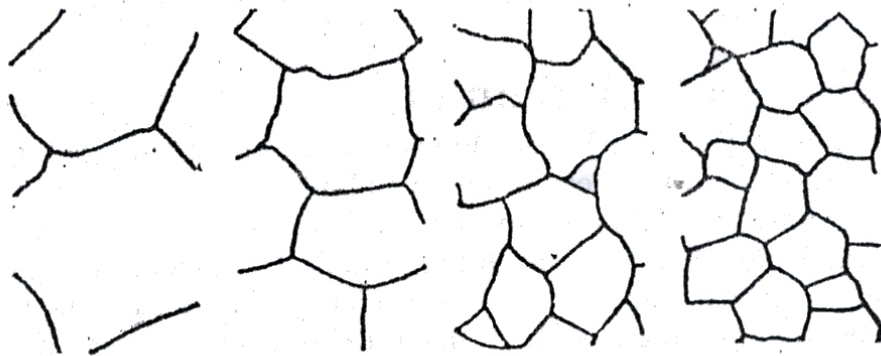
c)

Hình 1.7 - Mô hình đơn tinh thể và đa tinh thể

a) Đơn tinh thể

b) Đa tinh thể

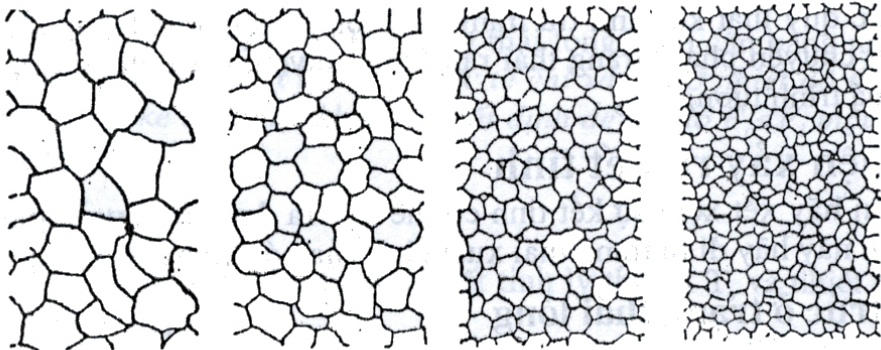
c) Ảnh tế vi mẫu đa tinh thể sau tẩm thực



2

3

4



5

6

7

8

Hình 1.8- Ảnh cấp hạt chuẩn ứng với độ phóng đại 100 lần.

Từ đó ta thấy rằng các hạt tinh thể không bao giờ có kích thước giống nhau nên

phải đưa ra khái niệm độ hạt. Có thể xác định độ hạt theo ba cách sau :

+Xác định tiết diện ngang S của các hạt (phương pháp này khó làm)

+Đo đường kính (chiều ngang) trung bình của các hạt (ít dùng)

+So sánh số lượng hạt có trong một đơn vị diện tích với độ phóng đại 100 lần với bản mẫu có sẵn. Đây là phương pháp phổ biến nhất. Sau đó xếp vào bảng cấp hạt. Bảng cấp hạt gồm 16 cấp từ -2 đến 14, thông dụng nhất là từ cấp 1 đến cấp 8, số càng lớn hạt càng nhỏ.

b-Tính đẳng hướng của đa tinh thể : Do sự phân bố ngẫu nhiên của các hạt trong đa tinh thể, phương mạng của chúng sắp xếp một cách bất kỳ nên tính dị hướng không còn thể hiện nữa. Do vậy đa tinh thể có tính *đẳng hướng giả*. Sở dĩ gọi là đẳng hướng giả vì trong từng phần nhỏ của đa tinh thể (hạt) vẫn thể hiện tính dị hướng.

TaiLieu.vn

CHƯƠNG 2 : GIẢI ĐỒ PHA

2.1. CÁC KHÁI NIỆM CƠ BẢN :

2.1.1. Pha, hệ, cấu tử, hệ cân bằng:

1 - Cấu tử : là các nguyên tố (hay hợp chất hóa học bền vững) cấu tạo nên vật liệu. Chúng là các thành phần độc lập.

2 - Hệ (đôi khi còn gọi là hệ thống) là một tập hợp vật thể riêng biệt của vật liệu trong điều kiện xác định hay là một loạt hợp kim khác nhau với các cấu tử giống nhau.

3- Pha : là tổ phần đồng nhất của hệ (hợp kim) có cấu trúc và các tính chất cơ, lý, hóa học xác định, giữa các pha có bề mặt phân cách.

Ví dụ : - Ta có một hệ gồm nước đá và nước. Hệ này chỉ có một cấu tử đó là hợp chất H_2O nhưng có hai pha : rắn (nước đá), lỏng (nước)

- Một chi tiết bằng la tông một pha : Hệ này có hai cấu tử là Cu và Zn nhưng chỉ có một pha α (dung dịch rắn của hai cấu tử trên).

4 - Hệ cân bằng (ổn định) : Hệ ở trạng thái cân bằng khi các pha của nó đều có năng lượng tự do nhỏ nhất trong các điều kiện về nhiệt độ, áp suất và thành phần xác định. Tức là các đặc tính của hệ không biến đổi theo thời gian. Thông thường hệ với các pha ở trạng thái cân bằng bao giờ cũng có độ bền, độ cứng thấp nhất, không có ứng suất bên trong, xô lệch mạng tinh thể thấp nhất và được hình thành với tốc độ nguội chậm. Hệ cân bằng có tính chất thuận nghịch.

5- Hệ không cân bằng (không ổn định) : Khi thay đổi nhiệt độ và áp suất làm tăng năng lượng tự do và hệ trở nên trạng thái không cân bằng. Lúc này hệ có thể chuyển biến sang trạng thái cân bằng mới có năng lượng tự do nhỏ hơn. Nói chung trạng thái không cân bằng là không ổn định, luôn có xu hướng tự biến đổi sang trạng thái cân bằng, ổn định. Trong thực tế một số trạng thái không cân bằng vẫn tồn tại lâu dài, do ở nhiệt độ thường chuyển biến xảy ra rất chậm hầu như không nhìn thấy được. Trạng thái không cân bằng thường có độ bền, độ cứng cao hơn nên được sử dụng khá nhiều trong thực tế (tổ chức mactenxit sau khi tôi). Trạng thái không cân bằng được hình thành với tốc độ nguội nhanh.

6- Hệ giả ổn định : Trạng thái giả ổn định tồn tại khi trạng thái cân bằng (ổn định) tuyệt đối chỉ tồn tại trên lý thuyết, tức là phải nung nóng hay làm nguội vô cùng chậm mà trong thực tế rất khó xảy ra. Vậy giả ổn định thực chất là không ổn định nhưng thực tế lại tồn tại một cách ổn định ngay cả khi nung nóng hay làm nguội trong một phạm vi nào đó.

2.1.2. Quy tắc pha và công dụng :

Trạng thái cân bằng của hệ được xác định bởi các yếu tố bên trong (thành phần hóa học) và các yếu tố bên ngoài (nhiệt độ và áp suất). Tuy nhiên các yếu tố này phụ thuộc lẫn nhau. Bậc tự do là số lượng các yếu tố độc lập có thể thay đổi được trong phạm vi nhất định mà không làm thay đổi số pha của nó (ký hiệu F - freedom).

Quy tắc pha xác định mối quan hệ giữa số pha P (phase), bậc tự do F và số cấu tử C (component). Ta có :

$$F = C - P + 2.$$

Nhưng do việc nghiên cứu vật liệu tiến hành trong khí quyển, có áp suất không đổi nên số yếu tố bên ngoài chỉ còn một là nhiệt độ. Vì vậy công thức của nó là :

$$F = C - P + 1$$

Cần lưu ý rằng bậc tự do là những số nguyên và không âm, số pha cực đại của một hệ chỉ có thể lớn hơn số cấu tử của nó một đơn vị ($P_{MAX} = C + 1$), nó giúp cho việc xác định số pha của một hệ hợp kim dễ dàng. Ví dụ :

- Khi $F = 1$ tức là chỉ có một yếu tố có thể thay đổi được (nhiệt độ hay thành phần), lúc này số pha bằng số cấu tử.

- Khi $F = 2$ có hai yếu tố thay đổi được cùng một lúc, số pha bằng số cấu tử trừ đi 1.

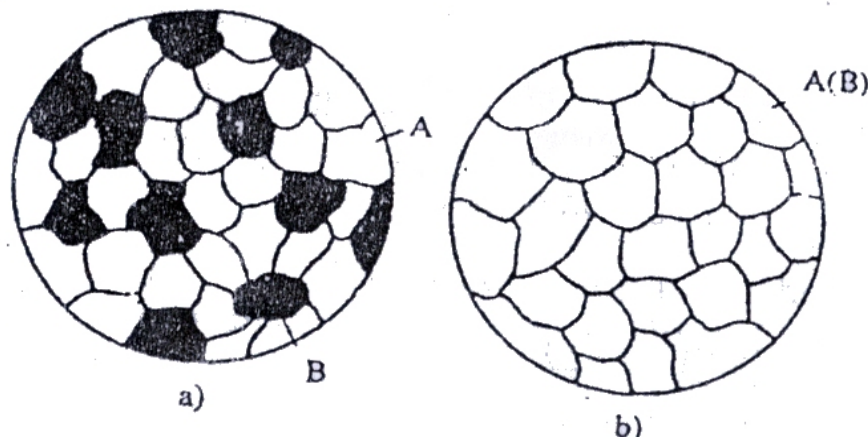
2.2.DUNG DỊCH RẮN VÀ CÁC PHA TRUNG GIAN :

2.2.1.Khái niệm và phân loại dung dịch rắn :

1-Khái niệm :

Cũng giống như dung dịch lỏng, trong dung dịch rắn ta không phân biệt được một cách cơ học các nguyên tử của các cấu tử, các nguyên tử của chúng phân bố xen vào nhau trong mạng tinh thể. Cấu tử nào có số lượng nhiều hơn, vẫn giữ được kiểu mạng của mình gọi là dung môi. Các cấu tử còn lại gọi là chất hòa tan. Dung dịch rắn là pha đồng nhất có cấu trúc mạng tinh thể của cấu tử dung môi nhưng thành phần của nó có thể thay đổi trong một phạm vi nhất định mà không làm mất đi sự đồng nhất đó. Ký hiệu của dung dịch rắn là A(B).

Dung dịch rắn được chia ra làm hai loại : dung dịch rắn thay thế và dung dịch rắn xen kẽ.

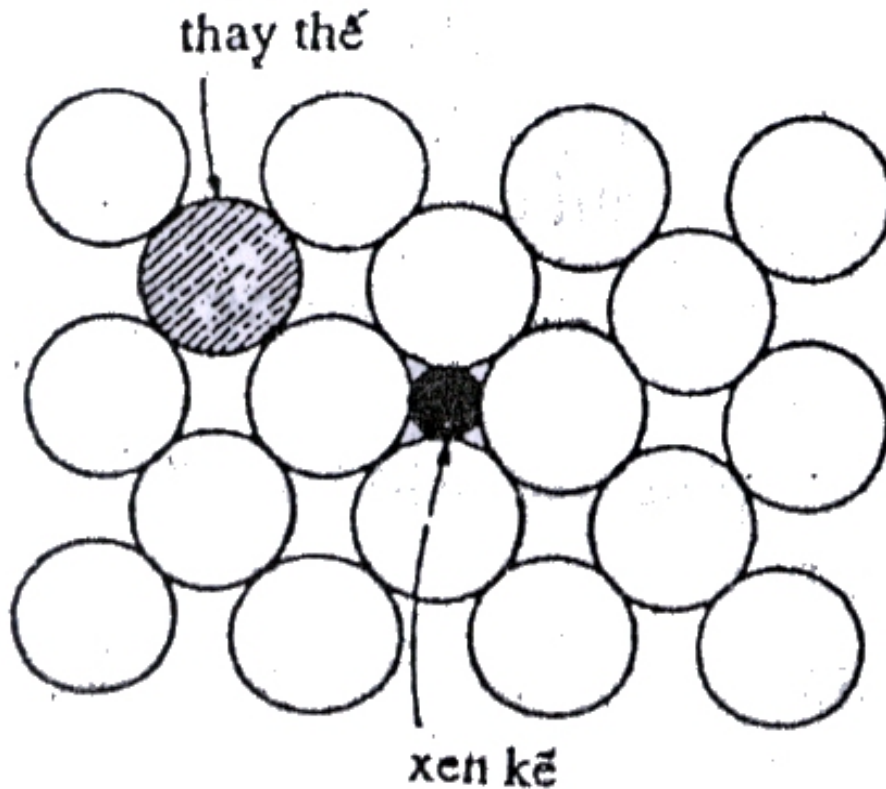


Hình 2.1 -Hỗn hợp cơ học (a) và dung dịch rắn (b)

2-Dung dịch rắn thay thế :

là loại dung dịch rắn mà trong đó nguyên tử của cấu tử hòa tan thay thế vào vị trí trên nút mạng của cấu tử dung môi (nguyên tố chủ).

Như vậy kiểu mạng và số nguyên tử trong khối cơ sở đúng như của cấu tử dung môi. Tuy nhiên sự thay thế này ít nhiều đều gây ra sự xô lệch mạng, vì không thể có hai loại nguyên tử có kích thước hoàn toàn giống nhau. Do vậy sự thay thế chỉ xảy ra với các cấu tử có kích thước nguyên tử khác nhau ít (với kim loại sự sai khác này không quá 15%). Tùy thuộc vào mức độ hòa tan người ta còn chia ra dung dịch rắn hòa tan vô hạn và có hạn.



Hình 2.2 - Sơ đồ tạo thành dung dịch rắn thay thế và xen kẽ

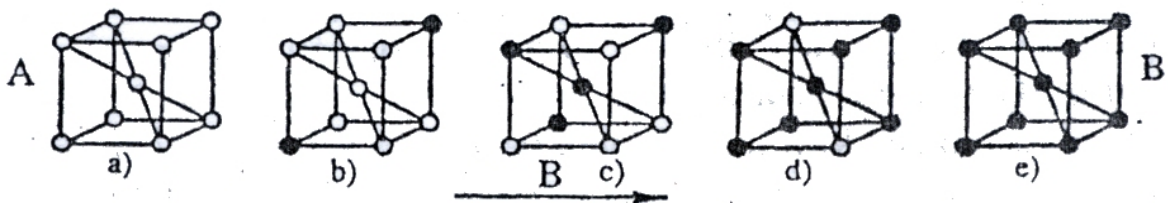
a - Dung dịch rắn thay thế hòa tan vô hạn :

Là dung dịch rắn mà trong đó nồng độ của chất hòa tan có thể biến đổi liên tục, tức là với nồng độ bất kỳ.

Trong loại dung dịch rắn này không thể phân biệt được cấu tử nào là dung môi, cấu tử nào là chất hòa tan, cấu tử nào có lượng chứa nhiều nhất là dung môi, các cấu tử còn lại là chất hòa tan. Ví dụ ta có dung dịch rắn của cấu tử A và B thì nồng độ A biến đổi từ $0 \div 100\%$, nồng độ B biến đổi từ $100\% \div 0$.

Điều kiện để hai cấu tử hòa tan vô hạn vào nhau :

- * Có cùng kiểu mạng tinh thể
- * Đường kính nguyên tử khác nhau ít, nhỏ hơn 8%. Nếu sai khác nhau nhiều từ $8 \div 15\%$ chỉ có thể hòa tan có hạn, lớn hơn 15% không thể hòa tan vào nhau
- * Nồng độ điện tử không vượt quá một giá trị xác định với mỗi loại dung dịch rắn (số lượng điện tử hóa trị tính cho một nguyên tử), tức là các nguyên tố phải có cùng hóa trị.



Hình 2.3 - Sơ đồ tạo thành dung dịch rắn thay thế hoà tan vô hạn

* Các tính chất vật lý và hóa học gần giống nhau (cấu tạo lớp vỏ điện tử, tính âm điện, nhiệt độ chảy...)

Nói chung các nguyên tố cùng trong một nhóm của bảng hệ thống tuần hoàn thỏa mãn điều kiện này. Các cặp nguyên tố hình thành dung dịch rắn vô hạn chỉ có thể là nguyên tố kim loại. Cần chú ý rằng đây chỉ là điều kiện cần của dung dịch rắn vô hạn.

b - Dung dịch rắn thay thế hòa tan có hạn :

Là dung dịch rắn mà trong đó các cấu tử chỉ hòa tan vào nhau với giá trị nhất định, tức là nồng độ của chúng bị gián đoạn.

Các cặp cấu tử không thỏa mãn bốn điều kiện trên sẽ tạo thành dung dịch rắn có hạn

c - Dung dịch rắn trật tự và không trật tự :

Nếu sự phân bố nguyên tử của cấu tử hòa tan trong mạng dung môi một cách ngẫu nhiên thì được gọi là dung dịch rắn không trật tự. Trong một số điều kiện nào đó (nhiệt độ, nồng độ) trong một số hệ các nguyên tử thay thế có tính quy luật và gọi là dung dịch rắn trật tự. Ví dụ trong hệ Au-Cu khi làm nguội chậm nguyên tử đồng sắp xếp tại tâm các mặt bên, còn nguyên tử vàng nằm ở các đỉnh của khối cơ sở.

3-Dung dịch rắn xen kẽ :

Là loại dung dịch rắn trong đó nguyên tử hòa tan nằm xen giữa các nguyên tử của kim loại dung môi, chúng chui vào lỗ hổng trong mạng dung môi. Như vậy ta thấy rằng số nguyên tử trong khối cơ sở tăng lên.

Do kích thước các lỗ hổng trong mạng tinh thể rất nhỏ nên các nguyên tử hòa tan phải có kích thước rất nhỏ. Đó chính là các nguyên tử C, N, H, B... với dung môi Fe. Đương nhiên là dung dịch rắn xen kẽ chỉ có loại hòa tan có hạn.

4-Các đặc tính của dung dịch rắn :

a - Mạng tinh thể của dung dịch rắn là kiểu mạng của kim loại dung môi, thường có các kiểu mạng đơn giản và xít chặt. Đây là yếu tố cơ bản quyết định các tính chất cơ, lý hóa ... Về cơ bản nó vẫn giữ được các tính chất của kim loại dung môi. Tuy nhiên về thông số mạng luôn khác với dung môi :

- Trong dung dịch rắn xen kẽ : thông số mạng dung dịch luôn lớn hơn thông số mạng dung môi.

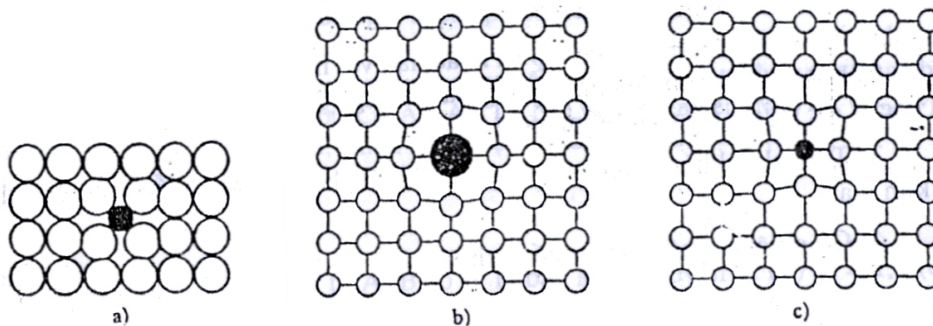
- Trong dung dịch rắn thay thế : nếu đường kính nguyên tử hòa tan lớn hơn đường kính nguyên tử dung môi thì thông số mạng dung dịch lớn hơn dung môi. Nếu đường kính nguyên tử hòa tan nhỏ hơn nguyên tử dung môi thì thông số mạng dung dịch nhỏ hơn dung môi.

b - Liên kết vẫn là liên kết kim loại. Do vậy dung dịch rắn vẫn giữ được tính dẻo giống như kim loại nguyên chất, tuy có kém hơn (trừ hệ hợp kim Cu-Zn, với 30%Zn hợp kim này còn dẻo hơn cả kẽm)

c - Thành phần hóa học thay đổi trong phạm vi nhất định mà không làm thay đổi kiểu mạng.

d - Tính chất biến đổi nhiều : độ dẻo, độ dai, hệ số nhiệt độ điện trở giảm, điện trở, độ bền, độ cứng tăng lên...

Do các đặc tính trên nên dung dịch rắn là cơ sở của các hợp kim kết cấu dùng trong cơ khí. Trong các hợp kim này pha cơ bản là dung dịch rắn, nó chiếm xấp xỉ 90%, có trường hợp đến 100%.



Hình 2.4 - Sự xô lệch mạng trong dung dịch rắn

a) Trong dung dịch rắn xen kẽ

b) Trong dung dịch thay thế khi $r_m > r_{dm}$

c) Trong dung dịch thay thế khi $r_h < r_{dm}$

2.2.2. Các pha trung gian :

Trong các hợp kim hầu như không có loại hợp chất hóa học hóa trị thường. Các hợp chất hóa học tồn tại trong hợp kim thường gọi là pha trung gian vì trên giản đồ pha nó nằm ở vị trí giữa và trung gian các dung dịch rắn.

1-Khái niệm và phân loại :

Các hợp chất hóa học tạo thành theo quy luật hóa trị thường có các đặc điểm sau :

- * Có mạng tinh thể phức tạp và khác hẳn mạng nguyên tố thành phần
- * Luôn luôn có một tỷ lệ chính xác giữa các nguyên tố và được biểu diễn bởi công thức hóa học nhất định.
- * Tính chất khác hẳn các nguyên tố thành phần, độ cứng cao, tính giòn lớn.
- * Có nhiệt độ nóng chảy xác định, khi hình thành là phản ứng tỏa nhiệt.

Các pha trung gian trong hợp kim có những đặc điểm khác với hợp chất hóa học theo hóa trị, đó là :

- * Không tuân theo quy luật hóa trị.
- * Không có thành phần chính xác.
- * Có liên kết kim loại.

Các pha trung gian trong hợp kim thường gặp là : pha xen kẽ, pha điện tử, pha La ves, pha σ ...

2-Pha xen kẽ : Là pha tạo nên giữa các kim loại chuyển tiếp (Fe, Cr, Mo, W...) có đường kính nguyên tử lớn với các á kim (H, B, N, C...) có đường kính nguyên tử bé. Kiểu mạng của pha xen kẽ được xác định theo quan hệ giữa đường kính nguyên tử kim loại và á kim :

- Nếu $d_A/d_K < 0,59$ thì pha xen kẽ có các kiểu mạng đơn giản : tâm khối, tâm mặt, sáu phương xếp chặt... Các nguyên tử á kim xen kẽ vào lỗ hổng trong mạng. Chúng có công thức đơn giản như : K_4A (Fe_4N), K_2A (W_2C), KA (NbC , NbH , TiC), KA_2 (Ti_2H). Với K là kim loại, A là á kim.

- Nếu $d_A/d_K > 0,59$ pha xen kẽ sẽ có kiểu mạng phức tạp và công thức phức tạp hơn K_3A (Mn_3C), K_7A_3 (Cr_7C_3), $K_{23}A_6$ ($Cr_{23}C_6$).

Đặc điểm của pha xen kẽ nói chung là có nhiệt độ chảy rất cao (thường $> 3000^{\circ}C$) và có độ cứng lớn ($2000 \div 5000$ HV), có tính giòn lớn. Chúng có vai trò rất lớn trong việc nâng cao tính chống mài mòn và chịu nhiệt của hợp kim.

3-Pha điện tử (Hum-Rozêri)

Là pha trung gian có cấu tạo phức tạp, tạo nên bởi hai kim loại. Thành phần của nó như sau :

* Nhóm một : gồm các kim loại hóa trị một Cu, Ag, Au và kim loại chuyển tiếp : Fe, Ni, Co, Pt, Pd.

* Nhóm hai : các kim loại hóa trị hai, ba, bốn : Be, Mg, Zn, Cd, Al, Si, Sn.

Nồng độ điện tử N có giá trị xác định là $3/2$, $21/13$ và $7/4$ ($21/14$, $21/13$, $21/12$).

Mỗi giá trị nồng độ điện tử ứng với một kiểu mạng tinh thể. Ví dụ :

- $N = 3/2$ là pha β với kiểu mạng lập phương tâm khối, hay lập phương phức tạp, hay sáu phương (Cu_5Sn , Cu_5Si).

- $N = 21/13$ là pha γ với kiểu mạng lập phương phức tạp ($Cu_{31}Sn_8$).

- $N = 7/4$ là pha ε với kiểu mạng sáu phương xếp chặt ($AgCd_3$).

4-Pha Laves :

La pha tạo nên bởi hai nguyên tố (A, B), có tỷ lệ đường kính nguyên tử $d_A/d_B = 1,2$ (tỷ lệ này có thể biến đổi trong phạm vi $1,1 \div 1,6$), có công thức AB_2 , kiểu mạng sáu phương xếp chặt ($MgZn_2$) hay lập phương tâm mặt ($MgCu_2$).

Trong hợp kim có thể còn gặp các pha : σ , λ , δ , μ ... Tuy nhiên các loại pha này ít phổ biến. Một đặc tính quan trọng của các pha trung gian là cứng và giòn. Vì vậy không bao giờ người ta dùng hợp kim chỉ có một pha là pha trung gian. Tỷ lệ của chúng trong các hợp kim thông thường $< 10\%$ (có khi đến $20 \div 30\%$), đây là các pha cản trở làm tăng độ bền, độ cứng.

2.2.3.Hỗn hợp cơ học :

Khá nhiều trường hợp, hợp kim có tổ chức hai hay nhiều pha : hai dung dịch rắn, dung dịch rắn và hợp chất hóa học... Cấu tạo như vậy gọi là hỗn hợp cơ học. Trên tổ chức tế vi ta phân biệt được rất rõ các pha khác nhau trong hỗn hợp cơ học. Hai trường hợp điển hình của hỗn hợp cơ học là cùng tinh và cùng tích.