

# Giáo trình vật liệu học

Vật lý kim loại và hợp  
kim

## 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. Cho đến ngày nay là một loạt các loại vật liệu mới như : composit, ceramit, pôlyme. 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 khí 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, 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.

## CHƯƠNG 1 : CẤU TẠO CỦA KIM LOẠI VÀ HỢP KIM

Trong bảng tuần hoàn các nguyên tố hoá học của Mendêlêep , hiện tại có hơn 100 nguyên tố thì các nguyên tố kim loại chiếm hơn 3/4 . Trong chương này chúng ta sẽ nghiên cứu cấu trúc của mạng tinh thể , sự sắp xếp của các nguyên tử và mật độ của chúng cũng như khoảng cách giữa các mặt tinh thể .

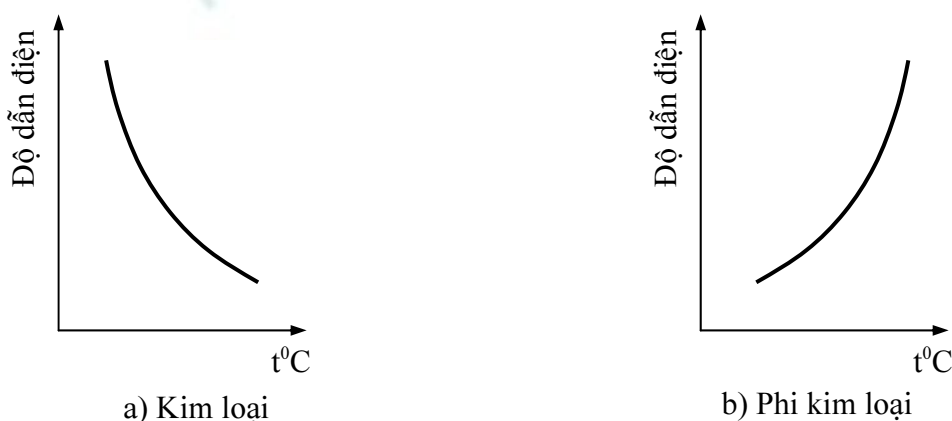
### 1.1.CẤU TẠO MẠNG TINH THỂ LÝ TƯỞNG CỦA KIM LOẠI NGUYÊN CHẤT :

#### 1.1.1. Khái niệm và đặc điểm của kim loại :

**1- Định nghĩa :** Kim loại là vật thể sáng , dẻo , có thể rèn được , có tính dẫn điện và dẫn nhiệt cao .

Bất cứ kim loại nào bề mặt chưa bị ô xy hoá đều có vẻ lấp lánh sáng ta thường gọi là ánh kim .Hầu hết các kim loại đều dẻo , có thể kéo sợi , dát mỏng dễ dàng , dẫn điện và dẫn nhiệt tốt . Tuy vậy không phải tất cả các kim loại đều thỏa mãn những tính chất trên . Ví dụ : stibi (Sb) rất giòn không thể rèn được , praseodim (Pr) dẫn điện rất kém .

Tiêu chuẩn để phân biệt kim loại và phi kim là hệ số nhiệt độ của điện trở . Kim loại có hệ số nhiệt độ của điện trở dương (khi nhiệt độ tăng thì điện trở tăng) còn với phi kim loại thì hệ số này âm (khi nhiệt độ tăng điện trở giảm).



Hình 1.1- Hệ số nhiệt độ của điện trở.

Ta có thể giải thích các đặc điểm của kim loại dựa vào lý thuyết cổ điển về cấu tạo nguyên tử . Kim loại có ánh kim là do khi có ánh sáng chiếu vào thì điện tử sẽ hấp thụ năng lượng . Do đó nó có năng lượng cao hơn, bị kích thích và nhảy lên phân mức năng lượng trên . Tại mức năng lượng này là không ổn định do đó điện tử chỉ tồn tại một thời gian rất ngắn và sau đó trở về mức năng lượng cũ . Khi đó chúng thải bớt phần năng lượng dưới dạng bức xạ và làm cho kim loại có vẻ lấp lánh sáng . Tính dẫn điện và dẫn nhiệt cũng có thể giải thích tương tự . Còn tính dẻo có thể giải thích dựa vào liên kết kim loại .

#### 2. Phân loại kim loại :

Trong thực tế tồn tại nhiều phương pháp phân loại kim loại, đây là một trong những phương pháp thường sử dụng nhất .

a- Theo khối lượng riêng: kim loại được chia làm hai nhóm : kim loại nhẹ và kim loại nặng

Kim loại nặng là các kim loại có khối lượng riêng lớn hơn  $5 \text{ g/cm}^3$ . Ví dụ như sắt ( $\gamma = 7,8$ ), vàng ( $\gamma = 19,5$ ), thủy ngân ( $\gamma = 13,1$ ) ...

Kim loại nhẹ là các kim loại có khối lượng riêng nhỏ hơn  $5 \text{ g/cm}^3$ . Ví dụ như nhôm ( $\gamma = 2,7$ ), ti tan ( $\gamma = 4,5$ ), man gan ( $\gamma = 1,73$ ) ...

b - Theo nhiệt độ nóng chảy : kim loại được chia làm hai nhóm

Kim loại có nhiệt độ nóng chảy cao : sắt ( $1539^\circ\text{C}$ ), vonfram ( $3410^\circ\text{C}$ ), titan ( $1668^\circ\text{C}$ ), đồng ( $1085^\circ\text{C}$ )

Kim loại có nhiệt độ nóng chảy thấp : chì ( $327^\circ\text{C}$ ), nhôm ( $657^\circ\text{C}$ ), stibi ( $631^\circ\text{C}$ ) ...

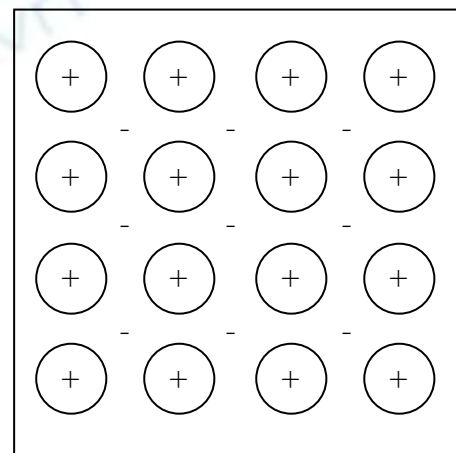
c - Theo tính chất hoạt động :

Kim loại kiềm : natri, kali, liti ...

Kim loại chuyển tiếp : sắt, crôm, mangan, vanadi ...

### 1.1.2. Liên kết kim loại :

Trong kim loại phần lớn các nguyên tử nhường bớt điện tử để trở thành ion dương còn các điện tử trở thành điện tử tự do. Các điện tử này không bị chi phối bởi một nguyên tử nào cả. Giữa các ion dương với nhau và các điện tử với nhau sẽ tồn tại lực đẩy, giữa ion và điện tử sinh ra lực hút. Sự cân bằng giữa các lực này là cơ sở của liên kết kim loại. Đây là dạng liên kết quan trọng của kim loại, nhờ mối liên kết này mà kim loại có tính dẻo rất cao.



Hình 1.2- Liên kết kim loại.

### 1.1.3. Các tính chất của kim loại :

Trong phần này ta chỉ nghiên cứu các tính chất được sử dụng trong cơ khí là chủ yếu. Ngoài ra còn xem xét thêm một vài tính chất khác.

**1-Cơ tính** : Nhiều kim loại có cơ tính tổng hợp tốt thỏa mãn các yêu cầu chế tạo trong cơ khí. Nhưng trong thực tế hầu như không sử dụng kim loại nguyên chất mà chủ yếu là dùng hợp kim. Cơ tính của kim loại và hợp kim được đánh giá bằng những chỉ tiêu sau đây :

\*Độ bền tĩnh : xác định bằng giới hạn bền  $\sigma_b$ , giới hạn chảy  $\sigma_c$  và giới hạn đàn hồi  $\sigma_{dh}$ . Đơn vị đo theo hệ SI là  $\text{N/m}^2$ , nhưng đơn vị này quá nhỏ nên thường dùng  $\text{MN/m}^2$  hay  $\text{MPa}$  (trong thực tế hay dùng  $\text{KG/mm}^2$ )

\*Độ cứng : được xác định bằng các loại độ cứng Brinen (HB), Rockwell (HRA, HRB, HRC) và Vicker (HV)

\*Độ dẻo : xác định bằng độ giãn dài tương đối  $\delta \%$  và độ thắt tỷ đối  $\Psi \%$

\*Độ dai : xác định bằng công phá hủy một đơn vị tiết diện mẫu, thường ký hiệu  $a_k$ , đơn vị đo  $\text{kJ/m}^2$ .

**Bảng 1.2. Bảng tuần hoàn các nguyên tố hóa học và mạng tinh thể của chúng**

Nhóm / Chu kỳ	IA	IIA	IIIA	IVA	VA	VIA	VIIA	VIII	IB	II B	III B	IV B	V B	VI B	VII B	O			
I	(H)	<p><b>KÝ HIỆU MANG TINH THỂ :</b></p> <p> <input type="checkbox"/> Lập phương tâm khối    <input type="checkbox"/> Chính phương đơn giản  <input checked="" type="checkbox"/> Lập phương tâm mặt    <input checked="" type="checkbox"/> Chính phương tâm khối  <input checked="" type="checkbox"/> Lập phương phức tạp    <input checked="" type="checkbox"/> Chính phương tâm mặt  <input checked="" type="checkbox"/> Sáu phương ABAB...    <input checked="" type="checkbox"/> Trục thoi  <input type="checkbox"/> Sáu phương ABAC...    <input type="checkbox"/> Mặt thoi  <input type="checkbox"/> Kiểu kim cương    <input type="checkbox"/> Một nghiêng                 </p> <p>                     Ký hiệu nguyên tử: <math>Z</math> (số hiệu nguyên tử), <math>A</math> (số khối nguyên tử)                      Ví dụ: <math>^{26}_{12}\text{Mg}</math> (Số hiệu nguyên tử 12, Số khối nguyên tử 26)                 </p>																	
II	L 3 Be 9,02	4 B 10,81	5 C 12,01	6 N 14,01	7 O 16,00	8 F 18,99	9 Ne 20,18												
III	Na 22,99	11 Mg 24,32																	
IV	K 39,10	19 Ca 40,08	20 Sc 44,96	21 Ti 47,88	22 V 50,94	23 Cr 52,00	24 Mn 54,94	25 Fe 55,85	26 Co 58,93	27 Ni 58,71	28 Cu 63,55	29 Zn 65,38	30 Ga 69,72	31 Ge 72,61	32 As 74,92	33 Se 78,96	34 Br 79,90	35 Kr 83,80	
V	Rb 85,46	37 Sr 87,62	38 Y 88,91	39 Zr 91,22	40 Nb 92,91	41 Mo 95,94	42 Tc 99	43 Ru 101,1	44 Rh 102,91	45 Pd 106,4	46 Ag 107,87	47 Cd 112,41	48 In 114,82	49 Sn 118,71	50 Sb 121,76	51 Te 127,60	52 I 126,90	53 Xe 131,30	54
VI	Cs 132,91	55 Ba 137,34	56 La 138,91	57-71 Hf 178,50	72 Ta 180,95	73 W 183,85	74 Re 186,21	75 Os 190,2	76 Ir 192,22	77 Pt 195,08	78 Au 196,97	79 Hg 200,59	80 Tl 204,38	81 Pb 207,2	82 Bi 208,98	83 Po 209	84 At 210	85 Rn 222	86
VII	Fr 223	87 Ra 226	88-103 Ac 227	104 Ku 260															
<b>Lantanit (đốt hiểm)</b>																			
<b>Actinít</b>																			

**2-Lý tính** : các tính chất vật lý của kim loại cũng được ứng dụng rất phổ biến : làm dây dẫn điện ,nam châm , vật liệu dẫn nhiệt ...

**3- Hóa tính** : các kim loại thường tác dụng mạnh với các nguyên tố phi kim loại và bị phá hủy trong không khí ẩm.

**4-Tính công nghệ** : là khả năng chịu các dạng gia công : đúc ,rèn dập ,cán,cắt gọt...Một kim loại không thể đồng thời có tất cả các tính công nghệ đều tốt.Ví dụ : nếu đúc tốt thì dập sẽ kém ... Kim loại dù rất quý nhưng nếu tinh công nghệ xấu thì không thể sử dụng trong lĩnh vực cơ khí .

#### **1.1.4. Cấu tạo mạng tinh thể của kim loại nguyên chất :**

##### **1- Các khái niệm cơ bản**

a-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 .

b-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.

c-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 ăng strông , với  $1kx = 1,00202A^{\circ} = 1,00202.10^{-8}$  cm. Theo thông số mạng ta có thể tính được đường kính nguyên tử kim loại . Thông số mạng thường ký hiệu là  $a$  .

##### **2- Các loại mạng tinh thể thường gặp của kim loại :**

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

a-Lập phương tâm khối (thể tâm  $A_2$ ) : 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 của khối lập phương 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  $Fe_{\alpha}$ , Cr, Mo,V. Khoảng cách gần nhất giữa hai nguyên tử là :

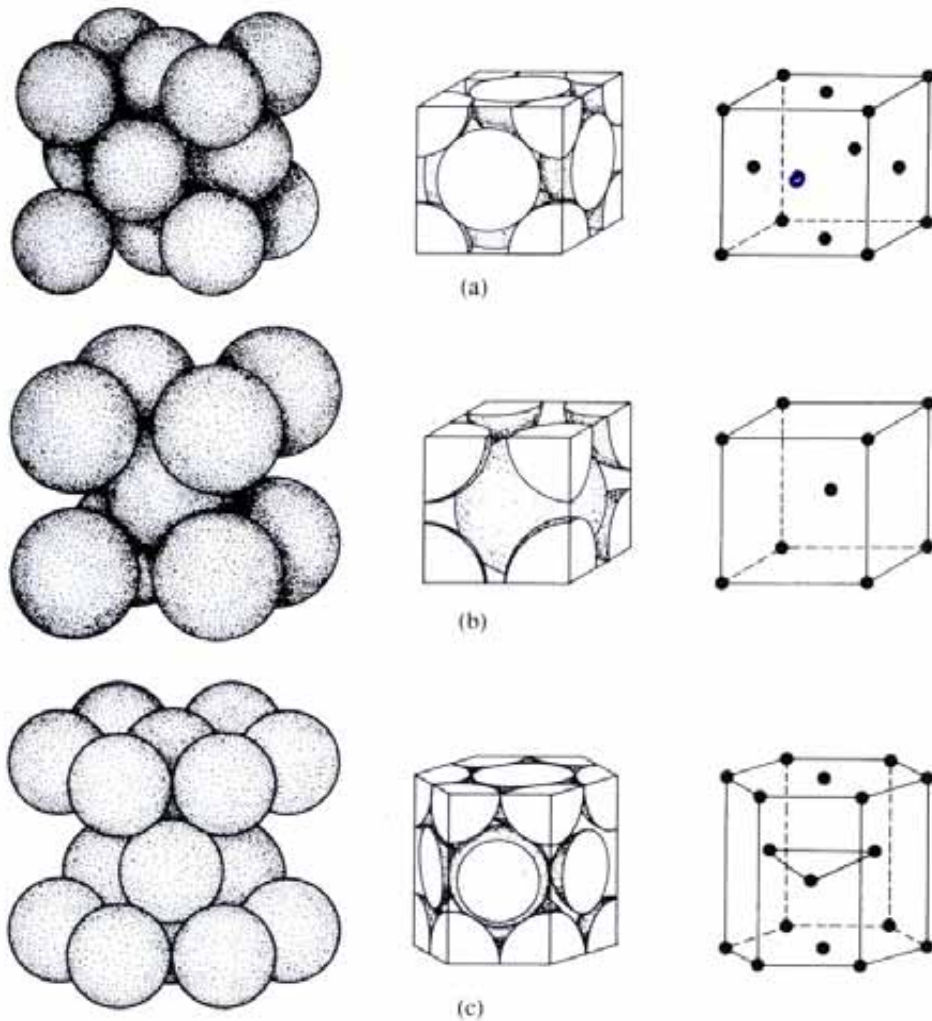
$$d = \frac{a\sqrt{3}}{2} \text{ và } r = \frac{a\sqrt{3}}{4} . \text{ Kiểu mạng này có một thông số mạng là } a .$$

b - Lập phương tâm mặt (diện tâm  $A_1$ ) : Các nguyên tử nằm ở các đỉnh và tâm của các mặt bên khối lập phương. 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

$$d = \frac{a\sqrt{2}}{2} \text{ và } r = \frac{a\sqrt{2}}{4} . \text{ kiểu mạng này chỉ có một thông số mạng là } a . \text{ Thường gặp}$$

trong các kim loại  $Fe_{\gamma}$ , Cu, Ni, Al, Pb...

c-Sáu phương xếp chặt (lục giác xếp chặt  $A_3$ ) : 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.Mạng sáu phương xếp chặt có hai thông số mạng là  $a$  và  $c$ , tỷ số  $c/a$  gọi là hệ số xếp chặt.



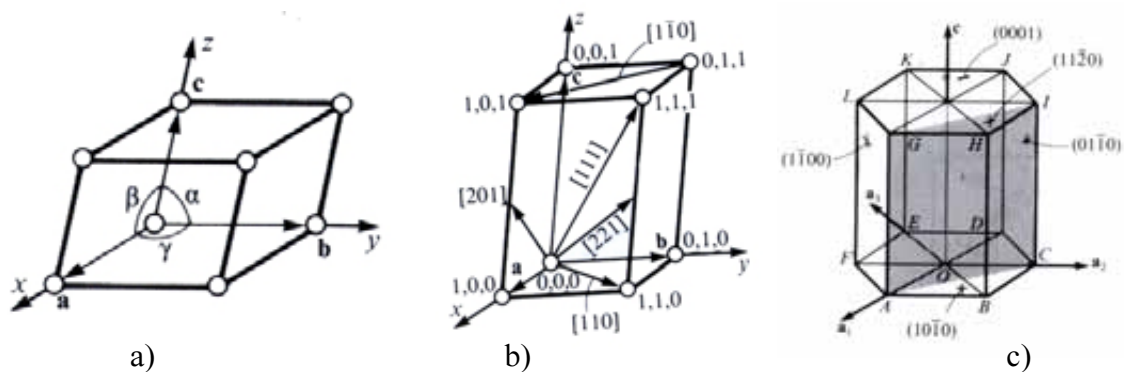
Hình 1.3- Mô hình và cách sắp xếp nguyên tử trong khối cơ sở.

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

Trong trường hợp lý tưởng  $\frac{c}{a} = \sqrt{\frac{8}{3}} \approx 1,633$ . Trong 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<sub>α</sub>, Mg, Ti, Ru...

d-Chính phương tâm khối (thể tâm): Trong tổ chức của thép sau khi tôi (mactenxit) 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 1.4- Hệ tọa độ và cách xác định mặt và phương tinh thể

- a) Hệ tọa độ trong khối cơ sở.
- b) Ký hiệu phương trong khối cơ sở.
- c) Ký hiệu mặt trong khối cơ sở

### 1.1.5. Mật độ nguyên tử và lỗ hổng của mạng tinh thể :

#### 1. Mật độ nguyên tử trong mạng tinh thể

Do ta coi các nguyên tử kim loại là hình cầu nên dù chúng sắp xếp sít chặt bao nhiêu đi nữa giữa chúng với nhau cũng còn có các khoảng trống nhất định . Vì vậy phải đưa ra vấn đề mật độ của nguyên tử trong mạng tinh thể .

Mật độ nguyên tử trong mạng tinh thể là phần thể tích (diện tích) có nguyên tử chiếm chỗ tính ra phần trăm .

$$\text{Mật độ khối } M_v = \frac{nv}{V} \cdot 100\%$$

Trong đó : n - số nguyên tử có trong khối cơ sở  
v - thể tích của một nguyên tử  
V - thể tích khối cơ sở

$$\text{Mật độ mặt } M_s = \frac{n_s}{S} \cdot 100\%$$

Trong đó : n<sub>s</sub> - số nguyên tử có trong mặt đang xét  
s - diện tích của một nguyên tử  
S - diện tích mặt đang xét

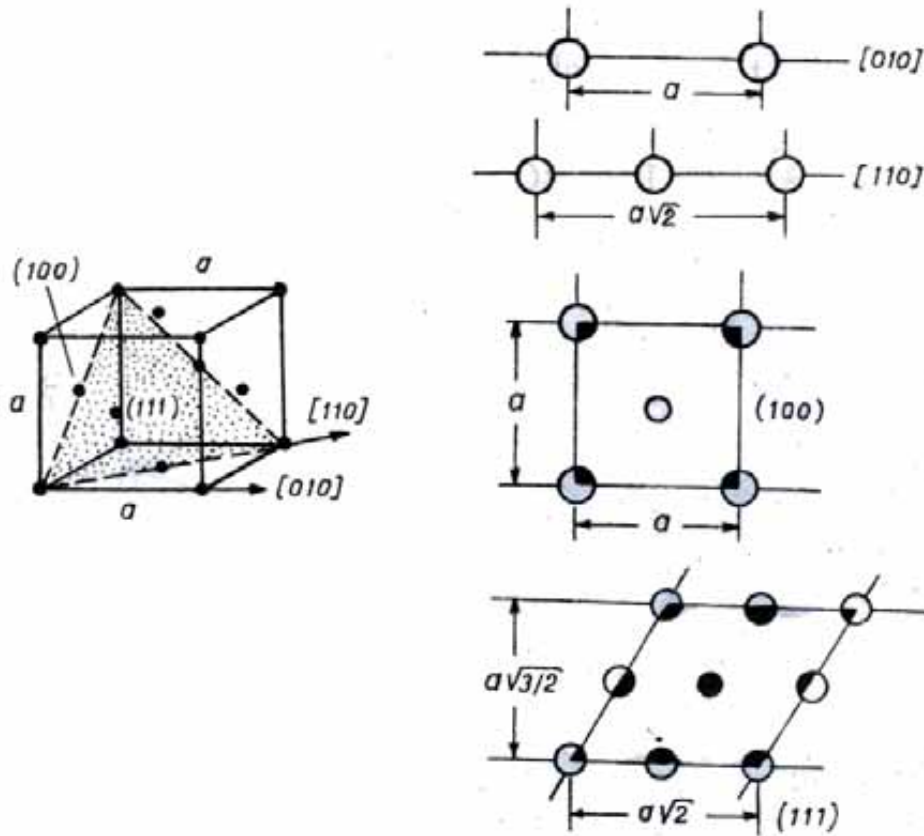
#### 2. Lỗ hổng trong mạng tinh thể

Do nguyên tử có dạng hình cầu nên giữa chúng luôn có các lỗ hổng . Có hai loại lỗ hổng : lỗ hổng trong khối tám mặt và lỗ hổng trong khối bốn mặt. Các kiểu mạng khác nhau có số lỗ hổng khác nhau và kích thước của chúng cũng khác nhau . Các lỗ hổng này quyết định sự hòa tan của các nguyên tử khác vào mạng của chúng.

Mạng lập phương tâm khối :

- Loại thứ nhất : nằm trong khối tám mặt tạo bởi sáu nguyên tử và có tâm nằm ở giữa các cạnh và trung tâm các mặt bên, kích thước của nó là 0,154d . Tất cả có sáu lỗ hổng như vậy .





Hình 1.5- Xác định mật độ sắp xếp  $M_p$ ,  $M_s$  của khối cơ sở mạng tinh thể.

- Loại thứ hai : nằm trong khối bốn mặt , có tâm nằm ở 1/4 đoạn thẳng nối điểm giữa các mặt bên, kích thước là  $0,221d$  và có tất cả 12 lỗ hổng. Mạng lập phương tâm khối có nhiều lỗ hổng hơn nhưng kích thước các lỗ hổng nhỏ hơn .

Mạng lập phương tâm mặt :

- Loại thứ nhất : nằm trong khối tám mặt có tâm nằm ở trung tâm khối cơ sở và đỉnh ở điểm giữa các mặt bên, kích thước  $0,41d$ . Có tất cả bốn lỗ hổng như vậy .

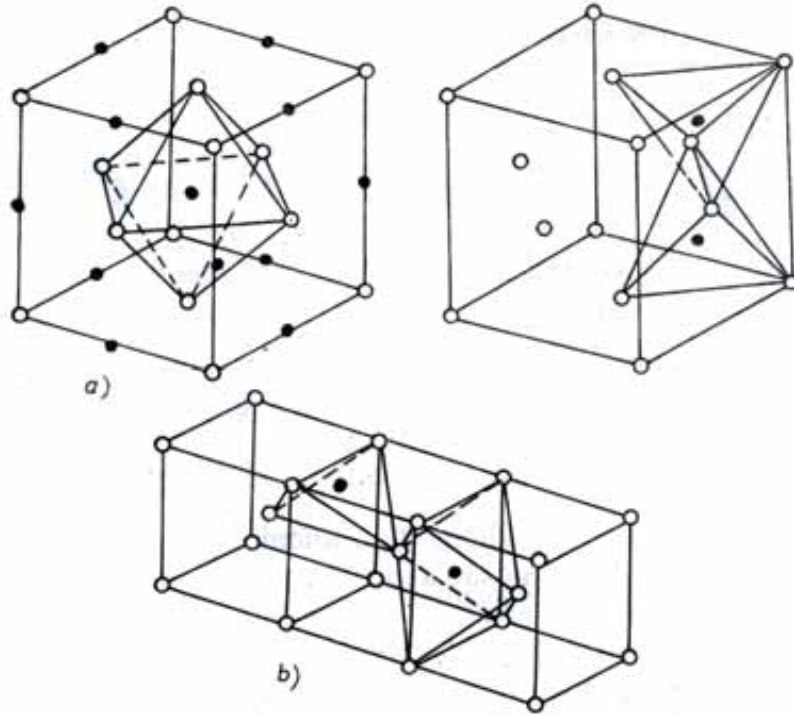
- Loại thứ hai : nằm trong khối bốn mặt, tâm nằm ở khoảng 1/4 các đường chéo khối  $\{111\}$ , kích thước  $0,225d$  , có tất cả tám lỗ hổng như vậy. Mạng lập phương tâm mặt có số lỗ hổng ít hơn nhưng kích thước lớn hơn .

### 1.1.6. Tính đa hình của kim loại (thù hình) :

#### 1-Khái niệm và ví dụ :

Khá nhiều kim loại có nhiều kiểu mạng tinh thể khác nhau ở các khoảng nhiệt độ và áp suất khác nhau, tính chất đó gọi là tính đa hình .

Nhiệt độ mà tại đó kim loại chuyển từ kiểu mạng này sang kiểu mạng khác gọi là nhiệt độ tới hạn của chuyển biến đa hình . Nhiệt độ này còn phụ thuộc vào tốc độ nung nóng, tốc độ làm nguội và trạng thái ban đầu của kim loại . Các dạng đa hình khác nhau của một nguyên tố được ký hiệu bằng các chữ Hy Lạp cổ :  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$ ... Trong đó  $\alpha$  là ký hiệu cho dạng đa hình ở nhiệt độ thấp nhất, các chữ còn lại ký hiệu lần lượt ở các nhiệt độ cao hơn.



Hình 1.6- Các loại lỗ hổng trong mạng lập phương tâm mặt (a) và lập phương tâm khối. (b)

Ví dụ : Sắt là kim loại có tính đa hình , ở nhiệt độ  $< 911^{\circ}\text{C}$  và từ  $1392^{\circ}\text{C}$  đến  $1539^{\circ}\text{C}$  có kiểu mạng lập phương tâm khối gọi là  $\text{Fe}_{\alpha}$  .Trong khoảng từ  $911^{\circ}\text{C}$  đến  $1392^{\circ}\text{C}$  có mạng lập phương tâm mặt gọi là  $\text{Fe}_{\gamma}$ .

Thiếc ở nhiệt độ thường có màu sáng bạc, có thể hàn, dát mỏng và kéo sợi được, đó là  $\text{Sn}_{\beta}$ . Nhưng khi làm nguội xuống  $-30^{\circ}\text{C}$  thì trở thành  $\text{Sn}_{\alpha}$  có màu xám ở dạng bột.

### **2-Sự thay đổi tính chất khi có chuyển biến đa hình :**

Khi có chuyển biến đa hình các kim loại đều có sự thay đổi các tính chất của chúng.

-Thể tích riêng thay đổi :

Từ  $\text{Fe}_{\alpha}$  sang  $\text{Fe}_{\beta}$  thể tích của nó có giảm đi khoảng 1% . Từ  $\text{Sn}_{\beta}$  sang  $\text{Sn}_{\alpha}$  thể tích tăng lên 25%

-Thay đổi về cơ tính : từ  $\text{Sn}_{\beta}$  sang  $\text{Sn}_{\alpha}$  độ bền không còn nữa

-Thay đổi về lý tính : do sự sắp xếp của nguyên tử có thay đổi nên nhiệt dung , điện trở ... đều biến đổi đi.

Sự thay đổi tính chất của kim loại khi chuyển biến đa hình được nghiên cứu kỹ lưỡng để tận dụng các tính chất có lợi và ngăn ngừa các mặt bất lợi .Tính đa hình của sắt được sử dụng rất nhiều trong nhiệt luyện .

### **1.1.7.Đơn tinh thể và đa tinh thể :**

**1-Tính có hướng của tinh thể :** Mạng tinh thể luôn luôn thể hiện tính có hướng (định hướng) của nó nghĩa là theo các hướng khác nhau tính chất của mạng (cơ ,lý , hóa tính...) khác nhau .Tính có hướng là do cấu tạo mạng tinh thể, các phương và mặt khác nhau có mật độ nguyên tử không giống nhau.Theo phương có mật độ nguyên tử lớn liên kết bền hơn nên có độ bền lớn hơn các phương có mật độ nguyên tử bé .

Ví dụ : Tinh thể đồng theo các phương khác nhau có độ bền kéo thay đổi từ 140 đến 250MN/m<sup>2</sup>. Tinh thể ma giê (mạng sáu phương xếp chặt) có điện trở : theo trục a có  $\rho = 4,53.10^{-6}\Omega\text{cm}$ , theo trục c có  $\rho = 3,78.10^{-6}\Omega\text{cm}$ .

## 2-Đơn tinh thể và đa tinh thể :

Đơn tinh thể : Nếu vật tinh thể có mạng thống nhất và phương không thay đổi trong toàn bộ thể tích thì gọi là đơn tinh thể.

Để hình dung về đơn tinh thể ta lấy một khối cơ sở và tịnh tiến nó theo ba trục tọa độ với đoạn bằng chu kỳ tuần hoàn mạng (thông số mạng) sẽ được đơn tinh thể.

Trong thực tế một số khoáng vật có thể tồn tại các đơn tinh thể tự nhiên. Với kim loại để có được tinh thể phải áp dụng công nghệ đặc biệt "nuôi" đơn tinh thể. Ngày nay người ta mới chế tạo được các đơn tinh thể kim loại có kích thước nhỏ, dài khoảng 3,5 cm.

Một số đơn tinh thể, đặc biệt là khoáng vật, có bề mặt ngoài khá nhẵn, hình dáng xác định, đó là những mặt phẳng nguyên tử giới hạn (thường là các mặt có mật độ nguyên tử lớn nhất).

Tính chất tiêu biểu của đơn tinh thể là tính có hướng (định hướng) do theo các hướng khác nhau có mật độ nguyên tử khác nhau.

Đơn tinh thể chủ yếu được sử dụng trong công nghiệp bán dẫn và vật liệu kỹ thuật điện.

Đa tinh thể : là kim loại có cấu tạo gồm nhiều tinh thể. Mỗi tinh thể trong đó gọi là hạt.

Đa tinh thể có các đặc điểm sau :

-Do sự định hướng mạng tinh thể của mỗi hạt là ngẫu nhiên nên phương mạng giữa các hạt luôn lệch nhau một góc nào đó.

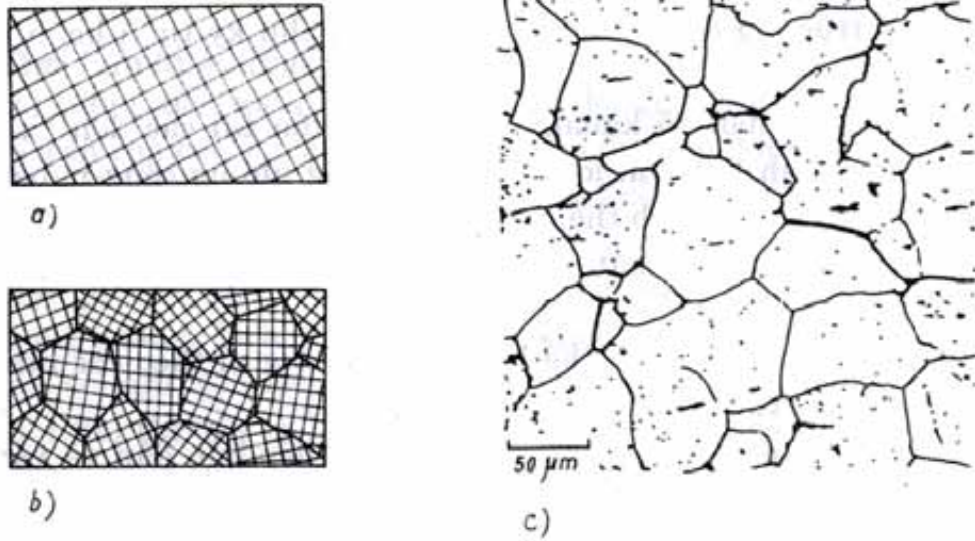
-Tại vùng biên giới hạt mạng tinh thể bị xô lệch .

-Đa tinh thể có tính đẳng hướng

Do đó trong thực tế các kim loại thường gặp đều có cơ tính đồng nhất theo mọi phương. Nếu đem kéo, cán kim loại với mức độ biến dạng lớn thì kim loại lại thể hiện tính có hướng của nó. Ví dụ : dây thép khi kéo nguội với độ biến dạng rất lớn (làm các dây cáp cần cầu, cáp treo, dây phanh xe đạp ...) độ bền theo phương dọc sợi lớn hơn rất nhiều so với phương ngang sợi.

### 1.1.8.Cấu tạo mạng tinh thể thực tế của kim loại :

Trong kim loại thực tế các nguyên tử không hoàn toàn nằm ở các vị trí một cách trật tự như đã nói ở trên mà luôn luôn có một số ít nguyên tử nằm sai vị trí gây nên sai lệch mạng. Trong thực tế không có kim loại nguyên chất tuyệt đối . Do vậy trong kim loại bao giờ cũng có các tạp chất .Kích thước các nguyên tử lạ này luôn khác nguyên tử kim loại nên gây ra sai lệch trong mạng tinh thể. Sai lệch mạng tinh thể chiếm số lượng rất thấp (1-2% thể tích mạng) nhưng ảnh hưởng rất lớn đến cơ tính của kim loại.



Hình 1.7- Mô hình đơn tinh thể (a) và đa tinh thể (b) và ảnh tế vi mẫu đa tinh thể sau tẩm thực.

### 1-Phân loại các sai lệch trong mạng tinh thể :

Theo kích thước của sự sắp xếp không trật tự ta phân chia sai lệch ra làm ba loại : sai lệch điểm, sai lệch đường và sai lệch mặt.

#### a.Các sai lệch điểm :

là các sai lệch có kích thước bé theo ba chiều đo (vài thông số mạng), có dạng điểm hay bao quanh một điểm. Gồm các loại sau đây;

- Nút trống : là các nút mạng không có nguyên tử chiếm chỗ .
- Các nguyên tử nằm xen giữa các nút mạng
- Các nguyên tử lạ nằm trên các nút mạng hay xen giữa các nút mạng.

Do có các sai lệch mạng nên nguyên tử nằm xung quanh sai lệch nằm không đúng vị trí quy định . Ví dụ : nút trống làm các nguyên tử xung quanh nó có xu hướng xích lại gần nhau, nguyên tử xen giữa nút mạng làm các nguyên tử xung quanh có xu hướng bị dồn ép lại.

Số lượng các nút trống và nguyên tử xen giữa nút mạng có xu hướng phụ thuộc vào nhiệt độ. Nhiệt độ càng tăng số lượng của chúng càng nhiều, tuy nhiên không vượt quá 1-2% . Kim loại càng bền thì khả năng nguyên tử lạ chui vào mạng tinh thể càng nhiều và do đó số lượng sai lệch điểm tăng.

#### b.Các sai lệch đường :

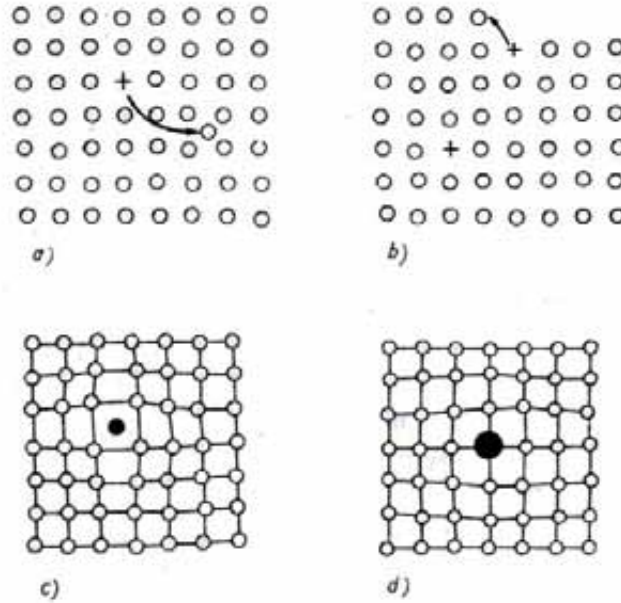
là các sai lệch có kích thước lớn theo một chiều đo và bé theo hai chiều đo còn lại. Nó có dạng đường thẳng, đường cong, đường xoắn ốc. Bao gồm các loại sau:

-Một dãy các nút trống hay các sai lệch điểm khác

-Lệch : là dạng sai lệch đường quan trọng nhất và có tính ổn định cao.

#### c.Các sai lệch mặt :

là các sai lệch có kích thước lớn theo hai chiều đo và bé theo chiều đo còn lại. Nó có dạng mặt cong, mặt phẳng. Gồm các loại sau : biên giới giữa các hạt, các mặt trượt, các mặt song tinh, mặt ngoài tinh thể.



Hình 1.8- Sai lệch điểm trong mạng tinh thể.

a) Nút trống Frenkel. b) Nút trống Schottky  
c, d) Nguyên tử xen kẽ và thay thế

## 2-Lệch và tác dụng của lệch trong tinh thể :

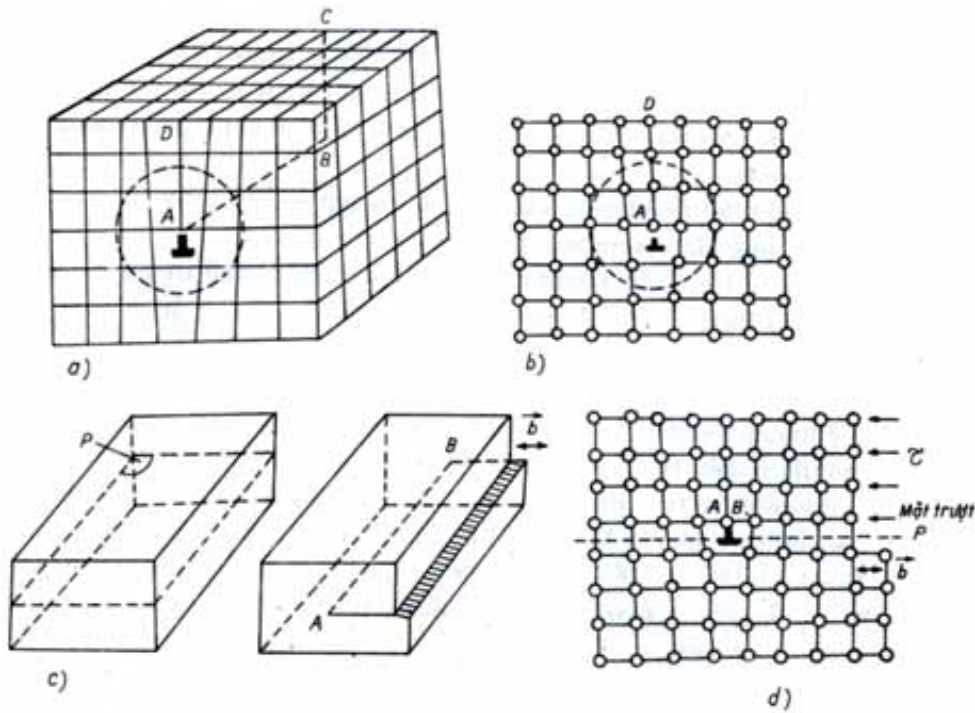
a.Lệch :

Nhờ sự phát triển của lý thuyết lệch cho phép giải thích được nhiều vấn đề như cơ cấu trượt, sự sai khác nhau giữa độ bền lý thuyết và độ bền thực tế, sự kết tinh ... Theo hình dáng hình học lệch được phân ra làm ba loại : lệch đường, lệch xoắn và lệch hỗn hợp.

-Lệch đường (lệch thẳng, lệch biên)

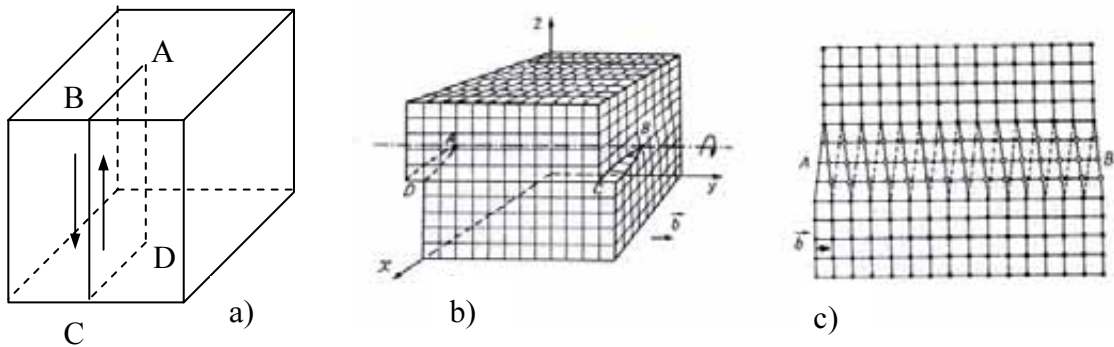
Ta có thể hình dung lệch đường như sau : ta có một mạng tinh thể hoàn chỉnh gồm nhiều mặt tinh thể song song và cách đều nhau hợp thành. Giả sử rằng ta gài vào đó thêm một bán mặt tinh thể ABCD, phần trên của mạng tinh thể như bị nén lại còn phần dưới của nó như bị kéo ra tương đối. Vùng xung quanh AB (mép của bán mặt) mạng tinh thể bị xô lệch nhiều nhất và do đó sai lệch có dạng đường. AB gọi là trục của lệch đường, nó có thể dài đến hàng nghìn hàng vạn thông số mạng. Trong khi tiết diện của sự xô lệch chỉ khoảng vài thông số mạng. Nếu bán mặt được gài từ trên xuống gọi là lệch đường dương (ký hiệu  $\perp$ ), gài từ dưới lên gọi là lệch đường âm (ký hiệu T).

-Lệch xoắn : Ta có thể hình dung lệch xoắn như sau : cắt mạng tinh thể hoàn chỉnh bằng bán mặt ABCD. Sau đó xé dịch hai phần của mạng tương đối với nhau theo mặt cắt đi một thông số mạng (các nguyên tử nằm trong vùng từ B  $\rightarrow$  A dịch đi một khoảng nhỏ hơn một thông số mạng, tại A dịch chuyển bằng không). Lúc này mạng tinh thể không phải gồm nhiều mặt song song và cách đều nhau nữa mà như gồm bởi một mặt cong quán quanh trục AD có dạng mặt vít và ta có lệch xoắn. AD gọi là trục của lệch xoắn có thể dài đến hàng nghìn hàng vạn thông số mạng, còn tiết diện của sự xô lệch chỉ vài thông số mạng.



Hình 1.9- Mô hình tạo lệch đường trong mạng tinh thể.

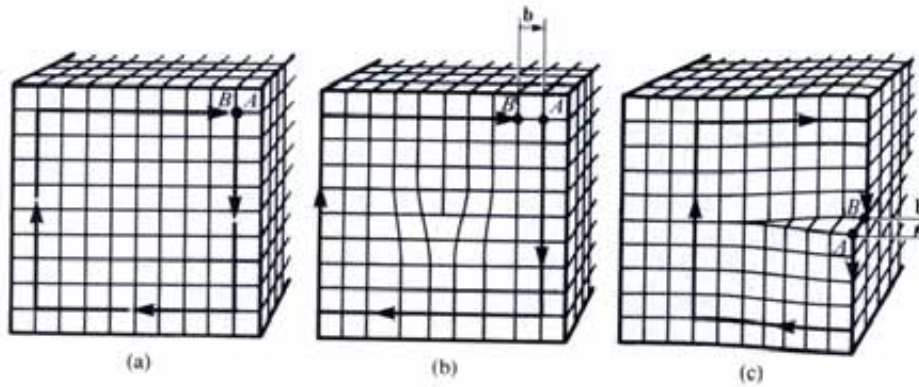
\*Lệch hỗn hợp : là loại lệch có dạng tổng hợp của hai loại lệch trên, có dạng hình học rất phức tạp .



Hình 1.10- Lệch xoắn: mô hình tạo thành (a), mô hình không gian (b) và sự sắp xếp nguyên tử trong vùng lệch (c)

b.Tác dụng của lệch :

Lệch có vai trò rất lớn trong tinh thể, nó ảnh hưởng rất nhiều đến quá trình chuyển biến pha, quá trình trượt của kim loại. Sự có mặt của lệch làm cho kim loại dễ trượt, làm cho độ bền thực tế của nó giảm đi rất nhiều so với tính toán. Ví dụ : sắt có  $\sigma_{b,t} = 13000\text{MN/m}^2$ , trong khi đó  $\sigma_{b,tt} = 250\text{MN/m}^2$  .



Hình 1.11- Cách xác định vectơ trượt (Burgers)

- Trong tinh thể hoàn chỉnh
- trong lệch đường
- Trong lệch xoắn

### 1.1.9. Các phương pháp nghiên cứu kim loại và hợp kim :

#### 1-Các phương pháp nghiên cứu tổ chức :

##### a. Mặt gãy :

Đây là phương pháp đơn giản nhất . Ta quan sát bề mặt kim loại tại nơi gãy vỡ có thể phát hiện được các vết nứt lớn, xác định được độ hạt các lần xỉ lớn ... Từ đó có thể sơ bộ kết luận được chất lượng của kim loại .

##### b. Tổ chức thô đại :

Bề gãy mẫu kim loại rồi mài phẳng trên giấy mài. Trên bề mặt của nó có thể phát hiện được : bọt khí, rỗ nứt, lẫn xỉ . Nếu cho ăn mòn nhẹ bằng các hóa chất thích hợp có thể thấy được tổ chức thớ, nhánh cây, hạt lớn, sự phân bố của photpho, lưu huỳnh trong thép. Thường dùng để phát hiện tổ chức thớ trong vật cán rèn, sự phân bố của các vùng tinh thể trong thỏi đúc .

##### c. Tổ chức tế vi :

Là phương pháp nghiên cứu tổ chức kim loại dưới kính hiển vi . Kính hiển vi vật liệu học thông dụng có độ phóng đại từ 50 đến 2000 lần. Mẫu để quan sát tổ chức tế vi chế tạo khá công phu. Phương pháp này cho biết được :

- Các thành phần tổ chức, độ lớn, hình dáng và sự sắp xếp của chúng.
- Sự phân bố của tạp chất.
- Sự thoát các bon ở bề mặt .
- Các vết nứt tế vi .
- Các lớp bảo hòa các bon, nhôm, ni tơ ...

#### 2-Nghiên cứu cấu trúc bằng tia rơn ghen :

Là phương pháp nghiên cứu sự sắp xếp của các nguyên tử trong kim loại bằng tia rơn ghen . Căn cứ vào ảnh nhiễu xạ của tia rơn ghen trên mẫu kim loại ta có thể biết được sự sắp xếp của các nguyên tử và khoảng cách giữa các mặt tinh thể .

#### 3-Phân tích hóa học và quang phổ quang phổ :

##### a-Phân tích hóa học :

Lấy phoi của kim loại cần phân tích mang hoà tan vào các axit thích hợp. Sau đó dùng các dung dịch chuẩn để định phân dung dịch cần nghiên cứu. Từ đó có thể biết được sự có mặt và lượng chứa của các nguyên tố trong mẫu phân tích. Độ chính xác của phân tích hóa học từ 0,1 - 0,01% trọng lượng.

b-Phân tích quang phổ :

Dem so sánh vạch quang phổ của mẫu nghiên cứu với các bản mẫu có sẵn sẽ biết được thành phần và lượng chứa của các nguyên tố có trong đó. Vị trí và màu sắc của vạch cho biết kết quả về định tính, độ đen của vạch cho biết kết quả định lượng. Phương pháp quang phổ có ưu điểm là : độ nhạy cao 0,001-0,0001% trọng lượng , cho kết quả nhanh và rẻ tiền .

#### **4-Xác định thành phần các bon bằng tia lửa khi mài :**

Các bon là thành phần quan trọng nhất trong thép, sự biến đổi của nó làm thay đổi tính chất của thép . Có thể xác định một cách gần đúng thành phần các bon bằng tia lửa khi mài thép. Với thép các bon thấp tia lửa khi mài ít, tia lửa hẹp và dài. Khi lượng các bon càng tăng lên tia lửa càng rộng ra và ngắn lại. Phương pháp này được sử dụng rộng rãi trong sản xuất. Độ chính xác từ 0,1-0,2%C phụ thuộc vào khả năng quan sát của người công nhân.

#### **5-Các phương pháp đo cơ lý tính của kim loại :**

Cơ lý tính của kim loại là các chỉ tiêu quan trọng cần phải xác định để sử dụng vật liệu hợp lý . Các phương pháp này được xác định trên các máy móc của phòng thí nghiệm.

#### **6-Các phương pháp vật lý kiểm tra tật hổng trong kim loại :**

Các tật hổng như nứt, rỗ, bọt khí, lẫn xỉ... nằm trong kim loại rất nguy hiểm . Cần phải phát hiện chúng bằng các phương pháp không phá hủy kim loại. Trong kỹ thuật ta dùng các tia đâm xuyên như rơn ghen, gam ma... Có thể dùng siêu âm và nhiễm từ để phát hiện các khuyết tật này. Tia rơn ghen có khả năng phát hiện được tật hổng trong chi tiết thép dày 20 cm. Tia gam ma kiểm tra được vật có chiều dày lớn hơn.

### **1.2.CẤU TẠO CỦA KIM LOẠI LỎNG VÀ ĐIỀU KIỆN KẾT TINH :**

Phần lớn các kim loại được luyện bằng phương pháp nấu chảy lỏng sau đó đem đúc thành hình sản phẩm hay bán thành phẩm. Chất lượng của vật đúc phụ thuộc phần lớn vào quá trình chuyển từ trạng thái lỏng sang trạng thái rắn, đó là quá trình kết tinh . Định nghĩa : kết tinh là quá trình hình thành mạng tinh thể từ trạng thái lỏng và thường gọi là kết tinh lần thứ nhất .

#### **1.2.1.Cấu tạo của kim loại lỏng :**

Trong kim loại lỏng các nguyên tử không sắp xếp hỗn loạn như ở trạng thái khí. Song cũng không sắp xếp trật tự như ở trạng thái rắn. Nếu xem xét biểu hiện bên ngoài thì kim loại lỏng gần với kim loại rắn hơn so với trạng thái khí.

Cấu tạo của kim loại lỏng có những đặc điểm sau :

- Liên kết vẫn là liên kết kim loại như ở trạng thái rắn nhưng có yếu hơn .
- Các nguyên tử luôn có xu hướng sắp xếp trật tự, tức là mỗi nguyên tử luôn giữ khoảng cách nhất định với các nguyên tử bên cạnh và luôn có một số nguyên tử nhất định bao quanh nó.



-Chuyển động nhiệt của nguyên tử ở trạng thái lỏng rất lớn, do đó xu hướng sắp xếp có trật tự luôn bị phá hủy và thay bằng sự sắp xếp có trật tự mới.

-Trong kim loại lỏng có điện tử tự do.

Tính chất của kim loại lỏng :

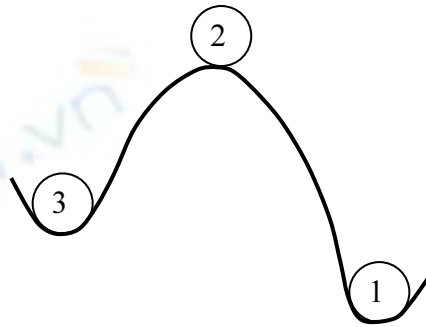
-Thể tích của kim loại lỏng và rắn khác nhau không nhiều lắm, phần lớn kim loại khi nóng chảy thể tích tăng lên từ 2-6%, trừ Ga và Bi thể tích giảm 30%.

-Nhiệt nóng chảy bé, chỉ bằng 5-10% nhiệt hóa hơi.

-Gần điểm nóng chảy nhiệt dung kim loại lỏng chỉ khác kim loại rắn 10% trong khi đó kim loại rắn và khí khác nhau 25%.

### 1.2.2.Điều kiện năng lượng của quá trình kết tinh :

Trong tự nhiên mọi quá trình tự phát đều xảy ra theo chiều giảm năng lượng, tức là theo chiều ở trạng thái mới có năng lượng dự trữ nhỏ hơn. Ví dụ : một hòn bi đặt tại vị trí A luôn có xu hướng lăn xuống vị trí B ổn định hơn . Trong trường hợp này năng lượng dự trữ chính là thế năng của hòn bi.



Hình 1.12- Sơ đồ biểu thị vị trí ổn định (1), không ổn định(2) và giả ổn định (3)

Trong hệ thống vật chất gồm chuyển động của các chất điểm (nguyên tử, phân tử) thì năng lượng dự trữ được đặc trưng bằng năng lượng tự do F.

$$F = U - TS$$

Trong đó : -U là nội năng của hệ thống

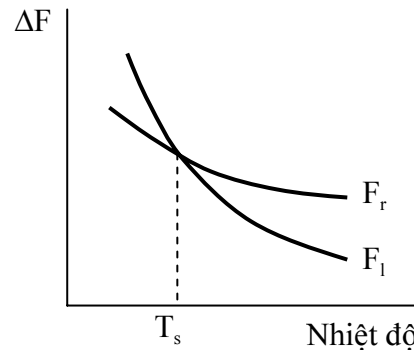
-S là entropi

-T là nhiệt độ tuyệt đối  $^{\circ}\text{K}$

Năng lượng tự do thay đổi theo nhiệt độ và các yếu tố khác. Từ biểu đồ về mối quan hệ giữa năng lượng tự do và nhiệt độ ta thấy :

-Với  $T > T_s$  ta có  $F_r > F_l$  do đó kim loại tồn tại ở trạng thái lỏng

-Với  $T < T_s$  ta có  $F_r < F_l$ , do đó kim loại tồn tại ở trạng thái rắn.



Hình 1.13- Sơ đồ biến đổi năng lượng tự do  $\Delta F$  của trạng thái lỏng và rắn theo nhiệt độ

Như vậy khi làm nguội kim loại lỏng xuống dưới nhiệt độ  $T_s$  sẽ có quá trình kết tinh xảy ra . Tại nhiệt độ  $T_s$  ta có  $F_r = F_l$ , năng lượng tự do của hai trạng thái bằng nhau, quá trình kết tinh chưa xảy ra, nghĩa là giữa kim loại rắn và kim loại lỏng có cân bằng động . Điều đó có nghĩa là : nếu có một lượng kim loại lỏng kết tinh thì cũng có một lượng như vậy kim loại rắn nóng chảy . Chỉ ở nhiệt độ  $T < T_s$  , để  $F_r < F_l$  rõ rệt sự kết tinh mới xảy ra .  $T_s$  được gọi là nhiệt độ kết tinh lý thuyết.

Như vậy nhiệt độ kết tinh thực tế luôn thấp hơn  $T_s$  hiện tượng này gọi là sự quá nguội và hiệu số giữa hai nhiệt độ đó gọi là độ quá nguội, ký hiệu  $\Delta T$ . Phần lớn các kim

loại kết tinh với độ quá nguội  $\Delta T_{nhỏ}$ , khoảng từ  $2 \div 5$  °C. Tuy nhiên cũng có kim loại kết tinh với độ quá nguội lớn (Stibi có  $\Delta T = 41$ °C).

Vậy điều kiện năng lượng để xảy kết tinh là phải làm nguội kim loại lỏng tới nhiệt độ thấp hơn  $T_s$  hay kim loại lỏng chỉ kết tinh với sự quá nguội nhất định. Ta cũng có thể lý luận tương tự như vậy với quá trình nóng chảy và chuyển biến thù hình. Do độ quá nguội và độ quá nung của phần lớn kim loại bé nên có thể dựa vào  $T_s$  để xác định nhiệt độ nóng chảy hay kết tinh của kim loại.

### 1.2.3. Hai quá trình của sự kết tinh :

Khi hạ nhiệt độ kim loại lỏng xuống thấp hơn nhiệt độ kết tinh lý thuyết  $T_s$ , quá trình kết tinh sẽ xảy ra. Sự kết tinh thực hiện được là nhờ có hai quá trình sau :

- Trong kim loại lỏng xuất hiện những trung tâm kết tinh có kích thước rất nhỏ, gọi là mầm kết tinh. Quá trình này gọi là tạo mầm.

- Các mầm này sẽ phát triển lên và tạo thành hạt tinh thể. Quá trình này gọi là phát triển mầm.

#### 1- Quá trình tạo mầm (trung tâm kết tinh) :

Tạo mầm là quá trình tạo nên các phần tử rắn có cấu tạo tinh thể, có kích thước rất nhỏ trong lòng khối kim loại lỏng, chúng là những mầm mống đầu tiên để phát triển lên thành hạt tinh thể.

Theo đặc tính phát sinh mầm được chia làm hai loại : mầm tự sinh (đồng pha) và mầm không tự sinh (ký sinh)

a- Mầm tự sinh (mầm đồng pha) : Là mầm sinh ra trực tiếp từ kim loại lỏng không cần sự giúp đỡ của bề mặt các hạt rắn có sẵn trong đó .

Tại nhiệt độ thấp hơn  $T_s$  các nhóm nguyên tử sắp xếp có trật tự trong kim loại lỏng có kích thước lớn hơn một giá trị xác định ứng với mỗi nhiệt độ sẽ cố định lại, không tan đi nữa và có điều kiện phát triển lên thành hạt tinh thể.

Ta xét điều kiện năng lượng của sự tạo mầm này. Giả sử rằng tại nhiệt độ nào đó nhỏ hơn  $T_s$  trong kim loại lỏng xuất hiện  $n$  nhóm nguyên tử sắp xếp trật tự có thể tích  $v$ . Tại nhiệt độ này ta có  $F_r < F_l$ . Gọi  $\Delta F_v = F_l - F_r$ , là hiệu số năng lượng tự do giữa kim loại lỏng và kim loại rắn tính cho một đơn vị thể tích kim loại lỏng thì  $\Delta F_v < 0$  khi  $T < T_s$ . Khi tạo ra  $n$  nhóm nguyên tử trật tự nói trên thì năng lượng của hệ thống giảm đi một lượng là  $n v \Delta F_v$ . Nhưng do tạo nên bề mặt tiếp xúc giữa rắn và lỏng nên năng lượng tự do sẽ tăng thêm một lượng là  $n s \sigma$ . Trong đó :  $s$  là diện tích tiếp xúc giữa nhóm nguyên tử với kim loại lỏng, còn  $\sigma$  là sức căng bề mặt trên một đơn vị diện tích. Khi tạo ra  $n$  nhóm nguyên tử sắp xếp có trật tự trên thì năng lượng cả hệ thống biến đổi một lượng là:

$$\Delta F = - n v \Delta F_v + n s \sigma$$

Coi các nhóm nguyên tử trật tự có dạng hình cầu bán kính  $r$ , ta có:

$$\Delta F = - \frac{4}{3} \pi r^3 n \Delta F_v + 4 \pi r^2 n \sigma \quad (1)$$

Ở nhiệt độ nhất định nhỏ hơn  $T_s$  thì  $\Delta F_v$  và  $\sigma$  là hằng số nên  $\Delta F = f(r)$ . Bằng thực nghiệm người ta đã vẽ được đồ thị về sự phụ thuộc giữa năng lượng tự do và bán kính  $r$  của nhóm nguyên tử trật tự. Từ đồ thị đó ta nhận thấy :

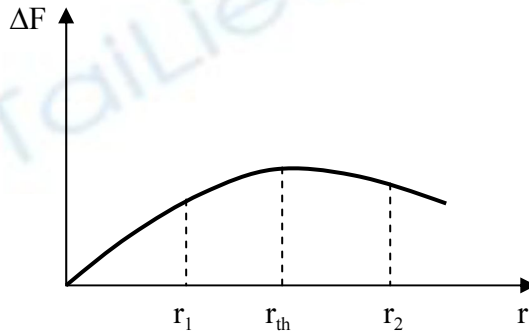
-Nếu nhóm nguyên tử trật tự có  $r_1 < r_{th}$  thì khi nó phát triển lên làm cho năng lượng của hệ thống tăng lên, không phù hợp với tự nhiên nên sẽ tan đi.

-Nếu nhóm nguyên tử trật tự có  $r_2 > r_{th}$  khi phát triển lên làm giảm năng lượng của hệ thống và nó trở thành mầm thật sự.

Kết luận : tại một nhiệt độ nhất định nhỏ hơn  $T_s$  trong kim loại lỏng có vô số nhóm nguyên tử sắp xếp trật tự có kích thước khác nhau. Chỉ những nhóm nào có kích thước lớn hơn một giá trị tới hạn nào đó mới trở thành mầm thật sự, còn những nhóm khác tan đi.

Ta có thể tính bán kính tới hạn như sau : tìm giá trị cực đại của biểu thức (1) và tính được  $r_{th} = \frac{2\sigma}{\Delta F_v}$  .(2) , giá trị  $r = 0$  không có ý nghĩa. Khi nhiệt độ kết tinh càng thấp

( $\Delta F_v$  lớn) thì  $r_{th}$  càng nhỏ và càng có nhiều nhóm nguyên tử trật tự có kích thước lớn hơn  $r_{th}$  để trở thành mầm. Do đó sự kết tinh xảy ra dễ dàng hơn. Tại  $T = T_s$  ta có  $r_{th} = \infty$ , quá trình sinh mầm không xảy ra .



Hình 1.14 - Quan hệ giữa bán kính mầm và  $\Delta F$

b-Mầm không tự sinh (ký sinh) :

Là mầm kết tinh được tạo nên trên bề mặt của các hạt rắn có sẵn trong kim loại lỏng.

Trong kim loại lỏng không thể nguyên chất tuyệt đối được, nên bao giờ cũng có tạp chất. Đó là các chất lẫn lộn không tan như : bụi than, bụi tường lò, các ôxyt, nitrit... Chúng giúp cho quá trình sinh mầm trên bề mặt của chúng xảy ra dễ dàng hơn. Vai trò của mầm không tự sinh rất quan trọng trong thực tế và do vậy quá trình kết tinh xảy ra rất nhanh chóng. Mầm không tự sinh bao gồm :

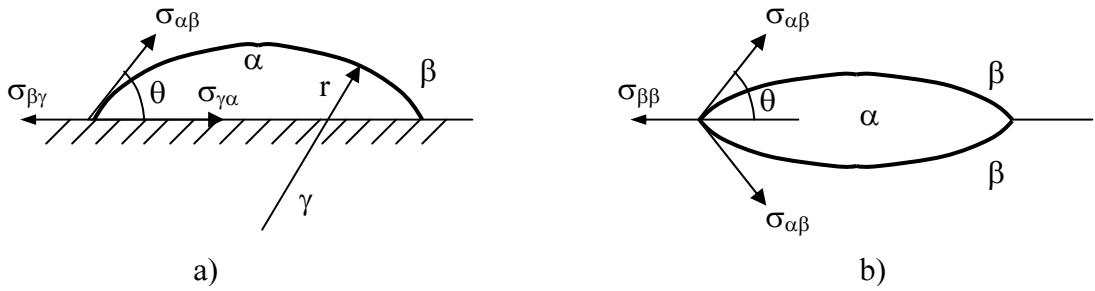
-Các phần tử vật lẫn lộn không tan rất nhỏ như ôxyt, bụi tường lò, nitrit, hydrit... có kiểu mạng và kích thước khác nhau với kim loại kết tinh.

-Các hạt rất nhỏ có khả năng hấp thụ trên bề mặt của chúng những nguyên tử kim loại kết tinh.

-Thành khuôn đúc, đặc biệt là các vết nứt và chỗ lõm trên thành khuôn.

**2-Quá trình phát triển mầm :**

Sau khi các mầm được tạo ra chúng sẽ tiếp tục phát triển lên thành hạt tinh thể. Quá trình này làm cho năng lượng tự do của hệ giảm đi phù hợp với tự nhiên (là quá trình tự phát). Ta có thể minh họa quá trình này bằng cơ cấu mầm hai chiều (Cosen) và cơ cấu mầm kết tinh có lệch xoắn.



Hình 1.15- Mầm ký sinh dạng chỏm cầu (a) và dạng thấu kính (b).

#### 1.2.4. Sự tạo thành hạt tinh thể và hình dáng hạt kim loại đúc :

##### 1-Sự tạo thành hạt tinh thể :

Sự kết tinh bao gồm quá trình tạo mầm và sau đó các mầm phát triển lên. Khi các mầm sinh ra đầu tiên phát triển lên, trong kim loại lỏng vẫn tiếp tục sinh ra các mầm mới. Quá trình cứ tiếp tục như vậy cho đến khi toàn bộ kim loại lỏng kết tinh hết. Chúng ta có thể hình dung sự tạo thành hạt tinh thể như sau. Giả sử rằng trong một đơn vị thể tích kim loại lỏng nào đó trong một giây sinh ra ba mầm. Ở giây thứ hai ba mầm sinh ra ở giây thứ nhất phát triển lên và sinh ra ba mầm mới. Quá trình như vậy cứ tiếp tục xảy ra cho đến khi toàn bộ khối kim loại lỏng kết tinh ở giây thứ n. Do sự định hướng của mầm trong không gian là ngẫu nhiên nên phương mạng giữa các hạt lệch nhau. Các hạt tạo thành có kích thước không đồng đều, những hạt do mầm sinh ra trước sẽ lớn hơn vì có điều kiện phát triển. Những hạt do các mầm càng sinh ra sau cùng càng ít có điều kiện phát triển nên có thể nhỏ hơn.

##### 2-Hình dáng của hạt kim loại đúc:

Hạt kim loại nhận được sau khi đúc có thể có nhiều hình dáng rất khác nhau. Trong thực tế có thể gặp các hình dáng sau đây :

- Hạt dạng cầu : do mầm kết tinh phát triển đều theo mọi phương.
- Hạt dạng tấm : do mầm phát triển mạnh theo một mặt đã cho.
- Hạt dạng kim : nhận được khi làm nguội rất nhanh.
- Hạt dạng đa cạnh : do các hạt phát triển lên chèn ép lẫn nhau. Đây là dạng hạt thường gặp nhất.

#### 1.2.5. Sự kết tinh hình nhánh cây, kích thước hạt kim loại :

##### a-Sự kết tinh hình nhánh cây :

Sự phát triển của tinh thể cũng có tính dị hướng, tức là theo các phương và mặt có mật độ lớn mầm phát triển mạnh hơn các phương và mặt có mật độ bé. Mặt khác tinh thể còn phát triển mạnh theo phương tản nhiệt, nên ban đầu của sự kết tinh, tinh thể có dạng hình nhánh cây. Quan sát kỹ quá trình kết tinh ta nhận thấy : đầu tiên mầm phát triển theo phương có lợi nhất tạo nên trục thứ nhất. Sau đó từ trục thứ nhất tạo ra trục thứ hai làm với trục thứ nhất một góc nào đó. Rồi từ trục hai phát triển ra trục ba...