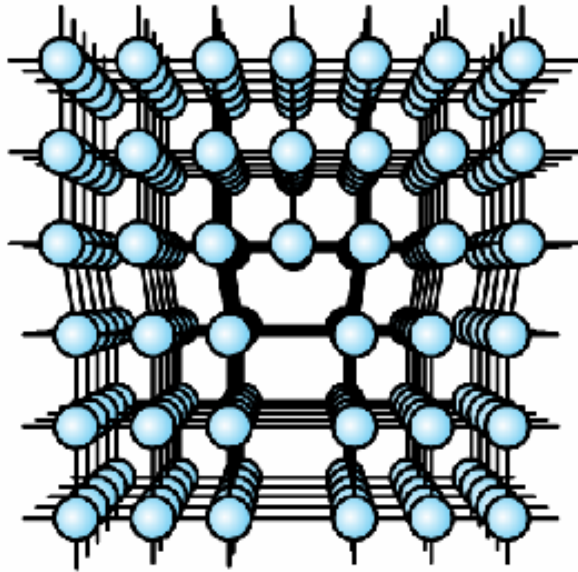




**Ths. Lê Văn Cương - Chủ biên**



# VẬT LIỆU KỸ THUẬT

**ĐẠI HỌC HÀNG HẢI - NĂM 2006**



## MỤC LỤC

|                   |  |            |
|-------------------|--|------------|
|                   | <b>Mục lục</b>   |            |
|                   | <b>Bài mở đầu</b>  | <b>3</b>   |
| <b>Phần I.</b>    | <b>Vật liệu học cơ sở</b>                                | <b>5</b>   |
| <i>Chương 1.</i>  | <i>Cấu tạo tinh thể</i>                                  | <i>5</i>   |
| <i>Chương 2.</i>  | <i>Kết tinh từ thể lỏng của kim loại</i>                 | <i>37</i>  |
| <i>Chương 3.</i>  | <i>Cấu tạo hợp kim và giản đồ trạng thái</i>             | <i>59</i>  |
| <i>Chương 4.</i>  | <i>Biến dạng dẻo và cơ tính của kim loại</i>             | <i>76</i>  |
| <b>Phần II.</b>   | <b>Nhiệt luyện thép</b>                                  | <b>96</b>  |
| <i>Chương 5.</i>  | <i>Giản đồ trạng thái sắt - cacbon</i>                   | <i>96</i>  |
| <i>Chương 6.</i>  | <i>Các chuyển biến xảy ra khi nung và làm nguội thép</i> | <i>106</i> |
| <i>Chương 7.</i>  | <i>Các phương pháp nhiệt luyện thép</i>                  | <i>128</i> |
| <i>Chương 8.</i>  | <i>Hóa bền bề mặt thép</i>                               | <i>156</i> |
| <b>Phần III.</b>  | <b>Các vật liệu kim loại</b>                             | <b>173</b> |
| <i>Chương 9.</i>  | <i>Gang và nhiệt luyện gang</i>                          | <i>173</i> |
| <i>Chương 10.</i> | <i>Thép cacbon</i>                                       | <i>186</i> |
| <i>Chương 11.</i> | <i>Thép hợp kim</i>                                      | <i>195</i> |
| <i>Chương 12.</i> | <i>Hợp kim màu</i>                                       | <i>242</i> |
|                   | <b>Câu hỏi ôn thi</b>                                    | <b>255</b> |
|                   | <b>Tài liệu tham khảo</b>                                |            |



## BÀI MỞ ĐẦU

Vật liệu học là môn khoa học khảo sát bản chất của vật liệu, mối quan hệ giữa cấu trúc và tính chất của chúng, từ đó đề ra phương pháp chế tạo và sử dụng thích hợp.

### 1. Mục đích, yêu cầu, nội dung môn học và các môn học liên quan

#### 1.1. Mục đích

- Trang bị những kiến thức cơ bản về cấu trúc, tổ chức và tính chất kim loại.
- Các phương pháp gia công nhiệt luyện áp dụng cho các kim loại (thép và gang).
- Các loại vật liệu kim loại: công dụng, thành phần, tính chất và kí hiệu.

#### 1.2. Yêu cầu

- Hiểu các quy luật chuyển biến cơ bản của kim loại
- Biết chọn và thay thế vật liệu theo các tiêu chuẩn khác nhau
- Lập được các quy trình gia công nhiệt luyện cho các chi tiết điển hình
- Hiểu được kí hiệu các vật liệu kim loại cơ bản

#### 1.3. Nội dung môn học

##### *Phần 1: Lí thuyết về kim loại*

Chương 1: Cấu tạo tinh thể

Chương 2: Sự kết tinh

Chương 3: Cấu tạo hợp kim và giản đồ trạng thái

Chương 4: Biến dạng kim loại

##### *Phần 2: Nhiệt luyện thép*

Chương 5: Hợp kim sắt - cacbon

Chương 6: Các phản ứng xảy ra khi nung và làm nguội thép

Chương 7: Nhiệt luyện thép

Chương 8: Hóa bền bề mặt thép

##### *Phần 3: Các vật liệu kim loại*

Chương 9: Gang và nhiệt luyện gang

Chương 10: Thép cacbon

Chương 11: Thép hợp kim

Chương 12: Kim loại và hợp kim màu



### **1.4. Các môn học liên quan**

- Lý thuyết nhiệt động
- Hóa lí và vật lí chất rắn

### **2. Sơ lược về lịch sử phát triển**

- \* Giai đoạn sử dụng vật liệu tự nhiên
- \* Giai đoạn sử dụng vật liệu theo kinh nghiệm:
  - Chưa có cơ sở khoa học
  - Tác động đến vật liệu theo cơ sở khoa học

### **3. Các phương pháp nghiên cứu môn học**

- Phương pháp thử cơ tính
- Phương pháp hóa phân tích
- Phương pháp phân tích quang phổ
- Phương pháp huỳnh quang

### **4. Tài liệu tham khảo**

- Kim loại học và nhiệt luyện - Nghiêm Hùng
- Vật liệu học - Arrmaxor - Chu Thiên Trường
- Vật liệu học - Lê Công Dưỡng



## Phần I. VẬT LIỆU HỌC CƠ SỞ

### Chương 1. CẤU TẠO TINH THỂ

Tùy theo điều kiện tạo thành (nhiệt độ, áp suất  $\square$ ) và tương tác giữa các phần tử cấu thành (dạng lực liên kết  $\square$ ), vật chất tồn tại ở trạng thái rắn, lỏng và khí (hơi). Tính chất của vật rắn (vật liệu) phụ thuộc chủ yếu vào lực liên kết và cách sắp xếp của các phần tử cấu tạo nên chúng. Trong chương này các khái niệm cơ bản sẽ được đề cập là: cấu tạo nguyên tử, các dạng liên kết và cấu trúc tinh thể, không tinh thể của vật rắn.

#### 1.1. CẤU TẠO NGUYÊN TỬ VÀ CÁC DẠNG LIÊN KẾT TRONG VẬT RẮN

Trong phần này khảo sát những khái niệm cơ bản về cấu tạo nguyên tử và các dạng liên kết giữa chúng, những yếu tố này đóng vai trò quyết định với cấu trúc và tính chất của vật rắn, vật liệu.

##### 1.1.1. Cấu tạo nguyên tử

Nguyên tử theo quan điểm cũ bao gồm hạt nhân và các điện tử quay chung quanh theo những quỹ đạo xác định. Tuy nhiên với mô hình đó không giải quyết được các khó khăn nảy sinh, đặc biệt là việc xác định chính xác quỹ đạo của điện tử. Áp dụng cơ học sóng để nghiên cứu cấu tạo nguyên tử chúng ta thấy rằng theo hệ thức bất định Heisenberg:

$$\begin{aligned}\Delta x \cdot \Delta p &\geq h \\ \Delta x \cdot \Delta v &\geq \frac{h}{m}\end{aligned}\tag{1.1}$$

Trong đó:

$\Delta x$ : độ bất định trong phép đo tọa độ vi hạt

$\Delta p$ : độ bất định trong phép đo xung lượng vi hạt

$\Delta v$ : độ bất định trong phép đo vận tốc vi hạt



Áp dụng nguyên lý cho điện tử trong nguyên tử chúng ta thấy nếu muốn xác định vị trí của điện tử thì  $\Delta x \leq 10^{-4} \mu\text{m}$  (là cỡ kích thước nguyên tử) khi đó  $\Delta v$  sẽ là  $\geq 10^6 \text{ m/s}$  tức là lớn hơn tốc độ chuyển động của điện tử trong nguyên tử theo mô hình cổ điển. Vì vậy không thể có khái niệm quỹ đạo của điện tử mà chỉ có thể nói đến xác suất tồn tại nó trong một thể tích nào đó.

Theo quan điểm của cơ học lượng tử sau khi giải phương trình sóng Schrodinger với các mô hình nguyên tử cụ thể đã giải quyết được vấn đề cấu tạo lớp vỏ điện tử của nguyên tử. Với một nguyên tử cụ thể theo mô hình với số điện tử  $z$  xác định có cấu tạo lớp vỏ điện tử được thể hiện qua bốn số lượng tử là:

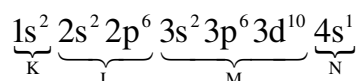
- Số lượng tử chính  $n = 1, 2, 3, \dots$  xác định mức năng lượng của lớp vỏ điện tử. Ví dụ:  $n = 1$  là lớp K,  $n = 2$  là lớp L,  $n = 3$  là lớp M và  $n = 4$  là lớp N.

- Số lượng tử phương vị  $l = 0, 1, 2, \dots, n-1$  xác định số phân lớp trong cùng một mức năng lượng. Ví dụ:  $l = 0, 1, 2, 3$  tương ứng với các phân lớp s, p, d, f.

- Số lượng tử từ  $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l$  xác định khả năng định hướng của mô men xung lượng quỹ đạo theo từ trường bên ngoài.

- Số lượng tử Spin  $S = \pm 1/2$  xác định khả năng định hướng ngược chiều nhau của véc tơ mô men xung lượng. Ngoài ra việc phân bố các điện tử với một trạng thái  $(n, l, m)$  xác định phải tuân theo nguyên lý loại trừ Pauli là chỉ có thể có hai điện tử với Spin ngược nhau. Dựa vào nguyên lý này có thể dự đoán được số điện tử cho phép trên các mức năng lượng (lớp và phân lớp) qua đó viết được cấu hình lớp vỏ điện tử của nguyên tử theo số thứ tự  $z$  của chúng trong hệ thống tuần hoàn Meldeleev (cũng là số điện tử của nguyên tử đó trong mô hình lý tưởng).

Ví dụ: Cu có  $z = 29$  ta có cấu tạo lớp vỏ điện tử là:



Ở đây điện tử vẫn có thể chuyển từ mức năng lượng này sang mức năng lượng khác (thuộc lớp hoặc phân lớp). Khi đó chúng sẽ phát ra hoặc thu vào một năng lượng dưới dạng lượng tử ánh sáng.



Theo số lượng tử chính  $n$  ta có bảng số lượng điện tử có thể (số trạng thái năng lượng) trên một số lớp và phân lớp như sau:

|             |     |
|-------------|-----|
| 1s          | - K |
| 2s 2p       | - L |
| 3s 3p 3d    | - M |
| 4s 4p 4d 4f | - N |

**Bảng 1.1.** Số lượng điện tử có thể trên các lớp và phân lớp  
(số trong ngoặc là số trạng thái có thể)

| Số lượng tử chính $n$ | Ký hiệu lớp điện tử | Ký hiệu phân lớp | Số điện tử có thể |     |
|-----------------------|---------------------|------------------|-------------------|-----|
|                       |                     |                  | Phân lớp          | Lớp |
| 1                     | K                   | s                | 2 (1)             | 2   |
| 2                     | L                   | s                | 2 (1)             | 8   |
|                       |                     | p                | 6 (3)             |     |
| 3                     | M                   | s                | 2 (1)             | 18  |
|                       |                     | p                | 6 (3)             |     |
|                       |                     | d                | 10 (5)            |     |
| 4                     | N                   | s                | 2 (1)             | 32  |
|                       |                     | p                | 6 (3)             |     |
|                       |                     | d                | 10 (5)            |     |
|                       |                     | f                | 14 (7)            |     |

### 1.1.2. Các dạng liên kết trong vật rắn

Theo điều kiện bên ngoài (P, T) vật chất tồn tại ba trạng thái: rắn, lỏng, hơi.

- Trạng thái rắn: có trật tự (trật tự xa)
- Trạng thái lỏng: có trật tự (trật tự gần)
- Trạng thái hơi: hỗn độn, không có trật tự

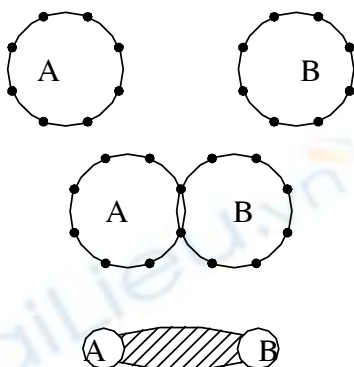
Độ bền của vật liệu ở trạng thái rắn phụ thuộc vào dạng liên kết của vật rắn.

#### 1.1.2.1. Liên kết cộng hoá trị

Đây là dạng liên kết mà các nguyên tử tham gia liên kết góp chung điện tử ở lớp ngoài cùng, tạo ra lớp ngoài cùng đạt trị số bão hoà về số điện tử có thể

( $s^2p^6$ ). Như vậy khi tạo liên kết cộng hoá trị sẽ tạo ra lớp ngoài cùng của nguyên tử có tám điện tử, với dạng liên kết như vậy nó có các đặc điểm sau:

- Là loại liên kết có định hướng, nghĩa là xác suất tồn tại các điện tử tham gia liên kết lớn nhất theo phương nối tâm các nguyên tử (hình 1.1).



**Hình 1.1.** Liên kết cộng hoá trị trong khí  $Cl_2$

- Cường độ liên kết phụ thuộc rất mạnh vào mức độ liên kết của các điện tử hoá trị với hạt nhân. *Ta có thể thấy rõ, các bon trong dạng thù hình kim cương có liên kết cộng hoá trị rất mạnh do các điện tử hoá trị liên kết trực tiếp với hạt nhân. Ngược lại với Sn do các điện tử hoá trị nằm rất xa hạt nhân nên có liên kết cộng hoá trị rất yếu.*

- Liên kết cộng hoá trị có thể xảy ra giữa các nguyên tử của cùng một nguyên tố (*đồng cực*) thuộc các nhóm từ IV A đến VII A (ví dụ  $Cl_2$ ,  $F_2$ ,  $Br_2$ , ...) hoặc các nguyên tử của các nguyên tố khác nhau (*dị cực*) thuộc các nhóm III A và V A hoặc II A và VI A ( $GaAs$ ,  $GaP$ , ...).

### 1.1.2.2. Liên kết Ion

Là loại liên kết mạnh, hình thành bởi lực hút giữa các điện tích trái dấu (lực hút tĩnh điện Coulomb). Liên kết này xảy ra do các nguyên tử cho bớt điện tử lớp ngoài cùng trở thành Ion dương hoặc nhận thêm điện tử để trở thành Ion âm. *Vì vậy liên kết Ion thường xảy ra và thể hiện rõ rệt với các nguyên tử có nhiều điện tử hoá trị (á kim điển hình) và các nguyên tử có ít điện tử hoá trị (kim loại điển hình). Ví dụ  $LiF$ ,  $NaCl$ ,  $Al_2O_3$ ,  $Fe_2O_3$ , ...*

Cũng giống liên kết cộng hoá trị, liên kết Ion càng mạnh (bền vững) khi nguyên tử chứa càng ít điện tử. Và nó là dạng liên kết không định hướng.



Năng lượng liên kết có thể tính bằng công thức:

$$U = -\frac{A}{r} \quad (1.2)$$

Và lực liên kết:

$$F = \frac{du}{dr} = -B \cdot \frac{1}{r^2} \quad (1.3)$$

Trong đó:

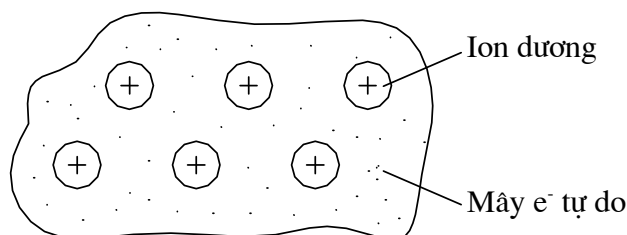
A và B: Các hằng số phụ thuộc vào phân tử liên kết

r: Khoảng cách giữa các phân tử liên kết

Dấu (-) chỉ rằng năng lượng và lực liên kết có xu hướng làm giảm khoảng cách giữa các phân tử liên kết.

### 1.1.2.3. Liên kết kim loại

Đặc điểm chung của các nguyên tử nguyên tố kim loại là có ít điện tử hoá trị ở lớp ngoài cùng, do đó chúng dễ mất (bứt ra) điện tử tạo thành các Ion dương bị bao quanh bởi các mây điện tử tự do. Các ion dương tạo thành một mạng xác định, đặt trong không gian điện tử tự do chung, đó là mô hình của liên kết kim loại.



**Hình 1.2.** Liên kết kim loại

*Liên kết kim loại thường rõ rệt với các nguyên tử có ít điện tử hoá trị (do dễ mất điện tử). Các nguyên tử thuộc nhóm I có một điện tử hoá trị là các kim loại điển hình, thể hiện rõ rệt nhất liên kết kim loại. Càng dịch sang phải bảng hệ thống tuần hoàn, tính đồng hoá trị trong liên kết tăng lên và xuất hiện liên kết hỗn hợp “kim loại - đồng hoá trị”. Cấu trúc tinh thể của các chất với liên kết kim loại có tính đối xứng rất cao.*



Liên kết kim loại là dạng hỗn hợp: gồm lực hút giữa các điện tích trái dấu và lực đẩy giữa các điện tích cùng dấu.

Năng lượng liên kết trong liên kết kim loại có thể tính bằng công thức:

$$U = -\frac{A}{r_I} + \frac{B}{r_{II}^2} + \frac{C}{r_{III}^3} \quad (1.4)$$

Với A, B, C là các hệ số

I: Năng lượng hút giữa các điện tích trái dấu

II, III: Năng lượng đẩy giữa các điện tích cùng dấu.

#### 1.1.2.4. Liên kết hỗn hợp

Thực tế, ít khi tồn tại những dạng liên kết thuần túy chỉ có một kiểu liên kết. Liên kết đồng hoá trị thuần túy chỉ xảy ra trong trường hợp đồng cực. Khi liên kết dị cực, điện tử hoá trị góp chung, tham gia liên kết đồng thời chịu hai tác dụng trái ngược:

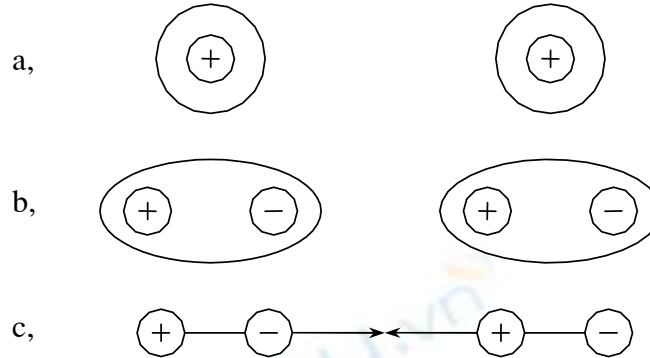
- Bị hút bởi hạt nhân của mình
- Bị hút bởi hạt nhân nguyên tử thứ hai để tạo điện tử chung.

Khả năng hút điện tử của hạt nhân được gọi là tính âm điện của nguyên tử. Sự khác nhau về tính âm điện của các nguyên tử tham gia liên kết trong liên kết đồng hoá trị làm cho đám mây điện tử bị biến dạng và tạo ra các ngẫu cực điện và là tiền đề cho liên kết ion. Tính chất của liên kết ion càng lớn khi sự sai khác về tính âm điện giữa các nguyên tử càng cao. Do đó có thể khẳng định rằng tất cả các liên kết dị cực đều là hỗn hợp giữa liên kết ion và đồng hoá trị.

#### 1.1.2.5. Liên kết yếu (liên kết Vander Waals)

*Liên kết đồng hoá trị cho phép lý giải sự tạo thành những phân tử như nước hoặc polyeten ( $C_2H_4$ )<sub>n</sub> ... nhưng không giải thích được sự hình thành các phân tử rắn từ các phân tử trung hoà (nước đá, polyme ...). Ta đã biết trong các phân tử có liên kết đồng hoá trị, do sự khác nhau về tính âm điện của các nguyên tử sẽ dẫn đến trọng tâm của điện tích dương và điện tích âm không trùng nhau, ngẫu cực điện hình thành, phân tử trung hoà bị phân cực. Liên kết Vander Waals là liên kết do hiệu ứng hút nhau giữa các nguyên tử hoặc phân tử bị phân cực (hình 1.3). Liên kết này là loại liên kết rất yếu, dễ bị phá vỡ bởi ba động nhiệt (khi*

tăng nhiệt độ). Vì vậy những vật rắn có liên kết Vander Waals có nhiệt độ nóng chảy rất thấp (nước đá nóng chảy ở  $0^{\circ}\text{C}$ ).



**Hình 1.3.** Quá trình tạo thành liên kết Vander Waals

a: Trung hoà

b: Phân cực

c: Tạo liên kết

Năng lượng liên kết:

$$U = -\frac{A}{r^6} \quad (1.5)$$

Và lực liên kết:

$$F = -\frac{B}{r^7} \quad (1.6)$$

## 1.2. CẤU TẠO TINH THỂ LÝ TƯỞNG CỦA VẬT RẮN

Các vật rắn trong tự nhiên hiện nay được phân thành hai nhóm là vật rắn tinh thể và vật vô định hình. Việc phân loại này để tạo sự thuận lợi cho quá trình mô hình hoá khi nghiên cứu vật liệu. Các vật liệu kim loại là loại vật liệu kết cấu cơ bản hiện nay chủ yếu là các vật có cấu tạo tinh thể. Do đó để nghiên cứu về cấu tạo của chúng trước hết chúng ta cần tìm hiểu về khái niệm vật tinh thể và vật vô định hình.

### 1.2.1. Vật tinh thể và vật vô định hình

Theo quan điểm của vật lý chất rắn, các vật rắn được gọi là vật tinh thể khi chúng đồng thời thỏa mãn các điều kiện sau:

- Là những vật luôn tồn tại với một hình dáng xác định trong không gian, hình dáng bên ngoài của chúng thể hiện một phần các tính chất bên trong.



- Vật tinh thể luôn luôn tồn tại một nhiệt độ nóng chảy (hoặc kết tinh) xác định. Có nghĩa là khi nung nóng vật tinh thể luôn có một nhiệt độ chuyển biến từ trạng thái rắn sang trạng thái lỏng xác định. Điều này cũng đúng khi làm nguội vật tinh thể từ thể lỏng.

- Vật tinh thể khi bị đập gãy (phá huỷ), sẽ bị gãy theo các mặt xác định và bề mặt vết gãy không nhẵn bóng. Tính chất này thể hiện rõ rệt sự khác biệt về tính chất của vật tinh thể với vật vô định hình.

- Vật tinh thể luôn có tính dị hướng, có nghĩa là tính chất của nó (cơ, lý, hoá tính) theo các phương khác nhau luôn có sự khác biệt. Điều này thể hiện rõ sự sắp xếp các nguyên tử trong vật tinh thể là tuân theo một quy luật xác định.

Ngược lại với vật tinh thể là các vật vô định hình. Vật vô định hình là những vật không tồn tại một hình dạng xác định trong không gian (có hình dáng là của vật chứa nó). Không có nhiệt độ nóng chảy hoặc kết tinh xác định, không thể hiện tính dị hướng ... Một số vật vô định hình tiêu biểu như nhựa đường, parafin, thuỷ tinh ...

Tuy nhiên việc phân biệt rõ ràng và rạch ròi giữa vật tinh thể và vật vô định hình là mang tính tương đối. Với sự phát triển của vật lý hiện đại, ranh giới giữa vật tinh thể và vật vô định hình trở nên không rõ ràng, ví dụ với vật liệu kim loại khi tiến hành nguội nhanh với tốc độ nguội rất lớn (đến hàng triệu  $^{\circ}\text{C}/\text{s}$ ) ta thu được kim loại có độ hạt rất nhỏ và thể hiện cả tính chất của vật vô định hình.

## 1.2.2. Cấu tạo tinh thể lý tưởng của vật rắn

### 1.2.2.1. Khái niệm mạng tinh thể

Qua xem xét tính chất của vật tinh thể, chúng ta có thể thấy rằng, các tính chất đó bị chi phối và quyết định bởi cách sắp xếp của các nguyên tử (hoặc ion, phân tử) ở trong vật rắn. Vì vậy để nắm rõ được mối quan hệ đó và ứng dụng nó trong nghiên cứu, xử lý vật liệu chúng ta cần đi vào quy luật sắp xếp nguyên tử trong vật tinh thể. Do đó ta có khái niệm mạng tinh thể.

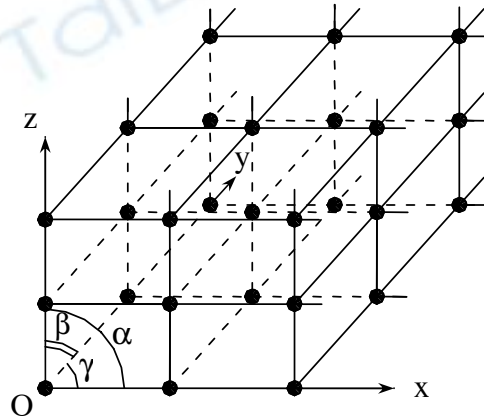
Mạng tinh thể là mô hình không gian, dùng để nghiên cứu quy luật sắp xếp của nguyên tử (hoặc ion, phân tử) trong vật tinh thể. Từ mô hình này cho phép chúng ta xác định được các đặc trưng cơ bản, định hướng được tính chất của các



vật liệu sử dụng. Như vậy để xây dựng mô hình mạng tinh thể, ta cần phải xác định được hệ tọa độ và đơn vị đo khi xây dựng mạng tinh thể.

Phương pháp xây dựng mạng tinh thể:

Để xây dựng mô hình mạng tinh thể trước hết ta chọn một nguyên tử (ion, phân tử) bất kỳ (từ đây gọi là chất điểm) làm gốc. Từ chất điểm gốc ta kẻ ba trục tọa độ qua ba chất điểm gần nhất (không cùng một mặt phẳng) làm ba trục tọa độ. Như vậy trên mỗi trục tọa độ của hệ trục tọa độ Decarte thu được sẽ có hàng loạt các chất điểm cách đều nhau. Qua các chất điểm đó ta dựng các đường thẳng song song với các trục tọa độ. Các đường thẳng đó cắt nhau tạo thành mô hình mạng tinh thể (hình 1.4).



**Hình 1.4.** Mô hình mạng tinh thể

Với mô hình mạng tinh thể như vậy, chúng ta thấy để xác định một vị trí bất kỳ trong mạng tinh thể, ta có véc tơ định vị là:

$$\vec{r}_n = m \cdot \vec{a} + n \cdot \vec{b} + j \cdot \vec{c} \quad (1.7)$$

Trong đó:

$\vec{a}$ : Véc tơ đơn vị theo trục Ox, có trị số bằng khoảng cách giữa hai chất điểm gần nhất theo trục Ox

$\vec{b}$ : Véc tơ đơn vị theo trục Oy

$\vec{c}$ : Véc tơ đơn vị theo trục Oz

m, n, j: Chỉ số theo ba trục tọa độ Ox, Oy, Oz.



Như vậy một mô hình mạng tinh thể sẽ được xác định khi chúng ta có bộ sáu thông số là ba véc tơ đơn vị  $\vec{a}$ ,  $\vec{b}$ ,  $\vec{c}$  và ba góc  $\alpha$  ( $zOx$ ,  $yOx$ ),  $\beta$  ( $zOy$ ,  $yOx$ ),  $\gamma$  ( $zOy$ ,  $zOx$ ). Từ cách xây dựng như trên, chúng ta thấy mạng tinh thể có các tính chất cơ bản sau:

- Mạng tinh thể là vô tận, không tồn tại khái niệm kích thước mạng mà chỉ có giá trị xác định là các véc tơ đơn vị và các góc định vị (do số lượng nguyên tử trong vật rắn là vô tận).

- Khi dịch chuyển mạng tinh thể đi một khoảng cách bằng khoảng cách giữa hai chất điểm theo phương nối hai chất điểm đó, mạng tự trùng lặp với chính mình. Khoảng cách đó gọi là chu kỳ lặp của mạng. Nếu khoảng cách đó được đo theo các trục tọa độ thì được gọi là chu kỳ mạng hay thông số mạng.

- Mạng tinh thể là mô hình không gian, tồn tại nhiều yếu tố đối xứng khác nhau.

- Tùy thuộc vào bộ các thông số xác định mạng tinh thể ( $\vec{a}$ ,  $\vec{b}$ ,  $\vec{c}$ ,  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$ ) chúng ta có các kiểu mạng khác nhau và do đó có các quy luật sắp xếp chất điểm khác nhau.

*Mạng tinh thể lý tưởng là mạng mà đáp ứng hoàn hảo các quy luật sắp xếp của chất điểm tại các vị trí, xác suất bắt gặp chất điểm bằng một, các chất điểm hoàn toàn giống nhau về kích thước và bản chất.*

*Như vậy khi xây dựng mạng tinh thể cho một vật rắn bất kỳ, chúng ta sẽ có một mô hình không gian vô tận về sự sắp xếp của các chất điểm. Việc nghiên cứu trên toàn bộ mạng là khó khăn và không cần thiết. Chính vì vậy để thuận lợi cho nghiên cứu tinh thể, người ta tiến hành nghiên cứu từ phần tử nhỏ nhất cấu tạo nên mạng tinh thể đó là các ô cơ bản.*

Ô cơ bản trong mạng tinh thể:

*Với cách xây dựng mạng tinh thể đã nêu ở trên chúng ta thấy rằng, một kiểu mạng tinh thể được hoàn toàn xác định với bộ sáu thông số. Như vậy chúng ta có thể hình dung rằng, có một phần tử nhỏ nhất có cấu tạo đặc trưng cho toàn bộ kiểu mạng và khi đó mạng tinh thể được hình thành là do vô số các phần tử đó xếp sát nhau. Phần tử đó gọi là ô cơ bản của mạng tinh thể. Và như vậy nghiên*



cứ tính chất của mạng tinh thể vô tận được chuyển về nghiên cứu thông qua ô cơ bản của nó có kích thước và hình dáng cụ thể.

Như vậy với tư cách là ô cơ bản của mạng tinh thể, cần phải thoả mãn các nguyên tắc sau:

- Ô cơ bản phải đảm bảo đặc trưng hoàn chỉnh cho cấu tạo một kiểu mạng, bao gồm thoả mãn các điều kiện đối xứng của tinh thể (đối xứng gương, đối xứng tâm, đối xứng trục quay) và đỉnh của ô cơ bản phải có chất điểm.

- Đỉnh của ô cơ bản phải có chất điểm.

- Thể tích của ô cơ bản phải là nhỏ nhất.

*Với một kiểu mạng tinh thể chúng ta có ô cơ bản đặc trưng của nó, thông qua ô cơ bản chúng ta xác định được các kiểu mạng tinh thể cơ bản. Để phân loại mạng tinh thể người ta chia thành:*

- Hệ mạng tinh thể là phân loại theo hình khối của ô cơ bản (ví dụ lập phương, lục giác ...).

- Kiểu mạng tinh thể là hình thức phương pháp sắp xếp của chất điểm trong ô cơ bản của mạng.

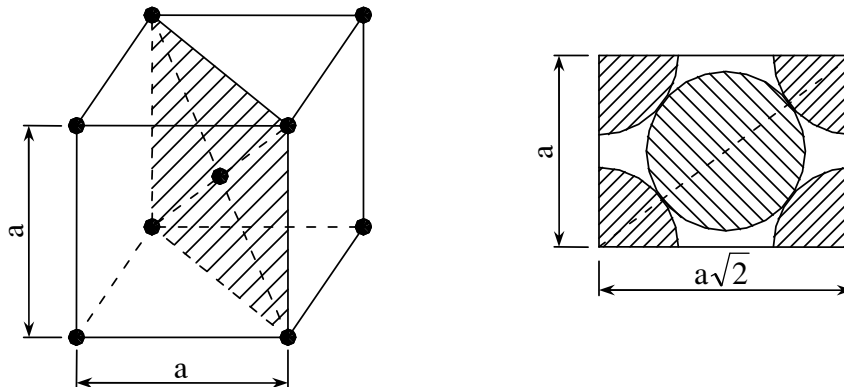
Sự kết hợp giữa hệ và kiểu cho chúng ta các loại mạng tinh thể cơ bản, các loại mạng tinh thể này được thống kê thành 14 kiểu mạng tinh thể Bravais.

**Bảng 1.2.** 14 kiểu mạng Bravais

| <i>Kiểu Hệ</i> | <i>Đơn giản</i> | <i>Đáy tâm</i> | <i>Thể tâm</i> | <i>Diện tâm</i> | <i>Quan hệ thông số mạng</i>   |
|----------------|-----------------|----------------|----------------|-----------------|--|
| Tam tà         | x               |                | x              |                 | $a \neq b \neq c$<br>$\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$     |
| Đơn tà         | x               | x              |                |                 | $a \neq b \neq c$<br>$\alpha = \beta = 90^\circ, \gamma \neq 90^\circ$ |
| Trực giao      | x               |                |                |                 | $a \neq b \neq c$<br>$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$              |
| Mặt thoi       | x               | x              | x              | x               | $a = b = c$<br>$\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$           |
| Lục giác       |                 | x              |                |                 | $a = b \neq c$<br>$\alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$      |
| Lập phương     | x               |                | x              | x               | $a = b = c$<br>$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$                    |
| Chính phương   |                 | x              |                |                 | $a = b \neq c$<br>$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$                 |

**1.2.2.2. Một số kiểu mạng tinh thể thường gặp của kim loại**

\* Mạng lập phương thể tâm (A2, K8): Xét ô cơ bản của mạng là một khối lập phương, các nguyên tử bố trí ở 8 đỉnh và tâm của khối.



**Hình 1.5.** Mạng lập phương thể tâm và mặt xếp sít của nguyên tử

- Thông số mạng (chu kì mạng):  $a$
- Số nguyên tử trong một ô cơ bản (số nguyên tử thuộc khối  $n_V$ ):  $n_{nt}$





$$n_{nt} = n_v = 8 \cdot \frac{1}{8} + 1 = 2 \text{ (nguyên tử)} \quad (1.8)$$

- Số sắp xếp K: số các nguyên tử gần nhất quanh một nguyên tử  $K = 8$   
- Cách sắp xếp của nguyên tử: các nguyên tử được xếp xít nhau theo đường chéo của khối (hình 1.5).

- Bán kính nguyên tử:  $r_{nt}$

$$r_{nt} = \frac{a\sqrt{3}}{4} \quad (1.9)$$

- Lỗ hổng trong mạng tinh thể: do các nguyên tử là hình cầu, khi xếp sát nhau mà không bị biến dạng sẽ tồn tại các lỗ hổng.

Các lỗ hổng trong mạng lập phương thể tâm: Lỗ hổng khối tám mặt nằm ở tâm của các mặt bên, lỗ hổng khối bốn mặt thuộc cạnh bên.

Ý nghĩa: cho phép sự xâm nhập khuếch tán của vật chất trong tinh thể để cho phép tạo ra hợp kim.

- Mật độ mặt của mạng tinh thể: là tỷ lệ của tiết diện nguyên tử thuộc một mặt phẳng giới hạn trong một ô cơ bản so với diện tích của mặt đó (chỉ tính cho mật độ nguyên tử dày nhất là mặt bên vững).

$$M_s = \frac{\sum S_{nt}}{S_{mat}} \cdot 100\% = \frac{n_s \cdot S_{1nt}}{S_{mat}} \cdot 100\% \quad (1.10)$$

Trong đó:

$n_s$ : Số nguyên tử thuộc mặt

$$n_s = 4 \cdot \frac{1}{4} + 1 = 2$$

$S_{1nt}$ : Diện tích tiết diện (mặt cắt) của nguyên tử thuộc mặt

$$S_{1nt} = \pi \cdot r_{nt}^2 = \pi \cdot \left( \frac{a\sqrt{3}}{4} \right)^2$$

$S_{mat}$ : Diện tích của mặt tính mật độ mặt

$$S_{mat} = a \cdot a \sqrt{2} = a^2 \sqrt{2}$$

Thay vào biểu thức trên ta có:

$$M_s = \frac{n_s \cdot S_{1nt}}{S_{mat}} \cdot 100\% = 83,4\%$$

Ý nghĩa: đánh giá mức độ liên kết của nguyên tử trong mạng đang xét, mật độ mạng càng lớn thì mạng càng bền vững.

- Mật độ khối của mạng tinh thể: là tỉ lệ phần trăm thể tích nguyên tử trong một ô cơ bản với thể tích ô cơ bản.

$$M_v = \frac{\Sigma V_{nt}}{V_{ocoban}} \cdot 100\% = \frac{n_v \cdot V_{Int}}{V_{ocoban}} \cdot 100\% \quad (1.11)$$

Trong đó:

$V_{Int}$ : Thể tích của một nguyên tử

$$V_{Int} = \frac{4}{3} \pi r^3 = \frac{4}{3} \pi \left( \frac{a\sqrt{3}}{4} \right)^3 = \frac{\sqrt{3}}{16} \pi a^3$$

$V_{ocoban}$ : Thể tích của một ô cơ bản

$$V_{ocoban} = a^3$$

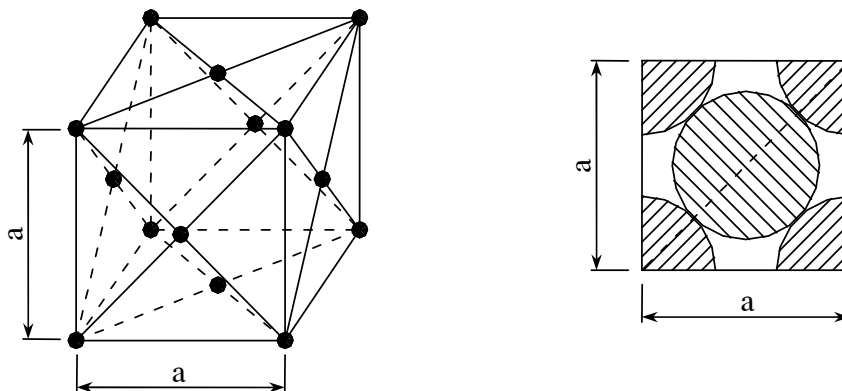
Thay vào biểu thức trên ta có:

$$M_v = \frac{n_v \cdot V_{Int}}{V_{ocoban}} \cdot 100\% = \frac{2 \cdot \frac{\sqrt{3}}{16} \pi a^3}{a^3} \cdot 100\% = 68\%$$

Ý nghĩa: cho biết mức độ điền đầy vật chất của kiểu mạng, do đó cho biết sơ bộ đánh giá khối lượng riêng của vật liệu có kiểu mạng đó.

- Những kim loại có kiểu mạng A2: Fe( $\alpha$ ), Cr, W, Mo ...

\* Mạng lập phương diện tâm (A1, K12): Xét ô cơ bản của mạng là một khối lập phương, các nguyên tử bố trí ở 8 đỉnh và tâm của 6 mặt bên.



Hình 1.6. Mạng lập phương diện tâm và mặt xếp sít của nguyên tử



- Thông số mạng:  $a$                        $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
- Số nguyên tử trong một ô cơ bản (số nguyên tử thuộc khối  $n_v$ ):  $n_{nt}$

$$n_{nt} = n_v = 8 \cdot \frac{1}{8} + 6 \cdot \frac{1}{2} = 4 \text{ (nguyên tử)} \quad (1.12)$$

- Số sắp xếp K: số các nguyên tử gần nhất quanh một nguyên tử  $K = 12$
- Cách sắp xếp của nguyên tử: các nguyên tử được xếp xít nhau theo đường chéo mặt bên của khối (hình 1.6).

- Bán kính nguyên tử:  $r_{nt}$

$$r_{nt} = \frac{a\sqrt{2}}{4} \quad (1.13)$$

- Mật độ mặt của mạng tinh thể:

$$M_s = \frac{\sum S_{nt}}{S_{mat}} \cdot 100\% = \frac{n_s \cdot S_{Int}}{S_{mat}} \cdot 100\% \quad (1.14)$$

Trong đó:

$n_s$ : Số nguyên tử thuộc mặt

$$n_s = 4 \cdot \frac{1}{4} + 1 = 2$$

$S_{Int}$ : Diện tích tiết diện (mặt cắt) của nguyên tử thuộc mặt

$$S_{Int} = \pi \cdot r_{nt}^2 = \pi \cdot \left( \frac{a\sqrt{2}}{4} \right)^2$$

$S_{mat}$ : Diện tích của mặt tính mật độ mặt

$$S_{mat} = a \cdot a = a^2$$

Thay vào biểu thức trên ta có:

$$M_s = \frac{n_s \cdot S_{Int}}{S_{mat}} \cdot 100\% = \frac{2 \cdot \pi \cdot \left( \frac{a\sqrt{2}}{4} \right)^2}{a^2} \cdot 100\% = 78,5\%$$

- Mật độ khối của mạng tinh thể:

$$M_v = \frac{\sum V_{nt}}{V_{ocoban}} \cdot 100\% = \frac{n_v \cdot V_{Int}}{V_{ocoban}} \cdot 100\% \quad (1.15)$$

Trong đó:

$V_{Int}$ : Thể tích của một nguyên tử



$$V_{\text{Int}} = \frac{4}{3} \pi r^3 = \frac{4}{3} \pi \left( \frac{a\sqrt{2}}{4} \right)^3 = \frac{\sqrt{2}}{24} \pi a^3$$

$V_{\text{ocoban}}$ : Thể tích của một ô cơ bản

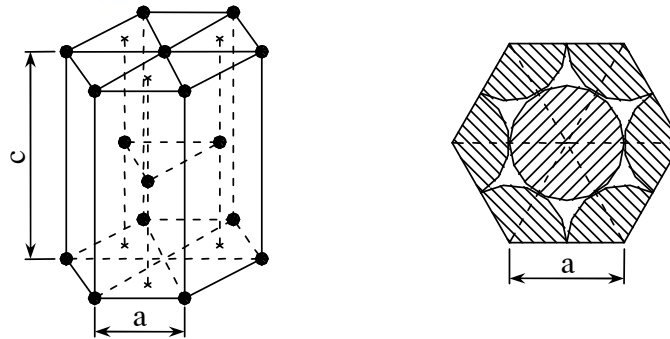
$$V_{\text{ocoban}} = a^3$$

Thay vào biểu thức trên ta có:

$$M_v = \frac{n_v \cdot V_{\text{Int}}}{V_{\text{ocoban}}} \cdot 100\% = \frac{4 \cdot \frac{\sqrt{2}}{24} \pi a^3}{a^3} \cdot 100\% = 74\%$$

- Những kim loại có kiểu mạng A1: Fe( $\gamma$ ), Ni, Mn, Au ...

\* Mạng lục giác xếp chặt (A3, L12): Các nguyên tử nằm ở các đỉnh, ở giữa hai mặt đáy hình lăng trụ lục giác và ở tâm ba khối lăng trụ tam giác khác nhau.



**Hình 1.7.** Mạng lục giác xếp chặt và mặt xếp sít của nguyên tử

- Thông số mạng: a, c

$$\frac{c}{a} = 1,663 : \text{Độ chính phương của mạng tinh thể}$$

$$\alpha = \beta = 90^\circ; \gamma = 120^\circ$$

- Số nguyên tử trong một ô cơ bản (số nguyên tử thuộc khối  $n_v$ ):  $n_{nt}$

$$n_{nt} = n_v = 12 \cdot \frac{1}{6} + 2 \cdot \frac{1}{2} + 3 = 6 \text{ (nguyên tử)} \quad (1.16)$$

- Số sắp xếp K: số các nguyên tử gần nhất quanh một nguyên tử  $K = 12$

- Cách sắp xếp của nguyên tử: các nguyên tử được xếp xít nhau theo mặt đáy của khối (hình 1.7).

- Bán kính nguyên tử:  $r_{nt}$