

BẢNG KÊ CÁC KÝ HIỆU VIẾT TẮT ĐƯỢC DÙNG TRONG SÁCH
(trong ngoặc là của nước ngoài)

<i>Ký hiệu viết tắt</i>	<i>Tên gọi</i>	<i>Đơn vị đo</i>
a, b, c	thông số mạng	nm
a_K (KCU, KCV, KCT)	độ dai va đập	kJ/m^2 , kG.m/cm^2
A_1, A_3, A_{cm}	các nhiệt độ tới hạn của thép tương ứng với giản đồ pha Fe-C	$^{\circ}\text{C}$
Ac_1, Ac_3, Ac_{cm}	A_1, A_3, A_{cm} khi nung nóng	$^{\circ}\text{C}$
Ar_1, Ar_3, Ar_{cm}	A_1, A_3, A_{cm} khi làm nguội	$^{\circ}\text{C}$
A_K	công phá hủy, impact value, CVN energie	J, ft.lbf
B	mật độ từ thông (B_r - mật độ từ thông dư)	gaus, tesla
d, D mm...	đường kính	nm, μm , mm...
E	môđun đàn hồi	MPa, GPa
F	lực, tải trọng	N, kG, T
h	chiều cao	μm , mm, m...
H	cường độ từ trường (H_C - lực khử từ)	ostet
HB	độ cứng Brinen	kG/mm^2
HRA, HRB, HRC	độ cứng Rôcven theo thang A, B, C	
HV	độ cứng Vicke	kG/mm^2
K_{IC}	độ dai phá hủy biến dạng phẳng	$\text{MPa} \cdot \sqrt{\text{m}}$
l, L	chiều dài	nm, μm , mm...
Ox, Oy, Oz, Ou	các trục tọa độ	
S	tiết diện, mặt cắt, diện tích	mm^2
t°, T°	nhiệt độ	$^{\circ}\text{C}$, $^{\circ}\text{K}$
t	thời gian	s (giây), min (phút), h (giờ)

v	vận tốc	mm/s, m/min
V	tốc độ nguội	$^{\circ}\text{C/s}$, $^{\circ}\text{C/h}$
α, β, γ	các góc tọa độ	
$\alpha, \beta, \gamma, \delta, \varepsilon, \xi \dots$	các dung dịch rắn	
$\alpha, \beta, \gamma, \delta$ (ở dạng chỉ số)	biểu thị dạng thù hình, ví dụ Fe_{α}	
γ	khối lượng riêng, mật độ	g/cm^3
ρ_t	bán kính nh cong	
δ (A, EL)	độ giãn dài tương đối	%
Ψ (Z, AR)	độ thắt (tiết diện) tương đối	%
τ	ứng suất tiếp	MPa, kG/mm^2 , psi, ksi
σ	ứng suất, ứng suất pháp	như trên
σ_b (R_m , TS)	giới hạn bền (kéo)	như trên
σ_{ch} (R_Y , σ_Y)	giới hạn chảy vật lý hay lý thuyết	như trên
$\sigma_{0,2}$ ($R_{0,2}$, YS)	giới hạn chảy quy ước	như trên
σ_{dh} (R_e , ES)	giới hạn đàn hồi	như trên
η	độ nhớt, độ sệt	P (poise)

Lời nói đầu

Tuy vật liệu kim loại còn chiếm địa vị chủ chốt và rất quan trọng, song không còn giữ được ngôi độc tôn trong chế tạo cơ khí vì ngoài nó ra người ta đang sử dụng ngày một nhiều hơn ceramic, polyme và đặc biệt là compozit. Trong các trường đại học kỹ thuật và chuyên nghiệp đã và đang có sự chuyển đổi giảng dạy môn “*Kim loại học và nhiệt luyện*” hay “*Vật liệu kim loại*” sang “*Vật liệu học*” hay “*Vật liệu học cơ sở*”. Cuốn sách này ra đời nhằm đáp ứng yêu cầu đó. Ở nước ngoài người ta thường dùng từ “*Khoa học và công nghệ vật liệu*” (Materials Science and Engineering) để đặt tên cho loại sách này. **Khoa học vật liệu** là môn học nghiên cứu mối quan hệ giữa tổ chức và tính chất của vật liệu, trên cơ sở đó **Công nghệ vật liệu** có mục tiêu là thiết kế hay biến đổi tổ chức vật liệu để đạt tới các tính chất theo yêu cầu.

Trong tất cả mọi công việc của kỹ sư cơ khí, từ việc quyết định phương án thiết kế, tính toán kết cấu cho đến gia công, chế tạo, lắp ráp vận hành máy, thiết bị, tất cả đều có liên quan mật thiết đến lựa chọn và sử dụng vật liệu. Điều quan trọng nhất đối với người học là phải nắm được cơ tính và tính công nghệ của các vật liệu kể trên để có thể lựa chọn và sử dụng chúng tốt nhất và hợp lý, đạt các yêu cầu cơ tính đề ra với chi phí gia công ít nhất, giá thành rẻ và có thể chấp nhận được. Song điều quyết định đến cơ tính và tính công nghệ lại nằm ở cấu trúc bên trong. Do vậy mọi yếu tố ảnh hưởng đến cấu trúc bên trong như thành phần hóa học, công nghệ chế tạo vật liệu và gia công vật liệu thành sản phẩm (luyện kim, đúc, biến dạng dẻo, hàn và đặc biệt là nhiệt luyện) đều có ảnh hưởng đến cơ tính cũng như công dụng của vật liệu được lựa chọn, tất cả được khảo sát một cách kỹ càng.

Giáo trình được biên soạn trên cơ sở thực tiễn của sản xuất cơ khí ở nước ta hiện nay, có tham khảo kinh nghiệm giảng dạy môn này của một số trường đại học ở Nga, Hoa Kỳ, Pháp, Canada, Trung Quốc..., đã được áp dụng ở Trường Đại Học Bách Khoa Hà Nội mấy năm gần đây.

Trong thực tế sử dụng vật liệu, đặc biệt là vật liệu kim loại, không thể lựa chọn loại vật liệu một cách chung chung (ví dụ: thép) mà phải rất cụ thể (ví dụ: thép loại gì, với mức, ký hiệu nào) theo các quy định nghiêm ngặt về các điều kiện kỹ thuật do các tiêu chuẩn tương ứng quy định. Trong điều kiện ở nước ta hiện nay, sản xuất cơ khí đang sử dụng các sản phẩm kim loại của rất nhiều nước trên thế giới, do đó không thể đề cập được hết. Khi giới thiệu cụ thể các thép, gang, giáo trình sẽ ưu tiên trình bày các mức theo tiêu chuẩn Việt Nam (nếu có) có đi kèm với các mức tương đương hay cùng loại của tiêu chuẩn Nga do tiêu chuẩn này đã được quen dùng thậm chí đã phổ biến rộng rãi ở nước ta trong mấy chục năm qua. Trong trường hợp ngược lại khi tiêu chuẩn Việt Nam chưa quy định, giáo trình lại giới thiệu các mức theo tiêu chuẩn Nga có kèm theo cách ký hiệu do TCVN 1659-75 quy định. Ngoài ra cũng kết hợp giới thiệu các mức thép gang của Hoa Kỳ, Nhật Bản là những quốc gia có nền kinh tế, khoa học - công nghệ mạnh hàng đầu thế giới. Trong phần hợp kim màu, chủ yếu giới thiệu các mức của tiêu chuẩn AA (cho nhôm) và CDA (cho đồng) là các tiêu chuẩn rất thông dụng trong

giao dịch thương mại trên thế giới, đồng thời có đi kèm với các mức tương đương hay cùng loại của tiêu chuẩn Nga. Rõ ràng là ngay cả với cách trình bày như vậy cũng không thể thỏa mãn hết các yêu cầu thực tế sử dụng và lúc này phải tham khảo các sách tra cứu tương ứng.

Cũng cần nói thêm rằng các thuật ngữ khoa học dùng trong sách theo đúng các quy định trong các tiêu chuẩn TCVN 1658 - 87 và TCVN 1660 - 87.

Cuối cùng như tên gọi của nó, chúng ta nên coi các điều trình bày trong sách như là phân kiến thức *cơ sở* về vật liệu thường dùng trong sản xuất cơ khí. Điều đó cũng có nghĩa để làm tốt hơn các công việc kỹ thuật, cần tham khảo thêm các sách, tài liệu chuyên sâu hơn về từng lĩnh vực đã đề cập.

Rõ ràng là không thể đạt được sự hoàn thiện tuyệt đối, nhất là do sự phát triển không ngừng của khoa học - công nghệ trên thế giới và ở nước ta, cùng với kinh nghiệm có hạn của người viết cũng như sự chậm trễ cập nhật thông tin ở nước ta, cuốn sách có thể tồn tại những hạn chế, rất mong được bạn đọc trao đổi. Thư từ xin gửi về Nhà xuất bản Khoa học và Kỹ thuật, 70 Trần Hưng Đạo, Hà Nội.

Tác giả chân thành cảm ơn các đồng nghiệp ở Trường Đại Học Bách Khoa Hà Nội về những đóng góp quý báu cho cuốn sách.

Tác giả

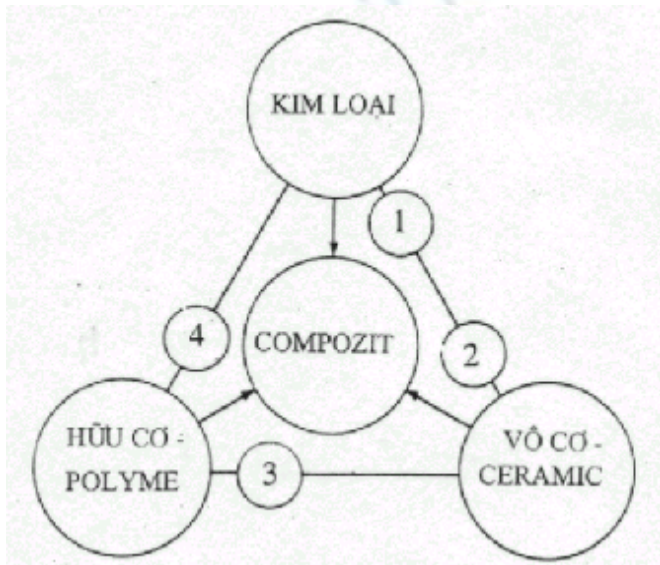
tháng 8 năm 2000

MỞ ĐẦU

Vật liệu học là khoa học nghiên cứu mối quan hệ giữa cấu trúc và tính chất của vật liệu, trên cơ sở đó đề ra các biện pháp công nghệ nhằm cải thiện tính chất và sử dụng thích hợp và ngày một tốt hơn.

0.1. Khái niệm về vật liệu

Vật liệu ở đây chỉ dùng để chỉ những *vật rắn* mà con người sử dụng để chế tạo dụng cụ, máy móc, thiết bị, xây dựng công trình và ngay cả để thay thế các bộ phận cơ thể hoặc thể hiện ý đồ nghệ thuật. Như vậy tất cả các chất lỏng, khí cho dù rất quan trọng song cũng không phải là đối tượng nghiên cứu của môn học. Dựa theo cấu trúc - tính chất đặc trưng, người ta phân biệt bốn nhóm vật liệu chính (hình 0.1) như sau:



Hình 0.1. Sơ đồ minh họa các nhóm vật liệu và quan hệ giữa chúng:

1. bán dẫn,
2. siêu dẫn,
3. silicon,
4. polyme dẫn điện

Vật liệu kim loại. Vật liệu kim loại thường là tổ hợp chủ yếu của các nguyên tố kim loại, trong đó nhiều điện tử là của chúng không thuộc về nguyên tử nào. Các tính chất điển hình của vật liệu kim loại là:

- dẻo và khá dẻo,
- dẫn nhiệt, dẫn điện cao,
- có ánh kim, phản xạ ánh sáng, không cho ánh sáng thường đi qua, dẻo, dễ biến dạng dẻo (cán, kéo, rèn, ép),
- có độ bền cơ học, nhưng kém bền hóa học.
- trừ nhôm ra các kim loại thông dụng như sắt, đồng... đều khá nặng,
- nhiệt độ chảy biến đổi trong phạm vi từ thấp đến cao nên đáp ứng được yêu cầu đa dạng của kỹ thuật.

Ceramic (vật liệu vô cơ). Vật liệu này có nguồn gốc vô cơ, là hợp chất giữa kim loại, silic với á kim (ôxít, nitrit, cacbit), bao gồm khoáng vật đất sét, xi măng, thủy tinh. Các tính chất điển hình của vật liệu vô cơ - ceramic là:

- rẻ và khá rẻ,
- khá nặng,
- dẫn nhiệt và dẫn điện rất kém (cách nhiệt và cách điện),
- cứng, giòn, bền ở nhiệt độ cao, bền hóa học hơn vật liệu kim loại và vật liệu hữu cơ.

Polyme (vật liệu hữu cơ). Vật liệu này phần lớn có nguồn gốc hữu cơ mà thành phần hóa học chủ yếu là cacbon, hydro và các á kim, có cấu trúc đại phân tử. Các tính chất điển hình của vật liệu hữu cơ - polyme là:

- rẻ và khá rẻ,
- dẫn nhiệt, dẫn điện kém,
- khối lượng riêng nhỏ,
- nói chung dễ uốn dẻo, đặc biệt ở nhiệt độ cao,
- bền vững hóa học ở nhiệt độ thường và trong khí quyển; nóng chảy, phân hủy ở nhiệt độ tương đối thấp.

Compozit. Vật liệu này được tạo thành do sự kết hợp của hai hay cả ba loại vật liệu kể trên, mang hầu như các đặc tính tốt của các vật liệu thành phần. Ví dụ bê tông cốt thép (vô cơ - kim loại) vừa chịu kéo tốt (như thép) lại chịu nén cao (như bê tông). Hiện dùng phổ biến các composit hệ kép: kim loại - polyme, kim loại - ceramic, polyme - ceramic với những tính chất mới lạ, rất hấp dẫn.

Ngoài ra có những nhóm phụ khó ghép vào một trong bốn loại trên:

- bán dẫn, siêu dẫn nhiệt độ thấp, siêu dẫn nhiệt độ cao, chúng nằm trung gian giữa kim loại và ceramic (trong đó hai nhóm đầu gần với kim loại hơn, nhóm sau cùng gần với ceramic hơn).
- silicon nằm trung gian giữa vật liệu vô cơ với hữu cơ, song gần với vật liệu hữu cơ hơn.

0.2. Vai trò của vật liệu

Muốn thực hiện được các giá trị vật chất đều phải thông qua sử dụng vật liệu cụ thể, như muốn tạo nên máy móc, ô tô, năng lượng... phải có kim loại và hợp kim, thiết bị, đồ dùng điện tử phải có chất bán dẫn, xây dựng nhà cửa, công trình phải có xi măng và thép, các đồ dùng hàng ngày thường là chất dẻo, máy bay và xe đua rất cần composit, tượng đài thường làm bằng hợp kim đồng - thiếc (bronze)...

Sự phát triển của xã hội loài người gắn liền với sự phát triển của công cụ sản xuất và kỹ thuật mà cả hai điều này cũng được quyết định một phần lớn nhờ vật liệu. Xã hội loài người phát triển qua các thời kỳ khác nhau gắn liền với vật liệu để chế tạo công cụ. Ở thời tiền sử con người chỉ biết dùng các công cụ làm bằng các vật liệu có sẵn trong thiên nhiên: gỗ, đá nên năng suất lao động rất thấp, không tạo được giá trị thặng dư. Sau khi người ta biết dùng các công cụ bằng các vật liệu qua chế biến: đồng (đúc ra là hợp kim đồng) và đặc biệt là sắt (đúc ra là thép) với các đặc tính cơ học tốt hơn hẳn: cứng hơn, bền hơn mà vẫn dẻo dai nên không những tạo ra năng suất lao động cao hơn lại có tuổi thọ dài hơn, do vậy đã tạo nên được các đột biến về phát triển trong khoảng 2000 năm đặc biệt trong 100 ÷ 200 năm gần đây (cần nhớ là tuy không có phân định rạch ròi song hiện nay xã hội loài

người vẫn còn ở thời kỳ đồ sắt). Năng lượng đang đóng vai trò quyết định trong sự phát triển tiếp theo của loài người, kỹ thuật siêu dẫn một khi thành hiện thực sẽ tạo nên bước ngoặt mới, song kỹ thuật này chỉ có được nếu tìm được vật liệu siêu dẫn ở nhiệt độ đủ cao để có thể áp dụng trong thực tế. Có thể tìm thấy rất nhiều ví dụ khác về vai trò của vật liệu trong đời sống cũng như trong kỹ thuật.

Cho đến nay vật liệu kim loại thực sự đã có vai trò quyết định trong tiến hóa của loài người. Kim loại và hợp kim đang chiếm vị trí chủ đạo trong chế tạo công cụ và máy móc thường dùng: công cụ cầm tay, dụng cụ, máy công cụ, máy móc nói chung, ô tô, tàu biển, máy bay, vận tải đường sắt, cầu, tháp, cột, truyền dẫn điện, nhiệt... và trong sản xuất vũ khí, đạn dược. Như vậy hiện nay vật liệu kim loại vẫn còn có tầm quan trọng hàng đầu trong sản xuất cơ khí, giao thông vận tải, năng lượng, xây dựng và quốc phòng.

Chất dẻo - polyme từ giữa thế kỷ này đã trở thành nhóm vật liệu mới, hiện đang đóng vai trò ngày càng quan trọng và chiếm tỷ lệ ngày càng cao trong đời sống hàng ngày cũng như trong thiết bị, máy móc.

Vật liệu vô cơ - ceramic có lịch sử lâu đời hơn cả (từ thời kỳ đồ đá). Trong quá trình phát triển, vật liệu này cũng được phổ biến một cách rộng rãi trong xây dựng và đời sống hàng ngày từ đồ gốm, sứ (chum, vại, bát, đĩa...) đến xi măng - bê tông, thủy tinh, vật liệu chịu lửa cho đến các ceramic kết cấu hiện đại và thủy tinh siêu sạch làm cáp quang.

Vật liệu kết hợp (compozit) được phát triển rất mạnh trong những năm gần đây, đáp ứng được các yêu cầu rất cao của chế tạo máy mà ba loại vật liệu kia không có được như rất nhẹ lại rất bền. Chắc chắn sự phát triển mạnh mẽ của loại vật liệu này sẽ tạo ra những thay đổi quan trọng cho ngành cơ khí.

0.3. Đối tượng của vật liệu học cho ngành cơ khí

Máy móc được cấu tạo từ nhiều chi tiết đòi hỏi các tính chất có khi rất khác nhau và điều quan trọng đối với kỹ sư cơ khí là phải biết chọn đúng vật liệu cũng như phương pháp gia công để thỏa mãn cao nhất điều kiện làm việc với giá thành thấp nhất. Môn học giúp ích cho những kỹ sư cơ khí tương lai làm được việc đó.

Vật liệu học trình bày trong sách này tuy có định hướng phục vụ riêng cho ngành cơ khí nói chung, đặc biệt cho hai ngành đào tạo then chốt là chế tạo máy và ô tô, song cũng bao quát được những nội dung quan trọng nhất của vật liệu học; hơn nữa lại là những kiến thức cơ bản không những có ích trong công việc kỹ thuật mà cả khi xử lý vật liệu trong đời sống hàng ngày.

Quan hệ tổ chức - tính chất hay sự phụ thuộc của tính chất của vật liệu vào cấu trúc là nội dung cơ bản của toàn bộ môn học.

Tổ chức hay cấu trúc là sự sắp xếp của các thành phần bên trong. Khái niệm về tổ chức vật liệu bao gồm cả tổ chức vĩ mô và vi mô.

Tổ chức vĩ mô còn gọi là tổ chức thô đại (macrostructure) là hình thái sắp xếp của các phân tử lớn với kích thước quan sát được bằng mắt thường (tối giới hạn khoảng 0,3mm) hoặc bằng kính lúp (0,01mm).

Tổ chức vi mô là hình thái sắp xếp của các phân tử nhỏ, không quan sát được bằng mắt hay lúp. Nó bao gồm:

- *Tổ chức tế vi* (microstructure) là hình thái sắp xếp của các nhóm nguyên tử hay phân tử với kích thước cỡ micromet hay ở cỡ các hạt tinh thể với sự giúp

đỡ của kí nh hiển vi quang học hay kí nh hiển vi điện tử. Thường gặp hơn cả là tổ chức tế vi quang học cho phép phân ly được tới giới hạn cỡ $0,15\mu m$. Trong nghiên cứu cũng thường dùng tổ chức tế vi điện tử cho phép phân ly được tới giới hạn nhỏ hơn, cỡ *chục nanômet* (10nm).

Cơ tí nh của vật liệu phụ thuộc rất nhiều vào tổ chức, tức không những vào thành phần hóa học mà cả vào các nhóm nguyên tử, phân tử kể trên mà ta gọi là pha theo số lượng, hình dạng, kí ch thước và sự phân bố của chúng. Trong thực tế người ta thường xuyên sử dụng phương pháp phân tí ch tổ chức tế vi quang học mà trong các tài liệu kỹ thuật chỉ được gọi đơn giản là tổ chức tế vi.

- *Cấu tạo tinh thể* là hình thái sắp xếp và tương tác giữa các nguyên tử trong không gian, các dạng khuyết tật của mạng tinh thể. Để làm được việc này phải sử dụng tới phương pháp nhiễu xạ tia rơngơn cũng như một số kỹ thuật khác, điều này chỉ thực sự cần thiết khi nghiên cứu các vật liệu mới.

Tí nh chất bao gồm các tí nh chất: cơ học (cơ tí nh), vật lý (lý tí nh), hóa học (hóa tí nh), công nghệ và sử dụng.

Đối với vật liệu kết cấu, đặc biệt là vật liệu cơ khí, cơ tí nh có ý nghĩa quan trọng hàng đầu. Vì thế trong giáo trình này mối quan hệ tổ chức - cơ tí nh được khảo sát khá kỹ càng và sẽ là tiền đề cho việc xác định thành phần hóa học của vật liệu cũng như chế độ gia công tí ch hợp. Ngoài cơ tí nh ra các vật liệu cơ khí cũng được quan tâm dưới khía cạnh ổn định hóa học trong khí quyển hay trong một số môi trường ăn mòn (axit, bazo, muối...). Thỏa mãn cơ - lý - hóa tí nh đề ra nhưng chưa đủ để có thể chuyển hóa vật liệu thành sản phẩm phục vụ mục đí ch đề ra, mà còn phải tí nh đến khả năng gia công - chế biến thành các hình dạng nhất định được gọi tổng quát là *tí nh công nghệ*. Nếu không có tí nh công nghệ thì dù vật liệu có ưu việt đến đâu cũng khó đưa vào sử dụng. Ví dụ: người ta đã tìm được một số chất siêu dẫn nhưng đều bị hạn chế bởi tí nh giòn quá cao không thể kéo thành dây dẫn được. Cuối cùng, tí nh sử dụng là tổng hợp của các chỉ tiêu: tuổi thọ, độ tin cậy (khả năng không gây ra sự cố) và giá thành cũng quyết định khả năng áp dụng của vật liệu cho mục đí ch đã chọn.

Giáo trình Vật Liệu Học Cơ Sở (cơ khí) gồm bốn phần chí nh:

- *Cấu trúc và cơ tí nh*: trình bày các nguyên lý chung về mối quan hệ giữa cấu trúc và cơ tí nh cho vật liệu nói chung nhưng có nhấn mạnh hơn cho kim loại gồm cấu trúc tinh thể, tạo pha, tổ chức, biến dạng, phá hủy.

- *Hợp kim và biến đổi tổ chức*: trình bày các tổ chức của hợp kim cũng như các biến đổi pha và tổ chức mà dạng điển hình và quan trọng nhất, thiết thực nhất là nhiệt luyện thép.

- *Vật liệu kim loại*: trình bày tổ chức, thành phần hóa học, cơ tí nh, chế độ nhiệt luyện và công dụng của các mác thép, gang, hợp kim màu và bột.

- *Vật liệu phi kim loại*: trình bày cấu trúc, thành phần hóa học, cơ tí nh, các phương pháp tạo hình và công dụng của ceramic, polyme và composít.

Sau cùng, cần nhấn mạnh là sử dụng hợp lý vật liệu là một trong những mục tiêu quan trọng hàng đầu của môn học, không thể tách rời tiêu chuẩn hóa cũng như các phương pháp kiểm tra, đánh giá. Một trong các yêu cầu đề ra là người học phải đạt được khả năng xác định được mác hay ký hiệu vật liệu theo tiêu chuẩn Việt Nam và các nước công nghiệp phát triển.

0.4. Các tiêu chuẩn vật liệu

Các nước đều đề ra các quy phạm trong việc sản xuất, gia công, chế biến, sử dụng, bảo quản các vật liệu nói chung, đặc biệt là cho vật liệu kim loại, đó là các cơ sở pháp lý cũng như kỹ thuật trong mọi khâu từ sản xuất, lưu thông cho đến sử dụng. Trong điều kiện của nước ta chúng ta cần có hiểu biết các tiêu chuẩn sau.

- Tiêu chuẩn Việt Nam - TCVN. Về cơ bản giáo trình được biên soạn theo tiêu chuẩn Việt Nam: các ký hiệu có trong các tiêu chuẩn cụ thể được gọi là *mác* (mark) Tuy nhiên do trình độ phát triển còn thấp và ra đời chưa lâu nên còn nhiều lĩnh vực TCVN chưa đề cập đến, trong trường hợp này giáo trình sẽ dùng từ ký hiệu để mã hóa các hợp kim theo cách ký hiệu đã được quy định tổng quát trong TCVN 1759-75 (Kim loại và Hợp kim – nguyên tắc ký hiệu). Ngoài ra cũng cần nói thêm là về cơ bản TCVN đã dựa theo các nguyên tắc của ГОСТ, nên giữa hai tiêu chuẩn này có nhiều nét tương đồng.

- Tiêu chuẩn Liên Xô (cũ) hay tiêu chuẩn Nga (hiện nay) đều được viết tắt là ГОСТ, đã được thịnh hành ở nước ta trong thời gian trước đây và vẫn còn quen dùng cho đến hiện nay.

- Các tiêu chuẩn Hoa Kỳ rất phổ biến trên thế giới, đặc biệt trong các sách giáo khoa, tạp chí kỹ thuật, tài liệu giao dịch của các hãng sản xuất. Việc hiểu biết các tiêu chuẩn Hoa Kỳ có tác dụng to lớn trong việc hòa nhập kinh tế với thế giới. Khác với nhiều nước chỉ có một cơ quan tiêu chuẩn của nhà nước ban hành các tiêu chuẩn cụ thể, ở Hoa Kỳ có rất nhiều tổ chức tiêu chuẩn như các hệ thống:

ASTM	(American Society for Testing and Materials),
AISI	(American Iron and Steel Institute),
SAE	(Society of Automotive Engineers),
AA	(Aluminum Association),
CDA	(Copper Development Association),

.....

Trong nhiều trường hợp với cùng một vật liệu có thể dùng các hệ thống khác nhau. Ở Hoa Kỳ người ta hay sử dụng hệ thống số (ba xxx hay bốn xxxx chữ số) - nên còn gọi là đánh số - để ký hiệu các vật liệu kim loại, vì vậy đã có các trường hợp lẫn lộn, gây hiểu nhầm. Để tránh điều này gần đây lại xuất hiện hệ thống UNS (Unified Numbering System) với năm chữ số (xxxxx).

- Tiêu chuẩn Nhật Bản JIS khá thông dụng trong các nước Châu Á và cũng được biết đến trên thế giới.

- Tiêu chuẩn Châu Âu EN và các nước Châu Âu: Đức DIN, Pháp NF, Anh BS cũng là các tiêu chuẩn quan trọng cần biết.

Trong giáo trình này ngoài trình bày các mác, ký hiệu theo TCVN cũng sẽ có kết hợp trình bày các mác của Nga, Mỹ và Nhật (tỉ mỉ về các mác vật liệu kim loại của các nước kể trên và các nước Châu Âu có thể tham khảo ở “Sách tra cứu thép, gang thông dụng” của cùng tác giả do Trường Đại Học Bách Khoa Hà Nội in năm 1997).

Giáo trình được trình bày từ giản đơn đến phức tạp, từ vật liệu cổ điển, truyền thống đến các loại mới phát triển. Tuy là môn học được coi là kỹ thuật cơ sở với những lý thuyết khá cơ bản song cũng có tí nh thực tiễn rất sâu sắc, gắn liền với đời sống thực tế cũng như các công việc kỹ thuật hàng ngày phải giải

quyết của các kỹ sư cơ khí . Do vậy ngoài phần nghe giảng trên lớp sinh viên còn phải:

- Thực hiện các bài thực nghiệm về cấu trúc, tính chất và sự biến đổi cấu trúc - cơ tính ở phòng thí nghiệm. Những bài thí nghiệm như thế giúp không những nắm vững, hiểu sâu các bài đã học mà còn giúp rất nhiều cho các công việc kỹ thuật có liên quan về sau.

- Làm các bài tập, trả lời các câu hỏi, giải thích các hiện tượng, so sánh các vật liệu và phương pháp khác nhau.

- Do có tính thực tiễn rất cao người học cần chú ý liên hệ đến các hiện tượng thường gặp, tham khảo thêm các sách có liên quan để giải quyết tốt các vấn đề về vật liệu đặt ra trong khi học các môn học khác cũng như trong các nhiệm vụ kỹ thuật sau này.

Tailieu.vn

Phần I CẤU TRÚC VÀ CƠ TÍNH

Trong phần này có hai chương, trình bày hai nội dung cơ bản của vật liệu là cấu trúc và cơ tính cũng như sự phụ thuộc của cơ tính vào cấu trúc, đặt cơ sở cho việc nghiên cứu các phương pháp hóa bền và các vật liệu cơ khí sẽ được đề cập trong các phần tiếp theo. Chính vì lý do đó các kiến thức trong phần này có tính chất cơ sở và tầm quan trọng đặc biệt.

Chương 1 CẤU TRÚC TINH THỂ VÀ SỰ HÌNH THÀNH

Như đã trình bày, tính chất (đặc biệt là cơ tính) của vật rắn phụ thuộc chủ yếu vào cách sắp xếp của các phân tử cấu thành (nguyên tử, phân tử, ion) và lực liên kết giữa chúng. Về mặt thành phần, vật liệu thường cấu thành bởi sự hòa trộn của các nguyên tố, các chất hóa học với cấu trúc độc lập, cố định. Hãy bắt đầu từ việc khảo sát dạng cấu trúc cơ bản, đơn giản nhất này.

1.1. Cấu tạo và liên kết nguyên tử

1.1.1. Khái niệm cơ bản về cấu tạo nguyên tử

Như đã học ở môn "Vật Lý", nguyên tử là hệ thống gồm hạt nhân (mang điện tích dương) và các điện tử bao quanh (mang điện tích âm) mà ở trạng thái bình thường được trung hòa về điện. Hạt nhân gồm proton (điện tích dương) và neutron (không mang điện). Các điện tử phân bố quanh hạt nhân tuân theo các mức năng lượng từ thấp đến cao.

Cấu hình điện tử (electron configuration) chỉ rõ: số lượng tử chính (1, 2, 3...), ký hiệu phân lớp (s, p, d...), số lượng điện tử thuộc phân lớp (số mũ trên ký hiệu phân lớp). Ví dụ: Cu có $Z = 29$ có cấu hình điện tử là $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^1$ qua đó biết được số điện tử ngoài cùng (ở đây là 1, hóa trị 1).

Trong số kim loại có nhóm kim loại chuyển tiếp là loại có phân lớp ở sát phân lớp ngoài cùng bị thiếu điện tử. Ví dụ: Fe có $Z = 26$ có cấu hình điện tử là $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^6 4s^2$ (trong trường hợp này phân lớp 3d bị thiếu, chỉ có 6, nếu đủ phải là 10 như trường hợp của Cu).

1.1.2. Các dạng liên kết nguyên tử trong chất rắn

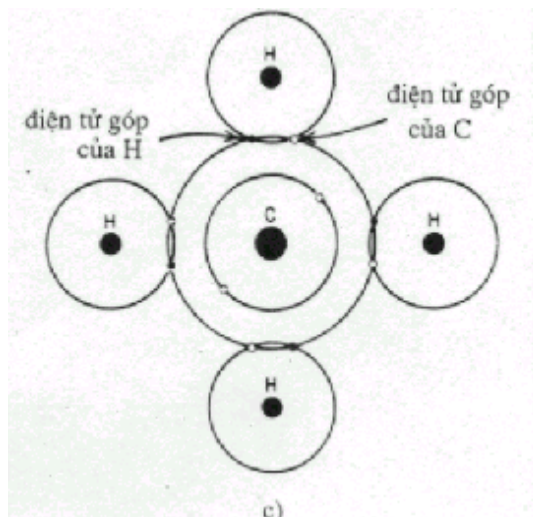
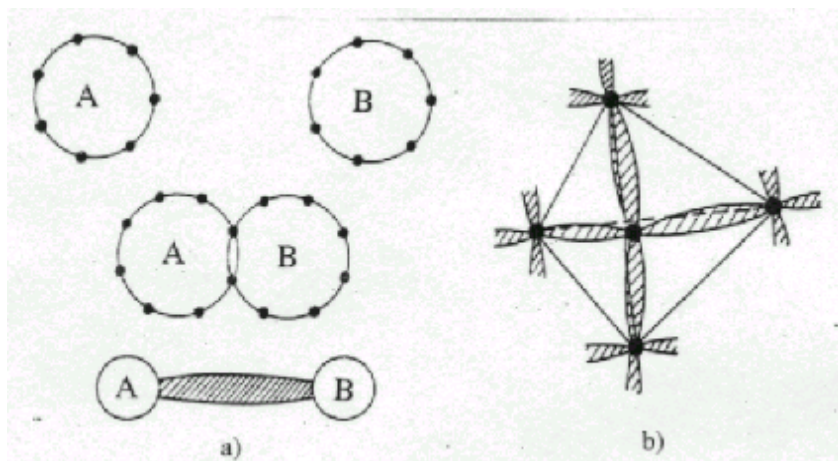
Hãy xem trong các loại vật liệu khác nhau tồn tại các dạng liên kết nào.

Chính sự khác nhau của các dạng liên kết đó cũng là nguyên nhân tạo nên cơ tính khác nhau giữa các loại vật liệu.

a. Liên kết đồng hóa trị

Liên kết này tạo ra khi hai (hoặc nhiều) nguyên tử góp chung nhau một số điện tử hóa trị để có đủ tám điện tử ở lớp ngoài cùng. Có thể lấy ba ví dụ như sau (hình 1.1).

- Clo có 7 điện tử ở lớp ngoài cùng, mỗi nguyên tử góp chung 1 điện tử nên một phân tử gồm hai nguyên tử clo sẽ chung nhau 2 điện tử làm cho lớp điện tử ngoài cùng của nguyên tử nào cũng đủ 8 (hình 1.1a).



Hình 1.1. Sơ đồ biểu diễn liên kết đồng hóa trị trong:

- phân tử clo
- giecmani (Ge)
- mêtan (CH₄).

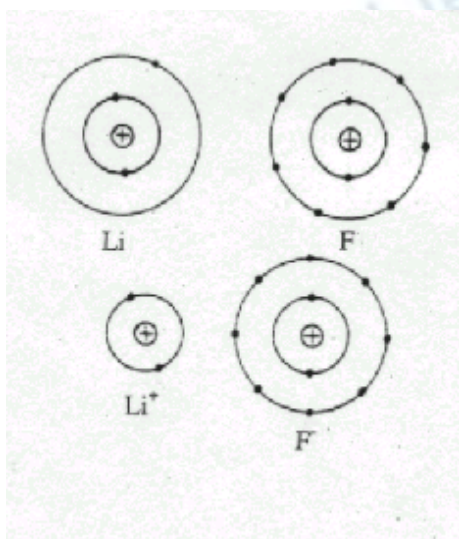
- Giecmani (Ge) có 4 điện tử ở lớp ngoài cùng ($4s^2, 4p^2$), mỗi nguyên tử góp chung 1 điện tử, nên một nguyên tử đã cho cần có bốn nguyên tử xung quanh để tạo nên cấu trúc bền vững với 8 điện tử (hình 1.1b). Liên kết đồng hóa trị xảy ra giữa các nguyên tử cùng loại (của nguyên tố hóa học trong các nhóm từ IVB VIIB như Cl, Ge) là loại đồng cực, còn giữa các nguyên tố khác loại như CH₄ là loại dị cực.

• Mêtan (CH_4). Cacbon chỉ có 4 điện tử ở lớp ngoài cùng như vậy là nó thiếu tới 4 điện tử để đủ 8. Trong trường hợp này nó sẽ kết hợp với bốn nguyên tử hydro để mỗi nguyên tử này góp cho nó 1 điện tử làm cho lớp điện tử ngoài cùng đủ 8. Đó là bản chất lực liên kết trong phân tử mêtan (CH_4) như biểu thị ở hình 1.1c.

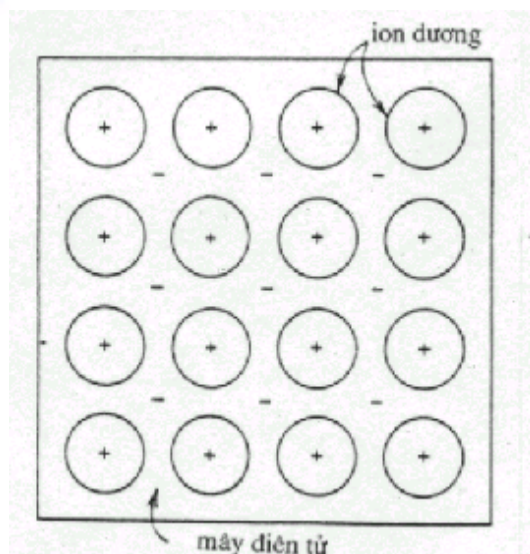
Nói chung liên kết đồng hóa trị là liên kết mạnh, tuy nhiên cường độ của nó phụ thuộc rất nhiều vào đặc tính liên kết giữa điện tử hóa trị với hạt nhân. Ví dụ: cacbon có 6 điện tử trong đó 4 là điện tử hóa trị hầu như liên kết trực tiếp với hạt nhân nếu như nó ở dạng kim cương sẽ có cường độ liên kết rất mạnh, nhiệt độ chảy lên tới 3550°C ; trong khi đó thiếc có tới 50 điện tử trong đó chỉ có 4 là điện tử hóa trị nằm xa hạt nhân nên có liên kết yếu với hạt nhân, có nhiệt độ chảy rất thấp, chỉ 232°C .

b. Liên kết ion

Đây là loại liên kết mạnh và rất dễ hình dung (hình 1.2), xảy ra giữa nguyên tử có ít điện tử hóa trị để cho bớt điện tử đi để tạo thành cation (ion dương) như các nguyên tố nhóm IB (Cu, Ag, Au), IIB (Zn, Cd, Hg) với nguyên tử có nhiều



Hình 1.2. Sơ đồ biểu diễn liên kết ion trong phân tử LiF.



Hình 1.3. Sơ đồ biểu diễn liên kết kim loại.

điện tử hóa trị để nhận thêm điện tử để tạo thành anion (ion âm) như các nguyên tố nhóm VIB (O, S...), VIIB (H, F, Cl, Br, I). Các ôxít kim loại như Al_2O_3 , MgO , CaO , Fe_3O_4 , NiO ... có xu thế mạnh với tạo liên kết ion.

Cũng giống như liên kết đồng hóa trị, liên kết ion càng mạnh khi các nguyên tử càng chứa ít điện tử, tức các điện tử cho và nhận nằm càng gần hạt nhân. Khác với liên kết đồng hóa trị là loại có liên kết định hướng (xác suất tồn tại các điện tử tham gia liên kết lớn nhất theo phương nối tâm các nguyên tử), liên kết ion là loại không định hướng. Đặc điểm quan trọng của liên kết ion là thể hiện tính giòn cao.

c. Liên kết kim loại

Đây là loại liên kết đặc trưng cho các vật liệu kim loại, quyết định các tính chất rất đặc trưng của loại vật liệu này. Có thể hình dung liên kết này như sau: các ion dương tạo thành mạng xác định, đặt trong không gian điện tử tự do "chung" như biểu thị ở hình 1.3. Năng lượng liên kết là tổng hợp (cân bằng) của lực hút (giữa ion dương và điện tử tự do bao quanh) và lực đẩy (giữa các ion dương). Chính nhờ sự cân bằng này các nguyên tử, ion kim loại luôn luôn có vị trí cân bằng xác định trong đám mây điện tử. Liên kết kim loại thường được tạo ra trong kim loại là các nguyên tố có ít điện tử hóa trị, chúng liên kết yếu với hạt nhân dễ dàng bứt ra khỏi nguyên tử trở nên tự do (không bị ràng buộc bởi nguyên tử nào) và tạo nên "mây" hay "biển" điện tử. Các nguyên tố nhóm IA có tính kim loại điển hình, càng dịch sang bên phải tính kim loại càng giảm, còn tính đồng hóa trị trong liên kết càng tăng.

Cần nhấn mạnh là chính liên kết này tạo cho kim loại các tính chất điển

hình, rất đặc trưng và được gọi là *tính kim loại*. Chúng bao gồm:

- *Ánh kim hay vẻ sáng*. Bề mặt kim loại (khi chưa bị ôxy hóa) sáng khi bị ánh sáng chiếu vào, điện tử tự do nhận năng lượng và bị kích thích, có mức năng lượng cao hơn song không ổn định, khi trở về mức cũ sẽ phát ra sóng ánh sáng.

- *Dẫn nhiệt và dẫn điện cao*. Nhờ có điện tử tự do rất dễ chuyển động định hướng dưới một hiệu điện thế làm kim loại có tính dẫn điện cao. Tính dẫn nhiệt cao được giải thích bằng sự truyền động năng của các điện tử tự do và ion dương.

- *Tính dẻo cao*. Đây là đặc tính rất có giá trị, nhờ có nó mà kim loại có thể cán, dát mỏng thành tấm, lá, màng, cán kéo thành thanh, sợi, dây rất thuận tiện cho vận chuyển, gia công và sử dụng. Ở một số kim loại nhờ có thêm độ bền tốt và cao đã được sử dụng rộng rãi trong các kết cấu vừa chịu tải tốt lại khó gãy, vỡ đột ngột. Sự có mặt của điện tử tự do hay mây điện tử cũng là nguyên nhân của tính dẻo cao. Các ion dương kim loại rất dễ dịch chuyển giữa các lớp đệm là mây điện tử dưới tác dụng cơ học, hơn nữa khi kim loại bị biến hình (tức các ion chuyển chỗ) liên kết kim loại vẫn được bảo tồn do vị trí tương quan giữa các ion dương và điện tử tự do không thay đổi. Đây là điều mà các loại liên kết trên không có được nên tính dẻo thấp. Ngoài ra kim loại có cấu tạo mạng đơn giản và xìt chặt, trong đó các mặt tinh thể có mặt độ chênh lệch nhau rõ rệt, nhờ đó các mặt dày đặc hơn có liên kết bền chắc hơn, dễ dàng trượt lên nhau dưới tác dụng cơ học.

Tất nhiên không phải mọi kim loại đều có các đặc tính trên, song các kim loại thông dụng (sắt, nhôm, đồng...) đều có các đặc tính trên rất rõ rệt. Chúng ta sẽ trở lại vấn đề này ở chương sau (mục 2.1.2).

d. Liên kết hỗn hợp

Thực ra các liên kết trong các chất, vật liệu thông dụng không mang tính chất thuần túy của một loại duy nhất nào, mà mang tính hỗn hợp của nhiều loại, như đã nói trong các kim loại vẫn có liên kết đồng hóa trị. Ví dụ liên kết đồng hóa trị chỉ có được trong liên kết đồng cực (giữa các nguyên tử của cùng một nguyên tố). Do nhiều yếu tố khác nhau trong đó có tính âm điện (khả năng hút điện tử của hạt nhân) mà các liên kết dị cực (giữa các nguyên tử của các nguyên tố khác nhau) đều mang đặc tính hỗn hợp giữa liên kết ion và đồng hóa trị. Ví dụ: Na và Cl có tính âm điện lần lượt là 0,9 và 3,0. Vì thế liên kết giữa Na và Cl trong NaCl gồm khoảng 52% liên kết ion và 48% liên kết đồng hóa trị.

e. Liên kết yếu (Van der Waals)

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, ngẫu cực điện được tạo thành và phân tử bị phân cực. Liên kết Van der Waals là liên kết do hiệu ứng hút nhau giữa các nguyên tử hay phân tử bị phân cực như vậy. Liên kết này yếu, rất dễ bị phá vỡ khi tăng nhiệt độ nên vật liệu có liên kết này có nhiệt độ chảy thấp. Do đặc tính như vậy liên kết này còn có tên gọi là liên kết bậc hai.

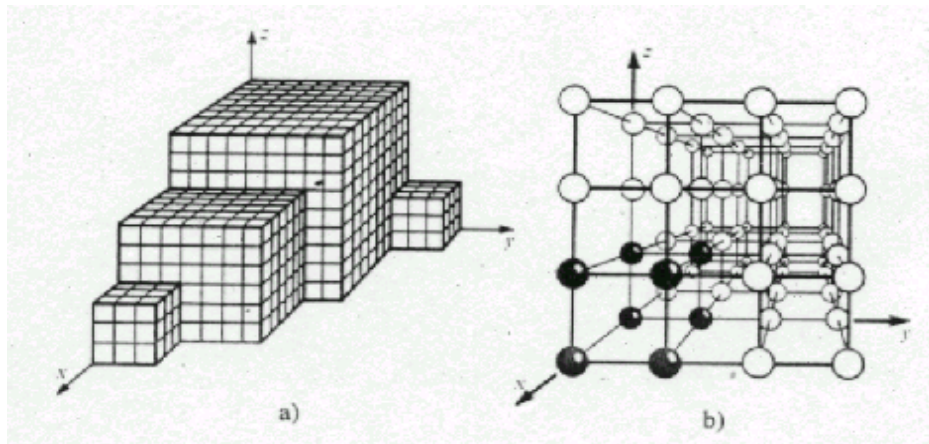
1.2. Sắp xếp nguyên tử trong vật chất

1.2.1. Chất khí

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

1.2.2. Chất rắn tinh thể

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



Hình 1.4. Cấu trúc mạng tinh thể lập phương (đơn giản).

Do có sắp xếp trật tự nên chất rắn tinh thể có cấu trúc tinh thể được xác định bằng kiểu mạng tinh thể xác định, tức các nguyên tử của nó được xếp thành hàng, lối với quy luật nhất định. Nối tâm các nguyên tử (ion) sắp xếp theo quy luật bằng các đường thẳng tưởng tượng sẽ cho ta hình ảnh của mạng tinh thể, trong đó nơi giao nhau của các đường thẳng được gọi là *nút mạng*. Ví dụ, trên hình 1.4 trình bày một phần của mạng tinh thể với kiểu sắp xếp trong đó các nguyên tử nằm ở các đỉnh của hình lập phương (ở đây không thể và cũng không cần vẽ hết cả mạng tinh thể gồm vô vàn nguyên tử, do tuân theo quy luật hình học vị trí của các nút tiếp theo hoàn toàn xác định trên cơ sở tịnh tiến theo cả ba chiều đo). Nút mạng được quan niệm như một điểm của mạng, tương ứng với nó chỉ có một nguyên tử

(ion) như ở mạng tinh thể kim loại. Trong mạng tinh thể hợp chất hóa học với các liên kết ion hay đồng hóa trị, ứng với một nút của mạng tinh thể có thể là phân tử (hai hay nhiều nguyên tử), lúc đó được gọi là nút phức.

Do sắp xếp có trật tự (quy luật, lặp lại theo ba chiều trong không gian) nên theo các phương khác nhau hình thái sắp xếp và mật độ nguyên tử cũng khác nhau, tạo nên *tính dị hướng hay có hướng*. Do tầm quan trọng của nó chúng ta sẽ trở lại nghiên cứu kỹ hơn về cấu trúc tinh thể ở mục sau.

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

a. Chất lỏng

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

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

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

- Mật độ xếp chặt (tỷ lệ giữa thể tích do nguyên tử chiếm chỗ so với tổng thể tích) của chất lỏng kém chất rắn nên khi kết tinh hay đông đặc thường kèm theo giảm thể tích (co ngót).

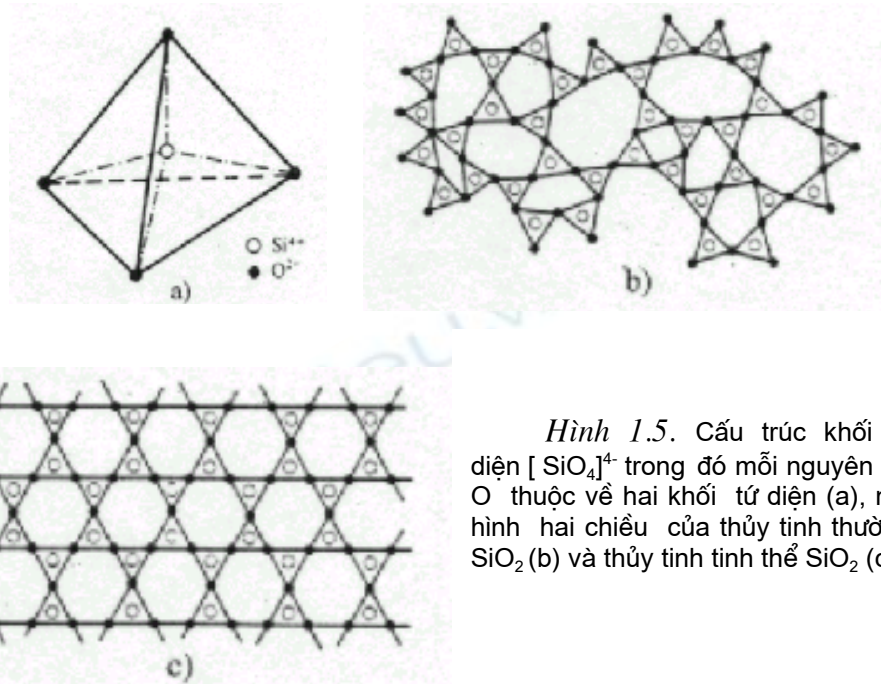
b. Chất rắn vô định hình

Ở một số chất, trạng thái lỏng có độ sệt cao, các nguyên tử không đủ độ linh hoạt để sắp xếp lại theo chuyển pha lỏng - rắn; chất rắn tạo thành không có cấu trúc tinh thể và được gọi là *chất rắn vô định hình*. Về mặt cấu trúc có thể coi các vật thể vô định hình là chất lỏng rắn lại với các yếu tố gây nên bởi ba động nhiệt bị loại trừ. Thủy tinh (mà cấu tạo cơ bản là SiO_2) là chất rắn vô định hình rất điển hình nên đôi khi còn dùng từ này để chỉ trạng thái vô định hình của các vật liệu thường có cấu trúc tinh thể (như kim loại thủy tinh).

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

Trong điều kiện làm nguội bình thường thủy tinh lỏng, các phân tử SiO_2 [trong đó ion O^{2-} ở các đỉnh khối tứ diện (bốn mặt) tam giác đều, tâm của khối là ion Si^{4+} như biểu thị ở hình 1.5a] không đủ thời gian sắp xếp lại, nó chỉ giảm ba động nhiệt tạo nên thủy tinh thường, vô định hình như biểu thị ở hình 1.5b; còn khi làm nguội vô cùng chậm các phân tử SiO_2 có đủ thời gian sắp xếp lại theo trật tự xa sẽ được thủy tinh (có cấu trúc) tinh thể như biểu thị ở hình 1.5c. Xem thế cấu trúc tinh thể là cấu trúc ổn định nhất. Ngược lại, các chất rắn được liệt vào loại tinh

thể như kim loại và hợp kim khi làm nguội bình thường từ trạng thái lỏng sẽ cho cấu trúc tinh thể, nay nếu làm nguội với tốc độ vô cùng lớn ($> 10^4 \div 10^5$ °C/s) sẽ nhận được cấu trúc vô định hình. Lúc này vật liệu nhận được lại mang các đặc tính của chất rắn vô định hình. Khác với chất rắn tinh thể, các chất rắn vô định hình có tính đẳng hướng tức tính chất như nhau theo mọi phương.



Hình 1.5. Cấu trúc khối tứ diện $[SiO_4]^{4-}$ trong đó mỗi nguyên tử O thuộc về hai khối tứ diện (a), mô hình hai chiều của thủy tinh thường SiO_2 (b) và thủy tinh tinh thể SiO_2 (c).

c. Chất rắn vi tinh thể

Cũng với vật liệu tinh thể kể trên khi làm nguội từ trạng thái lỏng rất nhanh (trên dưới 10000 °C/s) sẽ nhận được cấu trúc tinh thể nhưng với kích thước hạt rất nhỏ (cỡ nm), đó là vật liệu có tên gọi là *vi tinh thể* (còn gọi là *finemet* hay *nanomet*).

Tóm lại các vật liệu có ba kiểu cấu trúc: tinh thể (thường gặp nhất), vô định hình và vi tinh thể (ít gặp).

1.3. Khái niệm về mạng tinh thể

Trong số các loại vật liệu, loại có cấu trúc tinh thể chiếm tỷ lệ lớn và thường mang các tính chất rất đa dạng phụ thuộc vào kiểu sắp xếp nguyên tử. Do vậy nghiên cứu mạng tinh thể là bước cần thiết trước tiên.

1.3.1. Tính đối xứng

Mạng tinh thể bao giờ cũng mang tính đối xứng, nó là một trong những đặc điểm quan trọng, thể hiện cả ở hình dáng bên ngoài, cấu trúc bên trong cũng như thể hiện ra các tính chất. Tính đối xứng là tính chất ứng với một biến đổi hình học, các điểm, đường, mặt tự trùng lặp lại, gồm có:

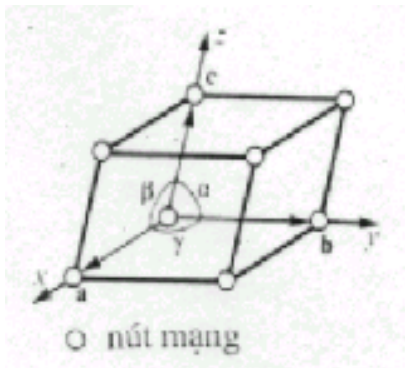
- tâm đối xứng: bằng phép nghịch đảo qua tâm chúng trùng lại nhau;

- trục đối xứng: các điểm có thể trùng lặp nhau bằng cách quay quanh trục một góc α , số nguyên $n = 2\pi/\alpha$ được gọi là bậc của trục đối xứng, chỉ tồn tại các $n = 1, 2, 3, 4, 6$;

- mặt đối xứng: bằng phép phản chiếu gương qua một mặt phẳng, các mặt sẽ trùng lặp lại.

1.3.2. Ô cơ sở - ký hiệu phương, mặt

a. Ô cơ sở



Hình 1.6. Ô cơ sở và hệ tọa độ.

Như đã nói không thể biểu diễn cả mạng tinh thể với vô vàn nguyên tử. Trong cả mạng tinh thể với các chất điểm (ion, nguyên tử, phân tử) sắp xếp theo trật tự, có quy luật đó bao giờ ta cũng tìm được hình không gian nhỏ nhất đặc trưng cho quy luật sắp xếp đó được gọi là *ô cơ sở*. Như mạng tinh thể lập phương (đơn giản) được biểu diễn ở hình 1.4 có thể được đặc trưng, biểu thị một cách đầy đủ bằng hình (khối) lập phương (được vẽ đậm trong hình b). Sau đây khi trình bày các kiểu mạng tinh thể ta chỉ cần đưa ra ô cơ sở của nó là đủ. Do tính đối xứng, từ một ô cơ sở tịnh tiến theo ba chiều đo trong không gian sẽ được mạng tinh thể.

Ô cơ sở được xây dựng trên ba vectơ đơn vị \vec{a} , \vec{b} , \vec{c} tương ứng với ba trục tọa độ Ox, Oy, Oz đặt trên ba cạnh của ô như biểu thị ở hình 1.6. Môđun của ba vectơ đó a, b, c là kí ch thước của ô cơ sở còn gọi *hằng số mạng* hay *thông số mạng*, vì chúng đặc trưng cho từng nguyên tố hóa học hay đơn chất. Các góc α , β , γ hợp bởi các vectơ đơn vị.

Tùy thuộc vào tương quan giữa các cạnh và góc của ô cơ sở có bảy hệ tinh thể khác nhau là:

tam tà (ba nghiêng)	$a \neq b \neq c$	$\alpha \neq \beta \neq \gamma$
đơn tà (một nghiêng)	$a \neq b \neq c$	$\alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta$
trực giao	$a \neq b \neq c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
mặt thoi (ba phương)	$a = b = c$	$\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$
lục giác (sáu phương)	$a = b \neq c$	$\alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$
chính phương (bốn phương)	$a = b \neq c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
lập phương	$a = b = c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$

Bảng 1.1 trình bày bảng tuần hoàn các nguyên tố hóa học và mạng tinh thể của chúng.

Trên cơ sở của hệ tọa độ có thể xác định (ký hiệu, đánh số) các nút mạng, phương, mặt tinh thể.

b. Nút mạng

Nút mạng tương ứng với các tọa độ lần lượt trên các trục tọa độ Ox, Oy, Oz đã chọn được đặt trong dấu móc vuông $[x, x, x]$, giá trị âm biểu thị bằng dấu "-" trên chỉ số tương ứng, ví dụ: trên chỉ số tương ứng với trục Oy có giá trị âm là $[x, \bar{x}, x]$.

c. Chỉ số phương

Phương là đường thẳng đi qua các nút mạng, được ký hiệu bằng $[uvw]$; như vậy chỉ cần biết hai nút mạng trên chúng sẽ xác định được phương đã cho. Do tính quy luật trong sắp xếp nguyên tử mà các phương song song với nhau có tính chất hoàn toàn như nhau nên sẽ có cùng một chỉ số phương lấy theo phương đi qua gốc tọa độ O. Ba chỉ số u, v, w là ba số nguyên tỷ lệ thuận với tọa độ của một nút mạng nằm trên phương đó song gần gốc tọa độ nhất.

Trên hình 1.7 giới thiệu ba phương điển hình trong mạng tinh thể của hệ lập phương:

- đường chéo khối $[111]$,
- đường chéo mặt $[110]$,
- cạnh $[100]$.

Những phương tuy không song song với nhau nhưng có các chỉ số (chỉ cần giá trị tuyệt đối) u, v, w giống nhau sẽ có các tính chất giống nhau, tạo nên họ phương $\langle uvw \rangle$. Ví dụ họ $\langle 110 \rangle$ gồm các phương sau đây:

- $[110]$, $[011]$, $[101]$,
- $[\bar{1}\bar{1}0]$, $[0\bar{1}\bar{1}]$, $[\bar{1}0\bar{1}]$,
- $[\bar{1}10]$, $[0\bar{1}1]$, $[10\bar{1}]$,
- $[\bar{1}\bar{1}0]$, $[0\bar{1}\bar{1}]$, $[\bar{1}0\bar{1}]$.

d. Chỉ số Miller của mặt tinh thể

Mặt tinh thể là mặt phẳng được tạo nên bởi các (ít nhất là ba) nút mạng. Có thể coi mạng tinh thể như gồm bởi các mặt tinh thể giống hệt nhau, song song với nhau và cách đều nhau. Các mặt tinh thể song song với nhau do có tính chất hoàn toàn giống nhau như vậy nên có cùng một ký hiệu. Người ta ký hiệu mặt bằng chỉ số Miller (hkl). Các chỉ số h, k, l được xác định theo các bước như sau:

- tìm giao điểm của mặt phẳng trên ba trục theo thứ tự Ox, Oy, Oz,
- xác định độ dài đoạn thẳng từ gốc tọa độ đến các giao điểm, rồi lấy các giá trị nghịch đảo,

- quy đồng mẫu số chung, lấy các giá trị của tử số, đó chính là các chỉ số h, k, l tương ứng cần tìm.

Tailieu.vn