

# CƠ SỞ VẬT LIỆU HỌC

**MSE 2030 - 3(2-2-0-4)**

Lý thuyết: 30

Bài tập/BTL: 30

Thí nghiệm: 0

Tài liệu tham khảo:

- Lê công Dưỡng(chủ biên), Vật liệu học, nxb khkt, Hà nội, 1997
- Vật liệu học cơ sở – Nghiêm Hùng
- Bài giảng : Cơ sở VLH - Phùng Thị Tố Hằng.
- William D. Callister, Materials Science and Engineering

2

## Mở đầu

•**Khoa học vật liệu** nghiên cứu mối quan hệ giữa **cấu trúc** và **tính chất** của vật liệu

•**Kỹ thuật Vật liệu** : thiết kế ( tạo ra) những cấu trúc mới → đạt được các tính chất mong muốn

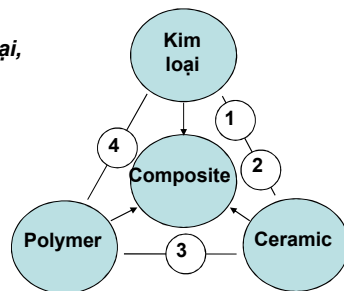
THINKING...

**Vật liệu là gì?**

→ là các vật rắn có thể sử dụng để chế tạo các dụng cụ, máy móc, thiết bị, xây dựng các công trình.....

**4 nhóm vật liệu chính: VL kim loại, Ceramic, Polymer và Composite**

- 1- VL bán dẫn
- 2- VL siêu dẫn
- 3- VL silicon
- 4- VL polymer dẫn điện



**Vật liệu kim loại:** các nguyên tố KL, cấu trúc mạng tinh thể

**Đặc điểm:**

- dẫn nhiệt, dẫn điện cao,
- có ánh kim, phản xạ ánh sáng với màu sắc đặc trưng
- dẻo, dễ biến dạng dẻo (cán, kéo, rèn, ép),
- bền cơ học, nhưng kém bền hóa học.

**Ceramic (VL vô cơ):** nguồn gốc vô cơ, hợp chất giữa KL, silic với á kim: ôxit, nitrit, cacbit (khoáng vật đất sét, xi măng, thủy tinh...)

**Đặc điểm:**

- 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 (VL hữu cơ):** nguồn gốc hữu cơ, thành phần hóa học chủ yếu là cacbon, hydro và các á kim, có cấu trúc đại phân tử.

Đặc điểm:

- 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 T thường và trong khí quyển;
- nóng chảy, phân hủy ở nhiệt độ tương đối thấp.

**Compozit:** 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)

## 2. Vai trò của vật liệu

### • Cần thiết trong mọi lĩnh vực của cuộc sống:

- Điện (pin, pin mặt trời....)
- Điện tử viễn thông: cáp quang, bảng mạch, vi mạch...
- Môi trường: chất xử lý nước thải, chất làm sạch môi trường
- Sinh học và CN sinh học: chất tăng trưởng, chất thay thế trong cơ thể con người....
- Chế tạo các chi tiết máy
- Dụng cụ thể thao....

.....

• **Sự phát triển của xã hội loài người** gắn liền với sự phát triển của công cụ sản xuất và kỹ thuật → 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

Thời kỳ đồ sắt: 1000-3000 năm trước

Thép và bê tông: 100-1000 năm trước

Polymer: những năm 1900

Silicon: khoảng 1960

Hiện nay: Vật liệu sinh học và vật liệu cấu trúc nano

## Nội dung của môn học:

→ nghiên cứu mối quan hệ giữa tính chất và cấu trúc của vật liệu

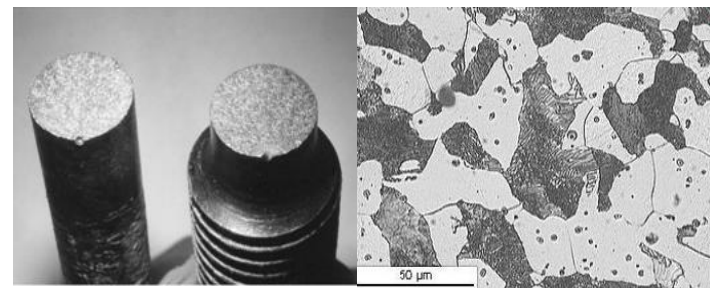
- **Cấu trúc** : sự sắp xếp của các thành phần bên trong.

**Cấu trúc vĩ mô** (tổ chức thô đại; macrostructure): hình thái sắp xếp của các phần tử lớn với kích thước quan sát được bằng mắt thường (giới hạn 0,3mm) hoặc bằng kính lúp (0,01mm).

**Cấu trúc vi mô** (microstructure): 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 hỗ trợ của kính hiển vi quang học (phân ly giới hạn cỡ 0,15  $\mu\text{m}$ ) hay kính hiển vi điện tử (cỡ chục *nanomet* (10nm))

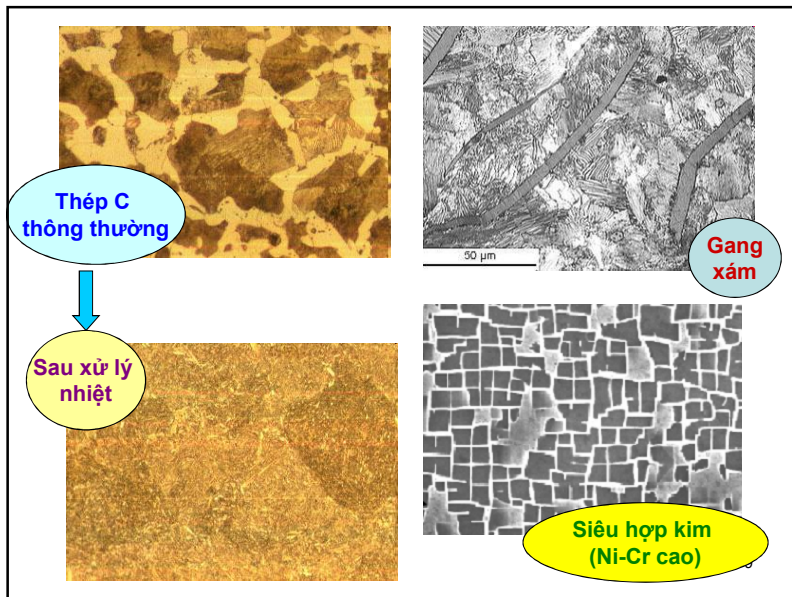
- **Tính chất:**
- cơ học (cơ tính)
  - vật lý (lý tính)
  - hóa học (hoá tính)
  - công nghệ và sử dụng

**Các tiêu chuẩn vật liệu:** TCVN, Nga, Mỹ, Nhật, Châu Âu....



**Tổ chức thô đại**

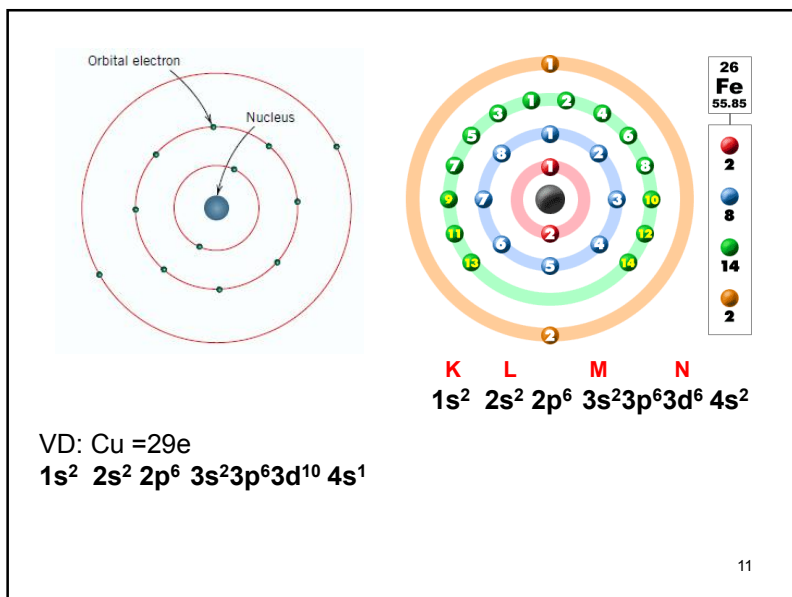
**Tổ chức tế vi**



## Chương 1: Cấu trúc tinh thể và sự hình thành

### 1.1 Cấu trúc nguyên tử:

- Các e chuyển động bao quanh hạt nhân → trung hòa về điện
- Hạt nhân gồm các proton (mang điện tích +) và neutron (không mang điện)
- Các e bao quanh hạt nhân tuân theo các mức năng lượng từ thấp tới cao

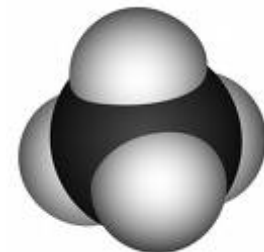
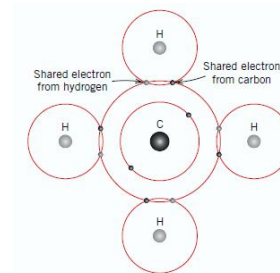


### 1.2. Liên kết nguyên tử

Các dạng liên kết trong chất rắn:

**1. Liên kết đồng hoá trị:** hình thành do các nguyên tử góp chung điện tử hoá trị → đủ 8 e lớp ngoài cùng liên

- Liên kết trong  $Cl_2$ ,  $CH_4$ ....



### Đặc điểm:

➤ Liên kết mạnh, cường độ phụ thuộc nhiều vào đặc tính liên kết giữa điện tử hóa trị với hạt nhân.

Ví dụ: C có 6e ; có 4e hóa trị hầu như liên kết trực tiếp với hạt nhân

▪ Nếu ở dạng kim cương → cường độ liên kết rất mạnh,  $T_{ch} = 3550^\circ\text{C}$ ;

▪ Sn có 50e, có 4e hóa trị, nằm xa hạt nhân → liên kết yếu, có  $T_{ch} = 232^\circ\text{C}$ .

➤ Liên kết có tính định hướng

13

**2. Liên kết ion:** hình thành do lực hút giữa các nguyên tử dễ nhường e hoá trị (tạo ion dương) với các nguyên tử dễ nhận e hoá trị (tạo ion âm) → liên kết (LiF, NaCl...).

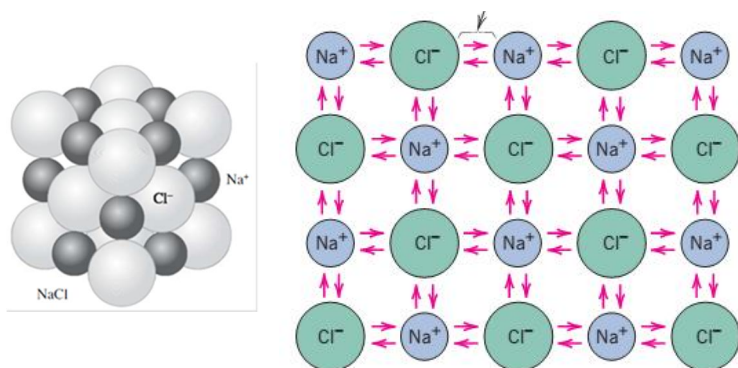
### Đặc điểm:

▪ Liên kết không có tính định hướng

▪ Liên kết bền vững khi các nguyên tử có ít e (gần hạt nhân)

**VD:** Các ôxit kim loại như  $\text{Al}_2\text{O}_3$ ,  $\text{MgO}$ ,  $\text{CaO}$ ,  $\text{Fe}_3\text{O}_4$ ,  $\text{NiO}$ ... Chủ yếu là liên kết ion

## Liên kết ion trong NaCl



15

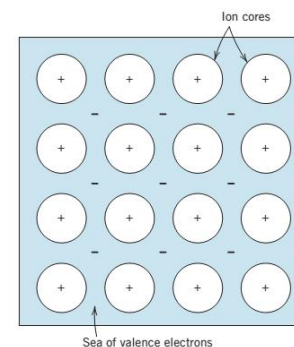
**3. Liên kết kim loại:** hình thành do sự tương tác giữa các e tự do chuyển động trong mạng tinh thể do các ion dương tạo thành

### Đặc điểm:

- Năng lượng liên kết là tổng hợp lực hút và đẩy tĩnh điện

- Được tạo thành từ những ng. tử có ít e hóa trị → e tự do

- Cấu trúc có tính đối xứng cao



#### 4. Liên kết hỗn hợp:

➤ Thực tế liên kết trong vật liệu thông dụng không mang tính thuần túy của một loại liên kết, mà mang tính hỗn hợp.

**Ví dụ :** liên kết đồng hóa trị chỉ có trong liên kết đồng cực (giữa các nguyên tử của cùng một nguyên tố).

➤ Do nhiều yếu tố khác nhau: tính âm điện (khả năng hút điện tử của hạt nhân) → liên kết dị cực (giữa các nguyên tử của các nguyên tố khác nhau)

→ mang đặc tính hỗn hợp giữa liên kết ion và đồng hóa trị.

**VD:** Na và Cl có tính âm điện lần lượt là 0,9 và 3,0 → liên kết NaCl gồm 52% liên kết ion và 48% liên kết đồng hóa trị.

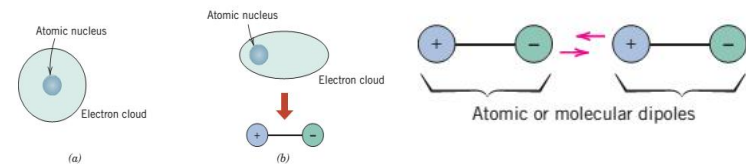
#### 5. Liên kết yếu (Van der Waals):

- 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 âm không trùng nhau → ngẫu cực điện 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

- Liên kết yếu, rất dễ bị phá vỡ khi tăng nhiệt độ → vật liệu có  $T$  chảy thấp.

VD: liên kết giữa các phân tử nước ( $H_2O$ )



Sự tạo thành ngẫu điện cực

#### 1.2 Sự sắp xếp các nguyên tử trong vật chất

**Chất khí:** các nguyên tử, phân tử chuyển động hỗn loạn

**Chất lỏng:** có trật tự gần, không có trật tự xa

**Chất rắn tinh thể:** các nguyên tử có vị trí hoàn toàn xác định (có trật tự xa)

**Chất rắn vô định hình:** các nguyên tử sắp xếp không có trật tự  
→ vô định hình: ở trạng thái lỏng có độ sệt cao → chuyển từ lỏng sang rắn → không đủ độ linh hoạt

VD: thủy tinh  $SiO_2$

**Chất rắn vi tinh thể:** có cấu trúc tinh thể ở trạng thái cỡ hạt nano

$$V_{ng} > 10.000^0/s$$

#### 1.3 Cấu trúc tinh thể của kim loại và ceramic

THINKING...



**Vì sao cần nghiên cứu về mạng tinh thể**

Tính chất vật liệu bị quyết định bởi cấu trúc của mạng tinh thể

**Đ/n:** Mạng không gian tạo bởi ng.tử (ion), sắp xếp theo qui luật chặt chẽ, biểu diễn dưới dạng hình học nhất định → mạng tinh thể

**Tính đối xứng:** → thể hiện hình dạng bên ngoài, cấu trúc bên trong và tính chất

- tâm đối xứng

- trục đối xứng : bậc của trục đối xứng  $n = 2 \pi / \alpha$

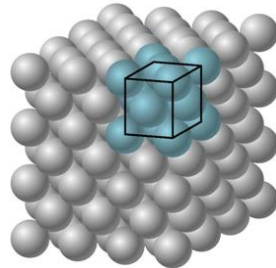
- mặt đối xứng



### 1.3.1. Ô cơ sở- nút mạng- phương- mặt tinh thể

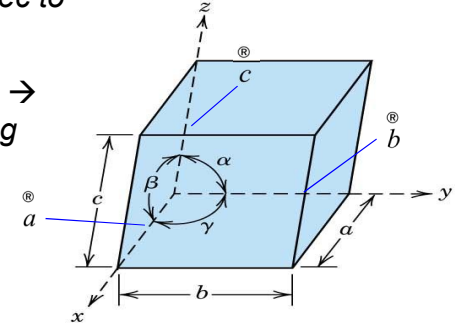
- Ô cơ sở: là khối thể tích nhỏ nhất có cách sắp xếp ng.tử đại diện cho mạng t.t.với các tính chất hình học đặc trưng cho mạng
- Chỉ cần biểu diễn mạng t.t bằng ô cơ sở
- Tịnh tiến ô cơ theo 3 chiều trong không gian  $\rightarrow$  toàn bộ mạng tinh thể.

Coi nguyên tử là những quả cầu  
rắn giống hệt nhau, sắp xếp xít nhau  
Núi tâm của các quả cầu  $\rightarrow$  mạng TT



### Ô cơ sở và cách biểu diễn

- Xây dựng ô cơ sở: trên 3 véc tơ  $a$ ,  $b$  và  $c$  (trên các trục  $Ox$ ,  $Oy$  và  $Oz$ )  $\rightarrow$  3 véc tơ đơn vị
- Các góc  $\alpha$ ,  $\beta$  và  $\gamma$  là góc tạo bởi các véc tơ đơn vị
- Độ lớn  $a$ ,  $b$  và  $c \rightarrow$  các hằng số mạng



### 7 hệ tinh thể khác nhau phụ thuộc vào mối quan hệ giữa cạnh và góc

1	Ba nghiêng (tam tà)	$a \neq b \neq c$	$\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$	
2	Một nghiêng	$a \neq b \neq c$	$\alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta$	
3	Trực thoi	$a \neq b \neq c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	
4	Ba phương (thoi)	$a = b = c$	$\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$	
5	Sáu phương	$a = b \neq c$	$\alpha = \beta = 90^\circ \quad \gamma = 120^\circ$	
6	Bốn phương	$a = b \neq c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	
7	Lập phương	$a = b = c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	

### 2. Nút mạng [x,x,x]: biểu thị tọa độ của các nguyên tử

- Đơn vị đo: Chiều dài hằng số mạng trên các trục đó

A [1,1,0]; B [1,1,1]; C [0,1,1]

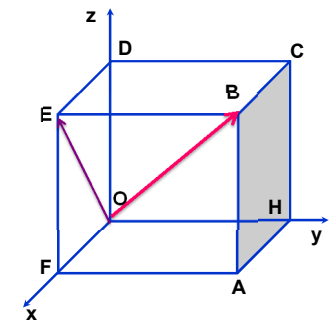
### 3. Chỉ số phương [uvw]:

$\rightarrow$  đường thẳng đi qua hai nút mạng

$\rightarrow$  biểu diễn phương

$\rightarrow$  Các phương song song  $\rightarrow$  t/c giống nhau  $\rightarrow$  cùng chỉ số với phương đi qua gốc tọa độ  $\rightarrow$  tỷ lệ với tọa độ nút mạng nằm gần gốc tọa độ nhất

OH [010]; OB [111]; OE [101]



- Các phương không song song với nhau nhưng có trị tuyệt đối các chỉ số giống nhau  $\rightarrow$  có t/c giống nhau  $\rightarrow$  tạo nên họ phương
- Họ phương, ký hiệu  $\langle uvw \rangle$
- VD: họ  $\langle 110 \rangle \rightarrow$  có 12 phương

THINKING...



**Hãy viết các phương trong họ**

25

#### 4. Chỉ số mặt (chỉ số Miller) (hkl):

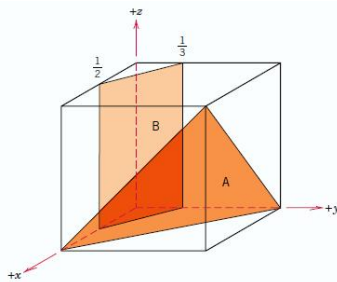
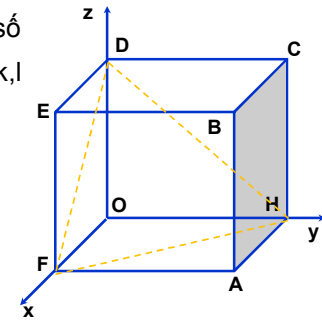
Cách xác định:

- Giao của mặt phẳng với các trục tọa độ (m.f không đi qua gốc tọa độ)
- Viết tọa độ của các điểm
- Lấy nghịch đảo, qui đồng mẫu số
- $\rightarrow$  giá trị tử số tương ứng với h,k,l

DFH (111), EFAB (100), FECH (110)

Họ mặt, ký hiệu  $\{hkl\}$

Chú ý: Không cho phép xác định các mặt đi qua gốc tọa độ

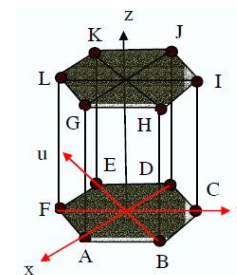


Mặt	Các trục	Nghịch đảo	Chỉ số
A	1, 1, -1	1, 1, -1	
B	1/2, 1/3, $\alpha$		

27

#### Chỉ số mặt (chỉ số Miller-Bravais) (hkil):

- Dùng cho hệ sáu phương:
- Thêm trục ou: ox, oy, ou (góc  $120^\circ$ )
- i là chỉ số trên trục ou  $i = -(h+k)$



mặt	chỉ số Miller	chỉ số Miller - Bravais
ABHG	(100)	(10 $\bar{1}$ 0)
BCIH	(010)	(01 $\bar{1}$ 0)
AGLF	(110)	(11 $\bar{2}$ 0)
ABCDEF	(001)	(0001)
ACIG		(11 $\bar{2}$ 0)

28

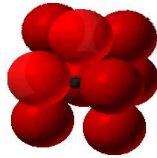
## 5. Mật độ nguyên tử

### Mật độ xếp:

Mật độ xếp theo phương  $M_l = l/L$

Mật độ xếp theo mặt  $M_s = s/S$

Mật độ xếp theo mạng  $M_v = v/V$



### Số sắp xếp:

→ số lượng nguyên tử cách đều gần nhất một nguyên tử đã cho

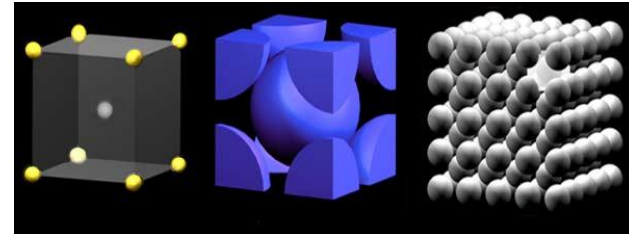
### Lỗ hổng:

→ là không gian trống bị giới hạn bởi các phần tử nằm tại nút mạng

→ kích thước lỗ hổng được xác định bằng quả cầu lớn nhất có thể lọt vào không gian trống đó

## 1.3.2. Mạng tinh thể của vật rắn với liên kết kim loại

### 1. Lập phương tâm khối (A2)



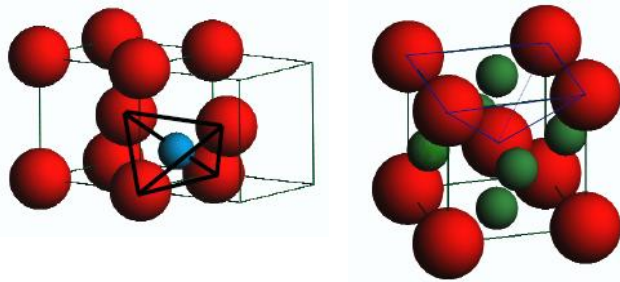
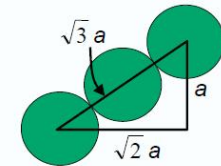
Số nguyên tử:  $n=2$ ;

$d_{ngt} = a \sqrt{3} / 2$ ;

Mật xếp chặt {110};

Phương xếp chặt :  $\langle 111 \rangle$

$M_v = 68\%$        $M_s \{110\} = 83,4\%$

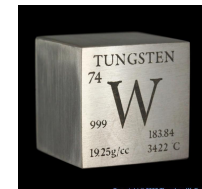
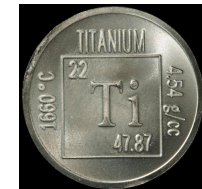


• Lỗ hổng 8 mặt: tâm các mặt bên + giữa các cạnh,  $d = 0,154d_{ng.t}$

• Lỗ hổng 4 mặt:  $\frac{1}{4}$  trên cạnh nối điểm giữa 2 cạnh đối diện,  $d = 0,291d_{ng.t}$

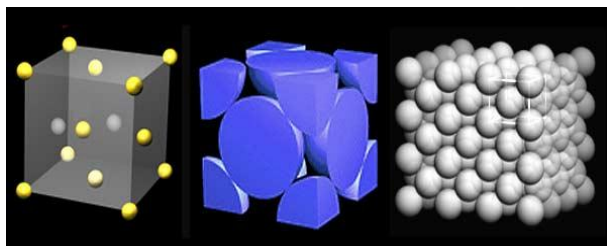
31

Kim loại có kiểu mạng A2: Fe<sub>α</sub>, Cr, Ti<sub>β</sub>, Mo, W, V.....





## 2. Lập phương tâm mặt (A1)



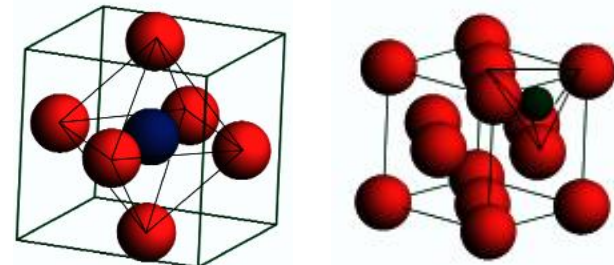
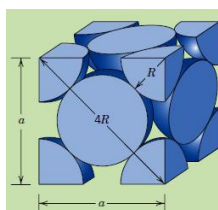
Số nguyên tử:  $n=4$

$$d_{nt} = a / \sqrt{2}$$

Mặt xếp chặt:  $\{111\}$ ;

Phương xếp chặt:  $\langle 110 \rangle$

Mv = 74% Ms  $\{111\}$  = 92%



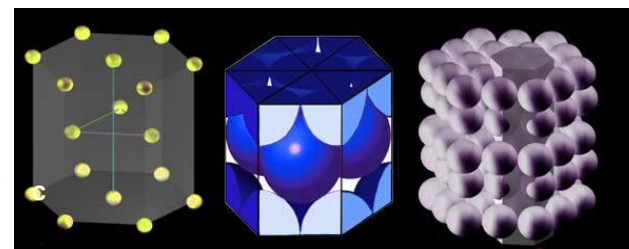
- Lỗ hổng 8 mặt: tâm khối + giữa các cạnh,  $d=0,414d_{ng.t}$
- Lỗ hổng 4 mặt:  $\frac{1}{4}$  trên các đường chéo khối tính từ đỉnh,  $d=0,225d_{ng.t}$

34

Kim loại có kiểu mạng A1: Fe<sub>v</sub>, Au, Ag, Al, Cu, Ni,...



## 3. Sáu phương xếp chặt (A3)



- Số nguyên tử:  $n=6$
- tỷ số  $c/a \rightarrow 1,57-1,64 \rightarrow$  mạng xếp chặt
- tỷ số  $c/a \rightarrow 1,57-1,64 \rightarrow$  mạng không xếp chặt

Kim loại có kiểu mạng A3: Ti, Zn, Mg, Mg, Be, Cd, Zr



### 1.3.3. Tính toán mật độ kim loại

Khối lượng riêng  $\rho$

$$\rho = \frac{nA}{V_C N_A}$$

Trong đó:

$n$ : số nguyên tử trong 1 ô cơ sở

$A$ : khối lượng nguyên tử

$V_C$ : thể tích của ô cơ sở

$N_A$ : số Avogadro ( $6,023 \times 10^{23}$  (số nt/mol))

### Bài tập

**Bài 1:** Cho bán kính nguyên tử Pb là 0,175 nm; kiểu mạng lập phương tâm mặt. Tính toán thể tích ô cơ sở (theo  $m^3$ ).

**Bài 2:** Trong cấu trúc mạng lập phương tâm khối có hằng số mạng  $a$  và bán kính nguyên tử  $R$ . Chứng minh liên hệ  $a = 4R/\sqrt{2}$ .

**Bài 3:** Chứng minh mật độ xếp thể tích mạng lập phương tâm khối là 0,68

**Bài 4:** Chứng minh mật độ xếp thể tích mạng lập phương tâm mặt là 0,74

**Bài 5:** Mo có cấu trúc tinh thể lập phương tâm khối, bán kính nguyên tử 0,1363 nm và trọng lượng nguyên tử 95,94 g/mol. Tính toán khối lượng riêng lý thuyết của Mo.

**Bài 6:** Tính bán kính nguyên tử Pd, biết rằng Pd có cấu trúc tinh thể lập phương tâm mặt, khối lượng riêng 12,0 g/cm<sup>3</sup> và trọng lượng nguyên tử của 106,4 g/mol.

**Bài 7:** Nobi có bán kính nguyên tử 0,1430 nm và khối lượng riêng 8,57 g/cm<sup>3</sup>. Xác định xem nó có một cấu trúc tinh thể lập phương tâm mặt hay lập phương tâm khối.

### 1.3.4. Cấu trúc tinh thể ceramic

- Bảo đảm trung hòa về điện: tổng điện tích âm của anion = tổng điện tích dương của cation
- Tương quan kích thước ion giữa cation và anion ảnh hưởng lớn đến kiểu mạng tinh thể và số phối trí ( $r_C/r_A$ )

$r_C/r_A$	<0,155	0,155-0,225	0,225-0,414	0,414-0,732	0,732-1,0
Số phối trí	2	3	4	6	8
Dạng phân bố ion					