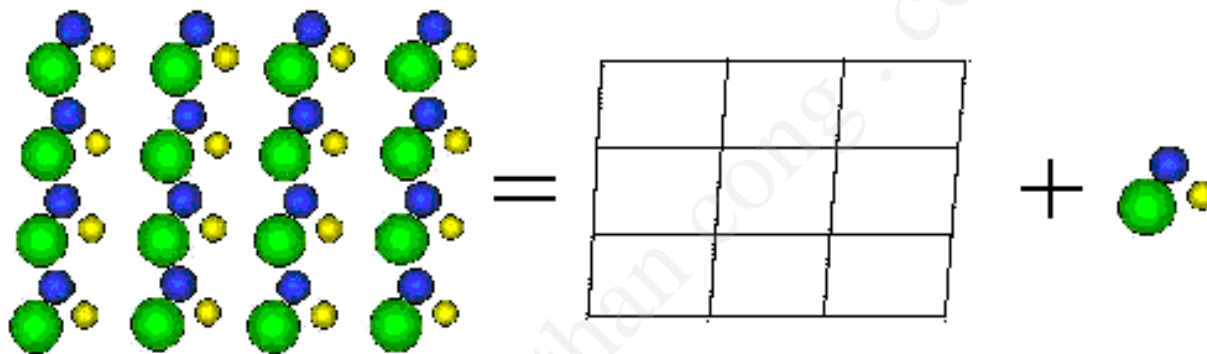


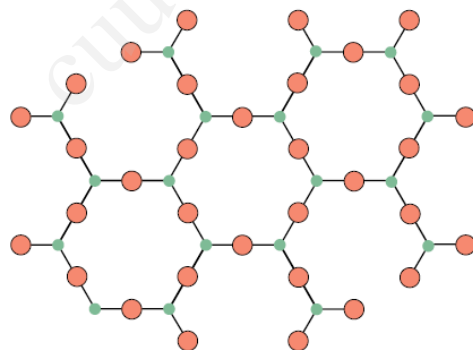
Chương 1: Cấu trúc của vật liệu rắn

Các khái niệm cơ bản:

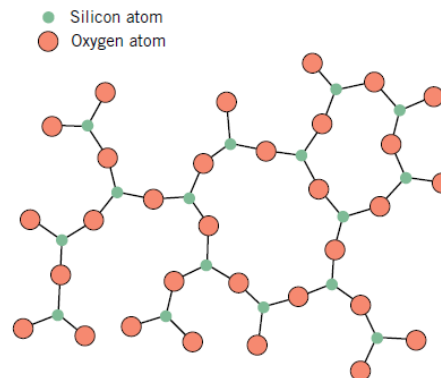
Vật liệu tinh thể là vật liệu mà trong đó các nguyên tử sắp xếp một cách tuần hoàn trong không gian.



$$\text{Tinh thể} = \text{Mạng tinh thể} + \text{Cơ sở}$$



(a)

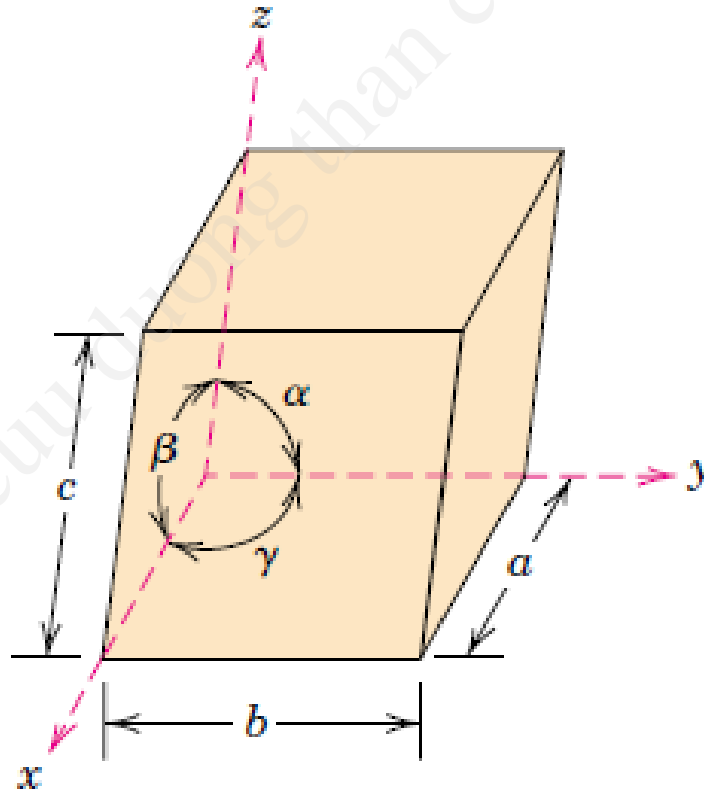


(b)

Ô đơn vị

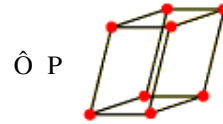
- * Là mạng tinh thể nhỏ nhất mà bằng cách tịnh tiến nó theo hướng của ba trục tinh thể ta có thể thu được toàn bộ tinh thể
- * Mỗi ô đơn vị được đặc trưng bởi hằng số mạng: a , b , c ,

Hình học của ô đơn vị được xác định bởi 6 thông số



Mạng tinh thể ba chiều

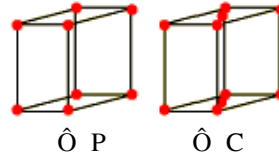
Hệ tam tà



$$a_1 \neq a_2 \neq a_3 ;$$

$$\alpha \neq \beta \neq \gamma$$

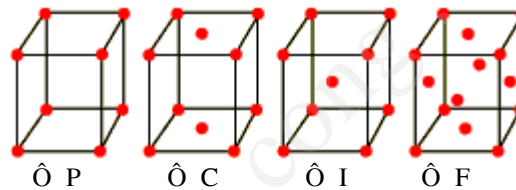
Hệ đơn tà



$$a_1 \neq a_2 \neq a_3 ;$$

$$\alpha = \beta = 90^\circ \neq \gamma$$

Hệ trực thoi



$$a_1 \neq a_2 \neq a_3 ;$$

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

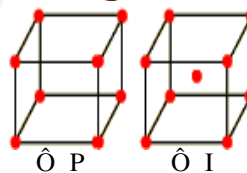
Hệ ba phương



$$a_1 = a_2 = a_3 ;$$

$$\alpha = \beta = \gamma < 120^\circ, \neq 90^\circ$$

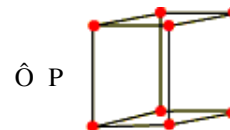
Hệ bốn phương



$$a_1 = a_2 \neq a_3 ;$$

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

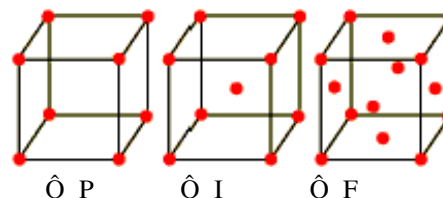
Hệ sáu phương



$$a_1 = a_2 \neq a_3 ;$$

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

Hệ lập phương

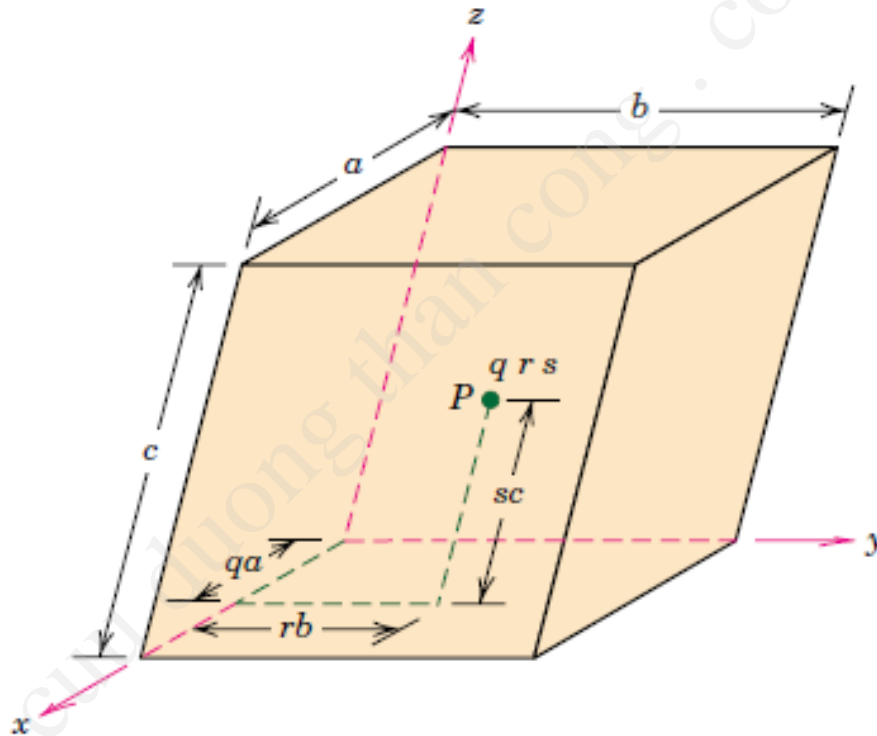


$$a_1 = a_2 = a_3 ;$$

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

Hướng và mặt tinh thể

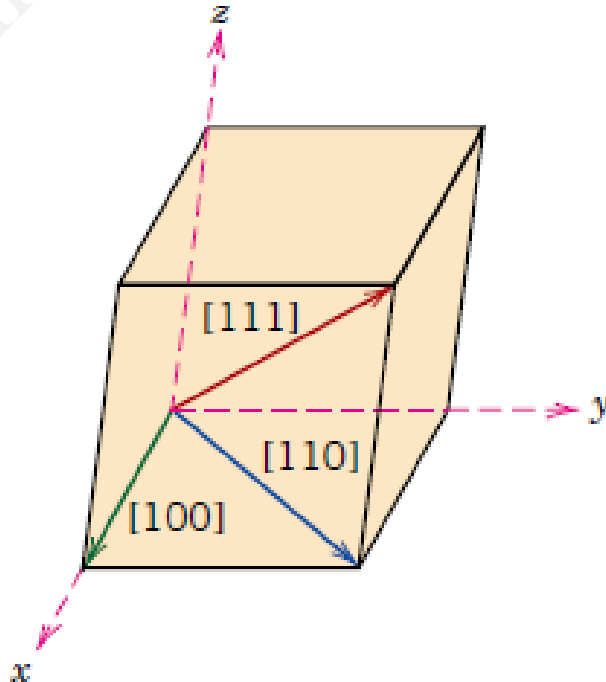
Vị trí của một điểm trong ô đơn vị được biểu diễn theo thông số mạng a , b , c



Hướng tinh thể đặc trưng bởi một vectơ

Cách xác định vectơ chỉ hướng

- Góc của vectơ là góc của hệ trục tọa độ
- Độ lớn của mỗi hướng được biểu diễn thông qua kích thước ô đơn vị a , b , c
- Các giá trị này có thể được nhân hoặc chia với một hệ số để nhận được giá trị nguyên nhỏ nhất.
- Ba chỉ số này được biểu diễn $[uvw]$

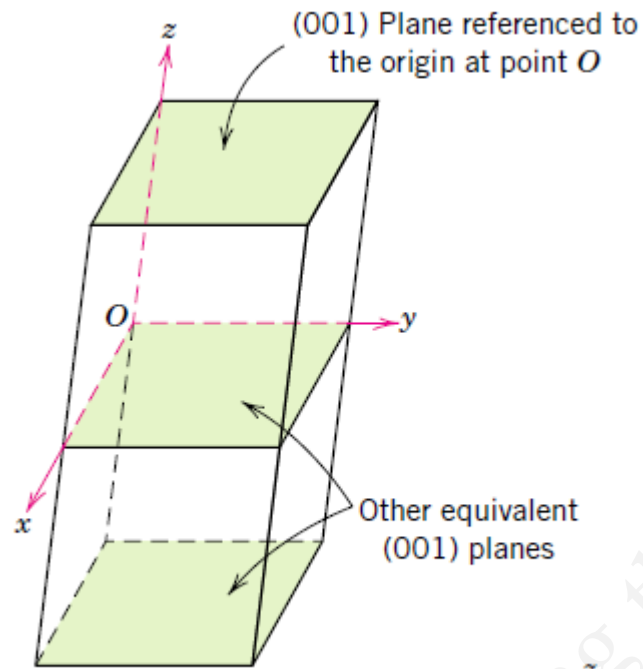


Mặt tinh thể đặc trưng bởi chỉ số Miller (hkl)

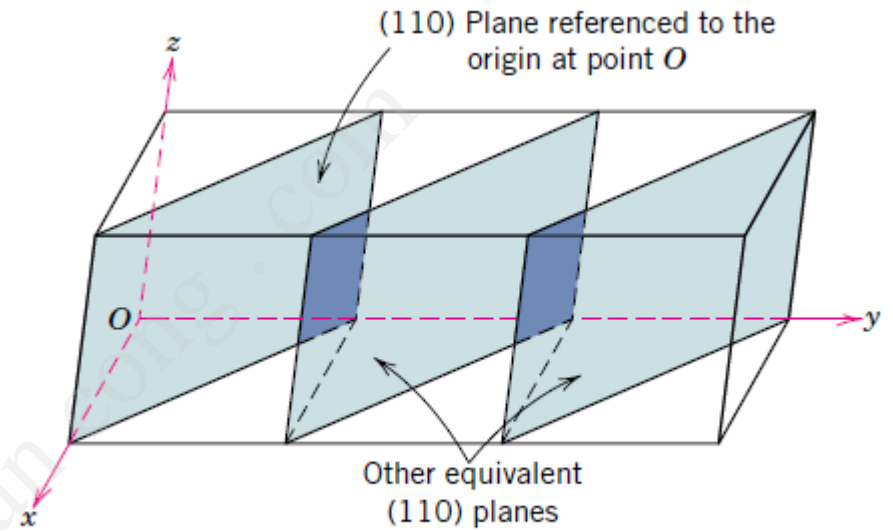
Hai mặt phẳng song song là tương đương nhau và có cùng h, k, l

Các bước xác định chỉ số h, k, l của mặt tinh thể

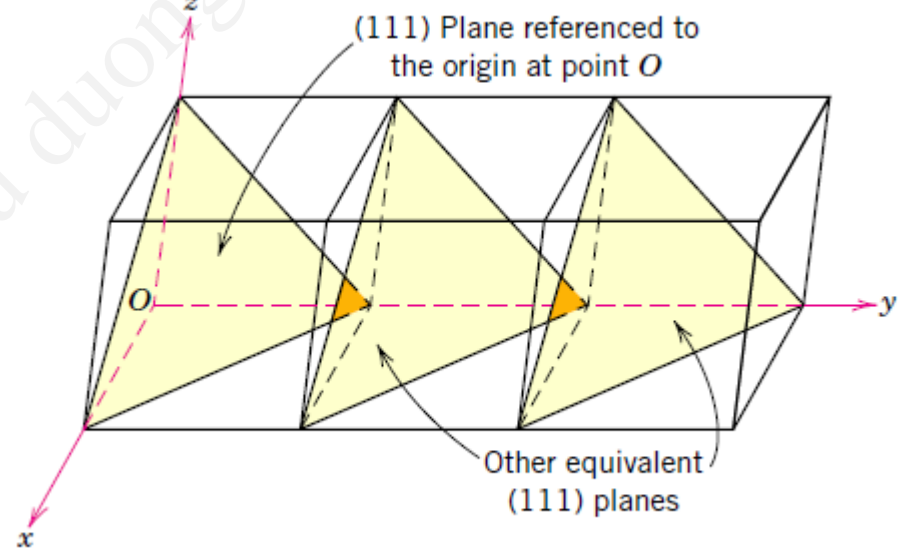
- Nếu mặt phẳng qua gốc tọa độ, thì một mặt phẳng song song khác được tạo ra bằng cách tịnh tiến mặt phẳng này một đoạn thích hợp hoặc một gốc tọa độ mới tại một góc khác của ô đơn vị phải được thiết lập.
- Mặt phẳng cắt hoặc song song với các trục tọa độ, từ đó xác định được độ dài theo các trục thông qua a, b, c.
- Nghịch đảo của các giá trị chính là h, k, l. Nếu mặt phẳng song song với một trục thì chỉ số Miller bằng 0.
- Các giá trị này có thể nhân hoặc chia với một số để h, k, l là các số nguyên nhỏ nhất.
- Biểu diễn chỉ số Miller (hkl).



(a)



(b)



(c)

Khoảng cách d_{hkl} giữa họ mặt (hkl) cho các hệ tinh thể

Hệ đơn tà (trục duy nhất song song với a_3)

$$\frac{1}{d_{hkl}^2} = \frac{h^2}{a_1^2 \sin^2 \gamma} + \frac{k^2}{a_2^2 \sin^2 \gamma} + \frac{l^2}{a_3^2} - \frac{2hk \cos \gamma}{a_1 a_2 \sin^2 \gamma}$$

Hệ trực thoi (orthorhombic)

$$\frac{1}{d_{hkl}^2} = \left(\frac{h}{a_1}\right)^2 + \left(\frac{k}{a_2}\right)^2 + \left(\frac{l}{a_3}\right)^2$$

Hệ bốn phương (tetragonal) ($a_1 = a_2 = a$; $a_3 = c$)

$$\frac{1}{d_{hkl}^2} = \left(\frac{h^2 + k^2}{a^2}\right) + \frac{l^2}{c^2}$$

Hệ lập phương

$$\frac{1}{d_{hkl}^2} = \frac{h^2 + k^2 + l^2}{a^2}$$

Hệ sáu phương (hexagonal) ($a_1 = a_2 = a$; $a_3 = c$)

$$\frac{1}{d_{hkl}^2} = \frac{4}{3} \left(\frac{h^2 + hk + k^2}{a^2}\right) + \frac{l^2}{c^2}$$

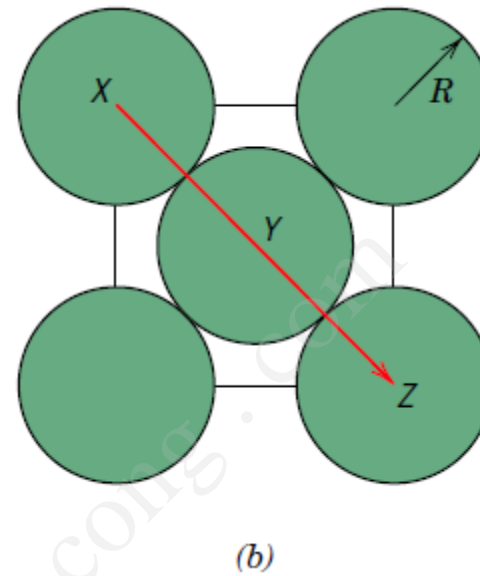
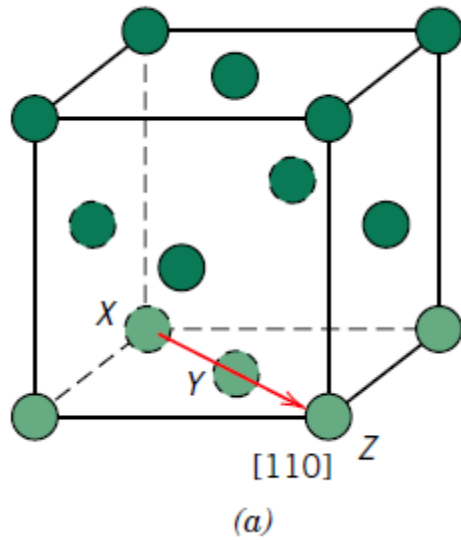
Hệ ba phương (rhombohedral) ($a_1 = a_2 = a_3 = a$; $\alpha = \beta = \gamma$)

$$\frac{1}{d_{hkl}^2} = \frac{(h^2 + k^2 + l^2) \sin^2 \alpha + 2(hk + kl + hl)(\cos^2 \alpha - \cos \alpha)}{a^2 (1 - 3 \cos^2 \alpha + 2 \cos^3 \alpha)}$$

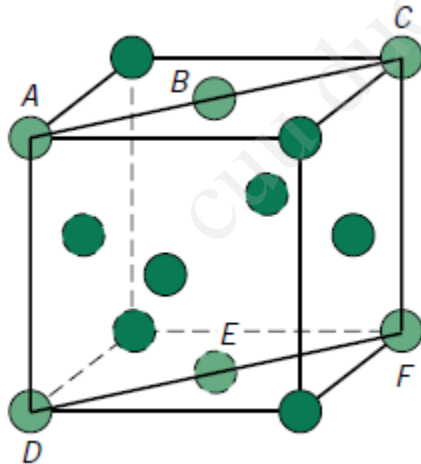
Mật độ đường (LD) – Mật độ mặt (PD)

$$LD = \frac{\text{number of atoms centered on direction vector}}{\text{length of direction vector}} \quad \text{nm}^{-1}, \text{m}^{-1}$$

$$PD = \frac{\text{number of atoms centered on a plane}}{\text{area of plane}} \quad \text{nm}^{-2}, \text{m}^{-2}$$



$$LD_{110} = \frac{2 \text{ atoms}}{4R} = \frac{1}{2R}$$



$$PD_{110} = \frac{2 \text{ atoms}}{8R^2\sqrt{2}} = \frac{1}{4R^2\sqrt{2}}$$

Cấu trúc tinh thể kim loại

- Lập phương tâm mặt (FCC)
- Lập phương tâm khối (BCC)
- Lục giác xếp chặt (HCP)

Lập phương tâm mặt

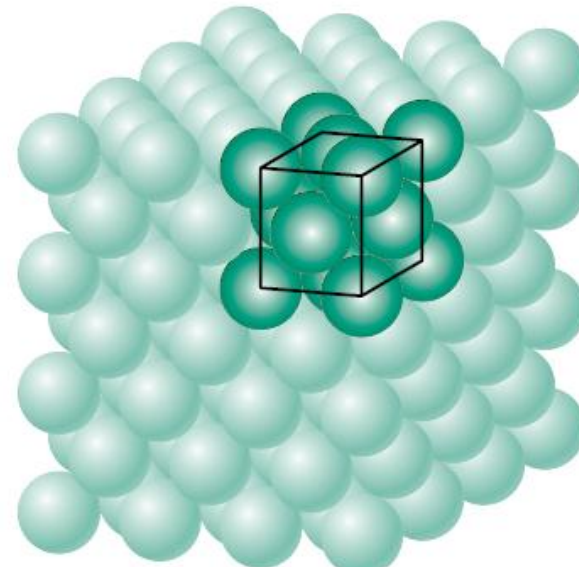
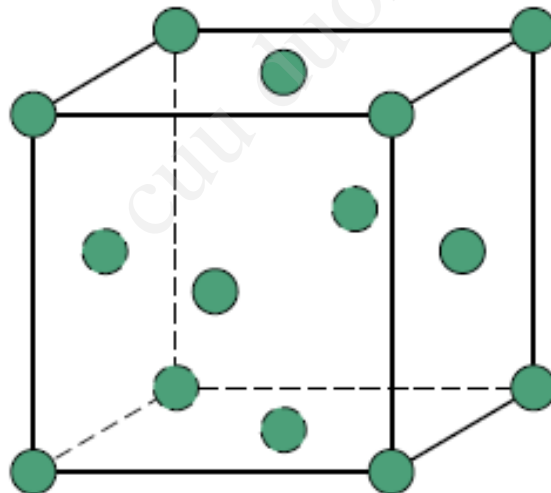
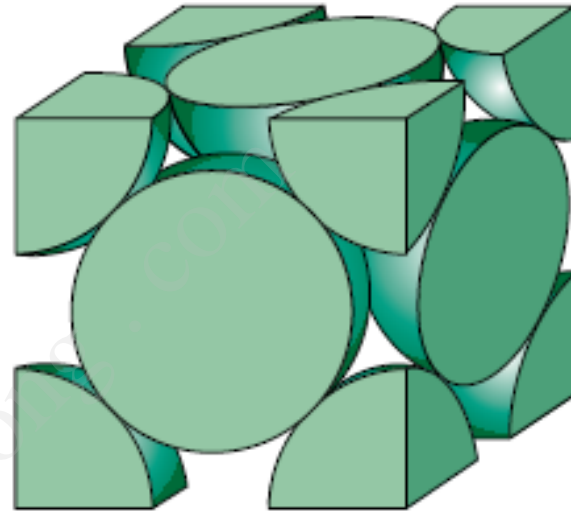
$$a = 2R\sqrt{2}$$

Số nguyên tử trong ô đơn vị:

Hệ số xếp chặt (APF)

$$APF = \frac{\text{volume of atoms in a unit cell}}{\text{total unit cell volume}}$$

APF của FCC là

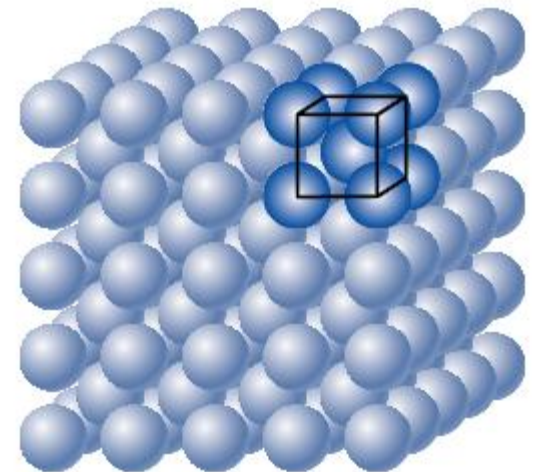
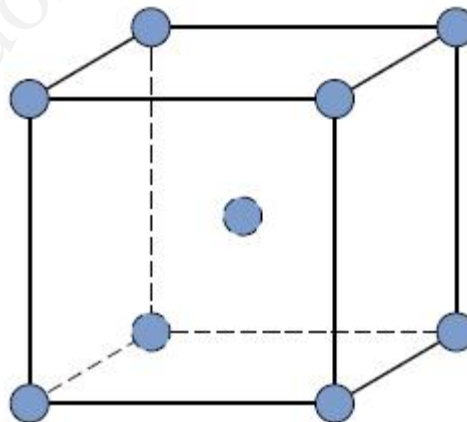
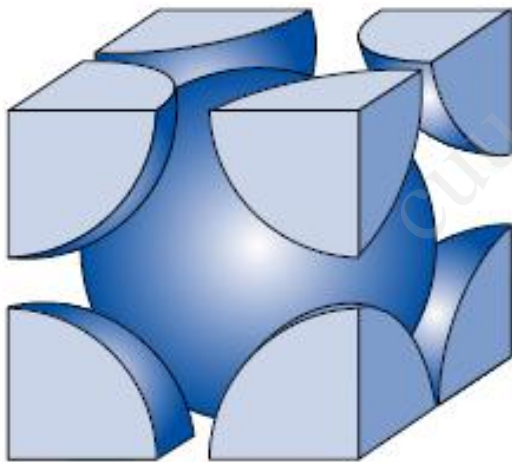


Lập phương tâm khối

$$a = \frac{4R}{\sqrt{3}}$$

Số nguyên tử trong ô đơn vị:

Hệ số xếp chặt (APF) là



Lục giác xếp chặt

Ô đơn vị có 2 thông số mạng là a và c , trường hợp lý tưởng = c/a

Số nguyên tử trong ô đơn vị:

Hệ số xếp chặt (APF) là

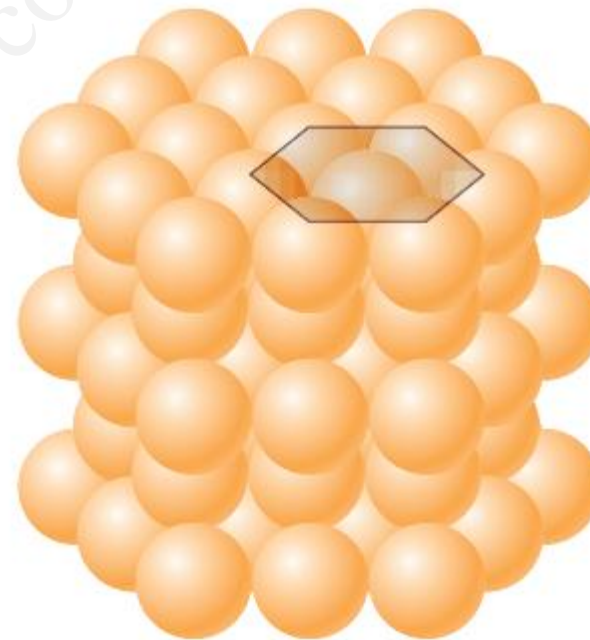
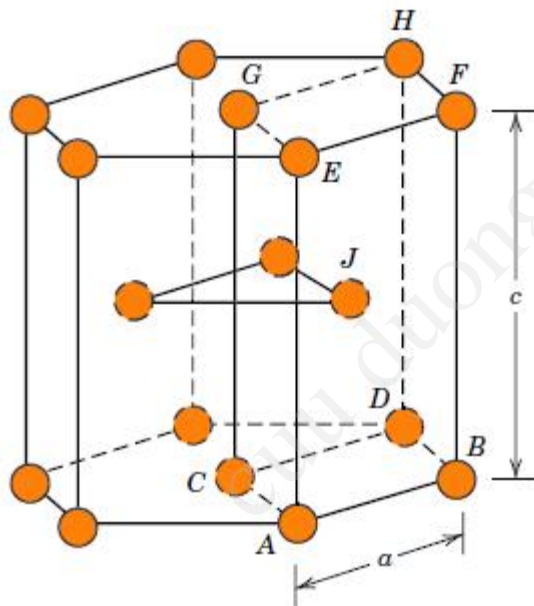


Table 3.1 Atomic Radii and Crystal Structures for 16 Metals

<i>Metal</i>	<i>Crystal Structure^a</i>	<i>Atomic Radius^b (nm)</i>	<i>Metal</i>	<i>Crystal Structure</i>	<i>Atomic Radius (nm)</i>
Aluminum	FCC	0.1431	Molybdenum	BCC	0.1363
Cadmium	HCP	0.1490	Nickel	FCC	0.1246
Chromium	BCC	0.1249	Platinum	FCC	0.1387
Cobalt	HCP	0.1253	Silver	FCC	0.1445
Copper	FCC	0.1278	Tantalum	BCC	0.1430
Gold	FCC	0.1442	Titanium (α)	HCP	0.1445
Iron (α)	BCC	0.1241	Tungsten	BCC	0.1371
Lead	FCC	0.1750	Zinc	HCP	0.1332

^aFCC = face-centered cubic; HCP = hexagonal close-packed; BCC = body-centered cubic.

^bA nanometer (nm) equals 10^{-9} m; to convert from nanometers to angstrom units (\AA), multiply the nanometer value by 10.

Công thức tính mật độ lý thuyết của kim loại

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

Ở đây: n là số nguyên tử trong ô đơn vị

A : nguyên tử khối

V_C : thể tích ô đơn vị

N_A số Avogadro

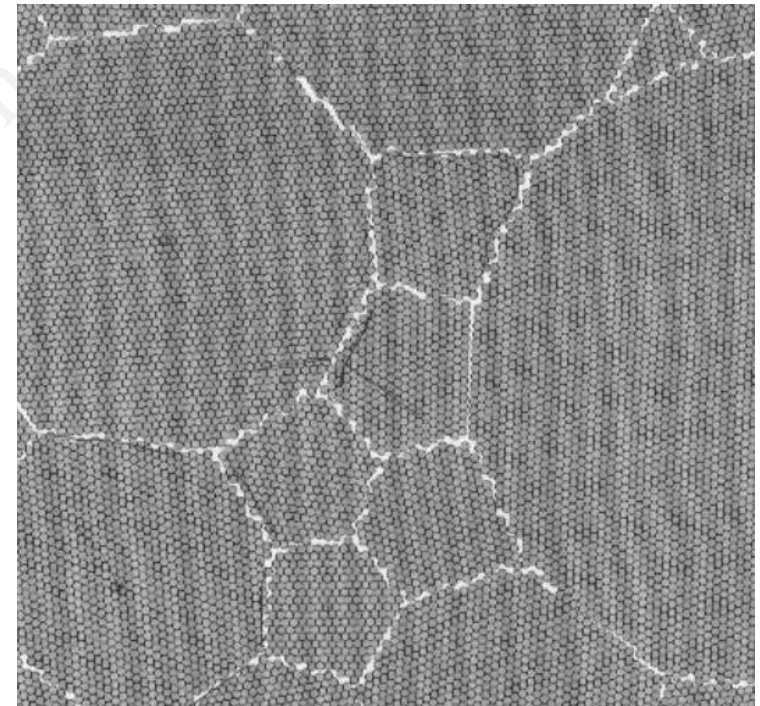
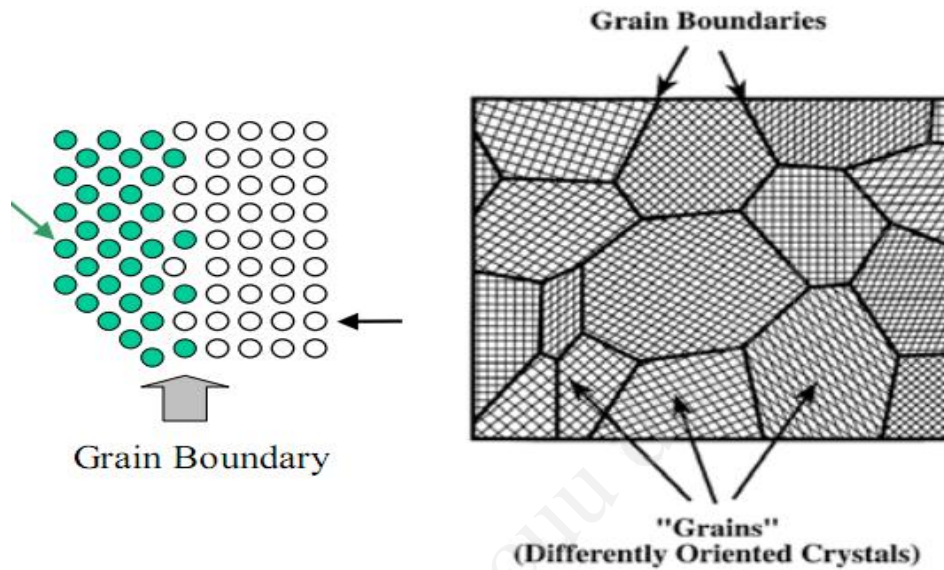
ĐƠN TINH THỂ - ĐA TINH THỂ

Vật rắn đơn tinh thể là vật được cấu tạo từ một tinh thể hoặc nhiều tinh thể nhỏ liên kết theo một trật tự xác định.

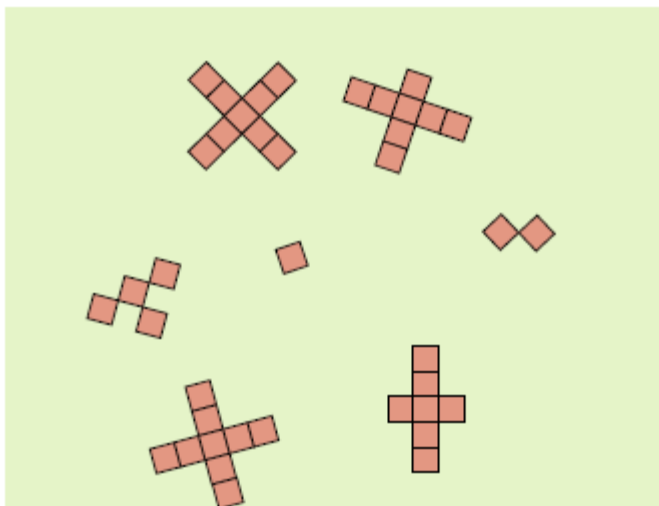


Garnet single crystal

Vật rắn đa tinh thể là vật được cấu tạo từ nhiều tinh thể nhỏ liên kết hỗn độn.
Hầu hết các kim loại (sắt, nhôm, đồng,...) là vật rắn đa tinh thể.



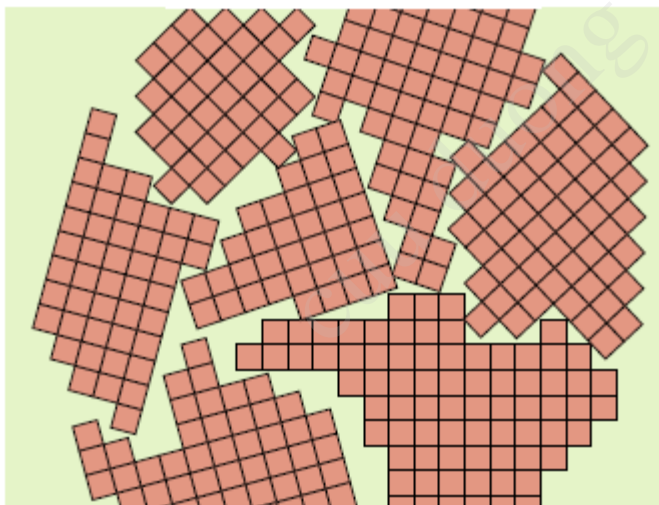
Quá trình hình thành vật liệu đa tinh thể



(a)



(b)



(c)



(d)

ANISOTROPY

Đơn tinh thể - dị hướng

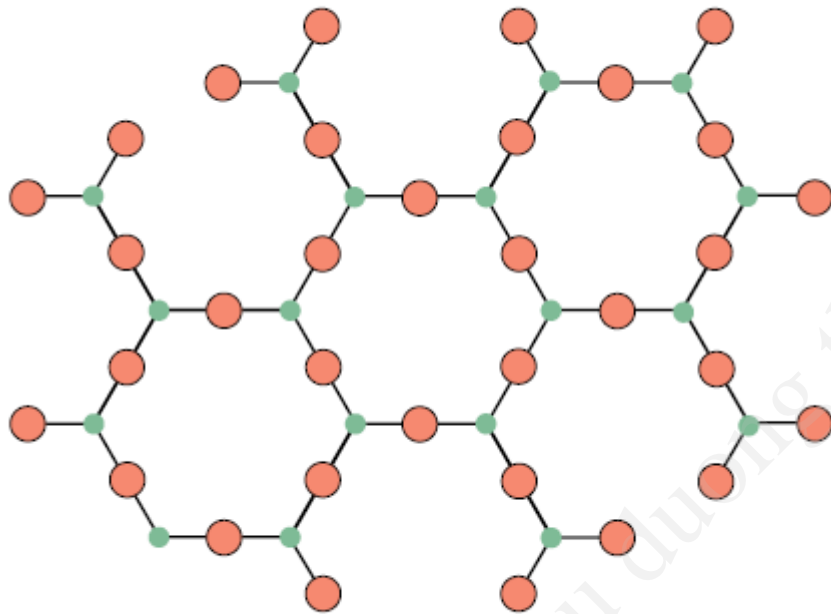
Đa tinh thể - đẳng hướng

<i>Metal</i>	<i>Modulus of Elasticity (GPa)</i>		
	<i>[100]</i>	<i>[110]</i>	<i>[111]</i>
Aluminum	63.7	72.6	76.1
Copper	66.7	130.3	191.1
Iron	125.0	210.5	272.7
Tungsten	384.6	384.6	384.6

Tính chất của chất rắn kết tinh

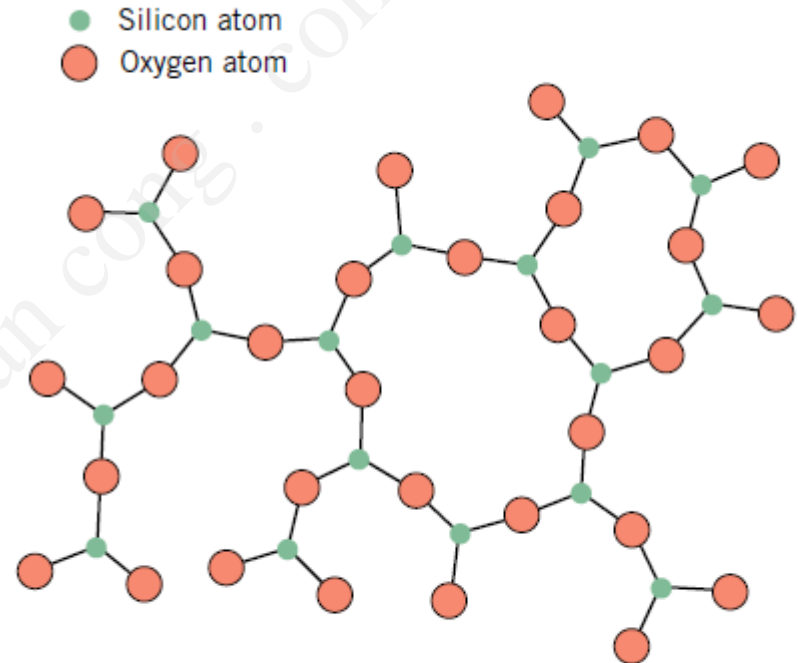
- a) Các chất rắn kết tinh được cấu tạo từ cùng một loại hạt, nhưng cấu trúc tinh thể không giống nhau thì những tính chất vật lí của chúng cũng rất khác nhau.
- b) Mỗi chất rắn kết tinh (ứng với 1 cấu trúc tinh thể) có nhiệt độ nóng chảy xác định không đổi ở mỗi áp suất cho trước.
- c) Chất rắn kết tinh có thể là chất đơn tinh thể hoặc chất đa tinh thể.

VẬT LIỆU VÔ ĐỊNH HÌNH



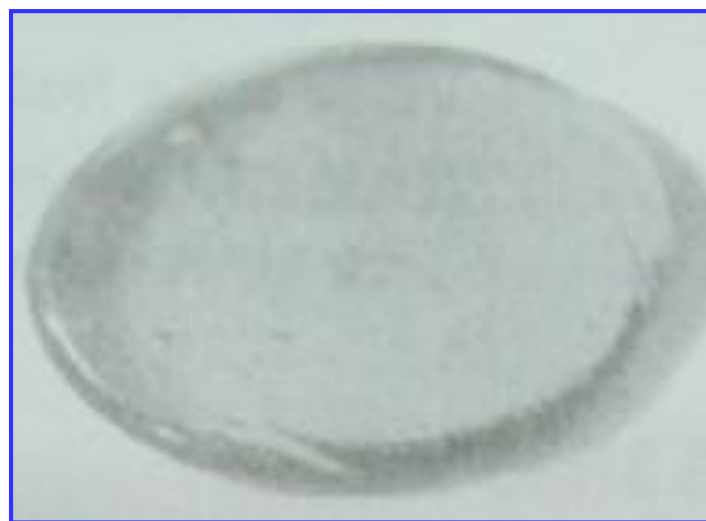
(a)

crystal



(b)

amorphous



Nhựa thông



Hắc ín



Thủy tinh

<i>Equation</i>	<i>Solving for</i>
$a = 2R\sqrt{2}$	Unit cell edge length, FCC
$APF = \frac{\text{volume of atoms in a unit cell}}{\text{total unit cell volume}} = \frac{V_s}{V_c}$	Atomic packing factor
$a = \frac{4R}{\sqrt{3}}$	Unit cell edge length, BCC
$\rho = \frac{nA}{V_c N_A}$	Theoretical density of a metal
$LD = \frac{\text{number of atoms centered on direction vector}}{\text{length of direction vector}}$	Linear density
$PD = \frac{\text{number of atoms centered on a plane}}{\text{area of plane}}$	Planar density
$n\lambda = 2d_{hkl} \sin \theta$	Bragg's law; wavelength-interplanar spacing-angle of diffracted beam
$d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}$	Interplanar spacing for crystals having cubic symmetry

Một số ví dụ

1/ Tính thể tích ô đơn vị của FCC theo R

ĐS: $V_C = a^3 = (2R\sqrt{2})^3 = 16R^3\sqrt{2}$

2/ CMR hệ số xếp chặt của tt cấu trúc FCC là 0,74

3/ Đồng có cấu trúc tt FCC, bán kính nguyên tử 0,128

Nguyên tử hơ 63,5 g/mol Tính mật độ lý thuyết và so sánh vs thực đo

$$\begin{aligned}\rho &= \frac{nA_{\text{Cu}}}{V_C N_A} = \frac{nA_{\text{Cu}}}{(16R^3\sqrt{2})N_A} \\ &= \frac{(4 \text{ atoms/unit cell})(63.5 \text{ g/mol})}{[16\sqrt{2}(1.28 \times 10^{-8} \text{ cm})^3/\text{unit cell}](6.022 \times 10^{23} \text{ atoms/mol})} \\ &= 8.89 \text{ g/cm}^3\end{aligned}$$