

## CHƯƠNG 8: KHUYẾT TẬT TRONG CẤU TRÚC

### 8.2. Khái niệm

Cấu trúc tinh thể của vật liệu thường gồm một số rất lớn nguyên tử chứa trong một thể tích nhỏ nên dễ xảy ra các sai lệch trong sự sắp xếp nguyên tử.

Ví dụ: Với Fe (Bcc),  $a = 2,87 \cdot 10^{-8} \text{cm}$ ,  $n = 2$ , có  $2/(2,87 \cdot 10^{-8})^3 = 8,5 \cdot 10^{22}$  nguyên tử/cm<sup>3</sup>

Các sai lệch trong sắp xếp nguyên tử được gọi là các khuyết tật, mất trật tự, sai lệch, sai hỏng, sai sót (defect) và có thể tồn tại ở các dạng:

- Sai lệch ở các nguyên tử riêng lẻ gọi là khuyết tật điểm (Point defects)
- Sai lệch ở các dãy nguyên tử gọi là khuyết tật đường (Linear defects)
- Sai lệch ở các mặt nguyên tử gọi là khuyết tật mặt (Planar defects)
- Sai lệch ở các cụm nguyên tử gọi là khuyết tật thể tích (Volume defects)

Trong thực tế để sản xuất một vật liệu ở quy mô công nghiệp thường khó đạt được độ tinh khiết 100%, vì vậy sản phẩm thường chứa tạp chất. Ngoài ra trong một vài trường hợp, để nhận được một tính chất nào đó của vật liệu, người ta lại cố ý thêm vào các nguyên tử khác (thường gọi là phụ gia). Trong giáo trình này, người ta xem các nguyên tử lạ dù được thêm vào vô tình hay cố ý đều tạo ra khuyết tật và được gọi là tạp chất

Ví dụ: Thêm Sn, Bi vào Pb để giảm nhiệt độ nóng chảy (làm vật liệu hàn).

Các khuyết tật (sai lệch và tạp chất) đều ảnh hưởng lớn đến tính chất vật liệu

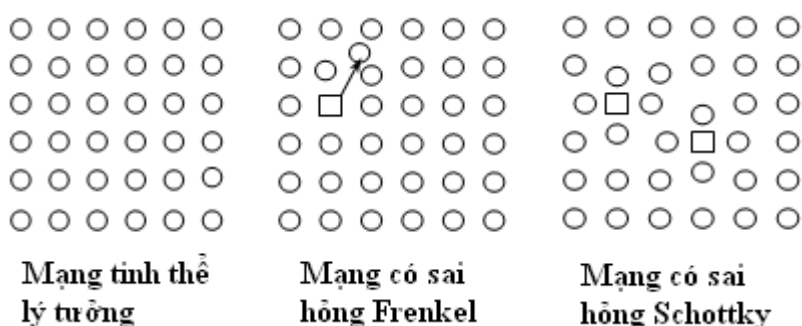
Ví dụ: Độ dẫn điện của Si rất kém nhưng thêm một lượng nhỏ P để tạo bán dẫn loại n thì độ dẫn điện sẽ tăng lên đáng kể.

### 8.3. Khuyết tật điểm

#### 8.3.1. Tạo nút trống, nguyên tử xen kẽ (Vacancies, interstitials)

Trong tinh thể, nguyên tử luôn dao động xung quanh vị trí cân bằng của mình. Khi một số nguyên tử có năng lượng đủ lớn, biên độ dao động lớn, sẽ bứt ra khỏi vị trí cân bằng và để lại những nút trống.

Sau khi rời khỏi vị trí cân bằng, các nguyên tử có thể xen kẽ giữa các nút mạng (tạo nút trống và nguyên tử xen kẽ theo cơ chế sai hỏng Frenkel) hoặc nguyên tử di chuyển ra biên giới tinh thể và chỉ tạo ra các nút trống (tạo nút trống theo cơ chế sai hỏng Schottky).

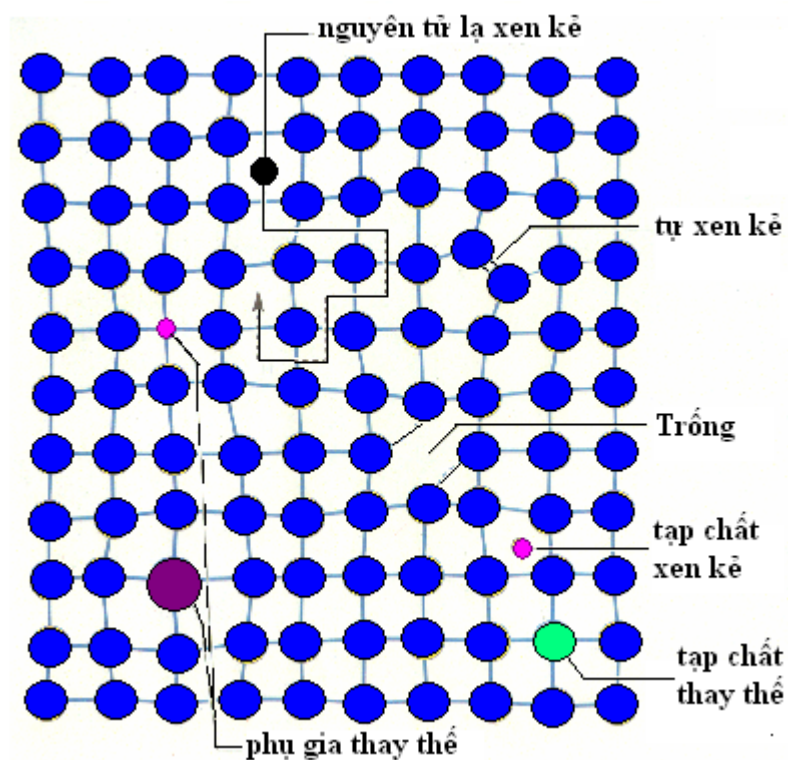
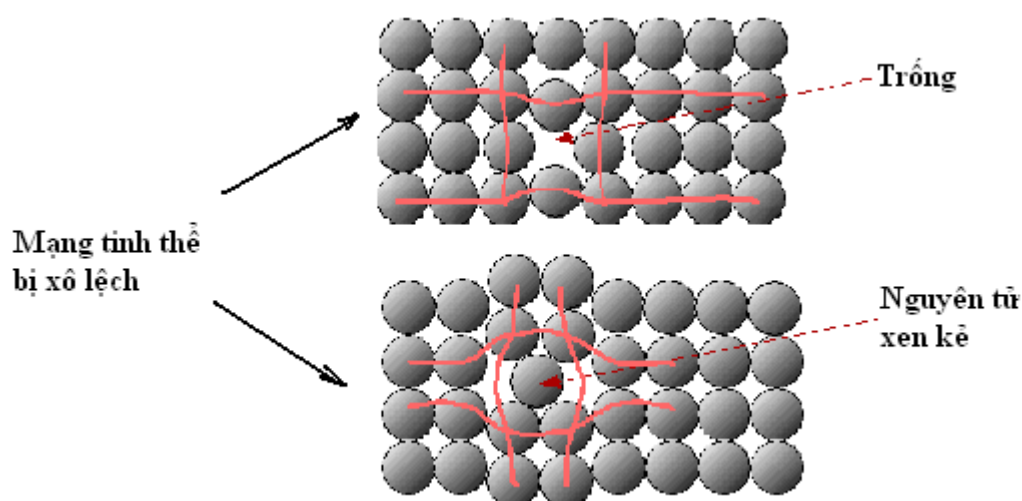


Các nút trống và nguyên tử xen kẽ không đứng yên mà luôn trao đổi vị trí với các nguyên tử bên cạnh theo các cơ chế khuếch tán trong chất rắn (khuếch tán nhờ các ion xen kẽ di chuyển và nhờ sự trao đổi giữa các nút trống).

#### 8.3.2. Tạp chất:

Các nguyên tử tạp chất có thể thay thế nguyên tử chính ở các nút mạng hoặc xen kẽ giữa các nút mạng.

Nói chung các lỗ trống, các nguyên tử xen kẽ, tạp chất đều làm mạng tinh thể bị xô lệch tạo ra các khuyết tật điểm.



### 8.3.3. Khuyết tật điểm trong cấu trúc tinh thể ion

#### 8.3.3.1. Ký hiệu khuyết tật điểm theo Kröger – Vink

Giả sử có mạng MX và tạp chất LY

$  \begin{array}{ccccccc}  M & \textcircled{M} & M & X & M & X & \textcircled{X} & M \\  X & M & Y & \square & X & M & X & \\  M & X & \textcircled{M} & M & X & L & \square & M \\  X & M & X & \textcircled{X} & X & M & X &   \end{array}  $	<p>X, M: anion, cation hóa trị 1  Y, L: anion, cation hóa trị 2  Tích điện dương 1 <math>\rightarrow \bullet</math>; dương 2 <math>\rightarrow \bullet\bullet</math>  âm 1 <math>\rightarrow ';</math> âm 2 <math>\rightarrow ''</math></p>
<p>M: nguyên tử M đúng vị trí M  X: nguyên tử X đúng vị trí X  L: nguyên tử L ở vị trí M  Y: nguyên tử Y ở vị trí X  <math>\square</math>: Trống vị trí M  <math>\square</math>: Trống vị trí X</p>	<p> <math>M_M</math>  <math>X_X</math>  <math>L_M^\bullet</math>  <math>Y_X'</math>  <math>V_M'</math>  <math>V_X^\bullet</math> </p> <p> <math>\textcircled{M}</math>: M ở vị trí xen kẽ  <math>\textcircled{X}</math>: X ở vị trí xen kẽ  <math>\textcircled{M}</math>: M thay vị trí X  <math>\textcircled{X}</math>: X thay vị trí M </p> <p> <math>M_i^\bullet</math>  <math>X_i'</math>  <math>M_X''</math>  <math>X_M''</math> </p>

Tổng quát  $A_B^C$

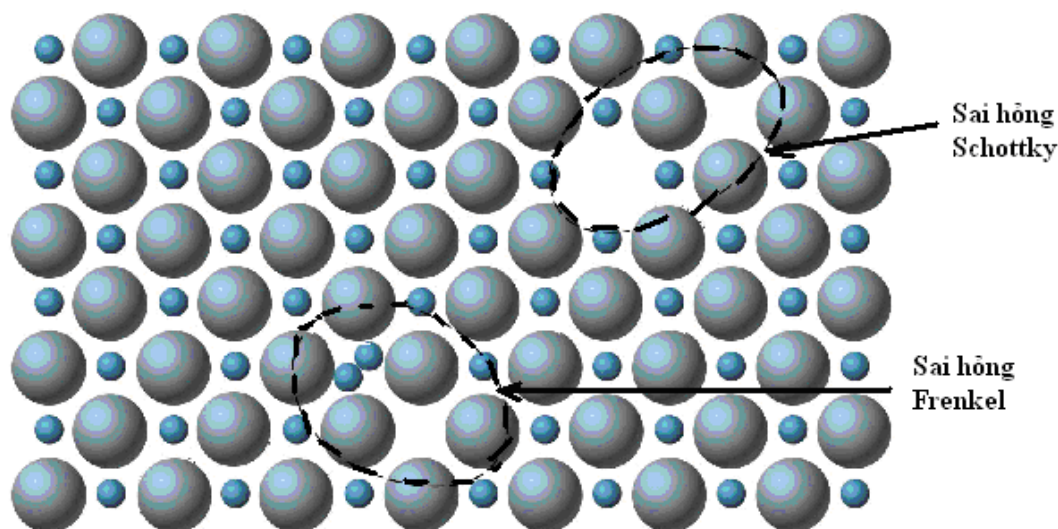
A: cái muốn nói  $\rightarrow$  ion: L, M, X, Y.

$\rightarrow$  trống: V

B: vị trí  $\rightarrow$  M, X.

$\rightarrow$  xen kẻ  $\rightarrow$  i.

C: Điện tích.

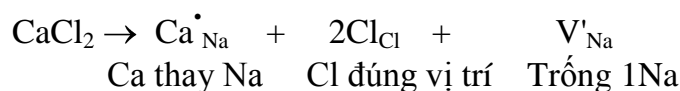


### 8.3.3.2. Nguyên tắc khi mất trật tự

▪ Nguyên tắc trung hòa về điện:  $\sum$  điện tích dương =  $\sum$  điện tích âm.

▪ Nguyên tắc bảo tồn vật chất

Ví dụ: Khi thêm  $\text{CaCl}_2$  vào  $\text{NaCl}$



### 8.3.3.3. Các loại mất trật tự thường gặp

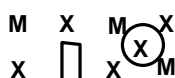
#### a) Sai hỏng Frenkel cation



M vào vị trí xen kẻ, để lại một trống M

$$\text{M}_i^{\bullet} + \text{V}_M' = 0$$

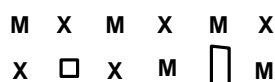
#### b) Sai hỏng Frenkel anion



X vào xen kẻ, để lại 1 trống X

$$\text{V}_X^{\bullet} + \text{X}_i' = 0$$

#### c) Sai hỏng Schottky



Trống 1 M thì có trống 1 X

$$\text{V}_X^{\bullet} + \text{V}_M' = 0$$

### 8.3.4. Mật độ khuyết tật

Đối với mạng tinh thể chỉ có một loại nguyên tử (kim loại, kim cương, graphit)

#### 8.3.4.1. Số nút trống

$$N_v = N_T \exp(-Q_{fv} / RT)$$

$N_v$ : số nút trống ở nhiệt độ T ( $^{\circ}\text{K}$ ), ( $R = 8,31 \text{ J / mol } ^{\circ}\text{K}$ )

$N_T$ : tổng số nút trong mạng (= tổng số nút trống + tổng số nút còn chứa nguyên tử)

$Q_{fv}$ : năng lượng hoạt hóa để tạo một lỗ trống (= năng lượng để đẩy nguyên tử ra khỏi vị trí cân bằng của nó) ( $\text{J / mol}$ )

### 8.3.4.2. Mật độ nút trống

$$C_v = \frac{N_v}{N_T} = \exp(-Q_{fv} / RT)$$

Số nguyên tử xen kẽ và mật độ nguyên tử xen kẽ cũng tính như đối với nút trống, nhưng thay  $Q_{fv}$  bởi  $Q_{fi}$  (năng lượng hoạt hóa để tạo một nguyên tử xen kẽ)

### 8.3.4.3. Đối với mạng tinh thể ion

#### ▪ Sai hỏng Frenkel

$$C_v = \frac{N_v}{N_T} = \exp(-W_f / 2RT) = \frac{N_i}{N_T} = C_i$$

$C_v, C_i$ : mật độ nút trống và ion xen kẽ

$W_f$ : năng lượng để tạo một nút trống và một ion xen kẽ = năng lượng để tạo một sai hỏng Frenkel

Hệ số 2: có 2 khuyết tật tạo thành trong quá trình

#### ▪ Sai hỏng Schottky cho hợp chất MX (NaCl)

$$C_{v,cation} = \frac{N_{v,cation}}{N_T} = \exp(-W_s / 2RT) = \frac{N_{v,anion}}{N_T} = C_{v,anion}$$

$C_{v,cation}, C_{v,anion}$ : mật độ nút trống cation và trống anion

$W_s$ : năng lượng để tạo một cặp trống anion, cation = năng lượng để tạo một sai hỏng Schottky.

#### ▪ Sai hỏng Schottky cho hợp chất $M_nX_p$

$$pC_{v,cation} = (np) \exp(-W_{sc} / [n^2 + p^2]RT) = nC_{v,anion}$$

$W_{sc}$ : năng lượng để tạo ra một cụm: n trống cation và p trống anion

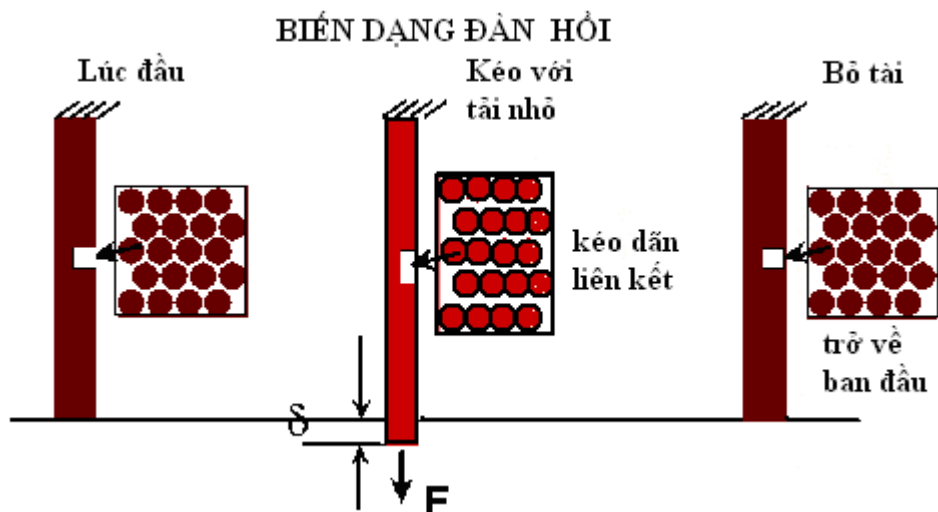
## 8.4. Khuyết tật đường (còn gọi là Lệch: dislocation)

### 8.4.1. Biến dạng dẻo:

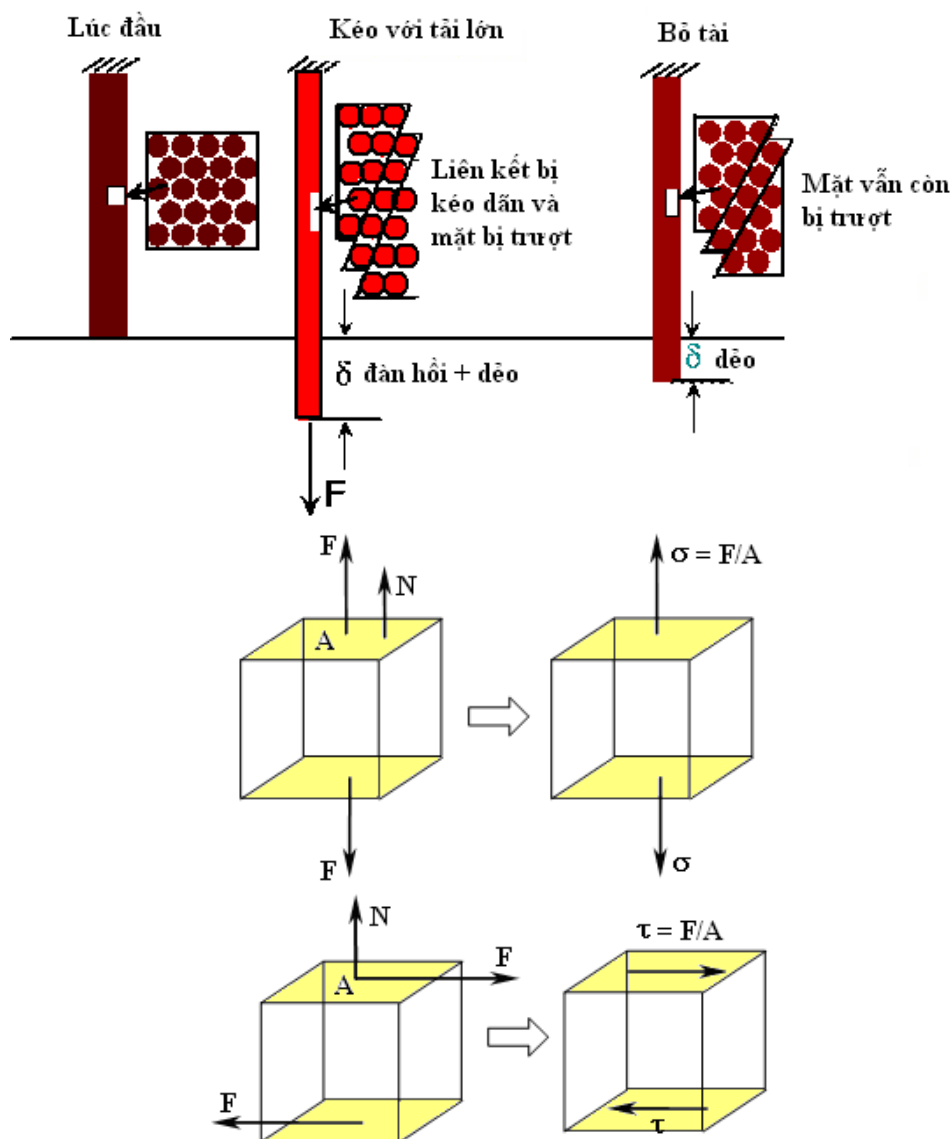
Tác dụng một lực cơ học lên một mẫu vật liệu, nếu sau khi bỏ tác dụng lực mà mẫu trở về hình dạng, kích thước ban đầu thì biến dạng gọi là biến dạng đàn hồi, nếu vẫn giữ nguyên thì gọi là biến dạng dẻo.

Biến dạng dẻo là kết quả của sự dịch chuyển các nguyên tử từ vị trí cân bằng này đến vị trí cân bằng khác dưới tác dụng của một lực với biên độ đủ lớn.

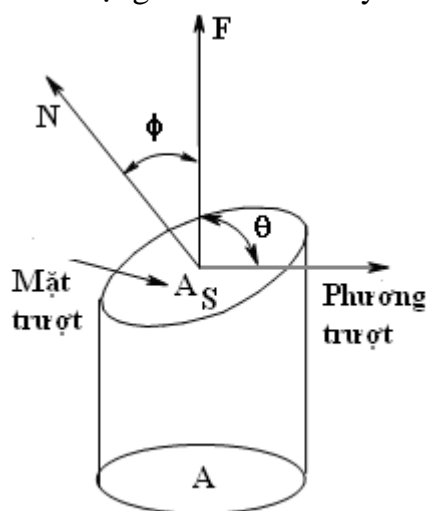
Ứng suất là tỉ số giữa lực và diện tích. Nếu lực song song với pháp tuyến thì ứng suất gọi là ứng suất pháp tuyến  $\sigma$ , nếu lực vuông góc với pháp tuyến ta có ứng suất trượt  $\tau$  (shear stress).



## BIẾN DẠNG DỄ



Biến dạng dẻo sinh ra do tác dụng của ứng suất trượt và chỉ xảy ra trên các mặt và phương xếp chặt. Đối với mỗi mặt và phương, sẽ có một giá trị ứng suất trượt tới hạn mà tại đó biến dạng dẻo bắt đầu xảy ra.



Mặt, phương mà biến dạng dẻo xảy ra thì gọi là mặt trượt và phương trượt.

Hệ gồm mặt trượt và phương trượt gọi là hệ trượt.

## Quan hệ giữa ứng suất pháp tuyến và ứng suất trượt

$\theta$ : Góc giữa phương lực  $F$  và phương trượt.

$\phi$ : Góc giữa phương trượt và pháp tuyến của mặt trượt (chỉ số phương pháp tuyến = chỉ số mặt trượt)

$$F_s = F \cos \theta \qquad A_s = A / \cos \phi$$

$$\frac{F_s}{A_s} = \tau = \frac{F}{A} \cos \theta \cos \phi \quad \tau = \sigma \cos \theta \cos \phi$$

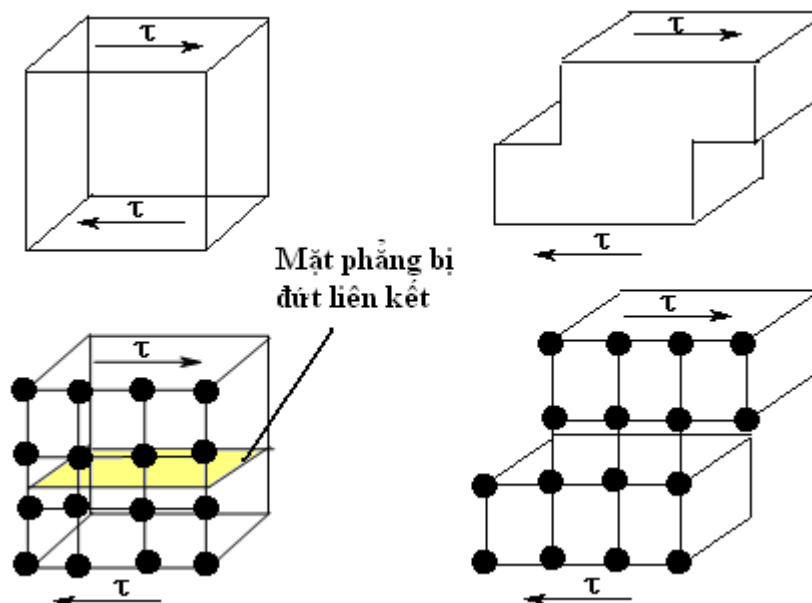
$$\theta = \phi = 45^\circ \Rightarrow \sigma_{\min} = 2\tau$$

Giá trị ứng suất trượt mà tại đó biến dạng dẻo bắt đầu xảy ra, gọi là ứng suất trượt tới hạn  $\tau_{th}$ , giá trị này là hằng số đối với một hệ trượt cho trước của một loại tinh thể cho trước



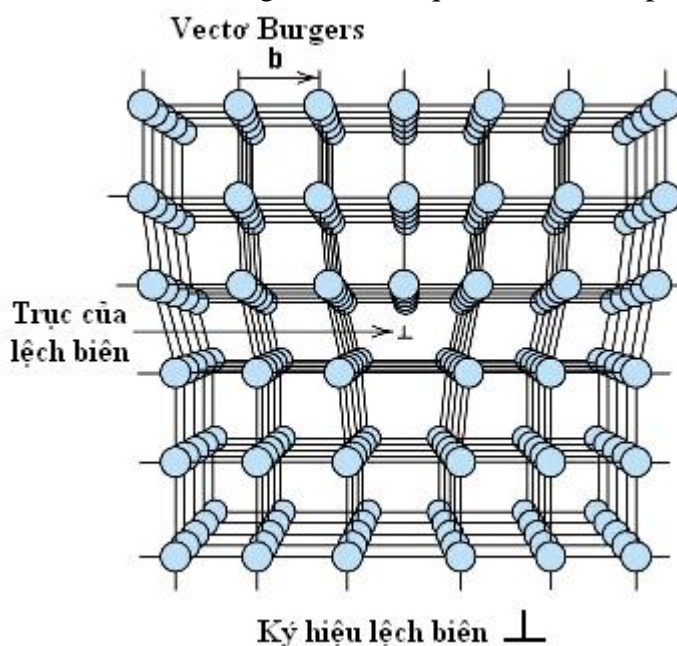
### ▪ Dự đoán giá trị $\tau_{th}$

Mô hình lý thuyết đầu tiên để dự đoán  $\tau_{th}$  đã giả thiết rằng mỗi mặt nguyên tử sẽ trượt qua mặt khác như là một thể thống nhất. Quá trình này đòi hỏi phải có lực rất lớn để bẻ gãy đồng thời tất cả các liên kết nguyên tử dọc theo mặt trượt. Từ mô hình này, người ta dự đoán  $\tau_{th} = E/10$  với  $E$  là mô đun đàn hồi của vật liệu, giá trị này là rất lớn so với các giá trị thực nghiệm.



### 8.4.2. Lệch biên

Năm 1934, Geoffrey Taylor giả sử rằng các tinh thể có chứa các khuyết tật gọi là lệch biên (Edge dislocations) để giải thích sự không thống nhất giữa tính toán giá trị ứng suất trượt tới hạn theo lý thuyết và thực tế. Tuy nhiên mãi đến những năm 50, sự tồn tại của lệch biên mới được công nhận nhờ quan sát trực tiếp trên kính hiển vi điện tử.



Lệch biên là một khuyết tật đường xảy ra xung quanh một đường biên của nửa mặt phẳng nguyên tử dư. Đường biên này vuông góc với mặt phẳng của tờ giấy và được gọi là trục của lệch biên.

Xung quanh trục của lệch biên xảy ra sự biến dạng cục bộ của mạng tinh thể. Phía trên trục lệch, các nguyên tử bị nén lại, phía dưới trục lệch chúng bị kéo dãn ra. Càng xa trục lệch, mạng tinh thể càng ít bị biến dạng.

Các nguyên tử trên trục của lệch sẽ có số sắp xếp nhỏ hơn các nguyên tử xung quanh.

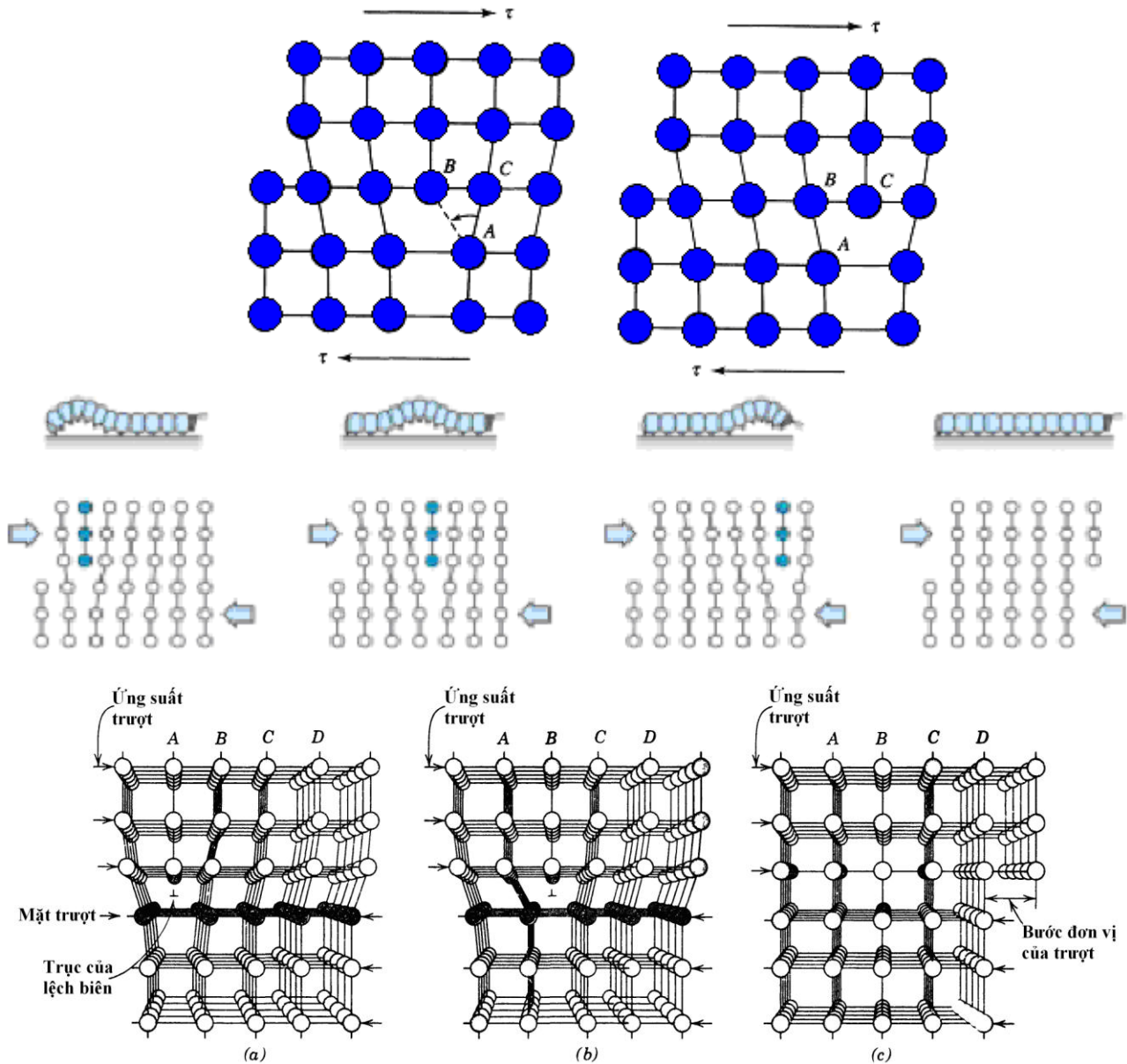
Ký hiệu của lệch biên  $\perp$  còn chỉ ra vị trí của trục lệch.

#### 8.4.2.1. Cơ chế xuất hiện lệch trong tinh thể

- Do các bất thường trong quá trình phát triển mầm khi đóng rắn tinh thể
- Do các ứng suất nội kết hợp với các khuyết tật khác trong tinh thể
- Do tương tác giữa các lệch có sẵn trong quá trình biến dạng dẻo

### 8.4.2.2. Cơ chế di chuyển lệch:

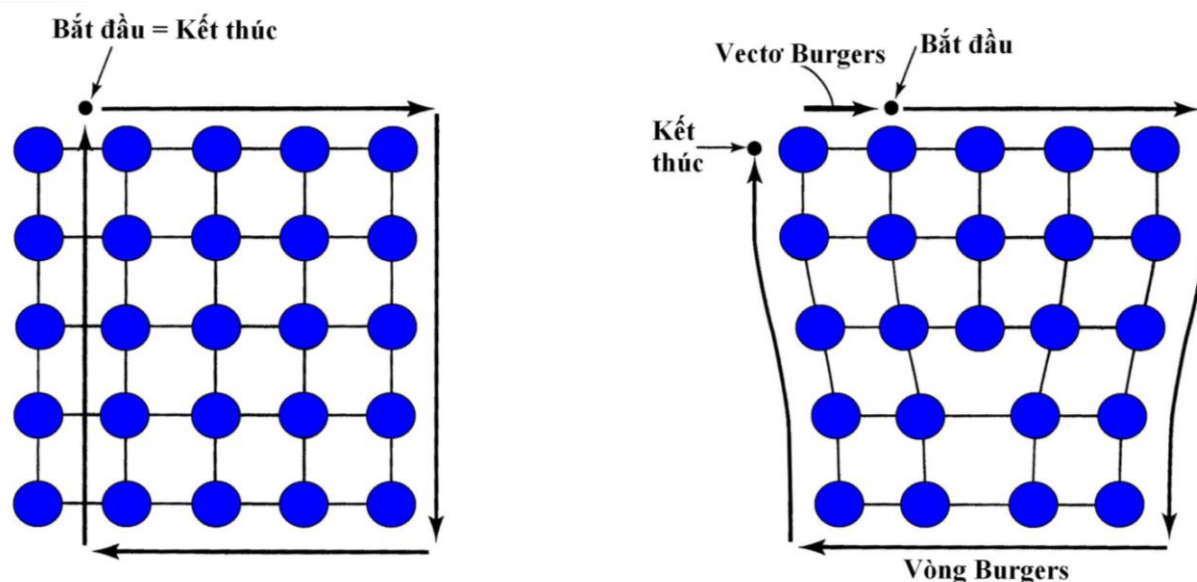
Nếu áp đặt một ứng suất trượt  $\tau$  thì sẽ tạo ra lực bẻ gãy các liên kết giữa 2 hàng nguyên tử A và C và tạo ra liên kết giữa hàng A và B. Trước khi tác dụng lực, nguyên tử trên hàng B không đủ số sắp xếp, thì sau khi tác dụng lực, nguyên tử trên hàng C lại không đủ số sắp xếp. Như vậy lệch đã di chuyển sang phải một đoạn bằng khoảng cách nguyên tử. Quá trình này gọi là trượt của lệch (dislocation glide) và sẽ tiếp diễn đến khi lệch di chuyển ra ngoài tinh thể.



Theo cơ chế này thì  $\tau_{th}$  tính được sẽ nhỏ hơn nhiều so với mô hình cũ vì chỉ cần bẻ gãy liên kết trên một hàng thay vì bẻ gãy tất cả liên kết trên một mặt. Giá trị  $\tau_{th}$  tính theo mô hình này cũng phù hợp với thực nghiệm.

### 8.4.2.3. Vector Burgers

Lệch được đặc trưng bởi vector Burgers ( $\vec{b}$ ) biểu thị độ lớn và phương di chuyển của nguyên tử. Để xác định  $\vec{b}$ , vẽ vòng Burgers là vòng vector kín bao quanh trung tâm lệch theo chiều kim đồng hồ trên bề mặt tinh thể lý tưởng, sau đó lặp lại trên tinh thể có chứa lệch thì vòng này sẽ không kín. Vector  $\vec{b}$  được dùng để nối từ điểm cuối đến điểm đầu.



Vector  $\vec{b}$  là một đại lượng không đổi cho dù tính chất của lệch có thể thay đổi từ vị trí này sang vị trí khác.

Vector tiếp tuyến  $\vec{t}$ : biểu thị cho phương của trục lệch

Vòng Burgers sẽ được vẽ theo chiều kim đồng hồ khi nhìn theo hướng của  $\vec{t}$

Đối với lệch biên:  $\vec{b} \perp$  trục lệch nghĩa là  $\vec{b} \perp \vec{t}$ . Mặt trượt sẽ là mặt chứa  $\vec{b}$  và  $\vec{t}$ . Khi đó chỉ số mặt trượt sẽ được biểu thị bởi vector pháp tuyến  $\vec{n}$  là tích của 2 vector  $\vec{b}$  và  $\vec{t}$ .

$$\vec{n} = \vec{b} \times \vec{t} = \begin{vmatrix} \vec{i} & \vec{j} & \vec{k} \\ x_1 & y_1 & z_1 \\ x_2 & y_2 & z_2 \end{vmatrix} = (y_1 z_2 - y_2 z_1) \vec{i} + (z_1 x_2 - z_2 x_1) \vec{j} + (x_1 y_2 - x_2 y_1) \vec{k}$$

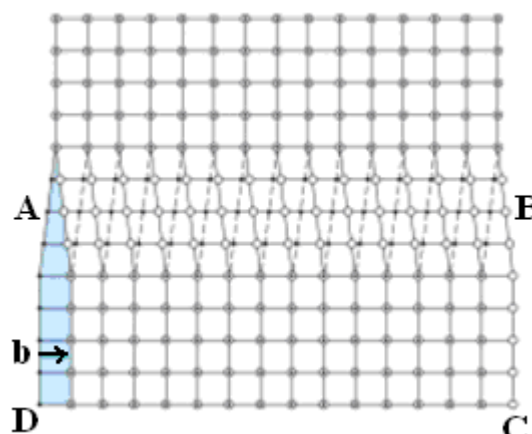
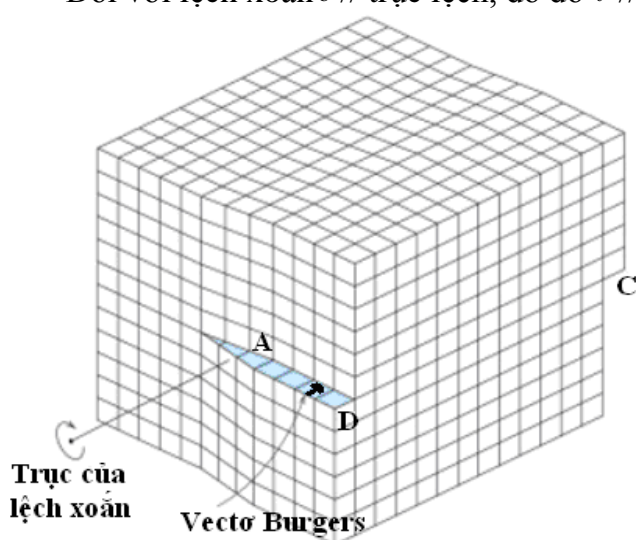
### 8.4.3. Các loại lệch khác

#### 8.4.3.1. Lệch xoắn

Lệch xoắn tạo thành khi ứng suất trượt gây ra biến dạng như hình vẽ: phần trên của vùng tinh thể bị dời đi một khoảng cách nguyên tử so với phần dưới.

Các lớp nguyên tử trong vùng sai lệch đi theo hình xoắn ốc, vẽ đường cong uốn quanh trục lệch với điểm bắt đầu ở mặt I phía dưới. Khi đi một vòng quanh trục đường cong hạ xuống mặt II, tiếp tục sẽ hạ xuống mặt III, mặt IV, tạo ra một hình xoắn ốc nên được gọi là lệch xoắn.

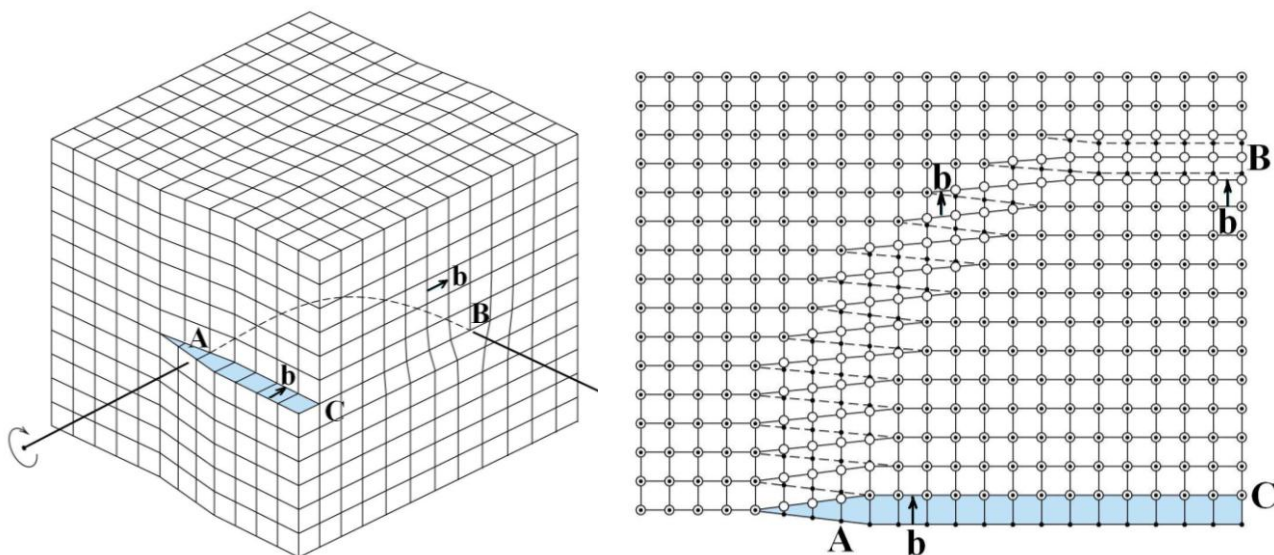
Đối với lệch xoắn  $\vec{b} \parallel$  trục lệch, do đó  $\vec{b} \parallel \vec{t}$





### 8.4.3.2. Lệch hỗn hợp

Là lệch trung gian giữa lệch biên và lệch xoắn. Trong lệch hỗn hợp  $\vec{b}$  tạo với  $\vec{l}$  một góc  $\alpha$  với  $0 < \alpha < 90^\circ$

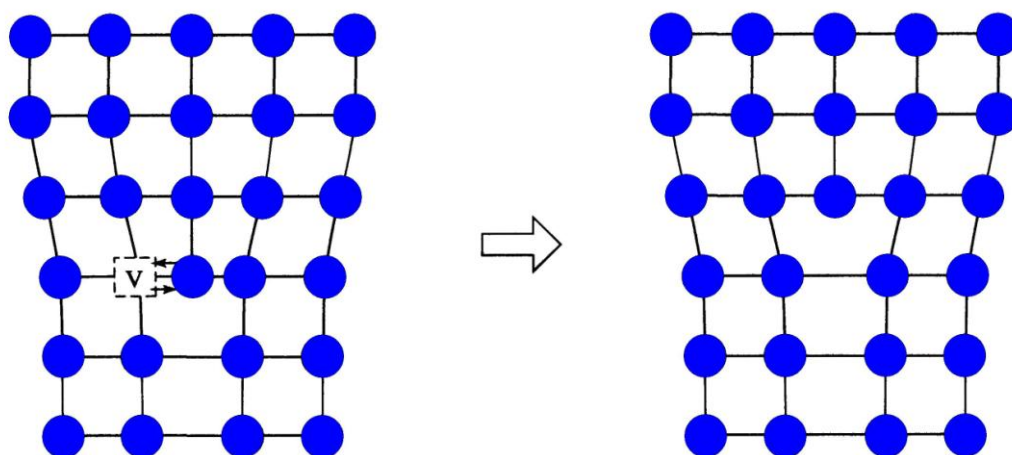


### 8.4.3.3. Cơ chế leo của lệch

Lệch chỉ có thể di chuyển theo cơ chế trượt khi mặt trượt là mặt xếp chặt

Hệ tinh thể	Mặt trượt	Phương trượt
Fcc	$\{111\}$	$\langle 110 \rangle$
Bcc	$\{110\}$	$\langle 111 \rangle$
	$\{211\}$	$\langle 111 \rangle$
	$\{321\}$	$\langle 111 \rangle$
Hcp	Mặt // mặt đáy	Phương trục tọa độ $x_1, x_2, x_3$

Khi lệch không thể trượt được, nó vẫn có thể di chuyển theo cơ chế khác. Cơ chế này bao gồm sự khuếch tán của nguyên tử, nút trống theo lệch. Cơ chế này gọi là leo của lệch, trong đó các nguyên tử trên trục lệch trao đổi vị trí với một dãy các nút trống. Khi đó lệch sẽ di chuyển lên một mặt nguyên tử.



Chuyển động này vuông góc với mặt trượt  $\vec{b} \times \vec{l}$  và do đó khác với cơ chế trượt của lệch. Cơ chế này đóng vai trò quan trọng ở nhiệt độ cao vì ở đó mật độ nút trống cao và việc tạo ra các dãy nút trống xảy ra dễ dàng hơn.

#### 8.4.3.4. Ảnh hưởng của lệch đến tính chất

Ngoài ảnh hưởng đến biến dạng dẻo, lệch còn có ảnh hưởng lớn đến các tính chất khác. Ví dụ miền sai lệch chung quanh lệch biên sẽ thuận lợi cho việc khuếch tán dọc theo trục (pipe diffusion) và quá trình khuếch tán này đóng vai trò quan trọng trong việc khuếch tán ở nhiệt độ thấp

Lệch cũng ảnh hưởng đến tính chất điện, quang, từ của vật liệu. Ví dụ muốn kim loại đạt tính chất điện cao nhất thì phải giảm tối đa mật độ lệch trong tinh thể.

Lệch cũng đóng vai trò quan trọng trong quá trình gia công vật liệu kỹ thuật. Ví dụ trong quá trình phát triển của tinh thể từ pha hơi, sự hiện diện của lệch xoắn trên bề mặt sẽ gia tăng đáng kể tốc độ phát triển mầm tinh thể.

### 8.5. Khuyết tật mặt

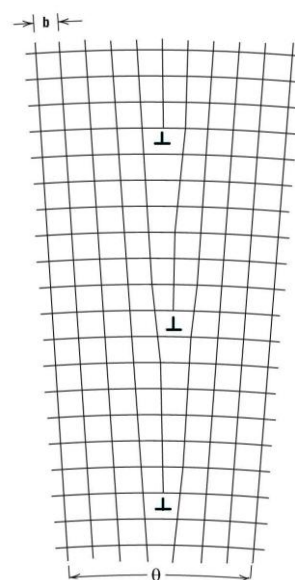
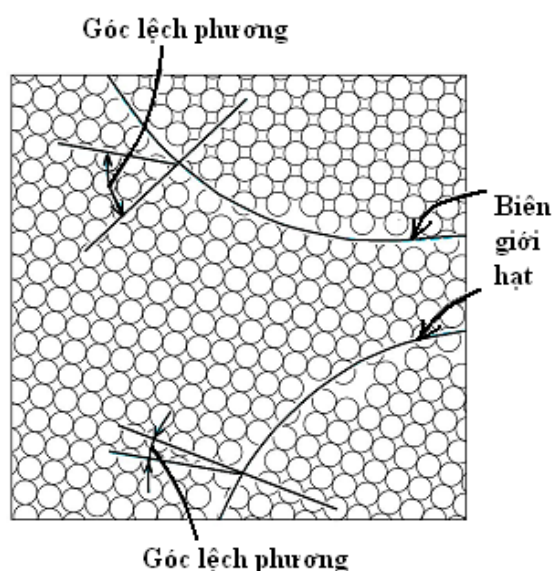
#### 8.5.1. Mặt ngoài tinh thể

Các nguyên tử ở bề mặt chỉ liên kết với một số nguyên tử ở phía trong nên số sắp xếp sẽ nhỏ hơn trị số quy định của mỗi loại cấu trúc. Điều này dẫn đến nguyên tử ở bề mặt sẽ có năng lượng cao hơn. Phần năng lượng tự do tăng thêm trên một đơn vị diện tích bề mặt gọi là sức căng bề mặt. Để giảm năng lượng này, vật liệu có khuynh hướng giảm tổng diện tích bề mặt bên ngoài. Ví dụ chất lỏng có dạng giọt hoặc hình cầu để có diện tích bề mặt nhỏ nhất. Bề mặt tự do như vậy được xem là một khuyết tật và thường là các vị trí dễ xảy ra các phản ứng hóa học.

#### 8.5.2. Biên giới hạt

Vùng tiếp giáp giữa các tinh thể (hạt) trong đa tinh thể gọi là vùng biên giới hạt. Các nguyên tử ở vùng này thường đã rời khỏi vị trí cân bằng và có số sắp xếp khác với các nguyên tử phía trong nên sẽ có năng lượng cao hơn. Phần năng lượng dư này được gọi là sức căng biên giới hạt và có giá trị trong khoảng  $1-3 \text{ J/m}^2$ . Trong đa số trường hợp, sức căng bề mặt của tất cả các hạt tiếp xúc nhau có khuynh hướng đạt đến cân bằng và ba hạt gần nhau sẽ tạo một góc  $\approx 120^\circ$ .

Do có năng lượng cao nên biên giới hạt cũng là vùng dễ xảy ra phản ứng hóa học và dễ thay đổi cấu trúc. Vì vậy biên giới hạt thường đóng vai trò quan trọng trong việc xác định tính chất vật liệu.



### 8.5.3. Siêu hạt

Trong mỗi hạt, phương mạng cũng không hoàn toàn cố định. Hạt được chia thành vô số vùng nhỏ có kích thước  $10^{-5} - 10^{-3}$  cm gọi là siêu hạt và phương mạng của các siêu hạt lệch nhau một góc rất nhỏ, thường nhỏ hơn  $1^\circ$ .

Biên giới siêu hạt gồm những lệch xếp thành hàng trên những khoảng cách bằng nhau. Khi đó khoảng cách giữa các lệch  $D \approx b/\theta$ ,  $b$ : độ dài vectơ  $\vec{b}$  và  $\theta$  là góc lệch giữa hai siêu hạt lân cận.

### 8.6. Khuyết tật thể tích

Khuyết tật thể tích là một vùng có kích thước ba chiều không gian mà ở đó đặc tính trật tự của tinh thể không còn nữa. Thông thường khuyết tật thể tích là các lỗ xốp (cụm các lỗ trống) hoặc kết tủa (cụm các tạp chất ở vị trí xen kẽ hoặc thay thế).

### 8.7. Cơ chế tăng bền trong kim loại

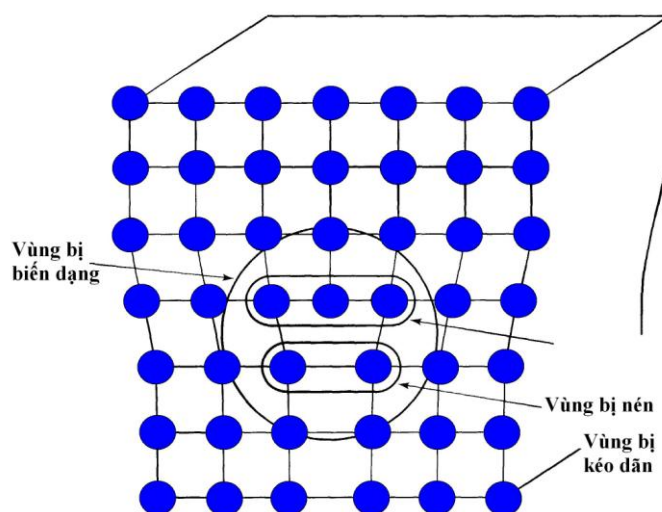
Biến dạng dẻo trong tinh thể xảy ra là do sự dịch chuyển các lệch. Vì vậy nguyên lý của cơ chế tăng bền kim loại là loại bỏ lệch hoặc làm ngừng sự dịch chuyển lệch. Đối với tinh thể ion hoặc cộng hóa trị, lệch di chuyển rất khó khăn vì vậy việc tăng bền các vật liệu này chống lại biến dạng dẻo sẽ không có ý nghĩa

#### 8.7.1. Hợp kim hóa để tăng độ bền

Sự có mặt của nguyên tử tạp chất (khi hợp kim hóa) dù ở vị trí thay thế hoặc xen kẽ đều làm giảm khả năng di chuyển của lệch.

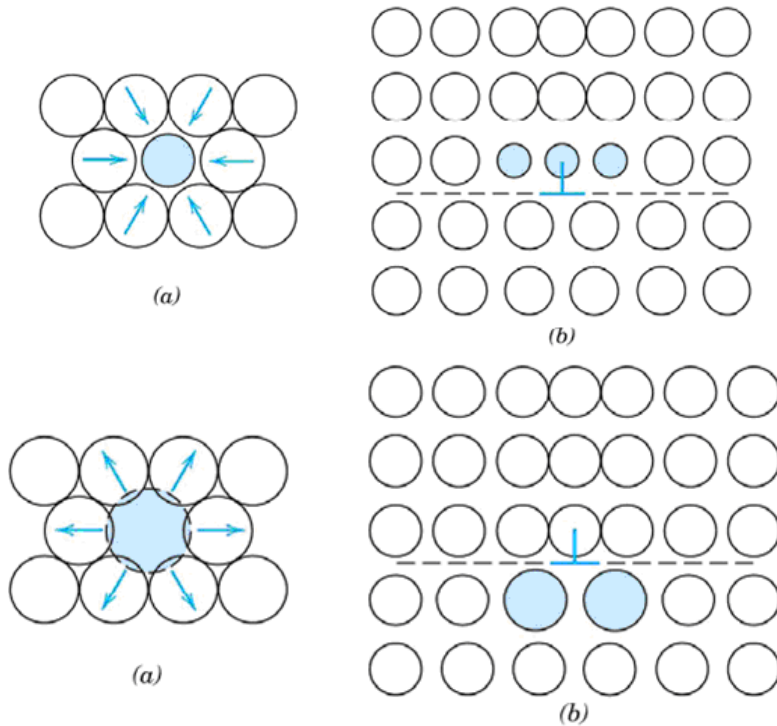
Xét trường hợp nguyên tử tạp chất ở vị trí xen kẽ. Khi đó sự có mặt của nguyên tử tạp chất sẽ làm các nguyên tử dung môi lệch khỏi vị trí cân bằng và làm tăng năng lượng biến dạng của tinh thể. Vùng tinh thể của nguyên tử dung môi chịu ảnh hưởng của nguyên tử tạp chất gọi là trường biến dạng. Tương tự, khi có lệch thì các nguyên tử ở xung quanh lệch cũng bị lệch khỏi vị trí cân bằng và lệch cũng làm cho năng lượng của hệ tăng lên.

Tùy thuộc vào bản chất của nguyên tử tạp chất mà nó có thể nằm ở vùng dẫn hoặc vùng bị ép xung quanh lệch. Khi đó nó có thể làm giảm năng lượng của hệ. Nếu lệch muốn di chuyển ngang qua vùng có tạp chất, năng lượng của hệ phải tăng lên bằng cách tăng tăng ứng suất áp đặt, làm cho độ bền vật liệu tăng lên.



Ví dụ: Nếu nguyên tử C có kích thước lớn hơn lỗ hổng trong mạng của Fe thì khi C nằm ở vị trí xen kẽ, sẽ làm các nguyên tử Fe xung quanh bị nén lại. Nếu nguyên tử C khuếch tán đến nằm ở vùng bị kéo dãn xung quanh lệch, nó sẽ làm giảm độ biến dạng của tinh thể và giảm năng lượng khuyết tật. Muốn di chuyển lệch ngang qua nguyên tử C cần phải tác động ứng suất cao hơn, khi đó Fe sẽ được tăng bền.

Hiệu quả của việc tăng bền tùy thuộc vào trường biến dạng của nguyên tử tạp chất. Thông thường, hiệu quả này là lớn nhất khi tạp chất chiếm vị trí xen kẽ trong các lỗ hổng bốn mặt trong kim loại Bcc. Do nguyên tử tạp chất ở vị trí thay thế, thường có cùng kích thước với dung môi, nên sự biến dạng mạng ít đáng kể và ít có ý nghĩa đến việc tăng bền.



### 8.7.2. Hóa cứng biến dạng

Khi mật độ lệch tăng thì độ bền của tinh thể cũng tăng lên. Đó là do công để di chuyển trường biến dạng của một lệch, sẽ tăng lên khi đi ngang qua trường biến dạng kết hợp của các lệch khác trong tinh thể.

Trong quá trình biến dạng dẻo, số lượng lệch tăng lên đột ngột làm cho ứng suất để tạo ra biến dạng dẻo phải càng lúc càng cao hơn. Sự gia tăng ứng suất để làm lệch di chuyển trong quá trình biến dạng dẻo gọi là sự hóa cứng biến dạng.

Mật độ lệch,  $\rho_{\text{disl}}$  tính theo

$$\rho_{\text{disl}} = \frac{\sum l_i}{V} \quad [\text{cm}^{-2}]$$

$\sum l_i$ : Chiều dài của tất cả các lệch (cm);  $V$ : thể tích tinh thể ( $\text{cm}^3$ )

$\rho_{\text{disl}}$  của vật liệu chưa bị biến dạng  $\approx 10^8 \text{ cm}^{-2}$ .

$\rho_{\text{disl}}$  của vật liệu bị biến dạng nhiều  $\approx 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ .

Đối với đa số kim loại, ứng suất để làm lệch di chuyển tính theo:

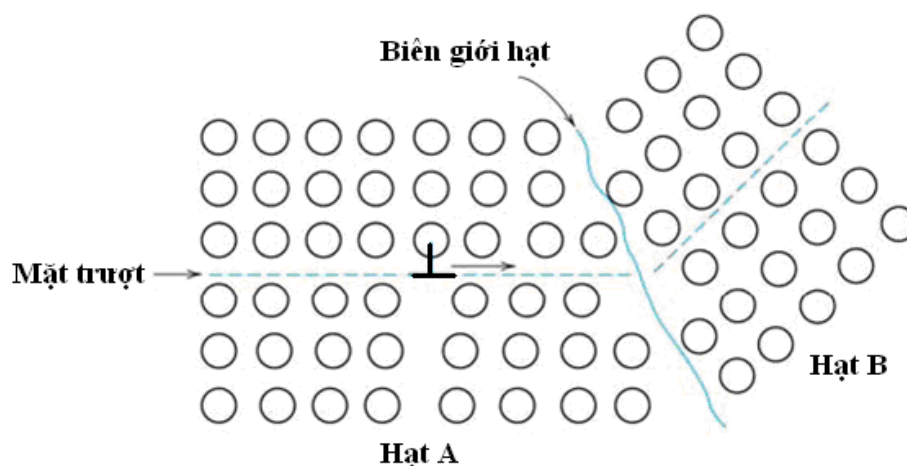
$$\tau = \tau_0 + k \sqrt{\rho_{\text{disl}}}$$

$\tau_0$  và  $k$  là các hằng số vật liệu.

### 8.7.3. Giảm dịch chuyển lệch nhờ biên giới hạt

Sự có mặt của biên giới hạt cản trở sự di chuyển của lệch và do đó làm tăng ứng suất cần thiết để di chuyển lệch (tạo ra biến dạng dẻo).

Do các vật liệu có kích thước hạt nhỏ thì mật độ biên giới hạt trên một đơn vị thể tích sẽ cao hơn, nên độ bền chảy (ứng suất bắt đầu gây ra biến dạng dẻo) sẽ tăng khi giảm kích thước hạt. Hiệu quả của việc tăng bền do cản trở bằng biên giới hạt là lớn nhất so với các phương pháp tăng bền khác.



#### 8.7.4. Hóa cứng nhờ kết tủa

Một cách khác để tăng bền là kết hợp các tạp chất kết tủa vào tinh thể. Sự di chuyển lệch bị cản trở bởi sự biến dạng mạng xung quanh kết tủa nên ứng suất để di chuyển lệch sẽ lớn hơn khi không có kết tủa.

Tóm lại để tăng bền kim loại chống lại biến dạng dẻo, thì phải xen vào trong cấu trúc một chương ngại đối với sự di chuyển lệch và làm tăng ứng suất của tinh thể.