

CHƯƠNG I:

MỞ ĐẦU

1.1. Trạng thái vật lý của vật chất

1.1.1. Trật tự và mất trật tự

Vật chất tồn tại ở bốn trạng thái: rắn, lỏng, khí và plasma.

Trạng thái vật lý của một chất được xác định bởi cân bằng giữa năng lượng liên kết (mang các nguyên tử lại gần nhau) và năng lượng nhiệt (đẩy các nguyên tử ra xa nhau).

- Năng lượng nhiệt sinh ra do dao động liên tục của các nguyên tử.

$$E_{nh} = kT \text{ với } T \text{ là nhiệt độ } [^{\circ}\text{K}] \text{ và } k \text{ là hằng số Boltzmann} = 1,38 \times 10^{-23} [\text{J}/^{\circ}\text{K}]$$

- Năng lượng liên kết là năng lượng để phân ly hệ thành các nguyên tử cấu thành, nó chính là năng lượng để hóa hơi hệ, gần đúng $E_{lk} = \text{const} (T)$.

Nếu lực liên kết giữa các nguyên tử càng mạnh thì E_{lk} càng lớn: kim loại, gốm; ngược lại là trường hợp của khí hiếm, các phân tử khí (F_2 , $Cl_2 \dots$), các phân tử hữu cơ.

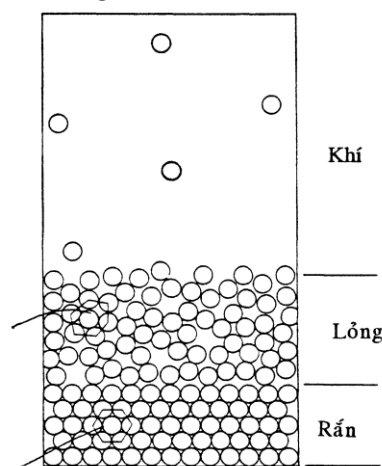
Từ $E_{nh} = kT$ và $E_{lk} = \text{const}$, có thể:

- Giải thích sự thay đổi trạng thái vật chất theo nhiệt độ.
- Khi $T^0 \uparrow$, $E_{nh} \uparrow$ thì sẽ mất đi các cấu trúc trật tự.

Khí: Trạng thái mất trật tự hoàn toàn.

Rắn: Trạng thái trật tự hoàn toàn. Mức độ trật tự thể hiện trên một khoảng cách xa, do khi E_{nh} thấp, dao động các nguyên tử trở nên khó khăn, các nguyên tử có xu hướng sắp xếp lại để giảm thế năng của hệ.

Lỏng: Là trung gian giữa hai trạng thái trên, có tồn tại trật tự gần.



Đặc trưng của các trạng thái

Đặc trưng	Rắn	Lỏng	Khí
Chuyển động	Dao động	Tịnh tiến, quay, dao động	Tịnh tiến, quay, dao động
Khoảng cách giữa các hạt	Bé, cỡ kích thước hạt	Tăng lên quá cỡ kích thước hạt	Khá lớn so với kích thước hạt
Quan hệ E_{nh} và E_{lk}	$E_{nh} < E_{lk}$	$E_{nh} \approx E_{lk}$	$E_{nh} > E_{lk}$
Hình dạng	Hình dạng và thể tích được bảo toàn	Có thể tích nhưng không có hình dạng	Không có thể tích, không có hình dạng

Trong một số trường hợp, ranh giới phân biệt giữa trạng thái rắn và lỏng không rõ ràng. Hiện nay, người ta thường dùng khái niệm độ nhớt để phân biệt một chất là ở trạng thái rắn hay lỏng. Theo quan điểm này, các chất rắn là những chất có độ nhớt động học lớn hơn 10^{12} poises.

Plasma: là một dạng khí có chứa các ion có điện tích dương và các điện tử có điện tích âm với số lượng gần bằng nhau, sao cho tổng điện tích gần như là trung hòa. Các nhà khoa học tin rằng 99% vật chất trong vũ trụ tồn tại ở dạng plasma.

Plasma có thể được tạo thành khi một chất khí được gia nhiệt đến nhiệt độ đủ cao, sao cho nguyên tử khí trung hòa điện sẽ bị mất hết điện tử để tạo thành các ion có điện tích dương và các điện tử có điện tích âm. Vì vậy người ta còn gọi khí ion hóa là plasma.

Do các điện tử và ion ở dạng tự do nên plasma có tính dẫn điện và có thể được kiểm soát bởi điện trường và từ trường nên được ứng dụng nhiều trong công nghiệp.

Ví dụ: Các trạng thái vật lý của nước

Rắn	Lỏng	Khí	Plasma
Nước đá, H_2O	Nước, H_2O	Hơi nước, H_2O	Khí ion hóa $H_2 \rightarrow H^+ + H^+ + 2e$
$T < 0\text{ }^{\circ}\text{C}$	$0 < T < 100\text{ }^{\circ}\text{C}$	$T > 100\text{ }^{\circ}\text{C}$	$T > 100.000\text{ }^{\circ}\text{C}$
Phân tử bị cố định trong mạng tinh thể	Phân tử di chuyển tự do	Phân tử di chuyển tự do, khoảng cách giữa các phân tử lớn	Ion và điện tử di chuyển độc lập, khoảng cách giữa các phân tử lớn

1.2. Vật liệu và Vật liệu học

1.2.1. Mở đầu

Vật liệu luôn đóng một vai trò thiết yếu trong đời sống con người. Trình độ sử dụng vật liệu nói lên trình độ văn minh của xã hội loài người. Từ thời đại đồ đá, đồ đồng, đồ sắt đến thời đại ngày nay, hầu hết các tiến bộ công nghệ quan trọng đều gắn liền với việc cải thiện các tính chất của vật liệu có sẵn hoặc sử dụng vật liệu mới.

Ví dụ vật liệu làm động cơ đốt trong làm lạnh bằng nước chỉ cần chịu được nhiệt độ $150\text{ }^{\circ}\text{C}$, còn muốn làm lạnh bằng không khí phải chịu được nhiệt độ $300\text{ }^{\circ}\text{C}$. Đối với động cơ phản lực thì vật liệu phải chịu được $650\text{ }^{\circ}\text{C}$. Như vậy vật liệu làm động cơ phải có những biến đổi đáng kể về độ bền nhiệt độ để đáp ứng các tiến bộ công nghệ.

Để thực hiện một công việc kỹ thuật thường người ta phải dùng nhiều loại vật liệu và kết hợp chúng với nhau một cách đúng đắn.

Ví dụ: Dây cáp điện.

Yêu cầu: Dẫn điện tốt. Do điện thế rất cao, phải treo cáp trên các trụ điện và cách điện giữa các dây bằng không khí. Để giảm số trụ điện thì cáp phải nhẹ và bền đứt.

Kết hợp: Chất dẫn điện tốt nhất là kim loại nguyên chất: Cu, Al nhưng chúng không đủ độ bền cơ. Vì vậy phải dùng cáp gồm nhiều vật liệu. Ở đây lõi của cáp là các dây thép bền cơ rất cao nhưng chúng lại dẫn điện kém nên phải dùng các dây nhôm bao quanh lõi thép để dẫn điện.

Các trụ được chế tạo bằng thép để chịu được lực kéo của cáp. Thép này phải được bảo vệ chống ăn mòn bằng sơn (polyme hữu cơ) hoặc phủ một lớp kim loại như Zn, Cd...

Để gắn cáp lên trụ điện phải dùng các ty cách điện bằng sứ (gôm) và để giữ chặt trụ điện trong đất phải dùng bê tông (gôm).

1.2.2. Định nghĩa

Trong khoa học vật liệu, người ta định nghĩa vật liệu là các chất rắn được sử dụng để chế tạo các đồ vật phục vụ cho đời sống con người. Khi nói đến vật liệu người ta thường nói đến chất liệu và hình dạng của nó.

1.2.3. Phân loại

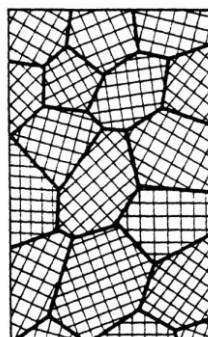
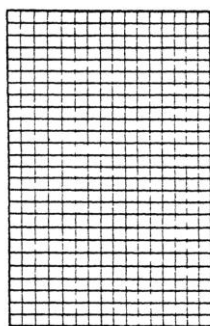
Các vật liệu khác nhau có thể được phân loại theo nguồn gốc cấu tạo, theo cấu trúc, theo quá trình công nghệ và thành phần hóa và theo tính năng sử dụng của nó.

1.2.3.1. Phân loại theo nguồn gốc cấu tạo

- Vật liệu có nguồn gốc hữu cơ
- Vật liệu có nguồn gốc vô cơ

1.2.3.2. Phân loại theo cấu trúc

• Vật liệu có cấu trúc tinh thể, bao gồm vật liệu đơn tinh thể và đa tinh thể: các nguyên tử được lặp lại có chu kỳ trên một khoảng cách xa, thường gặp trong kim loại và vài loại polyme.



• Vật liệu có cấu trúc vô định hình: ít trật tự hơn, giống như trong chất lỏng. Ở khoảng cách gần (vài đường kính nguyên tử) thì có sự lặp lại nào đó trong sự phân bố nguyên tử. Thường gặp cấu trúc này trong thủy tinh, cao su.

1.2.3.3. Phân loại theo quá trình công nghệ và thành phần hóa

- Vật liệu kim loại và hợp kim
- Vật liệu polyme hữu cơ
- Vật liệu gốm sứ
- Vật liệu composit

Vật liệu kim loại và hợp kim

Ở nhiệt độ thường, đa số các kim loại là chất rắn nguyên tử, các kim loại sử dụng nhiều nhất là Fe, Al, Zn và Cu. Hợp kim là sự kết hợp hai hoặc nhiều kim loại: Pb – Sn, Cu – Zn hoặc là kim loại và á kim: thép (Fe + C). Hợp kim và kim loại thường dẫn điện, nhiệt tốt, ngăn ánh sáng thấy được, cứng và có thể biến dạng dẻo.

Vật liệu polyme hữu cơ

Polyme hữu cơ thường là các vật liệu rắn phân tử có cấu tạo mạch dài các nguyên tử cacbon và gắn thêm các nguyên tử khác như: H, Cl, S, N, S, O hoặc gắn thêm các nhóm nguyên tử như: $-CH_3$, $-C_6H_5$. Các polyme hữu cơ phổ biến là: PVC, PE, PP, PS,

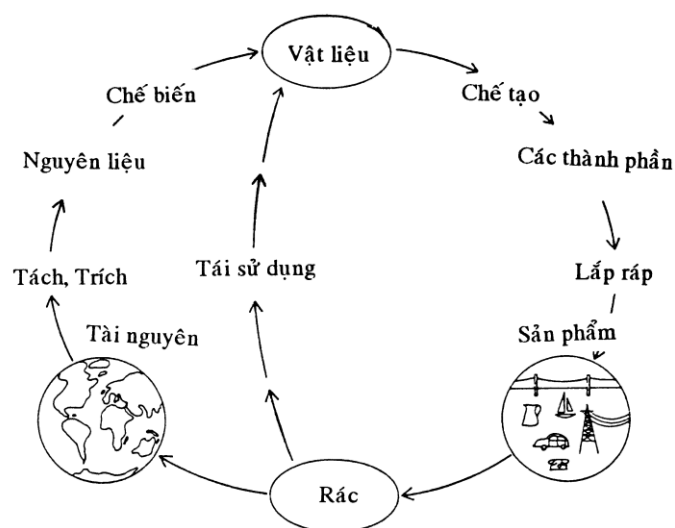
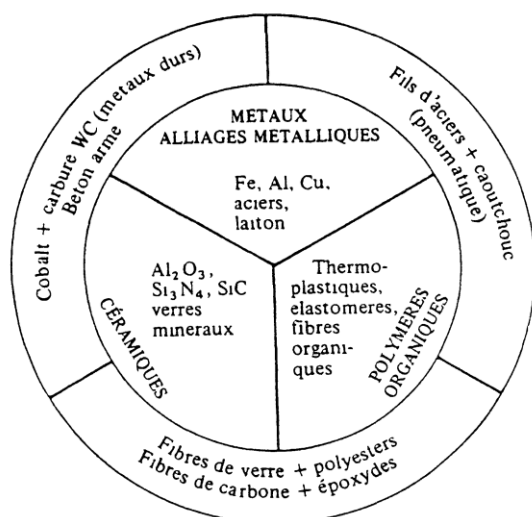
PMMA (Plexiglas), PA (Polyamid) (nylon), PTFE (Teflon). Các polyme hữu cơ có tính chất vật lý rất đa dạng: cứng như thủy tinh hữu cơ, dẻo như cao su... Các polyme hữu cơ có tính chất cách điện, cách nhiệt, nhẹ, dễ gia công, ít cứng, chịu được nhiệt độ $< 200\text{ }^{\circ}\text{C}$.

Vật liệu gốm sứ

Là các vật liệu vô cơ tạo thành từ sự kết hợp một số nguyên tố kim loại (Na, Mg, Ca, Fe, Al, ...) và một số nguyên tố á kim (O $\rightarrow$ oxyt, N $\rightarrow$ Nitrua, C $\rightarrow$ Cacbon). Gốm có tính bền cơ, bền ở nhiệt độ cao, cách điện, cách nhiệt, cứng, giòn.

Vật liệu composit

Ba loại vật liệu kể trên có thể kết hợp với nhau để tạo thành vật liệu composit, đó là sự kết hợp một cách thích hợp các tính chất riêng của các vật liệu khác nhau.



1.2.3.4. Phân loại theo tính năng sử dụng

- Vật liệu điện
- Vật liệu điện tử
- Vật liệu xây dựng
- Vật liệu cơ khí
- Vật liệu trong công nghiệp hóa chất, ...

1.2.4. Sử dụng vật liệu:

Việc sử dụng vật liệu phụ thuộc vào việc chọn lựa vật liệu một cách thích hợp nhất cho một mục đích cho trước.

Các tiêu chuẩn để lựa chọn:

- Chức năng chính của đối tượng: tải trọng, nhiệt độ, môi trường xâm thực, điều kiện sử dụng...

- Tính chất vật liệu: độ bền cơ, bền mài mòn, ăn mòn, độ dẫn điện, dẫn nhiệt...
- Tính phổ biến trên trái đất, tính dễ gia công chế tạo ...
- Giá thành.
- Khả năng tương hợp với môi trường của vật liệu.

Trong quá trình phát triển công nghệ, người ta thường thay thế một vật liệu này bằng một vật liệu khác do lý do kỹ thuật hoặc lý do kinh tế.

Ví dụ: Thùng xe đầu tiên bằng gỗ, kế đến là kim loại và hiện nay là polyme hữu cơ.

Thay gỗ bằng kim loại do kim loại dễ gia công, dễ tạo hình và bền cơ hơn.

Ngày nay người ta cố gắng làm nhẹ đi các kết cấu để tiết kiệm năng lượng.

Ví dụ: Dùng nhôm đuyra (Al + Mg), polyme hữu cơ thay cho thép.

1.2.5. Các đặc điểm tính chất của vật liệu

1.2.5.1. Tính chất cơ bản của vật liệu

Tính chất của vật liệu được đặc trưng bởi phản ứng của vật liệu đối với tác động của môi trường bên ngoài.

Có ba loại tính chất phụ thuộc vào kiểu tác động bên ngoài:

Tính chất cơ: phản ánh tính chất biến dạng của vật liệu khi có hệ lực bên ngoài tác dụng như độ bền cơ, độ dai, độ cứng...

Tính chất vật lý: biểu hiện của vật liệu dưới tác động của nhiệt độ, điện trường, từ trường, ánh sáng như độ dẫn điện, dẫn nhiệt, tính chất từ, tính chất quang.

Tính chất hóa học: đặc trưng cho độ bền hóa học của vật liệu dưới ảnh hưởng của môi trường ngoài.

Tính năng của một hệ kỹ thuật thường bị giới hạn bởi tính chất của các vật liệu có sẵn.

Ví dụ: Hiệu suất nhiệt của các turbine khí có thể tăng đáng kể nếu làm việc ở nhiệt độ cao, điều này bị hạn chế bởi yêu cầu vật liệu hợp kim làm cánh turbine phải có độ bền nhiệt cao.

1.2.5.2. Cấu trúc vi mô

Trong nhiều trường hợp, cấu trúc bên trong của vật liệu là một tập hợp các hạt có kích thước vi mô, có hình dạng nhất định tạo thành cấu trúc vi mô. Cấu trúc này có thể quan sát bằng kính hiển vi quang học (mm $\rightarrow$ μ m) hoặc kính hiển vi điện tử (100 μ m $\rightarrow$ nm). Cấu trúc này còn được gọi là đa tinh thể.

Để hiểu tính chất của vật liệu, cần phải thiết lập mối quan hệ giữa các hiện tượng xảy ra ở cấp độ cấu trúc vi mô, cấu trúc dưới vi mô (sự sắp xếp các nguyên tử, phân tử) và các tính chất của vật liệu.

Nguyên tử $\rightarrow$ ô cơ bản $\rightarrow$ Siêu hạt $\rightarrow$ Tinh thể $\equiv$ hạt (Ô cơ bản đồng hướng)

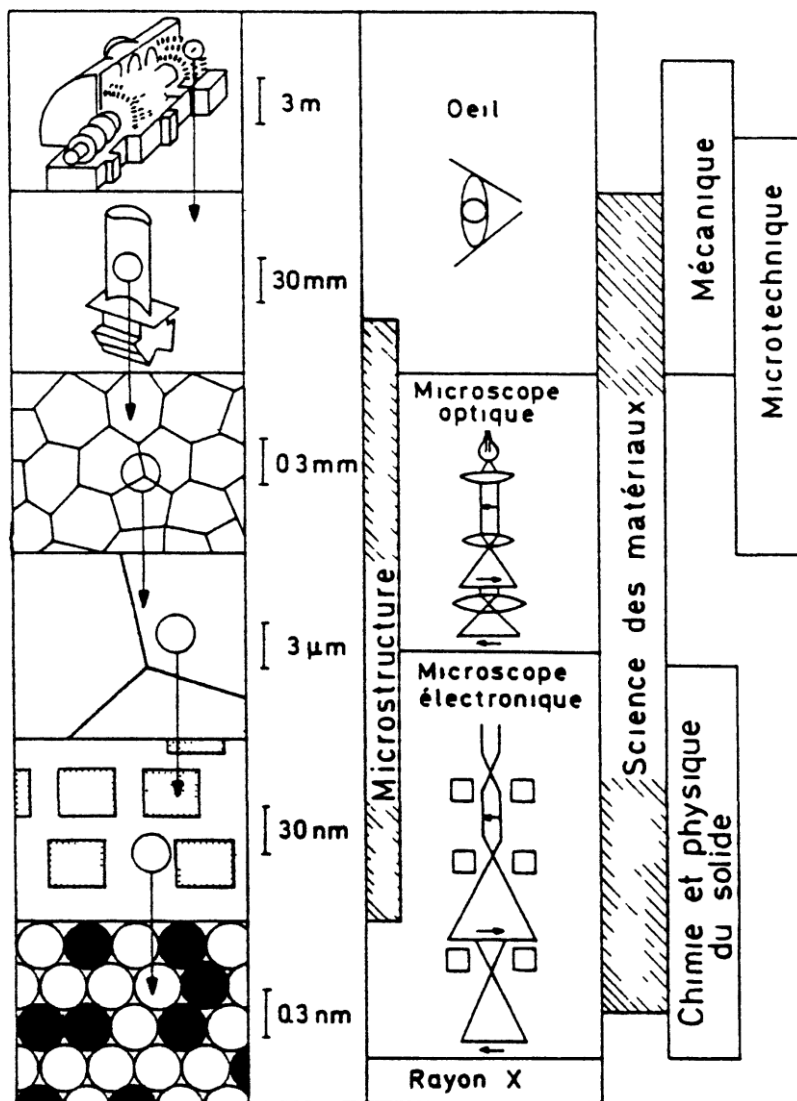
Các hạt sẽ có phương mạng khác nhau tạo thành cấu trúc đa tinh thể.

Cấu trúc vi mô thường được xác định bởi các thông số:

- Thành phần, sự sắp xếp nguyên tử, phân tử.
- Tỷ lệ tương đối các thành phần.
- Hình dáng, kích thước, quá trình gia công, chế tạo.

Cấu trúc vi mô xác định tính chất của một số lớn vật liệu. Nếu cải thiện cấu trúc vi mô một cách có kiểm soát thì có thể nhận được nhiều tính chất mới của vật liệu.

Theo thời gian, cấu trúc vi mô cũng sẽ thay đổi dẫn đến thay đổi tính chất, ví dụ hiện tượng lão hóa.



1.2.5.3. Quan hệ giữa thành phần, cấu trúc và tính chất

Nói chung khi thành phần, cấu trúc thay đổi thì tính chất thay đổi theo.

Thành phần: Ví dụ Pb 327 °C, Sn 232 °C, Bi 271 °C nhưng nhiệt độ nóng chảy của hợp kim Pb-Sn-Bi có thể < 150 °C.

Cấu trúc: Ví dụ graphit và kim cương đều cấu tạo từ nguyên tử cacbon, nhưng graphit mềm, dễ tách lớp còn kim cương thì rất cứng. Cấu trúc graphit là dạng sáu phương, có cấu trúc lớp, lực liên kết giữa các lớp yếu. Cấu trúc kim cương có dạng lập phương diện tâm, mỗi nguyên tử cacbon là tâm của một tứ diện đều nên bền vững hơn.

Cấu trúc vi mô: Al_2O_3 đục, muốn trở thành trong suốt phải thay đổi cấu trúc vi mô.

Ví dụ khi chế tạo gốm: nung bột tinh thể ở nhiệt độ cao sẽ có các lỗ trống làm cho vật liệu mất khả năng truyền ánh sáng, do mặt giao tiếp giữa Al_2O_3 và không khí trên bề mặt lỗ trống sẽ tạo sự khúc xạ làm đổi hướng ánh sáng. Khi chứa 0,3% lỗ trống thì Al_2O_3 đã trở nên trong mờ, 3% lỗ trống thì đục. Để tránh lỗ trống có thể thêm phụ gia (ví dụ: 0,1% khối lượng MgO) sẽ gây nên quá trình đông đặc ở nhiệt độ cao đối với Al_2O_3 , làm cho cấu trúc không có lỗ xốp, sẽ trở nên trong suốt.

1.2.5.4. Các dạng hư hỏng nói chung của vật liệu:

Kim loại: Ăn mòn ở nhiệt độ thường gọi là ăn mòn điện hóa, còn ở nhiệt độ cao là quá trình oxy hóa hóa học, còn gọi là ăn mòn hóa học.

Polyme hữu cơ: Sự phân hủy dưới ảnh hưởng của $h\nu$, t° , oxy không khí là do tạo ra các gốc tự do làm đứt mạch liên kết.

Gốm: ổn định hóa học nhất, đôi khi bị ăn mòn do ô nhiễm hóa học trong không khí.

1.3. Tổng quan về khoa học và công nghệ vật liệu

1.3.1. Khái niệm cơ bản

Kỹ thuật bao gồm tất cả những vấn đề về quá trình và thiết bị ở từng công đoạn để sản xuất ra một chi tiết. Công nghệ là sự tối ưu hóa tất cả các quá trình đi từ lúc chuẩn bị nguyên vật liệu ban đầu, đến khi tạo ra sản phẩm (kỹ thuật) và bán được trên thị trường (chất lượng sản phẩm, bao bì, mẫu mã, giá cả, quảng cáo, ...).

Khoa học về vật liệu là môn học thiết lập mối quan hệ giữa thành phần, cấu trúc nguyên tử hoặc phân tử, cấu trúc vi mô và các tính chất vĩ mô của vật liệu. Nói cách khác, khoa học vật liệu là môn khoa học về các quá trình chuyển chất và khoa học về các quá trình tạo hình. Môn học này là phần nhập môn cho môn công nghệ vật liệu, đó là môn học về các quá trình chế tạo, chuyển hóa, gia công và sản xuất vật liệu.

Quá trình gia công, chế tạo $\rightarrow$ Cấu trúc $\rightarrow$ Tính chất $\rightarrow$ Đặc tính kỹ thuật

1.3.2. Công nghệ vật liệu

- Kim loại: Công nghệ luyện kim $\rightarrow$ Phôi $\rightarrow$ Tạo hình: đúc, cán, hàn, cắt gọt, ...
- Polyme: Công nghệ hóa dầu $\rightarrow$ Chất liệu $\rightarrow$ Tạo hình: đúc, ép, đùn, thổi, ...
- Gốm sứ: Nguyên liệu bột $\rightarrow$ Tạo hình $\rightarrow$ Nung, kết khối
- Composit: Kết hợp các nguyên lý gia công

Đặc điểm:

Chất liệu $\rightarrow$ Gia công tạo hình: Công nghệ kim loại, polyme

Chất liệu và tạo hình đồng thời: Công nghệ gốm sứ

1.4. Vật liệu của tương lai

1.4.1. Vật liệu thông minh

Vật liệu thông minh là những nhóm vật liệu mới đang được phát triển, chúng sẽ có những ảnh hưởng rất đáng kể đến công nghệ hiện nay. Đó là những vật liệu có khả năng nhạy cảm với những thay đổi của môi trường xung quanh và đáp ứng lại những thay đổi đó theo cách đã được xác định trước (giống như tính chất của các sinh vật

sống). Khái niệm thông minh còn được mở rộng cho những hệ tương đối tinh vi bao gồm cả vật liệu thông minh và vật liệu truyền thống.

Các thành phần của vật liệu thông minh bao gồm một số loại cảm biến (sensor, dùng để phát hiện các tín hiệu đầu vào) và một bộ thi hành (actuator, dùng để thực thi các đáp ứng). Bộ thi hành sẽ thực hiện sự thay đổi về hình dạng, vị trí, tần số hoặc các đặc tính cơ theo sự thay đổi về nhiệt độ, điện trường và từ trường.

Vật liệu hay dụng cụ làm cảm biến bao gồm cáp quang, vật liệu áp điện (kể cả polyme) và các bộ vi cơ điện tử (microelectromechanical systems – MEMS – bộ tích hợp một số lớn các phần tử điện trên nền silicon và bộ xử lý cơ học gồm các cảm biến và bộ thi hành).

Có bốn loại vật liệu thường được dùng làm bộ thi hành:

- Hợp kim nhớ hình (shape memory alloys) là những vật liệu sau khi bị biến dạng sẽ trở về hình dạng ban đầu khi nhiệt độ thay đổi.
- Gốm áp điện (piezoelectric ceramics) là những vật liệu bị giãn nở hoặc nén lại theo điện trường (điện thế) áp đặt, ngược lại chúng có thể phát sinh ra điện trường khi kích thước bị thay đổi.
- Vật liệu áp từ (magnetostrictive materials) có đặc tính tương tự gốm áp điện nhưng chúng sẽ thay đổi theo từ trường.
- Chất lỏng lưu biến điện/từ (electro-rheological/magneto-rheological fluids) là những chất lỏng thay đổi độ nhớt đáng kể theo sự áp đặt của điện trường hoặc từ trường tương ứng.

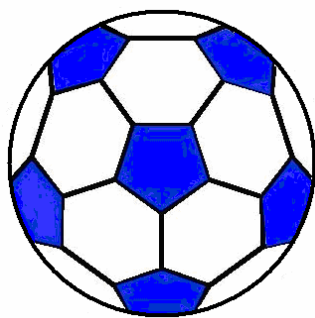
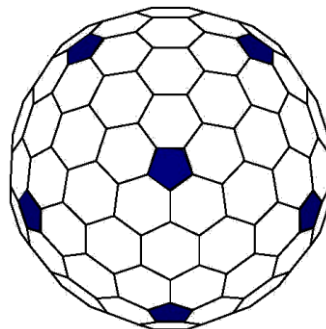
Ví dụ về việc sử dụng vật liệu thông minh trong trục thăng để làm giảm tiếng ồn khí động của cánh quạt trong buồng lái: Một cảm biến áp điện được đặt vào trong cánh quạt, ghi nhận sự thay đổi về ứng suất và biến dạng của cánh. Các tín hiệu phản hồi của cảm biến sẽ được gửi về một bộ phận kiểm soát điều khiển bằng máy tính, sau đó thiết bị này sẽ phát ra các phản âm loại trừ tiếng ồn.

1.4.2. Công nghệ nano

Cho đến gần đây, tiến trình của các nhà khoa học để nghiên cứu về hóa tính và lý tính của vật liệu thường là bắt đầu từ việc nghiên cứu các cấu trúc lớn, phức tạp rồi đi đến nghiên cứu các khối cấu tạo cơ bản nhỏ hơn, đơn giản hơn tạo nên cấu trúc. Tiến trình này thường được gọi là cách tiếp cận từ trên xuống (Top-down approach).

Tuy nhiên với sự tiến bộ của kính hiển vi quét (scanning probe microscopes) cho phép quan sát các nguyên tử và phân tử riêng lẻ, người ta có thể điều khiển và di chuyển các nguyên tử và phân tử để tạo thành cấu trúc mới, hay nói cách khác có thể thiết kế ra các vật liệu mới từ những cấu tử ở cấp độ nguyên tử đơn giản. Khả năng này cho phép tạo ra những tính chất cơ, điện, từ và những tính chất khác rất mới cho vật liệu. Tiến trình này được gọi là cách tiếp cận từ dưới lên (bottom-up approach) và việc nghiên cứu tính chất của những vật liệu này được gọi là công nghệ nano. Chữ nano ở đây nói lên kích thước của những cấu trúc này ở cấp độ nanomet (10^{-9} m), thường là nhỏ hơn 100 nm (gần tương đương với đường kính của 500 nguyên tử).

Ví dụ Fullerenes: khám phá năm 1985, dạng đơn giản nhất có công thức C_{60} , bao gồm các nguyên tử cacbon liên kết với nhau tạo thành các lục giác (6 nguyên tử cacbon) hoặc ngũ giác (5 nguyên tử cacbon).

 C_{60}  C_{200}