

Chương 1

KHÁI NIỆM CƠ BẢN VỀ KIM LOẠI VÀ HỢP KIM

Vật liệu dùng trong công nghiệp rất đa dạng, tuy nhiên kim loại và hợp kim của chúng vẫn được sử dụng nhiều nhất (70 – 80%) khối lượng, vì vậy cần phải hiểu biết những tính chất cơ bản và phạm vi sử dụng chúng.

1.1. KHÁI NIỆM VỀ VẬT LIỆU CÔNG NGHIỆP

Vật liệu nói chung là những vật rắn mà con người sử dụng để chế tạo dụng cụ, máy móc, thiết bị,... và ngay cả để thay thế một số bộ phận của cơ thể hoặc thể hiện ý đồ nghệ thuật.

Dựa theo cấu trúc – tính chất đặc trưng, người ta phân ra 4 nhóm vật liệu chính:

- Vật liệu kim loại.
- Ceramic (vật liệu vô cơ).
- Polyme (vật liệu hữu cơ).
- Compozit (vật liệu kết hợp).

Ngoài ra có những nhóm phụ khó ghép vào bốn nhóm trên như: bán dẫn, siêu dẫn nhiệt độ thấp, siêu dẫn nhiệt độ cao, silicon, vật liệu nano.

1.2. KHÁI NIỆM VỀ VẬT LIỆU KIM LOẠI

Kim loại là vật thể sáng (có ánh kim), có thể rèn được (do có tính dẻo), có tính dẫn điện, dẫn nhiệt tốt, có hệ số nhiệt điện trở dương...

Hiện nay đã tìm được hơn 100 nguyên tố, trong đó hơn 3/4 là kim loại; trong bảng tuần hoàn các nguyên tố hoá học, chúng nằm ở bên trái đường đậm nét. Ngoài ra một số nguyên tố có vị trí trung gian giữa kim loại và á kim, đó là các nguyên tố bán dẫn (Ge, Si). Các nguyên tố còn lại là á kim: C, O, H, N, B...; khí trơ: He, Ne, Ar, Kr... và halôzen: F, Cl, Br, I... (bên phải đường đậm nét).

Thực tế chưa có tiêu chuẩn thật rõ rệt phân biệt kim loại và á kim.

Trong kim loại lại phân ra: kim loại đen và kim loại màu.

- Kim loại đen là sắt và các hợp kim trên cơ sở sắt, ví dụ: thép và gang.
- Kim loại màu: bao gồm các kim loại còn lại trong bảng tuần hoàn và hợp kim trên cơ sở của chúng.

1.3. CẤU TẠO MẠNG TINH THỂ

1.3.1. Cấu tạo nguyên tử của kim loại

– *Đặc điểm cấu tạo nguyên tử của kim loại:* Nguyên tử là một hệ thống phức tạp gồm hạt nhân (chứa prôtôn + notrôn) mang điện tích dương và các điện tử mang điện tích âm quay quanh hạt nhân. Đặc điểm của kim loại là số điện tử hoá trị rất ít (thường là $1 \div 2e$, $e = \text{electron}$), các điện tử liên kết rất yếu với hạt nhân, dễ bứt ra khỏi hạt nhân và trở thành điện tử tự do còn nguyên tử trở thành ion dương. Đặc tính của các điện tử này quyết định nhiều tính chất đặc trưng của kim loại.

1.3.2. Cấu tạo tinh thể kim loại

1. Một số khái niệm cơ bản

Tất cả các kim loại và hợp kim ở trạng thái rắn đều là vật thể có cấu tạo *mạng tinh thể*. Các nguyên tử (ion) chiếm những vị trí nhất định trong không gian tạo thành mạng tinh thể.

– Mạng tinh thể gồm những mặt nguyên tử sắp xếp song song và cách đều nhau gọi là *mặt tinh thể*.

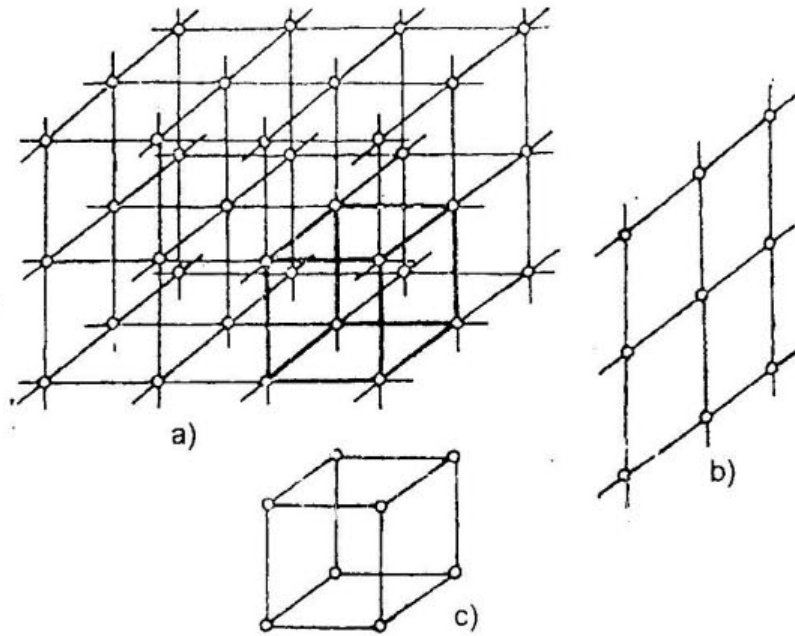
– Đường thẳng đi qua 2 nguyên tử (ion) và tiếp tục đi qua các nguyên tử (ion) khác gọi là *phương tinh thể*.

– Phần thể tích nhỏ nhất đặc trưng cho một loại mạng tinh thể nào đó được gọi là *ô cơ bản*. Nếu xếp liên tiếp các ô cơ bản theo 3 chiều không gian sẽ được toàn mạng tinh thể (hình 1.1).

– Thông số mạng

Thông số mạng là kích thước cơ bản của mạng tinh thể, từ đó có thể tính ra các khoảng cách bất kỳ trong mạng. Đơn vị thường dùng là ăngstrông (Å°) hay kilô inch (kx).

Hệ lập phương chỉ có một thông số mạng là cạnh a của khối cơ bản. Hệ lục giác có hai thông số mạng là a và c .

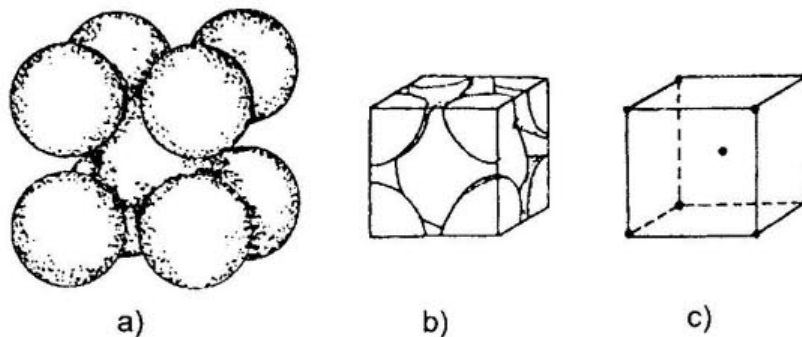


Hình 1.1. Mạng lập phương đơn giản
a) mạng tinh thể; b) mặt tinh thể; c) ô cơ bản.

1.3.3. Các dạng ô cơ bản của mạng tinh thể kim loại

Ô cơ bản đặc trưng cho kiểu mạng tinh thể của kim loại. Theo tính toán của Bravais thì tất cả có 14 kiểu mạng tinh thể khác nhau thuộc 7 hệ. Trong các kim loại thường dùng trong công nghiệp cơ khí, thường gặp ba kiểu mạng tinh thể là: lập phương tâm (còn gọi là lập phương tâm khối và ký hiệu là A2 hoặc lptk); lập phương diện tâm (còn gọi là lập phương tâm mặt và ký hiệu là A1 hoặc lptm); sáu phương xếp chặt (ký hiệu là A3 hoặc spxc).

a) *Lập phương tâm khối* (ký hiệu A2, lptk): (có ở các kim loại: Fe_α, Cr, V,...)

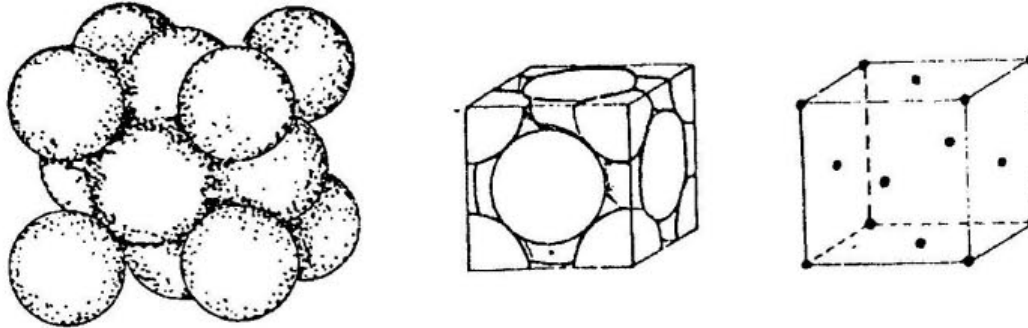


Hình 1.2. Ô cơ sở mạng lập phương tâm khối (a, b, c)

Ô lập phương tâm khối với cạnh là a , các nguyên tử nằm ở đỉnh và trung tâm khối, loại ô này có thể được ký hiệu bằng \blacksquare .

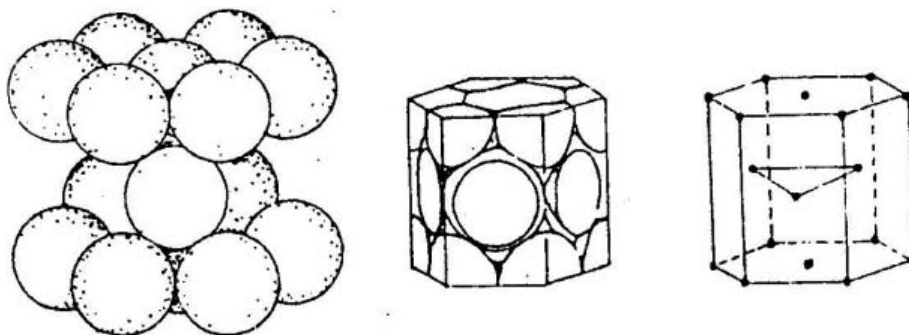
b) *Lập phương tâm mặt* (ký hiệu $A1$, $lptm$): (có ở các kim loại: Fe_γ , Al, Cu, Ni, Pb...).

Ô cơ sở là hình lập phương với cạnh là a , các nguyên tử nằm ở đỉnh và trung tâm các mặt bên của khối. Ô này đôi khi được ký hiệu bằng \square , hình 1.3.



Hình 1.3. Ô cơ sở mạng lập phương tâm mặt

c) *Sáu phương xếp chặt* (ký hiệu $A3$, $spxc$): (có ở các kim loại: Zn, Cd, Mg...). Ô cơ sở là hình lục giác với các cạnh là a và c (gồm sáu lăng trụ tam giác đều), các nguyên tử ở 12 đỉnh, giữa các mặt đáy và 3 nguyên tử nằm ở tâm 3 khối lăng trụ tam giác cách đều nhau (hình 1.4), được ký hiệu bằng \hexagon .

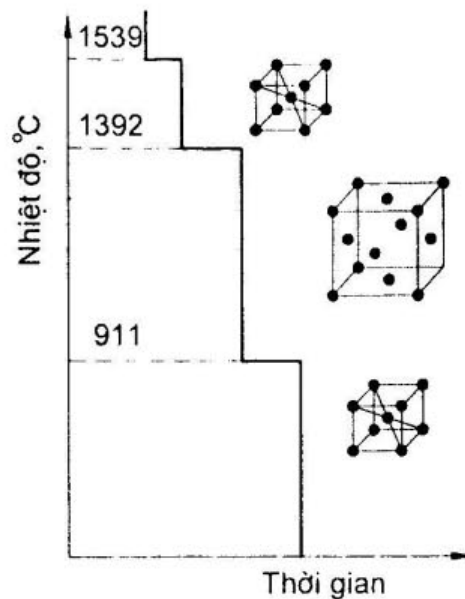


Hình 1.4. Ô cơ sở mạng sáu phương xếp chặt

* *Tính biến đổi thù hình của kim loại:*

Kim loại ở các nhiệt độ, áp suất khác nhau có kiểu mạng khác nhau, được gọi là tính thù hình của kim loại. Ví dụ: Fe, Co, Mn, Sn, Te, Ce...

Các dạng thù hình khác nhau của cùng một nguyên tố được ký hiệu bằng chữ cái Hy Lạp: α , β , γ , δ ... trong đó α chỉ dạng tồn tại ở nhiệt độ thấp nhất còn β , γ , δ ... lần lượt ở các nhiệt độ cao hơn. Ví dụ: Fe_α , Fe_β , Fe_γ ... (hình 1.5). Quá trình thay đổi cấu trúc mạng từ dạng thù hình này sang dạng thù hình khác được gọi là chuyển biến thù hình.



Hình 1.5. Tính thù hình của sắt

Đặc điểm khi chuyển biến thù hình:

- Toả hoặc thu nhiệt.
- Thay đổi thể tích.
- Thay đổi tính chất.

Nhìn vào sự biến đổi thù hình của sắt cho thấy : Fe_{α} mềm, có từ tính nhưng Fe_{γ} lại dẻo, nhưng không còn từ tính. Nhờ vậy mà cải thiện được tính công nghệ của sắt.

Trong thực tế không phải 100% nguyên tử đều nằm đúng vị trí quy định, mà luôn có những nguyên tử nằm sai lệch khỏi vị trí quy định, gây nên sai lệch mạng tinh thể (gọi là lệch mạng). Tuy số nguyên tử nằm sai lệch khỏi vị trí quy định rất ít (chỉ 1 – 2%) nhưng cũng gây ảnh hưởng rất lớn đến các tính chất của kim loại.

1.3.4. Đơn tinh thể và đa tinh thể

1. Đơn tinh thể

Đơn tinh thể là vật thể có mạng thống nhất và phương mạng không thay đổi trong toàn bộ thể tích của nó. Đơn tinh thể có hình dạng nhất định đặc trưng cho kiểu mạng của mình. Đơn tinh thể có tính dị hướng. Thực tế rất ít gặp đơn tinh thể vì chúng có kích thước rất bé (1–100 μ m), do phải "nuôi = công nghệ" bằng phương pháp công nghệ đặc biệt (hình 1.6a).

Tính dị hướng của đơn tinh thể: là sự khác nhau về tính chất (cơ, lý, hoá...) theo những phương mạng khác nhau của tinh thể.

Nguyên nhân: Theo phương khác nhau, mật độ nguyên tử khác nhau, lực liên kết khác nhau, tính chất khác nhau. Thường phương nào có mật độ lớn thì có độ bền cao.

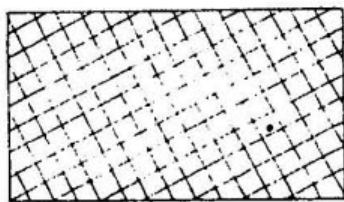
Khái niệm đơn tinh thể có thể liên hệ với khái niệm đơn tinh thể Ge, Si (vật liệu bán dẫn).

2. Đa tinh thể

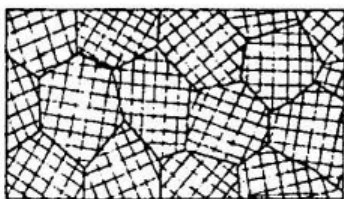
a) *Hạt tinh thể (gọi tắt là tinh thể):* Trong thực tế hầu như chỉ gặp *đa tinh thể*. Đa tinh thể gồm rất nhiều đơn tinh thể nhỏ (cỡ μm), mỗi đơn tinh thể trong đa tinh thể được gọi là *hạt tinh thể*. Các hạt có phương mạng định hướng khác nhau (ngẫu nhiên theo phương truyền nhiệt khi kết tinh) và liên kết với nhau qua vùng ranh giới (gọi là *biên hạt hoặc tinh giới hạt*).

Đặc điểm:

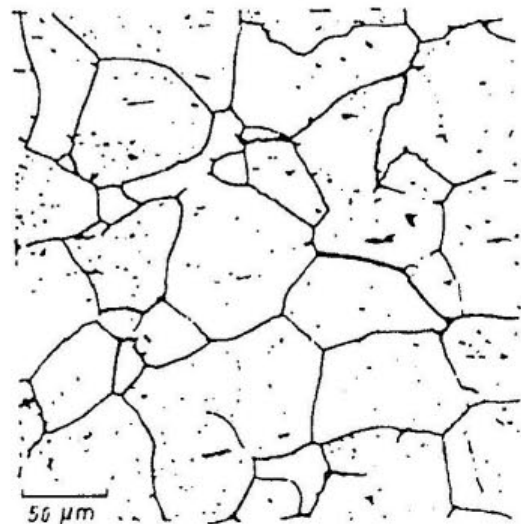
- Mạng tinh thể trong mỗi hạt đều có trật tự.
- Các hạt trong đa tinh thể có phương mạng sắp xếp bất kỳ nên đa tinh thể có *tính đẳng hướng*.
- Vùng biên giới hạt các nguyên tử sắp xếp không có trật tự và chịu ảnh hưởng của các hạt xung quanh (hình 1.6b,c).



a)



b)



c)

Hình 1.6. Mô hình đơn tinh thể (a), đa tinh thể (b) và ảnh hiển vi quang học mẫu đa tinh thể sau tấm thực (c)

b) *Độ hạt:* Hạt to, nhỏ có ảnh hưởng lớn tới cơ tính của kim loại. Độ hạt là biểu hiện kích thước trung bình của các hạt. Có 16 cấp từ 00, 0, 1, 2,...14 theo thứ tự nhỏ dần. Độ hạt càng nhỏ tính chất cơ học của kim loại càng cao, 8 cấp của kim loại thường dùng là từ cấp 1 đến 8.

1.4. SỰ KẾT TINH CỦA KIM LOẠI

Sự kết tinh của kim loại là sự tạo thành mạng tinh thể của kim loại khi chuyển từ trạng thái lỏng sang trạng thái đặc. Khi kết tinh có sự biến đổi từ trạng thái sắp xếp không hoàn toàn trật tự thành có trật tự (đó là cấu trúc tinh thể), nó xảy ra ở mỗi nhiệt độ nhất định đối với mỗi kim loại.

Phần lớn kim loại (hay hợp kim) được chế tạo ra ở trạng thái lỏng rồi làm nguội trong các khuôn đúc, tức là qua kết tinh, sau đó mới qua các dạng gia công khác nhau (ví dụ rèn, dập cán...) để làm thành bán thành phẩm, sản phẩm.

1.4.1. Điều kiện xảy ra kết tinh

a) *Biến đổi năng lượng khi kết tinh:* Trong tự nhiên mọi quá trình tự phát đều xảy ra theo chiều giảm năng lượng tự do (theo chiều có năng lượng dự trữ bé hơn). Trong hệ thống gồm nhiều chất điểm chuyển động (nguyên tử, phân tử), năng lượng dự trữ được đặc trưng bằng năng lượng tự do F . Hình 1.7 biểu thị sự biến đổi năng lượng tự do F của trạng thái rắn và trạng thái lỏng phụ thuộc vào nhiệt độ.

$$F = U - TS$$

Trong đó: U – nội năng của hệ thống;

S – entropi;

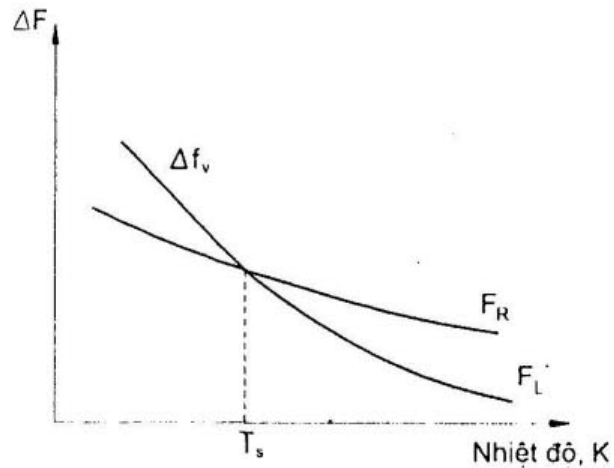
T – nhiệt độ K

Khi nhiệt độ $T > T_s$ vật thể ở trạng thái lỏng vì năng lượng tự do của trạng thái lỏng nhỏ hơn ở trạng thái rắn $F_L < F_R$, sự kết tinh chưa xảy ra.

Khi nhiệt độ $T < T_s$ vật thể ở trạng thái tinh thể vì $F_L > F_R$.

Khi nhiệt độ $T = T_s$ tại đó $F_L = F_R$, kim loại ở trạng thái cân bằng động: có một lượng kim loại kết tinh thì lại có một lượng kim loại rắn như vậy nóng chảy. Chỉ ở nhiệt độ $T < T_s$, khi đó $F_L > F_R$ mới có sự kết tinh.

Khi nguội qua T_s sẽ xảy ra quá trình kết tinh nên T_s được gọi là nhiệt độ kết tinh (khi nguội) hay gọi là nhiệt độ chảy (khi nung nóng), điều này chỉ có tính lý thuyết, vì tại đúng nhiệt độ đó khi làm nguội vẫn chưa xảy ra kết tinh; khi nung nóng vẫn chưa xảy ra nóng chảy.



Hình 1.7. Sơ đồ biến đổi năng lượng tự do ΔF của các trạng thái rắn, lỏng phụ thuộc vào nhiệt độ