

www.mientayvn.com

Dịch tiếng anh chuyên ngành khoa học tự nhiên và kĩ thuật.

Dịch các bài giảng trong chương trình học liệu mở của học viện MIT, Yale.

Tìm và dịch tài liệu phục vụ cho sinh viên làm seminar, luận văn.

Tại sao mọi thứ đều miễn phí và chuyên nghiệp ???

Trao i tr c tuy n t i:

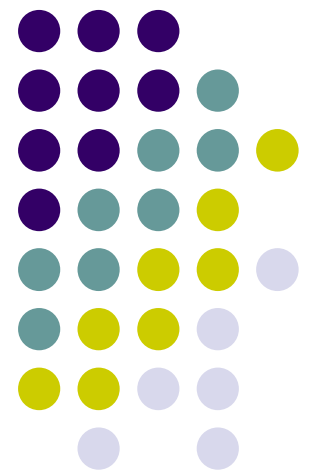
http://www.mientayvn.com/chat_box_li.html

CÔNG NGHỆ và KHOA HỌC VẬT LI CÔNG NGHỆ

Nguyễn Minh Tuấn

Chương IV

Số bit hoàn hảo trong Thuật toán



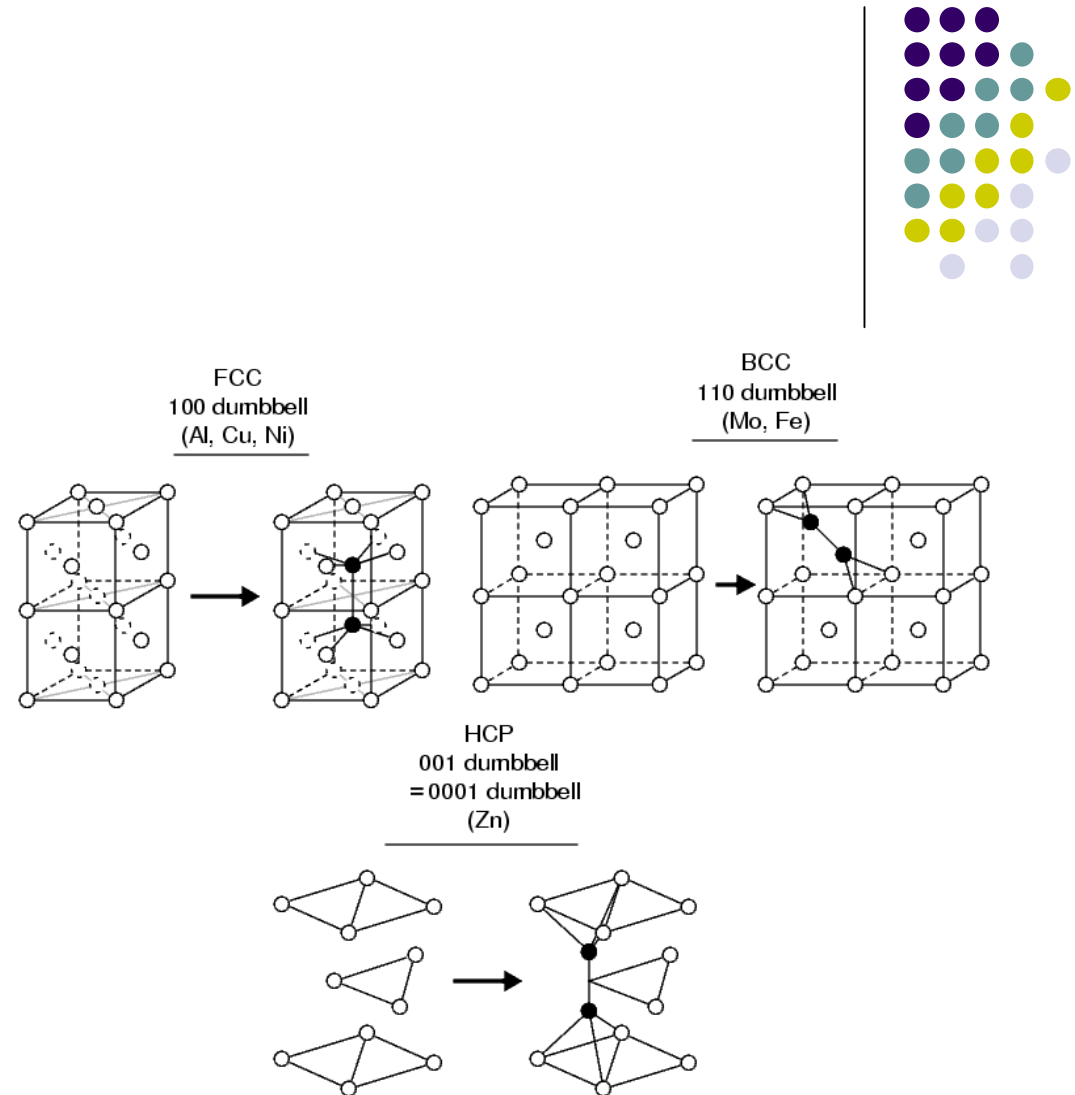


Nội dung

1. Sai hỏng điểm (point defects) – 0D
 - Nút khuyết tật (vacancies)
 - Các nguyên tử xen kẽ (interstitials)
 - Tạp chất
2. Sai hỏng đường, lích m ngang (line defects) – 1D
 - Lích mang biên (edge dislocations)
 - Lích m ngang xoắn (screw dislocations)
3. Sai hỏng mặt, biên hạt (planar defects) – 2D
 - Xấp nghiêng (tilt)
 - Xoắn (twist)
4. Sai hỏng thể tích, sai hỏng khối (bulk, volume defects) – 3D
 - Lích khối

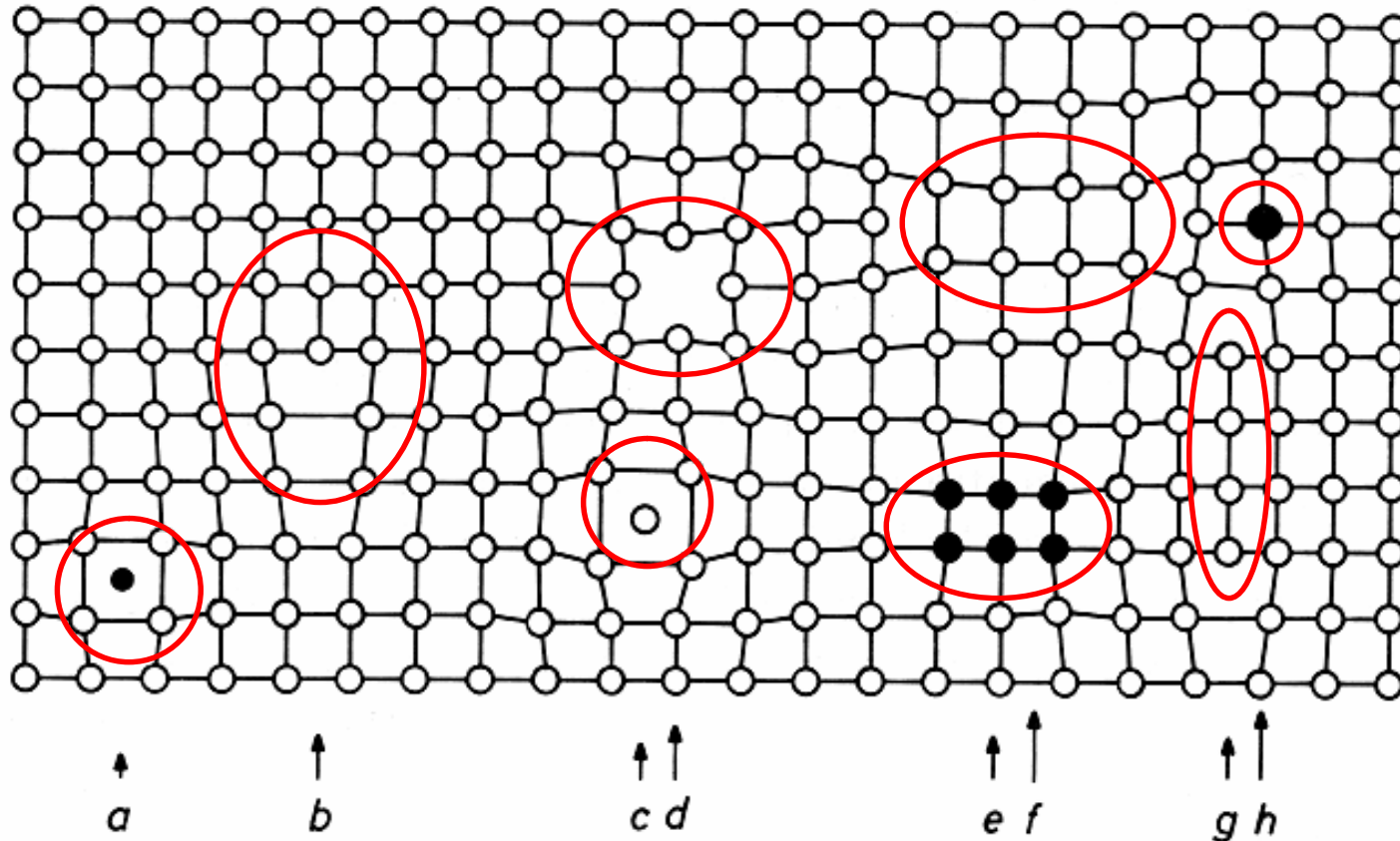
Nội dung

- Solids are like People. It is their defects that make them interesting





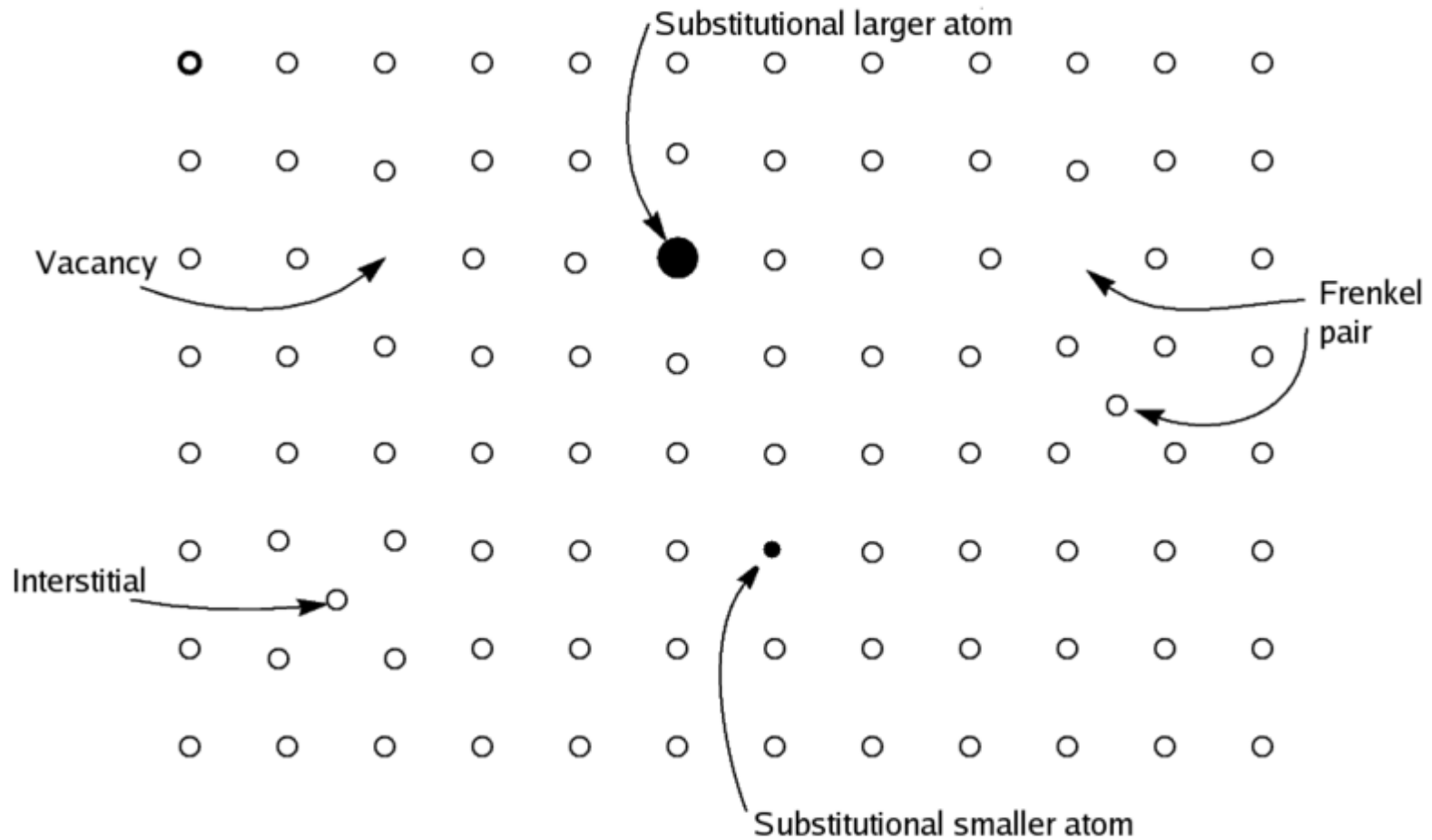
Phân loại sai hỏng



a: nguyên tử tạp chất xen kẽ, b: lỗ hổng biên, c: nguyên tử xen kẽ, d: nút khuyết, e: sừng ngạt các nguyên tử tạp chất, f: vòng lỗ hổng d ng nút khuyết, g: vòng lỗ hổng d ng xen kẽ, h: nguyên tử tạp chất thay thế

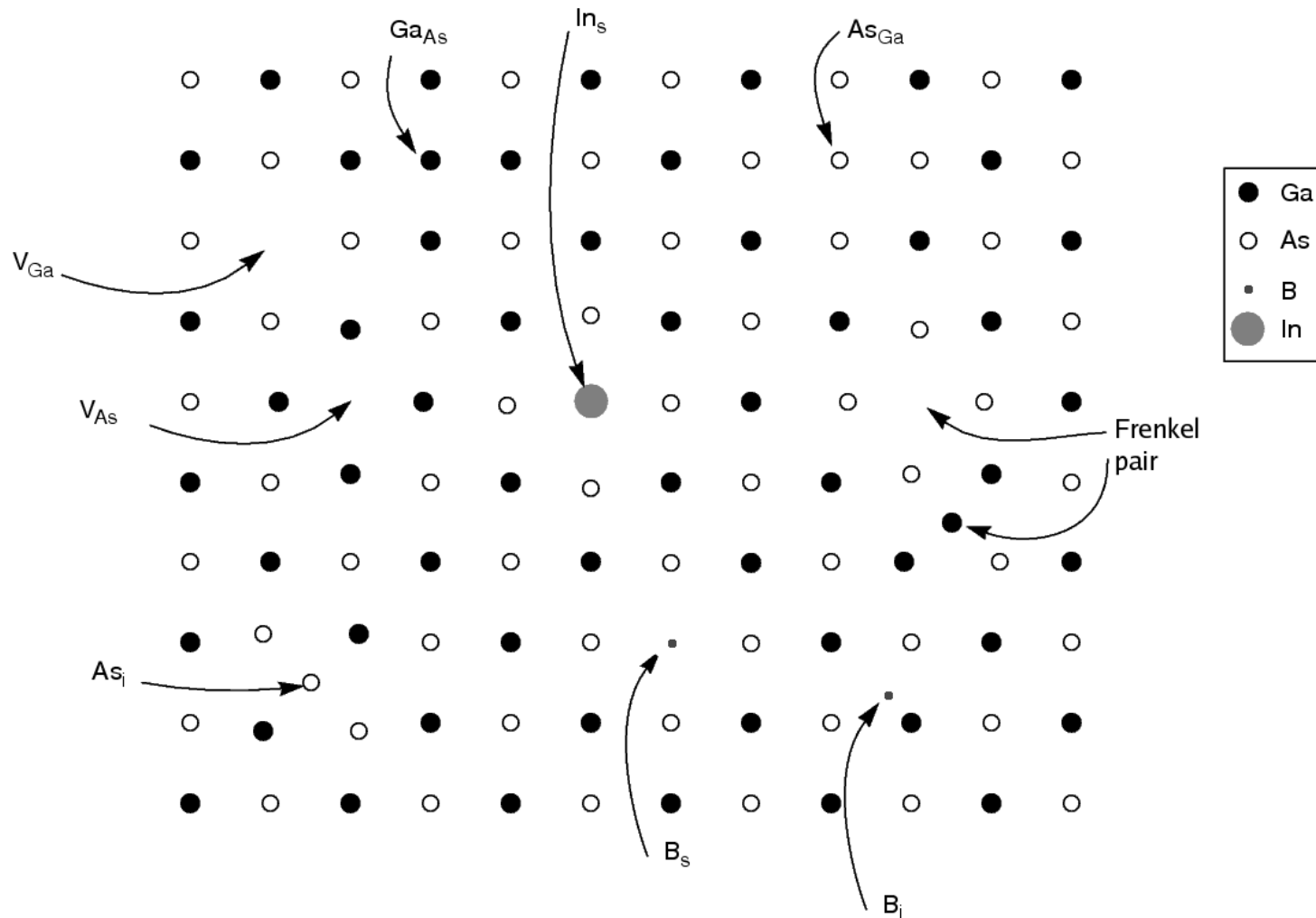


Phân loại sai hỏng





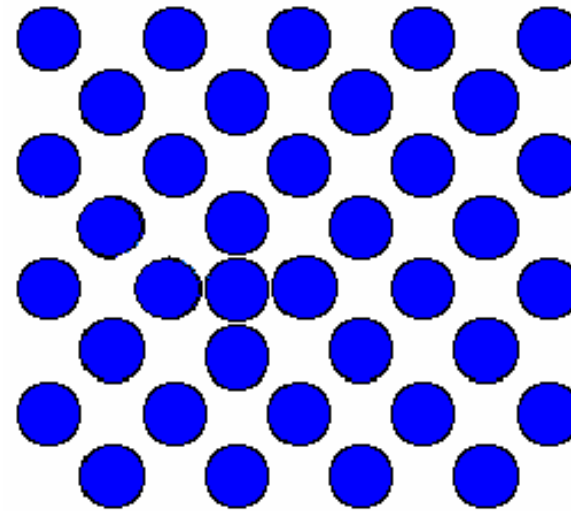
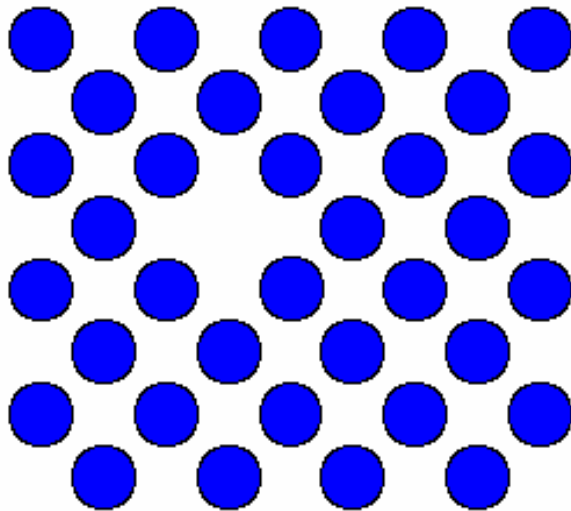
Phân loại sai hỏng





Sai hỏng trong cấu trúc (defects)

- Các tinh thể thực tế luôn có sai hỏng (defects).
- Các sai hỏng thực tế có ảnh hưởng lớn đến các tính chất cơ vật lý





Các loại sai hỏng

- **Sai hỏng điểm (0D):**
 - Các nguyên tử bị thiếu hoặc không nằm các nút mạng - (nút khuyết, nguyên tử xen kẽ, tạp chất...)
- **Sai hỏng đường (1D)**
 - Nhóm các nguyên tử nằm các vị trí không đều (lỗi mạng biên và lỗi mạng xoắn)
- **Sai hỏng mặt (2D)**
 - Các mặt nguyên tử 2 miền ngược nhau và vị trí lệch (biên hạt, mặt ngoài...)

- **Sai hỏng khối (3D)**
 - Các lỗ hổng, vết nứt...



Ảnh chụp TEM của sai hỏng khối trên tinh thể Silic (chụp TEM)



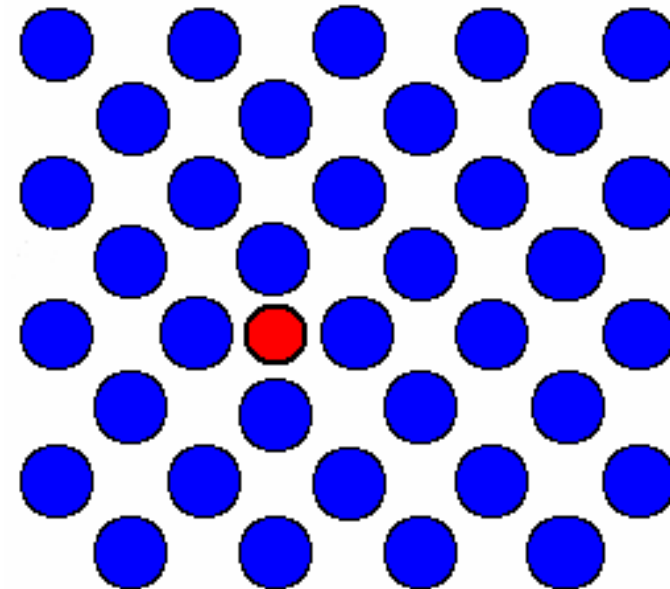
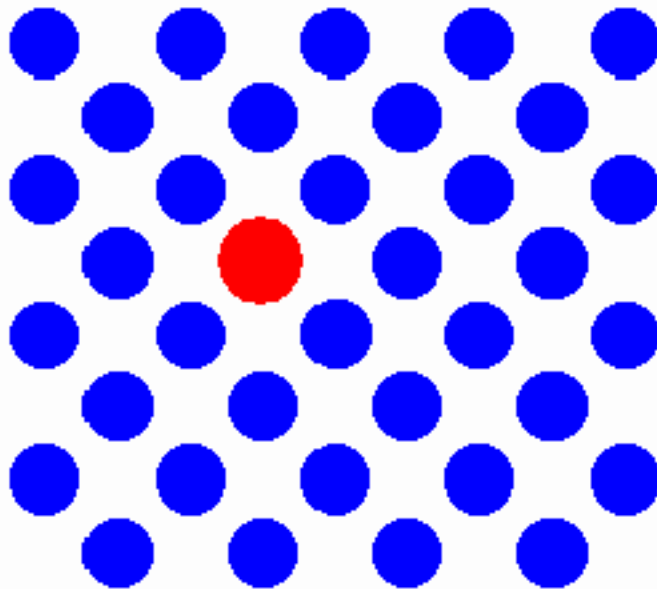
Sai hỏng điểm (point defects)

- Các sai hỏng trung hòa

- Nút khuyết tật Sai hỏng nội tại
- T xen kẽ

- Sai hỏng do tạp chất

- Thay thế Sai hỏng ngoại lai
- Xen kẽ

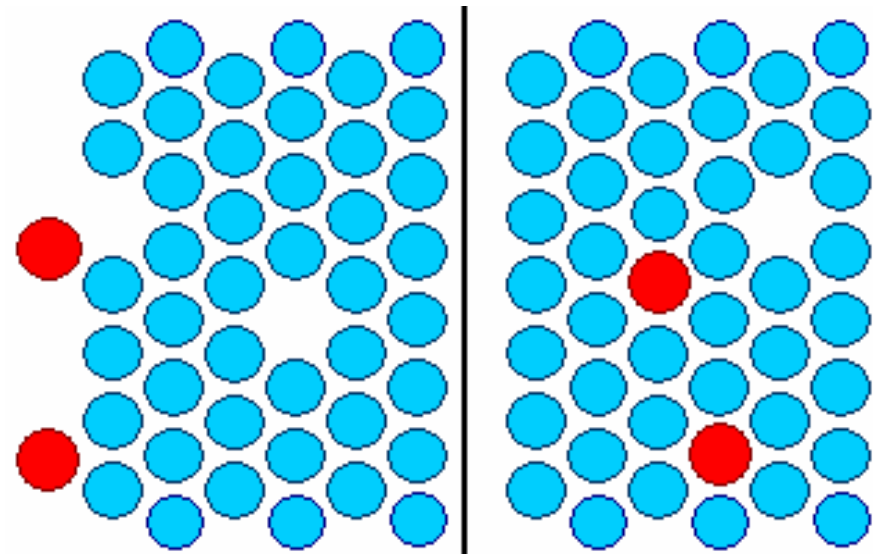




Sai hỏng điểm (point defects)

- Nút khuyết tật (vacancy)
 - Vị trí trong mạng không có nguyên tử chiếm chỗ
- Sự phân bố nút khuyết tật
 - Là sự nút khuyết tật cân bằng nhiệt động học do các dao động nhiệt theo phương trình nhiệt động học $N_V = N_S \exp(-Q_V/k_B T)$ với N_S là số nút mạng, k_B là hằng số Boltzmann, Q_V là năng lượng cần thiết để tạo nút mạng trống trong tinh thể hoàn hảo, T là nhiệt độ Kelvin

- Dùng công thức này có thể tính số nút khuyết tật trong vật rắn cho nhiệt độ khác nhau



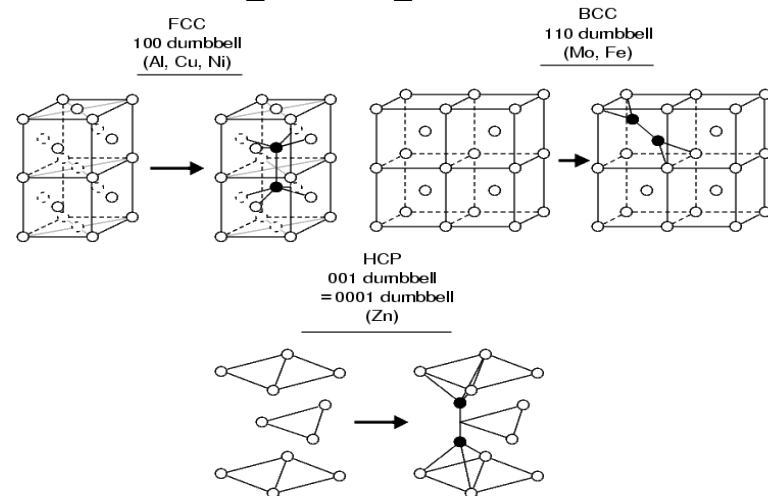


Sai hỏng điểm (point defects)

- **T xen k** (Self-interstitials) –
nội tại: có thêm nguyên tử xen k
nhúng chèn vào nguyên tử cùng
mạng tinh thể trong mạng – thường
tìm thấy trong thành phần các kim
loại và bán dẫn

- **Xen k** (Impurity interstitials) –
tạp bên ngoài: Nguyên tử xen k
là nguyên tử tạp chất mà nguyên tử
có kích thước nhỏ hơn – thường
nằm ngoài nút mạng, xen giữa
nguyên tử trong mạng

Cấu trúc của xen k trong mạng và kim loại





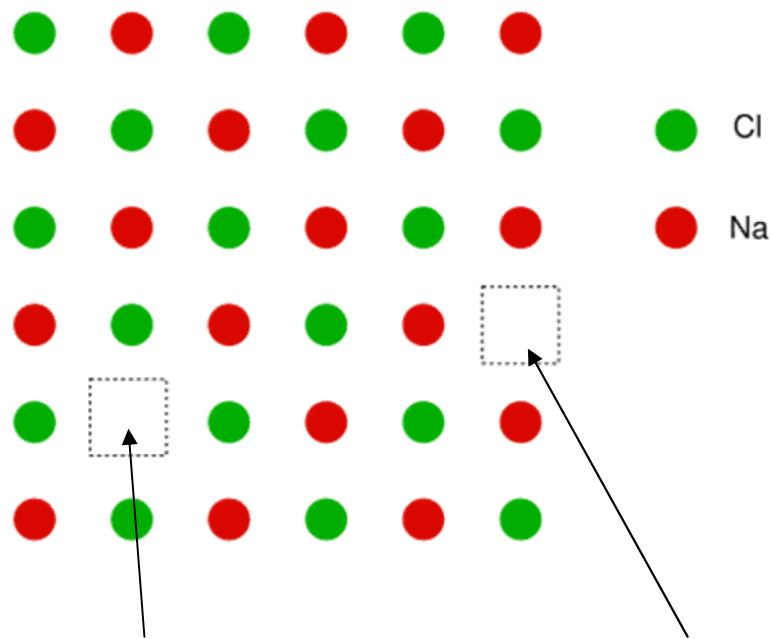
Ví dụ tính số nút khuyết

- Tính số nút khuyết có trong 1 cm³ (Cu) nhiệt độ phòng, biết năng lượng tạo nút khuyết $Q_V = 0,9 \text{ eV/atom}$
 - $k_B T = 300 \text{ K} \times 8,62 \times 10^{-5} \text{ eV/K} = 0,026 \text{ eV}$
- Số nút mạng $N_S = N_A \rho / A_{Cu}$
- $N_A = 6,023 \times 10^{23} \text{ atom/mol}$
- $\rho = 8,4 \text{ g/cm}^3$
- $A_{Cu} = 63,5 \text{ g/mol}$
- $N_S = N_A \rho / A_{Cu} = 8 \times 10^{22} \text{ atom/mol}$
- $N_V = 8 \times 10^{22} \times \exp(-0,9 / 0,026) = 7,4 \times 10^7 \text{ nút khuyết/cm}^3$

Sai hỏng Schottky và Sai hỏng Frenkel



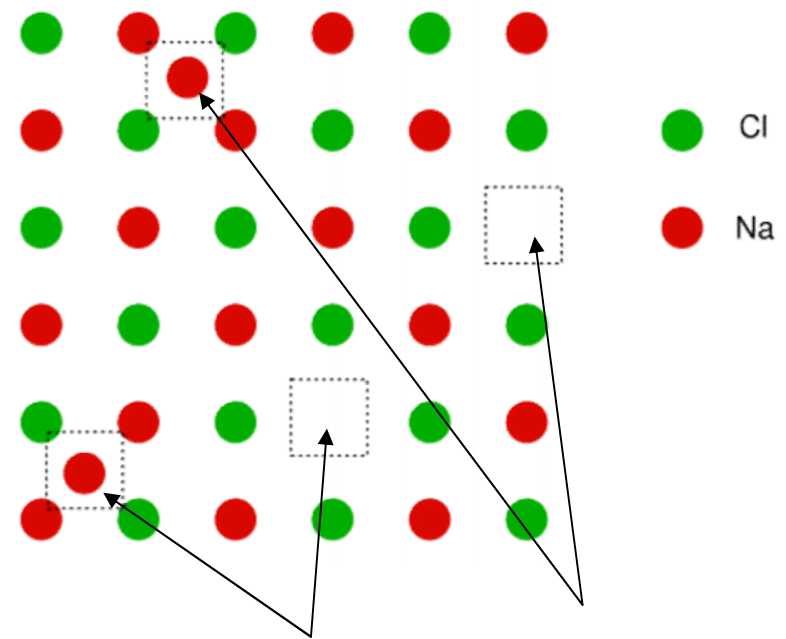
Sai hỏng Schottky trên NaCl



Nút khuyết t Cation

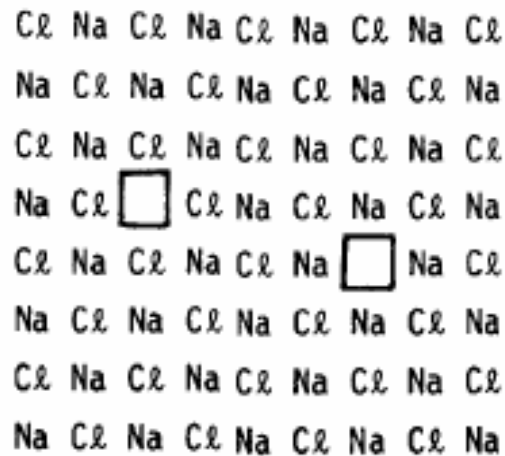
Nút khuyết t Anion

Sai hỏng Frenkel trên NaCl



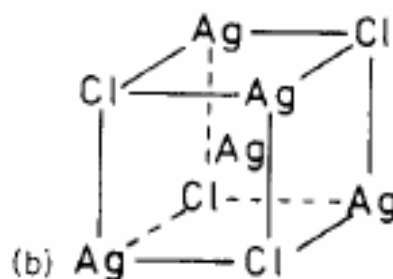
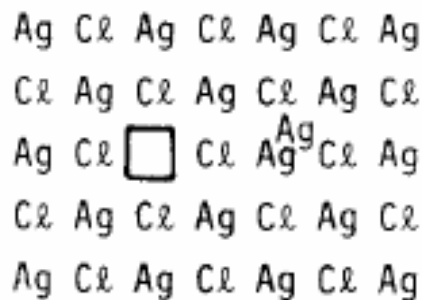
Cặp Frenkel

Sai hỏng Schottky và Sai hỏng Frenkel



Schottky defect in NaCl

- both cation and anion are missing from their regular lattice sites
- at room temp on 1 in 10^{15} sites are vacant in NaCl
- 200 kJmol^{-1} creation energy



Cation Frenkel defect in AgCl

- cation is displaced from regular lattice site onto interstitial site
- 130 kJ mol^{-1} creation energy

Sai hỏng Schottky và Sai hỏng Frenkel



- Sai hỏng Frenkel có thể xuất hiện trên phân tử anion (–) hoặc cation (+)
- Thứ tự cho thấy sai hỏng Frenkel cation phải nhỏ hơn sai hỏng Frenkel anion
 - Cation có kích thước nhỏ hơn Anion – do đó dễ dàng lấp đầy các vị trí trống giữa các nút mạng
- Các cấu trúc Fluorites (CaF_2 , SrF_2 , ZnO_2 , UO_2) có các anion sai hỏng Frenkel như x

Sai hỏng Schottky và Sai hỏng Frenkel



- **Anions** là những *ion tích điện âm*, tạo thành khi nguyên tử thu nhận thêm electron trong phân tử. Anions tích điện âm do điện tích dương của proton trong hạt nhân.
- **Cations** là những *ion tích điện dương*, tạo thành khi nguyên tử mất electron trong phân tử, tạo nên lỗ trống với điện tích “**electron hole**”. Cations là đối lập với anions, do cations có số điện tích ít hơn số proton.
- **Radical ions (gốc)**: gốc ion là ions chứa **các electron** và hạt tự do có hoạt tính rất cao và không bền.

Sai hỏng Schottky và Sai hỏng Frenkel



Table 5.1 The formation enthalpy of Schottky and Frenkel defects in some selected compounds

	<i>Compound</i>	$\Delta H(10^{-19} \text{ J})$	$\Delta H(\text{eV})^*$
Schottky defects	MgO	10.57	6.60
	CaO	9.77	6.10
	LiF	3.75	2.34
	LiCl	3.40	2.12
	LiBr	2.88	1.80
	LiI	2.08	1.30
	NaCl	3.69	2.30
	KCl	3.62	2.26
	Frenkel defects	UO ₂	5.45
ZrO ₂		6.57	4.10
CaF ₂		4.49	2.80
SrF ₂		1.12	0.70
AgCl		2.56	1.60
AgBr		1.92	1.20
β -AgI		1.12	0.70

*The literature often quotes values in eV, so these are included for comparison: $1 \text{ eV} = 1.60219 \times 10^{-19} \text{ J}$.



Tâm màu (Color Centers)

- **Tâm màu:** Sai hỏng gồm một nút khuyết t ion âm và một electron liên kết với nút khuyết đó
- Các sai hỏng có hấp thụ ánh sáng làm cho một số tinh thể trong suốt trở nên có màu – các tâm đó thường gọi là tâm F (Farbe tiếng Đức là màu sắc)
- Các ion b b y vị trí các nút khuyết tạo màu cho vật liệu
 - Các tâm màu
 - Màu là do sự chuyển mức của các ion b b y
- Các ion b b y khi
 - Chiếm chỗ
 - Khi xử lý một ion donor với các ion Na và K

Tâm màu (Color Centers)

Tâm F, H và V



- Chỉ ụ x có th t o ra sai h ng khi m t electron b m t i ho c thêm vào
- X lý v i h i kim lo i ki m có th t o ra các electron d trong v t li u
- **Tâm F**: electron b b t nút khuy t anion
 - Ví d tâm màu do electron b b t d n n s h p th trong vùng nhìn th y
- **Tâm H**: nguyên t Cl n m xen k gi a các nút liên k t v i Cl⁻ c a m ng
- **Tâm V**: các electron b l y i t nút anion c a m ng, d n t i c p nguyên t Cl và Cl⁻ lân c n

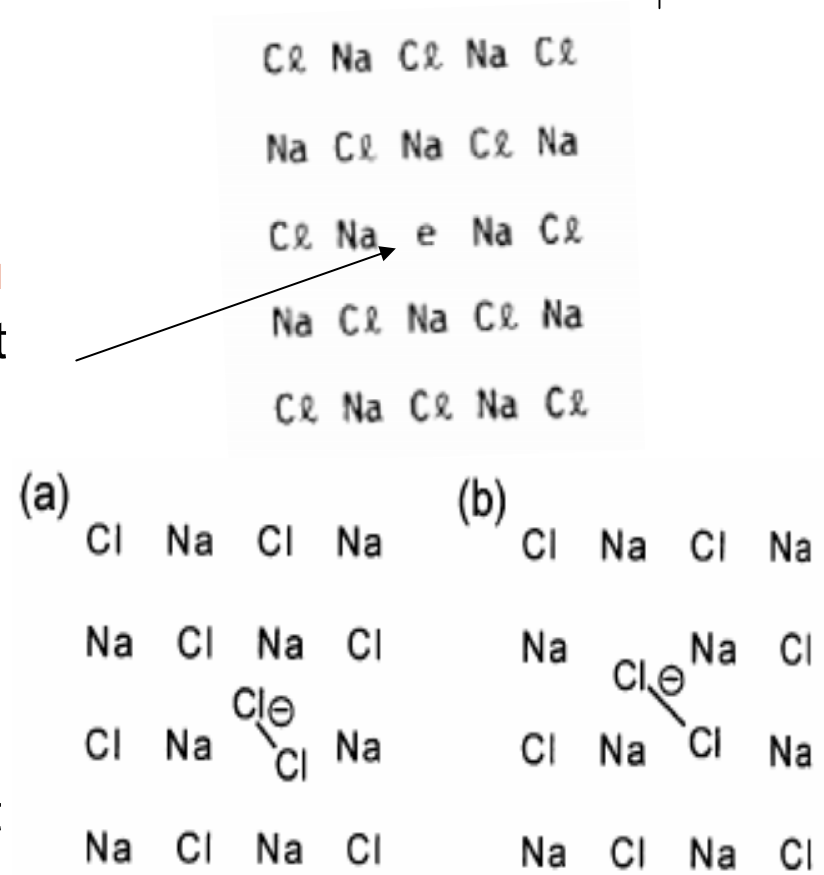


Fig. 5.6 (a) H-centre and (b) V-centre in NaCl



Tạp chất

- **Tạp chất:** Các nguyên tố khác với nguyên tố vật lý tinh thể
 - Tất cả các chất rắn đều có tạp chất
 - Tạp chất có thể do sản phẩm có trong tinh thể, hoặc do chèn vào làm thay đổi tính chất của vật lý
- Ví dụ điển hình như carbon chèn vào cấu trúc nguyên tử. Khi pha tạp Boron hoặc Phosphorus vào Silicon làm cho Silicon trở thành loại p hoặc n
- Hợp kim là hỗn hợp có cấu trúc như vật thể thành phần gồm nhiều kim loại làm thay đổi các tính chất của kim loại



Dung dịch rắn

- **Dung dịch rắn:** Tạo thành từ chất lỏng (dung môi hay matrix) có hòa tan thành phần thứ 2 (chất tan)
 - Hòa tan (solubility): khả năng hòa tan
 - Dung môi: hợp kim, nguyên tố hay hợp chất tinh thể đơn giản
 - Chất tan: hợp kim, nguyên tố hay hợp chất tinh thể đơn giản
- Dung dịch rắn:
 - Nguyên tố
 - Giãn nguyên tử cấu trúc tinh thể
 - Chuyển các tạp chất phân tán ngẫu nhiên (thay thế hoặc xen kẽ)
- Pha thứ hai: Khi các nguyên tố chất tan được thêm vào các hợp chất 1 cấu trúc mạng tinh thể tạo thành hoặc chất tan tạo nên các chất kết tủa phân tán. Tạp chất tạo nên dung dịch rắn hay pha thứ hai là tùy thuộc vào bản chất tạp chất, nồng độ, nhiệt độ, áp suất ...



Dung dịch rắn thay thế

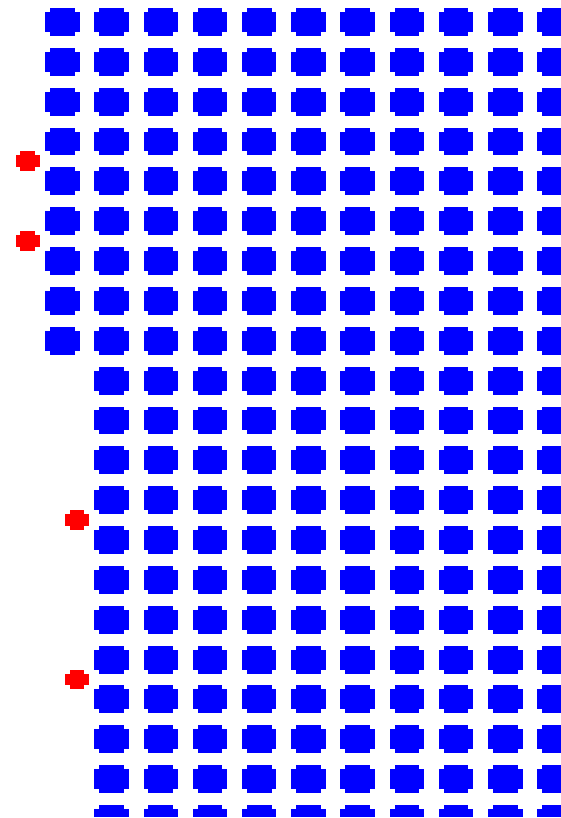
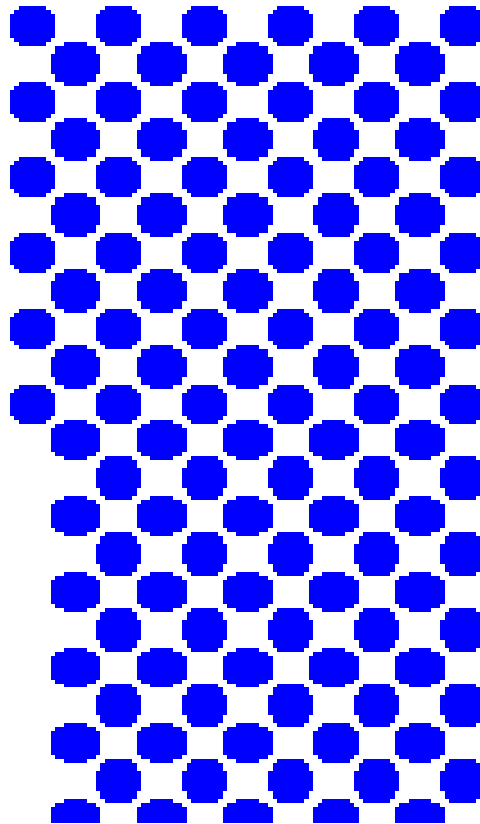
- 1) Kích thước nguyên tử : các nguyên tử phải nhỏ hơn, sai khác về bán kính nguyên tử cách thức dung môi và chất tan trong khoảng ~15%
- 2) Cấu trúc tinh thể chất tan và dung môi phải giống nhau
- 3) Âm điện của chất tan và dung môi phải khác nhau (nếu không các pha kim loại trung gian intermetallics có thể tạo thành)
- 4) Nói chung lượng chất tan trong dung môi sẽ cao hơn khi nó có hóa trị cao hơn dung môi



Dung dịch rắn xen kẽ

- Dung dịch rắn xen kẽ của carbon trong α -Fe: nguyên tử nhỏ hơn xen kẽ trong mạng tuy có tạo nên ứng suất nh trong mạng LPI
- **Các yếu tố cho hòa tan I n:** Vị trí cấu trúc FCC, BCC, HCP, các khoảng trống giữa các nguyên tử chủ yếu hình \rightarrow bán kính nguyên tử của chất tan I i càng nhỏ nh h n thì u bán kính nguyên tử của dung môi (thông thường ng ch t tan I n nh t 10% - 2% v i C-Fe)

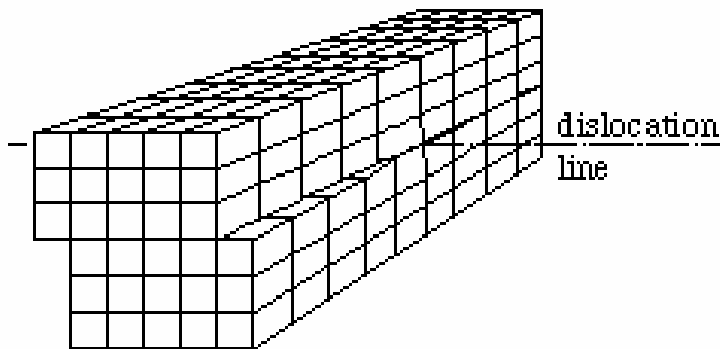
Sự khuếch tán các sai hỏng điểm



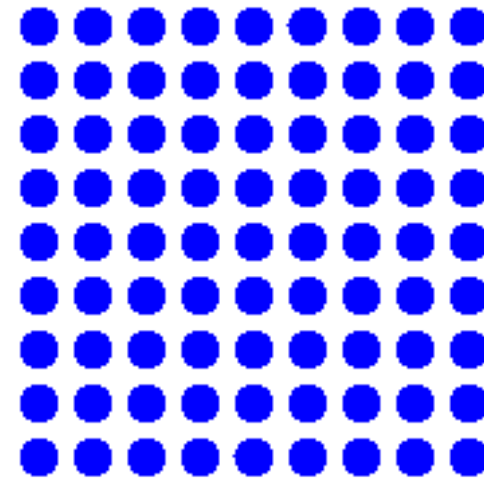


Lịch sử (Dislocations)

- Lịch sử là các sai hỏng
- Lịch sử có những tính chất đặc biệt – dùng gì thích tính chất đặc biệt
- Lịch sử có những tính chất đặc biệt khác
- Lịch sử có những tính chất đặc biệt khác



Lịch sử xoắn



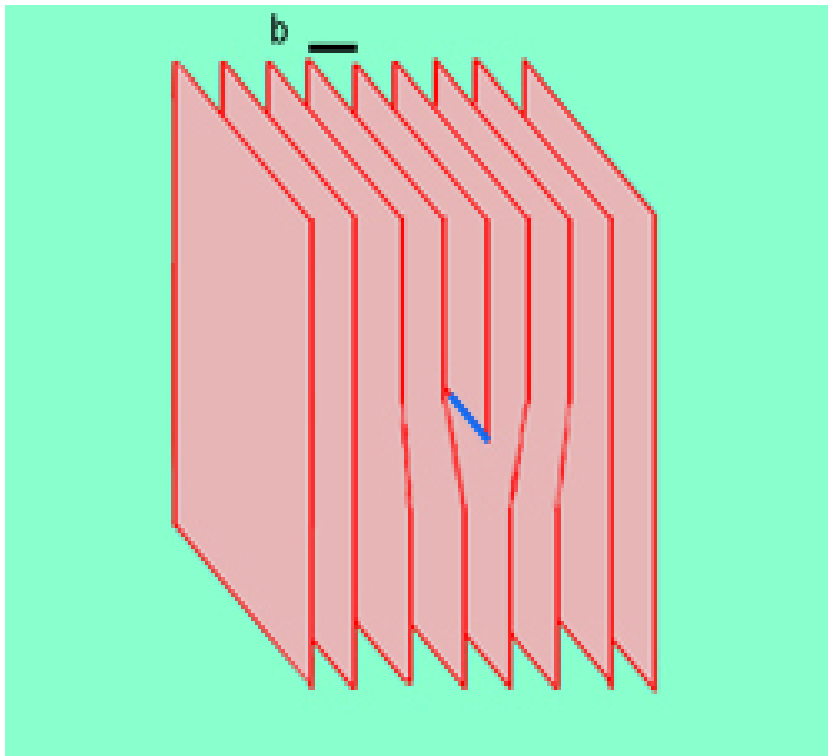
Lịch sử biên



Lịch sử (Dislocations)

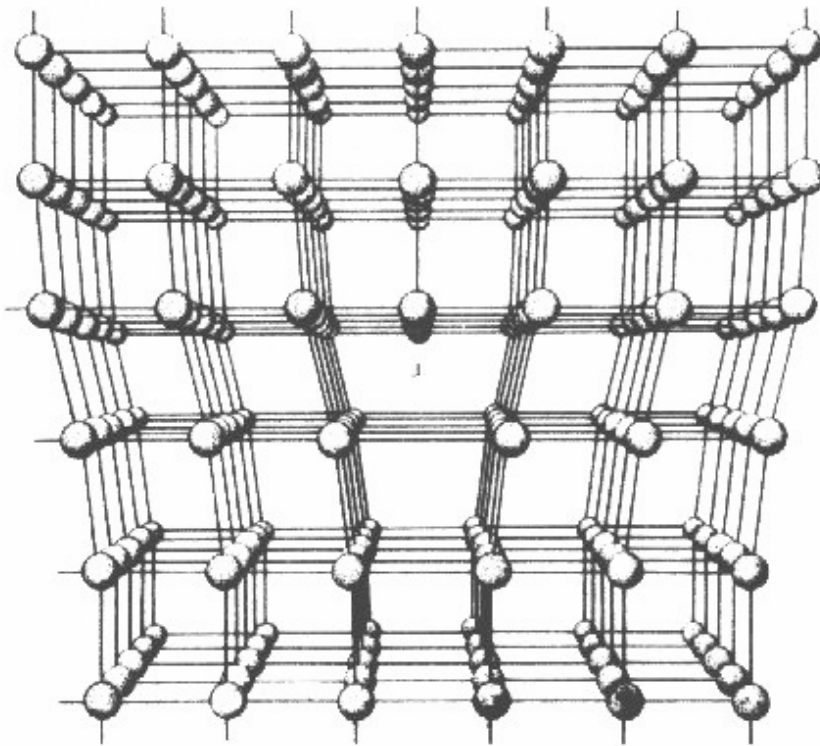
- Là các sai hỏng không cân bằng
 - Năng lượng không xác định bởi thức Boltzmann
 - Khi có cung cấp thời gian và năng lượng → các nguyên tử tái sắp xếp lại thành
- Nguyên nhân hình thành
 - Năng suất cao và biến dạng
 - Sai hỏng trong quá trình nuôi tinh thể
- Một bit
 - Lịch sử – chuyển trí và sự hình thành của
 - Vectơ Burgers – biểu thức toán học (xác định hướng và chiều)

Lịch trình biên Edge Dislocations



- Lịch trình biên: xuất hiện “các mặt nguyên tử d” trong mạng tinh thể
- Vectơ Burgers hướng vuông góc với hướng lịch trình (trên hình)

Lịch m ng biên Edge Dislocations

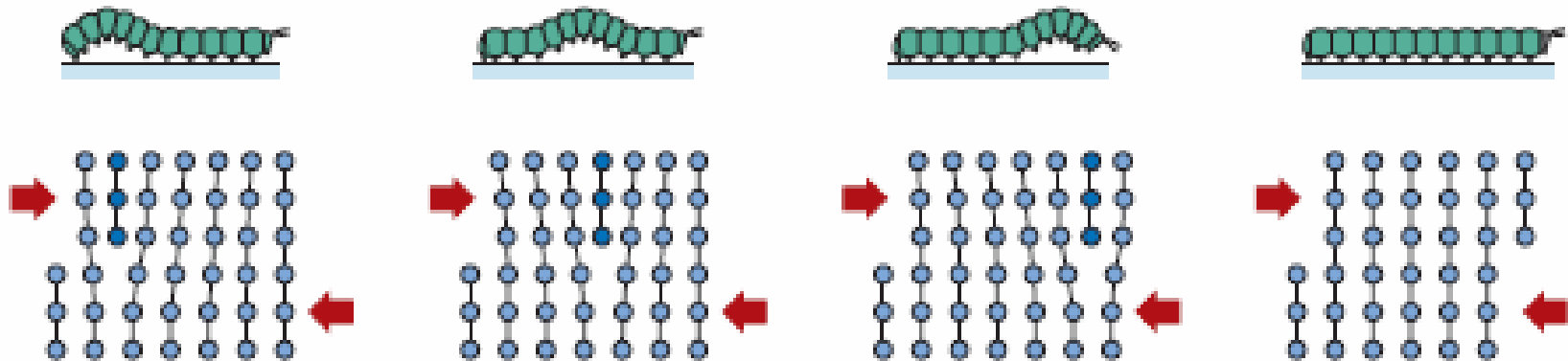


- Lịch m ng biên – xu t hi n s không liên t c c a các m t trong tinh th gi i h n b i ng Lịch m ng
- Trong th c t Lịch m ng biên c ng có c u trúc ph c t p

Lịch sử ứng biến Edge Dislocations



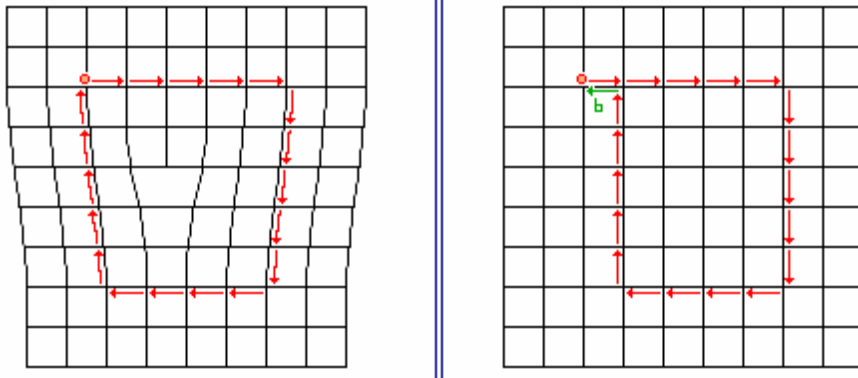
- Sự chuyển biến của lịch sử ứng biến khi chuyển từ ứng biến đơn trục sang đa trục
- Sự tái phân bố ứng biến và lịch sử



Lịch trình biên Véc-tơ Burgers

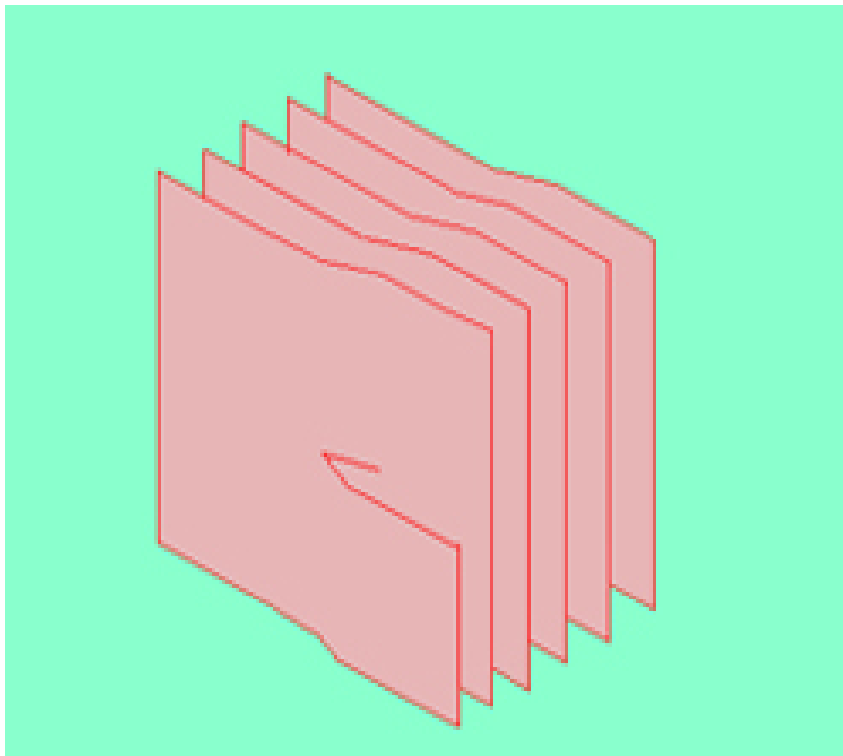


- Một kích thước và chiều của các biên mạng tinh thể do lịch trình \rightarrow nên ít ta dùng véc-tơ Burgers



- Xác định véc-tơ Burgers bằng cách vẽ một vòng nguyên tử này n nguyên tử khác với cùng một số khoảng cách nguyên tử nh nhau theo các chiều. Nếu tinh thể ch a lịch trình thì nguyên tử không kín. Véc-tơ làm kín mạch là véc-tơ Burgers \vec{b}
- Véc-tơ Burgers vuông góc với lịch trình

Lịch trình xoắn Screw Dislocations

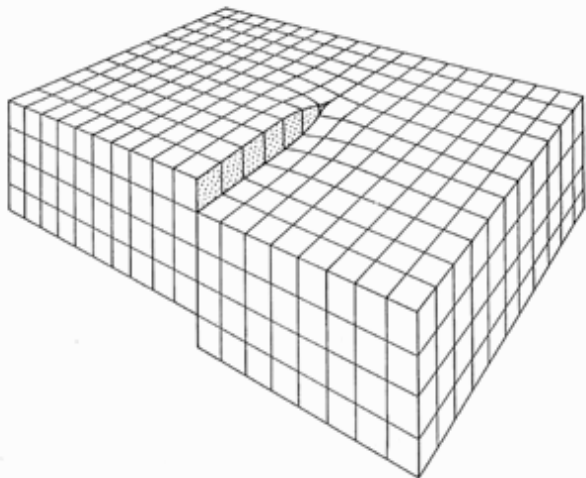


- Lịch trình xoắn: Sự xoay của hai phần lân cận trong tinh thể theo hướng lịch trình
- Xuất hiện ứng suất trên hướng lịch trình
- Khi các cung cấp thời gian và nhiệt độ có sự tái sắp xếp và hình thành lịch trình

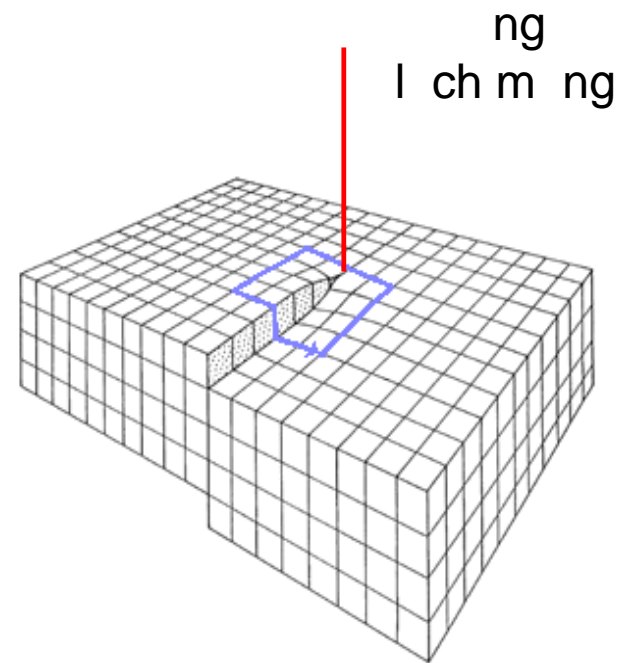
Lịch sử hình thành Vectơ Burgers



- Vectơ Burgers mô tả hình thức lịch sử
- Lịch sử hình thành là sự xoay hai phần lân cận của tinh thể song song với chiều tinh thể để dịch chuyển

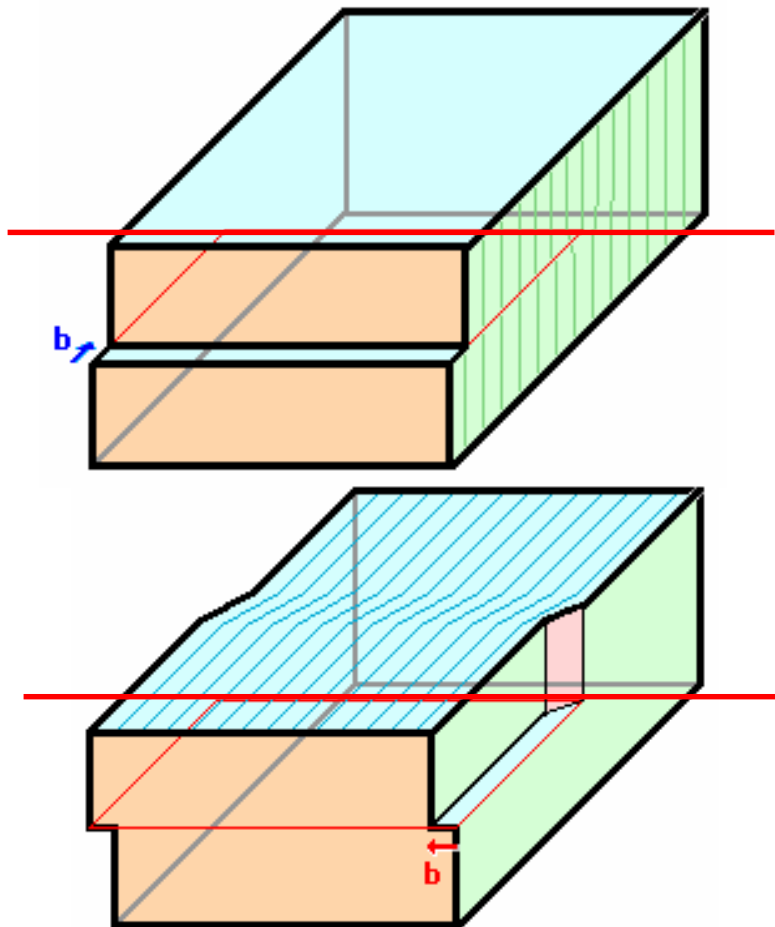


- Vectơ Burgers \vec{b} song song với hình thức lịch sử



Lịch sử ngành biên

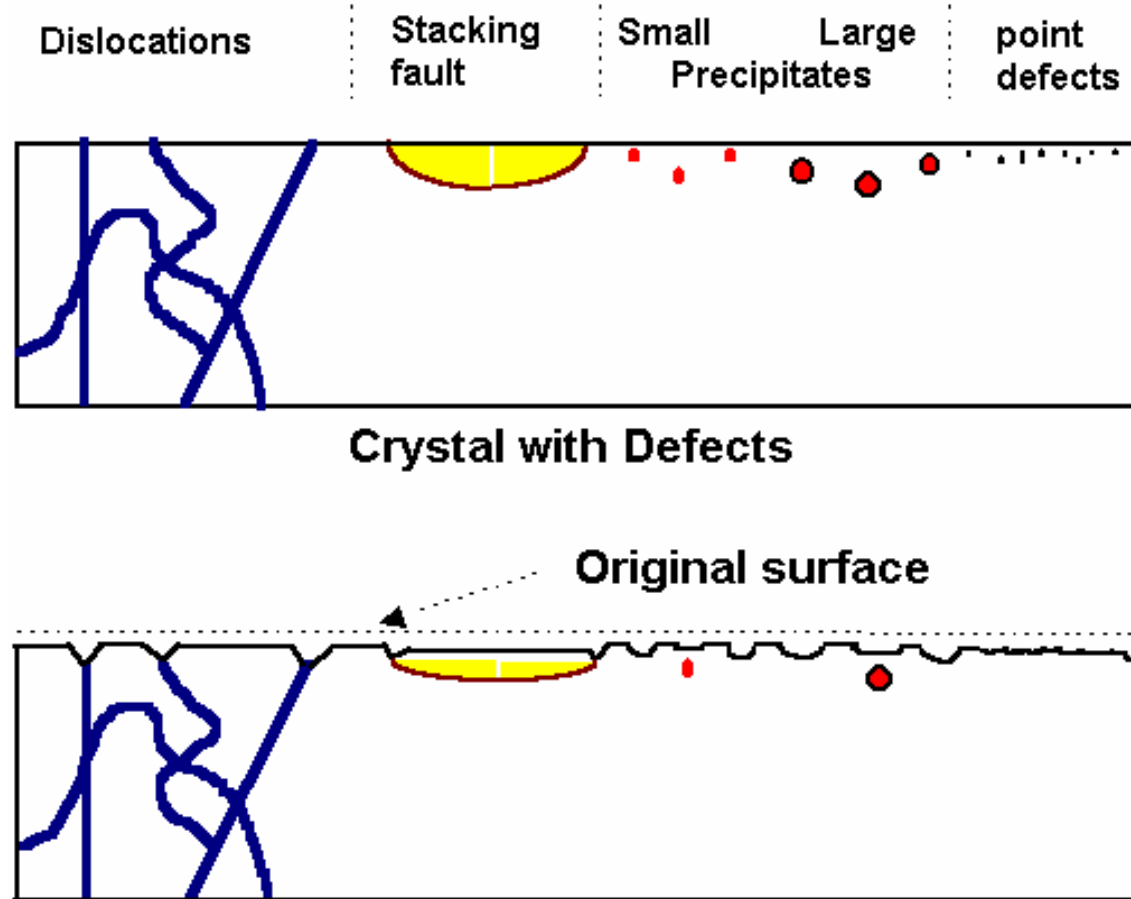
Lịch sử ngành xoăn



- Lịch sử ngành biên: Vectơ Burgers vuông góc với mặt trượt
- Lịch sử ngành xoăn: Vectơ Burgers song song với mặt trượt



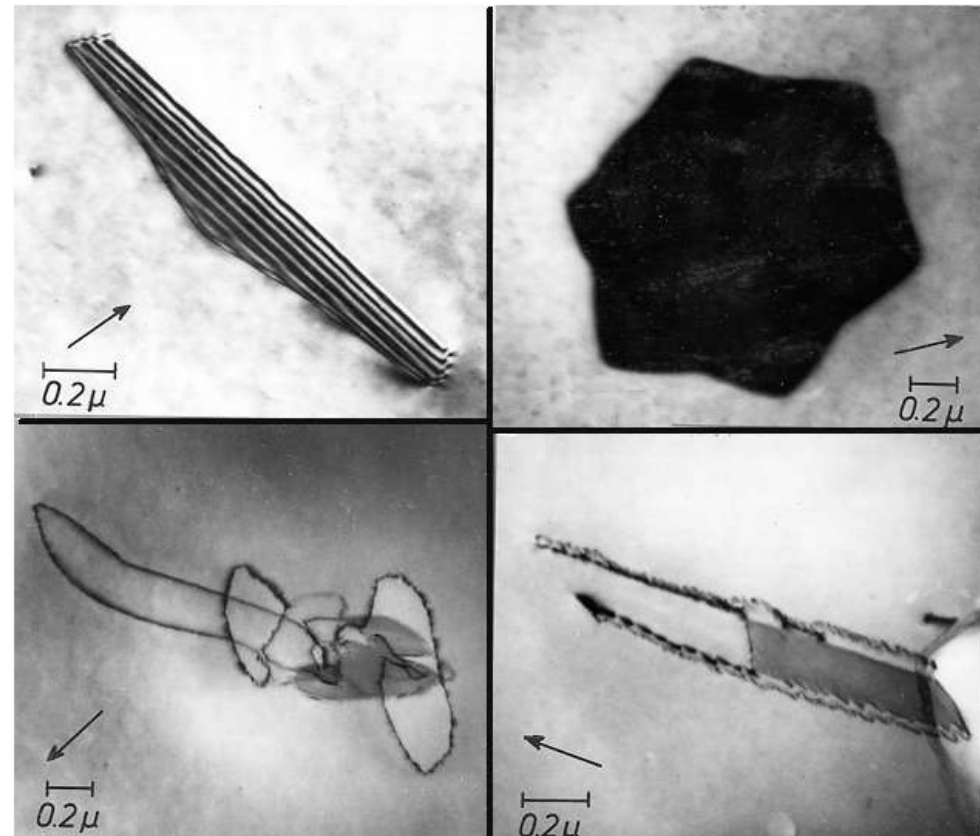
Quan sát các l ch m ng





Quan sát các I ch m ng

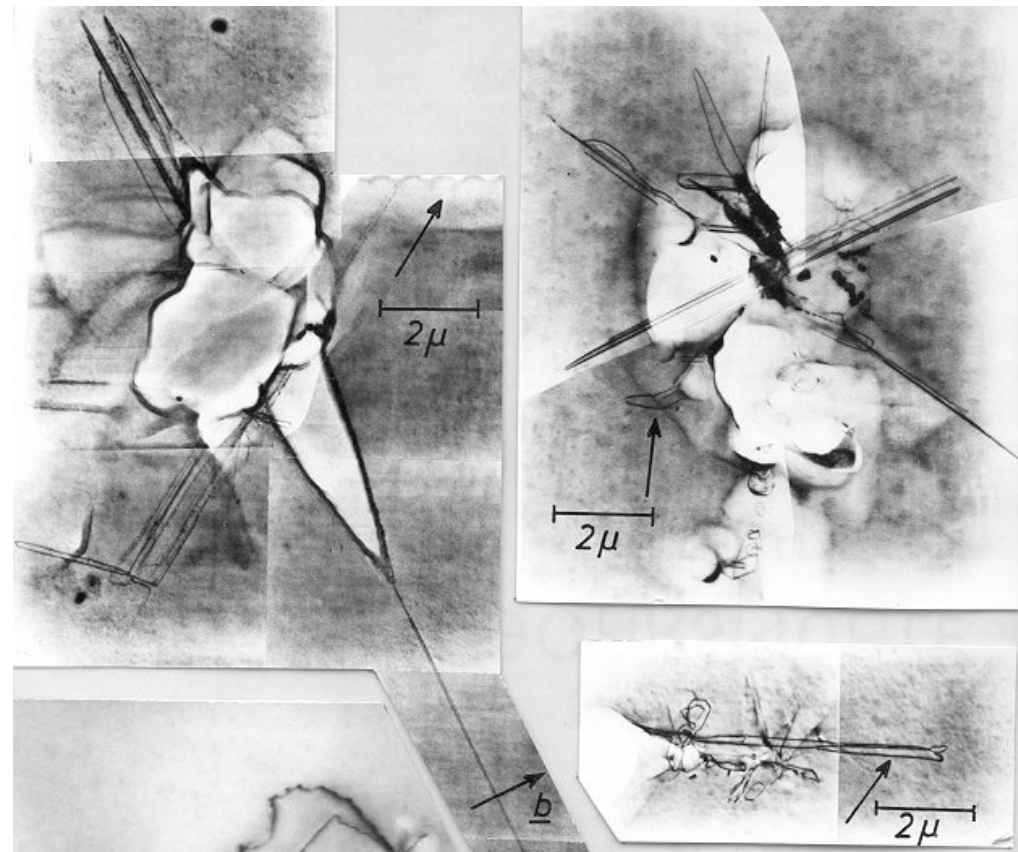
- Các c u trúc I ch m ng quan sát c trên tinh th Silic b ng kính hi n vi i n t truy n qua (TEM)
- Các I ch m ng trên th c t có hình d ng ph c t p





Quan sát các I ch m ng

- Các c u trúc I ch m ng quan sát c trên tinh th Silic b ng kính hi n vi i n t truy n qua (TEM)
- Các I ch m ng trên th c t có hình d ng ph c t p





Sai hỏng m t

- **M t ngoài**

- Các nguyên t m t ngoài không có liên k t y và có n ng l ng cao h n các nguyên t bên trong th tích \rightarrow xu t hi n n ng l ng m t ngoài, γ (J/m²)
- Các m t ngoài do s c c ng m t ngoài có xu h ng thu nh l i
- Các m t ngoài ch t r n có th “tái t o” th a m n các liên k t gi a các nguyên t b m t

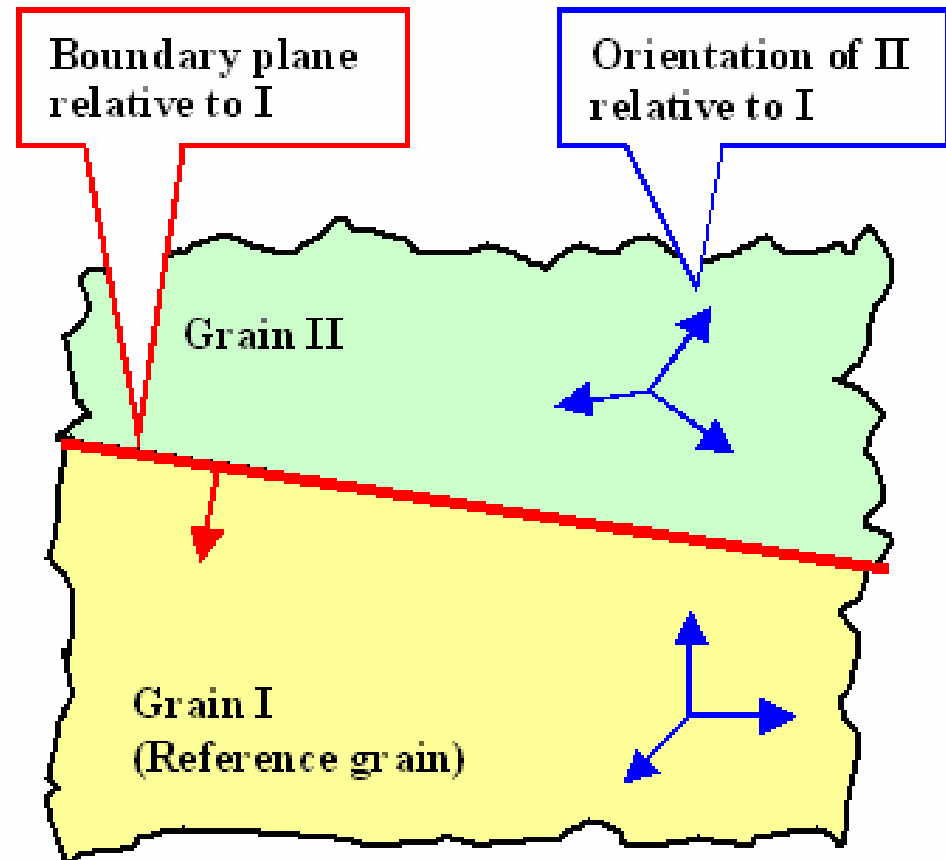
- **Biên h t**

- V t li u a tinh th g m nhi u h t tinh th nh v i nh h ng tinh th khác nhau \rightarrow xu t hi n các biên h t – là các m i n có s x p x p l ch nhau v tinh th
- Các m t ngoài và biên h t có ho t tính m nh \rightarrow các t p ch t có xu h ng t p trung các biên h t. N ng l ng b m t các h t có xu h ng gi m v i các h t nh

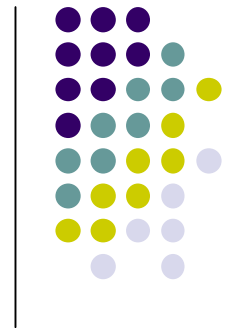


Sai lệch góc

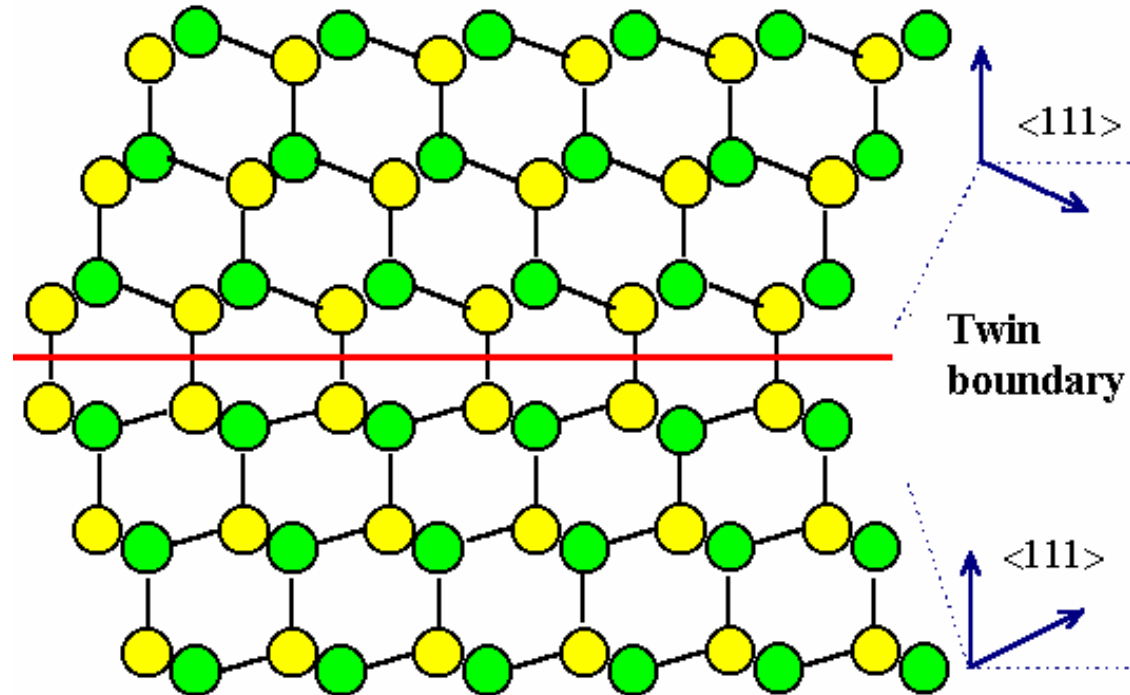
- Hình ảnh của hai hạt I và II trong mặt quan sát như hình tinh thể trong mặt cắt khi coi hạt I làm chuẩn



Sai hỏng mạng



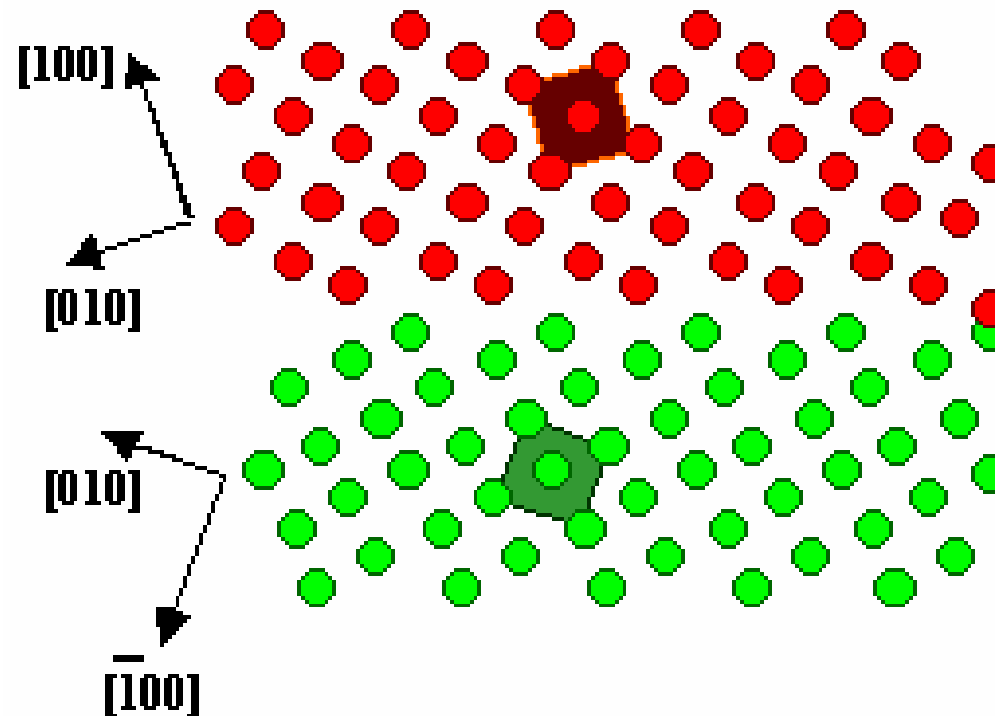
- Biên hạt song tinh





Sai hỏng mạng

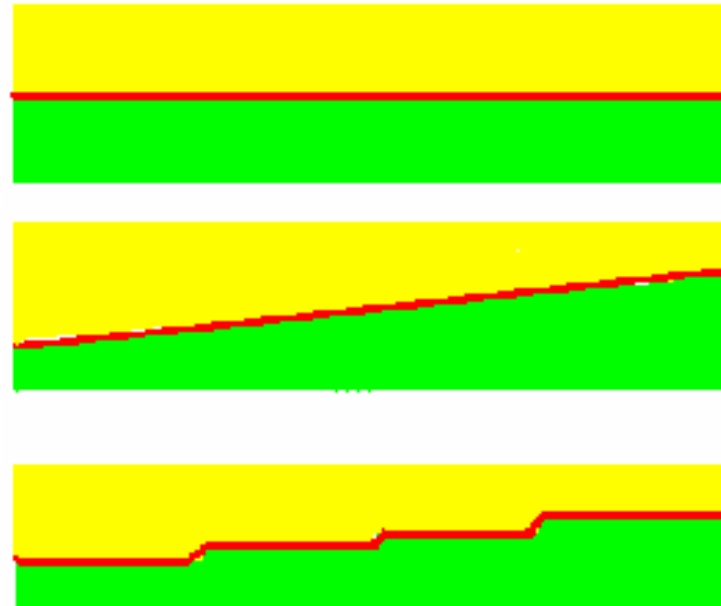
- Nguyên nhân biên hạt phụ thuộc mức năng lượng quan hệ giữa 2 mạng
- Nguyên nhân biên hạt phụ thuộc mức năng lượng ch số Miller biên hạt tiếp xúc





Sai hỏng m t

- Biên h t khi có m t n ng l ng th p (ví d m t (111) biên h t song tinh)
- Biên h t khi có m t n ng l ng cao
- S t i u hóa v n ng l ng b i facetting (t o m t) m t (111), di n tích tuy t ng nh ng n ng l ng gi m



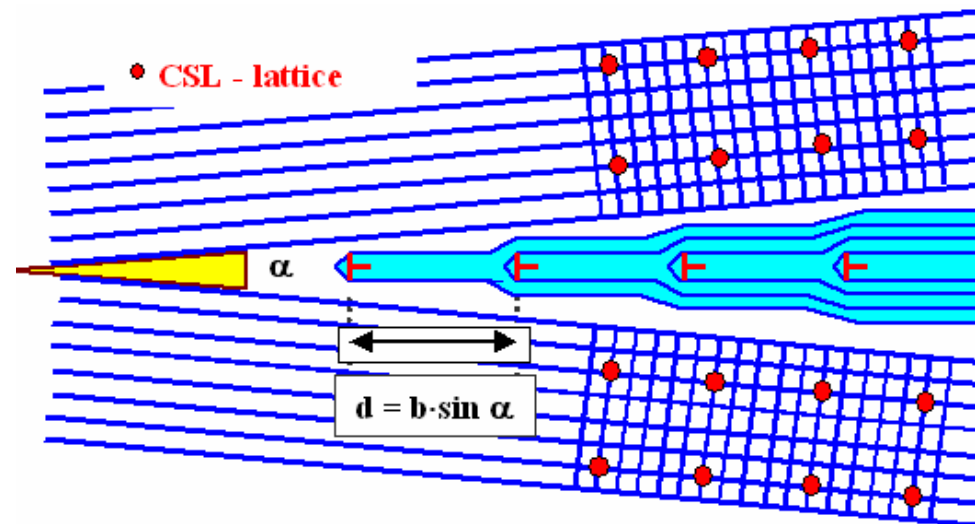
{111}





Sai lệch mạng tinh thể

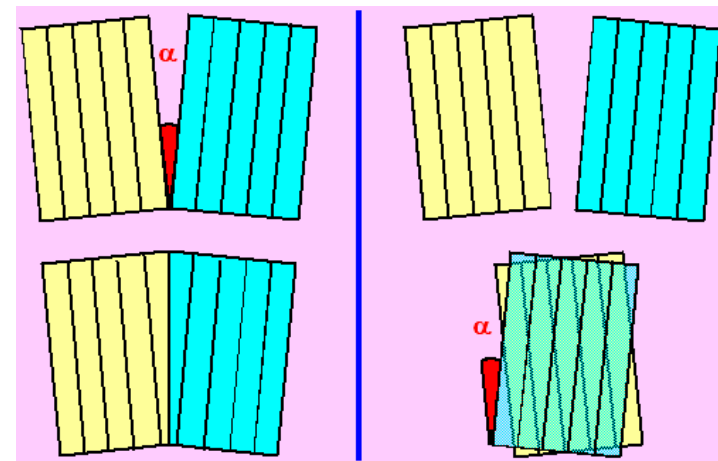
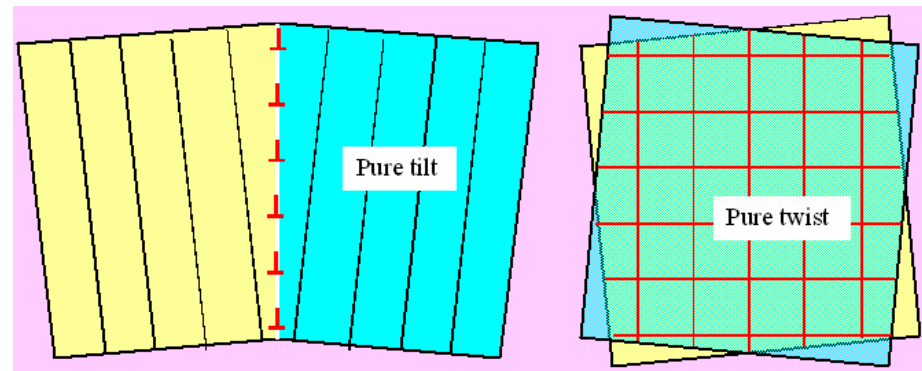
- Biên hạt trong các chất rắn đa tinh thể
- Biên hạt có thể coi là một dãy các lệch mạng
- α là góc sai lệch mạng giữa hai hạt tinh thể liên kết





Sai hình mặt

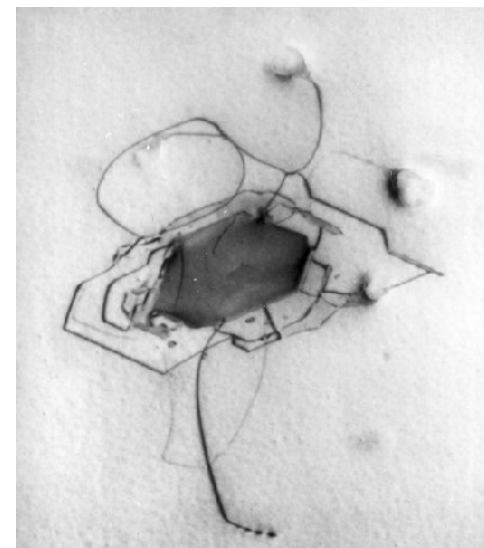
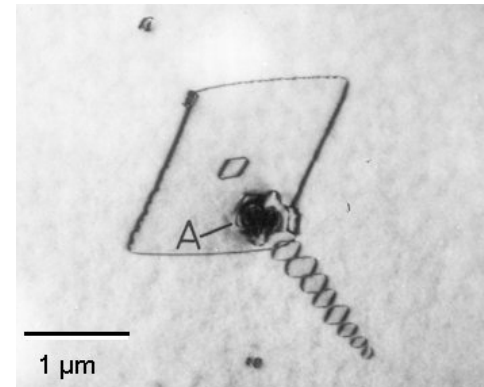
- Tùy theo góc lệch trong sự xếp các mặt tinh thể bên mà phân biệt
- Biên hình góc nhọn khi góc α lệch gần 2 hình thì là hình - c mặt và
- Biên hình góc lớn



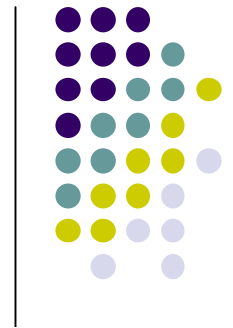


Sai hình thái tích

- Các hình thái - nh
hình thái như n các
tính chất nhiệt và c
- Các vật thể - nh
hình thái như n các
tính chất c
- Các thể ngoại hình p –
làm thay đổi nhiệt tính
chất i n, c , quang
c a vật li u



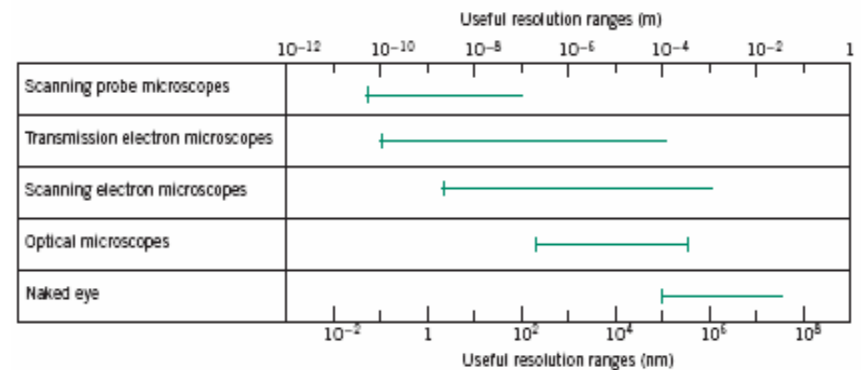
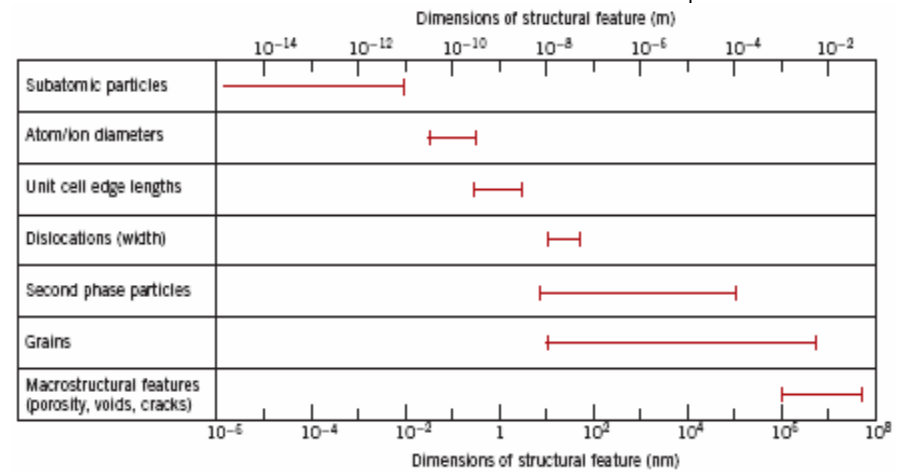
Kích thước hạt



- Kích thước hạt (grain size) là thông số quan trọng của vật liệu tinh thể
- Xác định kích thước hạt bằng phương pháp biểu diễn
- Phương pháp thống kê hay dùng (American Society for Testing and Materials (ASTM)) so sánh với các biểu thức kích thước hạt xác định thang bậc 1 đến 10.

$$N = 2^{n-1}$$

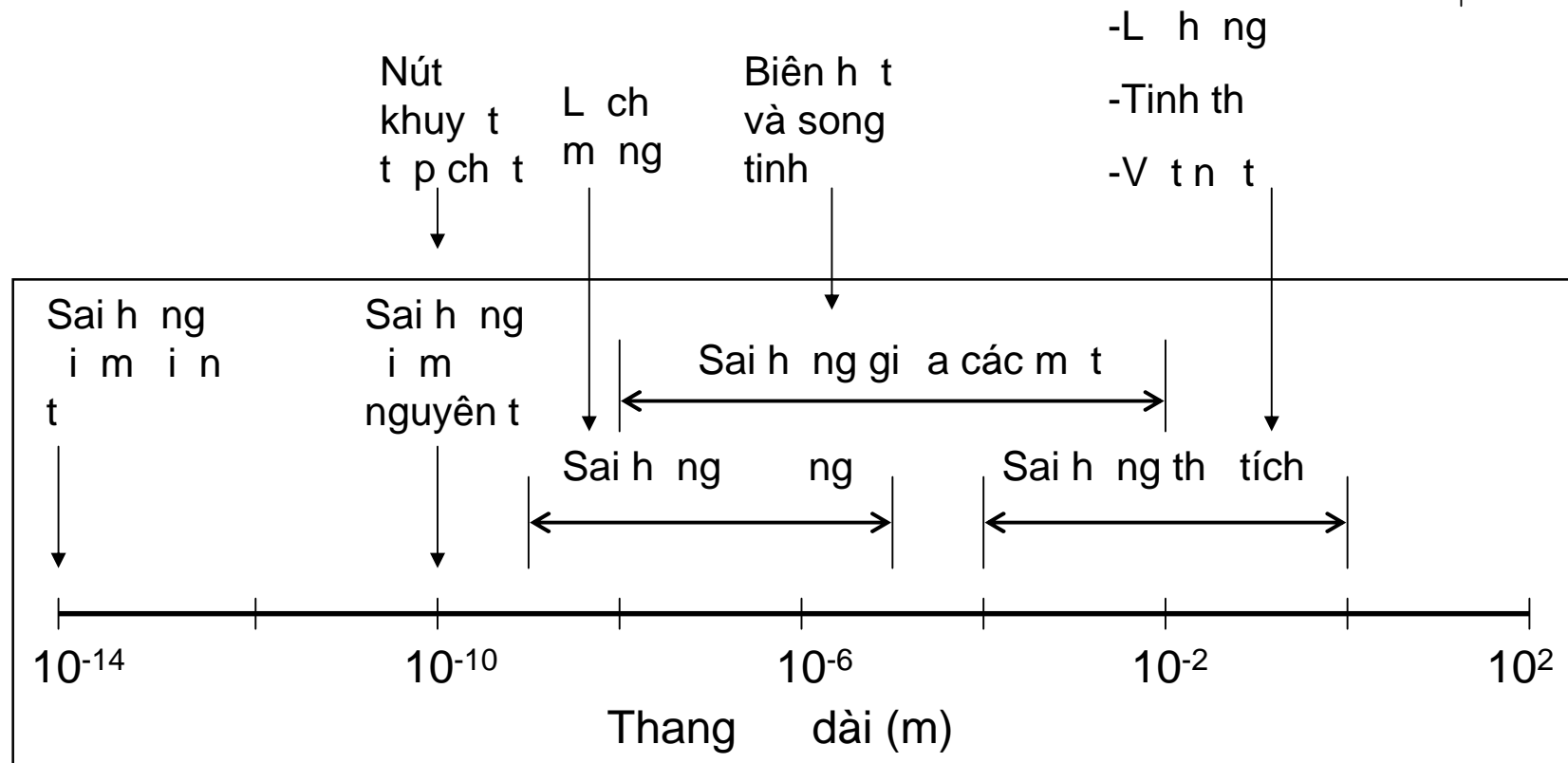
trong đó n là số kích thước hạt, N là kích thước hạt trung bình n và là inch vuông nhân với hệ số 100



Biểu đồ thang đo nghiên cứu trong vật liệu



Kích thước các sai hỏng



Kích thước các loại sai hỏng

Tóm l i



- **Ch tr ng và xen k**

- Các v t li u đ ngr n u ch a s l ngl n các b t hoàn h o ho c các l ch kh i hoàn h o c a tinh th . Sai h ng i m liên quan n các v trí ch a 1 ho c 2 nguyên t bao g m các ch tr ng (hay v trí còn tr ng trong m ng), các v trí t xen k (các nguyên t ch t ch chi m v trí xen k) và các nguyên t t p ch t

- **T p ch t trong ch t r n**

- Có th t o dung đ ch r n khi thêm các nguyên t t p ch t vào ch t r n. Khi ó c u trúc tinh th ban u v n c duy trì, không t o ra pha m i. V i dung đ ch r n thay th , nguyên t t p thay th các nguyên t ch t ch và c coi là hòa tan khi ng kính nguyên t và âm i n c a c hai lo i nguyên t là t ng ng, có cùng c u trúc tinh th và khi các nguyên t t p ch t có hóa tr b ng ho c nh h n c a ch t ch . Dung đ ch r n xen k có l ng nguyên t t p t ng i nh chi m gi v trí xen k gi a các nguyên t ch t ch

- **c tr ng thành ph n**

- Thành ph n c a h p kim có th c tr ng b ng thành ph n tr m v kh i l ng ho c nguyên t . C s c a cách tính ph n tr m kh i l ng c a thành ph n h p thành so v i kh i l ng t ng c ng c a h p kim. Ph n tr m nguyên t c tính là s mol c a m i thành ph n h p thành so v i s mol t ng c ng c a các nguyên t trong h p kim

- **L ch m ng - Sai h ng ng**

- L ch m ng là đ ng sai h ng tinh th m t chi u. Có hai lo i là *l ch m ng biên* và *l ch m ng xo n*. L ch m ng biên c xem là s sai l ch c u trúc m ng đ c theo biên c a n a m t đ c a nguyên t , còn l ch m ng xo n là nghiêng m t xo n c. V i l ch m ng h n h p có th th y các thành ph n c a c hai lo i. l n và h ng c a sai l ch m ng trong l ch m ng c tr ng b i véct Bergers. H ng t ng i c a véct Bergers và ng l ch m ng là (1) vuông góc khi l ch m ng biên, (2) song song khi l ch m ng xo n và (3) không vuông góc và c ng không song song khi l ch m ng h n h p



Tóm l i

- **Các sai h ng kh i m t phân cách ho c sai h ng th tích, s dao đ ng nguyên t**

- Nh ng b t hoàn h o khác bao g m các sai h ng m t phân cách (các m t ngoài, biên h t- c góc l n và góc nh , song tinh v.v.), các sai h ng th tích (v t n t, l h ng v.v..) và dao đ ng nguyên t . M i lo i b t hoàn h o u nh h ng t i tính ch t c a v t li u

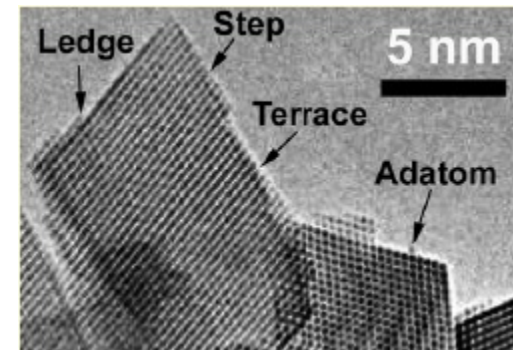
- **K thu t nghiên c u hi n vi**

- R t nhi u các thành ph n c u trúc và sai h ng quan tr ng c a v t li u là trong ph m vi nghiên c u c a k thu t hi n vi và ng i ta có th quan sát c b ng kính hi n vi. C hai lo i hi n vi quang h c và hi n vi i n t u c s d ng và th ng k th p v i các thi t b ch p nh. Các ch truy n qua và ph n x u c s d ng v i c hai lo i hi n vi. B n ch t c a m u, c u trúc nguyên t và các sai h ng là c u tiên quan tâm.

- K thu t hi n vi u dò quét (SPM) g n ây c phát tri n m nh nghiên c u các c tr ng b m t c a m u theo k thu t nghiên c u b m t đ ng b n (topographical maps). K thu t này c ng nghiên c u các c u trúc ph m vi nguyên t và phân t

- **Xác nh kích th c h t**

- Kích th c h t c a các v t li u a tinh th ng c xác nh b ng k thu t vi nh (photomicrographic techniques). Có hai ph ng pháp th ng dùng ph bi n là bi u chu n và bi u ch n





Bài tập chương IV

H T CH NG IV