

MÔ PHÒNG MÁY TÍNH VI CẤU TRÚC VÀ CƠ CHẾ KHUẾCH TÁN TRONG CÁC HỢP KIM VÔ ĐỊNH HÌNH (VDH): FE80B20, CO81.5B18.5 VÀ CO100-XPX

TỔNG QUAN

10.1. Ngoài nước (phân tích, đánh giá tình hình nghiên cứu thuộc lĩnh vực của đề tài trên thế giới, liệt kê danh mục các công trình nghiên cứu, tài liệu có liên quan đến đề tài được trích dẫn khi đánh giá tổng quan)

Mô phỏng vi cấu trúc, cấu trúc địa phương và các tính chất vật lý trên các vật liệu VDH đang là một trong những chủ đề được sự quan tâm nghiên cứu của các nhà khoa học vật liệu và ứng dụng [1-4]. Quá trình khuếch tán nguyên tử trong các hệ hợp kim VDH đang được nhiều nhà khoa học quan tâm nghiên cứu. Bởi vì, khuếch tán đóng một vai trò quan trọng trong nhiều quá trình vật lý xảy ra trong vật liệu. Tuy nhiên, cho đến nay, nhiều vấn đề về khuếch tán, đặc biệt là cơ chế khuếch tán trong vật liệu VDH vẫn còn một số vấn đề chưa được khảo sát tường tận và là các vấn đề mở đòi hỏi các công trình nghiên cứu mới. Trong vật liệu VDH, do không tồn tại nút mạng nên các khái niệm như vacancy, khuyết tật điểm trở nên khó định nghĩa một cách tường minh. Thêm nữa, quá trình khuếch tán trong vật rắn diễn ra cực chậm và sự dịch chuyển của các nguyên tử trong môi trường VDH xuất hiện nhiều hiệu ứng đặc biệt như: hiệu ứng tương quan năng lượng, tương quan hình học [5-8]. Do đó, mục đích của đề tài này là xây dựng mô hình khuếch tán bằng phương pháp mô phỏng thống kê hồi phục (TKHP) trong hợp kim VDH, nhằm giải thích thỏa đáng các quan sát thực nghiệm [6-8].

10.2. Trong nước (phân tích, đánh giá tình hình nghiên cứu thuộc lĩnh vực của đề tài ở Việt Nam, liệt kê danh mục các công trình nghiên cứu, tài liệu có liên quan đến đề tài được trích dẫn khi đánh giá tổng quan)

Hiện nay, mô phỏng máy tính về cấu trúc và các tính chất vật lý của các vật liệu VDH đang là một trong những đề tài mang tính thời sự, và đã thu hút được sự quan tâm của nhiều trung tâm nghiên cứu khoa học và công nghệ ứng dụng trong nước [9-12]. Một số lượng lớn công trình đã được công bố trên các tạp chí trong và ngoài nước có chất lượng cao, đã mang lại những kết quả đáng kể, cung cấp các số liệu cũng như cơ sở lý thuyết cho các ngành khoa học và công nghệ ứng dụng mà các phương pháp nghiên cứu khác khó hoặc không thể cung cấp được [9-15].

TÀI LIỆU THAM KHẢO

- [1] J. Chen Li and N. Cowlam (1990), "Structure and interatomic pair potentials for Fe80B20 metallic glass", *Journal of Non-Crystalline Solids* 117/118, 148-151.
- [2] Akihiko Hirata et al. (2006), "Compositional dependence of local atomic structures in amorphous Fe_{100-x}B_x (x = 14, 17, 20) alloys studied by electron diffraction and high-resolution electron microscopy", *Physical review B* 74, 214206.
- [3] D. K. Belashchenko, M. I. Mendeleev (1994), "Computer simulation of Ni₆₅B₃₅ amorphous alloy using diffraction data", *Sixth international conference on the structure of Non-Crystalline Materials, Praha, Aug.*
- [4] J. M. Delaye and Y. Limoge (1993), "Simulation of vacancies in a Lennard-Jones glass", *Journal of Non-Crystalline Solids* 156-158, 982-985.
- [5] J. M. Dubois, P. Chieux, G. Le Caer, J. Schweitzer and J. Bletry (1982), "Determination by polarized neutron diffraction of the three partial structure factors of a Co_{81.5}B_{18.5} glass", *Journal de physique*, 9-23.
- [6] J. W. van de Leur, A. Y. Orlov (2009), "Random turn walk on a half line with creation of

particles at the origin", *Physics Letters A* 88, 333-341.

[7] G. S. Ghadra, M. Sakata, N. Cowlam, H. A. Davies (1981), "A diffraction study of Co_{81.5}B_{18.5} binary metallic glass", *Phys. Stat. Sol. A* 62, 625.

[8] A. Zhu, G. J. Shiflet, S. J. Poon (2008), "Diffusion in metallic glasses: Analysis from the atomic bond defect perspective", *Acta Materialia* 56, 3550-3557.

[9] P. K. Hung, H. V. Hue, L. T. Vinh (2006), "Simulation study of pores and pore cluster in amorphous alloys Co_{100-x}B_x and Fe_{100-y}Py", *J. Non-Cryst. Sol.* 352, 3332-3338.

[10] P. K. Hung, D. K. Belashchenko, V. M. Chieu, N. T. Duong, V. V. Hoang and T. B. Van (1999), "Local structure of amorphous canonical systems", *Journal of metastable and nanocrystalline materials* 2-6, 393.

[11] Vo Van Hoang, Nguyen Hung Cuong (2009), "Local icosahedral order and thermodynamics of simulated amorphous Fe", *Physica B* 404, 340-346.

[12] Vo Van Hoang (2004), "Computer simulation of the effects of B and P concentrations on microstructure in amorphous Fe-B and Fe-P alloys", *Physica B* 348, 347-352.

[13] Vo Van Hoang (2010), "Glass of monatomic Lennard-Jones system at nanoscale", *Physica B: Condensed Matter* 405, 1908-1914.

[14] Vo Van Hoang, Suik Kun Oh (2005), "Annealing effects on structure in amorphous Al₂O₃ models", *Physica B* 364, 225-232.

10.3. Danh mục các công trình đã công bố thuộc lĩnh vực của đề tài của chủ nhiệm và những thành viên tham gia nghiên cứu (họ và tên tác giả; bài báo; ấn phẩm; các yếu tố về xuất bản)

1) P.K. Hung, L.T. Vinh, P.H. Kien (2010), "About the diffusion mechanism in amorphous alloys", *Journal of Non-Crystalline Solids* 356, 1213-1216.

2) Pham Huu Kien, Vu Van Hung and Pham Khac Hung (2010), "Simulating the role of microscopic bubbles in amorphous alloy Co_{81.5}P_{18.5}", *Journal of science & technology Technical Universities* 78A, 75-79.

3) P.H. Kien, P.K. Hung and V.V. Hung (2010), "The boron atom concentration dependence of the microscopic bubbles for amorphous alloy Fe_xB_{100-x}: Computer simulation", *Journal of science and technology of TNU* 68(6), 50-55.

MỤC TIÊU

- Mô phỏng vi cấu trúc hợp kim Fe₈₀B₂₀, Co_{81.5}B_{18.5}, Co_xP_{100-x} VĐH, thông qua việc phân tích hàm phân bố xuyên tâm, phân bố số phối trí và phân bố số bong bóng vi mô (microscopic bubbles).

- Mô phỏng cơ chế khuếch tán trên quan điểm hình học và quan điểm năng lượng thông qua bong bóng vi mô (vacancy tự nhiên) trong hợp kim VĐH.

NỘI DUNG

15.1. Nội dung nghiên cứu (trình bày dưới dạng đề cương nghiên cứu chi tiết)

- Phương pháp mô phỏng thống kê hồi phục và động lực học phân tử sẽ được sử dụng trong đề tài này để xây dựng các mô hình vật liệu VĐH và phân tích các đặc trưng vi cấu trúc của các hợp kim VĐH: Fe₈₀B₂₀, Co_{81.5}B_{18.5} và Co_{100-x}P_x.

- Mức độ tin cậy của các mô hình xây dựng sẽ được kiểm tra bằng cách so sánh HPBXT với các số liệu thực nghiệm và kết quả mô phỏng của các tác giả khác.

- Từ những phát hiện lần đầu tiên về sự tồn tại các bong bóng vi mô trong hợp kim VĐH, nhóm nghiên cứu chúng tôi (tại Viện Vật lý Kỹ thuật trường Đại học Bách khoa Hà Nội), đề xuất cơ chế khuếch tán thông qua vacancy bong bóng vi mô trong các vật liệu này theo quan điểm hình học và

quan điểm năng lượng.

- Hệ số khuếch tán tính toán từ mô phỏng được kiểm tra bằng cách so sánh với các số liệu thực nghiệm và kết quả mô phỏng của các tác giả khác.
- Bố cục nội dung của đề tài dự kiến 3 chương: Chương một, trình bày tổng quan về các hợp kim VĐH cũng như các kết quả nghiên cứu (thực nghiệm và mô phỏng) gần đây nhất về vi cấu trúc và các tính chất vật lý của chúng. Đặc biệt, những nghiên cứu về cơ chế khuếch tán nguyên tử trong các vật liệu VĐH. Kỹ thuật mô phỏng TKHP và các phương pháp phân tích vi cấu trúc sử dụng để xác định thông số vật lý của mô hình vật liệu được trình bày chi tiết trong chương hai. Vi cấu trúc mô hình vật liệu, số lượng bong bóng, vacancy bong bóng và quan điểm khuếch tán nguyên tử thông qua bong bóng vacancy cũng như ảnh hưởng của mức độ hồi phục, nồng độ, kích thước á kim trong các hệ hợp kim VĐH Fe-B, Co-B và Co-P là nội dung của chương ba.

PHƯƠNG PHÁP NGHIÊN CỨU

Phương pháp mô phỏng thống kê hồi phục (TKHP) và phương pháp phân tích cấu trúc vi mô đã được sử dụng để xây dựng, phân tích và tính toán các đặc trưng về vi cấu trúc, tính chất của các mô hình vật liệu.

HIỆU QUẢ KTXH

- Lần đầu tiên cung cấp một bức tranh đầy đủ về các lỗ hổng cấu trúc (bong bóng) trong hợp kim VĐH ở các trạng thái có mức độ hồi phục, nồng độ, kích thước á kim khác nhau như: phân bố số lượng, phân bố bán kính, phân bố năng lượng chuyển tiếp và độ cao rào thế, cho phép giải thích tính chất mất trật tự trong các vật liệu kim loại và hệ hợp kim VĐH.
- Quan điểm mới về quá trình khuếch tán thông qua vacancy bong bóng được trình bày chi tiết. Kết quả này, góp phần làm sáng tỏ quá trình khuếch tán trong kim loại và hệ hợp kim VĐH. Nghiên cứu đã cung cấp những số liệu tính toán về hệ số khuếch tán trong vật liệu VĐH ở các trạng thái có mức độ hồi phục, nồng độ và kích thước á kim khác nhau.
- Cùng hướng nghiên cứu này còn có nhiều nhóm nghiên cứu khác được thực hiện. Công trình này đã cung cấp nhiều số liệu từ các công trình thực nghiệm và mô phỏng về vi cấu trúc như hàm phân bố xuyên tâm, phân bố số phối trí, các thông số vi cấu trúc và số liệu về hệ số khuếch tán của các nguyên tử trong các kim loại và hệ hợp kim VĐH.

ĐƠN VỊ SỬ DỤNG

- Đại học Sư phạm Thái Nguyên
- Các Trung tâm Nghiên cứu mô phỏng