

NGHIÊN CỨU CẤU TRÚC VÀ CƠ CHẾ KHUẾCH TÁN TRONG VẬT LIỆU KIM LOẠI VÔ ĐỊNH HÌNH

TỔNG QUAN

Nghiên cứu vi cấu trúc, sự chuyển pha cấu trúc và các cơ chế vật lý trên những vật liệu kim loại là một trong những chủ đề thu hút được sự quan tâm nghiên cứu của nhiều nhà khoa học trên thế giới. Các vật liệu kim loại như sắt, ni ken và cô ban là các vật liệu có nhiều ứng dụng quan trọng trong lĩnh vực khoa học ứng dụng và khoa học công nghệ [1-5]. Nhiều nghiên cứu về vi cấu trúc và sự biến đổi cấu trúc trong các vật liệu này đã và đang được thực hiện bằng cả thực nghiệm, lý thuyết lẫn mô phỏng máy tính [6-11]. Sử dụng các phương pháp như: tán xạ tia-X, nhiễu xạ neutron, vi điện tử truyền qua..., các nghiên cứu thực nghiệm đã cung cấp nhiều dữ liệu quan trọng về vi cấu trúc của các vật liệu kim loại thông qua việc phân tích hàm phân bố xuyên tâm hoặc thừa số cấu trúc [3, 5-8]. Các kết quả nghiên cứu thực nghiệm này đã chỉ ra rằng, ở trạng thái vô định hình (VDH), hàm phân bố xuyên tâm và thừa số cấu trúc có sự tách thành hai đỉnh nhỏ ở cực đại thứ hai. Sự tách đỉnh ở cực đại thứ hai trong hàm phân bố xuyên tâm thường được cho là liên quan đến sự tồn tại của các khối đa diện 20 mặt (icosahedral) trong các vật liệu VDH [9-11]. Bằng phương pháp mô phỏng động lực học phân tử (ĐLHPT), R. S. Liu và cộng sự cho thấy, khi giảm nhiệt độ từ nhiệt độ nóng chảy 943 xuống tới 200 K thì trên hàm phân bố xuyên tâm của kim loại nhôm bắt đầu có tách đỉnh ở cực đại thứ hai ở dưới nhiệt độ 500 K [6]. S. Ozgen và E. Duruk cho thấy trong quá trình làm lạnh từ từ (quá trình ủ nhiệt chậm) trên kim loại nhôm từ nhiệt độ 700 xuống 300 K thì xuất hiện ba trạng thái lỏng, tinh thể yếu (weak-crystal) và trạng thái VDH [7]. Tuy nhiên những nghiên cứu này vẫn chưa giải thích thỏa đáng cơ chế chuyển pha lỏng-tinh thể, chuyển pha lỏng-VDH...

Như chúng ta đã biết, trong vật liệu VDH không tồn tại nút mạng nên các khái niệm như nút khuyết (vacancy), khuyết tật điểm trở nên khó định nghĩa một cách tường minh. Hơn nữa, quá trình khuếch tán trong vật liệu VDH diễn ra rất chậm (Hệ số khuếch tán cỡ 10-22 cm²/s), sự dịch chuyển của các nguyên tử trong môi trường VDH lại xuất hiện nhiều hiệu ứng đặc biệt như: hiệu ứng tương quan năng lượng, hiệu ứng tương quan hình học [1, 3, 4, 7, 9]... Những nghiên cứu về cơ chế khuếch tán trong các vật liệu VDH thường được giải thích thông qua các mô hình như: mô hình thể tích tự do, mô hình lý thuyết trạng thái hai mức, mô hình mô phỏng các quả cầu lỗ trống... Nhìn chung các kết quả nhận được đã giải thích được phần nào các hiện tượng khuếch tán trong các vật liệu kim loại VDH [4, 9, 11]. Một trong các mô hình giải thích rất hiệu quả và phù hợp hơn cả về cơ chế khuếch tán trong vật liệu VDH là cơ chế khuếch tán tập thể của một nhóm nguyên tử lân cận gần nhau [9, 12]. Chẳng hạn, Sietsma và cộng sự đã nghiên cứu các loại lỗ hổng trong các mẫu hợp kim VDH bằng phương pháp mô phỏng, họ đã phát hiện một số lỗ hổng được bao quanh bởi 10 hoặc hơn 10 nguyên tử trong các mẫu được ủ nhiệt tốt. Họ cũng đã cho thấy vai trò quan trọng của các lỗ hổng kích thước lớn đối với quá trình khuếch tán trong các mẫu vật liệu VDH [12].

10.2. Trong nước

Ở Việt nam, theo hiểu biết của chúng tôi, việc nghiên cứu về vi cấu trúc, các tính chất cơ học và quá trình khuếch tán trong các vật liệu kim loại và hợp kim của chúng theo nhiệt độ, áp suất và mức độ hồi phục đang được thực hiện bởi nhóm nghiên cứu của trường Đại học Khoa học Tự nhiên Tp. Hồ Chí Minh và nhóm nghiên cứu của chúng tôi tại trường Đại học Bách khoa Hà Nội [13-20].

Dựa trên mô hình thống kê hồi phục, chúng tôi đã nghiên cứu vi cấu trúc, cơ chế khuếch tán trong các vật liệu hợp kim cơ sở Fe, Co VĐH theo mức độ hồi phục, nồng độ á kim và kích thước của các á kim. Kết quả chỉ ra rằng cấu trúc của các hợp kim VĐH phụ thuộc mạnh vào mức độ hồi phục, nồng độ á kim và kích thước của các á kim. Chúng tôi đã đề xuất một cơ chế khuếch tán mới thông qua các bong bóng vi mô (vacancy tự nhiên) và giải thích được sự phụ thuộc của hệ số khuếch tán theo mức độ hồi phục và nồng độ á kim. Những kết quả nhận được đã được công bố trên các tạp chí chuyên ngành có uy tín và chất lượng ở trong và ngoài nước [13-16]. Tuy nhiên, chúng tôi chưa thực hiện các phân tích về vi cấu trúc, tính chất cơ học và quá trình khuếch tán bằng cách dựa trên mô hình ĐLHPT. Chúng tôi cũng chưa thực hiện mô phỏng ảnh hưởng của áp suất và nhiệt độ lên cấu trúc, tính chất nhiệt động lực học và quá trình khuếch tán trong các vật kim loại VĐH, lỏng và tinh thể. Ngoài ra, các cơ chế về sự chuyển pha cấu trúc như: sự chuyển pha lỏng-VĐH, chuyển pha lỏng-tinh thể hiện nay đang được chúng tôi quan tâm nghiên cứu.

Các công trình nghiên cứu có liên quan đến đề tài

- [1] A. Sarkar, P. Barat and P. Mukherjee (2008), "Molecular dynamics simulation of rapid solidification of Aluminum under pressure", *International Journal of Modern Physics B*, 22, 2781-2785.
- [2] Cherne FJ, Deymier PA (2001), "Calculation of the transport properties of liquid aluminum with equilibrium and non-equilibrium molecular dynamics", *Scripta materialia*, 45, 985-991.
- [3] Lopez JM and Silbert M (1989), "Structural diffusion model calculations of the pair distribution function of aluminum: From the liquid to the amorphous phase", *Solid State Communications*, 69, 585-587.
- [4] Nayak SK, Khanna SN, Rao BK and Jena P (1998), "Thermodynamics of small nickel clusters", *Journal of Physics Condensed Matter*, 10, 10853-10862.
- [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] R. S. Liu, D. W. Qi and S. Wang (1991), "Subpeaks of structure factors for rapidly quenched metals", *Physical Review B*, 45, 451-456.
- [7] Ozgen S, Duruk E (2004), "Molecular dynamics simulation of solidification kinetics of aluminum using Sutton-Chen version of EAM", *Mater. Lett.*, 58, 1071-1075.
- [8] 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.*
- [9] J. M. Delaye and Y. Limoge (1993), "Simulation of vacancies in a Lennard-Jones glass", *Journal of Non-Crystalline Solids* 156-158, 982-985.
- [10] 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.
- [11] 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.
- [12] J. Sietsma and B. J. Thijsse (1995), "Characterization of free volume in atomic models of metallic glasses", *Physical Review B* 52, 3248-3255.
- [13] Pham Huu Kien, Le Thi Huong Dung and Nguyen Van Dang, "Structural and Diffusion Coefficient Changes in Amorphous Co-P Alloy", *Journal of Materials Science and Engineering B* 2 (8) (2012) 482-486.

[14] P.H. Kien, H.V. Hue, and P.K. Hung, "Study of Tracer Diffusion Mechanism in Amorphous Metal", Hindawi Publishing Corporation, Journal of Metallurgy, Volume 2012, Article ID 517230, 6 pages.

[15] P. K. Hung, H. V. Hue, L. T. Vinh (2006), "Simulation study of pores and pore cluster in amorphous alloys $\text{Co}_{100-x}\text{B}_x$ and $\text{Fe}_{100-y}\text{P}_y$ ", J. Non-Cryst. Sol. 352, 3332-3338.

[16] 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.

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

[18] 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.

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

[20] Vo Van Hoang, Suik Kun Oh (2005), "Annealing effects on structure in amorphous Al_2O_3 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] Pham Huu Kien, "Local Structural and Tracer Diffusion Mechanism in Amorphous Fe-based Alloys", British Journal of Applied Science & Technology 3(4): 789-798, 2013.

[2] P.H. Kien and P.K. Hung, "THE STRUCTURAL AND DYNAMIC PROPERTIES OF COBALT METAL UNDER TEMPERATURE", Modern Physics Letters B 27(30): 1350223-10 pages, (2013).

[3] T V Mung, P H Kien, T V Ha and H V Hue, "The Structural and Thermodynamic Properties of Amorphous and Liquid Aluminum", International Journal of Engineering and Technology Research, Vol. 1, No. 10, November 2013, PP: 178 -185, ISSN: 2327-0349 (Online).

[4] Pham Huu Kien, Le Thi Huong Dung and Nguyen Van Dang, "Structural and Diffusion Coefficient Changes in Amorphous Co-P Alloy", Journal of Materials Science and Engineering B 2 (8) (2012) 482-486.

[6] 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.

[7] Pham Huu Kien, Vu Van Hung and Pham Khac Hung (2010), "Simulating the role of microscopic bubbles in amorphous alloy $\text{Co}_{81.5}\text{P}_{18.5}$ ", Journal of science & technology Technical Universities 78A, 75-79.

[8] P.H. Kien, P.K. Hung and V.V. Hung (2010), "The boron atom concentration dependence of the microscopic bubbles for amorphous alloy $\text{Fe}_x\text{B}_{100-x}$: Computer simulation", Journal of science and technology of TNU 68(6), 50-55.

MỤC TIÊU

- Mô phỏng được cấu trúc các vật liệu kim loại Fe, Co, Fe-B, Fe-P và Co-P có mật độ, mức độ hỗn hợp và nồng độ khác nhau thông qua việc phân tích hàm phân bố xuyên tâm, phân bố số phối trí và phân bố số lượng đơn vị cấu trúc (simplex).

- Xây dựng lý thuyết và mô phỏng cơ chế khuếch tán theo cả quan điểm hình học lẫn quan điểm năng lượng thông qua các bong bóng vi mô (microscopic-bubbles) trong vật liệu kim loại VĐH.

NỘI DUNG

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

- Nghiên cứu tổng quan cấu trúc và lý thuyết về các cơ chế khuếch tán trong vật liệu kim loại tinh thể, lỏng và VĐH.
- Xây dựng các phần mềm mô phỏng vật liệu trên ngôn ngữ lập trình C++ và chạy chương trình này trên hệ thống máy tính (30 máy PC) tại Bộ môn Vật lý tin học - Viện Vật lý, Trường Đại học Bách khoa Hà Nội.
- Dựng các mô hình vật liệu kim loại VĐH bằng phương pháp ĐLHPT với các thể tương tác khác nhau. Mức độ tin cậy của các mô hình xây dựng sẽ được kiểm tra bằng cách so sánh hàm phân bố xuyên tâm, thừa số cấu trúc với dữ liệu thực nghiệm và kết quả mô phỏng của một số tác giả khác.
- Nghiên cứu cấu trúc của vật liệu kim loại thông qua các mô hình xây dựng theo mức độ hồi phục, mật độ, kích thước.
- Xây dựng lý thuyết mô tả cơ chế khuếch tán và xác định hệ số khuếch tán trong các mô hình vật liệu.
- Bố cục nội dung của báo cáo tổng kết của đề tài dự kiến 3 chương: Chương một trình bày tổng quan lý thuyết liên quan đến đề tài. Kỹ thuật mô phỏng và các phương pháp phân tích vi cấu trúc được sử dụng để xác định thông số vật lý của mô hình vật liệu được trình bày chi tiết trong chương hai. Chương ba, chúng tôi phân tích và thảo luận về vi cấu trúc trên các mô hình xây dựng, số lượng các đơn vị cấu trúc và quan điểm khuếch tán nguyên tử cũng như ảnh hưởng của mức độ hồi phục, nhiệt độ.

PHƯƠNG PHÁP NGHIÊN CỨU

Đề tài sử dụng phương pháp mô phỏng thống kê hồi phục, phương pháp mô phỏng ĐLHPT và phương pháp phân tích vi cấu trúc để xây dựng các mẫu vật liệu, phân tích và tính toán đặc trưng về cấu trúc, tính chất động học, quá trình khuếch tán của các mẫu xây dựng.

HIỆU QUẢ KTXH

- Phương pháp mô phỏng bằng máy tính là một phương pháp nghiên cứu mới mẻ. Mô phỏng có thể cung cấp các số liệu và thông tin dự đoán trước về cấu trúc và các tính chất của mẫu vật liệu cho nhà nghiên cứu thực nghiệm và lý thuyết. Do đó, mô phỏng sẽ giảm bớt thời gian và tiết kiệm kinh tế cho các phương pháp nghiên cứu khác. Đồng thời, kết quả mô phỏng cung cấp số liệu về cấu trúc và các cơ chế xảy ra trong mẫu vật liệu cho các nhà nghiên cứu ứng dụng và công nghệ.
- Cung cấp một bức tranh đầy đủ về vi cấu trúc và sự chuyển pha cấu trúc trong các vật liệu kim loại khi nhiệt độ thay đổi, mức độ ủ nhiệt khác nhau. Giải thích được cơ chế chuyển pha lỏng-tinh thể, tinh thể-VĐH. Đưa ra quan điểm mới về quá trình khuếch tán thông qua các vacancy tự nhiên. Kết quả này, góp phần làm sáng tỏ quá trình khuếch tán trong kim loại. Nghiên cứu đã cung cấp những số liệu tính toán về hệ số khuếch tán trong vật liệu kim loại ở các trạng thái có mức độ hồi phục, nhiệt khác nhau.

ĐƠN VỊ SỬ DỤNG

Đại học Sư phạm - Đại học Thái Nguyên