

**ĐẠI HỌC THÁI NGUYÊN
TRƯỜNG ĐẠI HỌC SƯ PHẠM**

PHONESAVATH CHANHTHAVONG

**NGHIÊN CỨU CẤU TRÚC ĐA THÙ HÌNH
VÀ CÁC TÍNH CHẤT ĐỘNG HỌC CỦA C_0
BẰNG PHƯƠNG PHÁP MÔ PHỎNG**

LUẬN VĂN THẠC SĨ VẬT LÝ

THÁI NGUYÊN - 2018

**ĐẠI HỌC THÁI NGUYÊN
TRƯỜNG ĐẠI HỌC SƯ PHẠM**

PHONESAVATH CHANHTHAVONG

**NGHIÊN CỨU CẤU TRÚC ĐA THÙ HÌNH
VÀ CÁC TÍNH CHẤT ĐỘNG HỌC CỦA C_0
BẰNG PHƯƠNG PHÁP MÔ PHỎNG**

**Ngành: Vật lý chất rắn
Mã ngành: 8.44.01.04**

LUẬN VĂN THẠC SĨ VẬT LÝ

Người hướng dẫn khoa học: PGS.TS. Phạm Hữu Kiên

THÁI NGUYÊN - 2018

LỜI CAM ĐOAN

Tôi xin cam đoan đây là đề tài riêng của tôi, do chính tôi thực hiện dưới sự hướng dẫn của PGS.TS. Phạm Hữu Kiên và trên cơ sở nghiên cứu các tài liệu tham khảo. Đề tài này không trùng với kết quả của tác giả khác đã công bố. Nếu sai tôi hoàn toàn chịu trách nhiệm trước hội đồng.

Thái Nguyên, tháng ... năm 2018

Học viên

Phonesavath CHANHTHAVONG

LỜI CẢM ƠN

Luận văn được hoàn thành dưới sự hướng dẫn và chỉ bảo tận tình của PGS.TS. Phạm Hữu Kiên. Tôi xin bày tỏ lòng biết ơn sâu sắc đến Thầy. Thầy đã tận tình hướng dẫn, giúp đỡ tôi trong suốt quá trình học tập, giảng giải cho tôi các vấn đề liên quan và nghiên cứu để hoàn thành luận văn.

Tôi xin gửi lời cảm ơn tới Ban giám hiệu nhà trường, Ban chủ nhiệm khoa và thầy cô giáo trong khoa Vật lý, Trường Đại học Sư phạm - Đại học Thái Nguyên, đã tận tình giảng dạy và tạo điều kiện thuận lợi cho tôi trong suốt quá trình học tập và nghiên cứu đề tài luận văn.

Cuối cùng xin được bày tỏ lòng biết ơn tới gia đình, bạn bè và các bạn học viên lớp cao học Vật lý Chất rắn K24 đã dành tình cảm, luôn động viên và giúp đỡ tôi để vượt qua những khó khăn để hoàn thành luận văn này.

Thái Nguyên, tháng ... năm 2018

Học viên

Phonesavath CHANHTHAVONG

MỤC LỤC

	Trang
Lời cam đoan	i
Lời cảm ơn.....	ii
Mục lục	iii
Danh mục các ký hiệu và chữ viết tắt.....	iv
Danh mục các bảng.....	v
Danh mục các hình	vi
MỞ ĐẦU	1
1. Lý do chọn đề tài	1
2. Mục đích đề tài	2
3. Đối tượng nghiên cứu.....	2
4. Nhiệm vụ nghiên cứu	2
5. Phương pháp nghiên cứu.....	2
6. Dự kiến đóng góp của đề tài.....	2
7. Cấu trúc của đề tài	2
Chương 1: TỔNG QUAN	3
1.1. Vật liệu kim loại	3
1.1.1. Cấu trúc và tính chất của kim loại vô định hình	3
1.1.2. Cấu trúc và tính chất của kim loại lỏng	5
1.1.3. Phương pháp chế tạo và ứng dụng của vật liệu kim loại	8
1.2. Mô phỏng về vật liệu kim loại.....	9
1.2.1. Một số phương pháp mô phỏng	9
1.2.2. Một số kết quả mô phỏng về vật liệu kim loại.....	13
1.3. Tính chất động học trong vật liệu kim loại	15
1.3.1. Cơ chế khuếch tán	15
1.3.2. Động học không đồng nhất	17

Chương 2: PHƯƠNG PHÁP NGHIÊN CỨU	27
2.1. Phương pháp động lực học phân tử và thống kê hồi phục	27
2.1.1. Phương pháp động lực học phân tử.....	27
2.1.2. Phương pháp thống kê hồi phục.....	31
2.2. Xây dựng mẫu của kim loại Co.....	33
2.3. Xác định hàm phân bố xuyên tâm.....	35
2.4. Xác định đơn vị cấu trúc đơn giản	39
Chương 3: KẾT QUẢ VÀ THẢO LUẬN	42
3.1. Mô phỏng cấu trúc của kim loại Co theo nhiệt độ	42
3.2. Xác định nhiệt độ nóng chảy của kim loại Co	46
3.3. Khảo sát tính chất động học của kim loại Co.....	53
KẾT LUẬN	61
CÔNG TRÌNH CÔNG BỐ LIÊN QUAN ĐẾN LUẬN VĂN	62
TÀI LIỆU THAM KHẢO	63

DANH MỤC CÁC KÝ HIỆU VÀ CHỮ VIẾT TẮT

Chữ viết tắt	Chữ viết đầy đủ
CS	(Circum-sphere)
CST	Cầu tứ diện (Circum-sphere of tetrahedron)
Co	Kim loại Cô ban (Cobalt)
CTĐG	Cấu trúc đơn giản
DCBPTB	Dịch chuyển bình phương trung bình
ĐLHPT	Động lực học phân tử
DSR	Phân bố bán kính (Distribution of simplex radius)
ĐVCT	Đơn vị cấu trúc
HPBXT	Hàm phân bố xuyên tâm
MC	Monte Carlo
NLBĐ	Nguyên lý ban đầu
$N_{\text{nút khuyết}}$	Số nút khuyết tự nhiên (Native vacancy)
R_s	Bán kính của cấu trúc đơn giản
SMD	Cấu trúc khuếch tán (Structural Diffusion Model)
SPT	Số phối trí
TKHP	Thống kê hồi phục
TSCT	Thừa số cấu trúc
VĐH	Vô định hình

DANH MỤC CÁC BẢNG

	Trang
Bảng 1.1. Vị trí và độ cao các đỉnh hàm phân bố xuyên tâm cặp, $g(r)$ của một số kim loại VĐH	4
Bảng 1.2. Khối lượng riêng và một số dữ liệu của hệ số cấu trúc $a(K)$ của một số kim loại, trong đó K_1 và K_2 là vị trí đỉnh cao thứ nhất và thứ hai $a(K)$	7
Bảng 2.1. Hệ số của thế tương tác cặp nguyên tử Pak-Doyama.	34
Bảng 3.1. Các đặc trưng cấu trúc của kim loại Co, trong đó: r_i ($i = 1, 2, 3, 4$) lần lượt là vị trí đỉnh thứ nhất, hai, ba và bốn trong HPBXT; g_{\max} là độ cao cực đại thứ nhất trong HPBXT; a và b là số liệu thực nghiệm được lấy trong các công trình	42
Bảng 3.2. Các đặc trưng cấu trúc của kim loại Co theo nhiệt độ, trong đó: ε là năng lượng trên một nguyên tử, T và P tương ứng là nhiệt độ và áp suất trong các mô hình	44

DANH MỤC CÁC HÌNH VẼ, ĐỒ THỊ

Trang

Hình 1.1.	Thừa số cấu trúc $a(K)$ của một số kim loại VĐH theo dữ liệu thực nghiệm của Leung P.K.....	3
Hình 1.2.	Hệ số cấu trúc của Ga lỏng ở nhiệt độ khác nhau; a) Trường hợp 323 K, b) Trường hợp 333 K	6
Hình 1.3.	HPBXT của Fe lỏng và VĐH, đường 1 là Fe VĐH, đường 2 là Fe lỏng ở nhiệt độ 1560 K [14].....	6
Hình 1.4.	Mô tả một số cơ chế khuếch tán chủ yếu trong tinh thể	17
Hình 2.1.	Sơ đồ khối phương pháp ĐLHPT	30
Hình 2.2.	Sơ đồ khối phương pháp TKHP.....	33
Hình 2.3.	Minh họa vị trí các đỉnh của HPBXT đối với cấu trúc vật liệu VĐH trong không gian 2 chiều (2D).....	39
Hình 2.4.	Các loại đơn vị cấu trúc đơn giản; a) 4 -ĐVCT, b) 5 -ĐVCT, c) 6 -ĐVCT, d) 7 -ĐVCT, e) 8 -ĐVCT.....	41
Hình 3.1.	Phân bố nguyên tử trong không gian ba chiều vị trí nguyên tử Co đối với mô hình ở nhiệt 328 K.....	43
Hình 3.2.	Sự biến đổi động năng mô hình Co trong suốt quá trình hồi phục ở 328 K	43
Hình 3.3.	HPBXT cặp của mô hình Co ở nhiệt độ 328 K.....	44
Hình 3.4.	HPBXT cặp của mô hình Co với kết quả thực nghiệm	45
Hình 3.5.	Năng lượng của kim loại Co như là hàm theo nhiệt độ	46
Hình 3.6.	HPBXT cặp của mô hình Co trong vùng -a	47
Hình 3.7.	HPBXT cặp của mô hình Co trong vùng -b.....	48
Hình 3.8.	HPBXT cặp của mô hình Co trong vùng -c	49
Hình 3.9.	Phân bố SPT của mô hình Co trong vùng -a	50
Hình 3.10.	Phân bố SPT của mô hình Co trong vùng -b.....	50

Hình 3.11.	Phân bố SPT của mô hình Co trong vùng -c	51
Hình 3.12.	Sự phụ thuộc của tỉ số Wendt-Abraham theo nhiệt độ	52
Hình 3.13.	Sự dịch chuyển bình phương trung bình là hàm của bước thời gian ĐLHPT trong pha VDH	53
Hình 3.14.	Sự dịch chuyển bình phương trung bình là hàm của bước thời gian ĐLHPT trong pha tinh thể.....	54
Hình 3.15.	Sự dịch chuyển bình phương trung bình là hàm của bước thời gian ĐLHPT trong pha lỏng.....	55
Hình 3.16.	Minh họa nút khuyết tự nhiên. Ở đây vòng tròn màu xanh mô tả các nguyên tử. Hình a) là một nút khuyết tự nhiên có bán kính r_a lớn hơn r_b , với r_b là khoảng cách ngắn nhất giữa hai nguyên tử (xem hình b).	56
Hình 3.17.	Phân bố bán kính của ĐVCT trong mô hình 220 K.....	57
Hình 3.18.	Phân bố bán kính của ĐVCT trong mô hình 328 K.....	57
Hình 3.19.	Phân bố bán kính của ĐVCT trong mô hình 426 K.....	58
Hình 3.20.	Phân bố bán kính của ĐVCT trong mô hình 542 K.....	58