ĐẠI HỌC THÁI NGUYÊN
TRƯỜNG ĐẠI HỌC SƯ PHẠM

VŨ THỊ THANH HƯƠNG

MÔ PHỎNG ĐẶC TRƯNG CẤU TRÚC VÀ CƠ CHẾ KHUẾCH TÁN TRONG VẬT LIỆU NIKEN LỎNG VÀ RẮN

LUẬN VĂN THẠC SĨ VẬT LÝ

THÁI NGUYÊN - 2019

Số hóa bởi Trung tâm Học liệu và Công nghệ thông tin – Đại học Thái Nguyên http://lrc.tnu.edu.vn

ĐẠI HỌC THÁI NGUYÊN
TRƯỜNG ĐẠI HỌC SƯ PHẠM

VŨ THỊ THANH HƯƠNG

MÔ PHỎNG ĐẶC TRƯNG CẤU TRÚC VÀ CƠ CHẾ KHUẾCH TÁN TRONG VẬT LIỆU NIKEN LỎNG VÀ RẮN

Ngành: Vật lý chất rắn
Mã ngành: 8440104

LUẬN VĂN THẠC SĨ VẬT LÝ

Người hướng dẫn khoa học: TS. Phạm Mai An

THÁI NGUYÊN - 2019

Số hóa bởi Trung tâm Học liệu và Công nghệ thông tin – Đại học Thái Nguyên http://lrc.tnu.edu.vn

LỜI CAM ĐOAN

Tôi xin cam đoan đây là đề tài riêng của tôi, do chính tôi thực hiện dưới sự hướng dẫn của TS. Phạm Mai An 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 6 năm 2019

Học viên

Vũ Thị Thanh Hương

Số hóa bởi Trung tâm Học liệu và Công nghệ thông tin – Đại học Thái Nguyên http://lrc.tnu.edu.vn

LỜI CẢM ƠN

Luận văn được hoàn thành dưới sự hướng dẫn và chỉ bảo tận tình của TS. Phạm Mai An. 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 K25 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 6 năm 2019

Học viên

Vũ Thị Thanh Hương

Số hóa bởi Trung tâm Học liệu và Công nghệ thông tin – Đại học Thái Nguyên http://lrc.tnu.edu.vn

MỤC LỤC

Danh mục các ký hiệu và chữ viết tắt ii
Danh mục các bảng biểu..... iii
Danh mục các hình vẽ và đồ thị v
MỞ ĐẦU.....1
Chương 1. TỔNG QUAN VẬT LIỆU KIM LOẠI 3
1.1. Cấu trúc và tính chất vật liệu kim loại vô định hình…… 3
1.2. Cấu trúc tinh thể kim loại lỏng……..…….....4
1.3. Mô phỏng cấu trúc và tính chất động học trong kim loại Ni 7
Chương 2. PHƯƠNG PHÁP NGHIÊN CỨU 12
2.1. Phương pháp mô phỏng vật liệu.....12
2.2. Phương pháp dựng mẫu Ni.....18
2.3. Phương pháp xác định hàm phân bố xuyên tâm.....19
2.4. Phương pháp xác định cấu trúc đơn giản 23
2.5. Phương pháp xác cấu trúc tinh thể 25
Chương 3. KẾT QUẢ VÀ THẢO LUẬN.....30
3.1. Khảo sát cấu trúc Ni theo nhiệt độ và mức độ hồi phục 30
3.2. Cơ chế tạo pha thủy tinh (rắn), tạo pha tinh thể và tạo pha lỏng 37
3.3. Khảo sát cơ chế khuếch tán trong kim loại Ni 47
KẾT LUẬN.....50
TÀI LIỆU THAM KHẢO.....52

Số hóa bởi Trung tâm Học liệu và Công nghệ thông tin – Đại học Thái Nguyên http://lrc.tnu.edu.vn

DANH MỤC CÁC KÝ HIỆU VÀ CHỮ VIẾT TẮT

Chữ viết tắt	**Chữ viết đầy đủ**
CST	Tứ diện cầu
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
EAM	Thế tương tác nhúng
FCC	Lập phương tâm mặt
HPBXT	Hàm phân bố xuyên tâm
SPT	Số phối trí
TKHP	Thống kê hồi phục
TSCT	Thừa số cấu trúc
TSKG	Thừa số không Gauss
VĐH	Vô định hình

Số hóa bởi Trung tâm Học liệu và Công nghệ thông tin – Đại học Thái Nguyên http://lrc.tnu.edu.vn

DANH MỤC CÁC BẢNG BIỂU

Trang

Bảng 1.1.	Vị trí và tỉ lệ độ cao các đỉnh trong HPBXT 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)	6
Bảng 2.1.	Hệ số của thế tương tác cặp nguyên tử Pak-Doyama.	19
Bảng 2.2.	Phương pháp CNA nhận diện cấu trúc tinh thể. Ví dụ: nguyên tử được phối trí bởi mạng hcp có 6 liên kết loại (421) và 6 liên kết loại (422). Tức là bất kì hai nguyên tử lân cận nào trong tinh thể hcp cũng có 4 lân cận chung mà giữa chúng có 2 liên kết trong đó có thể là 1 (421) hoặc liên kết 2 (422).	26
Bảng 2.3.	Quan hệ giữa các loại biểu đồ CNA trong các cấu trúc tinh thể fcc, bcc và hcp.	29
Bảng 3.1.	Đặc trưng cấu trúc của Ni vô định hình ở 300 K được so sánh với số liệu thực nghiệm trong các công trình [1], [5]. Ở đây r_i and g_i là vị trí và độ cao của đỉnh thứ *i* trong HPBXT, Z là số phối trí trung bình.	30

Số hóa bởi Trung tâm Học liệu và Công nghệ thông tin – Đại học Thái Nguyên http://lrc.tnu.edu.vn

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 .	5
Hình 1.3.	HPBXT của Fe lỏng và VĐH, đường 1 là Fe VĐH, đường 2 là Fe lỏng ở nhiệt độ 1560 K .	6
Hình 1.4.	Ảnh 3D biểu diễn các mầm và sự phát triển của các pha tinh thể: a) t= 5 ps; b) t= 10 ps; c) t= 110 ps; d) t= 120 ps; e) t= 130 ps; f) t= 150 ps. Từ a) đến c) sự tạo thành mầm bởi sự sắp xếp lại do khuếch tán, d) và e) sự phát triển tinh thể bởi chuyển động tập thể của nguyên tử, f) liên kết các đám khác nhau thành tinh thể với các hướng tinh thể khác nhau.	9
Hình 2.1.	Sơ đồ khối mô tả phương pháp ĐLHPT	15
Hình 2.2.	Sơ đồ khối mô tả phương pháp TKHP.	18
Hình 2.3.	Các loại ĐVCT: a) 4- ĐVCT, b) 5- ĐVCT, c) 6- ĐVCT, d) 7- ĐVCT, e) 8– ĐVCT	24
Hình 2.4.	Minh hoạ cấu trúc địa phương của cặp nguyên tử được đặc trưng bởi ba thông số kmn. Các cặp nguyên tử màu xám, các nguyên tử lân cận chung màu trắng .	27
Hình 2.5.	Minh hoạ cấu trúc địa phương của cặp nguyên tử được đặc trưng bởi các thông số hkmn. Các cặp nguyên tử màu xám,các nguyên tử lân cận chung màu trắng	28
Hình 3.1	Hàm phân bố xuyên tâm đối với các mẫu 300 K; 500 K ở các bước hồi phục 10^6, 3×10^6, 7×10^6 bước và số liệu thực nghiệm.	31
Hình 3.2.	Hàm phân bố xuyên tâm đối với các mẫu 650 K; 750 K ở các bước hồi phục 10^6, 2×10^6, 3×10^6, 4×10^6 , 5×10^6 , 6×10^6 bước.	32
Hình 3.3.	Hàm phân bố xuyên tâm đối với các mẫu 900 K; 1000 K ở các bước hồi phục 10^6, 3×10^6, 7×10^6 bước.	34
Hình 3.4.	Phân bố số phối trí (SPT) đối với các mẫu VĐH 300 K, 500 K tại các bước hồi phục 10^6, 3×10^6, 7×10^6 bước.	34

Số hóa bởi Trung tâm Học liệu và Công nghệ thông tin – Đại học Thái Nguyên http://lrc.tnu.edu.vn

Hình 3.5.	Phân bố số phối trí (SPT) đối với các mẫu 650 K, 750 K tại 10^6, 2×10^6, 3×10^6, 4×10^6 , 5×10^6 , 6×10^6 bước.	36
Hình 3.6.	Phân bố số phối trí (SPT) đối với các mẫu lỏng 900 K, 1000 K tại các bước hồi phục 10^6, 3×10^6, 7×10^6 bước.	36
Hình 3.7.	Sự phụ thuộc của năng lượng theo thời gian đối với các mẫu 300 K, 1000 K.	37
Hình 3.8.	Sự phụ thuộc của năng lượng theo thời gian đối với các mẫu 650 K, 750 K.	38
Hình 3.9.	Trực quan hóa 3 chiều về sự sắp xếp các nguyên tử trong mẫu 750 K: (A), (B) và (C) vẽ mẫu ở các thời gian hồi phục 10^6, 3×10^6 và 7×10^6 bước	40
Hình 3.10.	Hàm phân bố xuyên tâm của các mẫu Ni tại các nhiệt độ khác nhau.	41
Hình 3.11.	Phân bố số phối trí (SPT) của các mẫu Ni tại các nhiệt độ khác nhau.	41
Hình 3.12.	Sự phụ thuộc nhiệt của năng lượng đối với các mẫu trong khoảng nhiệt độ 118 K đến 1380 K.	42
Hình 3.13.	Sự phụ thuộc nhiệt độ của tỉ số g_{min}/g_{max} đối với các mẫu trong khoảng nhiệt độ 118 K đến 1380 K.	42
Hình 3.14.	Phân bố bán kính của ĐVCT đối với các pha VĐH, pha tinh thể và pha lỏng..	43
Hình 3.15.	Phân bố khoảng cách cạnh, a_S của ĐVCT đối với các pha VĐH, pha tinh thể và pha lỏng	44
Hình 3.16.	Trực quan hóa 3 chiều về sự sắp xếp nguyên tử trong các mẫu 1380 K, 995 K và 873 K: (A), (B) và (C) vẽ mẫu với SPT khác 14.	46
Hình 3.17.	Trực quan hóa 3 chiều về sự sắp xếp nguyên tử trong các mẫu 1380 K, 995 K và 873 K: (D), (E) và (F) vẽ mẫu với nguyên tử có SPT bằng 14	46
Hình 3.18.	Khoảng cách dịch chuyển bình phương trung bình theo thời gian mô phỏng đối với các pha VĐH (118 K, 336 K, 516 K, 642 K) và pha tinh thể (873 K).	48
Hình 3.19.	Khoảng cách dịch chuyển bình phương trung bình theo thời gian mô phỏng đối với pha lỏng (995 K, 1167 K, 1380 K).	48

MỞ ĐẦU

1. Lý do chọn đề tài

Niken (Ni) là vật liệu kim loại có nhiều đóng góp quan trọng trong lĩnh vực khoa học ứng dụng và khoa học vật liệu. Nhiều nghiên cứu về cấu trúc và sự biến đổi cấu trúc đã được thực hiện bằng cả thực nghiệm, lý thuyết và mô phỏng. Các kết quả nghiên cứu thực nghiệm bằng cách sử dụng phương pháp tán xạ raman, nhiễu xạ tia X, nhiễu xạ neutron, hiển vi điện tử truyền qua,… đã cung cấp nhiều dữ liệu quan trọng về cấu trúc của các vật liệu kim loại thông qua phân tích hàm phân bố xuyên tâm (HPBXT) hoặc thừa số cấu trúc. Những kết quả nghiên cứu thực nghiệm đã chỉ ra rằng, ở trạng thái vô định hình (VĐH), đỉnh thứ hai của HPBXT tách thành hai đỉnh nhỏ, sự tách đỉnh này thường được cho là liên quan đến sự tồn tại của các khối đa diện 20 mặt. Bằng phương pháp mô phỏng, HPBXT của kim loại nhôm bắt đầu có sự tách đỉnh ở cực đại thứ hai ở dưới nhiệt độ 500 K. Trong suốt quá trình làm lạnh từ từ kim loại Nhôm (Al) từ 700 xuống 300 K thì thấy xuất hiện ba trạng thái: lỏng, tinh thể yếu và trạng thái VĐH. Tuy nhiên, trong các nghiên cứu trình bày ở trên vẫn chưa chỉ ra được cơ chế khuếch tán đối với kim loại lỏng và VĐH. Do đó cơ chế động học trong các kim loại vẫn đang là vấn đề còn nhiều tranh luận và cần có nghiên cứu mới. Lý do trên khiến chúng tôi chọn đề tài "*Mô phỏng đặc trưng cấu trúc và cơ chế khuếch tán trong vật liệu Ni lỏng và rắn*". Ở đây, chúng tôi thực hiện nghiên cứu cấu trúc và cơ chế khuếch tán đối với kim loại Ni trong khoảng nhiệt độ từ 1380 K- 118 K bởi thế tương tác cặp Pak- Doyama.

2. Mục tiêu đề tài

Tạo các mẫu Ni chứa 4394 và 10000 nguyên tử với mật độ thực của Ni trong khoảng nhiệt độ từ 1380 K đến 118 K. Phân tích vi cấu trúc của Ni trên các

Số hóa bởi Trung tâm Học liệu và Công nghệ thông tin – Đại học Thái Nguyên http://lrc.tnu.edu.vn