

ĐẠI HỌC THÁI NGUYÊN
TRƯỜNG ĐẠI HỌC SƯ PHẠM

PHẠM ĐỨC LINH

NGHIÊN CỨU SỰ HÌNH THÀNH PHA TINH THỂ
VÀ THỦY TINH CỦA HẠT NANO FeB
BẰNG PHƯƠNG PHÁP MÔ PHỎNG

LUẬN VĂN THẠC SĨ KHOA HỌC VẬT CHẤT

THÁI NGUYÊN - 2017

ĐẠI HỌC THÁI NGUYÊN
TRƯỜNG ĐẠI HỌC SƯ PHẠM

PHẠM ĐỨC LINH

**NGHIÊN CỨU SỰ HÌNH THÀNH PHA TINH THỂ
VÀ THỦY TINH CỦA HẠT NANO FeB
BẰNG PHƯƠNG PHÁP MÔ PHỎNG**

Chuyên ngành: Vật lí chất rắn

Mã số: 60.44.01.04

LUẬN VĂN THẠC SĨ KHOA HỌC VẬT CHẤT

Người hướng dẫn khoa học: TS. Phạm Hữu Kiên

THÁI NGUYÊN - 2017

LỜI CAM ĐOAN

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

Thái Nguyên, tháng 04 năm 2017

Tác giả luận văn

Phạm Đức Linh

LỜI CẢM ƠN

Tôi xin bày tỏ lòng biết ơn sâu sắc đến TS.Phạm Hữu Kiên đã tận tình hướng dẫn tôi hoàn thành luận văn này. Người Thầy rất thương yêu tôi, tận tình chỉ bảo và giảng giải cho tôi các vấn đề liên quan đến luận văn.

Tôi xin chân thành cảm ơn các thầy cô tại 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.

Xin chân thành cảm ơn lãnh đạo cũng như các thầy cô tại trường Văn hóa I - BCA đã giúp đỡ và tạo điều kiện làm việc cho tôi trong suốt quá trình nghiên cứu thực hiện luận văn.

Cuối cùng xin được bày tỏ lòng biết ơn tới gia đình, các anh chị lớp Cao học Vật lý Chất rắn K23 đã dành tình cảm, động viên, giúp đỡ tôi vượt qua những khó khăn để hoàn thành luận văn này.

Thái Nguyên, tháng 04 năm 2017

Tác giả luận văn

Phạm Đức Linh

MỤC LỤC

LỜI CAM ĐOAN	i
LỜI CẢM ƠN	ii
MỤC LỤC	iii
DANH MỤC CÁC KÝ HIỆU VÀ CHỮ VIẾT TẮT	iv
DANH MỤC CÁC HÌNH	v
MỞ ĐẦU	7
1. Lý do chọn đề tài	7
2. Mục tiêu đề tài	8
3. Phương pháp nghiên cứu	8
4. Đối tượng và phạm vi nghiên cứu	8
5. Đóng góp của luận văn.....	8
6. Cấu trúc của đề tài	9
Chương 1 TỔNG QUAN	10
1.1. Vật liệu nano.....	10
1.1.1. Tính chất của hạt nano.....	11
1.1.2. Một số ứng dụng của hạt nano	12
1.1.3. Phương pháp chế tạo vật liệu nano.....	13
1.2. Mô phỏng.....	15
1.2.1. Tổng quan về các phương pháp mô phỏng	15
1.2.2. Các phương pháp mô phỏng.....	17
1.3. Lý thuyết cổ điển về mầm và sự phát triển mầm	21
Chương 2 PHƯƠNG PHÁP NGHIÊN CỨU	24
2.1. Phương pháp động lực học phân tử.....	24
2.2. Phương pháp thống kê hồi phục	30
2.3. Xây dựng hạt nano.....	32
2.4. Xây dựng hạt nano.....	33
2.4.1. Hàm phân bố xuyên tâm.....	33

2.4.2. Hàm phân bố xuyên tâm của hạt nano	36
2.5. Phương pháp xác định mầm tinh thể	38
Chương 3 MÔ PHỎNG CẤU TRÚC VÀ CƠ CHẾ TINH THỂ HÓA HẠT	
NANO KIM LOẠI $Fe_{100-x}B_x$	40
3.1. Mô phỏng ảnh hưởng của nhiệt độ, mức độ hồi phục, nồng độ nguyên tử B đến cấu trúc hạt nano $Fe_{100-x}B_x$	40
3.1.1. Mô phỏng cấu trúc hạt nano $Fe_{100-x}B_x$ ở nhiệt độ 900K.....	40
3.1.2. Ảnh hưởng của thời gian ủ nhiệt đến cấu trúc của hạt nano $Fe_{100-x}B_x$ vô định hình	47
3.2. Cơ chế tinh thể hóa của $Fe_{95}B_5$	49
3.2.1. Cơ chế tinh thể hóa của $Fe_{95}B_5$	49
3.2.2. Giải thích cơ chế tạo thành tinh thể theo phương pháp giải tích.....	54
3.2.3. Giải thích cơ chế tạo thành tinh thể theo phương pháp trực quan hóa ..	55
3.3. Cơ chế tạo pha thủy tinh trong kim loại Fe	58
KẾT LUẬN	64
CÔNG TRÌNH ĐÃ CÔNG BỐ LIÊN QUAN ĐẾN LUẬN VĂN	65
TÀI LIỆU THAM KHẢO	66

DANH MỤC CÁC KÝ HIỆU VÀ CHỮ VIẾT TẮT

ĐLHPT	: Động lực học phân tử
ĐVCT	: Đơn vị cấu trúc
HPBXT	: Hàm phân bố xuyên tâm
MC	: Monte Carlo
NLBĐ	: Nguyên lý ban đầu
SPT	: Số phối trí
TKHP	: Thống kê hồi phục
TSCT	: Thừa số cấu trúc
VĐH	: Vô định hình

DANH MỤC CÁC HÌNH

Hình 1.1.	Tổng năng lượng tự do theo kích thước của đám	23
Hình 2.1.	Sơ đồ khối phương pháp ĐLHPT	29
Hình 2.2.	Sơ đồ khối phương pháp TKHP	31
Hình 2.3.	Sơ đồ minh họa 2 chiều (2D) vị trí các đỉnh của HPBXT đối với cấu trúc VĐH	36
Hình 2.4.	Minh họa sự xác định HPBXT đối với hạt nano (A); Lõi và bề mặt hạt nano (B); Ba vùng trong hạt nano (C).....	37
Hình 2.5.	Hình vẽ minh họa cách xác định mầm tinh thể trong mẫu vật liệu	39
Hình 3.2.	Hàm phân bố xuyên tâm của mẫu Fe ở 900K.....	41
Hình 3.3.	Hàm phân bố xuyên tâm của mẫu $Fe_{95}B_5$ ở 900K	42
Hình 3.4.	Hàm phân bố xuyên tâm của mẫu $Fe_{90}B_{10}$ ở 900K.....	43
Hình 3.5.	Năng lượng hạt nano Fe tại 900K như là hàm của các bước mô phỏng	45
Hình 3.6.	Năng lượng hạt nano $Fe_{95}B_5$ tại 900K như là hàm của các bước mô phỏng.....	46
Hình 3.7.	Năng lượng hạt nano $Fe_{90}B_{10}$ tại 900K như là hàm của các bước mô phỏng	46
Hình 3.8.	Phân bố số phối trí của hạt nano sắt ở 900K với số bước chạy 10^5 và 5×10^7 bước.....	48
Hình 3.9:	Nguyên tử tinh thể N_{Cr} như là hàm của thời gian đối với mẫu $Fe_{95}B_5$ được ủ ở 900K	49
Hình 3.10.	Ảnh chụp sự phân bố riêng biệt của các nguyên tử n_{CV} được xác định.	51
Hình 3.11.	Ảnh chụp sự phân bố riêng biệt của các nguyên tử n_{CV} được xác định.	51
Hình 3.12.	Ảnh chụp được chọn về sự phân bố riêng của các CB-atoms, CV-atoms.....	52
Hình 3.13.	Ảnh chụp Am – toms trong lõi hạt nano $Fe_{95}B_5$ thu được ở thời điểm cuối.	53

Hình 3.14. Ảnh chụp Am – toms bề mặt hạt nano Fe_{95}B_5 thu được ở thời điểm cuối.	53
Hình 3.15. Biểu diễn năng lượng của các nguyên tử loại khác nhau (E_{Cr} , E_{Am} , E_{CB} and E_{AB}) như là hàm của thời gian.....	55
Hình 3.16. Ảnh chụp sự sắp xếp nguyên tử đối với mẫu Fe_{95}B_5	57
Hình 3.17. Ảnh chụp sự sắp xếp nguyên tử của tinh thể Fe_{95}B_5	57
Hình 3.18. Động năng trung bình của một nguyên tử Fe ở nhiệt độ 200K và 1500K.	58
Hình 3.19. Hàm phân bố xuyên tâm của Fe ở trạng thái lỏng và thủy tinh	59
Hình 3.20. Phân bố số phối trí của Fe theo nhiệt độ	60
Hình 3.21. Phân bố bán kính ĐVCT theo nhiệt độ, ở áp suất 0 GPa.....	61
Hình 3.22. Phân bố khoảng cách giữa các đỉnh của tứ diện ĐVCT theo nhiệt độ, ở áp suất 0 GPa.	61

MỞ ĐẦU

1. Lý do chọn đề tài

Hiện nay, vật liệu nano đang được tập chung nghiên cứu và được ứng dụng rộng rãi trong nhiều lĩnh vực bởi các tính chất khác biệt của chúng so với vật liệu khối. Hạt nano có lõi với đặc trưng cấu trúc tương tự như vật liệu khối, còn vỏ có cấu trúc xốp. Hạt nano có thể có cấu trúc tinh thể hoặc VĐH phụ thuộc vào phương pháp chế tạo. Tương tự như vật liệu khối, hạt nano VĐH có thể chuyển sang trạng thái tinh thể khi chúng được ủ nhiệt ở nhiệt độ thích hợp. Cơ chế chuyển pha VĐH sang tinh thể của hạt nano về nguyên tắc sẽ khác với vật liệu khối, vì hạt nano chứa một số lượng lớn các nguyên tử ở phần vỏ. Nhóm các vật liệu nano Fe và các hợp kim của chúng được đặc biệt quan tâm bởi rất nhiều lý do. Nó là một trong những vật liệu từ tính thông dụng nhất, có thể được sử dụng trong các lõi biến áp điện và các phương tiện lưu trữ từ tính cũng như chất xúc tác.

Tương tự như các mẫu khối, tinh thể hóa hạt nano cũng nhận được sự quan tâm rộng rãi của các nhà vật lý. Sử dụng phương pháp DSC (Differential scanning calorimetry) nghiên cứu sự biến đổi pha trong hạt nano VĐH Co cho thấy nhiệt độ chuyển pha thủy tinh và nhiệt độ tinh thể hóa phụ thuộc vào kích thước của hạt nano. Các kết quả mô phỏng chỉ ra khi tốc độ làm lạnh giảm, cấu trúc VĐH của hạt nano thay đổi sang tinh thể thông qua khối đa diện 20 mặt. Bề mặt khối đa diện 20 mặt có các đặc điểm cấu trúc tinh thể với mặt tương ứng là $\{1,1,1\}$, còn trong lõi vẫn là VĐH. Mẫu tinh thể đầy đủ là đa tinh thể lập phương tâm mặt (fcc).

Tuy nhiên cho đến nay, quá trình hình thành pha tinh thể và pha thủy tinh trong vật liệu kim loại còn nhiều khía cạnh chưa được làm rõ. Do đó chúng tôi chọn đề tài “*Nghiên cứu sự hình thành pha tinh thể và thủy tinh của hạt nano FeB bằng phương pháp mô phỏng*” để cung cấp thêm những hiểu biết và thông tin về cơ chế hình thành pha thủy tinh và tinh thể trong vật liệu kim loại.