

NGHIÊN CỨU CẤU TRÚC VÀ TÍNH CHẤT CỦA VẬT LIỆU LỎNG VÀ VÔ ĐỊNH HÌNH BẰNG PHƯƠNG PHÁP MÔ PHỎNG TRÊN MÁY TÍNH

Tên chủ nhiệm đề tài: PGS.TS. VÕ VĂN HOÀNG

Cơ quan công tác: Khoa Vật lý, trường Đại học Khoa học Tự nhiên ĐHQG TP.HCM

Địa chỉ liên lạc: 354/15B Lý Thường Kiệt, P.14, Quận 10, tp.HCM

Điện thoại: 9020725

Email: vvhoang2002@yahoo.com

1. TÓM TẮT MỤC ĐÍCH NỘI DUNG NGHIÊN CỨU

Dựng các mô hình hợp kim hệ Fe-B, Fe-P, Co-B, Co-P, Ni-B, Ni-P và các oxide SiO_2 , Al_2O_3 , GeO_2 lỏng và vô định hình chứa từ 2000-3000 nguyên tử bằng phương pháp Động lực học phân tử, các mô hình có cấu trúc phù hợp với thực nghiệm. Chúng tôi tiến hành nghiên cứu cấu trúc vi mô, khảo sát ảnh hưởng của hàm lượng á kim lên cấu trúc và tính từ tính các hợp kim vô định hình; nghiên cứu cấu trúc vi mô của các oxide lỏng và vô định hình, nghiên cứu biến đổi của cấu trúc trong quá trình làm lạnh nhanh; nghiên cứu hiện tượng khuếch tán: xác lập sự phụ thuộc vào nhiệt độ của hệ số khuếch tán, tìm năng lượng kích hoạt của hiện tượng khuếch tán, khảo sát hiện tượng khuếch tán dị thường khi áp suất thay đổi; nghiên cứu hiện tượng dị thường về mặt động học: xác lập hệ số phi-Gauss, khảo sát động học và phân bố không gian của các nguyên tử cực nhanh và cực chậm trong mô hình, nghiên cứu hiện tượng kết bó của các nguyên tử cực chậm và cực nhanh cũng như mối liên hệ giữa cấu trúc địa phương và độ linh động của các nguyên tử; nghiên cứu hiện tượng chuyển pha cấu trúc của oxide lỏng và vô định hình dưới tác dụng của áp suất cao.

2. KẾT QUẢ NGHIÊN CỨU, Ý NGHĨA KHOA HỌC ĐÃ ĐẠT ĐƯỢC

1.1. Kết quả nghiên cứu:

Đã công bố 33 bài báo khoa học trong và ngoài nước trong đó có 28 bài ở nước ngoài tại hơn 10 tạp chí Vật lý hàng đầu của Mỹ, Đức, Pháp, Anh ... Xuất bản 01 sách chuyên khảo tại VN và tham gia viết 02 sách chuyên khảo xuất bản ở Mỹ.

1.2. Ý nghĩa khoa học đã đạt được

– Nghiên cứu chi tiết cấu trúc vi mô của các hợp kim vô định hình hệ Fe-B, Fe-P, Co-B, Co-P, Ni-B, Ni-P. Lần đầu tiên đã nghiên cứu ảnh hưởng của hàm lượng chất á kim lên phân bố vacancy và từ tính của các hệ hợp kim vừa nêu.

– Các kết quả mô phỏng đã cho những hiểu biết chi tiết về cấu trúc vi mô của các hệ oxide như SiO_2 , GeO_2 và Al_2O_3 là cấu trúc dạng mạng tứ diện với 4 nguyên tử oxy bao quanh mỗi nguyên tử Si, Ge hay Al. Theo kết quả tính toán, ở vùng nhiệt độ không cao thì sự phụ thuộc của hệ số khuếch tán vào nhiệt độ tuân theo định luật Arrhenius và ở vùng nhiệt độ cao hơn thì tuân theo định luật dạng hàm mũ, nhiệt độ chuyển của trạng thái này được xác định là khoảng 3500 K cho GeO_2 và Al_2O_3 . Bên cạnh đó hiện tượng khuếch tán dị thường trong GeO_2 lỏng cũng vừa được xác lập. Hiện tượng dị thường về mặt động học cũng được xác lập cho cả ba hệ oxide vừa nêu.

Chúng tôi xác lập được hiện tượng chuyển pha cấu trúc trong Al_2O_3 lỏng và vô định hình từ dạng mạng tứ diện sang dạng mạng lục giác.

3. Ý NGHĨA THỰC TIỄN VÀ HIỆU QUẢ ỨNG DỤNG THỰC TIỄN

Các hợp kim vừa nêu là các vật liệu từ cơ bản có nhiều ứng dụng trong kỹ thuật điện, điện tử. Các oxide như SiO_2 và GeO_2 là các chất bán dẫn quan trọng. Bên cạnh đó Al_2O_3 là lớp màng bảo vệ kim loại khỏi bị oxy hóa. Chính vì vậy mà kết quả nghiên cứu của đề tài vừa có ý nghĩa khoa học vừa có ý nghĩa thực tiễn.

4. KẾT QUẢ ĐÀO TẠO SAU ĐẠI HỌC

Thạc sĩ: số đã bảo vệ là 01 đang hướng dẫn: không
Tiến sĩ: số đã bảo vệ: không đang hướng dẫn: 01

5. SẢN PHẨM KHOA HỌC ĐÃ HOÀN THÀNH

5.1. Các công trình đã công bố trên các tạp chí khoa học

- [1]. Vo Van Hoang and Suhk Kun Oh, Simulation of pressure-induced phase transition in liquid and amorphous Al_2O_3 , *Phys. Rev. B* 72, 054209 (2005).
- [2]. Vo Van Hoang, About an order of liquid-liquid phase transition in simulated liquid Al_2O_3 , *Phys. Lett. A* 335, 439 (2005).
- [3]. Vo Van Hoang, Simulation of aging effects on dynamics in liquid Al_2O_3 , *Physica B* 367, 210 (2005).
- [4]. Vo Van Hoang, Cooling rate effects in liquid and amorphous Al_2O_3 , *Eur. Phys. J. B*, 2005, accepted for publication.
- [5]. Vo Van Hoang, Thermal hysteresis in simulated Al_2O_3 system, *Eur. Phys. J. B*, 2005, in press.
- [6]. Vo Van Hoang and Suhk Kun Oh, Cooling rate effects on dynamics in supercooled Al_2O_3 , 2005, *Int. J. Mod. Phys. B*, in press.
- [7]. Vo Van Hoang, Temperature-induced phase transition in simulated amorphous Al_2O_3 , *Phys. Stat. Sol. B*, 2005, in press.
- [8]. Vo Van Hoang, Spatial correlations of most mobile or immobile particles in supercooled Al_2O_3 , *Phys. Stat. Sol. A*, 2005, in press.
- [9]. Static and dynamic properties of simulated liquid and amorphous GeO_2 , 2005, *J. Phys.: Condens. Matt.*, in press.
- [10]. Vo Van Hoang and Suhk Kun Oh, Annealing effects on structure in amorphous Al_2O_3 models, *Physica B* 364, 225 (2005).
- [11]. Vo Van Hoang and Suhk Kun Oh, Computer simulation of the structural transformation in liquid Al_2O_3 , *J. Phys.: Condens. Matt.* 17, 3025 (2005).
- [12]. Vo Van Hoang and Suhk Kun Oh, Dynamical heterogeneities in supercooled Al_2O_3 , *J. Phys.: Condens. Matt.* 17, 5179 (2005).
- [13]. Vo Van Hoang, Static and dynamic heterogeneities in supercooled SiO_2 , *Defect and diffusion Forum*, 2005 in press.

- [14]. Vo Van Hoang, Heating rate effects in simulated liquid Al_2O_3 , *Eur. Phys. J. Appl. Phys.*, 2005 in press.
- [15]. Vo Van Hoang and Suhk Kun Oh, Molecular dynamics study of aging effects in supercooled Al_2O_3 , *Phys. Rev. E* 70, 061203 (2004).
- [16]. Vo Van Hoang, Molecular dynamics study on structure and properties of liquid and amorphous Al_2O_3 , *Phys. Rev. B* 70, 134204 (2004).
- [17]. Vo Van Hoang and Suhk Kun Oh, Structure and diffusion simulation of liquid Al_2O_3 , *Physica B* 352, 342 (2004).
- [18]. Vo Van Hoang and Suhk Kun Oh, Simulation of structural properties and structural transformation of amorphous Al_2O_3 , *Physica B* 352, 73 (2004).
- [19]. Vo Van Hoang, Belashchenko D.K, V. T. Mai Thuan, Computer simulation of the structural and thermodynamics properties of liquid and amorphous SiO_2 , *Physica B* 348, 249 (2004).
- [20]. Vo Van Hoang, Computer simulation of the effects of B and P concentrations on microstructure in amorphous Fe-B and Fe-P alloys, *Physica B* 348, 347 (2004)
- [21]. Vo Van Hoang, N. H. Hung, N. H. Tuan Anh, Computer simulation of the effect of the B, P concentration on the pore distribution in the amorphous Co-B, Co-P alloys, *J. Metastable and Nanocrystalline materials, e-vol. 18, 43 (2003)*.
- [22]. P.K. Hung. N.N. Nguyen, Vo Van Hoang, H.V. Hue, N.V. Hong, L.T. Vinh, Computer simulation of diffusion in amorphous solids, *J. Advances in Natural Sciences* 3, 1 (2002).
- [23]. Computer simulation of the liquid and amorphous SiO_2 , *J. Communications in Physics* 12, 245 (2002).
- [24]. Vo Van Hoang, T. B. Van, Simulation of structural and magnetic inhomogeneities of amorphous Ni-P alloys, *J. Metastable and Nanocrystalline Materials, e- vol 9, 5 (2001)*.
- [25]. Vo Van Hoang, T. B. Van, Belashchenko D. K, V. T. Thu Nhi, Computer simulation of microstructure of amorphous Co-P alloys, *J. Communication in Physics* 11, 157 (2001).
- [26]. Vo Van Hoang, T. B. Van, N. H. Hung, P. K. Hung, Calculation of magnetic of the amorphous Fe by XY model and Monte-Carlo method, *J. Communications in Physics* 11, 250 (2001).

5.2. Các công trình đã hoàn thành và sẽ công bố trên các tạp chí khoa học

- [1]. Vo Van Hoang, Anomalous diffusion in simulated liquid GeO_2 , *EuroPhys. Lett.*, submitted for publication.
- [2]. Vo Van Hoang, Interatomic potential effects on dynamical heterogeneities in liquid SiO_2 , in preparation for *Phys. Rev. E*.
- [3]. Vo Van Hoang, Nguyen Hong Linh and Nguyen Hoang Hung, Structural properties of simulated liquid and amorphous $\text{Al}_2\text{O}_3.2\text{SiO}_2$, in preparation for *Physica B*.

5.3. Các báo cáo tại các hội nghị khoa học

- [1]. Vo Van Hoang, Spatial correlations of most mobile or immobile particles in supercooled SiO_2 , *Inter. Meeting on Frontiers of Physics IMFP 2005, 25-29 July 2005, Kuala-Lumpur, Malaysia. (Oral Presentation)*.
- [2]. Vo Van Hoang and N.H. Tuan Anh, Simulation of structure of liquid and amorphous GeO_2 , *Inter. Meeting on Frontiers of Physics IMFP 2005, 25-29 July 2005, Kuala-Lumpur, Malaysia. (Oral Presentation)*.
- [3]. P.N. Nguyen, P. K. Hung, L. K. Hoang, N.T.N. Anh, N.T. Nhan, Vo Van Hoang, Computer simulation of diffusion in three – dimensional disordered systems, *4th German-Vietnamese Seminar on Physics and Engineering (GVS4), Dresden, 5-7 June, 2001, p.167*
- [4]. Vo Van Hoang, N. H. Hung, P. K. Hung, Investigation of the spin distribution in the amorphous Fe model, *Reported at the Vietnam National Conference on Physics, Hanoi, March, 2001. (in Vietnamese)*.

5.4. Sách chuyên khảo đã xuất bản

- [1]. Võ Văn Hoàng, Mô phỏng trong Vật lý, NXB Đại học Quốc Gia tp.HCM, 2004, 293 trang.
- [2]. Vo Van Hoang, *Structure and dynamics of simulated liquid Al_2O_3 under high pressure* in Horizon Physics: New Research, NovaScience Publishers, NewYork, 2005 edited by V.H. Marcelle
- [3]. Vo Van Hoang, *Dynamical heterogeneities in simulated liquid GeO_2* in Progress in Solid State Physics, NovaScience Publishers, NewYork accepted for publication.

6. ĐÁNH GIÁ VÀ KIẾN NGHỊ

– Đây là hướng nghiên cứu rất có triển vọng và được đồng nghiệp trên thế giới đánh giá cao. Tuy nhiên, điều kiện làm việc của tôi hiện tại là quá thiếu thốn và thiếu máy tính đủ mạnh để tiến hành những nghiên cứu phức tạp hơn. Vì vậy, tôi cần sự trợ giúp về mặt thiết bị tính toán và phối hợp nghiên cứu với các đồng nghiệp.

– Nên đơn giản hóa các thủ tục nghiệm thu đề tài sao cho đơn giản mà hiệu quả. Ví dụ, nếu đề tài khoa học mà đã đăng nhiều bài báo ở nước ngoài rồi thì không cần nghiệm thu mà chỉ cần nộp các bài báo khoa học là đủ.

– Nên lấy tiêu chí là bài báo khoa học đã được đăng trong các tạp chí khoa học quốc tế làm đơn vị để đo hiệu quả hoạt động khoa học và đưa ngay chỉ số impact factor của tạp chí.

COMPUTER SIMULATION OF STRUCTURE AND PHYSICAL PROPERTIES OF LIQUID AND AMORPHOUS MATERIALS

ABSTRACT

Models of liquid and amorphous materials containing 2000-3000 particles have been constructed by molecular dynamics method (e.g. liquid and amorphous Fe-B, Fe-

P, Co-B, Co-P, Ni-B, Ni-P alloys and SiO₂, Al₂O₃, GeO₂) and structure of models agreed well with the experimental data. We have investigated microstructure, composition dependence of microstructure and magnetic properties of amorphous alloys. Concerning on the oxides we have studied microstructure, cooling/heating rate effects, temperature dependence of diffusion constant, activation energy and anomalous diffusion. Furthermore, dynamical heterogeneities, spatial correlations of most mobile and immobile particles, cluster-size distribution of most mobile and immobile particles and pressure-induced phase transition of the systems have been studied and presented.