

SỰ ẢNH HƯỞNG CỦA SỐ HẠT LÊN VI CẤU TRÚC CỦA MÔ HÌNH HẠT Fe

Nguyễn Trọng Dũng¹, Nguyễn Chính Cường¹,
Mai Thị Lan², Nguyễn Văn Hồng² và Phạm Khắc Hùng²

¹*Khoa Vật lý, Trường Đại học Sư phạm Hà Nội*

²*Viện Vật lý Kỹ thuật, Trường Đại học Bách khoa Hà Nội*

Tóm tắt. Vi cấu trúc của mô hình hạt sắt nano, khối sử dụng thể nhúng Sutton-Chen được nghiên cứu và mô phỏng bằng phương pháp động lực học phân tử (MD). Các mô hình hạt sắt nano có dạng hình cầu được khảo sát với số nguyên tử tương ứng 2000 hạt, 3000 hạt, 4000 hạt và 5000 hạt tại nhiệt độ 300 K với điều kiện biên không tuần hoàn. Mô hình hạt sắt khối 3000 hạt cũng được khảo sát ở nhiệt độ 300 K với điều kiện biên tuần hoàn. Các đặc trưng về cấu trúc được phân tích qua hàm phân bố xuyên tâm, mật độ, phân bố số phối trí. Các kết quả cho thấy có sự ảnh hưởng của số hạt lên vi cấu trúc của mô hình, ở các mẫu có số hạt khác nhau thì có đặc trưng cấu trúc của lớp lõi và lớp bề mặt khác nhau.

Từ khóa: Vi cấu trúc, mô hình Fe, mô phỏng.

1. Mở đầu

Trong các lĩnh vực khoa học, công nghệ, vật liệu nano luôn dành được sự quan tâm đặc biệt của các nhà khoa học trong và ngoài nước do chúng có những đặc điểm, tính chất khác biệt so với các vật liệu khối. Nguyên nhân chính dẫn đến sự khác biệt này là do hạt có kích thước nano sẽ chịu ảnh hưởng của các hiệu ứng lượng tử, hiệu ứng bề mặt (hiệu ứng kích thước). Khi kích thước của hạt càng giảm thì diện tích bề mặt tổng cộng càng lớn và hiệu ứng tới hạn sẽ xảy ra khi kích thước của hạt đủ nhỏ để so sánh với các kích thước tới hạn của một số tính chất. Chính vì sự thay đổi lớn về các tính chất của vật liệu dẫn đến sự thu hút, tập trung lớn của các nhà khoa học nhằm nghiên cứu và tạo ra các loại vật liệu mới với các tính năng vượt trội.

Trong quá trình nghiên cứu các loại vật liệu nano từ nói chung, vật liệu Fe vô định hình nói riêng được quan tâm hơn cả vì vật liệu này có rất nhiều ứng dụng trong khoa học và công nghệ. Một khác vật liệu Fe vô định hình là vật liệu giá cân bằng nên chúng

Ngày nhận bài: 3/5/2013, Ngày nhận đăng: 18/6/2013.

Tác giả liên lạc: Nguyễn Trọng Dũng, địa chỉ e-mail: dungntsphn@gmail.com

luôn có xu hướng dịch chuyển về trạng thái cân bằng (tương ứng với cấu trúc tinh thể), khi nung nóng vật liệu đến một nhiệt độ đủ lớn sẽ xuất hiện hiện tượng tinh thể hoá (nhiệt độ tinh thể hoá được xác định là mức độ bền nhiệt của vật liệu). Đã có nhiều công trình nghiên cứu về vật liệu 1c, tuy nhiên, cho đến nay có rất ít nghiên cứu về vi cấu trúc của các hạt nano 1c bằng mô hình MD. Các nghiên cứu chỉ mới dừng lại ở việc xem xét các yếu tố ảnh hưởng như nhiệt độ, áp suất, kích thước hạt. Ngoài ra, kết quả của các nghiên cứu này vẫn chưa ổn định được công nghệ cũng như xác định được các yếu tố ảnh hưởng (nhiệt độ, áp suất, số hạt, thời gian thực hiện, cơ chế khuếch tán...) đến vi cấu trúc của vật liệu [1-5]. Vì thế trong bài báo này chúng tôi trình bày một cách khá chi tiết về sự ảnh hưởng của số hạt lên vi cấu trúc của mô hình bằng phương pháp mô phỏng động lực học phân tử.

2. Nội dung nghiên cứu

2.1. Phương pháp tính toán

Phương pháp Động lực học phân tử (ĐLHPT) là phương pháp được tính toán dựa trên cơ sở của phương trình động lực học ($F = m.a$) của các nguyên (phân) tử. Đối với phương pháp ĐLHPT [9-11] ta có thể theo dõi được sự chuyển động của các nguyên (phân) tử theo thời gian và có thể xác định được các yếu tố ảnh hưởng lên vi cấu trúc của mô hình như: nhiệt độ, áp suất, kích thước hạt... Ngoài ra, trong quá trình mô phỏng việc chọn thể tương tác quyết định đến tính chính xác của kết quả. Chính vì vậy, chúng tôi sử dụng thể tương tác nhúng Sutton-Chen [7, 8].

$$E_{tot} = \sum_{i=1}^N \frac{1}{2} \sum_{j=1, j \neq i}^N \Phi(r_{ij}) + F(\rho_i) \quad \text{với} \quad \Phi(r_{ij}) = \varepsilon \left(\frac{a}{r_{ij}} \right)^n$$

$$F(\rho_i) = -\varepsilon C \sum_{i=1}^N \sqrt{\rho_i}, \quad \rho_i = \sum_{j=1, j \neq i}^N \rho(r_{ij}), \quad \rho(r_{ij}) = \left(\frac{a}{r_{ij}} \right)^m$$

trong đó: r_{ij} là khoảng cách giữa hai nguyên tử thứ i và j , F là lực tương tác hay hàm nhúng, ρ_i là mật độ điện tử thứ i .

Bảng 1. Các giá trị tham số của mô hình

ε (eV)	a (Å)	N	m	C	R_{cutoff} (Å)
0.017306	3.471392	8.137381	4.7877	24.9390	10

Để xác định chính xác kết quả, ngoài việc lựa chọn thể tương tác thích hợp thì vấn đề quan trọng không kém là phải chọn điều kiện biên phù hợp. Biên tự do (biên có vùng bao quanh không gian là chân không) áp dụng đối với mô hình nano và biên tuần hoàn (là vùng biên mà những nguyên tử tương tác với những nguyên tử cực bên phải, bên trái, trên, dưới, trước và sau không gian tính toán) đối với mô hình khối và thường được sử dụng đối với các hệ lớn. Ngày nay với sự trợ giúp của khoa học máy tính, sự ra đời của các loại máy tính có tốc độ tính toán cao và dung lượng bộ nhớ lớn dẫn đến kích thước mô hình của vật liệu được tăng lên đáng kể [12, 13].

Trên cơ sở khảo sát các yếu tố ảnh hưởng đến vi cấu của mô hình chúng tôi chọn phương pháp DLHPT, thể nhúng và điều kiện biên thích hợp ở nhiệt độ 300 K để nghiên cứu vi cấu trúc của hạt Fe.

2.2. Kết quả và thảo luận

Các mẫu nano 2000 hạt, 3000 hạt, 4000 hạt, 5000 hạt dùng điều kiện biên không tuần hoàn còn mẫu khối 3000 hạt dùng điều kiện biên tuần hoàn bằng phương pháp động lực học phân tử với thể nhúng Sutton-Chen. Các mẫu được thực hiện ở nhiệt độ 300 K với ổn định nhiệt 50.000 bước, hồi phục với 1.000.000 bước cho đến khi hệ đạt trạng thái cân bằng, các kết quả phân tích vi cấu trúc được trình bày trong Bảng 2.

Bảng 2. Kết quả hàm phân bố xuyên tâm của Fe ở 300 K

Mẫu	r_1	r_2	r_3	r_4	r_5	$g(r_1)$	$g(r_2)$	$g(r_3)$	$g(r_4)$	$g(r_5)$
Nano 2000	2.55	4.6	6.80	8.95	11.15	3.8123	1.4432	1.2740	1.1674	1.1048
Nano 3000	2.55	4.6	6.75	8.90	11.15	3.9807	1.4711	1.3026	1.1968	1.129
Nano 4000	2.55	4.6	6.75	8.95	11.05	3.8924	1.4418	1.2875	1.1793	1.1138
Nano 5000	2.55	4.6	6.75	8.95	11.1	3.7993	1.4406	1.2734	1.1634	1.0982
Khối 3000	2.55	4.65	6.85	9.1	11.35	3.6230	1.3780	1.2730	1.132	1.073
Thực nghiệm	2.56	4.27	5.01	6.58	8.54	3.31	1.51	1.18	1.24	1.06

Qua quan sát Bảng 2 ta thấy đối với mẫu khối, mẫu nano không có trật tự xa, luôn tồn tại trật tự gần với đỉnh hàm phân bố xuyên tâm thứ nhất chiếm ưu thế. Khi ta tăng nhiệt độ mẫu, các vị trí đỉnh tiến ra xa và thay đổi nhiều so với kết quả thực nghiệm, còn cường độ đỉnh giảm dần về 1 chứng tỏ khoảng cách nội phân tử của các phân tử trong trật tự gần không phụ thuộc vào số hạt. Những điều đó khẳng định việc xây dựng mô hình hạt nano và mẫu khối của hệ khá thành công. Tuy nhiên, cường độ đỉnh của hàm phân bố xuyên tâm thứ nhất của mẫu khối và nano có sự thay đổi đáng kể như: Cường độ đỉnh hàm phân bố xuyên tâm của mẫu nano cao hơn cường độ đỉnh hàm phân bố xuyên tâm của mẫu khối, khi tăng số hạt cường độ đỉnh của hàm phân bố xuyên tâm của mẫu nano giảm chứng tỏ có sự ảnh hưởng của số hạt lên tính không đồng nhất về mặt cấu trúc trong mô hình.

Để khẳng định sự ảnh hưởng của số hạt lên tính không đồng nhất của mô hình, chúng tôi tiến hành phân tích các giá trị của mẫu nano: mật độ, số phối trí trung bình, thế năng trung bình, động năng trung bình, năng lượng trung bình được thể hiện ở Bảng 3.

Bảng 3. Kết quả phân tích mẫu nano (3000, 4000, 5000) hạt

Mẫu	ρ	Z_{TB}	U_{TB}	K_{TB}	E_{TB}
Nano 2000	0.076583	11.4709	-2.22589	0.040319	-2.18557
Nano 3000	0.072772	11.70984	-2.24837	0.040332	-2.20804
Nano 4000	0.073021	11.88911	-2.26392	0.041267	-2.22266
Nano 5000	0.07517	11.99042	-2.27335	0.040722	-2.23262

Kết quả trong Bảng 3 cho thấy khi tăng số hạt trong mô hình sẽ dẫn đến mật độ các nguyên tử (phần) tử trong mẫu tăng làm tăng số phối trí trung bình trong mẫu, thế năng trung bình giảm, động năng trung bình thay đổi không đáng kể dẫn đến năng lượng trung bình của mẫu giảm. Kết quả trên có thể giải thích rằng khi tăng số hạt làm cho mật độ các nguyên tử tăng dẫn đến sự va chạm giữa các nguyên tử trong mẫu tăng và khoảng cách giữa các nguyên tử giảm.

Kết quả trên cho thấy sự ảnh hưởng của số hạt lên vi cấu trúc của mô hình thể hiện rõ qua số phối trí. Để nghiên cứu cụ thể hơn chúng tôi khảo sát số phối trí của mẫu nano ở 300 K (Bảng 4).

Bảng 4. Bảng số liệu số phối trí của mẫu nano ở 300 K

Lớp bề mặt	Số phối trí của mẫu ở lớp bề mặt						
	5	6	7	8	9	10	
Nano 2000 hạt	0.0000	0.0129	0.0345	0.0633	0.0799	0.0613	
Nano 3000 hạt	0.0006	0.0082	0.0232	0.0593	0.0780	0.0536	
Nano 4000 hạt	0.0008	0.0075	0.0205	0.0501	0.0728	0.0541	
Nano 5000 hạt	0.0004	0.0047	0.0196	0.0484	0.0671	0.0506	
Lớp lõi	Số phối trí của mẫu ở lớp lõi						
	11	12	13	14	15	16	17
Nano 2000 hạt	0.044	0.1061	0.2666	0.2503	0.0731	0.0070	0.0002
Nano 3000 hạt	0.0381	0.1092	0.2890	0.2606	0.0725	0.0073	0.0002
Nano 4000 hạt	0.0352	0.1106	0.2981	0.2649	0.0770	0.0080	0.0003
Nano 5000 hạt	0.0322	0.1130	0.3055	0.2722	0.0780	0.0081	0.0003

Kết quả ở Bảng 4 cho thấy có sự khác biệt khá lớn giữa số phối trí ở lớp bề mặt và số phối trí ở lớp lõi. Trong đó số phối trí ở lớp bề mặt luôn nhỏ hơn số phối trí lớp lõi do các nguyên tử lớp bề mặt không có đủ các số phối trí như các nguyên tử nằm trong lớp lõi.

Điều đó khẳng định, khi tăng số hạt dẫn đến mật độ các nguyên tử (phần tử) trong lớp lõi, nó tăng dẫn đến số phối trí tăng, cường độ đỉnh của hàm phân bố xuyên tâm thứ nhất giảm, nguyên nhân chủ yếu của hiện tượng này là do hiệu ứng kích thước gây ra.

3. Kết luận

Nghiên cứu sự ảnh hưởng số hạt lên vi cấu trúc của hạt Fe bằng phương pháp mô phỏng động lực học phân tử được tiến hành thông qua 04 mẫu nano (2000, 3000, 4000 và 5000) hạt, 01 mẫu khối 3000 hạt ở nhiệt độ 300 K cho kết quả:

- Mô hình hạt Fe được xây dựng bằng mô hình động lực học phân tử với thế nhúng Sutton-Chen và các điều kiện biên thích hợp đã cho kết quả phù hợp với thực nghiệm và những tính toán trước đó của các nhóm nghiên cứu khác.

- Xác định được hình dạng các nguyên tử trong mô hình nano, khối có dạng hình cầu và được liên kết với nhau bởi đám mây điện tử.

- Xác định được sự ảnh hưởng của số hạt lên vi cấu trúc của mô hình là do số hạt tăng dẫn đến mật độ số hạt tăng làm tăng số phối trí ở cả lớp bề mặt và lớp lõi.

- Cấu trúc chủ yếu trong mô hình là các nguyên tử Fe tập trung chủ yếu trong lớp lõi của mô hình còn lớp vỏ tập trung ít hơn dẫn đến sự khác biệt về mật vi cấu trúc của mô hình.

- Nguyên nhân chính dẫn đến sự khác biệt này là do hiệu ứng kích thước, khi số hạt tăng dẫn đến mật độ các nguyên (phân) tử tăng làm tăng số phối trí lớp vỏ, lõi dẫn đến kích thước mô hình tăng.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

- [1] J. Zhang, K. Sasaki, F. Sutter, R.R. Adzic, 2007. Science 315, 220.
- [2] Y. Qi, T. Cagin, W.L. Johnson, W.A. Goddard, 2001. J. Chem. Phys. 115, 385.
- [3] S.K.R.S. Sankaranarayanan, V.R. Bhethanabotla, B. Joseph, 2005. Phys. Rev. B 71, 195415.
- [4] A. B. Belonoshko, R. Ahuja, and B. Johansson, 2000. Phys. Rev. Lett. 84, 3638.
- [5] Hamed Akburzadch, Gholam Abbas Parsafar, 2009. Fluid Phase Equilibria, 280.
- [6] Yuhua Wen, Hui Fang, ZiZhong Zhu, Shigang Sun, 2009. Physics Letter A. 373.
- [7] Sutton, A. P., and Chen, J., 1990. Philos. Mag. Lett., 61, 139.
- [8] K. Ratzke, A. Heesemann, F., 1995. J. Phys. Condens. Matter 7, 7663.
- [9] M. Sprik, 1995. *Molecular dynamics simulation in statistical mechanics and materials science*. Workshop on Computational Methods in Materials Science and Engineering 12-23 June, Trieste, Italy.
- [10] Vo Van Hoang and Suhk Kun Oh, 2005. Physica B 364, pp. 225-232.
- [11] Vo Van Hoang, 2004. Physical Review B 70, pp. 134204-134213.
- [12] P. Kizler, P. Lamparter and S. Steeb, 1989. Physica B: Condensed Matter 158, pp. 411-412.
- [13] O. Mishima, K. Takemura, and K. Aoki, 1991. Science 254, pp. 406-408.

ABSTRACT

The influence of the number of particles on the fe particle model's micro-structure

The micro-structure of an iron-nano particle model and the embedded Sutton-Chen block was studied and simulated using the molecular dynamics method (MD). The spherical iron - nano particle models with the number of atoms respectively at 2000 particles, 3000 particles, 4000 particles and 5000 particles was examined at 300 degrees K in the aperiodic boundary condition. The iron block model with 300 particles was also examined at 300 degrees K in the periodic boundary condition. Features of the structure were analyzed to determine radial distribution function, density, distribution of coordination number. The results showed that the number of particles influences the microstructure of the model in the way that models with different number of particles will have different features in their core structure and surface structure.