

NGHIÊN CỨU CẤU TRÚC VÀ CƠ CHẾ KHUẾCH TÁN TRONG HỢP KIM Fe-P VÔ ĐỊNH HÌNH

• Phạm Hữu Kiên (*), Nguyễn Thị Kim Thu (**)
Duong Thị Hà (**), Nguyễn Thị Phương Thanh (**)

TÓM TẮT

Cấu trúc và cơ chế khuếch tán của hợp kim Fe-P vô định hình (VDH) đã được mô phỏng bằng phương pháp thống kê hồi phục (TKHP). Ba mô hình vật liệu $Fe_{80}P_{20}$ VDH được xây dựng với mật độ là mật độ của mẫu vật liệu thực có cấu trúc phù hợp tốt với dữ liệu thực nghiệm. Kết quả mô phỏng cho thấy khi tăng mức độ hồi phục (giảm năng lượng của hệ), hàm phân bố xuyên tâm (HPBXT) của các mô hình $Fe_{80}P_{20}$ VDH thay đổi không đáng kể. Tuy nhiên số lượng các đơn vị cấu trúc (ĐVCT) và số lượng bong bóng (BB) vì mô giảm mạnh theo sự hồi phục. Kết quả này chỉ ra rằng, khi hệ được hồi phục thì hệ số khuếch tán (HSKT) của các nguyên tử giảm, HSKT giảm được cho là do sự giảm số lượng BB.

Từ khóa: Đơn vị cấu trúc; Vô định hình; Cơ chế khuếch tán; Hệ số khuếch tán; Bong bóng; Thống kê hồi phục.

1. Đặt vấn đề

Hợp kim VDH có tầm quan trọng trong thực tế, trong ứng dụng công nghệ các vật liệu này thường được sử dụng như các hệ đa thành phần. Kim loại thủy tinh có thể được rất mỏng nhưng vẫn đảm bảo tính ứng suất cao và độ bền, độ dẻo rất tốt. Điện trở suất rất lớn và hầu như không phụ thuộc vào nhiệt độ. Hơn nữa, hợp kim từ VDH có đặc trưng bởi các tính chất từ mềm rất tốt và thường được dùng làm vật liệu hoạt động trong từ trường ngoài, ví dụ như lõi biến thế, lõi nam châm điện, các lõi dẫn từ, cuộn chặn, cảm biến đo từ trường [1-4]. Vì vậy sự hiểu biết về cấu trúc cũng như một số tính chất của các loại vật liệu này là rất cần thiết và quan trọng. Mặc dù đã được tập trung nghiên cứu trong nhiều năm trở lại đây, tuy nhiên các nghiên cứu về cơ chế khuếch tán trong vật liệu VDH vẫn chưa được giải thích một cách thỏa đáng và còn nhiều vấn đề đang tranh cãi. Do Fe-P VDH không có trật tự xa nên quá trình khuếch tán trong vật liệu này là rất khác biệt so với sự khuếch tán trong vật liệu tinh thể [4-7]. Trong công trình [3,4], chúng tôi đã đề xuất cơ chế khuếch tán vỡ BB và xác định được HSKT trong Co và Fe-B VDH. Mục đích chính của bài báo này là chỉ ra sự khác nhau về cấu trúc và HSKT nguyên tử trong hệ $Fe_{80}P_{20}$ VDH khi năng lượng và mật độ khác nhau.

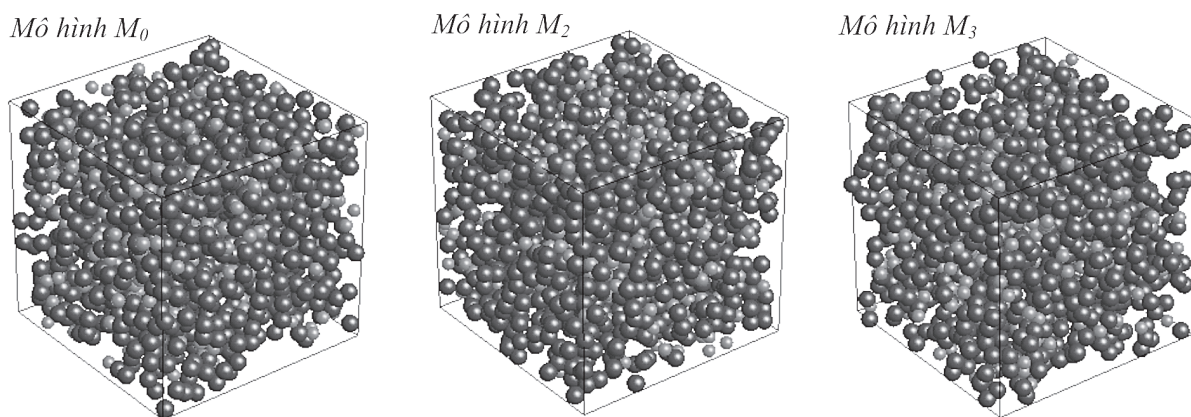
(*) TS. Khoa Vật lý, Trường Đại học Sư phạm - Đại học Thái Nguyên

(**) SV K45. Khoa Vật lý, Trường Đại học Sư phạm - Đại học Thái Nguyên

2. Giải quyết vấn đề

Phương pháp TKHP đã được sử dụng để xây dựng ba mô hình Fe-P VDH chứa 50 000 nguyên tử với thể tương tác cặp Pak-Doyama [4,5]. Cấu hình ban đầu của mô hình nhận được bằng cách gieo ngẫu nhiên tất cả các nguyên tử trong hộp lập phương có kích thước phù hợp với mật độ thực của vật liệu ($7,128\text{g/cm}^3$).

Cấu hình trên được chúng tôi lắc mạnh để phá vỡ trạng thái ban đầu và hồi phục sau 10^6 bước mô phỏng để tạo ra các trạng thái cân bằng của hệ, bước mô phỏng $dr = 0.01\text{Å}$, mô hình dựng được gọi là mô hình M_0 . Mô hình M_2 được dựng bằng cách giảm năng lượng mô hình M_0 đến trạng thái hồi phục tốt hơn bằng cách lắc các mô hình M_0 sau 100 bước mô phỏng, $dr = 0.4\text{Å}$ và tiếp tục hồi phục hệ trên 100 000 bước mô phỏng, $dr = 0.01\text{Å}$ để tạo ra các trạng thái cân bằng mới cho hệ. Mô hình M_3 được xây dựng tương tự mô hình M_2 nhưng có mật độ khối lượng lớn hơn 1,1% so với mô hình M_2 hoặc M_0 . Để chỉ ra cấu trúc và HSKT khác nhau, các ĐVCT và BB vi mô được xác định như trong các công trình [4,5]. Vị trí của các nguyên tử Fe và P trong các mô hình M_0 , M_2 và M_3 được mô tả như thấy trên hình 1.



Hình 1. Mô tả vị trí nguyên tử trong các mô hình xây dựng: Các quả cầu màu xanh và đỏ lần lượt là nguyên tử Fe và P.

3. Kết quả nghiên cứu và bình luận

Bảng 1 cho thấy vị trí, độ cao đỉnh thứ nhất của HPBXT cặp và số phối trí (SPT) trung bình trong ba mô hình xây dựng hầu như thay đổi không đáng kể khi giảm năng lượng (mô hình M_0 và M_2) và tăng mật độ (mô hình M_2 và M_3). Như thấy trong bảng 1, kết quả mô phỏng của chúng tôi phù hợp tốt với dữ liệu thực nghiệm trong công trình [6] và kết quả mô phỏng trong nghiên cứu [7]. Kết quả này cho phép sử dụng các mô hình xây dựng để nghiên cứu cấu trúc và một số tính chất vật lý trên hệ $\text{Fe}_{80}\text{P}_{20}$ VDH.

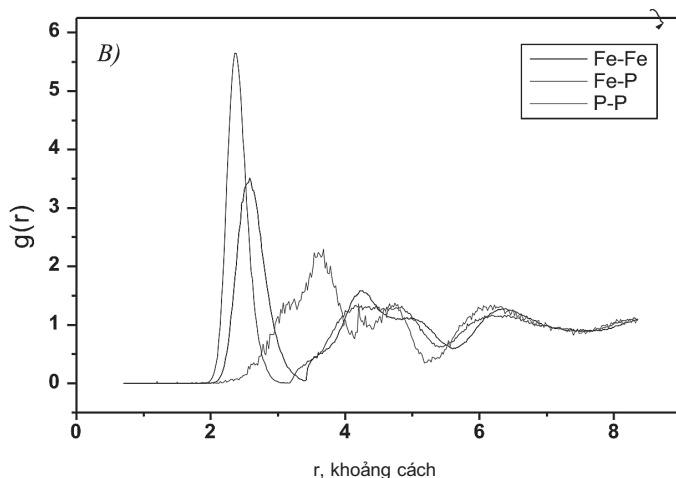
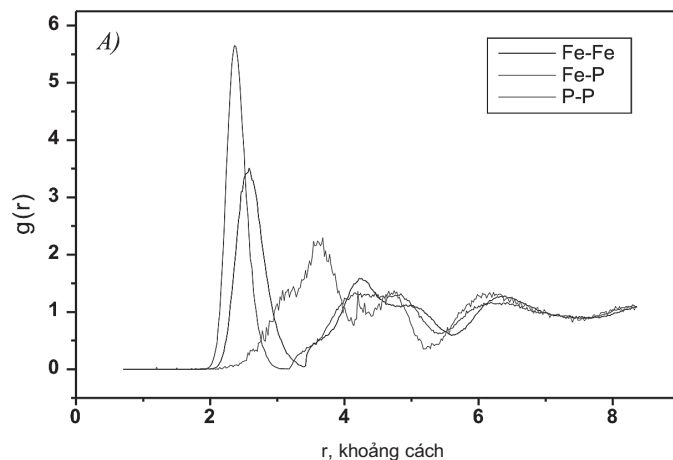
Bảng 1. Đặc trưng cấu trúc của mô hình $\text{Fe}_{80}\text{P}_{20}$: r_{ij} , g_{ij} - vị trí và độ cao các đỉnh thứ nhất của HPBXT; Z_{ij} - số phối trí trung bình; 1-1: cặp Fe-Fe; 1-2: cặp Fe-P; 2-1: cặp P-Fe; 2-2: cặp P-P.

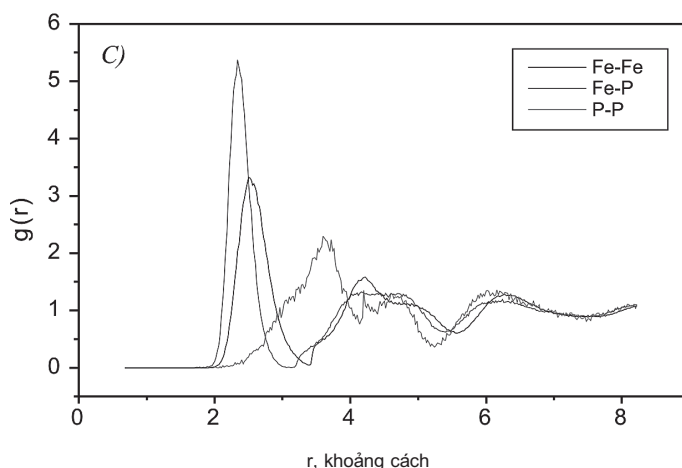
Mô hình	$r_{ij}, \text{Å}$			$g_{ij}(r)$			Z_{ij}			
	1-1	1-2	2-2	1-1	1-2	2-2	1-1	1-2	2-1	2-2
M ₀	2.56	2.38	3.62	3.64	5.91	2.36	10.51	2.50	10.00	3.53
M ₂	2.58	2.36	3.60	3.51	5.65	2.16	10.52	2.52	10.09	3.50
M ₃	2.50	2.34	3.60	3.32	5.37	2.08	10.86	2.61	10.43	3.75
Fe ₈₀ P ₂₀ ^a	2.61	2.38	3.50	–	–	–	10.40	2.60	8.10	3.50
Fe ₈₀ P ₂₀ ^b	2.36	2.18	–	–	–	–	10.10	2.60	8.60	–

a là số liệu thực nghiệm [6], b là số liệu mô phỏng trong [7]

Bảng 2. Số đơn vị cấu trúc (ĐVCT) trong mô hình Fe-P VĐH

Mô hình	Năng lượng trung bình của hệ, eV	Số nguyên tử bao quanh một ĐVCT, n_B				
		5	6	7	8	≥ 9
M ₀	-1.65428	59195	14557	1618	283	6
M ₂	-1.66916	57179	14131	1610	249	2
M ₃	-1.69270	49698	12004	885	120	5





Hình 2. Hàm phân bố xuyên tâm cặp của mô hình xây dựng; A, B và C lần lượt là các mô hình M_0 , M_2 và M_3 .

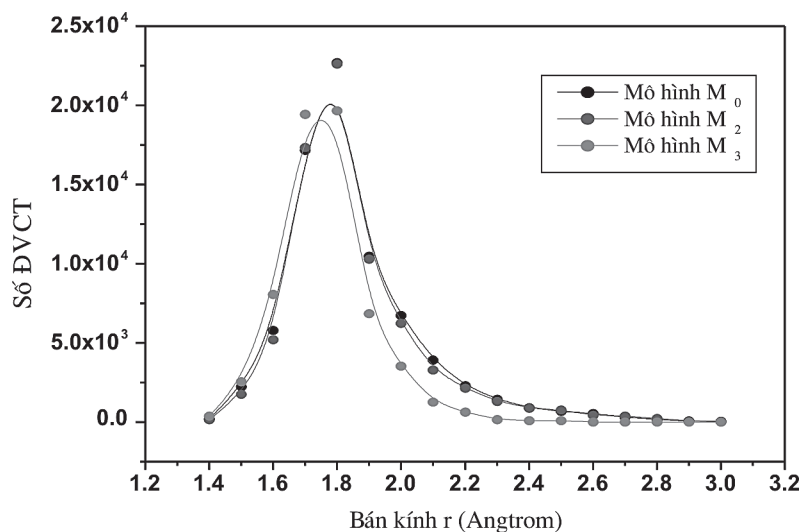
Hình 1 cho thấy vị trí và độ cao của đỉnh thứ nhất HPBXT cặp trong ba mô hình thay đổi không đáng kể theo mật độ và mức độ hồi phục. HPBXT cặp xuất hiện sự tách thành 2 đỉnh nhỏ ở cực đại thứ hai, đỉnh nhỏ bên trái cao hơn đỉnh nhỏ bên phải. Sự tách đỉnh này thường được giải thích là do có sự liên quan đến các khối đa mặt trong các kim loại VĐH. Kết quả này chứng tỏ rằng nếu chỉ dựa vào HPBXT thì rất khó phân biệt được cấu trúc khác nhau của $Fe_{80}P_{20}$ VĐH có mật độ và mức độ hồi phục khác nhau. Bảng 2 cho ta thấy số nguyên tử bao quanh một ĐVCT giảm dần và số ĐVCT-5, -6, -7, -8 và -9 giảm dần theo sự giảm năng lượng từ -1.65428 đến -1.69270 eV. Kết quả này cũng được thể hiện như thấy trong bảng 3 (hoặc hình 3).

Bảng 3. Phân bố bán kính của các ĐVCT

$R_B, \text{Å}$	1.4	1.5	1.6	1.7	1.8	1.9	2.0	2.1	2.2	2.3	2.4	2.5	≥ 2.6
M_0	210	2232	5797	17153	22696	10466	6741	3921	2292	1445	912	670	545
M_2	153	1752	5204	17346	22623	10299	6250	3294	2139	1303	873	771	428
M_3	384	2544	8057	19436	19656	6844	3529	1261	638	167	87	89	11

Bảng 4. Số BB và khoảng cách dịch chuyển bình phương trung bình của nguyên tử khuếch tán. Ở đây $\langle x_{Co}^2 \rangle$ và $\langle x_B^2 \rangle$ lần lượt là khoảng cách dịch chuyển bình phương trung bình của nguyên Fe và P khi nhảy vào BB; n_{Fe-BB} , n_{P-BB} lần lượt là số BB loại Fe và P.

Mô hình	n_{Fe-BB}	n_{P-BB}	Nguyên tử khuếch tán Fe		Nguyên tử khuếch tán P	
			$\langle x_{Co}^2 \rangle (\text{Å}^2)$	$\langle x_B^2 \rangle (\text{Å}^2)$	$\langle x_{Co}^2 \rangle (\text{Å}^2)$	$\langle x_B^2 \rangle (\text{Å}^2)$
M_0	4754	1421	6175	10.61	4.816	5.132
M_2	4308	1287	5595	7.806	2.295	2.679
M_3	934	475	1409	7.572	2.803	3.558



Hình 3. Phân bố số lượng ĐVCT theo bán kính của chúng.

Bảng 3 cho thấy một số lượng đáng kể ĐVCT với bán kính $> 1,8\text{\AA}$ (cỡ kích thước nguyên tử), số ĐVCT này giảm dần theo bán kính và mức độ hồi phục, mật độ. Phân tích bảng 2 và 3 cho thấy có thể phân biệt cấu trúc của $\text{Fe}_{80}\text{P}_{20}$ VĐH với năng lượng khác nhau thông qua việc thống kê các ĐVCT theo số nguyên tử bao quanh và bán kính của chúng. Về mặt vật lí có thể thấy, hệ có mật độ cao, hồi phục tốt (năng lượng thấp) thì số ĐVCT có bán kính ($< 1,7\text{\AA}$) và số nguyên tử bao quanh nhỏ (5 hoặc 6) tăng lên, trái lại số ĐVCT có bán kính và số nguyên tử bao quanh lớn sẽ giảm đi.

Theo [3], HSKT phụ thuộc vào khoảng cách dịch chuyển bình phương của nguyên tử. Tính toán như trong [4,5], chúng tôi thống kê được khoảng cách dịch chuyển bình phương trung bình và số BB của nguyên tử Fe và P (xem bảng 4). Phân tích tương tự như trong công trình [4,5], mô phỏng trong nghiên cứu này cho rằng HSKT của nguyên tử Fe và P trong Fe-P VĐH giảm khi tăng mật độ và mức độ hồi phục là do số BB giảm. Kết quả thu được phù hợp với thực tế, vì khi hệ càng bền vững thì sự dịch chuyển của nguyên tử trong hệ sẽ càng trở lên khó hơn.

4. Kết luận

Cấu trúc và cơ chế khuếch tán của hợp kim Fe-P VĐH chứa 50 000 nguyên tử đã được nghiên cứu bằng phương pháp mô phỏng thống kê hồi phục. Kết quả mô phỏng cho thấy, cấu trúc của $\text{Fe}_{80}\text{P}_{20}$ VĐH thay đổi không đáng kể theo mức độ hồi phục. Tuy nhiên, số lượng các ĐVCT và BB vi mô giảm mạnh khi giảm năng lượng hoặc mật độ của hệ. Kết quả này đã giúp chúng tôi chỉ ra rằng, cấu trúc khác nhau của các mô hình $\text{Fe}_{80}\text{P}_{20}$ VĐH được phân biệt bởi số lượng các ĐVCT trong hệ và HSKT của nguyên tử giảm khi hồi phục là do số lượng BB vi mô giảm theo mức độ hồi phục.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

- [1]. Buschow K.H.J, de Boer F.R. (2004), *Physics of Magnetism and Magnetic Materials* Kluwer Academic/Plenum Publishers, ISBN 0-306-48408-0.
- [2]. D.C. Jiles (2003), *Recent advances and future directions in magnetic materials*, Acta Materialia 51, 5907.
- [3]. N.elliaz, D.fuks and D.Eliezeran (1999), *A new model for the diffusion behavior of hydrogen in metallic glasses*, Acta mater, Vol.47, No.10, 2981-2989.
- [4]. P.H. Kien, H.V. Hue, and P.K. Hung (2012), *Study of Tracer Diffusion Mechanism in Amorphous Metal*, Hindawi Publishing Corporation, Journal of Metallurgy, Volume 2012, Article ID 517230, 6 pages.
- [5]. P.H. Kien, P.K. Hung and V.V. Hung (2010), *The boron atom concentration dependence of the microscopic bubbles for amorphous alloy Fe_xB_{100-x} : Computer simulation*, Journal of science and technology of TNU 68(6), 50-55.
- [6]. M. L. Fdez-Gubieda et al. (1995), *EXAFS study of compositional dependence of short range order in amorphous FeP electrodeposited alloys*, Physica B 208-209, 363-364.
- [7]. Vo Van Hoang (2004), *Computer simulation of the effects of B and P concentrations on microstructure in amorphous Fe-B and Fe-P alloys*, Physica B 348, 347-352.

ABSTRACT**STUDYING STRUCTURAL AND DIFFUSION MECHANISM IN AMORPHOUS Fe-P ALLOY**

Structural and diffusion mechanism in amorphous Fe-P alloy has been studied with the use of the relaxation statistic method. Three obtained Fe₈₀P₂₀ models with mass density of the real amorphous Fe₈₀P₂₀ samples are very close to the experimental data. The result showed that the radial distribution function of amorphous Fe₈₀P₂₀ models changed slightly as the relaxation increased. However, the number of the structural components and microscopic bubbles decreased sharply as the relaxation fell. This result indicated that if the relaxation occurs, the atom diffusion co-efficient will decrease because of a decrease in bubbles.

Key words: Structural components, amorphous, diffusion mechanism, diffusion co-efficient, bubbles, relaxation statistics.