

NGHIÊN CỨU SỰ ẢNH HƯỞNG CỦA SỐ NGUYÊN TỬ LÊN VI CẤU TRÚC CỦA MẪU FeNi BẰNG PHƯƠNG PHÁP ĐỘNG LỰC HỌC PHÂN TỬ

• Nguyễn Trọng Dũng^(*), Cáp Kim Hoàng^(**), Nguyễn Chính Cường^(*)

Tóm tắt

Bài báo này nghiên cứu sự ảnh hưởng của số nguyên tử lên vi cấu trúc của FeNi khối và hạt nano FeNi bằng phương pháp động lực học phân tử (MD) với thế tương tác nhúng Sutton-Chen, điều kiện biên phù hợp. Các đặc trưng vi cấu trúc được phân tích qua hàm phân bố xuyên tâm (RDF), năng lượng, kích thước, phương pháp phân tích lân cận chung (CNA) cho kết quả phù hợp với thực nghiệm. Các kết quả của các mẫu ở nhiệt độ 300 K luôn tồn tại các đơn vị cấu trúc: FCC, HCP, ICO và Amor.

Từ khóa: Số nguyên tử, vi cấu trúc, FeNi khối, hạt nano FeNi, động lực học phân tử.

1. Mở đầu

Trong những năm gần đây, các loại hợp kim Fe-Co, FePt [7], Fe-Cr [9]... nhận được sự quan tâm ngày càng nhiều của các nhà nghiên cứu trong và ngoài nước. Trong đó, hợp kim FeNi là vật liệu từ mềm có độ từ hóa bão hòa, độ từ thẩm cao... [6] được tồn tại nhiều trong thiên thạch của Trái đất và ứng dụng trong các ngành khoa học kỹ thuật, y sinh... Hiện nay, hợp kim FeNi được nghiên cứu bằng nhiều phương pháp khác nhau: Lý thuyết, thực nghiệm [5] và mô phỏng. Phương pháp mô phỏng được coi là phương pháp có nhiều ưu việt: Giảm giá thành nghiên cứu, kết quả nghiên cứu có thể được quan sát ở cấp độ vi mô đến từng nguyên tử... Trong nghiên cứu, sử dụng phương pháp mô phỏng động lực học phân tử với thế tương tác nhúng Sutton-Chen (EAM) được thực hiện bởi Daw và Baskes với các thông số được tối ưu hóa bởi Meyer và Entel nhằm nghiên cứu các đặc trưng vi cấu trúc của hợp kim FeNi [3]. Với các kết quả thu được không những cung cấp những hiểu biết mới về hợp kim FeNi mà còn khẳng định: Khi tăng số nguyên tử trong hợp kim dẫn đến mật độ các nguyên tử tăng và làm xuất hiện hiện tượng kết tinh khi hạ nhiệt độ. Tuy nhiên, sự hiểu biết về quá trình hình thành vi cấu trúc ở trạng thái vô định hình và trạng thái kết tinh của hợp kim FeNi còn nhiều hạn chế, chưa có sự thống nhất cho nên trong nội dung bài báo này chúng tôi chỉ tập trung nghiên cứu sự ảnh hưởng của số nguyên tử lên vi cấu trúc của mẫu FeNi (FeNi khối, hạt nano FeNi) bằng phương pháp động lực học phân tử với thế tương

tác nhúng Sutton-Chen và điều kiện biên tuần hoàn (FeNi khối), biên tự do (hạt nano FeNi) (phần 2). Các kết quả thu được có sự so sánh với các kết quả thực nghiệm, mô phỏng có liên quan (phần 3). Cuối cùng chúng tôi rút ra các kết luận (phần 4).

2. Phương pháp nghiên cứu

Ban đầu với các mẫu FeNi 5324 nguyên tử, 6912 nguyên tử và 8788 nguyên tử được gieo ngẫu nhiên trong khối hộp hình lập phương với điều kiện biên tuần hoàn (FeNi khối) và hạt nano FeNi được gieo ngẫu nhiên trong khối hình cầu với điều kiện biên tự do bằng phương pháp động lực học phân tử (MD) [4] và thế tương tác nhúng Sutton-Chen (1) [1], [8].

$$E_{tot} = \sum_{i=1}^N \frac{1}{2} \sum_{j=1, j \neq i}^N \Phi(r_{ij}) + F(\rho_i) \quad (1)$$

$$\Phi(r_{ij}) = \varepsilon \left(\frac{a}{r_{ij}} \right)^n,$$

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

$$F(\rho_i) = -\varepsilon C \sum_{i=1}^N \sqrt{\rho_i}.$$

Trong đó, các tham số của mẫu FeNi thể hiện ở Bảng 1.

Bảng 1. Các tham số của mẫu FeNi

Mẫu	ε ($\cdot 10^{-2}$ eV)	a (Å)	n	m	C	r_c (Å)
Fe	1,730	3,471	8,137	4,787	24,939	3,35
Ni	0,271	3,520	10	5	84,745	3,0
FeNi	0,684	3,495	9,068	4,893	45,972	3,175

^(*) Trường Đại học Sư phạm Hà Nội.

^(**) Trường Cao đẳng Sư phạm Quảng Trị.

Với: r_{ij} là khoảng cách giữa hai nguyên tử i, j ; a là hằng số mạng; ρ_i là mật độ nguyên tử i ; E_{tot} là năng lượng của hệ; $\Phi(r_{ij})$ là năng lượng giữa hai nguyên tử i, j ; $F(\rho_i)$ là lực tương tác của nguyên tử i ; r_c là bán kính ngắt; ϵ là năng lượng; C, m, n, N là các hằng số của mẫu.

Với các tham số được xác định:

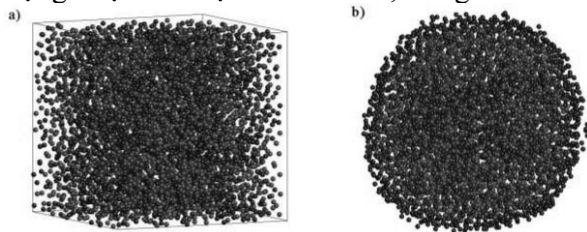
$$\epsilon_{FeNi} = \sqrt{\epsilon_{Fe} \cdot \epsilon_{Ni}}; a_{FeNi} = \frac{(a_{Fe} + a_{Ni})}{2}; n_{FeNi} = \frac{(n_{Fe} + n_{Ni})}{2};$$

$$m_{FeNi} = \frac{(m_{Fe} + m_{Ni})}{2}; C_{FeNi} = \sqrt{C_{Fe} \cdot C_{Ni}}; r_{cFeNi} = \frac{(r_{cFe} + r_{cNi})}{2}.$$

Sau đó, tất cả các mẫu FeNi được tăng nhiệt độ từ 0 K lên 2500 K với tốc độ gia nhiệt $\frac{\Delta T}{\Delta t} = 4.10^{12} K/s$ để phá vỡ cấu trúc ở trạng thái ban đầu chuyển sang trạng thái lỏng. Ở trạng thái lỏng 2500 K, hạ nhiệt độ xuống 300 K với cùng tốc độ gia nhiệt $4.10^{12} K/s$ để tất cả các mẫu FeNi được chuyển từ trạng thái lỏng sang trạng thái tinh thể mới. Tất cả các mẫu FeNi thu được được phân tích qua hàm phân bố xuyên tâm (PRDF), năng lượng, kích thước, phân tích lân cận chung (CNA) [10]. Các kết quả thu được cho thấy có sự ảnh hưởng của số nguyên tử lên vi cấu trúc của mẫu FeNi.

3. Kết quả và thảo luận

Tất cả các mẫu FeNi được tiến hành với cùng một điều kiện: Nhiệt độ, áp suất, tốc độ gia nhiệt... Kết quả hình dạng, kích thước và năng lượng được thể hiện trên Hình 1, Bảng 2.

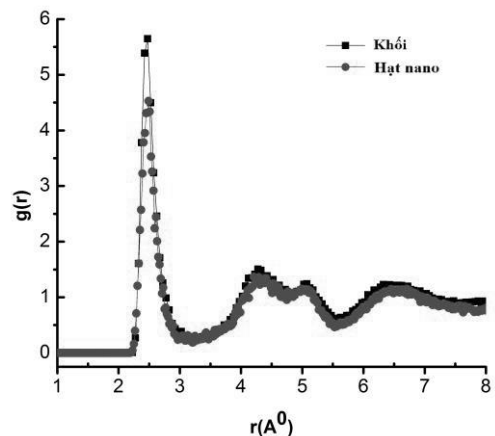


Hình 1. Hình dạng FeNi khối (Hình a), hạt nano FeNi (Hình b) với 5324 nguyên tử

Bảng 2. Kích thước, năng lượng của FeNi khối và hạt nano FeNi với số nguyên tử khác nhau

FeNi	Khối (nguyên tử)			Hạt nano (nguyên tử)		
	5324	6912	8788	5324	6912	8788
Kích thước D (nm)	7,55	8,23	8,92	14,53	15,85	17,17
Năng lượng E_{tot} (eV)	-8212,48	-10646,08	-13561,06	-7656,83	-9985,11	-12774,99

Các kết quả cho thấy FeNi khối 5324 nguyên tử có dạng hình lập phương (Hình 1a), kích thước $D = 7,55$ nm và tổng năng lượng $E_{tot} = -8212,48$ eV. Hạt nano FeNi 5324 nguyên tử có dạng hình cầu (Hình 1b), kích thước $D = 14,53$ nm và tổng năng lượng $E_{tot} = -7656,83$ eV. Mẫu FeNi tồn tại hai loại nguyên tử: nguyên tử Ni (màu xanh xẫm), nguyên tử Fe (màu đỏ), các nguyên tử được phân bố đồng đều. Khi tăng số nguyên tử trong FeNi khối từ 5324 nguyên tử lên 6912 nguyên tử và 8788 nguyên tử thì D tăng từ 7,55 nm lên 8,23 nm; 8,92 nm và E_{tot} tăng từ -8212,48 eV lên -10646,08 eV; -13561,06 eV. Tương tự, với hạt nano FeNi tăng từ 5324 nguyên tử lên 6912 nguyên tử và 8788 nguyên tử thì D tăng từ 14,53 nm lên 15,85 nm; 17,17 nm và E_{tot} tăng từ -7656,83 eV lên -9985,11 eV; -12774,99 eV (Bảng 2). Các kết quả cho thấy, khi tăng số nguyên tử trong mẫu FeNi thì kích thước tăng, năng lượng giảm. Để tìm hiểu, chúng tôi nghiên cứu hàm phân bố xuyên tâm của mẫu FeNi (khối, hạt nano), kết quả thể hiện trên Hình 2, Bảng 3.



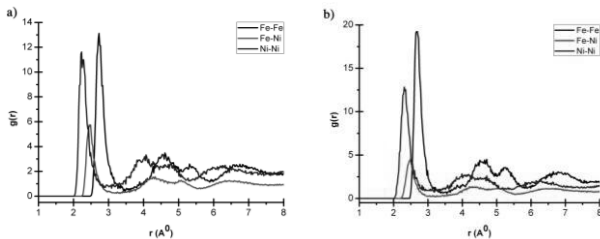
Hình 2. Hàm phân bố xuyên tâm của mẫu FeNi (khối, hạt nano) 5324 nguyên tử

Bảng 3. Hàm phân bố xuyên tâm của mẫu FeNi (khối, hạt nano) với số nguyên tử khác nhau ở nhiệt độ 300 K

FeNi (nguyên tử)	Mẫu khối			Hạt nano			Thực nghiệm [2]
	5324	6912	8788	5324	6912	8788	
$r(\text{Å})$	2,40	2,40	2,44	2,40	2,44	2,44	2,53
$g(r)$	3,416	3,482	3,487	3,131	3,114	3,134	

Các kết quả cho thấy mẫu FeNi (khối, hạt nano) 5324 nguyên tử ở nhiệt độ 300 K (Hình 2) có vị trí đỉnh thứ nhất của PRDF chiếm ưu thế, độ cao đỉnh thứ nhất của PRDF đối với FeNi

khối cao hơn hạt nano FeNi (Hình 2). Khi tăng số nguyên tử từ 5324 nguyên tử lên 6912 nguyên tử, 8788 nguyên tử trong mẫu FeNi cho thấy vị trí đỉnh thứ nhất của PRDF có giá trị thay đổi không đáng kể trong khoảng từ 2,4 Å đến 2,44 Å (Bảng 3), kết quả thu được phù hợp với kết quả [2] điều đó chứng tỏ vi cấu trúc không tồn tại trật tự xa mà luôn tồn tại trật tự gần. Ngoài ra, khi tăng số nguyên tử dẫn đến độ cao đỉnh thứ nhất của PRDF tăng từ 3,416 nm lên 3,487 nm với FeNi khối và tăng từ 3,131 nm lên 3,134 nm với hạt nano FeNi. Riêng với hạt nano FeNi 6912 nguyên tử, độ cao đỉnh thứ nhất của PRDF lại giảm xuống 3,114 nm. Các kết quả cho thấy hạt nano FeNi khi tăng số nguyên tử dẫn đến mật độ các nguyên tử giảm rồi tăng là do trong quá trình tăng số nguyên tử dẫn đến sự biến đổi vi cấu trúc làm cho mật độ các nguyên tử thay đổi. Với FeNi khối, khi tăng số nguyên tử dẫn đến mật độ các nguyên tử tăng làm cho độ cao đỉnh thứ nhất của PRDF tăng. Kết quả này khẳng định mẫu FeNi (khối, hạt nano) không có trật tự xa mà luôn tồn tại trật tự gần. Khi tăng số nguyên tử dẫn đến độ cao đỉnh thứ nhất của PRDF tăng làm cho mật độ các nguyên tử tăng, năng lượng giảm. Ngoài ra, trong mẫu FeNi còn tồn tại sự liên kết giữa 2 loại nguyên tử Ni, Fe như: Fe-Fe, Ni-Ni, Fe-Ni. Để tìm hiểu, chúng tôi nghiên cứu PRDF của các liên kết Fe-Fe, Fe-Ni, Ni-Ni, kết quả trên Hình 3 và Bảng 4.



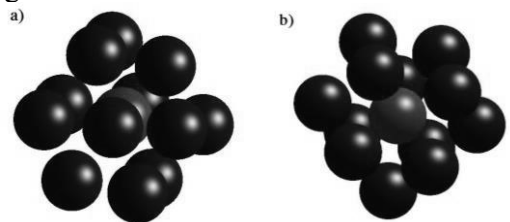
Hình 3. Hàm phân bố xuyên tâm của các liên kết Fe-Fe, Ni-Fe, Ni-Ni trong FeNi khối (Hình a), hạt nano FeNi (Hình b) 5324 nguyên tử ở nhiệt độ 300 K

Bảng 4. Vị trí, độ cao của hàm phân bố xuyên tâm các liên kết Fe-Fe, Ni-Fe, Ni-Ni trong mẫu FeNi (khối, hạt nano) với số nguyên tử khác nhau ở nhiệt độ 300 K

Khối	Khoảng cách giữa các nguyên tử $r(\text{Å}^0)$			Độ cao hàm phân bố xuyên tâm		
	$r_{\text{Fe-Fe}}$	$r_{\text{Ni-Fe}}$	$r_{\text{Ni-Ni}}$	$g_{\text{Fe-Fe}}$	$g_{\text{Ni-Fe}}$	$g_{\text{Ni-Ni}}$
5324	2,73	2,48	2,23	12,78	5,65	11,35
6912	2,73	2,47	2,25	13,08	5,53	12,89
8788	2,75	2,45	2,25	12,78	5,72	11,87

Nano	$r_{\text{Fe-Fe}}$	$r_{\text{Ni-Fe}}$	$r_{\text{Ni-Ni}}$	$g_{\text{Fe-Fe}}$	$g_{\text{Ni-Fe}}$	$g_{\text{Ni-Ni}}$
5324	2,69	2,49	2,31	19,24	4,53	12,82
6912	2,67	2,49	2,31	19,04	4,33	13,24
8788	2,71	2,47	2,31	18,24	4,64	12,39
5324	2,73	2,48	2,23	12,78	5,65	11,35

Các kết quả cho thấy mẫu FeNi (khối, hạt nano) 5324 nguyên tử ở nhiệt độ 300 K (Hình 3) có vị trí đỉnh thứ nhất PRDF của các liên kết Fe-Fe, Fe-Ni, Ni-Ni luôn chiếm vị trí ưu thế, độ cao đỉnh thứ nhất của các cặp liên kết Fe-Fe, Fe-Ni, Ni-Ni của hạt nano FeNi cao hơn FeNi khối. Khi tăng số nguyên tử từ 5324 nguyên tử lên 6912 nguyên tử, 8788 nguyên tử cho thấy vị trí đỉnh thứ nhất của PRDF các cặp liên kết Fe-Fe, Fe-Ni, Ni-Ni luôn chiếm vị trí ưu thế, không tồn tại trật tự xa mà luôn tồn tại trật tự gần và có giá trị thay đổi không đáng kể. Liên kết Fe-Fe có giá trị r tăng từ 2,73 Å lên 2,75 Å với FeNi khối và 2,69 Å lên 2,71 Å với hạt nano FeNi. Liên kết Fe-Ni có r giảm từ 2,48 Å xuống 2,45 Å với FeNi khối và 2,49 Å xuống 2,47 Å với hạt nano FeNi. Liên kết Ni-Ni có r tăng từ 2,23 Å lên 2,25 Å với FeNi khối và có giá trị r không đổi 2,31 Å với hạt nano FeNi. Với FeNi khối, độ cao đỉnh thứ nhất PRDF $g(r)$ của liên kết Fe-Fe, Ni-Ni có xu hướng tăng rồi giảm, liên kết Fe-Ni giảm rồi tăng. Với hạt nano FeNi, $g(r)$ của liên kết Fe-Fe giảm từ 19,24 Å xuống 18,24 Å, $g(r)$ của liên kết Fe-Ni giảm rồi tăng, $g(r)$ của liên kết Ni-Ni tăng rồi giảm (Bảng 4). Điều đó cho thấy mẫu FeNi (khối, hạt nano) không có trật tự xa mà luôn tồn tại trật tự gần. Khi tăng số nguyên tử dẫn đến độ cao các đỉnh của liên kết Fe-Fe, Fe-Ni, Ni-Ni thay đổi, chứng tỏ trong mẫu FeNi (khối, hạt nano) có sự thay đổi cấu trúc trong mạng tinh thể. Để khẳng định điều đó chúng tôi sử dụng phương pháp trực quan hóa, kết hợp với phân tích lân cận chung (CNA) để quan sát, phân tích sự thay đổi cấu trúc mạng tinh thể của mẫu FeNi (khối, hạt nano), kết quả thể hiện trên Hình 4, Bảng 5.



Hình 4. Cấu trúc FCC (Hình a), HCP (Hình b) trong mẫu FeNi (khối, hạt nano) ở nhiệt độ 300 K

Bảng 5. Bảng trạng thái cấu trúc của các liên kết Fe-Fe, Fe-Ni, Ni-Ni trong mẫu FeNi với số nguyên tử khác nhau

Hạt nano (Nguyên tử)	Liên kết Fe-Fe				Liên kết Ni-Ni				Cấu trúc ICO		Tinh thể	Amor
	Lớp vỏ		Lớp lõi		Lớp vỏ		Lớp lõi		Lớp lõi	Lớp vỏ		
	FCC	HCP	FCC	HCP	FCC	HCP	FCC	HCP				
5324	49	88	5	10	18	15	1	0	22	2	186	5114
6912	149	83	19	9	23	12	0	0	78	6	295	6533
8788	94	43	14	4	18	2	0	0	59	5	175	8549
Mẫu khối (Nguyên tử)	FCC	HCP	FCC	HCP	FCC	HCP	FCC	HCP	Lớp lõi	Lớp vỏ	Tinh thể	Amor
5324	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	5324
6912	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	6912
8788	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	8788

Các kết quả cho thấy FeNi khối chỉ tồn tại duy nhất 01 loại cấu trúc Amor còn hạt nano tồn tại 04 loại cấu trúc như: FCC, HCP, Amor và ICO (Bảng 5) như: Hạt nano FeNi 5324 nguyên tử với số nguyên tử có cấu trúc FCC của liên kết Fe-Fe trong lớp lõi là 05, lớp vỏ là 49 và cấu trúc HCP trong lớp lõi là 10, lớp vỏ là 88; cấu trúc FCC của liên kết Ni-Ni trong lớp lõi là 01, lớp vỏ là 18 và cấu trúc HCP trong lớp lõi là 00, lớp vỏ là 15; cấu trúc ICO trong lớp lõi là 22, lớp vỏ là 02; cấu trúc tinh thể 186; Amor là 5114. Khi tăng số nguyên tử từ 5324 nguyên tử lên 6912 nguyên tử và 8788 nguyên tử dẫn đến số trạng thái cấu trúc FCC trong lớp lõi, lớp vỏ của liên kết Fe-Fe tăng rồi giảm từ 05 lên 19 rồi giảm xuống 14 với lớp lõi và tăng từ 49 lên 149 rồi giảm xuống 94 với lớp vỏ; cấu trúc HCP giảm từ 10 xuống 04 trong lớp lõi và giảm từ 88 xuống 43 trong lớp vỏ; liên kết Ni-Ni cấu trúc FCC trong lớp lõi giảm từ 01 xuống 00, lớp vỏ tăng rồi giảm; cấu trúc HCP lớp lõi không có, lớp vỏ giảm từ 15 xuống 02; cấu trúc ICO trong lớp lõi, lớp vỏ tăng rồi giảm dẫn đến số nguyên tử tinh thể tăng rồi giảm, số nguyên tử Amor tăng (Bảng 5). Điều đó chứng tỏ để xảy ra sự kết tinh tốt thì hạt nano FeNi phải có mật độ phù hợp. Kết quả này cho

thấy có sự ảnh hưởng lớn của số nguyên tử lên vi cấu trúc, sự hình thành các trạng thái cấu trúc (FCC, HCP, ICO và Amor). Nguyên nhân chính dẫn đến sự hình thành các trạng thái cấu trúc là do hiệu ứng kích thước gây ra. Khi tăng số nguyên tử dẫn đến mật độ các nguyên tử tăng làm cho các nguyên tử ở lớp bề mặt dễ kết cụm, kéo theo sự hình thành các trạng thái cấu trúc (FCC, HCP, ICO và Amor) ở lớp bề mặt và lớp lõi của hạt nano FeNi còn FeNi khối không xuất hiện.

4. Kết luận

Qua quá trình nghiên cứu sự ảnh hưởng của số nguyên tử lên vi cấu trúc của mẫu FeNi (khối, hạt nano) 5324 nguyên tử, 6912 nguyên tử và 8788 nguyên tử ở nhiệt độ 300 K bằng phương pháp động lực học phân tử, chúng tôi thu được các kết quả sau: Với thể tương tác nhúng Sutton-Chen, điều kiện biên phù hợp (mẫu khối với điều kiện biên tuần hoàn, hạt nano điều kiện biên tự do) và các tham số được chọn cho kết quả phù hợp với kết quả [2]. Xây dựng thành công mẫu FeNi (khối, hạt nano) có kích thước nano, các nguyên tử tập trung chủ yếu trong lớp lõi của mẫu còn lớp vỏ tập trung ít hơn dẫn đến sự khác biệt về mặt cấu trúc của lớp vỏ và của lớp lõi. Xác định được sự ảnh hưởng của số nguyên tử lên vi cấu trúc, kích thước, năng lượng liên kết và trạng thái cấu trúc (FCC, HCP, Amor và ICO) là do hiệu ứng kích thước gây ra khi tăng số nguyên tử làm cho mật độ các nguyên tử tăng, dẫn đến kích thước tăng và năng lượng giảm. Xác định được sự ảnh hưởng của số nguyên tử lên các liên kết Fe-Fe, Fe-Ni, Ni-Ni của mẫu FeNi là rất lớn.

Lời cảm ơn: Phòng máy tính Khoa Vật lí, Trường Đại học Sư phạm Hà Nội đã hỗ trợ nhóm tác giả trong việc hoàn thiện tính toán, mô phỏng và nội dung bài báo./.

Tài liệu tham khảo

- [1]. H. H. Kart, M. Uludogan, T. Çağın, and M. Tomak (2005), "Thermodynamical and mechanical properties of Pd-Ag alloys", *Comput. Mat. Sci.*, (32), p. 107-117.
- [2]. K. L. McNerny, Y. Kim, D. E. Laughlin and M. E. McHenry (2010), "Chemical synthesis of monodisperse $\gamma_{\text{Fe-Ni}}$ magnetic nanoparticles with tunable Curie temperatures for self-regulated hyperthermia", *Journal of applied physics*, (107), p. 09A312.
- [3]. R. Meyer, P. Entel, (1998), "Martensite-austenite transition and phonon dispersion curves of $\text{Fe}_{1-x}\text{Ni}_x$ studied by molecular-dynamics simulations", *Phys. Rev. B*, (57), p. 5140.

[4]. V. V. Mitin, D. I. Sementsov and N. Z. Vagidov (2010), *Quantum Mechanics for Nanostructures*, Cambridge University Press, p. 1-427.

[5]. F. M. L. Mulaudzi, L. A. Cornish, G. A. Slabbert, M. J. Papo (2012), “Metal dusting on Alloys 602CA and 800”, *Journal of the Southern African Institute of Mining and Metallurgy*, (7A), p. 589-600.

[6]. M. Van Schilfgaarde, I. A. Abrikosov and B. Johansson (1999), “Origin of the Invar effect in iron-nickel alloys”, *Nature International Journal of Science*, (400), p. 46-49.

[7]. N. Shukla, C. Liu, and A. G. Roy (2006), “Oriented self-assembly of cubic FePt nanoparticles”, *Mater. Lett.*, (60), p. 995.

[8]. P. A. Sutton, J. Chen (1990), “Long-range Finnis-Sinclair potentials”, *Phil. Mag.*, 61 (3), p. 139-146.

[9]. D. Terentyev, K. Vortler, C. Orkas, B. K. Nordlund and L. Malerba (2011), “Primary radiation damage in bcc Fe and Fe–Cr crystals containing dislocation loops”, *Journal of Nuclear Materials*, (417), p. 1063-1066.

[10]. H. Tsuzuki, P. S. Branicio, J. P. Rino (2007), “Structural characterization of deformed crystals by analysis of common atomic neighborhood”, *Computer physics communications*, 177 (6), p. 518-523.

STUDYING THE ATOM NUMBER IMPACTS ON FeNi SAMPLE MICROSTRUCTURE OF FeNi SAMPLE BY MOLECULAR DYNAMICS METHOD

Summary

This paper studies the atom number impacts on the microstructure of FeNi bulk sample and FeNi nano-particle sample by Molecular Dynamics (MD) method, using the Sutton-Chen embedded potential and appropriate boundary conditions. The microstructure characteristics analyzed by the radial distribution function (RDF), the energy, the size, and the Common Neighbor Analysis methods (CNA) generate consistent experimental results. Those results of samples at 300 K always contain structural units: FCC, HCP, ICO and Amor.

Keywords: Atoms number, microstructure, FeNi bulk, FeNi nano-particle, molecular dynamics.

Ngày nhận bài: 26/01/2018; Ngày nhận lại: 21/03/2018; Ngày duyệt đăng: 04/4/2018.