

**ĐẠI HỌC QUỐC GIA HÀ NỘI  
TRƯỜNG ĐẠI HỌC KHOA HỌC TỰ NHIÊN**

**NGUYỄN THỊ HỒNG**

**NGHIÊN CỨU CÁC TÍNH CHẤT DẪN ĐIỆN  
VÀ NHIỆT ĐỘNG CỦA SẮT VÀ CÁC HỢP KIM  
Ở ÁP SUẤT CAO**

**Chuyên ngành: Vật lý lý thuyết và vật lý toán  
Mã số: 9440130.01**

**DỰ THẢO TÓM TẮT LUẬN ÁN TIẾN SỸ VẬT LÝ HỌC**

**Hà Nội - 2021**

Công trình được hoàn thành tại:

Khoa Vật lý, Trường Đại học Khoa học Tự nhiên, Đại học Quốc gia Hà Nội.

Người hướng dẫn khoa học   **1. PGS.TS. Hồ Khắc Hiếu**  
  **2. GS.TSKH. Nguyễn Xuân Hãn**

Phản biện 1: .....

Phản biện 2: .....

Phản biện 3: .....

Luận án sẽ được bảo vệ trước Hội đồng cấp Đại học Quốc gia chấm luận án tiến sĩ họp tại Trường Đại học Khoa học Tự nhiên, Đại học Quốc gia Hà Nội.

Vào hồi ..... giờ ..... ngày ..... tháng ..... năm .....

Có thể tìm hiểu luận án tại:

- Thư viện Quốc gia Việt Nam;

- Trung tâm Thông tin – Thư viện, Đại học Quốc gia Hà Nội

## MỞ ĐẦU

### 1. Lý do chọn đề tài

Sắt và hợp kim sắt là các loại vật liệu được sử dụng phổ biến lâu đời nhất trên Trái Đất, chiếm khoảng 95% tổng khối lượng kim loại sản xuất trên toàn thế giới, mang đến những giá trị to lớn trong các ngành xây dựng, công nghiệp hàng hải, giao thông vận tải, y sinh cũng như các vật dụng hằng ngày trong đời sống con người. Hợp kim sắt có tiềm năng lớn trong các ứng dụng công nghiệp như tuabin khí, linh kiện động cơ ô tô, lớp phủ bảo vệ cho vật liệu, chế tạo vật liệu đa năng, vật liệu chịu nhiệt cao... [30].

Ở tầm vĩ mô, các nghiên cứu về địa vật lý đã chỉ ra rằng kim loại sắt và các hợp kim của nó chiếm phần lớn trong tâm lõi Trái đất nên các tính chất nhiệt động của sắt và hợp kim của nó cung cấp những thông tin quan trọng trong nghiên cứu thành phần, cấu trúc cũng như sự tiến hóa của lõi Trái Đất và các hành tinh [31]

Cho đến nay, dù đã có rất nhiều công trình nghiên cứu được thực hiện, giá trị của một số đại lượng điện và nhiệt động của sắt và hợp kim ở áp suất cao (như độ dẫn điện, nhiệt độ nóng chảy, hệ số Grüneisen,...) vẫn chưa có sự thống nhất, thậm chí là mâu thuẫn trong các tính toán lý thuyết, đo đạc thực nghiệm và mô phỏng. Một số đại lượng khác của sắt (như hệ số Debye-Waller, độ dịch chuyển trung bình bình phương) vẫn còn ít được chú ý, quan tâm nghiên cứu.

Từ những phân tích trên, với mục đích hoàn thiện lý thuyết nghiên cứu các tính chất dẫn điện và nhiệt động của sắt và hợp kim sắt dưới ảnh hưởng của nhiệt độ và áp suất cao, chúng tôi lựa chọn đề tài nghiên cứu *“Nghiên cứu các tính chất dẫn điện và nhiệt động của sắt và các hợp kim ở áp suất cao”*.

### 2. Mục đích, đối tượng và phạm vi nghiên cứu

Mục đích của đề tài là phát triển mô hình lý thuyết Debye để nghiên cứu ảnh hưởng của áp suất đến các tính chất nhiệt động và độ dẫn điện của sắt và các hợp kim.

Đối tượng nghiên cứu của đề tài là kim loại sắt và hợp kim sắt dưới ảnh hưởng áp suất cao.

Phạm vi nghiên cứu: bao gồm tần số Debye, nhiệt độ Debye, độ dịch chuyển trung bình bình phương (Mean square displacement – MSD), DWF, nhiệt độ nóng chảy, điện trở suất của sắt và hợp kim.

### **3. Phương pháp nghiên cứu**

Để giải quyết bài toán đặt ra, trong luận án này, chúng tôi sử dụng phương pháp nhiễu loạn và thống kê lượng tử trong mô hình Debye. Thế năng tương tác hiệu dụng được xác định gần đúng bởi đóng góp của các nguyên tử lân cận gần nhất (quả cầu phối vị bậc 1) và phi điều hòa được xem có nguyên nhân từ tương tác phonon-phonon.

Để nghiên cứu nhiệt độ nóng chảy và độ dẫn điện của sắt và các hợp kim sắt chúng tôi kết hợp mô hình Debye và các định luật bán thực nghiệm Lindemann, Bloch-Grüneisen và quy tắc Matthiesen.

### **4. Ý nghĩa khoa học và thực tiễn của luận án**

Luận án đã phát triển và mở rộng phương pháp tính toán lý thuyết dựa trên mô hình Debye và các định luật bán thực nghiệm cho phép kiểm nghiệm cũng như tiên đoán được các tính chất nhiệt động và dẫn điện của sắt và các hợp kim của sắt dưới ảnh hưởng của áp suất. Những kết quả này có thể được sử dụng để nghiên cứu tính chất động lực, sự vận động, từ trường và thành phần của Trái đất cũng như các hành tinh. Đồng thời những kết quả tính toán số góp phần bổ sung vào cơ sở dữ liệu của tính chất vật lý của vật liệu ở áp suất cao, góp phần kiểm chứng các lý thuyết cũng như các phép đo thực nghiệm tương lai

## **5. Những đóng góp mới của luận án**

Phát triển mô hình Debye phi điều hoà để xây dựng được biểu thức giải tích phụ thuộc vào áp suất của tần số Debye, nhiệt độ Debye, DWF và nhiệt độ nóng chảy của sắt.

Phát triển mô hình Debye phi điều hoà để thiết lập được biểu thức giải tích của tần số Debye, nhiệt độ Debye, Độ dịch chuyển trung bình bình phương (Mean square displacement - MSD) và DWF của các hợp kim sắt với các nồng độ pha tạp khác nhau và tại các áp suất khác nhau.

Đề xuất một cách thức tiếp cận lý thuyết cho phép xác định ảnh hưởng của áp suất đến hệ số dẫn điện của kim loại sắt và hợp kim.

Các tính toán số được thực hiện đối với kim loại Fe và các hợp kim của sắt là FeAl, FeCr, FeSi, FeNi. Các kết quả tính số được so sánh với các dữ liệu thực nghiệm cũng như một số tính toán lý thuyết khác.

## **6. Cấu trúc của luận án**

Ngoài phần Mở đầu, Kết luận, Tài liệu tham khảo và Phụ lục, luận án bao gồm 3 chương:

Chương 1: Cơ sở lý thuyết và phương pháp nghiên cứu

Chương 2: Tính chất nhiệt động và dẫn điện của kim loại sắt dưới áp suất

Chương 3: Tính chất nhiệt động và dẫn điện của các hợp kim sắt dưới áp suất

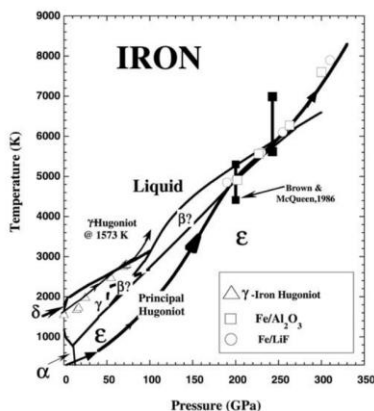
# **CHƯƠNG 1: CƠ SỞ LÝ THUYẾT VÀ PHƯƠNG PHÁP NGHIÊN CỨU**

## **1.1. Tổng quan tính chất nhiệt động và dẫn điện của sắt và hợp kim**

### 1.1.1. Các tính chất vật lý cơ bản của sắt và hợp kim sắt

Sắt (Fe) là kim loại có số nguyên tử bằng 26 và thuộc lớp kim loại chuyển tiếp đầu tiên. Kim loại sắt thuộc nhóm 8 của bảng tuần hoàn các nguyên tố hóa học. Cấu hình điện tử của sắt có dạng  $[Ar] 3d^6 4s^2$ . Sắt và các hợp kim là các thành phần chủ yếu cấu thành lớp vỏ ngoài của lõi Trái Đất. Kim loại sắt và hợp kim sắt kết hợp được nhiều ưu điểm như giá thành thấp, chịu lực, chịu nhiệt, độ bền tương đối cao, có sự kết hợp giữa các ưu điểm trọng lượng nhẹ, hoạt động oxy hóa ở nhiệt độ cao và khả năng chống ăn mòn tốt [41].

Kim loại sắt có nhiều dạng cấu trúc tinh thể khác nhau với giản đồ pha khá phức tạp (Hình 1.1) [10, 39].



**Hình 1.1:** Giản đồ pha của kim loại sắt [10].

Người ta ghi nhận nó có ít nhất 4 dạng thù hình là  $\alpha$ -Fe với cấu trúc lập phương tâm khối (Body-centered cubic - BCC),  $\gamma$ -Fe với cấu trúc lập phương tâm diện (Face-centered cubic - FCC),  $\varepsilon$ -Fe với cấu trúc lục giác xếp chặt (Hexagonal close packed - HCP),  $\delta$ -Fe có cấu trúc lập phương tâm khối ở nhiệt độ cao [33]. Nhiều thí nghiệm vẫn còn gây tranh cãi về sự tồn tại bền vững của pha  $\beta$  ở nhiệt độ và áp suất cao [35].

### 1.1.2. Tính chất nhiệt động

Để xác định hệ số Grüneisen của kim loại sắt dưới ảnh hưởng của áp suất, các tác giả đã sử dụng nhiều phương pháp thực nghiệm khác nhau [7], [37], [38], [39]. Tuy vậy, cho đến nay, các kết quả thu được cho hệ số Grüneisen ở áp suất cao vẫn còn chưa thống nhất trong cộng đồng nghiên cứu [37].

Đối với bài toán xác định hệ số Debye-Waller của sắt và các hợp kim sắt ở áp suất cao, cho đến nay chỉ mới có nhóm Y. Ping và các cộng sự đã có nghiên cứu đầu tiên đăng trên tạp chí Physical Review Letters năm 2013 [40].

Về bài toán nóng chảy, ở áp suất không, nhiệt độ nóng chảy của sắt tinh khiết được ghi nhận là 1811 K. Tại áp suất cao, nhiệt độ nóng chảy của sắt tăng nhanh. Đường cong nóng chảy của sắt trong vùng rộng của áp suất đã được xác định bằng nhiều phương pháp [14, 16, 18], [41]- [50], tuy nhiên, kết quả thu được có sự khác biệt rõ rệt giữa các nghiên cứu.

### **1.1.3. Tính chất dẫn điện**

Sắt và hợp kim của sắt là những vật liệu có tính dẫn điện tốt. Dựa trên các bằng chứng vũ trụ, địa hóa học và địa vật lý, các nhà nghiên cứu cho rằng, một số nguyên tố nhẹ như H, C, S, Ni, O và Si đã kết hợp với sắt để tạo thành hợp kim sắt trong lõi Trái Đất [57]. Nhiều công trình đã được thực hiện để nghiên cứu ảnh hưởng của các nguyên tố nhẹ như niken [27], silicon [20], [28] đến điện trở suất của hợp kim sắt ở áp suất cao nhưng giá trị độ dẫn điện của sắt và các hợp kim trên nền sắt ở điều kiện áp suất cao vẫn còn nhiều tranh cãi.

## **1.2. Phương pháp nghiên cứu tính chất nhiệt động của sắt và hợp kim**

### **1.2.1. Lý thuyết chung của mô hình Debye**

Mô hình Debye [68] giả thiết trong vật rắn có  $N$  nguyên tử dao động với tần số biến thiên từ 0 đến giá trị cực đại  $\omega_D$  (tần số Debye). Biểu thức tán sắc có dạng tuyến tính  $\omega = v_D k$ .

Trong biểu thức xác suất dịch chuyển trạng thái từ trạng thái đầu  $\psi_q$  đến trạng thái cuối  $\psi_{q'}$  có một thừa số quan trọng đóng góp vào yếu tố ma trận là [69]:

$$e^{-2W} = \prod_q \left\{ 1 - |K \cdot U_q|^2 \right\} = \exp \left\{ - \sum_q |K \cdot U_q|^2 \right\} = \exp \left\{ - \sum_q |K|^2 \cdot |U_q|^2 \right\}. \quad (1.7)$$

Thừa số (1.7) được gọi là hệ số Debye-Waller (Debye-Waller Factor - DWF) [70].

Độ dịch chuyển trung bình bình phương của nguyên tử (Mean square displacement - MSD)  $\langle u^2 \rangle$  ảnh hưởng mạnh đến biên độ của XRD, nhiễu xạ neutron hay quang phổ Mössbauer thông qua thừa số

$$\exp(-2W) = \exp(-K^2 \langle u^2 \rangle). \quad (1.13)$$

### 1.2.2. Mô hình Debye tương quan phi điều hòa

Phổ EXAFS phi điều hòa cung cấp thông tin về cấu trúc và nhiễu loạn nhiệt của các chất rắn thông qua việc khai triển gần đúng các mômen của độ dịch chuyển nguyên tử được gọi là các cumulant EXAFS [71]

$$\langle e^{2iqr} \rangle = \exp \left[ 2iqr_0 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(2iq)^n}{n!} \sigma^{(n)} \right], \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (1.15)$$

$\sigma^{(n)}$  là các cumulant bậc  $n$ .

Thế năng hiệu dụng của hệ có dạng [75]

$$V_{eff}(x) = \varphi(x) + \sum_{j \neq i} \varphi \left( \frac{\mu}{M_i} x \hat{R}_{AB} \hat{R}_{ij} \right) = \frac{1}{2} k_{eff} x^2 + k_3 x^3 + k_4 x^4 + \dots \quad (1.17)$$

Biểu thức tán sắc (hay là tần số dao động phonon) có dạng:



$$\omega(q) = 2\sqrt{\frac{k_{eff}}{M}} \left| \sin\left(\frac{qa_h}{2}\right) \right|, \quad (1.18)$$

Tần số Debye  $\omega_D$  và nhiệt độ Debye  $\theta_D$  tương ứng như sau

$$\omega_D = 2\sqrt{\frac{k_{eff}}{M}}, \quad \theta_D = \frac{\hbar\omega_D}{k_B}. \quad (1.19)$$

Ba cumulant phổ EXAFS đầu tiên của chất rắn trong ACDM đã được suy ra xây dựng và có dạng sau [72]

$$\sigma^{(1)} = \langle x \rangle = \langle r - r_0 \rangle = \frac{3\hbar a_h}{2\pi} \frac{k_3}{k_{eff}^2} \int_0^{\pi/a_h} \omega(q) \frac{1+z(q)}{1-z(q)} dq, \quad (1.20)$$

$$\sigma^{(2)} = \langle x^2 \rangle = -\frac{\hbar a_h}{2\pi} \frac{1}{k_{eff}} \int_0^{\pi/a_h} \omega(q) \frac{1+z(q)}{1-z(q)} dq, \quad (1.21)$$

$$\sigma^{(3)} \approx \langle x^3 \rangle - 3\langle x^2 \rangle \langle x \rangle = \frac{3\hbar^2 a_h^2}{4\pi^2} \frac{k_3}{k_{eff}^3} \int_0^{\pi/a_h} dq_1 \int_{-\pi/a_h}^{\frac{\pi}{a_h}-q_1} F(q_1, q_2) dq_2, \quad (1.22)$$

### 1.2.3. Định luật nóng chảy Lindemann

F.A. Lindemann xây dựng điều kiện nóng chảy như sau: Quá trình nóng chảy của vật liệu sẽ bắt đầu diễn ra khi tỉ số giữa căn bậc hai của độ dịch chuyển trung bình bình phương  $\langle u^2 \rangle$  và khoảng cách lân cận gần nhất giữa các nguyên tử  $a(P, T)$  tiến đến một giá trị tới hạn (hay giá trị ngưỡng) [77]. Giá trị  $\zeta(P, T) = \sqrt{\langle u^2 \rangle} / a(P, T)$  được gọi là tỉ số Lindemann về nóng chảy.

## 1.3. Phương pháp nghiên cứu tính chất dẫn điện của sắt và hợp kim

### 1.3.1. Định luật Bloch–Grüneisen

Biểu thức của định luật Bloch–Grüneisen có dạng

$$\rho(T) = \rho(0) + \rho_{el-ph}(T) \quad (1.28)$$

$$\rho_{el-ph}(T) = B \left( \frac{T}{\theta_D} \right)^n \int_0^{\theta_D/T} \frac{x^n}{(e^x - 1)(1 - e^{-x})} dx \quad (1.29)$$

### 1.3.2. Quy tắc Matthiessen

$$\rho(c, T) = \rho_0(c) + \rho_i(T) \quad (1.32)$$

Trên thực tế, quy tắc Matthiessen có thể bị vi phạm ở một mức độ  $\Delta(c, T)$  nhất định. Những sai lệch này thường là nhỏ so với  $\rho_0(c)$ ,  $\rho_i(T)$ .

$$\rho(c, T) = \rho_0(c) + \rho_i(T) + \Delta(c, T) \quad (1.33)$$

## CHƯƠNG 2: TÍNH CHẤT NHIỆT ĐỘNG VÀ DẪN ĐIỆN CỦA SẮT Ở ÁP SUẤT CAO

### 2.1. Các tính chất nhiệt động của sắt

#### 2.1.1. Hệ số Grüneisen

Đề xuất của Burakovsky và cộng sự [89]

$$\gamma_G = \frac{1}{2} + \gamma_1 \eta^{1/3} + \gamma_2 \eta^s. \quad (2.3)$$

#### 2.1.2. Các cumulant phổ EXAFS. Tần số và nhiệt độ Debye

Trong ACDM, cumulant bậc 1 (hay sự giãn nở mạng) và cumulant bậc hai (hay hệ số DWF) phổ EXAFS xác định bởi [72]:

$$\sigma^2 = -\frac{\hbar a_h}{2\pi k_{eff}} \int_0^{\pi/a_h} \omega(q) \frac{1+Z(q)}{1-Z(q)} dq, \quad \sigma^{(1)} = -\frac{3k_3}{k_{eff}} \sigma^2 \quad (2.4)$$

$$a_h = a_{0h} (V/V_0)^{1/3} = a_{0h} (\eta)^{1/3}. \quad (2.5)$$

Hệ số Grüneisen được định nghĩa trong mô hình Debye

$$\gamma_G = -\frac{\partial \ln \omega_D}{\partial \ln V} \quad (2.6)$$

Kết hợp phương trình (2.3) và (2.6) và thực hiện lấy tích phân

$$\omega_D(\eta) = \omega_{0D} \eta^{-1/2} \exp \left[ -3\gamma_1 (\eta^{1/3} - 1) - \frac{\gamma_2}{s} (\eta^s - 1) \right], \quad (2.9)$$

$$\theta_D(\eta) = \theta_{0D} \eta^{-1/2} \exp \left[ -3\gamma_1 (\eta^{1/3} - 1) - \frac{\gamma_2}{s} (\eta^s - 1) \right], \quad (2.10)$$

$$k_{eff} = k_{eff}^0 \eta^{-1} \exp \left[ -6\gamma_1 (\eta^{1/3} - 1) - \frac{2\gamma_2}{s} (\eta^s - 1) \right], \quad (2.12)$$

Biểu thức tường minh của các cumulant bậc 1 và bậc 2 phổ EXAFS

$$\sigma^2 = \frac{\hbar}{3M \omega_{0D} \eta^{-1/2} \exp \left[ -3\gamma_1 (\eta^{1/3} - 1) - \frac{\gamma_2}{s} (\eta^s - 1) \right]} \times \left[ \begin{aligned} & \sqrt{2 - \sqrt{2}} \coth \left( \frac{A\sqrt{2 - \sqrt{2}}}{2} \right) + \frac{\sqrt{2}}{2} \coth \left( \frac{A\sqrt{2}}{2} \right) \\ & + \sqrt{2 + \sqrt{2}} \coth \left( \frac{A\sqrt{2 + \sqrt{2}}}{2} \right) + \frac{1}{2} \coth(A) \end{aligned} \right] \quad (2.22)$$

Với

$$A = \beta \hbar \sqrt{\frac{k_{eff}}{M}} = \frac{\hbar}{k_B T} \frac{\omega_{0D}}{2} \eta^{-1/2} \exp \left[ -3\gamma_1 (\eta^{1/3} - 1) - \frac{\gamma_2}{s} (\eta^s - 1) \right].$$

Từ đó chúng tôi rút ra biểu thức của cumulant bậc 1

$$\sigma^{(1)}(P, T) = - \frac{4\hbar k_3}{M^2 \omega_{0D}^3 \eta^{-3/2} \exp \left[ -9\gamma_1 (\eta^{1/3} - 1) - \frac{3\gamma_2}{s} (\eta^s - 1) \right]} \times \left[ \begin{aligned} & \sqrt{2 - \sqrt{2}} \coth \left( \frac{A\sqrt{2 - \sqrt{2}}}{2} \right) + \frac{\sqrt{2}}{2} \coth \left( \frac{A\sqrt{2}}{2} \right) \\ & + \sqrt{2 + \sqrt{2}} \coth \left( \frac{A\sqrt{2 + \sqrt{2}}}{2} \right) + \frac{1}{2} \coth(A) \end{aligned} \right] \quad (2.23)$$

### 2.1.3. Nhiệt độ nóng chảy

Điều kiện nóng chảy Lindemann đã được nhóm của Wang và cộng sự [93] chỉ ra là tương đương với

$$T_m = const.V^{2/3}.\theta_D^2. \quad (2.24)$$

Kết hợp biểu thức của hệ số Grüneisen chúng tôi thu được

$$T_m = T_0\eta^{-1/3} \exp\left\{6\gamma_1(1-\eta^{1/3}) + \frac{2\gamma_2}{s}(1-\eta^s)\right\} \quad (2.28)$$

#### 2.1.4. Phương trình trạng thái Vinet

Để xác định được ảnh hưởng của áp suất đến các đại lượng nhiệt động chúng tôi sử dụng Vinet EOS [94]

$$P = 3K_0\eta^{-2/3}(1-\eta^{1/3})\exp\left[\frac{3}{2}(K_0' - 1)(1-\eta^{1/3})\right]. \quad (2.40)$$

### 2.2. Tính chất dẫn điện

Biểu thức tổng quát của định luật Bloch-Grüneisen

$$\rho_{BG}(V, T) = \rho(0) + B(V) \left[ \frac{T}{\theta_D(V)} \right]^n \int_0^{\theta_D(V)/T} \frac{x^n}{(e^x - 1)(1 - e^{-x})} dx. \quad (2.41)$$

Thực nghiệm cho thấy, khi tăng áp suất đến một giá trị nào đó thì điện trở suất của kim loại và hợp kim tiến đến một giá trị bão hòa  $\rho_{sat}$ . Vì vậy chúng tôi sử dụng mô hình bão hòa điện trở được Wiesmann và cộng sự [97] đề xuất có dạng của mô hình điện trở Shunt

$$\frac{1}{\rho_{tot}(V, T)} = \frac{1}{\rho_{BG}(V, T)} + \frac{1}{\rho_{sat}} \quad (2.42)$$

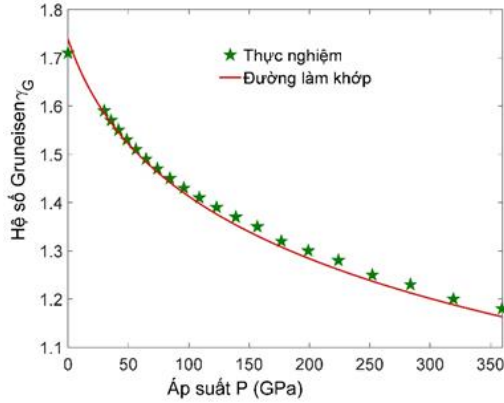
trong đó theo Gomi và cộng sự  $\rho_{sat}(V)$  của sắt có dạng [20]:

$$\rho_{sat}(V) = 1,68 \times \eta^{1/3} \times 10^{-6} \Omega m, \quad (2.43)$$

### 2.3. Tính số và thảo luận kết quả

#### 2.3.1. Tính chất nhiệt động

##### 2.3.1.1. Hệ số Grüneisen



**Hình 2.1.** Sự phụ thuộc áp suất của hệ số Grüneisen của kim loại sắt.

Kết quả làm khớp phương trình (2.3) với dữ liệu thực nghiệm  $\gamma_G$  của sắt trong gần đúng bình phương tối thiểu hệ số Grüneisen và phép đo thực nghiệm [7] được chúng tôi biểu diễn trên Hình 2.1.

### 2.3.1.2. Tần số và nhiệt độ Debye

#### a) Tại áp suất $P = 0$

Trước tiên, chúng tôi xác định giá trị của tần số và nhiệt độ Debye của  $\varepsilon$ -Fe bằng mô hình ACDM.

$$V_{eff}(x) = V(x) + 2V\left(\frac{x}{2}\right) + 8V\left(-\frac{x}{4}\right) + 8V\left(\frac{x}{4}\right). \quad (2.44)$$

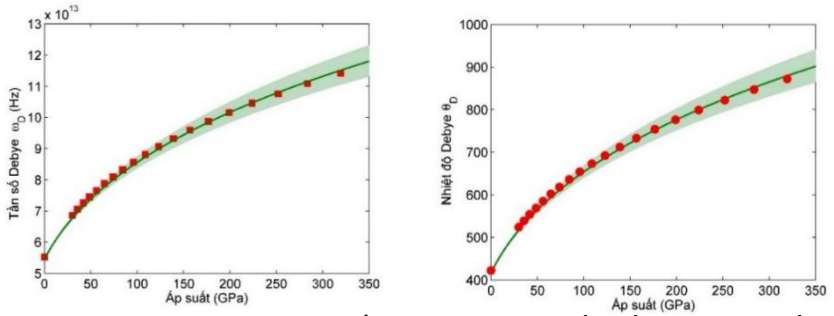
Qua các biến đổi toán học chúng tôi thu được

$$k_{eff}^0 = 5D\alpha^2, \quad k_3^0 = -\frac{3}{4}D\alpha^3, \quad k_4^0 = \frac{133}{192}D_0\alpha^4. \quad (2.37)$$

$$\omega_{0D} = 2\sqrt{\frac{k_{eff}^0}{M}} = 2\sqrt{\frac{5D\alpha^2}{M}}, \quad \theta_{0D} = \frac{\hbar\omega_{0D}}{k_B}. \quad (2.38)$$

#### b) Tại áp suất $P \neq 0$

Trên Hình 2.2, chúng tôi biểu diễn đồ thị sự phụ thuộc áp suất của tần số và nhiệt độ Debye của kim loại sắt đến áp suất 350 GPa.



**Hình 2.2.** Sự phụ thuộc áp suất của nhiệt độ và tần số Debye của sắt hợp (đường liền nét).

### 2.3.1.3. Hệ số Debye-Waller

#### a) Tại áp suất $P = 0$

Trong phần này, chúng tôi áp dụng mô hình ACDM để khảo sát hệ số Debye-Waller của  $\alpha$ -Fe dưới ảnh hưởng của nhiệt độ.

$$V_{eff}(x) = V(x) + 2V\left(-\frac{x}{2}\right) + 6V\left(-\frac{x}{6}\right) + 6V\left(\frac{x}{6}\right). \quad (2.53)$$

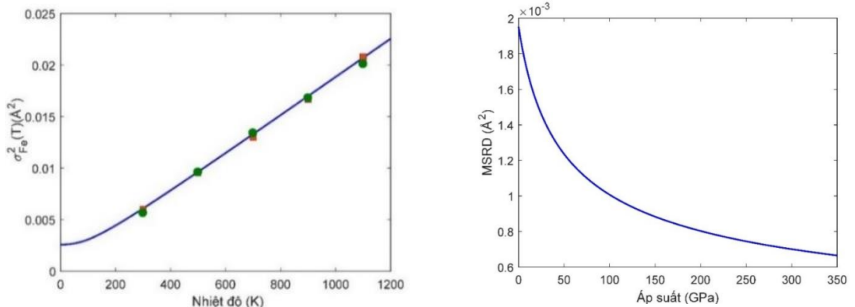
Chúng tôi thu được

$$k_{eff}^0 = \frac{11}{3}D\alpha^2, k_3^0 = -\frac{3}{4}D\alpha^3, k_4^0 = \frac{1715}{2592}D_0\alpha^4. \quad (2.55)$$

Trên Hình 2.3 chúng tôi biểu diễn sự phụ thuộc nhiệt độ của hệ số DWF đến nhiệt độ 1200 K.

#### b) Tại áp suất $P \neq 0$

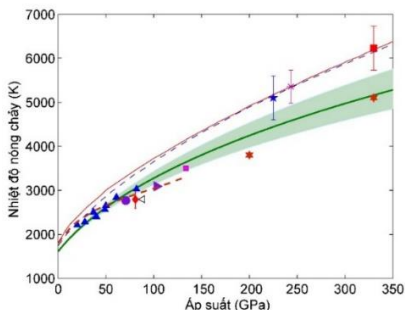
Sự phụ thuộc áp suất đến 350 GPa của cumulant bậc hai phổ EXAFS của  $\epsilon$ -sắt ở nhiệt độ phòng được chúng tôi biểu diễn trên Hình 2.4.



**Hình 2.3:** Sự phụ thuộc nhiệt độ của hệ số Debye–Waller phổ EXAFS của  $\alpha$ -Fe

**Hình 2.4:** Sự phụ thuộc áp suất của hệ số Debye–Waller phổ EXAFS của sắt

### 2.3.1.4. Nhiệt độ nóng chảy

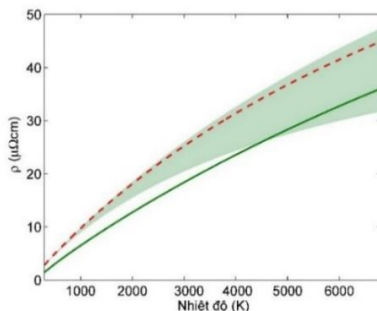
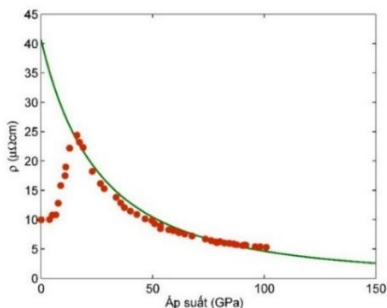


**Hình 2.5.** Đường cong nóng chảy  $T_m$  của  $\epsilon$ -Fe đến áp suất 350 GPa (đường liền nét dưới)

Trên Hình 2.5 chúng tôi biểu diễn đường cong nóng chảy của  $\epsilon$ -Fe đến áp suất 350 GPa – tương ứng với áp suất tại lõi trong của Trái đất.

### 2.3.2. Tính chất dẫn điện của sắt dưới áp suất

Trên Hình 2.6, chúng tôi biểu thị đường cong phụ thuộc áp suất của điện trở suất kim loại sắt ở nhiệt độ phòng. Trên Hình 2.7, chúng tôi khảo sát điện trở suất của sắt tại áp suất 212 GPa ở các nhiệt độ khác nhau.



**Hình 2.6:** Sự phụ thuộc áp suất

**Hình 2.7:** Điện trở suất của sắt ở

### CHƯƠNG 3: TÍNH CHẤT NHIỆT ĐỘNG VÀ DẪN ĐIỆN CỦA HỢP KIM SẮT Ở ÁP SUẤT CAO

#### 3.1. Tính chất nhiệt động của hợp kim sắt ở áp suất cao

##### 3.1.1. Nhiễu loạn nhiệt của hợp kim sắt ở áp suất $P = 0$

Trong phần này, chúng tôi nghiên cứu hiện tượng nhiễu loạn nhiệt trong hợp kim sắt FeX có cấu trúc B2 (dạng CsCl) ở áp suất  $P = 0$ . Giả thiết rằng, thế năng tương tác  $V(r)$  giữa các nguyên tử có thể được mô tả bởi thế tương tác cặp Morse có dạng

$$V(r) = D_0 \left\{ \exp[-2\alpha(r-r_0)] - 2\exp[-\alpha(r-r_0)] \right\} \\ \approx D_0 \left( -1 + \alpha^2 x^2 - \alpha^3 x^3 + \frac{7}{12} \alpha^4 x^4 \dots \right), \quad x = r - r_0, \quad (3.1)$$

##### 3.1.1.1. Thế tương tác hiệu dụng của tinh thể BCC

Trước hết, chúng tôi xét tinh thể kim loại tinh khiết có cấu trúc BCC.

$$V_{eff}(x) = V(x) + 2V\left(-\frac{x}{2}\right) + 6V\left(-\frac{x}{6}\right) + 6V\left(\frac{x}{6}\right). \quad (3.2)$$

Từ đó, ta thu được

$$k_{eff} = \frac{11}{3} D_0 \alpha^2, \quad k_3 = -\frac{3}{4} D_0 \alpha^3, \quad k_4 = \frac{1715}{2592} D_0 \alpha^4, \quad (3.4)$$

$$\omega_D = 2\sqrt{\frac{k_{eff}}{M}} = 2\sqrt{\frac{11D_0\alpha^2}{3M}}; \quad \theta_D = \frac{\hbar\omega_D}{k_B}.$$

##### 3.1.1.2. Phát triển ACDM cho hợp kim sắt

Trong luận án này, chúng tôi nghiên cứu nhiễu loạn nhiệt trong hợp kim FeX giàu sắt có cấu trúc B2.

$$V_{eff} = 2C_X V_{eff}^{FeX} + (C_{Fe} - C_X) V_{eff}^{Fe}, \quad (3.5)$$



Nhiều loạn nhiệt của các nguyên tử trong hợp kim có thể được mô tả bằng các cumulant phổ EXAFS [71]

$$\sigma^{(1)} = \frac{3\hbar a_h}{2\pi} \frac{2C_X k_3^{FeX} + (C_{Fe} - C_X) k_3^{Fe}}{[2C_X k_{eff}^{FeX} + (C_{Fe} - C_X) k_{eff}^{Fe}]^2} \int_0^{\pi/a_h} \omega(q) \frac{1+z(q)}{1-z(q)} dq \quad (3.18)$$

$$\sigma^{(2)} = -\frac{\hbar a_h}{2\pi} \frac{1}{2C_X k_{eff}^{FeX} + (C_{Fe} - C_X) k_{eff}^{Fe}} \int_0^{\pi/a_h} \omega(q) \frac{1+z(q)}{1-z(q)} dq, \quad (3.19)$$

$$\sigma^{(3)} = \frac{3\hbar^2 a_h^2}{4\pi^2} \frac{2C_X k_3^{FeX} + (C_{Fe} - C_X) k_3^{Fe}}{[2C_X k_{eff}^{FeX} + (C_{Fe} - C_X) k_{eff}^{Fe}]^3} \int_0^{\pi/a_h} dq_1 \int_{-\pi/a_h}^{\frac{\pi}{a_h} - q_1} F(q_1, q_2) dq_2 \quad (3.20)$$

### 3.1.2. Tính chất nhiệt động của hợp kim sắt ở áp suất cao

Sự phụ thuộc thể tích của hệ số Grüneisen, tần số Debye, nhiệt độ Debye và hằng số lực hiệu dụng của hợp kim sắt có thể được xác định theo hàm của hệ số nén  $\eta$  tương ứng như sau

$$\gamma_G = \frac{1}{2} + \gamma_1 \eta^{1/3} + \gamma_2 \eta^s \quad (3.21)$$

$$\omega_D(\eta) = \omega_{0D} \eta^{-1/2} \exp \left[ -3\gamma_1 (\eta^{1/3} - 1) - \frac{\gamma_2}{s} (\eta^s - 1) \right], \quad (3.22)$$

$$\theta_D(\eta) = \theta_{0D} \eta^{-1/2} \exp \left[ -3\gamma_1 (\eta^{1/3} - 1) - \frac{\gamma_2}{s} (\eta^s - 1) \right], \quad (3.23)$$

$$k_{eff} = k_{eff}^0 \eta^{-1} \exp \left[ -6\gamma_1 (\eta^{1/3} - 1) - \frac{2\gamma_2}{s} (\eta^s - 1) \right], \quad (3.24)$$

Từ các biểu thức trên, chúng tôi suy ra

$$\sigma^2 = \frac{\hbar}{6\sqrt{M(2C_X k_{eff}^{FeX} + (C_{Fe} - C_X) k_{eff}^{Fe})}} \left[ \sqrt{2-\sqrt{2}} \coth\left(\frac{B\sqrt{2-\sqrt{2}}}{2}\right) + \frac{\sqrt{2}}{2} \coth\left(\frac{B\sqrt{2}}{2}\right) + \sqrt{2+\sqrt{2}} \coth\left(\frac{B\sqrt{2+\sqrt{2}}}{2}\right) + \frac{1}{2} \coth(B) \right] \quad (3.28)$$

với  $B = \beta\hbar\sqrt{\frac{2C_X k_{eff}^{FeX} + (C_{Fe} - C_X) k_{eff}^{Fe}}{M}}$ .

Và cumulant bậc 1 là

$$\sigma^{(1)} = -\frac{3(2C_X k_3^{FeB} + (C_{Fe} - C_X) k_3^{Fe})}{2C_X k_{eff}^{FeX} + (C_{Fe} - C_X) k_{eff}^{Fe}} \times \frac{\hbar}{6\sqrt{M(2C_X k_{eff}^{FeX} + (C_{Fe} - C_X) k_{eff}^{Fe})}} \times \left[ \sqrt{2-\sqrt{2}} \coth\left(\frac{B\sqrt{2-\sqrt{2}}}{2}\right) + \frac{\sqrt{2}}{2} \coth\left(\frac{B\sqrt{2}}{2}\right) + \sqrt{2+\sqrt{2}} \coth\left(\frac{B\sqrt{2+\sqrt{2}}}{2}\right) + \frac{1}{2} \coth(B) \right] \quad (3.29)$$

Đối với nhiệt độ nóng chảy, biểu thức nhiệt độ nóng chảy  $T_m$

$$T_m = T_0 \eta^{-1/3} \exp\left\{6\gamma_1(1-\eta^{1/3}) + \frac{2\gamma_2}{s}(1-\eta^s)\right\} \quad (3.30)$$

### 3.2. Tính chất dẫn điện của hợp kim sắt ở áp suất cao

Quy tắc Matthiessen xác định ảnh hưởng của nồng độ tạp chất lên điện trở suất của hợp kim loãng

$$\rho_{tot}(V, T) = \rho_{ph}(V, T) + \sum_i \rho_i(V) \times \chi_i. \quad (3.31)$$

Đề xuất của Côte và Meisel [20, 28], [111].

$$\rho_{tot}(V,T) = \left(1 - \frac{\rho_{tot}(V,T)}{\rho_{sat}(V)}\right) \rho_{ph,ideal}(V,T) + \rho_{imp}(V) \exp(-2W(V,T)) \quad (3.32)$$

Theo Gomi và cộng sự [20]

$$\rho_{sat}(V) = \rho_{sat}(V_0) \left(\frac{V}{V_0}\right)^{1/3} = \rho_{sat}(V_0) \eta^{1/3} = 1,68 \times 10^{-6} \eta^{1/3} \Omega\text{m} \quad (3.33)$$

Điện trở suất do tán xạ của phonon

$$\rho_{ph,ideal}(V,T) = B(V) \left(\frac{T}{\theta_D(V)}\right)^{5 \theta_D(V)} \int_0^{\theta_D(V)} \frac{x^5 dx}{(e^x - 1)(1 - e^{-x})} \quad (3.34)$$

Giá trị của  $B(V)$  có thể được suy ra từ biểu thức điện trở suất phụ thuộc áp suất của kim loại sắt tại nhiệt độ phòng [20] là

$$\rho_{ph}(V, 300\text{K}) = 5,26 \times \left(1,24 - \frac{V}{V_0}\right)^{-3.21} \times 10^{-9} (\Omega\text{m}) \quad (3.35)$$

$\rho_{imp}(V)$  là điện trở suất của tạp chất và thừa số  $\exp(-2W(V,T))$  là DWF có thể được xác định từ mô hình Debye hoặc thực nghiệm.

### 3.3. Tính số và thảo luận kết quả

#### 3.3.1. Tính chất nhiệt động của hợp kim sắt

##### 3.3.1.1. Nhiễu loạn nhiệt trong hợp kim B2-FeAl

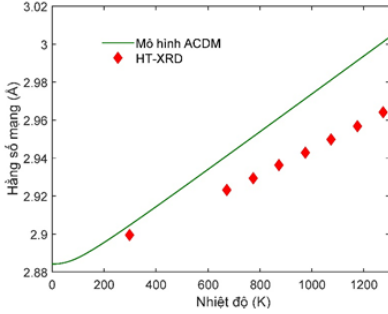
Trên Hình 3.3 chúng tôi biểu diễn sự phụ thuộc nhiệt độ của hằng số mạng của B2-Fe-40 at.%Al trong khoảng nhiệt độ 0–1300 K.

Ảnh hưởng của nhiệt độ đến cumulant bậc hai của hệ FeAl được chúng tôi biểu diễn trên Hình 3.4.

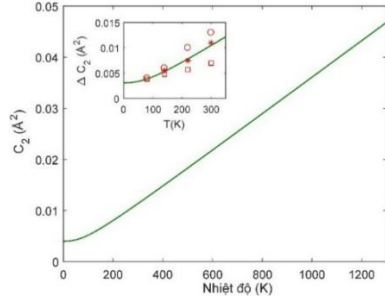
Dựa trên sự khác biệt giữa phép đo EXAFS và sự giãn nở nhiệt

của mạng tinh thể, chúng ta có thể suy ra thông tin của MSD  $\langle \Delta u_{\perp}^2 \rangle$  vuông góc với liên kết giữa nguyên tử hấp thụ và tán xạ.

$$\langle r \rangle \approx R_c + \langle \Delta u_{\perp}^2 \rangle / 2R_c \quad (3.29)$$



**Hình 3.3.** Hàng số mạng phụ thuộc nhiệt độ của B2-Fe-40 at.% Al.

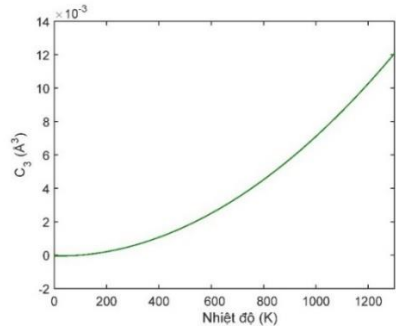
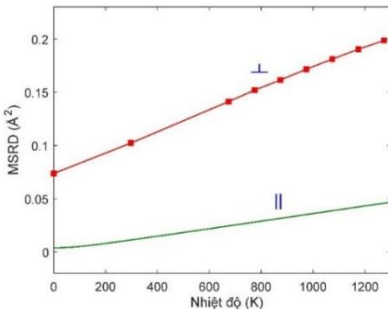


**Hình 3.4.** Sự phụ thuộc nhiệt độ của cumulant bậc hai của B2-Fe-40 at.% Al.

Ảnh hưởng của nhiệt độ đến MSRĐ vuông góc  $\langle \Delta u_{\perp}^2 \rangle$  và MSRĐ song song  $\langle \Delta u_{\parallel}^2 \rangle$  của hợp kim B2-Fe-40 at.% Al được chúng tôi biểu diễn trên Hình 3.5.

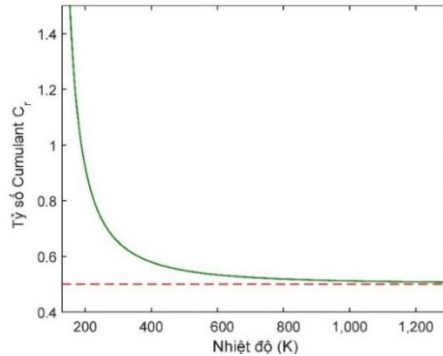
Sự phụ thuộc nhiệt độ đến 1300 K của cumulant bậc ba  $C_3$  của hợp kim FeAl thu được từ việc phát triển ACDM được chúng tôi mô tả trên Hình 3.6.

Tỷ số cumulant  $C_r = \frac{C_1 C_2}{C_3}$  [75] phụ thuộc nhiệt độ của hợp kim B2-Fe-40 at.% Al trong tính toán của nhóm chúng tôi dựa trên ACDM được biểu diễn trên Hình 3.7.



**Hình 3.5.** Sự phụ thuộc nhiệt độ của MSD song song và vuông góc của FeAl.

**Hình 3.6** Sự phụ thuộc nhiệt độ của cumulant bậc ba  $C_3$  của FeAl.

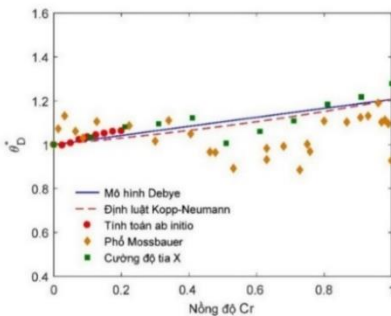


**Hình 3.7.** Sự phụ thuộc nhiệt độ của tỷ số cumulant  $C_r$  của FeAl.

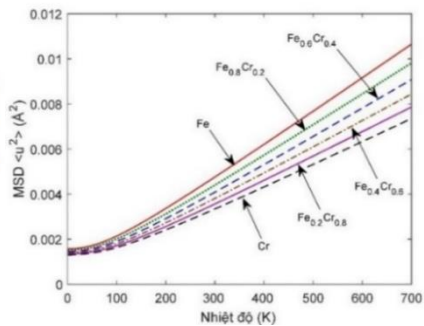
### 3.3.1.2. Tính chất nhiệt động của hợp kim hợp kim B2-FeCr

Kết quả nhiệt độ Debye chuẩn hóa của hợp kim  $Fe_{1-y}Cr_y$  ( $0 \leq y \leq 1$ ) được chúng tôi biểu diễn trên Hình 3.8. Trên Hình 3.9 chúng tôi biểu diễn các đường cong MSD phụ thuộc nhiệt độ của hợp kim FeCr với các nồng độ Cr khác nhau.

Sự phụ thuộc nồng độ Cr của hàm MSD của hợp kim FeCr tại nhiệt độ phòng được chúng tôi biểu diễn ở Hình 3.10.



**Hình 3.8.** Sự phụ thuộc nồng độ Cr của nhiệt độ Debye chuẩn

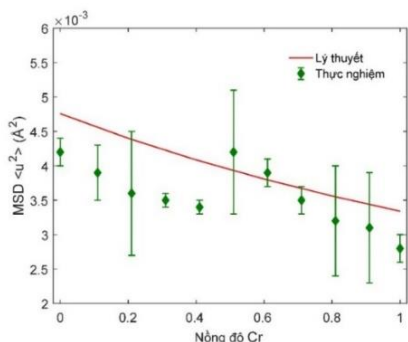


**Hình 3.9.** Sự phụ thuộc nhiệt độ của MSD của hợp kim FeCr

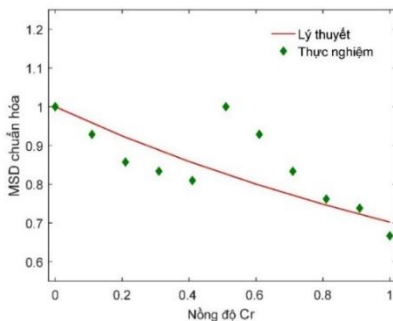
hóa của hợp kim FeCr.

với các nồng độ Cr khác nhau

Trên Hình 3.11, giá trị MSD chuẩn hóa được xác định bằng phép chia MSD của hợp kim FeCr cho giá trị MSD của kim loại Fe trong cùng một phương pháp.



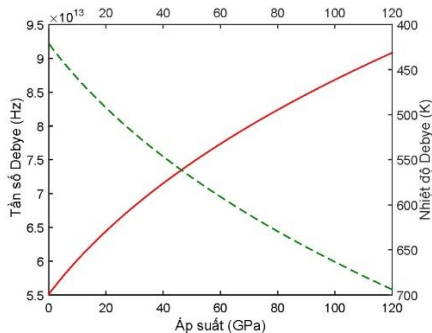
**Hình 3.10.** Sự phụ thuộc nồng độ Cr của MSD của hợp kim Fe-Cr.



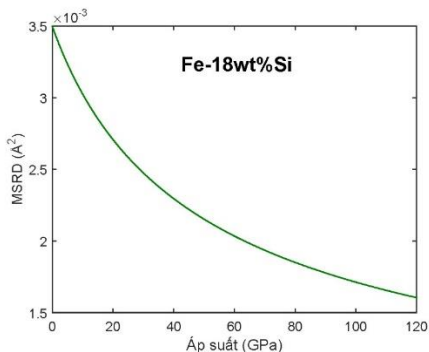
**Hình 3.11.** Sự phụ thuộc nồng độ Cr của MSD chuẩn hóa của hợp kim FeCr.

### 3.3.1.3. Tính chất nhiệt động của hợp kim Fe-Si ở áp suất cao

#### a) Tần số và nhiệt độ Debye. Hệ số Debye-Waller



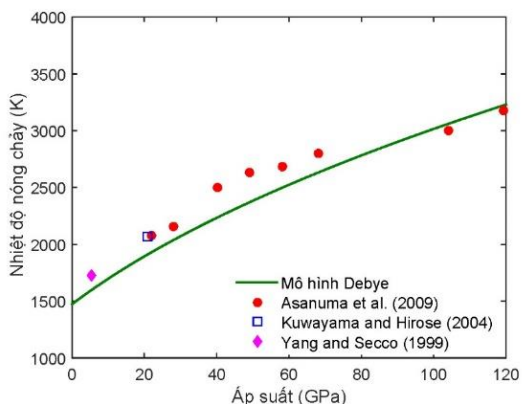
**Hình 3.12.** Tần số Debye (đường liền nét) và nhiệt độ Debye (đường nét đứt) của hợp kim Fe-18wt%Si dưới



**Hình 3.13.** Hệ số Debye-Waller của hợp kim Fe-18wt%Si dưới ảnh hưởng của áp suất

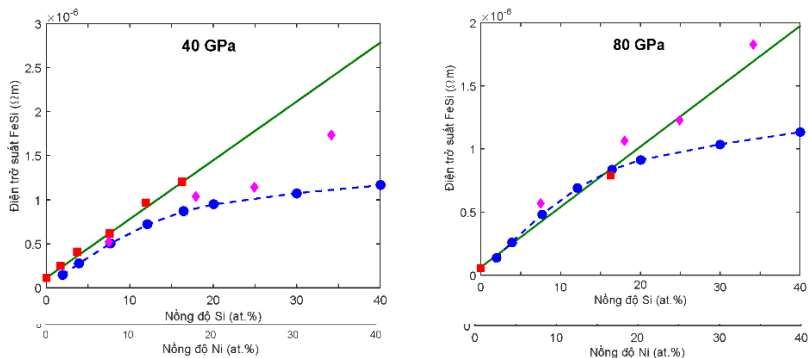
ảnh hưởng của áp suất

### b) Nhiệt độ nóng chảy

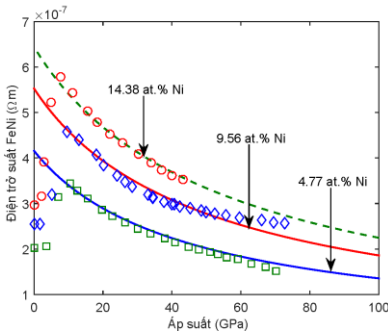


**Hình 3.14.** Nhiệt độ nóng chảy của hợp kim Fe-18wt%Si dưới ảnh hưởng của áp suất.

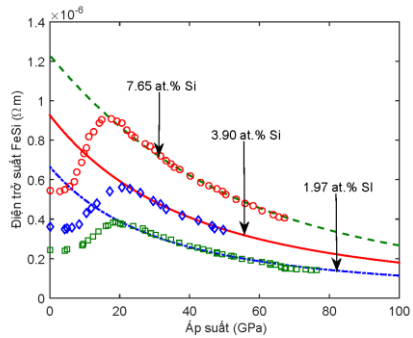
### 3.3.2. Tính chất dẫn điện của các hợp kim B2-FeSi và B2-FeNi



**Hình 3.15.** Ảnh hưởng của nồng độ tạp chất đến điện trở suất của các hợp kim FeNi và FeSi.



**Hình 3.16.** Đồ thị sự phụ thuộc áp suất của điện trở suất của hợp kim FeNi.



**Hình 3.17.** Đồ thị sự phụ thuộc áp suất của điện trở suất của hợp kim FeSi.

## KẾT LUẬN

Các kết quả chính mà luận án đạt được là

1. Phát triển mô hình Debye phi điều hoà để nghiên cứu ảnh hưởng của áp suất đến các đại lượng nhiệt động của kim loại sắt. Đã xây dựng được biểu thức giải tích phụ thuộc vào áp suất của tần số Debye, nhiệt độ Debye, DWF và nhiệt độ nóng chảy của sắt. Kết quả tính số cho thấy khi áp suất tăng sẽ dẫn đến sự tăng nhanh của tần số Debye, nhiệt độ Debye và nhiệt độ nóng chảy, và sự giảm nhanh của hàm DWF.

2. Phát triển mô hình Debye phi điều hoà để nghiên cứu các tính chất nhiệt động của các hợp kim sắt. Đã thiết lập được biểu thức giải tích của tần số Debye, nhiệt độ Debye, MSD và DWF của các hợp kim sắt với các nồng độ pha tạp khác nhau và tại các áp suất khác nhau. Kết quả tính số cho một số hợp kim cấu trúc B2 của sắt như Fe-Al, Fe-Si cho thấy sự phù hợp tốt với các giá trị thực nghiệm.

3. Dựa trên kết quả nghiên cứu sự phụ thuộc áp suất của nhiệt độ Debye, chúng tôi đề xuất một cách thức tiếp cận lý thuyết cho phép xác định ảnh hưởng của áp suất đến hệ số dẫn điện của kim loại sắt và hợp kim. Kết quả tính toán số chỉ ra rằng điện trở suất của



sắt và các hợp kim sắt (Fe-Ni, Fe-Si) giảm nhanh theo áp suất và tiến đến giá trị bão hòa ở áp suất và nhiệt độ cao.

Các kết quả tính số đạt được phù hợp tốt với thực nghiệm cho thấy rằng lý thuyết mà luận án xây dựng có thể được sử dụng để tiên đoán được các tính chất nhiệt động và độ dẫn điện của sắt và các hợp kim sắt dưới ảnh hưởng của áp suất. Đây là những thông tin vật lý quan trọng có thể giúp ích cho các nghiên cứu về thành phần, động lực học cũng như tiến hoá của Trái Đất và các hành tinh.

## DANH MỤC CÁC CÔNG TRÌNH KHOA HỌC ĐÃ CÔNG BỐ LIÊN QUAN TỚI LUẬN ÁN

1. Ho Khắc Hieu, Tran Thi Hai, **Nguyen Thi Hong**, Ngo Dinh Sang, Nguyen Viet Tuyen (2017), “Electrical Resistivity and Thermodynamic Properties of Iron Under High Pressure”, *Journal of Electronic Materials* **46** (6), pp. 3702-3706.
2. Ho Khắc Hieu, Tran Thi Hai, **Nguyen Thi Hong**, Ngo Dinh Sang, Nguyen Viet Tuyen (2017), “Pressure dependence of melting temperature and shear modulus of hcp iron”, *High Pressure Research* **37** (3), pp. 267-277.
3. Nguyen Viet Tuyen, Tran Thi Hai, **Nguyen Thi Hong**, Phan Thi Thanh Hong, Ho Khắc Hieu (2017), “High-pressure EXAFS Debye-Waller Factors of Metals”, *VNU Journal of Science: Mathematics – Physics* **33** (1), pp. 78-82.
4. **Nguyen Thi Hong**, Nguyen Ba Duc, Ho Khắc Hieu (2021) “EXAFS Debye-Waller factors of B2-FeAl alloys”, *VNU Journal of Science: Mathematics – Physics* **37** (2), pp. 43-48.
5. **Nguyen Thi Hong** and Ho Khắc Hieu (2021) “Investigation of Debye temperature and thermal disorder in Fe-Cr intermetallic alloys”, *Physica Scripta* **96** (7), pp.075701.
6. **Nguyễn Thị Hồng** (2021) “Ảnh hưởng của nồng độ tạp chất và áp suất đến điện trở suất của hợp kim FeNi”, *Tạp chí khoa học và công nghệ, trường Đại học Duy Tân, Đà Nẵng* (đã nhận đăng).