

**BỘ GIÁO DỤC VÀ ĐÀO TẠO**  
**TRƯỜNG ĐẠI HỌC SƯ PHẠM HÀ NỘI 2**

**LÊ HỒNG VIỆT**

**NGHIÊN CỨU**  
**TÍNH CHẤT NHIỆT ĐỘNG CỦA HỢP KIM XEN KÊ**  
**NHỊ NGUYÊN VÀ TAM NGUYÊN CÓ KHUYẾT TẬT**  
**VỚI CÁC CẤU TRÚC LẬP PHƯƠNG TÂM ĐIỆN**  
**VÀ LẬP PHƯƠNG TÂM KHỐI**

**Chuyên ngành: Vật lý lý thuyết và Vật lý toán**

**Mã số: 9 44 01 03**

**TÓM TẮT LUẬN ÁN TIẾN SĨ VẬT LÝ**

**HÀ NỘI - 2022**

Công trình được hoàn thành tại trường  
Đại học Sư phạm Hà Nội 2

**Người hướng dẫn khoa học 1:** PGS. TS Nguyễn Quang Học  
**Người hướng dẫn khoa học 2:** TS Phạm Thị Minh Hạnh

**Phản biện 1:** GS. TS. Nguyễn Hữu Tăng

**Phản biện 2:** GS. TS. Đỗ Đình Thanh

**Phản biện 3:** PGS. TS. Nguyễn Hồng Quang

Luận án sẽ được bảo vệ trước Hội đồng cấp Trường chấm luận án  
tiến sĩ họp tại Trường Đại học Sư phạm Hà Nội 2 vào hồi giờ ....  
ngày .... tháng ..... năm 2022.

Có thể tìm hiểu luận án tại:

- Thư viện Quốc gia Việt Nam
- Thư viện Trường Đại học Sư phạm Hà Nội 2

# MỞ ĐẦU

## 1. Lý do chọn đề tài

Hợp kim xen kẽ là một trong những vật liệu có vai trò chiến lược trong quân sự, khoa học kỹ thuật và công nghệ vật liệu như vật liệu siêu dẫn, điện và điện tử, hạt nhân, vũ trụ, luyện kim, trang sức và các thiết bị y tế. Những hợp kim nhẹ, bền, chịu được nhiệt độ và áp suất cao được sử dụng phổ biến trong các ngành công nghiệp chế tạo vũ khí khí tài, tên lửa, tàu vũ trụ, máy bay và ô tô. Hợp kim có tính bền hóa học và cơ học cao dùng để chế tạo các thiết bị trong công nghiệp dầu mỏ và công nghiệp hóa chất. Hợp kim không gỉ dùng để chế tạo các dụng cụ y tế và dụng cụ làm bếp. Hợp kim của vàng với bạc, đồng đẹp và cứng dùng để chế tác đồ trang sức.

Các khuyết tật nói chung và nút khuyết nói riêng có ảnh hưởng rất quan trọng đến tính chất của kim loại và hợp kim ở vùng nhiệt độ cao. Các nồng độ nút khuyết cân bằng tại điểm nóng chảy có bậc độ lớn khoảng  $10^{-3}$  trong các kim loại có điểm nóng chảy thấp và có bậc độ lớn khoảng  $10^{-2}$  trong các kim loại có điểm nóng chảy cao. Các ảnh hưởng phi tuyến mạnh trong nhiệt dung và sự giãn nở nhiệt ở các nhiệt độ cao có thể được giải thích bởi sự tạo thành các khuyết tật điểm. Ở áp suất cao trên 100 GPa, một loại khuyết tật khác là lệch mạng có đóng góp đáng kể đến nhiệt độ nóng chảy của tinh thể.

Nhiệt động lực học tính toán là thành phần cốt lõi của khoa học vật liệu tính toán vì các đặc tính nhiệt động lực học là các tính chất cơ bản nhất và có thể có ảnh hưởng lớn đến các đặc tính động học và quá trình xử lý vật liệu.

Có nhiều phương pháp lý thuyết nghiên cứu về nút khuyết và các tính chất nhiệt động của kim loại, hợp kim như phương pháp sóng phẳng của *ab initio* kết hợp mô hình Debye chuẩn điều hòa, tính toán *ab initio* kết hợp với phép gần đúng gradien suy rộng, *ab initio* kết hợp

lý thuyết phiếm hàm mật độ với phép gần đúng gradien suy rộng, tiếp cận của các pha cùng tồn tại, tính toán giản đồ pha, phương pháp hàm Green mạng, phương pháp nguyên tử những biến dạng, phương pháp học máy... Mỗi phương pháp đều có những ưu, nhược điểm riêng khi áp dụng cho hệ nhiều thành phần ở nhiệt độ và áp suất cao. Hầu hết các phương pháp nghiên cứu tính chất nhiệt động của kim loại và hợp kim đều là các phương pháp tính gần đúng, chưa tính đến hiệu ứng phi điều hoà trong dao động mạng tinh thể, thường chỉ xét ở áp suất không và áp suất thấp, chưa xét đến sự phụ thuộc của các đại lượng nhiệt động vào nồng độ của nguyên tử thay thế và xen kẽ. Kết quả các phương pháp lý thuyết nghiên cứu tính chất nhiệt động phần lớn cho kim loại và còn hạn chế đối với hợp kim. Một số kết quả nhận được từ phương pháp lý thuyết chưa thực sự phù hợp với thực nghiệm. Phương pháp thống kê mômen (SMM) là một phương pháp vật lý hiện đại của vật lý thống kê có thể áp dụng để nghiên cứu các tính chất nhiệt động, đàn hồi, khuếch tán, chuyển pha, nóng chảy,... cho nhiều loại vật liệu với các cấu trúc khác nhau trong khoảng nhiệt độ từ không độ tuyệt đối đến nhiệt độ nóng chảy của vật liệu và dưới tác dụng của áp suất kể cả áp suất cao hàng trăm GPa. SMM đã được áp dụng thành công để nghiên cứu các kim loại và hợp kim thay thế có khuyết tật. Tuy nhiên, việc nghiên cứu ảnh hưởng của khuyết tật lên tính chất nhiệt động, nóng chảy và chuyển pha cấu trúc của hợp kim xen kẽ nhị nguyên, hợp kim tam nguyên vừa thay thế vừa xen kẽ với các cấu trúc lập phương bằng SMM là một vấn đề còn bỏ ngỏ. Phương pháp này hi vọng khắc phục các nhược điểm nêu trên của các phương pháp khác.

Với những lí do trên, tôi lựa chọn đề tài của luận án là *“Nghiên cứu tính chất nhiệt động của hợp kim xen kẽ nhị nguyên và tam nguyên có khuyết tật với các cấu trúc lập phương tâm diện và lập phương tâm khối”*.

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

Áp dụng SMM để nghiên cứu các tính chất nhiệt động, nóng chảy và chuyển pha cấu trúc của các hợp kim xen kẽ nhị nguyên và tam nguyên có khuyết tật tính đến ảnh hưởng của nhiệt độ, áp suất, nồng độ nguyên tử thay thế, nồng độ nguyên tử xen kẽ và nồng độ nút khuyết cân bằng.

Đối tượng nghiên cứu là các tính chất nhiệt động của hợp kim xen kẽ nhị nguyên và tam nguyên có khuyết tật với cấu trúc lập phương.

Phạm vi nghiên cứu trong các khoảng nhiệt độ, áp suất, nồng độ nguyên tử thay thế, nồng độ nguyên tử xen kẽ và nồng độ nút khuyết cân bằng tương ứng với thực nghiệm.

## **3. Phương pháp nghiên cứu**

Phương pháp nghiên cứu là phương pháp thống kê mômen. Ngoài ra, trong tính số chúng tôi sử dụng phần mềm Maple và các phương pháp gần đúng như phép lặp gần đúng.

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

Các kết quả từ luận án cung cấp nhiều thông tin về các tính chất nhiệt động, nóng chảy và chuyển pha cấu trúc của hợp kim xen kẽ như sự phụ thuộc nhiệt độ, áp suất, nồng độ thành phần và nồng độ nút khuyết cân bằng của hệ số dẫn nở nhiệt, nhiệt dung đẳng áp, nhiệt độ nóng chảy, nhiệt độ chuyển pha cấu trúc. Luận án góp phần phát triển SMM trong nghiên cứu tính chất của vật liệu hợp kim xen kẽ cũng như cung cấp số liệu tham khảo cho các nghiên cứu tương lai. Một số kết quả tính số có thể dùng để dự báo, định hướng thực nghiệm.

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

Xây dựng biểu thức giải tích cho các đại lượng nhiệt động, nhiệt độ nóng chảy và nhiệt độ chuyển pha cấu trúc của các hợp kim xen kẽ

nhị nguyên và tam nguyên có khuyết tật với cấu trúc lập phương bằng SMM. Luận án góp phần bổ sung và hoàn thiện lý thuyết về nút khuyết cân bằng và hợp kim xen kẽ có cấu trúc lập phương.

Áp dụng lý thuyết thu được để tính số cho một số kim loại và hợp kim. Kết quả tính số thu được được so sánh với thực nghiệm và các kết quả tính toán bằng các phương pháp lý thuyết khác. Một số kết quả tính số có thể dự đoán, định hướng các thí nghiệm trong tương lai.

## **6. Cấu trúc của luận án**

Ngoài các phần Mở đầu, Kết luận, Tài liệu tham khảo và Phụ lục, nội dung luận án được trình bày trong 4 chương.

# CHƯƠNG 1

## TỔNG QUAN VỀ ĐỐI TƯỢNG NGHIÊN CỨU VÀ PHƯƠNG PHÁP NGHIÊN CỨU

Trong chương này, chúng tôi giới thiệu về hợp kim xen kẽ, lý thuyết nút khuyết và một số phương pháp lý thuyết trong nghiên cứu tính chất nhiệt động của kim loại và hợp kim. Các phương pháp đều có đánh giá ưu, nhược điểm khi áp dụng cho kim loại và hợp kim. Đặc biệt là chúng tôi trình bày SMM và giải thích lý do tại sao lựa chọn phương pháp này làm phương pháp nghiên cứu của luận án.

### 1.1. Hợp kim xen kẽ

Trong hợp kim xen kẽ, kim loại là thành phần chính thường chiếm 90% hoặc hơn. Các thành phần khác là phi kim. Đó là tác nhân tạo hợp kim và thường chiếm nồng độ dưới 1%. Các phi kim quan trọng nhất là C, H, O và N. Cấu trúc tinh thể của hợp kim xen kẽ do kim loại chính quyết định.

#### *1.1.1. Hợp kim xen kẽ nhị nguyên với cấu trúc lập phương*

Các hợp kim xen kẽ của Fe như FeSi, FeC và FeH cho ta biết thông tin về thành phần, cấu trúc, sự tiến hóa... của Trái Đất và các thiên thể. FeC gọi là thép cacbon chiếm tỉ trọng lớn trong ngành công nghiệp thép. Hợp kim thay thế FeCr được ứng dụng rộng rãi trong các lò phản ứng hạt nhân và các vật liệu kỹ thuật không gỉ chống mài mòn. Các hợp kim xen kẽ AuSi và CuSi thu hút sự quan tâm của các nhà nghiên cứu trong những năm gần đây vì ứng dụng nhiều trong công nghệ chế tạo dây siêu dẫn, trang sức, lắp ráp ổ trục, chấn lưu, đúc, hàn bước và che chắn bức xạ. Nghiên cứu các hợp kim TaSi và WSi đã được xác định bởi tính toán giản đồ pha. Việc biết giản đồ pha và các tính chất nhiệt động của các hệ TaSi, WSi có vai trò kỹ thuật quan trọng đối với các tiếp xúc kim loại giữa Ta, W, SiC trong các thiết bị điện và

điện tử. Các hợp kim như AuSi và CuSi thu hút sự quan tâm của các nhà nghiên cứu do các ứng dụng và tính chất vật lý dị thường của chúng.

Tính chất nhiệt động, đàn hồi, nóng chảy và khuếch tán của FeSi, FeC, FeH, WSi, AuSi, CuSi, AgC lý tưởng đã được nghiên cứu bằng SMM trong thời gian gần đây.

### ***1.1.2. Hợp kim xen kẽ tam nguyên với cấu trúc lập phương***

Zhang và cộng sự [*Physica B: Condensed Matter*, 586(2020) 412085] nghiên cứu ảnh hưởng của Si đến nhiệt độ Debye và hệ số dẫn nhiệt của FeCr, trong đó môđun Young của FeCrSi tăng theo sự tăng của nồng độ Cr. Pogatscher và cộng sự [*Physical Review Letters*, 112(22) (2014) 225701] nghiên cứu nồng độ nút khuyết cân bằng để kiểm soát các cơ chế lão hóa của hợp kim AlMgSi. Đây là hợp kim được sử dụng rộng rãi nhất của hợp kim nhôm với các ứng dụng công nghiệp như xây dựng, ô tô, máy bay, tên lửa, tàu vũ trụ và kiến trúc. Li và cộng sự [*Chemical Society Reviews*, 46(6)(2017)1693] nghiên cứu ảnh hưởng của nút khuyết lên các vật liệu có cấu trúc khác nhau như vật liệu chế tạo điện cực của pin liti trong lưu trữ năng lượng sạch, ion natri, chất xúc tác để tách hiđrô từ nước. Zhang và cộng sự [*Computational Materials Science*, 148(2018)249] nghiên cứu về khuyết tật điểm, nồng độ nút khuyết cân bằng nhằm nâng cao hiệu suất của các vật liệu được chiếu xạ. Gần đây, tính chất nhiệt động, đàn hồi và nóng chảy của FeCrSi, FeCrC, AuCuSi và AuCuLi lý tưởng đã được nghiên cứu bằng SMM.

## **1.2. Lý thuyết nút khuyết và các phương pháp lý thuyết trong nghiên cứu tính chất nhiệt động của kim loại và hợp kim**

Các nồng độ nút khuyết cân bằng tại điểm nóng chảy có bậc độ lớn khoảng  $10^{-3}$  trong các kim loại có điểm nóng chảy thấp và có bậc độ lớn khoảng  $10^{-2}$  trong các kim loại có điểm nóng chảy cao. Các ảnh hưởng



phi tuyến mạnh trong nhiệt dung và sự giãn nở nhiệt được giải thích bởi sự tạo thành khuyết tật điểm. Ở áp suất cao trên 100 GPa, một loại khuyết tật khác là lệch mạng có đóng góp đáng kể đến nhiệt độ nóng chảy của tinh thể.

Có nhiều phương pháp lý thuyết nghiên cứu về nút khuyết và các tính chất nhiệt động của kim loại, hợp kim như phương pháp sóng phẳng của *ab initio* kết hợp mô hình Debye chuẩn điều hòa, tính toán *ab initio* với phép gần đúng gradien suy rộng, *ab initio* kết hợp lý thuyết phiếm hàm mật độ với phép gần đúng gradien suy rộng, tiếp cận của các pha cùng tồn tại, tính toán giản đồ pha, phương pháp hàm Green mạng, phương pháp nguyên tử nhúng biến dạng, phương pháp học máy... Mỗi phương pháp đều có những ưu, nhược điểm riêng khi áp dụng cho hệ nhiều thành phần ở nhiệt độ và áp suất cao.

### 1.3. Phương pháp thống kê mômen

SMM dựa trên công thức truy hồi sau đây về các mômen

$$\langle \hat{K}_{n+1} \rangle_a = \langle \hat{K}_n \rangle_a \langle \hat{Q}_{n+1} \rangle_a + \theta \frac{\partial \langle \hat{K}_n \rangle_a}{\partial a_{n+1}} - \theta \sum_{m=0}^{\infty} \frac{B_{2m}}{(2m)!} \left( \frac{i\hbar}{\theta} \right)^{2m} \left\langle \frac{\partial \hat{K}_n^{(2m)}}{\partial a_{n+1}} \right\rangle_a. \quad (1.44)$$

Công thức này cho phép xác định mômen cấp cao qua mômen cấp thấp hơn thậm chí có thể biểu diễn qua mômen cấp một.

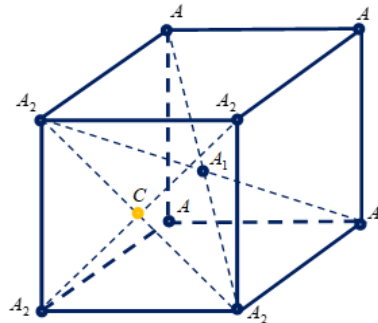
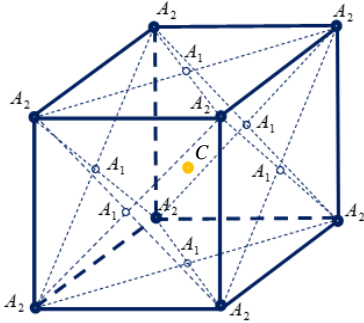
## CHƯƠNG 2

### TÍNH CHẤT NHIỆT ĐỘNG CỦA HỢP KIM XEN KẼ NHỊ NGUYÊN CÓ KHUYẾT TẬT VỚI CẤU TRÚC LẬP PHƯƠNG

Trong chương 2, chúng tôi sử dụng SMM và phương pháp quả cầu phối vị để rút ra các biểu thức giải tích tổng quát của năng lượng tự do, độ dãn của hạt khối nút mạng, khoảng lân cận gần nhất trung bình giữa hai nguyên tử, nồng độ nút khuyết cân bằng, các đại lượng nhiệt động của hợp kim xen kẽ AC có khuyết tật và áp dụng tính số cho các hợp kim AuSi và PtSi. Một phần nội dung chương này được công bố trong [CT2, CT3, CT5].

#### 2.1. Hợp kim xen kẽ nhị nguyên lí tưởng với cấu trúc lập phương

##### 2.1.1. Mô hình hợp kim



**Hình 2.1.** Mô hình hợp kim xen

kẽ AC với cấu trúc FCC

Đối với mạng FCC,  $c_A = 1 - 15c_C$ ,  $c_{A_1} = 6c_C$ ,  $c_{A_2} = 8c_C$

Đối với mạng BCC,  $c_A = 1 - 7c_C$ ,  $c_{A_1} = 2c_C$ ,  $c_{A_2} = 4c_C$

**Hình 2.2.** Mô hình hợp kim xen

kẽ AC với cấu trúc BCC

##### 2.1.2. Năng lượng tự do Helmholtz

$$\Psi_{AC} = N\psi_{AC} = N \sum_{X=A,C,A_1,A_2} c_X \psi_X - TS_c^{AC},$$

$$\Psi_X = N\psi_X = U_{0X} + \Psi_{0X} + \frac{3N\theta^2}{k_X^2} \left[ \gamma_{2X} Y_X^2 - \frac{2\gamma_{1X}}{3} \left( 1 + \frac{Y_X}{2} \right) \right] + \frac{6N\theta^3}{k_X^4} \left[ \frac{4}{3} \gamma_{2X}^2 Y_X \left( 1 + \frac{Y_X}{2} \right) - 2(\gamma_{1X}^2 + 2\gamma_{1X}\gamma_{2X}) \left( 1 + \frac{Y_X}{2} \right) (1 + Y_X) \right], \quad (2.1)$$

### 2.1.3. Năng lượng liên kết và các thông số hợp kim

Năng lượng liên kết  $u_0$  và các thông số tinh thể  $k$ ,  $\gamma_1, \gamma_2, \gamma$  đối với nguyên tử kim loại chính A trong kim loại sạch A, nguyên tử xen kẽ C, nguyên tử kim loại chính  $A_1$  ở tâm khối hoặc tâm mặt, nguyên tử kim loại chính  $A_2$  ở đỉnh của ô mạng lập phương trong hợp kim AC được xác định bằng SMM và trong phép gần đúng hai hoặc ba quả cầu phối vị (các công thức từ (2.2) đến (2.39)).

### 2.1.4. Khoảng lân cận gần nhất trung bình giữa hai nguyên tử

Khoảng lân cận gần nhất  $r_{iX}(P, 0)$  ( $X = A, A_1, A_2, C$ ) được xác định từ phương trình trạng thái

$$P_V = -r_1 \left( \frac{1}{6} \frac{\partial u_0}{\partial r_1} + \frac{\hbar \omega_0}{4k} \frac{\partial k}{\partial r_1} \right). \quad (2.41)$$

Các khoảng lân cận gần nhất được xác định bởi

$$r_{iC}(P, T) = r_{iC}(P, 0) + y_{A_1}(P, T), r_{iA}(P, T) = r_{iA}(P, 0) + y_A(P, T), \\ r_{iA_1}(P, T) = r_{iC}(P, T), r_{iA_2}(P, T) = r_{iA_2}(P, 0) + y_C(P, T), \quad (2.42)$$

$$\overline{r_{iA}(P, T)} = \overline{r_{iA}(P, 0)} + \overline{y(P, T)}, \overline{r_{iA}(P, 0)} = (1 - c_C) r_{iA}(P, 0) + c_C r'_{iA}(P, 0), \\ \overline{y(P, T)} = c_A y_A(P, T) + c_C y_C(P, T) + c_{A_1} y_{A_1}(P, T) + c_{A_2} y_{A_2}(P, T), \quad (2.43)$$

## 2.2. Hợp kim xen kẽ nhị nguyên có khuyết tật với cấu trúc lập phương

### 2.2.1. Năng lượng tự do Helmholtz

$$\Psi_{AC}^R = N \left\{ \sum_{X=A, C, A_1, A_2} \left\{ [1 - n_v n_1 + n_v (B_X - 1)] c_X \psi_X + n_v n_1 c_X \psi_X^{(1)} \right\} \right\} - T (S_c^{AC*} + S_c^{AC}). \quad (2.50)$$

### 2.2.2. Độ dời của nguyên tử từ vị trí cân bằng

$$y = \frac{1}{N} \left[ (N - n_1 n - n_2 n) y_0 + n_1 n y_1 \right] \quad (2.51)$$

### 2.2.3. Nồng độ nút khuyết cân bằng

$$n_v^{AC} = n_v^A \exp\left(-\frac{c_C g_v^f(C)}{k_{Bo} T}\right), \quad n_v^A = \exp\left(-\frac{\sum_{X=A,C,A_1,A_2} c_X g_v^f(X)}{k_{Bo} T}\right) \quad (2.69)$$

## 2.3. Các đại lượng nhiệt động

$$\chi_{TAC}^R = \frac{3 \left( \frac{a_{AC}}{a_{0AC}} \right)^3}{2P + \frac{a_{AC}^2}{V_{AC}} \frac{1}{3N} \left( \frac{\partial^2 \Psi_{AC}^R}{\partial a_{AC}^2} \right)_T}, \quad (2.70)$$

$$\alpha_{TAC}^R = -\frac{\sqrt{2} k_{Bo} \chi_{TAC}^R}{3a_{AC}} \frac{1}{3N} \frac{\partial^2 \Psi_{AC}^R}{\partial \theta \partial a_{AC}}, \quad (2.71)$$

$$C_{VAC}^R = N \sum_{X=A,C,A_1,A_2} \left\{ [1 - n_v n_1 + n_v (B_X - 1)] c_X C_{VX} + n_v n_1 c_X C_{VX}^{(1)} \right\}, \quad (2.74)$$

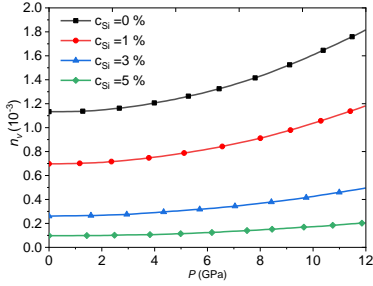
## 2.4. Kết quả tính số các đại lượng nhiệt động của hợp kim xen kẽ AuSi và PtSi

### 2.4.1. Thế tương tác giữa các nguyên tử trong hợp kim xen kẽ

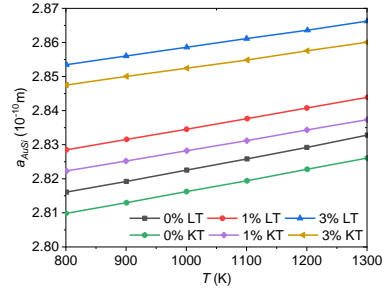
$$\varphi(r) = \frac{D}{n-m} \left[ m \left( \frac{r_0}{r} \right)^n - n \left( \frac{r_0}{r} \right)^m \right]. \quad (2.84)$$

### 2.4.2. Kết quả tính số đối với các đại lượng nhiệt động của AuSi và PtSi

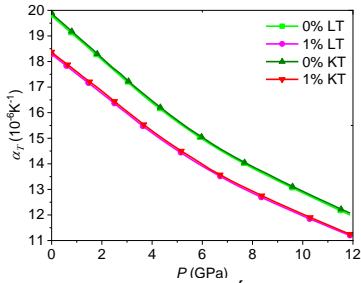
Đối với Au trong AuSi tại  $P = 0$  trong khoảng từ 800 K đến 1300 K, nồng độ nút khuyết cân bằng  $n_v$  tăng từ  $10^{-5}$  đến  $10^{-3}$ . Điều này phù hợp với thực nghiệm.  $n_v$  giảm rõ rệt theo nồng độ Si. Khi  $P$  (hoặc  $T$ ) tăng, các thăng giáng tăng mạnh hơn và làm cho  $n_v$  cũng tăng mạnh. Kết quả này phù hợp với thực nghiệm. Do ở vùng  $T$  và  $P$  thấp,  $n_v$  rất nhỏ nên khi đó có thể xem tinh thể là lí tưởng. Nhưng ở vùng  $T$  và  $P$  cao, ảnh hưởng của  $n_v$  lên tính chất cơ nhiệt của tinh thể là đáng kể.



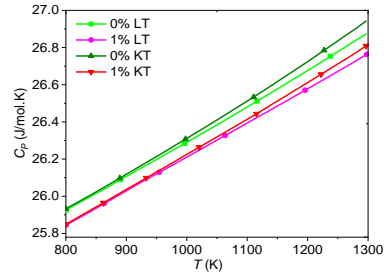
**Hình 2.3.**  $n_v(P, c_{Si})$  đối với AuSi (KT) tại  $T = 1200$  K



**Hình 2.4.**  $a(T, c_{Si})$  đối với AuSi tại  $P = 12$  GPa



**Hình 2.7.**  $\alpha_T(P, c_{Si})$  đối với AuSi tại  $T = 1200$  K



**Hình 2.8.**  $C_p(T, c_{Si})$  đối với AuSi tại  $P = 12$  GPa

Khi  $T$  tăng, khoảng lân cận gần nhất trung bình  $a$ , hệ số dẫn nhiệt  $\alpha_T$  và nhiệt dung đẳng áp  $C_p$  đều tăng, đặc biệt là  $\alpha_T$ . Khi  $P$  tăng, các đại lượng này đều giảm. Khi  $T$  và  $P$  càng cao,  $c_{Si}$  càng nhỏ thì ảnh hưởng của nút khuyết lên tính chất cơ nhiệt của tinh thể càng mạnh.

Đối với Au, sai số cực đại giữa tính toán và thực nghiệm là 4,4% đối với  $\alpha_T$  tại 700 K và 5,4% đối với  $C_p$  tại 1200 K, nghĩa là có sự phù hợp tốt giữa tính toán và thực nghiệm trong một khoảng nhiệt độ rộng. Kết quả tính toán đối với  $C_p$  của Au có nút khuyết tốt hơn kết quả tính toán đối với  $C_p$  của Au lí tưởng. Tuy nhiên, kết quả tính toán đối với  $\alpha_T$  của Au có nút khuyết kém hơn kết quả tính toán đối với  $\alpha_T$  của Au lí tưởng mặc dù vẫn trong phạm vi sai số cho phép.

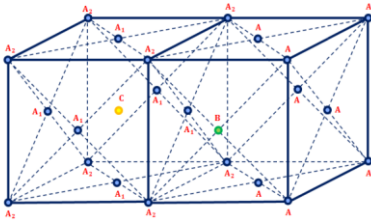
## CHƯƠNG 3

### TÍNH CHẤT NHIỆT ĐỘNG CỦA HỢP KIM XEN KẼ TAM NGUYÊN CÓ KHUYẾT TẬT VỚI CẤU TRÚC LẬP PHƯƠNG

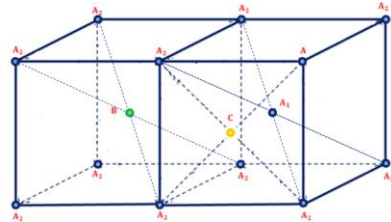
Trong chương 3, chúng tôi cũng sử dụng SMM và phương pháp quả cầu phối vị để rút ra các biểu thức giải tích tổng quát của năng lượng tự do, độ dãn của hạt khối nút mạng, khoảng lân cận gần nhất trung bình giữa hai nguyên tử, nồng độ nút khuyết cân bằng, các đại lượng nhiệt động của hợp kim xen kẽ ABC (hợp kim thay thế AB xen kẽ nguyên tử C) có khuyết tật và áp dụng tính số đối với các hợp kim AuCuSi, PtCuSi, FeCrSi và VWSi. Một phần nội dung chương này được công bố trong [CT1, CT4, CT6].

#### 3.1. Hợp kim xen kẽ tam nguyên lí tưởng với cấu trúc lập phương

##### 3.1.1. Mô hình hợp kim



**Hình 3.1.** Mô hình hợp kim ABC với cấu trúc FCC



**Hình 3.2.** Mô hình hợp kim ABC với cấu trúc BCC

##### 3.1.2. Năng lượng tự do Helmholtz

$$\begin{aligned} \Psi_{ABC} &= \Psi_{AC} + Nc_B(\psi_B - \psi_A) + TS_c^{AC} - TS_c^{ABC} = \\ &= N \sum_{X=A,B,C,A_1,A_2} c_X \psi_X + TS_c^{AC} - TS_c^{ABC}, \end{aligned} \quad (3.1)$$

Đối với mạng FCC,  $c_A = 1 - 15c_C$ ,  $c_{A_1} = 6c_C$ ,  $c_{A_2} = 8c_C$

Đối với mạng BCC,  $c_A = 1 - 7c_C$ ,  $c_{A_1} = 2c_C$ ,  $c_{A_2} = 4c_C$

##### 3.1.3. Năng lượng liên kết và các thông số hợp kim

Các biểu thức của năng lượng liên kết và các thông số tinh thể đối với các nguyên tử C, A<sub>1</sub>, A<sub>2</sub> của hợp kim xen kẽ AC trong hợp kim ABC giống như ở chương 2.

### 3.1.4. Khoảng lân cận gần nhất trung bình giữa hai nguyên tử

$$a_{ABC} = c_{AC} a_{AC} \frac{B_{TAC}^R}{B_T^R} + c_B r_{1B} \frac{B_{TB}^R}{B_T^R} \quad (3.2)$$

## 3.2. Hợp kim xen kẽ tam nguyên có khuyết tật với cấu trúc lập phương

### 3.2.1. Năng lượng tự do Helmholtz

$$\Psi_{ABC}^R = N \Psi_{ABC}^R = N \sum_{X=A,B,C,A_1,A_2} \left\{ [1 - n_v n_1 + n_v (B_X - 1)] c_X \psi_X + n_v n_1 c_X \psi_X^{(1)} \right\} - T \left( S_c^{ABC*} + S_c^{ABC} - S_c^{AC} \right) \quad (3.9)$$

### 3.2.2. Độ dời của nguyên tử từ vị trí cân bằng

$$y = \frac{1}{N} \left[ (N - n_1 n - n_2 n) y_0 + n_1 n y_1 \right], \quad (3.10)$$

### 3.2.3. Nồng độ nút khuyết cân bằng

$$n_v^{ABC} = n_v^A \exp \left( -\frac{c_B g_v^f(B)}{k_{Bo} T} \right) \exp \left( -\frac{c_C g_v^f(C)}{k_{Bo} T} \right), \quad (3.13)$$

## 3.3. Các đại lượng nhiệt động

$$\chi_{TABC}^R = \frac{3 \left( \frac{a_{ABC}}{a_{0ABC}} \right)^3}{2P + \frac{a_{ABC}^2}{V_{ABC}} \frac{1}{3N} \left( \frac{\partial^2 \Psi_{ABC}^R}{\partial a_{ABC}^2} \right)_T}, \quad (3.14)$$

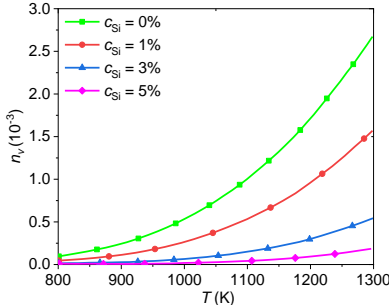
$$\alpha_{TABC}^R = -\frac{\sqrt{2} k_{Bo} \chi_{TABC}^R}{3a_{ABC}} \frac{1}{3N} \frac{\partial^2 \Psi_{ABC}^R}{\partial \theta \partial a_{AC}}, \quad (3.15)$$

$$C_{VAC}^R = N \sum_{X=A,B,C,A_1,A_2} \left\{ [1 - n_v n_1 + n_v (B_X - 1)] c_X C_{VX} + n_v n_1 c_X C_{VX}^{(1)} \right\}, \quad (3.18)$$

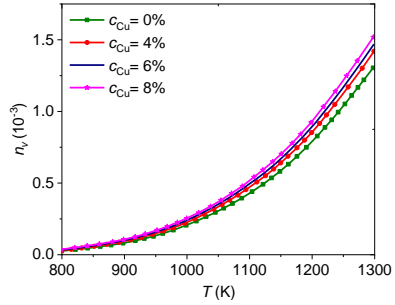
$$C_{PABC}^R = C_{VABC}^R + \frac{9TV_{ABC} \alpha_{TABC}^{R2}}{\chi_{TABC}^R}. \quad (3.19)$$

### 3.4. Kết quả tính số các đại lượng nhiệt động của hợp kim xen kẽ

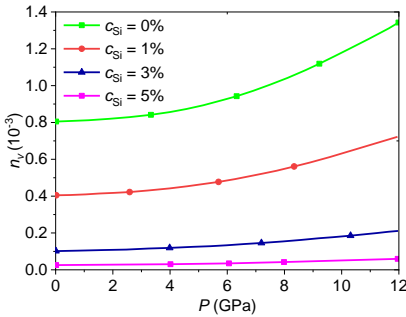
#### 3.4.1. Kết quả tính số các đại lượng nhiệt động của AuCuSi và PtCuSi với cấu trúc FCC



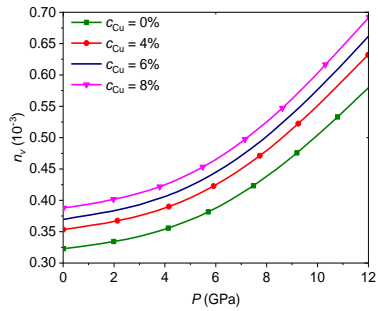
**Hình 3.3.**  $n_v(T, c_{Si})$  đối với AuCuSi tại  $P = 8$  GPa,  $c_{Cu} = 10\%$



**Hình 3.4.**  $n_v(T, c_{Cu})$  đối với AuCuSi tại  $P = 8$  GPa,  $c_{Si} = 1\%$



**Hình 3.5.**  $n_v(P, c_{Si})$  đối với AuCuSi tại  $T = 1100$  K,  $c_{Cu} = 10\%$

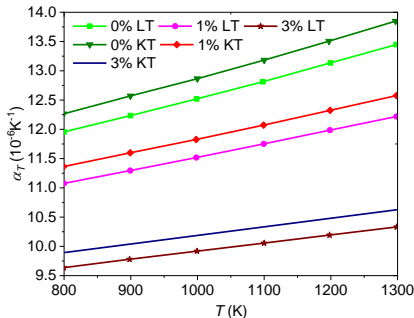


**Hình 3.6.**  $n_v(P, c_{Cu})$  đối với AuCuSi tại  $T = 1000$  K,  $c_{Si} = 1\%$

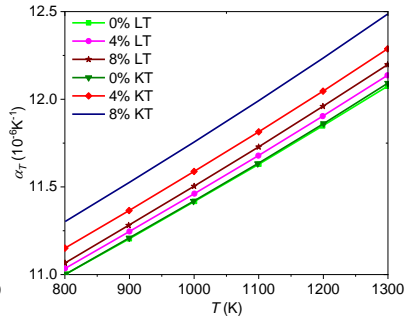
Đối với AuCuSi, trong khoảng  $P = 0 \div 12$  GPa,  $T = 800 \text{ K} \div 1300 \text{ K}$  thì nồng độ nút khuyết cân bằng rơi vào khoảng từ  $10^{-5}$  đến  $10^{-3}$ . Kết quả này phù hợp tốt với thực nghiệm đối với Au ở các nhiệt độ và áp suất cao. Bên cạnh đó,  $n_v$  phụ thuộc mạnh vào  $T$  và  $P$ . Khi  $T$  và  $P$  tăng,  $n_v$  cũng tăng. Ở gần nhiệt độ nóng chảy của Au,  $n_v$  tăng mạnh. Do ở  $T$  và  $P$  thấp,  $n_v$  rất nhỏ nên khi đó hợp kim được coi là lí tưởng, còn ở  $T$  và  $P$  cao,  $n_v$  là đáng kể và không thể bỏ qua ảnh hưởng của nút khuyết,



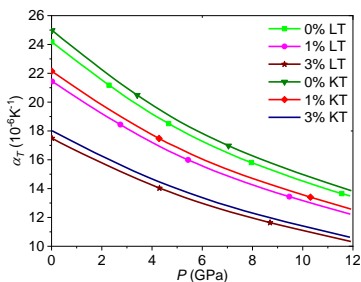
$n_v$  cũng thay đổi rõ rệt theo  $c_{Si}$ . Khi  $c_{Si}$  tăng,  $n_v$  giảm mạnh. Xét ảnh hưởng của  $c_{Cu}$  lên  $n_v$ . Mặc dù  $c_{Cu}$  lớn hơn nhiều so với  $c_{Si}$  nhưng  $c_{Cu}$  không làm thay đổi lớn đến  $n_v$  và các tính chất khác của hợp kim.



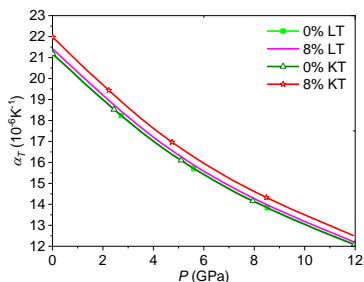
**Hình 3.10.**  $\alpha_T(T, c_{Si})$  đối với AuCuSi tại  $P = 12$  GPa,  $c_{Cu} = 10\%$



**Hình 3.11.**  $\alpha_T(T, c_{Cu})$  đối với AuCuSi tại  $P = 12$  GPa,  $c_{Si} = 1\%$



**Hình 3.12.**  $\alpha_T(P, c_{Si})$  đối với AuCuSi tại  $T = 1300$  K,  $c_{Cu} = 10\%$

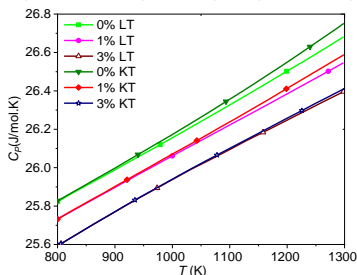


**Hình 3.13.**  $\alpha_T(P, c_{Cu})$  đối với AuCuSi tại  $T = 1300$  K,  $c_{Si} = 1\%$

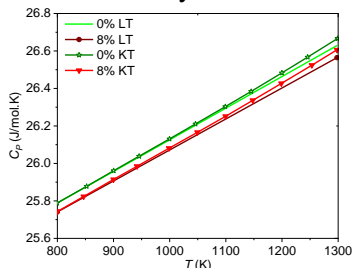
Xét khoảng lân cận gần nhất trung bình  $a$  trong AuCuSi. Ở cùng  $T$ ,  $P$  và nồng độ pha tạp,  $a$  của hợp kim có khuyết tật nhỏ hơn  $a$  của hợp kim lí tưởng.

Xét sự phụ thuộc của  $\alpha_T$  vào  $T$  và  $P$ . Ở cùng  $P$  và nồng độ pha tạp,  $\alpha_T$  tăng theo  $T$ , còn ở cùng  $T$  và nồng độ pha tạp,  $\alpha_T$  giảm theo  $P$ . Điều này phù hợp với thực nghiệm. Ở cùng  $T$  và  $P$  khi  $c_{Si}$  tăng,  $\alpha_T$  giảm. Nếu xét riêng hợp kim lí tưởng hoặc hợp kim có khuyết tật, tuy

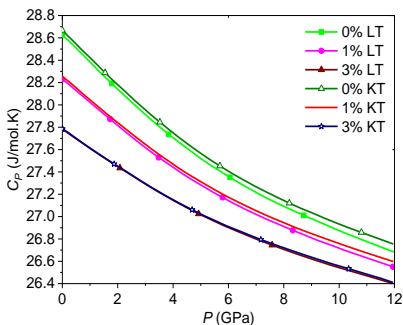
sự phụ thuộc của  $\alpha_T$  vào  $c_{Cu}$  kém hơn so với  $c_{Si}$  nhưng  $c_{Cu}$  có vai trò quan trọng trong việc tạo ra sự khác biệt giữa  $\alpha_T$  của hợp kim lý tưởng và  $\alpha_T$  của hợp kim có khuyết tật cũng như các tính chất khác. Nếu nguyên tử xen kẽ cản trở sự tạo thành nút khuyết thì nguyên tử thay thế tạo điều kiện thuận lợi cho sự hình thành nút khuyết.



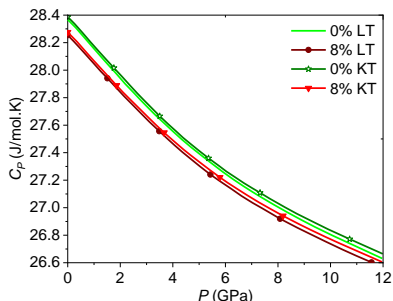
**Hình 3.18.**  $C_p(T, c_{Si})$  đối với AuCuSi tại  $P = 12$  GPa,  $c_{Cu} = 10\%$



**Hình 3.19.**  $C_p(T, c_{Cu})$  đối với AuCuSi tại  $P = 12$  GPa,  $c_{Si} = 1\%$



**Hình 3.20.**  $C_p(P, c_{Si})$  đối với AuCuSi tại  $T = 1300$  K,  $c_{Cu} = 10\%$



**Hình 3.21.**  $C_p(P, c_{Cu})$  đối với AuCuSi tại  $T = 1300$  K,  $c_{Si} = 1\%$

Sự phụ thuộc của  $C_p$  vào  $T$ ,  $P$  và nồng độ pha tạp đối với AuCuSi và PtCuSi giống như  $\alpha_T$ . Tuy nhiên, ở cùng một nồng độ pha tạp,  $C_p$  biến đổi theo  $T$  và  $P$  không mạnh như  $\alpha_T$ . Điều này phù hợp với lý thuyết vật lý thống kê lượng tử và thực nghiệm khi nghiên cứu  $C_p$  của chất rắn ở trong vùng  $T$  và  $P$  cao.

### 3.4.2. Kết quả tính số các đại lượng nhiệt động của FeCrSi và VWSi với cấu trúc BCC

Đối với FeCrSi,  $n_v$  phụ thuộc mạnh vào  $P$  và  $T$ . Ở cùng  $c_{Cr}$  và  $c_{Si}$  khi  $P$  (hoặc  $T$ ) tăng,  $n_v$  cũng tăng đáng kể. Ở vùng  $P$  và  $T$  thấp,  $n_v$  rất nhỏ và hợp kim được coi là lí tưởng, còn ở vùng  $P$  và  $T$  cao,  $n_v$  tăng mạnh theo hàm mũ và làm thay đổi tính chất của hợp kim.  $n_v$  tăng theo  $P$  không nhanh bằng tăng theo  $T$  nhưng sự thay đổi của  $n_v$  là rõ rệt. Kết quả này phù hợp với thực nghiệm vì khi  $T$  và  $P$  tăng, thăng giáng của mạng tinh thể tăng và tạo điều kiện thuận lợi cho sự hình thành nút khuyết.

Khi pha thêm Si hoặc Cr vào mạng của Fe,  $n_v$  giảm mạnh. Cr thường được pha thêm vào Fe để tạo ra thép có độ bền và độ cứng cao, tức là, năng lượng liên kết  $u_0$  giữa nguyên tử với mạng tinh thể trở nên mạnh hơn. Điều này cản trở sự tạo thành nút khuyết. Tuy nhiên,  $c_{Cr}$  không làm  $n_v$  giảm mạnh bằng  $c_{Si}$ .

Các khoảng lân cận gần nhất trung bình  $a$  của FeCrSi và VWSi đều tăng theo  $T$ , giảm theo  $P$ , tăng theo  $c_{Si}$  và giảm theo  $c_{Cr}$  hoặc  $c_W$ .  $a$  đối với hợp kim có khuyết tật nhỏ hơn  $a$  tương ứng đối với hợp kim lí tưởng.

Xét hệ số dẫn nở nhiệt  $\alpha_T$  và nhiệt dung đẳng áp  $C_p$  của FeCrSi và VWSi. Ở cùng  $P$ ,  $c_{Si}$  và  $c_{Cr}$  (hoặc  $c_W$ ) khi  $T$  tăng,  $\alpha_T$  tăng. Ở cùng  $P$ ,  $c_{Si}$  và  $c_{Cr}$  (hoặc  $c_W$ ) khi  $T$  tăng,  $C_p$  cũng tăng theo  $T$  nhưng sự tăng này không mạnh như sự tăng của  $\alpha_T$  theo  $T$ . Ở cùng  $T$  khi  $P$  hoặc  $c_{Si}$  (hoặc  $c_W$ ) tăng,  $\alpha_T$  và  $C_p$  đều giảm.  $C_p$  của hợp kim có khuyết tật nhỏ hơn  $C_p$  của hợp kim lí tưởng.  $\alpha_T$  của hợp kim có khuyết tật lớn hơn  $\alpha_T$  của hợp kim lí tưởng.

## CHƯƠNG 4

### NÓNG CHẢY VÀ CHUYỂN PHA CẤU TRÚC CỦA HỢP KIM XEN KẼ NHỊ NGUYÊN VÀ TAM NGUYÊN CÓ KHUYẾT TẬT VỚI CẤU TRÚC LẬP PHƯƠNG

Trong chương 4, chúng tôi xây dựng lý thuyết nóng chảy và chuyển pha cấu trúc của các hợp kim xen kẽ AC và ABC có khuyết tật với cấu trúc lập phương bằng SMM và tiến hành tính số đối với nhiệt độ nóng chảy của các hợp kim FeC, TaSi, WSi và nhiệt độ chuyển pha cấu trúc của kim loại Fe. Nội dung chương 4 được công bố trong [CT3, CT4, CT5].

#### 4.1. Nóng chảy và chuyển pha cấu trúc của hợp kim xen kẽ nhị nguyên có khuyết tật với cấu trúc lập phương

##### 4.1.1. Lý thuyết nóng chảy

$$\left(\frac{\partial P}{\partial v}\right)_{T=T_s} = 0, \quad (4.1)$$

$$T_s = \frac{a_s}{18k_{Bo}\gamma_G(P, T_s)} \left(\frac{\partial u_0}{\partial a}\right)_{T=T_s} + \left(\frac{\partial T}{\partial P}\right)_v P, \quad (4.3)$$

$$T_m \approx T_s + \frac{a_m - a_s}{k_{Bo}\gamma_G(P, T_s)} \left\{ \frac{Pv(P, T_s)}{a_s} + \frac{1}{18} \left[ \left(\frac{\partial u_0}{\partial a}\right)_{T=T_s} + a_s \left(\frac{\partial^2 u_0}{\partial a^2}\right)_{T=T_s} \right] \right\} \quad (4.4)$$

$$T_m(P) = T_m(0) \left[ \frac{a(P, 300K)}{a(P=0, 300K)} \right]^2 \frac{k(P, 300K)}{k(P=0, 300K)}. \quad (4.6)$$

$$T_m(P) = T_m(0) \frac{G(P, 300K)}{G(P=0, 300K)} \left[ \frac{B_T(P, 300K)}{B_T(P=0, 300K)} \right]^{\frac{1}{b}}, \quad (4.7)$$

$$T_m^R = T_m - \left(\frac{\partial T}{\partial n_v}\right)_{P,V} n_v(T_m) = T_m - \frac{T_m^2}{\frac{T_m}{4} \frac{\partial u_0}{\partial \theta} - \frac{u_0}{4k_B}}, \quad (4.10)$$

$$T_S(0) = \frac{a_{AC}}{18\gamma_G^T k_{Bo}} \sum_{X=A,C,A_1,A_2} \left\{ [1 - n_X n_1 + n_v (B_X - 1)] c_X \frac{\partial U_{0X}}{\partial a_X} + n_X n_1 c_X \frac{\partial U_{0X}^{(1)}}{\partial a_X} \right\} \quad (4.20)$$

$$T_m(P) = \frac{T_m(0)B_0^{\frac{1}{B_0}}}{G(0)} \cdot \frac{G(P)}{(B_0 + B_0'P)^{\frac{1}{B_0}}}. \quad (4.31)$$

#### 4.1.2. Lý thuyết chuyển pha cấu trúc

$$T_{AC}^{R\alpha-\beta}(P=0) = \left| \frac{\Delta E_{AC}^R}{\Delta S_{AC}^R} \right| = \left| \frac{E_{AC}^{R\alpha} - E_{AC}^{R\beta}}{S_{AC}^{R\alpha} - S_{AC}^{R\beta}} \right|. \quad (4.33)$$

$$T_{AC}^{R\alpha-\beta}(P) = \left| \frac{\Delta E_{AC}^R + P\Delta V_{AC}}{\Delta S_{AC}^R} \right| = \left| \frac{E_{AC}^{R\alpha} - E_{AC}^{R\beta} + P(V_{AC}^{\alpha} - V_{AC}^{\beta})}{S_{AC}^{R\alpha} - S_{AC}^{R\beta}} \right|. \quad (4.39)$$

### 4.2. Nóng chảy và chuyển pha cấu trúc của hợp kim xen kẽ tam nguyên có khuyết tật với cấu trúc lập phương

#### 4.2.1. Lý thuyết nóng chảy

Ta cũng áp dụng lý thuyết nóng chảy đề cập ở mục 4.1.1. đối với hợp kim ABC có khuyết tật với cấu trúc lập phương.

#### 4.2.2. Lý thuyết chuyển pha cấu trúc

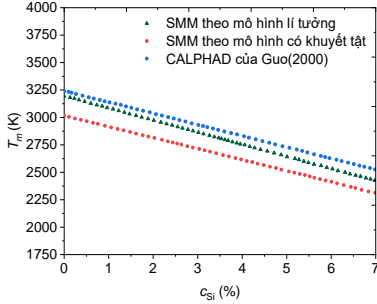
$$T_{ABC}^{R\alpha-\beta}(P=0) = \left| \frac{\Delta E_{ABC}^R}{\Delta S_{ABC}^R} \right| = \left| \frac{E_{ABC}^{R\alpha} - E_{ABC}^{R\beta}}{S_{ABC}^{R\alpha} - S_{ABC}^{R\beta}} \right|. \quad (4.54)$$

$$T_{ABC}^{R\alpha-\beta}(P) = \left| \frac{\Delta E_{ABC}^R + P\Delta V_{ABC}}{\Delta S_{ABC}^R} \right| = \left| \frac{E_{ABC}^{R\alpha} - E_{ABC}^{R\beta} + P(V_{ABC}^{\alpha} - V_{ABC}^{\beta})}{S_{ABC}^{R\alpha} - S_{ABC}^{R\beta}} \right|. \quad (4.60)$$

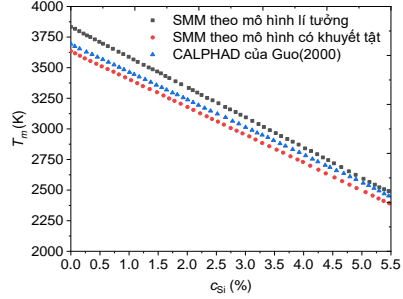
### 4.3. Tính số nhiệt độ nóng chảy và nhiệt độ chuyển pha cấu trúc

#### 4.3.1. Kết quả tính số nhiệt độ nóng chảy của các hợp kim xen kẽ TaSi, Wsi và FeC

Theo Hình 4.3, khi  $c_{Si}$  tăng từ 0 đến 7%,  $T_m$  của TaSi giảm từ 3210 K đến 2423 K theo tính toán SMM đối với mô hình hợp kim lí tưởng, từ 3031 K đến 2310 K theo tính toán SMM đối với mô hình hợp kim có khuyết tật và từ 3247 K đến 2533 K theo CALPHAD [*Journal of Phase Equilibria and Diffusion*, 30(5)(2000)564].



**Hình 4.3.**  $T_m(c_{Si})$  của TaSi tại  $P = 0$

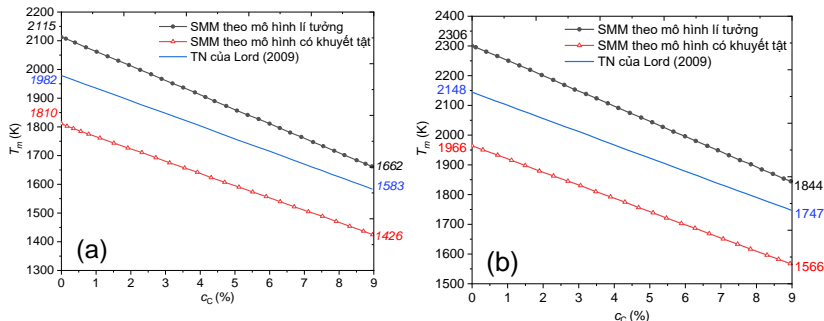


**Hình 4.4.**  $T_m(c_{Si})$  của WSi tại  $P = 0$

Theo Hình 4.4, khi  $c_{Si}$  tăng từ 0 đến 5,5%,  $T_m$  của WSi giảm từ 3810 K đến 2459 K theo tính toán SMM đối với mô hình hợp kim lí tưởng, từ 3609 K đến 2366 K theo tính toán SMM đối với mô hình hợp kim có khuyết tật và từ 3695 K đến 2460 K theo CALPHAD [*Journal of Phase Equilibria and Diffusion*, 30(5)(2000)564]. Nguyên tử xen kẽ làm cho hệ số xếp chặt của tinh thể lớn hơn và  $n_v$  tại điểm nóng chảy giảm theo sự tăng của  $c_{Si}$ . Những lí do này dẫn tới một giá trị nhỏ hơn đối với độ dốc của đường cong nóng chảy. Các tính toán SMM đối với độ dốc đường cong nóng chảy của tinh thể có khuyết tật phù hợp tốt với các kết quả tương ứng từ CALPHAD.

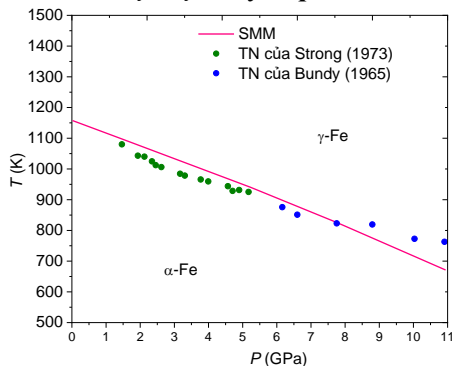
Theo Hình 4.8, nguyên tử xen kẽ C làm cho nhiệt độ nóng chảy của  $\gamma$ -Fe giảm đi rõ rệt. Trên Hình 4.8a đối với  $\gamma$ -FeC tại  $P = 0$ ,  $\frac{\Delta T_m}{\Delta c_C} = -50,33 \text{ K}/\%$  tính theo SMM đối với  $\gamma$ -FeC lí tưởng,  $\frac{\Delta T_m}{\Delta c_C} = -44,33 \text{ K}/\%$  tính theo SMM đối với  $\gamma$ -FeC có khuyết tật và  $\frac{\Delta T_m}{\Delta c_C} = -42,67 \text{ K}/\%$  theo thực nghiệm của Lord và cộng sự [*Earth and Planetary Science Letters*, 284(1-2)(2009)157]. Trên Hình 4.8b đối với  $\gamma$ -FeC tại  $P = 5 \text{ GPa}$ ,  $\frac{\Delta T_m}{\Delta c_C} = -51,22 \text{ K}/\%$  tính theo SMM đối với  $\gamma$ -FeC lí tưởng,  $\frac{\Delta T_m}{\Delta c_C} = -44,56 \text{ K}/\%$  tính theo SMM đối với  $\gamma$ -

FeC có khuyết tật và  $\frac{\Delta T_m}{\Delta c_C} = -44,44 \text{ K}/\%$  theo thực nghiệm của Lord và cộng sự [Earth and Planetary Science Letters, 284(1-2)(2009)157].



**Hình 4.8.** Ảnh hưởng của nguyên tử xen kẽ C lên nhiệt độ nóng chảy của  $\gamma$ -FeC tại  $P = 0$  (Hình a) và  $P = 5$  GPa (Hình b) thu được bởi SMM và TN

#### 4.3.2. Kết quả tính số nhiệt độ chuyển pha cấu trúc $\alpha$ - $\gamma$ của Fe



**Hình 4.13.** Đường chuyển pha cấu trúc giữa  $\alpha$ -Fe và  $\gamma$ -Fe

Theo Hình 4.13, kết quả tính toán theo SMM phù hợp tốt với thực nghiệm [Journal of Applied Physics, 36(2)(1965)616; Metallurgical Transactions, 4(11)(1973)2657]. Mọi sai số đều dưới 10% trong khoảng áp suất tương đối rộng từ 0 đến 11 GPa

## KẾT LUẬN CHUNG

Luận án sử dụng SMM để nghiên cứu các tính chất nhiệt động, nóng chảy và chuyển pha cấu trúc của các hợp kim xen kẽ AC và ABC có khuyết tật với cấu trúc lập phương ở áp suất không và dưới tác dụng của áp suất. Luận án đã đạt được kết quả chính như sau:

1. Trên cơ sở mô hình hợp kim xen kẽ AC và ABC lí tưởng với cấu trúc lập phương rút ra các biểu thức giải tích tổng quát độ dời của hạt khối nút mạng, khoảng lân cận gần nhất trung bình giữa hai nguyên tử, nồng độ nút khuyết cân bằng, năng lượng tự do Helmholtz, các đại lượng nhiệt động, nhiệt độ bền vững tuyệt đối trạng thái hợp kim, nhiệt độ nóng chảy của hợp kim, nhiệt độ chuyển pha cấu trúc phụ thuộc vào nhiệt độ, áp suất, nồng độ nguyên tử thay thế, nồng độ nguyên tử xen kẽ và nồng độ nút khuyết cân bằng của hợp kim xen kẽ AC và ABC có khuyết tật với cấu trúc lập phương. Lý thuyết nhiệt động, nóng chảy và chuyển pha cấu trúc của kim loại A, hợp kim xen kẽ AC và hợp kim thay thế AB có khuyết tật là các trường hợp giới hạn của lý thuyết nhiệt động, nóng chảy, chuyển pha cấu trúc của hợp kim xen kẽ ABC có khuyết tật tương ứng khi nồng độ nguyên tử xen kẽ và nồng độ nguyên tử thay thế bằng không, khi nồng độ nguyên tử thay thế bằng không và khi nồng độ nguyên tử xen kẽ bằng không.

2. Áp dụng tính số và thảo luận các kết quả lý thuyết thu được cho một số đại lượng nhiệt động của AuSi, PtSi, AuCuSi, PtCuSi, FeCrSi, VWSi, nhiệt độ nóng chảy của TaSi, WSi,  $\gamma$ -FeC và nhiệt độ chuyển pha BCC - FCC của Fe với thể cặp Mie-Lennard-Jones  $n$ - $m$  phụ thuộc vào nhiệt độ, áp suất, nồng độ nguyên tử xen kẽ, nồng độ nguyên tử thay thế và nồng độ nút khuyết cân bằng. Các kết quả thu được bằng SMM phù hợp tốt với các tính toán khác dùng *ab initio*, định luật Lindemann, MD và số liệu thực nghiệm. Các kết quả tính



toán chưa có so sánh có tính tiên đoán, dự báo cho các kết quả thực nghiệm trong tương lai.

Nhiều kết quả tính số bằng SMM có sự phù hợp với thực nghiệm và trong nhiều trường hợp có sự phù hợp tốt hơn so với các tính toán bằng các phương pháp khác. Sai số so với thực nghiệm chỉ khoảng dưới 10%. Điều đó chứng tỏ rằng phương pháp mà chúng tôi đã sử dụng để nghiên cứu trong luận án có độ tin cậy cao.

Sự thành công của luận án góp phần hoàn thiện và phát triển việc áp dụng SMM để nghiên cứu tính chất của vật liệu hợp kim xen kẽ có tính đến ảnh hưởng của hiệu ứng phi điều hòa của dao động mạng.

## DANH MỤC CÔNG TRÌNH ĐÃ CÔNG BỐ CỦA LUẬN ÁN

1. Nguyen Quang Hoc, Vu Dinh Lam, Pham Thi Minh Hanh, Tran Dinh Cuong and **Le Hong Viet** (2018). Heat capacity at constant pressure of defective FCC substitutional alloy AB with interstitial atom C, *Proc.the 9<sup>th</sup> International Workshop on Advanced Materials Science and Nanotechnology (IWAMSN 2018)*, Ninh Binh province, Vietnam, 7-11<sup>th</sup> November 2018, pp.49-56.

2. Nguyen Thi Hoa, Nguyen Quang Hoc, Gelu Coman, Tran Dinh Cuong and **Le Hong Viet** (2018). Thermodynamic property of FCC interstitial alloy AuSi with defects, *Proceedings of the 8th International Conference on Material Science and Engineering (UGALMAT 2018)*, 11 – 13 October, 2018, “Dunarea de Jos” University of Galati, Romania, *IOP Conference Series: Materials Science and Engineering* **485**, 012018.

3. Nguyen Quang Hoc, Bui Duc Tinh, Tran Dinh Cuong and **Le Hong Viet** (2019). Study on the melting of defective interstitial alloys TaSi and WSi with BCC structure. *Journal of the Korean Physical Society* **71**(8), pp.801-805.

4. Nguyen Quang Hoc, Dinh Quang Vinh, **Le Hong Viet**, Ta Dinh Van and Pham Thanh Phong (2019), Study on Structural Phase Transitions in Defective and Perfect Substitutional Alloys AB with Interstitial Atoms C under Pressure, *HNUE JOURNAL OF SCIENCE, Natural Sciences*, **64**(6), pp.57-67.

5. Nguyen Quang Hoc, **Le Hong Viet** and Nguyen Trong Dung (2019), On the melting of defective FCC interstitial alloy  $\gamma$ -FeC under pressure up to 100 GPa, *Journal of Electronic Materials*, **49**(2), pp.910-916.

6. **Le Hong Viet** and Nguyen Quang Hoc (2021), Equilibrium vacancy concentration and thermodynamic quantities of FCC defective alloys AuCuSi and PtCuSi under pressure, *HNUE JOURNAL OF SCIENCE, Natural Sciences*, **66**(3), pp.38-51.