

# TRÍCH YẾU LUẬN ÁN TIẾN SĨ

**Tên tác giả: LÊ HỒNG VIỆT**

**Tên luận án:** 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.

**Ngành khoa học của luận án:** Vật lý

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

**Mã số:** 9 44 01 03

**Tên đơn vị đào tạo Sau đại học:** Trường Đại học Sư phạm Hà Nội 2.

## 1. Mục đích và đối tượng nghiên cứu của luận án

Áp dụng phương pháp thống kê mômen (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 hợp kim xen kẽ tam nguyên có khuyết tật với cấu trúc lập phương 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 nóng chảy và chuyển pha cấu trúc của các hợp kim xen kẽ TaSi, WSi, FeC, AuSi, PtSi, FeCrSi, VWSi, AuCuSi và PtCuSi.

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.

## 2. Các phương pháp nghiên cứu đã sử dụng

Luận án sử dụng phương pháp nghiên cứu là SMM. Ngoài ra, trong tính số các kết quả giải tích thu được chúng tôi sử dụng phần mềm Maple và các phương pháp gần đúng như phép lặp gần đúng.

## 3. Các kết quả chính và kết luận

### 3.1. Các kết quả chính

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 AC và ABC có khuyết tật với các cấu trúc FCC và BCC bằng SMM.

Từ các kết quả giải tích thu được, áp dụng tính số đối với các đại lượng nhiệt động, nhiệt độ nóng chảy và nhiệt độ chuyển pha cấu trúc của một số kim loại, hợp kim xen kẽ AC và ABC có khuyết tật với các cấu trúc FCC và BCC. Kết quả tính số đối với vật liệu hợp kim xen kẽ được so sánh với thực nghiệm và các kết quả tính toán bằng các phương pháp lý thuyết khác.

Kết quả tính số của một số đại lượng nhiệt động, nhiệt độ nóng chảy và nhiệt độ chuyển pha cấu trúc dưới tác dụng của áp suất cao, nồng độ thành phần và nồng độ nút khuyết cân bằng có thể dự đoán, định hướng các thí nghiệm trong tương lai đồng thời góp phần bổ sung và hoàn thiện lý thuyết về nút khuyết cân bằng và hợp kim xen kẽ có cấu trúc lập phương.

### **3.2. Kết luận**

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 dãn 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 thế 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.

**T/M TẬP THỂ HƯỚNG DẪN**  
(Ký và ghi rõ họ tên)

**NGHIÊN CỨU SINH**  
(Ký và ghi rõ họ tên)

**PGS.TS. Nguyễn Quang Học**

**Lê Hồng Việt**