

**ĐẠI HỌC THÁI NGUYÊN
TRƯỜNG ĐẠI HỌC SƯ PHẠM**

BÁO CÁO TÓM TẮT

ĐỀ TÀI KHOA HỌC VÀ CÔNG NGHỆ CẤP ĐẠI HỌC

**NGHIÊN CỨU VI CẤU TRÚC VÀ TÍNH CHẤT
NHIỆT ĐỘNG TRÊN CÁC HẠT NANO KIM LOẠI
BẰNG PHƯƠNG PHÁP MÔ PHỎNG**

Mã số: ĐH2017-TN04-06

Chủ nhiệm đề tài: ThS. Giáp Thị Thùy Trang

Thái Nguyên, tháng 06 năm 2019

ĐẠI HỌC THÁI NGUYÊN
TRƯỜNG ĐẠI HỌC SƯ PHẠM

BÁO CÁO TÓM TẮT
ĐỀ TÀI KHOA HỌC VÀ CÔNG NGHỆ CẤP ĐẠI HỌC

NGHIÊN CỨU VI CẤU TRÚC VÀ TÍNH CHẤT
NHIỆT ĐỘNG TRÊN CÁC HẠT NANO KIM LOẠI
BẰNG PHƯƠNG PHÁP MÔ PHỎNG

Mã số: ĐH2017-TN04-06

Xác nhận của tổ chức chủ trì

(ký, họ tên, đóng dấu)

Chủ nhiệm đề tài

(ký, họ tên)

Thái Nguyên, tháng 6 năm 2019

DANH SÁCH NHỮNG THÀNH VIÊN THAM GIA NGHIÊN CỨU ĐỀ TÀI

TT	Họ và tên	Đơn vị công tác	Nội dung nghiên cứu cụ thể được giao
1	ThS. NCS Giáp Thị Thùy Trang	Khoa Vật lý, Trường Đại học Sư phạm - ĐHTN	Chủ nhiệm đề tài: Nghiên cứu cơ sở lý thuyết, xử lý và phân tích số liệu, viết báo khoa học và viết báo cáo kết quả nghiên cứu của đề tài.
2	TS. Phạm Hữu Kiên	Khoa Vật lý, Trường Đại học Sư phạm - ĐHTN	Cộng tác viên: Xây dựng các chương trình tính toán trên ngôn ngữ C++. Tham gia viết báo khoa học.
3	TS. Nguyễn Thị Minh Thủy	Khoa Vật lý, Trường Đại học Sư phạm - ĐHTN	Cộng tác viên: Tham gia phân tích số liệu và viết báo khoa học.
4	ThS. Khúc Hùng Việt	Khoa Vật lý, Trường Đại học Sư phạm - ĐHTN	Cài đặt máy tính, chạy thử các chương trình tính toán động lực học phân tử (ĐLHPT), Monte-Carlo.

ĐƠN VỊ PHỐI HỢP CHÍNH

Tên đơn vị	Nội dung phối hợp nghiên cứu	Họ và tên người đại diện đơn vị
Bộ môn Vật lý và Tin học, Trường ĐHBK Hà Nội.	- Hỗ trợ nghiên cứu xây dựng cơ sở lý thuyết và các chương trình mô phỏng. - Góp ý và chỉnh sửa các chương trình mô phỏng viết trên ngôn ngữ lập trình C++.	PGS.TSKH. Phạm Khắc Hùng PGS.TS. Nguyễn Văn Hồng
Trung tâm tính toán hiệu năng cao, Khoa Vật lý, Trường ĐHSP Hà Nội I	Chạy thực hành các chương trình mô phỏng trên hệ thống tính toán hiệu năng cao của Trung tâm.	ThS.NCS. Nguyễn Trọng Dũng

MỤC LỤC

Danh sách những thành viên tham gia nghiên cứu đề tài	i
Danh mục các ký hiệu và chữ viết tắt.....	iii
Danh mục các hình vẽ, đồ thị.....	iv
Danh mục các bảng biểu.....	v
Mở đầu	1
Chương 1 TỔNG QUAN	3
Chương 2 PHƯƠNG PHÁP TÍNH TOÁN	5
2.1 Xây dựng mô hình động lực học phân tử.....	5
2.1.1 <i>Thế tương tác</i>	5
2.1.2 <i>Kích thước của mô hình</i>	5
2.1.3 <i>Điều kiện biên tuần hoàn</i>	5
2.1.4 <i>Các thông số của mô hình</i>	5
2.2 Xây dựng mô hình động lực học phân tử của hạt nano Fe.....	6
2.3 Xây dựng mô hình động lực học phân tử của hạt nano FeB.....	6
2.4 Phân tích các đặc trưng vi cấu trúc, tính chất của vật liệu	7
2.4.1. <i>Hàm phân bố xuyên tâm</i>	7
2.4.2 <i>Số phối trí</i>	7
Chương 3 KẾT QUẢ VÀ THẢO LUẬN.....	8
3.1 Vi cấu trúc và tính chất nhiệt động của hạt nano Fe	8
3.2 Vi cấu trúc và tính chất nhiệt động của hạt nano Fe_xB_{100-x}	11
3.2.1 <i>Cơ chế tinh thể hóa và vai trò của nguyên tử Bo trong quá trình tinh thể hóa hạt nano Fe_xB_{100-x}</i>	11
3.2.2 <i>Cấu trúc địa phương của hạt nano $Fe_{90}B_{10}$ và $Fe_{95}B_5$</i>	14
KẾT LUẬN VÀ KIẾN NGHỊ	15

DANH MỤC CÁC KÝ HIỆU VÀ CHỮ VIẾT TẮT

TKHP	Thống kê hồi phục
ĐLHPT	Động lực học phân tử
HPBXT	Hàm phân bố xuyên tâm
Nguyên tử Cr	Nguyên tử tinh thể
Nguyên tử CB	Nguyên tử tinh thể ở vùng biên giữa pha tinh thể và pha VĐH
Nguyên tử CV	Nguyên tử tinh thể không ở vùng biên giữa pha tinh thể và pha VĐH
Nguyên tử Am	Nguyên tử vô định hình
Nguyên tử AB	Nguyên tử vô định hình ở vùng biên giữa pha tinh thể và pha VĐH
Nguyên tử AV	Nguyên tử vô định hình không ở vùng biên giữa pha tinh thể và pha VĐH
SPT	Số phối trí
VĐH	Vô định hình
NP	Hạt nano
MEPA	Thế năng trung bình của 1 nguyên tử

DANH MỤC CÁC HÌNH VẼ, ĐỒ THỊ

		Trang
Hình 1.1	Sự hình thành mầm tinh thể không đồng nhất	4
Hình 3.1.	Sự phụ thuộc của số lượng nguyên tử Cr vào bước ủ đối với mẫu 900	8
Hình 3.2.	Các HPBXT được xác định trong giai đoạn đầu tiên (1) và trong giai đoạn thứ ba (3).	8
Hình 3.3.	A) Số lượng nguyên tử Cr được phát hiện trong 3.10^6 bước ở giai đoạn đầu tiên; B) số lượng nguyên tử Cr được ghi lại trong khoảng thời gian này.	9
Hình 3.4.	Ảnh chụp sự sắp xếp các nguyên tử Cr: A) $N_{Cr} = 188$; B) $N_{Cr} = 568$; C) $N_{Cr} = 1651$; D) $N_{Cr} = 4440$; E) $N_{Cr} = 6162$; F) $N_{Cr} = 8907$	9
Hình 3.5.	MEPA của các loại nguyên tử khác nhau phụ thuộc vào số bước cho các đám tinh thể kích thước khác nhau: A) $N_{Cr} = 15-85$ nguyên tử; B) $N_{Cr} = 600-700$ nguyên tử; C) $N_{Cr} = 4100-4400$ nguyên tử; D) $N_{Cr} = 8900-9100$ nguyên tử.	10
Hình 3.6.	Sự phụ thuộc của MEPA vào số lượng nguyên tử Cr trong đám tinh thể	11
Hình 3.7.	Hình 3.7 Số nguyên tử tinh thể N_{Cr} phụ thuộc vào thời gian đối với mẫu $Fe_{95}B_5$ được ủ ở 900 K	11
Hình 3.8.	HPBXT của mẫu $Fe_{95}B_5$, nhiệt độ 900 K ở giai đoạn thứ 3 là đường (1) và ở giai đoạn 1 là đường (2)	12
Hình 3.9.	Ảnh phân bố không gian của các nguyên tử tinh thể ở lõi được xác định trong sáu khoảng thời gian.	13
Hình 3.10.	Ảnh chụp về sự phân bố của các CB-atoms, CV-atoms trong giai đoạn thứ hai tại ba thời điểm $t_1(A)$, $t_2(B)$, $t_3(C)$	13
Hình 3.11.	Ảnh chụp sắp xếp nguyên tử cho mẫu $Fe_{95}B_5$ tinh thể: A) các nguyên tử Am trong lõi; B) Nguyên tử Am ở bề mặt; C) Nguyên tử Cr; và đối với mẫu $Fe_{90}B_{10}$ tinh thể: D) Các nguyên tử Am trên bề mặt; E) Các nguyên tử Am trong lõi; F) Nguyên tử Cr. Hình cầu màu xanh và màu đỏ tương ứng là các nguyên tử Bo và sắt.	14

DANH MỤC CÁC BẢNG BIỂU

Trang

Bảng 2.1.	Bảng 2.1. Các hệ số của thế tương tác cặp Pak-Doyama đối với hệ hạt nano Fe	6
Bảng 2.2	Bảng 2.2. Hệ số của thế tương tác cặp nguyên tử Pak-Doyama đối với hệ hạt nano Fe-B	7
Bảng 3.1.	Số bước $\langle t_{cv} \rangle$ và số n_{cv} nhận được trong 6 khoảng thời gian.	12
Bảng 3.2	Bảng 3.2 Các đặc điểm của bốn mẫu hạt nano; $\rho_{core/surface}$ tương ứng là mật độ số nguyên tử ở lõi và bề mặt; Z_{Fe-Fe} , Z_{Fe-B} tương ứng là số phối trí trung bình của cặp Fe-Fe và Fe-B.	14

ĐẠI HỌC THÁI NGUYÊN
TRƯỜNG ĐẠI HỌC SƯ PHẠM

THÔNG TIN KẾT QUẢ NGHIÊN CỨU

1. Thông tin chung:

- Tên đề tài: **Nghiên cứu vi cấu trúc và tính chất nhiệt động trên các hạt nano kim loại bằng phương pháp mô phỏng**

- Mã số: ĐH2017-TN04-06

- Chủ nhiệm đề tài: ThS. Giáp Thị Thùy Trang

- Tổ chức chủ trì: Trường Đại học Sư phạm – Đại học Thái Nguyên

- Thời gian thực hiện: 24 tháng (Từ tháng 1 năm 2017 đến tháng 12 năm 2018)

2. Mục tiêu

- Xây dựng và phân tích được cấu trúc các hạt nano kim loại Fe và Fe_xB_{100-x} thông qua việc phân tích hàm phân bố xuyên tâm (HPBXT), phân bố số phối trí (SPT), sử dụng trực quan hóa 3 chiều và khảo sát số lượng các loại đơn vị cấu trúc và mầm nano tinh thể.

- Cố gắng đưa ra được cơ sở lý thuyết để có thể giải thích thỏa đáng về vi cấu trúc, và một số tính chất nhiệt động trên các hạt nano kim loại.

3. Tính mới và sáng tạo:

- Nghiên cứu đã chỉ ra sự lớn lên của đám tinh thể trong quá trình tinh thể hóa bắt nguồn từ sự sắp xếp lại các nguyên tử trong vùng biên giữa pha vô định hình và pha tinh thể và dẫn đến sự giảm năng lượng của hạt nano.

- Khảo sát với hạt nano Fe_xB_{100-x} nồng độ Bo cao, chúng tôi xét hai mẫu hạt nano $Fe_{90}B_{10}$ ở nhiệt độ 900 K, kết quả mô phỏng chỉ ra sự tinh thể hóa phụ thuộc mạnh vào cách tạo các hạt nano này. Điều này là do nguyên tử Bo đã cản trở quá trình tinh thể hạt nano Fe_xB_{100-x} .

4. Kết quả nghiên cứu:

- Bằng phương pháp mô phỏng động lực học phân tử, chúng tôi đã tạo ra được các hạt nano Fe, Fe-B có dạng hình cầu với thể tương tác cặp Pak - Doyama, lần lượt chứa 10000, 5000 nguyên tử ở các nhiệt độ 300 K và 900 K. Chúng tôi cũng đã khảo sát được những đặc trưng về cấu trúc và tính chất nhiệt động của các hạt nano này.

- Mô phỏng chỉ ra, khi các hạt nano Fe và $Fe_{95}B_5$ VDH (nồng độ B nhỏ) được ủ nhiệt trong một thời gian đủ dài (cỡ khoảng 10^7 bước ĐLHPT) ở nhiệt độ 900 K, thì chúng tinh thể hóa thành cấu trúc tinh thể bcc. Cơ chế tinh thể hóa trong hạt nano diễn ra như sau: (i) Ở giai đoạn đầu các đám tinh thể nhỏ hình thành, phân bố đều khắp trong hạt nano và nhanh chóng bị biến mất; (ii) Sau thời gian ủ đủ dài, các đám tinh thể ổn định đã được tạo ra trong lõi của hạt nano, các đám này phát triển nhanh theo mọi hướng bao phủ lõi và sau đó lan ra gần bề mặt hạt nano. (iii) Khi quá trình tinh thể hoàn thành, hạt nano tinh thể bao gồm: phần lõi là tinh thể Fe bcc và phần vỏ có cấu trúc xốp vô định hình.

- Phân tích thể năng trên một nguyên tử của các loại nguyên tử khác nhau với trường hợp đám tinh thể ổn định, chúng tôi thấy rằng, thể năng này giảm dần theo thứ tự sau: Nguyên tử AB → Nguyên tử CB → Nguyên tử CC. Nghĩa là, sự lớn lên của đám tinh thể bắt nguồn từ sự sắp xếp lại các nguyên tử trong vùng biên giữa pha vô định hình và pha tinh thể và dẫn đến sự giảm năng lượng của hạt nano.

- Khảo sát với hạt nano Fe_xB_{100-x} nồng độ Bo cao, chúng tôi xét hai mẫu hạt nano $Fe_{90}B_{10}$ ở nhiệt độ 900 K, kết quả mô phỏng chỉ ra sự tinh thể hóa phụ thuộc mạnh vào cách tạo các hạt nano này. Điều này là do nguyên tử Bo đã cản trở quá trình tinh thể hạt nano Fe_xB_{100-x} .

5. Sản phẩm:

5.1. Sản phẩm khoa học

- 1) Kien Pham Huu, Trang Giap Thi Thuy, and Hung Pham Khac (2017), “The study of separation of crystal Fe and morphology for FeB nanoparticle: Molecular dynamics simulation”, *AIP Advances* 7, 045301.
- 2) G T T Trang, P H Kien, P K Hung (2017), “Study of crystallization mechanisms of Fe nanoparticle”, *IOP Conf. Series: Journal of Physics: Conf. Series* 865, 012003.
- 3) Giáp Thị Thùy Trang, Phonesavath C., Khúc Hùng Việt và Phạm Hữu Kiên (2017), “Mô phỏng sự biến đổi cấu trúc trong hạt nano sắt theo nhiệt độ”, *Tạp chí Khoa học & công nghệ, Đại học Thái Nguyên* 172 (12/1) tr. 31-35.

5.2. Sản phẩm đào tạo

Hướng dẫn 02 đề tài NCKH SV đã được đánh giá xuất sắc.

- 1) Doãn Thị Thu Trang (2017), *Tìm hiểu phương pháp tạo hạt nano tinh thể Fe bcc từ hợp kim FeB bằng phương pháp mô phỏng*, Đề tài NCKH sinh viên, Trường Đại học sư phạm – Đại học Thái Nguyên.
- 2) Nguyễn Thị Linh (2018), *Nghiên cứu cấu trúc và quá trình chuyển pha của Nickel bằng phương pháp mô phỏng*, Đề tài NCKH sinh viên, Trường Đại học sư phạm – Đại học Thái Nguyên.
- 3) Đề tài là một phần luận án của Nghiên cứu sinh Giáp Thị Thùy Trang (đang thực hiện), *Mô phỏng cấu trúc và quá trình chuyển pha của các vật liệu vô định hình*, Trường Đại học Bách Khoa Hà Nội.

5.3. Sản phẩm ứng dụng

Mẫu các hạt nano kim loại và hợp kim Fe, Al, Ni và FeB

- 1) Mẫu các hạt nano Fe
- 2) Mẫu các hạt nano Al
- 3) Mẫu các hạt nano Ni
- 4) Mẫu các hạt nano FeB

6. Phương thức chuyển giao, địa chỉ ứng dụng, tác động và lợi ích mang lại của kết quả nghiên cứu:

- Phương thức chuyển giao: Trực tiếp hoặc qua thư điện tử
- Địa chỉ ứng dụng: Trường Đại học Sư phạm – Đại học Thái Nguyên
- Tác động và lợi ích mang lại của kết quả nghiên cứu:

Đối với lĩnh vực giáo dục và đào tạo

- Kết quả đề tài cung cấp những thông tin và hiểu biết cần thiết về vi cấu trúc, tính chất nhiệt động trong các hạt nano kim loại.
- Đề tài sẽ cho thấy khả năng ứng dụng của hạt nano trong ứng dụng công nghệ và y học.
- Báo cáo đề tài là tài liệu tham khảo cho học viên cao học ngành vật lý.

Đối với lĩnh vực khoa học và công nghệ có liên quan

- Mô phỏng có thể cung cấp các số liệu và thông tin dự đoán trước về cấu trúc và các tính chất của hạt nano kim loại cho nhà nghiên cứu thực nghiệm và lý thuyết.
- Kết quả mô phỏng cung cấp số liệu cần thiết về cấu trúc và các cơ chế vật lý xảy ra trong hạt nano kim loại để các nhà nghiên cứu ứng dụng và công nghệ đổi chiều.

Đối với phát triển kinh tế - xã hội

- Kết quả của đề tài góp phần đáng kể thúc đẩy sự đam mê tham gia nghiên cứu và khám phá khoa học của học viên cao học và sinh viên.

Đối với tổ chức chủ trì và các cơ sở ứng dụng kết quả nghiên cứu

- Kết quả của đề tài góp phần phát triển khoa học và công nghệ của Nhà trường. Đề tài cũng là một tài liệu tham khảo bổ ích đối với học viên cao học, sinh viên nghiên cứu khoa học và góp phần đáng kể trong định hướng đổi mới giáo dục trong lĩnh vực mô phỏng.

Ngày tháng năm 2019

Tổ chức chủ trì
(ký, họ và tên, đóng dấu)

Chủ nhiệm đề tài
(ký, họ và tên)

INFORMATION ON RESEARCH RESULTS

1. General information:

Project title: **Study on microstructure and thermodynamic properties of metal nanoparticles by simulation method.**

Code number: ĐH2017-TN04-06

Coordinator: MSc. Giap Thi Thuy Trang

Tel.: 0280 3856 893; Mobi: 0919.973.117

E-mai: giapthuytrang@dhsptn.edu.vn

Implementing Institution: Thainguyen University of Education

2. Objective(s):

- Constructing and analyzing the structure of Fe and FeB nanoparticles through the analysis of radial distribution function, coordination number distribution, using visualization and survey the number of nanocrystalline structure and nucleus units.

- Give a theoretical basis to be able to explain satisfactorily about microstructures, and some thermodynamic properties on metal nanoparticles.

3. Creativeness and innovativeness:

- The study has shown that the growth of crystalline clusters in the crystallization process originates from the rearrangement of atoms in the boundary region between the amorphous phase and the crystalline phase and leads to the reduction of particle energy. nano.

- Survey with high concentration of Fe_xB_{100-x} nanoparticles, we consider two samples of $Fe_{90}B_{10}$ nanoparticles at 900 K temperature, the simulation results show that the crystallization depends strongly on how to create these nanoparticles. This is because Bo atoms interfere with the Fe_xB_{100-x} nanoparticle crystal process.

4. Research results:

- By molecular dynamics simulation method, we have created Fe, Fe-B nanoparticles with spherical shape with the Pak-Doyama pair potential, which in turn contain 10000, 5000 atoms in the heat 300 K and 900 K. We also investigated the structural and thermodynamic properties of these nanoparticles.

- Simulation shows that when Fe and $Fe_{95}B_5$ GDH nanoparticles (small B concentration) are annealed for a long enough time (about 10^7 steps of DLHPT) at 900 K, they crystallize into structure. bcc crystal. The crystallization mechanism in nanoparticles takes place as follows: (i) In the early stages small crystals of crystals formed, evenly distributed throughout the nanoparticles and quickly disappeared; (ii) After a long enough incubation period, stable crystalline clusters were created in the core of the nanoparticle, which grew rapidly in all directions covering the core and then spread to the surface of the nanoparticle. (iii) When the crystal is completed, crystal nanoparticles include: the core part is Fe bcc crystal and the shell has amorphous porous structure.

- Analyzing the potential energy on an atom of different types of atoms with a stable crystal cluster, we find that this potential energy decreases in the following order: AB atom \rightarrow CB atom \rightarrow CC

atom. That is, the growth of the crystal cluster stems from the rearrangement of atoms in the boundary region between the amorphous phase and the crystal phase and leads to a reduction in the energy of the nanoparticle.

- Survey with high concentration of $\text{Fe}_x\text{B}_{100-x}$ nanoparticles, we consider two samples of $\text{Fe}_{90}\text{B}_{10}$ nanoparticles at 900 K temperature, the simulation results show that the crystallization depends strongly on how to create these nanoparticles. This is because Bo atoms interfere with the $\text{Fe}_x\text{B}_{100-x}$ nanoparticle crystal process.

5. Products:

5.1. Science products

1) Kien Pham Huu, Trang Giap Thi Thuy, and Hung Pham Khac (2017), “The study of separation of crystal Fe and morphology for FeB nanoparticle: Molecular dynamics simulation”, *AIP Advances* 7, 045301.

2) G T T Trang, P H Kien, P K Hung (2017), “Study of crystallization mechanisms of Fe nanoparticle”, *IOP Conf. Series: Journal of Physics: Conf. Series* 865, 012003.

3) Giap Thi Thuy Trang, Phonesavath C., Khuc Hung Viet và Pham Huu Kien (2017), “Simulation about structural change in iron nanoparticles depend on temperature”, *Journal of science and technology, Thai Nguyen University* 172 (12/1) tr. 31-35.

5.2. Training results

1) Doan Thi Thu Trang (2017), *Study of creation Fe bcc crystalline nanoparticles from FeB alloy by simulation method*, Student scientific research topic, Thai Nguyen university of education.

2) Nguyen Thi Linh (2018), *Study the structure and phase transition of Nickel by simulation method*, Student scientific research topic, Thai Nguyen university of education .

3) The Project is part of doctoral thesis which be long to Ph.D Giap Thi Thuy Trang (Processing), *Molecular dynamics simulation of microstructure and phase transition of amorphous materials*, Hanoi University of science and technology.

5.3. Applied products

10 models of Fe, Ni, Al, FeB nanoparticles

1) Model of iron nanoparticles: 10 models of iron nanoparticles at temperatures of 300, 900K; 490, 598, 713, 835, 946, 1070, 1542, 1771K

2) 3 models of Fe_{95}B_5 nanoparticles, and 2 models of $\text{Fe}_{90}\text{B}_{10}$ nanoparticles with two different patterns

3) Al nanoparticle models

4) Ni nanoparticle models

6. Transfer alternatives, application institutions, impacts and benefits of research results:

- Transfer alternatives: Directly or via email

- Application address: University of Education - Thai Nguyen University

- Impacts and benefits of research results:

For education and training

- The results of the research provide necessary information and understanding about microstructure, thermodynamic properties in metal nanoparticles.
- The topic will show the applicability of nanoparticles in the application of technology and medicine.
- Report of the topic is a reference for graduate students in physics.

For related fields of science and technology

- Simulation can provide predictable data and information about the structure and properties of metal nanoparticles to experimental and theoretical researchers.
- Simulation results provide necessary data on the structure and physical mechanisms that occur in metal nanoparticles for researchers to apply and contrast technology.

For socio-economic development

- The results of the project significantly contribute to the passion for participation in research and scientific discovery of graduate students and students.

For host organizations and research application establishments

- The results of the project contribute to the development of science and technology of the University. The topic is also a useful reference for graduate students, scientific research students and significantly contributes in the direction of educational innovation in the field of simulation.

MỞ ĐẦU

1. Lý do chọn đề tài

Ngày nay, vật liệu nano rất có tiềm năng ứng dụng trong cuộc sống của chúng ta. Chẳng hạn như trong lĩnh vực y tế, một nghiên cứu đã cho kết quả khả quan khi sử dụng các hạt nano vàng để chống lại nhiều loại ung thư. Không dừng lại ở đó, các nhà khoa học còn nghiên cứu một dự án nanorobot vô cùng đặc biệt, với những robot có kích thước siêu nhỏ, có thể đi vào bên trong cơ thể con người để đưa thuốc điều trị đến những bộ phận cần thiết làm tăng hiệu quả điều trị, ngay cả những căn bệnh ung thư khó chữa nhất như ung thư não, các bác sĩ có thể dễ dàng điều trị mà không cần mở hộp sọ của bệnh nhân hay bất kỳ phương pháp hóa trị độc hại; Trong lĩnh vực điện tử, những bộ vi xử lý được làm từ vật liệu nano khá phổ biến trên thị trường, một số sản phẩm như chuột, bàn phím cũng được phủ một lớp nano kháng khuẩn. Pin nano trong tương lai sẽ có cấu tạo theo kiểu ống nanowhiskers, cấu trúc ống này sẽ khiến các cực của pin có diện tích bề mặt lớn hơn rất nhiều lần, giúp nó lưu trữ được nhiều điện năng hơn khi mà kích thước của viên pin sẽ ngày càng được thu hẹp lại... Trong lĩnh vực may mặc, một ý tưởng vô cùng đặc biệt với loại quần áo có khả năng diệt vi khuẩn gây mùi hôi khó chịu trong quần áo đã trở thành hiện thực với việc áp dụng các hạt nano bạc. Ứng dụng hữu ích này đã được áp dụng trên một số mẫu quần áo thể thao. Không chỉ dừng lại ở công dụng khử mùi, công nghệ nano có thể biến chiếc áo đang mặc thành một trạm phát điện di động; sử dụng các nguồn năng lượng gió, năng lượng mặt trời và với công nghệ nano có thể sạc điện cho chiếc smartphone mọi lúc mọi nơi.

Sở dĩ vật liệu nano có nhiều đặc tính thú vị để ứng dụng là do kích thước của chúng rất nhỏ bé, có thể so sánh với các kích thước tới hạn của nhiều tính chất hóa lý trong vật liệu. Ví dụ như hiệu ứng đường hầm (điện tử có thể tức thời chuyển động xuyên qua một lớp cách điện), do đó các vật liệu điện tử xây dựng ở kích cỡ nano không những có thể được đóng gói dày đặc hơn trên một chip mà còn có thể hoạt động nhanh hơn, với ít electron hơn và mất ít năng lượng hơn những transistor thông thường; Sự thay đổi của những tính chất như tính chất điện và tính chất quang phi tuyến (non-linear optical), thí dụ khi ta kích thích một chấm lượng tử, chấm càng nhỏ thì năng lượng và cường độ phát sáng của nó càng tăng; Những tính chất căn bản của vật chất, chẳng hạn như nhiệt độ nóng chảy của một kim loại, từ tính của một chất rắn và vùng cấm của chất bán dẫn phụ thuộc rất nhiều vào kích thước của tinh thể thành phần, miễn là chúng nằm trong giới hạn của kích thước nanomet. Mỗi quan hệ này mở đường cho sự sáng tạo ra những thế hệ vật chất với những tính chất mong muốn, không chỉ bởi thay đổi thành phần hóa học của vật liệu mà còn bởi sự điều chỉnh kích thước và hình dạng.

Như vậy, vật liệu kích thước nano mét mang nhiều tính chất dị thường so với vật liệu khối và chúng đã có rất nhiều ứng dụng quan trọng trong khoa học công nghệ, kỹ thuật và y học. Vì vậy, tìm hiểu thông tin về vi cấu trúc cũng như các quá trình biến đổi bên trong hạt nano là rất quan trọng và cần thiết. Chính vì vậy mà hướng nghiên cứu về đặc tính cấu trúc và các tính chất dị thường của hạt nano đã và đang thu hút được sự quan tâm nghiên cứu mạnh mẽ của các nhà khoa học trong và ngoài nước. Tìm hiểu thông tin về cấu trúc của các hạt nano chỉ có thể được nghiên cứu bằng phương pháp mô phỏng vì rất khó để có thể theo dõi trực tiếp chuyển động của nguyên tử bằng thực nghiệm. Mô phỏng là phương pháp nghiên cứu, khảo sát các hiện tượng vật lý xảy ra trong vật liệu bằng các kỹ thuật sử dụng máy tính, cụ thể là sử dụng chương trình máy tính để mô tả một quá trình hoặc một tập hợp các trạng thái vi mô của hệ vật lý theo một mô hình cho trước. Phương pháp này không chỉ kiểm chứng được các lý thuyết mà còn giúp tiên đoán các kết quả thực nghiệm một cách nhanh chóng, dự báo được những vật liệu mới và những tính chất của chúng... Trong nghiên cứu, mô phỏng có thể tìm hiểu các cơ chế vi mô của các hiện tượng, khảo sát

sự biến đổi của hệ ở mức nguyên tử, theo dõi được diễn biến của hiện tượng ở những thời điểm mong muốn. Trong công nghệ vật liệu, phương pháp mô phỏng có thể tạo ra được những vật liệu mới theo yêu cầu sử dụng. Mô phỏng sẽ là công cụ hữu hiệu để quan sát, dự đoán các quá trình biến đổi cấu trúc.

Nhóm các vật liệu nano Fe và các hợp kim của chúng được quan tâm bởi rất nhiều lý do. Nó là vật liệu từ tính thông dụng nhất, có thể được sử dụng trong các lõi biến áp điện và các phương tiện lưu giữ từ tính cũng như chất xúc tác. Trong vài năm gần đây nhiều công trình đã nghiên cứu về vật liệu này nhưng chúng tôi chỉ tìm thấy một vài công trình nghiên cứu về cấu trúc và tính chất nhiệt động trên các hạt nano Fe, FeB bằng phương pháp thực nghiệm, mô phỏng. Cho đến nay vẫn chưa có một mô hình vật lý thống nhất nào được đưa ra mà có thể giải thích thỏa đáng vì cấu trúc cũng như các tính chất nhiệt động trên các hạt nano này. Sự kết tinh cũng như cấu trúc vi mô của hạt nano còn nhiều vấn đề đang bỏ ngỏ và chưa được tìm hiểu một cách đầy đủ. Cụ thể, cơ chế kết tinh ở mức nguyên tử là chưa rõ ràng, vẫn chưa rõ bề mặt tự do ảnh hưởng như thế nào đến sự tạo mầm và sự phát triển tinh thể, tính chất đa thù hình của các hạt nano...Làm rõ chi tiết cấu trúc địa phương của hạt nano là quan trọng, bởi vì nó liên quan đến một số đặc tính cụ thể được tìm thấy cho các vật liệu này. Do đó chúng tôi đưa ra ý tưởng thực hiện nghiên cứu cấu trúc và tính chất nhiệt động của các hạt nano Fe, FeB bằng phương pháp mô phỏng động lực học phân tử thông qua việc phân tích HPBXT, phân bố SPT và phương pháp trực quan hóa.

2. Mục tiêu đề tài

- Xây dựng và phân tích được cấu trúc các hạt nano kim loại Fe và Fe-B thông qua việc phân tích hàm phân bố xuyên tâm (HPBXT), phân bố số phối trí (SPT), sử dụng trực quan hóa 3 chiều và khảo sát số lượng các loại đơn vị cấu trúc và mầm nano tinh thể.

- Cố gắng đưa ra được cơ sở lý thuyết để có thể giải thích thỏa đáng về vi cấu trúc và một số tính chất nhiệt động trên các hạt nano kim loại.

3. Phương pháp nghiên cứu của đề tài

- Sử dụng các phần mềm mô phỏng thống kê hồi phục, mô phỏng ĐLHPT và một số phương pháp phân tích vi cấu trúc hạt nano.

- Sử dụng phương pháp trực quan hóa 3 chiều dựa trên phần mềm Matlab để quan sát vi cấu trúc và quá trình biến đổi trên hạt nano kim loại ở mức độ nguyên tử.

4. Đối tượng và phạm vi nghiên cứu của đề tài

- Đối tượng nghiên cứu là các hạt nano kim loại Fe, Fe-B vô định hình

- Phạm vi nghiên cứu là nghiên cứu lý thuyết cơ bản về vi cấu trúc, tính chất và các hiệu ứng vật lý trong hạt nano kim loại trong dải nhiệt độ 200-2500 K; Nghiên cứu vi cấu trúc hạt nano kim loại trên các mẫu mô phỏng theo kích thước của hạt, điều kiện nhiệt độ và áp suất khác nhau; - Đưa ra cơ sở lý thuyết giải thích mối liên hệ giữa tính chất nhiệt động và quá trình hình thành các “pha trung gian” trong hạt nano kim loại.

5. Cấu trúc của đề tài

Ngoài phần mở đầu, kết luận và tài liệu tham khảo, đề tài được chia thành 3 chương: Chương 1 giới thiệu tổng quan về phương pháp mô phỏng, lý thuyết chuyển pha, lý thuyết tinh thể hóa và đặc điểm về cấu trúc, tính chất của các hạt nano kim loại; Chương 2 trình bày phương pháp sử dụng để nghiên cứu đề tài và các kỹ thuật tính toán, phân tích các đặc trưng cấu trúc; Chương 3 trình bày các kết quả và những thảo luận về cấu trúc và tính chất nhiệt động của các hạt nano Fe, FeB.

Chương 1 TỔNG QUAN

Đề tài đã tham khảo 50 tài liệu để tổng kết các nội dung có liên quan, bao gồm: (i) Phương pháp mô phỏng ĐLHPT và thống kê hồi phục; (ii) Lý thuyết chuyển pha và lý thuyết tinh thể hóa; (iii) Đặc điểm cấu trúc và tính chất của các hạt nano kim loại.

Phương pháp mô phỏng ĐLHPT và thống kê hồi phục: Mô phỏng ĐLHPT cho phép theo dõi và dự đoán sự biến đổi theo thời gian của hệ các phần tử (nguyên tử) có tương tác. Chuyển động của các nguyên tử trong không gian mô phỏng tuân theo các phương trình chuyển động Newton. Mô phỏng ĐLHPT tạo ra một chuỗi các cấu hình biến đổi theo thời gian. Các cấu hình phụ thuộc vào thời gian này tạo ra quỹ đạo của các nguyên tử từ vị trí ban đầu cho tới khi kết thúc quá trình mô phỏng. Tính chất nhiệt động học vĩ mô có thể thu được bằng cách biến đổi các thông tin chi tiết từ các tập hợp ở mức vi mô dựa trên cơ sở của cơ học thống kê. Phương pháp thống kê hồi phục thường được sử dụng trong mô phỏng cấu trúc vật liệu vô định hình trong điều kiện các quá trình diễn ra ít phụ thuộc vào nhiệt độ. Về bản chất, phương pháp thống kê hồi phục là phương pháp MD được xét ở nhiệt độ $T = 0 K$.

Lý thuyết chuyển pha: Pha là tập hợp những phần đồng nhất của vật chất. Ở điều kiện cân bằng, chúng có cùng thành phần, cùng trạng thái và được ngăn cách với các pha khác bởi bề mặt phân chia. Khi nhiệt độ hay áp suất của hệ thay đổi sẽ kéo theo sự tăng năng lượng tự do. Lúc đó hệ có xu hướng biến đổi sang trạng thái cân bằng mới với năng lượng tự do nhỏ hơn tức là có sự chuyển pha. Chuyển pha thường được khởi đầu bằng sự tạo mầm của pha mới. Quá trình này được thực hiện bởi sự khuếch tán của các nguyên tử, phân tử để kết tụ với nhau tạo thành mầm. Các mầm lớn dần theo thời gian và vật liệu chuyển sang pha mới khi quá trình này kết thúc. Động học chuyển pha mô tả quan hệ giữa phần vật chất đã chuyển sang pha mới và thời gian chuyển pha ở các nhiệt độ khác nhau. Động học chuyển pha thường được biểu diễn bằng biểu thức Johnson-Mehl-Avrami (JMA):

$$X_p = 1 - \exp(-kt^n) \quad (1.1)$$

trong đó: t là thời gian chuyển pha; k là hằng số tốc độ chuyển pha và có giá trị xác định ở mỗi nhiệt độ xác định; n là hằng số Avrami.

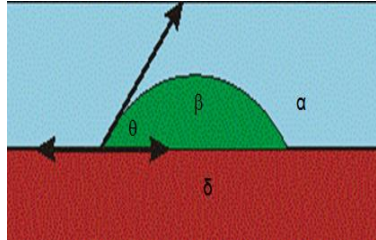
Lý thuyết tinh thể hóa

Trong quá trình tinh thể hóa, động lực tạo mầm và phát triển là sự giảm năng lượng tự do của hệ. Lý thuyết Nhiệt động học nghiên cứu sự hình thành và lớn lên của mầm tinh thể dựa vào khảo sát sự biến đổi năng lượng tự do của nó. Xét hai trường hợp tạo mầm khác nhau. Nếu mầm được hình thành trong hệ vật liệu tinh khiết được gọi là mầm đồng nhất. Trường hợp mầm xuất hiện trên các phần tử khác pha của hệ được gọi là mầm không đồng nhất.

Mầm đồng nhất: Giả sử trong một hệ tinh khiết ở nhiệt độ nhất định xuất hiện một đám nguyên tử có thể tích là V và diện tích bề mặt là S . Khi tạo thành đám, các nguyên tử chuyển từ pha ban đầu (vô định hình) kém bền vững sang pha mới (tinh thể) bền vững hơn. Năng lượng của hệ các nguyên tử này thay đổi do hai nguyên nhân: các nguyên tử ở pha mới có năng lượng thấp hơn ở pha ban đầu; mặt khác khi pha mới được hình thành, bề mặt ngăn cách giữa hai pha làm xuất hiện năng lượng bề mặt đám.

Mầm không đồng nhất: Theo lý thuyết nhiệt động học, một trong các yếu tố quan trọng khi xét đến cơ chế tạo mầm là năng lượng bề mặt của đám. Với hệ đồng nhất thì đó là năng lượng bề

mặt giữa pha mới hình thành và pha ban đầu. Với hệ không đồng nhất, do trong hệ có các tạp chất, khuyết tật thì cần xét tới cả năng lượng mặt phân cách giữa pha mới, ban đầu với thành phần không đồng nhất xuất hiện trong hệ. Xét trường hợp đơn giản sau: mầm không đồng nhất có dạng chỏm cầu bán kính r , chiều cao h xuất hiện trên bề mặt tạp chất, θ là góc hợp bởi giữa mặt cầu của mầm và bề mặt tạp chất. Khi đó trong hệ vật liệu tồn tại các thành phần khác nhau: các nguyên tử ở pha ban đầu (α), nhóm các nguyên tử tạo mầm ở pha mới (β) và các phần tạp chất mà các mầm hình thành trên đó (δ) (hình 1.1).



Hình 1.1 Sự hình thành mầm tinh thể không đồng nhất.

Cấu trúc và tính chất nhiệt động của các hạt nano kim loại và hợp kim: Các hạt nano đang được nghiên cứu, ứng dụng rộng rãi trong khoa học, công nghệ và y học. Nhiều nghiên cứu về vi cấu trúc, hiệu ứng kích thước và tính chất động học của các hạt nano kim loại đã được thực hiện bằng cả thực nghiệm, lý thuyết và mô phỏng. Cụ thể như: Debouttiere và cộng sự cho thấy hạt nano vàng bọc bởi các nguyên tử Gd được dùng để làm tăng độ tương phản trong cộng hưởng từ hạt nhân. Khi trộn hạt nano vàng hay bạc vào thủy tinh để chúng có các màu sắc khác nhau, Letfullin đã phát hiện hạt nano vàng có thể tiêu diệt các tế bào ung thư. Sử dụng phương pháp thực nghiệm như: tán xạ tia-X, nhiễu xạ neutron... các nhà thực nghiệm đã cung cấp rất nhiều dữ liệu quan trọng về vi cấu trúc và các tính chất động học của các hạt nano. Zhu và cộng sự sử dụng phương pháp mô phỏng ở mức nguyên tử đã công bố một số kết quả thú vị về hiệu ứng kích thước và các tính chất bề mặt trên hạt nano kim loại nhôm. Cho đến nay, người ta đã phát hiện hình dạng, tính chất và cấu trúc của hạt nano phụ thuộc mạnh vào điều kiện và các phương pháp chế tạo chúng. Thời gian gần đây, một số phương pháp cho phép tạo ra các hạt nano kim loại, hợp kim vô định hình. Các hạt nano (NP) vô định hình và tinh thể được quan tâm nghiên cứu và phát triển bởi vì chúng có nhiều tính chất thú vị và có nhiều ứng dụng quan trọng trong các lĩnh vực công nghiệp khác nhau. Chẳng hạn, các hạt nano sắt và sắt vô định hình thể hiện tính chất từ và tính chất hấp thụ quang độc đáo, điều này có thể dẫn đến những ứng dụng tiên tiến của chúng trong công nghệ nano. Cấu trúc của NP vô định hình bao gồm hai phần: phần lõi có cấu trúc tương tự như cấu trúc của mẫu khối, trong khi phần vỏ có cấu trúc xốp hơn. Nhìn chung trạng thái vô định hình là không bền vững, nên khi được ủ ở nhiệt độ và áp suất thích hợp, thì các hạt nano cấu trúc VĐH có thể bị tinh thể hóa thành cấu trúc tinh thể bcc, fcc hoặc hcp. Sự kết tinh của các hạt nano vô định hình đã được nghiên cứu bởi các thí nghiệm. Kết quả chỉ ra rằng so với mẫu khối, sự kết tinh trong NP bao gồm các quá trình riêng có nguồn gốc từ cấu trúc xốp của bề mặt hạt nano. Chẳng hạn như, Changsheng và cộng sự chứng minh nhiệt độ chuyển pha thủy tinh và pha tinh thể của các hạt nano Co phụ thuộc vào kích thước của hạt. Bằng phương pháp mô phỏng ĐLHPT, hai nhà nghiên cứu S. Ozgen và E. Duruk cho thấy: Trong quá trình làm lạnh từ từ hạt nano nhôm từ nhiệt độ 700 K xuống 300 K, họ phát hiện hạt nano nhôm trải qua ba trạng thái khác nhau là: trạng thái lỏng, trạng thái tinh thể yếu (weak-crystal) và trạng thái thủy tinh. Sự chuyển pha lỏng sang pha tinh thể hoặc sang pha VĐH cũng đã được tìm thấy trong các hạt nano Al_2O_3 và CdSe/CdS như có thể thấy trong các công trình.

Chương 2 PHƯƠNG PHÁP TÍNH TOÁN

2.1 Xây dựng mô hình động lực học phân tử

2.1.1 Thế tương tác

Một trong các đại lượng quan trọng của phương pháp mô phỏng là thế năng tương tác của các nguyên tử. Khảo sát đại lượng này thu được nhiều thông tin cần thiết về cơ chế vi mô của hiện tượng vật lý diễn ra trong mô hình.

Xét một hệ gồm N nguyên tử, thế tương tác của hệ được xác định như sau:

$$U(r_1, r_2, \dots, r_N) = \sum U_{ee} + \sum U_{NN} + \sum U_{Ne} \quad (2.1)$$

U : thế tương tác của hệ;

$\sum U_{ee}$: tổng thế tương tác giữa các electron ;

$\sum U_{NN}$: tổng thế tương tác giữa các hạt nhân;

$\sum U_{Ne}$: tổng thế tương tác giữa các hạt nhân với các electron;

2.1.2 Kích thước của mô hình

Giữa các nguyên tử trong hệ vật liệu luôn có lực tương tác và do đó luôn tồn tại thế năng tương tác giữa chúng. Gọi r_c là khoảng cách giữa hai nguyên tử mà thế tương tác giữa chúng coi như bằng không. Khi đó thế tương tác giữa các nguyên tử trong phạm vi có $r < r_c$ so với nguyên tử ta xét là đáng kể và các nguyên tử trong phạm vi này cần được đưa vào khảo sát. Như vậy, kích thước tối thiểu của mô hình được chọn là $L = 2r_c$.

2.1.3 Điều kiện biên tuần hoàn

Trong mô phỏng, số nguyên tử được sử dụng chỉ từ vài nghìn cho đến vài triệu nguyên tử. Kích thước mô hình này là rất nhỏ so với các mẫu khối thực tế. Để khắc phục hạn chế này, phương pháp mô phỏng sử dụng điều kiện biên tuần hoàn. Điều kiện biên tuần hoàn giúp không gian khảo sát của vật liệu được lặp đi lặp lại tương tự như mẫu khối. Khi đó hạn chế được ảnh hưởng của điều kiện biên. Gieo ngẫu nhiên một hệ gồm N nguyên tử vào trong không gian mô phỏng là hình hộp lập phương có kích thước $L \times L \times L$. Cụ thể, tọa độ của nguyên tử thứ i dịch chuyển trên phương trục x với điều kiện biên tuần hoàn được xác định như sau:

$$\begin{cases} x'(i) = x(i) - L & \text{khi } x(i) > L \\ x'(i) = x(i) + L & \text{khi } x(i) < 0. \end{cases} \quad (2.2)$$

2.1.4 Các thông số của mô hình

Khi hệ ta xét đạt trạng thái cân bằng, các đại lượng vật lý không đổi theo thời gian như năng lượng, nhiệt độ, áp suất... Trong mô phỏng bằng phương pháp MD, có một số tập hợp được giữ không đổi như NVE, NVT, NPT... với N là số nguyên tử của hệ, P, V và T tương ứng là áp suất, thể tích và nhiệt độ của hệ. Xét mô hình NPT, năng lượng toàn phần của hệ (E) được xác định bằng tổng động năng (K) và thế năng (U) của hệ theo hệ thức:

$$E = K + U. \quad (2.3)$$

Thế năng của hệ được xác định bởi hệ thức sau:

$$U = \sum_{i>j}^N U_{ij}(\vec{r}_{ij}). \quad (2.4)$$

Động năng của hệ ở thời điểm t được xác định thông qua vận tốc của các hạt:

$$K(t) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N m_i (\vec{v}_i(t))^2. \quad (2.5)$$

Nhiệt độ $T(t)$ của hệ ở thời điểm t được xác định bởi công thức:

$$\frac{3}{2} \cdot Nk_B T(t) = K(t). \quad (2.6)$$

2.2 Xây dựng mô hình động lực học phân tử của hạt nano Fe

Thế tương tác cặp Pak-Doyama đã được sử dụng nhiều trong các mô phỏng trước đây khi nghiên cứu về các vật liệu Fe, FeB, thế này có dạng:

$$U(r) = \begin{cases} a(r+b)^4 + c(r+d)^2 + e, & 0 \leq r \leq r_{cutoff} \\ 0, & r_{cutoff} < r \end{cases} \quad (2.9)$$

trong đó $U(r)$ là thế tương tác có đơn vị eV, r là khoảng cách giữa các nguyên tử tính bằng Å, $r_{cát}$ là vị trí cực tiểu thứ nhất của HPBXT, các hệ số a, b, c, d, e được xác định từ số liệu thực nghiệm về module đàn hồi (Bảng 2.1).

Hệ số	a	b	c	d	e	$r_{cát}$
Fe - Fe	-0,18892	-1,82709	1,70192	-2,50849	-0,19829	3,14 Å

Sau khi xác định thế tương tác giữa các nguyên tử trong mô hình, chúng tôi tiến hành xây dựng và khảo sát mô hình bằng phương pháp ĐLHPT. Các phương trình chuyển động được giải số bằng cách sử dụng thuật toán Verlet. Bước mô phỏng bằng $4,6 \times 10^{-14}$ s. Chúng tôi gieo ngẫu nhiên 10000 nguyên tử trong một hình cầu bán kính 34 Å với điều kiện biên tự do. Sau đó chạy thống kê hồi phục cho đến khi hệ đạt trạng thái cân bằng. Để tạo thành các mẫu với các nhiệt độ khác nhau, chúng tôi nung nóng mẫu trên đến 300K và tiếp tục hồi phục nhiệt mẫu này thêm 2×10^7 bước động lực học phân tử để hệ cân bằng, gọi hệ này là mẫu 300. Chúng tôi cũng đã chuẩn bị hai mẫu 300 để kiểm tra ảnh hưởng của các cấu hình ban đầu và thấy rằng cấu hình ban đầu đã không ảnh hưởng đến các thuộc tính cấu trúc. Để nghiên cứu quá trình tinh thể hóa chúng tôi đã chuẩn bị mẫu thứ hai bằng cách nung nóng mẫu 300 đến 900 K và sau đó ủ nhiệt mẫu 2×10^7 bước, mẫu này được gọi là mẫu 900.

2.3 Xây dựng mô hình động lực học phân tử của hạt nano FeB

Tương tự với xây dựng mô hình hạt nano sắt thì hạt nano FeB cũng được xây dựng với mô hình sử dụng thế tương tác cặp Pak-Doyama có công thức:

$$U(r) = \begin{cases} a(r+b)^4 + c(r+d)^2 + e, & 0 \leq r \leq r_{cutoff} \\ 0, & r_{cutoff} < r \end{cases}$$

Trong đó $U(r)$ là thế năng tương tác cặp và r_{ij} là khoảng cách giữa các nguyên tử tính bằng Å, r_{cutoff} là bán kính ngắt; các hệ số a , b , c , d và e được xác định theo các số liệu thực nghiệm. Các thông số với hạt nano FeB được đưa ra trong Bảng 2.1.

Cặp	a (eV/Å ⁴)	b (Å)	c (eV/Å ²)	d (Å)	e (eV)	r_{cutoff} (Å)
Fe-Fe	- 0,18892	- 1,82709	1,70192	- 0,50849	- 0,19829	3,44
Fe-B	- 0,22407	- 1,47709	2,01855	- 2,15849	- 0,23519	3,09
B-B	- 0,08772	- 2,17709	0,79028	- 2,85849	- 0,09208	3,79

Chúng tôi dựng mẫu hạt nano Fe₉₅B₅ VĐH chứa 5000 nguyên tử với thế tương tác Pak-Doyama ở nhiệt độ 900 K bằng phương pháp mô phỏng động lực học phân tử. Cụ thể, 5000 nguyên tử được gieo ngẫu nhiên trong hạt nano kích thước 28 Å với điều kiện biên tự do. Sau đó chạy thống kê hồi phục cho đến khi hệ đạt trạng thái cân bằng. Để tạo thành các mẫu với các nhiệt độ khác nhau, chúng tôi nung nóng mẫu trên đến 300K và tiếp tục hồi phục nhiệt mẫu này thêm 2×10^7 bước động lực học phân tử để hệ cân bằng, gọi hệ này là mẫu 300. Chúng tôi cũng đã chuẩn bị hai mẫu 300 để kiểm tra ảnh hưởng của các cấu hình ban đầu và thấy rằng cấu hình ban đầu đã không ảnh hưởng đến các thuộc tính cấu trúc. Để nghiên cứu quá trình tinh thể hóa chúng tôi đã chuẩn bị mẫu bằng cách nung nóng mẫu 300 đến 900 K, sau đó hồi phục khoảng 9.10^7 bước.

Chúng tôi cũng dựng thêm hai mẫu hạt nano Fe₉₀B₁₀ VĐH chứa 5000 nguyên tử bằng hai cách: (i) gieo ngẫu nhiên 5000 nguyên tử Fe và B trong quả cầu bán kính 28 Å; (ii) cách gieo ngẫu nhiên 4500 nguyên tử Fe trong quả cầu bán kính 28 Å và 500 nguyên tử B ở lớp cầu bề mặt. Các bước tiếp theo làm giống như tạo mẫu Fe₉₅B₅.

2.4 Phân tích các đặc trưng vi cấu trúc, tính chất của vật liệu

2.4.1. Hàm phân bố xuyên tâm

Trong mô phỏng vật liệu ở trạng thái VĐH, một đại lượng tuân theo quy tắc thống kê được sử dụng để xác định cấu trúc của vật liệu ở mức nguyên tử, đó là HPBXT. HPBXT có thể được xác định từ thực nghiệm thông qua TSCT. Từ HPBXT, phân bố SPT trung bình và TSCT sẽ được tính toán số trong mô phỏng.

N là số nguyên tử chứa trong thể tích V của mẫu vật liệu.

$$g(r) = \frac{\rho(r)}{\rho_0}, \quad (2.10)$$

trong đó ρ_0 là mật độ nguyên tử trung bình trong thể tích V của mẫu vật liệu, $\rho(r)$ là mật độ nguyên tử ở khoảng cách r tính từ nguyên tử trung tâm.

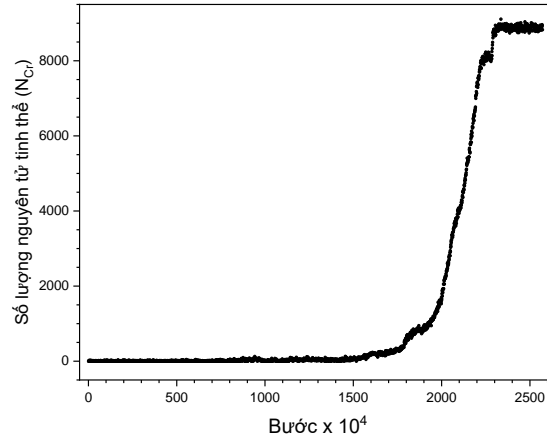
2.4.2 Số phối trí

Số phối trí trung bình $Z_{\alpha\beta}$ được xác định bằng biểu thức tích phân pick thứ nhất của HPBXT tương

$$\text{ứng: } Z_{\alpha\beta} = 4\pi\rho_j \int_0^{r_c} g_{\alpha\beta}(r)r^2 dr \quad (2.11)$$

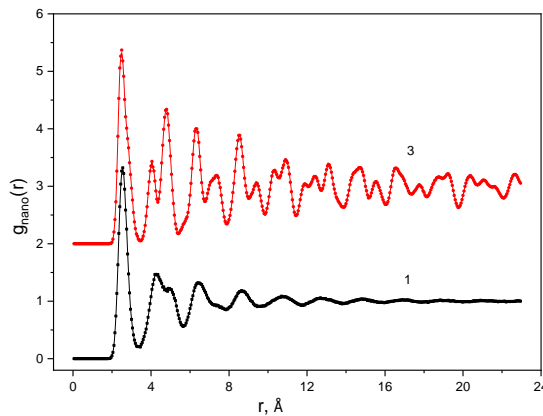
Chương 3 KẾT QUẢ VÀ THẢO LUẬN

3.1 Vi cấu trúc và tính chất nhiệt động của hạt nano Fe



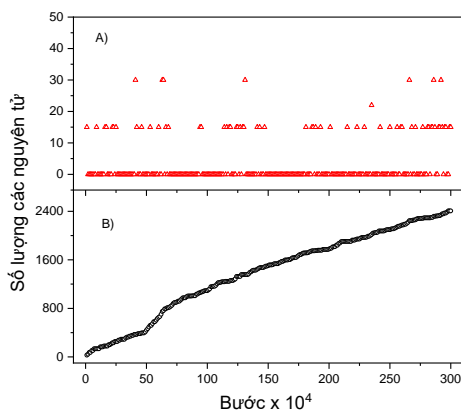
Hình 3.1 Sự phụ thuộc của số lượng nguyên tử Cr vào bước ủ đối với mẫu 900.

Trong hình 3.1, chúng tôi biểu diễn số lượng nguyên tử Cr (N_{Cr}) phụ thuộc vào số bước (thời gian) ủ. Quá trình có thể được chia thành ba thời kỳ. Trong giai đoạn đầu tiên, chúng tôi không tìm thấy bất kỳ đám tinh thể ổn định nào. Chỉ có rất ít các mầm hình thành và tan rã trong thời gian ngắn. Trong giai đoạn thứ hai N_{Cr} tăng nhanh cho thấy sự lớn lên đáng kể của các đám tinh thể. Trong giai đoạn thứ ba, N_{Cr} dao động nhỏ xung quanh một giá trị cố định, cho thấy quá trình tinh thể hóa hoàn thành.



Hình 3.2 Các HPBXT được xác định trong giai đoạn đầu tiên (1) và trong giai đoạn thứ ba (3).

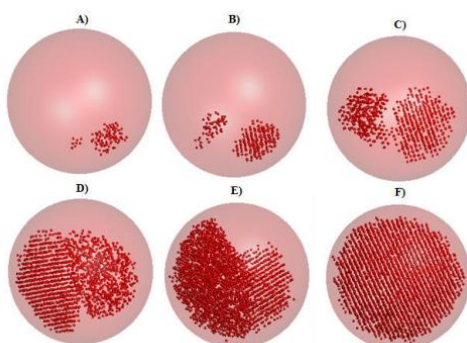
Các hàm phân bố xuyên tâm cặp (HPBXT) được xác định tại trong giai đoạn đầu tiên và thứ ba được biểu diễn như hình 3.2. HPBXT ở giai đoạn thứ ba có nhiều đỉnh thể hiện cấu trúc tinh thể, còn HPBXT ở giai đoạn đầu tương tự như HPBXT của mẫu khối, điều này cho biết rằng cấu trúc của hạt nano ở 900K trước khi ủ vẫn là vô định hình.



Hình 3.3 A) Số lượng nguyên tử Cr được phát hiện trong $3 \cdot 10^6$ bước ở giai đoạn đầu tiên; B) số lượng nguyên tử Cr được ghi lại trong khoảng thời gian này.

Hình 3A, cho thấy số N_{Cr} trong $3 \cdot 10^6$ bước trong giai đoạn đầu tiên, có thể thấy rằng N_{Cr} thay đổi trong khoảng từ 0 đến 30 nguyên tử. Điều này có nghĩa là các mầm hình thành và tan rã trong thời gian ngắn.

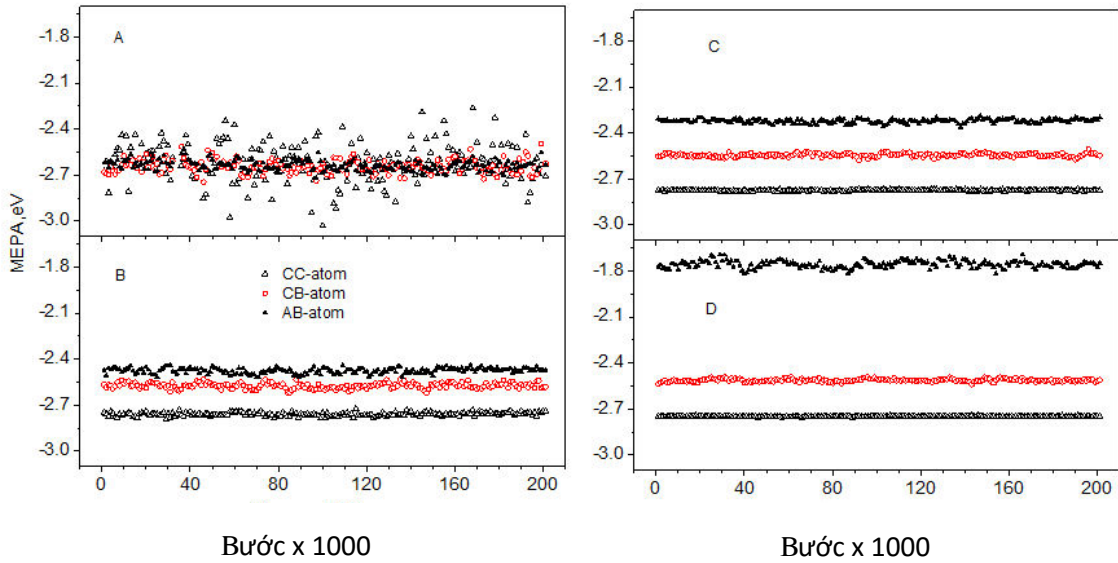
Để xác định nguyên tử nào là nguyên tử Cr trong khoảng thời gian xem xét, tại mọi bước MD chúng tôi tìm các nguyên tử Cr và ghi lại chúng. Số lượng nguyên tử Cr được ghi lại được hiển thị trong hình 3B. Có thể thấy rằng hạt nano vô định hình chứa một số nhóm nhỏ bao gồm các nguyên tử vô định hình ở gần nhau và các nhóm này phân bố khắp mọi nơi trong hạt. Các nguyên tử Am của các nhóm này sắp xếp giống mạng tinh thể bị méo. Đôi khi chúng sắp xếp lại và tạo thành mầm. Xem xét thêm chúng tôi thấy số lượng nguyên tử Cr được ghi lại trong lõi lớn hơn nhiều so với bề mặt, điều này là do cấu trúc vô định hình xốp của bề mặt.



Hình 3.4 Ảnh chụp sự sắp xếp các nguyên tử Cr: A) $N_{Cr} = 188$; B) $N_{Cr} = 568$;
C) $N_{Cr} = 1651$; D) $N_{Cr} = 4440$; E) $N_{Cr} = 6162$; F) $N_{Cr} = 8907$

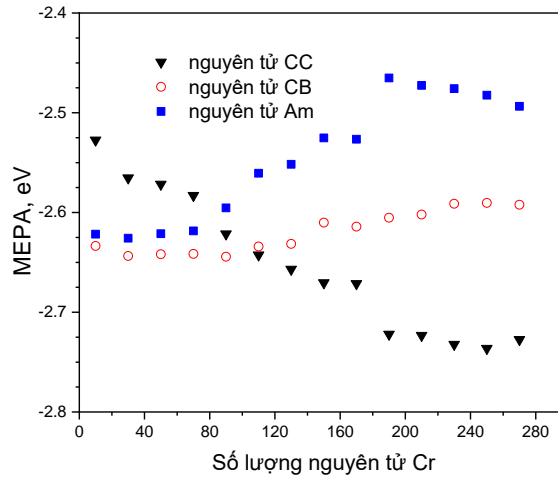
Trong hình 3.4, chúng tôi trực quan hóa về sự sắp xếp các nguyên tử Cr tại vài thời điểm khác nhau trong giai đoạn thứ hai. Đầu tiên, có hai đám tinh thể hình thành trong lõi. Sau đó, các đám này lớn lên và hợp nhất thành một đám lớn. Cuối cùng, đám phát triển bao phủ khắp trong hạt nano. Điều đáng lưu ý là các nguyên tử Cr tập hợp gần nhau và tạo thành hai đám. Từ hình 3.4 cho thấy: (i) Giai đoạn thứ hai không giống như giai đoạn đầu tiên, ở đây, các đám tinh thể ổn định đã được tạo ra trong lõi; (ii) Các mầm mới lúc này không được tạo ra ở những nơi khác nhau, mà chỉ ở các vùng biên của đám tinh thể; (iii) Sự lớn lên của các đám tinh thể bị dừng lại khi đến gần bề mặt. Như vậy, tần xuất hình thành mầm trong các vùng biên lớn hơn nhiều lần so với vùng vô định hình. Các đám tinh thể phát triển theo hướng bao phủ lõi và sau đó lan ra bề mặt. NP tinh thể hóa hoàn toàn bao gồm lõi có cấu trúc tinh thể bcc và bề mặt có cấu trúc vô định hình xốp.

Sự phụ thuộc theo thời gian của MEPA cho các loại đám khác nhau được hiển thị trong hình 3.5, có thể thấy rằng đối với các đám tinh thể nhỏ, MEPA của nguyên tử CB gần với MEPA của nguyên tử AB và MEPA của nguyên tử CC thấp đáng kể, có nghĩa là các đám tinh thể không ổn định. Khi kích thước của các đám tinh thể tăng lên, MEPA của nguyên tử AB tăng lên, điều này có liên quan đến sự lớn lên của đám tinh thể từ lõi ra bề mặt, nơi năng lượng của các nguyên tử lớn hơn năng lượng trong lõi. Trong trường hợp các đám tinh thể lớn, MEPA của các loại nguyên tử khác nhau giảm dần theo thứ tự sau: Nguyên tử AB → Nguyên tử CB → Nguyên tử CC. Theo đó là sự lớn lên của đám tinh thể dẫn đến sự giảm năng lượng của hạt nano.



Hình 3.5 MEPA của các loại nguyên tử khác nhau phụ thuộc vào số bước cho các đám tinh thể kích thước khác nhau: A) $N_{Cr} = 15-85$ nguyên tử; B) $N_{Cr} = 600-700$ nguyên tử; C) $N_{Cr} = 4100-4400$ nguyên tử; D) $N_{Cr} = 8900-9100$ nguyên tử.

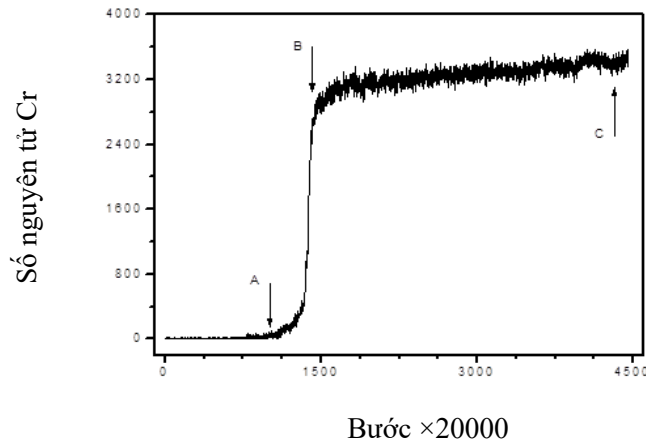
MEPA của các loại nguyên tử khác nhau phụ thuộc vào số lượng nguyên tử Cr trong đám được thể hiện trong hình 3.6. Tại điểm 120 nguyên tử trong đó MEPA của nguyên tử CC và nguyên tử CB nhỏ hơn nguyên tử AB. Điểm này tương ứng với kích thước tới hạn. Các đám có kích thước lớn hơn giá trị tới hạn là ổn định và có xu hướng phát triển. Tóm lại, các kết quả trên chỉ ra rằng ở giai đoạn đầu của việc ủ các mầm nhỏ khác nhau xuất hiện ở khắp mọi nơi trong hạt nano. Do cấu trúc xốp của bề mặt, nên mầm hình thành trong lõi lớn hơn nhiều so với bề mặt. MEPA của các nguyên tử CB và nguyên tử CC của các đám nhỏ là gần với MEPA của các nguyên tử AB. Các mầm nhỏ không ổn định và tan ra trong thời gian ngắn. Sau thời gian ủ dài một số mầm gần nhau tạo ra một đám tinh thể ổn định trong lõi của hạt nano. Không giống như đám nhỏ, MEPA của các loại nguyên tử khác nhau ứng với đám ổn định giảm theo thứ tự: nguyên tử AB → nguyên tử CB → nguyên tử CC. Thứ tự này dẫn đến đám tinh thể phát triển lớn hơn. Sự lớn lên của đám tinh thể bị cản trở khi vùng biên của đám tinh thể di chuyển đến bề mặt hạt nano. Do đó, đám tinh thể phát triển theo hướng bao phủ lõi và sau đó lan ra bề mặt. Mẫu kết tinh hoàn toàn bao gồm pha tinh thể trong lõi và pha vô định hình trên bề mặt.



Hình 3.6 Sự phụ thuộc của MEPA vào số lượng nguyên tử Cr trong đám tinh thể.

3.2 Vi cấu trúc và tính chất nhiệt động của hạt nano Fe_xB_{100-x}

3.2.1 Cơ chế tinh thể hóa và vai trò của nguyên tử Bo trong quá trình tinh thể hóa hạt nano Fe_xB_{100-x}

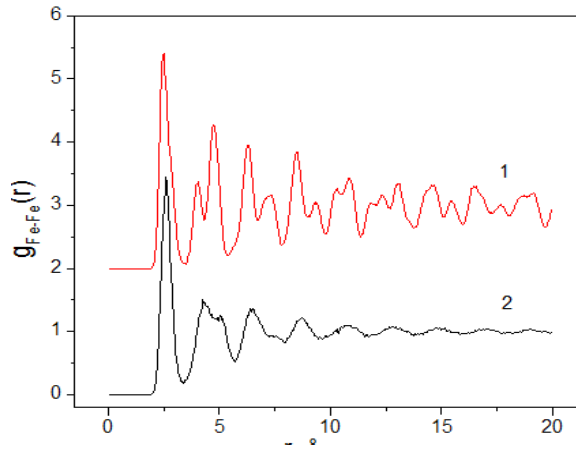


Hình 3.7 Số nguyên tử tinh thể N_{Cr} phụ thuộc vào thời gian đối với mẫu $Fe_{95}B_5$ được ủ ở 900 K.

Khảo sát sự biến đổi số nguyên tử tinh thể theo thời gian sẽ cung cấp những thông tin quan trọng về sự biến đổi cấu trúc hạt nano. Hình 3.7 chúng tôi vẽ số nguyên tử tinh thể N_{Cr} như là hàm của thời gian (bước ĐLHPT) trong hạt nano $Fe_{95}B_5$ ở nhiệt độ 900 K. Theo hình 3.7, sự thay đổi số nguyên tử tinh thể theo thời gian có thể chia thành 3 giai đoạn. Trong đó, giai đoạn 1 kéo dài tới điểm A, ở mỗi bước ĐLHPT, chúng tôi phát hiện hoặc không có nguyên tử tinh thể nào hoặc chỉ thấy số lượng nhỏ các nguyên tử tinh thể. Các mầm này không bền vững và tan ra trong thời gian rất ngắn. Giai đoạn thứ 2 kéo dài từ điểm A đến B, ở đây số lượng nguyên tử tinh thể tăng nhanh, không giống giai đoạn 1, hình thành các mầm tinh thể ổn định và mầm này lớn dần theo thời gian.

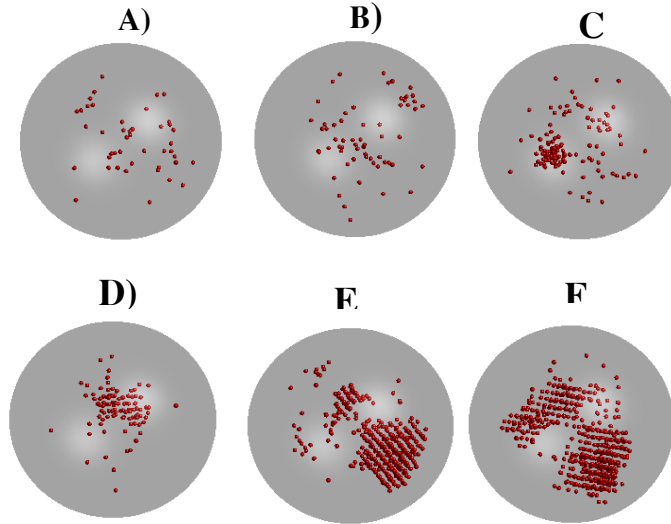
Trong giai đoạn thứ 3, số nguyên tử tinh thể N_{Cr} dao động mạnh quanh giá trị xác định và số nguyên tử tinh thể N_{Cr} tăng không đáng kể theo thời gian.

Vì nồng độ nguyên tử B rất nhỏ so với nồng độ nguyên tử Fe, do đó chúng tôi chỉ xét HPBXT của cặp Fe-Fe mà không cần xét cặp Fe-B và B-B. HPBXT đối với cặp Fe-Fe được xác định ở giai đoạn đầu và giai đoạn thứ 3 được vẽ như thấy trong hình 3.8 HPBXT của pha rắn hình thành ứng với giai đoạn 1 tương tự như HPBXT của mẫu khối VĐH. Trên hình 3.8 cho thấy độ cao và vị trí của cực đại thứ nhất lần lượt là 3,21 và 2,51 Å. Đặc biệt đỉnh thứ 2 của HPBXT ở giai đoạn đầu bị tách thành 2 đỉnh nhỏ, đỉnh nhỏ bên trái đặt tại vị trí 4,1 Å, đỉnh bên phải đặt tại vị trí 5 Å. Đỉnh nhỏ bên trái cao hơn bên phải (độ cao 1,5 so với 1,1). Trong khi đó, HPBXT xác định trong giai đoạn 3 có nhiều đỉnh rõ nét chỉ ra cấu trúc tinh thể. Đỉnh thứ nhất có độ cao 5,4 dao động quanh vị trí 2,55 Å tương ứng với khoảng cách ngắn nhất ($3^{1/2}a/2$), ở đây a là hằng số mạng. Tuy nhiên đỉnh này có đặc điểm không tách ra hoàn toàn vì tồn tại pha VĐH. Đỉnh thứ 2 chứa khoảng cách $2^{1/2}a$ có độ cao 3,4 được thấy quanh giá trị 4,1 Å. Đỉnh thứ 3 có độ cao 4,4 và vị trí quanh giá trị 5 Å tương ứng với khoảng cách $3^{1/2}a$ và $(11/4)^{1/2}a$. Giống như đỉnh thứ nhất, đỉnh thứ 3 không thấy sự tách đỉnh. Kết quả thu được khi phân tích HPBXT như trên chứng tỏ sự tách tinh thể Fe bcc từ hạt nano $Fe_{95}B_5$ VĐH.



Hình 3.8 HPBXT của mẫu $Fe_{95}B_5$, nhiệt độ 900 K ở giai đoạn thứ 3 là đường (1) và ở giai đoạn 1 là đường (2).

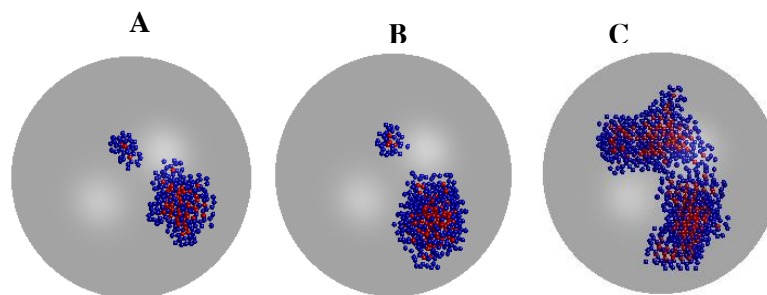
Bảng 3.1. Số bước $\langle t_{CV} \rangle$ và số n_{CV} nhận được trong 6 khoảng thời gian.						
Khoảng thời gian	1	2	3	4	5	6
n_{CV}	44	63	118	99	338	501
$\langle t_{nucleus} \rangle$ (số bước)	1373	1634	15563	21668	95259	96622



Hình 3.9 Ảnh phân bố không gian của các nguyên tử tinh thể ở lõi được xác định trong sáu khoảng thời gian.

Để chi tiết hơn về sự tạo mầm như thế nào, chúng tôi quan sát các mầm trong 6 khoảng thời gian tách biệt, mỗi khoảng thời gian kéo dài 5×10^5 bước và tất cả thuộc giai đoạn 1. Thời điểm bắt đầu của khoảng thứ i là t_i ($i=1,2,\dots,6$; $t_1 < t_2 < \dots < t_6$ và $t_{i+1}-t_i > 5 \cdot 10^5$). Trong các khoảng thời gian quan sát các mầm không ổn định và tan trong thời gian ngắn. Điều đó cho thấy rằng một số nguyên tử trong hạt nano là nguyên tử tinh thể trong thời gian ngắn. Chúng tôi kí hiệu thời gian sống trung bình của mầm là $\langle t_{\text{nucleus}} \rangle$. Chúng tôi cũng tìm thấy các nguyên tử là nguyên tử tinh thể ở lõi trong khoảng thời gian quan sát. Số lượng các nguyên tử này được ký hiệu là n_{CV} . Các giá trị n_{CV} và $\langle t_{\text{nucleus}} \rangle$ được liệt kê trong Bảng 3.1. Chúng ta có thể thấy rằng cả hai đều tăng nhanh từ khoảng thời gian thứ nhất đến thứ sáu, nghĩa là hạt nano vô định hình sau khi ủ thì nhiều nguyên tử đi theo con đường hình thành mầm và thời gian sống của mầm trở nên dài hơn. Trong hình 3.9, chúng tôi vẽ ảnh phân bố không gian các nguyên tử tinh thể ở lõi được xác định trong sáu khoảng thời gian trên. Trong khoảng thời gian 1 và 2, các nguyên tử CV phân bố đồng đều khắp trong hạt nano, nhưng đến khoảng thời gian cuối chúng có xu hướng kết đám lại gần nhau.

Ảnh chụp sự phân bố của các CB-atoms, CV-atoms phát hiện trong giai đoạn thứ 2 được thấy trong hình 3.10. Tại thời điểm đầu t_1 có hai đám tinh thể ổn định nằm trong lõi, sau đó, các đám này phát triển và hợp nhất thành một đám lớn tại thời điểm t_3 .



Hình 3.10. Ảnh chụp về sự phân bố của các CB-atoms, CV-atoms trong giai đoạn thứ hai tại ba thời điểm $t_1(A)$, $t_2(B)$, $t_3(C)$

Hình.3.10 cho thấy ảnh chụp nhanh các Am-toms trong lõi và bề mặt hạt nano thu được ở thời điểm cuối của giai đoạn thứ 3. Có một lượng nhỏ các nguyên tử vô định hình (Am) nằm trong lõi. Bởi vì hầu hết các nguyên tử trong lõi là nguyên tử tinh thể (Cr) tạo thành một hạt lớn với cấu trúc

ting thể bcc, do đó các nguyên tử Am trong lõi đóng vai trò như các khuyết tật của mạng bcc. Như thể hiện trong hình bên trái, các nguyên tử B trong lõi đại diện cho khuyết tật ở dạng nguyên tử xen kẽ.

3.2.2 Cấu trúc địa phương của hạt nano $Fe_{90}B_{10}$ và $Fe_{95}B_5$

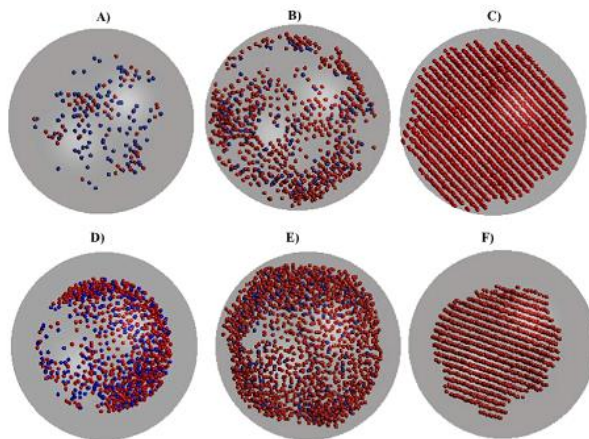
Để nghiên cứu tính chất đa thù hình của hạt nano $Fe_{90}B_{10}$ và $Fe_{95}B_5$, chúng tôi đã chuẩn bị các mẫu $Fe_{90}B_{10}$ và $Fe_{95}B_5$ ở 300K và sau khi tinh thể hóa ở 900 K.

Bảng 3.2 Các đặc điểm của bốn mẫu hạt nano; $\rho_{core/surface}$ tương ứng là mật độ số nguyên tử ở lõi và bề mặt; Z_{Fe-Fe} , Z_{Fe-B} tương ứng là số phối trí trung bình của cặp Fe-Fe và Fe-B.

Các mẫu	N_{Cr}	N_{Am}	E_{Cr} , eV	E_{Am} , eV	ρ_{core}	$\rho_{surface}$	Z_{Fe-Fe}	Z_{Fe-B}
$Fe_{95}B_5$ vô định hình	0	5000	-	-2.7185	0.0843	0.0458	11.73	0.52
$Fe_{95}B_5$ tinh thể	4056	944	-2.8262	-2.5845	0.0872	0.0405	12.29	0.57
$Fe_{90}B_{10}$ vô định hình	0	5000	-	-2.6458	0.0896	0.0381	10.79	1.08
$Fe_{90}B_{10}$ tinh thể	2313	2687	-2.9400	-2.3294	0.0896	0.0385	11.13	1.06

Tính chất đa thù hình của hạt nano được nghiên cứu thông qua số lượng các loại nguyên tử khác nhau và hạt tinh thể. Kết quả cho thấy các mẫu tinh thể được xem xét chỉ có một hạt tinh thể. Đặc điểm của bốn mẫu được liệt kê trong Bảng III, có thể thấy rằng cấu trúc vô định hình và tinh thể không chỉ khác nhau về số lượng nguyên tử Cr, mà còn khác nhau ở số phối trí trung bình và năng lượng E_{AM} . Mật độ của bề mặt bằng khoảng 42% – 55% so với lõi cho thấy bề mặt có cấu trúc xốp hơn so với lõi.

Như thấy trong hình 3.15, các mẫu tinh thể bao gồm một hạt tinh thể và các cụm nguyên tử vô định hình riêng biệt. Các hạt tinh thể có cấu trúc bcc khuyết tật (the bcc structure with defects). Đối với mẫu $Fe_{90}B_{10}$, hạt tinh thể nằm hoàn toàn bên trong lõi, trong khi pha vô định hình bao phủ toàn bộ bề mặt và phần lớn của lõi. Nồng độ B trong vùng vô định hình lớn hơn nồng độ B trong vùng tinh thể.



Hình 3.11 Ảnh chụp sắp xếp nguyên tử cho mẫu $Fe_{95}B_5$ tinh thể: A) các nguyên tử Am trong lõi; B) Nguyên tử Am ở bề mặt; C) Nguyên tử Cr; và đối với mẫu $Fe_{90}B_{10}$ tinh thể: D) Các nguyên tử Am trên bề mặt; E) Các nguyên tử Am trong lõi; F) Nguyên tử Cr. Hình cầu màu xanh và màu đỏ tương ứng là các nguyên tử Bo và sắt.

KẾT LUẬN VÀ KIẾN NGHỊ

1. Các kết quả chính của đề tài

Sau thời gian nghiên cứu, đề tài của chúng tôi đã thu được một số kết quả chính như sau:

1. Bằng phương pháp mô phỏng động lực học phân tử, chúng tôi đã tạo ra được các hạt nano Fe, Fe-B có dạng hình cầu với thể tương tác cặp Pak - Doyama, lần lượt chứa 10000, 5000 nguyên tử ở các nhiệt độ 300 K và 900 K. Chúng tôi cũng đã khảo sát được những đặc trưng về cấu trúc và tính chất nhiệt động của các hạt nano này.

2. Mô phỏng chỉ ra, khi các hạt nano Fe và $Fe_{95}B_5$ VĐH (nồng độ B nhỏ) được ủ nhiệt trong một thời gian đủ dài (cỡ khoảng 10^7 bước ĐLHPT) ở nhiệt độ 900 K, thì chúng tinh thể hóa thành cấu trúc tinh thể bcc. Cơ chế tinh thể hóa trong hạt nano diễn ra như sau: (i) Ở giai đoạn đầu các đám tinh thể nhỏ hình thành, phân bố đều khắp trong hạt nano và nhanh chóng bị biến mất; (ii) Sau thời gian ủ đủ dài, các đám tinh thể ổn định đã được tạo ra trong lõi của hạt nano, các đám này phát triển nhanh theo mọi hướng bao phủ lõi và sau đó lan ra gần bề mặt hạt nano. (iii) Khi quá trình tinh thể hoàn thành, hạt nano tinh thể bao gồm: phần lõi là tinh thể Fe bcc và phần vỏ có cấu trúc xốp vô định hình.

3. Phân tích thế năng trên một nguyên tử của các loại nguyên tử khác nhau với trường hợp đám tinh thể ổn định, chúng tôi thấy rằng, thế năng này giảm dần theo thứ tự sau: Nguyên tử AB \rightarrow Nguyên tử CB \rightarrow Nguyên tử CC. Nghĩa là, sự lớn lên của đám tinh thể bắt nguồn từ sự sắp xếp lại các nguyên tử trong vùng biên giữa pha vô định hình và pha tinh thể và dẫn đến sự giảm năng lượng của hạt nano.

4. Khảo sát với hạt nano Fe_xB_{100-x} nồng độ Bo cao, chúng tôi xét hai mẫu hạt nano $Fe_{90}B_{10}$ ở nhiệt độ 900 K, kết quả mô phỏng chỉ ra sự tinh thể hóa phụ thuộc mạnh vào cách tạo các hạt nano này. Điều này là do nguyên tử Bo đã cản trở quá trình tinh thể hạt nano Fe_xB_{100-x} .

2. Kiến nghị

Mặc dù những đặc trưng về cấu trúc và quá trình tinh thể hóa của các hạt nano Fe, Fe-B đã được nghiên cứu, những vẫn còn nhiều khía cạnh liên quan vẫn chưa được hiểu rõ. Cụ thể, các trạng thái trung gian giữa các dạng vô định hình và tinh thể chưa được nghiên cứu, sự không đồng nhất về cấu trúc trong các hạt nano và lý thuyết về tinh thể hóa ở cấp độ nguyên tử vẫn chưa rõ ràng... Trong các nghiên cứu tiếp theo, chúng tôi sẽ phát triển các kết quả mô phỏng trước đây về cơ chế tạo mầm, phát triển tinh thể và sự tiến hóa cấu trúc vi mô trong hạt nano. Chúng tôi cũng sẽ thực hiện phân tích có hệ thống về cấu trúc của các cụm giống như tinh thể để xác định các trạng thái trung gian. Cấu trúc vi mô địa phương của hạt nano vô định hình và tinh thể cũng sẽ được xem xét.