

## **THÔNG TIN LUẬN ÁN TIẾN SĨ**

Tên đề tài luận án: MÔ PHỎNG QUÁ TRÌNH NÓNG CHẢY HỆ VẬT LIỆU VÔ ĐỊNH HÌNH HAI CHIỀU

Chuyên ngành: Vật lý Kỹ thuật

Mã số chuyên ngành: 62520401

Họ và tên nghiên cứu sinh: Dương Thị Như Tranh

Họ và tên người hướng dẫn: PGS.TS. Trần Thị Thu Hạnh

GS. TS. Võ Văn Hoàng

Cơ sở đào tạo: Trường Đại học Bách Khoa – Đại học Quốc Gia Tp.HCM

### **TÓM TẮT NHỮNG ĐIỂM CHÍNH CỦA LUẬN ÁN**

Sự thành công trong việc chế tạo ra graphene, là vật liệu hai chiều (2D), vào năm 2004 có ý nghĩa vô cùng quan trọng trong cả lý thuyết và ứng dụng, mở ra một kỷ nguyên mới cho nghiên cứu chế tạo và phát triển ứng dụng của màng 2D. Vật liệu vô định hình 2D kết hợp những đặc tính của cả cấu trúc 2D và cấu trúc vô định hình được dự đoán là vật liệu có tiềm năng ứng dụng rộng rãi. Đến thời điểm hiện tại, các thông tin về quá trình chuyển pha của các màng 2D được quan sát chủ yếu bằng phương pháp mô phỏng. Các nghiên cứu cho thấy cơ chế nóng chảy của màng mỏng 2D tinh thể bị ảnh hưởng bởi kích thước của hệ và thể tương tác của các nguyên tử trong hệ được sử dụng. Tuy nhiên, thông tin về sự chuyển pha của màng 2D vô định hình vẫn còn hạn chế, cần được nghiên cứu.

Trong luận án này, sự nóng chảy của các hệ vô định hình dạng thủy tinh, gồm hệ Lennard – Jones – Gauss đơn nguyên tử và hệ vật liệu SiC, được nghiên cứu bằng cách sử dụng phương pháp mô phỏng động lực học phân tử (mô phỏng MD). Sự phụ thuộc vào nhiệt độ của các đặc tính cấu trúc và nhiệt động lực học của các hệ trong quá trình nung nóng được phân tích và thảo luận thông qua việc quan sát sự thay đổi theo nhiệt độ của thể năng, các hàm phân bố xuyên tâm, phân bố số phối vị, phân bố vòng, tính linh động của các nguyên tử và sự phân cụm của chúng. Sự tiến hóa của mô hình khi nung nóng được phân tích thông qua xu hướng tăng tính linh động và phá vỡ các cụm nguyên tử khi nung nóng, các nguyên tử dạng lỏng xuất hiện/phát triển trong mô hình.

Sự phụ thuộc vào tốc độ nung nóng và ảnh hưởng của kích thước trong quá trình nóng chảy của các tấm phẳng 2D chứa các hạt đơn nguyên tử, tương tác với nhau thông qua thế tương tác Lennard – Jones – Gauss, được nghiên cứu. Kết quả cho thấy rằng sự nóng chảy của hệ Lennard – Jones – Gauss đơn nguyên tử vô định hình dạng thủy tinh 2D không tuân theo lý thuyết về sự nóng chảy của các hệ vật liệu tinh thể hai chiều được đề xuất trước đây. Sự nóng chảy thể hiện bản chất đồng nhất, tức là các nguyên tử dạng lỏng xuất hiện đồng nhất trong toàn mô hình theo sự tăng nhiệt độ trong quá trình nung nóng và phát triển cho đến khi toàn bộ mô hình chuyển sang trạng thái lỏng. Bên cạnh đó, các kết quả thu được cũng cho thấy đặc tính cấu trúc của các mô hình thu được hầu như không khác nhau khi sử dụng hai tốc độ nung nóng khác nhau. Vùng nhiệt độ nóng chảy của hệ được xác định từ 0.2 đến 0.8 (đơn vị rút gọn). Trong vùng nhiệt độ nóng chảy, các đặc tính cấu trúc và động lực học của các hệ thay đổi mạnh theo sự tăng nhiệt độ. Nhiệt độ chuyển sang trạng thái thủy tinh  $T_g$  tăng theo sự tăng kích thước của các hệ. Hành vi này có thể được quan sát rõ ràng đối với các mô hình có kích thước nhỏ (có số nguyên tử  $\leq 3600$  nguyên tử). Khi kích thước của mô hình đủ lớn (có số nguyên tử  $> 3600$  nguyên tử), nhiệt độ chuyển sang trạng thái thủy tinh  $T_g$  không bị ảnh hưởng bởi kích thước mô hình.

Mở rộng nghiên cứu cho hệ các dải ruy băng SiC có kích thước nano vô định hình dạng thủy tinh. Sự mô hình hóa, quá trình nóng chảy và ảnh hưởng của cạnh tự do trong dải ruy băng lên quá trình nóng chảy được khảo sát. Đầu tiên, mô hình hóa dải ruy băng nano SiC vô định hình dạng thủy tinh bằng cách làm lạnh nhanh chất lỏng SiC từ nhiệt độ 8000 K xuống 300 K được tiến hành. Hai mô phỏng MD riêng biệt được thực hiện, một mô phỏng sử dụng thế tương tác Tersoff và mô phỏng còn lại sử dụng thế tương tác Vashishta. Kết quả thu được cho thấy so với thế tương tác Vashishta, thế tương tác Tersoff thích hợp hơn để thu được SiC trạng thái vô định hình dạng thủy tinh khi làm lạnh nhanh. Quan sát sự nóng chảy của các dải ruy băng cho thấy: trong khi các dải ruy băng ở trạng thái tinh thể bắt đầu nóng chảy từ các cạnh tự do, các dải ruy băng vô định hình lại không chịu ảnh hưởng của các cạnh tự do này. Hành vi nóng chảy của dải ruy băng ở trạng thái thủy tinh tương tự với tấm phẳng 2D, trong quá trình nung nóng các nguyên tử dạng lỏng đầu tiên xuất hiện nằm rải rác trong khắp mô hình cho

đến khi toàn bộ mô hình chuyển sang trạng thái lỏng. Vùng nhiệt độ nóng chảy và ảnh hưởng của kích thước lên sự nóng chảy của các dải ruy băng SiC thủy tinh được tìm thấy khi nung nóng các dải ruy băng thu được.