

NGHIÊN CỨU LÝ THUYẾT KHUẾCH TÁN CỦA HỢP KIM THAY THẾ AB XEN KẼ NGUYÊN TỬ C VỚI CẤU TRÚC LẬP PHƯƠNG TÂM KHỐI

Nguyễn Quang Học¹, Nguyễn Đức Hiền² và Nguyễn Hồng Nhung¹

¹*Khoa Vật lý, Trường Đại học Sư phạm Hà Nội*

²*Trường Trung học phổ thông Mạc Đĩnh Chi, Chu Pah, Gia Lai*

Tóm tắt. Năng lượng tự do của nguyên tử xen kẽ, khoảng cách lân cận gần nhất giữa hai nguyên tử xen kẽ, các thông số hợp kim đối với nguyên tử xen kẽ, các đại lượng khuếch tán như tần số bước nhảy của nguyên tử xen kẽ, độ dài bước nhảy hiệu dụng, thừa số tương quan, hệ số khuếch tán và năng lượng kích hoạt cùng với phương trình trạng thái đối với hợp kim thay thế AB xen kẽ nguyên tử C với cấu trúc lập phương tâm khối dưới tác dụng của áp suất được rút ra bởi phương pháp thống kê mômen. Trong các trường hợp giới hạn, ta có thể thu được lý thuyết khuếch tán của hợp kim xen kẽ AC, hợp kim thay thế AB và kim loại A.

Từ khóa: hợp kim thay thế và xen kẽ, tần số bước nhảy, độ dài bước nhảy hiệu dụng, thừa số tương quan, hệ số khuếch tán, năng lượng kích hoạt, phương pháp thống kê mômen.

1. Mở đầu

Hiện tượng khuếch tán của các nguyên tử trong tinh thể là một trong những vấn đề rất quan trọng và thu hút sự quan tâm của nhiều nhà nghiên cứu [1-7]. Đối với hợp kim nói chung và hợp kim xen kẽ (HKXX) nói riêng, có hai cơ chế khuếch tán cơ bản là cơ chế thay thế và cơ chế xen kẽ. Cơ chế nào là chủ đạo phụ thuộc vào từng kim loại và các tạp chất pha tạp. Hai thông số cơ bản nhất cần được xác định khi nghiên cứu quá trình khuếch tán là năng lượng kích hoạt và hệ số khuếch tán. Việc xác định hệ số khuếch tán của các nguyên tử trong tinh thể là một bài toán rất phức tạp vì các quá trình khuếch tán phụ thuộc vào rất nhiều điều kiện khác nhau. Để thu được kết quả chính xác của hệ số khuếch tán về mặt lý thuyết, cần phải giải quyết một số vấn đề cơ bản như lý thuyết liên kết của các nguyên tử trong tinh thể, lý thuyết tinh thể có khuyết tật, lý thuyết dao động mạng, v.v. Những vấn đề này được nghiên cứu bằng nhiều phương pháp nghiên cứu khác nhau như mô hình Einstein, phương pháp tốc độ phản ứng, phương pháp động học nguyên tử, ... Tuy nhiên, các phương pháp nói trên phần lớn chỉ mới giải quyết về mặt định tính, còn khi nghiên cứu định lượng gặp nhiều khó khăn về mặt toán học do phải thực hiện nhiều phép tính gần đúng đặc biệt là đối với các mô hình hợp kim như HKXX. Phương pháp thống kê mômen (PPTKMM) đã được áp dụng trong nghiên cứu tính chất cấu trúc, nhiệt động, đàn hồi, chuyển pha và khuếch tán của kim loại và hợp kim [8-10].

Hiện nay chưa có nhiều nghiên cứu định lượng về sự khuếch tán của HKXX. Trước đây, chúng tôi đã xây dựng lý thuyết khuếch tán của HKXX AB với cấu trúc lập phương tâm khối (LPTK) và đã áp dụng tính số cho các HKXX FeSi và FeH [11]. Trên cơ sở kết quả đó, chúng tôi

Ngày nhận bài: 19/10/2019. Ngày sửa bài: 13/3/2020. Ngày nhận đăng: 20/3/2020.

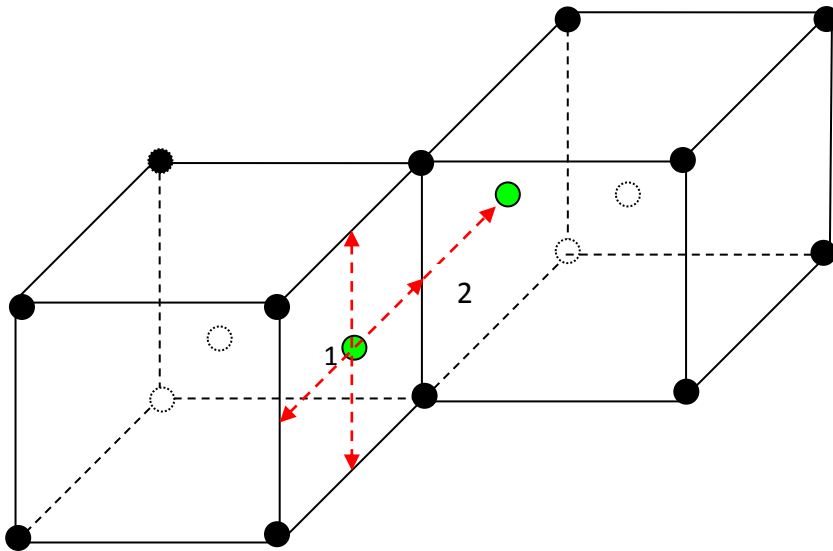
Tác giả liên hệ: Nguyễn Quang Học. Địa chỉ e-mail: hocnq@hnue.edu.vn

xây dựng một lí thuyết khuếch tán mới cho hợp kim thay thế (HKTT) AB xen kẽ nguyên tử C với cấu trúc LPTK dưới tác dụng của áp suất. Cụ thể là bằng PPTKMM chúng tôi rút ra các biểu thức giải tích của năng lượng tự do, khoảng cách lân cận gần nhất giữa hai nguyên tử và các thông số hợp kim đối với nguyên tử xen kẽ, các đại lượng khuếch tán như tần số bước nhảy của nguyên tử xen kẽ, độ dài bước nhảy hiệu dụng, thừa số tương quan, hệ số khuếch tán và năng lượng kích hoạt cùng với phương trình trạng thái đối với hợp kim này.

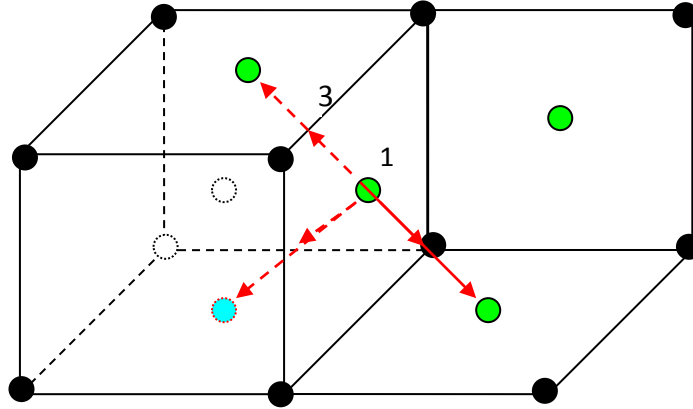
2. Nội dung nghiên cứu

2.1. Cơ chế khuếch tán

Trong mô hình HKTT AB xen kẽ nguyên tử C với cấu trúc LPTK, các nguyên tử A có kích thước lớn nằm ở các đỉnh (nút mạng), nguyên tử thay thế B có kích thước gần với kích thước của nguyên tử A nằm ở tâm khối và các nguyên tử xen kẽ C nằm ở các tâm mặt của ô cơ sở lập phương với điều kiện $c_C \ll c_B \ll c_A$ (c_A, c_B, c_C là các nồng độ của nguyên tử A, B, C). Trong mô hình này, có 2 cách để nguyên tử C dịch chuyển đến tâm của các mặt mạng bên cạnh. Theo cách I, nguyên tử C từ tâm mặt (vị trí 1) di chuyển qua điểm giữa cạnh ô mạng (vị trí 2) tới tâm mặt lân cận với khoảng cách a (a là chiều dài cạnh ô mạng). Theo cách này, có 4 vị trí mà nguyên tử C có thể dịch chuyển tới (Hình 1). Theo cách II, nguyên tử C từ tâm diện (vị trí 1) di chuyển qua điểm giữa đoạn nối 2 tâm của 2 mặt mạng vuông góc với nhau của một ô mạng (vị trí 3) tới tâm mặt lân cận với khoảng cách $a/\sqrt{2}$ (vị trí 3). Theo cách này, có 8 vị trí mà nguyên tử C có thể dịch chuyển tới (Hình 2).



Hình 1. Cơ chế khuếch tán của mạng lập phương tâm khối theo cách I



Hình 2. Cơ chế khuếch tán của mạng lập phương tâm khối theo cách II

2.2. Năng lượng tự do của nguyên tử xen kẽ

Năng lượng tự do của một nguyên tử xen kẽ C trong HKTT AB xen kẽ nguyên tử C với cấu trúc LPTK được xác định bởi [9].

$$\begin{aligned} \psi \approx U_0 + 3\theta \left[x + \ln(1 - e^{-2x}) \right] + 3 \left\{ \frac{\theta^2}{k^2} \left[\gamma_2 x^2 cth^2 x - \frac{2\gamma_1}{3} \left(1 + \frac{xcth x}{2} \right) \right] + \right. \\ \left. + \frac{2\theta^3}{k^4} \left[\frac{4}{3} \gamma_2^2 xcth x \left(1 + \frac{xcth x}{2} \right) - 2(\gamma_1^2 + 2\gamma_1\gamma_2) \left(1 + \frac{xcth x}{2} \right) (1 + xcth x) \right] \right\} \end{aligned} \quad (1)$$

trong phép gần đúng phi điều hòa hoặc

$$\psi = 3 \left\{ \frac{u_0}{6} + \theta \left[x + \ln(1 - e^{-2x}) \right] \right\}, U_0 = \frac{u_0}{2} \quad (2)$$

trong phép gần đúng điều hòa. Ở đây, $\theta = k_{Bo}T, k_{Bo} = 1,38 \cdot 10^{-23} \text{ J/K} = 1,38 \cdot 10^{-16} \text{ erg/K}$ là

hằng số Boltzmann, $x = \frac{h}{2k_bT} \sqrt{\frac{k}{m}}, h = 1,055096 \cdot 10^{-34} \text{ Js} = 1,055096 \cdot 10^{-27} \text{ erg.s}$ là hằng số

Planck. Như vậy, để tính năng lượng tự do của nguyên tử xen kẽ C ta cần phải xác định các đại lượng U_{0C} và k_C ở nhiệt độ T . Để làm điều đó, cần xác định các khoảng cách lân cận gần nhất $r_{1C}(0)$ và $r_{1C}(T)$ giữa 2 nguyên tử C trong hợp kim ở áp suất không ở nhiệt độ 0K và nhiệt độ T .

2.3. Khoảng cách lân cận gần nhất giữa hai nguyên tử xen kẽ

Có thể xác định khoảng cách lân cận gần nhất $r_{1C}(0,0)$ giữa 2 nguyên tử C trong HKTT AB xen kẽ nguyên tử C ở áp suất không và ở nhiệt độ 0K từ phương trình trạng thái hoặc từ điều kiện

$$\left(\frac{\partial U_{0C}}{\partial r_{1C}} \right)_{T=0K} = 0 \quad (3)$$

bằng cách dùng phần mềm Maple, trong đó U_{0C} là năng lượng liên kết giữa nguyên tử xen kẽ C và các nguyên tử A, B của hợp kim. Sau khi tính được $r_{1C}(0,0)$, có thể xác định giá trị của các

đại lượng $k_C, \omega_C = \sqrt{\frac{k_C}{m_C}}, \gamma_C$ tại $r_{1C}(0,0)$ và từ đó xác định $x_C = \frac{h\omega_C}{2k_{Bo}T}, a_{1C} = 1 + x_C \text{cthx}_C,$

$$a_{2C}, \dots, a_{6C}, A_C = a_{1C} + \sum_{i=2}^6 \left(\frac{\gamma_C k_{Bo} T}{k_C^2} \right)^i a_{iC}, y_{0C}(0, T) = \sqrt{\frac{2\gamma_C (k_{Bo} T)^2}{3k_C^3}} A_C \text{ ở áp suất không và}$$

hiệt độ T [9]. Do đó, có thể xác định được khoảng cách lân cận gần nhất $r_{1B}(0, T)$ giữa 2 nguyên tử C trong hợp kim ABC ở áp suất không và nhiệt độ T theo công thức

$$r_{1C}(0, T) = r_{1C}(0, 0) + y_{0C}(0, T), \quad (4)$$

trong đó k_C, ω_C, γ_C được xác định ở áp suất không và nhiệt độ 0 K.

Trong trường hợp khi nguyên tử xen kẽ C khuếch tán theo cách II thì khi chuyển từ vị trí 1 sang vị trí 2, do các vị trí không gian giống nhau (số nguyên tử trên các quả cầu là như nhau) nên ta phải tính đến sự thay đổi không gian để tính $r_{2C}(0, 0)$, nghĩa là

$$r_{2C}(0, 0) = r_{2C}^*(0, 0) + \Delta r_{2C}, \quad (5)$$

trong đó $r_{2C}^*(0, 0)$ được xác định từ điều kiện cực tiểu năng lượng liên kết và Δr_{2C} là phần đặc trưng cho sự thay đổi năng lượng kích hoạt.

2.4. Các thông số hợp kim đối với nguyên tử xen kẽ

Khi nguyên tử xen kẽ C ở vị trí 1 và trong phép gần đúng 2 quả cầu phối vị [10],

$$U_{01C} = \frac{1}{2} [2\varphi_{BC}(r_{1C}) + 4\varphi_{AC}(r_{2C})] = \varphi_{BC}(r_{1C}) + 2\varphi_{AC}(r_{2C}), r_{2C} = r_{1C}\sqrt{2}, \quad (6)$$

$$k_{1C} = \frac{d^2\varphi_{BC}(r_{1C})}{dr_{1C}^2} + \frac{2}{r_{2C}} \frac{d\varphi_{AC}(r_{2C})}{dr_{2C}}, \quad (7)$$

$$\gamma_{11C} = \frac{1}{24} \frac{d^4\varphi_{BC}(r_{1C})}{dr_{1C}^4} + \frac{1}{4r_{2C}^2} \frac{d^2\varphi_{AC}(r_{2C})}{dr_{2C}^2} - \frac{1}{4r_{2C}^3} \frac{d\varphi_{AC}(r_{2C})}{dr_{2C}}, \quad (8)$$

$$\gamma_{21C} = \frac{1}{4r_{1C}} \frac{d^3\varphi_{BC}(r_1)}{dr_1^3} - \frac{1}{2r_1^2} \frac{d^2\varphi_{BC}(r_1)}{dr_1^2} + \frac{1}{2r_1^3} \frac{d\varphi_{BC}(r_1)}{dr_1} + \frac{1}{4r_{2C}} \frac{d^3\varphi_{AC}(r_{2C})}{dr_{2C}^3} - \frac{1}{4r_{2C}^2} \frac{d^2\varphi_{AC}(r_{2C})}{dr_{2C}^2} + \frac{1}{4r_{2C}^3} \frac{d\varphi_{AC}(r_{2C})}{dr_{2C}}, \quad (9)$$

$$\gamma_{1C} = 4(\gamma_{11C} + \gamma_{21C}). \quad (10)$$

Khi nguyên tử xen kẽ C ở vị trí 2 và trong phép gần đúng 2 quả cầu phối vị,

$$U_{02C} = \frac{1}{2} [2\varphi_{AC}(r_{1C}) + 4\varphi_{BC}(r_{2C})] = \varphi_{AC}(r_{1C}) + 2\varphi_{BC}(r_{2C}), r_{2C} = r_{1C}\sqrt{2}, \quad (11)$$

$$k_{2C} = \frac{1}{r_{1C}} \frac{d\varphi_{AC}(r_{1C})}{dr_{1C}} + \frac{d^2\varphi_{BC}(r_{2C})}{dr_{2C}^2} + \frac{1}{r_{2C}} \frac{d\varphi_{BC}(r_{2C})}{dr_{2C}}, \quad (12)$$

$$\gamma_{12C} = \frac{1}{8r_{1C}^2} \frac{d^2\varphi_{AC}(r_{1C})}{dr_{1C}^2} - \frac{1}{r_{1C}^3} \frac{d\varphi_{AC}(r_{1C})}{dr_{1C}} + \frac{1}{48} \frac{d^4\varphi_{BC}(r_{2C})}{dr_{2C}^4} + \frac{1}{8r_{2C}} \frac{d^3\varphi_{BC}(r_{2C})}{dr_{2C}^3} -$$

Nghiên cứu lý thuyết khuếch tán của hợp kim thay thế AB xen kẽ nguyên tử C với cấu trúc lập phương tâm khối

$$-\frac{3}{16r_{2C}^2} \frac{d^2\varphi_{BC}(r_{2C})}{dr_{2C}^2} + \frac{3}{16r_{2C}^3} \frac{d\varphi_{BC}(r_{2C})}{dr_{2C}}, \quad (13)$$

$$\begin{aligned} \gamma_{22C} = & \frac{1}{4r_{1C}^2} \frac{d^2\varphi_{AC}(r_{1C})}{dr_{1C}^2} - \frac{1}{4r_{1C}^3} \frac{d\varphi_{AC}(r_{1C})}{dr_{1C}} + \frac{1}{8} \frac{d^4\varphi_{BC}(r_{2C})}{dr_{2C}^4} - \frac{1}{4r_{2C}} \frac{d^3\varphi_{BC}(r_{2C})}{dr_{2C}^3} + \\ & + \frac{7}{8r_{2C}^2} \frac{d^2\varphi_{BC}(r_{2C})}{dr_{2C}^2} - \frac{7}{8r_{2C}^3} \frac{d\varphi_{BC}(r_{2C})}{dr_{2C}}, \end{aligned} \quad (14)$$

$$\gamma_{2C} = 4(\gamma_{12C} + \gamma_{22C}). \quad (15)$$

Khi nguyên tử xen kẽ C ở vị trí 3 và trong phép gần đúng 2 quả cầu phối vị,

$$U_{03C} = \frac{1}{2} [\varphi_{BC}(r_{1C}) + 2\varphi_{AC}(r_{2C})] = \frac{1}{2} \varphi_{BC}(r_{1C}) + \varphi_{AC}(r_{2C}), r_{2C} = r_{1C} \sqrt{3}, \quad (16)$$

$$k_{3C} = \frac{1}{4} \frac{d^2\varphi_{BC}(r_{1C})}{dr_{1C}^2} + \frac{1}{4r_{1C}} \frac{d\varphi_{BC}(r_{1C})}{dr_{1C}} + \frac{1}{6} \frac{d^2\varphi_{AC}(r_{2C})}{dr_{2C}^2} + \frac{5}{6r_{2C}} \frac{d\varphi_{AC}(r_{2C})}{dr_{2C}}, \quad (17)$$

$$\begin{aligned} \gamma_{13C} = & \frac{1}{192} \frac{d^4\varphi_{BC}(r_{1C})}{dr_{1C}^4} + \frac{1}{32r_{1C}} \frac{d^3\varphi_{BC}(r_{1C})}{dr_{1C}^3} - \frac{3}{64r_{1C}^2} \frac{d^2\varphi_{BC}(r_{1C})}{dr_{1C}^2} + \frac{3}{64r_{1C}^3} \frac{d\varphi_{BC}(r_{1C})}{dr_{1C}} + \\ & + \frac{1}{864} \frac{d^4\varphi_{AC}(r_{2C})}{dr_{2C}^4} + \frac{5}{144r_{2C}} \frac{d^3\varphi_{AC}(r_{2C})}{dr_{2C}^3} + \frac{5}{288r_{2C}^2} \frac{d^2\varphi_{AC}(r_{2C})}{dr_{2C}^2} - \frac{5}{288r_{2C}^3} \frac{d\varphi_{AC}(r_{2C})}{dr_{2C}}, \end{aligned} \quad (18)$$

$$\begin{aligned} \gamma_{23C} = & \frac{1}{16r_{1C}} \frac{d^3\varphi_{BC}(r_{1C})}{dr_{1C}^3} - \frac{1}{16r_{1C}^2} \frac{d^2\varphi_{BC}(r_{1C})}{dr_{1C}^2} + \frac{1}{16r_{1C}^3} \frac{d\varphi_{BC}(r_{1C})}{dr_{1C}} + \frac{1}{144} \frac{d^4\varphi_{AC}(r_{2C})}{dr_{2C}^4} + \\ & + \frac{1}{24r_{2C}} \frac{d^3\varphi_{AC}(r_{2C})}{dr_{2C}^3} + \frac{5}{48r_{2C}^2} \frac{d^2\varphi_{AC}(r_{2C})}{dr_{2C}^2} - \frac{5}{48r_{2C}^3} \frac{d\varphi_{AC}(r_{2C})}{dr_{2C}}, \end{aligned} \quad (19)$$

$$\gamma_{3C} = 4(\gamma_{13C} + \gamma_{23C}). \quad (20)$$

Nếu biết thế tương tác $\varphi_{AA}, \varphi_{BB}, \varphi_{CC}$ thì có thể xác định các thế tương tác $\varphi_{AC}, \varphi_{BC}$ trong hợp kim ABC như sau:

$$\varphi_{AC} \approx \frac{1}{2}(\varphi_{AA} + \varphi_{CC}), \varphi_{BC} \approx \frac{1}{2}(\varphi_{BB} + \varphi_{CC}). \quad (21)$$

2.5. Phương trình trạng thái của hợp kim xen kẽ

Coi khoảng cách lân cận gần nhất trung bình giữa 2 nguyên tử trong hợp kim ABC xấp xỉ bằng khoảng cách lân cận gần nhất giữa 2 nguyên tử trong kim loại sạch A.

Phương trình trạng thái của kim loại A với cấu trúc LPTK ở nhiệt độ T được viết dưới dạng

$$Pv = -r_1 \left(\frac{1}{6} \frac{\partial u_0}{\partial r_1} + \theta_{xcthx} \frac{1}{2k} \frac{\partial k}{\partial r_1} \right), \quad (22)$$

trong đó $v = \frac{4r_1^3}{3\sqrt{3}}$ và sử dụng $\frac{\partial x}{\partial r_1} = \frac{x}{2k} \frac{\partial k}{\partial r_1}$. Có thể áp dụng tốt phương trình (22) nếu nhiệt độ

T_0 được chọn để tính các thông số gần với nhiệt độ T . Ở 0 K, (22) có dạng

$$Pv = -r_1 \left(\frac{1}{6} \frac{\partial u_0}{\partial r_1} + \frac{h\omega_0}{2k} \frac{\partial k}{\partial r_1} \right). \quad (23)$$

Nếu biết dạng của thế tương tác thì (23) cho phép xác định khoảng lân cận gần nhất giữa 2 nguyên tử trong kim loại ở áp suất P và nhiệt độ 0 K.

Bằng cách làm tương tự, có thể xác định được các khoảng cách lân cận gần nhất $r_{1C}(P,0)$ và $r_{1C}(P,T)$ giữa 2 nguyên tử xen kẽ, năng lượng tự do của nguyên tử xen kẽ ở áp suất P và nhiệt độ T và các thông số hợp kim đối với nguyên tử xen kẽ ở các vị trí 1, 2 và 3 trong hợp kim ABC ở áp suất P và nhiệt độ 0 K.

2.6. Các đại lượng khuếch tán của hợp kim xen kẽ

Khi khuếch tán theo cơ chế xen kẽ, hệ số khuếch tán của hợp kim ABC có dạng

$$D = g\Gamma a^2, \quad (24)$$

trong đó Γ là tần số bước nhảy, a là độ dài bước nhảy hiệu dụng và g là một hệ số phụ thuộc vào cấu trúc tinh thể, nhiệt độ, cơ chế khuếch tán và được xác định bởi

$$g = n_1 f \quad (25)$$

với f là thừa số tương quan và n_1 là số vị trí gần nhất mà nguyên tử khuếch tán (nguyên tử xen kẽ) C có thể nhảy vào. Nếu các vị trí mà nguyên tử xen kẽ C có thể nhảy vào có xác suất như nhau thì $f = 1$. Do các vị trí gần mà nguyên tử xen kẽ C có thể nhảy vào có xác suất lớn hơn so với các vị trí xa nên $f < 1$ và gần đúng được xác định bởi

$$f \approx \left(1 - \frac{1}{n_1} \right)^2 \approx 1 - \frac{2}{n_1}. \quad (26)$$

Đối với mạng LPTK, nếu khuếch tán theo cách I, $n_1 = 4$, $f = 0,5$ và nếu khuếch tán theo cách II, $n_1 = 8$, $f = 0,75$.

Tần số bước nhảy của nguyên tử xen kẽ C được xác định bởi

$$\Gamma = \frac{\omega}{2\pi} \exp\left(-\frac{\Delta\psi}{k_{Bo}T}\right), \omega = \sqrt{\frac{k_C}{m_C}}, \Delta\psi = \psi_C^* - \psi_C, \quad (27)$$

trong đó ψ_C^* là năng lượng tự do của nguyên tử xen kẽ C ở vị trí 1 và ψ_C là năng lượng tự do của nguyên tử xen kẽ C ở vị trí 2 được tính theo công thức (1) nếu nguyên tử xen kẽ khuếch tán theo cách I. Còn nếu nguyên tử xen kẽ khuếch tán theo cách II thì ψ_C là năng lượng tự do của nguyên tử xen kẽ C ở vị trí 3.

Độ dài bước nhảy hiệu dụng đối với mạng LPTK bằng

$$a = r_1 + r_2 \quad (28)$$

nếu khuếch tán theo cách I và

$$a = \frac{1}{2} \left(\frac{r_1}{\sqrt{2}} + r_2 \right) \quad (29)$$

nếu khuếch tán theo cách II.

Hệ số khuếch tán có dạng

Nghiên cứu lí thuyết khuếch tán của hợp kim thay thế AB xen kẽ nguyên tử C với cấu trúc lập phương tâm khối

$$D = D_0 \exp\left(-\frac{E}{k_{Bo}T}\right), \quad (30)$$

trong đó

$$D_0 = n_1 f a^2 \frac{\omega}{2\pi} \quad (31)$$

và

$$E = \Delta\psi \quad (32)$$

là năng lượng kích hoạt.

Khi nồng độ nguyên tử xen kẽ c_C thay đổi thì độ dài bước nhảy hiệu dụng a thay đổi và hệ số trước hàm mũ D_0 thay đổi. Có gần đúng

$$r_C = c_{AB} r_A^* + c_C r_C^* = (1 - c_C) r_A^* + c_C r_C^*, r_A^* = \frac{r_A}{\sqrt{2}} \quad (33)$$

trong đó $c_{AB} = c_A + c_B$, r_A là khoảng lân cận gần nhất giữa 2 nguyên tử A trong kim loại sạch, r_A^* là khoảng lân cận gần nhất giữa 2 nguyên tử A trong hợp kim ABC, r_C^* là khoảng lân cận gần nhất giữa nguyên tử C và các nguyên tử A, B trong hợp kim ABC, r_C là khoảng lân cận gần nhất giữa 2 nguyên tử C. Từ đó xác định r_{1C}, r_{2C}, r_{3C} tương ứng với các vị trí 1, 2 và 3 và các độ dài

bước nhảy hiệu dụng $a = r_{1C} + r_{2C}$ hoặc $a = \frac{1}{2} \left(\frac{r_{1C}}{\sqrt{2}} + r_{3C} \right)$. Sau đó tìm được sự phụ thuộc của

D_0, D vào nồng độ nguyên tử xen kẽ c_C .

Sau khi xác định khoảng cách lân cận gần nhất, năng lượng tự do, các thông số hợp kim đối với nguyên tử xen kẽ ở các vị trí 1, 2, 3, có thể tìm được các đại lượng khuếch tán của HKXX như độ dài bước nhảy hiệu dụng, tần số bước nhảy, năng lượng kích hoạt, hệ số trước hàm mũ và hệ số khuếch tán

Trong trường hợp khi nồng độ nguyên tử thay thế bằng không, ta thu được lí thuyết khuếch tán của hợp kim xen kẽ AC [11]. Trong trường hợp khi nồng độ nguyên tử xen kẽ bằng không, ta thu được lí thuyết khuếch tán của hợp kim thay thế AB [8]. Trong trường hợp khi nồng độ nguyên tử thay thế và nồng độ nguyên tử xen kẽ bằng không, ta thu được lí thuyết khuếch tán của kim loại A [8].

3. Kết luận

Bằng PPTKMM, chúng tôi rút ra các biểu thức giải tích của năng lượng tự do của nguyên tử xen kẽ, khoảng cách lân cận gần nhất giữa hai nguyên tử xen kẽ, các thông số hợp kim đối với nguyên tử xen kẽ, các đại lượng khuếch tán như tần số bước nhảy của nguyên tử xen kẽ, độ dài bước nhảy hiệu dụng, thừa số tương quan, hệ số khuếch tán và năng lượng kích hoạt cùng với phương trình trạng thái đối với HKTT AB xen kẽ nguyên tử C với cấu trúc LPTK phụ thuộc vào nhiệt độ và áp suất. Trong các trường hợp giới hạn, chúng tôi thu được lí thuyết khuếch tán của hợp kim thay thế AB, hợp kim xen kẽ AC và kim loại A. Trong bài báo tiếp theo, chúng tôi áp dụng các kết quả lí thuyết thu được trong bài báo này để nghiên cứu sự khuếch tán của nguyên tử xen kẽ trong hợp kim FeCrSi dưới tác dụng của áp suất.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

- [1] K.M.Zhao, G.Jiang and L.Wang, 2011. Electronic and thermodynamic properties of B2-FeSi from first principles. *Physica*, **B406**, pp. 363-357.
- [2] W.Xiong, M.Selleby, Q.Chen, J.Odqvist and Y.Du, 2010. Phase equilibria and thermodynamic properties in the Fe-Cr system. *Critical Reviews in Solid State and Materials Sciences*, **35**, pp. 125-152.
- [3] W.F.Smith, 1993. *Structure and properties of engineering alloys*. McGraw-Hill, Inc.
- [4] S.L.Chaplot, R.Mittal and N.Choudhury, 2010. *Thermodynamic properties of solids: experiment and modeling*. Wiley-VCH Verlag GmBh &Co.KgaA.
- [5] Y.Fukai, 1993. *The metal-hydrogen system*. Springer. Berlin.
- [6] T.T.Lau, C.J.Först, X.Lin, J.D.Gale, S.Yip, and K.J.Van Vliet, 2007. Many-body potential for point defect clusters in Fe-C alloys. *Phys. Rev. Lett.*, **98**. p. 215501.
- [7] L.S.I.Liyanage, S-G.Kim, J.Houze, S.Kim, M.A.Tschopp, M.I.Baskes and M.F.Horstemeyer, 2014. Structural elastic and thermal properties of cementite (Fe₃C) calculated using a modified embedded atom method. *Phys. Rev.*, **B89**, p. 094102.
- [8] Hoàng Văn Tích, 2000. *Lý thuyết khuếch tán của tinh thể kim loại và hợp kim*. Luận án Tiến sĩ Vật lý, Trường Đại học Sư phạm Hà Nội.
- [9] Vũ Văn Hùng, 2009. *Phương pháp thống kê mômen trong nghiên cứu tính chất nhiệt động và đàn hồi của tinh thể*. NXB Đại học Sư phạm, Hà Nội.
- [10] Nguyen Quang Hoc, Dinh Quang Vinh, Bui Duc Tinh, Tran Thi Cam Loan, Ngo Lien Phuong, Tang Thi Hue and Dinh Thi Thanh Thuy, 2015. Thermodynamic properties of binary interstitial alloys with a BCC structure: dependence on temperature and concentration of interstitial atoms. *Journal of Science of HNUE*, Math. and Phys. Sci., Vol. 60, No. 7, pp.146-155.
- [11] Nguyen Quang Hoc, Bui Duc Tinh, Dinh Quang Vinh and Le Hong Viet, 2016. Diffusion of interstitial atoms in interstitial alloys FeSi and FeH with BCC structure under pressure. *Scientific Journal of Hanoi Metropolitan University*, Vol. 61, No. 8, pp. 48-56.

ABSTRACT

Study on diffusion theory for substitutional alloy AB with interstitial atom C and BCC structure under pressure

Nguyen Quang Hoc¹, Nguyen Duc Hien² and Nguyen Hong Nhung¹

¹*Faculty of Physics, Hanoi National University of Education*

²*Mac Dinh Chi High School, Chu Pah, Gia Lai*

The free energy of interstitial atoms, the nearest neighbor distance between two interstitial atoms, the alloy parameters for interstitial atoms, the diffusion quantities such as the jumping frequency of interstitial atoms, the effective jumping length, the correlation factor, the diffusion factor and the activated energy and the equation of state for substitutional alloy AB with interstitial atom C in a BCC structure under pressure are derived using the statistical moment method. In limited cases, we obtain the diffusion theories for the substitutional alloy AB, the interstitial alloy AC and the metal A.

Keywords: interstitial alloy, jumping frequency, effective jumping length, correlation factor, diffusion factor, activated energy, statistical moment method.