

MÔ PHỎNG CẤU TRÚC VI MÔ CỦA $(Al_2O_3).2(SiO_2)$

Nguyễn Thành Tín¹, Lê Thế Vinh² và Bùi Danh Hòa²

ABSTRACT

The paper presents results of microstructural investigation of $(Al_2O_3).2(SiO_2)$ by means of molecular dynamics method with Born-Mayer potentials, periodic boundary conditions. Simulation were done in the basic cube containing 1650 ions with six different systems at temperature of 2500 K and different densities, pressure ranging from 0 GPa to 25 GPa, and with five different systems at pressure of 0 GPa, temperature ranging from 1000 K to 5000 K were prepared. Microstructure of constructed systems has been observed and analyzed through the structural parameters such as radial distribution function, coordination numbers, polyhedrons SiO_x and AlO_x ($x=4, 5$ and 6).

Keywords: Microstructure, molecular dynamics simulation, $(Al_2O_3).2(SiO_2)$ silicate

Title: Simulation of microstructure of $(Al_2O_3).2(SiO_2)$

TÓM TẮT

Bài báo trình bày kết quả nghiên cứu vi cấu trúc của vật liệu $(Al_2O_3).2(SiO_2)$ bằng phương pháp động lực học phân tử với thế tương tác Born-Mayer, điều kiện biên tuần hoàn. Quá trình mô phỏng được thực hiện đối với hệ gồm 1650 nguyên tử với 6 mô hình ở nhiệt độ 2500 K và các mật độ khác nhau tương ứng với dải áp suất từ 0 GPa đến 25 GPa và với 5 mô hình khác ở áp suất 0 GPa, các nhiệt độ 1000 K đến 5000 K. Vi cấu trúc của các hệ dưới tác động của áp suất được khảo sát và phân tích thông qua hàm phân bố xuyên tâm, số phối trí, các đa diện SiO_x và AlO_x ($x=4, 5$ và 6).

Từ khóa: Vi cấu trúc, mô phỏng động lực học phân tử, ôxít ba nguyên $(Al_2O_3).2(SiO_2)$

1 GIỚI THIỆU

Trong những năm gần đây, các vật liệu oxit đã được sử dụng rộng rãi trong các ngành công nghiệp: SiO_2 được ứng dụng chế tạo các chất bán dẫn, thủy tinh và các vật liệu kĩ thuật khác; Al_2O_3 được sử dụng rộng rãi trong chế tạo gốm. Đặc biệt, hỗn hợp oxit $(Al_2O_3).2(SiO_2)$ [AS2] là vật liệu cơ bản trong công nghệ gốm sứ, lọc hóa dầu và là thành phần cơ bản của vỏ trái đất. Do vậy, số lượng công trình nghiên cứu về vật liệu SiO_2 , Al_2O_3 và AS2 đã tăng nhanh. Có một số công trình nghiên cứu đã khảo sát sự thay đổi cấu trúc trong dải áp suất từ 3 GPa đến 5 GPa (Kostya Trachenko and Martin T. Dove, 2003). Sự thay đổi cấu trúc vi mô dẫn đến phá vỡ trật tự trung bình và quá trình chuyển pha - hồi phục cấu trúc đã được khảo sát. Ảnh hưởng của chuyển pha lên các tính chất cơ học được nghiên cứu bằng mô phỏng Monte Carlo (MC) sử dụng mô hình quả cầu cứng (Matthew H. Ford, 2004). Quá trình chuyển pha từ trạng thái vô định hình (VĐH) này sang trạng thái vô định hình khác (ở trật tự thứ nhất) xảy ra trong SiO_2 dưới tác dụng của áp suất tương tự với sự chuyển pha này xảy ra trong H_2O . Ở nhiệt độ thấp, sự chuyển pha này được thay bằng sự thay đổi chậm cấu trúc trong SiO_2 (Daniel J. Lacks, 2000).

¹ Trường THPT Hồng Ngự 1, Tỉnh Đồng Tháp

² Trường Đại học Sư phạm Kỹ thuật Vinh, Tỉnh Nghệ An

Kết quả cho thấy, tồn tại hai pha này ở điều kiện áp suất khác nhau là rất thú vị. Với cùng một dải nhiệt độ, pha thứ nhất bền vững ở áp suất thấp, trái lại pha thứ hai bền vững ở áp suất cao. Vùng áp suất xảy ra chuyển pha đã được nhiều công trình đề cập đến, kết quả thu được cũng khá khác nhau, có tác giả thu được kết quả là 14 GPa đến 22 GPa (Daniel J. Lacks, 2000); trong khi giá trị này Polian đo được là 8 GPa đến 25 GPa (A. Polian and M. Grimsditch, 1990). Cấu trúc của Al_2O_3 VDH được nghiên cứu ở nhiều công trình mô phỏng và thực nghiệm. Nhìn chung, kết quả nghiên cứu cho thấy độ dài liên kết Al-O trong khoảng 1.8 Å đến 1.9 Å và số nguyên tử O xung quanh nguyên tử Al trong khoảng 4.0 đến 4.8. Cấu trúc của hệ được tạo bởi từ các tứ diện AlO_4 và bát diện AlO_6 với tỷ lệ phụ thuộc vào phương pháp, quy trình làm mẫu thí nghiệm. Tác giả Lamparter và cộng sự đã nghiên cứu vi cấu trúc của Al_2O_3 bằng cả phương pháp thực nghiệm nhiễu xạ tia X, nhiễu xạ neutron và phương pháp mô phỏng Monte Carlo (P. Lamparter, R. Knier, 1997). Kết quả cho thấy, có 20% nguyên tử Al với 3 nguyên tử O bao quanh, 56% nguyên tử Al có 4 O và 22% nguyên tử Al có số phối trí O là 5, số liệu này cũng được xác nhận (G. Gutierrez, 2000). Vật liệu $(Al_2O_3)_2(SiO_2)$ được nghiên cứu trong công trình (N.V. Hồng, N.T. Nhân, P. K. Hùng, 2007), tác giả xây dựng mô hình AS2 gồm 1100 nguyên tử ở nhiệt độ 3000 K, áp suất thay đổi theo các giá trị là 0 GPa, 3 GPa, 5 GPa, 7 GPa, 9 GPa, 11 GPa, 13 GPa, 15 GPa và 20 GPa. Tác giả đã tính được độ cao cực đại thứ nhất của $g_{Si-Si}(r)$ là 4.84 Å tại giá trị $r = 3.18$ Å, độ cao cực đại thứ nhất của $g_{Si-O}(r)$ là 14.12 Å tại giá trị $r = 1.58$ Å, độ cao cực đại thứ nhất của $g_{O-Al}(r)$ là 7.84 Å tại $r = 1.64$ Å. Cho tới nay, đã có số lượng lớn công trình nghiên cứu về vi cấu trúc AS2. Tuy nhiên sự lý giải đầy đủ về sự thay đổi vi cấu trúc dưới tác động của áp suất và nhiệt độ vẫn chưa thỏa đáng và còn những vấn đề đang được thảo luận. Trong bài báo này chúng tôi nghiên cứu chi tiết sự thay đổi của cấu trúc mức độ nguyên tử thông qua việc khảo sát, phân tích đặc trưng cấu trúc như hàm phân bố xuyên tâm, phân bố số phối trí, độ liên kết giữa các cặp nguyên tử.

2 PHƯƠNG PHÁP TÍNH TOÁN

Mô hình vật liệu $(Al_2O_3)_2(SiO_2)$ gồm 1650 nguyên tử (300 nguyên tử Si, 300 nguyên tử Al và 1050 nguyên tử O) được xây dựng bằng phương pháp mô phỏng động lực học phân tử với điều kiện biên tuần hoàn và thế tương tác Born-Mayer:

$$U_{ij} = \frac{q_i q_j}{r_{ij}} + A_{ij} \exp(-B_{ij} r_{ij}) \quad (1)$$

Chi tiết về các hệ số của thế tương tác có thể xem trong tài liệu tham khảo (N.V. Hồng *et al.*, 2007; V.V. Hoang *et al.*, 2007). Cấu hình ban đầu, các nguyên tử được gieo ngẫu nhiên với nhiệt độ 7000 K, sau 65.000 bước mô phỏng, hệ được đưa về trạng thái cân bằng ở nhiệt độ 2500 K, áp suất là 0 GPa, mật độ 2.537 g/cm^3 . Từ trạng thái ổn định, hệ được nén áp suất 5 GPa, 10 GPa, 15 GPa, 20 GPa, 25 GPa sau 25.000 bước. Để khảo sát sự ảnh hưởng của nhiệt độ, từ dữ liệu ở mẫu ổn định ban đầu tại nhiệt độ 2500 K và áp suất 0 GPa, chúng tôi cho xây dựng 6 mẫu ở áp suất không đổi 0 GPa, với các nhiệt độ từ 1000 K, 2000 K, 3000 K, 4000 K, 5000 K. Mỗi mô hình sau khi xây dựng, được tiếp tục ổn định cấu trúc sau 25.000 bước

mô phỏng. Để tăng tính thống kê của phép đo, số liệu tính toán của các thông số đặc trưng được lấy trung bình của 1000 lần tính với 5 bước mô phỏng được xác định một lần.

3 KẾT QUẢ VÀ THẢO LUẬN

Số liệu về hàm phân bố xuyên tâm của các mô hình được trình trên hình 1 và các bảng 1, bảng 2.

Bảng 1: Vị trí đỉnh thứ nhất r_{ij} (Å) của hàm phân bố xuyên tâm của hệ AS2 theo áp suất

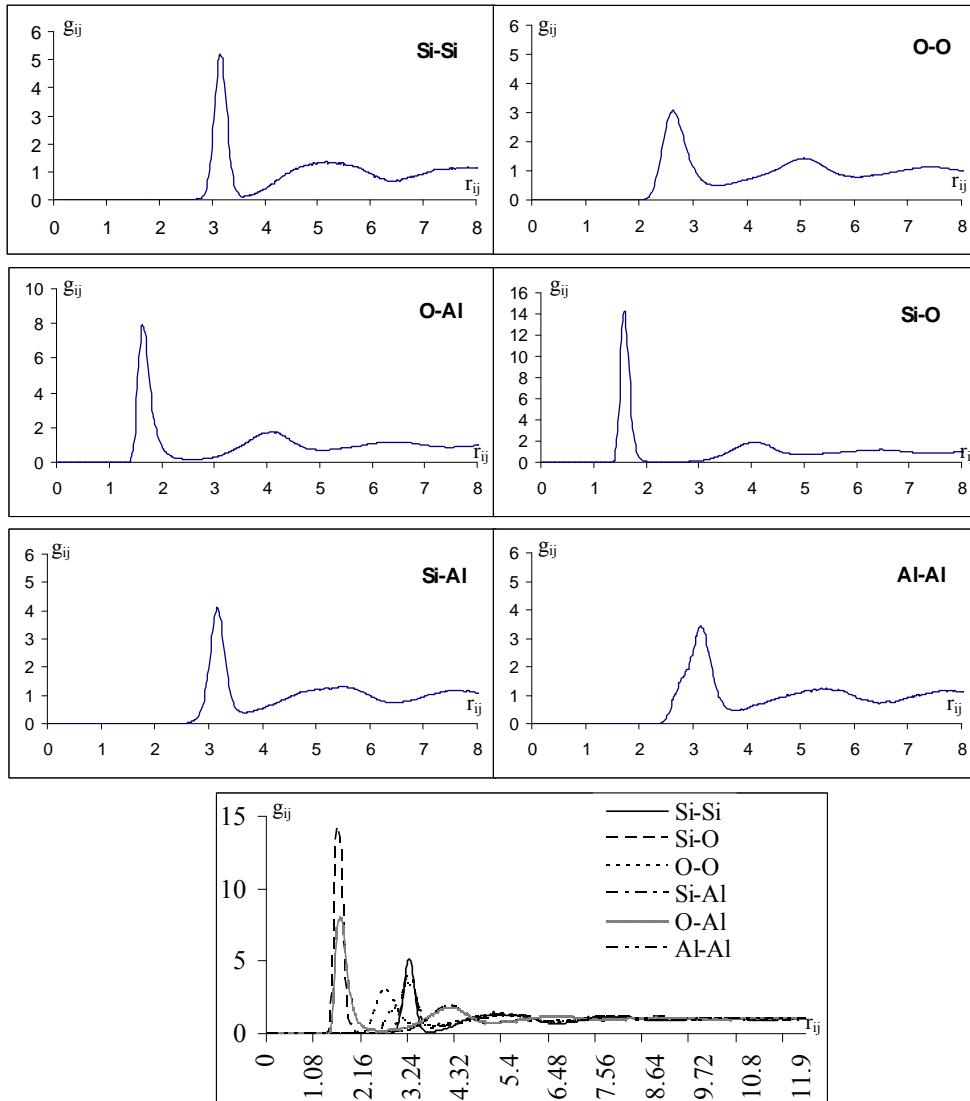
P, GPa	Si-Si	Si-O	O-O	Si-Al	O-Al	Al-Al
0	3.16	1.60	2.64	3.16	1.64	3.14
5	3.14	1.58	2.62	3.16	1.66	3.12
10	3.14	1.60	2.54	3.12	1.70	3.06
15	3.14	1.62	2.54	3.12	1.72	3.04
20	3.14	1.64	2.50	3.06	1.72	3.00
25	3.14	1.64	2.48	3.08	1.74	3.02

Bảng 2: Độ cao đỉnh thứ nhất $g_{ij}(r)$ của hàm phân bố xuyên tâm của hệ AS2 theo áp suất

P, GPa	Si-Si	Si-O	O-O	Si-Al	O-Al	Al-Al
0	5.18	14.30	3.08	4.11	7.97	3.43
5	4.47	11.66	2.73	3.60	6.22	3.22
10	3.71	7.59	2.40	3.22	4.74	2.92
15	3.72	6.77	2.43	2.99	4.40	3.26
20	3.49	6.13	2.43	3.30	4.20	2.88
25	3.57	5.94	2.50	3.22	4.12	3.09

Kết quả trên hình 1 và các bảng 1, bảng 2 cho thấy, khi áp suất tăng, độ dài liên kết của các cặp liên kết giữa các nguyên tử Al-Al và O-O giảm, trong khi liên kết Si-O và O-Al tăng. Độ dài liên kết của cặp Si-Si giảm khi áp suất tăng từ 0 GPa đến 5 GPa và hầu như không thay đổi khi áp suất tăng trong khoảng giá trị từ 10 GPa đến 25 GPa (Bảng 1). Các giá trị của cặp liên kết Si-O và O-Al phù hợp với giá trị thực nghiệm là 1.61 Å và 1.66 Å [7, 8]. Độ dài của cặp liên kết O-Al tăng nhanh hơn so với Si-O ($\Delta r_{Al-O} = 0.1 \text{ Å}$ so với $\Delta r_{Si-O} = 0.04 \text{ Å}$). Độ cao đỉnh thứ nhất của hàm $g_j(r)$ của hàm phân bố xuyên tâm của hệ AS2 đều giảm khi áp suất tăng (Bảng 2). Độ cao đỉnh thứ nhất của hàm phân bố xuyên tâm các cặp liên kết Si-Si, O-O và Al-Al xuất hiện cực tiểu tại áp suất 20 GPa.

Số liệu về phân bố số phối trí được trình bày trên Bảng 3. Kết quả cho thấy khi áp suất tăng số phối trí trung bình của tất cả các cặp đều tăng. Trong đó, số phối trí trung bình của cặp liên kết Al-O tăng từ 3.73 đến 6.41, cặp Si-O tăng từ 4.01 đến 6.22. Điều này chứng tỏ cấu trúc thay đổi theo xu hướng chuyển từ cấu trúc tứ diện sang cấu trúc bát diện.



Hình 1: Hàm phân bố xuyên tâm của hệ AS2 ở áp suất 0 GPa

Bảng 4 trình bày số liệu phân bố số phối trí cặp O-Si. Ở áp suất thấp, bao quanh 1 nguyên tử O là 1 hoặc 2 nguyên tử Si và có một tỉ lệ đáng kể trường hợp không có nguyên tử Si nào bao quanh 1 nguyên tử O. Tuy nhiên, khi áp suất tăng tỉ lệ không có nguyên tử Si bao quanh nguyên tử O giảm đáng kể và ở khoảng áp suất 5 GPa đến 10 GPa có xuất hiện trường hợp có 3 nguyên tử Si bao quanh 1 nguyên tử O. Như vậy, ở áp suất thấp, từ 0 GPa đến 5 GPa vẫn có cấu trúc "tricluster" gồm 3 cation là Si bao quanh 1 nguyên tử O, nhưng tỉ lệ xuất hiện rất thấp. Cấu trúc "tricluster" xuất hiện nhiều hơn ở áp suất vào khoảng từ 10 GPa đến 25 GPa và tăng khi áp suất tăng.

Bảng 3: Số phối trí trung bình của các cặp liên kết trong hệ AS2 ở các áp suất khác nhau

P, GPa	Si-Si	Si-O	Si-Al	O-Si	O-O	O-Al	Al-Si	Al-O	Al-Al
0	2.30	4.01	2.38	1.32	7.10	1.37	2.36	3.73	3.20
5	2.45	4.11	2.92	1.34	8.39	1.47	2.89	4.15	3.87
10	3.35	4.61	4.02	1.44	10.77	1.56	4.01	4.73	4.90
15	3.93	4.79	4.17	1.50	11.44	1.66	4.17	5.05	5.48
20	4.00	5.04	4.85	1.53	12.06	1.65	4.85	5.21	5.23
25	5.31	6.22	6.11	2.49	13.50	2.55	6.11	6.41	6.42

Bảng 4: Số phối trí của cặp liên kết O-Si theo các áp suất khác nhau

P, GPa	1	2	3	4	5
0	0.134	0.377	0.488	0.001	0.000
5	0.121	0.379	0.491	0.009	0.000
10	0.086	0.318	0.543	0.052	0.000
15	0.087	0.283	0.523	0.106	0.001
20	0.061	0.276	0.560	0.102	0.001
25	0.036	0.317	0.541	0.106	0.000

Bảng 5: Số phối trí của cặp liên kết O-Al theo các áp suất khác nhau

P, GPa	1	2	3	4	5	6
0	0.224	0.303	0.268	0.201	0.004	0.000
5	0.192	0.255	0.309	0.223	0.020	0.001
10	0.135	0.235	0.373	0.226	0.030	0.000
15	0.132	0.189	0.369	0.230	0.080	0.001
20	0.098	0.215	0.411	0.221	0.055	0.001
25	0.057	0.271	0.413	0.213	0.045	0.001

Số liệu về số phối trí cặp O-Al được trình bày trên bảng 5. Kết quả này chứng tỏ, ở áp suất thấp, có từ 1 đến 3 nguyên tử Al bao quanh 1 nguyên tử O và cũng có một tỉ lệ đáng kể trường hợp không có nguyên tử Al nào bao quanh O. Tuy nhiên, cũng giống như Si, khi tăng áp suất thì tỉ lệ này cũng giảm đáng kể. Bên cạnh đó, khi tăng áp suất cũng làm xuất hiện các trường hợp có 4 nguyên tử Al bao quanh 1 nguyên tử O, mặc dù tỉ lệ này rất thấp. Như vậy, cấu trúc "tricluster" gồm 3 cation là Al bao quanh 1 nguyên tử O luôn xuất hiện trong hệ AS2 ở các áp suất khác nhau và hầu như cấu trúc này không thay đổi khi thay đổi áp suất của hệ.

Kết quả khảo sát sự ảnh hưởng của nhiệt độ đến vi cấu trúc của AS2 được trình bày trong các bảng 6 đến bảng 12. Khi nhiệt độ tăng, độ dài liên kết của các cặp liên kết đều giảm, tuy nhiên đối với cặp liên kết O-O và Al-O lại có cực đại tại khoảng nhiệt độ 3000 K (Bảng 6).

Bảng 6: Vị trí đỉnh thứ nhất r_{ij} (Å) của hàm phân bố xuyên tâm của hệ AS2 theo nhiệt độ

T, K	Si-Si	Si-O	O-O	Si-Al	O-Al	Al-Al
1000	3.18	1.60	2.62	3.18	1.64	3.18
2000	3.18	1.60	2.60	3.16	1.64	3.18
3000	3.16	1.58	2.64	3.16	1.64	3.12
4000	3.16	1.58	2.62	3.16	1.62	3.14
5000	3.16	1.58	2.62	3.12	1.62	3.16

Bảng 7: Độ cao đỉnh thứ nhất $g_{ij}(r)$ hàm phân bố xuyên tâm của hệ AS2 theo nhiệt độ

T, K	Si-Si	Si-O	O-O	Si-Al	O-Al	Al-Al
1000	7.18	20.23	3.45	5.50	9.82	4.23
2000	5.66	15.92	3.20	4.43	8.42	3.55
3000	4.85	13.39	2.93	3.68	7.60	3.29
4000	4.64	12.64	2.88	3.47	7.34	3.03
5000	3.90	10.46	2.52	2.88	6.29	2.82

Độ cao đỉnh thứ nhất lớn nhất các cặp đều giảm khi nhiệt độ tăng (Bảng 7). Trong đó, độ cao đỉnh thứ nhất của cặp Si-O giảm nhanh nhất và cặp O-O giảm chậm nhất so với các liên kết còn lại.

Số phối trí trung bình của các cặp liên kết đều giảm khi nhiệt độ tăng (Bảng 8). Tuy nhiên, giá trị này của các cặp liên kết lại tăng mạnh ở khoảng nhiệt độ 5000 K. Số phối trí trung bình của cặp liên kết O-Al có giá trị lớn nhất so với các cặp liên kết còn lại.

Bảng 8: Số phối trí trung bình của các cặp liên kết trong hệ AS2 theo nhiệt độ

T, K	Si-Si	Si-O	O-O	Si-Al	O-Al	Al-Al
1000	2.32	4.03	2.44	1.33	7.20	1.40
2000	2.29	4.01	2.40	1.32	7.08	1.38
3000	2.32	4.01	2.33	1.33	7.03	1.37
4000	2.27	4.00	2.22	1.32	6.58	1.34
5000	3.33	5.01	3.19	2.15	7.91	2.03

Số phối trí của cặp liên kết Si-O chủ yếu là 4 và 5 và hầu như không thay đổi theo nhiệt độ. Như vậy, các đơn vị cấu trúc chủ yếu trong hệ là SiO_4 và SiO_5 , ở nhiệt độ khoảng 5000 K có sự xuất hiện đơn vị cấu trúc mới SiO_3 nhưng với tỉ lệ rất thấp (Bảng 9).

Bảng 9: Số phối trí của Si-O ở các nhiệt độ khác nhau

T, K	1	2	3	4	5
1000	0.000	0.000	0.000	0.968	0.032
2000	0.000	0.000	0.000	0.985	0.015
3000	0.000	0.000	0.001	0.983	0.016
4000	0.000	0.000	0.003	0.991	0.006
5000	0.000	0.000	0.017	0.941	0.042

Đối với Al-O, chủ yếu là các cấu trúc AlO_3 , AlO_4 và AlO_5 và một tỉ lệ rất nhỏ không đáng kể các cấu trúc AlO_2 và AlO_6 (Bảng 10).

Bảng 10: Số phối trí của Al-O ở các nhiệt độ khác nhau

T, K	1	2	3	4	5	6
1000	0.000	0.000	0.186	0.744	0.069	0.001
2000	0.000	0.000	0.245	0.672	0.081	0.002
3000	0.000	0.000	0.282	0.647	0.069	0.003
4000	0.000	0.001	0.371	0.574	0.053	0.001
5000	0.000	0.003	0.392	0.524	0.078	0.004

Bảng 11: Số phối trí của O-Si ở các nhiệt độ khác nhau

T, K	0	1	2	3
1000	0.133	0.374	0.493	0.000
2000	0.133	0.378	0.488	0.000
3000	0.137	0.369	0.494	0.000
4000	0.137	0.373	0.490	0.000
5000	0.088	0.444	0.465	0.003

Có từ 1 đến 3 nguyên tử Al bao quanh 1 nguyên tử O và có một tỉ lệ rất nhỏ 4 nguyên tử Al bao quanh 1 nguyên tử O. Cấu trúc này cũng không thay đổi theo nhiệt độ. Trường hợp không có nguyên tử Al nào bao quanh 1 nguyên tử O cũng xuất hiện với một tỉ lệ rất đáng kể (Bảng 12).

Bảng 12: Số phối trí của O-Al ở các nhiệt độ khác nhau

T, K	0	1	2	3	4
1000	0.220	0.284	0.280	0.214	0.002
2000	0.222	0.301	0.264	0.206	0.007
3000	0.227	0.303	0.268	0.195	0.007
4000	0.235	0.318	0.266	0.179	0.003
5000	0.154	0.410	0.293	0.137	0.005

Về tỉ lệ nguyên tử Si bao quanh 1 nguyên tử O, chủ yếu có từ 1 đến 2 nguyên tử Si bao quanh 1 nguyên tử O, cấu trúc này hầu như không thay đổi theo nhiệt độ. Cũng có tỉ lệ rất đáng kể không có nguyên tử Si nào bao quanh 1 nguyên tử O (Bảng 11). Tỉ lệ này có xu hướng giảm ở nhiệt độ 5000 K.

Số liệu trên các bảng 6 đến bảng 2 cho thấy, khi nhiệt độ tăng, cấu trúc vi mô của AS2 thay đổi ít về độ dài liên kết, số phối trí của các cặp nguyên tử. Cấu trúc chủ yếu là SiO₄ và AlO₄. Có xuất hiện SiO₅, AlO₅ với tỷ lệ 4.2% và 7.8%.

4 KẾT LUẬN

Có 11 mô hình vật liệu (Al₂O₃).2(SiO₂) đã được xây dựng, có thông số hàm phân bố xuyên tâm phù hợp với số liệu của các công trình thực nghiệm và mô phỏng đã được thực hiện. Các mô hình này có thể được sử dụng để nghiên cứu các tính chất vật lý khác.

Kết quả nghiên cứu đã cho thấy, khi áp suất tăng liên kết Si-O và O-Al tăng, trong khi các liên kết cặp khác giảm. Liên kết O-Al tăng nhanh hơn so với Si-O và các liên kết khác. Giá trị độ cao hàm phân bố xuyên tâm của các cặp giảm đáng kể khi nén ở các áp suất khác nhau. Trong đó, độ cao đỉnh thứ nhất cặp Si-O giảm mạnh nhất.

Ở áp suất thấp, các đơn vị cấu trúc chủ yếu là SiO₄, AlO₄. Khi áp suất tăng, các đơn vị cấu trúc SiO₄, AlO₄ giảm; các đơn vị cấu trúc SiO₆, AlO₆ tăng, quá trình chuyển đổi này diễn ra mạnh nhất ở khoảng áp suất 15 GPa.

Cấu trúc “tricluster” thay đổi đáng kể dưới tác động của áp suất. Khi áp suất trong khoảng 0 GPa đến dưới 10 GPa, có 1 đến 2 nguyên tử Si xung quanh 1 nguyên tử O; có 1 đến 3 nguyên tử Al bao quanh 1 nguyên tử O. Đồng thời, có tỉ lệ đáng kể trường hợp không có nguyên tử Al hoặc Si bao quanh nguyên tử O ở áp suất thấp.

Tuy nhiên, khi áp suất tăng thì tỉ lệ này giảm đi đáng kể. Khi áp suất tăng đến khoảng trên 10 GPa, xuất hiện trường hợp có 3 nguyên tử Si bao quanh 1 nguyên tử O và 4 nguyên tử Al bao quanh 1 nguyên tử O.

Khi nhiệt độ tăng, cấu trúc vi mô của AS2 thay đổi không nhiều, đơn vị cấu trúc chủ yếu là các tứ diện SiO_4 và AlO_4 . Số nguyên tử Si và Al bao quanh nguyên tử O gần như không thay đổi khi nhiệt độ tăng. Chủ yếu có 1 đến 2 nguyên tử Si và có 1 đến 3 nguyên tử Al bao quanh một nguyên tử O. Số “tricluster” có trong mô hình là không nhiều.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

- [1] Kostya Trachenko and Martin T. Dove (2003), *Compressibility, kinetics, and phase transition in pressurized amorphous silica*. in: Phys. Rev. B, 8415: 67-74.
- [2] Matthew H. Ford (2004), *On the mechanical properties and phase behavior of silica: A simple model based on low coordination and strong association*. in: J. Chem. Phys, 8415: 117-127.
- [3] Daniel J. Lacks (2000), *First-Order Amorphous-Amorphous Transformation in Silica*. in: Phys. Rev. Lett, 4629: 84-92.
- [4] A. Polian and M. Grimsditch (1990), *Room-temperature densification of α -SiO₂ versus pressure*. in: Phys. Rev. B, 6086: 41-49.
- [5] P. Lamparter, R. Kniep (1997), *Structure of amorphous Al₂O₃*. in: Phys. B, 405: 234-244.
- [6] G. Gutierrez (2000), *Structural properties of liquid Al₂O₃: A molecular dynamics study*. in: Phys. Rev. E, 2723: 3-61.
- [7] Nguyễn Văn Hồng, Nguyễn Thu Nhân, Phạm Khắc Hùng (2007), *Sự phụ thuộc cấu trúc của hệ (Al₂O₃)₂(SiO₂) lỏng vào áp suất*, Tạp chí Khoa học và Công nghệ các Trường đại học kỹ thuật, số 60: 5-16.
- [8] V.V. Hoang, N.N. Linh and N.H. Hung (2007), *Structure and dynamics of liquid and amorphous Al₂O₃.2SiO₂*. in: Eur. Phys. J, 111: 37-48.