

CẤU TRÚC LỚP TẠI GIAO DIỆN LỎNG - HÔI CỦA KIM LOẠI LỎNG SIÊU LẠNH CÓ BỀ MẶT TỰ DO

Trần Yên Mi¹, Trần Hoài Nhân² và Võ Văn Hoàng³

¹ Khoa Khoa học Tự nhiên, Trường Đại học Cần Thơ

² THCS&THPT Hòa Bình, Bình Minh, Vĩnh Long

³ Khoa Khoa học Ứng dụng, Đại học Quốc gia TP. Hồ Chí Minh

Thông tin chung:

Ngày nhận: 19/06/2014

Ngày chấp nhận: 30/10/2014

Title:

Surface-induced layering structure in supercooled liquid with free surface

Từ khóa:

Cấu trúc lớp, kim loại lỏng siêu lạnh, bề mặt tự do

Keywords:

Surface-induced layering structure, supercooled liquid metal

ABSTRACT

Study on the thermodynamic properties of liquid metal, Nickel, using the dynamics simulation shows that the simulation has surface-induced layering at 1220K. This temperature is very close to the phase transition temperature between solid and supercooled liquid of this system, 1190K. Based on the analysis of the density profile at 1220K, the width of the outermost layer is found to be about 1.89 Å. This is a typical value for many models. On the other hand, the close-packed structure in these layers is recognized by analysing radial distribution function $g(r)$. In addition, based on the distribution of coordination numbers, we find out that the particle density in layering structure space is higher than that of the remaining part of the system. Finally, the 3D visualization of roughness surface is taken at 1220 K in order to highlight the situation.

TÓM TẮT

Áp dụng phương pháp mô phỏng động lực học phân tử để khảo sát các tính chất nhiệt động học của mô hình Nickel lỏng ở trạng thái siêu lạnh, chúng tôi phát hiện hệ tồn tại cấu trúc lớp tại nhiệt độ 1220K (rất gần với nhiệt độ chuyển pha rắn – lỏng siêu lạnh, 1190K, của hệ). Trên cơ sở phân tích hàm mật độ tại 1220K, bề rộng của lớp ngoài cùng được đo vào khoảng 1.89Å (một giá trị tương đối đặc trưng của cấu trúc lớp trong các mô hình khác). Mặt khác, sự khác biệt trong cấu trúc xếp chặt của vùng không gian có cấu trúc lớp so với vùng không có cấu trúc lớp trong hệ cũng được tìm thấy, trên cơ sở phân tích hàm phân bố xuyên tâm $g(r)$. Ngoài ra, dựa vào sự phân bố số phối vị, chúng tôi lại một lần nữa nhận ra rằng mật độ hạt trong vùng cấu trúc lớp có giá trị vượt trội so với phần còn lại trong mô hình. Cuối cùng, ảnh 3D bề mặt của hệ Nickel lỏng siêu lạnh tại 1220K đã được chụp lại. Đây là một lớp bề mặt gồ ghề, thể hiện sự phân bố mật độ không đồng đều.

1 GIỚI THIỆU

Cấu trúc lớp trên bề mặt kim loại lỏng đã được tìm thấy bằng phương pháp nhiễu xạ tia X đối với một số kim loại thuần như Ga (M. J. Regan *et al.*, 1995), Hg (O. M. Magnussen *et al.*, 1995), In (H. Tostmann *et al.*, 1999), và gần đây là cả K (O.G.

Shpyrko *et al.*, 2003) và Sn (O.G. Shpyrko *et al.*, 2004). Tại đây, các nguyên tử ở trạng thái lỏng gần bề mặt đã sắp xếp để tạo thành các lớp riêng biệt, mỗi lớp có mật độ khác nhau và được sắp xếp song song với bề mặt của mẫu. Gần đây, cấu trúc này còn xuất hiện trong nước tinh khiết ở trạng thái

siêu lạnh (LÜ Yongjun *et al.*, 2006), đây là một điều tương đối bất ngờ và hiếm hoi, vì một số nghiên cứu trước đó cho rằng cấu trúc lớp không thường xuất hiện tại bề mặt tự do của các chất điện môi hay các chất lỏng ion (TartaglinoU *et al.*, 2005. Zykova-Timan T *et al.*, 2005). Trong giới hạn tìm kiếm, chúng tôi vẫn chưa tìm được bài báo thứ hai nói về cấu trúc lớp trong một chất lỏng siêu lạnh.

Đã có một số giả thiết được đưa ra để giải thích vấn đề này. Theo đó, Van der Waals (C. S. Garder and C. Radin, 1979) đã từng cho rằng cấu trúc lớp cũng xuất hiện bên trong khối vật liệu, nhưng bản chất của hiện tượng này trong các chất lỏng khác nhau đã không được giải thích thỏa đáng. Sau đó, Buff *et al.*, 1965 cho rằng chính sóng mao dẫn nhiệt xuất hiện tại một vị trí bất kỳ trên giao diện đã tạo ra sự dao động về độ cao của bề mặt. Ngoài ra, nhóm nghiên cứu S. Iarlori *et al.*, 1989 cũng chứng tỏ rằng bề mặt kim loại lỏng có cấu trúc trật tự gần (gần giống với cấu trúc tinh thể) hơn so với khối chất lỏng bên dưới khi ở cùng nhiệt độ. Chính lực đa thể “glue” đã quyết định hiện tượng bất thường này. Họ cũng cho rằng trong các chất lỏng đơn giản dùng thế cặp thì bề mặt của chúng sẽ ít trật tự hơn so với cấu trúc khối của chất lỏng bên dưới. Tuy nhiên, Chacon *et al.*, 2001 lại cho rằng cấu trúc lớp ở bề mặt có thể là một tính chất chung của các chất lỏng có bề mặt tự do ở nhiệt độ thấp, nhiệt độ nóng chảy của chúng phải tương đối thấp so với nhiệt độ tới hạn để tránh quá trình tinh thể hóa. Bản chất đa thể của các tương tác kim loại không đóng một vai trò quan trọng so với dạng của thế cặp được dùng trong mô phỏng.

Ngoài các hướng nghiên cứu chính là lý thuyết và thực nghiệm, phương pháp mô phỏng động lực học phân tử cũng được xem là một trong những công cụ đắc lực giúp hiểu rõ hơn về cấu trúc lớp ở cấp độ nguyên tử. Đây là phương pháp dùng khảo sát các tính chất cân bằng và chuyển dời của hệ nhiều hạt, khi sự dịch chuyển của chúng tuân theo các quy luật Newton cổ điển (Võ Văn Hoàng, 2004). Phương pháp này được xem là tính gần đúng rất tốt cho một dãy rộng các vật liệu, trong đó có cả Nickel ở trạng thái lỏng mà chúng tôi quan tâm.

2 PHƯƠNG PHÁP MÔ PHỎNG

2.1 Thế tương tác

Chúng tôi đã dùng thế tương tác EAM (Embedded Atom Method, một dạng của thế tương tác Glue) được đề xuất đầu tiên bởi Daw và Baskes

vào những năm 1983, 1984 (M. S. Daw *et al.*, 1983. M. S. Daw *et al.*, 1986). Đây là một thế bán thực nghiệm của hệ nhiều hạt, được xây dựng dựa trên lý thuyết hàm mật độ, cho phép tìm hiểu đầy đủ về hệ kim loại với các khuyết tật cấu trúc, quá trình bề mặt, tạp chất,... Thế này được xem là hiệu quả khi áp dụng cho các kim loại như Cu, Ag, Au, Ni, Pd và Pt (S. M. Foiles *et al.*, 1986). Theo thế này, mỗi nguyên tử được nhúng trong một đám khí electron. Năng lượng cần thiết để thay thế một nguyên tử đó được xác định thông qua mật độ electron tại cùng vị trí mà không phân biệt nguồn gốc của các electron. Biểu thức năng lượng tổng của hệ như sau:

$$E = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \Phi_{ij} \left(r_{ij} \right) + \sum_i F_i \rho_i \quad (1)$$

Với ρ_i : mật độ electron ở bó thứ i , được tạo bởi electron của các nguyên tử lân cận,

$$\rho_i = \sum_{j \neq i} f_j \left(r_{ij} \right) \quad (2)$$

f_j : mật độ electron của nguyên tử thứ j tại vị trí của nguyên tử thứ i , hai nguyên tử này cách nhau một đoạn r_{ij} .

$F_i \rho_i$: năng lượng nhúng.

Φ_{ij} : số hạng của thế tương tác cặp

2.2 Các chi tiết của mô hình vật liệu

Mô hình ban đầu gồm 32000 nguyên tử Ni được phân bố ngẫu nhiên trong một khối lập phương thể tích $73.931 \times 73.931 \times 73.931$ (Å), ứng với mật độ của Ni lỏng là $\rho = 7.717 \text{ g/cm}^3$ tại nhiệt độ 1773 K (F. J. Cherne *et al.*, 2001) (với nhiệt độ nóng chảy của hệ là 1726 K). Ban đầu hệ với điều kiện biên tuần hoàn được phục hồi ở nhiệt độ 3000 K sau 10^5 bước MD để đạt trạng thái lỏng cân bằng. Sau đó chúng tôi áp dụng điều kiện biên tuần hoàn theo trục x và y . Đối với trục z , điều kiện biên phản xạ được áp dụng sau khi thêm một khoảng chân không $\Delta z = 10$ Å tại điểm $z = 73.931$ Å. Tuy nhiên, do áp dụng điều kiện biên phản xạ đàn hồi nên hệ xuất hiện thêm một bề mặt tự do tại $z = 0$ Å trong suốt quá trình mô phỏng sau đó. Trong nghiên cứu, hệ cân bằng thêm một khoảng thời gian tại 3000 K, tương ứng với biên mới sau khi hồi phục 10^5 bước MD; sau đó, từng bước làm lạnh mô hình qua các nhiệt độ trung gian để cuối cùng thu được trạng thái tinh thể ở 300 K. Nhiệt độ giảm tuyến tính theo thời gian theo biểu thức

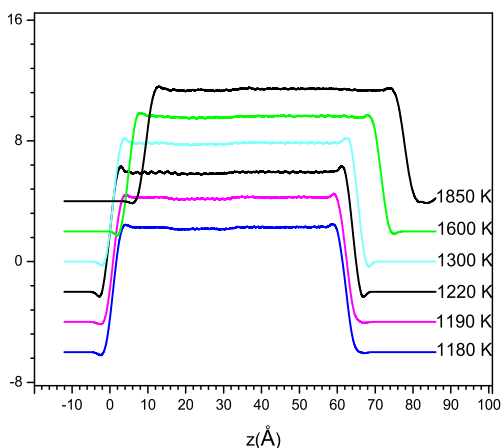
$T = T_0 - \gamma t$, với tốc độ làm lạnh $\gamma = 10^{11} K / s$. Để tăng độ tin cậy, chúng tôi chạy hai lần độc lập và lấy giá trị trung bình.

3 PHÂN TÍCH KẾT QUẢ

3.1 Hàm mật độ

Thông thường Ni có nhiệt độ nóng chảy vào khoảng 1726 K, có nghĩa rằng khi Ni có nhiệt độ nhỏ hơn 1726 K sẽ ở trạng thái rắn. Tuy nhiên, mẫu Ni mà chúng tôi chọn khảo sát lại có một tính chất khác, nó vẫn ở trạng thái lỏng khi nhiệt độ nhỏ

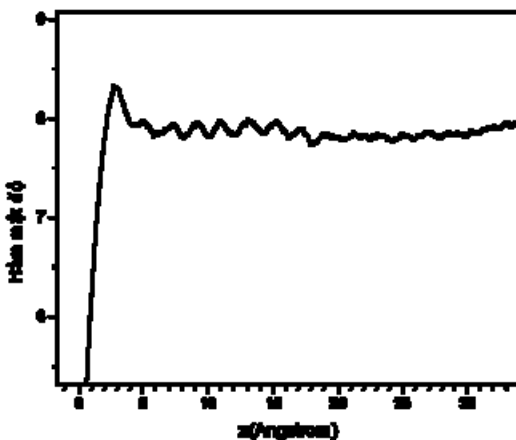
hơn 1726 K, và chỉ trở thành chất rắn kết tinh khi có nhiệt độ nhỏ hơn hay bằng 1190 K. Khi này, mẫu Ni của nghiên cứu được gọi là chất lỏng ở trạng thái siêu lạnh. Để tìm hiểu về cấu trúc lớp của chất lỏng siêu lạnh này, nghiên cứu đã tiến hành vẽ hàm mật độ của nó tại một số nhiệt độ (1180 K, 1190 K, 1220 K, 1300 K, 1600 K, 1850 K) lân cận nhiệt độ chuyển pha rắn – lỏng của mẫu (1190 K). Kết quả các hàm mật độ theo phương vuông góc với bề mặt mẫu rút ra từ phương pháp mô phỏng động lực học phân tử MD được mô tả trong Hình 1.



Hình 1: Hàm mật độ của hệ tại các nhiệt độ 1180 K, 1190 K, 1220 K, 1300 K, 1600 K, 1850 K

Hình 1 cho thấy rằng cấu trúc lớp chỉ xuất hiện tại nhiệt độ 1220 K (đường màu đen thứ 3, từ dưới đếm lên), khi hệ đang ở trạng thái lỏng siêu lạnh,

và cấu trúc lớp này chỉ xuất hiện ở một phía của mẫu (xét theo phương z). Hình 2 cho thấy ảnh cấu trúc lớp rõ hơn tại nhiệt độ 1220 K.



Hình 2: Hàm mật độ của hệ tại nhiệt độ 1220 K. Cấu trúc lớp xuất hiện trên bề mặt mẫu

Theo Hình 2, cấu trúc lớp tại nhiệt độ 1220 K xuất hiện tại bề mặt mẫu. Ta có thể thấy được 8 lớp xuất hiện, trong đó lớp ngoài cùng là cao nhất. Hay nói cách khác, hàm mật độ của hạt có dạng dao

động tắt dần khi đi từ bề mặt tự do của mẫu vào trong cấu trúc khối. Chúng tôi đã đo được bề rộng của một số lớp như sau:

Bảng 1: Độ rộng các lớp tại 1220 K

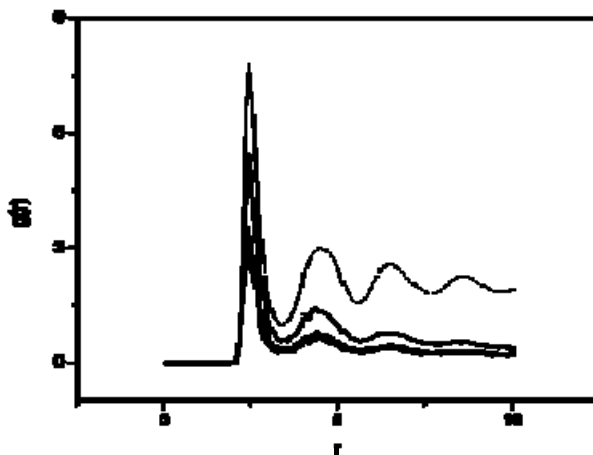
Tên lớp	01 (lớp ngoài cùng)	02	03	04	05	06
Độ rộng	1.89 Å	1.82 Å	2.15 Å	1.93 Å	2.00 Å	2.18 Å

Theo Bảng 1, do bề rộng của các lớp luôn nhỏ hơn giá trị hằng số mạng của Nickel (3.507 Å) nên chắc chắn cấu trúc lớp này không phải là sự sắp xếp của mạng tinh thể. So với bề rộng của các lớp (2 – 3 Å) được đo trong một số bài báo (LŨ Yongjun *et al.*, 2006. S. Iarlori *et al.*, 1989. E. Chacon *et al.*, 2001. J. G. Harris *et al.*, 1987. M. Zhao *et al.*, 1997. M. Zhao *et al.*, 1998. Brent. G. Walker *et al.*, 2007), thì bề rộng lớp của chúng tôi tương đối nhỏ hơn chút ít. Có thể giải thích vấn đề này như là hệ quả của độ linh động tương đối yếu của các nguyên tử trong mô hình, do chúng đang ở trạng thái siêu lạnh. Ngoài ra, cấu trúc lớp mà nghiên cứu phát hiện được có dáng điệu mất dần khi tiến sâu vào cấu trúc bên trong của mẫu, trong

khi cấu trúc tinh thể thì lại tuần hoàn trên toàn bộ mẫu.

3.2 Hàm phân bố xuyên tâm g(r)

Tiếp theo, để có thể hình dung được cấu trúc xếp chặt của các nguyên tử trong từng lớp tại nhiệt độ 1220 K, cũng như sự khác biệt rõ rệt giữa nhiệt độ (1220 K) có cấu trúc lớp và nhiệt độ không có cấu trúc lớp (ví dụ như 1300 K), nghiên cứu tiến hành khảo sát hàm phân bố xuyên tâm g(r) (Võ Văn Hoàng, 2004) theo hai hướng chính. Thứ nhất, nghiên cứu so sánh hàm phân bố xuyên tâm giữa các lớp tại nhiệt độ 1220 K. Sau đó, nghiên cứu phân tích hàm phân bố xuyên tâm g(r) tại nhiệt độ 1300 K trên cơ sở so sánh với g(r) tại nhiệt độ 1220 K.



Hình 3: Hàm phân bố xuyên tâm g(r) được vẽ cho cả hệ (đường chấm chấm), cho lớp 1 (đường liền nét đậm) và cho từng lớp còn lại tại nhiệt độ 1220 K

Hình 3 cho thấy hàm phân bố xuyên tâm g(r) vẽ cho cả hệ (đường chấm chấm) chứng tỏ hệ đang ở trạng thái lỏng. Đường g(r) vẽ cho lớp 1 (đường liền nét đậm) có sự khác biệt đáng kể về độ cao và độ dao động so với g(r) của các lớp bên trong. Ngoài ra, đường g(r) của các lớp bên trong gần như

trùng nhau hoàn toàn. Hai đặc trưng này cũng được tìm thấy trong một số nghiên cứu gần đây (D. Chekmarev *et al.*, 1998. J. G. Harris *et al.*, 1987. M. Zhao *et al.*, 1997. M. Zhao *et al.*, 1998). Nghiên cứu rút ra một số nhận xét về hàm phân bố xuyên tâm g(r) vẽ cho cả hệ và cho từng lớp trong hệ:

– Đỉnh nhọn đầu tiên của các $g(r)$ thẳng hàng nhau, chứng tỏ khoảng cách trung bình giữa các nguyên tử trong các lớp bằng nhau.

– Đỉnh hai và ba của hàm $g(r)$ của lớp 1 cao hơn đỉnh hai và ba của các lớp bên trong, có nghĩa rằng tốc độ tắt dần dao động của $g(r)$ của lớp 1 chậm hơn các lớp bên trong, nên có sự tăng trật tự gần ở lớp 1 so với các lớp bên trong.

– Hàm $g(r)$ của các lớp bên trong gần như trùng nhau hoàn toàn, chứng tỏ cách sắp xếp của các nguyên tử trong các lớp này giống nhau, và giống với cấu trúc khối trong mẫu.

– Đỉnh cao nhất của $g(r)$ của lớp 1 cao hơn đỉnh cao nhất của $g(r)$ của các lớp bên trong, chứng tỏ cấu trúc xếp chặt ở lớp ngoài cùng diễn ra mạnh mẽ hơn. Mặt khác, xét theo hàm mật độ thì bề rộng của lớp ngoài cùng lại nhỏ hơn bề rộng của các lớp bên trong, nên mật độ hạt ở lớp ngoài cùng lớn hơn mật độ hạt của các lớp bên trong.

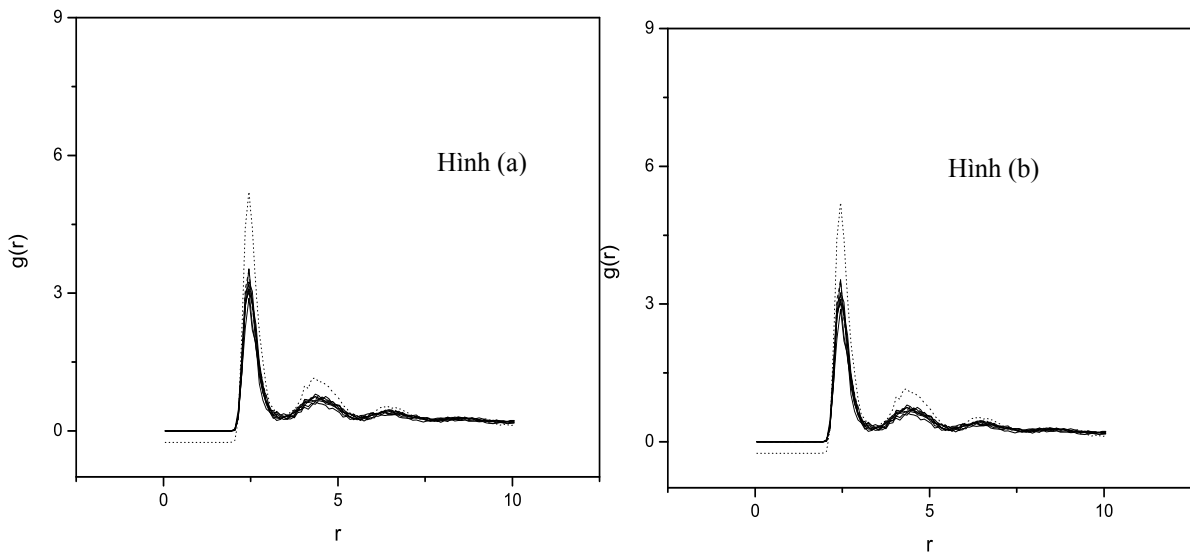
– Hàm $g(r)$ của lớp ngoài cùng có sự gồ ghề, chứng tỏ lớp bề mặt của mẫu có sai hỏng mạng, có cấu trúc chân không, hay sự hiện diện của các

khuyết tật cấu trúc.

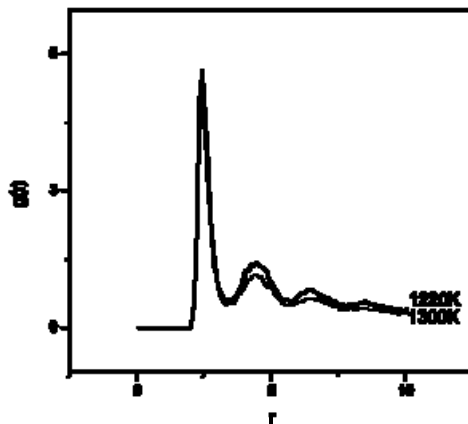
Tiếp theo, chúng tôi khảo sát hàm phân bố xuyên tâm $g(r)$ của mẫu tại nhiệt độ 1300 K trên cơ sở so sánh với các hàm phân bố xuyên tâm $g(r)$ của mẫu tại nhiệt độ 1220 K. Do đó, tại nhiệt độ 1300 K, chúng tôi cũng giả định chia vùng không gian tương ứng của mẫu thành từng lớp như khi mẫu có nhiệt độ 1220 K. Nếu dịch chuyển giá trị $g(r)$ của lớp ngoài cùng tại hai nhiệt độ 1220 K và 1300 K theo cùng một khoảng cách, ta sẽ thấy được sự nổi bật về cấu trúc lớp trong 1220 K.

Ở Hình 4, các lớp tại nhiệt độ 1300 K được giả định theo bề rộng của các lớp tại nhiệt độ 1200 K. So sánh hai hình (a) và (b) trong Hình 4, với cùng một độ dịch chuyển giá trị $g(r)$ của lớp ngoài cùng, rõ ràng cấu trúc lớp ngoài cùng ở 1220 K là nổi bật khi sự chênh lệch giữa độ cao của lớp ngoài cùng và các lớp bên trong tại 1220 K luôn lớn hơn trong 1300 K.

Để thấy rõ hơn vấn đề trên, chúng tôi thực hiện so sánh hàm $g(r)$ của lớp ngoài cùng tại hai nhiệt độ 1220 K và 1300 K.



Hình 4: So sánh sự khác biệt về độ phân biệt lớp ngoài cùng và các lớp bên trong tại 1220 K (Hình a) và tại 1300 K (Hình b)

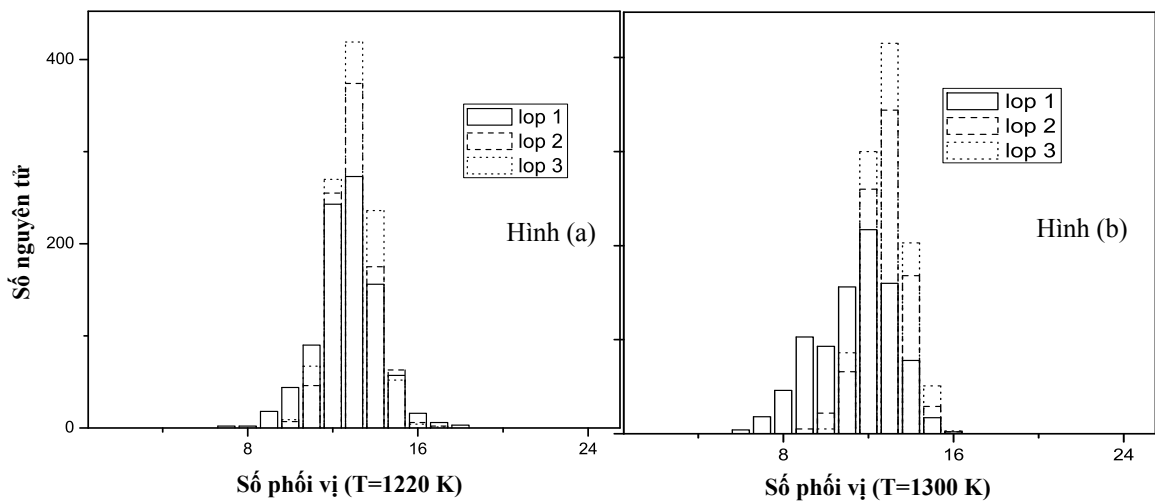


Hình 5: So sánh lớp ngoài cùng tại 1220K (đường in đậm) và tại 1300K

Hình 5 cho thấy sự khác biệt rõ rệt về cấu trúc của lớp ngoài cùng tại nhiệt độ 1220 K và tại nhiệt độ 1300 K. Hàm $g(r)$ của lớp ngoài cùng tại 1220 K (đường in đậm) có biên độ dao động cao hơn và cấu trúc tắt dần chậm hơn, chứng tỏ các hạt trong lớp ngoài cùng tại 1220 K có cấu trúc xếp chặt hơn, và có mật độ cao hơn. Ngoài ra, chúng tôi cũng đã vẽ hàm $g(r)$ của các lớp khác nhau tương ứng tại 1220 K và tại 1300 K từng đôi một, nhìn chung chúng không có sự khác biệt đáng kể.

3.3 Phân bố số phối vị

Ở Hình 6, chúng tôi trình bày phân bố số phối vị trong mặt cầu phối vị thứ nhất, của ba lớp ngoài cùng tại nhiệt độ 1220 K và tại nhiệt độ 1300 K (chúng tôi chỉ chọn ba lớp ngoài cùng để khảo sát số phối vị, vì theo Hình 4, các lớp bên trong tại hai nhiệt độ này gần như trùng nhau hoàn toàn). Để tính được các giá trị này, chúng tôi đếm số nguyên tử trong một quả cầu có tâm nằm tại một nguyên tử, và có bán kính là cực tiểu đầu tiên trong hàm phân bố xuyên tâm $g(r)$. Bán kính này có giá trị 3.368 Å.



Hình 6: Phân bố số phối vị của ba lớp ngoài cùng tại nhiệt độ 1220 K (hình a) và 1300 K (hình b)

Hình 6 cho thấy khi nhiệt độ trong mẫu hạ xuống thì có sự co cụm lại của sự phân bố số phối vị trong các lớp, có nghĩa rằng mức độ trật tự trong hệ đã tăng khi nhiệt độ của hệ giảm. Tuy nhiên, lớp ngoài cùng có sự co cụm phân bố số phối vị rõ rệt nhất khi nhiệt độ của mẫu giảm. Ở cả hai nhiệt độ, số phối vị 12 và 13 chiếm đa số tại cả ba lớp ngoài cùng của mẫu. Nếu ở nhiệt độ 1300 K, sự phân bố số phối vị trong lớp 1 mang tính dần trải, với số lượng có số phối vị 12 chiếm đa số, thì ở nhiệt độ 1220 K, số lượng các hạt trong mẫu có số phối vị 13 lại chiếm đa số. Số phối vị 12 ứng với cấu trúc icosahedral chuẩn và số phối vị 13 ứng với cấu trúc ICO khuyết tật. Đây là hai cấu trúc trật tự gần đặc trưng của Nickel lỏng, cấu trúc đối xứng bậc 5 (Brent. G. Walker *et al.*, 2007). Ngoài ra, số phối vị 12 cũng đặc trưng cho cấu trúc tinh thể FCC (Face-centered cubic, cấu trúc lập phương tâm mặt) và HCP (hexagonal close packed, cấu trúc xếp chặt 6 cạnh). Do đó, có thể tổng quát rằng tại nhiệt độ xuất hiện cấu trúc lớp của một chất lỏng siêu lạnh thì lớp ngoài cùng của mẫu có sự thay đổi rõ rệt và đáng kể về cấu trúc xếp chặt. Trong đó, số nguyên tử có số phối vị 12 và 13 chiếm đa số, đặc trưng cho cấu trúc giả tinh thể trên bề mặt mẫu. Giống với dự đoán của một số nhóm nghiên cứu (S. Iarlori *et al.*, 1989. C. A. Croxton *et al.*, 1974).

So sánh Hình 6 và Hình 4, ta thấy rằng các lớp bên trong (chỉ trừ lớp ngoài cùng) có hàm phân bố xuyên tâm giống nhau, nhưng có phân bố số phối vị khác nhau. Có thể hiểu là các lớp này có phân bố xếp chặt là như nhau theo khoảng cách, nhưng số nguyên tử xếp chặt ở những khoảng cách khác nhau là khác nhau, nên số hạt ở mỗi lớp là khác nhau. Để hiểu rõ hơn vấn đề này, chúng tôi cũng đã dùng chương trình tính số phối vị để tính mật độ hạt trên mỗi lớp, kết quả thu được như sau:

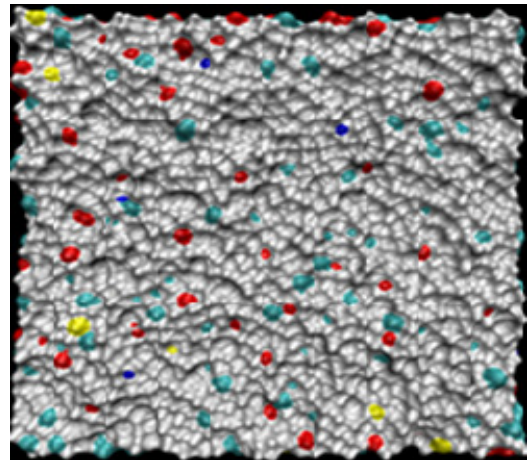
Bảng 2: Mật độ hạt của ba lớp ngoài cùng tại nhiệt độ 1220 K

Lớp	1	2	3
Số hạt	942	911	886

Như vậy, Bảng 2 một lần nữa đã chứng minh được rằng mật độ hạt của lớp ngoài cùng tại nhiệt độ 1220 K là cao nhất, và là một đặc trưng quan trọng của cấu trúc lớp trong mẫu kim loại lỏng nói chung.

3.4 Ảnh chụp 3D bề mặt của mẫu

Cuối cùng, chúng tôi giới thiệu ảnh 3D tại bề mặt của mẫu tại nhiệt độ 1220 K.



Hình 7: Ảnh 3D về lớp bề mặt của mẫu tại nhiệt độ 1220 K

Hình 7 cho thấy bề mặt mẫu gồ ghề, nhấp nhô, tương ứng với cấu trúc lớp của sự phân bố mật độ không đồng đều mà chúng tôi đã phân tích ở trên. Trên hình có một số chấm màu xuất hiện trên bề mặt mẫu, trong đó chấm tròn màu đỏ đặc trưng cho cấu trúc BCC (body centered cubic, cấu trúc lập phương tâm khối), màu lam đặc trưng cho cấu trúc FCC, màu vàng đặc trưng cho cấu trúc ICO, màu lục đặc trưng cho cấu trúc HCP và màu trắng đặc trưng cho các cấu trúc còn lại.

4 KẾT LUẬN VÀ HƯỚNG PHÁT TRIỂN CỦA ĐỀ TÀI

Bằng phương pháp mô phỏng động lực học phân tử, chúng tôi đã thu nhận được cấu trúc lớp xuất hiện tại bề mặt của kim loại lỏng siêu lạnh có bề mặt tự do tại nhiệt độ 1220K, với bề rộng của mỗi lớp có giá trị trong khoảng từ 1.89 Å đến 2.18 Å. Trong vùng cấu trúc lớp này, các nguyên tử xếp chặt nhau và tạo thành các nhóm cấu trúc, với số phối vị 12 (đặc trưng cho cấu trúc ICO chuẩn) và 13 (đặc trưng cho cấu trúc ICO khuyết tật) chiếm đa số. Nói cách khác, cấu trúc lớp trong trường hợp này là một cấu trúc giả tinh thể. Cuối cùng, chúng tôi chụp được ảnh 3D trên bề mặt mẫu, đây là một bề mặt gồ ghề, thể hiện sự phân tầng về mật độ trong vùng giao diện này.

Tuy nhiên, toàn bộ vấn đề mà chúng tôi trình bày trên đây mới chỉ là bằng chứng và một số đặc trưng quan trọng về cấu trúc lớp tại giao diện của kim loại lỏng siêu lạnh có bề mặt tự do. Do đó, hướng nghiên cứu sắp tới của chúng tôi là sẽ tìm hiểu về nguyên nhân và cơ chế của hiện tượng vật lý này.

LỜI CẢM ƠN

Chúng tôi xin gửi lời cảm ơn chân thành đến Phòng thí nghiệm Vật lý tính toán, Khoa Khoa học Ứng dụng, Đại học Bách Khoa TP. Hồ Chí Minh, Đại học Quốc gia TP. Hồ Chí Minh đã giúp chúng tôi trong suốt quá trình chạy các chương trình và phân tích số liệu. Chúng tôi cũng xin gửi lời cảm ơn chân thành đến Bộ môn Vật lý, Khoa Khoa học Tự nhiên, Trường Đại học Cần Thơ và Trường THCS&THPT Hòa Bình, Bình Minh, Vĩnh Long đã giúp chúng tôi hoàn thành đề tài nghiên cứu này.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

1. B. G. Walker *et al.*, 2007. In – plane structure and ordering at liquid sodium surface and interfaces from ab initio molecular dynamics. *J. Chem. Phys.* 127, 134703.
2. C. A. Croxton *et al.*, 1974. Publishing models and article dates explained. Cambridge Univ. Press. Cambridge, England.
3. C. S. Garder and C. Radin, 1979. The infinite volume ground state of the Lennard – Jones potential. *J. Stat. Phys.* 20, 197, 719 – 724.
4. D. Chekmarev *et al.*, 1998. Structure of the liquid – vapor interface of a metal from a simple model potential: corresponding states of the alkali metals. *J. Chem. Phys.* 109, 768.
5. E. Chacon *et al.*, 2001. Layering at free liquid surfaces. *Phys. Rev. Lett.* 87, 166101.
6. F. J. Cherne *et al.*, 2001. Properties of liquid Nickel: A critical comparison of EAM and MEAM calculations. *Phys. Rev. B* 65, 024209.
7. F. P. Buff *et al.*, 1965. Interfacial density profile for fluids in the critical region. *Phys. Rev. Lett.* 15, 621.
8. H. Tostmann *et al.*, 1999. Surface structure of liquid metals and the effect of capillary waves: X – ray studies on liquid indium. *Phys. Rev. B* 59, 783.
9. J. G. Harris *et al.*, 1987. Self – consistent Monte Carlo simulations of the electron and ion distributions of inhomogeneous liquid alkali metals. *J. Chem. Phys.* 87, 3069.
10. LŨ Yongjun *et al.*, 2006. A molecular dynamics study on surface properties of supercooled water, *Science in China Series G: Physics, Mechanics & Astronomy*. Vol.49 No. 5 616 – 625.
11. M. J. Regan *et al.*, 1995. Surface layering in liquid Gallium: An X – ray reflectivity study, *Phys. Rev. Lett.* 75, 2498.
12. M. S. Daw *et al.*, 1983. Semiempirical, quantum mechanical calculation of hydrogen embrittlement in metals. *Phys. Rev. Lett.* 50, 1285.
13. M. S. Daw *et al.*, 1986. Embedded – atom method: Derivation and application to impurities, surfaces and other defects in metals, *Phys. Rev. B* 29, 6443 – 6453 (1984)
14. M. Zhao *et al.*, 1997. Structure of liquid Ga and the liquid – vapor interface of Ga. *Phys. Rev. E* 56, 7033.
15. M. Zhao *et al.*, 1998. Comparison of the structures of the liquid – vapor interfaces of Al, Ga, In and Tl. *J. Chem. Phys.* 109, 1959.
16. S. Iarlori *et al.*, 1989. Structure and correlations of a liquid metal surface: Gold. *Surface Science* 211/212, 55 – 60.
17. S. M. Foiles *et al.*, 1986. Embedded – atom – method functions for the fcc metals Cu, Ag, Au, Ni, Pd, Pt, and their alloys. *Phys. Rev. B* 33, 7983.
18. O.G. Shpyrko *et al.*, 2003. X – ray study of the liquid potassium surface: structure and capillary wave excitations. *Phys. Rev. B* 67, 115405.
19. O.G. Shpyrko *et al.*, 2004. Anomalous layering at the liquid Sn surface. *Phys. Rev. B* 70, 224206.
20. O. M. Magnussen *et al.*, 1995. X – ray reflectivity measurements of surface layering in liquid mercury. *Phys. Rev. Lett.* 74, 4444.
21. Tartaglino *et al.*, 2005. Melting and nonmelting of solid surfaces and nanosystems. *Phys. Rep.* 411, 291.
22. Võ Văn Hoàng, 2004. Mô phỏng trong Vật lý, NXB Đại học quốc gia TP Hồ Chí Minh.
23. Zykova-Timan T *et al.*, 2005. Why are Alkali Halide surfaces not wetted by their own melt?. *Phys. Rev. Lett.* 94, 176105.