

NGHIÊN CỨU BIẾN DẠNG ĐÀN HỒI CỦA HỢP KIM THAY THỂ AB VỚI CẤU TRÚC LẬP PHƯƠNG TÂM DIỆN Ở ÁP SUẤT KHÔNG

Nguyễn Quang Học¹, Hoàng Văn Tích¹, Nguyễn Thị Hòa² và Nguyễn Đức Hiền³

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

²*Phòng Khảo thí và Đảm bảo chất lượng, Trường Đại học Giao thông vận tải, Hà Nội*

³*Trường Trung học phổ thông Mạc Đĩnh Chi, Chu Pah, Gia Lai*

Tóm tắt. Bài báo nghiên cứu sự biến dạng đàn hồi của hợp kim thay thế AB với cấu trúc lập phương tâm diện ở áp suất không. Kết quả nghiên cứu đã rút ra được các biểu thức giải tích của năng lượng tự do, khoảng cách lân cận gần nhất trung bình giữa hai nguyên tử, các môđun đàn hồi như môđun Young, môđun nén khối, môđun trượt và các hằng số đàn hồi đối với hợp kim thay thế AB với cấu trúc LPTD ở áp suất không phụ thuộc vào nhiệt độ và nồng độ nguyên tử thay thế bằng phương pháp thống kê mômen. Trong trường hợp khi nồng độ nguyên tử thay thế bằng không, ta thu được lý thuyết đàn hồi của kim loại chính A.

Từ khóa: Hợp kim thay thế, môđun Young, môđun nén khối, môđun trượt, hằng số đàn hồi.

1. Mở đầu

Hợp kim nói chung và hợp kim thay thế nói riêng là những vật liệu phổ biến trong khoa học và công nghệ vật liệu. Việc nghiên cứu biến dạng của vật liệu nói chung, kim loại và hợp kim nói riêng thu hút sự quan tâm của nhiều nhà nghiên cứu [1-5].

Có nhiều phương pháp lý thuyết khác nhau trong nghiên cứu biến dạng đàn hồi của vật liệu như phương pháp động lực học phân tử, phương pháp mô phỏng động lực học phân tử, phương pháp phân tử hữu hạn, phương pháp *ab-initio*, phương pháp mômen thống kê,... Mỗi phương pháp đều có những ưu và nhược điểm riêng, việc sử dụng phương pháp nào tốt hơn chỉ có thể được đánh giá tùy vào từng bài toán cụ thể. Phương pháp thống kê mômen (TKMM) 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 [6].

Trong bài báo này, bằng phương pháp TKMM chúng tôi rút ra các biểu thức giải tích của năng lượng tự do, khoảng cách lân cận gần nhất trung bình giữa hai nguyên tử, các môđun đàn hồi như môđun Young, môđun nén khối, môđun trượt và các hằng số đàn hồi đối với hợp kim thay thế AB với cấu trúc lập phương tâm diện (LPTD) ở áp suất không phụ thuộc vào nhiệt độ và nồng độ nguyên tử thay thế.

2. Nội dung nghiên cứu

2.1. Năng lượng tự do của hợp kim thay thế AB với cấu trúc LPTD

Xét mô hình hợp kim thay thế AB với cấu trúc LPTD. Đối với hợp kim trật tự xuất hiện hai loại nút. Nút loại a là nút “quen” với nguyên tử A và nút loại b là nút “quen” với nguyên tử B. Trong tập hợp N nguyên tử, có N_A nguyên tử loại A và N_B nguyên tử loại B. Nồng độ của các thành phần A và B trong hợp kim lần lượt là c_A và c_B được xác định bởi:

Ngày nhận bài: 24/2/2016. Ngày nhận đăng: 25/3/2016.

Tác giả liên lạc: Nguyễn Quang Học, địa chỉ e-mail: hocnq@hnue.edu.vn

$$c_A = \frac{N_A}{N}, c_B = \frac{N_B}{N}. \quad (1)$$

Năng lượng tự do trong vật lí thống kê được định nghĩa bởi công thức

$$\Psi_{AB} = -k_B T \ln Z_{AB}, \quad (2)$$

trong đó Z_{AB} là tổng thống kê của hợp kim AB và có dạng

$$Z_{AB} = \sum_n \exp\left(-\frac{E_n}{k_B T}\right), \quad (3)$$

trong đó E_n là năng lượng của hệ tương ứng với số lượng tử n . Ta biểu diễn E_n qua năng lượng cấu hình E_i và năng lượng dao động E_m

$$E_n = E_i + E_m, \quad (4)$$

trong đó một cách gần đúng có thể coi E_m không phụ thuộc vào cấu hình.

Thay (4) vào (3) và chuyển tổng theo n thành tổng theo i và m , ta có

$$Z_{AB} = \sum_{i,m} \exp\left(-\frac{E_i + E_m}{k_B T}\right) = \sum_m \exp\left(-\frac{E_m}{k_B T}\right) \sum_i \exp\left(-\frac{E_i}{k_B T}\right). \quad (5)$$

Trong gần đúng bỏ qua hiệu ứng tương quan, ta nhận được năng lượng cấu hình E_i như nhau đối với tất cả các cấu hình và có giá trị bằng E . Thay $E_i = E$ vào (5) và đưa $\exp\left(-\frac{E_i}{k_B T}\right)$ ra khỏi tổng theo i , tổng còn lại cho W các hoán vị khác nhau của nguyên tử theo các nút mạng. Kết quả là

$$Z_{AB} = \sum_m \exp\left(-\frac{E + E_m}{k_B T}\right) W = Z_1 W, Z_1 = \sum_m \exp\left(-\frac{E'_m}{k_B T}\right), E'_m = E_m + E. \quad (6)$$

Ở đây E'_m là năng lượng của hợp kim. Nó được xác định bởi số trạng thái lượng tử m của hệ và năng lượng cấu hình trung bình E .

Năng lượng cấu hình trung bình E của hợp kim được xác định theo năng lượng cấu hình E_α^β của các hệ hiệu dụng (α, β) dưới dạng

$$E = \sum_{\alpha, \beta} v_\beta P_\alpha^\beta E_\alpha^\beta, \quad (7)$$

trong đó v_β là nồng độ nút loại β ($\beta = a, b$) và P_α^β là xác suất để nguyên tử α ($\alpha = A, B$) nằm trên nút β . Nếu xem E_m không phụ thuộc vào cấu hình và các hệ hiệu dụng,

$$E'_m = \sum_{\alpha, \beta} v_\alpha P_\alpha^\beta (E_m + E_\alpha^\beta) = \sum_{\alpha, \beta} v_\alpha P_\alpha^\beta E'_{m\alpha}, E'_{m\alpha} = E_m + E_\alpha^\beta. \quad (8)$$

Ở đây $E'_{m\alpha}$ là năng lượng của hệ hiệu dụng (α, β) . Nó được xác định bởi số trạng thái lượng tử m của hệ và năng lượng cấu hình E_α^β . Do đó,

$$Z_1 = \sum_m \exp\left(-\frac{\sum_{\alpha, \beta} v_\beta P_\alpha^\beta E'_{m\alpha}}{k_B T}\right), \Psi_{AB} = \sum_{\alpha, \beta} v_\beta P_\alpha^\beta \Psi_\alpha^\beta - k_B T \ln W. \quad (9)$$

Lưu ý rằng có thể tính số hạng thứ hai trong (9) theo entropi cấu hình S_c của hợp kim

Nghiên cứu biến dạng đàn hồi của hợp kim thay thế AB với cấu trúc LPTD ở áp suất không

$$k_B T \ln W = TS_c, S_c = -k_B N \sum_{\alpha, \beta} v_\beta P_\alpha^\beta \ln P_\alpha^\beta. \quad (10)$$

Khi đó, năng lượng tự do của hợp kim có dạng

$$\Psi_{AB} = \sum_{\alpha, \beta} v_\beta P_\alpha^\beta \Psi_\alpha^\beta - TS_c. \quad (11)$$

Nồng độ nút v_β và xác suất P_α^β thỏa mãn các hệ thức

$$P_A^a + P_B^a = P_A^b + P_B^b = 1, v_a P_A^a + v_b P_A^b = c_A = \frac{N_A}{N}, v_a P_B^a + v_b P_B^b = c_B = \frac{N_B}{N}, N = N_A + N_B. \quad (12)$$

P_α^β được xác định thông qua thông số trật tự xa η trong hợp kim bởi

$$P_\alpha^\beta = \eta(1 - v_\beta) + c_\alpha. \quad (13)$$

Ψ_α^β là năng lượng tự do của hệ hiệu dụng (α, β) và có dạng

$$\Psi_\alpha^\beta = 3N \left\{ \frac{u_{0\alpha}^\beta}{6} + \theta \left[x_\alpha^\beta + \ln(1 - e^{-2x_\alpha^\beta}) \right] \right\}, u_{0\alpha}^\beta = \sum_i \varphi_{\alpha i}^\beta(|\vec{a}_i|), x_\alpha^\beta = \frac{\hbar \omega_\alpha^\beta}{2\theta},$$

$$k_\alpha^\beta = \frac{1}{2} \sum_i \left(\frac{\partial^2 \varphi_{\alpha i}^\beta}{\partial u_{i\ell}^2} \right)_{eq} = m^* (\omega_\alpha^\beta)^2 (\ell = x, y, z), m^* = c_A m_A + c_B m_B, \quad (14)$$

trong đó $u_{0\alpha}^\beta$ là tổng năng lượng tương tác giữa các nguyên tử trong hệ hiệu dụng (α, β) , m_A và m_B là các khối lượng của các nguyên tử A và B. Trong hệ hiệu dụng (α, β) , nguyên tử α được chọn nằm trên nút loại β và $\varphi_{\alpha i}^\beta$ là thế năng tương tác giữa nguyên tử thứ i với nguyên tử α , \vec{a}_i, \vec{u}_i là các vector xác định vị trí cân bằng và độ dịch chuyển khỏi vị trí cân bằng của nguyên tử thứ i . Năng lượng tự do Ψ_α^β của hệ hiệu dụng (α, β) phụ thuộc vào khoảng lân cận gần nhất giữa các nguyên tử trong hệ.

Đối với hợp kim hoàn toàn mất trật tự ($\eta = 0$),

$$P_A^a = P_A^b = c_A, P_B^a = P_B^b = c_B, \Psi_A^a = \Psi_A^b = \Psi_A^{**}, \Psi_B^a = \Psi_B^b = \Psi_B^{**}, \quad (15)$$

trong đó $\frac{\Psi_A^{**}}{N}$ là năng lượng tự do của một nguyên tử A mà xung quanh nó có $J_{1A} = \frac{n_1 P_{AB}}{c_A}$ nguyên tử

B (P_{AB} là xác suất để 2 nguyên tử A và B đứng cạnh nhau, n_1 là số nguyên tử trên quả cầu phối vị thứ nhất), $n_1 - J_{1A}$ nguyên tử A trên quả cầu phối vị thứ nhất, $J_{2A} = n_2 P_B^a = n_2 c_B$ nguyên tử B (n_2 là số nguyên tử trên quả cầu phối vị thứ hai) và $n_2 - J_{2A}$ nguyên tử A trên quả cầu phối vị thứ hai.

Tương tự $\frac{\Psi_B^{**}}{N}$ là năng lượng tự do của một nguyên tử B mà xung quanh nó có $J_{1B} = \frac{n_1 P_{AB}}{c_B}$ nguyên

tử A, $n_1 - J_{1B}$ nguyên tử B trên quả cầu phối vị thứ nhất, $J_{2B} = n_2 P_A^b = n_2 c_A$ nguyên tử A và $n_2 - J_{2B}$ nguyên tử B trên quả cầu phối vị thứ hai.

Trong hợp kim hoàn toàn mất trật tự, xác suất để 2 nguyên tử A, B đứng cạnh nhau được xác định bởi

$$P_{AB} = c_A c_B. \quad (16)$$

Khi đó, năng lượng tự do của hợp kim thay thế AB hoàn toàn mất trật tự

$$\Psi_{AB} = c_A \Psi_A^{**} + c_B \Psi_B^{**} - TS_c. \quad (17)$$

Trong gần đúng bỏ qua năng lượng trật tự của hợp kim,

$$\varphi_{AB}(r) \approx \frac{1}{2} [\varphi_{AA}(r) + \varphi_{BB}(r)]. \quad (18)$$

Khi đó, có thể xác định các biểu thức của Ψ_A^* , Ψ_B^* tương ứng với mô hình hiệu dụng trên với các thông số $u_{0\alpha}^\beta \equiv u_{0\alpha}^*$, $k_\alpha^\beta \equiv k_\alpha^*$ có dạng

$$\begin{aligned} u_{0\alpha}^* &= u_{0\alpha} \pm J_{1\alpha} (\varphi_{BB} - \varphi_{AA})_1 \pm J_{2\alpha} (\varphi_{BB} - \varphi_{AA})_2, \\ k_\alpha^* &= k_\alpha \pm \frac{J_{1\alpha}}{4} \left(\frac{\partial^2 \varphi_{BB}}{\partial u_{i1}^2} - \frac{\partial^2 \varphi_{AA}}{\partial u_{i1}^2} \right) \pm \frac{J_{21\alpha}}{4} \left(\frac{\partial^2 \varphi_{BB}}{\partial u_{i2}^2} - \frac{\partial^2 \varphi_{AA}}{\partial u_{i2}^2} \right). \end{aligned} \quad (19)$$

Ở đây, kí hiệu $(\dots)_i$ ($i = 1, 2$) cho giá trị của các biểu thức trong ngoặc tính tại khoảng cách a_i tương ứng ở quả cầu phối vị 1 hoặc 2, $J_{1\alpha}$ và $J_{2\alpha}$ có dạng

$$J_{1\alpha} = \frac{n_1 P_{AB}}{C_\alpha}, J_{2\alpha} = n_2 (1 - c_\alpha), \alpha = A, B. \quad (20)$$

Lưu ý rằng, dấu “+” trong các biểu thức trên tương ứng với trường hợp $\alpha = A$, còn dấu “-” tương ứng với $\alpha = B$. Trong trường hợp khi $c_B \ll c_A$, ta có gần đúng $u_{0A}^\beta \approx u_{0A}$, $k_A^\beta \approx k_A$. Khi đó, năng lượng tự do của hợp kim thay thế AB mất trật tự với $c_B \ll c_A$ có dạng

$$\Psi_{AB} \approx c_A \Psi_A + c_B \Psi_B - TS_c. \quad (21)$$

Trong một đơn vị thể tích, năng lượng tự do của hợp kim thay thế AB mất trật tự với $c_B \ll c_A$ có dạng

$$\Psi_{AB}^* \approx c_A \Psi_A^* + c_B \Psi_B^* - TS_c. \quad (22)$$

2.2. Khoảng cách lân cận gần nhất trung bình giữa hai nguyên tử trong hợp kim thay thế AB với cấu trúc LPTD

Khoảng lân cận gần nhất trung bình giữa 2 nguyên tử trong hợp kim thay thế AB với cấu trúc LPTD ở áp suất không và 0 K được xác định bởi công thức

$$r_{01AB} = c_A r_{01A} \frac{B_{0TA}}{B_{0T}} + c_B r_{01B} \frac{B_{0TB}}{B_{0T}}. \quad (23)$$

Ở đây, r_{01A} , r_{01B} tương ứng là các khoảng lân cận gần nhất giữa 2 nguyên tử A và giữa 2 nguyên tử B ở 0 K,

$$B_{0T\alpha} = \frac{\sqrt{2}}{3r_{01}} \frac{1}{3N} \left(\frac{\partial^2 \Psi_\alpha}{\partial r_{1\alpha}^2} \right)_{T=0}, \alpha = A, B, \quad (24)$$

$B_{0T\alpha}$ là môđun đàn hồi đẳng nhiệt của kim loại α ($\alpha = A, B$) ở áp suất không và 0 K,

$$\bar{B}_{0T} = c_A B_{0TA} + c_B B_{0TB} \quad (25)$$

là môđun đàn hồi đẳng nhiệt trung bình của hợp kim AB ở áp suất không và 0 K, r_{1A} , r_{1B} tương ứng là các khoảng lân cận gần nhất giữa 2 nguyên tử A và giữa 2 nguyên tử B ở nhiệt độ T .

Khoảng lân cận gần nhất trung bình giữa 2 nguyên tử trong hợp kim thay thế AB với cấu trúc LPTD ở áp suất không và nhiệt độ T được xác định bởi

$$r_{1AB} = c_A r_{1A} \frac{B_{TA}}{B_T} + c_B r_{1B} \frac{B_{TB}}{B_T}, \quad (26)$$

trong đó $B_{T\alpha}$ là môđun đàn hồi đẳng nhiệt của kim loại α ($\alpha = A, B$) ở áp suất không và nhiệt độ T và được xác định bởi công thức

$$B_{T\alpha} = \frac{r_{1\alpha}^2 \left(\frac{\partial^2 \Psi_\alpha}{\partial a_\alpha^2} \right)_T}{3 \left(\frac{r_{1\alpha}}{r_{01\alpha}} \right)^3}, V_\alpha = Nv_\alpha, v_\alpha = \frac{\sqrt{2}}{2} r_{1\alpha}^3, \quad (27)$$

trong đó \bar{B}_T là môđun đàn hồi đẳng nhiệt trung bình của hợp kim AB ở áp suất không và nhiệt độ T và được xác định bởi công thức

$$\bar{B}_T = C_A B_{TA} + C_B B_{TB}. \quad (28)$$

Trong các biểu thức ở trên,

$$\left(\frac{\partial^2 \Psi_\alpha}{\partial a_\alpha^2} \right)_T = \frac{1}{2} \frac{\partial^2 u_{0\alpha}}{\partial a_\alpha^2} + \frac{3\hbar\omega_\alpha}{4k_\alpha} \left[\frac{\partial^2 k_\alpha}{\partial a_\alpha^2} - \frac{1}{2k_\alpha} \left(\frac{\partial k_\alpha}{\partial a_\alpha} \right)^2 \right], \alpha = A, B. \quad (29)$$

2.3. Biến dạng đàn hồi của hợp kim thay thế AB với cấu trúc LPTD

Đạo hàm bậc hai hai vế của (22) theo độ biến dạng ε , ta có

$$\frac{\partial^2 \Psi_{AB}^*}{\partial \varepsilon^2} = c_A \frac{\partial^2 \Psi_A^*}{\partial \varepsilon^2} + c_B \frac{\partial^2 \Psi_B^*}{\partial \varepsilon^2}. \quad (30)$$

Từ đó rút ra môđun Young của hợp kim thay thế AB

$$E_{AB} = c_A E_A + c_B E_B, \quad (31)$$

trong đó E_A, E_B là các môđun Young của các kim loại A, B.

Môđun nén khối K_{AB} và môđun trượt G_{AB} của hợp kim thay thế AB được xác định theo môđun Young E_{AB} bởi các công thức

$$K_{AB} = \frac{E_{AB}}{3(1-2\nu_{AB})}, \quad (32)$$

$$G_{AB} = \frac{E_{AB}}{2(1+\nu_{AB})}. \quad (33)$$

Các hằng số đàn hồi của hợp kim thay thế AB được xác định bởi các công thức

$$C_{11AB} = \frac{E_{AB}(1-\nu_{AB})}{(1+\nu_{AB})(1-2\nu_{AB})}, \quad (34)$$

$$C_{12AB} = \frac{E_{AB}\nu_{AB}}{(1+\nu_{AB})(1-2\nu_{AB})}, \quad (35)$$

$$C_{44AB} = \frac{E_{AB}}{2(1+\nu_{AB})}. \quad (36)$$

Trong các công thức trên, hệ số Poisson ν_{AB} của các hợp kim thay thế AB được xác định bởi công thức

$$\nu_{AB} = c_A \nu_A + c_B \nu_B, \quad (37)$$

trong đó ν_A, ν_B là hệ số Poisson của các kim loại A, B.

Trong trường hợp nồng độ nguyên tử thay thế B bằng không, từ lý thuyết đàn hồi đối với hợp kim thay thế AB ta thu được lý thuyết đàn hồi của kim loại chính A.

3. Kết luận

Bằng phương pháp thống kê mômen, chúng tôi rút ra các biểu thức giải tích của năng lượng tự do, khoảng cách lân cận gần nhất trung bình giữa hai nguyên tử, các môđun đàn hồi như môđun Young, môđun nén khối, môđun trượt và các hằng số đàn hồi đối với hợp kim thay thế AB với cấu trúc LPTD ở áp suất không phụ thuộc vào nhiệt độ và nồng độ nguyên tử thay thế. Trong trường hợp nồng độ nguyên tử thay thế B bằng không, từ lý thuyết đàn hồi đối với hợp kim thay thế AB ta thu được lý thuyết đàn hồi của kim loại chính A.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

- [1] S. Carlsson, P. L. Larsson, 2001. *On the determination of residual stress and strain fields by sharp indentation testing*. Part II: Experimental investigation, Acta mater, 49, pp. 2193-2203.
- [2] M. J. Graf, C. W. Greeff, J. C.Boenger, 2003. *Shock compression of condensed matter-2003, Proc. of conference of American Physical society topical group on shock compression of condensed matter*. Portland, Oregon, July 20-25, 2003, p. 65.
- [3] M. E. Kassner, M. T. Pérez-Prado, M. Long, K. S. Vecchio, 2002. *Dislocation microstructure and internal-stress measurements by convergent-beam electron diffraction on creep-deformed Cu and Al*. Metallurgical and Materials Transactions A33(2), pp. 311-317.
- [4] E. M. Taleff, C. K. Syn, D. R. Lesuer, 2000. *Deformation, processing and properties of structural materials*. Proc. of the honorary symposium for Prof. Oleg D.Sherby, Nashville, Tennessee, March, pp. 14-16.
- [5] S. L. Chaplot, R. Mittal, N.Choudhry, 2010. *Thermodynamic properties of solids: experiment and modeling*. Wiley-VCH Verlag GmBh & Co. KgaA.
- [6] 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.

ABSTRACT

Elastic deformation of a binary AB substitutional alloy with FCC structure at zero pressure

The analytic expressions of free energy, the mean nearest neighbor distance between two atoms, elastic moduli such as the Young modulus, the bulk modulus and the rigidity modulus, and the elastic constants for a binary AB substitutional alloy with an FCC structure are derived using the statistical moment method. When the concentration of B substitution atoms is equal to zero, we obtain the elastic theory of A main metal.

Keywords. Substitution alloy, Young modulus, bulk modulus, rigidity modulus, elastic constants.