

CHUYỂN PHA CẤU TRÚC TRONG VẬT LIỆU ÔXÍT

STRUCTURAL TRANSITION IN OXIDE SYSTEMS

Tác giả: [Nguyễn Văn Yên*](#), [Bùi Danh Hào](#), [Doãn Thị Thanh Bình](#), [Lê Thế Vinh](#)

Tóm tắt bằng tiếng Việt:

Bài báo trình bày kết quả nghiên cứu vi cấu trúc của Al_2O_3 và SiO_2 bằng phương pháp động lực học phân tử với thế tương tác Born-Mayer, vi cấu trúc của hệ được khảo sát thông qua hàm phân bố xuyên tâm, số phối trí và độ dài liên kết. Công trình này khảo sát sự thay đổi của vi cấu trúc dưới tác động của áp suất của hệ hai nguyên (Al_2O_3 , SiO_2) so với hệ ba nguyên (Al_2O_3). $2(\text{SiO}_2)$. Với mục đích chứng minh bản chất tự nhiên và sự tồn tại các đơn vị cấu trúc cơ bản TO_4 , TO_5 , TO_6 (T đại diện cho Al, Si). Kết quả nghiên cứu cho thấy đối với hệ SiO_2 khi áp suất tăng số phối trí các cặp cũng tăng lên và có xu hướng chuyển pha cấu trúc từ SiO_4 lên SiO_5 . Đối với hệ Al_2O_3 ở áp suất thấp chủ yếu bao quanh O là 4 nguyên tử Al, Khi áp suất tăng lên tỷ lệ này giảm. Sự phụ thuộc của chiết suất vào mật độ của các hệ vật liệu cũng được tính toán và thảo luận trong bài báo này.

Từ khóa: Vật liệu ôxít; Thế tương tác Born-Mayer; Vi cấu trúc; Số phối trí; Chiết suất.

Tóm tắt bằng tiếng Anh:

This paper presents the research results of the material microstructures of Al_2O_3 , SiO_2 , using the method of molecular dynamics with the Born-Mayer interaction. Local structures of Al_2O_3 , SiO_2 and A_2S under pressure are studied and analyzed through the radial distribution function, coordination number and distance bond length. The paper focuses on doing the research to clarify the change of the material microstructures of Al_2O_3 , SiO_2 , in comparison with $\text{Al}_2\text{O}_3.2(\text{SiO}_2)$ (denoted as A_2S), with the purpose of demonstrating the nature and the existence of basic structure units: TO_4 , TO_5 , TO_6 (T is Si or Al). The research results showed that for the SiO_2 systems, when the pressure increases, coordination number also increases, and microstructure change from SiO_4 to SiO_5 . For Al_2O_3 systems, at low pressure mainly surrounded O are 4 Al atoms. When the pressure increases, this rate reduces; meanwhile, 5 Al atoms surrounding O increase very sharply. Besides, the dependence of refractive index on density will also be calculated and discussed in this paper.

Key words: Oxide materials; Born-Mayer potential; Material microstructures; Coordination number; refractive index.