

THÔNG TIN KẾT QUẢ NGHIÊN CỨU ĐỀ TÀI KHOA HỌC VÀ CÔNG NGHỆ CẤP ĐẠI HỌC

1. Thông tin chung:

Tên đề tài: Mô phỏng cấu trúc dị hướng và tính chất cơ-điện trong ôxit SiO_2 pha các tạp alkali

Mã số: ĐH2023-TN04-04

Chủ nhiệm đề tài: TS. Giáp Thị Thùy Trang

Địa chỉ cơ quan: Khoa Vật lí, Trường Đại học Sư phạm Thái Nguyên

Điện thoại cơ quan: 0280 3856 893; Điện thoại di động: 0337763699

E-mai: tranggtt@tnue.edu.vn

Cơ quan chủ trì đề tài: Trường Đại học Sư phạm - Đại học Thái Nguyên

2. Mục tiêu

- Phân tích được cấu trúc và sự biến đổi cấu trúc của của ôxit SiO_2 pha các tạp alkali thông qua các kỹ thuật phân tích cấu trúc sử dụng các đa diện hình học, hàm phân bố xuyên tâm, phân bố số phối trí, năng lượng, thống kê các đơn vị cấu trúc và trực quan hóa 3 chiều;

- Nghiên cứu được tính chất khuếch tán, dẫn điện và tính chất cơ của ôxit SiO_2 pha các tạp alkali theo áp suất và nhiệt độ;

3. Tính mới và sáng tạo

Trong vật liệu ôxit SiO_2 pha tạp alkali (sodium) Thể tích trung bình của mỗi khối đa diện hình học tăng dần theo thứ tự: khối đa diện Si \rightarrow khối đa diện BO \rightarrow khối đa diện NBF. Thể tích của đa diện Si chỉ chiếm khoảng 12%, còn các đa diện BO và NBF chiếm nhiều hơn, khoảng 88% thể tích của hộp mô phỏng.

Các đa diện Si không chứa bất kỳ nguyên tử Na nào, các đa diện O có thể chứa hoặc không chứa Na. Tỷ lệ n_{BO}/n_O , n_{NBF}/n_O tăng khi nhiệt độ tăng. Ngược lại, n_{BO}/n_O và n_{NBF}/n_O giảm đáng kể khi nhiệt độ tăng. Khi nồng độ pha tạp thay đổi thì các tỷ lệ này thay đổi không đáng kể.

Sự khuếch tán của các nguyên tử Na được thực hiện bằng hai cách: (i) chuyển động nhảy một mình trong cả hai loại đa diện hình học BO và NBF

nhưng chủ yếu từ NBF sang NBF khác; (ii) Chuyển động tập thể trong các đa diện hình học NBF. Thời gian trung bình giữa hai lần nguyên tử Na nhảy liên tiếp giảm khi nhiệt độ tăng. Con đường khuếch tán của nguyên tử Na bao gồm các khối đa diện hình học NBF cạnh nhau.

4. Kết quả nghiên cứu

Chúng tôi đã cho thấy ảnh hưởng của nhiệt độ và nồng độ đến cấu trúc không đồng nhất của vật liệu ôxit SiO_2 pha các tạp alkali, đây chính là nguyên nhân của động học không đồng nhất trong các hệ ôxit nhiều thành phần. Đồng thời, chúng tôi đã quan sát thấy, Thể tích của đa diện Si chỉ chiếm khoảng 1/10, còn các đa diện BO và NBF chiếm nhiều hơn thể tích của hộp mô phỏng. Các đa diện Si không chứa bất kỳ nguyên tử Na nào, các đa diện O có thể chứa hoặc không chứa Na. Tỷ lệ đa diện BO tăng khi nhiệt độ tăng. Ngược lại, tỷ lệ đa diện NBF giảm đáng kể khi nhiệt độ tăng. Khi nồng độ pha tạp thay đổi thì các tỷ lệ này thay đổi không đáng kể. Thời gian trung bình giữa hai lần nguyên tử Na nhảy liên tiếp giảm khi nhiệt độ tăng. Con đường khuếch tán của nguyên tử Na bao gồm các khối đa diện hình học NBF cạnh nhau.

5. Sản phẩm:

5.1. Sản phẩm khoa học

Công bố 03 bài báo khoa học: 01 bài ISI và 01 bài Quốc tế thường và 01 bài báo Hội nghị Quốc tế, cụ thể:

1. Kien, P. H., & Trang, G. T. T. (2024). *The Characteristics of Structural Properties and Diffusion Pathway of Alkali in Sodium Trisilicate: Nanoarchitectonics and Molecular Dynamic Simulation*. International Journal of Molecular Sciences, 25(11), 5628.

2. Trang, G. T. T., Kien, P. H., Tuyet, X. T., Nhu, T. T. Q., & Quang, P. D. (2024). *Study on Micro Structural Properties of Alkali-Doped SiO_2 Melt Using Molecular Dynamics Simulation*. Asian Journal of Applied Chemistry Research, 15(4), 71-78.

3. P. H. Kien, V. T. V. Anh, T. T. Q. Nhu, N. X. Vinh, D. T. Huong, P. D. Quang and G. T. T. Trang (2023). *The study of structural properties and the degree of polymerization in Mg_2SiO_4 liquid under compression*. The Proceedings of The 4th International Workshop on Advanced Materials and Devices – IWAMD 2023, Thai Nguyen, Vietnam

5.2. Sản phẩm đào tạo

Hướng dẫn thành công 01 luận văn thạc sĩ và 01 khóa luận tốt nghiệp sinh viên, cụ thể:

1. Thonchit Monesaykham, *Sử dụng kỹ thuật phân tích các đa diện hình học để nghiên cứu ảnh hưởng của nhiệt độ đến cấu trúc và cơ chế khuếch tán trong sodium silicate*, Luận văn thạc sĩ 2023 Đại học Sư phạm Thái Nguyên. Điểm 9,3.

2. Ngô Thị Thu Giang, *Khảo sát cấu trúc và sự phân bố của nguyên tử Na trong không gian của vật liệu Na_2SiO_3* , Khóa luận tốt nghiệp 2024, Đại học Sư phạm Thái Nguyên. Điểm 9,4.

6. Phương thức chuyển giao, địa chỉ ứng dụng, tác động và lợi ích mang lại của kết quả nghiên cứu:

- Phương thức chuyển giao: Trực tiếp hoặc qua thư điện tử
- Địa chỉ ứng dụng: Trường Đại học Sư phạm – Đại học Thái Nguyên
- Tác động và lợi ích mang lại của kết quả nghiên cứu:
- Đối với lĩnh vực giáo dục và đào tạo

Kết quả đề tài cung cấp những thông tin và hiểu biết cần thiết về vi cấu trúc, tính chất nhiệt động trong vật liệu ôxít SiO_2 pha tạp Na_2O và không pha tạp.

- Đối với lĩnh vực khoa học và công nghệ có liên quan:

+ Mô phỏng có thể cung cấp các số liệu và thông tin dự đoán trước về cấu trúc và các tính chất của vật liệu ôxít SiO_2 pha tạp Na_2O cho nhà nghiên cứu thực nghiệm và lý thuyết.

+ Kết quả mô phỏng cung cấp số liệu cần thiết về cấu trúc và các cơ chế vật lý xảy ra trong vật liệu ôxít SiO_2 pha tạp Na_2O để các nhà nghiên cứu ứng dụng và công nghệ đối chiếu.

- Đối với tổ chức chủ trì và các cơ sở ứng dụng kết quả nghiên cứu:

Kết quả của đề tài góp phần phát triển khoa học và công nghệ của Nhà trường. Đề tài cũng là một tài liệu tham khảo bổ ích đối với học viên cao học, sinh viên nghiên cứu khoa học và góp phần đáng kể trong định hướng đổi mới giáo dục trong lĩnh vực mô phỏng.

SUMMARY OF STUDY RESULTS OF SCIENCE AND TECHNOLOGY

1. General information

Project title: Simulation of anisotropic structure and mechanical-electrical properties in SiO₂ oxide doped with alkali impurities

Code number: DH2023-TN04-04

Coordinator: Dr. Giap Thi Thuy Trang

Tel.: 0280 3856 893; Mobi: 0337763699

E-mai: tranggt@tnue.edu.vn

Implementing Institution: Thainguyn University of Education

2. Objective

- Analyze the structure and structural transformation of SiO₂ oxide doped with alkali impurities through structural analysis techniques using geometric polyhedrons, radial distribution functions, coordination number distribution, energy, statistics of structural units and 3D visualization.

- Study the diffusion, electrical conductivity and mechanical properties of SiO₂ oxide doped with alkali impurities according to pressure and temperature.

3. Creativeness and innovativeness:

The geometric polyhedra increase in the order: Si→ BO→ NBF polyhedra. The volume of Si polyhedra only accounts for about 12%, while BO and NBF polyhedra occupy more, about 88% of the simulation box volume.

Si polyhedra do not contain any Na atoms, O polyhedra may or may not contain Na. The ratios $n_{BO1/nO}$, $n_{NBF0/nO}$ increase with increasing temperature. In contrast, $n_{BO0/nO}$ and $n_{NBF2/nO}$ decrease significantly with increasing temperature. When the doping concentration changes, these ratios do not change significantly.

The diffusion of Na atoms is carried out in two ways: (i) solitary hopping motion in both BO and NBF polyhedra but mainly from NBF to other NBF; (ii) Collective motion in NBF polyhedra. The average time between two consecutive Na atom jumps decreases with increasing

temperature. The diffusion path of Na atoms consists of adjacent NBF geometric polyhedra.

4. Research results:

We have shown the influence of temperature and concentration on the heterogeneous structure of SiO₂ oxide materials doped with alkali impurities, which is the cause of heterogeneous kinetics in multicomponent oxide systems. At the same time, we have observed that, The volume of Si polyhedra is only about 1/10, while BO and NBF polyhedra occupy more than the volume of the simulation box. Si polyhedra do not contain any Na atoms, O polyhedra may or may not contain Na. The ratio of BO polyhedra increases with increasing temperature. In contrast, the ratio of NBF polyhedra decreases significantly with increasing temperature. When the doping concentration changes, these ratios do not change significantly. The average time between two consecutive Na atom jumps decreases with increasing temperature. The diffusion path of Na atoms consists of adjacent NBF polyhedra.

5. Products:

5.1. Science products

1. Kien, P. H., & Trang, G. T. T. (2024). *The Characteristics of Structural Properties and Diffusion Pathway of Alkali in Sodium Trisilicate: Nanoarchitectonics and Molecular Dynamic Simulation*. International Journal of Molecular Sciences, 25(11), 5628.

2. Trang, G. T. T., Kien, P. H., Tuyet, X. T., Nhu, T. T. Q., & Quang, P. D. (2024). *Study on Micro Structural Properties of Alkali-Doped SiO₂ Melt Using Molecular Dynamics Simulation*. Asian Journal of Applied Chemistry Research, 15(4), 71-78.

3. P. H. Kien, V. T. V. Anh, T. T. Q. Nhu, N. X. Vinh, D. T. Huong, P. D. Quang and G. T. T. Trang (2023). *The study of structural properties and the degree of polymerization in Mg₂SiO₄ liquid under compression*. The Proceedings of The 4th International Workshop on Advanced Materials and Devices – IWAMD 2023, Thai Nguyen, Vietnam

5.2. Training results

We have trained 01 master and 01 student, specifically:

1. Thonchit Monesaykham, Using the technique of analyzing geometric polyhedra to study the effect of temperature on the structure and diffusion

mechanism in sodium silicate, Thesis 2023, Thai Nguyen University of Education. Point 9.3.

2. Ngo Thi Thu Giang, Surveying the structure and distribution of Na atoms in space of Na_2SiO_3 material, Graduation thesis 2024, Thai Nguyen University of Education. Score 9.4.

6. Transfer alternatives, application institutions, impacts and benefits of research results:

- Transfer alternatives: Directly or via email

- Application address: University of Education - Thai Nguyen University

- Impacts and benefits of research results:

For education and training

- The results of the research provide necessary information and understanding about microstructure, thermodynamic properties in Na_2O -doped and undoped liquid SiO_2 oxide materials.

- Report of the topic is a reference for graduate students in physics.

For related fields of science and technology

- Simulation can provide predictable data and information about the structure and properties of Na_2O -doped liquid SiO_2 oxide materials to experimental and theoretical researchers.

- Simulation results provide necessary data on the structure and physical mechanisms that occur in Na_2O -doped liquid SiO_2 oxide materials for researchers to apply and contrast technology.

For socio-economic development

- The results of the project significantly contribute to the passion for participation in research and scientific discovery of graduate students and students.

For host organizations and research application establishments

- The results of the project contribute to the development of science and technology of the University. The topic is also a useful reference for graduate students, scientific research students and significantly contributes in the direction of educational innovation in the field of simulation.