

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

1. Thông tin chung:

Tên đề tài: Nghiên cứu tương quan giữa cấu trúc và động học riêng phần trong các hệ ôxít MgO và Mg_2SiO_4 bằng phương pháp mô phỏng

Mã số: **DH2022-TN04-02**

Chủ nhiệm đề tài: PGS. TS. Phạm Hữu Kiên

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: 0973 472 364

E-mai: kienph@tnue.edu.vn

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

2. Mục tiêu

- Phân tích cấu trúc riêng phần của hệ ôxít Mg_2SiO_4 thông qua các tham số trật tự, như: hàm phân bố xuyên tâm, phân bố số phối trí, hàm trạng thái, thống kê các đơn vị cấu trúc và trực quan hóa số liệu mô phỏng.

- Nghiên cứu các tính chất động học riêng phần trong các hệ ôxít Mg_2SiO_4 bằng khảo sát nguyên tử nhanh chậm và kỹ thuật trực quan hóa.

- Tìm mối tương quan giữa tính chất động học và quá trình khuếch tán, liên hệ giữa năng lượng với áp suất và nhiệt độ trong Mg_2SiO_4 .

3. Tính mới và sáng tạo

Trong dải áp suất 0-60 GPa, sự chuyển đổi cấu trúc của Mg_2SiO_4 lỏng chủ yếu liên quan đến sự thay đổi của trật tự tầm trung, trong khi trật tự tầm gần hầu như không thay đổi. Thêm nữa, nguyên tử Mg khuếch tán nhanh nhất trong chất lỏng, điều này có thể được giải thích thông qua các kênh khuếch tán được tạo ra bởi ranh giới của vùng giàu Mg và Si.

Trong vùng áp suất âm và nhiệt độ thấp, cụ thể khi nhiệt độ giảm xuống nhiệt độ khí hóa lỏng, độ dài liên kết các cặp Si-O và Mg-O có giá trị không đổi trong khi độ dài liên kết cặp Si-Mg giảm đến 3,12 Å. Khi áp suất giảm xuống -2, -4, -6 GPa, độ dài liên kết cặp Si-O không đổi, độ dài liên kết cặp Si-Mg tăng đến 3,18 Å và độ dài liên kết cặp Mg-O tăng đến 1,98 Å.

Mối quan hệ giữa nhiệt độ và tổng năng lượng của hệ được xác định là đường thẳng với nhiệt độ khí hóa lỏng. Trong khi mối quan hệ giữa áp suất và tổng năng lượng của hệ xác định là đường cong bậc hai.

4. Kết quả nghiên cứu

Chúng tôi đã cho thấy ảnh hưởng của nhiệt độ và áp suất đến cấu trúc không đồng nhất của vật liệu Mg_2SiO_4 , đây chính là nguyên nhân của động học không đồng nhất trong các hệ ôxít nhiều thành phần. Đồng thời, chúng tôi đã quan sát thấy, nhiều mạng con Si-O, Mg-O trong mô hình ở áp suất thấp. Khi tăng áp suất, mạng con Si-O, Mg-O kết hợp với nhau để tạo thành cụm SiO_x-SiO_x và MgO_y-MgO_y , các cụm này tách biệt để tạo thành vùng giàu Si và Mg. Tồn tại mối tương quan giữa cấu trúc không đồng nhất và động học không đồng nhất trong mô hình vật liệu.

5. Sản phẩm:

5.1. Sản phẩm khoa học

Công bố 03 bài báo khoa học: 01 bài SICE, 01 bài Quốc tế thường và 01 bài Quốc gia uy tín, cụ thể:

1. Quoc, T. T., Trong, D. N., **Huu, K. P.**, & Tãlu, Ş. (2024). Effects of liquefied gas temperature and negative pressure on the microstructural characteristics of oxide Mg_2SiO_4 using molecular dynamics simulation method. *Computational Materials Science*, 242, 113075. **SCIE.**, <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0927025624002969>

2. **Pham Huu Kien, Phan Dinh Quang, Vu Van Anh, Tran Thi Quynh Nhu,** and **Giap Thi Thuy Trang.** The Structural Phase Transition, Degree of Polymerization and Dynamics Characteristics of Liquid Magnesium Silicate. A Molecular Dynamics Simulation, *Asian Journal of Applied Chemistry Research*. Accepted, 5/2024.

3. **Pham, H. K., Ho, T., & Giap, T. T. T.** (2022). Study of Dynamic Properties in $MgSiO_3$ Liquid under Compression by Mean of Molecular Dynamics Simulation. *VNU Journal of Science: Mathematics-Physics*, 38 (4).

5.2. Sản phẩm đào tạo

Hướng dẫn thành công 01 luận văn thạc sĩ, cụ thể:

1. Hồ Tuyên, *Nghiên cứu cấu trúc và cơ chế khuếch tán nguyên tử riêng phần trong hệ ôxít ba thành phần $MgSiO_3$ lỏng*, Luận văn thạc sĩ Trường Đại học Sư phạm – Đại học Thái Nguyên, 7/2023.

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 lỏng pha tạp Mg 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 lỏng pha tạp Mg và không pha tạp 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 lỏng pha tạp Mg và không pha tạp 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.