

Mô phỏng vật liệu cấu trúc Nanô nanostructured materials simulation : Đề tài NCKH.QG.04.06 / Nguyễn Ngọc Long . - H. : ĐHKHTN, 2006 . - 34 tr.

Tóm tắt kết quả nghiên cứu

kết quả về công cụ và phương pháp mô phỏng:

Đề xuất và xây dựng thành công phần mềm phát bộ số ngẫu nhiên có thống kê phân bố định trước. Công cụ này đã được áp dụng để tạo các mẫu nam châm tổ hợp hai pha cứng mềm kích thước nano dùng trong mô phỏng tính chất từ tính của loại nam châm này. Công cụ này cũng được áp dụng để tạo bề mặt xúc tác của các hạt xúc tác kích thước nano.

Áp dụng thành công phương pháp vi sai hữu hạn trong mô hình hóa trạng thái cực tiểu năng lượng của một hệ gồm một hạt từ mem trên nền một vật liệu từ cứng để xác định đường cong từ trễ của hệ.

Ứng dụng thành công thuật toán sử dụng phương pháp Monte - Carlo trong mô phỏng vật liệu từ tổ hợp và vật liệu xúc tác cấu trúc nano. Chuỗi xác suất sự kiện được gắn liền với tiêu chí kích thước tới hạn của hạt từ mềm trong mô phỏng vật liệu từ và khả năng hấp phụ phân tử khí độc hại trong mô phỏng vật liệu xúc tác.

Đã ứng dụng lý thuyết hình học fractal để nghiên cứu ảnh hưởng của tính fractal của bề mặt xúc tác lên các tính chất xúc tác.

Các kết quả mô phỏng:

Động học chuyển hóa khí thải từ carbon monoxide CO về carbon dioxide CO₂ phụ thuộc mạnh vào hình học fractal của bề mặt xúc tác (thông qua thứ nguyên fractal D_f của bề mặt xúc tác và thứ nguyên fractal d_w của vết đạo bộ ngẫu nhiên của quá trình khuếch tán kiểu đạo bộ ngẫu nhiên của các phân tử khí độc hại).

Hiệu suất chuyển hóa CO - CO₂ cân bằng phụ thuộc vào nồng độ tâm bắt CO và xác suất sự kiện khuếch tán của CO và phản ứng của chúng với nguyên tử ôxy. Khi kích thước hạt xúc tác giảm sự phụ thuộc của hiệu suất vào xác suất sự kiện trở nên yếu hơn.

Chúng minh khả năng tăng không nhiều của cảm ứng từ dư và tích năng lượng từ của nam châm tổ hợp hai pha cứng mềm hệ Nd₂Fe₁₄B/ α -Fe (trong khoảng 30% so với pha cứng nguyên thủy Nd₂Fe₁₄B) và giảm không đáng kể (cỡ 1%) của lực kháng từ nội tại iH_C .

Kết quả mô phỏng nam châm tổ hợp hai pha cứng mềm (TH2P) dùng phương pháp Monte Carlo đánh giá được nguyên nhân của sự tăng hạn chế phẩm chất từ tính của nam châm TH2P hệ $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}/\alpha\text{-Fe}$ so với những dự đoán lý thuyết, chúng bao gồm: i) ý tưởng xuất phát của nam châm TH2P là lợi dụng từ độ bão hòa cao của pha từ mềm, do vậy tỷ phần thể tích của pha từ mềm trong nam châm tổ hợp phải lớn; ii) tuy nhiên các hạt từ mềm phải được cứng hóa nhờ tương tác trao đổi với các hạt từ cứng và tiêu chí cứng hóa Kneller - Hawig đòi hỏi các hạt từ mềm $\alpha\text{-Fe}$ phải có kích thước cỡ

5nm, do vậy số lượng hạt từ mềm trong nam châm tổ hợp là rất lớn; iii) điều này đòi hỏi số lượng hạt từ cứng lại phải lớn gấp bội để tăng cường khả năng bao bọc các hạt từ mềm bằng tương tác trao đổi của mình; iv) điều này dẫn đến một kết luận là kích thước hạt của các hạt từ cứng phải rất nhỏ so với giá trị 5 nm của các hạt từ mềm vì tỷ phần thể tích của pha từ cứng là nhỏ; và cuối cùng v) hạn chế siêu thuận từ 2 nm của các hạt từ cứng $\alpha\text{-Fe}_2\text{B}$ gây ra mâu thuẫn không cho phép tạo một vi cấu trúc tối ưu của một nam châm TH2P như lý thuyết yêu cầu và trên thực tế trong khoảng 15 năm nghiên cứu vừa qua chưa có một kết quả thực nghiệm nào cho thấy khả năng tăng tích năng lượng từ lên hơn 30% nếu chỉ dùng tương tác trao đổi giữa hai pha cứng mềm.

Kết quả mô hình hóa nam châm TH2P trong khuôn khổ lý thuyết vi từ học giải phương trình Brown chứa 3 số hạng của trường dị hướng tinh thể, trường tương tác trao đổi và từ trường ngoài bằng phương pháp vi sai hữu hạn cho thấy nam châm TH2P hệ $\alpha\text{-Fe}_2\text{B}/\alpha\text{-Fe}$ có lực kháng từ nội tại lớn iH_c lớn (cho hệ $\alpha\text{-Fe}_2\text{B}/20\%\alpha\text{-Fe}$ iH_c đạt 2.6 Tesla). Sự có mặt của pha từ mềm tuy nâng cao cảm ứng từ dư nhưng làm suy giảm nhiều lực kháng từ B_H và do vậy khiến tích năng lượng từ cực đại $(BH)_{\max}$ chỉ đạt một giá trị khiêm tốn cỡ 23 MG.Oe mà thôi.

Kết quả mô hình hóa tính chất từ của một nam châm đơn pha kích thước nano trên cơ sở mô hình Stoner-Wohlfarth mở rộng đã chứng minh khả năng chế tạo nam châm kết dính đơn pha trên cơ sở bột nguội nhanh $\alpha\text{-Fe}_2\text{B}$ có phẩm chất từ tốt

$(BH)_{\max} \sim 8.8 \text{ MG.Oe}$ bằng phương pháp ép gia nhiệt tại 200°C so với phương pháp ép tại nhiệt độ phòng và sấy hóa cứng tại 200°C .

Kiến nghị về quy mô và đối tượng áp dụng nghiên cứu:

Áp dụng trong lĩnh vực khoa học và công nghệ vật liệu: cụ thể là có tác dụng định hướng cho công nghệ chế tạo vật liệu xúc tác dị thể cấu trúc nano và vật liệu từ cấu trúc nano hai pha cứng mềm.