

THÔNG TIN VỀ LUẬN ÁN TIẾN SĨ

1. Họ và tên nghiên cứu sinh: Nguyễn Thị Hồng
2. Giới tính: Nữ
3. Ngày sinh: 25-03-1986
4. Nơi sinh: Hà Lâm – Hà Trung – Thanh Hóa
5. Quyết định công nhận nghiên cứu sinh: Số 3972/QĐ-ĐHKHTN ngày 24 tháng 11 năm 2016 của Hiệu trưởng Trường Đại học Khoa học Tự nhiên – ĐGQGHN.
6. Các thay đổi trong quá trình đào tạo: Không
7. Tên đề tài luận án: **Nghiên cứu các tính chất dẫn điện và nhiệt động của sắt và các hợp kim ở áp suất cao**
8. Chuyên ngành: Vật lý lý thuyết và Vật lý toán
9. Mã số: 9440130.01
10. Cán bộ hướng dẫn khoa học: Hướng dẫn chính: PGS.TS. Hồ Khắc Hiếu
Hướng dẫn phụ: GS.TSKH. Nguyễn Xuân Hân
11. Tóm tắt các kết quả mới của luận án:

+ Trên cơ sở kết hợp mô hình Debye phi điều hoà với định luật nóng chảy Lindemann và đề xuất của Burakovsky về sự phụ thuộc thể tích của hệ số Grüneisen, luận án nghiên cứu ảnh hưởng của áp suất đến các đại lượng nhiệt động của kim loại sắt và hợp kim của sắt, cụ thể là:

Xây dựng được biểu thức giải tích tường minh phụ thuộc vào thể tích (áp suất) của tần số Debye, nhiệt độ Debye, độ dịch chuyển tương đối bình phương trung bình hay hệ số Debye-Waller (DWF) và nhiệt độ nóng chảy của sắt. Kết quả tính số cho thấy khi áp suất tăng sẽ dẫn đến sự tăng nhanh của tần số Debye, nhiệt độ Debye và nhiệt độ nóng chảy, và sự giảm nhanh của hàm DWF.

Thiết lập được biểu thức giải tích tường minh phụ thuộc áp suất và nồng độ pha tạp của độ dịch chuyển bình phương trung bình (MSD) và DWF của các hợp kim sắt. Kết quả tính số cho hợp kim cấu trúc B2 Fe-Si cho thấy khi áp suất tăng thì tần số Debye tăng nhanh và DWF giảm mạnh. Khi khảo sát ảnh hưởng của nồng độ Cr đến tính chất nhiệt động của hợp kim Fe-Cr, chúng tôi đã chỉ ra rằng, nhiệt độ Debye của hợp kim Fe-Cr tăng dần trong khi MSD lại giảm dần khi nồng độ Cr tăng. Các kết quả tính toán của chúng tôi đã được so sánh với các dữ liệu thực nghiệm thu thập được và cho thấy sự phù hợp tốt.

+ Dựa trên kết quả nghiên cứu sự phụ thuộc áp suất của nhiệt độ Debye, chúng tôi đề xuất một cách thức tiếp cận lý thuyết cho phép xác định ảnh hưởng của áp suất đến điện trở suất của kim loại sắt và các hợp kim. Kết quả tính toán số chỉ ra rằng điện trở suất của sắt và các hợp kim sắt (Fe-Ni, Fe-Si) giảm nhanh theo áp suất và tiến đến giá trị bão hòa ở áp suất và nhiệt độ cao.

12. Khả năng ứng dụng thực tiễn:

+ Các kết quả tính số thu được phù hợp tốt với thực nghiệm cho thấy rằng cách tiếp cận lý thuyết mà luận án xây dựng có thể được sử dụng để tiên đoán các tính chất nhiệt động cũng như dẫn điện của sắt và các hợp kim sắt dưới ảnh hưởng của áp suất.

+ Các tính chất nhiệt động của sắt và các hợp kim sắt ở áp suất cao là thông tin quan trọng cho các nghiên cứu về Trái Đất và các hành tinh.

13. Các hướng nghiên cứu tiếp theo:

+ Mở rộng kết quả nghiên cứu cho các hợp kim sắt ba thành phần cũng như các loại vật liệu khác ở áp suất cao như Pt, MgO.

+ Nghiên cứu độ dẫn nhiệt của sắt, các hợp kim sắt và các vật liệu ở áp suất cao.

14. Các công trình công bố liên quan đến luận án:

- [1]. Ho Khắc Hieu, Tran Thi Hai, **Nguyen Thi Hong**, Ngo Dinh Sang, Nguyen Viet Tuyen (2017), “Electrical Resistivity and Thermodynamic Properties of Iron Under High Pressure”, *Journal of Electronic Materials* **46** (6), pp. 3702-3706.
- [2]. Ho Khắc Hieu, Tran Thi Hai, **Nguyen Thi Hong**, Ngo Dinh Sang, Nguyen Viet Tuyen (2017), “Pressure dependence of melting temperature and shear modulus of hcp iron”, *High Pressure Research* **37** (3), pp. 267-277.
- [3]. Nguyen Viet Tuyen, Tran Thi Hai, **Nguyen Thi Hong**, Phan Thi Thanh Hong, Ho Khắc Hieu (2017), “High-pressure EXAFS Debye-Waller Factors of Metals”, *VNU Journal of Science: Mathematics – Physics* **33** (1), pp. 78-82.
- [4]. **Nguyen Thi Hong**, Nguyen Ba Duc, Ho Khắc Hieu (2021) “EXAFS Debye-Waller factors of B2-FeAl alloys”, *VNU Journal of Science: Mathematics – Physics* **37** (2), pp. 43-48.
- [5]. **Nguyen Thi Hong**, Ho Khắc Hieu (2021) “Investigation of Debye temperature and thermal disorder in Fe-Cr intermetallic alloys”, *Physica Scripta* **96** (7), p. 075701.
- [6]. **Nguyễn Thị Hồng** (2021) “Ảnh hưởng của nồng độ chất pha tạp và áp suất đến điện trở suất của hợp kim FeNi”, *Tạp chí Khoa học và Công nghệ Đại học Duy Tân* **5** (48), pp. 93-98.

Hà Nội, ngày tháng 10 năm 2022

Người hướng dẫn luận án

Nghiên cứu sinh

PGS.TS. Hồ Khắc Hiếu

Nguyễn Thị Hồng

INFORMATION ON DOCTORAL THESIS

1. Full name: Nguyen Thi Hong
2. Sex: female
3. Date of birth: 25-03-1986
4. Place of birth: Ha Lam – Ha Trung – Thanh Hoa
5. Admission decision number: 3972/QĐ-ĐHKHTN, 24th November 2016, Rector of University of Science – VNU
6. Changes in academic process: None
7. Official thesis title: **Investigation of electrical conductivity and thermodynamic properties of iron and alloys at high pressure**
8. Major: Theoretical and Mathematical Physics
9. Code: 9440130.01
10. Supervisors: Main Guide: Assoc. Prof. Dr. Ho Khac Hieu
Side Guide: Prof. Dr. Sci. Nguyen Xuan Han
11. Summary of the new findings of the thesis

+ On the basis of combining the anharmonic Debye model with Lindemann's melting law and Burakovsky's proposal of volume-dependent Grüneisen parameter, the author has studied the pressure effects on thermodynamic quantities of iron metals and its alloys. Particularly,

The volume (pressure)-dependent analytical expressions of the Debye frequency, the Debye temperature, the mean-square relative displacement corresponding to the Debye-Waller factor (DWF) and the melting temperature of iron have been established. The numerical results show that the increase of pressure leads to the rapid increase of Debye frequency, Debye temperature and melting temperature, and the rapid decrease of the DWF function.

The pressure-dependent analytical expressions of mean-square displacement (MSD) and DWF of iron alloys with different doping concentrations and at different pressures have been obtained. The numerical results for the B2-type Fe-Si alloy show that when the pressure is increased, the Debye frequency rises rapidly and the DWF decreases sharply. When considering the effect of Cr concentration on the thermodynamic properties of FeCr alloy, we pointed out that the Debye temperature of Fe-Cr alloy gradually increases and the MSD decreases progressively with the increasing of Cr concentration. Our calculation results are compared with the collected experimental data and show the good agreement.

+ Based on the results of obtained pressure-dependent Debye temperature, we proposed a theoretical approach that allows us to determine the influence of pressure on the electrical resistivity of iron metal and its alloys. Numerical calculation results show that the electrical resistivities of iron and its alloys (Fe-Ni, Fe-Si) decrease rapidly with pressure and approach to the saturation values at high pressure and temperature.

12. Practical applicability, if any:

+ The obtained numerical results are in good agreement with the experiments showing that the developed theory in the thesis can be used to predict the thermodynamic and electrical resistivity properties of iron and its alloys under the effect of pressure.

+ Thermodynamic properties of iron and its alloys under high pressure are of important information for the investigation of the Earth and planets.

13. Further research directions, if any

+ Derived results are going to be expanded for ternary iron-based alloys as well as other materials such as Pt, MgO.

+ Investigation of thermal conductivities of iron, iron alloys and other materials at high pressure.

14. Thesis-related publications:

- [1]. Ho Khac Hieu, Tran Thi Hai, **Nguyen Thi Hong**, Ngo Dinh Sang, Nguyen Viet Tuyen (2017), “Electrical Resistivity and Thermodynamic Properties of Iron Under High Pressure”, *Journal of Electronic Materials* **46** (6), pp. 3702-3706.
- [2]. Ho Khac Hieu, Tran Thi Hai, **Nguyen Thi Hong**, Ngo Dinh Sang, Nguyen Viet Tuyen (2017), “Pressure dependence of melting temperature and shear modulus of hcp iron”, *High Pressure Research* **37** (3), pp. 267-277.
- [3]. Nguyen Viet Tuyen, Tran Thi Hai, **Nguyen Thi Hong**, Phan Thi Thanh Hong, Ho Khac Hieu (2017), “High-pressure EXAFS Debye-Waller Factors of Metals”, *VNU Journal of Science: Mathematics – Physics* **33** (1), pp. 78-82.
- [4]. **Nguyen Thi Hong**, Nguyen Ba Duc, Ho Khac Hieu (2021) “EXAFS Debye-Waller factors of B2-FeAl alloys”, *VNU Journal of Science: Mathematics – Physics* **37** (2), pp. 43-48.
- [5]. **Nguyen Thi Hong**, Ho Khac Hieu (2021) “Investigation of Debye temperature and thermal disorder in Fe-Cr intermetallic alloys”, *Physica Scripta* **96** (7), p. 075701.
- [6]. **Nguyen Thi Hong** (2021) “Effect of doping concentration and pressure on the resistivity of FeNi alloy”, *DTU Journal of Science & Technology* **5** (48), pp. 93-98.

Supervisor



Assoc. Prof. Dr. Ho Khac Hieu

Hanoi, 4th October 2022

PhD Student



Nguyen Thi Hong