

THÔNG TIN LUẬN ÁN

Đề tài nghiên cứu:	Khảo sát cấu trúc và tính chất nhiệt động học của vật liệu hai chiều germanene bằng phương pháp mô phỏng
Ngành:	Vật lý kỹ thuật
Mã số ngành:	62520401
Họ và tên NCS:	Nguyễn Hoàng Giang
Tập thể hướng dẫn:	GS. TS. Võ Văn Hoàng
Cơ sở đào tạo:	Trường ĐH Bách khoa, ĐHQG HCM

Tóm tắt luận án

Thời gian gần đây, vật liệu hai chiều (2D) nhận được nhiều sự quan tâm từ các nhà khoa học trong và ngoài nước, đặc biệt là những vật liệu 2D có độ rộng vùng cấm như germanene. Tuy nhiên đến nay, các công bố liên quan đến quá trình chuyển pha của vật liệu 2D germanene vẫn còn hạn chế, các yếu tố ảnh hưởng đến quá trình hình thành vật liệu này chưa được khảo sát chi tiết, thậm chí nhiệt độ chuyển pha của germanene vẫn chưa được tìm hiểu, loại chuyển pha vẫn chưa được xác định. Bên cạnh đó, cấu trúc vi mô, các dạng khuyết tật, hay germanene có tồn tại ở trạng thái vô định hình hay không vẫn chưa được khảo sát tường tận. Trong nghiên cứu này, quá trình chuyển pha của vật liệu 2D germanene được khảo sát chi tiết thông qua phương pháp mô phỏng Động lực học phân tử. Nghiên cứu thu được nhiều kết quả mới đã giải quyết được các vấn đề tồn đọng nêu trên.

Đầu tiên, quá trình hình thành vật liệu 2D germanene đã khảo sát chi tiết bằng cách làm lạnh từ trạng thái lỏng. Căn cứ vào sự thay đổi tính chất nhiệt động học và cấu trúc cho thấy nhiệt độ tinh thể hóa của vật liệu 2D germanene được xác định là 1340 K, quá trình chuyển pha của vật liệu này là chuyển pha loại I. Kết quả thu được từ quá trình làm lạnh là mô hình có cấu trúc dạng lục giác tổ ong. Tuy nhiên mô hình thu được chưa hoàn hảo vì có chứa một số ít khuyết tật như Stone-Wales và khuyết tật mất nguyên tử. Mô hình thu được này được gọi là germanene đa tinh thể.

Sau đó, quá trình nóng chảy của vật liệu 2D germanene đơn tinh thể và đa tinh thể đã được khảo sát và phân tích chi tiết. Nhiệt độ nóng chảy của màng đơn tinh thể và đa tinh thể là khác nhau lần lượt: 1670 K và 1540 K. Mặc dù nhiệt độ chuyển pha là khác nhau, tuy nhiên loại chuyển pha giống nhau, đều là chuyển pha loại I. Các khuyết tật chủ đạo trong quá trình nóng chảy là khuyết tật Stone-Wales.

Ngoài ra, sự ảnh hưởng của tốc độ làm lạnh lên quá trình hình thành vật liệu 2D germanene đã được khảo sát chi tiết. Tùy vào mỗi tốc độ làm lạnh, mô hình thu được là tinh thể hoặc vô định hình. Khi tốc độ làm lạnh chậm, mô hình sẽ ít xuất hiện khuyết tật hơn. Thông qua nghiên cứu này đã xác định được nhiệt độ chuyển pha vô định hình là 1210 K ứng với tốc độ 10^{13} Ks^{-1} . Bên cạnh đó, mô hình 2D germanene vô định hình thu được tại 300 K đã được phân tích chi tiết.

Cuối cùng, sự ảnh hưởng của kích thước mô hình lên sự hình thành vật liệu 2D germanene đã được khảo sát. Kết quả cho thấy, kích thước của mô hình sẽ ảnh hưởng đến nhiệt độ chuyển pha và cấu trúc mô hình thu được.

Tập thể hướng dẫn

Nghiên cứu sinh

GS.TS. Võ Văn Hoàng

Nguyễn Hoàng Giang