

NGHIÊN CỨU SỰ NÓNG CHẢY CỦA HỢP KIM THAY THỂ AuCu DƯỚI TÁC DỤNG CỦA ÁP SUẤT CAO LÊN TỚI 100 GPa

Nguyễn Quang Học và Trần Đình Cường

Khoa Vật lý, Trường Đại học Sư phạm Hà Nội

Tóm tắt. Trong bài báo này, chúng tôi sử dụng phương pháp thống kê mômen để nghiên cứu sự nóng chảy của hợp kim thay thế nhị nguyên AuCu với cấu trúc lập phương tâm diện dưới tác dụng của áp suất lên tới 100 GPa. Lí thuyết nóng chảy đối với hợp kim thay thế nhị nguyên được xây dựng trong bài báo này là sự phát triển của lí thuyết nóng chảy đối với kim loại và đều xuất phát từ điều kiện giới hạn bền vững tuyệt đối của trạng thái tinh thể. Đường cong nóng chảy của các kim loại Au, Cu và hợp kim AuCu mà chúng tôi thu được có sự phù hợp tốt với thực nghiệm cũng như với kết quả tính toán của các tác giả khác sử dụng phương pháp ab initio và phương pháp mô phỏng động lực học phân tử. Điều đó cho phép chúng tôi dự đoán một cách đáng tin cậy các đặc tính nóng chảy của hợp kim AuCu trong những điều kiện vật lý chưa được khảo sát.

Từ khóa: Hợp kim thay thế, giới hạn bền vững tuyệt đối trạng thái tinh thể, phương pháp thống kê mômen.

1. Mở đầu

Trong những năm trở lại đây, với sự phát triển của các phương pháp thực nghiệm hiện đại - tiêu biểu là phương pháp ô mạng để kim cương [1] và phương pháp gây nóng chảy bằng sóng xung kích [2] - việc nghiên cứu nhiệt độ nóng chảy của vật liệu dưới tác dụng của áp suất cao đã trở thành một vấn đề nóng hổi mang tính thời sự, đặc biệt là đối với các ngành vật lý vật chất ngưng tụ và địa vật lý. Song song với đó, trên phương diện lí thuyết, các nhà khoa học thường sử dụng phương pháp ab initio [3] và phương pháp mô phỏng động lực học phân tử [4] để thu được những thông tin quan trọng về sự nóng chảy của vật liệu ở điều kiện áp suất lên tới hàng trăm GPa. Tuy nhiên, các phương pháp lí thuyết này lại đòi hỏi khối lượng tính toán quá lớn, thời gian mô phỏng quá lâu cùng những phép gần đúng quá phức tạp. Vì vậy, việc tìm ra một lời giải đơn giản cho bài toán nóng chảy vẫn là một vấn đề khó được nhiều nhà vật lý lí thuyết quan tâm theo đuổi.

Như chúng ta đã biết, hợp kim là một loại vật liệu phổ biến và được sử dụng rộng rãi trong các ngành công nghiệp. Việc khảo sát các đặc tính nhiệt động lực học của hợp kim có tầm quan trọng cơ bản trong việc tìm ra các ứng dụng của chúng. Song trong đa số các trường hợp, hiểu biết của chúng ta về sự nóng chảy của hợp kim vẫn là chưa đầy đủ. Chẳng hạn như với hợp kim thay thế AuCu, thông tin về sự nóng chảy của kim loại thành phần Cu dưới tác dụng của áp suất cao đã tương đối hoàn thiện và người ta đang hy vọng rằng trong tương lai có thể khảo sát sự nóng chảy của Cu lên tới hàng nghìn GPa [5, 6]. Ngược lại, chúng ta có rất ít nghiên cứu cả về lí thuyết lẫn thực nghiệm cho sự nóng chảy của kim loại thành phần Au. Đa số thông tin về các đặc tính nóng chảy

Ngày nhận bài: 27/12/2018. Ngày sửa bài: 19/3/2019. Ngày nhận đăng: 26/3/2019.

Tác giả liên hệ: Nguyễn Quang Học. Địa chỉ e-mail: hocnq@hnue.edu.vn

của Au hiện nay chỉ tập trung ở khoảng áp suất dưới 20 GPa [7-9] mặc dù sự chuyển pha cấu trúc lập phương tâm diện - lục giác xếp chặt của nó theo dự đoán sẽ diễn ra tại 151 GPa [10], tức là Au có thể tồn tại ở pha lập phương tâm diện trong một vùng áp suất rất rộng. Đặc biệt, khi ta kết hợp Au và Cu để tạo thành hợp kim, đường cong nóng chảy của hệ Au-Cu mới chỉ được xác định ở áp suất không [11].

Từ những năm 1990 trở lại đây, các nhà nghiên cứu tại khoa Vật lý, trường Đại học Sư phạm Hà Nội đã xây dựng, phát triển và ứng dụng một phương pháp nghiên cứu hiện đại có tên là phương pháp thống kê mômen. Phương pháp thống kê mômen dựa trên một công thức truy chứng đối với các mômen được xây dựng trên cơ sở ma trận mật độ của vật lý thống kê lượng tử. Dựa vào công thức này, chúng ta có thể biểu diễn các mômen cấp cao thông qua các mômen cấp thấp hơn và từ đó xác định toàn bộ các mômen của hệ mạng. Để tìm nhiệt độ nóng chảy bằng phương pháp thống kê mômen, các nhà nghiên cứu sẽ sử dụng điều kiện giới hạn bền vững tuyệt đối của trạng thái tinh thể - tức là chúng ta chỉ cần sử dụng duy nhất một pha rắn để tìm nhiệt độ nóng chảy [12-14]. Ưu điểm lớn nhất của phương pháp thống kê mômen đó chính là đơn giản về mặt toán học, rõ ràng về mặt vật lý, các hiệu ứng phi điều hòa và tương quan của dao động mạng được tính đến đầy đủ trong mô hình. Phương pháp thống kê mômen không đòi hỏi các chi phí tính toán lớn nhưng vẫn có thể cho ra các kết quả phù hợp tốt với thực nghiệm trong nhiều trường hợp.

Vì những lý do trên, trong bài báo này chúng tôi sẽ sử dụng phương pháp thống kê mômen để nghiên cứu sự nóng chảy của hợp kim thay thế AuCu dưới tác dụng của áp suất cao lên tới 100 GPa.

2. Nội dung nghiên cứu

2.1. Cơ sở lý thuyết

Đầu tiên chúng tôi sẽ xét kim loại sạch X lý tưởng với cấu trúc lập phương tâm diện (X có thể là Au hoặc Cu). Năng lượng liên kết u_{0X} và các thông số tinh thể k_X , γ_{1X} , γ_{2X} , γ_X [14] của kim loại X trong gần đúng hai quả cầu phối vị có dạng

$$u_{0X} = 12\phi_{1X}(a_X) + 6\phi_{2X}(a_X\sqrt{2}), \quad (1)$$

$$k_X = 2 \frac{d^2\phi_{1X}}{da_X^2} + \frac{4}{a_X} \frac{d\phi_{1X}}{da_X} + \frac{1}{2} \frac{d^2\phi_{2X}}{da_X^2} + \frac{1}{a_X} \frac{d\phi_{2X}}{da_X}, \quad (2)$$

$$\begin{aligned} \gamma_{1X} = & \frac{1}{24} \frac{d^4\phi_{1X}}{da_X^4} + \frac{1}{4a_X} \frac{d^3\phi_{1X}}{da_X^3} - \frac{1}{8a_X^2} \frac{d^2\phi_{1X}}{da_X^2} + \frac{1}{8a_X^3} \frac{d\phi_{1X}}{da_X} + \\ & + \frac{1}{96} \frac{d^4\phi_{2X}}{da_X^4} + \frac{1}{16a_X^2} \frac{d^2\phi_{2X}}{da_X^2} - \frac{1}{16a_X^3} \frac{d\phi_{2X}}{da_X}, \end{aligned} \quad (3)$$

$$\begin{aligned} \gamma_{2X} = & \frac{1}{8} \frac{d^4\phi_{1X}}{da_X^4} + \frac{1}{4a_X} \frac{d^3\phi_{1X}}{da_X^3} + \frac{3}{8a_X^2} \frac{d^2\phi_{1X}}{da_X^2} - \frac{3}{8a_X^3} \frac{d\phi_{1X}}{da_X} + \\ & + \frac{1}{8a_X} \frac{d^3\phi_{2X}}{da_X^3} - \frac{3}{16a_X^2} \frac{d^2\phi_{2X}}{da_X^2} + \frac{3}{16a_X^3} \frac{d\phi_{2X}}{da_X}, \end{aligned} \quad (4)$$

$$\gamma_X = 4(\gamma_{1X} + \gamma_{2X}), \quad (5)$$

trong đó φ_{1X} , φ_{2X} lần lượt là thế năng tương tác cặp giữa nguyên tử X với các nguyên tử lân cận nó trên quả cầu phối vị thứ nhất và thứ hai, thông số $k_X = m_X \omega_X^2$ biểu diễn tính chất điều hòa của dao động mạng (m_X là khối lượng nguyên tử X), các thông số γ_{1X} , γ_{2X} , γ_X mô tả dao động mạng trong gần đúng phi điều hòa, còn a_X là khoảng lân cận gần nhất trung bình giữa các nguyên tử trong kim loại sạch X.

Để xác định $a_X(P, T)$, trước hết chúng ta sẽ xác định $a_X(P, 0)$ dựa vào việc giải phương trình trạng thái sau [14]:

$$Pv_X = -a_X \left(\frac{1}{6} \frac{\partial u_{0X}}{\partial a_X} + \frac{\hbar \omega_X}{4k_X} \frac{\partial k_X}{\partial a_X} \right). \quad (6)$$

Biết $a_X(P, 0)$ chúng tôi tiếp tục tìm được độ dãn của nguyên tử $y_X(P, T)$ tại áp suất P và nhiệt độ T dựa vào công thức [14]

$$y_X(P, T) = \sqrt{\frac{2\gamma_X(P, 0)\theta^2}{3k_X^3(P, 0)}} A_X(P, 0), \quad (7)$$

trong đó $\theta = k_{Bo}T$, k_{Bo} là hằng số Boltzmann và $A_X(P, 0)$ là một hàm của X, $a_X(P, 0)$ và θ như trong [14].

Từ đó,

$$a_X(P, T) = a_X(P, 0) + y_X(P, T). \quad (8)$$

Bây giờ đối với hợp kim Au-Cu, từ mạng tinh thể của Au có thể thay các nguyên tử Au ở vị trí tâm mặt bằng các nguyên tử Cu. Khi đó, khoảng lân cận gần nhất trung bình a_{AuCu} sẽ được cho dưới dạng

$$a_{AuCu} = \frac{\sum_X c_X B_{TX} a_X}{\sum_X c_X B_{TX}}, \quad (9)$$

trong đó c_X là nồng độ nguyên tử X trong hợp kim (tính theo số nguyên tử), B_{TX} là môđun đàn hồi (suất đàn hồi) đẳng nhiệt của kim loại sạch X.

Phương trình trạng thái của hợp kim AuCu khi đó có dạng

$$P = -\frac{a_{AuCu}}{6v_{AuCu}} \sum_X c_X \frac{\partial u_{0X}}{\partial a_X} + \frac{3\gamma_G \theta}{v_{AuCu}} \quad (10)$$

với γ_G là thông số Grüneisen của hợp kim

$$\gamma_G = -\frac{a_{AuCu}}{6} \sum_X \frac{c_X}{k_X} \frac{\partial k_X}{\partial a_X} x_X \coth x_X, \quad x_X = \frac{\hbar \omega_X}{2\theta}. \quad (11)$$

Kết hợp (10) và (11) với điều kiện giới hạn bền vững tuyệt đối của trạng thái tinh thể

$$\left(\frac{\partial P}{\partial a_{\text{AuCu}}} \right)_{T=T_S} = 0, \quad (12)$$

chúng tôi tìm được phương trình sau đây cho phép xác định nhiệt độ giới hạn bền vững tuyệt đối của trạng thái tinh thể

$$T_S = \frac{2Pv_{\text{AuCu}} + \frac{a_{\text{AuCu}}^2}{6} \sum_X c_X \frac{\partial^2 u_{0X}}{\partial a_X^2} - \frac{\hbar a_{\text{AuCu}}^2}{4} \sum_X \frac{c_X \omega_X}{k_X} \left[\frac{1}{2k_X} \left(\frac{\partial k_X}{\partial a_X} \right)^2 - \frac{\partial^2 k_X}{\partial a_X^2} \right]}{\frac{k_{\text{Bo}} a_{\text{AuCu}}^2}{4} \sum_X \frac{c_X}{k_X^2} \left(\frac{\partial k_X}{\partial a_X} \right)^2}. \quad (13)$$

Lưu ý rằng các đại lượng trong vế phải của (13) cũng phải được tính tại T_S . Giải phương trình (13) sẽ cho chúng ta giá trị của T_S tại một áp suất và nồng độ nguyên tử pha tạp nhất định.

Do ở cùng một điều kiện vật lí, nhiệt độ giới hạn bền vững tuyệt đối của trạng thái tinh thể T_S và nhiệt độ nóng chảy T_m ở không xa nhau nên chúng tôi thực hiện một phép hiệu chỉnh như sau để tìm T_m từ T_S

$$T_m \approx T_S + \frac{a_m - a_S}{k_{\text{Bo}} \gamma_G} \left\{ \frac{Pv_{\text{AuCu}}}{a_S} + \sum_X \frac{c_X}{18} \left[\left(\frac{\partial u_{0X}}{\partial a_X} \right)_{T=T_S} + a_S \left(\frac{\partial^2 u_{0X}}{\partial a_X^2} \right)_{T=T_S} \right] \right\}, \quad (14)$$

trong đó $a_m = a(P, T_m)$, $a_S = a(P, T_S)$.

Về mặt nguyên tắc, chỉ cần lần lượt giải hai phương trình (13) và (14) là chúng tôi hoàn toàn có thể thu được mọi thông tin về sự nóng chảy của tinh thể. Tuy nhiên trong trường hợp đã biết nhiệt độ nóng chảy ở áp suất không $T_m(0)$, để đơn giản hóa tính toán chúng tôi có thêm một cách khác để tìm nhiệt độ nóng chảy dưới tác dụng của áp suất $T_m(P)$ như sau [15]:

$$T_m(P) = \frac{T_m(0) B_0^{\frac{1}{B_0'}}}{G(0)} \cdot \frac{G(P)}{(B_0 + B_0' P)^{\frac{1}{B_0'}}}, \quad (15)$$

trong đó G là môđun trượt của vật liệu, B_0 là môđun đàn hồi đẳng nhiệt của vật liệu ở áp suất không, $B_0' = (dB_T / dP)_{P=0}$ với B_T là môđun đàn hồi đẳng nhiệt của vật liệu ở áp suất P .

2.2. Kết quả tính số và thảo luận

Đối với hợp kim AuCu, chúng tôi sử dụng thế tương tác cặp Mie-Lennard-Jones có dạng

$$\varphi(r) = \frac{D}{n-m} \left[m \left(\frac{r_0}{r} \right)^n - n \left(\frac{r_0}{r} \right)^m \right], \quad (16)$$

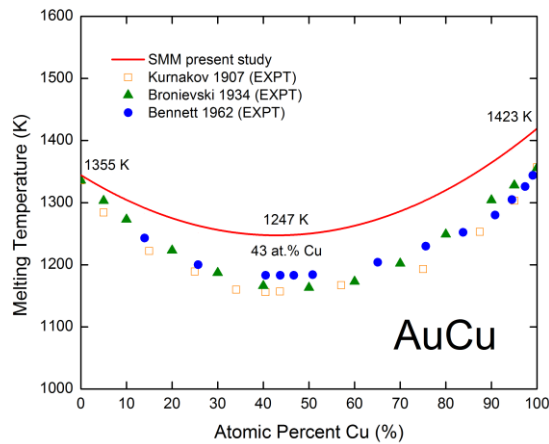
trong đó các thông số thế được cho trong Bảng 1.

Để xét tương tác giữa nguyên tử Au và nguyên tử Cu, chúng ta thực hiện phép lấy trung bình

$$\varphi_{\text{Au-Cu}} = \frac{1}{2} (\varphi_{\text{Au-Au}} + \varphi_{\text{Cu-Cu}}). \quad (17)$$

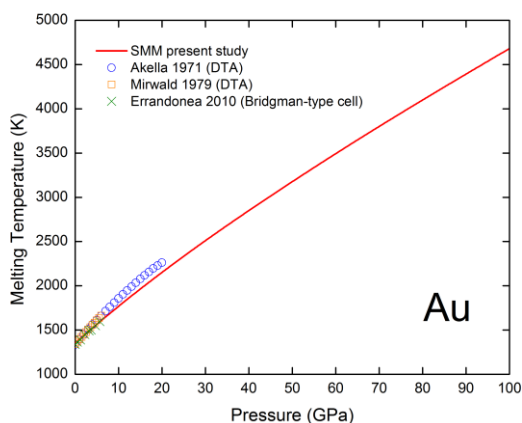
Bảng 1. Các thông số thể tương tác Mie-Lennard-Jones cho tương tác Au-Au [16] và Cu-Cu [17].

Sự tương tác	D (eV)	m	n	$r_0(10^{-10} \text{ m})$
Au-Au[15]	0,6387	1,96	15,56	2,8751
Cu-Cu[16]	0,2929	5,5	11	2,5487

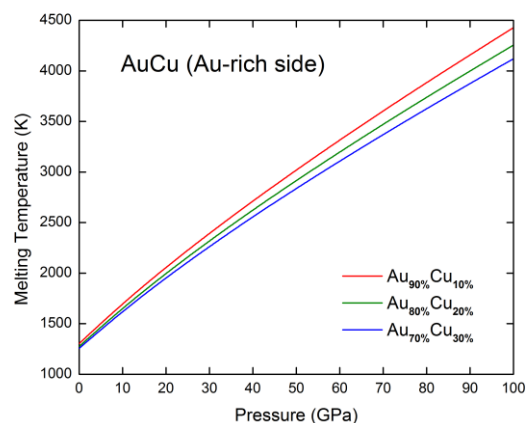


Hình 1. Đường cong nóng chảy $T_m(c_{Cu})$ của hợp kim AuCu tại áp suất không cho bởi phương pháp thống kê mômen (đường nét liền màu đỏ) phù hợp tốt với các kết quả thực nghiệm (chấm hình vuông màu da cam [18], hình tam giác màu xanh lá cây [19], chấm tròn màu xanh dương [20]).

Kết quả tính toán của chúng tôi cùng các kết quả khác để so sánh đối với hợp kim AuCu được chỉ ra trên Hình 1. Đầu tiên chúng ta sẽ kiểm tra một trường hợp giới hạn tại áp suất $P = 0$. Hình 1 cho thấy đường cong nóng chảy của hợp kim $T_m(c_{Cu})$ cho bởi phương pháp thống kê mômen có sự phù hợp tốt với các kết quả thực nghiệm [18-20]. Nhiệt độ nóng chảy của Au tại $P = 0$ là 1355 K theo tính toán của phương pháp thống kê mômen và là 1337 K theo các đo đạc thực nghiệm [21]. Nhiệt độ nóng chảy của Cu tại $P = 0$ thu được từ phương pháp thống kê mômen là 1423 K và 1358 K từ thực nghiệm [21]. Dễ thấy nhiệt độ nóng chảy của hợp kim AuCu không biến đổi nhiều theo nồng độ nguyên tử Cu pha vào nhưng đáng chú ý của nó có phần khá đặc biệt. Hình 1 cho thấy tồn tại một điểm cực tiểu tại $c_{Cu} = 43\%$ và T_m tương ứng bằng 1247 K. Tọa độ của điểm cực tiểu này theo các dữ kiện thực nghiệm tổng hợp [11] là (44%, 1183K). Dễ thấy nhiệt độ nóng chảy của hợp kim Au-Cu tại $P = 0$ theo phương pháp thống kê mômen có phần cao hơn so với thực nghiệm. Nguyên nhân của vấn đề này là do sự tạo thành nút khuyết trong tinh thể. Nồng độ nút khuyết cân bằng trong Au và Cu gần nhiệt độ nóng chảy dao động trong khoảng từ 10^{-4} đến 10^{-2} [22] và do đó, các nút khuyết sẽ có đóng góp đáng kể đến tính chất nhiệt động của tinh thể ở vùng nhiệt độ cao. Cụ thể là khi nút khuyết xuất hiện, nhiệt độ nóng chảy của tinh thể sẽ giảm rõ rệt do các nguyên tử liên kết không đầy đủ. Trong bài báo này, chúng tôi mới chỉ thực hiện các tính toán trên mô hình hợp kim AuCu lý tưởng nhưng sai số tối đa giữa lý thuyết với thực nghiệm cũng chỉ đạt 5,4%. Chúng tôi tin chắc rằng khi tính thêm ảnh hưởng của nút khuyết thì các kết quả tính số của chúng tôi sẽ tốt hơn.



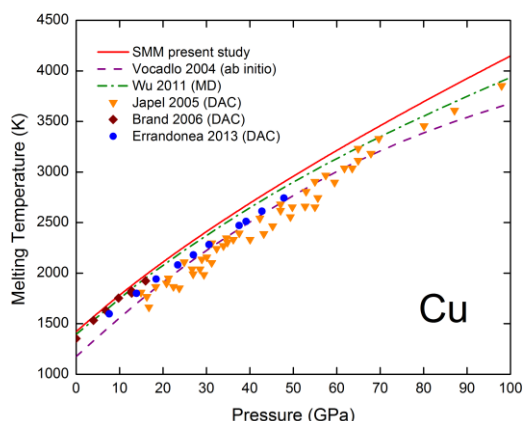
Hình 2. Đường cong nóng chảy $T_m(P)$ của kim loại sạch Au cho bởi phương pháp thống kê mômen (đường nét liền màu đỏ) và các đo đạc thực nghiệm sử dụng phương pháp phân tích nhiệt vi sai DTA (hình tròn màu xanh dương [7] và hình vuông màu cam [8]), sử dụng ô loại Bridgman [9] (dấu $\times$ màu xanh lá cây).



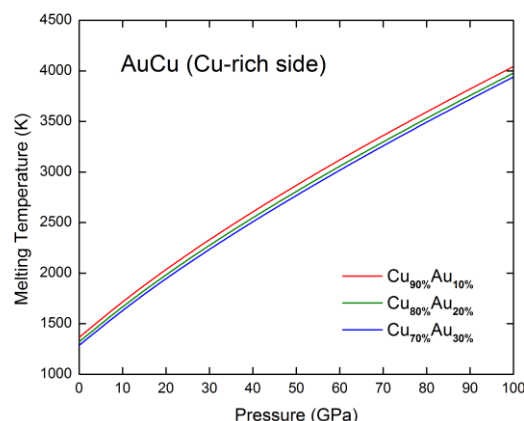
Hình 3. Đường cong nóng chảy $T_m(P)$ của hợp kim thay thế Au-Cu ở phía giàu Au lên tới 100 GPa cho bởi phương pháp thống kê mômen tại các nồng độ $c_{Au} = 90\%$ (đường nét liền màu đỏ), $c_{Au} = 80\%$ (đường nét liền màu xanh lá cây) và $c_{Au} = 70\%$ (đường nét liền màu xanh dương).

Hình 2 và Hình 3 cho thấy nhiệt độ nóng chảy của Au và hợp kim AuCu ở phía giàu Au được biết đến như một hàm tăng mạnh theo áp suất. Trên Hình 2, sai số tối đa giữa lý thuyết và các số liệu thực nghiệm hiện có [7-9] cho sự nóng chảy của Au chỉ đạt 4,7% tại $P = 20$ GPa. Điều đó cho phép chúng ta dự đoán một cách đáng tin cậy sự nóng chảy của Au ở vùng áp suất cao lên tới 100 GPa cũng như sự nóng chảy của các hợp kim $Au_{90\%}Cu_{10\%}$, $Au_{80\%}Cu_{20\%}$, $Au_{70\%}Cu_{30\%}$ trên Hình 3 (bởi lẽ từ Hình 1 chúng tôi đã chỉ ra được rằng T_m của hợp kim AuCu ở phía giàu Au sẽ không biến động nhiều so với T_m của kim loại chính Au). Cụ thể trong khoảng áp suất từ 0 đến 100 GPa, theo phương pháp thống kê mômen thì T_m của Au tăng từ 1355 đến 4682 K, T_m của $Au_{90\%}Cu_{10\%}$ tăng từ 1304 đến 4428 K, T_m của $Au_{80\%}Cu_{20\%}$ tăng từ 1275 đến 4255 K và T_m của $Au_{70\%}Cu_{30\%}$ tăng từ 1256 đến 4120 K.

Tương tự như đã phân tích ở Hình 2 và Hình 3, chúng tôi tin rằng các kết quả được trình bày trên Hình 4 và Hình 5 cũng sẽ đạt được độ chính xác cao. Cụ thể khi áp suất tăng từ 0 đến 100 GPa, theo phương pháp thống kê mômen thì T_m của Cu tăng từ 1423 đến 4148 K, T_m của $Cu_{90\%}Au_{10\%}$ tăng từ 1364 đến 4043 K, T_m của $Cu_{80\%}Au_{20\%}$ tăng từ 1320 đến 3978 K còn T_m của $Cu_{70\%}Au_{30\%}$ tăng từ 1286 đến 3941 K. Đặc biệt là Hình 4 cho thấy tuy phương pháp thống kê mômen không hề đòi hỏi các tính toán quá mức phức tạp và tinh tế nhưng hoàn toàn có thể cho ra đường cong nóng chảy dưới tác dụng của áp suất cao tương tự như các phương pháp hiện đại như ab initio và mô phỏng động lực học phân tử. Điều đó góp phần làm sáng tỏ hiệu quả của phương pháp thống kê mômen trong việc nghiên cứu các tính chất nhiệt động của kim loại và hợp kim trong một khoảng rộng của nhiệt độ, áp suất và nồng độ nguyên tử pha tạp.



Hình 4. Đường cong nóng chảy $T_m(P)$ của kim loại sạch Cu cho bởi phương pháp thống kê mômen (đường nét liền màu đỏ), phương pháp ab initio [3] (đường nét đứt màu tím), phương pháp mô phỏng động lực học phân tử [4] (đường gạch chấm màu xanh lá cây), phương pháp ô mạng để kim cương (hình tam giác màu vàng cam [23], hình tứ giác màu đỏ [24], hình tròn màu xanh dương [25]).



Hình 5. Đường cong nóng chảy $T_m(P)$ của hợp kim thay thế Au-Cu ở phía giàu Cu lên tới 100 GPa cho bởi phương pháp thống kê mômen tại các nồng độ $c_{Cu} = 90\%$ (đường nét liền màu đỏ), $c_{Cu} = 80\%$ (đường nét liền màu xanh lá cây) và $c_{Cu} = 70\%$ (đường nét liền màu xanh dương).

3. Kết luận

Phương pháp thống kê mômen cung cấp cho chúng ta một cách đơn giản, hiệu quả và nhanh gọn để khảo sát sự nóng chảy của tinh thể dưới tác dụng của áp suất cao và các nguyên tử pha tạp. Các kết quả lí thuyết được chúng tôi áp dụng để xây dựng đường cong nóng chảy của hợp kim thay thế AuCu với cấu trúc lập phương tâm diện lên tới 100 GPa. Mỗi quan hệ giữa nhiệt độ-áp suất-nồng độ nguyên tử pha tạp tại điểm nóng chảy của hệ AuCu đã được chúng tôi đánh giá kĩ càng. Các kết quả tính số của chúng tôi có sự phù hợp tốt với thực nghiệm cũng như với tính toán của các tác giả khác sử dụng ab initio và mô phỏng động lực học phân tử.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

- [1] D.Errandonea, B.Schwager, R.Ditz, C.Gessmann, R.Boehler and M.Ross, 2001. *Systematics of transition-metal melting*. Physical Review B **63**(13), 132104.
- [2] A.C.Mitchell and W.J.Nellis, 1981. *Shock compression of aluminum, copper, and tantalum*. Journal of Applied Physics **52**(5), 3363-3374.
- [3] L.Vocadlo, D.Alfe, G.D.Price and M.J.Gillan, 2004. *Ab initio melting curve of copper by the phase coexistence approach*. The Journal of Chemical Physics **120**(6), 2872-2878.
- [4] Y.N.Wu, L.P.Wang, Y.S.Huang and D.M.Wang, 2011. *Melting of copper under high pressures by molecular dynamics simulation*. Chemical Physics Letters **515**(4-6), 217-220.
- [5] H.K.Hieu, 2014. *Systematic prediction of high-pressure melting curves of transition metals*. Journal of Applied Physics **116**(16), 163505.
- [6] D.V.Minakov and P.R.Levashov, 2015. *Melting curves of metals with excited electrons in the quasiharmonic approximation*. Physical Review B **92**(22), 224102.
- [7] J.Akella and G.C.Kennedy, 1971. *Melting of gold, silver, and copper-proposal for a new high-pressure calibration scale*. Journal of Geophysical Research **76**(20), 4969-4977.

- [8] P.W.Mirwald and G.C.Kennedy, 1979. *The melting curve of gold, silver, and copper to 60-Kbar pressure: A reinvestigation*. Journal of Geophysical Research: Solid Earth **84**(B12), 6750-6756.
- [9] D.Errandonea, 2010. *The melting curve of ten metals up to 12 GPa and 1600 K*. Journal of Applied Physics **108**(3), 033517.
- [10] P.Söderlind, 2002. *Comment on Theoretical prediction of phase transition in gold*. Physical Review B **66**(17), 176201.
- [11] H.Okamoto, D.J.Chakrabarti, D.E.Laughlin and T.B.Massalski, 1987. *The Au-Cu (gold-copper) system*. Journal of Phase Equilibria **8**(5), 454.
- [12] V.V. Hung, H.V.Tich and D.T.Hai, 2011. *Study of Melting Temperature of Metals: Pressure Dependence*. Communications in Physics **21**(1), 77.
- [13] V.V.Hung and D.T.Hai, 2013. *Melting curve of metals with defect: Pressure dependence*. Computational Materials Science **79**, 789-794.
- [14] V.V.Hùng, 2009. *Phương pháp thống kê mômen trong nghiên cứu tính chất nhiệt động và đàn hồi của tinh thể*. Nhà xuất bản Đại học Sư phạm, t.1-231.
- [15] L.Burakovsky, D.L.Preston and P.R.Silbar, 2000. *Analysis of dislocation mechanism for melting of elements: pressure dependence*. Journal of Applied Physics **88**(11), 6294-6301.
- [16] M.N.Magomedov, 2006. *The calculation of the parameters of the Mie-Lennard-Jones potential*. High temperature **44**(4), 513-529.
- [17] M.N.Magomedov, 1987. *Calculation of the Debye temperature and the Gruneisen parameter*. Zhurnal fizicheskoi khimii **61**(4), 1003-1009.
- [18] N.S.Kurnakov and S.F.Zemczuzny, 1907. *Alloys of Copper with Nickel and Gold. Electrical Conductivity of Solid Metallic Solutions*. Zh. Russ. Fiz.-Khim. Obshchestva **39**, 211-219.
- [19] W.Broniewski and K.Wesolowski, 1934. *Structures of Gold-Copper Alloys*. Compt. Rend. **198**, 370-372.
- [20] H.E.Bennett, 1962. *Solidification curves of gold-copper system*. Journal of the Institute of Metals **91**(4), 158.
- [21] E.Y.Tonkov and E.G.Ponyatovsky, 2004. *Phase transformations of elements under high pressure*. CRC press.
- [22] Y.Kraftmakher, 1998. *Equilibrium vacancies and thermophysical properties of metals*. Physics Reports **299**(2-3), 79-188.
- [23] S.Japel, B.Schwager, R.Boehler and M.Ross, 2005. *Melting of copper and nickel at high pressure: The role of d electrons*. Physical review letters **95**(16), 167801.
- [24] H.Brand, D.P.Dobson, L.Vočadlo and I.G.Wood, 2006. *Melting curve of copper measured to 16 GPa using a multi-anvil press*. High Pressure Research **26**(3), 185-191.
- [25] D. Errandonea, 2013. *High-pressure melting curves of the transition metals Cu, Ni, Pd, and Pt*. Physical Review B **87**(5), 054108.

ABSTRACT

Study on the melting of substitutional alloy AuCu in high pressures up to 100 GPa

Nguyễn Quang Học và Trần Đình Cường

Faculty of Physics, Hanoi National University of Education

In this paper, we use the statistical moment method in order to study the melting of binary substitutional alloy AuCu with the face-centered cubic (fcc) structure under pressure up to 100 GPa. The melting theory for binary substitutional alloys builded in this paper is the development of the melting theory for metals and started from the absolute stability limit condition for crystalline state. Our obtained melting curves of metals Au, Cu and alloy AuCu are in good agreement with the experimental data as well as the calculated results of other authors using the ab initio and the molecular dynamics simulation. This is allowed us certainly to foresee the melting features of alloy AuCu in uninvestigated physical conditions.

Keywords: Substitutional alloy, absolute stability limit for crystalline state, statistical moment method.