

LÍ THUYẾT BIẾN DẠNG ĐÀN HỒI CỦA MÀNG MỎNG HỢP KIM XEN KẼ NHỊ NGUYÊN LẬP PHƯƠNG TÂM KHỐI TỪ PHƯƠNG PHÁP THỐNG KÊ MÔMEN

Nguyễn Quang Học¹, Phạm Phương Uyên¹, Phạm Duy Thành² và Lê Hồng Việt³

¹*Khoa Vật lý, Trường Đại học Sư phạm Hà Nội*

²*Trường Trung học phổ thông Chuyên, Trường Đại học Sư phạm Hà Nội*

³*Khoa Khoa học Tự nhiên, Trường Sĩ quan Lục quân*

Tóm tắt. Bài báo trình bày lý thuyết biến dạng đàn hồi và vận tốc truyền sóng đàn hồi của màng mỏng hợp kim xen kẽ AB với cấu trúc lập phương tâm khối (LPTK) trên cơ sở phương pháp thống kê mômen. Màng kim loại và hợp kim ở dạng vật liệu khối là các trường hợp riêng của màng hợp kim trong lý thuyết này. Kết quả lý thuyết thu được được áp dụng cho các màng của W và WSi trong đó có so sánh với thực nghiệm và tính toán khác.

Từ khóa: màng hợp kim xen kẽ nhị nguyên, cấu trúc lập phương tâm khối, màng kim loại, vật liệu khối, phương pháp thống kê mômen.

1. Mở đầu

Phương pháp thống kê mômen (SMM) đã được áp dụng để nghiên cứu biến dạng đàn hồi của kim loại và hợp kim xen kẽ ở dạng vật liệu khối [1-6].

W và các hợp kim xen kẽ của W như WSi, WC là những vật liệu có nhiệt độ nóng chảy rất cao. Tại áp suất $P = 0,1\text{MPa}$ và $T = 300\text{K}$, W có cấu trúc lập phương tâm khối (LPTK) và nóng chảy ở 3690K . Tại $P = 90\text{GPa}$, W nóng chảy ở 4000K [7, 8]. WC là vật liệu siêu cứng có độ cứng chỉ sau vật liệu có độ cứng cao nhất là kim cương và có độ bền đứt gãy cao hơn kim cương [9, 10].

Đa số các nghiên cứu thực nghiệm và lý thuyết được tiến hành đối với màng gắn chân đế [11-16]. Phần lớn các nghiên cứu đề cập đến các tính chất quang và điện của màng mỏng bán dẫn và hợp chất. Tính chất nhiệt động của màng kim loại đã được nghiên cứu bằng SMM trong một số công trình [17-19].

Trong bài báo này, lần đầu tiên chúng tôi đưa ra lý thuyết biến dạng đàn hồi của màng hợp kim xen kẽ nhị nguyên LPTK trên cơ sở SMM [1-6,17-21]. Các kết quả lý thuyết được tính số đối với các màng W và WSi.

Ngày nhận bài: 1/2/2023. Ngày sửa bài: 20/3/2023. Ngày nhận đăng: 30/3/2023.

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

2. Nội dung nghiên cứu

Xét một màng mỏng tự do của hợp kim xen kẽ AB với cấu trúc LPTK. A là nguyên tử trong kim loại sạch A, A₁ là nguyên tử kim loại chính A ở tâm khối, A₂ là nguyên tử kim loại chính A ở đỉnh và B là nguyên tử xen kẽ ở tâm mặt của ô cơ sở lập phương. Giả sử màng này có n^* lớp với bề dày d . Màng mỏng bao gồm 2 lớp nguyên tử bề mặt ngoài, hai lớp nguyên tử sát bề mặt ngoài và $n^* - 4$ lớp nguyên tử bên trong. Gọi N^{ng} , N^{ng1} và N^{tr} tương ứng là số nguyên tử ở lớp ngoài, lớp sát ngoài và lớp trong của màng mỏng này.

Khoảng lân cận gần nhất r_{1X} giữa 2 nguyên tử X ở áp suất P , nhiệt độ T và ở áp suất P , nhiệt độ 0 K trong cả 3 lớp tương ứng thỏa mãn các phương trình trạng thái sau:

$$Pv_X = -r_{1X} \left(\frac{1}{6} \frac{\partial u_{0X}}{\partial r_{1X}} + \frac{\theta Y_X}{2k_X} \frac{\partial k_X}{\partial r_{1X}} \right), Y_X \equiv x_X \coth x_X, \quad (1)$$

$$Pv_X = -r_{1X} \left(\frac{1}{6} \frac{\partial u_{0X}}{\partial r_{1X}} + \frac{\hbar \omega_{0X}}{4k_X} \frac{\partial k_X}{\partial r_{1X}} \right), \quad (2)$$

trong đó $v_X = \frac{4r_{1X}^3}{3\sqrt{3}}$, u_{0X} là năng lượng liên kết của nguyên tử X, X = A, A₁, A₂, B,

$\theta = k_{Bo}T, k_{Bo}$ là hằng số Boltzmann, k_X là thông số tinh thể điều hòa,

$x_X = \frac{\hbar \omega_X}{2\theta} = \frac{\hbar}{2\theta} \sqrt{\frac{k_X}{m_X}}$, m_X là khối lượng của nguyên tử X. (2) cho phép xác định $r_{1X}(P,0)$,

$k_X(P,0)$, $\gamma_{1X}(P,0)$, $\gamma_{2X}(P,0)$, $\gamma_X(P,0)$ và độ dãn $y_X(P,T)$. Đối với lớp ℓ (ℓ là trong hoặc sát ngoài),

$$y_X^\ell(P,T) = \sqrt{\frac{2\gamma_X^\ell(P,0)\theta^2}{3(k_X^\ell)^3}} A_X^\ell(P,T), A_X^\ell(P,T) = a_{1X}^\ell + \sum_{i=2}^6 \left(\frac{\gamma_X^\ell \theta}{(k_X^\ell)^2} \right)^i a_{iX}^\ell,$$

$$a_{1X}^\ell = 1 + \frac{1}{2} Y_X^\ell, a_{2X}^\ell = \frac{13}{3} + \frac{47}{6} Y_X^\ell + \frac{23}{6} (Y_X^\ell)^2 + \frac{1}{2} (Y_X^\ell)^3,$$

$$a_{3X}^\ell = -\left(\frac{25}{3} + \frac{121}{6} (Y_X^\ell) + \frac{50}{3} (Y_X^\ell)^2 + \frac{16}{3} (Y_X^\ell)^3 + \frac{1}{2} (Y_X^\ell)^4 \right),$$

$$a_{4X}^\ell = \frac{43}{3} + \frac{93}{2} (Y_X^\ell) + \frac{169}{3} (Y_X^\ell)^2 + \frac{83}{3} (Y_X^\ell)^3 + \frac{22}{3} (Y_X^\ell)^4 + \frac{1}{2} (Y_X^\ell)^5,$$

$$a_{5X}^\ell = -\left(\frac{103}{3} + \frac{749}{6} (Y_X^\ell) + \frac{363}{2} (Y_X^\ell)^2 + \frac{391}{3} (Y_X^\ell)^3 + \frac{148}{3} (Y_X^\ell)^4 + \frac{53}{6} (Y_X^\ell)^5 + \frac{1}{2} (Y_X^\ell)^6 \right),$$

$$a_{6X}^\ell = 65 + \frac{561}{2} (Y_X^\ell) + \frac{1489}{3} (Y_X^\ell)^2 + \frac{927}{2} (Y_X^\ell)^3 +$$

$$+ \frac{733}{3} (Y_X^\ell)^4 + \frac{145}{2} (Y_X^\ell)^5 + \frac{31}{3} (Y_X^\ell)^6 + \frac{1}{2} (Y_X^\ell)^7, Y_X^\ell \equiv x_X^\ell \coth x_X^\ell, \quad (3)$$

Đối với lớp ngoài,

$$y_X^{ng}(P, T) = -\frac{\gamma_X^{ng} \theta}{(k_X^{ng})^2} Y_X^{ng}, \quad Y_X^{ng} \equiv x_X^{ng} \coth x_X^{ng}, \quad (4)$$

Đối với lớp m (m là trong, sát ngoài và ngoài),

$$\begin{aligned} r_{1C}^m(P, T) &= r_{1C}^m(P, 0) + y_{A_1}^m(P, T), r_{1A}^m(P, T) = r_{1A}^m(P, 0) + y_A^m(P, T), \\ r_{1A_1}^m(P, T) &= r_{1C}^m(P, T), r_{1A_2}^m(P, T) = r_{1A_2}^m(P, 0) + y_C^m(P, T). \end{aligned} \quad (5)$$

Khoảng lân cận gần nhất trung bình giữa 2 nguyên tử A ở lớp m được xác định bởi

$$\begin{aligned} r_{1A}^m(P, T) &= r_{1A}^m(P, 0) + y^m(P, T), r_{1A}^m(P, 0) = (1 - c_B^m) r_{1A}^m(P, 0) + c_B^m r_{1A}^m(P, 0), \\ r_{1A}^m(P, 0) &= \sqrt{3} r_{1C}^m(P, 0), y^m(P, T) = \sum_X c_X^m y_X^m(P, T), \end{aligned} \quad (6)$$

trong đó $c_A^m = 1 - 7c_B^m, c_{A_1}^m = 2c_B^m, c_{A_2}^m = 4c_B^m, c_X^m = \frac{N_X^m}{N^m}$ là nồng độ của nguyên tử X trong lớp

m , N_X^m là số nguyên tử X trong lớp m và N^m là số nguyên tử của lớp m .

Năng lượng tự do Helmholtz đối với lớp ℓ có dạng

$$\begin{aligned} \Psi^\ell &= N^\ell \left(\sum_X c_X^\ell \psi_X^\ell - TS_c^\ell \right), \\ \Psi_X^\ell &= N^\ell \psi_X^\ell \approx U_{0X}^\ell + 3N^\ell \theta [x_X^\ell + \ln(1 - e^{-2x_X^\ell})] \\ &+ \frac{3N^\ell \theta^2}{(k_X^\ell)^2} \left[\gamma_{2X}^\ell (Y_X^\ell)^2 - \frac{2\gamma_{1X}^\ell}{3} \left(1 + \frac{Y_X^\ell}{2} \right) \right] + \\ &+ \frac{6N^\ell \theta^3}{(k_X^\ell)^4} \left[\frac{4}{3} (\gamma_{2X}^\ell)^2 \left(1 + \frac{Y_X^\ell}{2} \right) Y_X^\ell - 2 \left((\gamma_{1X}^\ell)^2 + 2\gamma_{1X}^\ell \gamma_{2X}^\ell \right) \left(1 + \frac{Y_X^\ell}{2} \right) (1 + Y_X^\ell) \right]. \end{aligned} \quad (7)$$

Năng lượng tự do đối với lớp ngoài có dạng

$$\begin{aligned} \Psi^{ng} &= N^{ng} \left(\sum_X c_X^{ng} \psi_X^{ng} - TS_c^{ng} \right), \\ \Psi_X^{ng} &= N^{ng} \psi_X^{ng} \approx U_0^{ng} + 3N^{ng} \theta [x_X^{ng} + \ln(1 - e^{-2x_X^{ng}})]. \end{aligned} \quad (8)$$

Trong (7) và (8), $U_{0X}^m = \frac{N^m}{2} u_{0X}^m, N^m$ là số nguyên tử của lớp m , u_{0X}^m là năng lượng liên kết của nguyên tử X thuộc lớp m , ψ_X^m là năng lượng tự do Helmholtz của một nguyên tử X thuộc lớp m và S_c^m là entropi cấu hình của hợp kim trong lớp m .

Tại nhiệt độ thấp, năng lượng tự do đối với lớp m của màng có dạng

$$\begin{aligned} \Psi^m &= N^m \left(\sum_X c_X^m \psi_X^m - TS_c^m \right), \\ \Psi_X^m &= N^m \psi_X^m \approx U_0^m + 3N^m \theta [x_X^m + \ln(1 - e^{-2x_X^m})]. \end{aligned} \quad (9)$$

Giả sử màng mỏng N nguyên tử, n^* lớp và N^L nguyên tử trên mỗi lớp. Khi đó,

$$n^* = \frac{N}{N^L}. \quad (10)$$

Số nguyên tử trong các lớp được xác định bởi

$$N^{tr} = (n^* - 4)N^L = \left(\frac{N}{N^L} - 4\right)N^L = N - 4N^L, \quad (11)$$

$$N^{ng1} = 2N^L = N - (n^* - 2)N^L, \quad (12)$$

$$N^{ng} = 2N^L = N - (n^* - 2)N^L. \quad (13)$$

Năng lượng tự do của màng được cho bởi

$$\begin{aligned} \Psi &= \Psi^{tr} + \Psi^{ng1} + \Psi^{ng} - TS_c = N^{tr}\psi^{tr} + N^{ng1}\psi^{ng1} + N^{ng}\psi^{ng} - TS_c = \\ &= (N - 4N^L)\psi^{tr} + 2N^L\psi^{ng1} + 2N^L\psi^{ng} - TS_c, \end{aligned} \quad (14)$$

trong đó $N = N^{tr} + N^{ng1} + N^{ng}$ là số nguyên tử tổng cộng, S_c là entropi cấu hình của màng, $\psi^{tr}, \psi^{ng1}, \psi^{ng}$ tương ứng là năng lượng tự do ứng với một nguyên tử của lớp trong, lớp sát ngoài và lớp ngoài của màng mỏng. Do đó, năng lượng tự do của màng ứng với một nguyên tử là

$$\frac{\Psi}{N} = \left(1 - \frac{4}{n^*}\right)\psi^{tr} + \frac{2}{n^*}\psi^{ng1} + \frac{2}{n^*}\psi^{ng} - \frac{TS_c}{N}. \quad (15)$$

Mối liên hệ giữa khoảng lân cận gần nhất trung bình \bar{a} giữa hai nguyên tử, bề dày trung bình \bar{b} của hai lớp màng và hằng số mạng trung bình \bar{a}_c của màng là

$$\bar{b} = \frac{\bar{a}}{\sqrt{3}}, \quad \bar{a}_c = 2\bar{b} = \frac{2\bar{a}}{\sqrt{3}}. \quad (16)$$

Bề dày màng liên hệ với số lớp bởi

$$d = 2b^{ng} + 2b^{ng1} + (n^* - 4)b^{tr} = (n^* - 1)\bar{b} = (n^* - 1)\frac{\bar{a}}{\sqrt{3}}. \quad (17)$$

Từ đó,

$$n^* = 1 + \frac{d}{\bar{b}} = 1 + \frac{d\sqrt{3}}{\bar{a}}. \quad (18)$$

Từ đó rút ra biểu thức năng lượng tự do ứng với một nguyên tử của màng

$$\begin{aligned} \frac{\Psi}{N} &= \frac{d\sqrt{3} - 3\bar{a}}{d\sqrt{3} + \bar{a}}\psi^{tr} + \frac{2\bar{a}}{d\sqrt{3} + \bar{a}}\psi^{ng} + \frac{2\bar{a}}{d\sqrt{3} + \bar{a}}\psi^{ng1} - \frac{TS_c}{N} = \\ &= \frac{d\sqrt{3} - 3\bar{a}}{d\sqrt{3} + \bar{a}} \left(\sum_X c_X^{tr} \psi_X^{tr} - TS_c^{tr} \right) + \frac{2\bar{a}}{d\sqrt{3} + \bar{a}} \left(\sum_X c_X^{ng} \psi_X^{ng} - TS_c^{ng} \right) + \\ &\quad \frac{2\bar{a}}{d\sqrt{3} + \bar{a}} \left(\sum_X c_X^{ng1} \psi_X^{ng1} - TS_c^{ng1} \right) - \frac{TS_c}{N}. \end{aligned} \quad (19)$$

Môđun Young của màng có dạng

$$E_{YAB} = \frac{d\sqrt{3} - 3\bar{a}}{d\sqrt{3} + \bar{a}} E_Y^{tr} + \frac{2\bar{a}}{d\sqrt{3} + \bar{a}} E_Y^{ng} + \frac{2\bar{a}}{d\sqrt{3} + \bar{a}} E_Y^{ng1},$$

$$\begin{aligned}
 E_Y^{tr} &= \sum_X c_X E_{YX}^{tr}, E_Y^{ng} = \sum_X c_X E_{YX}^{ng}, E_Y^{ng1} = \sum_X c_X E_{YX}^{ng1}, \\
 E_{YX}^{tr} &= \frac{1}{\pi(r_{01X}^{tr} + y_X^{tr}) A_{1X}^{tr}}, A_{1X}^{tr} = \frac{1}{k_X^{tr}} \left[1 + \frac{2(\gamma_X^{tr})^2 \theta^2}{(k_X^{tr})^4} \left(1 + \frac{Y_X^{tr}}{2} \right) (1 + Y_X^{tr}) \right], \\
 E_{YX}^{ng} &= \frac{1}{\pi(r_{01X}^{ng} + y_X^{ng}) A_{1X}^{ng}}, A_{1X}^{ng} = \frac{1}{k_X^{ng}} \left[1 + \frac{2(\gamma_X^{ng})^2 \theta^2}{(k_X^{ng})^4} \left(1 + \frac{Y_X^{ng}}{2} \right) (1 + Y_X^{ng}) \right], \\
 E_{YX}^{ng1} &= \frac{1}{\pi(r_{01X}^{ng1} + y_X^{ng1}) A_{1X}^{ng1}}, A_{1X}^{ng1} = \frac{1}{k_X^{ng1}} \left[1 + \frac{2(\gamma_X^{ng1})^2 \theta^2}{(k_X^{ng1})^4} \left(1 + \frac{Y_X^{ng1}}{2} \right) (1 + Y_X^{ng1}) \right]. \quad (20)
 \end{aligned}$$

Trong phép gần đúng ba quả cầu phối vị đối với lớp trong của màng,

$$u_{0B}^{tr} = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{n_i} \varphi_{AB}^{tr}(r_i) = \varphi_{AB}^{tr}(r_{1B}^{tr}) + 2\varphi_{AB}^{tr}(r_{2B}^{tr}), r_{2B}^{tr} = \sqrt{2}r_{1B}^{tr}, \quad (21)$$

$$k_B^{tr} = \frac{1}{2} \sum_i \left(\frac{\partial^2 \varphi_{AB}^{tr}}{\partial u_{i\beta}^{tr2}} \right)_{eq} = \frac{1}{r_{1B}^{tr}} \frac{d\varphi_{AB}^{tr}(r_{1B}^{tr})}{dr_{1B}^{tr}} + \frac{d^2 \varphi_{AB}^{tr}(r_{2B}^{tr})}{dr_{2B}^{tr2}} + \frac{1}{r_{2B}^{tr}} \frac{d\varphi_{AB}^{tr}(r_{2B}^{tr})}{dr_{2B}^{tr}}, \quad (22)$$

$$\begin{aligned}
 \gamma_{1B}^{tr} &= \frac{1}{48} \sum_i \left(\frac{\partial^4 \varphi_{AB}^{tr}}{\partial u_{i\beta}^{tr4}} \right)_{eq} = \frac{1}{8r_{1B}^{tr2}} \frac{d^2 \varphi_{AB}^{tr}(r_{1B}^{tr})}{dr_{1B}^{tr2}} - \frac{1}{8r_{1B}^{tr3}} \frac{d\varphi_{AB}^{tr}(r_{1B}^{tr})}{dr_{1B}^{tr}} + \frac{1}{48} \frac{d^4 \varphi_{AB}^{tr}(r_{2B}^{tr})}{dr_{2B}^{tr4}} + \\
 &+ \frac{1}{8r_{2B}^{tr}} \frac{d^3 \varphi_{AB}^{tr}(r_{2B}^{tr})}{dr_{2B}^{tr3}} - \frac{3}{16r_{2B}^{tr2}} \frac{d^2 \varphi_{AB}^{tr}(r_{2B}^{tr})}{dr_{2B}^{tr2}} + \frac{3}{16r_{2B}^{tr3}} \frac{d\varphi_{AB}^{tr}(r_{2B}^{tr})}{dr_{2B}^{tr}}, \quad (23)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \gamma_{2B}^{tr} &= \frac{6}{48} \sum_i \left(\frac{\partial^4 \varphi_{AB}^{tr}}{\partial u_{i\alpha}^{tr2} \partial u_{i\beta}^{tr2}} \right)_{eq} = \frac{1}{4r_{1B}^{tr}} \frac{d^3 \varphi_{AB}^{tr}(r_{1B}^{tr})}{dr_{1B}^{tr3}} - \frac{1}{2r_{1B}^{tr2}} \frac{d^2 \varphi_{AB}^{tr}(r_{1B}^{tr})}{dr_{1B}^{tr2}} + \frac{1}{2r_{1B}^{tr3}} \frac{d\varphi_{AB}^{tr}(r_{1B}^{tr})}{dr_{1B}^{tr}} + \\
 &+ \frac{1}{4r_{2B}^{tr}} \frac{d^3 \varphi_{AB}^{tr}(r_{2B}^{tr})}{dr_{2B}^{tr3}} - \frac{1}{4r_{2B}^{tr2}} \frac{d^2 \varphi_{AB}^{tr}(r_{2B}^{tr})}{dr_{2B}^{tr2}} + \frac{1}{4r_{2B}^{tr3}} \frac{d\varphi_{AB}^{tr}(r_{2B}^{tr})}{dr_{2B}^{tr}}, \quad (24)
 \end{aligned}$$

$$u_{0A_1}^{tr} = u_{0A}^{tr} + 3\varphi_{A_1B}^{tr}(r_{1A_1}^{tr}), \quad (25)$$

$$k_{A_1}^{tr} = k_A^{tr} + \frac{1}{2} \sum_i \left[\left(\frac{\partial^2 \varphi_{A_1B}^{tr}}{\partial u_{i\beta}^{tr2}} \right)_{eq} \right]_{r=r_{1A_1}} = k_A^{tr} + \frac{d^2 \varphi_{A_1B}^{tr}(r_{1A_1}^{tr})}{dr_{1A_1}^{tr2}} + \frac{2}{r_{1A_1}^{tr}} \frac{d\varphi_{A_1B}^{tr}(r_{1A_1}^{tr})}{dr_{1A_1}^{tr}}, \quad (26)$$

$$\begin{aligned}
 \gamma_{1A_1}^{tr} &= \gamma_{1A}^{tr} + \frac{1}{48} \sum_i \left[\left(\frac{\partial^4 \varphi_{A_1B}^{tr}}{\partial u_{i\beta}^{tr4}} \right)_{eq} \right]_{r=r_{1A_1}} = \\
 &= \gamma_{1A}^{tr} + \frac{1}{24} \frac{d^4 \varphi_{A_1B}^{tr}(r_{1A_1}^{tr})}{dr_{1A_1}^{tr4}} - \frac{1}{6r_{1A_1}^{tr}} \frac{d^3 \varphi_{A_1B}^{tr}(r_{1A_1}^{tr})}{dr_{1A_1}^{tr3}} + \frac{3}{4r_{1A_1}^{tr2}} \frac{d^2 \varphi_{A_1B}^{tr}(r_{1A_1}^{tr})}{dr_{1A_1}^{tr2}} - \frac{3}{4r_{1A_1}^{tr3}} \frac{d\varphi_{A_1B}^{tr}(r_{1A_1}^{tr})}{dr_{1A_1}^{tr}}, \quad (27)
 \end{aligned}$$

$$\gamma_{2A_1}^{tr} = \gamma_{2A}^{tr} + \frac{6}{48} \sum_i \left[\left(\frac{\partial^4 \varphi_{A_1B}^{tr}}{\partial u_{i\alpha}^{tr2} \partial u_{i\beta}^{tr2}} \right)_{eq} \right]_{r=r_{1A_1}} = \gamma_{2A}^{tr} + \frac{1}{4r_{1A_1}^{tr}} \frac{d^3 \varphi_{A_1B}^{tr}(r_{1A_1}^{tr})}{dr_{1A_1}^{tr3}}, \quad (28)$$

$$u_{0A_2}^{ir} = u_{0A}^{ir} + 6\varphi_{A_2B}^{ir}(r_{1A_2}^{ir}), \quad (29)$$

$$k_{A_2}^{ir} = k_A^{ir} + \frac{1}{2} \sum_i \left[\left(\frac{\partial^2 \varphi_{A_2B}^{ir}}{\partial u_{i\beta}^{ir2}} \right)_{eq} \right]_{r=r_{1A_2}} = k_A^{ir} + 2 \frac{d^2 \varphi_{A_2B}^{ir}(r_{1A_2}^{ir})}{dr_{1A_2}^{ir2}} + \frac{4}{r_{1A_2}^{ir}} \frac{d\varphi_{A_2B}^{ir}(r_{1A_2}^{ir})}{dr_{1A_2}^{ir}}, \quad (30)$$

$$\begin{aligned} \gamma_{1A_2}^{ir} = \gamma_{1A}^{ir} + \frac{1}{48} \sum_i \left[\left(\frac{\partial^4 \varphi_{A_2B}^{ir}}{\partial u_{i\beta}^{ir4}} \right)_{eq} \right]_{r=r_{1A_2}} &= \gamma_{1A}^{ir} + \frac{1}{24} \frac{d^4 \varphi_{A_2B}^{ir}(r_{1A_2}^{ir})}{dr_{1A_2}^{ir4}} + \frac{5}{12r_{1A_2}^{ir}} \frac{d^3 \varphi_{A_2B}^{ir}(r_{1A_2}^{ir})}{dr_{1A_2}^{ir3}} + \\ &\quad - \frac{1}{8r_{1A_2}^{ir2}} \frac{d^2 \varphi_{A_2B}^{ir}(r_{1A_2}^{ir})}{dr_{1A_2}^{ir2}} + \frac{1}{8r_{1A_2}^{ir3}} \frac{d\varphi_{A_2B}^{ir}(r_{1A_2}^{ir})}{dr_{1A_2}^{ir}}, \end{aligned} \quad (31)$$

$$\begin{aligned} \gamma_{2A_2}^{ir} = \gamma_{2A}^{ir} + \frac{6}{48} \sum_i \left[\left(\frac{\partial^4 \varphi_{A_2B}^{ir}}{\partial u_{i\alpha}^{ir2} \partial u_{i\beta}^{ir2}} \right)_{eq} \right]_{r=r_{1A_2}} &= \gamma_{2A}^{ir} + \frac{1}{8} \frac{d^4 \varphi_{A_2B}^{ir}(r_{1A_2}^{ir})}{dr_{1A_2}^{ir4}} + \\ &\quad + \frac{1}{4r_{1A_2}^{ir}} \frac{d^3 \varphi_{A_2B}^{ir}(r_{1A_2}^{ir})}{dr_{1A_2}^{ir3}} + \frac{3}{8r_{1A_2}^{ir2}} \frac{d^2 \varphi_{A_2B}^{ir}(r_{1A_2}^{ir})}{dr_{1A_2}^{ir2}} - \frac{3}{8r_{1A_2}^{ir3}} \frac{d\varphi_{A_2B}^{ir}(r_{1A_2}^{ir})}{dr_{1A_2}^{ir}}, \end{aligned} \quad (32)$$

$$u_{0A}^{ir} = 4\varphi_{AA}^{ir}(r_{1A}^{ir}) + 3\varphi_{AA}^{ir}(r_{2A}^{ir}), \quad r_{2A}^{ir} = \frac{2}{\sqrt{3}} r_{1A}^{ir}, \quad (33)$$

$$k_A^{ir} = \frac{4}{3} \frac{d^2 \varphi_{AA}^{ir}(r_{1A}^{ir})}{dr_{1A}^{ir2}} + \frac{8}{3r_{1A}^{ir}} \frac{d\varphi_{AA}^{ir}(r_{1A}^{ir})}{dr_{1A}^{ir}} + \frac{d^2 \varphi_{AA}^{ir}(r_{2A}^{ir})}{dr_{2A}^{ir2}} + \frac{2}{r_{2A}^{ir}} \frac{d\varphi_{AA}^{ir}(r_{2A}^{ir})}{dr_{2A}^{ir}}, \quad (34)$$

$$\begin{aligned} \gamma_{1A}^{ir} = \frac{1}{54} \frac{d^4 \varphi_{AA}^{ir}(r_{1A}^{ir})}{dr_{1A}^{ir4}} + \frac{2}{9r_{1A}^{ir}} \frac{d^3 \varphi_{AA}^{ir}(r_{1A}^{ir})}{dr_{1A}^{ir3}} - \frac{2}{9r_{1A}^{ir2}} \frac{d^2 \varphi_{AA}^{ir}(r_{1A}^{ir})}{dr_{1A}^{ir2}} + \frac{2}{9r_{1A}^{ir3}} \frac{d\varphi_{AA}^{ir}(r_{1A}^{ir})}{dr_{1A}^{ir}} + \\ + \frac{1}{24} \frac{d^4 \varphi_{AA}^{ir}(r_{2A}^{ir})}{dr_{2A}^{ir4}} + \frac{1}{4r_{2A}^{ir2}} \frac{d^2 \varphi_{AA}^{ir}(r_{2A}^{ir})}{dr_{2A}^{ir2}} - \frac{1}{4r_{2A}^{ir3}} \frac{d\varphi_{AA}^{ir}(r_{2A}^{ir})}{dr_{2A}^{ir}}, \end{aligned} \quad (35)$$

$$\gamma_{2A}^{ir} = \frac{1}{9} \frac{d^4 \varphi_{AA}^{ir}(r_{1A}^{ir})}{dr_{1A}^{ir4}} + \frac{2}{3r_{1A}^{ir2}} \frac{d^2 \varphi_{AA}^{ir}(r_{1A}^{ir})}{dr_{1A}^{ir2}} - \frac{2}{3r_{1A}^{ir3}} \frac{d\varphi_{AA}^{ir}(r_{1A}^{ir})}{dr_{1A}^{ir}} + \frac{1}{2r_{2A}^{ir}} \frac{d^3 \varphi_{AA}^{ir}(r_{2A}^{ir})}{dr_{2A}^{ir3}}. \quad (36)$$

trong đó φ^{ir} là thế tương tác giữa 2 nguyên tử, thuộc lớp trong, khoảng lân cận gần nhất r_{01X}^{ir} được xác định từ điều kiện cực tiểu của năng lượng liên kết u_{0X}^{ir} , n_i là số nguyên tử trên quả cầu phối vị thứ i , u_{0A}^{ir} , k_A^{ir} , γ_{1A}^{ir} , γ_{2A}^{ir} là năng lượng liên kết và các thông số tinh thể của kim loại sạch A trong phép gần đúng hai quả cầu phối vị.

Tương tự, trong phép gần đúng ba quả cầu phối vị đối với lớp sát ngoài (có sự khuyết hạt trên trục z ở quả cầu phối vị thứ hai) của màng,

$$u_{0B}^{ng1} = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{n_i} \varphi_{AB}^{ng1}(r_i) = \varphi_{AB}^{ng1}(r_{1B}^{ng1}) + 2\varphi_{AB}^{ng1}(r_{2B}^{ng1}), \quad r_{2B}^{ng1} = \sqrt{2}r_{1B}^{ng1}, \quad (37)$$

$$k_B^{ng1} = \frac{1}{2} \sum_i \left(\frac{\partial^2 \varphi_{AB}^{ng1}}{\partial u_{i\beta}^{ng12}} \right)_{eq} = \frac{1}{r_{1B}^{ng1}} \frac{d\varphi_{AB}^{ng1}(r_{1B}^{ng1})}{dr_{1B}^{ng1}} + \frac{d^2 \varphi_{AB}^{ng1}(r_{2B}^{ng1})}{dr_{2B}^{ng12}} + \frac{1}{r_{2B}^{ng1}} \frac{d\varphi_{AB}^{ng1}(r_{2B}^{ng1})}{dr_{2B}^{ng1}}, \quad (38)$$

$$\begin{aligned} \gamma_{1B}^{ng1} &= \frac{1}{48} \sum_i \left(\frac{\partial^4 \varphi_{AB}^{ng1}}{\partial u_{i\beta}^{ng14}} \right)_{eq} = \frac{1}{8r_{1B}^{ng12}} \frac{d^2 \varphi_{AB}^{ng1}(r_{1B}^{ng1})}{dr_{1B}^{ng12}} - \frac{1}{8r_{1B}^{ng13}} \frac{d\varphi_{AB}^{ng1}(r_{1B}^{ng1})}{dr_{1B}^{ng13}} + \frac{1}{48} \frac{d^4 \varphi_{AB}^{ng1}(r_{2B}^{ng1})}{dr_{2B}^{ng14}} + \\ &+ \frac{1}{8r_{2B}^{ng1}} \frac{d^3 \varphi_{AB}^{ng1}(r_{2B}^{ng1})}{dr_{2B}^{ng13}} - \frac{3}{16r_{2B}^{ng12}} \frac{d^2 \varphi_{AB}^{ng1}(r_{2B}^{ng1})}{dr_{2B}^{ng12}} + \frac{3}{16r_{2B}^{ng13}} \frac{d\varphi_{AB}^{ng1}(r_{2B}^{ng1})}{dr_{2B}^{ng13}}, \end{aligned} \quad (39)$$

$$\begin{aligned} \gamma_{2B}^{ng1} &= \frac{6}{48} \sum_i \left(\frac{\partial^4 \varphi_{AB}^{ng1}}{\partial u_{i\alpha}^{ng12} \partial u_{i\beta}^{ng12}} \right)_{eq} = \frac{1}{4r_{1B}^{ng1}} \frac{d^3 \varphi_{AB}^{ng1}(r_{1B}^{ng1})}{dr_{1B}^{ng13}} - \frac{1}{2r_{1B}^{ng12}} \frac{d^2 \varphi_{AB}^{ng1}(r_{1B}^{ng1})}{dr_{1B}^{ng12}} + \frac{1}{2r_{1B}^{ng13}} \frac{d\varphi_{AB}^{ng1}(r_{1B}^{ng1})}{dr_{1B}^{ng13}} + \\ &+ \frac{1}{4r_{2B}^{ng1}} \frac{d^3 \varphi_{AB}^{ng1}(r_{2B}^{ng1})}{dr_{2B}^{ng13}} - \frac{1}{4r_{2B}^{ng12}} \frac{d^2 \varphi_{AB}^{ng1}(r_{2B}^{ng1})}{dr_{2B}^{ng12}} + \frac{1}{4r_{2B}^{ng13}} \frac{d\varphi_{AB}^{ng1}(r_{2B}^{ng1})}{dr_{2B}^{ng13}}, \end{aligned} \quad (40)$$

$$u_{0A_1}^{ng1} = u_{0A}^{ng1} + 2\varphi_{A_1B}^{ng1}(r_{1A_1}^{ng1}), \quad (41)$$

$$k_{A_1}^{ng1} = k_A^{ng1} + \frac{1}{2} \sum_i \left[\left(\frac{\partial^2 \varphi_{A_1B}^{ng1}}{\partial u_{i\beta}^{ng12}} \right)_{eq} \right]_{r=r_{1A_1}} = k_A^{ng1} + \frac{d^2 \varphi_{A_1B}^{ng1}(r_{1A_1}^{ng1})}{dr_{1A_1}^{ng12}} + \frac{1}{r_{1A_1}^{ng1}} \frac{d\varphi_{A_1B}^{ng1}(r_{1A_1}^{ng1})}{dr_{1A_1}^{ng1}}, \quad (42)$$

$$\begin{aligned} \gamma_{1A_1}^{ng1} &= \gamma_{1A}^{ng1} + \frac{1}{48} \sum_i \left[\left(\frac{\partial^4 \varphi_{A_1B}^{ng1}}{\partial u_{i\beta}^{ng14}} \right)_{eq} \right]_{r=r_{1A_1}} = \\ &= \gamma_{1A}^{ng1} + \frac{1}{24} \frac{d^4 \varphi_{A_1B}^{ng1}(r_{1A_1}^{ng1})}{dr_{1A_1}^{ng14}} - \frac{1}{6r_{1A_1}^{ng1}} \frac{d^3 \varphi_{A_1B}^{ng1}(r_{1A_1}^{ng1})}{dr_{1A_1}^{ng13}} + \frac{5}{8r_{1A_1}^{ng12}} \frac{d^2 \varphi_{A_1B}^{ng1}(r_{1A_1}^{ng1})}{dr_{1A_1}^{ng12}} - \frac{5}{8r_{1A_1}^{ng13}} \frac{d\varphi_{A_1B}^{ng1}(r_{1A_1}^{ng1})}{dr_{1A_1}^{ng13}}, \end{aligned} \quad (43)$$

$$\begin{aligned} \gamma_{2A_1}^{ng1} &= \gamma_{2A}^{ng1} + \frac{6}{48} \sum_i \left[\left(\frac{\partial^4 \varphi_{A_1B}^{ng1}}{\partial u_{i\alpha}^{ng12} \partial u_{i\beta}^{ng12}} \right)_{eq} \right]_{r=r_{1A_1}} = \gamma_{2A}^{ng1} + \frac{1}{4r_{1A_1}^{ng1}} \frac{d^3 \varphi_{A_1B}^{ng1}(r_{1A_1}^{ng1})}{dr_{1A_1}^{ng13}} - \\ &- \frac{1}{4r_{1A_1}^{ng12}} \frac{d^2 \varphi_{A_1B}^{ng1}(r_{1A_1}^{ng1})}{dr_{1A_1}^{ng12}} + \frac{1}{4r_{1A_1}^{ng13}} \frac{d\varphi_{A_1B}^{ng1}(r_{1A_1}^{ng1})}{dr_{1A_1}^{ng13}}, \end{aligned} \quad (44)$$

$$u_{0A_2}^{ng1} = u_{0A}^{ng1} + 6\varphi_{A_2B}^{ng1}(r_{1A_2}^{ng1}), \quad (45)$$

$$k_{A_2}^{ng1} = k_A^{ng1} + \frac{1}{2} \sum_i \left[\left(\frac{\partial^2 \varphi_{A_2B}^{ng1}}{\partial u_{i\beta}^{ng12}} \right)_{eq} \right]_{r=r_{1A_2}} = k_A^{ng1} + 2 \frac{d^2 \varphi_{A_2B}^{ng1}(r_{1A_2}^{ng1})}{dr_{1A_2}^{ng12}} + \frac{4}{r_{1A_2}^{ng1}} \frac{d\varphi_{A_2B}^{ng1}(r_{1A_2}^{ng1})}{dr_{1A_2}^{ng1}}, \quad (46)$$

$$\begin{aligned} \gamma_{1A_2}^{ng1} &= \gamma_{1A}^{ng1} + \frac{1}{48} \sum_i \left[\left(\frac{\partial^4 \varphi_{A_2B}^{ng1}}{\partial u_{i\beta}^{ng14}} \right)_{eq} \right]_{r=r_{1A_2}} = \gamma_{1A}^{ng1} + \frac{1}{24} \frac{d^4 \varphi_{A_2B}^{ng1}(r_{1A_2}^{ng1})}{dr_{1A_2}^{ng14}} + \frac{5}{12r_{1A_2}^{ng1}} \frac{d^3 \varphi_{A_2B}^{ng1}(r_{1A_2}^{ng1})}{dr_{1A_2}^{ng13}} + \\ &- \frac{1}{8r_{1A_2}^{ng12}} \frac{d^2 \varphi_{A_2B}^{ng1}(r_{1A_2}^{ng1})}{dr_{1A_2}^{ng12}} + \frac{1}{8r_{1A_2}^{ng13}} \frac{d\varphi_{A_2B}^{ng1}(r_{1A_2}^{ng1})}{dr_{1A_2}^{ng13}}, \end{aligned} \quad (47)$$

$$\gamma_{2A_2}^{ng1} = \gamma_{2A}^{ng1} + \frac{6}{48} \sum_i \left[\left(\frac{\partial^4 \varphi_{A_2B}^{ng1}}{\partial u_{i\alpha}^{ng12} \partial u_{i\beta}^{ng12}} \right)_{eq} \right]_{r=r_{1A_2}} = \gamma_{2A}^{ng1} + \frac{1}{8} \frac{d^4 \varphi_{A_2B}^{ng1}(r_{1A_2}^{ng1})}{dr_{1A_2}^{ng14}} +$$

$$+ \frac{1}{4r_{1A_2}^{ng1}} \frac{d^3 \varphi_{A_2B}^{ng1}(r_{1A_2}^{ng1})}{dr_{1A_2}^{ng13}} + \frac{3}{8r_{1A_2}^{ng12}} \frac{d^2 \varphi_{A_2B}^{ng1}(r_{1A_2}^{ng1})}{dr_{1A_2}^{ng12}} - \frac{3}{8r_{1A_2}^{ng13}} \frac{d\varphi_{A_2B}^{ng1}(r_{1A_2}^{ng1})}{dr_{1A_2}^{ng1}}, \quad (48)$$

$$u_{0A}^{ng1} = 4\varphi_{AA}^{ng1}(r_{1A}^{ng1}) + 3\varphi_{AA}^{ng1}(r_{2A}^{ng1}), \quad r_{2A}^{ng1} = \frac{2}{\sqrt{3}} r_{1A}^{ng1}, \quad (49)$$

$$k_A^{ng1} = \frac{4}{3} \frac{d^2 \varphi_{AA}^{ng1}(r_{1A}^{ng1})}{dr_{1A}^{ng12}} + \frac{8}{3r_{1A}^{ng1}} \frac{d\varphi_{AA}^{ng1}(r_{1A}^{ng1})}{dr_{1A}^{ng1}} + \frac{d^2 \varphi_{AA}^{ng1}(r_{2A}^{ng1})}{dr_{2A}^{ng12}} + \frac{2}{r_{2A}^{ng1}} \frac{d\varphi_{AA}^{ng1}(r_{2A}^{ng1})}{dr_{2A}^{ng1}}, \quad (50)$$

$$\begin{aligned} \gamma_{1A}^{ng1} = & \frac{1}{54} \frac{d^4 \varphi_{AA}^{ng1}(r_{1A}^{ng1})}{dr_{1A}^{ng14}} + \frac{2}{9r_{1A}^{ng1}} \frac{d^3 \varphi_{AA}^{ng1}(r_{1A}^{ng1})}{dr_{1A}^{ng13}} - \frac{2}{9r_{1A}^{ng12}} \frac{d^2 \varphi_{AA}^{ng1}(r_{1A}^{ng1})}{dr_{1A}^{ng12}} + \frac{2}{9r_{1A}^{ng13}} \frac{d\varphi_{AA}^{ng1}(r_{1A}^{ng1})}{dr_{1A}^{ng1}} + \\ & + \frac{1}{24} \frac{d^4 \varphi_{AA}^{ng1}(r_{2A}^{ng1})}{dr_{2A}^{ng14}} + \frac{1}{4r_{2A}^{ng12}} \frac{d^2 \varphi_{AA}^{ng1}(r_{2A}^{ng1})}{dr_{2A}^{ng12}} - \frac{1}{4r_{2A}^{ng13}} \frac{d\varphi_{AA}^{ng1}(r_{2A}^{ng1})}{dr_{2A}^{ng1}}, \end{aligned} \quad (51)$$

$$\gamma_{2A}^{ng1} = \frac{1}{9} \frac{d^4 \varphi_{AA}^{ng1}(r_{1A}^{ng1})}{dr_{1A}^{ng14}} + \frac{2}{3r_{1A}^{ng12}} \frac{d^2 \varphi_{AA}^{ng1}(r_{1A}^{ng1})}{dr_{1A}^{ng12}} - \frac{2}{3r_{1A}^{ng13}} \frac{d\varphi_{AA}^{ng1}(r_{1A}^{ng1})}{dr_{1A}^{ng1}} + \frac{1}{2r_{2A}^{ng1}} \frac{d^3 \varphi_{AA}^{ng1}(r_{2A}^{ng1})}{dr_{2A}^{ng13}}. \quad (52)$$

Tương tự, trong phép gần đúng ba quả cầu phối vị đối với lớp ngoài (bỏ đi 1 nguyên tử trên quả cầu phối vị thứ 2 khi tính năng lượng liên kết và các thông số tinh thể của nguyên tử B và bỏ đi 1 nguyên tử trên quả cầu phối vị thứ 3 khi tính năng lượng liên kết và các thông số tinh thể của nguyên tử A₁ và A₂) của màng,

$$u_{0B}^{ng} = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{n_i} \varphi_{AB}^{ng}(r_i) = \varphi_{AB}^{ng}(r_{1B}^{ng}) + \frac{3}{2} \varphi_{AB}^{ng}(r_{2B}^{ng}), \quad r_{2B}^{ng} = \sqrt{2} r_{1B}^{ng}, \quad (53)$$

$$k_B^{ng} = \frac{1}{2} \sum_i \left(\frac{\partial^2 \varphi_{AB}^{ng}}{\partial u_{i\beta}^{ng2}} \right)_{eq} = \frac{1}{r_{1B}^{ng}} \frac{d\varphi_{AB}^{ng}(r_{1B}^{ng})}{dr_{1B}^{ng}} + \frac{3}{4} \frac{d^2 \varphi_{AB}^{ng}(r_{2B}^{ng})}{dr_{2B}^{ng2}} + \frac{3}{4r_{2B}^{ng}} \frac{d\varphi_{AB}^{ng}(r_{2B}^{ng})}{dr_{2B}^{ng}}, \quad (54)$$

$$\begin{aligned} \gamma_{1B}^{ng} = & \frac{1}{48} \sum_i \left(\frac{\partial^4 \varphi_{AB}^{ng}}{\partial u_{i\beta}^{ng4}} \right)_{eq} = \frac{1}{8r_{1B}^{ng2}} \frac{d^2 \varphi_{AB}^{ng}(r_{1B}^{ng})}{dr_{1B}^{ng2}} - \frac{1}{8r_{1B}^{ng3}} \frac{d\varphi_{AB}^{ng}(r_{1B}^{ng})}{dr_{1B}^{ng}} + \frac{1}{64} \frac{d^4 \varphi_{AB}^{ng}(r_{2B}^{ng})}{dr_{2B}^{ng4}} + \\ & + \frac{3}{32r_{2B}^{ng}} \frac{d^3 \varphi_{AB}^{ng}(r_{2B}^{ng})}{dr_{2B}^{ng3}} - \frac{9}{64r_{2B}^{ng2}} \frac{d^2 \varphi_{AB}^{ng}(r_{2B}^{ng})}{dr_{2B}^{ng2}} + \frac{9}{64r_{2B}^{ng3}} \frac{d\varphi_{AB}^{ng}(r_{2B}^{ng})}{dr_{2B}^{ng}}, \end{aligned} \quad (55)$$

$$\begin{aligned} \gamma_{2B}^{ng} = & \frac{6}{48} \sum_i \left(\frac{\partial^4 \varphi_{AB}^{ng}}{\partial u_{i\alpha}^{ng2} \partial u_{i\beta}^{ng2}} \right)_{eq} = \frac{1}{4r_{1B}^{ng}} \frac{d^3 \varphi_{AB}^{ng}(r_{1B}^{ng})}{dr_{1B}^{ng3}} - \frac{1}{2r_{1B}^{ng2}} \frac{d^2 \varphi_{AB}^{ng}(r_{1B}^{ng})}{dr_{1B}^{ng2}} + \frac{1}{2r_{1B}^{ng3}} \frac{d\varphi_{AB}^{ng}(r_{1B}^{ng})}{dr_{1B}^{ng}} + \\ & + \frac{3}{16r_{2B}^{ng}} \frac{d^3 \varphi_{AB}^{ng}(r_{2B}^{ng})}{dr_{2B}^{ng3}} - \frac{3}{16r_{2B}^{ng2}} \frac{d^2 \varphi_{AB}^{ng}(r_{2B}^{ng})}{dr_{2B}^{ng2}} + \frac{3}{16r_{2B}^{ng3}} \frac{d\varphi_{AB}^{ng}(r_{2B}^{ng})}{dr_{2B}^{ng}}, \end{aligned} \quad (56)$$

$$u_{0A_i}^{ng} = u_{0A}^{ng} + \frac{5}{2} \varphi_{A_iB}^{ng}(r_{1A_i}^{ng}), \quad (57)$$

$$k_{A_i}^{ng} = k_A^{ng} + \frac{1}{2} \sum_i \left[\left(\frac{\partial^2 \varphi_{A_iB}^{ng}}{\partial u_{i\beta}^{ng2}} \right)_{eq} \right]_{r=r_{1A_i}^{ng}} = k_A^{ng} + \frac{d^2 \varphi_{A_iB}^{ng}(r_{1A_i}^{ng})}{dr_{1A_i}^{ng2}} + \frac{3}{2r_{1A_i}^{ng}} \frac{d\varphi_{A_iB}^{ng}(r_{1A_i}^{ng})}{dr_{1A_i}^{ng}}, \quad (58)$$

$$\begin{aligned} \gamma_{1A_1}^{ng} &= \gamma_{1A}^{ng} + \frac{1}{48} \sum_i \left[\left(\frac{\partial^4 \varphi_{A_1 B}^{ng}}{\partial u_{i\beta}^{ng4}} \right)_{eq} \right]_{r=r_{1A_1}} = \\ &= \gamma_{1A}^{ng} + \frac{1}{24} \frac{d^4 \varphi_{A_1 B}^{ng}(r_{1A_1}^{ng})}{dr_{1A_1}^{ng4}} - \frac{1}{6r_{1A_1}^{ng}} \frac{d^3 \varphi_{A_1 B}^{ng}(r_{1A_1}^{ng})}{dr_{1A_1}^{ng3}} + \frac{11}{16r_{1A_1}^{ng2}} \frac{d^2 \varphi_{A_1 B}^{ng}(r_{1A_1}^{ng})}{dr_{1A_1}^{ng2}} - \frac{11}{16r_{1A_1}^{ng3}} \frac{d\varphi_{A_1 B}^{ng}(r_{1A_1}^{ng})}{dr_{1A_1}^{ng}}, \end{aligned} \quad (59)$$

$$\begin{aligned} \gamma_{2A_1}^{ng} &= \gamma_{2A}^{ng} + \frac{6}{48} \sum_i \left[\left(\frac{\partial^4 \varphi_{A_1 B}^{ng}}{\partial u_{i\alpha}^{ng2} \partial u_{i\beta}^{ng2}} \right)_{eq} \right]_{r=r_{1A_1}} = \gamma_{2A}^{ng} + \frac{1}{4r_{1A_1}^{ng}} \frac{d^3 \varphi_{A_1 B}^{ng}(r_{1A_1}^{ng})}{dr_{1A_1}^{ng3}} - \\ &- \frac{1}{8r_{1A_1}^{ng2}} \frac{d^2 \varphi_{A_1 B}^{ng}(r_{1A_1}^{ng})}{dr_{1A_1}^{ng2}} + \frac{1}{8r_{1A_1}^{ng3}} \frac{d\varphi_{A_1 B}^{ng}(r_{1A_1}^{ng})}{dr_{1A_1}^{ng}}, \end{aligned} \quad (60)$$

$$u_{0A_2}^{ng} = u_{0A}^{ng} + \frac{11}{2} \varphi_{A_2 B}^{ng}(r_{1A_2}^{ng}), \quad (61)$$

$$k_{A_2}^{ng} = k_A^{ng} + \frac{1}{2} \sum_i \left[\left(\frac{\partial^2 \varphi_{A_2 B}^{ng}}{\partial u_{i\beta}^{ng2}} \right)_{eq} \right]_{r=r_{1A_2}} = k_A^{ng} + 2 \frac{d^2 \varphi_{A_2 B}^{ng}(r_{1A_2}^{ng})}{dr_{1A_2}^{ng2}} + \frac{7}{2r_{1A_2}^{ng}} \frac{d\varphi_{A_2 B}^{ng}(r_{1A_2}^{ng})}{dr_{1A_2}^{ng}}, \quad (62)$$

$$\begin{aligned} \gamma_{1A_2}^{ng} &= \gamma_{1A}^{ng} + \frac{1}{48} \sum_i \left[\left(\frac{\partial^4 \varphi_{A_2 B}^{ng}}{\partial u_{i\beta}^{ng4}} \right)_{eq} \right]_{r=r_{1A_2}} = \gamma_{1A}^{ng} + \frac{1}{24} \frac{d^4 \varphi_{A_2 B}^{ng}(r_{1A_2}^{ng})}{dr_{1A_2}^{ng4}} + \frac{5}{12r_{1A_2}^{ng}} \frac{d^3 \varphi_{A_2 B}^{ng}(r_{1A_2}^{ng})}{dr_{1A_2}^{ng3}} + \\ &- \frac{3}{16r_{1A_2}^{ng2}} \frac{d^2 \varphi_{A_2 B}^{ng}(r_{1A_2}^{ng})}{dr_{1A_2}^{ng2}} + \frac{3}{16r_{1A_2}^{ng3}} \frac{d\varphi_{A_2 B}^{ng}(r_{1A_2}^{ng})}{dr_{1A_2}^{ng1}}, \end{aligned} \quad (63)$$

$$\begin{aligned} \gamma_{2A_2}^{ng1} &= \gamma_{2A}^{ng1} + \frac{6}{48} \sum_i \left[\left(\frac{\partial^4 \varphi_{A_2 B}^{ng1}}{\partial u_{i\alpha}^{ng12} \partial u_{i\beta}^{ng12}} \right)_{eq} \right]_{r=r_{1A_2}} = \gamma_{2A}^{ng1} + \frac{1}{8} \frac{d^4 \varphi_{A_2 B}^{ng1}(r_{1A_2}^{ng1})}{dr_{1A_2}^{ng14}} + \\ &+ \frac{3}{16r_{1A_2}^{ng}} \frac{d^3 \varphi_{A_2 B}^{ng}(r_{1A_2}^{ng})}{dr_{1A_2}^{ng3}} + \frac{7}{16r_{1A_2}^{ng2}} \frac{d^2 \varphi_{A_2 B}^{ng}(r_{1A_2}^{ng})}{dr_{1A_2}^{ng2}} - \frac{7}{16r_{1A_2}^{ng3}} \frac{d\varphi_{A_2 B}^{ng}(r_{1A_2}^{ng})}{dr_{1A_2}^{ng}}, \end{aligned} \quad (64)$$

$$u_{0A}^{ng} = 4\varphi_{AA}^{ng}(r_{1A}^{ng}) + 3\varphi_{AA}^{ng}(r_{2A}^{ng}), \quad r_{2A}^{ng} = \frac{2}{\sqrt{3}} r_{1A}^{ng}, \quad (65)$$

$$k_A^{ng} = \frac{4}{3} \frac{d^2 \varphi_{AA}^{ng}(r_{1A}^{ng})}{dr_{1A}^{ng2}} + \frac{8}{3r_{1A}^{ng}} \frac{d\varphi_{AA}^{ng}(r_{1A}^{ng})}{dr_{1A}^{ng}} + \frac{d^2 \varphi_{AA}^{ng}(r_{2A}^{ng})}{dr_{2A}^{ng2}} + \frac{2}{r_{2A}^{ng}} \frac{d\varphi_{AA}^{ng}(r_{2A}^{ng})}{dr_{2A}^{ng}}, \quad (66)$$

$$\begin{aligned} \gamma_{1A}^{ng} &= \frac{1}{54} \frac{d^4 \varphi_{AA}^{ng}(r_{1A}^{ng})}{dr_{1A}^{ng4}} + \frac{2}{9r_{1A}^{ng}} \frac{d^3 \varphi_{AA}^{ng}(r_{1A}^{ng})}{dr_{1A}^{ng3}} - \frac{2}{9r_{1A}^{ng2}} \frac{d^2 \varphi_{AA}^{ng}(r_{1A}^{ng})}{dr_{1A}^{ng2}} + \frac{2}{9r_{1A}^{ng3}} \frac{d\varphi_{AA}^{ng}(r_{1A}^{ng})}{dr_{1A}^{ng}} + \\ &+ \frac{1}{24} \frac{d^4 \varphi_{AA}^{ng}(r_{2A}^{ng})}{dr_{2A}^{ng4}} + \frac{1}{4r_{2A}^{ng2}} \frac{d^2 \varphi_{AA}^{ng}(r_{2A}^{ng})}{dr_{2A}^{ng2}} - \frac{1}{4r_{2A}^{ng3}} \frac{d\varphi_{AA}^{ng}(r_{2A}^{ng})}{dr_{2A}^{ng}}, \end{aligned} \quad (67)$$

$$\gamma_{2A}^{ng} = \frac{1}{9} \frac{d^4 \varphi_{AA}^{ng}(r_{1A}^{ng})}{dr_{1A}^{ng4}} + \frac{2}{3r_{1A}^{ng2}} \frac{d^2 \varphi_{AA}^{ng}(r_{1A}^{ng})}{dr_{1A}^{ng2}} - \frac{2}{3r_{1A}^{ng3}} \frac{d\varphi_{AA}^{ng}(r_{1A}^{ng})}{dr_{1A}^{ng}} + \frac{1}{2r_{2A}^{ng}} \frac{d^3 \varphi_{AA}^{ng}(r_{2A}^{ng})}{dr_{2A}^{ng3}}. \quad (68)$$

Đối với nguyên tử X trong tất cả các lớp

$$\gamma_X = 4(\gamma_{1X} + \gamma_{2X}). \quad (69)$$

Môđun nén khối của màng mỏng hợp kim AB bằng [2,21]

$$K_{AB} = \frac{E_{AB}}{3(1-2\nu_{AB})}, \quad (70)$$

trong đó [2, 21]

$$\nu_{AB} = c_A \nu_A + c_B \nu_B \approx \nu_A, \quad (71)$$

ν_{AB} là tỉ số Poisson của màng hợp kim AB, ν_A , ν_B là tỉ số Poisson của các vật liệu A và B. Do $c_B \ll c_A$ nên $\nu_{AB} \approx \nu_A$. Môđun trượt của màng mỏng hợp kim AB được cho bởi [2, 21]

$$G_{AB} = \frac{E_{AB}}{2(1+\nu_{AB})}. \quad (72)$$

Các hằng số đàn hồi của màng mỏng hợp kim AB được xác định bởi [2, 21]

$$C_{11AB} = \frac{E_{AB}(1-\nu_{AB})}{(1+\nu_{AB})(1-2\nu_{AB})}, \quad C_{12AB} = \frac{E_{AB}\nu_{AB}}{(1+\nu_{AB})(1-2\nu_{AB})}, \quad C_{44AB} = \frac{E_{AB}}{2(1+\nu_{AB})}, \quad (73)$$

Vận tốc truyền sóng dọc V_{ABd} và vận tốc truyền sóng ngang V_{ABn} trong màng mỏng hợp kim AB tương ứng được cho bởi [2, 21]

$$V_{ABd} = \sqrt{\frac{2C_{44AB} + C_{12AB}}{\rho_{AB}}}, \quad V_{ABn} = \sqrt{\frac{C_{44AB}}{\rho_{AB}}}, \quad (74)$$

trong đó $\rho_{AB} = \frac{m_{AB}}{V_{AB}} \approx \rho_A$, $V_{AB} = N V_{AB}$, ρ_{AB} là khối lượng riêng của hợp kim AB, ρ_A là khối lượng riêng của kim loại chính A, V_{AB} là thể tích của hợp kim AB và các hằng số đàn hồi C_{12AB} , C_{44AB} được cho bởi biểu thức (74).

Cách chia màng mỏng hợp kim thành lớp ngoài, lớp sát ngoài và lớp trong giống như đã làm đối với màng mỏng kim loại [17-19]. Cách tính khoảng lân cận gần nhất r_{1X} giữa 2 nguyên tử X ở áp suất P và nhiệt độ T trong cả 3 lớp của màng hợp kim theo các công thức (1), (2) giống như đã làm đối với hợp kim khối [2]. Cách xác định độ dời $y_X(P, T)$ của nguyên tử X ở áp suất P và nhiệt độ T từ vị trí cân bằng đối với lớp sát ngoài và lớp trong của màng hợp kim theo công thức (3) giống như đã làm đối với hợp kim khối [2] và đối với lớp ngoài của màng hợp kim theo công thức (4) giống như đã làm đối với màng kim loại [17]. Các công thức (7)-(9) đối với năng lượng tự do của các lớp là sự kết hợp các công thức của hợp kim khối [2] và màng kim loại [17]. Các công thức từ (10) đến (19) trích dẫn các công thức đối với màng kim loại [17]. Công thức (20) là sự kết hợp công thức của hợp kim khối [2] và màng kim loại [17]. Cách tính các thông số tinh thể của lớp trong theo các công thức từ (21) đến (36) giống như đối với hợp kim khối [2].

Cách tính các thông số tinh thể của lớp ngoài và lớp sát ngoài theo các công thức từ (37) đến (69) là sự kết hợp công thức của hợp kim khối [2] và màng kim loại [17]. Các công thức từ (70) đến (74) đối với màng hợp kim giống như các công thức của hợp kim khối [2].

Khi bề dày đủ lớn, năng lượng tự do của màng mỏng chỉ có đóng góp của năng lượng tự do của lớp trong và trở thành năng lượng tự do của vật liệu khối.

Khi nồng độ nguyên tử xen kẽ bằng không, các đại lượng biến dạng đàn hồi, các vận tốc truyền sóng dọc và sóng ngang trong màng mỏng hợp kim AB trở thành các đại lượng biến dạng đàn hồi, các vận tốc truyền sóng dọc và sóng ngang trong kim loại sạch A.

Để nghiên cứu tương tác giữa các nguyên tử W-W, Si-Si, ta áp dụng thế tương tác cặp Mie-Lennard-Jones $n-m$ như sau

$$\varphi(r) = \frac{D}{n-m} \left[m \left(\frac{r_0}{r} \right)^n - n \left(\frac{r_0}{r} \right)^m \right], \quad (75)$$

trong đó các thông số thế D , r_0 , m và n được cho trong Bảng 1.

Bảng 1. Các thông số thế D , r_0 , m và n đối với các tương tác W-W, Si-Si

Tương tác	m	n	$D(10^{-16}\text{erg})$	$r_0(10^{-10}\text{m})$
W-W[22]	6,5	10,5	15564,744	2,7365
Si-Si [23]	6	12	45128,24	2,295

Các kết quả tính số biến dạng đàn hồi và vận tốc sóng đàn hồi của màng mỏng W và WSi được tổng kết trong các bảng từ Bảng 2 đến Bảng 9 và được minh họa trên các hình vẽ từ Hình 1 đến Hình 4.

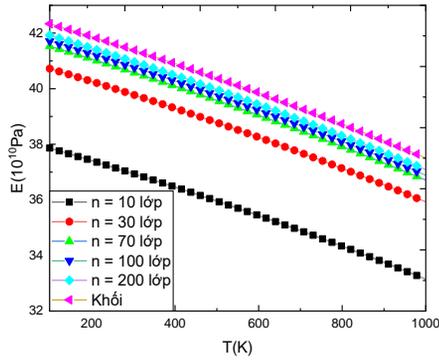
Sự phụ thuộc nhiệt độ và số lớp của môđun Young đối với W tại $P = 0$ tính bởi SMM được biểu diễn trên Hình 1. Sự phụ thuộc nhiệt độ và số lớp của môđun Young đối với WSi tại $c_{\text{Si}} = 5\%$, $P = 0$ tính bởi SMM được biểu diễn trên Hình 2. Sự phụ thuộc áp suất và số lớp của môđun Young đối với W tại $T = 300\text{K}$ tính bởi SMM được biểu diễn trên Hình 3. Sự phụ thuộc áp suất và số lớp của môđun Young đối với WSi tại $c_{\text{Si}} = 5\%$, $T = 300\text{K}$ tính bởi SMM được biểu diễn trên Hình 4.

Sự phụ thuộc nồng độ Si và số lớp của khoảng lân cận gần nhất và khoảng lân cận gần trung bình a , các môđun đàn hồi E , K , G và các hằng số đàn hồi C_{11} , C_{12} , C_{44} , vận tốc dọc V_d và vận tốc ngang V_n đối với màng W và WSi tại $P = 0$, $T = 300\text{K}$ tính bởi SMM được tổng kết trong Bảng 2, trong đó có kết quả đối với vật liệu khối để so sánh.

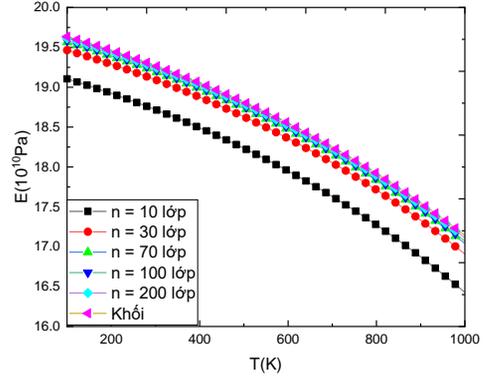
Sự phụ thuộc nhiệt độ và số lớp của vận tốc dọc và vận tốc ngang đối với màng W tại $P = 0$ tính bởi SMM được tổng kết trong Bảng 3, trong đó có kết quả đối với vật liệu khối để so sánh.

Sự phụ thuộc nhiệt độ và số lớp của vận tốc dọc và vận tốc ngang đối với màng WSi tại $c_{\text{Si}} = 5\%$, $P = 0$ tính bởi SMM được tổng kết trong Bảng 4, trong đó có kết quả đối với vật liệu khối để so sánh.

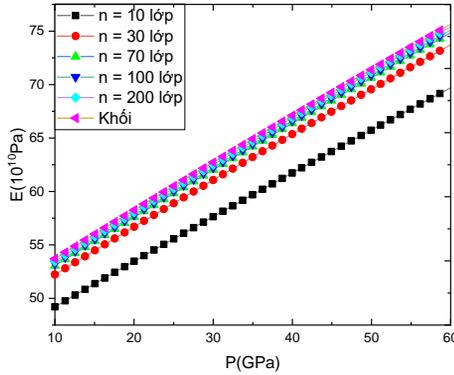
Sự phụ thuộc áp suất và số lớp của vận tốc dọc và vận tốc ngang đối với màng W tại $T = 300\text{K}$ tính bởi SMM được tổng kết trong Bảng 5, trong đó có kết quả đối với vật liệu khối để so sánh.



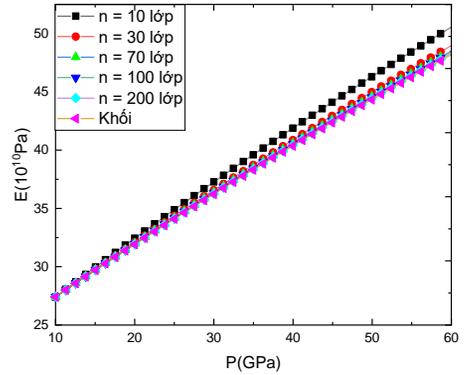
Hình 1. $E(T, n^*)$ đối với W tại $P = 0$ tính bởi SMM



Hình 2. $E(T, n^*)$ đối với W_{Si} tại $c_{Si} = 5\%$, $P = 0$ tính bởi SMM



Hình 3. $E(P, n^*)$ đối với W tại $T = 300$ K tính bởi SMM



Hình 4. $E(P, n^*)$ đối với W_{Si} tại $c_{Si} = 5\%$, $T = 300$ K tính bởi SMM

Bảng 2. $a(c_{Si}, n^*)$, $E(c_{Si}, n^*)$, $K(c_{Si}, n^*)$, $G(c_{Si}, n^*)$, $C_{11}(c_{Si}, n^*)$, $C_{12}(c_{Si}, n^*)$, $C_{44}(c_{Si}, n^*)$, $V_d(c_{Si}, n^*)$, và $V_n(c_{Si}, n^*)$ đối với màng W và W_{Si} tại $P = 0$, $T = 300$ K tính bởi SMM

Số lớp	c_{Si} (%)	0	1	3	5
		$a(10^{-10}m)$	2,642	2,658	2,690
10	$E(10^{10}Pa)$	38,76	33,91	25,81	19,47
	$G(10^{10}Pa)$	29,36	25,88	19,99	15,31
	$K(10^{10}Pa)$	15,14	13,23	10,05	7,56
	$C_{11}(10^{10}Pa)$	4,96	4,35	3,34	2,54
	$C_{12}(10^{10}Pa)$	1,93	1,71	1,33	1,03

	$C_{44}(10^{10}\text{Pa})$	1,51	1,32	1,00	0,76
	$V_n(10^5\text{cm/s})$	4,69	4,39	3,85	3,35
	$V_d(10^5\text{cm/s})$	2,59	2,42	2,11	1,83
	$a(10^{-10}\text{m})$	2,647	2,663	2,696	2,728
30	$E(10^{10}\text{Pa})$	40,39	35,03	26,17	19,35
	$G(10^{10}\text{Pa})$	30,60	26,73	20,27	15,21
	$K(10^{10}\text{Pa})$	15,78	13,67	10,19	7,51
	$C_{11}(10^{10}\text{Pa})$	5,16	4,50	3,39	2,52
	$C_{12}(10^{10}\text{Pa})$	2,01	1,76	1,35	1,02
	$C_{44}(10^{10}\text{Pa})$	1,58	1,37	1,02	0,75
	$V_n(10^5\text{cm/s})$	4,78	4,46	3,87	3,34
	$V_d(10^5\text{cm/s})$	2,64	2,46	2,12	1,82
	$a(10^{-10}\text{m})$	2,649	2,665	2,697	2,730
70	$E(10^{10}\text{Pa})$	40,85	35,34	26,28	19,32
	$G(10^{10}\text{Pa})$	30,95	26,97	20,35	15,18
	$K(10^{10}\text{Pa})$	15,96	13,79	10,23	7,50
	$C_{11}(10^{10}\text{Pa})$	5,22	4,54	3,40	2,52
	$C_{12}(10^{10}\text{Pa})$	2,03	1,78	1,35	1,02
	$C_{44}(10^{10}\text{Pa})$	1,60	1,38	1,02	0,75
	$V_n(10^5\text{cm/s})$	4,81	4,48	3,88	3,34
	$V_d(10^5\text{cm/s})$	2,66	2,47	2,13	1,82
	$a(10^{-10}\text{m})$	2,649	2,665	2,698	2,730
100	$E(10^{10}\text{Pa})$	40,95	35,41	26,30	19,31
	$G(10^{10}\text{Pa})$	31,02	27,03	20,37	15,18
	$K(10^{10}\text{Pa})$	16,00	13,82	10,23	7,50
	$C_{11}(10^{10}\text{Pa})$	5,24	4,54	3,40	2,52
	$C_{12}(10^{10}\text{Pa})$	2,04	1,78	1,35	1,02
	$C_{44}(10^{10}\text{Pa})$	1,60	1,38	1,02	0,75
	$V_n(10^5\text{cm/s})$	4,82	4,49	3,88	3,34
	$V_d(10^5\text{cm/s})$	2,66	2,47	2,13	1,82
	$a(10^{-10}\text{m})$	2,649	2,666	2,698	2,731
200	$E(10^{10}\text{Pa})$	41,07	35,50	26,32	19,30
	$G(10^{10}\text{Pa})$	31,11	27,09	20,39	15,17
	$K(10^{10}\text{Pa})$	16,04	13,85	10,24	7,49

	$C_{11}(10^{10}\text{Pa})$	5,25	4,56	3,40	2,52
	$C_{12}(10^{10}\text{Pa})$	2,04	1,79	1,36	1,02
	$C_{44}(10^{10}\text{Pa})$	1,60	1,38	1,02	0,75
	$V_n(10^5\text{cm/s})$	4,82	4,49	3,88	3,34
	$V_d(10^5\text{cm/s})$	2,67	2,48	2,13	1,82
	$a(10^{-10}\text{m})$	2,649	2,666	2,698	2,731
Khối	$E(10^{10}\text{Pa})$	41,19	35,57	26,35	19,29
	$G(10^{10}\text{Pa})$	31,20	27,15	20,67	15,22
	$K(10^{10}\text{Pa})$	16,09	13,88	10,23	7,483
	$C_{11}(10^{10}\text{Pa})$	5,26	4,56	3,43	2,52
	$C_{12}(10^{10}\text{Pa})$	2,05	1,78	1,38	1,02
	$C_{44}(10^{10}\text{Pa})$	1,61	1,39	1,02	0,74
	$V_n(10^5\text{cm/s})$	4,83	4,49	3,89	3,34
	$V_d(10^5\text{cm/s})$	2,67	2,47	2,13	1,82

Bảng 3. $V_d(T, n^*)$, và $V_n(T, n^*)$ đối với W tại $P = 0$ tính bởi SMM

V	Số lớp	$T(\text{K})$					
		100	300	500	700	900	1000
$V_d(10^5\text{cm/s})$	10	4,61	4,56	4,50	4,43	4,36	4,32
	30	4,78	4,73	4,67	4,60	4,53	4,49
	70	4,83	4,78	4,72	4,65	4,58	4,54
	100	4,84	4,79	4,73	4,66	4,59	4,55
	200	4,85	4,80	4,74	4,67	4,60	4,57
	Khối	4,85	4,83	4,74	4,69	4,60	4,58
$V_n(10^5\text{cm/s})$	10	2,55	2,52	2,48	2,45	2,41	2,39
	30	2,64	2,61	2,58	2,54	2,50	2,48
	70	2,67	2,64	2,61	2,57	2,53	2,51
	100	2,68	2,65	2,61	2,58	2,54	2,52
	200	2,68	2,65	2,62	2,58	2,54	2,52
	Khối	2,69	2,67	2,62	2,58	2,55	2,52

Bảng 4. $V_d(T, n^*)$, và $V_n(T, n^*)$ đối với WSi tại $c_{Si} = 5\%$, $P = 0$ tính bởi SMM

V	Số lớp	T(K)					
		100	300	500	700	900	1000
$V_n 10^5 \text{cm/s}$	10	1,85	1,83	1,81	1,78	1,75	1,73
	30	1,84	1,82	1,80	1,77	1,74	1,72
	70	1,84	1,82	1,80	1,77	1,74	1,72
	100	1,84	1,82	1,80	1,77	1,74	1,72
	200	1,84	1,82	1,80	1,77	1,74	1,72
	Khối	1,84	1,81	1,79	1,77	1,75	1,72
$V_d(10^5 \text{cm/s})$	10	3,38	3,35	3,31	3,26	3,20	3,16
	30	3,37	3,34	3,30	3,25	3,19	3,15
	70	3,37	3,34	3,30	3,25	3,19	3,15
	100	3,37	3,34	3,30	3,25	3,18	3,15
	200	3,37	3,34	3,30	3,25	3,18	3,15
	Khối	3,37	3,34	3,30	3,25	3,18	3,15

Bảng 5. $V_d(P, n^*)$, và $V_n(P, n^*)$ đối với W tại $T = 300 \text{ K}$ tính bởi SMM

V	Số lớp	P(GPa)				
		10	20	30	40	50
$V_d(10^5 \text{cm/s})$	10	5,77	6,01	6,24	6,46	6,67
	30	5,94	6,19	6,43	6,65	6,86
	70	5,99	6,24	6,48	6,70	6,91
	100	6,00	6,25	6,49	6,71	6,93
	200	6,01	6,27	6,50	6,72	6,94
	Khối	6,06	6,30	6,54	6,75	6,97
$V_n 10^5 \text{cm/s}$	10	3,19	3,32	3,45	3,57	3,69
	30	3,28	3,42	3,55	3,67	3,79
	70	3,31	3,45	3,58	3,70	3,82
	100	3,32	3,46	3,59	3,71	3,83
	200	3,32	3,46	3,59	3,72	3,84
	Khối	3,29	3,43	3,55	3,67	3,79

Môđun đàn hồi đẳng nhiệt của W ở dạng vật liệu khối tại $T = 300 \text{ K}$, $P = 0$ tính bởi SMM phù hợp tốt với các số liệu khác [17-19, 24] (xem Bảng 6).

**Bảng 6. B_T của W dạng khối tại $T = 300\text{ K}$, $P = 0$
tính bởi SMM, LDA[24], TB [24] và theo TN [25-27]**

Phương pháp	SMM	TN [17-19]	LDA [16]	TB [16]
$B_T(\text{GPa})$	320,03	323,00	333,00	319,00

(LDA là kết quả tính toán trong phép gần đúng mật độ địa phương, TB là tính toán bằng phương pháp liên kết chặt).

Khoảng lân cận gần nhất a và các môđun E , G , K của W ở dạng vật liệu khối tại $T = 300\text{ K}$, $P = 0$ tính bởi SMM phù hợp khá tốt với các thực nghiệm [28-31] (Bảng 7).

**Bảng 7. a , E , K , G của W ở dạng khối tại $T = 300\text{ K}$, $P = 0$
tính bởi SMM và theo TN [28-31]**

Phương pháp	$a(10^{-10}\text{m})$ TN [30, 31]	$E(10^{10}\text{Pa})$ TN [28]	$K(10^{10}\text{Pa})$ TN [28, 29]	$G(10^{10}\text{Pa})$ TN [28]
SMM	2,6443	41,40	31,36	16,17
TN [28-31]	2,7400	41,50	30,00	16,00

Các hằng số đàn hồi C_{11} , C_{12} , C_{44} của W ở dạng vật liệu khối tại $T = 300\text{ K}$, $P = 0$ tính bởi SMM phù hợp khá tốt với các thực nghiệm [24, 29, 32] (xem Bảng 8).

**Bảng 8. C_{11} , C_{12} , C_{44} của W dạng khối tại $T = 300\text{ K}$, $P = 0$
tính bởi SMM và theo TN [16, 21, 24]**

Phương pháp	SMM	TN [29]	TN [24]	TN [32]
$C_{11}(10^{11}\text{Pa})$	5,29	5,27	5,21	5,29
$C_{12}(10^{11}\text{Pa})$	2,06	1,94	2,02	1,70
$C_{44}(10^{11}\text{Pa})$	1,62	1,47	1,60	1,98

Khoảng lân cận gần nhất của màng mỏng phụ thuộc vào bề dày, nhiệt độ và áp suất. Khoảng lân cận gần nhất của màng mỏng tăng theo bề dày, tăng mạnh theo nhiệt độ và giảm theo áp suất. Khi nhiệt độ tăng, khoảng lân cận gần nhất trung bình giữa hai nguyên tử tăng, các đại lượng biến dạng đàn hồi và sóng đàn hồi giảm. Khi áp suất tăng, khoảng lân cận gần nhất trung bình giữa hai nguyên tử giảm, các đại lượng biến dạng đàn hồi và sóng đàn hồi tăng. Khi nồng độ nguyên tử xen kẽ tăng, khoảng lân cận gần nhất trung bình giữa hai nguyên tử tăng, các đại lượng biến dạng đàn hồi và sóng đàn hồi giảm. Khi số lớp tăng cho đến khoảng 200 lớp (bề dày khoảng 35 nm), các đại lượng biến dạng đàn hồi và sóng đàn hồi của màng mỏng tiến đến các giá trị của vật liệu khối.

3. Kết luận

Bài báo trình bày mô hình màng hợp kim xen kẽ AB với cấu trúc LPTK và xây dựng lý thuyết biến dạng đàn hồi và vận tốc truyền sóng đàn hồi của màng này trên cơ sở SMM. Trong trường hợp khi nồng độ nguyên tử xen kẽ bằng không, lý thuyết này trở thành lý thuyết biến dạng đàn hồi và vận tốc truyền sóng đàn hồi của màng kim loại. Khi bề dày màng đủ lớn, biến dạng đàn hồi và vận tốc truyền sóng đàn hồi của màng hợp kim xen kẽ

trở thành biến dạng đàn hồi và vận tốc truyền sóng đàn hồi của vật liệu khối của hợp kim xen kẽ. Bài báo tính số đối với biến dạng đàn hồi và vận tốc sóng đàn hồi của W và WSi khi sử dụng thế Mie-Lennard-Jones $m-n$ và phương pháp quả cầu phối vị. Một số kết quả tính toán được so sánh với số liệu thực nghiệm và tính toán khác. Các kết quả tính toán đối với màng mỏng có tính dự báo, định hướng thực nghiệm trong tương lai.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

- [1] Hoc N.Q., Tinh B.D. and Hien N.D., 2019. Elastic moduli and elastic constants of interstitial alloy AuCuSi with FCC structure under pressure. *High Temperature Materials and Processes*, Vol.38, pp. 264-272.
- [2] Tinh B.D., Hoc N.Q., Vinh D.Q., Cuong T.D. and Nguyen Duc Hien N.D., 2018. Thermodynamic and elastic properties of interstitial alloy FeC with BCC structure at zero pressure. *Advances in Materials Science and Engineering*, Vol. 2018, 5251741.
- [3] Hoc N.Q., Hoa N.T., Hien N.D. and Thang D.Q., 2018. Study on nonlinear deformation of binary interstitial alloy with BCC structure under pressure. *HNUE Journal of Science, Natural Sciences*, Vol. 63, Iss. 6, pp. 57-65.
- [4] Hoc N.Q., Hien N.D. and Thang D.Q., 2018. Elastic deformation of alloy AuSi with BCC structure under pressure. *HNUE Journal of Science, Natural Sciences*, Vol. 63, Iss. 6, pp.74-83.
- [5] Hoc N.Q., Cuong T.D. and Hien N.D., 2019. Study on elastic deformation of interstitial alloy FeC with BCC structure under pressure, *Proc. the ACCMS-Theme Meeting on "Multiscale Modelling of Materials for Sustainable Development"*, 7th - 9th September, 2018, VNU, Hanoi, Vietnam. *VNU Journal of Sciences: Mathematics-Physics*, Vol. 35, Iss. 1, pp. 1-12.
- [6] Hoc N.Q., Hien N.D., Nam T.D. and Thanh V.L., 2021. Study on elastic deformation of stainless steel under pressure. *HNUE Journal of Science, Natural Sciences*, Vol. 66, Iss. 2, pp. 83-99.
- [7] Vereshchagin L. F. and N. S. Fateeva N.S., 1977. Melting temperatures of refractory metals at high pressures. *High Temperature High Pressure*, Vol. 9, pp. 619-628.
- [8] Errandonea D., Schwager B., Ditz R., Gessmann C., Boehler R. and Ross M. , 2001. Systematics of transition-metal melting. *Physical Review B*, Vol. 63, 132104.
- [9] Mazhnik E. and Oganov A.R., 2020. Application of machine learning methods for predicting new superhard materials. *Journal of Applied Physics*, Vol. 128, 075102.
- [10] Mazhnik E. and Oganov A.R., 2019. A model of hardness and fracture toughness of solids. *Journal of Applied Physics*, Vol. 126, 125109.
- [11] Haibo H. and Spaepen F., 2000. Tensile testing of free - standing Cu, Ag and Al thin films and Ag/Cu multilayers. *Acta Mater.*, Vol. 48, pp. 3261-3269.
- [12] Knepper R. and Baker S.P., 2007. Coefficient of thermal expansion and biaxial elastic modulus of β phase tantalum thin films. *Applied Physics Letters*, Vol. 90, 181908.

- [13] Vaz A.R., Salvadori M.C. and Cattani M., 2004. Young modulus measurement of nanostructured metallic thin films. *Journal of Metastable and Nanocrystalline Materials*, Vol. 20-21, pp. 758-762.
- [14] Weiss B., Groger V., Khatibi G., Kotas A., Zimprich P., Stickler R. and Zagar B., 2002. Characterization of mechanical and thermal properties of thin Cu foils and wires. *Sensors and Actuators A*, Vol.99, pp.172-182.
- [15] Kuru Y., Wohlschlogel M., Welzel U. and Mittemeijer E.J., 2008. Coefficients of thermal expansion of thin metal films investigated by non-ambient X-ray diffraction stress analysis. *Surface & Coating Technology*, Vol. 202, pp. 2306-2309.
- [16] Fuks D., Dorfman S., Zhukovskii F., Kotomin A. and Stoneham A.M. , 2001. Theory of the growth mode for a thin metallic film on an insulating substrate. *Surface Science*, Vol. 499, pp. 24-40.
- [17] Hung V.V., Phuong D.D., Hoa N.T. and Hieu H.K., 2015. Theoretical investigation of thermodynamic properties of metallic thin films. *Thin Solid Films*, Vol. 583, pp. 7-12.
- [18] Hung V.V., Phuong D.D. and Hoa N.T., 2013. Investigation of thermodynamic properties of metal thin film by statistical moment method. *Communications in Physics*, Vol. 23, Iss. 4, pp. 301-311.
- [19] Hung V.V., Phuong D.D. and Hoa N.T., 2014. Thermodynamic properties of free standing thin metal films: Temperature and pressure dependences. *Communications in Physics*, Vol. 24, Iss. 2, pp. 77-191.
- [20] Tang N. and Hung V.V., 1988. Investigation of the thermodynamic properties of anharmonic crystals by the momentum method, I. General results for FCC crystals. *Physica Status Solidi (b)*, Vol. 149, pp. 511-519.
- [21] Hùng V.V., 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, Hà Nội.
- [22] Magomedov M.N., 1987. On calculating the Debye temperature and the Gruneisen parameter. *Zhurnal Fizicheskoi Khimii*, Vol. 61, Iss. 4, pp. 1003-1009 (in Russian).
- [23] Magomedov M.N., 2006. The calculation of the parameters of the Mie–Lennard-Jones potential. *High Temperature*, Vol. 44, Iss. 4, pp. 513-529.
- [24] Mehl M.J. and Papacnstantopoulos D.A., 1996. Applications of a tight-binding total-energy method for transition and noble metals: Elastic constants, vacancies and surfaces of monatomic metals. *Physical Review B*, Vol. 54, Iss. 7, 4519.
- [25] Donohue J., 1974. *The structure of the elements*. Wiley, New York, pp.191-199.
- [26] Cyunn H. and Yoo C. S., 1999. Equation of state of tantalum to 174 GPa. *Physical Review B*, Vol. 59, Iss. 13, 8526.
- [27] Kittel C., 1986. *Introduction to Solid State Physics*, Wiley, New York.
- [28] Tikhonov L.V. and Knonenko G.Y., 1986. *Mechanical properties of metals and alloys*. Kiev, Nauka Dumka.
- [29] Dwight E.G. , 1961. *American institute of physics handbook*, 2nd Ed., McGraw-Hill book Company, New York-Toronto-London.
- [30] David R.L., 2005. *CRC Handbook of Chemistry and Physics*, 86th Ed., Taylor & Francis, Boca Raton, London-New York-Singapore.

- [31] Xương N.K., 2003. *Vật liệu kim loại màu*, NXB Khoa học Kỹ thuật, Hà Nội.
- [32] Mehl M.J., 1993. Pressure dependence of the elastic moduli in aluminum-rich Al-Li compounds. *Physical Review B*, Vol. 47, Iss. 5, pp. 2493.

ABSTRACT

Study on the elastic deformation of BCC interstitial alloy's thin film

Nguyen Quang Hoc¹, Pham Phuong Uyen¹, Pham Duy Thanh² and Le Hong Viet³

¹*Faculty of Physics, Hanoi National University of Education*

²*Gifted High School, Hanoi National University of Education*

³*Faculty of Natural Sciences, Tran Quoc Tuan University*

The article presents the theory of elastic deformation and elastic wave propagation velocity of BCC binary interstitial alloy's thin film based on the statistical moment method. Metal's films and bulk interstitial alloys are specific cases of interstitial alloy's films in this theory. The obtained theoretical results are applied to W and WSi films, where calculated results are compared with other calculations and experimental data.

Keywords: binary interstitial alloy's thin film, BCC structure, metallic thin film, bulk material, statistical moment method.