

BIẾN DẠNG ĐÀN HỒI VÀ VẬN TỐC SÓNG ĐÀN HỒI CỦA CÁC HỢP KIM TAM NGUYÊN FeCrSi VÀ AuCuSi

Nguyễn Quang Học¹, Nguyễn Đức Hiền², Nguyễn Thị Hòa³,
Phạm Phương Uyên¹ và Trịnh Hồng Ngọc¹

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

²Trường Trung học phổ thông Mạc Đình Chi, Chu Pah, Gia Lai

³Trường Đại học Giao thông vận tải

Tóm tắt. Bài báo sử dụng mô hình hợp kim tam nguyên vừa thay thế vừa xen kẽ với cấu trúc lập phương và điều kiện nồng độ nguyên tử xen kẽ nhỏ hơn nhiều so với nồng độ nguyên tử thay thế và nồng độ nguyên tử thay thế nhỏ hơn nhiều so với nồng độ nguyên tử kim loại chính. Trên cơ sở đó cùng với lý thuyết biến dạng đàn hồi và sóng đàn hồi của hợp kim này thu được bởi phương pháp thống kê mômen, chúng tôi tiến hành tính số đối với sự phụ thuộc nhiệt độ, áp suất, nồng độ nguyên tử thay thế và nồng độ nguyên tử xen kẽ của các mô đun đàn hồi E , K , G , các hằng số đàn hồi C_{11} , C_{12} , C_{44} , vận tốc sóng dọc V_d và vận tốc sóng ngang V_n của FeCrSi và AuCuSi. Các kết quả tính số đối với FeCrSi và AuCuSi được so sánh với các kết quả tính số của Fe, FeCr, FeSi, Au, AuCu, AuSi, các kết quả tính toán khác và thực nghiệm. Các kết quả tính số đối với hợp kim tam nguyên có tính dự báo, định hướng cho các thực nghiệm trong tương lai.

Từ khóa: hợp kim tam nguyên vừa thay thế vừa xen kẽ, mô đun đàn hồi, hằng số đàn hồi, vận tốc sóng dọc, vận tốc sóng ngang, phương pháp thống kê mômen

1. Mở đầu

Biến dạng đàn hồi và vận tốc sóng đàn hồi của các kim loại Fe, Au và các hợp kim của chúng thu hút sự quan tâm của các nhà nghiên cứu.

Fe và các hợp kim xen kẽ của nó như FeSi, FeC, FeH, FeS,... chiếm phần lớn lõi của Trái Đất và các thiên thể. Shibazaki và cộng sự (2016) [1] đã chỉ ra ảnh hưởng của nhiệt độ lên vận tốc sóng đàn hồi đối với cấu trúc lập phương tâm khối (LPTK) của Fe lớn hơn nhiều so với cấu trúc B_{20} của hợp kim FeSi và vận tốc âm trong các hợp kim của Fe không những phụ thuộc vào cấu trúc tinh thể mà còn phụ thuộc vào hàm lượng nguyên tố nhẹ xen kẽ. Các tính chất cơ nhiệt của các hợp kim xen kẽ nói trên cung cấp cho chúng ta hiểu biết đầy đủ hơn đối với thành phần, cấu trúc, quá trình vận động của Trái Đất và các thiên thể. Giảm thất thoát năng lượng là một tiêu chí quan trọng để chế tạo các thiết bị thân thiện hơn với môi trường. Máy biến áp được sử dụng phổ biến để truyền tải và phân phối điện năng. Hiệu suất của máy biến áp được cải thiện đáng kể bằng cách bổ sung các nguyên tử silic vào các lõi thép của máy biến áp [2]. Thép kỹ thuật điện với hàm lượng silic cao có điện trở suất lớn và độ từ thẩm cao. Do đó, nó được dùng làm rôto và stato trong động cơ và máy phát điện để giảm bớt tổn hao do dòng điện xoáy.

Ngày nhận bài: 22/2/2022. Ngày sửa bài: 21/3/2022. Ngày nhận đăng: 28/3/2022.

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

Các kết quả nghiên cứu của Psiachos và cộng sự (2011) [3] về tính chất đàn hồi của FeH chỉ ra rằng khi nồng độ nguyên tử hiđrô xen kẽ tăng thì hằng số mạng của FeH tăng và các hằng số đàn hồi của FeH giảm đáng kể một cách tuyến tính. Thép là một dạng hợp kim xen kẽ điển hình có tầm quan trọng đặc biệt trong xây dựng, giao thông vận tải, chế tạo máy,... Một hợp kim xen kẽ của Fe là FeC gọi là thép cacbon chiếm tỉ trọng lớn trong ngành công nghiệp thép. Các hợp kim của sắt và crôm được ứng dụng rộng rãi như trong các lò phản ứng hạt nhân (Olsson và cộng sự, 2003) [4]. Công trình của Zhang và cộng sự (2020) [5] chứng minh rằng mô đun Young của FeCrSi tăng theo sự tăng của nồng độ Cr.

Các kim loại chuyển tiếp và hợp kim xen kẽ của chúng như Au, AuSi,... được ứng dụng nhiều trong công nghệ chế tạo dây siêu dẫn [6]. Silicua vàng là một trong nhiều hợp kim kim loại được bán bởi American Elements dưới tên thương mại là AE Alloys™. Các hợp kim này có sẵn dưới dạng thỏi, thanh, ruy băng, dây, tấm và lá. Các dạng có độ tinh khiết siêu cao và độ tinh khiết cao cũng bao gồm bột kim loại, bột micrômet, kích thước nano, bia để ngưng kết màng mỏng và viên nén cho các ứng dụng lắng đọng hơi hóa học (CVD) và lắng đọng hơi vật lý (PVD). Các ứng dụng chính bao gồm lắp ráp ổ trục, chấn lưu, đúc, hàn bước và che chắn bức xạ.

Việc nghiên cứu các tính chất biến dạng của hợp kim xen kẽ phụ thuộc của vào nhiệt độ, áp suất và nồng độ nguyên tử xen kẽ có vai trò to lớn để dự đoán sức bền vật liệu, sự ổn định cơ học, sự khuếch tán,... [7-9].

Phương pháp thống kê mômen (SMM) [10] đã được áp dụng để nghiên cứu biến dạng của kim loại, hợp kim thay thế và hợp kim xen kẽ với cấu trúc lập phương trong các công trình trước đây của chúng tôi [11-20]. Tuy nhiên, trong các công trình đó chúng tôi chưa tính đến vận tốc sóng đàn hồi và chưa có nghiên cứu biến dạng đàn hồi của hợp kim tam nguyên vừa thay thế vừa xen kẽ với cấu trúc lập phương.

Trong bài báo này, trên cơ sở kết quả lý thuyết của các bài báo [10, 16] chúng tôi tính toán các đại lượng biến dạng đàn hồi và sóng đàn hồi của các hợp kim tam nguyên vừa thay thế vừa xen kẽ FeCrSi và AuCuSi.

2. Nội dung nghiên cứu

Trong mô hình hợp kim vừa thay thế vừa xen kẽ ABC với cấu trúc LPTK và điều kiện nồng độ nguyên tử xen kẽ nhỏ hơn nhiều so với nồng độ nguyên tử thay thế và nồng độ nguyên tử thay thế nhỏ hơn nhiều so với nồng độ nguyên tử kim loại chính, nguyên tử xen kẽ C nằm ở tâm mặt, nguyên tử thay thế B thay thế nguyên tử kim loại chính A gọi là A_1 nằm ở tâm khối và nguyên tử kim loại chính A gọi là A_2 nằm ở đỉnh của ô cơ sở lập phương [11-15].

Trong mô hình hợp kim vừa thay thế vừa xen kẽ ABC với cấu trúc lập phương tâm diện (LPTD) và điều kiện nồng độ nguyên tử xen kẽ nhỏ hơn nhiều so với nồng độ nguyên tử thay thế và nồng độ nguyên tử thay thế nhỏ hơn nhiều so với nồng độ nguyên tử kim loại chính, nguyên tử xen kẽ C nằm ở tâm khối, nguyên tử thay thế B thay thế nguyên tử kim loại chính A gọi là A_1 nằm ở tâm mặt và nguyên tử kim loại chính A gọi là A_2 nằm ở đỉnh của ô cơ sở lập phương [16-20].

Ta tiến hành tính số các đại lượng biến dạng đàn hồi và sóng đàn hồi của hợp kim vừa thay thế vừa xen kẽ ABC với cấu trúc lập phương theo trình tự như sau:

(1) Xác định khoảng lân cận gần nhất $r_{1X}(P,0)$ ($X = A, A_1, A_2, C$) giữa hai nguyên tử A trong kim loại sạch A và giữa nguyên tử A_1 hoặc A_2 hoặc C và nguyên tử khác trong hợp kim xen kẽ AC tại áp suất P và nhiệt độ $0K$ từ phương trình trạng thái như sau [10, 12, 14]:

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

trong đó $v_X = \frac{4r_{1X}^3}{3\sqrt{3}}$ là thể tích ô cơ sở ứng với một nguyên tử X của mạng LPTK, $v_X = \frac{r_{1X}^3}{\sqrt{2}}$ là thể tích ô cơ sở ứng với một nguyên tử X của mạng LPTD, u_{0X} là năng lượng liên kết đối với nguyên tử X, k_X là thông số tinh thể điều hòa đối với nguyên tử X, $\omega_{0X} = \sqrt{\frac{k_X(P,0)}{m_X}}$ là tần số dao động của nguyên tử X tại áp suất P và nhiệt độ $0K$, m_X là khối lượng của nguyên tử X và $\hbar = \frac{h}{2\pi}$, h là hằng số Planck.

(2) Xác định thông số tinh thể điều hòa $k_X(P,0)$ và các thông số tinh thể phi điều hòa $\gamma_{1X}(P,0)$, $\gamma_{2X}(P,0)$, $\gamma_X(P,0)$ của nguyên tử X tại áp suất P và nhiệt độ $0K$ theo các công thức trong [10, 12, 14].

(3) Xác định độ dãn $y_X(P,T)$ của nguyên tử X tại áp suất P và nhiệt độ T từ vị trí cân bằng theo công thức trong [10, 12, 14].

(4) Xác định các khoảng lân cận gần nhất $r_{1X}(P,T)$ theo các công thức sau [10, 12, 14]:

$$\begin{aligned} r_{1C}(P,T) &= r_{1C}(P,0) + y_A(P,T), r_{1A}(P,T) = r_{1A}(P,0) + y_A(P,T), \\ r_{1A_1}(P,T) &= r_{1C}(P,T), r_{1A_2}(P,T) = r_{1A_2}(P,0) + y_C(P,T). \end{aligned} \quad (2)$$

(5) Xác định khoảng lân cận gần nhất trung bình giữa hai nguyên tử A $\overline{r_{1A}(P,T)}$ tại áp suất P và nhiệt độ T trong hợp kim AC theo công thức sau [10,12,14]:

$$\overline{r_{1A}(P,T)} = \overline{r_{1A}(P,0)} + \overline{y(P,T)}, \overline{r_{1A}(P,0)} = (1 - c_C) r_{1A}(P,0) + c_C r'_{1A}(P,0), \overline{y(P,T)} = \sum_X c_X y_X(P,T), \quad (3)$$

trong đó $r'_{1A}(P,0) = \sqrt{3} r_{1C}(P,0)$, $c_A = 1 - 7c_C$, $c_{A_1} = 2c_C$, $c_{A_2} = 4c_C$ đối với mạng LPTK, $r'_{1A}(P,0) = \sqrt{2} r_{1C}(P,0)$, $c_A = 1 - 15c_C$, $c_{A_1} = 6c_C$, $c_{A_2} = 8c_C$ đối với mạng LPTD, $\overline{r_{1A}(P,0)}$ là khoảng lân cận gần nhất trung bình giữa hai nguyên tử A trong hợp kim AC tại áp suất P và nhiệt độ $0K$, $\overline{y(P,T)}$ là độ dãn trung bình của nguyên tử A ở áp suất P và nhiệt độ T từ vị trí cân bằng, $r_{1A}(P,0)$ là khoảng lân cận gần nhất giữa hai nguyên tử A trong kim loại sạch A tại áp suất P và nhiệt độ $0K$, $r'_{1A}(P,0)$ là khoảng lân cận gần nhất giữa hai nguyên tử A trong vùng chứa nguyên tử xen kẽ C tại áp suất P và nhiệt độ $0K$ và c_X là nồng độ của nguyên tử X.

(6) Xác định khoảng lân cận gần nhất trung bình giữa hai nguyên tử A tại áp suất P và nhiệt độ T trong hợp kim ABC theo công thức sau [10, 12, 14]:

$$\begin{aligned} a_{ABC} &= c_{AC} a_{AC} \frac{B_{TAC}}{B_T} + c_B r_{1B} \frac{B_{TB}}{B_T}, \quad \overline{B_T} = c_{AC} B_{TAC} + c_B B_{TB}, c_{AC} = c_A + c_C, a_{AC} \equiv \overline{r_{1A}(P,T)}, \\ B_{TAC} &= \frac{1}{\chi_{TAC}}, \chi_{TAC} = \frac{3 \left(\frac{a_{AC}}{a_{0AC}} \right)^3}{2P + \frac{a_{AC}^2}{v_{AC}} \frac{1}{3} \left(\frac{\partial^2 \psi_{AC}}{\partial a_{AC}^2} \right)_T}, B_{TB} = \frac{1}{\chi_{TB}}, \chi_{TB} = \frac{3 \left(\frac{r_{1B}}{r_{0B}} \right)^3}{2P + \frac{r_{1B}^2}{v_B} \frac{1}{3} \left(\frac{\partial^2 \psi_B}{\partial r_{1B}^2} \right)_T}, \end{aligned}$$

$$\left(\frac{\partial^2 \psi_{AC}}{\partial a_{AC}} \right)_T \approx \sum_X c_X \left(\frac{\partial^2 \psi_X}{\partial r_{1X}^2} \right)_T,$$

$$\frac{1}{3} \left(\frac{\partial^2 \psi_X}{\partial r_{1X}^2} \right)_T = \frac{1}{6} \left(\frac{\partial^2 u_{0X}}{\partial r_{1X}^2} \right)_T + \frac{\hbar \omega_X}{4k_X} \left[\frac{\partial^2 k_X}{\partial r_{1X}^2} - \frac{1}{2k_X} \left(\frac{\partial k_X}{\partial r_{1X}} \right)^2 \right],$$

$$\frac{1}{3} \left(\frac{\partial^2 \psi_B}{\partial r_{1B}^2} \right)_T = \frac{1}{6} \left(\frac{\partial^2 u_{0B}}{\partial r_{1B}^2} \right)_T + \frac{\hbar \omega_B}{4k_B} \left[\frac{\partial^2 k_B}{\partial r_{1B}^2} - \frac{1}{2k_B} \left(\frac{\partial k_B}{\partial r_{1B}} \right)^2 \right], \quad (4)$$

trong đó năng lượng liên kết và các thông số tinh thể đối với nguyên tử B được xác định giống như đối với các nguyên tử X, ψ_X, ψ_B là các năng lượng tự do Helmholtz ứng với một nguyên tử X và ứng với một nguyên tử B và có dạng như trong [10, 12, 14].

(7) Xác định môđun Young của hợp kim ABC theo công thức sau [10, 12, 14]:

$$E_{ABC} = E_{AC} + c_B (E_A - E_B), \quad E_{AC} = E_A \frac{\sum_X c_X \frac{\partial^2 \psi_X}{\partial \varepsilon^2}}{\frac{\partial^2 \psi_A}{\partial \varepsilon^2}},$$

$$E_M = \frac{1}{\pi r_{1M} A_{1M}}, \quad A_{1M} = \frac{1}{k_M} \left[1 + \frac{2\gamma_M^2 \theta^2}{k_M^4} \left(1 + \frac{1}{2} Y_M \right) (1 + Y_M) \right],$$

$$\frac{\partial^2 \psi_X}{\partial \varepsilon^2} = \left\{ \frac{1}{2} \frac{\partial^2 u_{0X}}{\partial r_{1X}^2} + \frac{3}{4} \frac{\hbar \omega_X}{k_X} \left[\frac{\partial^2 k_X}{\partial r_{1X}^2} - \frac{1}{2k_X} \left(\frac{\partial k_X}{\partial r_{1X}} \right)^2 \right] \right\} 4r_{01X}^2 +$$

$$+ \left(\frac{1}{2} \frac{\partial u_{0X}}{\partial r_{1X}} + \frac{3}{2} \hbar \omega_X \coth x_X \frac{1}{2k_X} \frac{\partial k_X}{\partial r_{1X}} \right) 2r_{01X}, \quad x_X = \frac{\hbar \omega_X}{2\theta}, \quad \omega_X = \sqrt{\frac{k_X}{m_X}}.$$

$$Y_M \equiv x_M \coth x_M, \quad M = A, B, \quad x_B = \frac{\hbar \omega_B}{2\theta}, \quad \omega_B = \sqrt{\frac{k_B}{m_B}}. \quad (5)$$

Ở đây, $\theta = k_{B0} T, k_{B0}$ là hằng số Boltzmann.

(8) Xác định môđun nén khối của hợp kim ABC theo công thức sau:

$$K_{ABC} = \frac{E_{ABC}}{3(1 - 2\nu_{ABC})}, \quad (6)$$

trong đó $\nu_{ABC} = c_{AC} \nu_{AC} + c_B \nu_B \approx c_A \nu_A + c_B \nu_B = \nu_{AB}, \nu_{ABC}$ là tỷ số Poisson của hợp kim ABC, ν_{AB} là tỷ số Poisson của hợp kim AB, ν_A, ν_B, ν_C là các tỷ số Poisson của các vật liệu A, B, C.

(9) Xác định môđun trượt của hợp kim ABC theo công thức sau [10, 12, 14]:

$$G_{ABC} = \frac{E_{ABC}}{2(1 + \nu_{ABC})}. \quad (7)$$

(10) Xác định các hằng số đàn hồi của hợp kim ABC theo các công thức sau [10, 12, 14]:

$$C_{11ABC} = \frac{E_{ABC}(1 - \nu_{ABC})}{(1 + \nu_{ABC})(1 - 2\nu_{ABC})}, \quad (8)$$

$$C_{12ABC} = \frac{E_{ABC}\nu_{ABC}}{(1 + \nu_{ABC})(1 - 2\nu_{ABC})}, \quad (9)$$

$$C_{44ABC} = \frac{E_{ABC}}{2(1 + \nu_{ABC})}. \quad (10)$$

(11) Xác định các vận tốc sóng dọc và ngang trong hợp kim ABC theo các công thức sau [10]:

$$V_{ABCd} = \sqrt{\frac{2C_{44ABC} + C_{12ABC}}{\rho_{ABC}}}, \quad (11)$$

$$V_{ABCn} = \sqrt{\frac{C_{44ABC}}{\rho_{ABC}}}, \quad (12)$$

trong đó $\rho_{ABC} = \frac{m_{ABC}}{V_{ABC}} \approx \rho_{AB}$, $V_{ABC} = Nv_{ABC}$, ρ_{ABC} là khối lượng riêng của hợp kim ABC, ρ_{AB}

là khối lượng riêng của hợp kim AB và N là số nguyên tử của hợp kim ABC.

Để nghiên cứu các hợp kim FeCrSi và AuCuSi, chúng tôi sử dụng thế tương tác cặp Mie-Lennard-Jones (MLJ) $m-n$ [21]

$$\varphi(r) = \frac{D}{n-m} \left[m \left(\frac{r_0}{r} \right)^n - n \left(\frac{r_0}{r} \right)^m \right], \quad (13)$$

trong đó r_0 là khoảng cách giữa hai nguyên tử tương ứng với thế năng cực tiểu lấy giá trị $-D$, m, n là các số có giá trị khác nhau đối với các nguyên tử kim loại khác nhau và được xác định bằng con đường kinh nghiệm dựa trên cơ sở số liệu thực nghiệm. Các thông số thế MLJ đối với các tương tác Fe-Fe, Cr-Cr, Au-Au, Cu-Cu và Si-Si được cho trong Bảng 1. Các thông số thế đối với các tương tác Au-Si, Cu-Si được xác định bởi [21]. Các tương tác A-C, A-B được xác định bởi [22].

Bảng 1. Các thông số thế MLJ $m-n$, tỷ số Poisson ν và khối lượng riêng ρ đối với Fe, Cr, Au, Cu và Si [21, 22]

Interaction	m	n	$D(10^{-10}\text{erg})$	$r_0(10^{-10}\text{m})$	ν	$\rho(\text{g/cm}^3)$
Fe-Fe	7	11,5	6416,448	2,4775	0,26	7,8672
Cr-Cr	6	15,5	6612,960	2,4950	0,33	7,2
Au-Au	5,5	10,5	4683	2,8751	0,39	19,283
Cu-Cu	5,5	11	6469,518	2,5487	0,37	8,932
Si-Si	6	12	45128,34	2,2950	0,28	2,329

$$D_{A-B} = \sqrt{D_{A-A}D_{B-B}}, r_{0A-B} = \frac{1}{2}(r_{0A-A} + r_{0B-B}), D_{A-C} = \sqrt{D_{A-A}D_{C-C}}, r_{0A-C} = \frac{1}{2}(r_{0A-A} + r_{0C-C}). \quad (14)$$

Các kết quả tính số biến dạng đàn hồi và vận tốc sóng đàn hồi của FeCrSi được tóm tắt trong các bảng từ Bảng 2 đến Bảng 4.

Bảng 2. $E(T, c_{Cr})$, $G(T, c_{Cr})$, $K(T, c_{Cr})$, $C_{11}(T, c_{Cr})$, $C_{12}(T, c_{Cr})$, $C_{44}(T, c_{Cr})$, $V_d(T, c_{Cr})$ và $V_n(T, c_{Cr})$
đối với FeCrSi tại $P = 0$, $c_{Si} = 1\%$

$T(K)$	$c_{Cr}(\%)$	0	2,5	5	7,5	10
300	$E(10^{10}Pa)$	18,200	18,336	18,471	18,607	18,742
	$K(10^{10}Pa)$	14,382	14,505	14,628	14,751	14,874
	$G(10^{10}Pa)$	7,059	7,111	7,162	7,213	7,265
	$C_{11}(10^{10}Pa)$	23,795	23,986	24,177	24,368	24,560
	$C_{12}(10^{10}Pa)$	9,675	9,764	9,853	9,942	10,031
	$C_{44}(10^{10}Pa)$	7,059	7,111	7,162	7,213	7,265
	$V_d(m/s)$	5519	5547	5575	5603	5631
	$V_n(m/s)$	3006	3020	3034	3048	3063
500	$E(10^{10}Pa)$	16,347	16,514	16,680	16,846	17,013
	$K(10^{10}Pa)$	12,918	13,064	13,209	13,355	13,502
	$G(10^{10}Pa)$	6,341	6,404	6,467	6,531	6,594
	$C_{11}(10^{10}Pa)$	21,372	21,602	21,833	22,063	22,294
	$C_{12}(10^{10}Pa)$	8,691	8,794	8,898	9,001	9,106
	$C_{44}(10^{10}Pa)$	6,341	6,404	6,467	6,531	6,594
	$V_d(m/s)$	5231	5264	5298	5332	5365
	$V_n(m/s)$	2849	2866	2884	2901	2918
700	$E(10^{10}Pa)$	14,115	14,320	14,526	14,731	14,936
	$K(10^{10}Pa)$	11,154	11,328	11,503	11,678	11,853
	$G(10^{10}Pa)$	5,475	5,554	5,632	5,711	5,789
	$C_{11}(10^{10}Pa)$	18,454	18,733	19,013	19,292	19,572
	$C_{12}(10^{10}Pa)$	7,504	7,626	7,748	7,871	7,994
	$C_{44}(10^{10}Pa)$	5,475	5,554	5,632	5,711	5,789
	$V_d(m/s)$	4860	4902	4944	4986	5027
	$V_n(m/s)$	2647	2669	2691	2712	2734
900	$E(10^{10}Pa)$	11,634	11,882	12,130	12,379	12,627
	$K(10^{10}Pa)$	9,193	9,400	9,606	9,814	10,021
	$G(10^{10}Pa)$	4,512	4,608	4,703	4,799	4,894
	$C_{11}(10^{10}Pa)$	15,210	15,543	15,878	16,212	16,547
	$C_{12}(10^{10}Pa)$	6,185	6,328	6,471	6,614	6,758
	$C_{44}(10^{10}Pa)$	9,193	9,400	9,606	9,814	10,021
	$V_d(m/s)$	4412	4465	4518	4570	4622
	$V_n(m/s)$	2403	2431	2459	2487	2514

Bảng 3. $E(T, c_{Si})$, $G(T, c_{Si})$, $K(T, c_{Si})$, $C_{11}(T, c_{Si})$, $C_{12}(T, c_{Si})$, $C_{44}(T, c_{Si})$, $V_d(T, c_{Si})$ và $V_n(T, c_{Si})$
đối với FeCrSi tại $P = 0$, $c_{Cr} = 10\%$

$T(K)$	$c_{Si}(\%)$	0	1	3	5
300	$E(10^{10}Pa)$	21,111	18,742	14,719	11,466
	$K(10^{10}Pa)$	16,908	14,874	11,472	8,781
	$G(10^{10}Pa)$	8,171	7,265	5,722	4,471
	$C_{11}(10^{10}Pa)$	27,802	24,560	19,101	14,742
	$C_{12}(10^{10}Pa)$	11,461	10,031	7,658	5,800
	$C_{44}(10^{10}Pa)$	8,171	7,265	5,722	4,471
	$V_d(m/s)$	5970	5631	5002	4427
	$V_n(m/s)$	3236	3063	2738	2438
500	$E(10^{10}Pa)$	19,206	17,013	13,196	10,004
	$K(10^{10}Pa)$	15,382	13,502	10,285	7,661
	$G(10^{10}Pa)$	7,433	6,594	5,130	3,901
	$C_{11}(10^{10}Pa)$	25,293	22,294	17,125	12,862
	$C_{12}(10^{10}Pa)$	10,427	9,106	6,865	5,060
	$C_{44}(10^{10}Pa)$	7,433	6,594	5,130	3,901
	$V_d(m/s)$	5694	5365	4736	4135
	$V_n(m/s)$	3087	2918	2592	2277
700	$E(10^{10}Pa)$	16,969	14,936	11,334	8,306
	$K(10^{10}Pa)$	13,591	11,853	8,834	6,361
	$G(10^{10}Pa)$	6,568	5,789	4,406	3,239
	$C_{11}(10^{10}Pa)$	22,347	19,572	14,708	10,679
	$C_{12}(10^{10}Pa)$	9,212	7,994	5,897	4,202
	$C_{44}(10^{10}Pa)$	6,568	5,789	4,406	3,239
	$V_d(m/s)$	5352	5027	4389	3768
	$V_n(m/s)$	2902	2734	2402	2075
900	$E(10^{10}Pa)$	14,478	12,627	9,349	6,676
	$K(10^{10}Pa)$	11,596	10,021	7,287	5,112
	$G(10^{10}Pa)$	5,603	4,894	3,634	2,603
	$C_{11}(10^{10}Pa)$	19,067	16,547	12,132	8,583
	$C_{12}(10^{10}Pa)$	7,860	6,758	4,864	3,377
	$C_{44}(10^{10}Pa)$	5,603	4,894	3,634	2,603
	$V_d(m/s)$	4944	4622	3987	3378
	$V_n(m/s)$	2680	2514	2182	1860

Bảng 4. $E(P, c_{Si})$, $G(P, c_{Si})$, $K(P, c_{Si})$, $C_{11}(P, c_{Si})$, $C_{12}(P, c_{Si})$, $C_{44}(P, c_{Si})$, $V_d(P, c_{Si})$ và $V_n(P, c_{Si})$
đối với FeCrSi tại $T = 300K$, $c_{Cr} = 10\%$

$P(GPa)$	$c_{Si}(\%)$	0	1	3	5
2	$E(10^{10}Pa)$	21,116	18,808	11,586	11,649
	$K(10^{10}Pa)$	16,912	14,926	5,778	8,920
	$G(10^{10}Pa)$	8,173	7,290	19,290	4,542
	$C_{11}(10^{10}Pa)$	27,809	24,646	7,733	14,976
	$C_{12}(10^{10}Pa)$	11,464	10,066	5,778	5,892
	$C_{44}(10^{10}Pa)$	8,173	7,290	5027	4,542
	$V_d(m/s)$	5971	5641	2751	4462
	$V_n(m/s)$	3237	3068	15,858	2457
4	$E(10^{10}Pa)$	22,065	19,789	12,361	12,609
	$K(10^{10}Pa)$	17,672	15,704	6,165	9,655
	$G(10^{10}Pa)$	8,540	7,670	20,581	4,916
	$C_{11}(10^{10}Pa)$	29,058	25,931	8,251	16,210
	$C_{12}(10^{10}Pa)$	11,979	10,591	6,165	6,378
	$C_{44}(10^{10}Pa)$	8,540	7,670	5192	4,916
	$V_d(m/s)$	6103	5786	2842	4642
	$V_n(m/s)$	3309	3147	2842	2556
6	$E(10^{10}Pa)$	22,999	20,748	16,823	13,538
	$K(10^{10}Pa)$	18,420	16,466	13,113	10,367
	$G(10^{10}Pa)$	8,901	8,042	6,540	5,279
	$C_{11}(10^{10}Pa)$	30,289	27,188	21,833	17,405
	$C_{12}(10^{10}Pa)$	12,486	11,104	8,753	6,848
	$C_{44}(10^{10}Pa)$	8,901	8,042	6,540	5,279
	$V_d(m/s)$	6231	5925	5348	4810
	$V_n(m/s)$	3378	3222	2927	2649
8	$E(10^{10}Pa)$	23,921	21,689	17,765	14,445
	$K(10^{10}Pa)$	19,158	17,212	13,847	11,061
	$G(10^{10}Pa)$	9,258	8,407	6,906	5,632
	$C_{11}(10^{10}Pa)$	31,502	28,421	23,055	18,570
	$C_{12}(10^{10}Pa)$	12,986	11,608	9,243	7,306
	$C_{44}(10^{10}Pa)$	9,258	8,407	6,906	5,632
	$V_d(m/s)$	6355	6058	5495	4968
	$V_n(m/s)$	3445	3295	3008	2736
10	$E(10^{10}Pa)$	24,831	22,614	18,687	15,696
	$K(10^{10}Pa)$	19,887	17,947	14,566	12,019
	$G(10^{10}Pa)$	9,610	8,765	7,265	6,120
	$C_{11}(10^{10}Pa)$	32,700	29,634	24,252	20,180
	$C_{12}(10^{10}Pa)$	13,480	12,103	9,723	7,939
	$C_{44}(10^{10}Pa)$	9,610	8,765	7,265	6,120
	$V_d(m/s)$	6475	6186	5636	5179
	$V_n(m/s)$	3510	3364	3085	2852

Theo các bảng từ Bảng 2 đến Bảng 4, môđun Young E của FeCrSi tuân theo một số quy luật chung. Thứ nhất là đối với FeCrSi ở cùng áp suất, nồng độ Cr và nồng độ Si khi nhiệt độ T tăng thì môđun Young E giảm. Chẳng hạn như đối với FeCrSi tại $P = 0$, $c_{Cr} = 10\%$ và $c_{Si} = 5\%$ khi T tăng từ 0 đến 1000 K thì E giảm từ $12,6997 \cdot 10^{10}$ xuống $5,9488 \cdot 10^{10}$ Pa (giảm 53,16%). Điều này là do khi nhiệt độ tăng, động năng của các nguyên tử tăng, tính phi điều hòa của dao động mạng làm tăng khoảng lân cận trung bình giữa hai nguyên tử và do đó, E , K , G , C_{11} , C_{12} , C_{44} , V_d và V_n đều giảm. Thứ hai là đối với FeCrSi ở cùng nhiệt độ, nồng độ Cr và nồng độ Si khi áp suất P tăng thì môđun Young E tăng. Ví dụ như đối với FeCrSi tại $T = 300$ K, $c_{Cr} = 10\%$ và $c_{Si} = 5\%$ khi P tăng từ 0 đến 10 GPa thì E tăng từ $21,114 \cdot 10^{10}$ đến $24,8307 \cdot 10^{10}$ Pa (tăng 17,62%). Điều đó là do vì khi áp suất tăng, lực nén tác dụng lên vật liệu từ mọi phía tăng, các nguyên tử xích lại gần nhau hơn, khoảng lân cận trung bình giữa hai nguyên tử giảm và do đó, E , K , G , C_{11} , C_{12} , C_{44} , V_d và V_n đều tăng. Thứ ba là đối với FeCrSi ở cùng nhiệt độ, áp suất và nồng độ Cr khi nồng độ Si tăng thì môđun Young E giảm. Chẳng hạn như đối với FeCrSi tại $T = 300$ K, $P = 0$ và $c_{Cr} = 10\%$ khi c_{Si} tăng từ 0 đến 5%, E giảm từ $21,114 \cdot 10^{10}$ đến $11,4664 \cdot 10^{10}$ Pa (giảm 45,69%). Điều này tương tự như FeSi và phù hợp với thực nghiệm (TN) của Takeuchi (1969) [2]. Khi nồng độ Si tăng, khoảng lân cận trung bình giữa hai nguyên tử tăng và do đó, E , K , G , C_{11} , C_{12} , C_{44} , V_d và V_n đều giảm. Thứ tư là đối với FeCrSi ở cùng nhiệt độ, áp suất và nồng độ Si khi nồng độ Cr tăng thì môđun Young E tăng rất chậm. Ví dụ như đối với FeCrSi tại nhiệt độ $T = 300$ K, $P = 0$ và $c_{Si} = 5\%$ khi c_{Cr} tăng từ 0 đến 10% thì E tăng từ $18,2002 \cdot 10^{10}$ đến $18,7422 \cdot 10^{10}$ Pa (tăng 2,98%). Do hằng số mạng của Cr xấp xỉ bằng hằng số mạng của Fe nên khi Cr thay thế Fe, mạng tinh thể Fe ít bị thay đổi và do đó, tính chất đàn hồi của FeCrSi ít bị thay đổi theo nồng độ Cr.

Xét trường hợp giới hạn của FeCrSi khi $c_{Si} = 0$ và c_{Cr} biến thiên từ 0 đến 10%. Kết quả thu được đối với FeCr được tổng kết trong các bảng từ Bảng 5 đến Bảng 7 và được minh họa trên Hình 1, trong đó có so sánh, đánh giá sai số giữa kết quả tính toán bởi SMM, tính toán *ab initio* của Olsson và cộng sự (2003) [4], Zhang và cộng sự (2010) [24], các TN của Speich và cộng sự (1972) [25], Heintze và cộng sự (2009) [26].

Bảng 5. $E(c_{Cr})$ đối với FeCr tại $T = 298$ K, $P = 0$ tính bởi SMM, *ab initio* của Zhang (2010) [24] và TN của Speich (1972) [25]

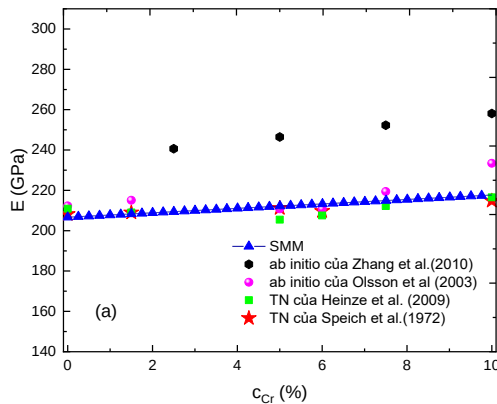
$c_{Cr}(\%)$	0	1,5	2,5	5	6	7,5	10
$E(\text{GPa})\text{-SMM}$	208,4	208,8	209,1	209,8	210,1	210,5	211,3
$E(\text{GPa})\text{-TN [25]}$	208,2	209	-	211,2	209,7	-	214,8
$\delta_{\text{SMM-TN[26]}} (\%)$	0,1	0,1	-	0,7	0,2	-	1,6
$E(\text{GPa})\text{-}ab\text{ initio [24]}$	-	-	241,3	254,3	-	252,5	258,3
$\delta_{[25]\text{-TN[26]}} (\%)$	-	-	-	20,4	-	-	16,8

Bảng 6. $K(c_{Cr})$ đối với FeCr tại $T = 298K$, $P = 0$ tính bởi SMM, *ab initio* của Zhang (2010) [24] và TN của Speich (1972) [25]

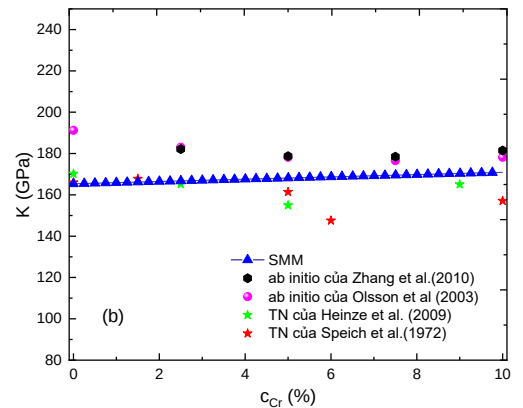
c_{Cr} (%)	0	1,5	2,5	5	6	7,5	10
$K(\text{GPa})$ -SMM	165,4	166,2	166,7	168,1	168,7	169,5	170,9
$K(\text{GPa})$ -TN [25]	166,0	166,7	-	161,4	147,6	-	157,1
$\delta_{\text{SMM-TN}[26]}$ (%)	0,4	0,3	-	4,2	14,3	-	8,8
$K(\text{GPa})$ - <i>ab initio</i> [24]	-	-	182,4	177,9	-	179,3	181,2
$\delta_{[25]-\text{TN}[26]}$ (%)	-	-	-	10,2	-	-	15,3

Bảng 7. $G(c_{Cr})$ đối với FeCr tại $T = 298K$, $P = 0$ tính bởi SMM, *ab initio* của Zhang (2010) [24] và TN của Speich (1972) [25]

c_{Cr} (%)	0	1,5	2,5	5	6	7,5	10
$G(\text{GPa})$ -SMM	80,70	80,87	80,96	81,23	81,34	81,50	81,76
$G(\text{GPa})$ -TN [25]	80,65	80,86	-	82,38	83,00	-	84,45
$\delta_{\text{SMM-TN}[26]}$ (%)	0,1	1,3	-	1,4	2,0	-	3,4
$G(\text{GPa})$ - <i>ab initio</i> [24]	-	-	94,3	96,6	-	99,8	102,3
$\delta_{[25]-\text{TN}[26]}$ (%)	-	-	-	17,3	-	-	21,1



(a)

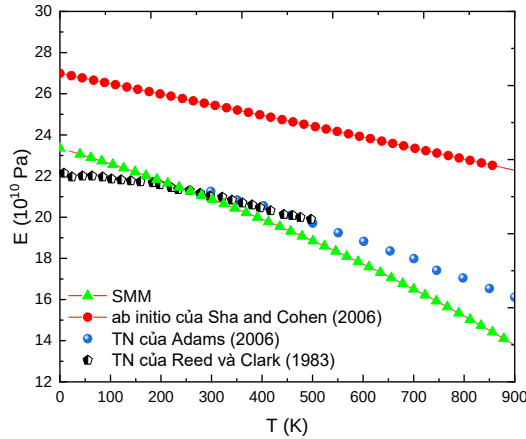


(b)

Hình 1. (a) $E(c_{Cr})$ và (b) $K(c_{Cr})$ đối với FeCr tại $T = 298K$, $P = 0$ tính bởi SMM, *ab initio* của Olsson (2003) [4], *ab initio* của Zhang (2010) [24] và từ các TN của Heinze (2009) [26] và Speich (1972) [25]

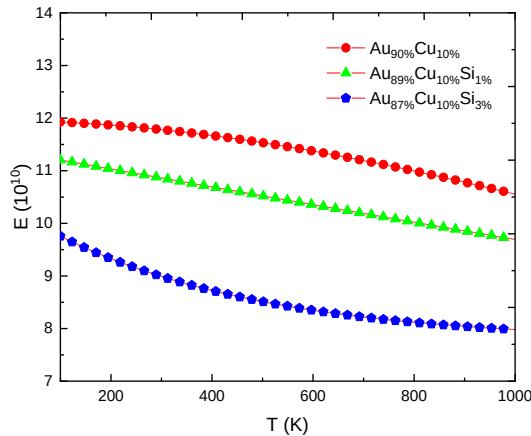
Các tính toán bởi SMM, *ab initio* và số liệu thực nghiệm đều chứng tỏ rằng biến dạng đàn hồi của FeCr ít thay đổi theo nồng độ Cr. Cụ thể là khi c_{Cr} tăng từ 0 đến 10% thì mô đun Young của FeCr tăng 1,4% theo tính toán bởi SMM và tăng 7% theo tính toán *ab initio* của Zhang và cộng sự (2010) [24] trong khi tăng 3,2% theo số liệu thực nghiệm của Speich và cộng sự (1972) [25]. Các bảng từ Bảng 5 đến Bảng 7 và Hình 1 chứng tỏ rằng đối với các mô đun đàn hồi E , K , G của

FeCr, tính toán bởi SMM chính xác hơn các tính toán *ab initio* của Olsson và cộng sự (2003) [4], Zhang và cộng sự (2010) [24]. Sự khác nhau giữa kết quả tính toán của Zhang và cộng sự (2010) [24] và thực nghiệm là do Zhang sử dụng biểu thức năng lượng liên kết có dạng $E(r) = a + be^{-\lambda r} + ce^{-2\lambda r}$ cho bởi Moruzzi và cộng sự (1988) [27], trong đó r là bán kính Wigner – Seitz, các đại lượng λ , a , b và c là các thông số thể được làm khớp tại 0K. Do đó, kết quả tính toán *ab initio* của Zhang bị ràng buộc bởi việc làm khớp các thông số nói trên ở vùng nhiệt độ thấp.



Hình 2. $E(T)$ của Fe tại $P = 0$ tính bởi SMM, *ab initio* của Sha và Cohen (2006) [28], từ các TN của Adams (2006) [7], Reed và Clark (1983) [30].

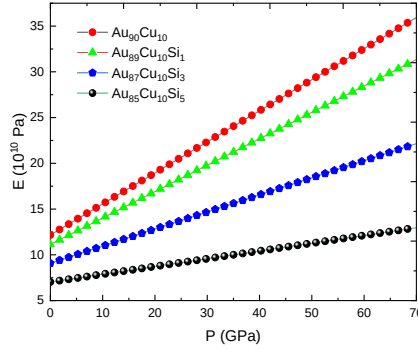
Sự phụ thuộc của môđun Young E vào nhiệt độ đối với kim loại chính Fe trong hợp kim FeCrSi được tính bởi SMM, tính toán *ab initio* của Sha và Chen (2006) [28] và từ các thực nghiệm của Adams và cộng sự (2006) [29], Reed và Clark (1983) [30] được chỉ ra trên Hình 2. Kết quả tính toán bằng SMM phù hợp rất tốt với thực nghiệm đặc biệt trong khoảng từ 200 đến 400 K và tốt hơn nhiều so với tính toán *ab initio*.



Hình 3. $E(T, c_{Si})$ đối với AuCuSi tại $P = 0$, $c_{Cu} = 10\%$

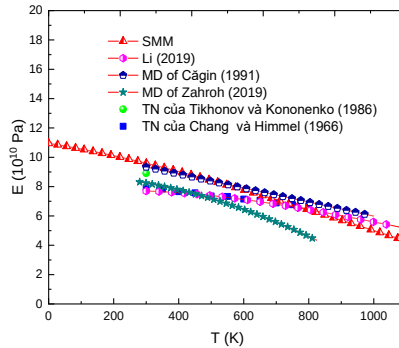
Sự phụ thuộc của môđun Young E vào nhiệt độ đối với hợp kim xen kẽ FeSi giống như sự phụ thuộc của môđun Young E vào nhiệt độ đối với kim loại Fe như được chỉ ra trong công trình trước đây của chúng tôi [15].

Sự phụ thuộc nhiệt độ, áp suất, nồng độ nguyên tử xen kẽ của môđun Young E đối với AuCuSi được minh họa trên Hình 3 và Hình 4. Theo kết quả này, đối với AuCuSi ở cùng áp suất, nhiệt độ và nồng độ Cu khi nồng độ Si tăng thì khoảng lân cận gần nhất trung bình a tăng và do đó, E , K , G , C_{11} , C_{12} , C_{44} , V_d và V_n giảm. Điều này cũng giống như AuSi. Chẳng hạn như đối với AuCuSi tại $T = 300$ K, $P = 70$ GPa và $c_{Cu} = 10\%$ khi c_{Si} tăng từ 0 đến 5% thì a tăng từ $2,6359$ đến $2,7086 \cdot 10^{-10}$ m và E giảm từ $35,604 \cdot 10^{10}$ đến $12,905 \cdot 10^{10}$ Pa. Đối với AuCuSi ở cùng áp suất, nhiệt độ và nồng độ Si khi nồng độ Cu tăng thì a giảm chậm và do đó, E , K , G , C_{11} , C_{12} , C_{44} , V_d và V_n tăng chậm. Chẳng hạn như đối với AuCuSi tại $P = 0$, $T = 300$ K và $c_{Si} = 5\%$ khi c_{Cu} tăng từ 0 đến 10% thì a giảm từ $2,9687$ đến $2,8740 \cdot 10^{-10}$ m và E tăng từ $6,911 \cdot 10^{10}$ tới $6,966 \cdot 10^{10}$ Pa. Đối với AuCuSi ở cùng nhiệt độ, nồng độ Cu và nồng độ Si khi áp suất P tăng thì a giảm và do đó, E , K , G , C_{11} , C_{12} , C_{44} , V_d và V_n tăng. Chẳng hạn như đối với AuCuSi tại $T = 300$ K, $c_{Cu} = 10\%$ và $c_{Si} = 5\%$ khi P tăng từ 0 đến 70 GPa thì a giảm từ $2,8740$ đến $2,7086 \cdot 10^{-10}$ m và E tăng từ $0,6966 \cdot 10^{11}$ đến $1,2950 \cdot 10^{11}$ Pa. Đối với AuCuSi ở cùng áp suất, nồng độ Si và nồng độ Cu khi nhiệt độ T tăng thì a tăng và do đó, E , K , G , C_{11} , C_{12} , C_{44} , V_d và V_n giảm. Chẳng hạn như đối với AuCuSi tại $P = 0$, $c_{Cu} = 10\%$ và $c_{Si} = 3\%$, khi T tăng từ 50 đến 1000 K thì a tăng từ $2,8447$ đến $3,2793 \cdot 10^{-10}$ m và E giảm từ $9,991 \cdot 10^{10}$ đến $7,959 \cdot 10^{10}$ Pa.



Hình 4. $E(P, c_{Si})$ đối với AuCuSi tại $T = 300$ K, $c_{Cu} = 10\%$

Quy luật biến đổi của khoảng lân cận gần nhất trung bình giữa hai nguyên tử theo áp suất và nồng độ nguyên tử xen kẽ đối với AuCuSi giống như quy luật đối với AuSi [17]. Còn quy luật biến đổi của khoảng lân cận gần nhất trung bình giữa hai nguyên tử theo áp suất và nồng độ nguyên tử thay thế đối với AuCuSi giống như quy luật đối với AuCu.



Hình 5. $E(T)$ đối với của Au tại $P = 0$ tính bởi SMM, Li (2019) [31], MD của Cagin et al. (1991) [32], MD của Zahroh et al. (2019) [33] và từ các TN của Chang và Himmel (1966) [34], Tikhonov và Kononenko (1986) [24]

Hình 5 mô tả sự phụ thuộc của môđun Young E vào nhiệt độ đối với Au tại $P = 0$ qua khoảng nhiệt độ từ 0 đến 1100 K, trong đó các kết quả tính số bằng SMM phù hợp tốt với các tính toán khác như tính toán động lực học phân tử (MD) của Căgin và cộng sự (1991) [32], tính toán của Li và cộng sự (2019) [31], tính toán MD của Zahroh và cộng sự (2019) [33] và các thực nghiệm của Chang và Himmel (1966) [34], Tikhonov và Kononenko (1986) [35].

3. Kết luận

Chúng tôi đưa ra mô hình hợp kim tam nguyên vừa thay thế vừa xen kẽ với cấu trúc lập phương và chỉ ra cách xác định các đại lượng biến dạng đàn hồi và vận tốc truyền sóng đàn hồi như các môđun đàn hồi E , K , G , các hằng số đàn hồi C_{11} , C_{12} , C_{44} , vận tốc sóng dọc V_d và vận tốc sóng ngang V_n của hợp kim này. Các đại lượng biến dạng đàn hồi và vận tốc truyền sóng đàn hồi phụ thuộc vào nhiệt độ, áp suất, nồng độ nguyên tử thay thế và nồng độ nguyên tử xen kẽ. Trong các trường hợp giới hạn, từ lý thuyết biến dạng đàn hồi và vận tốc truyền sóng đàn hồi của hợp kim tam nguyên vừa thay thế vừa xen kẽ với cấu trúc lập phương có thể suy ra lý thuyết biến dạng đàn hồi và vận tốc truyền sóng đàn hồi của hợp kim thay thế nhị nguyên, hợp kim xen kẽ nhị nguyên và kim loại với cùng cấu trúc lập phương.

Các kết quả lý thuyết được áp dụng tính số cho hợp kim FeCrSi trong khoảng nhiệt độ từ 0 đến 900K, khoảng áp suất từ 0 đến 10 GPa, khoảng nồng độ nguyên tử thay thế từ 0 đến 10% và khoảng nồng độ nguyên tử xen kẽ từ 0 đến 5% và cho hợp kim AuCuSi trong khoảng nhiệt độ từ 0 đến 1000K, khoảng áp suất từ 0 đến 70 GPa, khoảng nồng độ nguyên tử thay thế từ 0 đến 15% và khoảng nồng độ nguyên tử xen kẽ từ 0 đến 5%. Các kết quả tính số đối với FeCrSi và AuCuSi được so sánh với các kết quả tính số của Fe, FeCr, FeSi, Au, AuCu, AuSi, các kết quả tính toán khác và thực nghiệm. Nhiều kết quả tính số đối với hợp kim tam nguyên có tính dự báo, định hướng cho các thực nghiệm trong tương lai.

Lời cảm ơn. Bài báo được thực hiện với sự tài trợ kinh phí của đề tài “Nghiên cứu biến dạng và khuếch tán của hợp kim nhị nguyên và tam nguyên với cấu trúc lập phương ở dạng vật liệu khối và màng mỏng” của Trường Đại học Giao thông Hà Nội với mã số T2022-CB-010.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

- [1] Shibazaki Y., Nishida K., Higo Y., Igarashi M., Tahara M., Sakamaki T., Terasaki H., Shimoyama Y., Kuwabara S., Takubo Y. and Ohtani E., 2016. Compressional and shear wave velocities for polycrystalline bcc-Fe up to 6.3 GPa and 800 K. *American Mineralogist*, Vol.101, Iss.5, pp.1150-1160.
- [2] Odkhuu D., Yun W.S. and Hong S.C., 2012, Electronic origin of the negligible magnetostriction of an electric steel $\text{Fe}_{1-x}\text{Si}_x$ alloy: A density-functional study, *Journal of Applied Physics*, Vol.111, Iss. 6, 063911
- [3] Psiachos D., Hammerschmidt T. and Drautz R., 2011. *Ab initio* study of the modification of elastic properties of α -iron by hydrostatic strain and by hydrogen interstitials. *Acta Materialia*, Vol. 59, Iss. 11, pp. 4255-4263.
- [4] Olsson P., Abrikosov I.A., Vitos L. and Wallenius J., 2003. *Ab initio* formation energies of Fe–Cr alloys. *Journal of Nuclear Materials*, Vol. 321, pp. 84-90.
- [5] Zhang J., Su C. and Liu Y., 2020. First-principles study of bcc Fe–Cr–Si binary and ternary random alloys from special quasi-random structure. *Physica B: Condensed Matter*, Vol.586, ID 412085.

- [6] Nyilas R.D., Frank S. and Spolenak R., 2010. Revealing plastic deformation mechanisms in polycrystalline thin Films with synchrotron XRD. *JOM*, Vol. 62, pp. 44-51.
- [7] Duffy T.S., Shen G., Heinz D.L., Shu J., Ma Y., Mao H.K., Hemley R.J. and Singh A.K., 1999. Lattice strains in gold and rhenium under nonhydrostatic compression to 37 GPa, *Physical Review B*, Vol. 60, Iss. 22, pp. 15063-15073.
- [8] Esfahani M.N. and Jabbari M., 2020. Molecular Dynamics Simulations of Deformation Mechanisms in the Mechanical Response of Nanoporous Gold. *Materials*, Vol. 13, Iss. 9, p. 2071.
- [9] Singh B.N., Huang X., Tähtinen S., Moilanen P., Jacquet P. and Dekeyser J., 2007. *Final report on in-reactor uniaxial tensile deformation of pure iron and Fe-Cr alloy*, 1616(EN), Riso National Laboratory Technical University of Denmark Roskilde, Denmark, 0106-2840.
- [10] Tang N. and Hung V.V., 1988. Investigation of the thermodynamic properties of anharmonic crystals by the momentum method, I. General results for face-centered cubic crystals. *Physica Status Solidi (b)*, Vol. 149, Iss. 2, pp. 511-519.
- [11] 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.
- [12] Tinh B.D., Hoc N.Q., Vinh D.Q., Cuong T.D. and 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, ID 5251741.
- [13] 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. *VNU Journal of Sciences: Mathematics-Physics*, Vol. 35, Iss. 1, pp.1-12.
- [14] Hoc N.Q., Tinh B.D., Hien N.D. and Coman G. , 2021, Nonlinear deformation of BCC metal Fe and BCC interstitial alloy FeSi: Dependence on temperature, pressure and silicon concentration, *Materials Physics and Mechanics*, Vol.47, pp.501-513.
- [15] Hoc N.Q., Hien N.D., Hoa N.M. and Trung V.Q. , 2021, Combining the Mie-Lennard-Jones and the model atomic potentials in studying the elastic deformation of interstitial alloy FeSi with BCC structure under pressure, *HNUE Journal of Science, Natural Sciences*, Vol. 65, Iss.6, pp.61-74.
- [16] Hoc N.Q., Tinh B.D., Tuan L.D. and Hien N.D., 2016, Elastic deformation of binary and ternary interstitial alloys with FCC structure and zero pressure: Dependence on temperature, concentration of substitution atoms and concentration of interstitial atoms, *Journal of Science of HNUE, Mathematical and Physical Sciences*, Vol. 61, Iss.7, pp. 47-57.
- [17] Hoc N.Q., Hien N.D. and Thang D.Q., 2018. Elastic deformation of alloy AuSi with FCC structure under pressure. *HNUE Journal of Science, Natural Sciences*, Vol. 63, Iss. 6, pp. 74-83.
- [18] Hoa N.T., Hoc N.Q., Coman G., Cuong T.D. and Viet L.H., 2019, Thermodynamic property of FCC interstitial alloy with defects, *Proc. of the 8th International Conference on Material Science and Engineering (UGALMAT 2018)*, 11 - 13 October, 2018, "Dunarea de Jos" University of Galati, Romania, *IOP Conference Series: Materials Science and Engineering*, Vol. 485, ID 012018.

- [19] Hoc N.Q., Tinh B.D. and Hien N.D., 2020. Stress-strain curve of FCC interstitial alloy AuSi under pressure. *Romanian Journal of Physics*, Vol.65, Iss. 5-6, p.608.
- [20] Hoc N.Q., Tinh B.D., Hien N.D. and Coman G., 2021. Study on nonlinear deformation of FCC-AuCuSi under pressure by the statistical moment method, *Advanced Materials Science and Engineering*, Vol. 2021, ID 6693326.
- [21] 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).
- [22] David R. Lide, 2005. *CRC Handbook of Chemistry and Physics*, 86th Ed., Taylor & Francis, Boca Raton London New York Singapore.
- [23] Good R. J. and Hope C. J., 1970. New combining rule for intermolecular distances in intermolecular potential functions. *Journal of Chemical Physics*, Vol. 53, Iss. 2, pp. 540-543.
- [24] Zhang H., Punkkinen Marko P.J., Johansson B. and Vitos L., 2010. Theoretical elastic moduli of ferromagnetic bcc Fe alloys. *Journal of Physics: Condensed Matter*, Vol. 22, ID 275402.
- [25] Speich G.R., Schwoeble A.J. and Leslie W.C., 1972. Elastic constants of binary iron-base alloys. *Metallurgical Transactions*, Vol. 3, Iss. 8, pp. 2031-2037.
- [26] Heintze C., Bergner F. and Ulbricht A., 2009. *Characterization of Fe-Cr alloys using SANS, nanoindentation and ultrasound*, Lecture (Conference) Euromat 2009, 07-10 October, 2009, Glasgow, United Kingdom, 13268.
- [27] Moruzzi V.L., Janak J.F. and Schwarz K., 1988. Calculated thermal properties of metals, *Physical Review B*, Vol. 37, Iss. 2, pp.790-799.
- [28] Sha X. and Cohen R.E., 2006. First-principles thermoelasticity of bcc iron under pressure. *Physical Review B*, Vol.74, Iss.21, p.214111.
- [29] Adams J.J., Agosta D.S., Leisure R. G. and Ledbetter H., 2006. Elastic constants of monocrystal iron from 3 to 500 K. *Journal of Applied Physics*, Vol. 100, Iss. 11, p.113530
- [30] Reed R.P. and Clark A.F., 1983. *Materials at low temperatures*. American Society for Metals, pp.1-590.
- [31] Li W., Kou H., Zhang .X, Ma J. and Li J., Geng P., Wu X., Chen L. and Fang D., 2019. Temperature-dependent elastic modulus model for metallic bulk materials. *Mechanics of Materials*, Vol. 139, ID 103194.
- [32] Çağın T., Dereli G., Uludoğan and Tomak M., 1985. Thermal and mechanical properties of some fcc transition metals. *Physical Review B*, Vol. 59, Iss. 5, pp. 3468-3473.
- [33] Zahroh F.F., Sugihartono I. and Safitri E.D., 2019. Young's Modulus Calculation of Some Metals Using Molecular Dynamics Method Based on the Morse Potential. *Computational and Experimental Research in Materials and Renewable Energy (CERiMRE)*, Vol. 2. Iss. 1, pp.19-34.
- [34] Chang Y.A. and Himmel L., 1966. Temperature Dependence of the Elastic Constants of Cu, Ag, and Au above Room Temperature. *Journal of Applied Physics*, Vol. 37, Iss. 9, pp. 3567-3572.
- [35] Tikhonov L.V., Kononenko G.I., 1986. *Mechanical properties of metals and alloys*. Kiev (in Russian).

ABSTRACT

Elastic deformation and elastic wave velocity of ternary alloys FeCrSi and AuCuSi

Nguyen Quang Hoc¹, Nguyen Duc Hien², Nguyen Thi Hoa³,
Pham Phuong Uyen¹ and Trinh Hong Ngoc¹

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

²*Mac Dinh Chi High School, Chu Pah, Gia Lai*

³*University of Transport and Communications*

The paper uses the model of cubic ternary substitutional and interstitial alloy and conditions in which the interstitial atom concentration is very small compared to the substitutional atom concentration, the substitutional atom concentration is very small compared to the main metal atom concentration. On that basis together with the elastic wave and the elastic deformation theory of this alloy obtained by the statistical moment method, we perform numerical calculations for temperature, pressure, the concentration of substitutional atoms, and concentration of interstitial atoms dependences of the elastic moduli E , K , G , the elastic constants C_{11} , C_{12} , C_{44} , the longitudinal wave velocity V_d and the transverse wave velocity V_n of alloys FeCrSi and AuCuSi. Numerical results for FeCrSi and AuCuSi are compared with that of Fe, FeCr, FeSi, Au, AuCu, AuSi, and other calculations, and experiments. Numerical results for ternary alloys predict experimental results in the future.

Keywords: ternary substitutional and interstitial alloy, elastic moduli, elastic constants, longitudinal wave velocity, transverse wave velocity, statistical moment method.