

# Ảnh hưởng của nồng độ tạp chất và áp suất đến điện trở suất của hợp kim FeNi

Effects of impurity concentration and pressure on the resistivity of FeNi alloy

Nguyễn Thị Hồng<sup>a,b\*</sup>  
Nguyen Thi Hong<sup>a,b\*</sup>

<sup>a</sup>Khoa Khoa học Tự nhiên, Trường Đại học Hồng Đức, Thanh Hóa, Việt Nam

<sup>a</sup>Faculty of Natural Sciences, Hong Duc University, Thanh Hoa, Vietnam

<sup>b</sup>Khoa Vật lý, Trường Đại học Khoa học Tự nhiên, Đại học Quốc gia Hà Nội, Việt Nam

<sup>b</sup>Faculty of Physics, Hanoi University of Science, VNU-Hanoi, Vietnam

(Ngày nhận bài: 18/6/2021, ngày phản biện xong: 22/6/2021, ngày chấp nhận đăng: 20/10/2021)

## Tóm tắt

Trong bài báo này, chúng tôi nghiên cứu điện trở suất của hợp kim FeNi dưới ảnh hưởng của nồng độ pha tạp và áp suất dựa trên quy tắc Matthiessen và mô hình do Côte và Meisel đề xuất. Kết quả tính số điện trở suất với các hợp kim loãng FeNi đến áp suất 100 GPa cho thấy, khi áp suất tăng thì điện trở suất của hợp kim giảm dần theo áp suất đến giá trị bão hòa. Nghiên cứu của chúng tôi cũng cho thấy rằng khi nồng độ Ni nhỏ hơn 20%, điện trở suất của hợp kim FeNi tăng gần như tuyến tính với nồng độ của tạp chất Ni. Các kết quả tính toán lý thuyết của chúng tôi được so sánh với dữ liệu thực nghiệm nén tĩnh và nén sốc cho thấy sự phù hợp tốt.

**Từ khóa:** Điện trở suất; FeNi; quy tắc Matthiessen; nồng độ tạp chất; áp suất cao.

## Abstract

In this work, impurity concentration and pressure effects on the electrical resistivity of FeNi alloy have been investigated based on the Matthiessen's rule combined with the model proposed by Côte and Meisel. Our numerical calculations for dilute FeNi alloys up to pressure of 100 GPa show that when the pressure increases, the electrical resistivity of the alloy gradually decreases to the value of saturation. Furthermore, when the concentration of Ni is less than 20%, the electrical resistivity of the FeNi alloy increases almost linearly with the concentration of Ni. Our theoretical calculations are compared with available experimental data (static and shock compressions) showing the reasonable agreement.

**Keywords:** Resistivity; FeNi; Matthiessen's rule; impurity concentration; high pressure.

## 1. Giới thiệu

Sắt-niken (FeNi) là một trong các hợp kim đầu tiên được con người sử dụng dưới dạng thiên thạch kim loại [1]. Hợp kim FeNi có nhiều ưu điểm như dễ uốn, có khả năng chống

ăn mòn và có độ bền tương đối cao. Do đó việc sử dụng hợp kim này trong công nghiệp đã được bắt đầu từ hàng trăm năm trước bao gồm các ngành giao thông vận tải (ô tô, đường sắt, hàng không, hàng hải) và trong các ngành

\*Corresponding Author: Nguyen Thi Hong; Faculty of Natural Sciences, Hong Duc University, Thanh Hoa, Vietnam; Faculty of Physics, Hanoi University of Science, VNU-Hanoi, Vietnam  
Email: nguyenthihongvatly@hdu.edu.vn

thông tin liên lạc (điện thoại, điện báo và đài phát thanh). FeNi cũng cung cấp một hệ thống mô hình lý tưởng để nghiên cứu các quá trình trong thương mại thép không gỉ và hợp kim invar [1] (một loại hợp kim có hệ số giãn nở cực kỳ thấp được sử dụng rộng rãi trong ngành công nghiệp điện tử và dụng cụ chính xác, các lĩnh vực khác như vật liệu kim loại kép, vật liệu từ tính, các thành phần của kính viễn vọng thiên văn, dụng cụ quang học, ...).

Mặt khác, sắt và các hợp kim của sắt là những thành phần chủ yếu trong lõi Trái đất nên việc biết tính chất vận chuyển của các hợp kim sắt ở các điều kiện liên quan đến lõi Trái đất là rất quan trọng để hiểu các câu hỏi địa từ và địa động lực của lõi Trái đất [2]. Dựa trên các bằng chứng vũ trụ, địa hóa học và địa vật lý, các nghiên cứu về Trái đất, vật lý thiên thể trước đây đã chỉ ra rằng lõi Trái đất có chứa một lượng đáng kể (5 đến 15%) Ni có thể tạo thành hợp kim với sắt trong lõi Trái Đất [1–3]. Do đó, các tính chất của hợp kim này đóng góp quan trọng vào cơ sở dữ liệu về cấu trúc, sự vận động và tiến hóa của lõi trái đất. Tác động lớn của các nguyên tố như H, C, S, Ni, O và Si, đối với các tính chất vật lý của lõi trái đất đã được thảo luận rộng rãi [4]. Các phép đo thực nghiệm điện trở suất của sắt ở áp suất cao (đến áp suất lõi Trái đất) cũng đã thực hiện trong đó có kể đến ảnh hưởng của các tạp chất Si, Ni, S, O và C [2,5]. Trong công trình [1] Acharya và cộng sự đã trình bày các kết quả của phép đo sự phụ thuộc nồng độ niken của điện trở suất của hợp kim nhị phân  $Fe_{0.9}Ni_{0.1}$ ,  $Fe_{0.7}Ni_{0.3}$ ,  $Fe_{0.5}Ni_{0.5}$ ,  $Fe_{0.3}Ni_{0.7}$ . Stacey và Anderson [6] ước tính điện trở suất của tạp chất đối với 10 at.% Ni là  $1,5 \cdot 10^{-7} \Omega m$ . Gần đây, Gomi và cộng sự [7] đã thực hiện các thí nghiệm ở áp suất cao trong tế bào để kim cương từ đó xác định điện trở suất của hợp kim FeNi. Tuy vậy, các nghiên cứu về điện trở suất của hợp kim FeNi ở áp suất cao vẫn còn rất hạn chế.

Trong công trình này, chúng tôi trình bày nghiên cứu ảnh hưởng của nồng độ tạp chất và áp suất lên điện trở suất của hợp kim FeNi. Trong đó, ảnh hưởng của nồng độ tạp chất Ni tới điện trở suất của hợp kim được tính toán dựa vào quy tắc Matthiessen. Để tính toán điện trở suất của hợp kim ở áp suất cao chúng tôi sử dụng đề xuất của Côté và Meisel trong đó điện trở suất của hệ hợp kim bao gồm cả điện trở suất bão hòa và điện trở suất do đóng góp của tán xạ phonon.

## 2. Nguyên tắc tính toán

Điện trở suất của vật liệu được gây ra bởi sự tán xạ của các hạt mang điện (điện tử hoặc lỗ trống) do các dao động lượng tử của mạng (nghĩa là các phonon) và do va chạm của chúng với nhau. Đối với kim loại tinh khiết, điện trở suất giảm về 0 tại  $T = 0 K$ , nhưng đối với hợp kim, sự phân tán các chất mang làm tăng điện trở suất. Sự tán xạ từ các phân tử tạp chất sẽ đóng góp phụ gia vào điện trở suất. Năm 1864 Matthiessen và cộng sự [8] đã đo điện trở suất của hợp kim hai thành phần trong khoảng nhiệt độ từ 0 đến  $100^{\circ}C$ . Các tác giả đã kết luận rằng việc bổ sung tạp chất chỉ thêm vào tổng điện trở suất của kim loại tinh khiết một thành phần không đổi, giữ nguyên thành phần phụ thuộc nhiệt độ. Điều này có nghĩa là sự đóng góp của tạp chất vào điện trở suất không phụ thuộc vào nhiệt độ và có thể viết tổng điện trở suất như sau:

$$\rho_{tot}(V, T) = \rho_{ph}(V, T) + \sum_i \rho_i(V) \times C_i, \quad (1)$$

trong đó  $\rho_{ph}(V, T)$  là điện trở suất do tán xạ phonon của kim loại sắt,  $\rho_i(V)$  là điện trở suất của tạp chất  $i$  và  $C_i$  là nồng độ của tạp chất  $i$ .

Trong nghiên cứu này, trước hết chúng tôi áp dụng quy tắc Matthiessen để xác định ảnh hưởng của nồng độ tạp chất lên điện trở suất của hợp kim loãng theo biểu thức (1). Trong đó, điện trở suất do tán xạ phonon của kim loại được chúng tôi xác định thông qua biểu thức của định luật Bloch-Grüneisen:

$$\rho_{ph}(V, T) = B(V) \left( \frac{T}{\theta_D(V)} \right)^5 \int_0^{\theta_D(V)} \frac{x^5 dx}{(e^x - 1)(1 - e^{-x})}, \quad (2)$$

với  $B(V)$  là đại lượng phụ thuộc vào áp suất và vật liệu nghiên cứu. Giá trị của  $B(V)$  có thể được suy ra từ biểu thức điện trở suất phụ thuộc áp suất của kim loại sắt tại nhiệt độ phòng [2]

$$\rho_{ph}(V, 300\text{K}) = 5,26 \times \left( 1,24 - \frac{V}{V_0} \right)^{-3.21} \times 10^{-9} \text{ (}\Omega\text{m)}. \quad (3)$$

Khi áp suất tăng thì nhiệt độ Debye cũng thay đổi, nhưng sự thay đổi của nhiệt độ Debye rất ít ảnh hưởng đến điện trở suất. Ở đây chúng tôi giả định giá trị của  $\theta_D(V)$  không đổi trong khoảng áp suất được nghiên cứu và có thể được xác định từ mô hình Debye tương quan phi điều hòa hoặc từ thực nghiệm.

Để xác định ảnh hưởng của áp suất lên điện trở suất của hợp kim chúng tôi áp dụng mô hình điện trở suất bão hòa được đề xuất bởi Cote và Meisel [9]. Tổng điện trở suất được tính toán từ mô hình của Cote và Meisel (1978) với điện trở suất tạp chất và điện trở suất do đóng góp của tán xạ phonon được mô hình hóa bởi Gomi và cộng sự theo phương trình sau [2,5].

$$\rho_{tot}(V, T) = \left( 1 - \frac{\rho_{tot}(V, T)}{\rho_{sat}(V)} \right) \rho_{ph}(V, T) + \rho_{imp}(V) \exp(-2W(V, T)), \quad (4)$$

trong đó  $\rho_{tot}(V, T)$  là tổng điện trở suất của hợp kim,  $\rho_{sat}(V)$  là điện trở bão hòa,  $\rho_{ph}(V, T)$  là điện trở suất do đóng góp của tán xạ phonon được xác định theo công thức (2),  $\rho_{imp}(V)$  là điện trở suất của tạp chất và thừa số  $\exp(-2W(V, T))$  là hệ số Debye-Waller có thể được xác định từ mô hình Debye hoặc thực nghiệm.

đó, chúng ta có thể viết điện trở suất bão hòa  $\rho_{sat}(V)$  dưới dạng [2]

$$\rho_{sat}(V) = \rho_{sat}(V_0) \left( \frac{V}{V_0} \right)^{1/3}, \quad (5)$$

trong đó  $\rho_{sat}(V_0) = 1,68 \times 10^{-6} \Omega\text{m}$  là giá trị điện trở bão hòa của sắt cũng như hợp kim sắt do Bohnenkamp và cộng sự xác định ở áp suất 1 bar [10].

Đối với điện trở suất bão hòa, theo Gomi và cộng sự [2] điện trở suất bão hòa  $\rho_{sat}(V)$  tăng tỷ lệ với  $V^{1/3}$ . Điều này có thể giải thích rằng hiện tượng bão hòa điện trở suất xảy ra khi quãng đường tự do trung bình có giá trị tương đương với khoảng cách giữa các nguyên tử. Do

Điện trở suất của tạp chất  $\rho_{imp}(V)$  được lấy từ thực nghiệm hoặc tính toán từ các nguyên lý ban đầu [2,5,7]. Cụ thể, biểu thức điện trở suất phụ thuộc áp suất của Ni được làm khớp từ các giá trị thực nghiệm tương ứng là [5]

$$\rho_{Ni}(V) = 2,40 \times \left( 11,6 - \frac{V}{V_0} \right)^{-0,918} \times 10^{-7} \text{ (}\Omega\text{m/at.}\%). \quad (6)$$

Để xác định được ảnh hưởng của áp suất đến điện trở suất, chúng tôi sử dụng phương trình trạng thái Vinet được xây dựng có dạng sau [11]

$$P = 3K_0 \left( \frac{V}{V_0} \right)^{-2/3} \left[ 1 - \left( \frac{V}{V_0} \right)^{1/3} \right] \exp \left\{ \frac{3}{2} (K_0' - 1) \left[ 1 - \left( \frac{V}{V_0} \right)^{1/3} \right] \right\}, \quad (7)$$

trong đó,  $K_0$ ,  $K'_0$  tương ứng là các môđun nén khối đẳng nhiệt và đạo hàm bậc nhất theo áp suất của nó. Các giá trị  $K_0$ ,  $K'_0$  có thể được xác định bằng đo đạc thực nghiệm hoặc mô phỏng lý thuyết phiếm hàm mật độ.

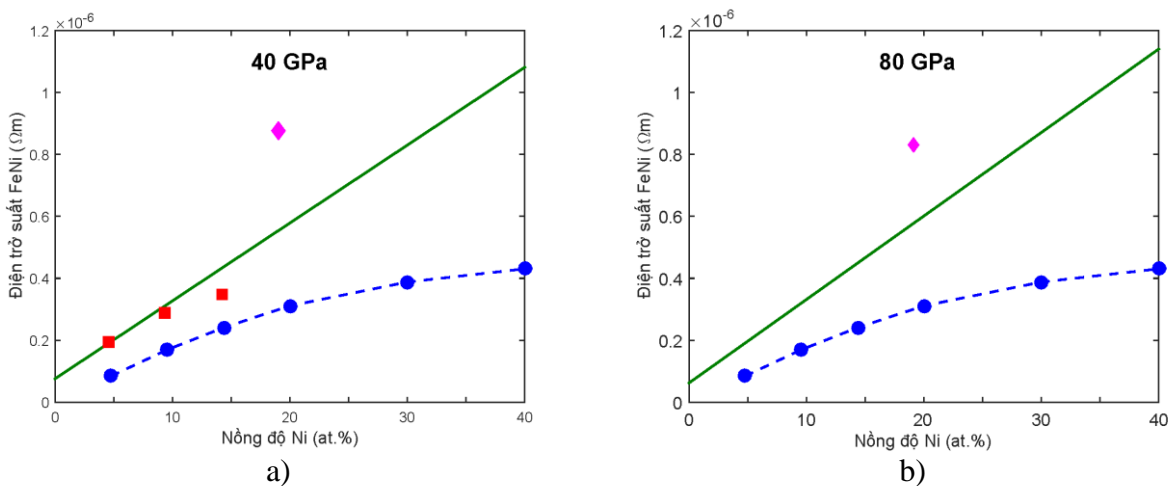
### 3. Tính số và thảo luận kết quả

Để tính toán ảnh hưởng của nồng độ tạp chất và áp suất đến điện trở suất của hợp kim FeNi, chúng tôi sử dụng các biểu thức được thiết lập trong Phần 2. Trong đó giá trị của nhiệt độ Debye và hệ số Debye-Waller được lấy từ thực nghiệm ở công trình của Gomi [5].  $\theta_D(V) = 710 \text{ K}$ ,  $\exp(-2W(V, T)) \approx 0.95$ . Môđun nén khối đẳng nhiệt và đạo hàm bậc nhất theo áp suất của nó đối với hợp kim cũng gần đúng đối với kim loại sắt [12]  $K_0 = 163,4 \text{ GPa}$ ,  $K'_0 = 5,38$

Trên Hình 1, chúng tôi biểu diễn ảnh hưởng của nồng độ tạp chất đến điện trở suất của hợp kim FeNi ở nhiệt độ phòng tại các áp suất 40 GPa (Hình 1a) và 80 GPa (Hình 1b). Các kết

quả thực nghiệm được đo bởi Gomi và cộng sự (bằng phương pháp ô mạng để kim cương (DAC)) [5,7] và phép đo nén sốc bởi Matassov [13] cũng được chúng tôi đưa vào để so sánh.

Từ Hình 1 chúng ta có thể nhận thấy, khi nồng độ tạp chất (Ni) nhỏ hơn 20%, kết quả tính toán từ mô hình lý thuyết của nhóm chúng tôi phù hợp tốt với dữ liệu thực nghiệm của [13] cũng như của Gomi và cộng sự [5,7]. Trong khoảng nồng độ tạp chất Ni này, điện trở suất của các hợp kim tăng gần như tuyến tính với nồng độ tạp chất. Kết quả này phù hợp tốt với tiên đoán của quy tắc Matthiesen. Tuy nhiên, khi nồng độ tạp chất lớn hơn 20%, sự sai khác giữa kết quả đo thực nghiệm và tính toán lý thuyết của nhóm chúng tôi được thể hiện rõ. Lúc này, các kết quả đo trước đây cho thấy điện trở suất của hợp kim sẽ không còn tăng tuyến tính mà sẽ giảm dần. Sự giảm này của điện trở suất cũng phù hợp với các tính toán từ nguyên lý ban đầu của Gomi và cộng sự [5].



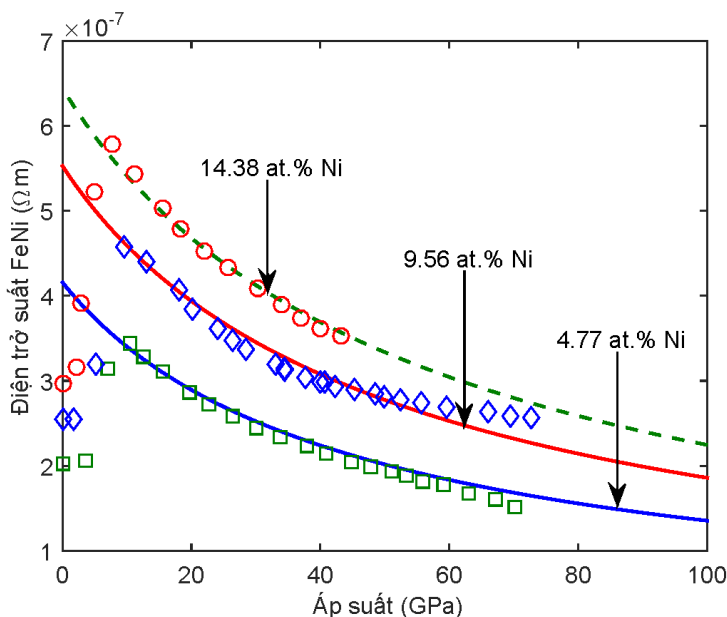
Hình 1. Ảnh hưởng của nồng độ tạp chất đến điện trở suất của hợp kim FeNi (tính toán của chúng tôi là đường liền nét). Dữ liệu thực nghiệm của Gomi và cộng sự bằng phương pháp DAC [5,7] (hình vuông đặc) và phép đo nén sốc bởi Matassov [13] (hình kim cương đặc) được chúng tôi biểu diễn để so sánh. Đường nét đứt và các hình tròn đặc là kết quả tính toán từ nguyên lý ban đầu của [5].

Ảnh hưởng của áp suất đến điện trở suất của hợp kim FeNi trong khoảng từ 0 GPa đến 100 GPa được chúng tôi biểu diễn trên Hình 2. Từ hình này, chúng ta có thể nhận thấy, dữ liệu của các phép đo thực nghiệm của Gomi và cộng sự

chỉ ra rằng điện trở suất của hợp kim FeNi ban đầu tăng nhanh theo sự tăng của áp suất và đạt giá trị cực đại ở áp suất 10 GPa sau đó giảm dần và có hiện tượng bão hòa ở vùng áp suất cao [7]. Sự thay đổi của điện trở suất tại các áp

suất này có thể được giải thích là do sự chuyển pha cấu trúc của các hợp kim. Có thể thấy, mô hình lý thuyết của nhóm chúng tôi chưa mô tả được sự biến thiên của điện trở suất theo áp suất ở vùng áp suất dưới 10 GPa. Tuy vậy, ở áp suất cao hơn 10 GPa, kết quả tính toán lý thuyết cho thấy điện trở suất giảm dần ở vùng áp suất cao phù hợp với các phép đo của Ohta và cộng sự [14]. Giải thích về hiện tượng bão hòa,

Gunnarsson và cộng sự [15] cho rằng, điện trở suất có xu hướng đạt tới giá trị bão hòa  $\rho_{sat}$  khi quãng đường tự do trung bình của electron tự do tương đương với khoảng cách tương tác giữa các nguyên tử ở nhiệt độ và áp suất cao. Do điện trở suất phụ thuộc vào khoảng cách tương tác giữa các nguyên tử nên giá trị này sẽ giảm theo áp suất.



**Hình 2.** Đồ thị sự phụ thuộc áp suất của điện trở suất của hợp kim FeNi ở các nồng độ Ni 4.77 at.% (đường liền nét màu xanh), 9.56 at.% (đường liền nét màu đỏ) và 14.387 at.% (đường nét đứt màu xanh lá). Dữ liệu thực nghiệm được Gomi và cộng sự đo bằng phương pháp DAC [7] ở các nồng độ tương ứng (cá hình vuông xanh lá, hình kim cương xanh da trời và hình tròn đỏ) cũng được chúng tôi biểu diễn để so sánh

#### 4. Kết luận

Trong công trình này, chúng tôi đã trình bày kết quả nghiên cứu ảnh hưởng của nồng độ pha tạp và áp suất đến điện trở suất của hợp kim FeNi. Kết quả tính toán số của chúng tôi đối với hợp kim loãng FeNi đến áp suất 100 GPa cho thấy, điện trở suất của hợp kim sẽ tăng dần theo nồng độ của tạp chất Ni. Khi áp suất tăng, điện trở suất của hợp kim FeNi giảm dần đến giá trị bão hòa. Ở áp suất cao hơn 10 GPa, tính toán lý thuyết cho kết quả phù hợp tốt với kết quả đo thực nghiệm. Điều này cho thấy, mô hình lý thuyết mà chúng tôi đưa ra có thể áp dụng để nghiên cứu điện trở suất của các hệ hợp kim khác dưới ảnh hưởng áp suất.

#### Tài liệu tham khảo

- [1] Acharya, S.S. and Medicherla, V.R.R. (2015) Structure and Resistivity of FeNi Binary Alloys. *Orissa Physical Society*. 22 (1), 99–102.
- [2] Gomi, H., Ohta, K., Hirose, K., Labrosse, S., Caracas, R., Verstraete, M.J., et al. (2013) The high conductivity of iron and thermal evolution of the Earth's core. *Physics of the Earth and Planetary Interiors*. 224 88–103.
- [3] D Anderson (1989) Theory of Earth. (Blackwell Scientific, Oxford).
- [4] Hirose, K., Labrosse, S., and Hernlund, J. (2013) Composition and state of the core. *Annual Review of Earth and Planetary Sciences*. 41 (March), 657–691.
- [5] Gomi, H., Hirose, K., Akai, H., and Fei, Y. (2016) Electrical resistivity of substitutionally disordered hcp Fe–Si and Fe–Ni alloys: Chemically-induced

- resistivity saturation in the Earth's core. *Earth and Planetary Science Letters*. 451 51–61.
- [6] Stacey, F.D. and Anderson, O.L. (2001) Electrical and thermal conductivities of Fe-Ni-Si alloy under core conditions. *Physics of the Earth and Planetary Interiors*. 124 (3–4), 153–162.
- [7] Gomi, H. and Hirose, K. (2015) Electrical resistivity and thermal conductivity of hcp Fe-Ni alloys under high pressure: Implications for thermal convection in the Earth's core. *Physics of the Earth and Planetary Interiors*. 247 2–10.
- [8] Matthiessen, A. and Vogt, C. (1864) Ueber den Einfluss der Temperatur auf die elektrische Leitungsfähigkeit der Legirungen. *Annalen Der Physik*. 198 (5), 19–78.
- [9] Cote, P. J. and Meisel, L. V. (1978) Origin of Saturation Effects in Electron Transport. 40 (24), 1586–1589.
- [10] Bohnenkamp, U., Sandström, R., and Grimvall, G. (2002) Electrical resistivity of steels and face-centered-cubic iron. *Journal of Applied Physics*. 92 (8), 4402–4407.
- [11] P. Vinet J. Ferrante J. H. Rose J. R. Smith (1987) Compressibility of solids. *Journal of Geophysical Research Geophys Res*. 92 (B9), 9319–9325.
- [12] Dewaele, A., Loubeyre, P., Occelli, F., Mezouar, M., Dorogokupets, P.I., and Torrent, M. (2006) Quasihydrostatic equation of state of Iron above 2 Mbar. *Physical Review Letters*. 97 (21), 29–32.
- [13] Matassov, G. (1977) The electrical conductivity of iron-silicon alloys at high pressures and the Earth's core. publishing house of University of California, .
- [14] Ohta, K., Kuwayama, Y., Hirose, K., Shimizu, K., and Ohishi, Y. (2016) Experimental determination of the electrical resistivity of iron at Earth's core conditions. *Nature*. 534 (7605), 95–98.
- [15] Gunnarsson, O., Calandra, M., and Han, J.E. (2003) Colloquium: Saturation of electrical resistivity. *Reviews of Modern Physics*. 75 (4), 1085–1099.