

CHUYỂN PHA CẤU TRÚC TRONG VẬT LIỆU ÔXÍT

STRUCTURAL TRANSITION IN OXIDE SYSTEMS

Nguyễn Văn Yên¹, Bùi Danh Hòa², Doãn Thị Thanh Bình³, Lê Thế Vinh²

¹⁾ Cao học Vật lý, Khoa 19, Trường Đại học Vinh, Email: trungyen2512@gmail.com;

²⁾ Trường ĐHSP Kỹ thuật Vinh.

³⁾ Trường THPT Nghi Lộc 3, Nghệ An

Tóm tắt: Bài báo trình bày kết quả nghiên cứu vi cấu trúc của Al_2O_3 và SiO_2 bằng phương pháp động lực học phân tử với thế tương tác Born-Mayer, vi cấu trúc của hệ được khảo sát thông qua hàm phân bố xuyên tâm, số phối trí và độ dài liên kết. Công trình này khảo sát sự thay đổi của vi cấu trúc dưới tác động của áp suất của hệ hai nguyên (Al_2O_3 , SiO_2) so với hệ ba nguyên ($(Al_2O_3)_2(SiO_2)$). Với mục đích chứng minh bản chất tự nhiên và sự tồn tại các đơn vị cấu trúc cơ bản TO_4 , TO_5 , TO_6 (T đại diện cho Al, Si). Kết quả nghiên cứu cho thấy đối với hệ SiO_2 khi áp suất tăng số phối trí các cặp cũng tăng lên và có xu hướng chuyển pha cấu trúc từ SiO_4 lên SiO_5 . Đối với hệ Al_2O_3 ở áp suất thấp chủ yếu bao quanh O là 4 nguyên tử Al, Khi áp suất tăng lên tỷ lệ này giảm. Sự phụ thuộc của chiết suất vào mật độ của các hệ vật liệu cũng được tính toán và thảo luận trong bài báo này.

Từ khóa: Vật liệu ôxít; Thế tương tác Born-Mayer; Vi cấu trúc; Số phối trí; Chiết suất.

1. Giới thiệu

Việc nghiên cứu vi cấu trúc của các hệ vật liệu ôxít đã và đang thu hút sự chú ý của các nhà khoa học trong và ngoài nước trong những năm gần đây bằng cả phương pháp thực nghiệm và mô phỏng. Một số vật liệu ôxít đã và đang được quan tâm nhiều là SiO_2 , Al_2O_3 , A2S. Công trình [1] tác giả M.Scott Sell và cộng sự đã thực hiện mô phỏng hệ SiO_2 lỏng gồm 450 nguyên tử (150 nguyên tử Si và 300 nguyên tử O). Ở các nhiệt độ từ 2500K đến 6000K và mật độ từ 1,8 g/cm³ đến 4,2 g/cm³ hệ số khuếch tán đạt cực đại ở mật độ khoảng 3,2 đến 3,5 g/cm³. Tác giả cho rằng ở mật độ trung bình khoảng 3,0 g/cm³ trật tự cấu trúc của hệ bị phá vỡ. Động lực học trở nên nhanh hơn thể hiện ở hệ số khuếch tán tăng. Tới mật độ khoảng 4,0 g/cm³ hệ số khuếch tán bắt đầu giảm mạnh. Ở áp suất cao hệ chuyển từ trạng thái có trật tự cấu trúc bị phá vỡ sang trạng thái có trật tự cấu trúc mới được thiết lập. Ở công trình [2] tác giả mô phỏng sự phụ thuộc của hệ số khuếch tán của Si và O trong hệ SiO_2 lỏng bằng phương pháp động lực học phân tử (ĐLHPT) với mô hình 450 nguyên tử kết quả thu được cũng phù hợp với số liệu trong công trình [1]. Công trình [3] tác giả xây dựng mô hình A2S chứa 1408 nguyên tử (với 256 nguyên tử Al, 256 nguyên tử Si và 896 nguyên tử O). Tác giả đã khảo sát hệ A2S thông qua quá trình làm nguội nhanh với nhiệt độ khác nhau và hầu hết đều có cấu trúc dạng tứ diện. Các kết quả như các khoảng cách trung bình $r_{Si-O} = 1.605(\text{Å})$, $r_{Al-O} = 1.66(\text{Å})$, $r_{Al-Al} = 3.13(\text{Å})$, $r_{Si-Si} = 3.12(\text{Å})$, số nguyên tử trung bình của O quanh Al, Si là 4.

Công trình [4] tác giả đã nghiên cứu vi cấu trúc của Al_2O_3 và GeO_2 lỏng dưới tác động của áp suất. Hai hệ

Abstract: This paper presents the research results of the material microstructures of Al_2O_3 , SiO_2 , using the method of molecular dynamics with the Born-Mayer interaction. Local structures of Al_2O_3 , SiO_2 and A2S under pressure are studied and analyzed through the radial distribution function, coordination number and distance bond length. The paper focuses on doing the research to clarify the change of the material microstructures of Al_2O_3 , SiO_2 , in comparison with $(Al_2O_3)_2(SiO_2)$ (denoted as A2S), with the purpose of demonstrating the nature and the existence of basic structure units: TO_4 , TO_5 , TO_6 (T is Si or Al) The research results showed that for the SiO_2 systems, when the pressure increases, coordination number also increases, and microstructure change from SiO_4 to SiO_5 . For Al_2O_3 systems, at low pressure mainly surrounded O are 4 Al atoms. When the pressure increases, this rate reduces; meanwhile, 5 Al atoms surrounding O increase very sharply. Besides, the dependence of refractive index on density will also be calculated and discussed in this paper.

Key words: Oxide materials; Born-Mayer potential; Material microstructures; Coordination number, refractive index

mẫu đã được xây dựng, gồm 1998 nguyên tử GeO_2 và 2000 nguyên tử Al_2O_3 ở nhiệt độ 3000K, giải áp suất từ 0 đến 50 GPa. Kết quả nghiên cứu cho thấy khi áp suất tăng mật độ của cả hai đều tăng nhưng của GeO_2 tăng mạnh hơn. Cấu trúc của chúng là một tập hợp các đơn vị cấu trúc TO_x , với $x = 4, 5$ và 6. Khi mật độ tăng tỷ lệ TO_4 giảm, tỷ lệ TO_6 lại tăng nhưng tỷ lệ TO_5 lại tăng sau đó lại giảm. Tỷ lệ này đạt cực đại ở mật độ 3.4g/cm³ cho Al_2O_3 và 5,25g/cm³ cho GeO_2 . Sự phụ thuộc của vi cấu trúc vào nồng độ trong nhôm-silicat lỏng $((Al_2O_3)_x(SiO_2)_{1-x})$ với $x = 0.25, 0.33, 0.47$ và 0.06 ở nhiệt độ 3000 K đã được nghiên cứu ở công trình [5]. Kết quả nghiên cứu đã chỉ ra rằng cấu trúc của vật liệu có 98.8% dạng SiO_4 , 64.4% là dạng AlO_4 , cũng có một tỷ lệ đáng kể tồn tại ở dạng AlO_3 và AlO_5 .

Tuy nhiên cho đến nay, sự thay đổi vi cấu trúc dưới tác động của áp suất trong A2S và sự khác nhau của quá trình chuyển pha cấu trúc xảy ra trong A2S với Al_2O_3 , SiO_2 chưa có công trình nào đề cập. Công trình này nhằm làm rõ hơn vấn đề nêu trên thông qua việc phân tích sự thay đổi của vi cấu trúc dưới tác động của áp suất đối với từng vật liệu.

2. Phương pháp nghiên cứu:

Thông tin về 3 hệ mẫu được xây dựng: 1998 nguyên tử SiO_2 (666 nguyên tử Si, 1332 nguyên tử O); 2000 nguyên tử Al_2O_3 (800 nguyên tử Al, 1200 nguyên tử O) và 1650 nguyên tử A2S (300 nguyên tử Al, 1050 nguyên tử O, 300 nguyên tử Si) được xây dựng bằng phương pháp mô phỏng động lực học phân tử với điều kiện biên tuần hoàn và thế tương tác Born-Mayer:

$$u_{ij} = \frac{q_i q_j e^2}{r} + A_{ij} \exp(-B_{ij} r)$$

Ban đầu các nguyên tử được gieo ngẫu nhiên trong không gian mô phỏng ở nhiệt độ khoảng 7000K. Sau 65.000 bước hệ được đưa về nhiệt độ 3000K áp suất 0 GPa. Với mật độ SiO₂ là 2,05 g/cm³ Al₂O₃ là 2,72 g/cm³ và A₂S là 2,15 g/cm³. Kết quả hàm phân bố xuyên tâm được so sánh với kết quả thực nghiệm và mô phỏng để kiểm tra độ tin cậy của mô hình. Từ trạng thái ổn định các mẫu lần lượt được nén ở các áp suất 5GPa, 10GPa, 15GPa, 20GPa, 25GPa, 30GPa. Sau 25.000 bước để tăng tính thống kê, số liệu tính toán của các thông số vật lý được lấy trung bình của 1000 lần tính, với 5 bước mô phỏng được xác định một lần.

Chiết suất của vật liệu được xác định qua biểu thức Lorentz - Lorenz và phương trình Clausius – Mosotti:

$$n = \sqrt{\frac{2c\rho + 1}{1 - c\rho}} \quad \text{Trong đó: } c = \frac{4\pi}{3} \alpha_m \frac{N_A}{m}$$

- ρ là mật độ, m khối lượng phân tử, α_m hệ số phân cực phân tử.

3. Kết quả và thảo luận:

3.1. Vi cấu trúc của SiO₂:

Bảng 1a. Vị trí đỉnh thứ nhất r_{ij} (Å), độ cao đỉnh thứ nhất g_{ij} (Å) của SiO₂.

P(GPa)	r_{ij} (Å)			g_{ij} (Å)		
	Si-Si	Si-O	O-O	Si-Si	Si-O	O-O
0	3.16	1.60	2.56	4.55	12.89	3.15
5	3.12	1.58	2.54	4.45	12.22	3.12
10	3.10	1.58	2.54	3.99	10.44	2.88
15	3.10	1.58	2.54	3.65	8.26	2.60
20	3.10	1.60	2.54	3.56	6.99	2.54
25	3.12	1.60	2.48	3.47	6.16	2.55
30	3.10	1.60	2.48	3.47	5.60	2.56

Bảng 1b. Số phối trí Z_{ij} của SiO₂.

P(GPa)	Z_{ij}			
	Si-Si	Si-O	O-Si	O-O
0	4.28	4.02	2.01	7.81
5	4.55	4.06	2.03	8.5
10	5.27	4.19	2.09	9.85
15	6.68	4.45	2.22	11.94
20	7.71	4.76	2.38	13.07
25	8.52	5.04	2.52	13.97
30	9.08	5.26	2.63	14.63

Bảng 1a và 1b cho ta thấy khi thay đổi mật độ thì độ dài liên kết của các cặp Si-Si, Si-O, O-O có sự thay đổi rất ít. Các số liệu này khá phù hợp với kết quả nghiên cứu

ở công trình [5,8] với $r_{\text{Si-Si}} = 3.12(\text{Å})$, $r_{\text{Si-O}} = 1.60(\text{Å})$, $r_{\text{O-O}} = 2.54(\text{Å})$.

Về độ cao đỉnh thứ nhất khi mật độ tăng lên ta thấy độ cao đỉnh g_{ij} hầu như giảm, các cặp Si-Si, O-O, có sự giảm nhẹ. Riêng với cặp Si-O giảm rất mạnh từ 12.89(Å) xuống 5.60(Å).

Về số phối trí khi mật độ tăng lên thì hầu như số phối trí của tất cả các cặp tăng lên. Tăng mạnh ở các cặp Si-Si với 4.28 đến 9.08. Cặp O-O tăng từ 7.81 đến 14.63. Đặc biệt cặp Si-O chuyển từ tứ diện SiO₄ sang SiO₅.

Bảng 2. Số phối trí của cặp liên kết O-Si theo các áp suất khác nhau.

P(GPa)	1	2	3	4
0	0.002	0.986	0.012	0.000
5	0.000	0.972	0.028	0.000
10	0.000	0.906	0.094	0.000
15	0.000	0.779	0.219	0.002
20	0.000	0.627	0.363	0.009
25	0.000	0.501	0.477	0.022
30	0.000	0.409	0.550	0.041

Bảng 2 trình bày về phân bố số phối trí cặp O-Si. Ở mật độ thấp thì chủ yếu bao quanh O có hai nguyên tử Si, có một lượng không đáng kể 1 hoặc 3 nguyên tử Si. Ở mật độ cao thì có sự ngược lại, số lượng 2 nguyên tử Si bao quanh O giảm đáng kể trong khi 3 nguyên tử Si tăng lên và có tồn tại 1 lượng nhỏ 4 nguyên tử Si bao quanh 1 nguyên tử O.

3.2. Vi cấu trúc của Al₂O₃

Bảng 3a. vị trí đỉnh thứ nhất r_{ij} (Å), độ cao đỉnh thứ nhất g_{ij} (Å), của Al₂O₃.

P (GPa)	r_{ij} (Å)			g_{ij} (Å)		
	Al-Al	Al-O	O-O	Al-Al	Al-O	O-O
0	3.10	1.70	2.72	3.01	5.91	2.34
5	3.14	1.70	2.74	2.72	5.24	2.30
10	3.08	1.70	2.68	2.80	4.97	2.37
15	3.06	1.70	2.66	2.82	4.78	2.34
20	3.02	1.72	2.60	2.90	4.51	2.45
25	3.04	1.72	2.56	2.89	4.47	2.44
30	3.00	1.74	2.56	2.93	4.44	2.51

Bảng 3b. Số phối trí Z_{ij} của Al₂O₃.

P(GPa)	Z_{ij}			
	Al-Al	Al-O	O-Al	O-O
0	7.90	4.21	2.81	11.77
5	9.15	4.50	3.00	13.25
10	9.91	4.68	3.12	14.06
15	10.51	4.84	3.22	14.69

20	11.30	5.10	3.40	15.37
25	11.61	5.22	3.48	15.74
30	11.89	5.34	3.56	16.03

Bảng 3a và 3b cho thấy khi tăng áp suất từ 5 GPa độ dài liên kết Al-Al, O-O có xu thế giảm nhẹ, trong khi độ dài liên kết cặp Al-O có xu thế tăng nhẹ. Kết quả này phù hợp với công trình [4], công trình thực nghiệm [7] với $r_{Al-Al} = 3.2(\text{Å})$, $r_{Al-O} = 1.8(\text{Å})$, $r_{O-O} = 2.8(\text{Å})$.

Khi áp suất tăng lên độ cao đỉnh thứ nhất của cặp Al-O có xu thế giảm mạnh trong khi cặp Al-Al, O-O có sự thay đổi. Về số phối trí, khi áp suất tăng lên các cặp liên kết Al-Al, Al-O, O-Al, O-O hầu như đều tăng. Riêng cặp Al-Al, O-O tăng mạnh, đặc biệt cặp Al-O có xu thế từ tứ diện AlO_4 sang dạng AlO_5 .

Bảng 4. Số phối trí của cặp liên kết O-Al theo các áp suất khác nhau.

P(GPa)	1	2	3	4	5
0	0.000	0.000	0.252	0.686	0.062
5	0.000	0.000	0.131	0.741	0.127
10	0.000	0.000	0.084	0.715	0.198
15	0.000	0.000	0.056	0.668	0.270
20	0.000	0.000	0.026	0.557	0.404
25	0.001	0.000	0.017	0.501	0.465
30	0.002	0.000	0.010	0.440	0.526

Bảng 4, ở áp suất thấp chủ yếu bao quanh O là 4 Al, có khoảng 25,2% có 3 Al bao quanh O và một lượng nhỏ có 5 Al bao quanh O. Trong khi ở áp suất cao 4 Al, 5Al bao quanh O là chủ yếu, so với pha mật độ thấp thì 4Al bao quanh O giảm, trong khi 5Al bao quanh O tăng mạnh.

Đối với hệ A2S các thông số vi cấu trúc kết quả tính toán về hàm phân bố xuyên tâm, số phối trí có kết quả phù hợp với số liệu trong công trình [6].

3.3. Thảo luận về sự thay đổi vi cấu trúc của hệ SiO_2 , Al_2O_3 và A2S

Bảng 5. Số phối trí của hệ SiO_2 , Al_2O_3 và A2S ở mật độ thấp.

P	0 (GPa)			
Số phối trí (%)	4	5	6	
Z_{Si-O}	95.5	3.1	0	
Z_{Al-O}	69.2	24.5	1	
A2S	Z_{Si-O}	61.3	5.1	0
	Z_{Al-O}	98.6	13.2	0

Số liệu ở Bảng 5 cho thấy ở mật độ thấp ($P = 0\text{GPa}$), các mẫu Al_2O_3 tồn tại ở các dạng tứ diện AlO_4 , một lượng nhỏ ở dạng AlO_5 , không có bát diện. Điều này cũng đúng với SiO_2 với tỷ lệ SiO_4 chiếm tới 95.5% trong khi dạng bát diện lại không tồn tại và một phần ít tồn tại ở dạng SiO_5 . Khi hòa trộn mẫu SiO_2 , Al_2O_3 thành A2S ta vẫn không thấy xuất hiện dạng bát diện. Tỷ lệ tứ diện SiO_4 và AlO_4 vẫn chiếm phần chủ yếu điều này là không thay đổi

khi có sự hòa trộn nhưng với SiO_4 tỷ lệ này đã giảm đáng kể trong khi AlO_4 lại có xu thế ngược lại.

Bảng 6. Số phối trí của hệ SiO_2 , Al_2O_3 và A2S ở mật độ cao.

P	30(GPa)			
Số phối trí (%)	4	5	6	
Z_{Si-O}	15.2	46.2	35.4	
Z_{Al-O}	10.1	47.5	40.0	
A2S	Z_{Si-O}	8.4	41.4	43.1
	Z_{Al-O}	13.5	54.1	32.1

Xét hệ ở mật độ cao ($P = 30\text{GPa}$), số liệu trong Bảng 6 cho thấy với mẫu SiO_2 dạng tứ diện chiếm tỷ lệ nhỏ nhất phần lớn tồn tại ở dạng SiO_5 , SiO_6 . Điều này lại một lần nữa đúng cho mẫu Al_2O_3 với tỷ lệ tứ diện chỉ chiếm 10.1% trong khi AlO_5 chiếm 47.5%. Khi có sự pha trộn thì tỷ lệ tứ diện có sự biến động nhẹ. Trong khi SiO_4 giảm thì AlO_4 lại tăng. SiO_5 , AlO_5 tuy có giảm nhưng chúng vẫn chiếm tỷ lệ nhiều nhất.

So sánh hệ ở mật độ thấp và hệ ở mật độ cao. Nhìn vào hai pha mật độ ta thấy rõ các tỷ lệ cấu trúc đã có sự thay đổi hoàn toàn, trong khi TO_4 (T là Si hoặc Al) thì giảm còn TO_5 , TO_6 tăng lên, với TO_5 , TO_6 tăng vừa phải thì TO_4 thì giảm rất mạnh. Với SiO_4 giảm từ 95.5% xuống 15.2%, điều này cũng đúng khi đã có sự kết hợp. Như vậy sự lập lại cấu trúc đã cho ta thấy ảnh hưởng của áp suất đến vi cấu trúc như thế nào.

Sự thay đổi về áp suất dẫn đến sự thay đổi về độ dài liên kết, độ cao đỉnh, số phối trí cũng như về góc đã làm thay đổi về mật độ mẫu, chính điều này làm ảnh hưởng đến chiết suất của các hệ.

3.4. Ảnh hưởng của áp suất đến vi cấu trúc và chiết suất

Bảng 7. Mật độ và chiết suất ở các áp suất khác nhau của SiO_2 , Al_2O_3 .

P(GPa)	SiO_2		Al_2O_3	
	Mật độ (g/cm^3)	Chiết suất (n)	Mật độ (g/cm^3)	Chiết suất (n)
0	2.057932	2.21294	2.767061	2.42010
5	2.244970	2.33809	3.113725	2.59237
10	2.582267	2.54097	3.312564	2.68448
15	3.035798	2.78285	3.466177	2.75292
20	3.300985	2.91271	3.662482	2.83738
25	3.525459	3.01739	3.772688	2.88347
30	3.693571	3.09309	3.864951	2.92138

Kết quả tính toán chiết suất của SiO_2 và Al_2O_3 được trình bày ở Bảng 7. Kết quả cho thấy chiết suất của SiO_2 và Al_2O_3 tăng theo mật độ có sự tuyến tính, khi áp suất thấp thì mật độ thấp và mật độ sẽ tăng khi áp suất tăng. Điều này phù hợp với thực tế, và cũng từ bảng số liệu trên chúng ta nhận thấy khi áp suất tăng thì chiết suất cũng tăng lên, giá trị lớn nhất đạt được ở 30GPa.

Bảng 8. Mật độ và chiết suất ở các áp suất khác nhau của A2S.

P(GPa)	Mật độ(g/cm ³)	Chiết suất(n)
0	2.152064	1.685277
5	2.599281	1.714617
10	2.892535	1.744309
15	3.378895	1.803999
20	3.608345	1.835014
25	3.765273	1.856916
30	3.835315	1.866835

Số liệu trong Bảng 7 ta đã thấy sự phụ thuộc của chiết suất vào mật độ cũng như áp suất, của các nguyên tử SiO₂, Al₂O₃ khi chúng độc lập. Ở Bảng 8 ta thấy khi hai nguyên tử trên kết hợp để tạo thành A2S thì dường như sự phụ thuộc trên cũng không thay đổi. Có chăng Chỉ là khác nhau về mặt giá trị hàm số còn cái cách mà nó phụ thuộc lẫn nhau thì vẫn vậy. Vẫn là sự phụ thuộc tuyến tính giữa mật độ và chiết suất.

4. Kết luận

Ba hệ mẫu vật liệu là Al₂O₃, SiO₂ và A2S với 21 mô hình ở các áp suất khác nhau đã được xây dựng. Số liệu tính toán hàm phân bố xuyên tâm của các mô hình phù hợp với số liệu thực nghiệm. Những mô hình này có thể dùng để nghiên cứu các tính chất vật lý khác nhau của hệ.

Với mẫu SiO₂ khi áp suất tăng số phối trí các cặp cũng tăng lên và có xu thế chuyển pha cấu trúc từ SiO₄ lên SiO₅. Đồng thời độ dài liên kết ít thay đổi, độ cao đỉnh thứ nhất giảm, giảm mạnh nhất ở cặp Si-O.

Với mẫu Al₂O₃ ở áp suất thấp chủ yếu bao quanh O là 4 Al. Khi áp suất tăng lên tỷ lệ này giảm, trong khi đó 5 nguyên tử Al bao quanh O lại tăng rất mạnh. Khi áp suất tăng độ dài liên kết tăng ít, nhưng độ cao đỉnh giảm mạnh.

Với mẫu A2S, số phối trí của tất cả các cặp đều tăng lên khi tăng áp suất. Có xu thế chuyển pha từ cấu trúc TO₅ sang TO₆. Độ dài liên kết các cặp thay đổi, độ cao đỉnh thứ nhất giảm.

Ở pha mật độ thấp SiO₂, Al₂O₃ tồn tại chủ yếu ở dạng tứ diện, tỷ lệ này là không thay đổi trong A2S. Trong khi ở mật độ cao tỷ lệ tứ diện giảm mạnh, ở áp suất cao cấu trúc bát diện tăng lên đáng kể.

Sự phụ thuộc của chiết suất vào mật độ của các hệ SiO₂, Al₂O₃ đã được khảo sát. Kết quả tính toán cho thấy chiết suất tăng khi mật độ tăng. Kết quả này cho phép phân tích mối quan hệ giữa tính chất quang học của vật liệu và các đặc trưng vi cấu trúc dưới tác động của áp suất.

Tài liệu tham khảo

- [1] Shell M. Scott, Pablo G. Delerediti and Athanassios Panagiotopoulos, "Molecular structural order and anomalies in liquid silica", Phys. Rev. E, 66, 011202 (2002).
- [2] Sharma Ruchi, Mudi Anirban, Chakravarty Charusita, "Diffusional anomaly and network dynamics in liquid silica", Chem. Phys., 125, 4, 0454 (2006).
- [3] A.Winkler, J. Hobach, W.Kob K. Binder, "Structure and diffusion in amorphous aluminum silicate A molecular dynamics computer simulation", J. Chem. Phys., 120, 384 (2004).
- [4] P.K. Hung et. al., "Local structure of liquids Al₂O₃ and GeO₂ under densification", J. Non-Cryst. Sol., Vol 354, 3093 (2008).
- [5] Le The Vinh et. al., "Amolecular dynamic study of Alumina-Silica liquid", Communication in Physics, Vol. 19, No. 3, 155 (2009).
- [6] Nguyễn Thành Tín, Lê Thế Vinh, Bùi Danh Hào, "Mô phỏng cấu trúc vi mô của (Al₂O₃).2(SiO₂)", Tạp chí Khoa học, Trường Đại học Cần Thơ, Số 23b, Trang 89-96, (2012).
- [7] P. Lamparte, R. Kniep, "Structure of amorphous Al₂O₃", Physica B 234, 405 (1997).
- [8] K. Vollmayr, W. Kob, K. Binder, "Cooling-rate effects in amorphous silica: A computer-simulation study", Phys. Rev. B 54, 15808 (1996)

(BBT nhận bài: 23/01/2014, phản biện xong: 10/02/2014)