

LỜI NÓI ĐẦU

Tạp chí Khoa học Trường Đại học Hồng Đức là cơ quan ngôn luận chính thức của Trường Đại học Hồng Đức, có Mã số chuẩn quốc tế ISSN 1859 - 2759, hoạt động theo Giấy phép số 14/BTTTT-GPHĐBC ngày 01/01/2009, và Giấy phép số 125/GP-BTTTT cấp lại ngày 10 tháng 4 năm 2014 của Bộ Thông tin và Truyền thông.

Tạp chí Khoa học Trường Đại học Hồng Đức là nơi phản ánh hoạt động giáo dục, đào tạo; Công bố các tác phẩm, công trình nghiên cứu khoa học của cán bộ, giảng viên, học viên, các nhà khoa học trong và ngoài trường; Tuyên truyền phổ biến các chủ trương đường lối, chính sách của Đảng và Nhà nước về công tác giáo dục, đào tạo; Giới thiệu, trao đổi các kết quả nghiên cứu, ứng dụng các thành tựu khoa học và công nghệ trong nước và quốc tế.

Hội đồng biên tập rất mong nhận được sự cộng tác nhiệt tình của đông đảo cán bộ giảng viên, cán bộ nghiên cứu, các nhà khoa học trong và ngoài trường để Tạp chí Khoa học Trường Đại học Hồng Đức mang đến độc giả những kết quả, thông tin có giá trị khoa học và hữu ích.

HỘI ĐỒNG BIÊN TẬP

TẠP CHÍ KHOA HỌC
TRƯỜNG ĐẠI HỌC HỒNG ĐỨC
SỐ 39 (6 - 2018)

MỤC LỤC

1	<i>Lê Đình Chấn</i> <i>Nguyễn Hoàng Yến</i>	Phân lập và xác định trình tự gen RPOC1 từ loài Sâm cau (<i>Curculigo orchioides</i> Gaertn.) tại Thanh Hóa	5
2	<i>Phạm Thị Cúc</i> <i>Phạm Văn Châu</i>	Một số ứng dụng của hàm sinh xác suất	14
3	<i>Hoàng Văn Dũng</i> <i>Trần Minh Ngọc</i>	Mạng và quy hoạch mạng nội bộ Trường Đại học Hồng Đức	24
4	<i>Nguyễn Tiến Dũng</i>	Điều khiển hệ số hấp thụ và tán sắc trong hệ phân tử kim loại kiềm cấu hình chữ V	33
5	<i>Nguyễn Tiến Đà</i>	Dáng điệu tiệm cận nghiệm của một lớp phương trình kiểu thủy động lực học ngẫu nhiên có trễ	40
6	<i>Nguyễn Đình Định</i> <i>Trịnh Thị Phú</i>	Ứng dụng phần mềm Maple để xây dựng hệ thống bài kiểm tra đánh giá kết quả học tập	48
7	<i>Mai Thị Ngọc Hằng</i> <i>Lê Thị Thanh Tâm</i> <i>Mai Thị Hồng</i>	Ảnh hưởng của kích thước cốt liệu lên các tính chất của bê tông	55
8	<i>Mai Thị Ngọc Hằng</i> <i>Lưu Đình Thi</i> <i>Hà Văn Sơn</i>	Các đặc tính kỹ thuật của bê tông bị xâm thực bởi muối sunphat	65
9	<i>Nguyễn Thị Hồng</i>	Các trạng thái đan rối trong bộ ghép phi tuyến kiểu Kerr được bơm trên hai mode	72
10	<i>Lê Quang Huy</i>	Cấu trúc căn của Idêan đơn thức	82

	<i>Hoàng Thị Minh Nhân</i>		
11	<i>Ngô Thị Lan Nguyễn Thị Thảo Nguyễn Văn Cần</i>	Nghiên cứu thời gian sống vận chuyển và thời gian sống lượng tử trong mô hình giếng lượng tử pha tạp một phía	89
12	<i>Đinh Chí Linh Lê Viết Bái Trần Đăng Thành</i>	Tính chất từ nhiệt của hệ vật liệu perovskite nền mangan $La_{0,7}A_{0,3}MnO_3$ với A là Ca, Sr và Ba	97
13	<i>Trần Mai Loan Trần Thị Hải Nguyễn Văn Cần</i>	Nghiên cứu thừa số dạng chấn để khảo sát ảnh hưởng của pha tạp lên tính chất điện trong giếng lượng tử	108
14	<i>Nguyễn Thị Nga</i>	Luật mạnh số lớn cho các phần tử ngẫu nhiên độc lập đôi một trong không gian Banach	115
15	<i>Lương Thị Kim Phượng Lê Thị Giang</i>	Ảnh hưởng của nồng độ ion Al^{3+} và điều kiện công nghệ tới tính chất quang của màng silica - titania pha tạp ion Er^{3+} ứng dụng trong quang dẫn sóng	120
16	<i>Lê Phương Thanh</i>	Thực nghiệm nghiên cứu chế tạo gạch không nung Geopolymer tro bay	131
17	<i>Nguyễn Thị Thảo</i>	Nghiên cứu mô phỏng động lực phân tử cấu trúc Nano xếp ZnO kênh rỗng dạng lục giác	140
18	<i>Nguyễn Ngọc Văn Đặng Việt Hùng</i>	Mô phỏng từ trường máy điện một chiều bằng phương pháp phần tử hữu hạn	148

PHÂN LẬP VÀ XÁC ĐỊNH TRÌNH TỰ GEN RPOC1 TỪ LOÀI SÂM CAU (*CURCULIGO ORCHIOIDES* GAERTN.) TẠI THANH HÓA

Lê Đình Chấn¹, Nguyễn Hoàng Yên²

TÓM TẮT

Thuật ngữ “DNA barcode” được sử dụng nhiều trong nghiên cứu phân loại học phân tử. Về cơ bản, kỹ thuật này dựa vào việc sử dụng một trình tự DNA khoảng 400-800 bp như là một tiêu chuẩn để nhận dạng và xác định quan hệ chủng loài của các loài sinh vật một cách nhanh chóng và chính xác. Do đó, kỹ thuật DNA mã vạch không chỉ giúp các nhà phân loại học trong công tác phân loại và xác định loài, mà còn nâng cao năng lực kiểm soát, hiểu biết và tận dụng sự đa dạng sinh học. Vì vậy trong bài viết này, chúng tôi đề cập đến kết quả phân lập và đọc trình tự gen *rpoC1* của các mẫu Sâm cau thu tại Thanh Hóa. Chúng tôi đã phân lập gen *rpoC1* từ 2 mẫu Sâm cau thu tại Vườn quốc gia Bến En và Khu bảo tồn thiên nhiên Xuân Liên Thanh Hóa, kích thước gen *rpoC1* mà chúng tôi thu được là 570 nucleotid và có sự tương đồng là 99,5% so với trình tự gen *rpoC1* đã công bố trên ngân hàng gen mã số JF972810.

Từ khóa: *RpoC1*, DNA barcoding, gen *RpoC1*, gen lục lạp.

1. ĐẶT VẤN ĐỀ

Theo Y học cổ truyền Việt Nam, Sâm cau (*Curculigo orchioides Gaertn.*) có vị cay, tính ấm, có tác dụng trợ dương, trừ hàn, cường dương, mạnh gân xương. Một số nghiên cứu gần đây cho thấy, Sâm cau có tác dụng kích thích miễn dịch, bảo vệ gan, chống oxy hóa, chống ung thư [10]. Mặt khác, Sâm cau có nhiều hợp chất quý có tác dụng chữa bệnh cao, đặc biệt là một số hợp chất như: glucosid chlorophenolic mới được phân lập từ Sâm cau, trong nhóm này gồm có: curculigin E (1), curculigin F (2), curculigin G (3), curculigin H (5), curculigin I (6) và một phenolic glycosid mới là orcinosid H (4), 2,6-dimethoxy benzoic acid (1), curculigoside A (2), curculigoside B (3), curculigine A (4), curculigine D (5) và 3,3', 5', 5'-tetramethoxy-7,9': 7',9'-diepoxy lignan-4,4'-di-O-beta-D-glucopyranoside (6), cùng với 8 glycosid phenolic đã được biết đến trước đó [5]. Cấu trúc của chúng đã được chứng minh bởi các kỹ thuật phổ (IR, UV, MS, 1D và 2D NMR). Các glycosid phenolic này được đánh giá có tác dụng chống loãng xương trên dòng tế bào MC3T3-E1 sử dụng phương pháp MTT. Tuy nhiên việc nghiên cứu đặc điểm di truyền học của loài cây này còn hạn chế, do đó những dữ liệu khoa học về di truyền học của loài dược liệu quý này chưa được công bố nhiều trên thế giới và trong nước; đặc biệt là hệ thống mã vạch DNA (DNA barcode).

Đối với thực vật, trong hệ thống mã vạch DNA thì hệ gen lục lạp mang nhiều đặc điểm thích hợp đối với chỉ thị DNA và hệ gen nhân, vùng DNA nằm giữa các gen hay còn gọi ITS

¹ Giảng viên khoa Khoa học Tự nhiên, Trường Đại học Hồng Đức

² Giáo viên Trường Trung học phổ thông Nguyễn Trãi, thành phố Thanh Hóa

(Internal Transcribed Spacer) thường được sử dụng làm DNA chỉ thị trong một số nghiên cứu [2,6,8]. Trong những năm gần đây, nhiều vùng gen đã được nghiên cứu và đề xuất là chỉ thị DNA cho thực vật như *Matk*, *Procl*... [3,4,7]. Theo Taberlet P. và cộng sự (2007), hệ thống mã vạch DNA lý tưởng phải đáp ứng các yêu cầu sau:

Thứ nhất, đoạn DNA chỉ thị phải đủ độ biến thiên để phân biệt giữa các loài nhưng không khác nhau quá mức giữa các cá thể trong cùng loài;

Thứ hai, hệ thống định danh bằng DNA phải được chuẩn hóa, với cùng một vùng DNA có thể được sử dụng cho các nhóm phân loại khác nhau;

Thứ ba, đoạn DNA chỉ thị cần chứa đủ thông tin phát sinh loài để có thể dễ dàng định danh loài vào các nhóm phân loại (chi, họ...);

Thứ tư, có khả năng áp dụng với các mẫu vật thô, với vị trí cặp mỗi nhân gen có độ bảo thủ cao, dễ dàng thực hiện phản ứng khuếch đại và đọc trình tự DNA.

Gen *rpoB*, *rpoC1*, *rpoC2* mã hóa ba trong 4 tiểu đơn vị của *RNA polymerase* lục lạp. Hiện nay *rpoB* là gen được sử dụng nhiều trong nghiên cứu phát sinh loài và xác định các loài vi khuẩn, đặc biệt khi nghiên cứu các chủng có quan hệ gần gũi. Cùng với gen 16S *rRNA*, *rpoB* được sử dụng trong nhiều nghiên cứu để xác định loài vi khuẩn mới, do vậy các gen này được đề xuất là chỉ thị barcode độc lập hoặc kết hợp một số gen khác. Trong các nghiên cứu gần đây, CBOL đã thử nghiệm 7 locus và thấy rằng khả năng phân biệt loài của đoạn gen *rpoC1* là thấp nhất (43%). Mặc dù vậy, trong một số nghiên cứu gần đây đã chỉ ra *rpoC1* là một chỉ thị rất hữu ích khi được sử dụng để phân biệt các loài bryophytes. Do vậy cần có các nghiên cứu tiếp theo để chứng minh sự phù hợp khi sử dụng *rpoB* và *rpoC1* làm chỉ thị barcode trong các nghiên cứu giám định loài [9,10].

Những thay đổi ở DNA lục lạp (cpDNA) đã và đang được sử dụng cho các nghiên cứu về tiến hóa, sinh thái và phát sinh chủng loại ở thực vật. CpDNA có mức độ bảo thủ trong việc thay thế cho các nucleotide. Điều này tạo điều kiện cho sự so sánh những thay đổi ở phạm vi rộng trong phân loại thực vật. Một số chỉ thị cpDNA như microsatellite lục lạp, một số vùng không mã hóa, một số phân đoạn của chuỗi đơn lớn (*trnC* - *trnD*, *trnD* - *trnT*, *psaA* - *trnS*, *petB* - *petD*, *trnH* - *psaA*, *trnD* - *trnT*) và một số vùng đệm giữa các gen (*trnL* - *trnF*) đã được sử dụng trong các nghiên cứu về đa dạng di truyền và phát sinh loài ở thực vật [1]. Vì vậy trong bài viết này, chúng tôi đề cập đến việc phân lập và đọc trình tự gen *ropC1* loài Sâm cau (*Curculigo orchioides* Gaertn.) tại Thanh Hóa nhằm cung cấp dữ liệu thực vật học về loài được liệt kê này.

2. NỘI DUNG

2.1. Vật liệu nghiên cứu

Mẫu Sâm cau (*Curculigo orchioides* Gaertn.) được thu thập vào lúc 8h00' sáng, ngày 18/4/2017 tại Thanh Hóa.

Cặp mồi đặc hiệu *rpoC1*F/R và các hóa chất cần thiết trong nghiên cứu sinh học phân tử như: Kit GenJET PCR Purification của hãng Thermo Scientific; Kit BigDye® Terminator

v3.1 Cycle Sequencing Tris HCl, EDTA, phenol, ethanol (100%), agarose... thuộc các hãng: Merck, Sigma, Biolabs của các nước Mỹ, Anh, Đức.

Tên môi		Trình tự môi (5' - 3')
<i>RpoC1</i>	F	GTGGATACTTCTTGATAATGG
	R	TGAGAAAACATAAGTAAACGGGC

2.2. Phương pháp nghiên cứu

2.2.1. Phương pháp tách chiết DNA tổng số

DNA tổng số được tách chiết từ lá non theo phương pháp của Shanghai Maroof và cộng sự (1984).

2.2.2. Phương pháp nhân gen *proC1* bằng kỹ thuật PCR

Theo phương pháp của Peter và cộng sự (2011) và bảng các cặp môi DNA Barcoding [12]. Trong đó, đoạn gen *rpoC1* được khuếch đại bằng kỹ thuật PCR với cặp môi đặc hiệu *rpoC1-1f/rpoC1-3r* với kích thước dự kiến là khoảng 600 nucleotide.

Phản ứng PCR được tiến hành với thành phần phản ứng được trình bày ở bảng 1.

Bảng 1. Thành phần phản ứng PCR nhân gen *rpoC1*

STT	Thành phần	Nồng độ	Thể tích (μl)
1	PCR Masster Mix	2X	12,5
2	Môi xuôi	10pmol/μl	1
3	Môi ngược	10pmol/μl	1
4	DNA khuôn	10ng/μl	1
5	Nước khử ion	-	9,5
Tổng thể tích			25

2.2.3. Phương pháp chạy điện di kiểm tra sản phẩm PCR

Trong nghiên cứu này, chúng tôi sử dụng DNA trên gel agarose 0,8% được phát hiện bằng cách nhuộm với Ethidium Bromide (EtBr) và quan sát dưới tia UV.

Sau khi chạy điện di, lấy bản gel ra khỏi máy điện di, nhẹ nhàng lấy riêng phần gel agarose cho vào hộp chứa dung dịch Ethidium bromide. Nhuộm trong 10 phút. Lấy bản gel ra, rửa bằng cách ngâm trong nước 2 - 3 phút. Đem vào máy quan sát dưới đèn tử ngoại (UV) và chụp ảnh.

Phương pháp tinh sạch sản phẩm PCR

Sau khi nhân được gen *rpoC1* bước tiếp theo cần thu nhận gen ở dạng tinh sạch và không lẫn gel agarose. Quá trình tinh sạch được thực hiện theo Kit GenJET PCR Purification của hãng Thermo Scientific.

2.2.4. Phương pháp xác định trình tự nucleotide của đoạn gen *rpoC1*

Trình tự nucleotide của đoạn gen *rpoC1* được xác định bằng máy giải trình tự ABI PRISM® 3100 Avant Genetic Analyzer, sử dụng bộ Kit BigDye® Terminator v3.1 Cycle Sequencing với cặp môi đặc hiệu. Trình tự gen được phân tích, so sánh và lập cây phát sinh chủng loại bằng các chương trình Bioedit, BLAST, DNASTAR. Thí nghiệm được thực hiện tại Viện Hàn lâm Khoa học và Công nghệ Việt Nam.

2.3. Kết quả và thảo luận

2.3.1. Kết quả tách chiết DNA

DNA được tách chiết theo phương pháp của Shanghai Maroof và cộng sự (1984), sau đó DNA được đo nồng độ và xác định độ sạch bằng máy đo NanoDrop (Thermo Scientific).

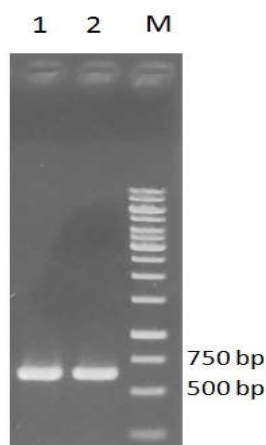
Bảng 2. Nồng độ và độ tinh sạch các mẫu

Tên mẫu	OD260/280	Nồng độ (ng/μl)
SCXL	2,00	938,4
SCBE	1,92	995,7

Qua bảng 2 có thể thấy rằng DNA được tách chiết với độ tinh sạch cao nằm trong khoảng từ 1,92 đến 2,00. Nồng độ DNA được tách chiết đạt từ 938,4 đến 995,7. DNA này sẽ được pha loãng đến nồng độ cuối cùng là 100ng/μl cho phản ứng PCR tiếp theo.

2.3.2. Kết quả nhân bản gen *rpoC1* các mẫu Sâm cau

Sau khi thực hiện PCR sản phẩm được tiến hành điện di kiểm tra trên gel agarose 0,8%. Kết quả PCR với các cặp môi đặc hiệu được thể hiện trên hình 1.



Hình 1. Kết quả PCR 2 mẫu với cặp môi *RpoC1*

M: Marker (1kb, Thermo);

*1: Sản phẩm PCR nhân bản bằng cặp môi *rpoC1F/R* từ mẫu Sâm cau Xuân Liên;*

*2: Sản phẩm PCR nhân bản bằng cặp môi *rpoC1F/R* từ mẫu Sâm cau Bến En*

Kết quả PCR từ 2 mẫu Sâm cau với cặp mồi *rpoC1* F/R thu được một băng duy nhất ở vị trí khoảng 600 bp, kết quả này phù hợp với tính toán lý thuyết và làm cơ sở cho việc đọc trình tự gen *rpoC1* phục vụ cho các nghiên cứu tiếp theo.

2.3.3. Kết quả đọc trình tự gen *rpoC1* từ 2 mẫu Sâm cau

Sản phẩm PCR sau khi được kiểm tra bằng phương pháp điện di, cho thấy sản phẩm thu được là đặc hiệu đúng kích thước so với tính toán lý thuyết, là cơ sở để chúng tôi tiến hành đọc trình tự gen *rpoC1* trên máy ABI PRISM® 3100 Avant Genetic Analyzer, sử dụng bộ Kit BigDye® Terminator v3.1 Cycle Sequencing với cặp mồi đặc hiệu, kết quả thu được như sau:

Trình tự gen *rpoC1* Bến En

```

1  AATCCGCGGA CAGCCAATGA GGGATGGTCA TAATAAAGTT TACAAGTCAT
51  TTTCAGATGT AATTGAAGGC AAAGAGGGAA GATTTTCGCGA GACTCTGCTT
101 GGTAAACGGG TTGATTACTC GGGGCGCTCC GTCATTGTCG TGGGTCCTTC
151 GCTTTCATTA CATCAATGTG GATTACCTCG AGAAATAGCA ATAGAACTTT
201 TCCAAACATT TGTAATTTCGT GGTCTAATCA GACAACATCT TGCTTCTAAC
251 ATAGGTATTG CTAAGAGTAA AATTCGGGAA AAAGAACCGA TTGTATGGGA
301 AATACTTCAA GAAGTTATGC AGGGGCATCC TGTATTGTTG AATAGAGCAC
351 CCACCTTGCA TAGATTAGGC ATACAGGCGT TCCAACCCAT TTTAGTGGAG
401 GGGCGTGCCA TTTGTTTACA CCCATTAGTT TGTAAGGGCT TCAATGCAGA
451 CTTTGATGGG GATCAAATGG CCGTTCATGT ACCTTTATCT TTGGAAGCTC
501 AAGCGGAAGC TCGTTTACTT ATGTTTTTCTC ATATGAATCT CCTGTCTCCA
551 ACTATTGGGG ATCCCATTTT
    
```

Trình tự gen *rpoC1* Xuân Liên

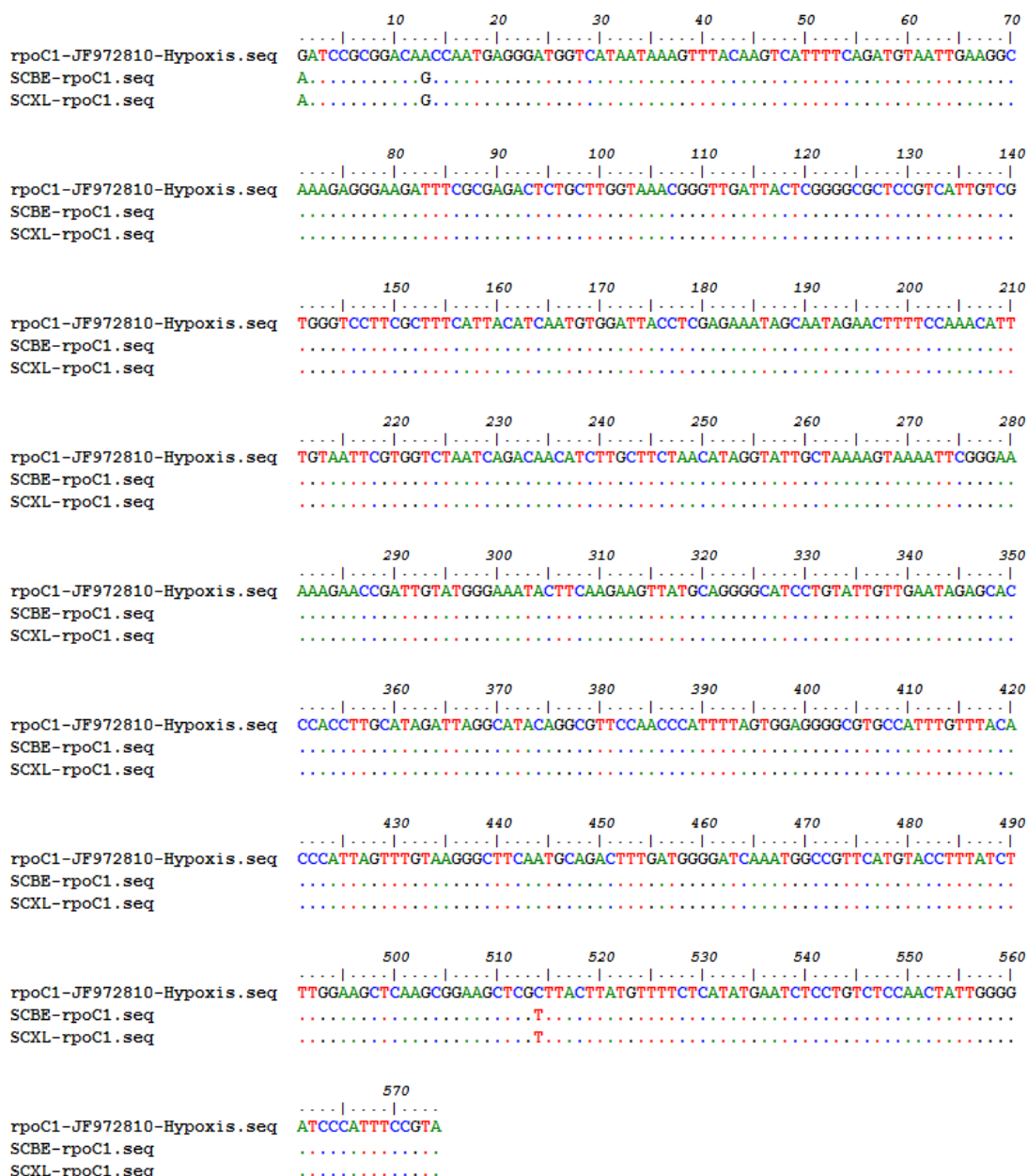
```

1  AATCCGCGGA CAGCCAATGA GGGATGGTCA TAATAAAGTT TACAAGTCAT
51  TTTCAGATGT AATTGAAGGC AAAGAGGGAA GATTTTCGCGA GACTCTGCTT
101 GGTAAACGGG TTGATTACTC GGGGCGCTCC GTCATTGTCG TGGGTCCTTC
151 GCTTTCATTA CATCAATGTG GATTACCTCG AGAAATAGCA ATAGAACTTT
201 TCCAAACATT TGTAATTTCGT GGTCTAATCA GACAACATCT TGCTTCTAAC
251 ATAGGTATTG CTAAGAGTAA AATTCGGGAA AAAGAACCGA TTGTATGGGA
301 AATACTTCAA GAAGTTATGC AGGGGCATCC TGTATTGTTG AATAGAGCAC
351 CCACCTTGCA TAGATTAGGC ATACAGGCGT TCCAACCCAT TTTAGTGGAG
401 GGGCGTGCCA TTTGTTTACA CCCATTAGTT TGTAAGGGCT TCAATGCAGA
451 CTTTGATGGG GATCAAATGG CCGTTCATGT ACCTTTATCT TTGGAAGCTC
501 AAGCGGAAGC TCGTTTACTT ATGTTTTTCTC ATATGAATCT CCTGTCTCCA
551 ACTATTGGGG ATCCCATTTT
    
```

Với 2 mẫu thu được từ kết quả phân lập, chúng tôi nhận được trình tự nucleotide của 2 mẫu đều bằng nhau và bằng 570 nucleotide, để khẳng định trình tự này là gen *rpoC1*, chúng tôi tiến hành so sánh với trình tự gen *rpoC1* đã công bố trên Ngân hàng gen quốc tế mã số JF972810 để làm cơ sở cho các nghiên cứu tiếp theo.

2.3.4. Kết quả phân tích trình tự gen *rpoC1* thu được với trình tự gen *rpoC1* mang mã số JF972810 đã công bố trên Ngân hàng gen quốc tế

Để so sánh các trình tự gen *rpoC1* chúng tôi thu được với trình tự gen *ropC1* thuộc loài *Curculigo orchoides* Gaertn đã công bố trên Ngân hàng gen quốc tế mang mã số JF972810 bằng phần mềm Blast. Kết quả được thể hiện trên hình 2.



Hình 2. Kết quả so sánh trình tự gen *rpoC1* thu được với trình tự gen *rpoC1* đã công bố trên Ngân hàng gen quốc tế mã số JF972810

Kết quả trên hình 2, cho thấy: Các mẫu Sâm cau thu được tại Bến En và Xuân Liên có trình tự nucleotide của gen *rpoC1* khác nhau với tỉ lệ rất ít (bảng 2), điều này một lần nữa khẳng định các mẫu Sâm cau thu được tại Vườn Quốc gia Bến En và Khu bảo tồn thiên nhiên Xuân Liên là cùng một loài. Tuy nhiên, một số vị trí trên các trình tự gen *rpoC1* chúng tôi thu được có sự sai khác so với trình tự gen *rpoC1* mang mã số JF972810 đã được công bố trên Ngân hàng gen quốc tế. Sự sai khác này được cụ thể hóa bởi bảng 3.

Bảng 3. Sự sai khác của các trình tự gen *rpoC1* thu được và trình tự gen *rpoC1* đã công bố trên Ngân hàng gen quốc tế mã số JF972810

TT	Vị trí	JF972810	BE	XL
1	1	G	A	A
2	13	A	G	G
3	514	C	T	T

Kết quả bảng 3 cho thấy, có 3 vị trí khác nhau giữa trình tự gen *rpoC1* chúng tôi thu được so với trình tự gen *rpoC1* mang mã số JF972810 đã công bố trên Ngân hàng gen quốc tế. Điều này cho thấy sự sai khác trong trình tự nucleotide của gen *rpoC1* là tương đối nhỏ giữa các mẫu chúng tôi thu được so với trình tự gen *rpoC1* đã công bố trên Ngân hàng gen quốc tế mã số JF972810 (Trung Quốc). Tuy nhiên, hai trình tự *rpoC1* chúng tôi thu được từ 2 mẫu Sâm cau tại Xuân Liên và Bến En Thanh Hóa có độ tương đồng là 100%. Điều này cho thấy, trình tự nucleotide bảo thủ của gen *rpoC1* là rất cao đối với các cá thể cùng loài tại những vùng địa lý tương tự nhau về điều kiện tự nhiên, thổ nhưỡng, tiểu khí hậu.

Để phân tích mối quan hệ di truyền của gen *rpoC1* tại các mẫu thu được và so với trình tự gen *rpoC1* đã công bố trên Ngân hàng gen quốc tế, chúng tôi tiếp tục sử dụng phần mềm BioEdit để phân tích, kết quả được thể hiện trên bảng 4 và hình 3.

Bảng 4. Kết quả so sánh giữa các trình tự gen *rpoC1* phân lập được với trình tự gen *rpoC1* đã công bố trên Ngân hàng gen quốc tế

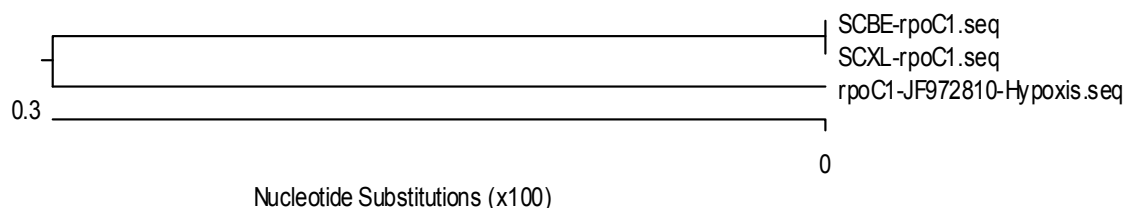
		Percent Identity			
		1	2	3	
Divergence	1	■	99.5	99.5	1
	2	0.5	■	100.0	2
	3	0.5	0.0	■	3
		1	2	3	

rpoC1-JF972810-Hypoxis.seq

SCBE-rpoC1.seq

SCXL-rpoC1.seq

Kết quả phân tích bảng 4 cho thấy, sự tương đồng của các trình tự gen *rpoC1* chúng tôi thu được là 100% và có sự sai khác 0,5 % so với trình tự gen *rpoC1* loài *Hypoxis aurea* thuộc họ Hypoxidaceae.



Hình 3. Sơ đồ cây dựa trên trình tự nucleotide của gen *rpoC1* của các mẫu thu được với trình tự gen *rpoC1* *Hypoxis aurea* - thuộc họ Hypoxidaceae mã số JF972180

Kết quả trên hình 3 cho thấy, các mẫu Sâm cau thu được tại Vườn Quốc gia Bến En và Khu bảo tồn thiên nhiên Xuân Liên là cùng loài và có quan hệ khác chi, cùng họ với loài *Hypoxis aurea* thuộc họ Hypoxidaceae.

3. KẾT LUẬN

Chúng tôi đã thành công trong việc phân lập và đọc trình tự gen *rpoC1* của loài Sâm cau tại Thanh Hóa, kích thước gen *rpoC1* chúng tôi thu được là 574 nucleotid và có sự tương đồng 99,5% so với trình tự gen *rpoC1* đã công bố trên Ngân hàng gen quốc tế mã số JF972180;

Trình tự gen *rpoC1* của các mẫu Sâm cau thu được tại Khu Bảo tồn thiên nhiên Xuân Liên và Vườn Quốc gia Bến En Thanh Hóa có độ tương đồng là 100%, điều này cho thấy các mẫu Sâm cau chúng tôi thu được là cùng loài.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

- [1] Aron J. F., Kevin S. B., Prasad R. K., Sean W. G., Steven G. N., Brian C. H., Diana M. P., Mehrdad Hajibabaei, Spencer C. H. B. (2008), *Multiple multilocus DNA barcodes from the plastid genome discriminate plant species equally well*, PLoS ONE, 3(7), pp. 2802.
- [2] Borsch T., Hilu K.W., Quandt D., Wilde V., Neinhuis C., Barthlott W. (2003), *Noncoding plastid trnT-trnF sequences reveal a well resolved phylogeny of basal angiosperms*, J. Evol. Biol, (6), pp. 558-576.
- [3] Chase M. W., Nicolas S., Mike W., James M. D., Rao P. K., Nadia H., and Vincent S. (2005), *Land plants and DNA barcodes: short-term and long-term goals*, Philos Trans R Soc Lond B Biol Sci, 360 (1462), pp. 1889-1895.
- [4] German Serino and Pal Maliga (1998), *RNA Polymerase Subunits Encoded by the Plastid rpo Genes Are Not Shared with the Nucleus- Encoded Plastid Enzyme*, PlantPhysiol. Aug, 117(4): 1165-1170.
- [5] Jiao L, Cao DP, Qin LP, Han T, Zhang QY, Zhu Z, Yan F. (2009), *Antiosteoporotic activity of phenolic compounds from Curculigo orchoides*. Sep-16(9):874-81.

- [6] Kim S, Kim J, Liu J. (2009), *Genetic discrimination of Catharanthus roseus cultivars by pyrolysis mass spectrometry*, J Plant Biol 52: 462465. doi: 10.1007/s12374-009-9059-1.
- [7] Kress W. J., Erickson D. L. (2008), *DNA barcodes: Genes, genomics, and bioinformatics*, Proc Natl Acad Sci U S A, 105(8), pp. 2761-2762.
- [8] Ole S. and Gitte P. (2009), *How many loci does it take to DNA barcode a crocus?*, PLoS ONE, 4(2), pp. 4598.
- [9] Taberlet P., Eric C., François P., Ludovic G., Christian M., Alice V., Thierry V., Gérard C., Christian B., and Eske W. (2007), *Power and limitations of the chloroplast trnL (UAA) intron for plant DNA barcoding*, Nucleic Acids Res, 35(3), pp14.
- [10] Zhang JG, Liu Q, Liu ZL, Li L, Yi LT. (2015), *Antihyperglycemic activity of Anoectochilus roxburghii polysaccharose in diabetic mice induced by high-fat diet and streptozotocin*, J Ethnopharmacol. 22;164. pp,180-185.
- [11] Zhong Xi Yi Jie He Xue Bao. (2010), *Curculigo orchioides: the black gold with numerous health benefits*. Jul;8(7):613-23.
- [12] M.A.Saghai-Maroofof, K.M.Soliman, R.A.Jorgensen, and R.W.Allard (1984), *Ribosomal DNA spacer-length polymorphism in barley: Mendelian inheritance, chromosomal location, and population dynamics*, Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America, December, 81(24):8014-8018

DISTRIBUTION AND GENERATION OF GENETIC TYPES OF THE *CURCULIGO ORCHIOIDES* GAERTN. IN THANH HOA

Le Dinh Chac, Nguyen Hoang Yen

ABSTRACT

The term “DNA barcode” is applied extensively in molecular taxonomy research. Basically, this technique is based on the use of a DNA sequence of about 400-800 bp as a standard for quickly and accurately recognizing and identifying species. Thus, DNA barcoding techniques not only help taxonomists in classifying and identifying species, but also improve their capacity to control, understand and utilize biodiversity. Therefore, in this article, we refer to the results of isolation and sequencing of rpoC1 genes of the Curculigo orchioides Gaertn., in Thanh Hoa province. We isolated two rpoC1 gene samples in Ben En National Park and Xuan Lien Nature Reserve, Thanh Hoa. The rpoC1 gene size we obtained was 570 nucleotides and was 99.5% similar to the published rpoC1 gene sequence compared to found gene bank code JF972810.

Keywords: *RpoC1, DNA barcoding, gen RpoC1, gene, chloroplast gene.*

MỘT SỐ ỨNG DỤNG CỦA HÀM SINH XÁC SUẤT

Phạm Thị Cúc¹, Phạm Văn Châu²

TÓM TẮT

Trong bài báo này, chúng tôi giới thiệu một vài ứng dụng của hàm sinh xác suất. Đó là sử dụng hàm sinh xác suất để tính xác suất, kỳ vọng, phương sai, tìm tổng của các biến ngẫu nhiên độc lập, khảo sát quá trình phân nhánh và tính xác suất tuyệt chủng của một họ cá thể.

Từ khóa: Hàm sinh xác suất, biến ngẫu nhiên, phân phối xác suất.

1. ĐẶT VẤN ĐỀ

Hàm sinh được sử dụng rộng rãi trong toán học và đóng vai trò quan trọng trong lý thuyết xác suất [3-5].

Có nhiều loại hàm sinh như : hàm sinh thường, hàm sinh mũ, hàm sinh xác suất, ... Trong bài viết này, chúng tôi sẽ xem xét hàm sinh xác suất đối với các biến ngẫu nhiên rời rạc nhận các giá trị $0, 1, 2, \dots$

Bản thân tên gọi ‘hàm sinh xác suất’ cũng cho chúng ta một gợi ý về vai trò của nó. Hàm sinh xác suất có thể được sử dụng để ‘sinh ra’ tất cả xác suất của phân phối. Tuy rằng đây không phải là cách hiệu quả được dùng để tính xác suất, sự thực là hàm sinh xác suất đã được chứng minh cho chúng ta biết mọi điều về phân phối xác suất. Bên cạnh đó, hàm sinh xác suất còn được sử dụng để tính kỳ vọng và phương sai.

Trong lý thuyết xác suất, tổng của các biến ngẫu nhiên đóng vai trò đặc biệt quan trọng trong việc nghiên cứu các quá trình ngẫu nhiên, bởi vì nhiều quá trình ngẫu nhiên được tạo nên từ tổng của một dãy các bước lặp, chẳng hạn bài toán về sự thua cuộc của người chơi cờ bạc. Song nhìn chung, việc tìm ra phân phối của tổng bằng cách sử dụng công thức tính xác suất truyền thống là khó khăn. Hàm sinh xác suất được xem là một công cụ hữu dụng để tính tổng và giới hạn của các biến ngẫu nhiên. Ưu điểm đặc biệt của hàm sinh xác suất là cho chúng ta một phương pháp thuận tiện để đặc trưng phân phối tổng $X + Y$ khi X và Y là độc lập. Hàm sinh xác suất chuyển một tổng thành tích và do đó ta có thể tính toán dễ dàng hơn.

Ngoài ra, đối với một số quá trình ngẫu nhiên, hàm sinh xác suất cũng đóng vai trò đặc biệt trong việc chỉ ra khi nào thì quá trình sẽ đạt đến một trạng thái đặc biệt hoặc một trạng thái cho trước.

¹ Giảng viên khoa Khoa học Tự nhiên, Trường Đại học Hồng Đức

² Giáo viên Trường Trung học phổ thông Hậu Lộc 3, huyện Hậu Lộc, tỉnh Thanh Hóa

2. NỘI DUNG

2.1. Hàm sinh xác suất

2.1.1. Định nghĩa và tính chất

Định nghĩa ([5]). Cho X là đại lượng ngẫu nhiên rời rạc nhận giá trị trong tập hợp các số tự nhiên $\{0; 1; 2; 3; \dots\}$. Hàm sinh xác suất của X là hàm số được xác định bởi

$$G_X(x) = p_0 + p_1x + p_2x^2 + \dots = \sum_{k=0}^{\infty} p_k x^k,$$

Trong đó $p_k = P\{X = k\}$ là xác suất để biến ngẫu nhiên X nhận giá trị k .

Chú ý rằng nếu X chỉ nhận một số hữu hạn giá trị thì ta gán cho xác suất bằng 0 đối với những giá trị không thể xảy ra.

Tính chất. Dễ thấy $G_X(x) = E(x^X)$.

Chú ý rằng $G_X(1) = 1$ vì vậy chuỗi hội tụ tuyệt đối với $|x| \leq 1$.

Ta cũng có $G_X(0) = p_0$.

Ta có thể mở rộng định nghĩa hàm sinh xác suất cho các hàm của X . Hàm sinh xác suất của biến ngẫu nhiên rời rạc $Y = f(X)$ là :

$$G_Y(x) = G_{f(X)}(x) = E(x^{f(X)}) = \sum_k P(X = k) x^{f(k)}$$

Nếu Y là hàm đơn giản thì ta có thể biểu diễn $G_Y(x)$ qua $G_X(x)$. Chẳng hạn, nếu $Y = a + bX$ thì:

$$G_Y(x) = E(x^Y) = E(x^{a+bX}) = x^a E[(x^b)^X] = x^a G_X(x^b)$$

2.1.2. Hàm sinh xác suất của một số phân phối thường gặp

i) Phân phối hằng ([1]): Giả sử $X = c$ là biến ngẫu nhiên hằng, nghĩa là $P(X = c) = 1$ và $P(X = k) = 0$ với $k \neq c$. Khi đó hàm sinh xác suất của X là:

$$G_X(x) = E(x^X) = x^c$$

ii) Phân phối Bernoulli ([2]): Giả sử X là biến ngẫu nhiên thỏa mãn: $P(X = 1) = p$, $P(X = 0) = 1 - p = q$, $P(X = k) = 0$ với $k \neq 0, 1$. Khi đó hàm sinh xác suất của X là:

$$G_X(x) = E(x^X) = q + px$$

iii) Phân phối hình học với tham số p ([2]): Giả sử X là biến ngẫu nhiên thỏa mãn $P(X = k) = pq^{k-1}$, $k = 1, 2, \dots$, $q = 1 - p$. Khi đó hàm sinh xác suất của X là:

$$G_X(x) = \frac{px}{1 - qx} \text{ nếu } |x| < \frac{1}{q}$$

iv) Phân phối nhị thức ([2]): Giả sử $X \approx B(n, p)$ là phân phối nhị thức với hai tham số (n, p) , nghĩa là $P(X = k) = C_n^k p^k (1-p)^{n-k}$, $k = 0, 1, 2, \dots, n$. Khi đó hàm sinh xác suất của X là:

$$G_X(x) = (q + px)^n, \quad (q = 1 - p)$$

v) Phân phối Poisson ([2]): Giả sử X là phân phối Poisson với tham số λ , nghĩa là $P(X = k) = \frac{\lambda^k e^{-\lambda}}{k!}$, $k = 0, 1, 2, \dots, n$. Khi đó hàm sinh xác suất của X là:

$$G_X(x) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} \lambda^k e^{-\lambda} x^k = e^{\lambda(x-1)}$$

2.1.3. Định lý duy nhất

Định lý 1 ([2]). Nếu các biến ngẫu nhiên X và Y có các hàm sinh xác suất lần lượt là $G_X(x)$ và $G_Y(x)$ thì $G_X(x) = G_Y(x)$ với mọi x khi và chỉ khi $P(X = k) = P(Y = k)$ với mọi $k = 0, 1, 2, \dots$. Nghĩa là, $G_X(x) = G_Y(x)$ khi và chỉ khi X và Y có cùng phân phối xác suất.

Chứng minh.

Ta chỉ cần chứng minh điều kiện cần. Do bán kính hội tụ của $G_X(x)$ và $G_Y(x)$ không nhỏ hơn 1 nên chúng có duy nhất một khai triển chuỗi lũy thừa:

$$G_X(x) = \sum_{k=0}^{\infty} P(X = k)x^k, \quad G_Y(x) = \sum_{k=0}^{\infty} P(Y = k)x^k$$

Nếu $G_X(x) = G_Y(x)$ thì hai chuỗi lũy thừa này có các hệ số đồng nhất.

Trong thực hành, nếu ta có thể chỉ ra rằng hai biến ngẫu nhiên có cùng hàm sinh xác suất trên một khoảng nào đó chứa 0 thì hai biến ngẫu nhiên đó có cùng phân phối xác suất. Điều đó có nghĩa là hàm sinh xác suất cho chúng ta biết mọi điều về phân phối xác suất.

2.2. Một số ứng dụng của hàm sinh xác suất

2.2.1. Sử dụng hàm sinh xác suất để tính xác suất

Hàm sinh xác suất có tên gọi như vậy bởi vì chuỗi lũy thừa có thể được khai triển và vì phân của nó sẽ cho chúng ta biết các xác suất riêng biệt. Vì vậy, cho trước một hàm sinh xác suất $G_X(x) = E(x^X)$ ta có thể biết được tất cả các xác suất $p_k = P(X = k)$ như sau:

Từ $G_X(x) = E(x^X) = \sum_{k=0}^{\infty} p_k x^k = p_0 + p_1 x + p_2 x^2 + p_3 x^3 + \dots$ suy ra :

$$p_k = P(X = k) = \frac{1}{k!} G_X^{(k)}(0) = \frac{1}{k!} \frac{d^k}{dx^k} G_X(x) \Big|_{x=0}$$

2.2.2. Tính kỳ vọng và phương sai từ hàm sinh xác suất

Cũng giống như việc tính xác suất, ta có thể sử dụng hàm sinh xác suất để tính kỳ vọng và phương sai của phân phối X .

Định lý 2. Cho X là biến ngẫu nhiên rời rạc có hàm sinh xác suất là $G_X(x)$. Khi đó:

i) $E(X) = G'_X(1)$

ii) $D(X) = G_X^{(2)}(1) - [G_X^{(1)}(1)]^2 + G_X^{(1)}(1)$

Chứng minh.

Ta có: $G'_X(x) = \sum_{k=1}^{\infty} kp_k x^{k-1}$.

Chuỗi này hội tụ với $-1 < x < 1$. Với $x = 1$ thì vế phải chính là $\sum kp_k = E(X)$. Nếu kỳ vọng này tồn tại thì đạo hàm $G'_X(x)$ sẽ liên tục trên khoảng đóng $-1 \leq x \leq 1$. Nếu $\sum kp_k$ phân kỳ thì $G'_X(x) \rightarrow \infty$ khi $x \rightarrow 1$. (Trong trường hợp này ta nói X có kỳ vọng vô hạn và viết $G'_X(1) = E(X) = \infty$). Điều này chứng tỏ:

$$E(X) = \sum_{k=1}^{\infty} kp_k = G'_X(1)$$

Tương tự, ta có:

$$E(X(X-1)) = \sum_{k=1}^{\infty} k(k-1)p_k = G_X''(1)$$

Từ đó suy ra phương sai của X là:

$$D(X) = G_X''(1) - [G'_X(1)]^2 + G'_X(1)$$

2.2.3. Tìm tổng của các biến ngẫu nhiên độc lập

2.2.3.1. Tổng của hai biến ngẫu nhiên độc lập

Từ định nghĩa của hàm sinh xác suất $G_X(x) = E(x^X)$ dễ dàng suy ra kết quả sau.

Định lý 3. Giả sử X và Y là hai biến ngẫu nhiên rời rạc độc lập với nhau và có hàm sinh xác suất lần lượt là $G_X(x)$ và $G_Y(x)$. Đặt $Z = X + Y$, khi đó :

$$G_Z(x) = G_{X+Y}(x) = G_X(x)G_Y(x)$$

Hệ quả 4. Nếu X_1, X_2, \dots, X_n là các biến ngẫu nhiên rời rạc độc lập với nhau và có hàm sinh xác suất lần lượt là $G_{X_1}(x), \dots, G_{X_n}(x)$ thì: $G_{X_1+\dots+X_n}(x) = G_{X_1}(x)\dots G_{X_n}(x)$.

Ví dụ 1. Trong một dãy gồm n phép thử độc lập Bernoulli, giả sử $I_i = 1$ nếu phép thử thứ i cho kết quả thành công (với xác suất p) và $I_i = 0$ nếu phép thử thứ i cho kết quả thất bại (với xác suất $q = 1 - p$). Đặt $X = \sum_{i=1}^n I_i$ là số lần thành công trong n phép thử. Tìm phân phối xác suất của X ?

Giải.

Vì các phép thử là độc lập nên các biến ngẫu nhiên I_1, \dots, I_n là độc lập. Vậy

$$G_X(x) = G_{I_1} G_{I_2} \dots G_{I_n}(x)$$

Nhưng $G_{I_i}(x) = q + px$, $i = 1, \dots, n$ nên $G_X(x) = (q + px)^n = \sum_{k=0}^n C_n^k (px)^k q^{n-k}$.

Khi đó, $P(X = k)$ là hệ số của x^k trong $G_X(x)$ và bằng $C_n^k p^k q^{n-k}$, $k = 0, \dots, n$, nghĩa là X là biến ngẫu nhiên có phân phối nhị thức với hai tham số (n, p) .

2.2.3.2. Tổng của một số ngẫu nhiên các biến ngẫu nhiên độc lập

Định lý 5. Giả sử N, X_1, X_2, \dots là các biến ngẫu nhiên rời rạc đếm được. Nếu các biến ngẫu nhiên X_i có cùng phân phối với hàm sinh xác suất là $G_X(x)$ thì $S_N = X_1 + \dots + X_N$ có hàm sinh xác suất là $G_{S_N}(x) = G_N(G_X(x))$. Chú ý rằng ta thừa nhận quy ước $X_1 + \dots + X_N = 0$ với $N = 0$).

Chứng minh.

$$\begin{aligned} \text{Ta có: } G_{S_N}(x) &= E(x^{S_N}) = \sum_{n=0}^{\infty} E(x^{S_N} | N = n) P(N = n) \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} E(x^{S_n}) P(N = n) = \sum_{n=0}^{\infty} G_{X_1 + \dots + X_n}(x) P(N = n) \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} [G_X(x)]^n P(N = n) = G_N(G_X(x)) \end{aligned}$$

Hệ quả. i) $E(S_N) = E(N).E(X)$

ii) $D(S_N) = E(N)D(X) + D(N)[E(X)]^2$

Ví dụ 2. (Gà Poisson) Một con gà đẻ N quả trứng, với N là biến ngẫu nhiên có phân phối Poisson với tham số λ . Mỗi quả trứng nở ra gà con với xác suất p một cách độc lập với các quả trứng khác. Tìm phân phối xác suất của số gà con được sinh ra Z .

Giải.

Gọi X_i là biến ngẫu nhiên chỉ số gà con được sinh ra từ quả trứng thứ i . Ta có : $Z = X_1 + \dots + X_N$, trong đó X_1, \dots, X_N là các biến ngẫu nhiên có phân phối Bernoulli với tham số p . Khi đó: $G_N(x) = e^{\lambda(x-1)}$, $G_X(x) = q + px$.

Vì vậy $G_Z(x) = G_N(G_X(x)) = e^{\lambda p(x-1)}$, nghĩa là Z là biến ngẫu nhiên có phân phối Poisson với tham số λp .

Ví dụ 3. (Bài toán cờ bắt cá) Một quý bà trước khi đi du lịch đã nhờ hàng xóm của mình cho cá vàng ở cái ao trong vườn nhà ăn. Mặc dù người hàng xóm sang và cho lũ cá vàng ăn hàng ngày song người này không bao giờ nhìn thấy một con cá vàng nào

trong suốt 3 tuần. Hóa ra tất cả cá vàng đã bị một con cò chén sạch trong khi người này không để ý.

Gọi N là số lần con cò ghé thăm cái ao trong khi người hàng xóm vắng mặt. Giả sử rằng N là một biến ngẫu nhiên có phân phối hình học với tham số $1-\theta$, vì vậy $P(N = n) = (1-\theta)\theta^n$, với $n = 0, 1, 2, \dots$. Khi con cò ghé thăm cái ao, xác suất p để nó bắt được một con cá vàng không phụ thuộc vào các lần ghé thăm khác. (Điều đó có nghĩa là ta đã giả sử có nhiều vô hạn cá vàng để cho cò bắt!). Tìm phân phối xác suất của biến ngẫu nhiên T chỉ tổng số cá vàng bị bắt.

Giải.

Đặt $X_i = 1$ nếu cò bắt được một con cá vàng trong lần ghé thăm và $X_i = 0$ nếu cò không bắt được con cá vàng nào trong lần ghé thăm đó. Khi đó $T = X_1 + X_2 + \dots + X_N$ (tổng của một số ngẫu nhiên các biến ngẫu nhiên).

Vì vậy: $G_T(x) = G_N(G_X(x))$

Bây giờ: $G_X(x) = E(x^X) = x^0.P(X = 0) + x^1.P(X = 1) = 1 - p + px$. Ta cũng có :

$$G_N(y) = \sum_{n=0}^{\infty} y^n P(N = n) = \sum_{n=0}^{\infty} y^n (1-\theta)\theta^n = (1-\theta) \sum_{n=0}^{\infty} (y\theta)^n = \frac{1-\theta}{1-\theta y}, \quad (y < \frac{1}{\theta})$$

$$\text{Suy ra: } G_T(x) = \frac{1-\theta}{1-\theta G_X(x)} = \frac{1-\theta}{1-\theta(1-p+px)} = \frac{1-\theta}{1-\theta+\theta p-\theta px}$$

Tiếp tục biến đổi ta được:

$$G_T(x) = \frac{1-\theta}{(1-\theta+\theta p)-\theta px} = \frac{1-\theta}{1-\theta+\theta p} \cdot \frac{1}{1-\left(\frac{\theta p}{1-\theta+\theta p}\right)x} = \frac{1-\theta}{1-\theta+\theta p} \cdot \frac{1}{1-\frac{\theta p}{1-\theta+\theta p}x}$$

Đây là hàm sinh xác suất của phân phối hình học với tham số $\left(1 - \frac{\theta p}{1-\theta+\theta p}\right)$. Vì vậy theo tính duy nhất của hàm phân phối xác suất ta kết luận rằng T có phân phối hình học với tham số $\left(1 - \frac{\theta p}{1-\theta+\theta p}\right)$.

Nhận xét. Bài toán trên đây cho thấy việc sử dụng hàm sinh xác suất thực sự rất hữu ích trong việc tính tổng của các biến ngẫu nhiên mà nếu sử dụng hàm xác suất thông thường sẽ gặp khó khăn. Thật vậy, để tìm phân phối xác suất của $T = X_1 + X_2 + \dots + X_N$ (là tổng của một số ngẫu nhiên các biến ngẫu nhiên) ta cần tìm biểu thức $P(T = t)$ với t bất kỳ. Để tìm $P(T = t)$ ta phải phân hoạch các giá trị khác nhau của N :

$$P(T = t) = \sum_{n=0}^{\infty} P(T = t | N = n) P(N = n)$$

Sau đó tính tổng theo n . Đối với những bài tổng quát, cả hai bước này nhìn chung sẽ quá khó nếu không có máy tính. Sử dụng hàm sinh xác suất ta không gặp những khó khăn này, và thậm chí nếu $G_T(x)$ không có dạng đơn giản thì ta vẫn có thể biết được mọi điều về phân phối của T .

2.2.4. Sử dụng hàm sinh xác suất để khảo sát quá trình phân nhánh và tìm xác suất tuyệt chủng

Xét một cá thể (giả định) nào đó sống trong đúng một đơn vị thời gian sau đó chết trong quá trình sinh ra một họ các cá thể tương tự. Ta giả sử rằng :

- i) Các kích thước của họ cá thể là các biến ngẫu nhiên độc lập nhận các giá trị $0, 1, 2, \dots$;
- ii) Các kích thước của họ cá thể là những biến ngẫu nhiên có cùng phân phối xác suất, số ‘con’ trong một họ ký hiệu là C có phân phối : $P(C = k) = p_k, k = 0, 1, 2, \dots$

Sự phát triển của ‘dân số’ khi thời gian tiếp diễn gọi là *quá trình phân nhánh*. Giả sử X_n là số cá thể được sinh ra ở thời điểm n (nghĩa là kích thước của thế hệ thứ n). Sự phát triển của dân số được mô tả bởi một dãy các biến ngẫu nhiên X_0, X_1, X_2, \dots . Giả sử rằng $X_0 = 1$, nghĩa là ta bắt đầu với đúng một cá thể.

Ta có thể sử dụng hàm sinh xác suất để khảo sát quá trình này như sau. Gọi $G(x)$ là hàm sinh xác suất của C , theo định nghĩa hàm sinh xác suất thì : $G(x) = \sum_{k=0}^{\infty} P(C = k)x^k$

và gọi $G_n(x)$ là hàm sinh xác suất của X_n thì: $G_n(x) = \sum_{i=0}^{\infty} P(X_n = i)x^i$

Bây giờ, giả sử $G_0(x) = x$, vì $P(X_0 = 1) = 1; P(X_0 = i) = 0$ với $i \neq 1$ và $G_1(x) = G(x)$.

Ta cũng có : $X_n = C_1 + C_2 + \dots + C_{n-1}$

Trong đó: C_j là kích thước của họ được sinh ra bởi thành viên thứ j của thế hệ thứ $(n-1)$. Như vậy, do X_n là tổng của một số ngẫu nhiên các biến ngẫu nhiên độc lập và có cùng phân phối xác suất nên ta có: $G_n(x) = G_{n-1}(G(x))$ với $n = 2, 3, \dots$ và điều này cũng đúng với $n = 1$. Lặp lại công thức này, ta được :

$$G_n(x) = G_{n-1}(G(x)) = G_{n-2}(G(G(x))) = \dots = G_1(G(G(\dots(x)\dots))) = G(G(G(\dots(x)\dots)))$$

với $n = 0, 1, 2, \dots$, nghĩa là G_n là bước lặp thứ n của G .

Bây giờ, vì $G(1) = 1$ nên ta có : $E(X_n) = G'_n(1) = G'_{n-1}(G(1))G'(1) = G'_{n-1}(1)G'(1)$, nghĩa là $E(X_n) = E(X_{n-1})\mu$, trong đó $\mu = E(C)$ là kích thước trung bình của họ cá thể. Do đó : $E(X_n) = \mu E(X_{n-1}) = \mu^2 E(X_{n-2}) = \dots = \mu^n E(X_0) = \mu^n$

$$\text{Vì vậy : } E(X_n) \rightarrow \begin{cases} 0, & \mu < 1 \\ 1, & \mu = 1 \\ \infty, & \mu > 1 \end{cases}$$

Thực ra ta có thể chỉ ra được toàn bộ phân phối xác suất của X_n bằng cách khai triển hàm sinh dưới dạng chuỗi lũy thừa của x , song kết quả này khá phức tạp. Tuy nhiên, trường

$$\text{hợp đặc biệt : } P(X_n = 0) = G_n(0) = p \frac{q^n - p^n}{q^{n+1} - p^{n+1}} = \frac{\mu^n - 1}{\mu^{n+1} - 1}$$

Trong đó $\mu = q/p$ là kích thước trung bình của họ. Từ đó suy ra sự tuyệt chủng là chắc chắn nếu $\mu < 1$ và ít chắc chắn hơn nếu $\mu > 1$.

Dưới đây, ta sẽ chỉ ra rằng kết luận trên đây về sự tuyệt chủng là đúng đối với tất cả các phân phối của kích thước họ cá thể.

Xác suất để quá trình tuyệt chủng sau n thế hệ là $e_n = P(X_n = 0)$. Ta có $e_n \leq 1$ và $e_n \leq e_{n+1}$ (vì $X_n = 0$ kéo theo $X_{n+1} = 0$), nghĩa là $\{e_n\}$ là một dãy đơn điệu bị chặn. Vì vậy $e = \lim_{n \rightarrow \infty} e_n$ tồn tại và được gọi là *xác suất tuyệt chủng*.

Định lý 6. e là nghiệm không âm nhỏ nhất của phương trình $x = G(x)$.

Chứng minh.

Chú ý rằng: $e_n = P(X_n = 0) = G_n(0)$. Ta có:

$$G_n(x) = G_{n-1}(G(x)) = \dots = G(G \dots (x) \dots) = G(G_{n-1}(x))$$

Cho $x = 0$ thì $e_n = G_n(0) = G(e_{n-1})$, $n = 1, 2, \dots$, với điều kiện biên $e_0 = 0$. Lấy giới hạn khi $n \rightarrow \infty$ ta được $e = G(e)$.

Bây giờ giả sử η là nghiệm không âm bất kỳ của phương trình $x = G(x)$. Do $G(x)$ là không giảm trên đoạn $[0; 1]$ (vì nó có các hệ số không âm) nên

$$e_1 = G(e_0) = G(0) \leq G(\eta) = \eta$$

$$e_2 = G(e_1) \leq G(\eta) = \eta$$

và bằng qui nạp ta có $e_n \leq \eta$ với $n = 1, 2, \dots$

Vì vậy : $e = \lim_{n \rightarrow \infty} e_n \leq \eta$. Suy ra e là nghiệm không âm nhỏ nhất.

Định lý 7. $e = 1$ khi và chỉ khi $\mu \leq 1$.

Chứng minh.

Ta có thể giả sử rằng $p_0 > 0$ (vì nếu ngược lại thì $e = 0$ và $\mu > 1$). Bây giờ, trên đoạn $[0; 1]$ thì $G(x)$ là :

liên tục (vì bán kính hội tụ ≥ 1)

không giảm (vì $G'(x) = \sum_k k p_k x^{k-1} \geq 0$)

lồi (vì $G''(x) = \sum_k k(k-1)p_k x^{k-2} \geq 0$).

Từ đó suy ra rằng trong đoạn $[0;1]$ thì đường thẳng $y = x$ có một (nếu $G'(1) \leq 1$) hoặc hai giao điểm (nếu $G'(1) > 1$) với đường cong $y = G(x)$.

Vì $G'(1) = \mu$ nên suy ra $e = 1$ khi và chỉ khi $\mu \leq 1$.

Ví dụ 4. Tìm xác suất tuyệt chủng khi C có phân phối kiểu hình học

$$p_k = pq^k, \quad k = 0, 1, 2, \dots; \quad 0 < p = 1 - q < 1.$$

Giải.

Hàm sinh xác suất của C là: $G(x) = \frac{p}{1 - qx}$, $|x| < \frac{1}{q}$

và e là nghiệm không âm nhỏ nhất của phương trình: $G(x) = \frac{p}{1 - qx} = x$

Các nghiệm của phương trình này là $\frac{1 \pm (2p - 1)}{2(1 - p)}$.

Vì vậy:

nếu $p < \frac{1}{2}$ (nghĩa là $\mu = \frac{q}{p} > 1$) thì $e = \frac{p}{q} (= \mu^{-1})$,

nếu $p \geq \frac{1}{2}$ (nghĩa là $\mu \leq 1$) thì $e = 1$.

3. KẾT LUẬN

Trên đây, sau khi giới thiệu về hàm sinh xác suất cùng với một số tính chất và ví dụ điển hình, chúng tôi đã trình bày một số ứng dụng cơ bản của hàm sinh trong lý thuyết xác suất. Ngoài các ứng dụng này, hàm sinh xác suất cũng có thể được sử dụng để tính mô-men, giải hệ thức đệ quy hoặc xem xét khi nào thì một quá trình đạt đến một trạng thái đặc biệt nào đó.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

- [1] Đào Hữu Hồ (2006), *Xác suất thống kê*, Nxb. Đại học Quốc gia Hà Nội, Hà Nội.
- [2] Đỗ Đức Thái, Nguyễn Tiên Dũng (2010), *Nhập môn hiện đại Xác suất và Thống kê*, Nxb. Đại học Sư phạm, Hà Nội.
- [3] Feller W. (1968), *An introduction to probability theory and its applications*, Vol.1, 3rd Edition, John Wiley, New York.
- [4] Malliavin, P. (1995), *Integration and Probability*, Springer Verlag.
- [5] Manuel, L. Ésquivel (2009), *Some applications of probability generating function based methods to statistical estimation*, *Discussiones Mathematicae Probability and Statistics*, 29, 131-153.

SOME APPLICATIONS OF PROBABILITY GENERATING FUNCTIONS

Pham Thi Cuc, Pham Van Chau

ABSTRACT

In this paper, we introduce some applications of probability generating functions: using probability generating functions to calculate probability, expectation, variance, sum of independent random variables, investigating branching processes and calculating the extinction probability of a family of organisms.

Keywords: *Probability generating function, random variable, probability distribution.*

MẠNG VÀ QUY HOẠCH MẠNG NỘI BỘ TRƯỜNG ĐẠI HỌC HỒNG ĐỨC

Hoàng Văn Dũng¹, Trần Minh Ngọc²

TÓM TẮT

Việc khai thác sử dụng mạng nội bộ trong Trường Đại học Hồng Đức là nhu cầu bắt buộc, các dịch vụ trên mạng đã làm nâng cao hiệu quả học tập, giảng dạy, nghiên cứu và quản lý. Hiện nay, số lượng thiết bị truy cập mạng trong trường là rất lớn, cần phải phân cấp/lớp về tốc độ truyền, mức bảo mật cho các thiết bị mạng nhằm đáp ứng nhu cầu về tốc độ, an toàn dữ liệu và kiểm soát truy cập mạng của các thiết bị. Đó là việc quy hoạch lại hệ thống mạng nội bộ của Nhà trường. Mạng được quy hoạch theo mô hình gồm 3 lớp: Lớp lõi: lớp có tốc độ truyền dữ liệu cao, giao tiếp với mạng internet và kết nối các mạng trong các tòa nhà lại thành mạng nội bộ Trường Đại học Hồng Đức; Lớp phân phối: Kết nối các thiết bị cuối hoặc các nhóm vào lớp lõi, lớp này có vai trò định tuyến, bảo mật, quản lý vùng và thiết bị truy nhập; Lớp truy cập: Là các điểm truy cập và phần kết nối ghép thiết bị vào mạng thông qua lớp phân phối.

Từ khóa: *Quy hoạch mạng nội bộ, tiêu chuẩn kỹ thuật, Trường Đại học Hồng Đức.*

1. ĐẶT VẤN ĐỀ

Mạng máy tính là sự nối kết nhiều máy tính với nhau bởi dây cáp mạng để trao đổi thông tin, chia sẻ tài nguyên và tạo ra hệ thống liên kết xử lý đa lĩnh vực. Từ đầu thế kỷ XX, mạng được hình thành và ứng dụng ngay sau khi có máy tính điện tử. Ban đầu mạng máy tính nối kết một vài máy, trong khu vực hẹp và đến bây giờ được kết nối thành mạng toàn cầu. Hiện nay, mạng toàn cầu không chỉ là máy tính mà còn thêm nhiều thiết bị số khác, tạo nên số lượng lớn các thiết bị trong mạng. Hoạt động của mạng đã đem lại các lợi ích rất lớn trong việc truyền văn bản, dữ liệu, hình ảnh, âm thanh, chinh phục khoảng cách địa lý không giới hạn và đáp ứng các yêu cầu thông tin cực kỳ nhanh chóng. Mạng máy tính Trường Đại học Hồng Đức đã hình thành rất sớm và phục vụ hiệu quả các công việc phục vụ giáo dục đào tạo và nghiên cứu khoa học của trường. Tuy nhiên do sự phát triển theo các dự án xây dựng một cách thụ động đến nay đã bộc lộ những hạn chế cần phải khắc phục. Quy hoạch lại mạng Trường Đại học Hồng Đức là một việc cần phải thực hiện.

2. NỘI DUNG

2.1. Yêu cầu và quy hoạch mạng

Một thiết bị tham gia vào mạng cần có các yêu cầu cơ bản sau: Đăng nhập mạng thành công với thời gian hợp lý, thiết bị được an toàn, bảo mật và có thể trao đổi thông tin trong mạng.

¹ Trung tâm Thông tin thư viện, Trường Đại học Hồng Đức

Việc đăng nhập mạng là việc xác lập để thiết bị sở hữu một địa chỉ IP độc lập trong lần kết nối mạng đó, IP của thiết bị mạng có thể được đặt trước hoặc một DHCP của hệ thống cấp, IP của thiết bị quyết định mạng LAN của nó.

Việc an toàn và bảo mật thông tin có nhiều mức khác nhau, tùy theo sự cần thiết để chúng ta chọn thiết bị ở mức bảo mật phù hợp. Mức an toàn và bảo mật càng cao thì tốc độ truy xuất thông tin đó càng giảm, do việc kiểm duyệt đối tượng trao đổi thông tin, kiểm tra dữ liệu khi truyền tin.

Một mạng LAN có số lượng thiết bị lớn, phục vụ nhiều mục đích khác nhau sẽ phát sinh các mức yêu cầu về mạng khác nhau, thường có những điểm không đạt được mục đích gây ra sự cố. Để hạn chế sự cố, nâng cao hiệu suất hoạt động của mạng, người quản trị mạng phải lựa chọn được cấu hình mạng tối ưu, phù hợp với nhu cầu của từng thiết bị. Việc lựa chọn chế độ hoạt động cho các thiết bị trong mạng tiến tới thiết kế, lắp ráp, phân vùng, định tuyến khi kết nối nó vào mạng là công việc quy hoạch mạng cục bộ cụ thể. Như vậy, khi trong mạng có nhiều thiết bị và chia thành nhiều vùng, nhóm cần quy hoạch để tất cả thiết bị đều được đảm bảo yêu cầu về mạng. Trường Đại học Hồng Đức hiện nay, có hàng nghìn thiết bị truy cập mạng, trong số đó có nhiều thiết bị chưa được thiết lập các thông số kỹ thuật hợp lý trên hệ thống mạng dẫn đến bất cập trong quản lý và xuất hiện nhiều lỗi truy cập trên mạng. Vì vậy mạng nội bộ của trường cần phải được quy hoạch lại để đảm bảo hiệu năng, an toàn và thuận tiện trong quản lý.

2.2. Thực trạng hệ thống mạng Trường Đại học Hồng Đức

Hệ thống mạng của Trường Đại học Hồng Đức hình thành từ năm 1998 (khoảng 50 máy cá nhân vào Internet, chỉ cần 01 dải IP). Hiện nay đã có hàng nghìn thiết bị truy nhập mạng Internet (gồm máy tính server và máy cá nhân, camera, Smartphone... yêu cầu mạng phải cấp nhiều dải IP và có nhiều vùng với các mức bảo mật khác nhau). Hiện tại hệ thống mạng của trường có đến 8 mạng LAN, mỗi mạng tạo thành do sự kết nối thiết bị mạng trong một hoặc vài tòa nhà lại để truy cập vào Internet. Toàn trường đang sử dụng 15 đường Internet tốc độ cao, chia thành 8 điểm truy cập Internet tương đương 8 mạng LAN độc lập, trong đó điểm tại Nhà điều hành có cấu trúc phức tạp: có hàng trăm máy tính cá nhân, camera số, hệ thống server Website, phần mềm ứng dụng và Data... Tất cả các điểm đều truy cập trực tiếp Internet tự do thông qua Modem, chưa có phần mềm hoặc thiết bị chuyên dụng để bảo mật, độ ổn định và tốc độ kết nối Internet trong các mạng LAN trên là khác nhau.

Từ thực trạng trên dẫn đến hệ thống mạng nội bộ của Trường Đại học Hồng Đức tồn tại một số hạn chế như: Việc bảo mật truy cập Internet cho các Server, cán bộ, giảng viên, người học trong và ngoài mạng đều chưa được thực hiện triệt để, đang sử dụng công cụ bảo vệ sẵn có của Hệ điều hành Windows nên nhiều Virus tin học có thể vượt qua ; các thiết bị truy cập trong mạng ở mức an toàn và bảo mật chưa cao, chưa quản lý được người dùng, độ ổn định và tốc độ kết nối internet khác nhau trong các mạng LAN.

2.3. Tính cấp thiết phải quy hoạch mạng nội bộ Trường Đại học Hồng Đức

Trong những năm qua, cùng với sự phát triển không ngừng của các công nghệ và ứng dụng trên mạng và internet, Trường Đại học Hồng Đức đã đầu tư nhiều cho cơ sở hạ tầng để mở rộng và khai thác các ứng dụng trên mạng. Tuy nhiên trên hệ thống mạng còn tồn tại những điểm thiết bị chưa đảm bảo yêu cầu về quản lý, an toàn truy cập, chưa quản lý được người dùng, tốc độ truy cập internet còn chậm và chưa ổn định. Muốn khắc phục yếu điểm hiện tại và mở rộng, phát triển mạng trong tương lai, việc quy hoạch lại kết nối mạng nội bộ cần đạt các mục đích sau: Phân chia vùng, băng thông hợp lý, sử dụng phần mềm chuyên dụng để nâng cao mức an toàn, bảo mật, quản lý người truy cập mạng, dự phòng các kết nối cho việc mở rộng và phát triển mạng trong tương lai, thiết lập liên kết giữa các nhóm trong mạng LAN Nhà trường để đường truyền nội bộ đạt tối thiểu 100Mkps.

Căn cứ vào các yêu cầu sử dụng, kỹ thuật kết nối mạng hiện tại và chiến lược phát triển Công nghệ thông tin-truyền thông Trường Đại học Hồng Đức giai đoạn 2015 - 2020, tầm nhìn 2025 để xây dựng những yêu cầu và giải pháp triển khai mạng tương ứng.

Bảng 1. Các yêu cầu sử dụng và giải pháp khả thi cho việc quy hoạch của hệ thống mạng nội bộ Trường Đại học Hồng Đức

STT	Yêu cầu	Giải pháp	Ghi chú
1	Có số thiết bị truy nhập mạng > 2000.	Dùng nhiều vùng, mỗi vùng 1 dải IP động; Số máy ≤ 254 máy.	Gồm cả máy cá nhân, camera và Server, Smartphone, camera ...
2	Tất cả đều vào Internet.	Định tuyến các vùng bởi Router và ISA Server.	Nhu cầu công việc và quản lý, tốc độ.
3	Có nhiều hình thức và mức bảo mật khác nhau khi vào Internet.	Chia thành nhiều vùng LAN khác nhau; dùng Router và ISA để cấp IP và định tuyến, quản lý truy cập Internet.	- ISA để an toàn, bảo mật cho Website và Data; - ISA để quản lý người vào Internet cần quản lý; - Router cấp IP và Internet cho LAN (vào trực tiếp Internet); - Vùng LAN của Modem dùng cho quản lý, thiết bị thông minh.
4	Thiết bị phân bố ở nhiều khu nhà khác nhau	Kéo đường Cáp quang nội bộ, thiết bị định tuyến và cấp IP động cho khu nhà - các vùng.	Nhà trường gồm nhiều khu nhà độc lập.

5	Chia sẻ tài nguyên	Thiết bị cuối có thể truy nhập vào được tài khoản tại các Server.	Sử dụng thiết bị, phần mềm dùng chung và lưu trữ chung.
6	Thường xuyên phát sinh thiết bị	Phải có khả năng cấp IP phát sinh- IP động.	Phát sinh laptop, thiết bị số ra vào mạng để dạy học.
7	Mạng chạy ổn định	Phục vụ công tác và học tập.	Cơ cấu cấp dư IP theo vùng, thiết bị cấp IP chạy ổn định.
8	Tiết kiệm chi phí	Dùng Router và ISA server đúng vị trí.	Sử dụng thiết bị cấp IP phù hợp theo từng vùng.
9	Quy hoạch sử dụng thiết bị theo hệ thống đã có	Bổ sung thiết bị định tuyến, Swich cho đầu vào các tòa nhà.	Mỗi IP của Modem là 1 đầu vào của một vùng.

Từ các yêu cầu sử dụng và giải pháp nói trên, mạng của trường bao gồm: Đầu vào là Internet, vùng nội bộ mạng LAN của trường.

Đầu vào Internet: 2 đường Fiber Internet, chạy cân bằng tải cấp chung cho mạng; nếu cần thiết thêm 01 đường Leased line ADSL bổ sung cho hệ thống server.

Trong vùng mạng LAN được phân theo mức bảo mật thành 4 vùng sau:

Vùng 1:

Truy cập Internet qua Firewall (xây dựng ISA sever, có 3 card mạng: 1 vào lớp modem Fiber Internet, 1 vào Leased line ADSL, 1 vào Swich của hệ thống server). Vùng này quan trọng nhất, vùng kết nối hệ thống server.

Vùng 2:

Truy cập Internet qua Firewall (xây dựng ISA sever, có 2 card mạng: 1 vào lớp modem Fiber Internet, 1 vào Swich cấp cho mạng LAN để vào Internet). Vùng này quản lý các truy cập Internet, dùng cho cán bộ, sinh viên nước ngoài, hoặc những người cần quản lý truy nhập.

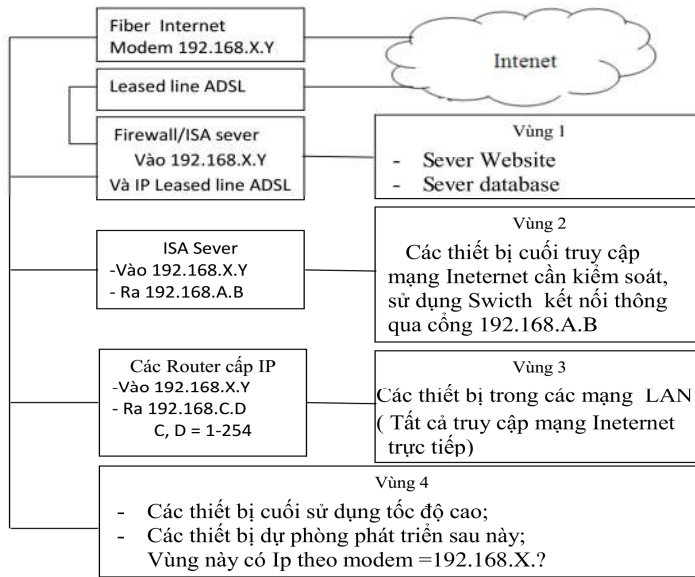
Vùng 3:

Truy cập Internet qua Router, Router chỉ định tuyến và cấp IP cho mạng LAN, không quản lý vào Internet.

Vùng 4:

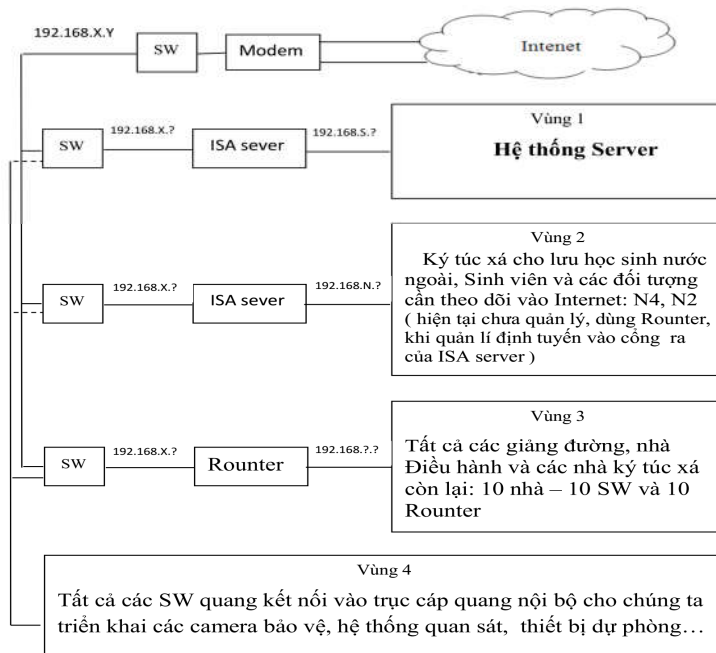
Có địa chỉ chung với địa chỉ LAN của modem vào internet, vùng này truy cập trực tiếp Internet, vùng này dùng cho quản lý và dự phòng để phát triển các vùng nội bộ sau này.

Mô hình phân vùng và kết nối internet được thể hiện bằng sơ đồ quy hoạch tổng thể (hình 1).

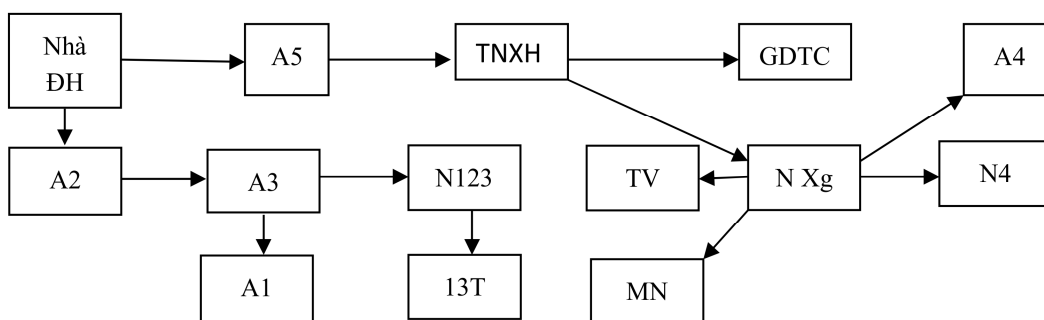


Hình 1. Sơ đồ quy hoạch tổng thể phân vùng theo mức bảo mật và mức truy cập

Từ sơ đồ quy hoạch tổng thể, chuyển sang sơ đồ chi tiết và xác định thiết bị cần thiết. Hiện tại hệ thống server không dùng đường Leased line ADSL nên sơ đồ chi tiết không thể hiện đường truyền Leased line ADSL. Thiết bị an toàn, bảo mật trong sơ đồ chi tiết sẽ lựa chọn ISA server (là phần mềm của Microsoft, có giá thành thấp hơn firewall và tận dụng server). Mô hình sơ đồ quy hoạch chi tiết phân vùng và kết nối internet được thể hiện bằng sơ đồ quy hoạch chi tiết (hình 2).



Hình 2. Phân vùng chi tiết IP mạng của Trường Đại học Hồng Đức



Hình 3. Sơ đồ kết nối tuyến cáp quang

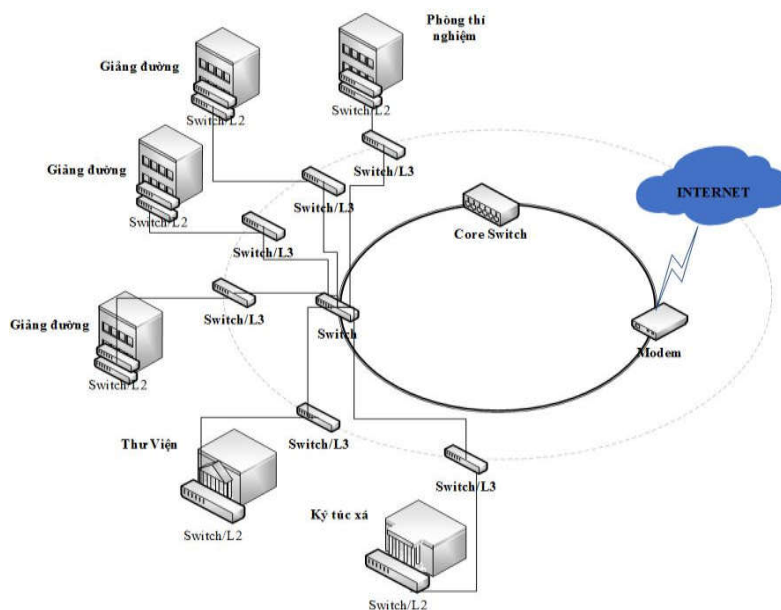
Từ ISA sever hoặc Router sẽ kết nối vào các Swieth trung tâm trong các tòa nhà.

Những truy cập Internet cần quản lý phải kết nối chung vào Swieth để thông qua rounter định tuyến đến ISA sever để quản lý người dùng.

Hệ thống cáp quang quyết định toàn bộ liên kết, cần chú trọng đến chất lượng đường cáp quang.

2.4. Đánh giá mô hình quy hoạch mạng Trường Đại học Hồng Đức

Sau khi khảo sát, đánh giá, nghiên cứu các giải pháp và lập ra mô hình quy hoạch mạng tổng thể và chi tiết mạng nội bộ Trường Đại học Hồng Đức. Mô hình rõ ràng, cụ thể cho từng vị trí và thiết bị. Xét trên mô hình tổng thể mạng của Trường Đại học Hồng Đức có đủ vùng, đáp ứng yêu cầu sử dụng, đặc biệt có nhiều nét tương đồng như mô hình mạng Campus của Cisco (hình 4).



Mô hình kiến trúc mạng trường đại học

Hình 4. Mô hình kiến trúc mạng trường đại học

Căn cứ theo định nghĩa các lớp mạng Campus của Cisco là:

Lớp 1 - Lớp core: Lớp lõi của hệ thống chính là các thành phần mạng cơ bản trong đó bao gồm hệ thống máy chủ (Server farm), các thiết bị chuyển mạch và định tuyến trung tâm.

Hệ thống này là nơi cung cấp các dịch vụ cho toàn bộ mạng, định tuyến các luồng dữ liệu trao đổi giữa các thành phần của hệ thống.

Cung cấp các dịch vụ cơ bản cho hệ thống

Thực hiện việc định tuyến phân phối dữ liệu tốc độ cao

Lớp 2 - Lớp phân phối: Thực hiện chức năng phân phối, định tuyến thông tin trên mạng. Mục đích của cấp này là cung cấp sự xác định ranh giới và là nơi thực hiện việc xử lý các gói dữ liệu và thiết lập các chính sách trên mạng. Trong môi trường làm việc mạng nhiều module, cấp này có thể bao gồm một số chức năng cơ bản sau:

Cung cấp truy cập đến các workgroup, domain

Định tuyến trên VLAN

Thực hiện chuyển tiếp giữa các thiết bị nếu cần thiết

Lọc địa chỉ nguồn hoặc địa chỉ đích

Trong môi trường LAN Campus, lớp phân phối có thể đóng vai trò là một điểm phân phối lại giữa các định tuyến hoặc là ranh giới giữa các giao thức định tuyến. Ngoài ra, nó cũng là điểm mà từ đó các điểm bên ngoài có thể từ xa truy cập vào mạng.

Lớp 3 - Lớp truy cập: là điểm mà tại đó người dùng cuối được phép truy cập vào mạng. Cấp này có thể sử dụng các danh sách truy cập hoặc các bộ lọc để tối ưu hoá yêu cầu của một nhóm người dùng nhất định. Lớp truy cập có các chức năng sau:

Cung cấp kết nối tới người sử dụng.

Thực hiện lọc theo lớp địa chỉ MAC.

Thực hiện phân đoạn mạng nhằm tăng hiệu suất hoạt động

Mô hình mạng của Trường Đại học Hồng Đức phần lớn là tương đồng với mô hình kiến trúc mạng Campus của Cisco. Lớp 1 của trường là đường truyền cáp quang với dải IP là 192.168.X.Y; lớp 2 là đường truyền dẫn và các Switch nối từ lớp 1 đến các ISA sever và Rounter cho các vùng 1, 2, 3, 4; lớp 3 là các vùng 1, 2, 3, 4.

Điểm khác của Mô hình mạng Trường Đại học Hồng Đức

Mạng của Trường Đại học Hồng Đức kết nối từ Switch lớp 2 đến các vùng 1, 2, 3, 4 trong hình 2 là các ISA server và Rounter. Các ISA server đóng vai trò bộ lọc - Firewall, xác lập, cấp IP và định tuyến; các Router đóng vai DHCP cấp IP và định tuyến. Tăng cường thêm các thiết bị trên là do một Switch hiện tại không thể cấp được nhiều dải IP mà 01 khu nhà của Đại học Hồng Đức có thể cần nhiều dải IP vì vậy phải nối thêm để cấp IP động, tăng tốc độ đăng nhập mạng cho thiết bị. Mạng của Nhà trường được quy hoạch trên cơ sở các thiết bị mạng hiện có, kinh phí bổ sung router thấp hơn nhiều so với đối Switch cấu hình.

Có thiết bị cuối kết nối vào lớp 2 (vùng 4 trong hình 2), có một số ít thiết bị sử dụng vào mục đích quản lý và điều hành, cần ưu tiên về tốc độ nên kết nối vào lớp này. Các Switch ở lớp này có thể cấu hình, lựa chọn dải thông cho thiết bị để không làm ảnh hưởng đến toàn hệ thống.

So sánh với mô hình mạng hiện tại

Mô hình mạng quy hoạch: Quản lý mạng tập trung, toàn trường chung một mạng LAN; Có thể kiểm soát được các điểm truy cập; tiết kiệm được tài nguyên, đường truyền và nâng cao hiệu quả sử dụng hệ thống; mạng ổn định hơn, ít sự cố, dễ xử lý sự cố, dễ dàng đáp ứng các yêu cầu về mạng hiện tại và mở rộng mạng trong tương lai.

Mô hình mạng hiện tại của trường: Chia thành 8 mạng LAN độc lập dẫn đến lãng phí tài nguyên, khó kiểm soát, không thể quản lý tập trung... đây là mô hình mạng phạm vi hẹp, lạc hậu.

3. KẾT LUẬN

Nhìn chung, quy hoạch mạng nội bộ Trường Đại học Hồng Đức là hết sức cần thiết trong bối cảnh hiện nay khi mà nhu cầu khai thác các dịch vụ trên mạng tăng lên không ngừng. Để quy hoạch hệ thống mạng của Nhà trường cần một số thiết bị phần cứng cơ bản: 01 Core Switch, khoảng 15 Router, 15 Swicth quang lớp 2 và các tuyến cáp quang nội bộ kết nối từ Nhà điều hành đến các tòa nhà giảng đường, thư viện, phòng thí nghiệm... Khi đã thực hiện xong quy hoạch, tốc độ truy nhập mạng trong trường sẽ tương đối đồng đều, lỗi loop mạng dễ xử lý hơn, hệ thống mạng hoạt động ổn định, sẽ tiết kiệm được khoảng 3 đường Internet FiberVNN hiện tại, có đường truyền và các cổng kết nối thiết bị phục vụ cho công tác bảo vệ, quản lý và dự phòng cho phát triển mạng trong tương lai. Trọng tâm của hệ thống là xây dựng các tuyến cáp quang nội bộ, các tuyến cáp được xây dựng trước, các phần còn lại sẽ hoàn thiện sau.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

- [1] Lê Tuấn Dương (2004), *Bài giảng thiết kế mạng LAN-WAN*, Viện Công nghệ thông tin, Trung tâm Khoa học Tự nhiên và Công nghệ Quốc gia, Hà Nội.
- [2] Nguyễn Thúc Hải (1999), *Mạng máy tính và các hệ thống mở*, Nxb. Giáo dục, Hà Nội.
- [3] Nguyễn Hồng Sơn (2008), *Giáo trình hệ thống CCNA*, Nxb. Lao động Xã hội, Hà Nội.
- [4] Nguyễn Khánh Văn (2014), *Giáo trình an toàn và bảo mật thông tin*, Nxb. Bách khoa Hà Nội, Hà Nội.

NETWORK AND NETWORK ZONING AT HONG DUC UNIVERSITY

Hoang Van Dung, Tran Minh Ngoc

ABSTRACT

The internal network utilization at Hong Duc University is a timely demand. The networks' services improve the effectiveness of learning, teaching, research and

managements. Currently, there are a large number of devices accessing to the network, it's needed to classify the network's devices in term of data transferring speed and security level in order to meet the demand of speed, data security and network access controlling of those devices. It is the university's internal network reorganization. The network is organized into 3 layers: (1) The core layer which has high data transferring speed interacts with the internet and connects the networks inside buildings to Hong Duc University's internal network; (2) The distributing layer: Connecting terminal devices or groups of devices to the core layer. This layer is in charge of routing, securing, domain and devices managing; (3) The accessing layer: Accessings points and the linking parts which connect the devices to the network via the distributing layer.

Keywords: *Internal network planning, technical standards, Hong Duc University.*

ĐIỀU KHIỂN HỆ SỐ HẤP THỤ VÀ TÁN SẮC TRONG HỆ PHÂN TỬ KIM LOẠI KIỂM CẤU HÌNH CHỮ V

Nguyễn Tiến Dũng¹

TÓM TẮT

Trong công trình này, chúng tôi thiết lập hệ phương trình ma trận mật độ dẫn ra biểu thức giải tích của hệ số hấp thụ và hệ số tán sắc của hệ phân tử kim loại kiểm cấu hình chữ V chòm laser có cường độ yếu (chòm dò) dưới sự cảm ứng của chòm laser có cường độ mạnh (chòm điều khiển). Các hệ số này có thể điều khiển được theo các thông số của trường laser điều khiển.

Từ khóa: Trong suốt cảm ứng điện từ, phân tử kim loại kiểm.

1. ĐẶT VẤN ĐỀ

Hấp thụ và tán sắc là hai tham số cơ bản đặc trưng cho các tính chất quang học của môi trường. Trong lân cận miền phổ cộng hưởng, biên độ của các hệ số này thay đổi mạnh theo tần số và quy luật thay đổi được quy định bởi đặc trưng cấu trúc của các nguyên tử, phân tử trong môi trường. Tuy nhiên, sự ra đời của ánh sáng laser thì tính chất quang học của các nguyên tử có thể được thay đổi một cách “có điều khiển”. Tiêu biểu cho điều này là sự tạo hiệu ứng trong suốt cảm ứng điện từ (Electromagnetically Induced Transparency viết tắt EIT). Đây là hiệu ứng được đề xuất vào năm 1989 [8] và kiểm chứng thực nghiệm vào năm 1991 [6] bởi nhóm nghiên cứu ở Stanford. Hiệu ứng này là kết quả sự giao thoa giữa các biên độ xác suất của các kênh dịch chuyển trong nguyên tử dưới sự kích thích kết hợp của một hoặc nhiều trường điện từ dẫn đến sự trong suốt của môi trường đối với một chòm quang học nào đó.

Điều khiển sự hấp thụ và tán sắc dựa trên hiệu ứng trong suốt cảm ứng điện từ hiện đang được chú ý nghiên cứu trên cả hai phương diện lý thuyết và thực nghiệm đối với các hệ nguyên tử, phân tử khác nhau bởi có nhiều triển vọng ứng dụng. Tiêu biểu là tạo các bộ chuyển mạch quang học [3], làm chậm vận tốc nhóm của ánh sáng [7], tăng hiệu suất các quá trình quang phi tuyến [4]. Đặc biệt, sự ra đời của các kỹ thuật làm lạnh nguyên tử bằng laser trong thời gian gần đây đã tạo ra các hệ nguyên tử lạnh mà ở đó các va chạm dẫn đến sự biến đổi pha giữa các trạng thái lượng tử của điện tử có thể được bỏ qua. Các nhà khoa học kỳ vọng điều này sẽ tạo một bước đột phá trong ứng dụng vào chế tạo các thiết bị quang tử học có độ nhạy cao. Để đạt được mục đích này, việc mô tả chính xác hệ số hấp thụ và hệ số tán sắc là rất quan trọng.

Gần đây hiệu ứng EIT cho hệ phân tử đã được nghiên cứu trên cả phương diện lý thuyết và thực nghiệm như Li_2 [1], Cs_2 [8] và gần đây nhất là công trình của A. Lazoudis và

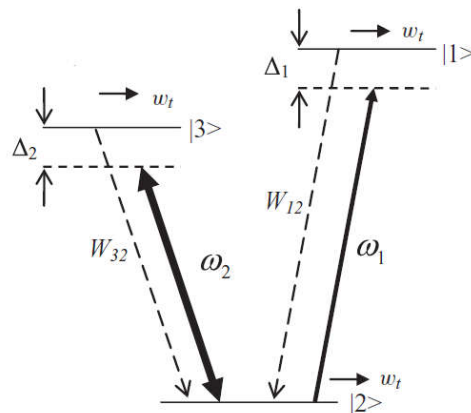
¹ Giảng viên Viện Kỹ thuật và Công nghệ, Trường Đại học Vinh

cộng sự đã nghiên cứu hiện tượng EIT trong cấu hình 3 mức năng lượng loại V ở trạng thái mở của phân tử Na_2 [2]. Trong công trình này, tác giả bằng thực nghiệm đã quan sát độ sâu của cửa sổ EIT trong phân tử Na_2 . Để giải thích thực nghiệm, A. Lazoudis và cộng sự đã sử dụng các hình thức ma trận mật độ, phương pháp nhiễu loạn và vẽ công tua hấp thụ với trường dò cho cả hai hệ mở và đóng của phân tử Na_2 , từ đó cho thấy sự phù hợp giữa thực nghiệm với lý thuyết. Các kết quả nghiên cứu lý thuyết mới dừng lại ở dạng số, chưa có bức tranh về thay đổi liên tục phổ EIT theo các tham số điều khiển dẫn đến hạn chế trong một số ứng dụng. Để khắc phục vấn đề này, chúng tôi đề xuất sử dụng phương pháp giải tích để xác định hệ số hấp thụ và hệ số tán sắc cho cấu hình chữ V cho phân tử kim loại kiềm. Theo đó, điều kiện cường độ chùm laser dò yếu so với chùm laser điều khiển được đưa vào để đơn giản hóa quá trình giải hệ phương trình ma trận mật độ của hệ phân tử kim loại kiềm.

2. NỘI DUNG

2.1. Dẫn ra hệ số hấp thụ và hệ số tán sắc

Sơ đồ cấu hình chữ V ba mức của phân tử kim loại kiềm được trình bày như trên hình 1 [2]. Một trường dò yếu với tần số $\omega_p = \omega_1$ và độ lệch tần $\Delta_p = \omega_{12} - \omega_1$ tạo sự dịch chuyển $|2\rangle \rightarrow |1\rangle$, trường điều khiển mạnh có tần số $\omega_c = \omega_2$ và độ lệch tần $\Delta_c = \omega_{32} - \omega_2$ tạo sự dịch chuyển $|2\rangle \rightarrow |3\rangle$, các phân tử chiếm các mức năng lượng kích thích $|1\rangle$ và $|3\rangle$ có thể bị kích thích mạnh theo các cách khác nhau để xuống ở trạng thái cơ bản mức $|2\rangle$. Ở đây W_{ij} là tốc độ phát xạ tự phát của mức $|i\rangle$ đến mức $|j\rangle$, W_i là tốc độ phân rã tự nhiên của mức $|i\rangle$. Tốc độ phân rã của trạng thái cơ bản mức $|2\rangle$ là không đáng kể. Các tần số Rabi của các trường dò và liên kết được ký hiệu tương ứng $\Omega_p = d_{12}E_p/\hbar$ và $\Omega_c = d_{32}E_c/\hbar$; w_t là tốc độ tích thoát của các phân tử ở các mức do các nguyên nhân khác nhau [9].



Hình 1. Cấu hình lý thuyết chữ V cho phân tử hai nguyên tử

Dưới tác dụng của các trường quang học, sự tiến triển các trạng thái lượng tử của hệ nguyên tử có thể được mô tả qua ma trận mật độ ρ theo phương trình Liouville [9] (ở đây,

chúng ta xem xét các chuyển động của các phân tử là bé so với độ lệch của trường và bỏ qua hiệu ứng Doppler).

$$\dot{\rho} = -\frac{i}{\hbar}[H, \rho] \quad (1)$$

Hệ phân tử xét trong bài toán này có 3 mức nên phương trình (1) là một hệ gồm $3 \times 3 = 9$ phương trình cho các phân tử ma trận mật độ ρ_{ik} . Tuy nhiên, vì chỉ quan tâm đến phân tử ma trận ứng với dịch chuyển tạo bởi chùm dò nên ta chỉ cần viết 6 phương trình cho các phân tử ma trận mật độ liên quan đến dịch chuyển giữa trạng thái $|1\rangle$ với bốn trạng thái còn lại. Trong gần đúng sóng quay và gần đúng lưỡng cực điện, bỏ qua các biến đổi trung gian, hệ 6 phương này có thể đưa được về dạng:

$$\dot{\rho}_{11} = i\Omega_p(\rho_{12} - \rho_{21}) - W_1^t \rho_{11} \quad (2a)$$

$$\dot{\rho}_{12} = i\Omega_p(\rho_{11} - \rho_{22}) - d_1 \rho_{12} + i\Omega_c \rho_{13} \quad (2b)$$

$$\dot{\rho}_{13} = i\Omega_c \rho_{12} - d_2 \rho_{13} - i\Omega_p \rho_{23} \quad (2c)$$

$$\dot{\rho}_{22} = -i\Omega_p(\rho_{12} - \rho_{21}) + i\Omega_c(\rho_{23} - \rho_{32}) + W_{12} \rho_{11} + W_{32} \rho_{33} - w_t(\rho_{22} - \rho_{22}^e) \quad (2d)$$

$$\dot{\rho}_{23} = -i\Omega_p \rho_{13} + i\Omega_c(\rho_{22} - \rho_{33}) - d_3 \rho_{23} \quad (2e)$$

$$\dot{\rho}_{33} = -i\Omega_c(\rho_{23} - \rho_{32}) - W_3^t \rho_{33} \quad (2f)$$

với $d_1 = i\Delta_p + \gamma_{12}^t$, $d_2 = i\Delta_p - i\Delta_c + \gamma_{13}^t$, $d_3 = -i\Delta_c + \gamma_{23}^t$, \tilde{d}_i biểu thị liên hợp phức của d_i , $W_i^t = W_i + w_t$ và $\gamma_{ij}^t = \gamma_{ij} + w_t$. Trong đó W_i tốc độ phân rã mức i , W_{ij} là tốc độ phát xạ tự phát giữa mức i và j , ρ_{ii}^e là mật độ mức i ở trạng thái cân bằng nhiệt, γ_{ij} là tốc độ phân rã độ cư trú giữa mức i và j .

Giả thiết rằng hai trường laser là hoạt động ở chế độ liên tục nên chỉ sau một khoảng thời gian rất ngắn thì điều kiện dừng được thiết lập (đạo hàm của các phân tử ma trận ρ_{ik} sẽ triệt tiêu). Đồng thời, công suất của chùm laser dò được chọn là rất bé (công suất cỡ μW) so với công suất chùm laser điều khiển (công suất cỡ mW) nên độ cư trú của nguyên tử ở các trạng thái kích thích sẽ nhỏ hơn rất nhiều so với trạng thái cơ bản $|2\rangle$, khi đó $\rho_{22} = 1$. Giải hệ các phương trình (2a) - (2f) đồng thời sử dụng các giả thiết này ta tìm được:

$$\rho_{12} = \frac{i(\Omega_p \Omega_c^2 - \Omega_p d_2 d_3)}{\Omega_c^2 d_3 + d_1 d_2 d_3} = \frac{K + iL}{P + iQ} \quad (3)$$

$$\text{với } K = \Omega_p \left[\Delta_c \gamma_{13}^t - \gamma_{23}^t (\Delta_p - \Delta_c) \right]$$

$$L = \Omega_p \left[(\Delta_p - \Delta_c) \Delta_c - \Omega_c^2 - \gamma_{13}^t \gamma_{23}^t \right]$$

$$P = \gamma_{23}^t \Omega_c^2 + \gamma_{12}^t \left[(\Delta_p - \Delta_c) \Delta_c + \gamma_{13}^t \gamma_{23}^t \right] - \Delta_p \left[\gamma_{23}^t (\Delta_p - \Delta_c) - \Delta_c \gamma_{13}^t \right]$$

$$Q = \Delta_p [(\Delta_p - \Delta_c)\Delta_c + \gamma'_{13}\gamma'_{23}] + \gamma'_{12} (\Delta_p\gamma'_{23} - \Delta_c\gamma'_{23} - \Delta_c\gamma'_{13}) - \Delta_c\Omega_c^2$$

Mặt khác, độ cảm của nguyên tử đối với chùm laser dò liên hệ ρ_{21} theo biểu thức [9]:

$$\chi = -2 \frac{Nd_{21}}{\epsilon_0 E_p} \rho_{21} = \chi' + i\chi'' \quad (4)$$

với N là mật độ phân tử, còn ϵ_0 là hằng số điện môi của chân không.

Để xác định các biểu thức của hệ số hấp thụ α của môi trường phân tử hai nguyên tử đối với chùm dò, ta sử dụng phần ảo của độ cảm tuyến tính (hoặc ρ_{12}) ở (3), ta có hệ số hấp thụ và hệ số tán sắc đối với chùm dò:

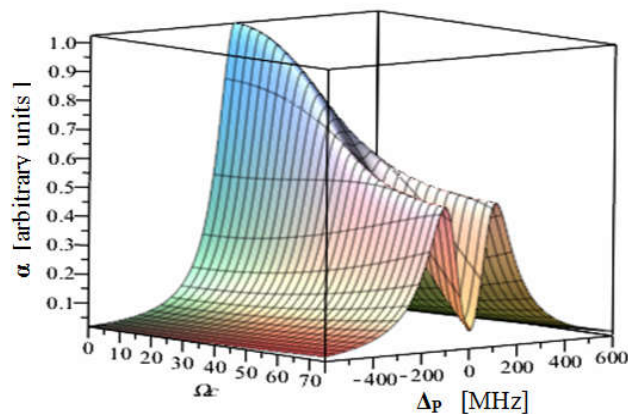
$$\alpha = \frac{\chi'' \omega_p}{c} = \frac{\omega_p}{c} \frac{2Nd_{12}^2}{\hbar \epsilon_0 \Omega_p} \frac{LP - KQ}{P^2 + Q^2} \quad (5)$$

$$n = 1 + \frac{1}{2} \chi' = 1 + \frac{2Nd_{ij}^2}{\hbar \epsilon_0 \Omega_p} \frac{(LP + KQ)}{P^2 + Q^2} \quad (6)$$

2.2. Điều khiển hệ số hấp thụ và hệ số tán sắc

Các biểu thức (5) và (6) cho thấy hệ số hấp thụ và hệ số tán sắc phụ thuộc vào cường độ và độ lệch tần số của chùm laser điều khiển. Sự phụ thuộc này được khảo sát theo phương pháp đồ thị. Để khảo sát hệ số hấp thụ α ta chọn các thông số không thay đổi [2]: $c = 3.10^8 \text{ m/s}$, $\hbar = 1,05.10^{-34} \text{ J.s}$, $\gamma'_{12} = \gamma'_{13} = \gamma'_{23} = 81 \text{ MHz}$, số phân tử $N = 10^{17}$ phân tử/cm³, $\epsilon_0 = 8,85.10^{-12} \text{ F/m}$.

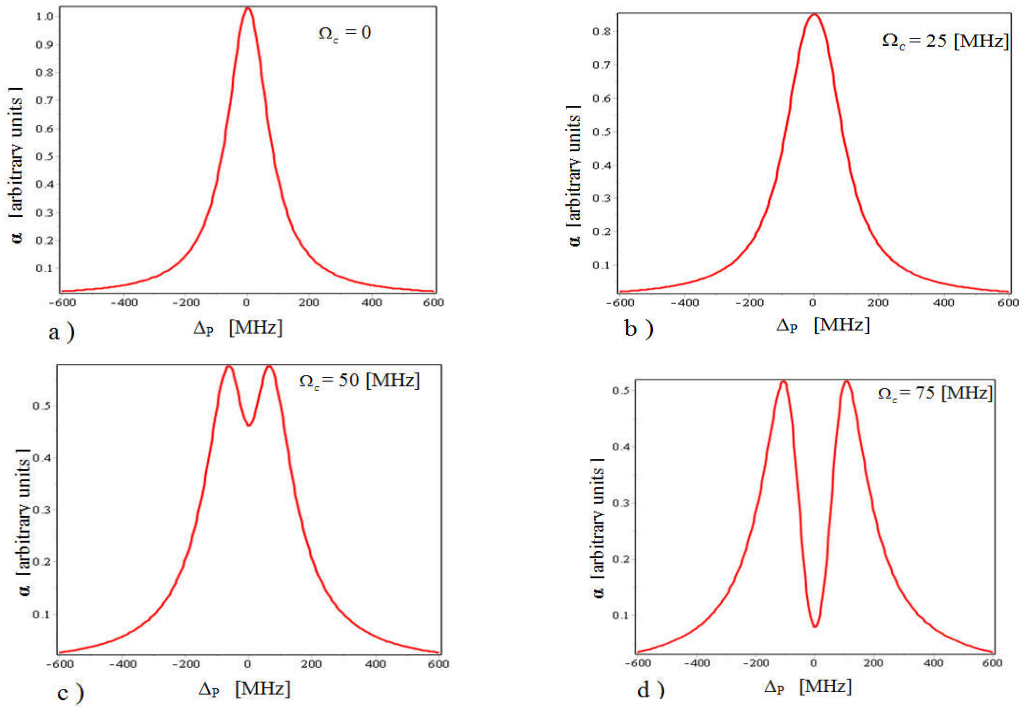
2.2.1. Điều khiển theo cường độ trường



Hình 2. Đồ thị ba chiều của hệ số hấp thụ α theo Δ_p và Ω_c với $\Delta_c = 0 \text{ MHz}$

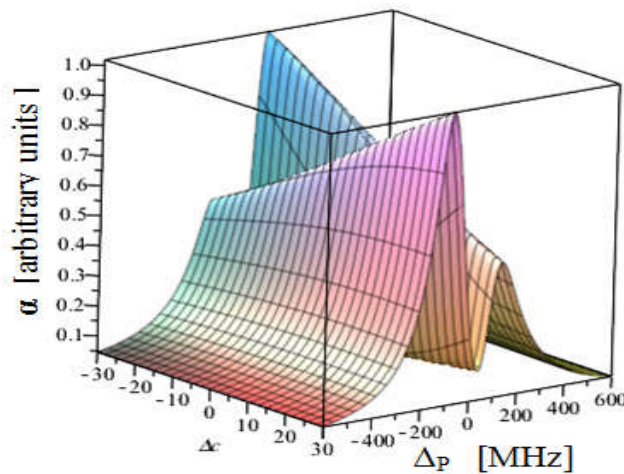
Từ hình 2 cho Ω_c tăng dần cường độ của chùm điều khiển thì hệ số hấp thụ của môi trường với chùm dò giảm dần ở vị trí $\Delta_p = 0$ (hình 3a,b). Do tốc độ phân rã lớn nên khi giá trị Ω_c cỡ 30 MHz đến 35 MHz thì bắt đầu xuất hiện cửa sổ EIT. Tâm của cửa sổ trong suốt

nằm ở giá trị $\Delta_p = 0$ tức là khi đó tần số của chùm dò cộng hưởng với tần số chuyển mức $|2\rangle \rightarrow |1\rangle$. Tiếp tục tăng Ω_c của sơ EIT tăng dần độ sâu so với độ hấp thụ cực và đạt đến độ hấp thụ cực đại khi $\Omega_c = 75$ MHz(hình 3d).



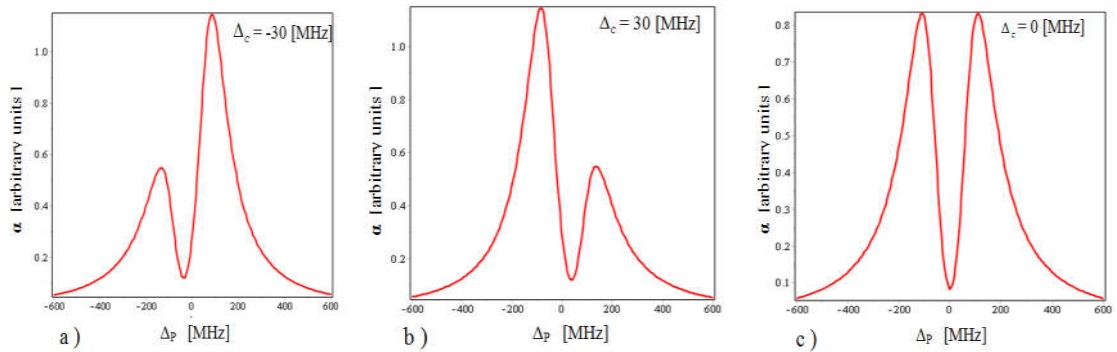
Hình 3. Đồ thị 2 chiều của α khi Ω_c có các giá trị khác nhau

2.2.2. Điều khiển theo độ lệch tần số



Hình 4. Đồ thị 3 chiều của hệ số hấp thụ α theo tần số của chùm điều khiển Δ_c và Δ_p với $\Omega_p = 1$ MHz, $\Omega_c = 70$ MHz

Để điều khiển hệ số hấp thụ chùm dò của môi trường, chúng tôi cố định các giá trị $\Omega_p = 1$ MHz, $\Omega_c = 70$ MHz và thay đổi độ lệch tần số của chùm điều khiển trong khoảng -30 MHz đến 30 MHz thì sự hấp thụ của môi trường đối với chùm dò thay đổi đối xứng quanh giá trị $\Delta_c = 0$ MHz (hình 4). Tâm của khe EIT nằm chính giữa với giá trị $\Delta_c = 0$, $\Delta_p = 0$ nghĩa là khi đó cả chùm dò và chùm điều khiển có tần số cộng hưởng với tần số chuyển mức $|2\rangle \rightarrow |1\rangle$ của môi trường (hình 5c). Ngoài giá trị $\Delta_c = 0$, độ sâu của cửa sổ EIT không đạt được đến cực tiểu đồng thời tâm của cửa sổ sẽ bị lệch về giá trị âm của Δ_p khi Δ_c âm (hình 5a) và tâm của cửa sổ sẽ bị lệch về giá trị dương của Δ_p khi Δ_c dương (hình 5b).



Hình 5. Đồ thị 2 chiều của hệ số hấp thụ α theo tần số của chùm điều khiển với $\Omega_p=1$ MHz, $\Omega_c =70$ MHz trong các trường hợp $\Delta_c = -30$ MHz, $\Delta_c = 30$ MHz, $\Delta_c = 0$ MHz

3. KẾT LUẬN

Trong khuôn khổ lý thuyết bán cổ điển, chúng tôi đã dẫn ra phương trình ma trận mật độ cho hệ phân tử kim loại kiềm cấu hình chữ V dưới tác dụng đồng thời của hai trường laser dò và điều khiển. Sử dụng gần đúng sóng quay và gần đúng lưỡng cực điện, chúng tôi đã tìm nghiệm dưới dạng giải tích cho hệ số hấp thụ và hệ số tán sắc của phân tử hai nguyên tử khi chùm dò có cường độ bé so với chùm điều khiển. Việc rút ra được biểu thức hệ số hấp thụ và hệ số tán sắc sẽ tạo điều kiện thuận lợi cho các nghiên cứu ứng dụng sau này. Hệ quả là chúng tôi đã khảo sát ảnh hưởng của các thông số của trường laser điều khiển lên các hệ số hấp thụ và hệ số tán sắc được thực hiện một cách dễ dàng. Kết quả cho thấy rằng, với cấu hình chữ V 3 mức ta xuất hiện cửa sổ trong suốt đối với chùm laser dò. Độ sâu và độ rộng hoặc vị trí của các cửa sổ này có thể điều khiển được bằng cách thay đổi cường độ hoặc độ lệch tần số của trường laser điều khiển.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

- [1] A. Lazoudis, T. Kirova, E. H. Ahmed, L. Li, J. Qi, and A. M. Lyyra (2010), *Electromagnetically induced transparency in an open -type molecular lithium system*, Phys. Rev. A 82, 023812.

- [2] A. Lazoudis, T. Kirova, E. H. Ahmed, L. Li, J. Qi, and A. M. Lyyra (2011) *Electromagnetically induced transparency in an open V-type molecular system* Phys. Rev. A 83, 063419.
- [3] B.S. Ham (2002), *Nonlinear optics of atoms and electromagnetically induced transparency*, J. Mod. Opt. 49, 2477.
- [4] D.A. Braje, V. Balic, S. Goda, G.Y. Yin, S.E. Harris (2004), *Frequency Mixing Using Electromagnetically Induced Transparency in Cold Atoms*, Phys. Rev. Lett. 93, 183601.
- [5] H. Li, H. Chen, M. A. Gubin, Y. V. Rostovtsev, V. A. Sautenkov, and M. O. Scully (2010), *Vapor pressure dependence of spectral width of EIT in Λ -levels cesium molecular system*, Laser Physics 20, 1725.
- [6] K.J. Boller, A. Imamoglu, S.E. Harris (1991), *Observation of electromagnetically induced transparency*, Phys. Rev. Lett. 66, 2593.
- [7] L.V. Hau, S. E. Harris, Z. Dutton, C.H. Bejroozi (1999), *Light speed reduction to 17 m/s in an ultracold atomic gas*, Nature 397, 594.
- [8] S.E. Harris, J.E. Field, A. Imamoglu (1990), *Nonlinear optical process using electromagnetically induced transparency*, Phys. Rev. Lett. 64, 1107.
- [9] Yong-qing Li and Min Xiao (1995), *Electromagnetically induced transparency in three-level Λ type system in rubidium atoms*, Phys. Rev. A 51, R2703-2706.

CONTROLLING ABSORPTION AND DISPERSION COEFFICIENT IN A V SCHEME OF THE ALKALI-METAL DIATOMIC MOLECULES

Nguyen Tien Dung

ABSTRACT

In this work, we set up a system of density matrix equations leading an analytical expression of absorption and dispersion coefficient for alkali metal molecule system for a weak probe laser beam under the induction of a strong coupling laser beam. These coefficients could be controlled by the frequency detuning and intensity of the coupling laser.

Keywords: *Electromagnetically induced transparency, alkali-metal molecule.*

DÁNG ĐIỀU TIỆM CẬN NGHIỆM CỦA MỘT LỚP PHƯƠNG TRÌNH KIỂU THỦY ĐỘNG LỰC HỌC NGẪU NHIÊN CÓ TRỄ

Nguyễn Tiên Đà¹

TÓM TẮT

Trong bài báo này chúng tôi nghiên cứu tính ổn định mũ theo kỳ vọng và ổn định mũ hầu chắc chắn của một lớp phương trình kiểu thủy động lực học ngẫu nhiên có trễ thời gian thông qua mô hình trườ tượng:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = -Au(t) - B(u(t)) - R(t, u(t)) + G(u(t - \rho(t))) + \sigma(t, u(t - \rho(t))) \frac{dW(t)}{dt}$$

trên miền bị chặn thỏa mãn bất đẳng thức Poincar'e.

Từ khóa: Phương trình vi phân ngẫu nhiên có trễ, ổn định mũ theo kỳ vọng, ổn định mũ hầu chắc chắn, trễ thời gian.

1. ĐẶT VẤN ĐỀ

Tính chất ổn định của dòng chảy theo thời gian đã và đang được đánh giá là một trong những vấn đề quan trọng và thú vị trong lý thuyết của động lực học chất lỏng. Đặc biệt chúng đã và đang nhận được rất nhiều sự quan tâm nghiên cứu của nhiều nhà toán học nổi tiếng trong và ngoài nước, trong đó có các chuyên gia hàng đầu về phương trình vi phân đạo hàm riêng ngẫu nhiên như Capinski. M và Gatarek. D. Một số kết quả hiện nay về lĩnh vực này đã được một số tác giả trình bày trong các bài báo [1-3,5,6,8,9]. Một trong những mô hình quen thuộc nhất là phương trình Navier-Stokes hai chiều ngẫu nhiên không nén được. Bên cạnh đó, một số mô hình quan trọng khác cũng được nhiều chuyên gia trong nước nghiên cứu về phương trình đạo hàm riêng ngẫu nhiên, điển hình là PGS. TS. Cung Thế Anh và các cộng sự nghiên cứu về sự tồn tại của tập hút toàn cục cũng như dáng điệu tiệm cận nghiệm của phương trình khi tham số thời gian đủ lớn.

Tuy nhiên hầu hết các kết quả kể trên đều xem xét trong trường hợp tất định và không có trễ của biến thời gian. Điều này dẫn đến một câu hỏi khá tự nhiên và thú vị là nghiệm của hệ tất định sẽ bị ảnh hưởng thế nào nếu nó chịu tác động bởi một nhiễu ngẫu nhiên có độ trễ thời gian? Để trả lời cho câu hỏi trên, trong bài báo này, chúng ta xem xét sự ổn định của một lớp các phương trình vi phân đạo hàm riêng có trễ trong cơ học chất lỏng được biểu diễn bởi một mô hình trườ tượng có dạng:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = -Au(t) - B(u(t)) - R(t, u(t)) + G(u(t - \rho(t))) + \sigma(t, u(t - \rho(t))) \frac{dW(t)}{dt} \quad (1.1)$$

¹ Giảng viên khoa Khoa học Tự nhiên, Trường Đại học Hồng Đức

Trong đó $u = u(x, t) = (u_1, u_2)$ là vectơ vận tốc chưa biết, $G(u(t - \rho(t)))$ là trường ngoại lực bên ngoài có trễ và $\sigma(t, u(t - \rho(t))) \frac{dW(t)}{dt}$ là trường ngoại lực ngẫu nhiên với $W(t)$ là một quá trình Wiener vô hạn chiều.

2. NỘI DUNG

2.1. Một số không gian nghiệm và các khái niệm liên quan

Giả sử $(H, |.,.|)$ là không gian Hilbert khả li, A là một toán tử tuyến tính không bị chặn và xác định dương trên H . Kí hiệu $V = \text{Dom}(A^{1/2})$. Với mỗi $v \in V$ ta có $\|v\| = |A^{1/2}v|$, gọi V' là không gian đối ngẫu của V (trùng ứng với tích vô hướng $\langle ., . \rangle$ trên H). Đồng thời ta có quan hệ $V \subset H \equiv H' \subset V'$. Ta gọi $\langle u, v \rangle$ là ký hiệu tích đối ngẫu giữa $u \in V$ và $v \in V'$. sao cho $\langle u, v \rangle = (u, v)$ với mọi $u \in V, v \in H$, cuối cùng $B : V \times V \rightarrow V'$ là ánh xạ thỏa mãn các điều kiện dưới đây:

(C1) $B : V \times V \rightarrow V'$ là ánh xạ liên tục.

(C2) Với mọi $u, v, w \in V$, ta có:

$$(B(u, v), w) = -(B(u, w), v);$$

(C3) Tồn tại không gian Banach nội suy H_1 sao cho:

$$V \subset H_1 \subset H$$

$$\|u\|_{H_1}^2 \leq a_0 \|u\| \|u\|$$

$$|(B(u, v), w)| \leq \eta \|w\|^2 + C_\eta \|u\|_{H_1} \|v\|_{H_1}, \forall u, v, w \in V$$

Giả sử (Ω, \mathcal{F}, P) là một không gian xác suất đầy đủ được trang bị một bộ lọc tự nhiên \mathcal{F}_t ($t \geq 0$) thỏa mãn một số điều kiện thông thường, ta kí hiệu $\beta_n(t)$ ($n = 1, 2, \dots$) là một dãy độc lập các chuyển động Brown một chiều nhận giá trị thực. Khi đó quá trình Wiener vô hạn chiều được biểu diễn bởi:

$$W(t) = \sum_{n=1}^{+\infty} \sqrt{\lambda'_n} \beta_n(t) e_n, \quad t \geq 0$$

Trong đó $\lambda'_n \geq 0$ ($n = 1, 2, \dots$) là dãy các số thực không âm sao cho $\sum_{n=1}^{+\infty} \lambda'_n < +\infty$ và $\{e_n\}$ ($n = 1, 2, \dots$) là một cơ sở trực giao đầy đủ trong không gian Hilbert thực khả li K . Gọi $Q \in L(K, K)$ là toán tử tuyến tính liên tục trên K xác định bởi $Qe_n = \lambda'_n e_n$ ($n = 1, 2, \dots$). Quá trình ngẫu nhiên nhận giá trị trong K nói trên được gọi là quá trình Q -Wiener. $L(K, H)$ là

không gian các toán tử tuyến tính bị chặn từ K vào H . Với $\sigma \in L(K, H)$ ta sử dụng định

$$\text{nghĩa: } \|\sigma\|_{L^2(K^0, H)}^2 := \text{tr}(\sigma Q \sigma^*) = \left\{ \sum_{n=1}^{+\infty} \|\sqrt{\lambda_n} \sigma e_n\|^2 \right\}.$$

Nếu $\|\sigma\|_{L^2(K^0, H)}^2 < +\infty$, thì σ được gọi là toán tử Q -Hilbert-Schmidt và kí hiệu

$L^2(K^0, H)$, với $K^0 = Q^{\frac{1}{2}}K$ là không gian các toán tử Q -Hilbert-Schmidt $\sigma : [0, T] \times H \rightarrow L^2(K^0, H)$.

Về định nghĩa của tích phân ngẫu nhiên nhận giá trị trong H của một quá trình $\Phi(t)$ dự đoán được và \mathcal{F}_0 -thích nghi nhận giá trị trong $L^2(K^0, H)$ tương ứng với quá trình Q -Wiener $W(t)$, có thể tham khảo trong [8].

Với việc thiết lập này hệ phương trình kiểu thủy động lực học hai chiều ngẫu nhiên có trễ thời gian được viết như sau:

$$\begin{cases} du(t) = [-Au(t) - B(u(t)) - R(t, u(t)) + G(u(t - \rho(t)))]dt \\ \quad + \sigma(u(t - \rho(t)))dW(t), \quad t \geq 0, \\ u_0(\theta) = \varphi \in L^2(\Omega, C([- \tau, 0], H)), \quad \theta \in [- \tau, 0], \end{cases} \quad (2.1)$$

Trong đó $L^2(\Omega, C([- \tau, 0], H))$ là kí hiệu của một họ các quá trình ngẫu nhiên \mathcal{F}_t ($t \geq 0$)- đo được và bị chặn hầu chắc chắn nhận giá trị trong $C([- \tau, 0], H)$ được trang bị với chuẩn $\|\varphi\|_0 = E \sup_{\theta \in [- \tau, 0]} |\varphi(\theta)|^2$; hàm $\rho : [0, +\infty) \rightarrow [0, \tau]$ ($\tau > 0$) là bị chặn và đo được;

$G : V \rightarrow V'$ và $\sigma : [0, T] \times H \rightarrow L^2(K^0, H)$ là các hàm đo được theo nghĩa Borel.

Phương trình tất định tương ứng của hệ (2.1) có thể viết như sau:

$$\begin{cases} \frac{d}{dt}u(t) = -Au(t) - B(u(t)) - R(t, u(t)) + G(u(t - \rho(t))) \\ u_0(\theta) = \varphi \in C([- \tau, 0], H), \quad t \geq 0, \quad \theta \in [- \tau, 0]. \end{cases} \quad (2.2)$$

Định nghĩa 1 [12]. Một quá trình ngẫu nhiên $u(t)$ ($t \geq -\tau$) được gọi là nghiệm yếu của hệ (2.1) nếu $u(t)$ là \mathcal{F}_t -thích nghi; $u(t) \in L^\infty(-\tau, T; H) \cap L^2(-\tau, T; V)$ hầu chắc chắn với mọi $T > 0$;

Phương trình sau đây xảy ra hầu chắc chắn như một đồng nhất thức trong V' với mọi $t \in [0, +\infty)$,

$$u(t) = u(0) + \int_0^t [-Au(s) - B(u(s)) - R(t, u(t)) + G(u(s - \rho(s)))]ds \\ + \int_0^t \sigma(u(s - \rho(s)))dW(s).$$

Kí hiệu $C^{(1,2)}([0; +\infty) \times H, R^+)$ là không gian tất cả các hàm Φ nhận giá trị trong R xác định trên $[0; +\infty) \times H$ với các giả thiết sau đây:

$\Phi(t, u)$ khả vi theo $t \in [0; +\infty)$ và khả vi Fréchet hai lần theo u với $\Phi_t(t, \cdot)$, $\Phi_u(t, \cdot)$ và $\Phi_{uu}(t, \cdot)$ bị chặn địa phương trên H ;

$\Phi(t, \cdot)$, $\Phi_t(t, \cdot)$ và $\Phi_u(t, \cdot)$ là các hàm liên tục trên H ;

Các toán tử lớp vết Z , $tr(\Phi_{uu}(t, \cdot)Z)$ là liên tục từ H vào R với mỗi Z ;

Nếu $v \in V$, thì $\Phi_u(t, v) \in V$ và $x \rightarrow \langle \Phi_u(t, x), v_\infty \rangle$ là liên tục với mỗi $v_\infty \in V'$;

$\|\Phi_u(t, x)\| \leq C_0(t)(1 + \|x\|)$, $C_0(t) > 0$, với mọi $x \in V$.

Bổ đề 1. (Công thức Ito) [7]. *Nếu quá trình ngẫu nhiên $u(t)$ là nghiệm yếu của hệ (2.1), thì ta có đẳng thức*

$$\Phi(t, u(t)) = \Phi(0, u(0)) + \int_0^t L\Phi(s, u(s))ds + \int_0^t (\Phi_u(s, u(s)), \sigma(u(s - \rho(s)))dW(s)),$$

Trong đó:

$$\begin{aligned} L\Phi(t, u(t)) = & \Phi_t(t, u(t)) + \langle -Au(t) - B(u(t)) - R(t, u(t)) + f(t) \\ & + G(u(t - \rho(t))), \Phi_x(t, x(t)) \rangle \\ & + \frac{1}{2} tr(t, u(t))\sigma(u(t - \rho(t)))Q\sigma(u(t - \rho(t)))^*. \end{aligned}$$

Định nghĩa 2 [7]. *Ta nói nghiệm yếu $u(t)$ của (2.1) hội tụ mũ tới $u_\infty \in H$ theo bình phương kỳ vọng nếu tồn tại $a > 0$ và $M_0(u(0)) > 0$ sao cho*

$$\mathbb{E}|u(t) - u_\infty|^2 \leq M_0 e^{-at}, \forall t \geq 0.$$

Đặc biệt, nếu u_∞ là nghiệm của (2.1), thì ta nói u_∞ là ổn định mũ theo bình phương kỳ vọng.

Định nghĩa 3 [7]. *Ta nói nghiệm yếu $u(t)$ của hệ (2.1) hội tụ mũ hầu chắc chắn tới $u_\infty \in H$ nếu tồn tại $\gamma > 0$ sao cho: $\limsup_{t \rightarrow +\infty} \frac{1}{t} \log|u(t) - u_\infty| \leq -\gamma$, hầu chắc chắn.*

Đặc biệt, nếu u_∞ là nghiệm của hệ (2.1), thì ta nói u_∞ là ổn định mũ hầu chắc chắn.

Bổ đề 2 [7]. *Giả sử γ là số dương tùy ý, khi đó luôn tồn tại các số $\lambda' > 0$, $\lambda'' > 0$ và các hàm $y: [-\tau; +\infty) \rightarrow [0; +\infty)$ sao cho nếu $\lambda'' < \gamma$ thì bất đẳng thức:*

$$y(t) \leq \begin{cases} \lambda' e^{-\gamma t} + \lambda'' \int_0^t e^{-\gamma(t-s)} \sup_{\theta \in [-\tau; 0]} y(s + \theta) ds & t \geq 0, \\ \lambda' e^{-\gamma t}, & t \in [-\tau; 0], \end{cases} \quad (2.3)$$

xảy ra. Hơn nữa, ta có $y(t) \leq \lambda' e^{-\lambda t}$ ($t \geq -\tau$), trong đó $\mu \in (0, \gamma)$ sao cho $\frac{\lambda''}{\gamma - \mu} e^{\mu\tau} = 1$.

2.2. Các kết quả chính

Để đưa ra các kết quả về tính ổn định mũ theo kỳ vọng và ổn định mũ hầu chắc của nghiệm yếu của hệ (2.1), chúng ta cần đưa thêm vào một số giả thiết sau:

(H1) Tồn tại $c_1 > 0$ sao cho

$$\|G(u) - G(v)\|_{V'} \leq c_1 |u - v|, \text{ với mọi } u, v \in H \text{ và } G(0) = 0.$$

(H2) Tồn tại số dương $L > 0$ thỏa mãn:

$$|R(t, u) - R(t, v)| \leq L |u - v|, \text{ với } u, v \in H$$

Chúng ta nhắc lại rằng $|u|^2 \leq \lambda_1 \|u\|^2, \forall u \in V$, hơn nữa chúng ta cũng sử dụng khái niệm

$$\|\sigma(t, u)\|_{L^2(K^0, H)}^2 = \text{tr}(\sigma(t, u)Q\sigma(t, u)^*)$$

Cuối cùng chúng ta giả sử $\sigma(t, \cdot): H \rightarrow L^2(K^0, H)$ và thỏa mãn các điều kiện:

$$(H3) \begin{cases} a) & \sigma(t, u_\infty) \equiv 0 \quad \forall t \geq 0, \\ b) & \|\sigma(t, u) - \sigma(t, v)\|_{L^2(K^0, H)} \leq c_2 |u - v|, \quad \forall u, v \in H. \end{cases}$$

Định nghĩa 4. Nghiệm dừng yếu của bài toán (2.2) là một phần tử $u_\infty \in V$ sao cho

$$Au_\infty + B(u_\infty, u_\infty) + Ru_\infty = Gu_\infty \text{ trong } V' \quad (2.4)$$

2.2.1. Sự ổn định mũ theo bình phương kỳ vọng

Định lý 1. Giả sử rằng các điều kiện (H1), (H2) và (H3) được thỏa mãn. Nếu

$$2 - \frac{2C}{\sqrt{\lambda_1}} \|u_\infty\| - 2L - \frac{2c_1 + c_2^2}{\lambda_1} > 0 \quad (2.5)$$

thì nghiệm yếu $u(t)$ của (2.1) hội tụ mũ theo bình phương kỳ vọng tới nghiệm dừng u_∞ của (2.4), nghĩa là tồn tại hằng số dương $\lambda > 0$ sao cho: $\mathbb{E}|u(t) - u_\infty|^2 \leq \mathbb{E}|u(0) - u_\infty|^2 e^{-\lambda t}, t \geq 0$.

Chứng minh.

Từ điều kiện (2.5), chúng ta có thể chọn số thực dương $a > 0$ đủ nhỏ sao cho $a > \lambda_1 \left(2 - \frac{2C}{\sqrt{\lambda_1}} \|u_\infty\| - 2L - \frac{2c_1 + c_2^2}{\lambda_1} \right)$. Khi đó, áp dụng công thức Ito cho hàm $e^{at} |u(t) - u_\infty|^2$, ta được:

$$e^{at} \mathbb{E}|u(t) - u_\infty|^2 = \mathbb{E}|u(0) - u_\infty|^2 + \int_0^t a e^{as} \mathbb{E}|u(s) - u_\infty|^2 ds - 2 \int_0^t e^{as} \mathbb{E}(Au(s), u(s) - u_\infty) ds$$

$$\begin{aligned} & -2 \int_0^t e^{as} \mathbb{E} \left(B(u(s)), u(s) - u_\infty \right) ds - 2 \int_0^t e^{as} \mathbb{E} \left(R(s, u(s)), u(s) - u_\infty \right) ds \\ & + 2 \int_0^t e^{as} \mathbb{E} \langle G(u(s - \rho(s))), u(s) - u_\infty \rangle ds \\ & - 2 \int_0^t e^{as} \mathbb{E} \langle \sigma(u(s - \rho(s))), u(s) - u_\infty \rangle dW(s). \end{aligned}$$

Hơn nữa, $(B(u(s)) - B(u_\infty), u(s) - u_\infty) = (u(s) - u_\infty, u_\infty, u(s) - u_\infty)$

Khi đó, ta có:

$$\begin{aligned} e^{at} \mathbb{E} |u(t) - u_\infty|^2 & \leq \mathbb{E} |u(0) - u_\infty|^2 + \int_0^t a e^{as} \mathbb{E} |u(s) - u_\infty|^2 ds - 2 \int_0^t e^{as} \mathbb{E} (A(u - u_\infty), u(s) - u_\infty) ds \\ & - 2 \int_0^t e^{as} \mathbb{E} (R(u) - R(u_\infty), u(s) - u_\infty) ds - 2 \int_0^t e^{as} \mathbb{E} (B(u(s) - u_\infty, u_\infty, u(s) - u_\infty)) ds \\ & + 2 \int_0^t e^{as} \mathbb{E} \langle G(u(s - \rho(s))) - G(u_\infty), u(s) - u_\infty \rangle ds \\ & - 2 \int_0^t e^{as} \mathbb{E} \langle \sigma(u(s - \rho(s))) - \sigma(u_\infty), u(s) - u_\infty \rangle dW(s) \\ & \leq \mathbb{E} |u(0) - u_\infty|^2 + \int_0^t \left(a - 2\lambda_1 \left(1 - \sqrt{\lambda_1^{-1} C} \right) \|u_\infty\| - 2L - \lambda_1^{-1} (2c_1 + c_2^2) \right) e^{as} \sup_{\theta \in [-\tau, 0]} \mathbb{E} \|u(s + \theta) - u_\infty\|^2 ds. \end{aligned}$$

Do vậy,

$$\begin{aligned} & \sup_{\theta \in [-\tau, 0]} \mathbb{E} |u(\theta) - u_\infty|^2 e^{-a\theta} + \left(a - \lambda_1 \left(2 - \frac{2C}{\sqrt{\lambda_1}} \|u_\infty\| - 2L - \frac{2c_1 + c_2^2}{\lambda_1} \right) \right) \\ & \quad \times \int_0^t e^{-a(t-s)} \sup_{\theta \in [-\tau, 0]} \mathbb{E} |u(s + \theta) - u_\infty|^2 ds, \end{aligned}$$

với $t \geq 0$. Rõ ràng, ta có được

$$\mathbb{E} |u(t) - u_\infty|^2 \leq \sup_{\theta \in [-\tau, 0]} \mathbb{E} |u(\theta) - u_\infty|^2 e^{-at}, \quad t \in [-\tau, 0].$$

Chúng ta xét hai trường hợp:

Trường hợp 1. Nếu $a = \lambda_1 \left(2 - \frac{2C}{\sqrt{\lambda_1}} \|u_\infty\| - 2L - \frac{2c_1 + c_2^2}{\lambda_1} \right)$, ta có điều cần phải chứng minh.

Trường hợp 2. Nếu $a > \lambda_1 \left(2 - \frac{2C}{\sqrt{\lambda_1}} \|u_\infty\| - 2L - \frac{2c_1 + c_2^2}{\lambda_1} \right)$, từ Bổ đề 2, ta suy ra

$$\mathbb{E} |u(t) - u_\infty|^2 \leq M e^{-at}, \quad t \geq 0, \quad (2.6)$$

trong đó, $\alpha \in (0; a)$ và

$$M = \max \left\{ \sup_{\theta \in [-\tau; 0]} \mathbb{E} |u(\theta) - u_\infty|^2 (a - \alpha) \times \left(\left[a - \lambda_1 \left(2 - \frac{2C}{\sqrt{\lambda_1}} \|u_\infty\| - 2L - \frac{2c_1 + c_2^2}{\lambda_1} \right) \right] e^{a\tau} \right)^{-1}, \right. \\ \left. \sup_{\theta \in [-\tau; 0]} \mathbb{E} |u(\theta) - u_\infty|^2 \right\} > 0.$$

Như vậy, định lý đã được chứng minh hoàn toàn.

Ý tưởng chứng minh của định lý sau được dựa theo [7]. Do vậy nó có thể được bỏ qua ở đây.

2.2.2. Ổn định mũ hầu chắc chắn

Định lý 2. Giả sử u_∞ là nghiệm dừng duy nhất của (2.4) và các điều kiện (H1), (H2), (H3)

xảy ra. Khi đó, nếu $2 - \frac{2C}{\sqrt{\lambda_1}} \|u_\infty\| - 2L - \frac{2c_1 + c_2^2}{\lambda_1} > 0$, thì nghiệm yếu bất kỳ $u(t)$ của (2.1) cũng

hội tụ mũ hầu chắc chắn tới nghiệm dừng u_∞ của (2.4). Nghĩa là, tồn tại hằng số $\gamma > 0$ sao

cho $\limsup_{t \rightarrow +\infty} \frac{1}{t} \log |u(t) - u_\infty| \leq -\gamma$, hầu chắc chắn.

3. KẾT LUẬN

Trong bài báo này chúng tôi đã chứng minh được tính ổn định mũ theo bình phương kỳ vọng và ổn định mũ hầu chắc chắn của một lớp các phương trình đạo hàm riêng ngẫu nhiên kiểu thủy động lực học trong cơ học chất lỏng, lớp phương trình này bao gồm nhiều phương trình quan trọng như phương trình Navier-Stokes cổ điển hai chiều không nén được ngẫu nhiên, phương trình Maxwell biểu thị sự chuyển động của chất lỏng trong từ trường hay còn gọi là hệ MHD (magnetohydrodynamic equation), mô hình 3D Leray- α và một số phương trình quan trọng khác. Hơn nữa, trong trường hợp số hạng $R=0$, chúng ta thu được các kết quả hoàn toàn tương tự như trong [7].

TÀI LIỆU THAM KHẢO

- [1] Barbu V and Sritharan S. (2003), *Navier-Stokes equation with hereditary viscosity*, Z. Angew. Math. Phys. 54, 449-461.
- [2] Bensoussan A (1995), *Stochastic Navier-Stokes equations*, Acta Appl. Math. 38, 267-304.
- [3] Capinski M and Gatarek D (1994), *Stochastic equations in Hilbert spaces with applications to Navier-Stokes equations in any dimension*, J. Funct. Anal. 126, 26-35.
- [4] Caraballo T, Langa J and Taniguchi T (2002), *The exponential behavior and stabilizability of stochastic 2D-Navier-Stokes equations*, J. Diff. Equations 179, 714-737.

- [5] Caraballo T and Real J (2001), *Navier-Stokes equations with delays*, R. Soc. London A457, 2441-2453.
- [6] Caraballo T and Real J (2003), *Asymptotic behavior of Navier-Stokes equations with delays*, R. Soc. London A459, 3181-3194.
- [7] Chen. H (May,2012), *Asymptotic behavior of stochastic two dimensional Navier-Stokes equations with delays*, Indian Acad. Sci. (Math. Sci.) Vol. 122, No. 2, pp. 283-295.
- [8] Planas G and Hernandez E (2008), *Asymptotic behavior of two-dimensional time-delayed Navier-Stokes equations*, Discrete Contin. Dynam. Syst. 31,1245-1258.
- [9] Prato G Da and Zabczyk J (1992), *Stochastic Equations in Infinite Dimensions* (Cambridge University Press).
- [10] Sundar P and Yin H (2009), *Existence and uniqueness of solutions to the backward 2D stochastic Navier-Stokes equations*, Stoch. Proc. Appl. 119, 1216-1234. Stochastic Navier-Stokes equations 295.
- [11] Temam R, Navier-Stokes Equations (1979), *Theory and Numerical Analysis* (Amsterdam: North-Holland).
- [12] Temam R (1995), *Navier-Stokes Equations and Nonlinear Functional Analysis*, 2nd edition (Philadelphia: SIAM).

ASYMPTOTIC BEHAVIOR OF STOCHASTIC TWO-DIMENSIONAL HYDRODYNAMIC TYPE EQUATIONS WITH DELAYS

Nguyen Tien Da

ABSTRACT

The aim of this paper is to study the exponential behavior and stabilizability of stochastic 2D hydrodynamic type equation with delay

$$\frac{\partial u}{\partial t} = -Au - B(u) - R(t, u(t)) + G(u(t - \rho(t))) + \sigma(t, u(t - \rho(t))) \frac{dW(t)}{dt} \text{ in a bounded}$$

domain satisfying the Poincar'e inequality.

Keywords: *The 2D stochastic hydrodynamic type equations, exponential stability in mean square, almost surely exponential stability, delay.*

ỨNG DỤNG PHẦN MỀM MAPLE ĐỂ XÂY DỰNG HỆ THỐNG BÀI KIỂM TRA ĐÁNH GIÁ KẾT QUẢ HỌC TẬP

Nguyễn Đình Định¹, Trịnh Thị Phú²

TÓM TẮT

Bài viết này trình bày về ứng dụng của phần mềm Maple để xây dựng hệ thống các bài kiểm tra, đánh giá kết quả học tập của sinh viên đối với một số học phần trong chương trình đào tạo ngành Công nghệ thông tin của Trường Đại học Hồng Đức. Mục tiêu của giải pháp này là đảm bảo tính chính xác trong kiểm tra đánh giá người học.

Từ khoá: Ứng dụng, phần mềm Maple, kiểm tra, đánh giá kết quả học tập.

1. ĐẶT VẤN ĐỀ

Trong những năm qua, Trường Đại học Hồng Đức đã thực hiện công tác đảm bảo chất lượng bằng việc xây dựng và ban hành chuẩn đầu ra, chương trình đào tạo cho từng ngành đào tạo; xây dựng hệ thống các đề cương chi tiết, các ngân hàng đề thi cho từng học phần; đổi mới phương pháp dạy học theo hướng tích cực, ứng dụng công nghệ thông tin, gắn lý thuyết với thực hành; tổ chức các hội nghị, hội thảo về đổi mới phương pháp dạy học, đổi mới phương pháp kiểm tra đánh giá nhằm nâng cao hiệu quả, chất lượng đào tạo đảm bảo chuẩn đầu ra. Để đảm bảo được chuẩn đầu ra phụ thuộc vào nhiều yếu tố, trong đó chất lượng kiểm tra đánh giá là một yếu tố quan trọng, phản ánh năng lực và kiến thức của người học, qua đó đánh giá được có đạt chuẩn hay không.

Kết quả đánh giá người học, đối với từng học phần, không chỉ dựa vào kết quả của bài thi kết thúc học phần mà kết quả đánh giá qua các bài kiểm tra quá trình và giữa kì cũng rất quan trọng, giúp người học ý thức được cần cố gắng, nỗ lực ngay từ đầu và trong suốt quá trình học tập. Mục tiêu của chúng tôi là xây dựng được hệ thống đánh giá từ các bài kiểm tra quá trình đến bài kiểm tra giữa kì cho một số học phần trong chương trình đào tạo cử nhân Công nghệ thông tin. Trong đó, mỗi bài kiểm tra cho tất cả các sinh viên đều có mã đề khác nhau, với độ khó của mỗi mã đề là tương đương. Qua đó, đánh giá chính xác, công bằng kết quả học tập của sinh viên, góp phần cải thiện chất lượng kiểm tra đánh giá người học.

2. NỘI DUNG

2.1. Hiện trạng

Hầu hết tất cả học phần của các chương trình đào tạo tại Trường Đại học Hồng Đức đã được xây dựng ngân hàng câu hỏi thi kết thúc học phần và được các hội đồng chuyên môn đánh giá kỹ lưỡng, quy trình tổ chức kiểm tra đánh giá kết thúc học phần cũng chặt chẽ, chính xác. Tuy nhiên, các bài kiểm tra đánh giá quá trình và giữa kì thi do cán bộ giảng dạy

^{1,2} Giảng viên khoa Công nghệ Thông tin và Truyền thông, Trường Đại học Hồng Đức

tự quyết định hình thức tổ chức thi và đánh giá kết quả. Mỗi học phần giảng dạy, giảng viên thường phải đánh giá 3 đến 6 con điểm thành phần và 1 con điểm giữa kì cho một sinh viên, với các lớp có 50 đến 70 sinh viên thì khó để kiểm soát được chất lượng kiểm tra đánh giá, bởi nếu số đề kiểm tra ít không tránh khỏi việc các sinh viên trao đổi, hỗ trợ nhau trong lúc làm bài, còn mỗi sinh viên làm một mã đề khác nhau thì việc làm đáp án chi tiết và cân đối mức độ tương đương cho các mã đề sẽ rất khó, đặc biệt đối với các học phần mà việc giải một bài tập hay một ví dụ đòi hỏi một lượng lớn các phép tính toán.

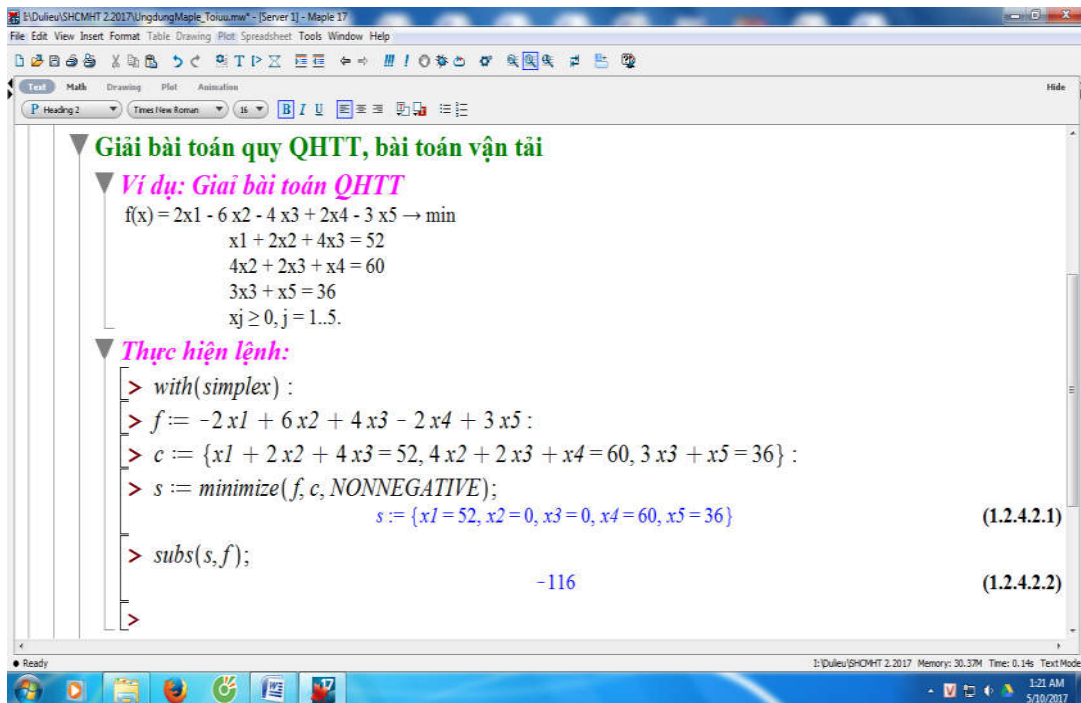
Maple là một phần mềm tính toán, được sử dụng phục vụ công tác học tập và nghiên cứu. Trong dạy học, với sự hỗ trợ của Maple người học dễ dàng kiểm tra kết quả tính toán của mình, người dạy có thể dùng Maple để xây dựng các hệ thống bài tập, bài kiểm tra một cách nhanh chóng chính xác.

2.2. Giải pháp

2.2.1. Ứng dụng phần mềm Maple trong dạy - học

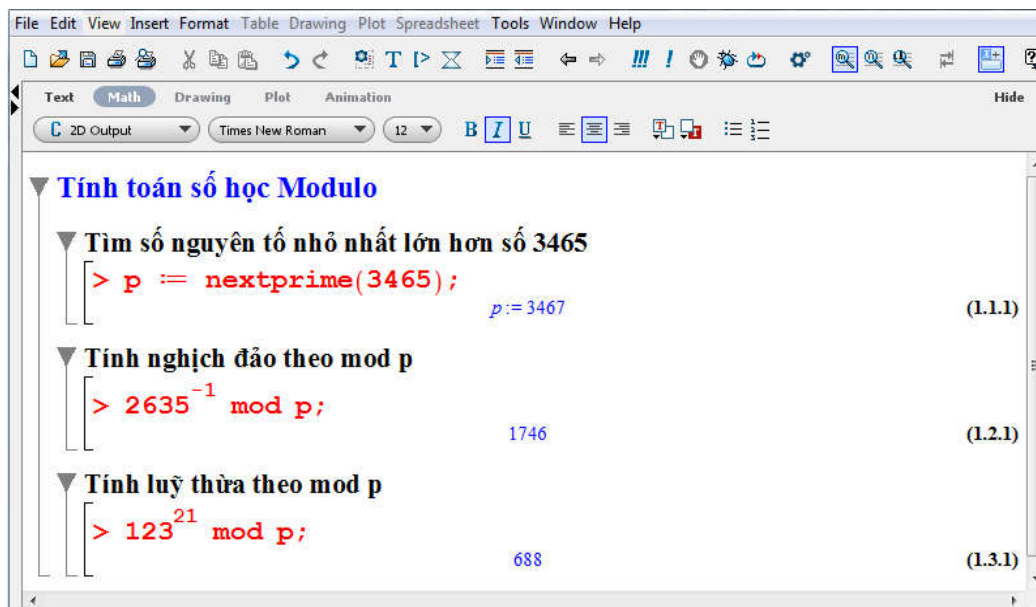
Phần mềm Maple hỗ trợ các gói lệnh cho phép giải trực tiếp các bài toán, qua đó người học có thể tự kiểm tra lại kết quả giải quyết các bài tập của mình. Trong trường hợp cần kiểm tra toàn bộ các bước tính toán của quá trình giải bài toán thì phải lập trình để thực hiện các bước tính toán, tuy nhiên việc lập trình trên Maple rất đơn giản vì hầu như đã có tất cả các hàm hỗ trợ tính toán, người lập trình chỉ cần ghép các bước tính toán giống như tính toán thủ công.

Khi giải bài toán tối ưu quy hoạch tuyến tính, người học có thể kiểm tra lại kết quả:



Hình 1. Kiểm tra kết quả giải bài toán tối ưu

Hoặc kiểm tra tính nghịch đảo, tính lũy thừa trong số học modulo:



Hình 2. Kiểm tra kết quả tính toán số học modulo

2.2.2. Ứng dụng phần mềm Maple trong kiểm tra đánh giá

Căn cứ số tín chỉ của mỗi học phần để xây dựng hệ thống bài kiểm tra đảm bảo quy định số lượng bài kiểm tra quá trình và giữa kì, đồng thời mỗi bài kiểm tra lại căn cứ vào nội dung kiến thức và tiêu chí đánh giá của từng phần trong đề cương chi tiết học phần để phân dạng các bài tập từ đó thiết kế các dạng cho từng bài kiểm tra. Với phần mềm Maple chúng ta dễ dàng tạo ra các đề kiểm tra nhiều mã đề cùng với đáp án chi tiết cho từng mã đề mà không tốn nhiều công sức. Trong phần này, chúng tôi trình bày một ví dụ về việc thực hiện bài kiểm tra giữa kì của môn học Lý thuyết mật mã cho lớp Đại học Công nghệ thông tin K18B.

Bước 1: Soạn nội dung đề kiểm tra

BÀI KIỂM TRA GIỮA KÌ

Học phần: **Lý thuyết mật mã** Lớp: **ĐH CNTT K18B**
 Thời gian làm bài: **30 phút**

NỘI DUNG BÀI KIỂM TRA

Ghi chú: Làm bài kiểm tra với số k là thứ tự của SV trong lớp.

Cho hệ mã RSA có $p = 13$, $q = 17$, $e = 35$.

- a) Hãy tìm khóa của hệ mã trên.
- b) Cho bản rõ $x = k+15$. Hãy tìm bản mã của x .
- c) Giả sử bản mã thu được là $y = k+20$.
 Hãy tìm bản rõ của y .

Bước 2: Tạo đáp án

```
with(matma):
Dapan:=proc(stt)
    local p,q,n,e,d,phin,x,y;
    p:=13; q:=17; e:=35; x:=15+stt; y:=20+stt;
    n:=p*q: phin:=(p-1)*(q-1): d:=1/e mod phin:
    printf("\n* a) K' = (%d, %d),
    K'' = %d. ", n, e, d); ndaoB(e,phin);
    printf("\n* b) y = %d", x^e mod n);
    luythuaB(x,e,n);
    printf("\n* c) x = %d", y^d mod n);
    luythuaB(y,d,n);
end proc:
```

Vậy là đã có một bộ đề kiểm tra giữa kì hơn 200 mã đề, các mã đề khác nhau về số liệu tính toán mà mức độ kiến thức hoàn toàn tương đương.

Khi chấm bài kiểm tra, để có đáp án mã đề 1 chỉ cần nhập số 1 cho đáp án như sau:

[> **Dapan(1);**

sẽ nhận được kết quả đáp án chi tiết của mã đề 1:

```
* a) K' = (221, 35), K'' = 11.
Buoc lap : t g2 v2 g0 v0 g1 v1
```

```
-----
K.gan : - - - 192 0 35 1
1 : 5 17 -5 35 1 17 -5
2 : 2 1 11 17 -5 1 11
3 : 17 0 -192 1 11 0 -192
```

So nghich dao: 11

```
* b) y = 152
Buoc lap: z1 a1 x
```

```
-----
K.gan : 35 16 1
```

```
1 : 34 - 16
2 : 17 35 -
3 : 16 - 118
4 : 8 120 -
5 : 4 35 -
6 : 2 120 -
7 : 1 35 -
8 : 0 - 152
```

Gia tri: 152

```
* c) x = 200
Buoc lap: z1 a1 x
```

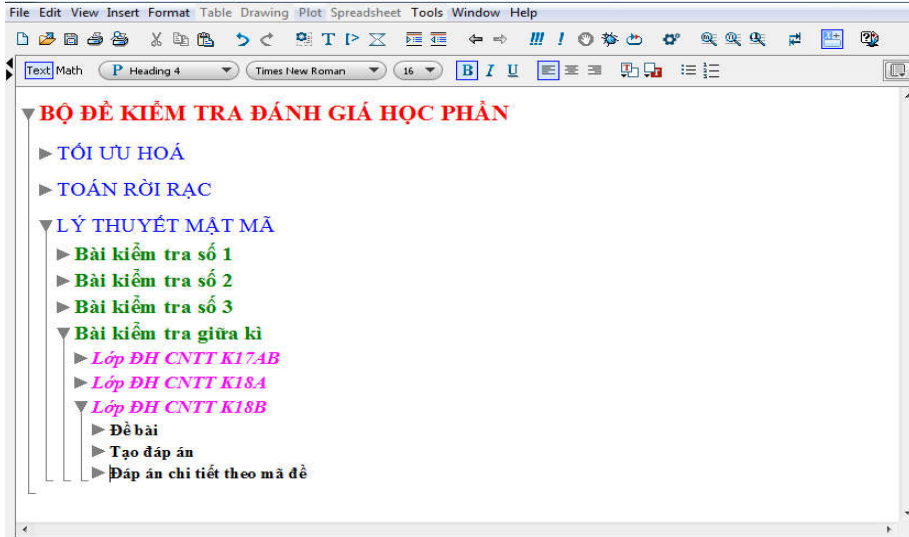
```
-----
K.gan : 11 21 1
```

```
1 : 10 - 21
2 : 5 220 -
3 : 4 - 200
4 : 2 1 -
5 : 1 1 -
6 : 0 - 200
```

Gia tri: 200

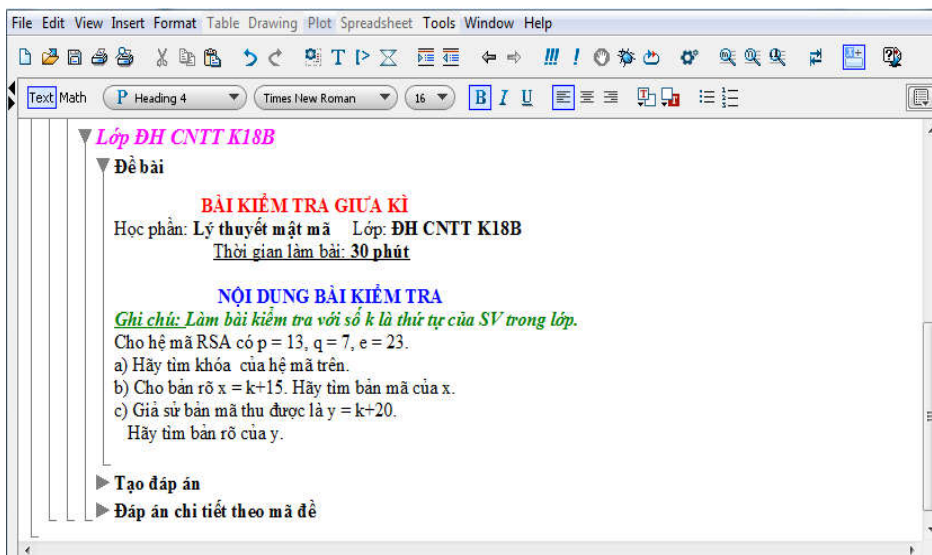
2.3. Kết quả ứng dụng

Chúng tôi đã ứng dụng phần mềm Maple để xây dựng bộ đề kiểm tra quá trình và giữa kì, hệ thống các đề kiểm tra được tổ chức dạng cây thư mục.

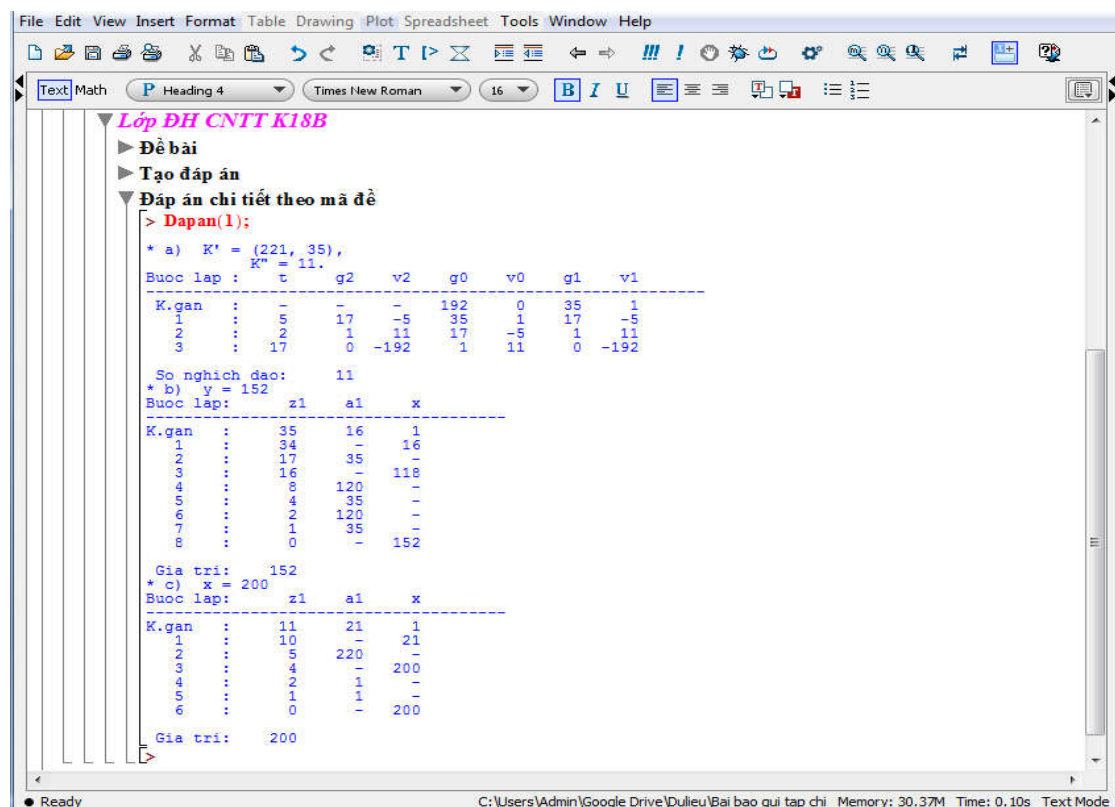


Hình 3. Hệ thống các bài kiểm tra thường xuyên

Phần mềm Maple cho phép tạo ra các file dạng e-book mà trên đó vừa có thể soạn thảo văn bản (bài giảng, nội dung đề kiểm tra) nhưng đồng thời cũng cho phép thực hiện các lệnh tính toán. Như trong file ứng dụng trên, mỗi đề kiểm tra chúng tôi đã biên soạn cả nội dung đề kiểm tra, nội dung lệnh tạo đáp án, đáp án chấm chi tiết cho từng mã đề, vì vậy có thể dùng file này để trình chiếu trực tiếp đề kiểm tra ngay trên lớp (ở chế độ Slideshow của phần mềm Maple).



Hình 4. Nội dung bài kiểm tra



Hình 5. Đáp án chi tiết cho một mã đề

3. KẾT LUẬN

Quá trình kiểm tra đánh giá thường xuyên là một phần trong dạy học, nhằm giúp người dạy đánh giá mức độ kiến thức, kỹ năng của người học, đồng thời người học cũng ý thức được bản thân cần phải cố gắng để đạt kết quả học tập tốt. Tuy nhiên, làm sao để có kết quả đánh giá chính xác mới thực sự quan trọng trong quá trình dạy học. Trong quá trình giảng dạy cho sinh viên ngành Công nghệ thông tin tại Trường Đại học Hồng Đức, chúng tôi đã ứng dụng Maple trong kiểm tra đánh giá thường xuyên người học bằng việc xây dựng hệ thống các đề kiểm tra nhiều mã đề. Các hệ thống đề kiểm tra này được xây dựng với sự hỗ trợ của Maple, các đề kiểm tra có mức độ kiến thức tương đương nhưng khác nhau về số liệu tính toán, điều này đáp ứng được mục đích về sự công bằng và chính xác trong kiểm tra đánh giá. Qua đó tránh được tình trạng sinh viên dựa dẫm vào sự hỗ trợ những sinh viên khác, thúc đẩy sinh viên có ý thức học tập tốt hơn; nâng cao hiệu quả dạy học, góp phần đổi mới phương pháp dạy học và kiểm tra đánh giá người học.

Hiện tại, ứng dụng của chúng tôi đã được áp dụng cho các học phần tại Trường Đại học Hồng Đức là: Toán rời rạc, Tối ưu hóa, Lý thuyết mật mã. Những ưu điểm nổi bật của việc áp dụng này là: Dễ dàng xây dựng được các bộ đề kiểm tra nhiều mã một cách nhanh và chính xác; các mã đề khác nhau có nội dung khác nhau về số liệu tính toán, nhưng hoàn toàn tương đương về yêu cầu kiến thức, kỹ năng.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

- [1] Bộ Giáo dục và Đào tạo (2009), *Tài liệu tập huấn giáo viên: Ứng dụng Công nghệ thông tin đổi mới phương pháp dạy học và đổi mới kiểm tra, đánh giá kết quả học tập*.
- [2] Phan Đình Diệu (2002), *Lý thuyết mật mã & an toàn thông tin*, Nxb. Đại học Quốc gia Hà Nội, Hà Nội.
- [3] Nguyễn Xuân Dũng (2007), *Bảo mật thông tin, mô hình và ứng dụng*, Nxb. Thống kê, Hà Nội.
- [4] Nguyễn Thanh Hải (2006), *Tối ưu hóa (Giáo trình cho ngành Tin học và Công nghệ thông tin)*, Nxb. Đại học Bách khoa Hà Nội, Hà Nội.
- [5] Nguyễn Đức Nghĩa (2002), *Tối ưu hóa*, Nxb. Giáo dục, Hà Nội.
- [6] Nguyễn Đức Nghĩa, Nguyễn Tô Thành (2006), *Toán rời rạc*, Nxb. Đại học Quốc gia Hà Nội, Hà Nội.
- [7] Bruce Schneier (1996), *Applied Cryptography*, 2nd Edition, John Wiley&Son.
- [8] Hankerson, Menezes, Vanstone (2004), *Guide to elliptic curve cryptography*, Springer.
- [9] J.E.Beasley (1996), *Advances in Linear and Integer Programming*, Clarendon Press, Oxford.
- [10] William Stallings (2005), *Cryptography and Network Security Principles and Practices*, 4th Edition, Prentice Hall.
- [11] Website: <https://www.maplesoft.com/support/help/>.

THE APPLICATION OF MAPLE SOFTWARE TO BUILD TESTS

Nguyen Dinh Dinh, Trinh Thi Phu

ABSTRACT

This article presents the application of the Maple software to build tests for some modules in the IT training program at Hong Duc university. The goal of this solution is to ensure accuracy in the assessment of learners.

Keywords: *Application, Maple software, tests, assesement.*

ẢNH HƯỞNG CỦA KÍCH THƯỚC CỐT LIỆU LÊN CÁC TÍNH CHẤT CỦA BÊ TÔNG

Mai Thị Ngọc Hằng¹, Lê Thị Thanh Tâm², Mai Thị Hồng³

TÓM TẮT

Bài báo nghiên cứu sự ảnh hưởng của kích thước cốt liệu lên các tính chất của bê tông. Các hỗn hợp mẫu bê tông được thiết kế với tỷ lệ nước - chất kết dính 0,35 và 0,45. Cốt liệu lớn được sử dụng với các kích thước lớn nhất là 25mm, 19mm, 12,5mm và 9,5mm. Kết quả thí nghiệm cho thấy, khối lượng thể tích của bê tông tươi không bị ảnh hưởng nhiều bởi kích thước cốt liệu. Tuy nhiên, kích thước cốt liệu ảnh hưởng lớn đến độ sụt, cường độ chịu nén, và vận tốc truyền xung siêu âm trong bê tông. Khi kích thước cốt liệu tăng, độ sụt của bê tông tăng. Sử dụng cốt liệu có kích thước lớn nhất 12,5mm cho bê tông có cường độ chịu nén và vận tốc truyền xung siêu âm trong bê tông lớn nhất. Hơn nữa, tất cả các mẫu bê tông trong nghiên cứu này đều có chất lượng tốt với vận tốc truyền xung siêu âm trong bê tông lớn hơn 4200m/s. Kết quả này cho thấy, có thể sử dụng kích thước cốt liệu hợp lý để nâng cao chất lượng của bê tông.

Từ khóa: *Bê tông, cường độ chịu nén, độ sụt, kích thước cốt liệu, vận tốc truyền xung siêu âm.*

1. ĐẶT VẤN ĐỀ

Trong quá trình công nghiệp hóa và hiện đại hóa đất nước hiện nay, việc phát triển cơ sở hạ tầng được ưu tiên như là một nhiệm vụ trọng tâm. Trong đó, bê tông cốt thép vẫn đóng vai trò là kết cấu chịu lực chính và phổ biến trong các công trình xây dựng. Chất lượng của bê tông phụ thuộc vào tính chất và đặc tính của các loại vật liệu cấu tạo nên chúng, bao gồm: xi măng, cát, đá, nước và phụ gia. Với việc chiếm gần 45% thể tích trong bê tông, kích thước cốt liệu lớn là một trong những nhân tố quan trọng ảnh hưởng lớn đến các thuộc tính của bê tông như độ sụt, cường độ chịu nén và độ bền. Chính vì vậy, theo tiêu chuẩn thiết kế thành phần cấp phối bê tông ACI 211.1 của Mỹ, hàm lượng nước và cốt liệu lớn được xác định dựa trên kích thước lớn nhất của cốt liệu [1].

Nghiên cứu sự ảnh hưởng của các kích thước cốt liệu khác nhau lên các thuộc tính của bê tông nhận được sự quan tâm từ một số các nhà nghiên cứu trên thế giới. Đa phần các nghiên cứu đều cho rằng cường độ chịu nén của bê tông tăng khi giảm kích thước các hạt cốt liệu lớn [2,7,13,15]. Tuy nhiên cũng có một số nghiên cứu cho kết quả ngược lại [10,12]. Mặt khác, khi nghiên cứu ảnh hưởng của các cốt liệu có kích thước lớn nhất 10mm, 12,5mm, 16mm và 20mm, Rathish và Krishna [8] đã chỉ ra rằng cường độ chịu nén lớn nhất đạt được với cốt liệu có kích thước lớn nhất là 12,5mm. Kết quả này cho

^{1,2,3} Giảng viên khoa Kỹ thuật Công nghệ, Trường Đại học Hồng Đức

thấy, bê tông đạt cường độ chịu nén cao nhất khi sử dụng các kích thước cốt liệu phù hợp, chứ không phải kích thước lớn nhất hay nhỏ nhất. Không chỉ ảnh hưởng đến cường độ chịu nén, kích thước cốt liệu còn ảnh hưởng lớn đến tính công tác của bê tông. Một số kết quả nghiên cứu cho rằng độ sụt của bê tông tăng khi kích thước cốt liệu tăng [2,13,15]. Tuy nhiên, kết quả nghiên cứu của Rathish và Krishna [8] lại cho rằng độ sụt của bê tông giảm khi kích thước cốt liệu tăng.

Các kết quả nghiên cứu về ảnh hưởng của kích thước cốt liệu lên các đặc tính của bê tông còn trái ngược nhau, bởi vì tỷ lệ nước-chất kết dính, hình dạng và kích thước mẫu bê tông, điều kiện thí nghiệm, hàm lượng và tính chất của các thành phần vật liệu cấu tạo nên bê tông trong mỗi nghiên cứu khác nhau. Ở Việt Nam, vấn đề này chưa nhận được nhiều sự quan tâm từ các nhà nghiên cứu trong nước. Với sự ảnh hưởng lớn của kích thước cốt liệu lên các đặc tính của bê tông như đã nêu trên, việc tìm ra kích thước cốt liệu phù hợp làm tăng hiệu quả sử dụng cốt liệu trong bê tông, đặc biệt là khi chế tạo bê tông có cường độ cao hoặc có tính công tác lớn. Bài báo này nghiên cứu ảnh hưởng của các kích thước cốt liệu điển hình trên địa bàn Thanh Hóa lên các đặc tính vật lý, cơ học và độ bền của bê tông.

2. NỘI DUNG

2.1. Vật liệu và phương pháp thí nghiệm

2.1.1. Vật liệu

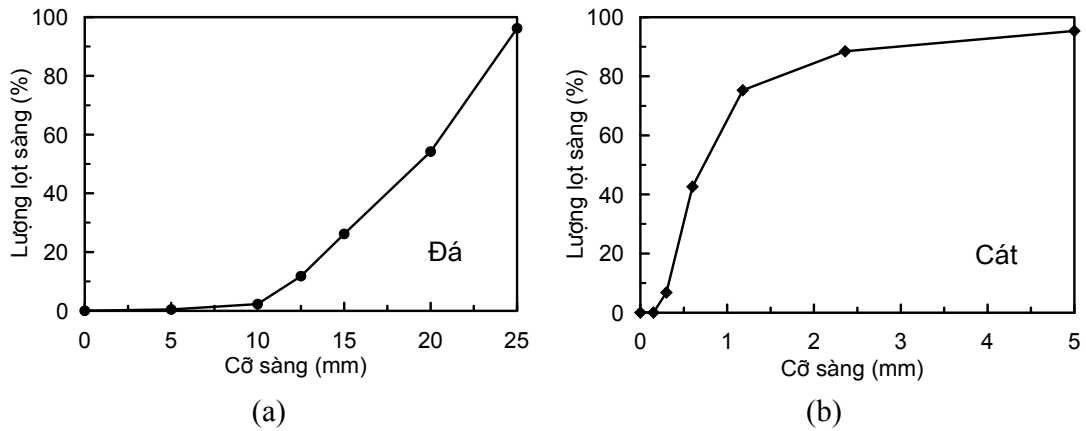
Nghiên cứu này sử dụng xi măng Nghi Sơn PC40 và tro bay của nhà máy nhiệt điện Nghi Sơn làm chất kết dính, khối lượng riêng của chúng lần lượt là $3,12\text{tấn/m}^3$ và $2,16\text{tấn/m}^3$. Hàm lượng tro bay được sử dụng bằng 10% tổng lượng chất kết dính. Các thành phần hóa học của xi măng và tro bay được trình bày trong bảng 1.

Bảng 1. Thành phần hóa học của xi măng và tro bay

Thành phần (%)	SiO ₂	Al ₂ O ₃	Fe ₂ O ₃	CaO	MgO	SO ₃	K ₂ O	Na ₂ O	Khác	Lượng mất khi nung
Xi măng	22,4	5,3	4,0	55,9	2,8	2,1	0,8	0,3	4,5	1,9
Tro bay	48,4	20,4	4,8	2,8	1,4	0,2	1,1	0,8	4,3	15,8

Chú ý rằng, việc sử dụng 10% tro bay thay thế xi măng được kế thừa từ kết quả của nghiên cứu trước với cùng loại vật liệu [11].

Cốt liệu nhỏ sử dụng trong nghiên cứu này là cát vàng có khối lượng riêng là $2,62\text{tấn/m}^3$, khối lượng thể tích xốp ở trạng thái khô $1,43\text{tấn/m}^3$, độ ẩm tự nhiên 5,65%, độ hút nước 0,28%, mô đun độ lớn 2,67. Trong khi cốt liệu lớn là đá được khai thác từ các mỏ đá tự nhiên có khối lượng riêng là $2,69\text{tấn/m}^3$, khối lượng thể tích xốp ở trạng thái khô $1,41\text{tấn/m}^3$, độ ẩm tự nhiên 0,05%, độ hút nước 0,68%, kích thước hạt lớn nhất (D_{\max}) là 25mm.



Hình 1. Đường cong cấp phối hạt của: (a) đá và (b) cát

Hình 1 thể hiện đường cong cấp phối hạt của đá và cát sử dụng trong nghiên cứu này theo tiêu chuẩn ASTM C136 [3]. Chú ý rằng, mục đích của nghiên cứu này là đánh giá sự ảnh hưởng của các kích thước cốt liệu D_{max} đến các đặc tính của bê tông. Do vậy, sau khi đúc các mẫu bê tông với cấp phối đá ban đầu có $D_{max}=25\text{mm}$, cốt liệu lớn còn lại được sàng qua rây sàng có kích thước 25mm để đúc các mẫu bê tông có kích thước đá lớn nhất là 19mm. Tương tự như vậy cho đá qua các rây sàng có kích thước 15mm và 12,5mm để có các loại đá có kích thước hạt lớn nhất là 12,5mm và 9,5mm.

Để giảm lượng nước, tăng tính công tác và chất lượng bê tông, phụ gia hóa dẻo Sikament R7 có khối lượng riêng là $1,15\text{tấn}/\text{m}^3$ được sử dụng với hàm lượng bằng 1% tổng khối lượng các chất kết dính.

2.1.2. Thiết kế thành phần cấp phối mẫu bê tông

Các hỗn hợp bê tông trong nghiên cứu này được thiết kế dựa theo tiêu chuẩn ACI 211.1 [1991] với tỷ lệ nước - chất kết dính (N/CKD) 0,35 và 0,45. Với mỗi tỷ lệ N/CKD bao gồm 4 hỗn hợp bê tông được chế tạo với đá có kích thước hạt lớn nhất lần lượt là 25mm, 19mm, 12,5mm và 9,5mm. Thành phần cấp phối của các hỗn hợp bê tông được trình bày như bảng 2.

Bảng 2. Thành phần cấp phối hỗn hợp bê tông

Hỗn hợp bê tông	N/CKD	Thành phần cấp phối (kg/m^3)					
		Xi măng	Tro bay	Cát	Đá	Nước	Phụ gia hóa dẻo
M35 ($D_{max}=25; 19; 12,5; 9,5\text{mm}$)	0,35	469,1	52,1	811,6	898,4	172,2	5,2
M45 ($D_{max}=25; 19; 12,5; 9,5\text{mm}$)	0,45	365,4	40,6	910,3	899,7	178,7	4,1

(Ghi chú: Các giá trị ghi trong bảng là khối lượng vật liệu ở trạng thái khô, khi tiến hành đúc mẫu đã được điều chỉnh dựa trên độ ẩm và độ hút nước của vật liệu)

2.1.3. Chuẩn bị mẫu và phương pháp thí nghiệm

Khối lượng thể tích và độ sụt của hỗn hợp bê tông tươi được đo ngay sau khi trộn đều. Sau đó các mẫu bê tông được đúc trong khuôn hình trụ có đường kính 10cm và chiều cao 20cm. Các mẫu bê tông được tháo khuôn sau khi đúc 1 ngày và ngâm bảo dưỡng trong nước ở điều kiện thường đến khi làm thí nghiệm. Cường độ chịu nén và vận tốc truyền xung siêu âm trong bê tông được xác định tại các thời điểm 3, 7, 14, 28, 56 và 91 ngày, kết quả trình bày trong bài báo là giá trị trung bình của 3 mẫu thử. Độ sụt của hỗn hợp bê tông, cường độ nén và vận tốc truyền xung siêu âm trong bê tông được xác định lần lượt theo tiêu chuẩn ASTM C143 (2015), ASTM C39 (2012) và ASTM C597 (2009). Các thiết bị đo cường độ chịu nén và vận tốc truyền xung siêu âm được minh họa như hình 2. Thiết bị đo vận tốc truyền xung siêu âm có mã hiệu 58-E4800 được sản xuất bởi hãng Controls của Ý, có một đầu phát sóng siêu âm tần số 50kHz, một đầu nhận sóng, hai đầu này được nối với máy đo như hình 2(b). Thời gian sóng truyền từ đầu phát qua mẫu bê tông đến đầu thu sẽ được ghi lại trên màn hình điều khiển, từ đó xác định được vận tốc truyền sóng qua mẫu bê tông thông qua công thức vật lý. Kết cấu bê tông càng đặc chắc thì vận tốc truyền sóng siêu âm trong bê tông càng cao và ngược lại, do vậy nó được sử dụng trong nghiên cứu này để đánh giá sự sắp xếp của các hạt cốt liệu có kích thước khác nhau trong bê tông. Các thí nghiệm trong nghiên cứu này được tiến hành tại Xưởng thực hành, khoa Kỹ thuật Công nghệ Trường Đại học Hồng Đức.



(a)



(b)

Hình 2. Thí nghiệm xác định (a) cường độ chịu nén và (b) vận tốc truyền xung siêu âm

2.2. Kết quả và thảo luận

2.2.1. Ảnh hưởng của kích thước cốt liệu lên các thuộc tính của bê tông tươi

Các thuộc tính của bê tông tươi được xem xét bao gồm khối lượng thể tích và độ sụt. Kết quả thí nghiệm được trình bày trong bảng 3. Có thể thấy rằng, khối lượng thể tích của các hỗn hợp bê tông gần như nhau, dao động xung quanh giá trị 2500kg/m^3 . Điều này có nghĩa là kích thước cốt liệu không ảnh hưởng nhiều đến khối lượng thể tích của bê tông tươi.

Hỗn hợp bê tông có tỷ lệ nước - chất kết dính 0,35 có độ sụt nhỏ hơn các hỗn hợp bê tông tương ứng có tỷ lệ nước - chất kết dính 0,45. Điều này được giải thích bởi vì độ sụt của bê tông phụ thuộc vào hàm lượng nước và tỷ lệ nước - chất kết dính. Khi hàm lượng nước tăng hoặc tỷ lệ N/CKD tăng sẽ làm tăng độ sụt của bê tông. Mặt khác, với cùng tỷ lệ N/CKD, độ sụt của hỗn hợp bê tông với $D_{\max}=25\text{mm}$ là lớn nhất, tiếp đến là hỗn hợp bê tông với $D_{\max}=19\text{mm}$, $12,5\text{mm}$ và hỗn hợp bê tông với $D_{\max}=9,5\text{mm}$ có giá trị độ sụt nhỏ nhất. Nghĩa là độ sụt của hỗn hợp bê tông tỷ lệ thuận với kích thước cốt liệu. Kết quả này đồng thuận với các nghiên cứu trước của W.Xie và cộng sự (2012), R.K.L.Su và C.Bel (2008), A.Woode và cộng sự (2015). Tuy nhiên, lại ngược với kết quả nghiên cứu của Rathish và Krishna [8]. Chú ý rằng, nghiên cứu của Rathish và Krishna [8] đã sử dụng tỷ lệ nước - chất kết dính và kích thước cốt liệu khác so với nghiên cứu này. Kết quả của nghiên cứu này có thể được giải thích bởi Shetty [9], với cùng một đơn vị thể tích, tổng diện tích bề mặt của các hạt cốt liệu có kích thước lớn nhỏ hơn tổng diện tích bề mặt của các hạt cốt liệu có kích thước nhỏ. Do vậy, khi hàm lượng nước và tỷ lệ N/CKD như nhau, lượng nước và vữa xi măng bao quanh bề mặt các hạt cốt liệu lớn sẽ nhiều hơn ở các hạt nhỏ, do vậy làm giảm sự ma sát giữa các hạt cốt liệu, vì vậy làm tăng độ sụt của bê tông. Chính vì vậy, trong tiêu chuẩn thiết kế thành phần cấp phối bê tông ACI 211.1 (1991), với cùng độ sụt yêu cầu, kích thước lớn nhất của cốt liệu tăng thì lượng nước sử dụng giảm.

Bảng 3. Độ sụt và khối lượng thể tích của các mẫu

Hỗn hợp bê tông	N/CKD	Phụ gia hóa dẻo (kg/m^3)	Độ sụt (cm)	Khối lượng thể tích (kg/m^3)
M35-9,5	0,35	5,2	1,6	2523
M35-12,5			3,6	2523
M35-19			5,5	2513
M35-25			6,1	2517
M45-9,5	0,45	4,1	3,9	2514
M45-12,5			4,5	2513
M45-19			8,7	2493
M45-25			11,2	2495

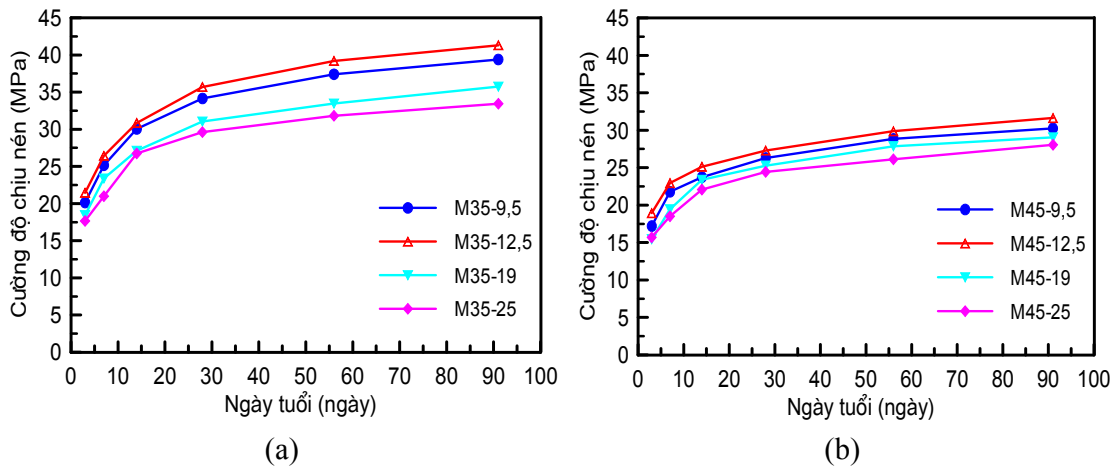
2.2.2. Ảnh hưởng của kích thước cốt liệu lên cường độ chịu nén

Sự phát triển cường độ chịu nén của các mẫu bê tông được thể hiện trên hình 3. Các mẫu bê tông được thiết kế với tỷ lệ N/CKD=0,35 có cường độ chịu nén cao hơn các mẫu bê tông tương ứng được thiết kế với tỷ lệ N/CKD=0,45. Cường độ chịu nén của bê tông phụ thuộc nhiều vào tỷ lệ N/CKD, khi tỷ lệ N/CKD giảm, cường độ chịu nén của bê tông tăng. Mặt khác, với cùng tỷ lệ N/CKD, các mẫu bê tông được chế tạo với $D_{\max}=12,5\text{mm}$ có cường độ lớn nhất, tiếp theo là các mẫu bê tông với $D_{\max}=9,5\text{mm}$, 19mm và 25mm . Cụ thể, với hỗn

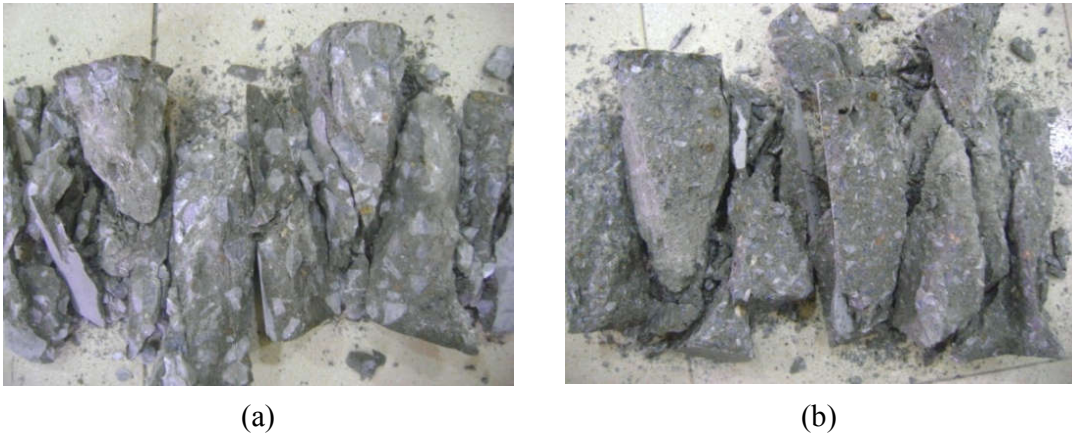
hợp bê tông có tỷ lệ $N/CKD=0,35$, cường độ chịu nén của mẫu M35-12,5 lớn hơn cường độ chịu nén của các mẫu M35-9,5, M35-19 và M35-25 lần lượt là 5%, 15% và 20% ở 28 ngày tuổi; và 5%, 16% và 23% ở 91 ngày tuổi. Tương tự với hỗn hợp bê tông có tỷ lệ $N/CKD=0,45$, cường độ chịu nén của mẫu M45-12,5 lớn hơn cường độ chịu nén của các mẫu M45-9,5, M45-19 và M45-25 lần lượt là 4%, 8% và 12% ở 28 ngày tuổi; và 5%, 9% và 13% ở 91 ngày tuổi. Có nghĩa là kích thước cốt liệu lớn nhất $D_{max}=12,5mm$ là kích thước hợp lý nhất trong nghiên cứu này để bê tông có cường độ chịu nén lớn nhất.

Kết quả trên có thể được lý giải như sau, theo Shetty [9], một cách tổng quát, cường độ chịu nén của bê tông phụ thuộc vào sự sắp xếp của cốt liệu trong bê tông và mối quan hệ giữa cốt liệu lớn và vữa xi măng. Như đã giải thích ở trên, khi kích thước cốt liệu tăng, tổng diện tích bề mặt của các hạt cốt liệu giảm, hàm lượng nước và vữa xi măng bám trên các bề mặt này tăng. Hàm lượng nước nhiều trên bề mặt các hạt cốt liệu là nguyên nhân dẫn đến sự giảm cường độ của bê tông. Hơn nữa, khi sử dụng cốt liệu lớn, sự đồng nhất trong kết cấu của bê tông bị giảm, ứng suất truyền qua giữa các vùng này không đồng đều cũng là nguyên nhân dẫn đến các phá hủy cục bộ trong bê tông khi chịu lực, làm giảm cường độ của bê tông [15]. Hình 4a và 4b lần lượt minh họa các mẫu bê tông với $D_{max}=25mm$ và $12,5mm$ sau khi bị nén vỡ. Sự đồng nhất của mẫu bê tông được chế tạo với cốt liệu có $D_{max}=12,5mm$ được thể hiện rõ ràng hơn so với mẫu bê tông được chế tạo với $D_{max}=25mm$. Do vậy, bê tông được chế tạo với $D_{max}=12,5mm$ có cường độ chịu nén lớn hơn bê tông được chế tạo với $D_{max}=19mm$ và $25mm$. Kích thước cốt liệu càng lớn thì cường độ chịu nén của bê tông càng giảm, kết quả này tương tự với các kết quả nghiên cứu trước [2,7,13,15], trái ngược với kết quả nghiên cứu [10,12]. Tuy nhiên cần lưu ý rằng, kết quả nghiên cứu của Meddah [10] là sự kết hợp của các tổ hợp kích thước cốt liệu gồm: 3mm và 8mm, 8mm và 15mm, 15mm và 25mm; kết quả nghiên cứu của Kozul và Darwin [12] chỉ gồm hai kích cỡ cốt liệu $D_{max}=16mm$ và $19mm$.

Tuy nhiên, như đã đề cập trên, cường độ chịu nén của bê tông còn phụ thuộc vào sự sắp xếp các cốt liệu trong bê tông. Cường độ chịu nén của bê tông với $D_{max}=9,5mm$ nhỏ hơn cường độ chịu nén của bê tông với $D_{max}=12,5mm$. Cốt liệu có kích thước lớn nhất là 9,5mm chỉ có các hạt có kích thước trong khoảng 5mm đến 9,5mm, trong khi cốt liệu có $D_{max}=12,5mm$ có các hạt cốt liệu từ 5mm đến 12,5mm. Sự kết hợp của nhiều hơn các kích thước cốt liệu dễ sắp xếp tạo thành kết cấu vững chắc hơn, các hạt nhỏ hơn khóa lấp những lỗ hổng giữa các hạt lớn. Tuy nhiên, điều này chỉ đúng khi sự khác biệt giữa 9,5mm và 12,5mm là không lớn, còn khi kích thước cốt liệu tăng lên đến 19mm và 25mm thì kết quả đã được giải thích như trên. Nghĩa là trong phạm vi nghiên cứu này, giữa các cốt liệu có $D_{max}=25mm$, 19mm, 12,5mm, và 9,5mm, việc sử dụng cốt liệu có $D_{max}=12,5mm$ cho cường độ chịu nén cao nhất. Nghĩa là $D_{max}=12,5mm$ là cốt liệu hợp lý nhất trong phạm vi nghiên cứu này. Kết quả này tương đồng với nghiên cứu của Rathish và Krishna [8], bê tông đạt cường độ cao nhất khi sử dụng kích thước cốt liệu phù hợp. Điều này cũng giải thích tại sao trong các sản phẩm bê tông chất lượng cao hoặc yêu cầu cao về cốt liệu như bê tông cường độ cao, bê tông tự lèn, cốt liệu có kích thước lớn nhất là 12,5 mm thường hay được sử dụng.



Hình 3. Cường độ chịu nén của các mẫu bê tông: a) M35 và b) M45

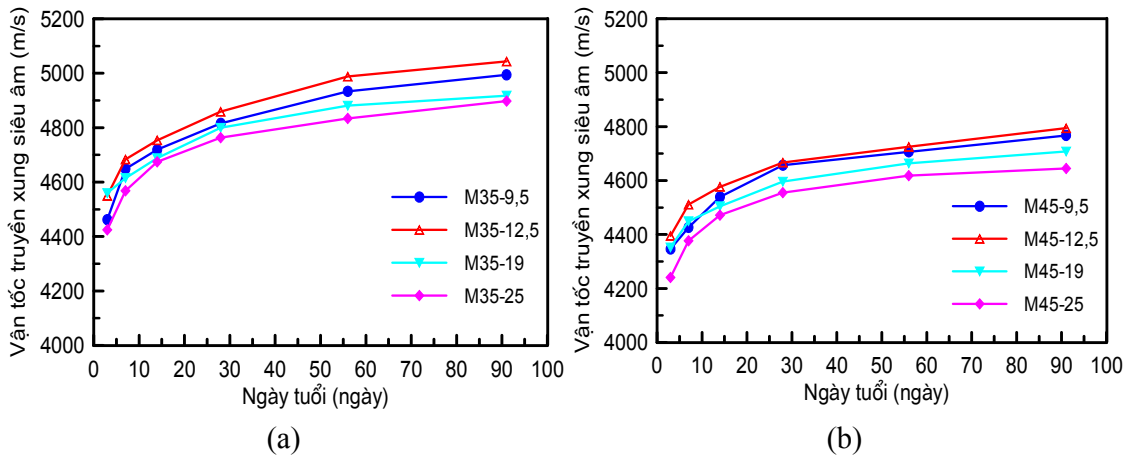


Hình 4. Các mẫu bê tông sau khi nén: a) $D_{max}=25\text{mm}$ và b) $D_{max}=12,5\text{mm}$

2.2.3. Ảnh hưởng của kích thước cốt liệu lên vận tốc truyền xung siêu âm trong bê tông

Sự sắp xếp của các hạt cốt liệu có kích thước khác nhau ảnh hưởng đến độ đặc chắc và cấu trúc bên trong bê tông. Do vậy để đánh giá sự đồng nhất, các khuyết tật bên trong cũng như đặc tính bền chắc của bê tông, thí nghiệm xác định vận tốc truyền xung siêu âm trong bê tông được tiến hành. Thông thường vận tốc truyền xung siêu âm trong bê tông càng cao thì bê tông càng đặc chắc và đồng nhất, ít có các khuyết tật bên trong kết cấu. Kết quả thí nghiệm xác định vận tốc truyền xung siêu âm trong bê tông được trình bày trên hình 5. Tương tự như cường độ chịu nén của bê tông, các mẫu bê tông có tỷ lệ N/CKD=0,35 có vận tốc truyền xung siêu âm trong bê tông lớn hơn các mẫu có tỷ lệ N/CKD=0,45. Điều này được giải thích tương tự như trên, với tỷ lệ N/CKD nhỏ, hàm lượng xi măng lớn, lượng nước nhỏ cho kết cấu bê tông đặc chắc và đồng nhất. Với tỷ lệ N/CKD lớn, hàm lượng nước để phản ứng với xi măng còn dư thừa tồn tại trong kết cấu bê tông, sau một thời gian chúng bay hơi, để lại các khuyết tật vi mô trong bê tông và làm giảm sự đồng nhất trong bê tông, do vậy làm giảm cường độ cũng như độ bền, đặc chắc của bê tông.

Tương tự như kết quả thí nghiệm nén, vận tốc truyền xung siêu âm trong bê tông của các mẫu với $D_{\max}=12,5\text{mm}$ là lớn nhất, tiếp theo là các mẫu với $D_{\max}=9,5\text{mm}$, 19mm, và 25mm. Kết quả này cũng chứng minh rằng, bê tông được chế tạo với $D_{\max}=12,5\text{mm}$ có độ đồng nhất và đặc chắc tốt hơn bê tông được chế tạo với $D_{\max}=9,5\text{mm}$. Điều này khẳng định lại kết quả cường độ chịu nén của bê tông với $D_{\max}=12,5\text{mm}$ lớn hơn bê tông với $D_{\max}=9,5\text{mm}$ ở trên là hợp lý. Hơn nữa, tất cả các mẫu bê tông được chế tạo trong nghiên cứu này có vận tốc truyền xung siêu âm trong bê tông lớn hơn 4200m/s. Theo phân loại của Carcano và Moreno [14], chúng được xếp vào loại bê tông có chất lượng cao.



Hình 5. Vận tốc truyền xung siêu âm trong bê tông của các mẫu a) M35 và b) M45

3. KẾT LUẬN

Bài báo này trình bày các kết quả thực nghiệm về các đặc tính của bê tông được chế tạo với các loại cốt liệu có kích thước hạt lớn nhất khác nhau (25mm, 19mm, 12,5mm, và 9,5mm), tỷ lệ nước - chất kết dính 0,35 và 0,45. Các kết luận chính được rút ra từ kết quả thí nghiệm trong nghiên cứu này như sau:

Khối lượng thể tích của các hỗn hợp bê tông tươi không thay đổi nhiều khi thay đổi kích thước cốt liệu, tuy nhiên độ sụt của bê tông tăng khi tăng kích thước của các hạt cốt liệu lớn.

Các mẫu bê tông được chế tạo với cốt liệu có $D_{\max}=12,5\text{mm}$ có cường độ chịu nén và vận tốc truyền xung siêu âm trong bê tông lớn nhất trong bốn loại cốt liệu được nghiên cứu trong bài báo này, nghĩa là nếu chọn kích thước cốt liệu hợp lý sẽ cho bê tông có chất lượng cao nhất.

Tất cả các mẫu bê tông được chế tạo trong nghiên cứu này có chất lượng tốt với vận tốc truyền xung siêu âm trong bê tông lớn hơn 4200m/s.

Các kết quả trên được thực hiện với các loại vật liệu có tính chất và thông số kỹ thuật nhất định, khi áp dụng cho các công trình thực tế với các loại vật liệu có tính chất khác nhau, tỷ lệ nước - chất kết dính khác nhau cần tiến hành thử nghiệm để lựa chọn được kích thước cốt liệu hợp lý cho bê tông có chất lượng cao nhất.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

- [1] ACI 211.1 (1991), *Standard practice for selecting proportions for normal, heavyweight, and mass concrete*.
- [2] A. Woode, D. K. Amoah, I. A. Aguba, and P. Ballow (2015), *The effect of maximum coarse aggregate size on the compressive strength of concrete produced in Ghana*, Civil and Environmental Research, Vol. 7, No. 5, pp. 7-12.
- [3] ASTM C136 (2001), *Standard test method for sieve analysis of fine and coarse aggregates*.
- [4] ASTM C597 (2009), *Standard test method for pulse velocity through concrete*.
- [5] ASTM C39 (2012), *Standard test method for compressive strength of cylindrical concrete specimens*.
- [6] ASTM C143 (2015), *Standard test method for slump of hydraulic-cement concrete*.
- [7] E. Yasar, Y. Erdogan, and A. Kilic (2004), *Effect of limestone aggregate type and water-cement ratio on concrete strength*, Material Letters, Vol. 58, pp. 772-777.
- [8] K. P. Rathish and R. M. V. Krishna (2012), *A study on the effect of size of aggregate on the strength and sorptivity characteristics of cinder based light weight concrete*, Research Journal of Engineering Sciences, Vol. 1, No. 6, pp. 27-35.
- [9] M. S. Shetty (2005), *Concrete technology theory and practice*, S. Chand & Company Ltd., Ram Nagar, New Delhi, India. p. 624.
- [10] M. S. Meddah, S. Zitouni, and S. Belaabes (2010), *Effect of content and particle size distribution of coarse aggregate on the compressive strength of concrete*, Construction and Building Materials, Vol. 24, pp. 505-512.
- [11] N. S. Huy, L. T. T. Tam, and H. T. Phuoc (2017), *Effect of fly ash content on the compressive strength development of concrete*, Tạp chí Khoa học Công nghệ Xây dựng, No. 2, pp. 31-36.
- [12] R. Kozul and D. Darwin (1997), *Effects of aggregate type, size, and content on concrete strength and fracture energy*, Report No. 43, University of Kansas Center for Research, p. 98.
- [13] R. K. L. Su and C. Bel (2008), *The effect of coarse aggregate size on the stress-strain curves of concrete under uniaxial compression*, The Hong Kong Institution of Engineers Transactions, Vol. 15, No. 3, pp. 33-39.
- [14] R. S. Carcano and E. I. Moreno (2008), *Evaluation of concrete made with crushed limestone aggregate based on ultrasonic pulse velocity*, Construction and Building Materials, Vol. 22, pp. 1225-1231.
- [15] W. Xie, Y. Jin, and S. Li. (2012), *Experimental research on the influence of grain size of coarse aggregate on pebble concrete compressive strength*, Applied Mechanics and Materials, Vol. 238, pp. 133-137.

THE EFFECT OF COARSE AGGREGATE SIZES ON THE PROPERTIES OF CONCRETE

Mai Thi Ngoc Hang, Le Thi Thanh Tam, Mai Thi Hong

ABSTRACT

This paper investigates the effect of coarse aggregate sizes on the properties of concrete. Concrete mixtures were designed with water-to-binder ratios of 0.35 and 0.45. Coarse aggregates with maximum sizes of 25mm, 19mm, 12.5mm and 9.5mm were used. Testing results indicate that the unit volume weight of fresh concrete is not affected by coarse aggregate sizes. However, the coarse aggregate size are significantly influenced by slump, compressive strength and ultrasonic pulse velocity of concrete. The slump of concrete increases with increasing the coarse aggregate size. The use of maximum coarse aggregate size of 12.5mm results in the highest concrete compressive strength and ultrasonic pulse velocity. In addition, all concrete samples produced in this study have a good quality with the ultrasonic pulse velocity of higher than 4200m/s. This study also indicates that the quality of concrete can be improved if the optimal coarse aggregate size was utilized.

Keywords: Concrete, compressive strength, slump, coarse aggregate size, ultrasonic pulse velocity.

CÁC ĐẶC TÍNH KỸ THUẬT CỦA BÊ TÔNG BỊ XÂM THỰC BỞI MUỐI SUNPHAT

Mai Thị Ngọc Hằng¹, Lưu Đình Thi², Hà Văn Sơn³

TÓM TẮT

Bài báo nghiên cứu các đặc tính của bê tông bị xâm thực bởi muối sunphat. Các hỗn hợp bê tông được thiết kế với tỷ lệ nước - chất kết dính 0,35, 0,40 và 0,45. Tro bay thô của nhà máy nhiệt điện Nghi Sơn được sử dụng để thay thế 10% xi măng trong thành phần cấp phối hỗn hợp bê tông. Các mẫu bê tông được ngâm trong dung dịch Na₂SO₄ nồng độ 5% và trong nước để so sánh kết quả. Các thí nghiệm về cường độ chịu nén và vận tốc truyền xung siêu âm được tiến hành tại 3, 7, 14, 28, 56 và 91 ngày tuổi. Kết quả thí nghiệm cho thấy, cường độ chịu nén và vận tốc truyền xung siêu âm của các mẫu bị xâm thực sunphat nhỏ hơn các mẫu bê tông thường được bảo dưỡng trong nước. Các phản ứng giữa muối sunphat và các sản phẩm thủy hóa và puzolan hóa tạo nên gypsum và ettringite là nguyên nhân gây nên sự trương nở, nứt nẻ và làm giảm cường độ chịu lực của bê tông.

Từ khóa: *Bê tông, xâm thực sunphat, cường độ chịu nén, vận tốc truyền xung siêu âm, gypsum, ettringite.*

1. ĐẶT VẤN ĐỀ

Chất lượng của các kết cấu bê tông cốt thép bị giảm đáng kể do hiện tượng xâm thực từ môi trường bên ngoài. Các hóa chất từ bên ngoài như axit, muối... khi xâm nhập vào bên trong bê tông sẽ tác động tiêu cực và làm thay đổi khả năng chịu lực cũng như độ bền của bê tông. Hiện tượng bê tông bị xâm thực bởi các muối sunphat được phát hiện từ năm 1908, tuy nhiên cho đến nay các nhà nghiên cứu vẫn chưa thực sự hiểu biết về nó một cách đầy đủ [8]. Với các nghiên cứu trên hồ xi măng, Sahmaran và cộng sự [8] đã chỉ ra rằng cường độ chịu nén của chúng giảm đáng kể sau 16 tuần ngâm trong dung dịch Na₂SO₄ nồng độ 5%. Các nghiên cứu trước cũng chỉ ra rằng hồ xi măng không phù hợp để sử dụng trong điều kiện môi trường bị xâm thực sunphat bởi vì sự tấn công của các muối sunphat dẫn đến sự giãn nở và làm mất khả năng chịu lực của chúng [4,8]. Tuy nhiên, các nghiên cứu trên cũng chỉ ra rằng khả năng chống lại sự xâm thực sunphat của hồ xi măng được cải thiện đáng kể khi sử dụng thêm tro bay và tro trấu với hàm lượng phù hợp.

Những tác động tiêu cực của sunphat lên bê tông được thể hiện thông qua sự giãn nở, mất khối lượng và giảm cường độ chịu lực [6,7,10,11,12]. Đặc biệt các nghiên cứu của Torii và cộng sự (1995); Li và cộng sự (2003) đều cho rằng với bê tông thường chỉ sử dụng xi măng làm chất kết dính bị giãn nở lớn và mất khả năng chịu lực sau 1 năm bị xâm thực bởi dung dịch Na₂SO₄ nồng độ 10% hoặc H₂SO₄ nồng độ 2%. Để cải thiện khả năng chống ăn mòn sunphat, Summer [10] đã sử dụng 10÷17% tro bay loại F hoặc C để thay thế xi măng.

^{1,2,3} Giảng viên khoa Kỹ thuật Công nghệ, Trường Đại học Hồng Đức

Kết quả tương tự khi Torii và cộng sự (1995); Iassar và cộng sự (1996) sử dụng lần lượt 50% và 20% tro bay thay thế xi măng. Việc sử dụng kết hợp tro bay với xi lò cao và muối silic cũng làm tăng khả năng chống lại sự xâm thực sunphat của bê tông [7,12].

Với tốc độ phát triển mạnh mẽ của ngành công nghiệp xây dựng hiện nay, ngày càng nhiều các công trình được xây dựng với các yêu cầu kỹ thuật ngày càng khắt khe, đặc biệt là các công trình tiếp xúc trực tiếp với môi trường có tồn tại sunphat (đất, nước ngầm, nước biển, nước thải, không khí, ...). Hiện nay các công trình nghiên cứu thực nghiệm ở Việt Nam về ăn mòn sunphat còn rất hạn chế, trong khi các nghiên cứu trên thế giới vẫn chưa hoàn toàn hiểu hết về hiện tượng này. Việc sử dụng tro bay và các phụ gia khoáng khác có thể tăng khả năng chống lại sự xâm thực sunphat, tuy nhiên hiệu quả của chúng phụ thuộc nhiều vào chất lượng của vật liệu được sử dụng. Các kết quả nghiên cứu trước đây sử dụng tro bay tuyển (được tuyển chọn với chất lượng cao) có lượng mất khi nung từ 0,45% đến 3,2%. Bài báo này nghiên cứu các đặc tính của bê tông sử dụng tro bay của nhà máy nhiệt điện Nghi Sơn để thay thế 10% xi măng bị xâm thực bởi dung dịch Na_2SO_4 nồng độ 5%. Chú ý rằng tro bay được sử dụng trong bài báo này là tro bay thô (chưa qua tuyển chọn) có lượng mất khi nung lớn, 15,8%.

2. NỘI DUNG

2.1. Vật liệu và phương pháp thí nghiệm

2.1.1. Vật liệu

Chất kết dính sử dụng trong nghiên cứu này là xi măng Nghi Sơn PC40 và tro bay của nhà máy nhiệt điện Nghi Sơn, các thành phần hóa học của chúng được thể hiện trong bảng 1, khối lượng riêng của chúng lần lượt là $3,12\text{tấn/m}^3$ và $2,16\text{tấn/m}^3$. Theo tiêu chuẩn ASTM C618 [2005], tro bay sử dụng trong nghiên cứu này là tro bay loại F, với tổng hàm lượng SiO_2 , Al_2O_3 và Fe_2O_3 lớn hơn 70% (bảng 1). Chú ý rằng, các nghiên cứu trước [4-7,10-12] sử dụng tro bay tuyển có lượng mất khi nung nhỏ hơn 6%, phù hợp với tiêu chuẩn ASTM C618 (). Tro bay sử dụng trong nghiên cứu này là tro bay thô, với lượng mất khi nung 15,8%, lớn hơn yêu cầu theo quy định của tiêu chuẩn ASTM C618. Việc sử dụng tro bay thô chưa qua tuyển chọn trong các công trình chịu xâm thực sunphat sẽ được đánh giá trong nghiên cứu này.

Đá và cát được khai thác từ các mỏ tự nhiên trên địa bàn tỉnh Thanh Hóa với các đặc trưng được trình bày trong bảng 2. Phụ gia hóa dẻo Sikament R7 với khối lượng riêng là $1,15\text{tấn/m}^3$ được sử dụng để giảm lượng nước và tăng tính công tác cho bê tông. Hàm lượng phụ gia hóa dẻo được sử dụng bằng 1% tổng khối lượng các chất kết dính.

Bảng 1. Thành phần hóa học của xi măng và tro bay

Thành phần (%)	SiO_2	Al_2O_3	Fe_2O_3	CaO	MgO	SO_3	K_2O	Na_2O	Khác	Lượng mất khi nung (%)
Xi măng	22,4	5,3	4,0	55,9	2,8	2,1	0,8	0,3	4,5	1,9
Tro bay	48,4	20,4	4,8	2,8	1,4	0,2	1,1	0,8	4,3	15,8

Bảng 2. Các đặc trưng của cốt liệu

Cốt liệu	Kích thước hạt lớn nhất (mm)	Khối lượng riêng (T/m ³)	Khối lượng thể tích khô (T/m ³)	Độ ẩm (%)	Độ hút nước (%)
Cát	5,0	2,62	1,50	4,35	1,08
Đá	15,0	2,69	1,45	0,11	0,08

2.1.2. Thiết kế thành phần cấp phối hỗn hợp bê tông

Bảng 3 trình bày thành phần cấp phối của các hỗn hợp bê tông. Các hỗn hợp bê tông được thiết kế theo tiêu chuẩn ACI 211-91 [2] với các tỷ lệ nước-chất kết dính (N/CKD) 0,35, 0,40 và 0,45. Chú ý rằng, hàm lượng tro bay sử dụng bằng 10% tổng hàm lượng chất kết dính, được kế thừa từ nghiên cứu trước với cùng loại vật liệu [1].

Bảng 3. Thành phần cấp phối mẫu bê tông (tính cho 1m³)

Tên mẫu	Tỷ lệ N/CKD	Xi măng (kg)	Tro bay (kg)	Cát (kg)	Đá (kg)	Nước (kg)	Phụ gia hóa dẻo (kg)
M35	0,35	469,1	52,1	811,6	898,4	177,2	5,2
M40	0,40	410,8	45,6	867,1	899,1	178,0	4,6
M45	0,45	365,4	40,6	910,3	899,7	178,7	4,1

2.1.3. Chuẩn bị mẫu và phương pháp thí nghiệm

Khối lượng bê tông tươi và độ sụt của các hỗn hợp bê tông được xác định ngay sau khi trộn. Sau đó các mẫu bê tông được đúc trong khuôn hình trụ có đường kính 10cm, chiều cao 20cm. Sau một ngày, tháo khuôn và bảo dưỡng các mẫu bê tông trong nước và trong dung dịch Na₂SO₄ nồng độ 5% cho đến khi tiến hành các thí nghiệm. Các thí nghiệm được tiến hành bao gồm cường độ chịu nén và vận tốc truyền xung siêu âm tại 3, 7, 14, 28, 56 và 91 ngày tuổi. Kết quả trình bày trong bài báo này là giá trị trung bình của 3 mẫu thử.

2.2. Kết quả và thảo luận

2.2.1. Độ sụt và khối lượng bê tông tươi

Độ sụt và khối lượng đơn vị thể tích của các hỗn hợp bê tông tươi được trình bày trong bảng 4. Độ sụt và khối lượng đơn vị thể tích của bê tông thay đổi lần lượt từ 5,2÷6,0 cm và 2408÷2372kg/m³ khi tỷ lệ N/CKD thay đổi từ 0,35 đến 0,45. Kết quả cho thấy độ sụt tăng và khối lượng đơn vị thể tích của bê tông giảm khi tăng tỷ lệ N/CKD. Với hàm lượng nước gần như nhau, khi tỷ lệ N/CKD tăng thì hàm lượng xi măng giảm, dẫn đến khối lượng đơn vị thể tích mẫu giảm, bởi vì khối lượng riêng của xi măng lớn nhất trong các thành phần cấu tạo nên bê tông. Mặt khác, cường độ chịu nén của bê tông phụ thuộc chủ yếu vào tỷ lệ N/CKD [9], khi tỷ lệ N/CKD giảm thì cường độ bê tông tăng.

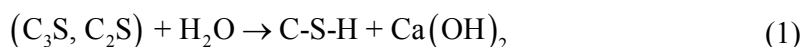
Bảng 4. Độ sụt và khối lượng đơn vị thể tích của các mẫu

Hỗn hợp bê tông	N/CKD	Phụ gia hóa dẻo (kg/m ³)	Độ sụt (cm)	Khối lượng đơn vị thể tích (kg/m ³)
M35	0,35	5,2	4,2	2408
M40	0,40	4,6	5,1	2388
M45	0,45	4,1	6,0	2372

2.2.2. Cường độ chịu nén

Cường độ chịu nén của các mẫu bê tông thường được bảo dưỡng trong nước và các mẫu bị xâm thực sunphat (ngâm trong dung dịch Na₂SO₄ nồng độ 5%) được thể hiện lần lượt như hình 1a và 1b. Cường độ chịu nén của tất cả các mẫu vẫn tiếp tục tăng theo thời gian, bởi vì các phản ứng thủy hóa của xi măng (1) và puzolan hóa của tro bay (2) vẫn tiếp tục phát triển theo thời gian. Ở cùng ngày tuổi, các mẫu với tỷ lệ N/CKD nhỏ có cường độ chịu nén cao hơn các mẫu với tỷ lệ N/CKD cao. Điều này được giải thích bởi Shetty [9], cường độ chịu nén của bê tông tỷ lệ nghịch với tỷ lệ N/CKD.

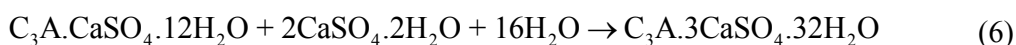
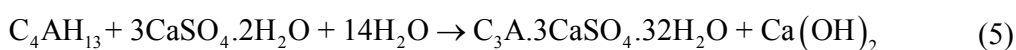
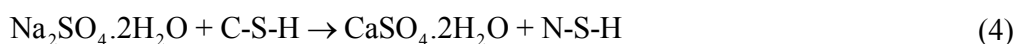
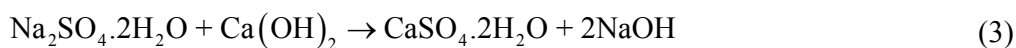
Phản ứng thủy hóa:

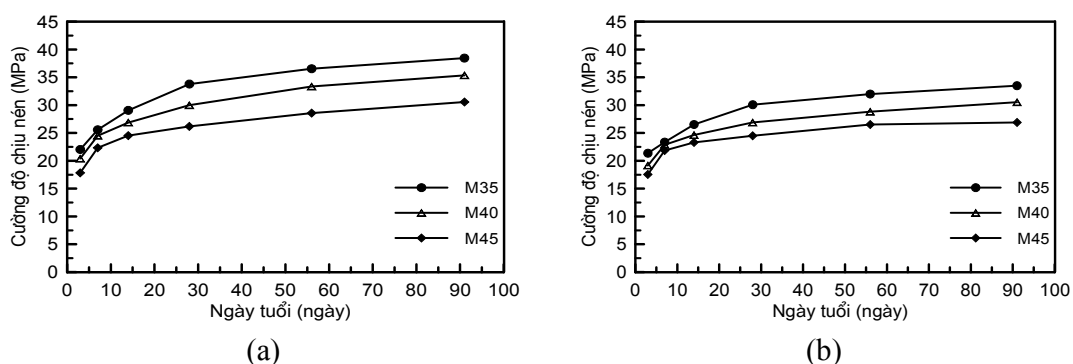


Phản ứng Puzolan hóa:



Cường độ chịu nén tại các ngày tuổi ban đầu không có sự khác biệt nhiều giữa các mẫu ngâm trong nước và dung dịch muối sunphat. Tuy nhiên ở các ngày tuổi càng dài, cường độ chịu nén của các mẫu bê tông được ngâm trong dung dịch muối sunphat thấp hơn các mẫu bê tông tương ứng được ngâm trong nước. Tại 91 ngày tuổi, cường độ chịu nén của các mẫu bị ăn mòn sunphat chỉ bằng khoảng 86÷88% so với các mẫu thường, và sự giảm cường độ này có xu hướng tiếp diễn theo thời gian. Đây là kết quả của các phản ứng giữa muối sunphat và các sản phẩm thủy hóa và puzolan hóa để tạo thành thạch cao (gypsum: CaSO₄.2H₂O) và ettringite (C₃A.3CaSO₄.32H₂O) như phương trình (3)-(6). Tại các ngày tuổi ban đầu, các phản ứng thủy hóa và puzolan hóa chiếm ưu thế nên cường độ của các mẫu tiếp tục phát triển. Tuy nhiên, càng về sau, các phản ứng tạo ra gypsum và ettringite ngày càng nhiều, đây là các hợp chất gây giãn nở, làm nứt nẻ và giảm khả năng chịu lực của bê tông.

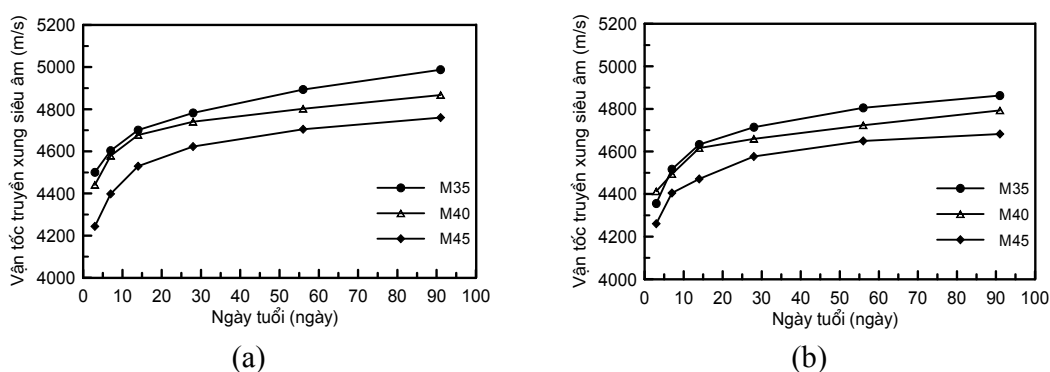




Hình 1. Cường độ chịu nén (a) mẫu ngâm nước; (b) mẫu ngâm trong dung dịch Na₂SO₄

2.2.3. Vận tốc truyền xung siêu âm

Vận tốc truyền xung siêu âm là một thí nghiệm không phá hủy mẫu, được dùng để đánh giá độ bền của bê tông liên quan đến tính đặc chắc, tính đồng nhất và các khuyết tật bên trong bê tông như vết nứt, lỗ rỗng. Vận tốc truyền xung siêu âm trong bê tông càng cao, độ đặc chắc của kết cấu càng tốt, chất lượng bê tông càng cao. Theo Carcano và Moreno [5], bê tông có vận tốc truyền xung siêu âm lớn hơn 4100m/s được xếp vào loại bê tông có chất lượng cao. Hình 2a và 2b lần lượt thể hiện vận tốc truyền xung siêu âm của các mẫu thường và mẫu bị ăn mòn sunphat. Kết quả thí nghiệm chỉ ra rằng, vận tốc truyền xung siêu âm có liên quan mật thiết đến khả năng chịu nén của bê tông. Các mẫu bê tông có cường độ chịu nén cao thì tương ứng có vận tốc truyền xung siêu âm cao. Tương tự như kết quả chịu nén, các mẫu bê tông bị ăn mòn sunphat có vận tốc truyền xung siêu âm nhỏ hơn các mẫu bê tông tương ứng ở điều kiện thường. Kết quả này cũng được giải thích tương tự như kết quả thí nghiệm xác định cường độ chịu nén, do sự hình thành gypsum và ettringite làm giảm chất lượng bê tông. Tuy nhiên, tất cả các mẫu bê tông trong nghiên cứu này đều có vận tốc truyền xung siêu âm lớn hơn 4100m/s, được phân loại là bê tông có chất lượng tốt như đã đề cập ở trên [5]. Kết quả này một phần là do sự có mặt của tro bay đã làm tăng khả năng chống ăn mòn sunphat, tương tự như kết quả từ các nghiên cứu trước [4,6-7,10-12].



Hình 2. Vận tốc truyền xung siêu âm
(a) mẫu ngâm nước; (b) mẫu ngâm trong dung dịch Na₂SO₄

3. KẾT LUẬN

Bài báo này trình bày kết quả thí nghiệm về các đặc tính kỹ thuật của bê tông bị xâm thực bởi dung dịch Na_2SO_4 nồng độ 5%. Các mẫu bê tông thường được bảo dưỡng trong nước cũng được thí nghiệm để làm mẫu so sánh. Các kết quả chính được rút ra từ thí nghiệm cho thấy :

Sau 91 ngày tuổi, cường độ chịu nén của các mẫu bê tông bị xâm thực sunphat giảm còn 86÷88% so với các mẫu bê tông thường.

Vận tốc truyền xung siêu âm của các mẫu bê tông bị xâm thực thấp hơn các mẫu bê tông thường.

Sự giảm chất lượng của bê tông trong môi trường bị xâm thực sunphat là do sự hình thành gypsum và ettringite gây giãn nở, nứt và giảm khả năng chịu lực của bê tông.

Các mẫu bê tông trong nghiên cứu này có chất lượng tương đối tốt khi có vận tốc truyền xung siêu âm lớn hơn 4100m/s, một phần do sự có mặt của tro bay trong thành phần cấp phối mẫu.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

- [1] Ngô Sĩ Huy, Lê Thị Thanh Tâm, Huỳnh Trọng Phước (2017), *Effect of fly ash content on the compressive strength development of concrete*”, Tạp chí Khoa học Công nghệ Xây dựng, Số 2, trang 31-36.
- [2] ACI Committee 211 (1991), *Standard practice for selecting proportions for normal, heavyweight, and mass concrete*.
- [3] ASTM C618 (2005), *Standard specification for coal fly ash and raw or calcined natural pozzolan for use in concrete*.
- [4] Chindaprasirt P., Kanchanda P., Sathonsaowaphak A., and Cao H. T. (2007), *Sulfate resistance of blended cements containing fly ash and rice husk ash*, Construction and Building Materials, 21, pp. 1356-1361.
- [5] Carcano R. S., and Moreno E. I. (2008), *Evaluation of concrete made with crushed limestone aggregate based on ultrasonic pulse velocity*, Construction and Building Materials, 22, pp. 1125-1131.
- [6] Irassar E. F., Maio A. D., and Batic O. R. (1996), *Sulfate attack on concrete with mineral admixtures*, Cement and Concrete Research, 26(1), pp. 113-123.
- [7] Li G., and Zhao X. (2003), *Properties of concrete incorporating fly ash and ground granulated blast-furnace slag*, Cement and Concrete Composite, 25, 293-299.
- [8] Sahmaran M., Kasap O., Duru K., and Yaman I. O. (2007), *Effects of mix composition and water-cement ratio on the sulfate resistance of blended cements*, Cement and Concrete Composite, 29, pp. 159-167.
- [9] Shetty M. S. (2005), *Concrete technology theory and practice*, Ram Nagar, New Delhi, India.

- [10] Sumer M. (2012), *Compressive strength and sulfate resistance properties of concretes containing Class F and Class C fly ashes*, Construction and Building Materials, 34, pp. 531-536.
- [11] Torii K., Taniguchi K., and Kawamura M. (1995), *Sulfate resistance of high fly ash content concrete*, Cement and Concrete Research, 25(4), pp. 759-768.
- [12] Thomas M. D. A., Shehata M. H., Shashiprakash S. G., Hopkins D. S., and Cail K. (1999), *Use of ternary cementitious systems containing silica fume and fly ash in concrete*, Cement and Concrete Research, 29, pp. 1207-1214.

THE ENGINEERING PROPERTIES OF CONCRETE UNDER SULFATE ATTACK

Mai Thi Ngoc Hang, Luu Dinh Thi, Ha Van Son

ABSTRACT

This paper investigates the properties of concrete under sulfate attack. Concrete mixtures were designed with water to binder ratios of 0.35, 0.40, and 0.45. The raw fly ash of Nghi Son power plant was used to substitute 10% of cement in concrete mixtures. Concrete samples were immersed in 5% Na₂SO₄ solution and fresh water for comparison. The compressive strength and ultrasonic pulse velocity tests were conducted at 3, 7, 14, 28, 56 and 91 days. Testing results indicate that the compressive strength and ultrasonic pulse velocity of concrete samples immersed in sulfate solution were lower than those of corresponding samples immersed in fresh water. The chemical reactions between sulfate ion with the hydration and pozzolanic products to form gypsum and ettringite are causes of expansion, cracks, and reduction in strength of concrete.

Keywords: Concrete, sulfate attack, compressive strength, ultrasonic pulse velocity, gypsum, ettringite.

CÁC TRẠNG THÁI ĐƠN RỜI TRONG BỘ GHÉP PHI TUYẾN KIỂU KERR ĐƯỢC BƠM TRÊN HAI MODE

Nguyễn Thị Hồng¹

TÓM TẮT

Bài báo này, chúng tôi nghiên cứu bộ ghép phi tuyến kiểu Kerr bao gồm hai dao động tử phi tuyến được liên kết bằng kiểu tương tác tuyến tính và chịu tác động của trường điện từ bên ngoài được giả thiết dưới dạng các xung liên tục trên cả hai mode. Chúng tôi sẽ chỉ ra rằng hệ có thể được xem như kéo lượng tử phi tuyến và đóng vai trò như một mô hình hai qubit. Bằng cách sử dụng các công thức toán tử biến đổi, chúng tôi tiến hành mô hình hóa hệ lượng tử, tìm ra biểu thức giải tích của biên độ xác suất của các trạng thái phụ thuộc vào thời gian và từ đó tạo ra các trạng thái đơn rời cực đại với hiệu quả cao.

Từ khóa: Trạng thái đơn rời, độ đơn rời lượng tử, entropy von Neumann, concurrence, công lượng tử.

1. ĐẶT VẤN ĐỀ

Do nhu cầu tính toán ngày càng tăng, máy tính được vi tính hóa liên tục kèm theo đó là nhu cầu cải tiến thiết bị điện tử ngày càng nhỏ hơn nữa. Việc thực hiện cả hai nhu cầu trên là thách thức lớn đối với các nhà khoa học. Trong khoảng đầu những năm tám mươi của thế kỷ trước, để tìm lối thoát khỏi tình huống này, nhà bác học nổi tiếng Richard Feynman đã đưa ra ý tưởng tính toán chính ngay trên hệ vật lý [2]. Sau đó, tính toán lượng tử đã phát triển như vũ bão, hiện đang là đề tài nóng trong vật lý lý thuyết. Thông tin lượng tử dùng đơn vị nhỏ nhất là qubit (bit lượng tử), một hệ hai trạng thái bất kỳ để liên hệ với tin học cổ điển, người ta thường ký hiệu chúng là $|0\rangle$ và $|1\rangle$. Trong khuôn khổ lý thuyết lượng tử, nó có thể là tổ hợp tuyến tính của hai trạng thái $|0\rangle$ và $|1\rangle$. Theo đó thì qubit là một véc tơ trong không gian Hilbert hai chiều được biểu diễn dưới dạng [1]:

$$|\psi\rangle = a|0\rangle + b|1\rangle \quad (1)$$

Trong đó a và b là các số phức thỏa mãn điều kiện chuẩn hóa $|a|^2 + |b|^2 = 1$.

Biểu hiện của qubit khi được đo là chỉ thu được các kết quả $|0\rangle$ hoặc $|1\rangle$. Phép đo làm thay đổi trạng thái của qubit, làm tan vỡ trạng thái tổ hợp của $|0\rangle$ và $|1\rangle$. Khi không thực hiện một phép đo nào lên trạng thái lượng tử, rõ ràng nó giữ nguyên tất cả các biến liên tục mô tả hệ như a và b . Nhưng nếu không đo thì làm sao có thể xử lý được thông tin? Khái

¹ Giảng viên khoa Khoa học Tự nhiên, Trường Đại học Hồng Đức

niệm trạng thái đan rối được đưa ra giải quyết cho câu hỏi này, đó là trạng thái không thể phân ra được tích tenxơ của hai trạng thái mô tả các hệ con thành phần. Nếu trạng thái của hệ là đan rối thì khi đọc qubit riêng biệt thứ nhất được hai kết quả với cùng xác suất thì nếu ta đo qubit thứ hai cũng luôn thu được kết quả như qubit thứ nhất (thậm chí ở khoảng cách rất xa). Einstein đã gọi đây là một *tác động ma quái ở khoảng cách*.

Trạng thái đan rối của hai hệ con được định nghĩa là trạng thái được mô tả bằng một véctơ trong không gian Hilbert của hệ phức hợp mà không phải là tích của các véctơ mô tả các hệ con.

$$|\psi\rangle \neq |\psi_A\rangle \otimes |\psi_B\rangle \quad (2)$$

Toán tử ma trận mật độ của chúng không được biểu diễn dưới dạng:

$$\rho = \sum_i p_i \rho_i^A \rho_i^B \quad (3)$$

Ma trận mật độ là đại lượng đo mật độ trạng thái nên không có thứ nguyên.

Một lớp các trạng thái đan rối này được gọi là các trạng thái Bell. Tính chất đan rối của hệ lượng tử tiến tới thực hiện một máy tính lượng tử trong tương lai với những khả năng tính toán mà không một máy tính hiện thời nào thực hiện được [3,4]. Trong bài báo này, chúng tôi nghiên cứu sử dụng kéo lượng tử để cắt các không gian Hilbert vô hạn chiều tạo ra các trạng thái đan rối giữa hai qubit có độ đan rối cao nhất - Trạng thái Bell.

Hình thức luận kéo lượng tử và mô hình kéo lượng tử tuyến tính.

Chúng ta biết rằng không gian Hilbert là một không gian mà không bị giới hạn về số chiều, đó là một không gian có tích vô hướng. Tuy nhiên, gần đây các trạng thái liên kết hữu hạn chiều đã được xem xét ở các khía cạnh khác nhau trong một số công trình. Có nhiều các trạng thái lượng tử hữu hạn chiều như trạng thái n-photon, các trạng thái bị ép hữu hạn chiều, các trạng thái Bell... Các trạng thái này được gọi là các trạng thái bị cắt [7,8,10]. Chúng thường được xét trong trạng thái đan rối lượng tử. Ví dụ trạng thái Bell là một trạng thái như vậy [13]. Kéo lượng tử tuyến tính chính là cơ cấu sử dụng các phần tử tuyến tính cắt các không gian vô hạn chiều thành không gian hữu hạn chiều. Từ đó ta tìm ra các hệ liên quan trong tin học lượng tử.

Đề án lý thuyết đầu tiên về khả năng cắt ngắn các trạng thái liên kết quang được đề xuất bởi Pegg, Philips, và Barnett [5,12,14].

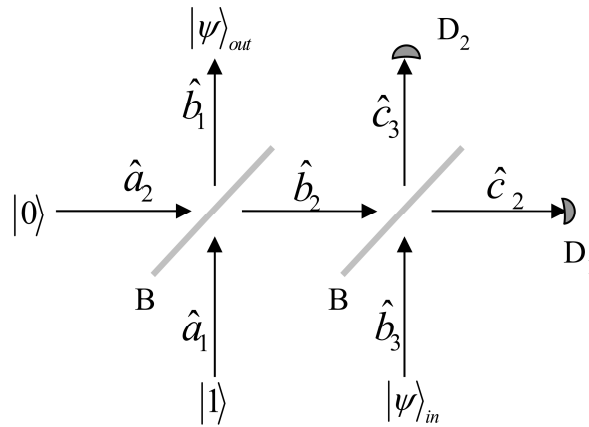
Các trạng thái kết hợp định nghĩa không gian hai chiều:

$$|\alpha\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} a_n |n\rangle = \exp\left(-\frac{|\alpha|^2}{2}\right) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle \quad (4)$$

đã được cắt để có một dạng đơn giản hơn mà ở đó chỉ có sự chồng chập của hai trạng thái số:

$$|\psi\rangle_{cut} = \gamma_0 |0\rangle + \gamma_1 |1\rangle,$$

Trong đó γ_0, γ_1 là các biên độ xác suất



Hình 1. Đồ thị biểu diễn thiết bị kéo lượng tử tuyến tính với hai chùm tia BS1 và BS2 và các bộ dò photon D1 và D2

Thiết bị bao gồm hai bộ tách chùm tia đối xứng (BS1 và BS2), mỗi bộ tách chùm phản xạ và truyền tới môi trường với xác suất 0,5. Nếu giả sử tại bộ tách chùm thứ nhất BS1, một trong các trường tới (biểu diễn bởi \hat{b}_1) ở trạng thái một photon còn trường tới kia (biểu diễn bởi \hat{b}_2) ở trạng thái chân không thì bộ tách chùm tia sẽ tạo ra một trạng thái đan rối. Chế độ đầu ra sau đó được đưa vào bộ tách chùm tia thứ hai tạo thành một trạng thái liên kết, trạng thái này sẽ được cắt để điều chế sự chồng chập chân không và trạng thái một photon theo ý muốn:

$$|\psi_{\text{desired}}\rangle_{b_1} = \frac{1}{\sqrt{1+|\alpha|^2}} (|0\rangle_{b_1} + \alpha|1\rangle_{b_1}) \quad (5)$$

Độ đan rối của trạng thái cắt ngắn được tính thông qua độ tụ hợp (concurrence) Concurrence của trạng thái đang xét được xác định theo [13]:

$$C(|\psi\rangle_{AB}) = |{}_{AB}\langle\tilde{\psi}|\psi\rangle_{AB}| = 2|c_{00}c_{11} - c_{01}c_{10}| \quad (6)$$

Cũng theo [13] ta xác định độ đan rối $E(|\psi\rangle_{AB})$ của $|\psi\rangle_{AB}$ theo công thức:

$$E(|\psi\rangle_{AB}) = -x \log_2 x - (1-x) \log_2 (1-x) \quad (7)$$

với $x = \frac{1 + \sqrt{1 - C^2}}{2}$.

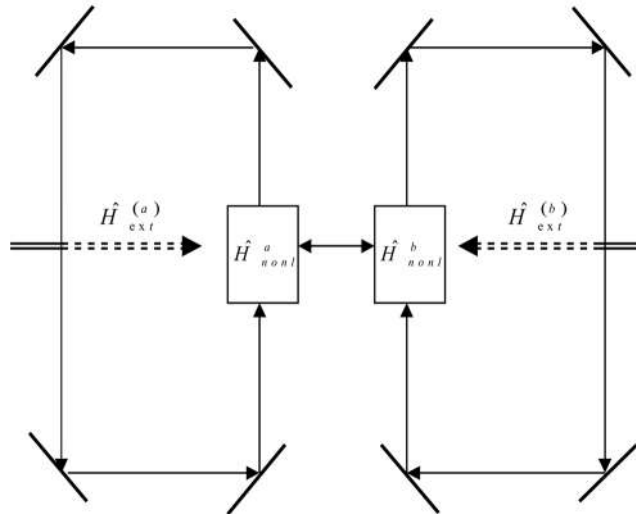
Trong đó Concurrence có thứ nguyên là ebit, độ đan rối được đo bằng entropy.

2. KÉO LƯỢNG TỬ PHI TUYẾN VÀ BỘ GHÉP PHI TUYẾN KIỂU KERR

Kéo lượng tử phi tuyến là thiết bị quang học sử dụng các yếu tố quang phi tuyến mà kết quả tác động của nó lên các trạng thái quang cũng tương tự như mô tả đối với trường hợp kéo lượng tử tuyến tính. Trong phần này, chúng tôi sẽ mô tả thiết bị kéo lượng tử phi

tuyến sử dụng bộ ghép hai dao động phi tuyến với tính chất phi tuyến Kerr χ_a, χ_b có tính đến cả tương tác với trường ngoài. Bộ ghép phi tuyến kiểu Kerr thể hiện sự tự khắc phục, tự điều chế những thay đổi của chính nó và các hiệu ứng tự chuyển đổi. Trong trạng thái lượng tử, chúng cũng tạo ra ánh sáng nén, hay các trạng thái đan rối [6].

Bộ nối phi tuyến kiểu Kerr được đưa ra bao gồm hai dao động tử điều hòa phi tuyến kiểu Kerr a và b tương tác với nhau bằng kiểu tương tác tuyến tính, các dao động tử có thể được tác động bằng trường điện từ bên ngoài được giả thiết dưới dạng xung liên tục mô tả trên hình 2. Cụ thể, chúng tôi sẽ giới thiệu bộ nối phi tuyến kiểu Kerr bao gồm hai dao động tử điều hòa phi tuyến kiểu Kerr a và b được liên kết một cách tuyến tính với nhau, các dao động tử được tác động bằng trường điện từ bên ngoài được giả thiết dưới dạng xung liên tục [11].



Hình 2. Mô hình bộ ghép phi tuyến kiểu Kerr, tương tác với nhau và chịu sự kích thích của trường ngoài ở cả hai mode dưới dạng xung liên tục

Hamiltonian mô tả hệ có dạng:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1 \quad (8)$$

trong đó:

$$\hat{H}_0 = \omega_a \hat{a}^\dagger \hat{a} + \omega_b \hat{b}^\dagger \hat{b} \quad (9)$$

$$\hat{H}_1 = \hat{H}_{nonl}^{(a)} + \hat{H}_{nonl}^{(b)} + \hat{H}_{int} + \hat{H}_{ext}^{(a)} + \hat{H}_{ext}^{(b)} \quad (10)$$

$$\hat{H}_{nonl}^{(a)} + \hat{H}_{nonl}^{(b)} = \frac{\chi_a}{2} (\hat{a}^\dagger)^2 \hat{a}^2 + \frac{\chi_b}{2} (\hat{b}^\dagger)^2 \hat{b}^2 \quad (11)$$

$$\hat{H}_{int} = \varepsilon \hat{a}^\dagger \hat{b} + \varepsilon^* \hat{a} \hat{b}^\dagger \quad (12)$$

$$\hat{H}_{ext}^{(a)} = \alpha \hat{a}^\dagger + \alpha^* \hat{a}; \quad \hat{H}_{ext}^{(b)} = \beta \hat{b}^\dagger + \beta^* \hat{b} \quad (13)$$

$\hat{a}, \hat{b}, \hat{a}^+, \hat{b}^+$ là các toán tử hủy và sinh boson tương ứng với hai mode a và b của tần số ω_a, ω_b ; \hat{H}_{int} mô tả tương tác tuyến tính giữa các dao động tử, đặc trưng bằng tham số ε mô tả độ lớn của tương tác giữa các mode, $\hat{H}_{\text{ext}}^{(a,b)}$ mô tả tác động của xung bơm bên ngoài lên các dao động tử điều hòa a và b, các xung bơm này là các xung bơm liên tục. χ_a, χ_b là độ cảm mô tả tính chất phi tuyến trong Hamiltonian của các dao động tử. Các tham số α, β đặc trưng cho độ mạnh của tương tác với trường ngoài. Tiến triển theo thời gian của hệ có thể được mô tả bởi phương trình Schrodinger:

$$i \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = \hat{H} |\psi(t)\rangle \quad (14)$$

Bỏ qua quá trình tắt dần (damping) và do đó tiến triển của hệ có thể được mô tả bởi một hàm sóng phụ thuộc thời gian. Hàm sóng này có thể được biểu diễn thông qua tổ hợp tuyến tính trong cơ sở của các trạng thái Fock như sau:

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{m,n=0}^{\infty} c_{mn}(t) |m\rangle_a |n\rangle_b \quad (15)$$

Với $c_{mn}(t)$ là biên độ xác suất tương ứng với trạng thái m và n photon trên dao động tử a và b. Sử dụng các tính chất của toán tử hủy hạt và toán tử sinh hạt và kết hợp các biểu thức từ (11) đến (13) thay vào phương trình (14) ta thu được:

$$\begin{aligned} i \frac{d}{dt} c_{mn} = & \frac{1}{2} [\chi_a m(m-1) + \chi_b n(n-1)] c_{mn} + \\ & + \varepsilon c_{m-1,n+1} \sqrt{m(n+1)} + \varepsilon^* c_{m+1,n-1} \sqrt{n(m+1)} + \\ & + \alpha c_{m-1,n} \sqrt{m} + \alpha^* c_{m+1,n} \sqrt{m+1} + \beta c_{m,n-1} \sqrt{n} + \beta^* c_{m,n+1} \sqrt{n+1} \end{aligned} \quad (16)$$

Trong thực tế phương trình (16) bao gồm vô số phương trình, việc giải hệ phương trình này gặp rất nhiều khó khăn. Tuy nhiên, giả sử rằng tất cả các tương tác được xem xét ở đây là yếu $\{\alpha, \varepsilon\} \ll \{\chi_a, \chi_b\}$, hệ lượng tử có thể được xem xét như kéo lượng tử phi tuyến. Và theo đó, tiến triển theo thời gian của hệ sẽ được giới hạn trong bốn trạng thái cộng hưởng $|0\rangle_a |0\rangle_b, |1\rangle_a |0\rangle_b, |0\rangle_a |1\rangle_b, |1\rangle_a |1\rangle_b$. Kết quả thu được là hệ phương trình (16) sẽ được giới hạn xuống hệ bốn phương trình cho biên độ xác suất tương ứng với $\{m, n\} = \{0, 1\}$. Nghĩa là các biên độ xác suất $c_{m,n}(t) = 0$ khi $\{m, n\} \neq \{0, 1\}$, từ đó ta có thể viết lại hàm sóng dưới dạng “cắt” như sau:

$$|\psi(t)\rangle_{\text{cut}} = c_{00} |0\rangle_a |0\rangle_b + c_{01} |0\rangle_a |1\rangle_b + c_{10} |1\rangle_a |0\rangle_b + c_{11} |1\rangle_a |1\rangle_b \quad (17)$$

Với giả thuyết tại thời điểm ban đầu, hệ trong trạng thái chân không ($|\psi(0)\rangle = |0\rangle|0\rangle$). Từ đó ta thu được hệ bốn phương trình đơn giản sau:

$$\begin{aligned} i \frac{dc_{00}}{dt} &= \alpha^* c_{10} + \beta^* c_{01}, & i \frac{dc_{01}}{dt} &= \varepsilon^* c_{10} + \alpha^* c_{11} + \beta c_{00}, \\ i \frac{dc_{10}}{dt} &= \varepsilon c_{01} + \alpha c_{00} + \beta^* c_{11}, & i \frac{dc_{11}}{dt} &= \alpha c_{01} + \beta c_{10}. \end{aligned} \quad (18)$$

Giải hệ phương trình trên trong trường hợp $\alpha = \varepsilon$ với các điều kiện ban đầu: $c_{00}(0) = c_{11}(0) = c_{10}(0) = 0, c_{01}(0) = 1$ ta thu được nghiệm tương ứng với một số trường hợp cụ thể:

Trường hợp: $\alpha = \beta$

$$c_{00}(t) = c_{11}(t) = -2i \frac{\alpha}{\lambda} \sin\left(\frac{\lambda t}{2}\right) e^{-\frac{i\varepsilon t}{2}} \quad (19)$$

$$c_{01}(t) = \frac{1}{2} e^{i\varepsilon t} + \frac{1}{2} \left[\cos\left(\frac{\lambda t}{2}\right) - i \frac{\varepsilon}{\lambda} \sin\left(\frac{\lambda t}{2}\right) \right] e^{-\frac{i\varepsilon t}{2}} \quad (20)$$

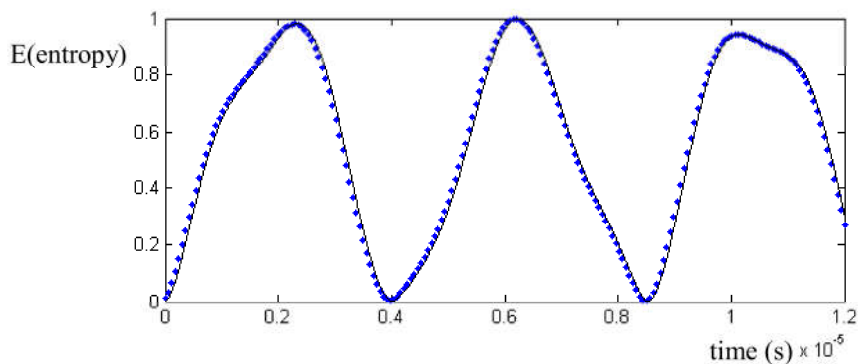
$$c_{10}(t) = -\frac{1}{2} e^{i\varepsilon t} + \frac{1}{2} \left[\cos\left(\frac{\lambda t}{2}\right) - i \frac{\varepsilon}{\lambda} \sin\left(\frac{\lambda t}{2}\right) \right] e^{-\frac{i\varepsilon t}{2}} \quad (21)$$

trong đó: $\lambda = \sqrt{16\alpha^2 + \varepsilon^2}$.

Tính Concurrent theo công thức $C = 2|c_{00}c_{11} - c_{01}c_{10}|$ và tính độ đan rối theo (7):

$$E(t) = -\frac{1 + \sqrt{1 - C^2}}{2} \log_2 \frac{1 + \sqrt{1 - C^2}}{2} - \left(1 - \frac{1 + \sqrt{1 - C^2}}{2} \right) \log_2 \left(1 - \frac{1 + \sqrt{1 - C^2}}{2} \right) \quad (22)$$

Kết quả thu được thể hiện trên đồ thị tiến triển theo thời gian của độ đan rối các trạng thái được tạo ra (các dấu chấm) và các trạng thái được cắt ngắn theo mong muốn $|\psi(t)\rangle_{cut}$ (đường liền nét) bởi bộ ghép



Hình 3. Tiến triển độ đan rối của các trạng thái $|\psi(t)\rangle$ được tạo ra (các dấu chấm) và các trạng thái được cắt ngắn theo mong muốn $|\psi(t)\rangle_{cut}$ (đường liền nét) bởi bộ ghép

$$\text{bơm 2 mode } \beta = \alpha = \frac{10^8}{200}; \quad \varepsilon = \alpha$$

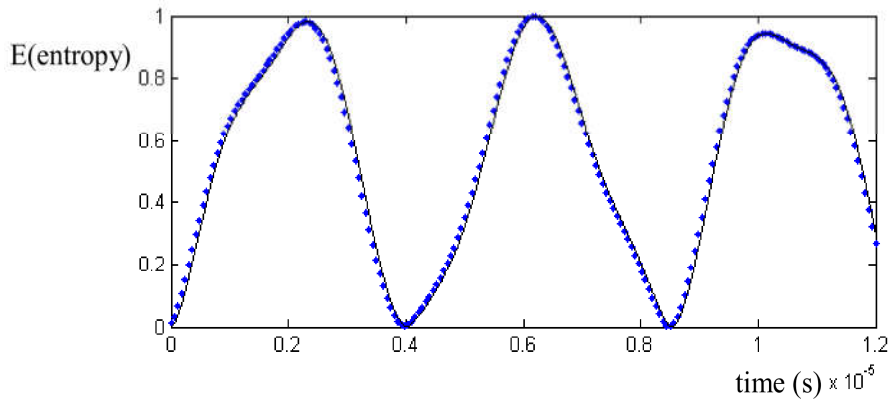
Trường hợp: $\beta = -\alpha$

$$c_{00}(t) = -c_{11}(t) = 2i \frac{\alpha}{\lambda} \sin\left(\frac{\lambda t}{2}\right) e^{\frac{i\epsilon t}{2}} \quad (23)$$

$$c_{01}(t) = \frac{1}{2} e^{-i\epsilon t} + \frac{1}{2} \left[\cos\left(\frac{\lambda t}{2}\right) + i \frac{\epsilon}{\lambda} \sin\left(\frac{\lambda t}{2}\right) \right] e^{\frac{i\epsilon t}{2}} \quad (24)$$

$$c_{10}(t) = -\frac{1}{2} e^{-i\epsilon t} + \frac{1}{2} \left[\cos\left(\frac{\lambda t}{2}\right) - i \frac{\epsilon}{\lambda} \sin\left(\frac{\lambda t}{2}\right) \right] e^{\frac{i\epsilon t}{2}} \quad (25)$$

Kết quả thu được thể hiện trên đồ thị tiến triển theo thời gian của độ đan rối của các trạng thái được tạo ra (đường chấm) và các trạng thái được cắt ngắn theo mong muốn (đường liền nét) bởi bộ ghép bom 2 mode như sau:



Hình 4. Tiến triển độ đan rối của các trạng thái $|\psi(t)\rangle$ được tạo ra (đường chấm)

và các trạng thái được cắt ngắn theo mong muốn $|\psi(t)\rangle_{cut}$ (đường liền nét) bởi bộ ghép

$$\text{bom 2 mode } \beta = -\alpha = -\frac{10^8}{200}; \quad \epsilon = \alpha$$

Rõ ràng trong cả hai trường hợp trên hình 3 và hình 4 thì độ đan rối giải tích thu được rất phù hợp với kết quả tính số. Ta cũng nhận thấy đồ thị Tiến triển của độ đan rối của các trạng thái được tạo ra ở hai trường hợp trên hình 3 và hình 4 là như nhau. Điều này được giải thích đơn giản từ công thức tính concurrent và công thức tính độ đan rối (22) trong hai trường hợp này là như nhau. Độ đan rối của trạng thái thu được có thể xấp xỉ hoặc thậm chí bằng 1, tuy nhiên cũng có những thời điểm trạng thái đan rối của hệ hoàn toàn bị biến mất (độ đan rối bằng không) rồi lại được tái sinh. Để đánh giá chất lượng của trạng thái quang học được cắt ngắn, bây giờ ta sẽ xét đến độ sai lệch giữa trạng thái hai qubit lý tưởng $\hat{\rho}_{cut} = |\psi(t)\rangle_{cut} \langle \psi(t)|$ và trạng thái đầu ra thực tế $\hat{\rho}(t) = |\psi(t)\rangle \langle \psi(t)|$, trong đó, $|\psi(t)\rangle$ được tính toán số dạng [11,15]. $|\psi(t)\rangle = \exp(-i\hat{H}t)|01\rangle$ trong không gian Hilbert hai mode thực tế là vô hạn chiều. Trong phần tính toán số tôi sẽ đưa ra ở phụ lục, tôi chọn

số chiều là 20 trong mỗi không gian con. Độ chính xác của trạng thái cắt ngắn được tạo ra của phép cắt ngắn bằng kéo lượng tử ở trên được xác định bởi [11,15]:

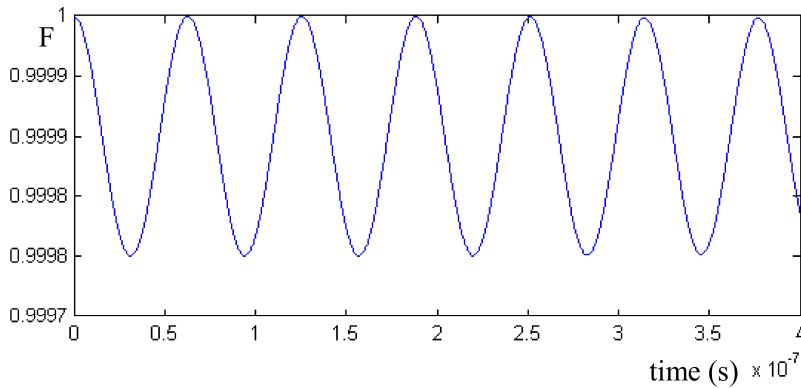
$$F(\hat{\rho}, \hat{\rho}_{cut}) = \left\{ \text{Tr} \left[\left(\sqrt{\hat{\rho}_{cut}} \hat{\rho} \sqrt{\hat{\rho}_{cut}} \right)^{1/2} \right] \right\}^2 \quad (26)$$

độ tin cậy được đo bằng ebit.

Trong phần này, tôi tập trung vào trường hợp các trạng thái thuần được cắt ngắn. Khi đó độ chính xác ở (26) được đơn giản hóa thành:

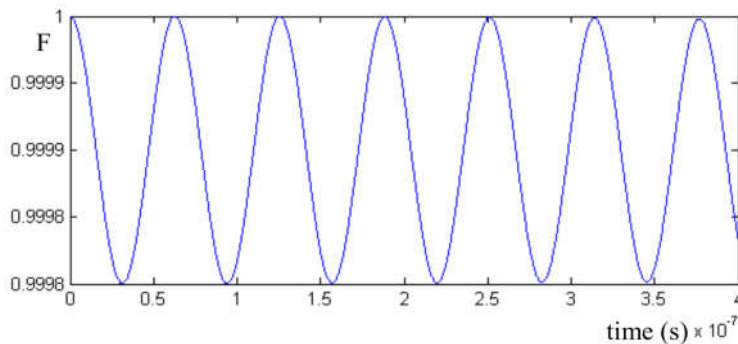
$$F = \left\| \langle \psi(t) | \psi(t) \rangle_{cut} \right\|^2 \quad (27)$$

Độ chính xác của việc cắt ngắn lý tưởng bằng 1. Kết quả thu được từ việc tính số độ chính xác của sự cắt ngắn trong các trường hợp được thể hiện rõ trong hình 5 và hình 6.



Hình 5. Độ chính xác giữa trạng thái thực được tạo ra $|\psi(t)\rangle$ và trạng thái cắt ngắn

lý tưởng $|\psi(t)\rangle_{cut}$ bởi bộ ghép bơm 2 mode $\beta = \alpha = \frac{10^8}{200}$; $\varepsilon = \frac{\alpha}{10}$



Hình 6. Độ chính xác giữa trạng thái thực được tạo ra $|\psi(t)\rangle$ và trạng thái cắt ngắn

lý tưởng $|\psi(t)\rangle_{cut}$ bởi bộ ghép bơm 2 mode $\beta = -\alpha = -\frac{10^8}{200}$; $\varepsilon = \frac{\alpha}{10}$

Kết quả thu được trên hình 5 và hình 6 cho thấy độ tin cậy của quá trình cắt trong trường hợp $\beta = \alpha$ đạt được là cao hơn so với trường hợp $\beta = -\alpha$. Theo định nghĩa của fidelity (độ chính xác hay độ tin cậy của phép “cắt”), fidelity sẽ bằng 1 cho trường hợp chúng ta có phép “cắt” hoàn hảo. Với việc lấy số chiều của mỗi không gian Hilbert con là $m=n=20$, kết quả tính toán số độ tin cậy của trạng thái $|\psi(t)\rangle_{cut}$ và trạng thái thực $|\psi(t)\rangle$ được chúng tôi tính toán và thể hiện trên hình 5 và 6, với một số giá trị khác nhau của tham số đầu vào. Ta nhận thấy độ chính xác của việc cắt ngắn luôn xấp xỉ 1 trong một thời gian ngắn. Các giá trị của độ chính xác chỉ lệch khỏi 1 cỡ 3.10^{-4} , thậm chí là 2.10^{-4} , điều này chỉ ra sự phù hợp trong phương pháp phân tích để chỉ ra một thiết bị kéo lượng tử dùng để cắt ngắn các trạng thái tạo ra được trạng thái hai qubit có độ đan rối cao nhất trong thời gian tiến triển tương đối ngắn. Vào năm 2006, nhóm tác giả Miranowicz A. and Leoński W. cũng đã công bố công trình tính toán độ đan rối của trạng thái được tạo ra cũng như độ tin cậy của phép cắt ngắn này với các tham số đầu vào khác nhau và cũng thu được các kết quả tương tự.

3. KẾT LUẬN

Bài báo giới thiệu tổng quan về trạng thái đan rối lượng tử, phân tích tính toán độ đan rối theo hai cách khác nhau. Chúng tôi cũng đưa ra các mô hình kéo lượng tử tuyến tính và kéo lượng tử phi tuyến và tập trung nghiên cứu mô hình kéo lượng tử phi tuyến có các mode tương tác tuyến tính được bơm 2 mode tạo ra không gian Hilbert hữu hạn chiều trong trường hợp không có mất mát và thu được những trạng thái có độ đan rối cao. Qua nghiên cứu, khảo sát chúng tôi đã thu được các trạng thái lượng tử hai qubit có độ đan rối xấp xỉ hoặc thậm chí bằng 1 từ việc sử dụng kéo lượng tử phi tuyến để cắt các trạng thái trong không gian Hilbert vô hạn chiều. Chất lượng của trạng thái tạo ra tương đối cao và được chúng tôi đánh giá qua đồ thị của độ chính xác giữa trạng thái thực được tạo ra và trạng thái lý tưởng theo mong muốn. Độ chính xác này xấp xỉ 1 và chỉ sai lệch cỡ 2.10^{-4} . Các kết quả tính toán được so sánh giữa phương pháp tính số và phương pháp giải tích đã xác nhận giá trị của phương pháp giải tích mà chúng tôi đưa ra. Điều có thể được áp dụng như là nguồn nguyên liệu của giao thức viễn tải lượng tử và máy tính lượng tử trong tương lai không xa.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

- [1] Nguyễn Văn Hóa, Nguyễn Mạnh An, Cao Long Vân (2014), *Ở ngưỡng cửa của cách mạng lượng tử trong tin học*, Tạp chí Khoa học Trường Đại học Hồng Đức, số 19.
- [2] Cao Long Vân, Tạ Phương Hạnh (2005), *Tin học lượng tử và máy tính lượng tử (I)*, Tạp chí ứng dụng toán học tập III, (số 1), trang 83-102.
- [3] Cao Long Vân (2005), *Tin học lượng tử và máy tính lượng tử (II)*, Tạp chí ứng dụng toán học, tập III, (số 2), trang 77-100.

- [4] Cao Long Vân (2006), *Tin học lượng tử và máy tính lượng tử (III): Các thuật toán lượng tử*, Tạp chí ứng dụng toán học, tập IV, (số 1), trang 73-90.
- [5] Babichev S. A., Ries J. and Lvovsky A. I. (2003), *Europhys. Lett.* 64 1.
- [6] Gree Jaeger (2009), Entanglement, information and the interpretation of quantum mechanics, The Frontiers Collection, 50-52.
- [7] Kuang L.M., Wang F.B. and Zhou Y.G. (1993), *Phys. Lett. A* 183, 1.
- [8] Kuang L.M., Wang F.B. and Zhou Y.G. (1994), *J. Mod.opt.* 41, 1607
- [9] Leonski W, Miranowicz A (2004), *Kerr nonlinear coupler and entanglement*, *J.Opt. B: Quantum Semiclass. Opt.* 6, pp 37-42.
- [10] Miranowicz A., Leonski W., and Imoto (2001), *Quantum-Optical State in Finite-Dimensional Hilbert Space*, *J. Mod.opt.* 155, 193.
- [11] Miranowicz A. and Leoński W. (2006), *Two-mode optical state truncation and generation of maximally entangled states in pumped nonlinear couplers*, *J.Phys. B: At. Mol.Opt. Phys.* 39.
- [12] Ozdemir S.K., Miranowicz A., Koasi M. and Imoto N (2001), *Phys.Rev. A* 64 063818.
- [13] Pegg D.T. and Barnett S.M. (1989), *Phase properties of the quantized single-mode electromagnetic field*, *Phys.Rev.A.* 39 1665.
- [14] Pegg D.T., Philips L.S. and Barnett S.M. (1998), *Optical State Truncation by Projection Synthesis*, *Phys. Rev. Lett.* 81 1604.
- [15] Wootters W.K. (1998), *Entanglement of Formation of an Arbitrary State of Two Qubits*, *Phys. Rev. Lett.* 26, 78.

ENTANGLEMENT STATES IN THE KERR - LIKE NONLINEAR COUPLER PUMPED ON TWO MODES

Nguyen Thi Hong

ABSTRACT

In this paper, we study the Kerr - like nonlinear coupler consisting of two nonlinear oscillators that are linearly coupled together and affected by an external electromagnetic field being assumed to be in the form of continuous pulses in both modes. We explore that it is possible to apply the formalism of nonlinear quantum scissors to the system so that the system can be considered as a two-qubit system. By using transformational formulas for operators, we conduct modeling the quantum system, find out the analytical expressions of the probability amplitudes of time-dependent states, and thus generating maximal entangled states with high efficiency.

Keywords: *Entanglement state, quantum entanglement, von Neumann entropy, concurrence, quantum gates.*

CẤU TRÚC CĂN CỦA IDEAN ĐƠN THỨC

Lê Quang Huy¹, Hoàng Thị Minh Nhân²

TÓM TẮT

Bài báo giới thiệu về cấu trúc căn của ideal đơn thức trong vành đa thức nhiều biến.

Từ khóa: *Vành, cấu trúc căn ideal, vành đa thức.*

1. ĐẶT VẤN ĐỀ

Cho R là vành giao hoán có đơn vị, trong tập hợp các ideal của R chúng ta có thể xây dựng được các ideal mới qua các phép toán như tổng, tích, lũy thừa và chia. Bên cạnh đó, như một sự mở rộng tự nhiên của các phép toán trên tập hợp số đối với các ideal I của R , khái niệm ideal căn của ideal được nhiều nhà toán học quan tâm nghiên cứu. Ideal $\sqrt{I} = \{x \in R \mid \exists n \in \mathbb{N} : x^n \in I\}$ được gọi là căn của I , khái niệm này được trình bày trong [1], [2], [3], [4] và [5]. Mục đích chính của bài báo này là mô tả cấu trúc của ideal \sqrt{I} trong trường hợp I là ideal đơn thức (ideal sinh bởi các đơn thức).

Trong nội dung nghiên cứu của bài báo được chi thành hai mục

Mục 2.1 giới thiệu một số kết quả cần thiết của tập lồi trong \mathbb{R}^n để áp dụng vào chứng minh kết quả chính của bài báo.

Mục 2.2 trình bày kết quả mô tả cấu trúc căn của ideal đơn thức (Định lý 3.5) và đưa ra một số ứng dụng của định lý này trong tính toán ideal căn một số lớp ideal đơn thức (Định lý 2.2.6).

2. NỘI DUNG

2.1. Tập lồi trong \mathbb{R}^n

Định nghĩa 2.1.1

i) Cho tập $X \subseteq \mathbb{R}^n$ và $X \neq \emptyset$ gọi là tập lồi nếu với mọi $x, y \in X$ thì $tx + (1-t)y \in X$ với mọi $0 \leq t \leq 1$.

ii) Một tổ hợp lồi của các phần tử $\{\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_m\} \subset X$ là biểu thức $\sum_{i=1}^m a_i \alpha_i$, trong

đó $a_i \in \mathbb{R}$, $0 \leq a_i \leq 1$ và $\sum_{i=1}^m a_i = 1$.

¹ Giảng viên khoa Khoa học Tự nhiên, Trường Đại học Hồng Đức

² Đại học Sư phạm Toán K17A, khoa Khoa học Tự nhiên, Trường Đại học Hồng Đức

Bổ đề 2.1.2

Giả sử tập $X \subseteq \mathbb{R}^n$ là tập lồi và $\{\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_m\} \subset X$.

Khi đó $\sum_{i=1}^m a_i \alpha_i \in X$, trong đó $a_i \in \mathbb{R}$, $0 \leq a_i \leq 1$ và $\sum_{i=1}^m a_i = 1$.

Chứng minh

Ta chứng minh quy nạp theo m :

Với $m = 1, 2$, suy ra từ định nghĩa tập lồi.

Giả sử mệnh đề đúng đến k , nghĩa là ta có $\sum_{i=1}^k a_i \alpha_i \in X$, trong đó $a_i \in \mathbb{R}$ và $\sum_{i=1}^k a_i = 1$.

Ta cần chứng minh mệnh đề cũng đúng đến $k + 1$, tức là cần chứng minh.

$\sum_{i=1}^{k+1} a_i \alpha_i \in X$, trong đó $a_i \in \mathbb{R}$ và $\sum_{i=1}^{k+1} a_i = 1$. Ta có

$$\sum_{i=1}^{k+1} a_i \alpha_i = \sum_{i=1}^k a_i \alpha_i + a_{k+1} \alpha_{k+1} = \sum_{i=1}^k a_i \left(\frac{a_1}{\sum_{i=1}^k a_i} \alpha_1 + \dots + \frac{a_i}{\sum_{i=1}^k a_i} \alpha_k \right) + a_{k+1} \alpha_{k+1}$$

Lại có $\frac{a_1}{\sum_{i=1}^k a_i} \alpha_1 + \dots + \frac{a_i}{\sum_{i=1}^k a_i} \alpha_k = 1$

nên theo giả thiết quy nạp ta có

$$x = \frac{a_1}{\sum_{i=1}^k a_i} \alpha_1 + \dots + \frac{a_i}{\sum_{i=1}^k a_i} \alpha_k \in X$$

Do đó, $\sum_{i=1}^{k+1} a_i \alpha_i = \left(\sum_{i=1}^k a_i \right) x + a_{k+1} \alpha_{k+1}$. Vì $x, \alpha_{k+1} \in X$, $\sum_{i=1}^k a_i + a_{k+1} = 1$, nên theo Định

nghĩa 2.1 ta có $\frac{a_1}{\sum_{i=1}^k a_i} \alpha_1 + \dots + \frac{a_i}{\sum_{i=1}^k a_i} \alpha_k \in X$.

Vậy ta có điều phải chứng minh.

Định nghĩa và Bổ đề 2.1.3

Cho Y là 1 tập con hữu hạn của \mathbb{R}^n . Kí hiệu

$$Conv(Y) = \left\{ \sum_{i=1}^m a_i \alpha_i \mid \alpha_i \in Y, a_i \in \mathbb{R}, 0 \leq a_i \leq 1, \sum_{i=1}^m a_i = 1, m \geq 1 \right\}$$

Khi đó ta nói $Conv(Y)$ là một tập lồi và được gọi là bao lồi của Y .

Chứng minh

Với mọi $x, y \in Conv(Y)$, khi đó ta có thể viết dưới dạng:

$$x = \sum_{i=1}^m a_i \alpha_i, \alpha_i \in Y, a_i \in \mathbb{R}, 0 \leq a_i \leq 1, \sum_{i=1}^m a_i = 1, m \geq 1,$$

$$y = \sum_{j=1}^u b_j \beta_j, \beta_j \in Y, b_j \in \mathbb{R}, 0 \leq b_j \leq 1, \sum_{j=1}^u b_j = 1, u \geq 1.$$

Ta có: $tx + (1-t)y = \sum_{i=1}^m ta_i \alpha_i + \sum_{j=1}^u (1-t)b_j \beta_j.$

Mặt khác: $\sum_{i=1}^m ta_i + \sum_{j=1}^u (1-t)b_j = t \sum_{i=1}^m a_i + (1-t) \sum_{j=1}^u b_j = t + 1 - t = 1.$

Suy ra $tx + (1-t)y \in Conv(Y).$

Vậy $Conv(Y)$ là một tập lồi.

Nếu $Y = \{\alpha_1, \dots, \alpha_m\}$, để cho đơn giản ta kí hiệu: $Conv(Y) = Conv(\alpha_1, \dots, \alpha_m).$

Mệnh đề 2.1.4

Cho $\alpha_1, \dots, \alpha_m$ là một dãy các phân tử đôi một phân biệt của \mathbb{R}^n . Khi đó, tồn tại $j \in \{1, 2, \dots, m\}$ sao cho $\alpha_j \notin Conv(\alpha_1, \dots, \alpha_{j-1}, \alpha_{j+1}, \dots, \alpha_m)$. Nghĩa là không tồn tại

$$\begin{cases} 0 \leq a_i \leq 1 \\ \forall i \neq j \end{cases}, \sum_{\substack{i=1 \\ i \neq j}}^m a_i = 1, \text{ sao cho ta có thể viết được } \alpha_j = \sum_{\substack{i=1 \\ i \neq j}}^m a_i \alpha_i.$$

Chứng minh

Ta chứng minh quy nạp theo m : Với $m = 1, 2$, hiển nhiên đúng.

Giả sử đúng đến $m-1$, nghĩa là với mọi họ có $m-1$ phân tử $\{\beta_1, \dots, \beta_{m-1}\}$, luôn tồn tại t sao cho $\beta_t \notin Conv(\beta_1, \dots, \beta_{t-1}, \beta_{t+1}, \dots, \beta_{m-1})$. Ta cần chứng minh đúng đến m . Thật vậy giả sử $\alpha_j \in Conv(\alpha_1, \dots, \alpha_{t-1}, \alpha_{t+1}, \dots, \alpha_{m-1}) \forall j \in \overline{1, m}$, nghĩa là tồn tại $\exists a_{jk}, 0 \leq a_{jk} \leq 1, \forall j = \overline{1, m}, \forall k = \overline{1, m}, k \neq j$ sao cho:

$$\begin{cases} \alpha_1 = a_{1_2} \alpha_2 + a_{1_3} \alpha_3 + \dots + a_{1_m} \alpha_m & (1) \\ \alpha_2 = a_{2_1} \alpha_1 + a_{2_3} \alpha_3 + \dots + a_{2_m} \alpha_m & (2) \\ \vdots \\ \alpha_j = a_{j_1} \alpha_1 + \dots + a_{j_{j-1}} \alpha_{j-1} + a_{j_{j+1}} \alpha_{j+1} + \dots + a_{j_m} \alpha_m & (j) \\ \vdots \\ \alpha_m = a_{m_1} \alpha_1 + a_{m_2} \alpha_2 + \dots + a_{m_m} \alpha_m & (m) \end{cases}$$

Rút α_{j-1} ở phương trình $(j-1)$ thay vào phương trình thứ (j) với $2 \leq j \leq m$ ta được:

$$\left\{ \begin{array}{l} \alpha_2 = \beta_{2_3} \alpha_3 + \dots + \beta_{2_m} \alpha_m \\ \vdots \\ \alpha_m = \beta_{m_1} \alpha_2 + \dots + \beta_{m_{m-1}} \alpha_{m-1} \end{array} \right. , \text{ trong đó } \left\{ \begin{array}{l} \sum_{k=2}^m \beta_{jk} = 1 \\ \forall 2 \leq j \leq m . \\ k \neq j \end{array} \right.$$

Do vậy: $\alpha_j \in \text{Conv}(\alpha_1, \dots, \alpha_{t-1}, \alpha_{t+1}, \dots, \alpha_{m-1})$.

Điều này mâu thuẫn với giả thiết quy nạp. Vậy mệnh đề được chứng minh.

2.2. Cấu trúc căn của idêan đơn thức

Trong mục này, luôn xem $R = K[x_1, x_2, \dots, x_n]$ là vành đa thức n biến x_1, x_2, \dots, x_n . Từ là biểu thức có dạng $\alpha x_1^{a_1} \dots x_n^{a_n}$, trong đó $\alpha \in K$ được gọi là hệ số của từ. Kí hiệu: $x = (x_1, \dots, x_n)$, $a = (a_1, \dots, a_n) \in \mathbb{N}^n$ và $x^a = x_1^{a_1} \dots x_n^{a_n}$. Đa thức n biến x_1, \dots, x_n trên vành R là một tổng hình thức của các từ $f(x) = \sum_{a \in \mathbb{N}^n} \alpha_a x^a$, trong đó chỉ có một số hữu hạn hệ số $\alpha_a \neq 0$. Từ $\alpha_a x^a$ với $\alpha_a \neq 0$ được gọi là từ của đa thức $f(x)$ và x^a là đơn thức của $f(x)$.

Mệnh đề 2.2.1 (Xem [1, Bổ đề 4.3])

Cho I là một idêan của R , khi đó các điều kiện sau tương đương

- i) I là idêan đơn thức.
- ii) Với mọi đa thức $f \in R$ thì $f \in I$ khi và chỉ khi các từ của $f \in I$.

Bổ đề 2.2.2

Cho đa thức $f = a_1 x^{\alpha_1} + a_2 x^{\alpha_2} + \dots + a_t x^{\alpha_t}$ (biến x_1, \dots, x_n). Khi đó tồn tại $i \in \{1, 2, \dots, t\}$ sao cho $\alpha_i \notin \text{Conv}(\alpha_1, \dots, \alpha_{i-1}, \alpha_{i+1}, \dots, \alpha_t)$.

Chứng minh

Ta có $\alpha_1, \dots, \alpha_t \in \mathbb{R}^n$ đôi một khác nhau, theo Mệnh đề 2.1.4 ta có điều phải chứng minh.

Mệnh đề 2.2.3

Nếu I là một idêan đơn thức thì \sqrt{I} cũng là một idêan đơn thức.

Chứng minh

Lấy f là một đa thức $f = \sum_{i=1}^t h_i x^{\alpha_i} \in \sqrt{I}$. Suy ra tồn tại $k \in \mathbb{N}$ sao cho $f^k \in I$.

Cần chứng minh $x^{\alpha_i} \in \sqrt{I}$ với mọi $\alpha_i, i = \overline{1, t}$.

Ta chứng minh quy nạp theo t : Với $t = 1$, mệnh đề hiển nhiên đúng.

Giả sử mệnh đề đúng với mọi đa thức có $t-1$ số hạng.

Ta cần chứng minh mệnh đề đúng với mọi đa thức có t số hạng. Thật vậy, không mất tính tổng quát giả sử trong khai triển $f^k, \exists k_1, k_2, \dots, k_t$ sao cho

$$x^{a_i k} = x^{a_1 k_1} \cdot x^{a_2 k_2} \dots x^{a_t k_t} \quad \forall i = \overline{1, t}, \text{ trong đó } k = k_1 + k_2 + \dots + k_t \quad (0 \leq k_i \leq k).$$

$$\text{Suy ra: } a_i k = a_1 k_1 + a_2 k_2 + \dots + a_{i-1} k_{i-1} + a_{i+1} k_{i+1} + \dots + a_t k_t$$

$$\Leftrightarrow a_i = a_1 \cdot \frac{k_1}{k-k_i} + \dots + a_{i-1} \cdot \frac{k_{i-1}}{k-k_i} + a_{i+1} \cdot \frac{k_{i+1}}{k-k_i} + a_t \cdot \frac{k_t}{k-k_i}.$$

$$\text{Mặt khác, ta có } \Leftrightarrow a_i = a_1 \cdot \frac{k_1}{k-k_i} + \dots + a_{i-1} \cdot \frac{k_{i-1}}{k-k_i} + a_{i+1} \cdot \frac{k_{i+1}}{k-k_i} + a_t \cdot \frac{k_t}{k-k_i}.$$

Theo Định nghĩa và Bổ đề 2.1.3, ta có $a_i \in \text{Conv}(a_1, a_2, \dots, a_t), i = \overline{1, t}$. Điều này mâu thuẫn với Bổ đề 2.2.2. Do đó, tồn tại $i \in \{1, \dots, t\}$ sao cho $a_i \notin \text{Conv}(a_1, \dots, a_{i-1}, a_{i+1}, \dots, a_t) \forall i = \overline{1, t}$. Suy ra $x^{ka_i} \in I$, do đó $x^{a_i} \in \sqrt{I}$. Khi đó đa thức $g = f - h_i x^{a_i} \in \sqrt{I}$, mà g có $k-1$ số hạng nên theo giả thiết quy nạp ta có tất cả các đơn thức còn lại của f đều thuộc \sqrt{I} . Nên theo Mệnh đề 2.2.3, \sqrt{I} là idêan đơn thức.

Ta có điều phải chứng minh.

Định nghĩa 2.2.4

Giả sử $x^\alpha = x^{\alpha_1} \dots x^{\alpha_n}$. Ký hiệu $\sqrt{x^\alpha} = x_1 \dots x_n$ là căn của đơn thức x^α .

Áp dụng các kết quả trên, ta nhận được kết quả của định lý sau:

Định lý 2.2.5 (Xem [3, Proposition 1.2.4])

Cho idêan đơn thức $I = (f_1, f_2, \dots, f_n)$.

Khi đó $\sqrt{I} = (\sqrt{f_1}, \sqrt{f_2}, \dots, \sqrt{f_n})$.

Áp dụng kết quả của Định lý 2.2.5 ta dễ dàng nhận được các kết quả sau:

Định lý 2.2.6

Cho $K[x_1, \dots, x_n]$ là vành đa thức n biến trên trường K . Giả sử $\{x_1, \dots, x_t\} \subseteq \{x_1, \dots, x_n\}$.

Khi đó, ta có

$$\text{i) } \sqrt{(x_1^{\alpha_1}, \dots, x_t^{\alpha_t})} = (x_1, \dots, x_t).$$

$$\text{ii) } \sqrt{(x_1^{\alpha_1}, \dots, x_t^{\alpha_t}, u_1, \dots, u_t)} = (x_1, \dots, x_t), \text{ trong đó } u_1, \dots, u_t \text{ là các đơn thức}$$

chỉ chứa các biến thuộc tập $\{x_1, \dots, x_t\}$ và $t \in \mathbb{N} \setminus \{0\}$.

iii) $\sqrt{(x_1^{\alpha_1}, \dots, x_n^{\alpha_n}, u_1, \dots, u_t)} = (x_1, \dots, x_n)$, trong đó $t \in \mathbb{N} \setminus \{0\}$ và u_1, \dots, u_t là các đơn thức tùy ý của $K[x_1, \dots, x_n]$.

Chứng minh

i) Ta có $\sqrt{x_{i_j}^{\alpha_j}} = x_{i_j}$, $\forall j = \overline{1, k}$. Áp dụng Định lý 3.5 ta được điều phải chứng minh.

ii) Áp dụng Định lý 2.2.5 ta có

$$\sqrt{(x_{i_1}^{\alpha_1}, \dots, x_{i_k}^{\alpha_k}, u_1, \dots, u_t)} = (x_{i_1}, \dots, x_{i_k}, \sqrt{u_1}, \dots, \sqrt{u_t})$$

Vì u_1, \dots, u_t chỉ chứa các biến thuộc tập $\{x_{i_1}, \dots, x_{i_k}\}$, nên $\forall u_i, i = \overline{1, t}$, luôn tồn tại i_j mà $j \in \{1, \dots, k\}$, sao cho $u_i \in \mathcal{X}_{i_j}$ hay $(x_{i_1}, \dots, x_{i_k}, \sqrt{u_1}, \dots, \sqrt{u_t}) = (x_1, \dots, x_n)$.

iii) Áp dụng ii) cho $k = n$, ta nhận được kết quả của iii).

Ví dụ 2.2.7

Giả sử $K[x_1, x_2, x_3, x_4, x_5, x_6, x_7]$ là đa thức 7 biến trên trường K . Khi đó ta có

i) Nếu $I = (x_1, x_2, x_3^{11}, x_3^3)$ thì $\sqrt{I} = (x_1, x_2, x_3, x_4)$.

ii) Nếu $I = (x_1^{13}, x_2^{25}, x_3^5, x_4^3, x_5^8, x_1x_3^2x_4x_5^4)$ thì $\sqrt{I} = (x_1, x_2, x_3, x_4, x_5)$.

iii) Nếu $I = (x_1^{12}, x_2^7, x_3^3, x_4^9, x_5^8, x_1x_3^2x_4x_5^4, x_2x_3x_4^2x_5^7)$ thì $\sqrt{I} = (x_1, x_2, x_3, x_4, x_5)$.

iv) Nếu $I = (x_1^{33}, x_2^{71}, x_3, x_4^{13}, x_5^8, x_1x_4x_5^4, x_2x_4^2)$ thì $\sqrt{I} = (x_1, x_2, x_3, x_4, x_5)$.

v) Nếu $I = (x_1^3, x_2^5, x_3^{44}, x_4^3, x_5x_6^{11}, x_1^8x_2^9, x_1x_3^5x_4^2, x_3^7x_4^2, x_1x_3^5x_6)$

thì $\sqrt{I} = (x_1, x_2, x_3, x_4, x_5, x_6)$.

vi) Nếu $I = (x_1^5, x_2^7, x_3, x_4^7, x_5^{30}, x_6^8, x_7^5, x_1^3x_2^5x_5, x_4x_5^8, x_2x_4^2x_5^8x_7^2)$

thì $\sqrt{I} = (x_1, x_2, x_3, x_4, x_5, x_6, x_7)$.

3. KẾT LUẬN

Cho $R = K[x_1, x_2, \dots, x_n]$ là vành đa thức n biến.

Khi đó với mọi idêan đơn thức $I = (f_1, f_2, \dots, f_n)$, idêan căn được xác định bởi công thức $\sqrt{I} = (\sqrt{f_1}, \sqrt{f_2}, \dots, \sqrt{f_n})$.

Đối với một số lớp idêan đặc biệt, từ công thức trên ta có thể tính toán cụ thể được idêan căn như sau:

Giả sử

$$\{x_{i_1}, \dots, x_{i_k}\} \subseteq \{x_1, \dots, x_n\}.$$

Khi đó, ta có

$$i) \sqrt{(x_{i_1}^{\alpha_1}, \dots, x_{i_k}^{\alpha_k})} = (x_{i_1}, \dots, x_{i_k}).$$

ii) $\sqrt{(x_{i_1}^{\alpha_1}, \dots, x_{i_k}^{\alpha_k}, u_1, \dots, u_t)}$ = $(x_{i_1}, \dots, x_{i_k})$, trong đó u_1, \dots, u_t là các đơn thức chỉ chứa các biến thuộc tập $\{x_{i_1}, \dots, x_{i_k}\}$ và $t \in \mathbb{N} \setminus \{0\}$.

iii) $\sqrt{(x_1^{\alpha_1}, \dots, x_n^{\alpha_n}, u_1, \dots, u_t)}$ = (x_1, \dots, x_n) , trong đó $t \in \mathbb{N} \setminus \{0\}$ và u_1, \dots, u_t là các đơn thức tùy ý của $K[x_1, \dots, x_n]$.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

- [1] Lê Tuấn Hoa (2013), *Đại số máy tính*, Nxb. Đại học Quốc gia Hà Nội, Hà Nội.
- [2] M. F. Atiyah and I. G. Macdonald (1969), *Introduction to Commutative Algebra*, Addison-Wesley.
- [3] J. Herzog and T. Hibi (2011), *Monomial ideals*, Springer Press.
- [4] H. Matsumura (1986), *Commutative Ring Theory*, Cambridge University Press.
- [5] R.Y. Sharp (1990), *Steps in Commutative Algebra*, Cambridge University Press.

THE RADICAL OF MONOMIAL IDEAL STRUCTURE

Le Quang Huy, Hoang Thi Minh Nhan

ABSTRACT

This paper gives the radical of monomial ideal structure of polynomial rings in the indeterminates.

Keywords: Ring, radical of monomial ideal, polynomial ring.

NGHIÊN CỨU THỜI GIAN SỐNG VẬN CHUYỂN VÀ THỜI GIAN SỐNG LƯỢNG TỬ TRONG MÔ HÌNH GIẾNG LƯỢNG TỬ PHA TẠP MỘT PHÍA

Ngô Thị Lan¹, Nguyễn Thị Thảo², Nguyễn Văn Cần³

TÓM TẮT

Chúng tôi đưa ra một lý thuyết về ảnh hưởng của pha tạp điều biến bất đối xứng lên hiện tượng vận chuyển của hạt tải trong giếng lượng tử vuông góc. Bằng việc sử dụng phương pháp biến phân chúng tôi đã đưa ra biểu thức giải tích của hạt tải trong giếng lượng tử pha tạp một phía. Chúng tôi đã tính thời gian sống vận chuyển và thời gian sống lượng tử cho các cơ chế tán xạ khác nhau RI, SR, và DP. Lý thuyết của chúng tôi có thể giải thích một số kết quả tính toán gần đây về tính chất vận chuyển của hạt tải, đặc biệt là tỉ số thời gian sống vận chuyển và lượng tử.

Từ khóa: Thời gian sống vận chuyển, thời gian sống lượng tử, giếng lượng tử, pha tạp một phía.

1. ĐẶT VẤN ĐỀ

Thời gian sống vận chuyển và lượng tử là hai đại lượng quan trọng đối với một hệ lượng tử. Trong nghiên cứu tính chất vận chuyển của các hệ thấp chiều người ta nhận thấy rằng có sự khác biệt rõ rệt giữa hai thời gian đặc trưng nói trên. Thời gian sống vận chuyển τ_c là thời gian chuyển động tự do trung bình của hạt tải chuyển động theo phương riêng biệt (ví dụ của trường ngoài) khi tồn tại các tán xạ. Thời gian sống vận chuyển được rút ra khi đo độ linh động Hall với từ trường yếu. Thời gian sống khác là thời gian sống lượng tử τ_q là thời gian trung bình mà hạt tồn tại trên một trạng thái lượng tử khi tồn tại các tán xạ. Thời gian sống lượng tử được xác định từ hàm bao của dao động Shubnikov-de Haas.

Thời gian sống vận chuyển và thời gian sống lượng tử là hai tham số quan trọng thường được sử dụng để đặc trưng cho hiệu suất của các cấu trúc bán dẫn có độ linh động cao. Để nâng cao hiệu suất của các linh kiện điện tử cần phải nghiên cứu và xác định được các cơ chế tán xạ gây bất lợi cho độ linh động [7,8,10,12]. Các nghiên cứu gần đây chỉ ra rằng, một trong các cách hiệu quả nhất để xác định các cơ chế tán xạ chủ đạo là nghiên cứu thời gian sống vận chuyển và lượng tử cũng như là tỉ số của chúng (Dingle ratio) [2,9]. Thời gian sống lượng tử còn liên quan đến sự mở rộng của các mức Landau của các điện tử trong từ trường ngoài và với năng lượng riêng của hạt. Việc lưu trữ và truyền thông tin bằng các hiện tượng lượng tử là lĩnh vực nghiên cứu nóng bỏng của các nhà khoa học trên toàn thế giới. Để làm điều đó người ta phải tìm cách kéo dài thời gian sống lượng tử của

¹ Giáo viên Trường Trung học phổ thông Hậu Lộc 2, huyện Hậu Lộc, tỉnh Thanh Hóa

^{2,3} Giảng viên khoa Khoa học Tự nhiên, Trường Đại học Hồng Đức

điện tử. Gần đây các nhà Vật lý đã sử dụng từ trường cực mạnh và nâng thời gian sống lượng tử của điện tử lên hơn 50 lần [9], điều này giúp cho việc xây dựng máy tính lượng tử tiến gần hơn đến hiện thực. Có thể nói rằng thời gian sống (vận chuyển và lượng tử) là đại lượng vừa mang đến cho chúng ta những thông tin quan trọng về hệ lượng tử vừa là đại lượng có tính quyết định cho việc ứng dụng các hệ đó trong các thiết bị lượng tử. Với những ý nghĩa đó, việc nghiên cứu thời gian sống của hệ hạt tải trong các giếng lượng tử pha tạp một phía là vấn đề nghiên cứu có tính khoa học và cấp thiết.

Trong bài báo này chúng tôi nghiên cứu thời gian sống vận chuyển và lượng tử của hạt tải trong mô hình giếng lượng tử pha tạp một phía. Các tính toán này góp phần hoàn thiện thêm lý thuyết vận chuyển tuyến tính và giải thích rõ hơn về mặt Vật lý đại lượng thời gian sống của hạt tải cũng như tỉ số của thời gian sống vận chuyển và thời gian sống lượng tử.

2. NỘI DUNG

2.1. Lý thuyết tính thời gian sống vận chuyển và thời gian sống lượng tử

Theo lý thuyết vận chuyển tuyến tính, độ linh động ở nhiệt độ thấp được xác định bởi $\mu = e\tau / m^*$ với m^* là khối lượng hiệu dụng trong mặt phẳng của kênh dẫn. Thời gian sống của hạt tải (vận chuyển và lượng tử) được biểu diễn qua hàm tự tương quan:

$$\frac{1}{\tau} = \frac{1}{(2\pi)^2 \hbar E_F} \int_0^{2k_F} dq \int_0^{2\pi} d\varphi \frac{q^2}{(4k_F^2 - q^2)^{1/2}} \frac{\langle |U(q)|^2 \rangle}{\varepsilon^2(q)} \quad (1)$$

ở đây, $q = (q, \varphi)$ là xung lượng truyền hai chiều cho bởi các cơ chế tán xạ trong mặt phẳng x, y : $q = |q| = 2k_F \sin(\mathcal{G}/2)$ với \mathcal{G} là góc tán xạ.

Năng lượng Fermi được xác định: $E_F = \hbar^2 k_F^2 / 2m^*$ với $k_F = \sqrt{2\pi p_s}$ là số sóng Fermi.

Hàm tự tương quan trong phương trình (1) có $\langle |U(q)|^2 \rangle$ được định nghĩa là trung bình thống kê các biến đổi Fourier hai chiều của các thế tán xạ phụ thuộc vào hàm sóng bao.

$$U(q) = \int_{-\infty}^{\infty} dz |\zeta(z)|^2 U(q, z) \quad (2)$$

Hàm điện môi $\varepsilon(q)$ định lượng cho hiệu ứng chắn của thế tán xạ của hạt tải hai chiều.

Áp dụng gần đúng trường ngẫu nhiên ta có: $\varepsilon(q) = 1 + \frac{q_{TF}}{q} F_s(qL)[1 - G(q)]$.

Trong đó, $q_s = 2m^* e^2 / \varepsilon_L \hbar^2$ là nghịch đảo chiều dài chắn hai chiều Thomas-Fermi. Hiệu chỉnh trường cục bộ do tương tác trao đổi giữa các hạt với nhau được cho bởi:

$G(q) = \frac{q}{2\sqrt{q^2 + k_F^2}}$. Thừa số dạng chắn phụ thuộc vào tương tác của hạt dọc theo phương

nuôi, được xác định bởi: $F_s(q) = \int_{-\infty}^{\infty} dz \int_{-\infty}^{\infty} dz' \zeta^2(z) \zeta^2(z') e^{-q|z-z'|}$ (3)

Sử dụng hàm sóng mô tả sự phân bố của hạt tải trong giếng lượng tử pha tạp một phía có dạng [3]:

$$\zeta(z) = \begin{cases} B\sqrt{\pi/L} \cos(\pi z/L) e^{-cz/L} & \text{khi } |z| \leq L/2 \\ 0 & \text{khi } |z| > L/2, \end{cases} \quad (4)$$

trong đó, B là hằng số xác định từ điều kiện chuẩn hóa, c là tham số biến phân.

Thay biểu thức hàm sóng ở phương trình (4) vào phương trình (2), kết hợp với các hàm đơn giản $\gamma_n(x)$ và $\omega_n(x)$ cho bởi (5), ta sẽ thu được biểu thức cho hàm tự tương quan $U(q)$, kết hợp với phương trình (1) ta sẽ thu được đại lượng thời gian sống cho từng cơ chế tán xạ.

$$\gamma_n(x) = \left[\frac{1}{x} + \frac{(-1)^n x}{x^2 + n^2 \pi^2} \right] \sinh x, \quad \omega_n(x) = \left[\frac{(-1)^n \pi x}{x^2 + n^2 \pi^2} \right] \sinh x \quad (5)$$

với $n = 0, 1, 2, \dots$ là số nguyên.

Ở nhiệt độ thấp, các hạt tải có thể có các cơ chế tán xạ sau: Tán xạ (RI), độ nhám bề mặt (SR), thể biến dạng khớp sai (DP). Thời gian sống tổng cộng được xác định bởi quy tắc Matthiessen:

$$\frac{1}{\tau_{tot}} = \frac{1}{\tau_{SR}} + \frac{1}{\tau_{DP}} + \frac{1}{\tau_{RI}}, \quad (6)$$

Ở đây $\tau_{SR}, \tau_{DP}, \tau_{RI}$ lần lượt là thời gian sống gây bởi các cơ chế tán xạ do độ nhám bề mặt (SR), thể biến dạng khớp sai (DP), tán xạ (RI).

Từ phương trình (1), ta thấy giá trị của thời gian sống vận chuyển được biểu diễn qua hàm tự tương quan cho mỗi cơ chế tán xạ. Mặt khác, theo [1, 4, 6] hàm tự tương quan của hệ hai chiều chứa đựng hầu như toàn bộ đặc trưng của hệ, cho phép tính toán các tính chất điện như: độ linh động của điện tử và sự mở rộng các mức Landau. Vì vậy, để tính toán các đặc trưng quan trọng của một hệ lượng tử, ta phải xác định biểu thức hàm tự tương quan ứng với từng cơ chế tán xạ trong hệ.

2.2. Các cơ chế tán xạ cơ bản trong giếng lượng tử pha tạp một phía

2.2.1. Tán xạ gây bởi độ nhám bề mặt (SR)

Ta biết rằng độ lớn của thể tán xạ trong không gian vectơ sóng được xác định bởi giá trị cục bộ của hàm sóng tại các vị trí biên $\zeta_m = \zeta(z = mL/2)$, giá trị của thể trong không gian véc tơ sóng đối với các tán xạ từ bề mặt nhám phía đỉnh có dạng:

$$U_{SRm}(q) = V_0 |\zeta_m|^2 \Delta_q \quad (7)$$

ở đây, Δ_q là biến đổi Fourier hai chiều của cấu hình bề mặt.

Với chiều cao thế rào V_0 đủ lớn ta có thể thay thế hàm sóng trong (7) bằng đạo hàm sau:

$$V_0 |\zeta_{\mp}|^2 = \frac{\hbar^2}{2m_z} |\zeta_{\mp}|^2 \quad (8)$$

Tiến hành tích phân phương trình Schrodinger 1 chiều với hàm sóng bao cho bởi (4) từ $z = \pm\infty$ tới $z = z_0$ ($z_0 > -L/2$). Ta được:

$$V_0 |\zeta_-|^2 = [E(c) - V_0(z_0)] \zeta^2(0) \mp \frac{\pi^3 e^2 B^4 p_s}{2\varepsilon_L (c^2 + \pi^2)} \left\{ \pi^2 \frac{e^{-c}}{c} \Gamma_1(\pm c, \pm \delta) - \left(\frac{2c^2 + \pi^2}{c} \right) \Gamma_1(\pm 2c, \pm \delta) - \frac{c}{2} [\Gamma_2(\pm 2c, \pm \delta) - \Gamma_0(\pm 2c, \pm \delta)] \pm \frac{\pi}{2} [\Omega_2(\pm 2c, \pm \delta) + 2\Omega_4(\pm 2c, \pm \delta)] \right\} \quad (9)$$

ở đây $E(c)$ là năng lượng tổng cộng của hạt ở trạng thái cơ bản [10].

2.2.2. Tán xạ gây bởi thế biến dạng khớp sai (DP)

Tiếp theo, như đã chứng minh trong [5], độ nhám bề mặt tạo ra thăng giáng của biến dạng trong giếng lượng tử có sự chênh lệch hằng số mạng. Chính sự chênh lệch này dẫn tới sự thay đổi của dạng biên, làm xuất hiện các cơ chế tán xạ mới. Thế tán xạ mới này phụ thuộc vào dạng đối xứng của tinh thể và loại hạt tải.

Sử dụng hàm sóng từ phương trình (4) chúng tôi xác định được biểu thức cho hàm tự tương quan cho thế biến dạng khớp sai cho điện tử có dạng phương trình (10) trùng với kết quả đã dẫn ra trong công trình [4]:

$$U_{DP}^{(t/b)}(q, z) = \left(\frac{\pi^{3/2} \alpha \in_{\parallel} \Lambda \Delta B^2}{4L} \right) F_{DP}^{(t/b)}(t) \times \left\{ \frac{3}{2} [b_s (K+1)]^2 (1 + \sin^4 \varphi + \cos^4 \varphi) + \left(\frac{d_s G}{4c_{44}} \right)^2 (1 + \sin^2 \varphi \cos^2 \varphi) \right\}^{1/2} \quad (10)$$

trong đó, thừa số dạng $F_{DP}(t) = t^2 e^{-t} [\gamma_1(c \pm t/2)]^2 F_R(t)$.

2.2.3. Tán xạ gây bởi Tạp xạ (RI)

Cuối cùng, hàm tự tương quan cho tán xạ từ sự phân bố ngẫu nhiên của tạp được xác định bởi tích phân trên toàn miền pha tạp [8]:

$$\langle |U_{RI}(q)|^2 \rangle = \left(\frac{2\pi e^2}{\varepsilon_L q} \right)^2 \int_{-\infty}^{+\infty} dz_i N_I(z_i) F_R^2(q, z_i) \quad (11)$$

Trong đó, $N_I(z_i)$ là sự phân bố của tạp và $F_R(q, z_i)$ là thừa số dạng đối với lá tạp ở vị trí $z = z_i$, được xác định bởi:

$$F_R(q, z_i) = \int_{-\infty}^{+\infty} dz |\zeta(z)|^2 e^{-q|z-z_i|} \quad (12)$$

Tính toán phương trình (9), (10) với hàm sóng cho bởi phương trình (4) ta được hàm tự tương quan cho tạp có dạng [6]:

$$\langle |U_{RI}(q)|^2 \rangle_c = \left(\frac{2\pi e^2}{\varepsilon_L q} \right)^2 \frac{N_i L^3}{4} F_{RI}(qL) \quad (13)$$

ở đây thừa số dạng chấn có dạng:

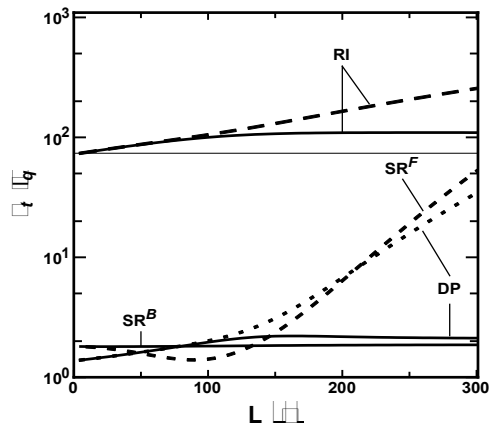
$$F_{RI}(t) = \frac{R^2(t) e^{-2st} - e^{-2dt}}{2 t^2 (t + t_c)} \quad (14)$$

với $d = z_z / L$ và $s = z_s / L$ và $t_c = q_c L$.

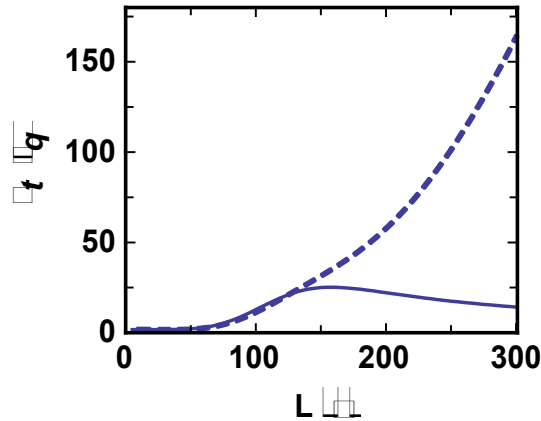
Như vậy, với việc sử dụng hàm sóng bao ở phương trình (4), chúng ta đã xác định được hàm tự tương quan cho tất cả các cơ chế tán xạ của giếng lượng tử pha tạp điều biến đối xứng ở dưới dạng giải tích. Các hàm tự tương quan trong không gian véc tơ sóng là thành phần quan trọng đóng góp vào việc xác định thời gian sống của hạt tải theo phương trình (1). Cụ thể, xác định được các hàm tương quan cho mỗi cơ chế tán xạ ta sẽ xác định được thời gian sống của hạt tải tương ứng với từng cơ chế tán xạ, từ đó thời gian sống tổng cộng được xác định bởi quy tắc Mathiessen cho bởi phương trình (6).

2.3. Kết quả và thảo luận

Tác giả cũng tiến hành so sánh tỉ số giữa thời gian sống vận chuyển và thời gian sống lượng tử $\alpha = \frac{\tau_t}{\tau_q}$ (hình 1) do các cơ chế tán xạ khác nhau (hình 1) ảnh hưởng đến quá trình vận chuyển của hạt tải trong giếng lượng tử pha tạp một phía $\text{Si}_{0.3}\text{Ge}_{0.7}/\text{Ge}/\text{Si}_{0.3}\text{Ge}_{0.7}$ với số liệu thực nghiệm trong [7]: $p_s = 10^{12} \text{ cm}^{-2}$; $n = 4$; $\varepsilon_L = 15.2$; vị trí biên dạng pha tạp có giá trị $L_d = 100 \text{ \AA}$, $L_s = 150 \text{ \AA}$, các tham số nhám bề mặt $\Delta = 5 \text{ \AA}$, $\Lambda = 40 \text{ \AA}$.



Hình 1. Tỉ số giữa thời gian sống vận chuyển và thời gian sống lượng tử gây ra bởi tất cả các cơ chế tán xạ khác nhau trong giếng lượng tử pha tạp 1 phía phụ thuộc vào bề rộng giếng lượng tử L



Hình 2. Tỉ số giữa thời gian sống vận chuyển và thời gian sống lượng tử tổng cộng phụ thuộc vào bề rộng giếng lượng tử L

Đường đứt nét (dash line) là tỉ số thời gian sống vận chuyển và thời gian sống lượng tử vẽ cho trường hợp giếng lượng tử không pha tạp (flat-band). Đường liền nét là tỉ số thời gian sống vận chuyển và thời gian sống lượng tử vẽ cho trường hợp giếng lượng tử pha tạp một phía.

Hình 2 là tỉ số giữa thời gian sống vận chuyển và thời gian sống lượng tử tổng cộng được xác định theo quy tắc Mathiessen cho cả hai trường hợp: Flat-band (đường đứt nét) và pha tạp một phía (đường liền nét). Ta nhận thấy: $\alpha = \frac{\tau_l}{\tau_q} \approx 1$, tán xạ xảy ra đẳng hướng, đồng thời cũng chỉ rõ các thể tương tác tầm gần như: không trật tự hợp bán dẫn (DP) và độ nhám bề mặt (SR) là những cơ chế tán xạ cơ bản. Khi $\alpha = \frac{\tau_l}{\tau_q} \gg 1$, tán xạ xảy ra chủ yếu về phía trước, trong đó các thể tương tác tầm xa như: tạp nền và tạp Coulomb xa (RI) là những cơ chế tán xạ cơ bản.

Hơn nữa, hình 1 cho thấy ảnh hưởng của các cơ chế tán xạ SR, DP, RI là khác nhau lên quá trình vận chuyển của hạt tải trong giếng. Tán xạ do độ nhám bề mặt là nguồn tán xạ chủ đạo, còn RI không đóng vai trò là nguồn gây ra tán xạ. Kết quả này cũng được dẫn ra trong công trình [11] khi nghiên cứu các cơ chế tán xạ cơ bản trong mô hình giếng lượng tử pha tạp một phía.

Hình 2 cho thấy, tỉ số thời gian sống vận chuyển và lượng tử trong trường hợp pha tạp một phía không tăng đơn điệu như trong trường hợp flat-band mà có tồn tại một cực đại của tỉ số phụ thuộc vào bề rộng giếng lượng tử, điều này cho thấy ảnh hưởng của hiệu ứng uốn cong vùng năng lượng do pha tạp một phía đã làm thay đổi đáng kể của tỉ số này so với trường hợp không pha tạp (flat-band). Đây cũng là cơ sở để chúng ta có thể nghiên cứu sâu về ảnh hưởng của hiệu ứng uốn cong vùng năng lượng lên tính chất điện của hạt tải trong mô hình giếng lượng tử có pha tạp.

3. KẾT LUẬN

Chúng tôi đã nghiên cứu tỉ số thời gian sống vận chuyển và thời gian sống lượng tử trong mô hình giếng lượng tử pha tạp một phía. Kết quả của chúng tôi thu được bao gồm đóng góp của tất cả các cơ chế tán xạ khác nhau SR, DP, RI lên quá trình vận chuyển của hạt tải trong giếng. Tỉ số này cũng cho phép chúng ta kết luận về cơ chế tán xạ nào là cơ bản, cũng như dự đoán được chiều hướng của các tán xạ. Theo đó, khi tỉ số này xấp xỉ bằng 1, tán xạ gây bởi không trật tự hợp bán dẫn (DP) và độ nhám bề mặt (SR) là những cơ chế tán xạ cơ bản. Khi tỉ số này lớn hơn nhiều so với một tán xạ gây bởi tạp nền và tạp Coulomb xa (RI) là những cơ chế tán xạ cơ bản. Những kết quả tính toán trên đây đóng góp một phần quan trọng vào việc xác định cơ chế tán xạ chủ đạo trong mô hình giếng lượng tử pha tạp một phía, giúp hoàn thiện thêm lý thuyết về quá trình vận chuyển của hạt tải trong cấu trúc giếng lượng tử.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

- [1] Ando. T., Fowler. A. B., and Stern. F. (1982), *Electronic properties of two-dimensional systems*, Rev. Mod. Phys. Vol. 54, 437.
- [2] Das Sarma. S. and Stern. F. (1985), *Single-particle relaxation time versus scattering time in an impure electron gas*, Physics Review B Vol. 32(12), pp. 8442-8444.
- [3] D. N. Quang and N. H. Tung (2008), *Band-bending effects on the electronic properties of square quantum wells*, Phys. Rev. B 77, pp.125335-125341.
- [4] D. N, Quang, N. H. Tung, L. Tuan, D. T. Hien, and Tran Thi Hai (2008), *Key scattering mechanisms for holes in strained SiGe/Ge/SiGe square quantum wells*, Journal of Applied physics, 104, 113711.
- [5] Feenstra. R. M. and Lutz. M. A. (1995), *Scattering from strain variations in high-mobility Si/ SiGe heterostructures*, J. Appl. Phys. Vol. 78, 6091.
- [6] Gold. A. (1987), *Electronic transport properties of two-dimensional electron gas in a silicon quantum-well structure at low temperature*, Phys. Rev. B. 35, 723.
- [7] Irisawa. T., Myronov. M., Parker. E. H. C., Nakagawa. K., Murata. M., Koh. S. and Shiraki. Y. (2003), *Hole density dependence of effective mass, mobility and transport time in strained Ge channel modulation-doped heterostructures*, Appl. Phys. Lett. 82, 1425.
- [8] Morris. R. J. H., Grasby. T. J., Hammond. R., Myronov. M., Mironov. O. A., Leadley. D. R., Whall. T. E., Parker. E. H. C., Currie. M. T., Leitz. C. W. and Fitzgerald. E. A. (2004), *High conductance Ge p-channel heterostructures realized by hybrid epitaxial growth*, Semicond. Sci. Technol. 19, L106
- [9] Manfra. M. J., Simon. S. H., Baldwin. K. W., Sergent. A. M., West. K. W., Molnar. R. J. and Caissie. J. (2004), *Quantum and transport lifetimes in a tunable low-density AlGaIn/GaN two-dimensional electron gas*, Appl. Phys. Lett. 85, 5278.

- [10] Sawano. K., Satoh. H., Kunishi. Y., Nakagawa. K. and Shiraki. Y. (2007), *Strain and hole-density dependence of hole mobility in strained-Ge modulation-doped structures*, Semicond. Sci. Technol. 22, S161.
- [11] Tran Thi Hai, Nguyen Manh An, Nguyen Thi Dung (2017), *The main scattering mechanisms in Single-side modulation doped square quantum wells*, Journal of Physics: Conf. Serie 865, 012004.
- [12] Xie. Y. H., Monroe. D., Fitzgerald. E. A., Silverman. P. J., Thiel. F. A. and Watson. G. P. (1993), *Very high mobility two-dimensional hole gas in Si/GeSi_{1-x}/Ge structures grown by molecular beam epitaxy*, Appl. Phys. Lett. 63, 2263.

A STUDY OF TRANSPORT AND QUANTUM TIME IN ONE-SIDE DOPED SQUARE QUANTUM WELLS

Ngo Thi Lan, Nguyen Thi Thao, Nguyen Van Can

ABSTRACT

We present a theoretical study of the effects from asymmetric modulation of the envelop wave function on quantum transport in square quantum wells (QWs). Within the variational approach we obtain analytic expressions for the carrier distribution and their scattering in asymmetric one-side doped square QWs. We calculated transport and quantum time ratio for RI, SR and DP scattering mechanisms. Our theory can explain some recent calculations about the transport properties of interest, namely, the ratio of the transport to quantum lifetimes.

Keywords: *Transport lifetimes, quantum lifetimes, quantum wells, one-side doped.*

TÍNH CHẤT TỪ NHIỆT CỦA HỆ VẬT LIỆU PEROVSKITE NỀN MANGAN $\text{La}_{0,7}\text{A}_{0,3}\text{MnO}_3$ VỚI A LÀ Ca, Sr và Ba

Đinh Chí Linh¹, Lê Viết Bái², Trần Đăng Thành³

TÓM TẮT

Trong báo cáo này, chúng tôi trình bày các kết quả nghiên cứu về hiệu ứng từ nhiệt của hệ vật liệu $\text{La}_{0,7}\text{A}_{0,3}\text{MnO}_3$ (với $A = \text{Ca}, \text{Sr}$ và Ba). Sự thay thế Sr và Ba cho Ca gây ảnh hưởng đáng kể lên các thông số mạng tinh thể, đồng thời đóng vai trò quan trọng trong sự tăng nhiệt độ chuyển pha sắt từ - thuận từ (nhiệt độ Curie, T_C) của vật liệu. Khi $A = \text{Ca}$, vật liệu biểu hiện tính chất chuyển pha loại I với độ biến thiên entropy từ rất lớn. Khi thay thế Sr và Ba cho Ca, vật liệu chuyển sang tính chất chuyển pha loại II và độ biến thiên entropy từ giảm đáng kể, nhưng làm tăng khả năng làm lạnh của vật liệu trong một số trường hợp. Kết quả thực nghiệm cho thấy, các số liệu về độ biến thiên entropy từ phụ thuộc nhiệt độ đo tại các từ trường khác nhau của mẫu $A = \text{Ca}$ không tuân theo phương pháp đường cong phổ quát, điều này hoàn toàn ngược lại với kết quả thu được khi thay thế Sr và Ba cho Ca.

Từ khóa: Hiệu ứng từ nhiệt, vật liệu perovskite nền mangan, chuyển pha từ.

1. ĐẶT VẤN ĐỀ

Trong vài thập kỉ qua, hệ vật liệu perovskite nền mangan (REMnO_3 với RE là nguyên tố đất hiếm, được gọi tắt là manganit) đã thu hút được sự quan tâm to lớn của các nhà khoa học bởi tính chất điện - từ của chúng vô cùng thú vị. Mặc dù REMnO_3 là chất điện môi - phản sắt từ, nhưng khi thay thế RE bằng một nguyên tố kiềm hoặc kiềm thổ (A) trong công thức $\text{RE}_{1-x}\text{A}_x\text{MnO}_3$, dẫn đến một phần ion Mn^{3+} ($t_{2g}^3 e_g^1, S = 2$) chuyển thành ion Mn^{4+} ($t_{2g}^3, S = 3/2$), thì các hệ vật liệu này trở thành kim loại-sắt từ và xuất hiện chuyển pha sắt từ (Ferromagnetic, FM) - thuận từ (Paramagnetic, PM). Về cơ bản, tính chất điện-từ của hệ vật liệu $\text{La}_{1-x}\text{A}_x\text{MnO}_3$ ($A = \text{Ca}, \text{Sr}$, và Ba) đã được nhiều nhà khoa học quan tâm từ những năm 1950 [5,6]. Kết quả cho thấy, khi thay thế một phần ion La^{3+} bằng các ion kim loại hóa trị II thì vật liệu xuất hiện một số hiệu ứng điện - từ thú vị [13], điển hình như hiệu ứng từ trở khổng lồ (Colossal magnetoresistance, CMR) và hiệu ứng từ nhiệt (Magnetocaloric, MC) [9,11]. Trong số đó, hợp chất $\text{La}_{0,7}\text{Ca}_{0,3}\text{MnO}_3$ được biết đến như là một vật liệu điển hình cho các hiệu ứng CMR và MC, độ lớn của các hiệu ứng này lớn hơn rất nhiều so với những kết quả thu được từ các manganit khác. Ví dụ như: hiệu ứng CMR thu được trên màng mỏng $\text{La}_{2/3}\text{Ca}_{1/3}\text{MnO}_3$ có giá trị từ trở MR lớn hơn 100000% tại nhiệt độ $T = 77 \text{ K}$ trong từ trường $H = 60 \text{ kOe}$ [12] và hiệu ứng MC thu được trên đa tinh thể $\text{La}_{0,7}\text{Ca}_{0,3}\text{MnO}_3$ có độ biến thiên entropy từ cực đại $|\Delta S_{\text{max}}| = 5 \text{ J/kg}\cdot\text{K}$ trong biến thiên từ

¹ Nghiên cứu sinh Viện Khoa học vật liệu, Viện Hàn lâm Khoa học và Công nghệ Việt Nam

² Giảng viên khoa Kỹ thuật và Công nghệ, Trường Đại học Hồng Đức

³ Nghiên cứu viên Học viện Khoa học và Công nghệ, Viện Hàn lâm Khoa học và Công nghệ Việt Nam

trường $\Delta H = 10$ kOe [7]. Tuy nhiên, chuyển pha FM-PM của vật liệu $\text{La}_{0,7}\text{Ca}_{0,3}\text{MnO}_3$ dạng khối đơn tinh thể hay đa tinh thể luôn đi kèm với sự thay đổi về cấu trúc tinh thể, điều này được biết đến là đặc trưng của vật liệu chuyển pha loại I (First-order phase transition, FOPT) [12]. Chúng ta biết rằng, độ rộng vùng chuyển pha FM-PM của các vật liệu FOPT thường rất hẹp. Hiện tượng trễ nhiệt và trễ từ trong các vật liệu này cũng khá lớn. Những nhược điểm này đã làm hạn chế khả năng ứng dụng của vật liệu FOPT. Trong khi đó, các vật liệu chuyển pha loại II (Second-order phase transition, SOPT) thường có vùng chuyển pha FM-PM khá rộng, hầu như không có hiện tượng trễ từ và trễ nhiệt. Do vậy, để tận dụng các ưu điểm của cả hai loại vật liệu kể trên, chúng ta cần phải mở rộng vùng chuyển pha FM-PM, đồng thời phải làm giảm hiện tượng trễ nhiệt và trễ từ của vật liệu thông qua biến đổi bản chất FOPT thành SOPT. Một số biện pháp có thể áp dụng cho trường hợp vật liệu $\text{La}_{0,7}\text{Ca}_{0,3}\text{MnO}_3$ như: i) thay thế các ion thích hợp vào vị trí La/Ca và/hoặc Mn, ii) giảm kích thước tinh thể của vật liệu, iii) dùng các tác nhân bên ngoài như áp suất, từ trường. Trong bài báo này, chúng tôi thay thế một số ion kim loại kiềm thổ (Sr^{2+} và Ba^{2+}) vào vị trí của Ca^{2+} và nghiên cứu ảnh hưởng của chúng lên cấu trúc tinh thể, chuyển pha từ và hiệu ứng từ nhiệt của hệ vật liệu $\text{La}_{0,7}\text{Ca}_{0,3}\text{MnO}_3$. Kết quả nghiên cứu cho thấy khả năng làm lạnh của vật liệu được cải thiện đáng kể đồng thời vùng chuyển pha FM-PM đã mở rộng và dịch về phía vùng nhiệt độ phòng, giúp vật liệu trở nên hữu ích hơn trong công nghệ làm lạnh bằng từ trường.

2. NỘI DUNG

2.1. Thực nghiệm

Sáu mẫu gốm đa tinh thể có công thức hóa học dạng $\text{La}_{0,7}\text{A}_{0,3}\text{MnO}_3$ ($\text{A} = \text{Ca}, \text{Sr}$ và Ba) được chế tạo bằng phương pháp phản ứng pha rắn. Nguyên liệu ban đầu gồm các ôxít La_2O_3 , CaCO_3 , BaCO_3 , SrCO_3 và Mn với độ sạch 99,9%, chúng được cân khối lượng theo công thức hợp phần danh định, sau đó được trộn đều và nung sơ bộ trong không khí tại 1200°C trong thời gian 24 giờ. Hỗn hợp bột sau khi nung được nghiền trộn lại, rồi ép thành viên với áp lực 3 tấn/ cm^2 và nung thiêu kết trong không khí 24 giờ tại 1400°C . Các sản phẩm cuối cùng được kiểm tra cấu trúc tinh thể bằng nhiễu xạ tia X (Bruker AXS, D8 Discover) với nguồn bức xạ $\text{Cu-K}\alpha$ ($\lambda = 1,5406$ Å). Các phép đo từ độ phụ thuộc nhiệt độ $M(T)$ và từ trường $M(H)$ được thực hiện trên hệ từ kế mẫu rung (VSM) với bước tăng nhiệt độ là 2K. Để thuận tiện, chúng tôi sử dụng các kí hiệu viết tắt cho các mẫu vật liệu trong bài báo này như sau:

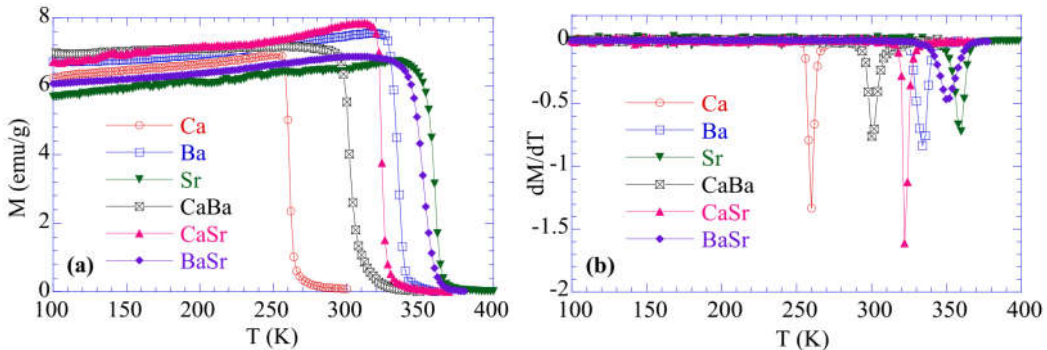
$\text{La}_{0,7}\text{Ca}_{0,3}\text{MnO}_3$ (Ca), $\text{La}_{0,7}\text{Sr}_{0,3}\text{MnO}_3$ (Sr), $\text{La}_{0,7}\text{Ba}_{0,3}\text{MnO}_3$ (Ba), $\text{La}_{0,7}\text{Ca}_{0,15}\text{Ba}_{0,15}\text{MnO}_3$ (CaBa), $\text{La}_{0,7}\text{Ca}_{0,15}\text{Sr}_{0,15}\text{MnO}_3$ (CaSr) và $\text{La}_{0,7}\text{Ba}_{0,15}\text{Sr}_{0,15}\text{MnO}_3$ (BaSr).

2.2. Kết quả và thảo luận

Giản đồ nhiễu xạ tia X đo tại nhiệt độ phòng của các mẫu cho thấy chúng đều đơn pha tinh thể. Các mẫu Ca, CaBa, và CaSr có hệ cấu trúc tinh thể là orthorhombic, trong khi đó các mẫu Ba, Sr và BaSr có hệ cấu trúc tinh thể là rhombohedral. Trên cơ sở số liệu nhiễu xạ tia X, các thông số mạng (a , b và c) và thể tích ô mạng (V) của pha tinh thể có trong các mẫu đã được tính toán và trình bày trong bảng 1.

Bảng 1. Các thông số mạng, bán kính ion trung bình tại vị trí La/A ($\langle r_A \rangle$) và nhiệt độ chuyển pha FM-PM (T_C) của hợp chất $\text{La}_{0,7}\text{A}_{0,3}\text{MnO}_3$

Hợp chất	Kí hiệu	Cấu trúc	a (Å)	b (Å)	c (Å)	V (Å ³)	$\langle r_A \rangle$ (Å)	T_C (K)
$\text{La}_{0,7}\text{Ca}_{0,3}\text{MnO}_3$	Ca	Orthorhombic	5,451	5,468	7,709	229,8	1,354	260
$\text{La}_{0,7}\text{Ba}_{0,3}\text{MnO}_3$	Ba	Rhombohedral	5,541	-	13,505	358,9	1,435	333
$\text{La}_{0,7}\text{Sr}_{0,3}\text{MnO}_3$	Sr	Rhombohedral	5,511	-	13,405	352,6	1,384	360
$\text{La}_{0,7}\text{Ca}_{0,15}\text{Ba}_{0,15}\text{MnO}_3$	CaBa	Orthorhombic	5,428	5,503	7,751	231,5	1,395	300
$\text{La}_{0,7}\text{Ca}_{0,15}\text{Sr}_{0,15}\text{MnO}_3$	CaSr	Orthorhombic	5,481	5,463	7,748	232,0	1,369	322
$\text{La}_{0,7}\text{Ba}_{0,15}\text{Sr}_{0,15}\text{MnO}_3$	BaSr	Rhombohedral	5,535	-	13,463	356,4	1,410	350



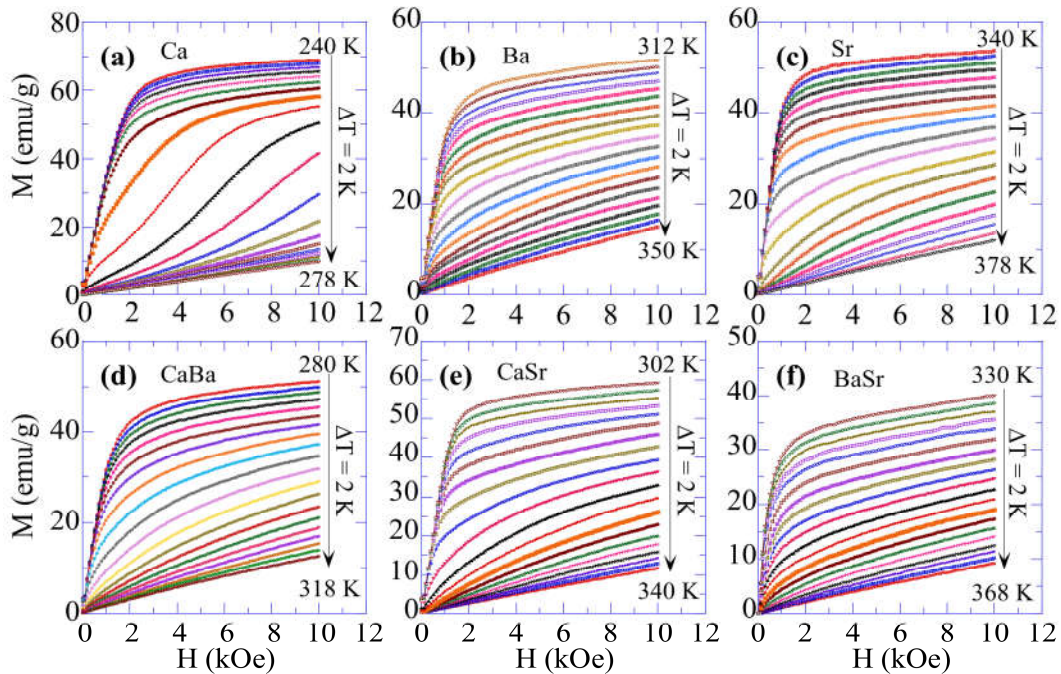
Hình 1. (a) Các đường cong $M(T)$ và (b) dM/dT phụ thuộc T , đo ở chế độ ZFC trong từ trường 100 Oe của hợp chất $\text{La}_{0,7}\text{A}_{0,3}\text{MnO}_3$ với $A = \text{Ca}, \text{Sr}$ và Ba

Từ bảng 1 ta thấy, so với giá trị V của Ca, khi thay thế Sr và Ba vào vị trí của Ca đã làm tăng đáng kể thể tích ô cơ sở. Sự thay đổi này có thể được giải thích bởi sự thay thế ion Ca^{2+} có bán kính nhỏ hơn ($r_{\text{Ca}^{2+}} = 1,34 \text{ \AA}$) bằng các ion Sr^{2+} hoặc Ba^{2+} với bán kính ion lớn hơn ($r_{\text{Sr}^{2+}} = 1,44 \text{ \AA}$ và $r_{\text{Ba}^{2+}} = 1,61 \text{ \AA}$). Do vậy làm tăng bán kính trung bình ($\langle r_A \rangle$) của các ion tại vị trí La/A (thường được gọi là bán kính ion trung bình tại vị trí A trong cấu trúc perovskite ABO_3).

Đường cong từ độ phụ thuộc nhiệt độ trong từ trường 100 Oe của các mẫu, đo trong chế độ làm lạnh không từ trường (Zero field cooled, ZFC) được trình bày trong hình 1 (a). Khi nhiệt độ tăng, tất cả các mẫu đều có một chuyển pha FM-PM sắc nét xảy ra ở khoảng nhiệt độ trên 250 K. Nhiệt độ xảy ra chuyển pha FM-PM phụ thuộc mạnh vào nồng độ của Ca, Sr và Ba trong hợp chất. Nhiệt độ Curie (T_C) của các mẫu được xác định tại điểm cực tiểu trên đường cong phụ thuộc nhiệt độ của vi phân bậc nhất từ độ theo nhiệt độ, dM/dT phụ thuộc T , hình 1(b). Giá trị T_C của các mẫu được trình bày trong bảng I cho thấy, nhiệt độ chuyển pha FM-PM tăng với sự gia tăng của Sr hoặc Ba trong vật liệu. Kết quả này rất phù hợp với những nghiên cứu đã được công bố trước đây [10,15]. Nhìn chung, sự gia tăng T_C của các manganit đã được các nhà khoa học giải thích dựa trên sự gia tăng của bán kính ion trung bình $\langle r_A \rangle$. Với các ion có bán kính khác nhau nằm ở vị trí A sẽ tạo ra hiện tượng

không vừa khớp bán kính, dẫn đến hình thành những biến dạng mạng địa phương trong bát diện MnO_6 , kết quả làm thay đổi độ dài liên kết Mn-O và góc liên kết Mn-O-Mn. Khi $\langle r_A \rangle$ tăng, độ dài liên kết Mn-O giảm, góc liên kết Mn-O-Mn tăng và tiệm cận dần đến giá trị 180° . Kết quả này tạo điều kiện làm tăng khả năng chồng phủ giữa các điện tử $3d$ của các ion Mn với các điện tử $2p$ của các ion oxy. Do vậy cường độ tương tác trao đổi kép (Double-exchange, DE) mang tính sắt từ tăng lên, làm tăng T_C của vật liệu [3, 4, 17]. Sự biến dạng mạng tinh thể không chỉ làm thay đổi giá trị T_C mà còn làm biến đổi bản chất chuyển pha từ và tính chất từ của vật liệu [17].

Để biết thêm thông tin liên quan đến tính chất từ của các mẫu, chúng tôi đã đo đường cong từ hóa ban đầu của chúng tại các nhiệt độ khác nhau $M(H, T)$ trong từ trường $H = 0-10$ kOe. Hình 2 trình bày bộ các đường cong $M(H, T)$ của hệ mẫu được đo tại các nhiệt độ khác nhau xung quanh vùng chuyển pha FM-PM. Ta có thể thấy, trong trạng thái sắt từ, phần lớn từ độ tăng đột ngột trong khoảng từ trường thấp ($H < 3$ kOe), sau đó tiến dần đến giá trị bão hòa trong vùng từ trường trên 4 kOe. Tuy nhiên, từ độ của các mẫu không đạt giá trị bão hòa hoàn toàn khi từ trường đã lên đến 10 kOe. Điều này được cho là có liên quan đến sự cùng tồn tại của tương tác DE mang tính sắt từ và tương tác siêu trao đổi (Superexchange, SE) mang tính phản sắt từ trong vật liệu. Ngoài ra còn có thể liên quan đến sự không đồng nhất về tính chất từ trong vật liệu. Các kết quả tương tự cũng được quan sát thấy ở nhiều hệ manganit khác. Tại mỗi giá trị từ trường nhất định, từ độ của vật liệu giảm dần khi nhiệt độ tăng, các đường cong $M(H)$ chuyển dần từ trạng thái phi tuyến tính sang tuyến tính khi vật liệu chuyển từ pha sắt từ sang pha thuận từ.



Hình 2. Bộ các đường cong $M(H, T)$ đo tại các nhiệt độ khác nhau xung quanh T_C của hợp chất $La_{0,7}A_{0,3}MnO_3$ với $A = Ca, Sr$ và Ba

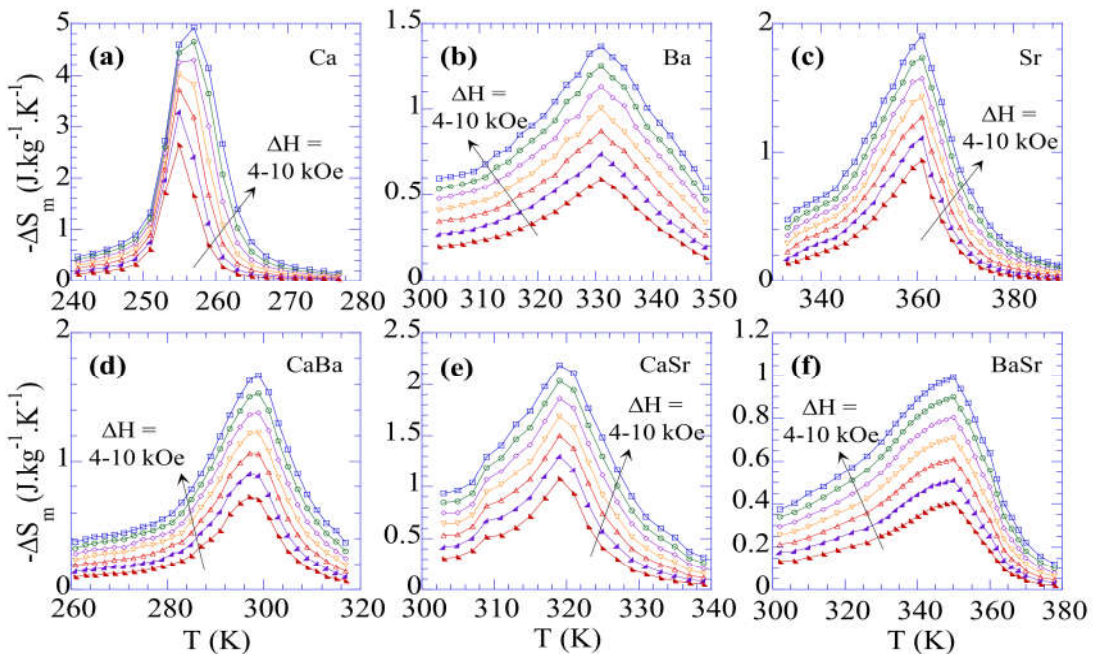
Dựa trên bộ số liệu $M(H, T)$, hiệu ứng MC của một vật liệu từ có thể được đánh giá thông qua việc xác định và nghiên cứu các đường cong $\Delta S_m(T)$. Hình 3 trình bày các đường cong $-\Delta S_m(T)$ của hệ mẫu xác định được trong các khoảng biến thiên từ trường $\Delta H = 4-10$ kOe (với bước nhảy của ΔH là 1 kOe). Trong đó, giá trị ΔS_m trong biến thiên từ trường ΔH từ 0 đến H được tính toán từ các số liệu $M(H, T)$ thông qua biểu thức:

$$\Delta S_m(T, H) = \int_0^H \left(\frac{\partial M}{\partial T} \right)_H dH \quad (1)$$

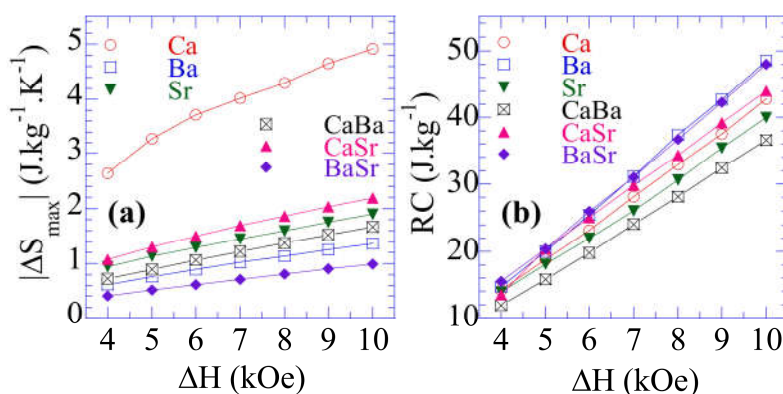
Từ hình 3 cho thấy, trên các đường cong $-\Delta S_m(T)$ xuất hiện giá trị cực đại tại lân cận nhiệt độ chuyển pha T_C . Giá trị $|\Delta S_{\max}|$ tăng khi ΔH tăng. Một hiệu ứng từ nhiệt lớn có giá trị $|\Delta S_{\max}|$ đạt $4,92 \text{ J}\cdot\text{kg}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$ được quan sát thấy trong mẫu Ca. Tuy nhiên hiệu ứng này chỉ xảy ra trong phạm vi nhiệt độ khá hẹp (250-262 K). Ngược lại, các mẫu CaBa, CaSr, BaSr, Ba và Sr có độ biến thiên entropy từ vừa phải, nhưng hiệu ứng MC của chúng diễn ra trong phạm vi nhiệt độ rộng hơn. Để đánh giá khả năng làm lạnh của vật liệu, nhiều tác giả đã sử dụng đại lượng công suất làm lạnh tương đối (Relative cooling power, RCP). Giá trị RCP được xác định bằng tích giữa giá trị biến thiên entropy từ cực đại ($|\Delta S_{\max}|$) nhân với độ rộng tại nửa chiều cao cực đại của đường cong $\Delta S_m(T)$ (δT_{FWHM}) [1].

$$\text{RCP} = |\Delta S_{\max}| \times \delta T_{\text{FWHM}} \quad (2)$$

RCP là đại lượng đặc trưng cho khả năng làm lạnh của vật liệu. Nó cho biết lượng nhiệt có thể được chuyển giao giữa hai bộ phận nóng và lạnh của máy lạnh trong một chu trình nhiệt động lý tưởng.



Hình 3. Các đường cong $-\Delta S_m(T)$ phụ thuộc T xác định được trong các biến thiên từ trường khác nhau $\Delta H = 4-10$ kOe của hợp chất $\text{La}_{0.7}\text{A}_{0.3}\text{MnO}_3$ với $\text{A} = \text{Ca}, \text{Sr}$ và Ba



Hình 4. Sự phụ thuộc của $|\Delta S_{\max}|$ và RCP theo ΔH của hợp chất $\text{La}_{0,7}\text{A}_{0,3}\text{MnO}_3$ với $\text{A} = \text{Ca}, \text{Sr}$ và Ba

Hình 4 cho thấy khi so sánh các giá trị của $|\Delta S_{\max}|$ và RCP giữa các mẫu. Mẫu Ca cho $|\Delta S_{\max}|$ lớn nhất, tuy nhiên RCP của nó chỉ đạt giá trị vừa phải. Ngược lại, các mẫu Ba và BaSr có $|\Delta S_{\max}|$ thấp hơn các mẫu khác, nhưng RCP của chúng lại đạt giá trị lớn nhất trong phần lớn các khoảng biến thiên từ trường. Để thuận tiện cho việc so sánh hiệu ứng MC trong các vật liệu từ nhiệt khác nhau, chúng ta có thể sử dụng các tỉ số $|\Delta S_{\max}|/\Delta H$ và $\text{RCP}/\Delta H$. Trong trường hợp của chúng tôi, tỉ số $|\Delta S_{\max}|/\Delta H$ của hệ vật liệu $\text{La}_{0,7}\text{A}_{0,3}\text{MnO}_3$ có giá trị từ 0,10 - 0,49 $\text{J}\cdot\text{kg}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}\cdot\text{kOe}^{-1}$, giá trị này có thể so sánh được với một số kết quả nghiên cứu trước đây. Bảng 2 cho biết giá trị các thông số liên quan đến hiệu ứng MC của hệ vật liệu $\text{La}_{0,7}\text{A}_{0,3}\text{MnO}_3$ và so sánh với một số manganit tương đồng [2,8,14,15,16,17,19]. Có thể nhận thấy mẫu Ca của chúng tôi có tỉ số $|\Delta S_{\max}|/\Delta H$ cao nhất (0,49 $\text{J}/\text{kg}\cdot\text{K}\cdot\text{kOe}$), nhưng tỉ số $\text{RCP}/\Delta H$ của mẫu này cũng chỉ cùng bậc khi so sánh với các manganit khác.

Bảng 2. Giá trị T_C và các thông số liên quan đến hiệu ứng MC ($|\Delta S_{\max}|$, $|\Delta S_{\max}|/\Delta H$, RCP và $\text{RCP}/\Delta H$) của hệ vật liệu $\text{La}_{0,7}\text{A}_{0,3}\text{MnO}_3$ so sánh với một số manganit khác đã công bố gần đây

Hợp chất	T_C (K)	ΔH (kOe)	$ \Delta S_{\max} $ (J/kg·K)	$ \Delta S_{\max} /\Delta H$ (J/kg·K·kOe)	RCP (J/kg)	$\text{RCP}/\Delta H$ (J/kOe·kg)	TLTK
$\text{La}_{0,7}\text{Ca}_{0,3}\text{MnO}_3$ (PC)	260	10	4,92	0,49	42,75	4,28	Trong bài
$\text{La}_{0,7}\text{Ba}_{0,3}\text{MnO}_3$ (PC)	333	10	1,37	0,14	48,46	4,85	Trong bài
$\text{La}_{0,7}\text{Sr}_{0,3}\text{MnO}_3$ (PC)	360	10	1,91	0,19	39,99	4,00	Trong bài
$\text{La}_{0,7}\text{Ca}_{0,15}\text{Ba}_{0,15}\text{MnO}_3$ (PC)	300	10	1,67	0,17	36,62	3,66	Trong bài
$\text{La}_{0,7}\text{Ca}_{0,15}\text{Sr}_{0,15}\text{MnO}_3$ (PC)	322	10	2,19	0,22	44,00	4,40	Trong bài

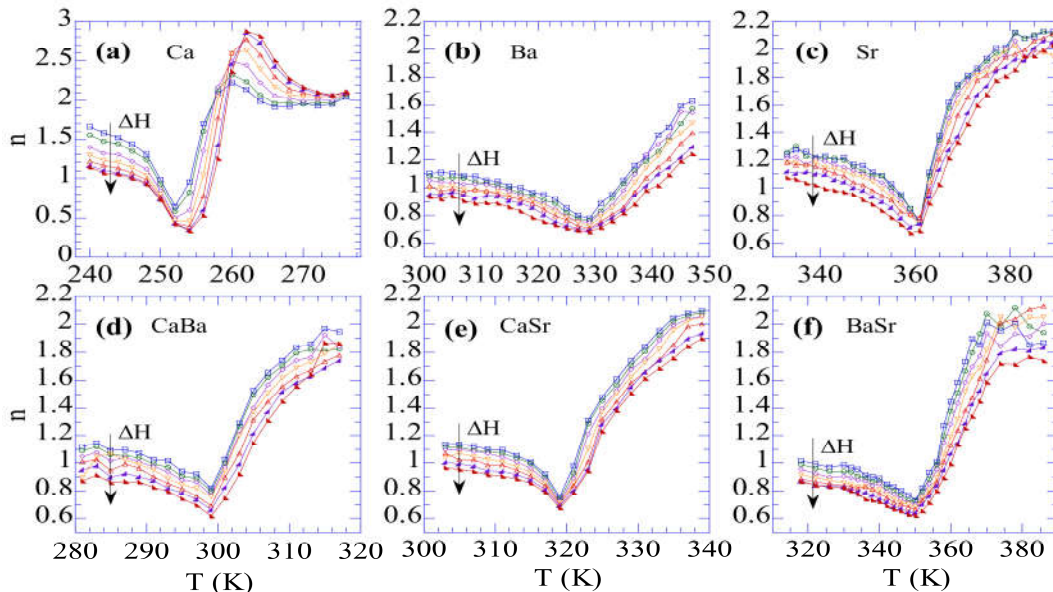
$\text{La}_{0,7}\text{Ba}_{0,15}\text{Sr}_{0,15}\text{MnO}_3$ (PC)	350	10	0,99	0,10	47,98	4,80	Trong bài
$\text{La}_{0,7}\text{Ca}_{0,275}\text{Ba}_{0,025}\text{MnO}_3$ (NPs)	256	30	4,39	0,15	140	4,67	[14]
$\text{La}_{0,7}\text{Ca}_{0,25}\text{Ba}_{0,05}\text{MnO}_3$ (NPs)	258	30	4,38	0,15	140	4,67	[14]
$\text{La}_{0,7}\text{Ca}_{0,3}\text{MnO}_3$ (NPs)	235-270	45	5,00-8,60	0,11-0,19	218-243	4,84-5,40	[15]
$\text{La}_{0,7}\text{Ca}_{0,25}\text{MnO}_3$ (SC)	275	50	10,50	0,21	462	9,24	[16]
$\text{La}_{0,7}\text{Ca}_{0,2}\text{Sr}_{0,1}\text{MnO}_3$ (SC)	308	50	7,50	0,15	374	7,48	[16]
$\text{La}_{0,7}\text{Ca}_{0,1}\text{Sr}_{0,2}\text{MnO}_3$ (SC)	340	50	7,00	0,14	369	7,38	[16]
$\text{La}_{0,7}\text{Ca}_{0,05}\text{Sr}_{0,25}\text{MnO}_3$ (SC)	341	50	6,90	0,14	364	7,28	[16]
$\text{La}_{0,7}\text{Ca}_{0,2}\text{Sr}_{0,1}\text{MnO}_3$ (PC)	284	30	4,30	0,14	150	5,00	[17]
$\text{La}_{0,7}\text{Ca}_{0,2}\text{Sr}_{0,1}\text{MnO}_3$ (NPs)	297	10	1,47	0,15	54,4	5,44	[9]
$\text{La}_{0,7}\text{Ca}_{0,19}\text{Sr}_{0,11}\text{MnO}_3$ (NPs)	301	10	1,42	0,14	52,5	5,25	[9]
$\text{La}_{0,7}\text{Ca}_{0,18}\text{Sr}_{0,12}\text{MnO}_3$ (NPs)	309	10	1,38	0,19	44,3	4,43	[9]
$\text{La}_{0,7}\text{Ca}_{0,2}\text{Sr}_{0,1}\text{MnO}_3$ (PC)	294	50	6,20	0,12	234,5	4,69	[18]
$\text{La}_{0,7}\text{Ca}_{0,2}\text{Sr}_{0,1}\text{MnO}_3$ (PC)	280	50	4,62	0,09	239,6	4,79	[18]
$\text{La}_{0,7}\text{Ca}_{0,2}\text{Sr}_{0,1}\text{MnO}_3$ (PC)	255	50	3,80	0,08	240	4,80	[18]
$\text{La}_{0,7}\text{Ca}_{0,3}\text{MnO}_3$ (PC)	260	20	7,80	0,39	124	6,20	[10]
		50	10,70	0,21	278	5,56	
$\text{La}_{0,7}\text{Ca}_{0,27}\text{Ba}_{0,025}\text{MnO}_3$ (PC)	260	20	6,40	0,32	109	5,45	[10]
		50	9,20	0,18	276	5,52	
$\text{La}_{0,7}\text{Ca}_{0,25}\text{Ba}_{0,05}\text{MnO}_3$ (PC)	267	20	6,30	0,32	101	5,05	[10]
		50	9,10	0,18	267	5,34	
$\text{La}_{0,7}\text{Ca}_{0,225}\text{Ba}_{0,075}\text{MnO}_3$ (PC)	268	20	4,10	0,21	90	4,50	[10]
		50	7,10	0,14	241	4,82	
$\text{La}_{0,7}\text{Ca}_{0,2}\text{Ba}_{0,1}\text{MnO}_3$ (PC)	300	20	3,10	0,16	105	5,25	[10]
		50	6,00	0,12	246	4,92	

(Ghi chú: Các ký hiệu viết tắt: PC: đa tinh thể, NPs: hạt kích thước nm, SC: đơn tinh thể, TLTK: tài liệu tham khảo)

Gần đây, Franco và cộng sự (2010) đã đưa ra những đặc điểm phổ biến của vật liệu từ nhiệt chuyển pha loại II, từ những kết quả nghiên cứu đó chúng ta có thể dự đoán được một vài thông số vật lý vượt ra khỏi điều kiện hiện có của phòng thí nghiệm. Với vật liệu chuyển pha loại II, sự phụ thuộc của độ biến thiên entropy từ cực đại vào sự biến thiên từ trường ngoài có thể được mô tả bằng quy luật hàm số mũ, $|\Delta S_{\max}| \sim \Delta H^n$. Số mũ từ trường n là đại lượng phụ thuộc nhiệt độ và từ trường, giá trị của nó có thể xác định được thông qua biểu thức [18]:

$$n(T, H) = \frac{d \ln |\Delta S_m(T, H)|}{d \ln H} \quad (3)$$

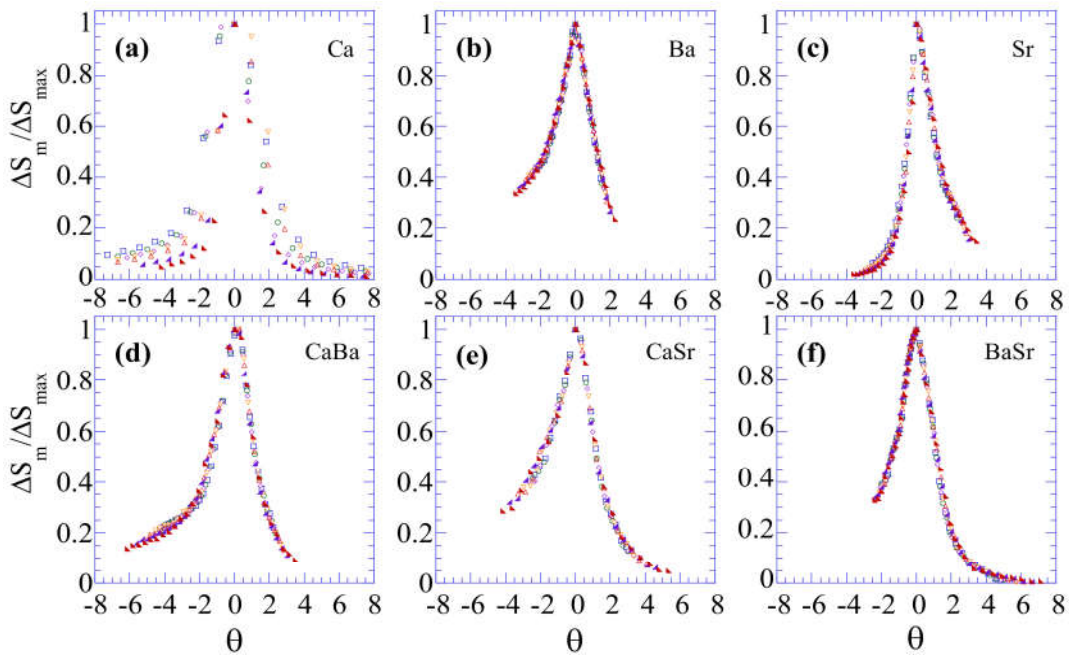
Ở đây, giá trị của n trong vùng FM có xu hướng tiệm cận đến 1 khi $T \ll T_C$ và tiệm cận đến 2 trong vùng PM khi $T \gg T_C$. Tại $T = T_C$, n có giá trị cực tiểu và không phụ thuộc từ trường [18]. Hình 5 trình bày sự biến đổi theo nhiệt độ của n trong các biến thiên từ trường khác nhau $\Delta H = 4-10$ kOe tính được theo biểu thức (3) của vật liệu $\text{La}_{0,7}\text{A}_{0,3}\text{MnO}_3$. Từ hình 5 ta thấy, giá trị n phụ thuộc mạnh vào nhiệt độ và từ trường. Với các mẫu Ba, Sr, CaBa, CaSr, BaSr (hình 5b-f), quy luật biến đổi của $n(T)$ có dạng giống như Franco và cộng sự (2010) đã mô tả. Nhìn chung, giá trị n của chúng đều tiệm cận đến 1 trong vùng FM ($T \ll T_C$) và tiệm cận đến 2 trong vùng PM ($T \gg T_C$), đạt cực tiểu tại $T \approx T_C$ (ký hiệu là $n(T_C)$). Khi biến thiên từ trường ngoài thay đổi, giá trị $n(T_C)$ thay đổi không đáng, chứng tỏ chuyển pha từ của những mẫu này tuân theo quy luật của SOPT. Từ hình 5a ta thấy, đáng điều và quy luật $n(T)$ của mẫu Ca có nhiều điểm khác biệt so với các mẫu còn lại. Trong vùng FM ($T \ll T_C$), $n(T)$ có xu hướng tiệm cận đến giá trị lớn hơn 1. Trong vùng PM ($T \gg T_C$), giá trị $n(T)$ có sự thay đổi lớn, chúng tăng đột ngột đến cực đại ($n_{\max} > 2$) trong khoảng nhiệt độ vài Kelvin sau đó giảm dần về lân cận 2. Trong vùng lân cận chuyển pha FM-PM, giá trị cực tiểu $n(T_C)$ thay theo cả nhiệt độ và từ trường. Điều này chứng tỏ chuyển pha từ của mẫu Ca không thuộc SOPT.



Hình 5. Các đường cong n phụ thuộc T xác định được trong các biến thiên từ trường khác nhau $\Delta H = 4-10$ kOe của hợp chất $\text{La}_{0,7}\text{A}_{0,3}\text{MnO}_3$ với $A = \text{Ca}, \text{Sr}$ và Ba

Theo phương pháp đường cong phổ quát (Universal master curves method) [18], tất cả dữ liệu $\Delta S_m(T)$ trong các biến thiên từ trường ΔH khác nhau của vật liệu SOPT sẽ chồng phủ lên nhau tạo thành một đường cong duy nhất (gọi là đường cong phổ quát) thông qua những thao tác biến đổi như sau: các số liệu $\Delta S_m(T)$ được chuẩn hóa theo giá trị lớn nhất của chúng ($\Delta S_m(T)/\Delta S_{m,\max}$). Trục nhiệt độ T (K) được thay đổi tỉ lệ trở thành trục θ theo

mối liên hệ: $\theta = (T - T_C)/(T_r - T_C)$, với T_r là nhiệt độ tham khảo và có liên quan với hệ số tỉ lệ $k = \Delta S_m(T_r)/\Delta S_{m,max}$, $0 < k < 1$. Sự lựa chọn giá trị k không ảnh hưởng đến việc xây dựng đường cong phổ quát. Hình 6 biểu diễn $\Delta S_m(T)/\Delta S_{m,max}$ phụ thuộc θ cho các mẫu trong các biến thiên từ trường $\Delta H = 4-10$ kOe, với bước nhảy của ΔH là 1 kOe. Ở đây giá trị T_r được chọn tương ứng với $k = 0,6$. Ta thấy, tất cả số liệu thực nghiệm $\Delta S_m(T)$ của mẫu Ca không tập trung vào một đường cong duy nhất, hình 6(a). Trong khi đó, tất cả số liệu thực nghiệm $\Delta S_m(T)$ của mẫu pha Sr và Ba đều chồng phủ lên nhau tạo thành một đường duy nhất trong toàn dải nhiệt độ, khảo sát hình 6b-f. Từ những kết quả đánh giá $n(T)$ kết hợp với phương pháp đường cong phổ quát, chúng ta có thể khẳng định mẫu Ca là vật liệu FOPT, các mẫu còn lại đều thuộc vật liệu SOPT.



Hình 6. Các đường $\Delta S_m(T)/\Delta S_{m,max}$ trong các biến thiên từ trường khác nhau $\Delta H = 4-10$ kOe của hợp chất $La_{0,7}A_{0,3}MnO_3$ với $A = Ca, Sr$ và Ba

3. KẾT LUẬN

Chúng tôi đã nghiên cứu ảnh hưởng của sự pha tạp Sr và Ba đến cấu trúc, hiệu ứng MC của hệ vật liệu $La_{0,7}A_{0,3}MnO_3$ ($A = Ca, Sr$ và Ba). Khi $A = Ca$ vật liệu có hiệu ứng MC rất lớn ($|\Delta S_{max}| \approx 5$ J/kg·K trong biến thiên từ trường $\Delta H = 10$ kOe) nhưng vùng nhiệt độ xảy ra hiệu ứng khá hẹp. Khi thay thế A bằng Sr và/hoặc Ba, độ lớn biến thiên entropy từ của vật liệu giảm đi đáng kể, tuy nhiên vùng nhiệt độ xảy ra hiệu ứng được mở rộng. Nhờ đó, khả năng làm lạnh của một số mẫu đã được cải thiện.

Trên cơ sở phương pháp đường cong phổ quát, sự phụ thuộc nhiệt độ của độ biến thiên entropy từ $\Delta S_m(T)$ trong các từ trường biến thiên ΔH khác nhau đã được xây dựng. Kết quả chỉ ra rằng, các số liệu $\Delta S_m(T)$ trong mỗi mẫu hoàn toàn tuân theo một đường cong duy nhất,

ngoại trừ mẫu A = Ca. Kết quả này chứng minh rằng, trường hợp A = Ca là vật liệu FOPT, các mẫu còn lại đều là vật liệu SOPT và tuân theo mô hình đường cong phổ quát.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

- [1] A.M. Tishin, Y.I. Spichkin (2003), *The Magnetocaloric Effect and its Applications*, Institute of Physics Publishing, Bristol, UK.
- [2] A. Dhahri, M. Jemmali, K. Taibi, E. Dhahri, E. K. Hlil (2015), *Structural, magnetic and magnetocaloric properties of $La_{0.7}Ca_{0.2}Sr_{0.1}Mn_{1-x}Cr_xO_3$ compounds with $x= 0, 0.05$ and 0.1* , J. Alloys Compd., vol. 618, pp. 488.
- [3] D. C. Linh, N. T. Ha, N. H. Duc, L. H. G. Nam, L. V. Bau, N. M. An, S. C. Yu, and T. D. Thanh, *Na-doped $La_{0.7}Ca_{0.3}MnO_3$ compounds exhibiting a large magnetocaloric effect near room temperature*, Physica B, vol. 532, pp. 155.
- [4] E. Dagotto, T. Hotta, A. Moreo (2001), *Colossal magnetoresistant materials: the key role of phase separation*, Phys. Rep., vol. 344, pp. 1.
- [5] G. H. Jonker and J. H. Van Santen (1950), *Ferromagnetic compounds of manganese with perovskite structure*, Physica, vol. 16, pp. 337.
- [6] J. H. Van Santen and G. H. Jonker (1950), *Electrical conductivity of ferromagnetic compounds of manganese with perovskite structure*, Physica, vol. 16, pp. 599.
- [7] L. E. Hueso, P. Sande, D. R. Miguens, J. Rivas, F. Rivadulla, M. A. Lopez-Quintela (2002), *Tuning of the magnetocaloric effect in $La_{0.67}Ca_{0.33}MnO_3 - \delta La_{0.67}Ca_{0.33}MnO_3 - \delta$ nanoparticles synthesized by sol-gel techniques*, J. Appl. Phys., vol. 91, pp. 9943.
- [8] M. H. Phan, S. C. Yu, N. H. Hur (2005), *Excellent magnetocaloric properties of $La_{0.7}Ca_{0.3-x}Sr_xMnO_3$ ($0.05 \leq x \leq 0.25$) single crystals*, Appl. Phys. Lett., vol. 86, pp. 072504.
- [9] M. H. Phan and S. C. Yu (2007), *Review of the magnetocaloric effect in manganese materials*, J. Magn. Magn. Mater., vol. 308, pp. 325.
- [10] N. Moutis, I. Panagiotopoulos, M. Pissas and D. Niarchos (1999), *Structural and magnetic properties of $La_{0.67}(Ba_xCa_{1-x})_{0.33}MnO_3$ perovskites ($0 \leq x \leq 1$)*, Phys. Rev. B, vol. 59, pp. 1129.
- [11] P. Ramirez (1997), *Colossal magnetoresistance*, J. Phys: Condens. Matter., vol. 9, pp. 8171.
- [12] S. Jin, T. H. Tiefel, M. McCormack, R. A. Fastnacht, R. Ramesh, L. H. Chen (1994), *Thousandfold change in resistivity in magnetoresistive La-Ca-Mn-O films*, Science, vol. 264, pp. 413.
- [13] T. D. Thanh, L. H. Nguyen, D. H. Manh, N. V. Chien, P. T. Phong, N. V. Khiem, L. V. Hong, and N. X. Phuc (2012), *Structural, magnetic and magnetotransport behavior of $La_{0.7}Sr_xCa_{0.3-x}MnO_3$ compounds*, Physica B, vol. 407, pp. 145.
- [14] T. L. Phan, Y. D. Zhang, P. Zhang, T. D. Thanh, S.C. Yu (2012), *Critical behavior and magnetic-entropy change of orthorhombic $La_{0.7}Ca_{0.2}Sr_{0.1}MnO_3$* , J. Appl. Phys., vol. 112, pp. 093906.

- [15] T. D. Thanh, T. L. Phan, N. V. Chien, D. H. Manh, S.C. Yu (2014), *Second-Order Phase Transition and the Magnetocaloric Effect in $La_{0.7}Ca_{0.3-x}Sr_xMnO_3$ Nanoparticles*, IEEE Trans. Magn., vol. 50, pp. 2501504.
- [16] T. D. Thanh, D. C. Linh, N. T. U. Tuyen, T. L. Phan, S. C. Yu (2015), *Magnetic and magnetocaloric properties in Ba-doped $La_{0.7}Ca_{0.3}MnO_3$ nanoparticles*, J. Alloys Compd., vol. 649, pp. 981.
- [17] T. L. Phan, N. T. Dang, T. A. Ho, T. V. Manh, T. D. Thanh, C. U. Jung, B. W. Lee, A. T. Le, A. D. Phan, S. C. Yu (2016), *First-to-second-order magnetic-phase transformation in $La_{0.7}Ca_{0.3-x}Ba_xMnO_3$ exhibiting large magnetocaloric effect*, J Alloys Compod., vol. 657, pp. 818.
- [18] V. Franco and A. Conde (2010), *Scaling laws for the magnetocaloric effect in second order phase transitions: From physics to applications for the characterization of materials*, Int. J. Refrig., vol. 33, pp. 465.
- [19] W. Tang, W. J. Lu, X. Luo, B. Wang, X. B. Zhu, W. H. Song, Z.R. Yang, Y. P. Sun (2010), *Particle size effects on $La_{0.7}Ca_{0.3}MnO_3$: size-induced changes of magnetic phase transition order and magnetocaloric study*, J. Magn. Mater., vol. 322, pp. 2360.

MAGNETOCALORIC PROPERTIES OF PEROVSKITE MANGANITES $La_{0.7}A_{0.3}MnO_3$ WITH A = Ca, Sr, AND Ba

Dinh Chi Linh, Le Viet Bau, Tran Dang Thanh

ABSTRACT

In this work, the magnetocaloric properties of $La_{0.7}A_{0.3}MnO_3$ (with A = Ca, Sr, and Ba) have been presented. Sr and/or Ba substitution for Ca strongly affects the lattice parameters, and it also plays an important role in enhancing their ferromagnetic-paramagnetic phase transition temperature (T_C). For A = Ca, sample exhibits the first-order behavior corresponding to a high value of the maximum magnetic entropy change ($|\Delta S_{max}|$). Meanwhile, for A = Sr and/or Ba, samples undergo a second-order phase transition, and their magnetic entropy change (ΔS_m) significantly reduces, however, the value of the relative cooling power is improved for some cases of the Sr and/or Ba substitution. Additionally, all $\Delta S_m(T)$ data obtained under different applied field changes of sample Ca do not follow the universal master curve. This behavior is in contrast with that obtained from other samples.

Keywords: Magnetocaloric effect, Perovskite manganites, magnetic phase transition.

NGHIÊN CỨU THỪA SỐ DẠNG CHẮN ĐỂ KHẢO SÁT ẢNH HƯỞNG CỦA PHA TẠP LÊN TÍNH CHẤT ĐIỆN TRONG GIẾNG LƯỢNG TỬ

Trần Mai Loan¹, Trần Thị Hải², Nguyễn Văn Cần³

TÓM TẮT

Chúng tôi đưa ra một lý thuyết nghiên cứu về thừa số dạng chắn hai chiều trong các mô hình giếng lượng tử pha tạp điều biến một phía và hai phía. Bằng việc xây dựng các công thức toán học phù hợp, giúp cho việc mô tả ảnh hưởng của pha tạp điều biến trong giếng lượng tử được dễ dàng hơn, chúng tôi đã đưa ra công thức tính toán chính xác cho thừa số dạng chắn hai chiều. Chúng tôi cũng tiến hành tính số các dạng của thừa số dạng chắn trong mô hình giếng lượng tử pha tạp điều biến một phía và hai phía. Ảnh hưởng của chắn tăng lên khi tăng bề rộng giếng lượng tử và nồng độ pha tạp.

Từ khóa: Thừa số dạng chắn, giếng lượng tử, pha tạp điều biến.

1. ĐẶT VẤN ĐỀ

Khoa học công nghệ nano là một ngành khoa học đang được quan tâm và thúc đẩy phát triển mạnh mẽ hiện nay [1,2,6,9,10], công nghệ nano đã mở ra một bước ngoặt mới, con đường mới cho ngành khoa học, đã mở ra một triển vọng mới trong việc ứng dụng những dụng cụ thông tin kỹ thuật có những chức năng mà trước kia chưa từng có. Các dòng máy tính điện tử ngày càng được nâng cấp nhờ tăng mật độ và tốc độ xử lý thông tin bằng cách thu nhỏ kích thước của những thành tố cơ bản. Sự hoạt động của các cấu trúc nano có độ linh động cao được quy định bởi các tính chất vận chuyển (tính chất điện) của chúng. Vì vậy việc nghiên cứu tính chất điện của hạt tải là vấn đề được nhiều nhà khoa học trong và ngoài nước quan tâm.

Các nghiên cứu lý thuyết và thực nghiệm [3] chỉ ra rằng cơ chế giam hãm gây bởi pha tạp có ảnh hưởng rất lớn lên độ linh động của cấu trúc dị tính. Với mẫu vùng năng lượng bị uốn cong do pha tạp [3] người ta đã giải thích được một số vấn đề có tính chất thách đố của hệ hạt tải hai chiều như sự phụ thuộc không đơn điệu của độ linh động vào độ rộng giếng và nguyên nhân của sự giảm độ linh động khi mẫu được pha tạp điều biến bất đối xứng.

Kết quả tính toán từ công trình [4,5] cho thấy rằng dưới ảnh hưởng của hiệu ứng uốn cong vùng năng lượng, hình dạng của hàm sóng biểu thị sự phân bố của các hạt tải trong giếng có sự thay đổi đáng kể, không còn đối xứng như trong mô hình flat-band mà nó tăng về phía có pha tạp và giảm về phía không có pha tạp trong trường hợp pha tạp một phía và

¹ Trường Trung học phổ thông Nguyễn Mộng Tuân, huyện Đông Sơn, Thanh Hóa

^{2,3} Giảng viên khoa Khoa học Tự nhiên, Trường Đại học Hồng Đức

tập trung về cả hai phía trong trường hợp giếng lượng tử pha tạp hai bên. Sự thay đổi này phụ thuộc vào mức pha tạp và bề rộng kênh dẫn.

Hiệu ứng uốn cong vùng (band bending) ảnh hưởng lên tính chất điện trong giếng lượng tử được thể hiện rất rõ nét ở thừa số dạng chắn bởi thừa số dạng chắn phụ thuộc vào sự phân bố của hạt tải theo phương z (phương giam hãm) [3]. Với những ý nghĩa đó, việc nghiên cứu thừa số dạng chắn của hệ hạt tải trong các cấu trúc giếng lượng tử là vấn đề nghiên cứu mang ý nghĩa khoa học lớn và cần thiết.

Tuy nhiên, một trong những trở ngại chính của các lý thuyết hiện có là việc sử dụng hàm Fang-Howard [2]. Hàm sóng được xác định bằng phương pháp biến phân này đã cho ta công cụ toán học đơn giản mô tả giam hãm lượng tử gây bởi pha tạp, áp dụng rất tốt cho các trường hợp giếng lượng tử tam giác được tạo bởi các tiếp xúc dị tính. Khi áp dụng cho các giếng lượng tử vuông góc, mô hình Fang-Howard chỉ có thể mô tả gần đúng sự phụ thuộc của độ linh động vào nhiệt độ, vào mật độ hạt tải chứ hoàn toàn không thể dẫn ra sự phụ thuộc vào độ rộng của giếng. Cho đến nay người ta mới xây dựng được lý thuyết về ảnh hưởng của pha tạp lên giam hãm lượng tử cho giếng tam giác, đối với các giếng lượng tử vuông góc vẫn chưa đưa ra được biểu thức tính toán tường minh và thỏa đáng. Vì vậy, trong bài báo này chúng tôi tập trung tính toán thừa số dạng chắn trong các mô hình giếng lượng tử vuông góc và so sánh giữa các mô hình pha tạp khác nhau để thấy được sự ảnh hưởng của thừa số dạng chắn lên tính chất điện của điện tử trong cấu trúc giếng lượng tử.

2. NỘI DUNG

2.1. Lý thuyết tính thừa số dạng chắn

Một tập hợp các điện tích phân bố đều (uniform/ homogenous) trong không gian sẽ không tạo ra trường. Giả sử ta thả một điện tích thử Q vào trong hệ điện tích. Điện tích Q sẽ đẩy các điện tử gần nó, xung quanh Q có một vùng không gian thiếu điện tích âm, khối điện tử bị phân cực. Như vậy, dưới tác dụng của một nguồn ngoài nào đó thì hệ điện tích sẽ phân bố lại và phân bố trở nên không đều, hệ bị phân cực, sự phân cực tạo ra một trường phụ, trường phụ có xu hướng chống lại nguồn đã sinh ra nó, tác dụng ngược chiều với trường chính. Khi đó, trường tổng hợp bao gồm trường chính cộng với trường phụ sẽ yếu hơn trường chính. Đó là hiện tượng chắn. Các phần tử tham gia vào chắn là các điện tích linh động. Dưới tác dụng của nguồn ngoài nào đó (điện tích thử, dono, axepcto, độ nhám bề mặt...) các điện tích này sẽ di chuyển, phân bố lại không đều, chúng bị phân cực, tạo ra trường phụ làm yếu trường ban đầu.

Điều kiện để có chắn: Phụ thuộc vào độ linh động của các điện tích và các điện tích phải tương tác với nhau.

Các yếu tố để xác định chắn

(i) Chắn được xác định dựa vào độ cơ động của các điện tích. Khi điện tích dễ di chuyển, chúng sẽ dễ bị phân bố lại, từ đó hệ điện tích dễ bị phân cực và vì thế chắn sẽ tăng lên. Bên cạnh đó, số điện tích tham gia vào chắn cũng ảnh hưởng đến chắn.

(ii) Chấn trong ba chiều mạnh hơn trong hai chiều, chấn trong hai chiều còn phụ thuộc vào cấu trúc của giếng lượng tử chứa điện tích.

(iii) Ngoài ra, nguyên lý Pauli không cho phép hai hạt nằm trong cùng một trạng thái, điều này làm giảm khả năng di chuyển của các điện tích, chấn vì thế cũng giảm. Tất cả các tương tác (Coulomb, độ nhám bề mặt, thế biến dạng khớp sai...) làm thay đổi phân bố của khí điện tử đều bị chấn động.

Hiệu ứng chấn động được định lượng bằng hàm điện môi $\varepsilon(q)$. Để xác định $\varepsilon(q)$ ta sử dụng biểu thức trong gần đúng pha ngẫu nhiên được đưa ra bởi [1].

$$\varepsilon(q) = 1 + \frac{q_{TF}}{q} F_s(qL)[1 - G(q)] \text{ với } q \leq 2k_F \quad (1)$$

với $q_{TF} = \frac{2m^* e^2}{\varepsilon_L \hbar^2}$ là nghịch đảo bán kính chấn Thomas-Fermi hai chiều.

$F_s(qL)$ là thừa số dạng chấn phụ thuộc vào sự phân bố của khí lỗ trống hai chiều theo phương z.

$$F_s(qL) = \int_{-\infty}^{+\infty} dz \int_{-\infty}^{+\infty} dz' |\zeta(z)|^2 |\zeta(z')|^2 e^{-q|z-z'|} \quad (2)$$

$G(q)$ là hiệu chỉnh trường cục bộ khi tính đến tương tác trao đổi, tức là tương tác của các điện tử xuất hiện do nguyên lý Pauli. Theo nguyên lý Pauli, không thể tồn tại quá hai hạt Fermion cùng nằm trong một trạng thái, điều này đã hạn chế khả năng di chuyển của các điện tích, làm giảm sự phân cực của hệ, làm yếu trường phụ, chấn vì thế cũng giảm đi.

Trong phép gần đúng Hubbard, $G(q)$ có dạng [7]:

$$G(q) = \frac{q}{2(q^2 + k_F^2)^{1/2}} \quad (3)$$

Thừa số dạng chấn F_s (2) phụ thuộc vào sự phân bố của khí lỗ trống theo phương z. Khi hàm sóng thay đổi thì thừa số dạng chấn thay đổi, có nghĩa là khi dạng pha tạp (doping) thay đổi thì chấn thay đổi. Để khảo sát ảnh hưởng của pha tạp (doping) lên tính chất điện trong giếng lượng tử, người ta xác định thừa số dạng chấn.

2.1.1. Thừa số dạng chấn trong giếng lượng tử pha tạp một phía

Sử dụng biểu thức (2) ở trên và hàm sóng trong mô hình giếng lượng tử pha tạp một phía cho bởi phương trình (1) trong tài liệu tham khảo [4], kết hợp với các hàm phụ $\gamma_n(x)$ và $\omega_n(x)$ cho bởi (A1) và (A2) trong phần phụ lục của tài liệu tham khảo [4], ta thu được:

Thừa số dạng chấn phụ thuộc vào tương tác của hạt dọc theo phương nuôi, được xác định bởi:

$$F_s(t) = \frac{\pi^2 B^4}{8} [F_U(t) + F_L(t)] \quad (4)$$

$$\begin{aligned}
 F_L(t) = & \left(\frac{L}{2}\right)^2 \left\{ -\frac{1}{2c+t} \left[e^{-(c+\frac{t}{2})} \phi(a, c - \frac{t}{2}) - \phi(a, 2c) \right] - \right. \\
 & - \frac{c+\frac{t}{2}}{4[a^2 + (c+\frac{t}{2})^2]} \left[2\cos a e^{-(c+\frac{t}{2})} \phi(a, c - \frac{t}{2}) - \phi(2a, 2c) - 2\phi(a, 2c) + \phi(0, 2c) \right] \\
 & \left. + \frac{a}{4[a^2 + (c+\frac{t}{2})^2]} \left[2\sin a e^{-(c+\frac{t}{2})} \phi(a, c - \frac{t}{2}) - \psi(2a, 2c) - 2\psi(a, 2c) \right] \right\}, \quad (5)
 \end{aligned}$$

và

$$\begin{aligned}
 F_U(t) = & \left(\frac{L}{2}\right)^2 \left\{ \frac{1}{2c-t} \left[e^{(c-\frac{t}{2})} \phi(a, c + \frac{t}{2}) - \phi(a, 2c) \right] + \right. \\
 & + \frac{c-\frac{t}{2}}{4[a^2 + (c-\frac{t}{2})^2]} \left[2\cos a e^{(c-\frac{t}{2})} \phi(a, c + \frac{t}{2}) - \phi(2a, 2c) - 2\phi(a, 2c) + \phi(0, 2c) \right] + \\
 & \left. \frac{a}{4[a^2 + (c-\frac{t}{2})^2]} \times \left[2\sin a e^{(c-\frac{t}{2})} \phi(a, c + \frac{t}{2}) + \psi(2a, 2c) + 2\psi(a, 2c) \right] \right\}, \quad (6)
 \end{aligned}$$

$t = qL$ là số sóng hai chiều.

2.1.2. Thừa số dạng chắn trong giếng lượng tử pha tạp đối xứng hai phía

Sử dụng biểu thức (2) ở trên và hàm sóng trong mô hình giếng lượng tử pha tạp hai phía cho bởi phương trình (1) trong tài liệu tham khảo [8], kết hợp với các hàm phụ $\gamma_n(x)$ và $\omega_n(x)$ [7] ta thu được biểu thức giải tích dạng tường minh của thừa số dạng chắn cho trường hợp giếng lượng tử pha tạp đối xứng hai phía như sau:

$$\begin{aligned}
 F_s(t) = & \frac{\pi^2 B^4}{8} \left\{ \frac{4t}{t^2 - 4c^2} [\gamma_1(2c) + 1] + \frac{8}{t} [2\gamma_1(c) - e^{-t/2} \gamma_1(t/2) + 1] + \right. \\
 & + \left(\frac{t-2c}{(t-2c)^2 + 4\pi^2} + \frac{t+2c}{(t+2c)^2 + 4\pi^2} \right) [\gamma_2(2c) + 2\gamma_1(2c) - \gamma_0(2c) + 1] + \\
 & + \frac{8t}{t^2 + 4\pi^2} [\gamma_2(c) + 2\gamma_1(c) - \gamma_0(c) + e^{-t/2} \gamma_1(t/2) + 1/2] + \frac{16\pi ct}{[(t-2c)^2 + 4\pi^2][(t+2c)^2 + 4\pi^2]} \quad (6) \\
 & \times [\omega_2(2c) + 2\omega_1(2c)] - 8\pi^2 \left[\frac{e^{-c-t/2}}{(t-2c)[(t-2c)^2 + 4\pi^2]} + \right. \\
 & \left. + \frac{e^{-(c+t/2)}}{(t+2c)[(t+2c)^2 + 4\pi^2]} + \frac{4e^{-t/2}}{t[t^2 + 4\pi^2]} \right] \{ \gamma_1(c+t/2) + \gamma_1(c-t/2) \} \left. \right\}
 \end{aligned}$$

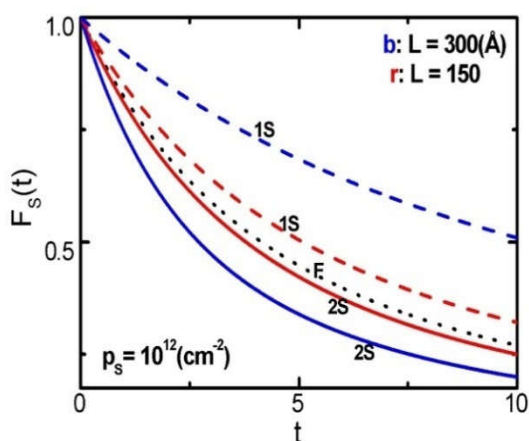
(5), (6) và (7) là biểu thức giải tích của thừa số dạng chắn trong mô hình giếng lượng tử pha tạp một phía và pha tạp đối xứng hai phía. Việc tính toán ra biểu thức thừa số dạng chắn này hết sức khó khăn do sự phức tạp của quá trình tính toán. Vì các tác giả trước trong [2] chỉ đưa ra biểu thức gần đúng của thừa số dạng chắn mà không thể nào tìm được biểu thức giải tích chính xác. Nhóm tác giả chúng tôi, bằng việc xây dựng một số hàm phụ [4] giúp cho việc tính toán được dễ dàng hơn, chúng tôi đã đưa ra biểu thức giải tích của thừa số dạng chắn theo các phương trình (5), (6) và (7).

2.2. Kết quả và thảo luận

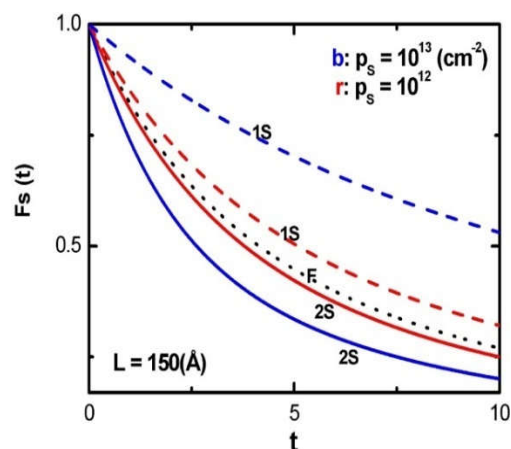
Chúng tôi tiến hành khảo sát thừa số dạng chắn phụ thuộc vào các tham số của giếng lượng tử như nồng độ hạt tải và bề rộng của giếng.

Đồ thị hình 1 cho biết sự phụ thuộc của thừa số dạng chắn vào xung lượng vô hướng t đối với khí lỗ trống hai chiều trong giếng lượng tử vuông góc GaAs [8] với các giá trị khác nhau của bề rộng giếng lượng tử $L = 150, 300 \text{ \AA}$.

Đồ thị hình 2 cho biết sự phụ thuộc của thừa số dạng chắn vào xung lượng vô hướng t đối với khí lỗ trống hai chiều trong giếng lượng tử vuông góc GaAs [8] với các giá trị khác nhau của nồng độ hạt tải $p_s = 10^{12}, 10^{13} \text{ cm}^{-2}$.



Hình 1. F_s phụ thuộc vào t với các giá trị khác nhau của bề rộng giếng lượng tử L



Hình 2. F_s phụ thuộc vào xung lượng t với các giá trị khác nhau của nồng độ hạt tải p_s

Trong đó, các đường đứt nét (dot line) là thừa số dạng chắn trong mô hình flat-band, đường đứt nét (dash line) là thừa số dạng chắn trong mô hình bent-band do pha tạp một phía và đường liền nét là thừa số dạng chắn trong mô hình pha tạp đối xứng hai phía.

Quan sát hình 1 ta thấy, khi ta thay đổi bề rộng giếng lượng tử bằng các giá trị $L = 150 \text{ \AA}$ và $L = 300 \text{ \AA}$ ứng với cùng một giá trị của nồng độ pha tạp là $p_s = 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ thì thừa số dạng chắn trong mô hình flat-band (dot line) không thay đổi, thừa số dạng chắn trong mô hình pha tạp một phía (dash line) và pha tạp hai phía (đường liền nét) thay đổi rõ rệt, đặc biệt khi ta tăng bề rộng của giếng lượng tử thừa số dạng chắn trong hai mô hình trên càng

khác biệt nhau, điều này dẫn tới tính chất điện của điện tử trong hai mô hình pha tạp một phía và pha tạp hai phía là khác nhau rõ rệt.

Quan sát hình 2 ta thấy, khi ta thay đổi nồng độ hạt tải trong giếng lượng tử bằng các giá trị $p_s = 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ và $p_s = 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ ứng với cùng một giá trị của bề rộng giếng lượng tử $L = 150 \text{ \AA}$ thì thừa số dạng chắn trong mô hình flat-band (dot line) không thay đổi, thừa số dạng chắn trong mô hình pha tạp một phía (dash line) và pha tạp hai phía (đường liền nét) thay đổi rõ rệt, đặc biệt khi ta tăng nồng độ hạt tải trong giếng thừa số dạng chắn trong hai mô hình trên càng khác biệt nhau, điều này dẫn tới tính chất điện của điện tử trong hai mô hình pha tạp một phía và pha tạp hai phía là khác nhau rõ rệt.

3. KẾT LUẬN

Chúng tôi tính toán thừa số dạng chắn của các mô hình giếng lượng tử không pha tạp (flat-band), giếng lượng tử pha tạp một phía và giếng lượng tử pha tạp đối xứng hai phía. Các tính toán này hết sức phức tạp, mà các nhóm trước đây chưa đưa ra được biểu thức giải tích. Tuy nhiên, bằng việc sử dụng các công cụ toán học thích hợp với việc đặt các hàm phụ, chúng tôi đã đưa ra được dạng tường minh của các biểu thức dạng chắn. Chúng tôi cũng tiến hành tính số và kết quả cho thấy, đối với các giếng lượng tử pha tạp khác nhau thì chắn là khác nhau. Dạng của chắn tăng khi ta tăng bề rộng giếng lượng tử và nồng độ hạt tải trong giếng. Điều này giải thích được tính chất điện, tính chất vận chuyển của hạt tải trong các mô hình giếng lượng tử pha tạp khác nhau là khác nhau, phụ thuộc vào nồng độ hạt tải và độ rộng của giếng lượng tử.

Tính toán ra biểu thức giải tích của thừa số dạng chắn và mô phỏng để tính số, so sánh đại lượng này giữa các mô hình giếng lượng tử khác nhau đã góp phần hoàn thiện thêm lí thuyết nghiên cứu tính chất điện của hạt tải trong các cấu trúc giếng lượng tử.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

- [1] Ando. T., Fowler. A. B., and Stern. F. (1982), *Electronic properties of two-dimensional systems*, Rev. Mod. Phys. Vol. 54, 437.
- [2] B. PÖDÖR (1995), *Variational calculation for triangular quantum wells using modified trial function*, Acta physica polonica A, Vol. 88, No.5.
- [3] D. N. Quang and N. H. Tung (2008), *Band-bending effects on the electronic properties of square quantum wells*, Phys. Rev. B 77, pp.125335-125341.
- [4] Doan Nhat Quang, Nguyen Huyen Tung, Do Thi Hien, and Tran Thi Hai (2008), *Key scattering mechanisms for holes in strained SiGe/Ge/SiGe square quantum wells*, Journal of Applied physics, 104, 113711.
- [5] Doan Nhat Quang, Nguyen Huyen Tung, Nguyen Trung Hong, and Tran Thi Hai (2011), *Two-Side Doping Effects on the Mobility of Carriers in Square Quantum Wells*, Journal of the Physical Society of Japan 80, 044714.

- [6] Gold. A. (1987), *Electronic transport properties of two-dimensional electron gas in a silicon quantum-well structure at low temperature*, Phys. Rev. B. 35, 723.
- [7] Jonson M. (1976), *Electron correlations in inversion layers*, J. Phys. C 9, 3055.
- [8] Manfra. M. J., Pfeiffer. L. N., West. K. W., Stormer. H. L., Baldwin. K. W., Hsu. J. W. P., Lang. D. V., and Molnar. R. J. (2000), *High-mobility AlGaIn/GaN heterostructures grown by molecularbeam epitaxy on GaN templates prepared by hydride vapor phase epitaxy*, Appl. Phys. Lett. 77, 2888.
- [9] Schäffer. F. (1997), *High-mobility Si and Ge structures*, . Sci. Technol. 12, 1515.
- [10] Van de Walle. C. G. (1989), *Band lineups and deformation potentials in the model-solid theory*, Phys. Rev. B. 39, 1871.

STUDY SCREENING FORM FACTOR TO INVESTIGATE MODULATION-DOPING EFFECTS ON ELECTRIC CHARACTERISTICS IN QUANTUM WELLS

Tran Mai Loan, Tran Thi Hai, Nguyen Van Can

ABSTRACT

We present a theoretical study of the 2-dimensional (2D) screening form factor in a single-side and double-side doped square quantum well (QW). By introducing some mathematical functions, which make up a helpful tool to the description of the modulation-doping effects in an infinite square QW, we derive a special formula allowing to exactly calculate the 2-dimensional screening form factor. We have carried out numerical calculations to evaluate the band-bending effects from single-side and double-side modulation doping on the 2D screening form factor. The bent-band screening is raised with a rise of the channel width and of the doping level.

Keywords: *Screening form factor, quantum well, modulation-doping.*

LUẬT MẠNH SỐ LỚN CHO CÁC PHẦN TỬ NGẪU NHIÊN ĐỘC LẬP ĐÔI MỘT TRONG KHÔNG GIAN BANACH

Nguyễn Thị Nga¹

TÓM TẮT

Trong bài báo này, chúng tôi thiết lập luật mạnh số lớn cho dãy các phần tử ngẫu nhiên độc lập đôi một nhận giá trị trong không gian Banach.

Từ khoá: Luật mạnh số lớn (SLLN), hội tụ hầu chắc chắn (Hec), compact khả tích đều (CUI).

1. ĐẶT VẤN ĐỀ

Lý thuyết xác suất trên không gian Banach là một lĩnh vực được nhiều nhà khoa học quan tâm nghiên cứu và phát triển mạnh mẽ, thu được nhiều kết quả sâu sắc. Trong bài báo này chúng tôi chứng minh một bổ đề về luật mạnh số lớn cho dãy các biến ngẫu nhiên thực đôi một độc lập. Từ đó chúng tôi thu được luật mạnh số lớn cho dãy các phần tử ngẫu nhiên đôi một độc lập nhận giá trị trong không gian Banach.

2. NỘI DUNG

2.1. Phần chuẩn bị

Trong bài báo này (Ω, \mathcal{F}, P) là không gian xác suất đầy đủ. Ξ là không gian Banach, không gian liên hợp của Ξ được ký hiệu là Ξ^* và $B(\Xi)$ là σ -đại số các tập Borel của Ξ .

Định nghĩa 2.1.1 Ta nói ánh xạ $X : \Omega \rightarrow \Xi$ là một phần tử ngẫu nhiên nếu $X^{-1}(B) \in \mathcal{F}$ với mọi $B \in B(\Xi)$.

Dưới đây, ta nêu lên một số khái niệm hội tụ của họ các phần tử ngẫu nhiên.

Định nghĩa 2.1.2 Giả sử $\{X, X_n : n \geq 1\}$ là họ các phần tử ngẫu nhiên cùng xác định trên Ω và nhận giá trị trong Ξ . Ta nói dãy $\{X_n : n \geq 1\}$ hội tụ đến phần tử ngẫu nhiên X :

Theo xác suất nếu với mọi $\varepsilon > 0$ thì

$$\lim_{n \rightarrow \infty} P(\|X_n - X\| > \varepsilon) = 0$$

Hầu chắc chắn nếu

$$P\left(\lim_{n \rightarrow \infty} \|X_n - X\| = 0\right) = 1$$

Định nghĩa 2.1.3. Dãy các phần tử ngẫu nhiên $\{X_n : n \geq 1\}$ gọi là “Compact khả tích đều” nếu với mỗi $\varepsilon > 0$, tồn tại tập compact K_ε của Ξ sao cho

¹ Giảng viên khoa Khoa học Tự nhiên, Trường Đại học Hồng Đức

$$\sup_{n \geq 1} E\left(\|X_n\| I\{X_n \notin \mathcal{K}_\varepsilon\}\right) \leq \varepsilon.$$

Giá trị kỳ vọng của một phần tử ngẫu nhiên được định nghĩa bởi tích phân Pettis [6] như sau:

Định nghĩa 2.1.4. Giả sử $X : \Omega \rightarrow \Xi$ là một phần tử ngẫu nhiên. Phần tử $EX \in \Xi$ được gọi là kỳ vọng của X nếu: $f(EX) = E(f(X))$ với mọi $f \in \Xi^*$.

2.2. Luật mạnh số lớn cho các phần tử ngẫu nhiên đôi một độc lập

Để thiết lập kết quả chính trong phần này, đầu tiên ta cần chứng minh bổ đề sau

Bổ đề 2.2.1. Cho $\{X_i : i \geq 1\}$ là dãy các biến ngẫu nhiên không âm đôi một độc lập với moment bậc hai hữu hạn sao cho:

(a) $\sup_{i \geq 1} EX_i < \infty$

(b) $\sum_{i=1}^{\infty} \frac{EX_i^2}{i^2} < \infty$

Khi đó ta thu được luật mạnh số lớn $\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (X_i - EX_i) \xrightarrow{hcc} 0$, khi $n \rightarrow \infty$

Chứng minh.

Cho $a > 1$, đặt $n_k = [a^k]$. Với C là một hằng số tùy ý nào đó và δ là số dương bất kỳ, theo bất đẳng thức Chebyshev ta có

$$\sum_{k=1}^{\infty} P\left(\left|\frac{S_{n_k} - ES_{n_k}}{n_k}\right| > \delta\right) \leq \frac{1}{\delta^2} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{Var S_{n_k}}{n_k^2} \leq C \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\sum_{i=1}^{n_k} EX_i^2}{n_k^2} \leq C \sum_{i=1}^{\infty} \frac{EX_i^2}{i^2} < \infty \quad (\text{theo (b)})$$

Bởi bổ đề Borel-Cantelli, ta thu được $\frac{S_{n_k} - ES_{n_k}}{n_k} \xrightarrow{hcc} 0$, khi $n \rightarrow \infty$

Với mỗi n nguyên dương, tồn tại số tự nhiên k sao cho $n_k \leq n < n_{k+1}$. Ta có đánh giá sau:

$$\frac{S_n - ES_n}{n} \leq \frac{|S_{n_{k+1}} - ES_{n_{k+1}}|}{n} + \frac{ES_{n_{k+1}} - ES_{n_k}}{n} \leq \frac{|S_{n_{k+1}} - ES_{n_{k+1}}|}{n_{k+1}} \cdot \frac{n_{k+1}}{n} + \frac{ES_{n_{k+1}} - ES_{n_k}}{n_k}$$

và

$$\frac{S_n - ES_n}{n} \geq -\frac{|S_{n_k} - ES_{n_k}|}{n} - \frac{ES_{n_{k+1}} - ES_{n_k}}{n} \geq -\frac{|S_{n_k} - ES_{n_k}|}{n_k} \cdot \frac{n_{k+1}}{n} - \frac{ES_{n_{k+1}} - ES_{n_k}}{n_k}$$

Khi $n \rightarrow \infty$ thì $k \rightarrow \infty$. Từ đó kéo theo

$$\limsup_{n \rightarrow \infty} \frac{S_n - ES_n}{n} \leq \sup_i (EX_i)(a-1) \quad (hcc)$$

$$\liminf_{n \rightarrow \infty} \frac{S_n - ES_n}{n} \geq -\sup_i (EX_i)(a-1) \quad (hcc)$$

Cho $a \downarrow 1$ ta thu được điều phải chứng minh

Định lý 2.2.2. Cho $\{X_i : i \geq 1\}$ là dãy các phần tử ngẫu nhiên đôi một độc lập và CUI.

Giả sử $\sum_{i=1}^{\infty} \frac{E\|X_i\|^2}{i^2} < \infty$, khi đó ta thu được luật mạnh số lớn

$$\sum_{i=1}^n \frac{X_i - EX_i}{n} \xrightarrow{hcc} 0, \text{ khi } n \rightarrow \infty$$

Chứng minh.

Với $\varepsilon > 0$, từ giả thiết suy ra tồn tại tập compact K_ε của Ξ sao cho $E(\|X_i\| I\{X_i \notin K_\varepsilon\}) < \varepsilon$ với mọi i . Từ tính compact của K_ε , tồn tại hữu hạn các điểm $\{x_1, x_2, \dots, x_p\}$ sao cho $K_\varepsilon \subset \bigcup_{i=1}^p B(x_i, \varepsilon)$, với $B(x_i, \varepsilon) = \{x \in \Xi : \|x - x_i\| < \varepsilon\}$.

Với mỗi $i \geq 1$, ta định nghĩa phần tử ngẫu nhiên sau

$$Y_i = Z_i I(X_i \in K_\varepsilon),$$

$$\text{với } Z_i = x_1 I[X_i \in B(x_1, \varepsilon)] + \sum_{j=2}^p x_j I\left[X_i \in B(x_j, \varepsilon) \cap \bigcup_{k=1}^{j-1} B(x_k, \varepsilon)^c\right]$$

Ta thấy Y_i là phần tử ngẫu nhiên nhận hữu hạn giá trị và dãy $\{Y_i : i \geq 1\}$ là đôi một độc lập. Bởi bất đẳng thức tam giác, ta có

$$\begin{aligned} \left\| \sum_{i=1}^n \frac{X_i - EX_i}{n} \right\| &\leq \left\| \sum_{i=1}^n \frac{X_i - X_i I(X_i \in K_\varepsilon)}{n} \right\| + \left\| \sum_{i=1}^n \frac{X_i I(X_i \in K_\varepsilon) - Y_i}{n} \right\| + \left\| \sum_{i=1}^n \frac{Y_i - EY_i}{n} \right\| \\ &\quad + \left\| \sum_{i=1}^n \frac{EY_i - EX_i I(X_i \in K_\varepsilon)}{n} \right\| + \left\| \sum_{i=1}^n \frac{EX_i I(X_i \in K_\varepsilon) - EX_i}{n} \right\| \\ &:= (A_1) + (A_2) + (A_3) + (A_4) + (A_5) \end{aligned}$$

Bây giờ ta sẽ đánh giá lần lượt tương ứng từ $(A_1) - (A_5)$:

Với (A_1) , ta có

$$\begin{aligned} (A_1) &= \left\| \sum_{i=1}^n \frac{X_i I(X_i \notin K_\varepsilon)}{n} \right\| \\ &\leq \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (\|X_i I(X_i \notin K_\varepsilon)\| - E\|X_i I(X_i \notin K_\varepsilon)\|) + \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n E\|X_i I(X_i \notin K_\varepsilon)\| \\ &\leq \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (\|X_i I(X_i \notin K_\varepsilon)\| - E\|X_i I(X_i \notin K_\varepsilon)\|) + \varepsilon \end{aligned}$$

Đề ý rằng dãy $\{\|X_i I(X_i \notin \mathcal{K}_\varepsilon)\| : i \geq 1\}$ là độc lập đôi một với $\sup_{i \geq 1} E\|X_i I(X_i \notin \mathcal{K}_\varepsilon)\| < \infty$

$$\text{Và } \sum_{i=1}^{\infty} \frac{E\|X_i I(X_i \notin \mathcal{K}_\varepsilon)\|}{i^2} \leq \sum_{i=1}^{\infty} \frac{E\|X_i\|}{i^2} < \infty$$

Do đó, áp dụng bổ đề 2.2.1 ta có

$$\limsup_{n \rightarrow \infty} \left\| \sum_{i=1}^n \frac{X_i I(X_i \notin \mathcal{K}_\varepsilon)}{n} \right\| \leq \varepsilon \quad (hcc)$$

Với (A_2) , bởi định nghĩa của Y_i , ta có

$$(A_2) = \left\| \sum_{i=1}^n \frac{X_i I(X_i \in \mathcal{K}_\varepsilon) - Y_i}{n} \right\| \leq \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \|X_i I(X_i \in \mathcal{K}_\varepsilon) - Y_i\| < \varepsilon$$

Với (A_3) , ta có: $Y_i = Z_i I(X_i \in \mathcal{K}_\varepsilon) = \sum_{j=1}^p x_j I(X_i = x_j)$

$$\text{và } EY_i = \sum_{j=1}^p x_j P(X_i = x_j)$$

$$\text{Do đó } (A_3) = \left\| \sum_{i=1}^n \frac{Y_i - EY_i}{n} \right\| \leq \sum_{j=1}^p \|x_j\| \left\| \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n [I(X_i = x_j) - P(X_i = x_j)] \right\|$$

Vì với mỗi $j = 1, 2, \dots, p$ thì dãy biến ngẫu nhiên thực $\{I(X_i = x_j) : i \geq 1\}$ là đôi một độc lập thỏa mãn bổ đề 2.2.1, nên ta có: $(A_3) \xrightarrow{hcc} 0, n \rightarrow \infty$.

Với (A_4) , ta có:

$$(A_4) = \left\| \sum_{i=1}^n \frac{EY_i - EX_i I(X_i \in \mathcal{K}_\varepsilon)}{n} \right\| \\ \leq \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \|E(Y_i - X_i I(X_i \in \mathcal{K}_\varepsilon))\| \leq \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n E\|Y_i - X_i I(X_i \in \mathcal{K}_\varepsilon)\| < \varepsilon$$

Với (A_5) , ta có:

$$(A_5) = \left\| \sum_{i=1}^n \frac{EX_i I(X_i \in \mathcal{K}_\varepsilon) - EX_i}{n} \right\| \leq \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n E\|X_i I(X_i \in \mathcal{K}_\varepsilon) - X_i\| \leq \varepsilon$$

Từ đó ta có:

$$\limsup_{n \rightarrow \infty} \left\| \sum_{i=1}^n \frac{X_i - EX_i}{n} \right\| \leq 4\varepsilon$$

Cho $\varepsilon \rightarrow 0$, ta có điều phải chứng minh.

3. KẾT LUẬN

Kết quả chính trong bài báo là Định lý 2.2.2. Trong định lý này nếu không gian là hữu hạn chiều thì điều kiện CUI tương đương với điều kiện khả tích đều.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

- [1] Nguyễn Duy Tiến, Vũ Việt Yên (2001), *Lý thuyết xác suất*, Nxb. Giáo dục, Hà Nội.
- [2] A.Bozorgnia and M. Bhaskara Rao (1978), *Some Remarks on the Strong Law of Large Numbers for Banach Space Valued Weakly Integrable Random Variables*, Journal of multivariate analysis 8, 579-583.
- [3] B. J. Pettis (1938), *On integration in vector spaces*, Trans. Amer. Math. Soc. 44, 277-304.
- [4] J. A. Cuesta and C. Matrán (1988), *Strong Convergence of Weighted Sums of Random Elements through the Equivalence of Sequences of Distributions*, Journal of multivariate analysis 25, 311-322.
- [5] N. Etemadi (1983), *On the Laws of Large Numbers for Nonnegative Random Variables*, Journal of multivariate analysis 13, 187-193.

**THE STRONG LAW OF LARGE NUMBERS FOR PAIRWISE
INDEPENDENT RANDOM ELEMENTS
IN BANACH SPACE**

Nguyen Thi Nga

ABSTRACT

In this paper, we establish the strong law of large numbers for sequence of pairwise independent random elements taking valued in Banach space.

Keywords: *Strong law of large number, almost sure convergence, compactly uniformly integrable (CUI).*

ẢNH HƯỞNG CỦA NỒNG ĐỘ ION Al^{3+} VÀ ĐIỀU KIỆN CÔNG NGHỆ TỚI TÍNH CHẤT QUANG CỦA MÀNG SILICA-TITANIA PHA TẠP ION Er^{3+} ỨNG DỤNG TRONG QUANG DẪN SÓNG

Lương Thị Kim Phượng¹, Lê Thị Giang²

TÓM TẮT

Màng thủy tinh silica-titania đồng pha tạp ion Al^{3+} và Er^{3+} được chế tạo bằng phương pháp sol-gel và kỹ thuật quay phủ trên đế silic. Mẫu được ủ nhiệt ở $900^{\circ}C$ trong thời gian từ 1 giờ đến 6 giờ với độ dày màng thay đổi từ 500nm đến 3000nm. Kính hiển vi điện tử quét SEM được dùng để đánh giá chất lượng bề mặt của màng cũng như mật độ các sai hỏng trên bề mặt. Kết quả phổ tán xạ Raman cho thấy các liên kết trong vật liệu có đặc trưng liên kết của vật liệu thủy tinh vô định hình với những đỉnh phổ đặc trưng như trong thủy tinh silica được chế tạo bằng phương pháp nóng chảy quartz. Ảnh hưởng của nồng độ ion Al^{3+} tới cường độ huỳnh quang đã được khảo sát khi nồng độ ion Al^{3+} thay đổi từ 1 đến 7%mol. Cường độ huỳnh quang đạt giá trị lớn nhất ứng với nồng độ ion Al^{3+} pha tạp là 5%mol. Ảnh hưởng của các điều kiện công nghệ như độ dày màng, thời gian ủ mẫu... đến khả năng phát quang của hệ mẫu cũng đã được khảo sát.

Từ khoá: Thủy tinh silica-titania, ion Al^{3+} , ion Er^{3+} , sol-gel, huỳnh quang, màng dẫn sóng.

1. ĐẶT VẤN ĐỀ

Vật liệu thủy tinh đa thành phần pha tạp các ion đất hiếm đã thu hút được nhiều sự quan tâm nghiên cứu của các nhà khoa học trong nước và trên thế giới vì những ứng dụng to lớn của nó trong lĩnh vực quang dẫn sóng, kể cả cho sợi quang và các kênh dẫn sóng phẳng. Một trong những yêu cầu chính của vật liệu chế tạo sợi quang là khả năng giam giữ ánh sáng trong nó, do đó giá trị của chiết suất vật liệu cũng là vấn đề cần được quan tâm nghiên cứu. Để tăng chiết suất của vật liệu người ta có thể pha trộn các loại thủy tinh khác nhau với thủy tinh silica như GeO_2 , P_2O_5 , TiO_2 ... Các nghiên cứu cho thấy khi pha tạp GeO_2 vào silica, nó làm tăng chỉ số khúc xạ của vật liệu, đồng thời cho phép giam hãm ánh sáng lớn khi các dẫn sóng được chế tạo. Vật liệu $SiO_2 - TiO_2$ nổi lên như một hệ thủy tinh có nhiều ứng dụng quan trọng, nhất là trong lĩnh vực dẫn sóng bởi tính ổn định và khả năng thay đổi chiết suất của chúng nhờ việc điều khiển tỷ lệ SiO_2/TiO_2 [7]. Một số nghiên cứu đã chỉ ra rằng, khi pha trộn TiO_2 vào mạng nền của thủy tinh SiO_2 thì chỉ số khúc xạ có thể tăng từ 1,46 đến 1,73. Chỉ số khúc xạ phụ thuộc vào nồng độ Ti trong mẫu theo hàm bậc nhất [2]. Tuy nhiên trong thực tế, TiO_2 có thể hình thành tinh thể khi xử lý nhiệt với nhiệt độ tạo tinh thể của TiO_2 khoảng $450-850^{\circ}C$ [5]. Nhiệt độ này có thể cao hơn khi TiO_2 được pha trộn vào

¹ Phòng Quản lý Đào tạo Sau Đại học, Trường Đại học Hồng Đức

² Giảng viên khoa Kỹ thuật Công nghệ, Trường Đại học Hồng Đức

vật liệu khác. Những mảng tinh thể đó sẽ tán xạ ánh sáng và gây mất mát năng lượng, do đó thành phần pha trộn và quy trình chế tạo phải được nghiên cứu để tránh sự tạo thành pha tinh thể trong vật liệu. Kết quả của một số nghiên cứu cho thấy khi tỷ lệ $\text{SiO}_2:\text{TiO}_2$ là 80:20 thì hệ vật liệu có chiết suất khoảng 1,56 và sự phân pha giữa SiO_2 và TiO_2 vẫn chưa xảy ra [4,9].

Sau đó sự phát huỳnh quang của ion Er^{3+} xung quanh bước sóng 1530 nm được quan tâm rất nhiều mà mục đích của nó là sử dụng hiệu ứng này để tăng hiệu suất cho bộ khuếch đại quang. Vật liệu thủy tinh silica cho tổn hao quang thấp nhất với tín hiệu ở xung quanh bước sóng 1530 nm. Không phải ngẫu nhiên mà người ta pha tạp Er^{3+} vào vật liệu silica, lý do ở đây là khả năng bù suy hao của ion Er^{3+} khi pha tạp vào mạng nền, do đặc trưng các mức năng lượng của nó [3,8,10,11].

Sợi thủy tinh pha tạp ion Er^{3+} đã được chuyển từ nghiên cứu sang công nghiệp trong thời gian rất ngắn và nhanh chóng mở ra ứng dụng trong các mạng viễn thông với khoảng cách lớn. Tuy nhiên, vẫn tồn tại một số khó khăn trong việc tích hợp quang học trong một thiết bị quang nên các nhà khoa học vẫn đang cố gắng làm ra các bộ tích hợp quang và dẫn sóng với kích thước cỡ một vài cm. Điều khác nhau cơ bản trong chế tạo sợi quang và những bộ khuếch đại dẫn sóng là khoảng cách từ vài mét tới vài chục mét cho quãng đường quang học thì thích hợp với sợi do vậy có thể pha tạp Er^{3+} với nồng độ thấp. Tuy nhiên trong các bộ dẫn sóng phẳng có pha tạp Er^{3+} thì khả năng cung cấp hệ số khuếch đại cao trong khoảng cách vài cm là một yêu cầu, do vậy nồng độ Er^{3+} trong đó đòi hỏi phải cao hơn. Khi pha tạp ở nồng độ cao các ion Er^{3+} có xu hướng tạo đám nên làm tăng khả năng tái hợp không bức xạ do các ion Er^{3+} bị kích thích truyền năng lượng cho các ion ở lân cận. Vì vậy, khả năng cô lập các ion Er^{3+} với các ion khác càng cao càng tốt là một thông số quan trọng cho việc lựa chọn vật liệu quang dẫn sóng. Khó khăn đặt ra là SiO_2 có liên kết cộng hóa trị bền vững nên việc pha tạp Er^{3+} ở nồng độ cao là không dễ dàng. Vấn đề này có thể được giảm bớt khi đồng pha tạp nhôm vào mạng nền của SiO_2 .

Trong bài báo này, chúng tôi tiến hành nghiên cứu vai trò của ion Al^{3+} pha tạp vào mạng nền của thủy tinh $\text{SiO}_2:\text{TiO}_2$ trong việc phân tán các ion Er^{3+} pha tạp nhờ hình thành các liên kết Si-O-Al-O-Er. Từ đó nghiên cứu ảnh hưởng của nồng độ ion Al^{3+} và một số điều kiện công nghệ lên tính chất quang màng thủy tinh đa thành phần.

2. NỘI DUNG

2.1. Thực nghiệm

Hoá chất để tiến hành thí nghiệm có các thông số cơ bản như trong bảng 1.

Bảng 1. Tên hoá chất và các thông số cơ bản được sử dụng để chế tạo mẫu

STT	Tên hóa chất	Nồng độ (độ sạch)	Nguồn gốc
1	TEOS ($\text{Si}(\text{OC}_2\text{H}_5)_4$)	98,0%	Merk, Đức
2	TPOT ($\text{Ti}(\text{OC}_3\text{H}_7)_4$)	98,0%	Merk, Đức
3	$\text{Al}(\text{NO}_3)_3.9\text{H}_2\text{O}$	98,5%	Merk, Đức

4	$\text{Er}(\text{NO}_3)_3 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$	99,0%	Merk, Đức
5	$\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$	99,8%	Merk, Đức
6	H_2O	100,0%	Phòng sạch viện ITIMS
7	HNO_3	65,0%	Merk, Đức

Quy trình tạo mẫu theo phương pháp sol-gel và kỹ thuật quay phủ được thực hiện qua các bước như sau:

Tạo hỗn hợp của TEOS (Tetra Etanol Ortho Silica), Etanol, nước và axit nitric với tỉ lệ mol: 1: 30: 2: 0,01 và khuấy từ từ ở 70°C trong vòng 60 phút. Sau đó TPOT (Tetra Propanol Ortho Titana) được đưa vào hỗn hợp thu được theo tỉ lệ TPOT : TEOS= 1 : 4. Tiếp đó, các muối $\text{Er}(\text{NO}_3)_3 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$ và $\text{Al}(\text{NO}_3)_3 \cdot 9\text{H}_2\text{O}$ được pha vào dung dịch với các nồng độ khác nhau.

Sau cùng, dung dịch Sol đồng nhất được quay phủ trên đế bằng máy spin-coating. Kích thước của đế cỡ 1,2 x 2cm, tốc độ quay phủ là 3000vòng/phút và thời gian quay phủ là 20 giây. Mẫu được xử lý nhiệt nhanh ở 900°C trong vòng 50 giây sau mỗi lần quay phủ, sau đó mẫu được ủ nhiệt ở 900°C với thời gian ủ từ 1 đến 6 giờ.

Kính hiển vi điện tử quét (SEM) được sử dụng để biết được những thông tin cần thiết về hình thái bề mặt của màng, một trong những yếu tố quan trọng liên quan trực tiếp đến tổn hao quang học trong quá trình truyền dẫn.

Phổ tán xạ Raman được dùng để xem xét các liên kết hình thành trong vật liệu, thông qua các dao động đặc trưng của liên kết đó. Phép đo này được tiến hành tại bộ môn Hóa dầu-khoa Hóa, thuộc Trường Đại học Bách khoa Hà Nội.

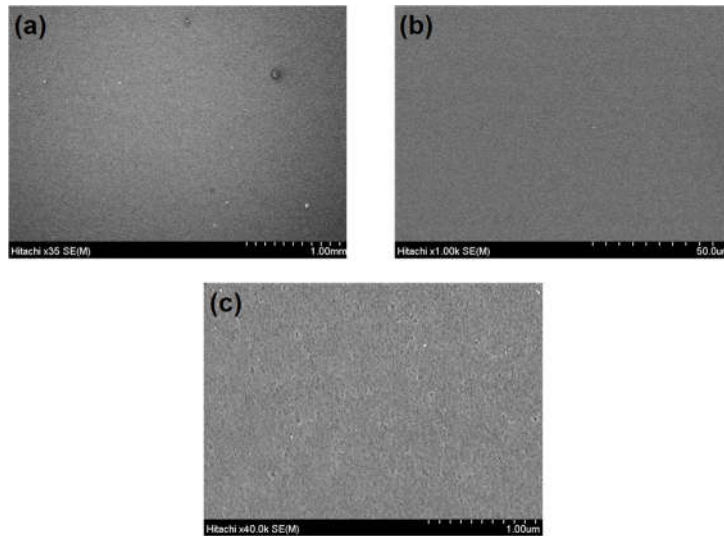
Một số kết quả đo phổ huỳnh quang trong vùng hồng ngoại của nghiên cứu này được tiến hành trên hệ đo Raman với bước sóng kích thích của laze là 1064nm và một số kết quả khác được tiến hành ở cộng hoà Pháp với bước sóng của laze kích thích là 976nm.

2.2. Kết quả và thảo luận

Suy hao quang trong quá trình dẫn sóng là một vấn đề lớn cần hạn chế, vì vậy yêu cầu về chất lượng màng và chất lượng tinh thể được đặt ra hàng đầu. Bề mặt màng thu được phải đồng đều, không có các sai hỏng hay các vết rạn nứt trên bề mặt, chiết suất của vật liệu đồng đều trong toàn bộ màng. Như thế sẽ tránh được các loại tổn hao quang trong quá trình dẫn sóng như: tổn hao do tán xạ, tổn hao do tán sắc... Trong đó, nguyên nhân của tổn hao do tán xạ là do độ gồ ghề và các sai hỏng hình thành trên bề mặt màng trong quá trình chế tạo, các sai hỏng đó sẽ trở thành các tâm tán xạ và làm mất mát năng lượng. Còn sự không đồng đều của chiết suất sẽ gây ra tổn hao do tán sắc, làm cho tia sáng bị lệch hướng và gây nên tổn hao quang trong quá trình truyền sóng.

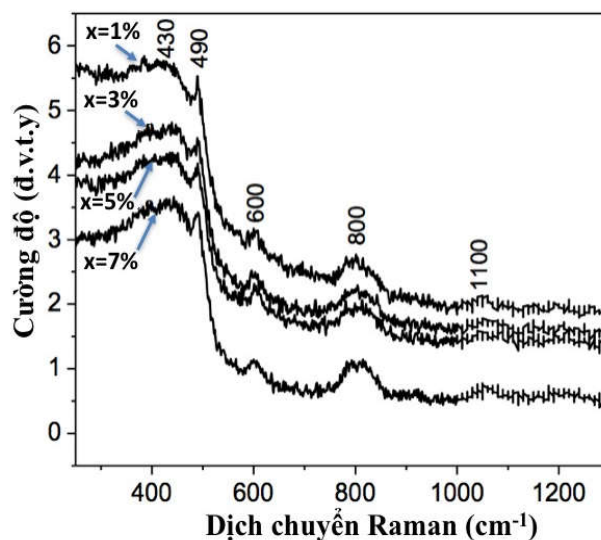
Hình thái bề mặt của các màng sau khi chế tạo được kiểm tra thông qua ảnh hiển vi điện tử quét (SEM) với các độ phóng đại khác nhau được trình bày trên hình 1.

Kết quả từ ảnh SEM cho thấy với các độ phóng đại khác nhau, bề mặt màng thu được có độ đồng nhất cao, các vết rạn nứt hay các điểm sai hỏng hầu như không quan sát thấy trên bề mặt màng khi độ phóng đại lên tới 40.000 lần.



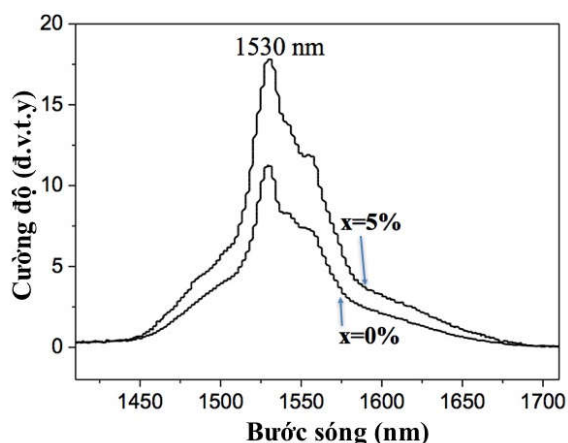
Hình 1. Ảnh hiển vi điện tử quét (SEM) của màng với các độ phóng đại khác nhau (a) $\times 35$ lần; (b) $\times 1.000$ lần và (c) $\times 40.000$ lần

Để xem xét việc hình thành các liên kết đặc trưng của vật liệu thủy tinh silica trong mẫu, chúng tôi tiến hành đo phổ tán xạ Raman để xem xét các liên kết đó (hình 2). Các mẫu màng $80\text{SiO}_2:20\text{TiO}_2:x\%\text{Al}^{3+}:0.5\%\text{Er}^{3+}$ với $x=1\%$, 3% , 5% và 7% ; $0,5\%$ được kích thích bằng nguồn laser với bước sóng kích thích $\lambda=1064\text{nm}$, được quét trong toàn bộ dải sóng từ 250cm^{-1} đến 1300cm^{-1} . Công suất nguồn bơm là 800mW và góc mở của detector là 30° . Từ kết quả đo phổ Raman ta thấy có xuất hiện những đỉnh phổ đặc trưng cho các liên kết của vật liệu thủy tinh silica. Vùng có tâm ở 430cm^{-1} là do dao động uốn cong của liên kết Si-O-Si, trong khi đó đỉnh phổ 800cm^{-1} là do dao động của liên kết đối xứng Si-O-Si tạo ra.



Hình 2. Phổ tán xạ Raman của hệ mẫu màng $80\text{SiO}_2:20\text{TiO}_2:x\%\text{Al}^{3+}:0.5\%\text{Er}^{3+}$ với $x=1\%$, 3% , 5% và 7%

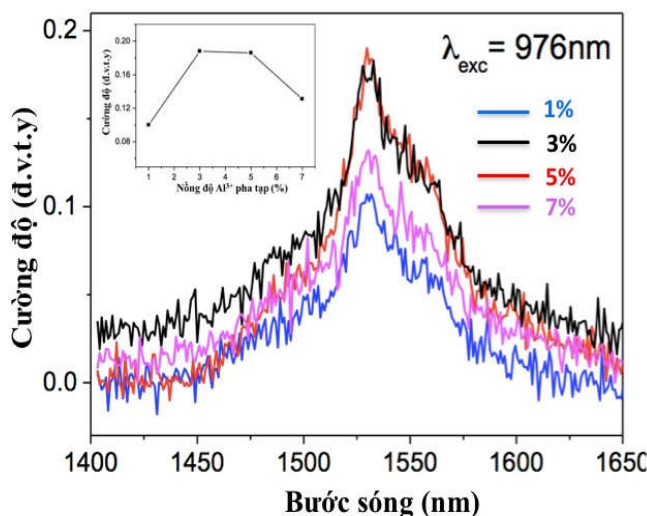
Các đỉnh phổ ứng với bước sóng 1100cm^{-1} được cho là do mode dao động LO của liên kết bất đối xứng Si-O-Si trong vật liệu [1]. Ngoài ra, những đỉnh phổ Raman ở 490cm^{-1} và 600cm^{-1} cũng xuất hiện, đó là vị trí gây ra bởi các sai hỏng D1, D2 của mạng thủy tinh silica [6]. Vùng ở 430cm^{-1} và 800cm^{-1} là do quá trình đa ngưng tụ tạo thành, làm cho các liên kết Si-O-Si được hình thành trong cấu trúc của vật liệu do quá trình xử lý nhiệt. Những đỉnh này xuất hiện như trong thủy tinh silica được chế tạo bằng phương pháp nóng chảy Quartz [1]. Như vậy, có thể khẳng định rằng, các liên kết thu được từ các màng được chế tạo bằng phương pháp quay phủ từ dung dịch sol-gel ban đầu là khá phù hợp so với các liên kết đặc trưng của vật liệu thủy tinh silica được chế tạo bằng phương pháp nóng chảy Quartz. Vấn đề này có vai trò rất quan trọng trong việc đánh giá chất lượng của mẫu chế tạo bằng phương pháp quay phủ so với mẫu chế tạo bằng các phương pháp khác.



Hình 3. Phổ huỳnh quang trong vùng hồng ngoại của màng $80\text{SiO}_2:20\text{TiO}_2:x\%\text{Al}^{3+}:0,5\%\text{Er}^{3+}$ với nồng độ Al^{3+} pha tạp là 0% và 5% và bước sóng kích thích $\lambda=1064\text{ nm}$

Hình 3 là phổ huỳnh quang trong vùng hồng ngoại của màng $80\text{SiO}_2:20\text{TiO}_2:x\%\text{Al}^{3+}:0,5\%\text{Er}^{3+}$ với nồng độ Al^{3+} pha tạp là 0 và 5%, được phủ trên đế Quartz, kích thích bởi nguồn laser có bước sóng $\lambda=1064\text{nm}$, quét trong dải sóng 1350 - 1750nm, công suất kích là 800mW và góc mở của detector là 60° . Từ hình vẽ ta thấy có một đỉnh ở 1530 nm và một vai phổ ở 1560nm, nó đặc trưng cho quá trình dịch chuyển bức xạ từ $^4\text{I}_{13/2} \rightarrow ^4\text{I}_{15/2}$ của ion Er^{3+} . Độ rộng phổ trong cả hai trường hợp có pha tạp nhôm và không pha tạp nhôm là tương đối giống nhau và độ bán rộng vào khoảng gần 50nm. Sự mở rộng này bao gồm sự mở rộng đồng nhất và không đồng nhất. Vì khi đó sự tương tác của trường mạng nền đối với các ion Er^{3+} có sự thay đổi cũng như có sự thay đổi trong tương tác giữa các ion Er^{3+} khi thay đổi khoảng cách giữa chúng, dẫn tới sự tách vạch Stark và mở rộng phổ. Hơn nữa, thực tế các ion Er^{3+} không thể có vị trí hoàn toàn giống nhau, nghĩa là có sự khác biệt trong môi trường cục bộ của mỗi ion, dẫn tới sự mở rộng phổ không đồng nhất. Từ kết quả trên hình 3 ta cũng thấy cường độ huỳnh quang của mẫu có pha tạp ion Al^{3+} cao hơn nhiều so với mẫu không có Al^{3+} . Khi Al^{3+} được đưa vào mạng nền nó có thể tồn tại theo 2 dạng, đó là dưới dạng nhóm $\text{AlO}_{4/2}$ trong mạng chuẩn (formal network) và dưới dạng nhóm

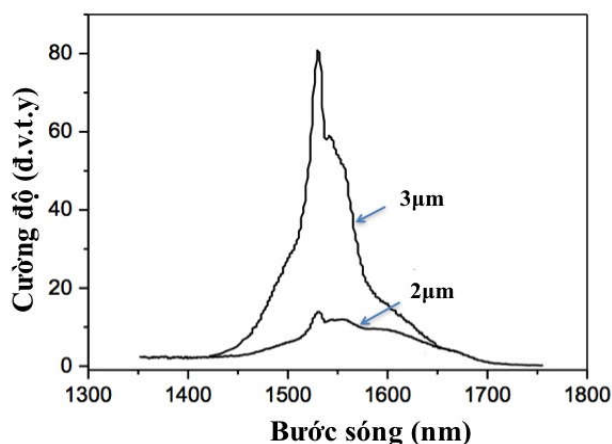
$\text{AlO}_{6/2}$ trong mạng cải biên (modified network) [6]. Trong mạng chuẩn, Al^{3+} sẽ thay thế vị trí của Si, silic tồn tại ở trạng thái Si^{4+} còn nhôm tồn tại ở trạng thái Al^{3+} nên khi sự thay thế này càng nhiều thì tạo ra càng nhiều nhóm AlO_4^- , các ion đất hiếm có xu hướng tiến lại gần nhóm này để tạo ra sự cân bằng về điện và làm cho các ion Er^{3+} phân tán đều trong mạng nền. Còn trong trường hợp hình thành mạng cải biên thì ion Al^{3+} làm đứt gãy các liên kết Si-O-Si làm ion Er^{3+} đi vào mạng nền dễ dàng hơn đồng thời nó tạo ra các nhóm Al-O có thể phân tán các đám Er-O-Er thông qua hình thành liên kết Si-O-Al-O-Er... Như vậy, các nhóm $\text{AlO}_{4/2}$ và $\text{AlO}_{6/2}$ có thể hoạt động như những phần tử hòa tan trong mạng nền đối với các ion đất hiếm.



Hình 4. Phổ huỳnh quang trong vùng hồng ngoại của màng $80\text{SiO}_2:20\text{TiO}_2:x\%\text{Al}^{3+}:0,5\%\text{Er}^{3+}$ với nồng độ Al^{3+} pha tạp khác nhau: 1%-xanh, 3%-đen, 5%-đỏ và 7%-hồng

Ngoài ra, do bán kính ion của Al^{3+} lớn hơn bán kính của ion Si^{4+} nên nó sẽ làm giãn mạng silica, tạo khung oxit rộng hơn nên các ion Er^{3+} có nhiều cơ hội để tổ hợp vào mạng nền hơn và làm cho cường độ huỳnh quang của mẫu tăng lên. Cùng với việc nghiên cứu trên đế Quartz, để xác định nồng độ ion Al^{3+} pha tạp tối ưu, chúng tôi tiến hành phân tích phổ huỳnh quang trong vùng hồng ngoại của hệ mẫu màng $80\text{SiO}_2:20\text{TiO}_2:x\%\text{Al}^{3+}:0,5\%\text{Er}^{3+}$ với dải nồng độ ion Al^{3+} pha tạp là 1%, 3%, 5% và 7% được phủ trên đế silicon-silica, bước sóng của laze kích thích là 976nm (hình 4). Kết quả cho thấy khi tăng nồng độ ion Al^{3+} pha tạp từ 1%mol đến 3%mol thì cường độ huỳnh quang tăng lên và đạt đến trạng thái bão hòa ở nồng độ pha tạp là 5%mol. Tiếp tục tăng nồng độ Al^{3+} pha tạp đến 7%mol, thì cường độ huỳnh quang của màng giảm mạnh (hình 5). Điều này được giải thích như sau: ở nồng độ Al^{3+} pha tạp thấp ($\leq 5\%$ mol), sẽ giúp cho các ion Er^{3+} pha tạp phân bố đồng đều hơn trong mạng silica và làm cho cường độ huỳnh quang của mẫu tăng lên. Tuy nhiên, khi nồng độ ion Al^{3+} pha tạp tiếp tục tăng lên, sẽ xuất hiện sự phân pha trong vật liệu, dẫn tới sự hình thành các pha giàu ion Al^{3+} và các pha nghèo ion Al^{3+} làm giảm cường độ huỳnh quang của

mẫu. Ngoài ra, ion Al^{3+} là nguyên tố có bán kính ion khá lớn nên nếu lượng ion Al^{3+} được đưa vào càng nhiều thì lại làm cho vật liệu trở nên xốp hơn, nghĩa là vật liệu lại kém xếp chặt hơn và dễ gây ra các sai hỏng. Như vậy, với một nồng độ pha tạp 0,5%mol Er^{3+} thì lượng ion Al^{3+} tối ưu được đưa vào vật liệu là 5%mol. So với kết quả nghiên cứu của một số nhóm trên thế giới như nhóm của Xavier Ogirnac có tỉ lệ tối ưu: $80\text{SiO}_2:20\text{TiO}_2:0,31\%\text{Er}^{3+}:5\%\text{Al}^{3+}$ thì trong nghiên cứu này tỉ lệ mol của ion Er^{3+} được tích hợp vào mạng nền nhiều hơn [12].

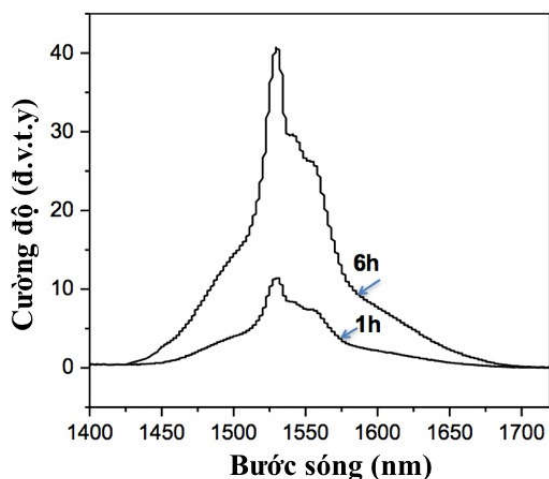


Hình 5. Cường độ huỳnh quang của màng theo chiều dày màng khác nhau: 40 lớp và 60 lớp

Để đánh giá ảnh hưởng của chiều dày màng đến khả năng dẫn sóng của màng thủy tinh đa thành phần, chúng tôi đã tiến hành chế tạo màng $80\text{SiO}_2:20\text{TiO}_2:5\%\text{Al}^{3+}:0,5\%\text{Er}^{3+}$ với chiều dày màng khác nhau. Hình 5 là phổ huỳnh quang trong vùng hồng ngoại của màng 40 lớp (chiều dày $\sim 2\mu\text{m}$) và màng 60 lớp (chiều dày $3\mu\text{m}$). Kết quả cho thấy cường độ huỳnh quang của màng 60 lớp lớn hơn nhiều so với màng 40 lớp. Nguyên nhân là khi chiều dày màng tăng lên thì với cùng một điểm laze chiếu, số ion Er^{3+} nhận được sự kích thích sẽ nhiều hơn, dẫn tới cường độ huỳnh quang tăng lên. Khi tăng số lần quay phủ từ 40 lớp lên 60 lớp thì cường độ huỳnh quang của các ion đất hiếm tăng lên nhiều, nhưng nếu tiếp tục tăng số lần quay phủ với quy trình xử lý nhiệt nhanh ở 900°C trong vòng 50 giây thì khi màng càng dày thì sự khác biệt do sự giãn nở vì nhiệt của màng và đế càng lớn, dẫn tới xuất hiện những ứng suất gây rạn nứt màng. Ngoài ra, để chế tạo lớp dẫn sóng đơn mode ứng với bước sóng 1530nm thì độ dày của lớp dẫn không cần quá lớn (chỉ cỡ $1,5\mu\text{m}$), do vậy trong nghiên cứu này chúng tôi chỉ tiến hành khảo sát màng với số lần quay phủ tối đa là 60 lớp.

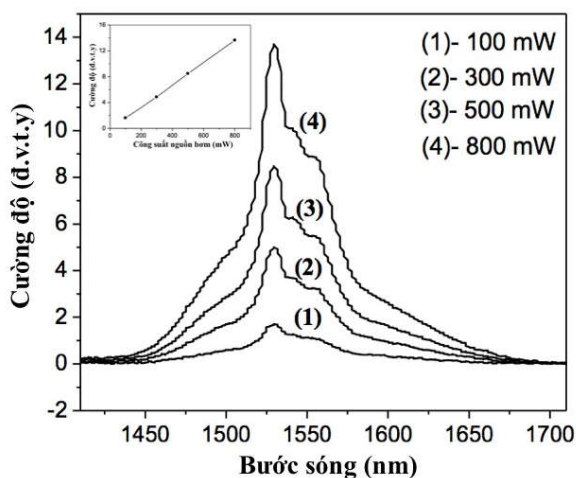
Với việc sử dụng phương pháp quay phủ từ dung dịch sol-gel để chế tạo màng, thì quy trình xử lý nhiệt ảnh hưởng rất lớn đến chất lượng mẫu. Hình 6 là phổ huỳnh quang trong vùng hồng ngoại của mẫu màng $80\text{SiO}_2:20\text{TiO}_2:5\%\text{Al}^{3+}:0,3\%\text{Er}^{3+}$, được ủ ở nhiệt độ 900°C , trong môi trường không khí với thời gian ủ là 1 giờ và 6 giờ. Kết quả cho thấy, cường độ huỳnh quang của mẫu ủ ở 6 giờ lớn hơn rất nhiều so với ủ mẫu ở 1 giờ, vì khi thời gian ủ mẫu tăng lên, sẽ giúp cho việc đốt cháy hoàn toàn các tạp chất hữu cơ trong mẫu và

tăng cường sự thoát nước ra khỏi mẫu, từ đó góp phần loại bỏ sự có mặt của nhóm OH, là nhóm gây ra sự tổn hao quang trong vật liệu. Ngoài ra khi tăng thời gian ủ sẽ giúp cho quá trình co ngót và xếp chặt được hoàn thiện hơn, tạo ra một cấu trúc vật liệu thực sự ổn định.



Hình 6. Cường độ huỳnh quang của màng $80\text{SiO}_2:20\text{TiO}_2:5\%\text{Al}^{3+}:0,3\%\text{Er}^{3+}$ khi được ủ ở 900°C với thời gian khác nhau: 1 giờ và 6 giờ

Cường độ huỳnh quang của mẫu $80\text{SiO}_2:20\text{TiO}_2:5\%\text{Al}^{3+}:0,3\%\text{Er}^{3+}$ phụ thuộc vào công suất nguồn laze (100 - 800 mW) được chỉ ra trên hình 7. Ta thấy rằng, khi công suất bơm tăng lên thì cường độ huỳnh quang của mẫu tăng lên khá đều đặn (hình lồng).



Hình 7. Cường độ huỳnh quang của màng $80\text{SiO}_2:20\text{TiO}_2:5\%\text{Al}^{3+}:0,3\%\text{Er}^{3+}$ khi công suất nguồn bơm thay đổi

Nguyên nhân là do khi tăng công suất nguồn bơm thì số photon kích thích tới một đơn vị diện tích mẫu tăng nên số ion Er^{3+} bị kích thích để chuyển từ mức cơ bản lên mức $^4\text{I}_{11/2}$ và các mức trên cũng tăng lên, dẫn tới số ion Er^{3+} chuyển mức từ $^4\text{I}_{13/2}$ về $^4\text{I}_{15/2}$ tăng và làm tăng cường độ huỳnh quang của mẫu.

3. KẾT LUẬN

Chế tạo thành công màng $80\text{SiO}_2: \text{TiO}_2: \text{Al}^{3+}: \text{Er}^{3+}$ bằng công nghệ sol-gel và kỹ thuật quay phủ với độ dày màng từ 500nm đến 3000nm. Màng được xử lý nhiệt ở nhiệt độ 900°C trong thời gian 1 giờ - 6 giờ. Kết quả chụp SEM cho thấy màng có độ đồng đều cao và không có các sai hỏng cũng như rạn nứt trên bề mặt của màng khi độ phóng đại lên tới 40.000 lần.

Các liên kết đặc trưng của vật liệu thủy tinh silica-titana được khẳng định từ kết quả đo phổ tán xạ Raman của hệ mẫu. Phổ huỳnh quang của các mẫu được khảo sát trong vùng hồng ngoại với bước sóng xung quanh 1530nm. Cường độ huỳnh quang tăng lên khi nồng độ nhôm tăng từ 1% tới 5% mol nhưng sau đó lại giảm đi khi nồng độ Al^{3+} tiếp tục tăng. Cường độ huỳnh quang cao nhất khi tỉ lệ mol của ion Al^{3+} và Er^{3+} trong vật liệu nền $80\text{SiO}_2:20\text{TiO}_2$ là $5\%\text{Al}^{3+}:0,5\%\text{Er}^{3+}$.

Khi khảo sát sự phụ thuộc cường độ huỳnh quang vào các điều kiện công nghệ như thời gian ủ nhiệt, độ dày màng và công suất nguồn bơm chúng tôi nhận thấy rằng cường độ huỳnh quang của mẫu ở vùng bước sóng 1530nm tỷ lệ thuận với thời gian ủ nhiệt, độ dày màng và công suất nguồn bơm.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

- [1] Trần Ngọc Khiêm, Lương Thị Kim Phụng, Phạm Thành Huy, Nguyễn Đức Chiến, Maurizio Ferrari (2005), *Silica-Alumina Xerogel đồng pha tạp Er^{3+} và Yb^{3+} : quá trình chế tạo và các tính chất*, Hội nghị vật lý toàn quốc, Hà Nội.
- [2] A. Bahtat, M. Bouazaoui, M. Bahtat, C. Garapon, B. Jacquier, J. Mugnier (1996), *Up-conversion fluorescence spectroscopy in Er^{3+} : TiO_2 planar waveguides prepared by sol-gel process*, Journal of Non-Crystalline Solids 202, 16-22.
- [3] A. Polman (2000), *Exciting erbium-doped planar optical amplifier materials*, Proc. SPIE 3942, 2
- [4] C. Bernard, S. Chaussedent, A. Monteil (2002), *Molecular dynamics simulation of an erbium-activated titania-silica glass: composition influence on the structural properties*, Philosophical Magazine B 82, 681-693.
- [5] K.B. Bennett, F. David, P.A. Jakobson, N. Jolley, R. Keys, M.A. Newhouse, S. Sheih, M.J. Yadlowsky (1997), *980 nm based pump wavelength tuning of the gain spectrum of EDFAs*, OSA Trends in Optical and Photonics, 16, 152-155.
- [6] Khiem Tran Ngoc (2005), *Sol-gel-derived Er^{3+} activated multicomponent silica glasses for photonics*, Doctor thesis, Italia.
- [7] L.Q. Minh, N.T. Huong, C. Barthou, P. Bernalloul, W. Streck and T.K. Anh (2002), *Eu^{3+} - and Er^{3+} -doped $\text{SiO}_2\text{-TiO}_2$ sol-gel films for active planar waveguides*, Materials Science, 20, 2.

- [8] M.P. Hehlen, N.J. Cockroft, T.R. Gosnell (1997), *Spectroscopy properties of Er³⁺ and Yb³⁺ doped soda-lime silicate and alumino silicate glasses*, Physical Review B 56, 9302-9318.
- [9] P.C. Becker, N.A. Olsson, J.R. Simpson (1990), *Erbium-Doped Fiber Amplifiers*, Academic Press, San Diego.
- [10] R. R. Gonçalves, G. Carturan, L. Zampedri, M. Ferrari, M. Montagna, A. Chiasera, G. C. Righini, S. Pelli, S. J. L. Ribeiro, and Y. Messaddeq (2002), *Sol-gel Er-doped SiO₂ - HfO₂ planar waveguides: A viable system for 1.5 m application*, Applied Physics Letters 8, 28.
- [11] S. Hufner (1978), *Optical Spectra of Rare Earth Compounds*, Academic Press New York.
- [12] Xavier Ogirnac, Denis Barbie, Xin Min Du, Rui M. Almeida, Orla McCarthy, Eric Yeatman (1999), *Sol-gel silica/titania-on-silicon Er/Yb-doped waveguides for optical application at 1.5μm*, Optical Material 12, 1-18.

THE EFFECT OF AL³⁺ ION CONCENTRATION AND TECHNOLOGICAL CONDITION ON OPTICAL PROPERTIES OF SILICA-TITANIA THIN FILM DOPED ER³⁺ ION FOR OPTICAL WAVEGUIDE APPLICATION

Luong Thi Kim Phuong, Le Thi Giang

ABSTRACT

Silica-Titania glass films co-doped with Al³⁺ and Er³⁺ ions on silicon substrate were prepared by sol-gel route and spin-coating technique. Thermal treatment for samples was set up at 900°C from 1 to 6 hours and film's thickness varies in the range of 500-3000nm. The film's surface morphology as well as defect density can be evaluated owning a Scanning Electron Microscopy (SEM). The result from Raman scattering spectrum reveals bonds in material having the same feature bonds of silica glass fabricating by Quartz melting method. The influence of Al³⁺ ion concentration on photoluminescence intensity was investigated when increasing Al³⁺ ion concentration from 1 to 7% mol. The highest photoluminescence intensity obtained at the value of Al³⁺ ion concentration is about 5% mol. The effect of technological conditions such as film's thickness, annealing time on photoluminescence properties of the glass film are also studied.

Keywords: Silica-titania glass, Al³⁺ ion, Er³⁺ ion, sol-gel, photoluminescence, planar wave guide.

THỰC NGHIỆM NGHIÊN CỨU CHẾ TẠO GẠCH KHÔNG NUNG GEOPOLYMER TRO BAY

Lê Phương Thanh¹

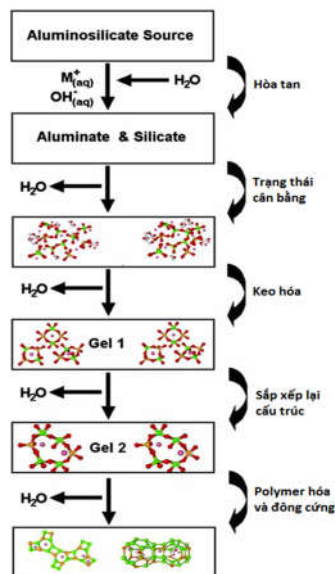
TÓM TẮT

Bài viết đề cập đến việc thực nghiệm chế tạo gạch không nung geopolymer tro bay, với kích thước viên gạch là 220x105x60mm. Gạch không nung geopolymer tro bay được chế tạo từ tro bay và cát sông với các tỷ lệ khác nhau 9:1, 8:2 và 7:3 theo khối lượng. Dung dịch kiềm kích hoạt gồm NaOH 8M và thủy tinh lỏng theo tỷ lệ cố định 1:2,5. Tỷ lệ dung dịch kiềm kích hoạt/ tro bay cố định là 0,25. Các viên gạch được chế tạo và bảo dưỡng ở nhiệt độ 60⁰C trong thời gian 24 giờ. Các thí nghiệm về độ hút nước và cường độ nén cho thấy gạch geopolymer có cường độ nén cao hơn 10MPa chỉ sau 7 ngày và độ hút nước thấp hơn 4%.

Từ khóa: Gạch geopolymer, tro bay, gạch không nung.

1. ĐẶT VẤN ĐỀ

Geopolymer là loại vật liệu dính kết polymer vô cơ, được phát triển đầu tiên bởi nhà khoa học người Pháp Joseph Davidovits từ những năm 1970 [13,14,15]. Phản ứng geopolymer hóa là một phản ứng hóa học diễn ra giữa các oxit của nhôm và silic với dung dịch có tính kiềm mạnh để tạo ra các mạch có cấu trúc ba chiều rắn chắc chứa các liên kết Si-O-Al. Quá trình geopolymer hóa các nguyên liệu được thể hiện trong hình 1.



Hình 1. Quá trình geopolymer hóa

¹Giảng viên khoa Kỹ thuật Công nghệ, Trường Đại học Hồng Đức

Theo các tài liệu nghiên cứu của các nhà khoa học, bất kỳ dung dịch kiềm mạnh nào cũng có thể được sử dụng để làm chất kích hoạt cho việc tạo ra geopolymer. Các dung dịch kiềm được sử dụng phổ biến nhất là NaOH hoặc KOH và Na_2SiO_3 hoặc K_2SiO_3 . Tuy nhiên, theo nghiên cứu của Palomo và cộng sự (2004), dung dịch kiềm NaOH có chứa silic hòa tan như dung dịch natri silicat (Na_2SiO_3) hoặc kali silicat (K_2SiO_3), thì phản ứng geopolymer hóa xảy ra ở một tỷ lệ cao hơn so với khi chỉ có hydroxit kiềm được sử dụng để kích hoạt. Mặt khác, tăng nồng độ mol của dung dịch kiềm sẽ tạo ra sự hòa tan lớn hơn của nguyên liệu [11,12,16]. Kết quả là cường độ nén của geopolymer sẽ tăng lên cùng với việc tăng nồng độ mol của dung dịch kiềm. Fernández-Jimenez kết luận rằng sử dụng NaOH 12,5M mang lại cường độ nén cao hơn khi sử dụng NaOH 8M [5].

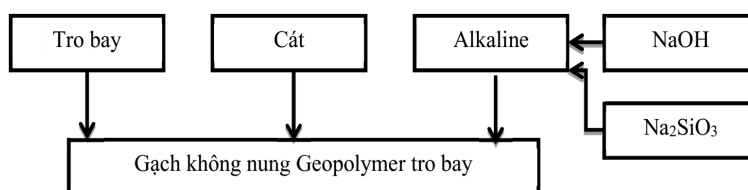
Tro bay là một loại phế thải công nghiệp nguy hại của nhà máy điện chạy than. Hiện nay, các nhà khoa học trong và ngoài nước đã và đang nghiên cứu ứng dụng tro bay trong nhiều lĩnh vực như: xây dựng, nông nghiệp, composite... nhằm giảm thiểu tác động đến môi trường của loại chất thải này. Trong số ứng dụng đó, sản xuất gạch không nung đang được quan tâm nghiên cứu và phát triển. Gạch không nung tro bay kết hợp với xi măng Portland hoặc với vôi và thạch cao đã được nghiên cứu và ứng dụng thành công trên thế giới. Bên cạnh đó đã có một số nghiên cứu chế tạo gạch không nung tro bay geopolymer như: Banupriya và cộng sự (2016), đã tiến hành các thí nghiệm để nghiên cứu ứng xử của gạch geopolymer sử dụng tro bay và xi lò cao. Raghunathan và cộng sự (2010) đã chế tạo gạch sử dụng xi măng, bùn đỏ và cát với tỷ lệ 1:1,7:3,5 thu được cường độ nén 3,73 N/cm². Gạch không nung tro bay chế tạo theo phương pháp geopolymer là một phương pháp xanh, góp phần bảo vệ môi trường [6, 8]. Tuy nhiên số lượng các nghiên cứu còn hạn chế, mặt khác các tính chất của geopolymer phụ thuộc nhiều vào chất lượng của tro bay [4]. Trong khi đó, mỗi nhà máy nhiệt điện chạy than thải ra loại tro bay có tính chất khác nhau [1]. Vì vậy, nghiên cứu thực nghiệm chế tạo gạch không nung geopolymer tro bay của nhà máy nhiệt điện Phả Lại là cần thiết.

2. NỘI DUNG

2.1. Vật liệu và phương pháp nghiên cứu

2.1.1. Vật liệu

Nguyên vật liệu để chế tạo gạch không nung geopolymer tro bay bao gồm: tro bay, cát, dung dịch NaOH 8M, thủy tinh lỏng Na_2SiO_3 theo sơ đồ hình 2.



Hình 2. Sơ đồ vật liệu sử dụng chế tạo gạch Geopolymer tro bay

Tro bay (FA)

Tro bay sử dụng trong nghiên cứu là tro bay Vina F&C lấy từ tro thải của nhiệt điện Phả Lại, thị xã Chí Linh, tỉnh Hải Dương. Thành phần hóa học của tro bay thí nghiệm được kiểm tra tại Viện vật liệu xây dựng (bảng 1), đạt yêu cầu của tro bay loại F theo tiêu chuẩn ASTM C618 -03 (2003).

Bảng 1. Thành phần hóa học của tro bay tính theo % khối lượng

SiO ₂	Al ₂ O ₃	Fe ₂ O ₃	CaO	MgO	K ₂ O	Na ₂ O	TiO ₂	SO ₃	Loi*
51,74	24,53	5,59	0,81	1,95	4,42	0,11	0,76	0,31	8,98

(*: Lượng mất khi nung)

Bảng 2. Chỉ tiêu vật lý của tro bay

STT	Chỉ tiêu thí nghiệm	Phương pháp thử	Đơn vị	Kết quả
1	Độ ẩm	14TCN 108:1999	%	0,31
2	Khối lượng thể tích xốp	TCVN 4030:2003	kg/m ³	920
3	Khối lượng riêng	TCVN 4030:2003	g/cm ³	2,39
4	Độ mịn (lượng sót trên sàng 0.08)	TCVN 4030:2003	%	6,93

Cát sông

Cát sử dụng trong nghiên cứu này là cát sông Mã, lấy tại mỏ cát Tào Xuyên, Thanh Hóa. Các chỉ tiêu vật lý được xác định trong bảng 3.

Bảng 3. Chỉ tiêu vật lý của cát

STT	Chỉ tiêu thí nghiệm	Phương pháp thử	Đơn vị	Kết quả
1	Khối lượng riêng khô	TCVN 7572-4 : 2006	g/cm ³	2,63
3	Khối lượng thể tích xốp	TCVN 7572-6 : 2006	T/m ³	1,42
3	Độ hồng	TCVN 7572-6 : 2006	%	49,73
4	Hàm lượng bụi, bùn, sét	TCVN 7572-8 : 2006	%	0,68

Dung dịch kiềm kích hoạt (AK)

Dung dịch kiềm kích hoạt là hỗn hợp của dung dịch kiềm mạnh (NaOH 8M) và thủy tinh lỏng (Na₂SiO₃). Dung dịch xút được điều chế từ NaOH dạng vảy khô (độ tinh khiết 98%) pha với nước để đạt được nồng độ mol yêu cầu. Thủy tinh lỏng sử dụng sản phẩm của nhà máy hóa chất Việt Trì có tỷ lệ Na₂O/SiO/H₂O tương ứng là 11,8/28,5/59.7% theo khối lượng. Lựa chọn pha trộn dung dịch kiềm kích hoạt theo tỷ lệ khối lượng Na₂SiO₃/NaOH = 2,5.

2.1.2. Phương pháp chế tạo mẫu

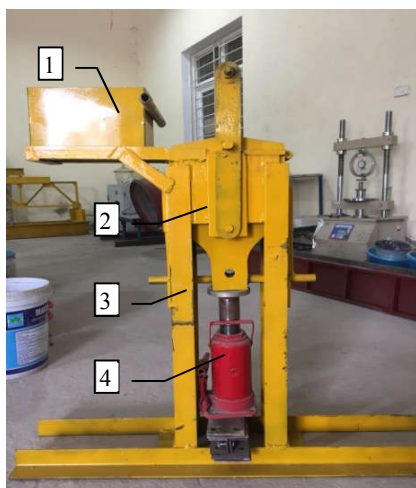
Tỷ lệ phối trộn vật liệu: Tro bay và cát được phối trộn theo một tỷ lệ được đề xuất trong bảng 4.

Bảng 4. Tỷ lệ phối trộn nguyên liệu chế tạo gạch geopolimer tro bay

Tên mẫu	Tro bay (FA) (%)	Cát (Sand) (%)	AK/FA	Ghi chú
M1	90	10	0.25	Nhiệt độ sấy 60°C, 24h
M2	80	20	0.25	
M3	70	30	0.25	

Thiết bị chế tạo mẫu gạch

Thiết bị chế tạo mẫu gồm 4 bộ phận chính: (1) Bộ phận định lượng nguyên liệu làm bằng tôn 2mm, (2) bộ phận khuôn (gồm xilanh và pitton) làm bằng thép 10mm có kích thước 220x105mm, chiều cao xi lanh 160mm, (3) khung ép làm bằng thép V75x75x5mm và (4) kích thủy lực 20 tấn. Thiết bị được chế tạo tại xưởng thực hành khoa Kỹ thuật Công nghệ, Trường Đại học Hồng Đức (hình 3).

**Hình 3. Thiết bị chế tạo mẫu gạch không nung trong phòng thí nghiệm****Hình 4. Mẫu gạch geopolimer tro bay sau khi chế tạo và bảo dưỡng***Chế tạo mẫu*

Viên gạch chế tạo có kích thước tiêu chuẩn 220x105x60mm. Tro bay và dung dịch alkaline được trộn trước với nhau bằng máy trộn trong thời gian 5 phút sau đó cho cát vào trộn tiếp trong thời gian 2 phút. Sau khi trộn xong hỗn hợp được đưa vào khuôn và được ép tạo mẫu bằng thiết bị ép thủy lực 20 tấn (hình 3). Mỗi mẫu chế tạo 30 viên (hình 4).

2.1.3. Bảo dưỡng mẫu

Mẫu sau khi chế tạo được đưa vào lò sấy ở nhiệt độ 60°C (hình 5) trong thời gian 24h, sau đó được đưa ra lò và ổn định ở nhiệt độ phòng trong vòng 3 ngày trước khi đưa đi thí nghiệm.



Hình 5. Máy sấy 300°C



Hình 6. Thiết bị nén mẫu 100T

2.1.4. Phương pháp thí nghiệm

2.1.4.1. Kích thước, màu sắc và khuyết tật ngoại quan

Kích thước, màu sắc và khuyết tật ngoại quan được xác định theo TCVN 6477 (2016). Sử dụng mắt thường để đánh giá màu sắc và khuyết tật ngoại quan, dùng thước lá có độ chính xác 1mm và thước kẹp có độ chính xác 0,1mm để xác định kích thước mẫu gạch. Mỗi mẫu lấy 3 viên, mỗi viên đo kích thước ở 3 vị trí gồm 2 đầu và giữa.

2.1.4.2. Cường độ nén

Sau thời gian bảo dưỡng các viên gạch được chế tạo từ thiết bị nén tĩnh. Tiến hành kiểm tra cường độ nén của các mẫu bằng máy nén có công suất 1000kN với tốc độ gia tải 0,5MPa/s. Thực hiện nén mẫu thử từng viên đơn lẻ (mỗi mẫu thử nén 3 viên) cho đến khi bị phá hủy đo được lực nén lớn nhất P_{\max} (N). Cường độ nén được xác định theo tiêu chuẩn TCVN 6477 (2016):

$$R = P_{\max} \frac{K}{S}$$

Trong đó: S là giá trị trung bình cộng diện tích hai mặt chịu nén (mm^2). K là hệ số hình dạng lấy bằng 0,68. Kết quả thí nghiệm cường độ nén là giá trị trung bình của nén 3 viên riêng lẻ.

2.1.4.3. Độ hút nước

Độ hút nước được xác định theo TCVN 6355-4 (2009). Mỗi mẫu thử lấy 5 viên gạch mang sấy khô ở nhiệt độ 105°C đến 115°C cho tới khi khối lượng gạch không đổi giữa hai lần cân liên tiếp (chênh lệch không lớn hơn 0,2%), cân được khối lượng (m_0). Ngâm mẫu thử vào nước sạch trong 24h ở nhiệt độ 27±2°C. Vớt mẫu ra, dùng khăn ẩm thấm bề mặt mẫu thử và cân mẫu ngay lập tức được khối lượng bão hòa nước (m_1). Kết quả thí nghiệm là giá trị trung bình của 5 viên gạch.

$$\text{Độ hút nước \% tính theo khối lượng} = \frac{m_1 - m_0}{m_0} \cdot 100$$

2.2. Kết quả và thảo luận

2.2.1. Kích thước, màu sắc và khuyết tật ngoại quan

Bảng 5. Kết quả xác định kích thước, màu sắc và khuyết tật ngoại quan

Mẫu	Dài (mm)	Rộng (mm)	Cao (mm)	Độ cong vênh (mm)	Khuyết tật	Màu sắc
M1	220	105	59,8	0	Không	Xám trắng
M2	220	105	60,0	0	Không	Xám trắng
M3	220	105	60,1	0	Không	Xám trắng

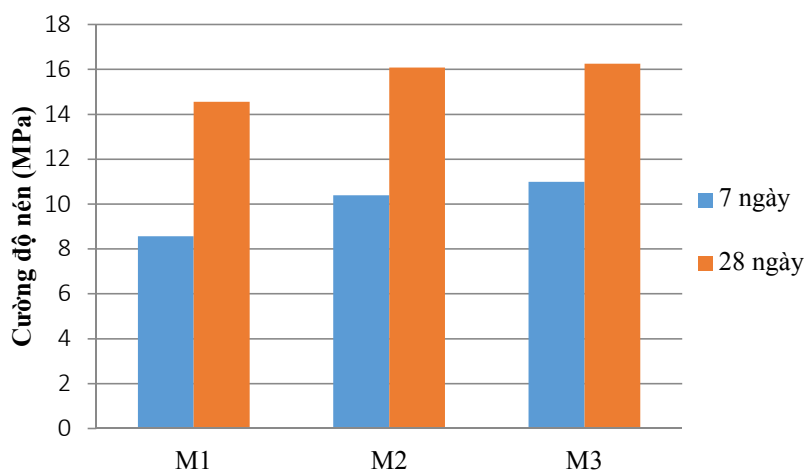
Các mẫu gạch chế tạo có kích thước yêu cầu 220x105x60mm với độ sai số theo chiều cao (bảng 5) ở mẫu M1 (-0,2mm), mẫu M3 (+0,1mm), và không có sai số theo chiều dài, rộng. Các bề mặt của viên gạch có độ phẳng cao, nhẵn, mịn. Như vậy, các viên gạch chế tạo thí nghiệm phù hợp với tiêu chuẩn TCVN 6477:2016.

2.2.2. Cường độ nén

Cường độ nén được thí nghiệm ở tuổi 7 ngày và 28 ngày. Kết quả thí nghiệm thể hiện trong bảng 4 và hình 7.

Bảng 4. Kết quả thí nghiệm cường độ nén theo thời gian

Tên mẫu	Cường độ nén (MPa)	
	7 ngày	28 ngày
M1	8,56	14,55
M2	10,39	16,07
M3	10,99	16,25



Hình 7. Biểu đồ kết quả thí nghiệm cường độ nén theo thời gian

Nhận xét

Cường độ nén tăng theo thời gian tại tất cả các mẫu, điều này cũng phù hợp với các kết quả nghiên cứu đã được công bố về geopolimer (cường độ phát triển theo thời gian tương tự như xi măng portland).

Cường độ nén tăng khi tăng hàm lượng cát từ 10% đến 30%, lý do hàm lượng cát tăng góp phần tăng độ đặc chắc cho các mẫu gạch. Tuy nhiên, theo kết quả thí nghiệm thì cường độ nén mẫu M2 tăng đáng kể so với mẫu M1 và thấp hơn không đáng kể so với mẫu M3.

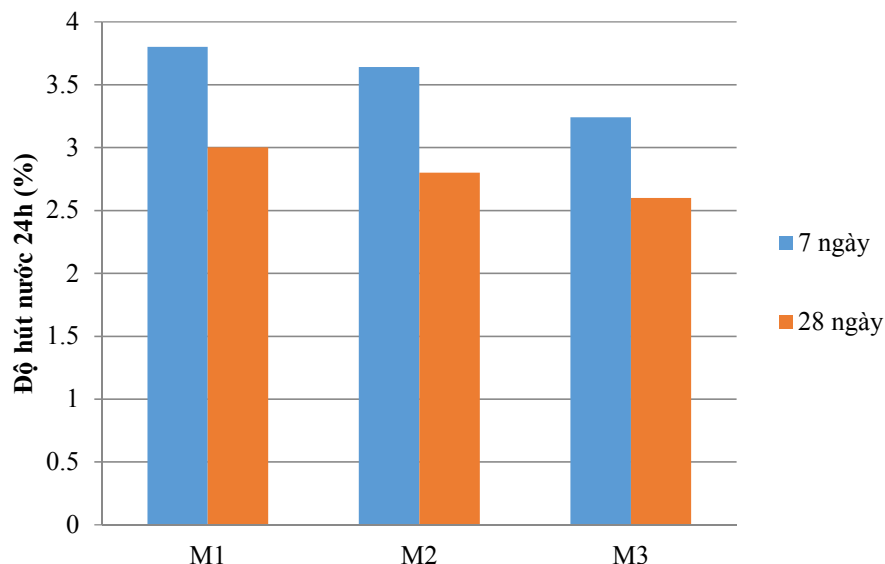
Các mẫu gạch M1 đạt mức M12,5 và các mẫu gạch M2, M3 đạt mức M15 ở tuổi 28 ngày theo TCVN 6477 (2016).

2.2.3. Độ hút nước

Độ hút nước được thí nghiệm cho hai thời điểm 7 ngày và 28 ngày tuổi. Kết quả thí nghiệm thể hiện trong bảng 5 và hình 8.

Bảng 5. Kết quả thí nghiệm độ hút nước 24h

Tên mẫu	Độ hút nước 24h (%)	
	7 ngày	28 ngày
M1	3,8	3,00
M2	3,64	2,80
M3	3,24	2,60

**Hình 8. Biểu đồ kết quả thí nghiệm độ hút nước 24h**

Nhận xét: Độ hút nước 24 giờ của các mẫu gạch đều giảm theo thời gian và giảm không đáng kể khi tăng hàm lượng cát từ 10% (mẫu M1) đến 30% (mẫu M3). Các giá trị thí

thực nghiệm đều cho độ hút nước tương đối thấp (nhỏ hơn 4%) thỏa mãn tiêu chuẩn TCVN 6477 (2016) (độ hút nước yêu cầu < 12%).

3. KẾT LUẬN

Kết quả thí nghiệm bước đầu chế tạo được các mẫu gạch không nung geopolimer tro bay đạt M12,5 và M15 và thỏa mãn các yêu cầu về độ hút nước 24 giờ, kích thước, khuyết tật ngoại quan theo TCVN 6477:2016.

Do số lượng loại mẫu của thí nghiệm còn ít nên chưa thể đánh giá hết đường cong ảnh hưởng khi thay đổi hàm lượng cát và tro bay cũng như việc thay đổi nồng độ mol của NaOH, tỷ lệ AK/FA, tỷ lệ $\text{Na}_2\text{SiO}_3/\text{NaOH}$ và giá thành.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

- [1] Phan Hữu Duy Quốc, *Phân tích việc sử dụng tro xỉ than thải ra từ các nhà máy nhiệt điện ở Việt Nam*, Viện Khoa học Công nghiệp, Trường Đại Học Tokyo, Nhật Bản.
- [2] TCVN 6355-4:2009 (2009), Tiêu chuẩn quốc gia Việt Nam Xác định độ hút nước.
- [3] TCVN 6477:2016 (2016), *Tiêu chuẩn quốc gia Việt Nam Gạch bê tông*.
- [4] A. Fernández-Jiménez và A. Palomo (2003), *Characterisation of fly ashes. Potential reactivity as alkaline cements*, Fuel. 82, tr. 2259-2265.
- [5] A. M. Fernández-Jiménez, A. Palomo và C. López-Hombrados (2006), *Engineering Properties of Alkali-Activated Fly Ash Concrete*, ACI Materials Journal. 103(No. 2), tr. 106-112.
- [6] A. Palomo, M. W. Grutzeck và M. T. Blanco (1999), *Alkali-activated fly ashes - A cement for the future*, Cement and Concrete Research. 29, tr. 1323-1329.
- [7] A. Palomo, M. T. Blanco-Varela, M. L. Granizo, F. Puertas, T. Vazquez và M. W. Grutzeck (1999b), *Chemical stability of cementitious materials based on metakaolin*, Cement and Concrete Research (29), tr. 997-1004.
- [8] A. Palomo, S. Alonso, A. Fernández-Jiménez, I. Sobrados và J. Sanz (2004), *Alkaline activation of fly ashes: NMR study of the reaction products*, Journal of the American Ceramic Society. 87, tr. 1141-1145.
- [9] ASTM C618-03 (2003), *Standard Specification for Coal Fly ash and raw or Calcined Natural Pozzolan for Use in Concrete*.
- [10] C. Banupriya, Sharon John. R, Suresh, E. Divya và D. Vinitha (2016), *Experimental Investigations on Geopolymer Bricks/Paver Blocks*, Indian Journal of Science and Technology. 9, tr. 16.
- [11] H. Xu và J. S. J. van Deventer (2000), *The geopolymerisation of alumino-silicate minerals*, International Journal of Mineral Processing. 59(No.3), tr. 247-266.

- [12] H. Xu và J. S. J. van Deventer (2001), *Effect of Alkali Metals on the Preferential Geopolymerisation of Stilbite/Kaolinite Mixtures*, Industrial and Engineering Chemistry Research. 40, tr. 3749-3756.
- [13] J. Davidovits (1981), *The need to create a new technical language for the transfer of basic scientific information*, Transfer and Exploitation of Scientific and Technical Information, Commission of the European Communities
- [14] J. Davidovits (1991), *Geopolymer - Inorganic polymeric new materials*, Journal of Thermal Analysis. 37, tr. 1633-1656.
- [15] J. Davidovits (2008), *Geopolymer Chemistry and Applications*, Institute Geopolymer.
- [16] J. W. Phair và J. S. J. van Deventer (2001), *Effect of silicate activator pH on the leaching and material characteristics of waste-based inorganic polymers*, Minerals Engineering. 14(No.3), tr. 289-304.
- [17] P. Duxson, Fernández-Jiménez, Provis J. L., Lukey G. C., Palomo A. và Van Deventer J. S. J. (2007), *Geopolymer technology: The current state of the art*, Journal of Materials Science. 42(9), tr. 2917-2933.
- [18] Raghunathan, Gopalsamy P và Elangovan R (2010), *Study on Strength of Concrete with ETP Sludge from Dyeing Industry*, International journal of civil and structural engineering. 1(3), tr. 378-389.

EXPERIMENTAL INVESTIGATION ON FLY ASH BASED GEOPOLYMER BRICKS

Le Phuong Thanh

ABSTRACT

This paper presents the experimental study of fly ash based geopolymeric bricks with the size of 220×105×60mm. The bricks were produced from fly ash and river sand with fly ash to sand ratios by weight of 9:1, 8:2, and 7:3. The activated alkaline solution including NaOH 8M and liquid glass in a fixed ratio of 1: 2.5 was used. The activated alkaline solution to fly ash ratio was 0.25. The bricks were made and maintained at a temperature of 60°C for 24 hours. Test results indicates that the compressive strength of bricks are higher than 10 MPa after 7 days and their water absorption is less than 4%.

Keywords: *Geopolymer brick, fly ash, unfired brick.*

NGHIÊN CỨU MÔ PHỎNG ĐỘNG LỰC PHÂN TỬ CẤU TRÚC NANO XÓP ZnO KÊNH RỔNG DẠNG LỤC GIÁC

Nguyễn Thị Thảo¹

TÓM TẮT

Cùng với wurtzite (WZ) và zinblende, người ta đã tìm thấy một số lượng lớn oxit kẽm (ZnO) có các đa hình khác nhau với các đặc tính và ứng dụng khác nhau căn bản. Do đó, dự đoán và tổng hợp các nhóm đa hình mới của ZnO có ý nghĩa lớn và vẫn đang thu hút được sự quan tâm nghiên cứu đáng kể. Ở đây, chúng tôi thực hiện một nghiên cứu dựa trên phương pháp lý thuyết phiếm hàm mật độ kết hợp gần đúng liên kết chặt (Density Functional Theory based Tight Binding - DFTB) để dự đoán lý thuyết một họ đa hình rỗng mới của ZnO bằng cách tiếp cận từ trên xuống. Hình thù của các thành tố cơ bản cho phép thu được họ cấu trúc nano ZnO xếp mật độ thấp với kênh rỗng hình lục giác. Tính toán của chúng tôi cũng chỉ ra rằng tất cả các cấu trúc rỗng được dự đoán/thiết kế đều là chất bán dẫn có vùng cấm rộng, thẳng giống như của cấu trúc khối ZnO. Cấu trúc vùng điện tử của cấu trúc nano xếp ZnO cũng được nghiên cứu chi tiết.

Từ khóa: Nano xếp, lý thuyết phiếm hàm mật độ, chất bán dẫn.

1. ĐẶT VẤN ĐỀ

Ngày nay, các vật liệu vô cơ mở khung (nano xếp) đã nhanh chóng trở thành một hướng nghiên cứu mạnh. Các vật liệu nano xếp đóng một vai trò quan trọng trong nhiều ứng dụng liên quan đến năng lượng và phát triển bền vững, ví dụ xúc tác, tách khí, lọc nước và pin nhiên liệu. Theo thực nghiệm, vấn đề chính của hướng nghiên cứu vật liệu khung mở là tìm ra các vật liệu sở hữu kênh và các tính năng mà làm cho chúng thành vật liệu nano xếp, chẳng hạn các hốc cơ sở/các lồng ở cấp độ nano. Về mặt lý thuyết, tìm kiếm các dạng thù hình rỗng mới không những cần thiết mà còn là thách thức. Cơ sở dữ liệu của Hiệp hội Zeolite quốc tế (IZA) cho thấy rằng, theo thời gian số lượng các loại cấu trúc khung nano xếp độc đáo đã tăng nhanh chóng, từ 27 loại trong năm 1970, lên 38 vào năm 1978, lên 64 trong năm 1988, lên 98 vào năm 1996 và đến 174 trong năm 2007 [9].

Oxit kẽm (ZnO) được cho là vật liệu bán dẫn có nhiều tính chất thú vị và quan trọng hơn nhiều so với các vật liệu khác. Lý giải cho điều này là vì ZnO có thể được hiện thực hóa rất dễ dàng trong nhiều cấu trúc nano khác nhau, tính chất phát quang tuyệt vời và khả năng thay đổi độ rộng vùng cấm năng lượng, chẳng hạn trong cấu trúc nano dị chất vô-lõi, tính áp điện của nó tìm thấy ứng dụng như máy phát điện nano, tính tương thích sinh học của nó tìm thấy ứng dụng trong cảm biến hóa sinh, tính trong suốt cao và khả năng có tính sắt từ ở nhiệt độ phòng sẽ tìm thấy ứng dụng trong quang điện tử và điện tử học spin. Đến nay, các tìm kiếm để tổng hợp hoặc dự đoán lý thuyết các nhóm cấu trúc hay các đa hình hoặc pha mới cho các hợp chất này vẫn có ý nghĩa lớn và đang thu hút được sự quan tâm đáng kể [6].

¹ Giảng viên khoa Khoa học Tự nhiên, Trường Đại học Hồng Đức

Trong bài báo này, chúng tôi đề xuất một phương pháp lý thuyết để thiết kế họ cấu trúc nano ZnO xốp mật độ thấp với kênh rỗng hình lục giác từ một vài thành tố đơn vị rỗng được lựa chọn cẩn thận. Chúng tôi cho rằng phương pháp này có thể cung cấp một cách hữu hiệu để thiết kế mô hình tính toán vật liệu nano xốp. Ở đây, chúng tôi thảo luận về độ bền vững và cấu trúc điện tử của các vật liệu dựa trên các tính toán trong hình thức phiếm hàm mật độ kết hợp gần đúng liên kết chặt (DFTB).

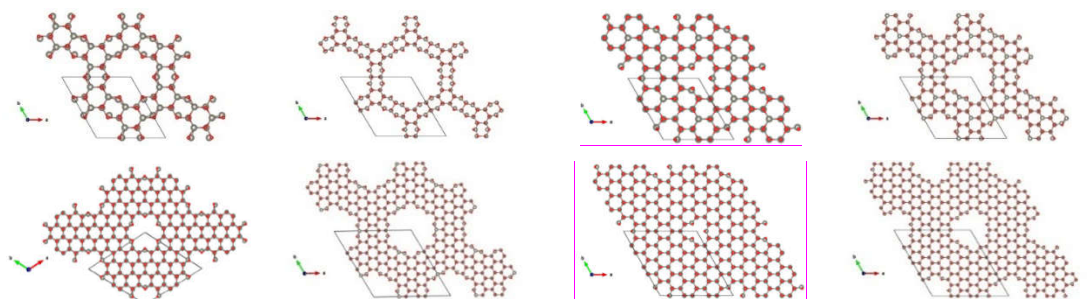
2. NỘI DUNG

2.1. Phương pháp nghiên cứu

2.1.1. Phương pháp thiết kế cấu trúc

Trong phần này chúng tôi mô tả ngắn gọn phương pháp tiếp cận “từ trên xuống” để tiên đoán về mặt lý thuyết các tinh thể nano rỗng. Các thủ tục thiết kế được bắt đầu từ một số lượng lớn các siêu ô của tinh thể ZnO dạng WZ, rồi khoét đi các kênh rỗng dạng lục giác, để lại một khung xương rỗng. Tiếp đến, cấu trúc khung rỗng này được dịch chuyển về tâm đối xứng và được thực hiện các phép đối xứng có thể, để được ô mạng tinh thể nguyên thủy. Sau đó, các cấu trúc này được tiến hành tối ưu hóa cấu trúc, tức là cho phục hồi hay giải tỏa các biến dạng đi kèm với sự tồn tại của kênh rỗng cũng như bề mặt bên trong của các vách rỗng. Cuối cùng, các cấu trúc đã hồi phục này được tính toán các đặc trưng cấu trúc, điện tử và rút ra các quy luật liên quan.

Các cấu trúc nano xốp rỗng ZnO trong bài báo này được đặc trưng bởi kích thước hốc và độ dày vách, tất cả các hốc đều có hình lục giác nhưng có đường kính khác nhau, được đo bằng đơn vị kích thước khối lục giác. Chúng tôi đưa ra khái niệm độ dày vách với ngụ ý là độ dày nhỏ nhất giữa các hốc, cũng được đo bằng số lớp khối lục giác, có thể là đơn vách (SW), hai vách (DW), ba vách (3W) hoặc bốn vách (4W). Do đó, một cấu trúc được viết là SW-2 sẽ có hốc lục giác với kích thước 2 khối lục giác, được cách nhau bởi những vách đơn. Tương tự như vậy, cấu trúc 1.5W-2 là hốc lục giác với kích thước 2 khối lục giác, được cách nhau bởi vách rưỡi. Với mục đích minh họa, chúng tôi chỉ đưa ra các cấu trúc nhỏ nhất ở mỗi chuỗi được chỉ ra ở hình 1.



Hình 1. Bốn chuỗi cấu trúc nano xốp ZnO kênh rỗng lục giác thiết kế trong bài báo này (chỉ có hai đại diện nhỏ nhất cho mỗi chuỗi). Từ trái sang phải: SW-2, SW-3, 2W-2, 2W-3, 3W-2, 3W-3, 4W-2, 4W-3. Các quả bóng nhỏ (màu đỏ) là nguyên tử O, các quả bóng lớn (màu xám) là những nguyên tử Zn. Khung hình thoi là ô cơ sở

2.1.2. Phương pháp tính toán

Tính toán của chúng tôi dựa trên phương pháp phiếm hàm mật độ kết hợp gần đúng liên kết chặt (DFTB+) có phân cực spin và tự tương thích điện tích. Phương pháp này dựa trên việc khai triển đến gần đúng bậc hai phiếm hàm năng lượng tổng của hệ điện tử Kohn-Sham phụ thuộc vào spin của hệ điện tử tham chiếu cho trước nhất định và mật độ từ hóa. Phương pháp này đã được sử dụng phổ biến [5, 7] và được đưa ra một cách ngắn gọn như sau:

i) Khai triển các quỹ đạo theo tổ hợp tuyến tính các quỹ đạo Slater:

$\psi_n(\vec{r}) = \sum_i \sum_v C_{iv} \phi_{iv}(\vec{r} - \vec{R}_i)$. Các hàm cơ sở $\phi_{iv}(\vec{r} - \vec{R}_i)$ tập trung vào hạt nhân nguyên tử thứ i , ở vị trí \vec{R}_i , bản thân chúng là tổ hợp tuyến tính của các quỹ đạo Slater đơn

$\phi_v(\vec{r}) = \left(\sum_{j=1}^l \left(\sum_{n=0}^{\infty} a_{jn} \vec{r}^{l_v+n} \right) e^{-\alpha_j r} \right) Y_{l_v, m_v}$. Lượng tử số góc và lượng tử số từ được xác định bởi l_v và m_v . Y_{l_v, m_v} là hàm cầu điều hòa tương ứng.

ii) Gần đúng liên kết chặt khai triển các hàm sóng (tính các yếu tố ma trận trong gần đúng hai tâm): $\sum_i \sum_v \left[H_{iv, j\mu} - ES_{iv, j\nu} \right] C_{iv, j\mu} = 0$ với $H_{iv, j\mu} = \langle \phi_{iv} | \hat{H} | \phi_{j\mu} \rangle$ và $S_{iv, j\mu} = \langle \phi_{iv} | \phi_{j\mu} \rangle$.

iii) Khai triển phiếm hàm năng lượng Kohn-Sham đến gần đúng bậc hai (tự tương thích mật độ điện tích- SCC-DFTB): $E_{Total} = \sum_{\mu, \nu} \left(\frac{1}{2} \gamma_{\mu\nu} \Delta q_{\mu} \Delta q_{\nu} \right) + \sum_{i=1}^I n_i \langle \psi_i | \hat{H}_o | \psi_i \rangle + E^{rep}$

trong đó Δq_{μ} - là thăng giáng điện tích của từng đơn nguyên tử (điện tích Mulliken), $\gamma_{\mu\nu}$ - là hệ số được xác định từ tương tác Culomb giữa hai phân bố điện tích cầu tập trung quanh các nguyên tử μ và ν tương ứng, E^{rep} - là số hạng mô tả tương tác đẩy.

Tất cả các yếu tố ma trận và các quỹ đạo đều được suy ra từ việc tính phiếm hàm mật độ, lợi thế của phương pháp DFTB là dựa trên việc sử dụng bộ cơ sở nhỏ của các quỹ đạo nguyên tử (để giảm kích thước ma trận cho việc tăng tốc độ chéo hóa) và hạn chế đến hai tâm Hamilton không trực giao (cho phép sử dụng rộng rãi bảng tra cứu). Phương pháp này khác biệt so với phương pháp bán thực nghiệm là tính rõ ràng của hàm sóng cơ sở, cho chúng ta cái nhìn vật lý sâu sắc hơn và kiểm soát tốt hơn các gần đúng được sử dụng. Phương pháp này sử dụng hình chiếu điện tích Mulliken để giải phương trình Kohn-Sham bằng cách tự hợp và chứng minh cho khả năng đưa ra thể tương tác chính xác cũng như hiệu quả bằng số cho phép mô phỏng động lực phân tử của ô mạng chứa vài trăm đến một ngàn nguyên tử.

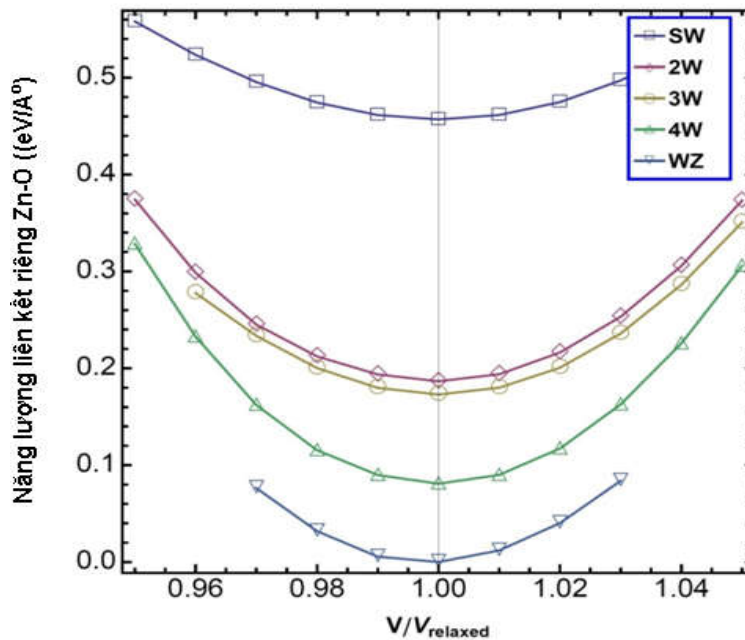
Như vậy đây là phương pháp đặc biệt thích hợp để nghiên cứu các tính chất điện và động lực của hệ vi mô lớn và phân tử hữu cơ như dây nano hay chất hấp thụ bề mặt, chất bán dẫn dị cấu trúc... [5]. Lợi thế của tham số DFTB chỉ là rất ít, có thể lựa chọn các hệ cần thiết để tạo ra các thông số, tức là trong DFTB các hệ làm khớp có thể cũng là các hệ hoàn toàn lý tưởng, nếu chúng được chấp nhận về mặt hoá học và được mô tả cẩn thận với phương

pháp ab-initio. Tiếp theo, tham số này có thể được sử dụng cho hệ lớn hơn nhiều do tính chuyển đổi của nó. Trong tính toán của chúng tôi, tham số và tính chuyển đổi của nó đã được áp dụng thành công trong một số công trình DFTB [7, 8]. Các tham số điện tử DFTB (tức là tham số Hubbard, và các yếu tố ma trận $H_{\mu\nu}^o$ và $S_{\mu\nu}$) được rút ra trực tiếp từ tính toán DFT, được thực hiện trong gần đúng gradient tổng quát (GGA) và sử dụng phiếm hàm trao đổi tương quan Perdew, Burke và Ernzerhof (PBE).

2.2. Kết quả thảo luận

2.2.1. Năng lượng liên kết, độ bền vững của pha

Để so sánh độ bền vững của các khung nano tinh thể xếp với các pha ZnO khối truyền thống, chúng tôi đã tính tổng năng lượng liên kết trên mỗi cặp ZnO theo thể tích tỷ đối cho tất cả các cấu trúc được nghiên cứu so với pha WZ-ZnO đã biết.



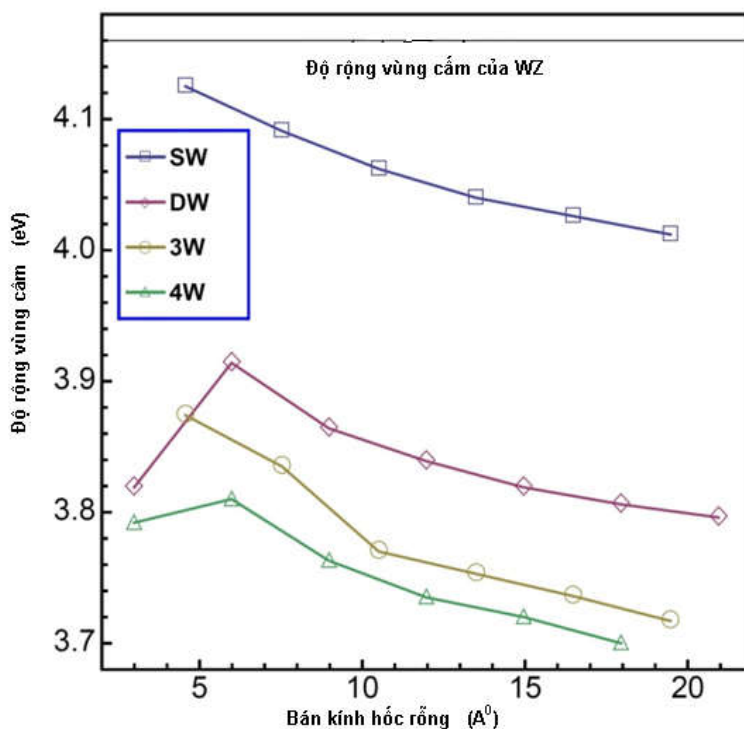
Hình 2. Sự phụ thuộc của năng lượng liên kết riêng (eV/ZnO) với thể tích tỷ đối cho tất cả các cấu trúc rỗng có kích thước nhỏ nhất ($n = 2$) của từng chuỗi

Trên cơ sở của những đường cong làm khớp bậc ba phi tuyến [2], chúng tôi rút ra một số kết luận về độ bền vững của chúng. Như chúng tôi đã dự kiến, các cấu trúc rỗng đã đề xuất đều đứng vững (tức là có thể tồn tại) trong tất cả các hệ cấu trúc tuần hoàn mà không bị sụp đổ về mặt cấu trúc, điều này có thể dẫn đến sự tồn tại của các pha nano xếp mật độ thấp của chúng. Như ở hình 2 cho ta thấy rằng các cấu trúc bền vững hơn về mặt năng lượng là tương ứng với độ dày của vách tăng lên. Mặc dù pha có độ bền vững cao nhất là pha không rỗng, hay chính là cấu trúc tinh thể WZ và có một năng lượng cân bằng, tuy nhiên các pha rỗng lại có thêm một phần năng lượng liên kết đến từ các quá trình hồi

phục bề mặt nội tại. Sự ảnh hưởng của bề mặt bên trong cũng như tỉ số bề mặt bên trong - trên - thể tích ở đây có thể được đánh giá qua số phối vị trung bình của cấu trúc, số này là ít hơn bốn phối vị (xem bảng 1) và khác nhau cho từng nhóm cấu trúc, số này thay đổi khi kích thước thay đổi.

2.2.2. Cấu trúc vùng điện tử

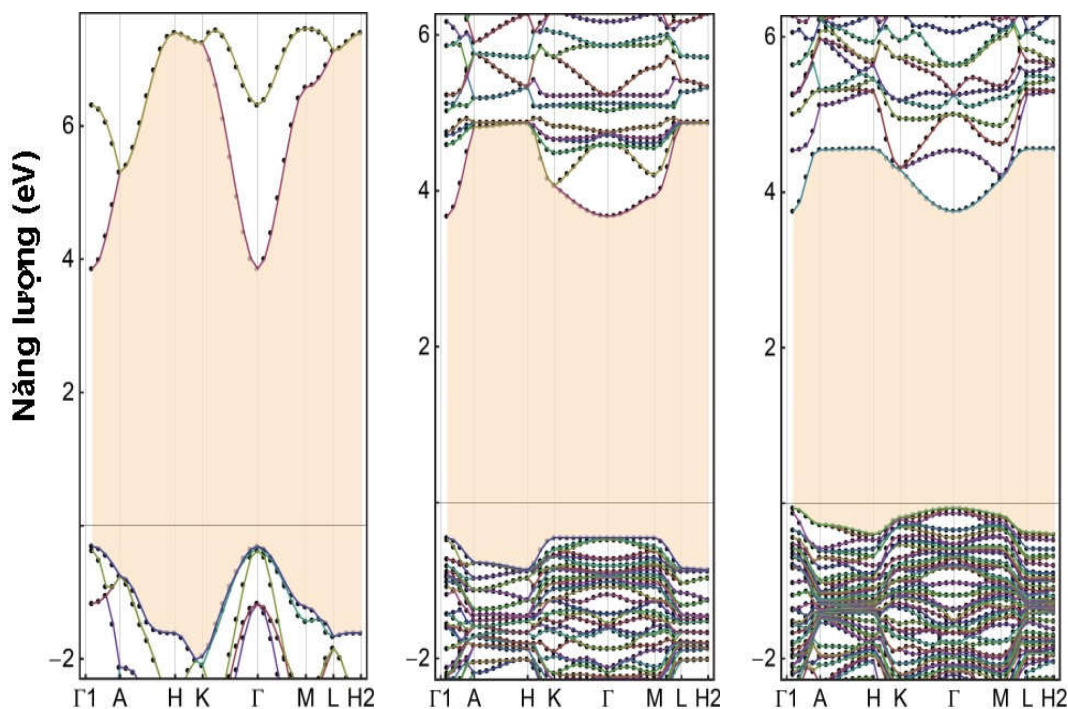
Để biết liệu các cấu trúc ZnO xấp được dự đoán, nếu được tổng hợp có sở hữu các đặc tính mới lạ không, chúng tôi khảo sát các cấu trúc điện tử của chúng. Hình 3 cho thấy sự phụ thuộc độ rộng vùng cấm của các cấu trúc rỗng này theo kích thước của hốc rỗng, tất cả các vùng cấm của chúng đều nhỏ hơn so với cấu trúc khối WZ. Việc tất cả các độ rộng vùng cấm của các cấu trúc rỗng đều nhỏ hơn WZ đã được chỉ ra bởi L.Sponza và cộng sự (2015) là do tác động của thế tĩnh điện lên các anion V_O và cation V_{Zn} dẫn đến một đóng góp cỡ $V = V_O - V_{Zn} > 0$ cho việc chia tách mức năng lượng của nguyên tử và độ rộng vùng cấm. Hơn nữa, chúng tôi cũng quan sát thấy việc tồn tại một giá trị vùng cấm nhỏ hơn trong một vài cấu trúc đầu tiên của một số nhóm, ví dụ 2W-2, 4W-2... so sánh với 2W-3, 4W-3, điều này là do hiệu ứng bề mặt làm xuất hiện các trạng thái bề mặt ở ngay trong vùng cấm.



Hình 3. Độ rộng vùng cấm theo kích thước hốc rỗng

Tính toán của chúng tôi cho thấy rằng độ rộng vùng cấm của chúng dao động trong khoảng từ 3.7eV với cấu trúc 4W đến 4.1eV với SW. Vì vậy, có thể kết luận là tất cả các

pha mới thu được vẫn là các bán dẫn có vùng cấm rộng và thẳng ở điểm gamma (Γ) như của cấu trúc gốc WZ-ZnO. Các cấu trúc rỗng cho các kết quả khác chủ yếu ở mặt cắt tiết diện ngang các hướng H-K- Γ -M-L, gây ra bởi việc làm phẳng các vùng năng lượng (hình 4).



Hình 4. Từ trái sang phải, cấu trúc vùng năng lượng của khối WZ-ZnO và SW-2, DW-2

Các liên kết treo trong bề mặt gây ra sự hồi phục bề mặt, có thể được quan sát thấy bởi sự chuyển động vào phía bên trong mặt của các vị trí anion (Zn), dẫn đến sự co nhận lại bề mặt ngoài của các vách rỗng (hình 1). Demiroglu và cộng sự (2014) cho rằng, bình thường thì việc hình thành các khoảng trống trong không gian của một tinh thể tuần hoàn đậm đặc sẽ loại bỏ một số nguyên tử và qua đó cũng loại đi đóng góp vào việc hình thành cấu trúc vùng của chúng, kết quả là làm cho độ rộng vùng cấm nhỏ hơn. Lưu ý rằng các hốc ở đây không đưa thêm vào các trạng thái trong vùng cấm thông qua việc tạo ra các khuyết tật, ngoại trừ thông qua các trạng thái bề mặt như đã nói trên. Đây cũng là lý do mà đáng điều của độ rộng vùng cấm trở nên phẳng khi không gian trống của hốc bên trong làm hạn chế sự chòng chéo, xen phủ lẫn nhau trong hầu hết phương tiết diện ngang khắp các tinh thể. Đó cũng chính là hiệu ứng của việc cấu trúc xốp làm giảm sự hình thành cấu trúc vùng năng lượng như được chỉ ra tại [1] hay cụ thể nó tuân theo đáng điều dự kiến của hiệu ứng giam hãm lượng tử.

2.2.3. Các thông số cấu trúc

Để đánh giá sự tin cậy cho các cấu trúc nano xốp rỗng chúng tôi đã tính các thông số đặc trưng cho từng cấu trúc rỗng xốp (bảng 1).

Bảng 1. Các đặc tính tiêu biểu của mỗi loại từ các cấu trúc nghiên cứu

Cấu trúc	SW-2	DW-2	3W-2	4W-2
Mật độ khối lượng (gcm^{-3})	3.975	5.126	4.757	5.257
Thể tích riêng V/at ($\text{Å}^3/at$)	17.002	13.183	14.205	12.854
Mật độ hạt (10^{23}cm^{-3})	36.588	46.759	96.704	106.778
Số phối vị trung bình	3.67	3.87	3.87	3.94
Cấu trúc tinh thể	Hex.	Hex.	Hex.	Hex.
Nhóm đối xứng tinh thể	P63MC 185	P31M 157	P63MC 185	P31M 157
Số nguyên tử trong ô đơn vị	36	46	96	106
Hằng số mạng (a-c) (Å)	11.40 5.44	11.40 5.40	17.08 5.40	17.10 5.39
Độ dài liên kết (Å)	2.00	2.01	2.01	2.013
Góc liên kết	108.65	109.18	109.09	109.34
Zn-O-Zn/O-Zn-O	111.25	110.06	110.05	109.72
Độ rộng vùng cấm (eV)	4.12	3.82	3.87	3.79
Diện tích bề mặt tiếp cận (Å^2)	130.27	42.79	127.77	43.63
Thể tích rỗng (Å^3)	163.67	20.72	156.60	21.02

Sự bền vững của các cấu trúc được nghiên cứu là bằng chứng rõ ràng cho thấy một cách hợp lý để tin rằng các cấu trúc tinh thể được tạo ra bằng phương pháp tiếp cận từ trên xuống sẽ là mục tiêu tổng hợp nên các đa hình hấp dẫn. Cấu trúc vùng và các phân tích trên bảng 1 cho thấy số phối vị trung bình cho cấu trúc bất kỳ gần như bằng bốn (ngoại trừ một số nhỏ các liên kết treo do bề mặt bên trong của hốc), tức là mỗi nguyên tử Zn (O) có gần bốn nguyên tử O (Zn) bên cạnh hình thành một kiểu lai hóa dạng sp^3 biến dạng cho hầu hết tất cả các cấu trúc. Vì vậy, bằng cách này đã giữ lại tính chất quan trọng của vật liệu ZnO như: bán dẫn vùng cấm rộng, áp điện và trong suốt quang học với ánh sáng nhìn thấy.

Kết quả bảng 1 cho thấy, thể tích mỗi nguyên tử của các cấu trúc rỗng ZnO cao hơn từ 8% đến 57.0% so với WZ (11.9 Å^3). Một cách tự nhiên, điều này dẫn đến độ linh hoạt và khả năng nén cao hơn của các pha rỗng này. Do đó, các pha nano xốp mới này nếu được tổng hợp sẽ là một trong những ứng cử viên hứa hẹn nhất của siêu vật liệu cơ học để thay thế các vật liệu đất liền, dễ bị gãy vỡ cơ học hoặc các vật liệu dùng cho việc lọc các phân tử. Độ rộng vùng cấm của chúng thay đổi được và diện tích bề mặt bên trong rộng cũng là lợi thế cho các giải pháp đầy hứa hẹn trong việc chuyển đổi hiệu quả năng lượng mặt trời thành hóa năng lượng và phản điện hóa nước thay thế cho các cấu trúc vi/nano khuôn từ vật liệu TiO_2 . Các thông số cấu trúc thiết yếu khác, chẳng hạn như các hằng số mạng tinh thể, mật độ hạt, mật độ khối lượng, cấu trúc mạng tinh thể đi kèm với nhóm đối xứng không gian, cho thấy rằng tất cả các pha này đều là các pha tinh thể có tính đối xứng cao, nghĩa là đi kèm với sự ổn định cao.

3. KẾT LUẬN

Dự đoán lý thuyết của chúng tôi về các ứng cử viên cho các cấu trúc tinh thể nano xốp ZnO dạng hốc lục giác theo cách tiếp cận mô hình topo, các cấu trúc này có tính đối

xứng tương tự với pha WZ-ZnO nhưng với kích thước hốc và độ dày vách khác nhau. Các phân tích về cấu trúc, tính chất điện tử cho thấy rõ ràng, các pha rỗng có thể tồn tại trong các cấu trúc tuần hoàn mà không làm sụp đổ cấu trúc, điều này có thể dẫn tới việc tồn tại các pha nano xốp và vật liệu tinh thể có mật độ thấp. Một yếu tố quan trọng cho các ứng dụng thực tế là khả năng điều chỉnh độ rộng vùng cấm, do ảnh hưởng của kích thước lỗ (hốc) và phân bố hình dạng.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

- [1] A. Martijn Zwijnenburg, F. Illas and S. T. Bromley (2010), *Apparent Scarcity of Low-Density Polymorphs of Inorganic Solids*. Phys. Rev. Lett. 104 (17), 175503.
- [2] From Wikipedia, the free encyclopedia - Birch - Murnaghan equation of state [https://en.wikipedia.org/wiki/Birch-Murnaghan_equation_of_state].
- [3] I. Demiroglu, S. Tosoni, F. Illasa and T. Stefan Bromley (2014), *Bandgap engineering through nanoporosity*. Nanoscale 6(2), 1181-1187.
- [4] L. Sponza, J. Goniakowski, and C. Noguera (2015), *Structural, electronic, and spectral properties of six ZnO bulk polymorphs*. Phys. Rev. B 91(7), 075126.
- [5] M. Elstner, D. Porezag, G. Jungnickel, J. Elsner, M. Haugk, Th. Frauenheim, S. Suha, G. Seifert (1998), *Self-consistent-charge density-functional tight-binding method for simulations of complex materials properties*. Phys. Rev. B 58 (11), 7260.
- [6] Magnus Willander (2014), *Zinc Oxide Nanostructures Advance and Applications*. Pan Stanford Publisher.
- [7] Simulation code dftb+ at <http://www.dftb-plus.info/>
- [8] Vu Ngoc Tuoc (2010), *The self-consistent charge density functional tight binding study on wurtzite nanowire*. Computational Materials Science 49, S161-S169.
- [9] W. J. Roth, P. Nachtigall, R. E. Morris, P. S. Wheatley, V. R. Seymour, S. E. Ashbrook, P. Chlubná, L. Grajciar, M. Polozij, A. Zukal, O. Shvets & J. Cejka (2013), *A family of zeolites with controlled pore size prepared using a top-down method*. Nature Chemistry 5 (7), 628-633.

MOLECULAR DYNAMICS SIMULATION STUDY ON ZnO NANOPOROUS STRUCTURE WITH HEXAGONAL HOLLOW

Nguyen Thi Thao

ABSTRACT

Along with zincblende and wurtzite, a large amount of zinc oxide (ZnO) has been found with different polymorphisms with different basic properties and applications. Thereby synthesizing and predicting new polymorphic groups of ZnO are of great significance and are still gaining considerable research interests. Here we perform a study based on the DFTB

method to predict several new classes of ZnO polymorphisms by a top-down approach. The shape of the basic elements allows for obtaining a series of hexagonal, low density nanoporous ZnO hollow structure. Our calculations also explore that all hollow structures are predicted/designed to be semiconductors having the large, straight band gap like the bulk ZnO. The electronic band structure of the ZnO nanoporous are finally investigated in detail.

Keywords: *Nanoporous, theory density functional (DFT), semiconductor.*

MÔ PHỎNG TỪ TRƯỜNG MÁY ĐIỆN MỘT CHIỀU BẰNG PHƯƠNG PHÁP PHẦN TỬ HỮU HẠN

Nguyễn Ngọc Văn¹, Đặng Việt Hùng²

TÓM TẮT

Việc mô phỏng phân bố của từ trường trong máy điện cho phép đánh giá ảnh hưởng của cấu trúc, hình dạng và các thông số vật liệu đến các thông số vận hành. Hiện nay, các chương trình mô phỏng dựa trên phương pháp phần tử hữu hạn (Finite Element Method - FEM) là công cụ mạnh, tin cậy và có chi phí thấp, hỗ trợ cho các nhà nghiên cứu, sản xuất trong quá trình thiết kế, đánh giá và cải thiện các đặc tính kỹ thuật của thiết bị. Nội dung bài báo tập trung phân tích, đánh giá ảnh hưởng của từ thông, mật độ từ cảm, sóng hài và mô men trong máy điện một chiều không chổi than (Brushless DC - BLDC) dựa trên kết quả mô phỏng.

Từ khóa: *Phương pháp phần tử hữu hạn, tính toán từ trường, máy điện một chiều không chổi than.*

1. ĐẶT VẤN ĐỀ

Hiện nay, trong tính toán và thiết kế máy điện, khí cụ điện các nhà sản xuất luôn mong muốn sản phẩm sản xuất ra vận hành tin cậy, tiết kiệm điện năng và có độ bền cao. Để đánh giá hiệu quả hoạt động cũng như ảnh hưởng của các vật liệu khác nhau đến sự làm việc của máy điện thì việc phân tích, làm rõ sự biến đổi của trường điện từ xảy ra bên trong là vấn đề hết sức quan trọng. Giải pháp mô phỏng các hiện tượng điện từ trường trong máy điện bằng phần mềm dựa trên FEM đã được nghiên cứu rộng rãi [1,2,4,5], giải pháp giúp phân tích hiệu quả tác động của cấu trúc, hình dạng và vật liệu từ tới phân bố từ trường trong máy điện. Ở những khu vực có mật độ từ cảm cao như răng, rãnh. Với mục tiêu cải thiện phân bố từ trường ở các khu vực đặc biệt hoặc nghiên cứu ứng dụng vật liệu từ mới, phương án mô phỏng bằng các phần mềm chuyên dụng trở thành một giải pháp nổi bật với chi phí thấp. Các nghiên cứu mô phỏng máy điện thường tập trung vào việc tính toán, phân tích trường điện từ máy điện xoay chiều, một chiều thông thường và chưa có nhiều nghiên cứu đánh giá về sóng hài và mô men. Do vậy, nội dung bài báo sẽ tập trung vào việc phân tích, đánh giá từ trường, đồng thời với các thông số về sóng hài và mô men của máy điện một chiều không chổi than (BLDC). BLDC là loại máy điện một chiều đặc biệt. BLDC làm việc tin cậy, không tạo tia lửa điện, không gây nhiễu và có tuổi thọ cao hơn so với các loại máy điện một chiều thông thường.

^{1,2}Giảng viên khoa Kỹ thuật điện, Trường Đại học Điện lực Hà Nội

2. NỘI DUNG

2.1. Mô phỏng từ trường máy điện bằng FEM

FEM là phương pháp số cho phép phân tích bên trong đối tượng nghiên cứu và ước lượng chính xác các thông số, sự phân bố điện từ trường như mật độ từ thông trong khe hở không khí hoặc trong bất kỳ bộ phận nào của thiết bị điện. Trên cơ sở các kết quả phân tích về phân bố trong không gian của điện từ trường, có thể xác định các điểm bất lợi về mặt cấu trúc hoặc thiết kế của thiết bị.

Theo FEM, quá trình tính toán mô phỏng từ trường trong máy điện thực hiện như sau:

Rời rạc hóa một mô hình mẫu, tạo ra các phần tử và các nút. Các phần tử được liên kết bởi các nút thành mô hình mẫu hoàn chỉnh.

Dựa trên đặc thù các vật liệu khác nhau của mô hình mẫu, các thông số về vật liệu tương ứng sẽ được xác định cho mỗi phần tử.

Phương trình Maxwell và các điều kiện biên được sử dụng để liên kết tất cả các phần tử với nhau tùy theo cấu trúc bằng việc đơn giản hóa một cách phù hợp, từ đó thiết lập các phương trình phần tử hữu hạn.

Tùy theo các đặc trưng riêng, có thể một phương pháp tính toán chính xác sẽ được lựa chọn để giải quyết các biểu thức từ trường ở các nút không xác định.

Các phương trình Maxwell đối với từ trường:

$$\text{rot } \vec{H} = \vec{J}; B = \mu_s H; \text{div } \vec{B} = 0 \quad (1)$$

Trong đó: \vec{H} là vector cường độ từ trường,

\vec{B} là vector cảm ứng từ,

μ_s là độ từ thẩm

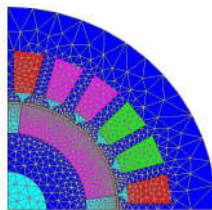
\vec{J} là vector mật độ dòng điện.

Mặt khác:
$$\vec{B} = \text{rot } \vec{A}; \text{div } \vec{A} = 0 \quad (2)$$

Với \vec{A} là từ thế vector.

Kết hợp với (1) rút ra:
$$\frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{1}{\mu_s} \frac{\partial A}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[\frac{1}{\mu_s} \frac{\partial A}{\partial y} \right] + J = 0 \quad (3)$$

Sử dụng FEM, mô hình được phân tích bằng cách phân chia thành các phần tử tuyến tính dạng tam giác (hình 1). Lưới phần tử được chia nhỏ hơn tại những vị trí quan trọng hay nơi từ trường phân bố tập trung nhằm làm giảm độ phức tạp tính toán và tăng tốc độ tính toán.

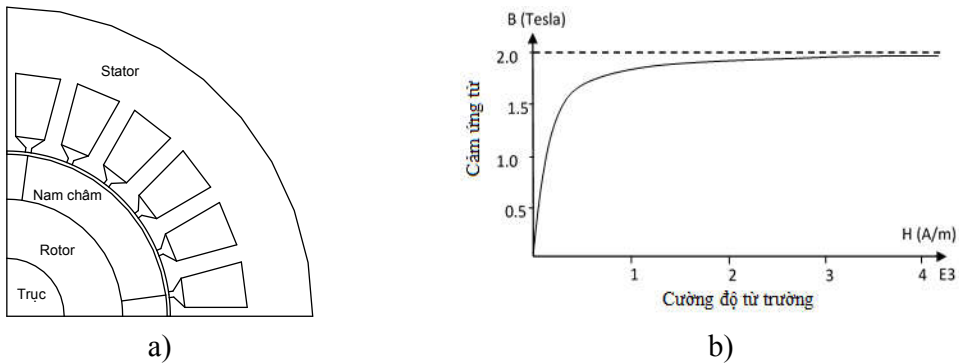


Hình 1. Các lưới phần tử hữu hạn ở động cơ BLDC

2.2. Mô phỏng từ trường máy điện một chiều

2.2.1. Mô hình mô phỏng

Mô hình nghiên cứu là động cơ một chiều không chổi than nam châm vĩnh cửu 3 pha, 4 cực, 24 rãnh. Do tính chất đối xứng của động cơ qua các trục, mô hình hình học 2D được xây dựng trên mặt phẳng cắt ngang chỉ bao gồm $\frac{1}{4}$ động cơ gồm 6 rãnh stator và 1 cực bắc của nam châm (hình 2a). Việc xây dựng mô hình, phân tích và mô phỏng được thực hiện trên phần mềm mô phỏng trường điện từ Flux2D [6].



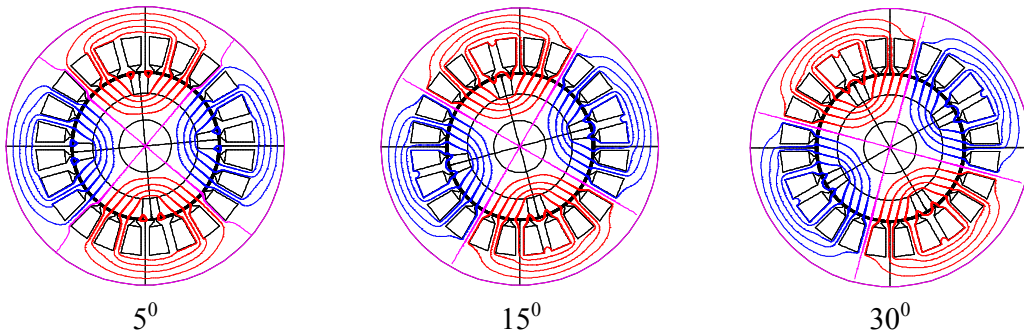
Hình 2. Mô hình mô phỏng (a) và đặc tính B(H) của rotor và stator động cơ BLDC (b)

Trong mô hình mô phỏng, thông số của vật liệu từ như sau: độ từ thẩm nam châm vĩnh $\mu_r = 1.07$, mật độ từ cảm $B = 0.401T$, độ từ thẩm ban đầu của rotor và stator $\mu = 7500$, mật độ từ cảm bão hòa $B = 1,99T$ (hình 2b). Bài báo thực hiện mô phỏng và phân tích ảnh hưởng của từ trường nam châm điện đến rotor, stator và khe hở không khí động cơ BLDC với các góc quay khác nhau của rotor.

2.2.2. Kết quả mô phỏng

2.2.2.1 Tính toán phân bố từ thông theo góc Rotor

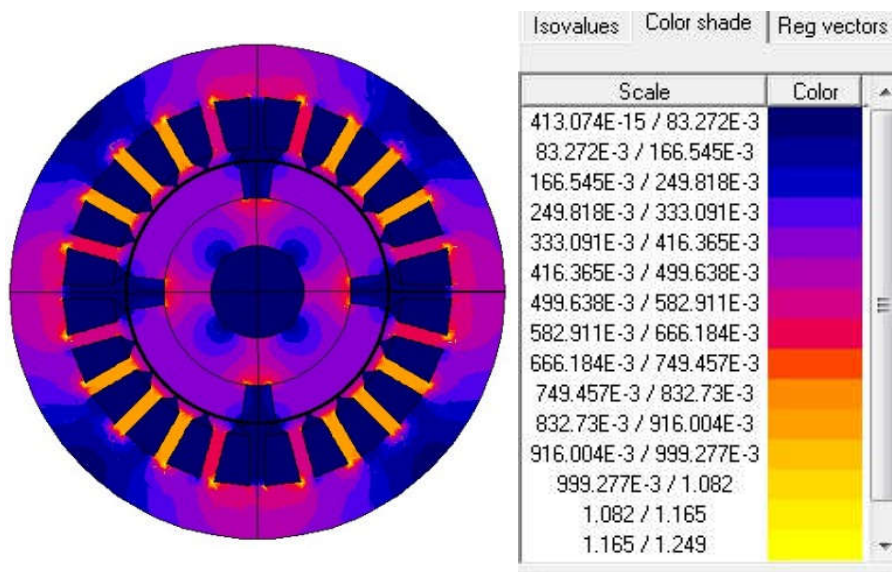
Kết quả mô phỏng cho phép tính toán các giá trị và hiển thị đường phân bố từ thông theo góc quay rotor, ta thấy giá trị lớn nhất từ thông là $2,58.10^{-6}Wb$ và xuất hiện tại vị trí ở hai rãnh cuộn dây giữa hai cực nam châm (hình 3).



Hình 3. Phân bố từ thông trong các trường hợp khác nhau của góc rotor

2.2.2.2. Phân bố mật độ từ cảm trong động cơ

Kết quả mô phỏng cho phép hiển thị kết quả phân bố dưới dạng màu sắc độ lớn mật độ từ cảm trong toàn bộ mặt cắt của động cơ và trên từng phần tử riêng biệt như rotor hay stator. Giá trị lớn nhất của mật độ từ cảm đạt 1,332T xuất hiện tại vị trí trên thân răng stator đối diện với nam châm rotor (hình 4).

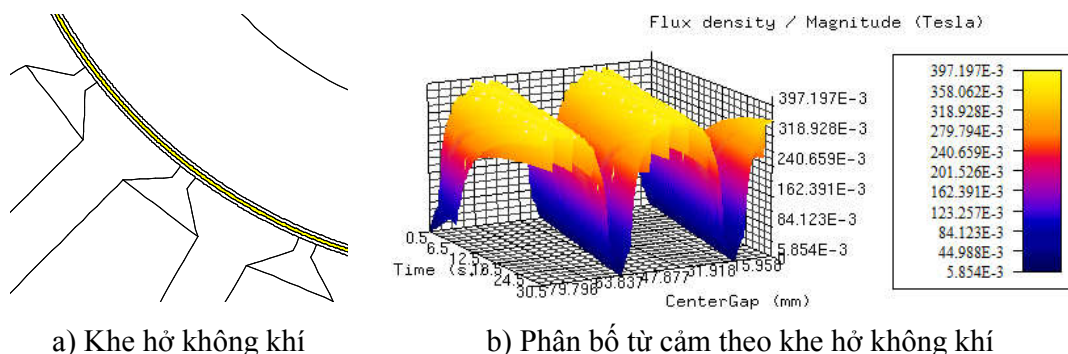


Hình 4. Phân bố từ thông và mật độ từ cảm

Nhận thấy giá trị mật độ từ cảm lớn nhất $B = 1,322T$ xác định điểm làm việc trên đường cong từ hóa của vật liệu từ. Điểm làm việc này nằm trên đoạn tuyến tính của đường cong từ hóa (mật độ từ cảm ứng với đoạn bão hòa của vật liệu từ đang khảo sát là 1,99T) và ở vị trí chuẩn bị bão hòa của vật liệu từ. Việc đẩy cao điểm làm việc sát đoạn bão hòa của đường đặc tính cho phép tận dụng tốt khả năng dẫn từ của vật liệu, dẫn đến kích thước hình học của động cơ và khối lượng vật liệu từ là tối ưu. Như vậy, kết quả mô phỏng ngoài việc cho phép nhà thiết kế xác định phân bố từ trường, mật độ từ cảm, còn cho phép xác định điểm làm việc trên đường cong từ hóa của vật liệu từ. Điều này đóng vai trò quan trọng trong việc tận dụng tối ưu khả năng dẫn từ của vật liệu cũng như tối ưu hóa phương án thiết kế kinh tế, kỹ thuật.

2.2.2.3. Phân bố từ cảm dọc theo khe hở không khí rotor và stator

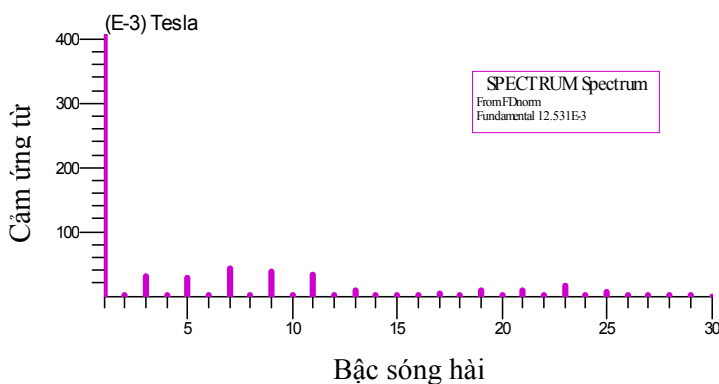
Kết quả phân bố từ cảm thành phần vuông góc dọc theo khe hở không khí rotor và stator (hình 5a) tại các thời điểm khác nhau khi rotor quay quanh trục cho thấy giá trị mật độ từ cảm thay đổi dọc theo vị trí tương đối rotor và stator, đạt giá trị lớn nhất bằng $397,197.10^{-3} T$. Từ trường khe hở không khí có phân bố dạng hình sin theo không gian. Kết quả mô phỏng cho phép xây dựng trực quan đồ thị phân bố từ cảm dọc theo khe hở không khí (hình 5.b).



Hình 5. Phân bố cảm ứng từ vuông góc tại khe hở không khí thời điểm $t = 1, 3, 5, 7s$

2.2.2.4. Phân tích thành phần sóng hài

Tính toán mô phỏng cho phép phân tích biên độ các thành phần sóng hài xuất hiện trong quá trình làm việc của động cơ. Xét tại thời điểm $t=1s$, phân tích cho thấy xuất hiện các thành phần sóng hài có biên độ lớn là các sóng hài bậc lẻ 3, 5, 7, 9 và 11 trong đó giá trị lớn nhất là hài bậc 7 (hình 6).



Hình 6. Phổ sóng hài theo thành phần cảm ứng từ tương ứng tại khe hở không khí

Từ giá trị phổ sóng hài thu được, có thể xác định độ méo dạng sóng hài (THD) tương ứng theo công thức sau:

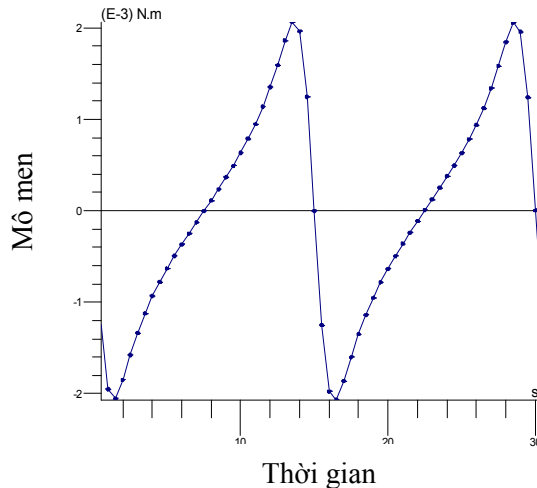
$$THD = 100 \cdot \frac{\sqrt{B_2^2 + B_3^2 + B_4^2 + \dots + B_n^2}}{B_1} \quad (4)$$

Dựa vào phổ sóng hài trên hình 6, độ méo của từ cảm thu được là THD (từ cảm) = 22%. Do sóng hài có thể ảnh hưởng đến các thiết bị khác trong hệ thống điện, nhiều tiêu chuẩn đã được đưa ra để đánh giá mức độ nghiêm trọng của sóng hài. Một trong các tiêu chuẩn này là tiêu chuẩn IEEE 519 của Viện Kỹ thuật Điện - Điện tử [3], tiêu chuẩn căn cứ vào mức độ nhạy cảm của các thiết bị trong một hệ thống điện làm ngưỡng quy định mức sóng hài áp tối đa được cho phép. Do đó, chuẩn IEEE 519 đưa ra các ngưỡng sóng hài khác nhau cho các hệ thống điện khác nhau. Trong trường hợp máy điện nghiên cứu ở trên mức độ méo dạng

sóng hài cho từ cảm thu được từ tính toán mô phỏng (22%) đã vượt ngưỡng cho phép đối với hệ thống công nghiệp (10%).

2.2.2.5. Phân tích mômen trên trục động cơ

Hình 7 thể hiện sự thay đổi của giá trị mômen trên trục động cơ trong khoảng thời gian 30s, giá trị cực đại bằng $2,0188 \cdot 10^{-3} \text{N.m}$. Việc tính toán chính xác giá trị mômen giúp cho việc tối ưu hóa vấn đề cơ khí khi chế tạo các máy điện.



Hình 7. Mômen trên trục động cơ

3. KẾT LUẬN

Sử dụng phần mềm mô phỏng trường điện từ trên cơ sở FEM cho phép xây dựng mô hình mô phỏng và đánh giá các tham số điện từ trường trong máy điện. Thực hiện mô phỏng trên động cơ BLDC cho thấy phân bố và ảnh hưởng của từ trường nam châm vĩnh cửu đối với trường hợp khác nhau của góc rotor. Kết quả mô phỏng cho thấy giá trị lớn nhất của từ thông xuất hiện tại vị trí ở hai rãnh cuộn dây giữa hai cực nam châm; giá trị lớn nhất của mật độ từ cảm xuất hiện tại vị trí trên thân răng stator đối diện với nam châm rotor; từ trường khe hở không khí có phân bố dạng hình sin theo không gian; xuất hiện sóng hài bậc lẻ trong đó lớn nhất là bậc 7 xét tại thời điểm $t=1\text{s}$. Các kết quả mô phỏng giúp đánh giá và cho phép đưa ra các giải pháp trong thiết kế, chế tạo nhằm tối ưu hóa và nâng cao hiệu suất động cơ.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

- [1] Viet Phuong Bui ; O. Chadebec ; L.-L. Rouve ; J.-L. Coulomb (2006), *An Homogenised FEM Model to Predict the Stray Magnetic Field Created by Faulty Electrical Machines*, 12th Biennial IEEE Conference on Electromagnetic Field Computation, Miami, USA.

- [2] Bozhidar Stoev and al. (2017), *Finite element analysis of rotating electrical machines - An educational approach*, Global Engineering Education Conference, Athens, Greece.
- [3] IEEE Std 519-2014, IEEE Recommended Practice and Requirements for Harmonic Control in Electric Power Systems, Viện kỹ thuật Điện - Điện tử.
- [4] S.J. Salon (1990), *Finite element analysis of electric machinery*, IEEE Computer Applications in Power, Volume: 3, Issue: 2.
- [5] Stefanov Goce, Vasilija Sarac (2011), *Calculation of Electromagnetic Fields in Electrical Machines using Finite Elements Method*, International Journal of Engineering and Industries.
- [6] User's guide Flux2D, 2006.

SIMULATION OF ELECTROTROMAGNETIC FIELD IN DC MOTORS USING THE FINITE ELEMENT METHOD

Nguyen Ngoc Van, Dang Viet Hung

ABSTRACT

The simulation of magnetic field distribution in electric machines enables people to evaluate the influence of device construction, device geometry and material parameters on machine performance. Recently, computer-aided simulation programs based on the Finite Element Method (FEM) are effective, reliable and low-cost tools for supporting researchers,

This paper aims to analyze and evaluate the impact of magnetic flux, flux density, Total Harmonic Distortion (THD) and moment through the simulation of a model of brushless direct current motor (BLDC).

Keywords: *FEM, magnetic field calculation, BLDC.*

HONG DUC UNIVERSITY

JOURNAL OF SCIENCE

No 39 (6 - 2018)

CONTENT

1	<i>Le Dinh Chac</i> <i>Nguyen Hoang Yen</i>	Distribution and generation of genetic types of the <i>Curculigo Orchioides</i> Gaertn. in Thanh Hoa	5
2	<i>Pham Thi Cuc</i> <i>Pham Van Chau</i>	Some applications of probability generating functions	14
3	<i>Hoang Van Dung</i> <i>Tran Minh Ngoc</i>	Network and network zoning at Hong Duc university	24
4	<i>Nguyen Tien Dung</i>	Controlling absorption and dispersion coefficient in a V scheme of the alkali-metal diatomic molecules	33
5	<i>Nguyen Tien Da</i>	Asymptotic behavior of stochastic two-dimensional hydrodynamic type equations with delays	40
6	<i>Nguyen Dinh Dinh</i> <i>Trinh Thi Phu</i>	The application of Maple software to build tests	48
7	<i>Mai Thi Ngoc Hang</i> <i>Le Thi Thanh Tam</i> <i>Mai Thi Hong</i>	The effect of coarse aggregate sizes on the properties of concrete	55
8	<i>Mai Thi Ngoc Hang</i> <i>Luu Dinh Thi</i> <i>Ha Van Son</i>	The engineering properties of concrete under Sulfate attack	65
9	<i>Nguyen Thi Hong</i>	Entanglement states in the Kerr-like nonlinear coupler pumped on two modes	72
10	<i>Le Quang Huy</i> <i>Hoang Thi Minh Nhan</i>	The radical of monomial ideal structure	82

11	<i>Ngo Thi Lan</i> <i>Nguyen Thi Thao</i> <i>Nguyen Van Can</i>	A study of transport and quantum time in one-side doped square quantum wells	89
12	<i>Dinh Chi Linh</i> <i>Le Viet Bau</i> <i>Tran Dang Thanh</i>	Magnetocaloric properties of perovskite manganites $\text{La}_{0.7}\text{A}_{0.3}\text{MnO}_3$ with A = Ca, Sr, and Ba	97
13	<i>Tran Mai Loan</i> <i>Tran Thi Hai</i> <i>Nguyen Van Can</i>	Study screening form factor to investigate modulation-doping effects on electric characteristics in quantum wells	108
14	<i>Nguyen Thi Nga</i>	The strong law of large numbers for pairwise independent random elements in banach space	115
15	<i>Luong Thi Kim Phuong</i> <i>Le Thi Giang</i>	The effect of Al^{3+} ion concentration and technological condition on optical properties of silica-titania thin film doped Er^{3+} ion for optical waveguide application	120
16	<i>Le Phuong Thanh</i>	Experimental investigation on fly ash based geopolymer bricks	131
17	<i>Nguyen Thi Thao</i>	Molecular dynamics simulation study on ZnO nanoporous structure with hexagonal hollow	140
18	<i>Nguyen Ngoc Van</i> <i>Dang Viet Hung</i>	Simulation of electrotromagnetic field in DC motors using the finite element method	148