

# **Đánh giá tương tác giữa các mặt mạng của tinh thể TiO<sub>2</sub> (Anatase, Rutile) và đế Fe(110), Fe(111) sử dụng phương pháp động học phân tử**

*Nguyễn Sĩ Hoài Vũ<sup>1,2\*</sup>, Tôn Nữ Quỳnh Trang<sup>2</sup>, Vũ Thị Hạnh Thu<sup>2</sup>*

<sup>1</sup>Viện Khoa học Cơ bản và Ứng dụng, Trường Đại học Duy Tân

<sup>2</sup>Khoa Vật lý – Vật lý Kỹ thuật, Trường Đại học Khoa học Tự Nhiên, ĐHQG-HCM  
nguyenshoaiwu@dtu.edu.vn, tnqtrang@hcmus.edu.vn, vththu@hcmus.edu.vn

## **Tóm tắt**

Trong nghiên cứu này, phương pháp mô phỏng động học phân tử (MD) được sử dụng để đánh giá năng lượng tương tác giữa các mặt mạng của tinh thể TiO<sub>2</sub> ở pha Anatase (8 mặt mạng phổ biến) và pha Rutile (10 mặt mạng phổ biến) trên đế thép – được đại diện bằng mặt mạng Fe(110) và Fe(111) ở nhiệt độ phòng. Nghiên cứu MD cho thấy các mặt mạng TiO<sub>2</sub> khác nhau có năng lượng liên kết và độ bất tương thích rất khác nhau với đế thép, tuy nhiên không có sự khác biệt giữa đế Fe(110) và Fe(111), đồng thời chứng minh pha Rutile tương tác với đế thép tốt hơn pha Anatase. Nghiên cứu thực nghiệm cho kết quả phù hợp với mô phỏng, khi màng mỏng TiO<sub>2</sub> được nung ở nhiệt độ thích hợp thể hiện khả năng chống ăn mòn trong môi trường nước biển cao hơn các mẫu không nung.

Từ khóa: Anatase; rutile; động học phân tử; tinh thể; ăn mòn; màng mỏng;

# **Evaluate interaction between TiO<sub>2</sub> crystal phase (Anatase and Rutile) and Fe(110), Fe(111) surfaces by molecular dynamics simulation**

*Nguyen Si Hoai Vu<sup>1,2\*</sup>, Ton Nu Quynh Trang<sup>2</sup>, Vu Thi Hanh Thu<sup>2</sup>*

<sup>1</sup>Institute of Fundamental and Applied Sciences, Duy Tan University

<sup>2</sup>Faculty of Physics and Engineering Physics, University of Science, VNU-HCM  
nguyenshoaiVu@dtu.edu.vn, tnqtrang@hcmus.edu.vn, vththu@hcmus.edu.vn

## **Abstract**

In this research, the molecular dynamics (MD) simulation was applied to study the interaction between TiO<sub>2</sub> crystal phases including 8 Anatase common orientations and 10 Rutile common orientations with steel surface – represented by Fe(110) and Fe(111) orientations. The results pointed out that different TiO<sub>2</sub> orientations have distinguished binding energy as well as the dissimilarity among them and steel surfaces, but there is almost no disagreement of them on Fe(110) and Fe(111) surface. The results also showed that Rutile phases has better connection to steel surface than Anatase phases. Experimental results had a good agreement with simulation data, emphasized that TiO<sub>2</sub> thin film had been treated in appropriate annealing temperature, exhibited better corrosion resistance than the others in simulated seawater environment.

Key words: Anatase; rutile; molecular dynamics; crystal; corrosion; thin film;