

# ẢNH HƯỞNG CỦA ÁP SUẤT ĐẾN TÍNH CHẤT NHIỆT ĐỘNG CỦA HỢP KIM FeSi

Nguyễn Thị Hồng<sup>1</sup>, Huỳnh Mai Thuận<sup>2</sup>, Trần Thị Hải<sup>1</sup>, Nguyễn Thị Dung<sup>1</sup>  
Nguyễn Thị Thảo<sup>1</sup>, Nguyễn Thị Loan<sup>1</sup>

## TÓM TẮT

Trong bài báo ảnh hưởng của áp suất đến tần số Debye, nhiệt độ Debye và nhiệt độ nóng chảy của hợp kim hai thành phần đã được nghiên cứu dựa trên phương pháp bán thực nghiệm trong mô hình Debye. Tính toán số được thực hiện cho hợp kim sắt silic Fe-18wt%Si tới áp suất 120 GPa. Kết quả được so sánh với dữ liệu thực nghiệm có sẵn và cho thấy sự phù hợp tốt. Đây là một yếu tố quan trọng để xác minh tính đúng đắn của lý thuyết mà chúng tôi đã phát triển và cho phép chúng tôi tin rằng mô hình hiện tại có thể được phát triển rộng rãi để nghiên cứu tính chất nhiệt động của các vật liệu khác.

**Từ khóa:** Nóng chảy, áp suất cao, sắt silic (FeSi), định luật Lindemann, mô hình Debye, tần số và nhiệt độ Debye.

## 1. ĐẶT VẤN ĐỀ

Hợp kim Fe-Si với nồng độ pha tạp cao đã và đang được chấp nhận như một vật liệu từ mềm khả thi về mặt thương mại, dự kiến sẽ được các ngành công nghiệp áp dụng rộng rãi [1-3]. Với đặc tính từ mềm tuyệt vời, hợp kim Fe-Si có thể đáp ứng nhu cầu ngày càng tăng về sản xuất và vận chuyển năng lượng điện cũng như nhu cầu gần đây đối với động cơ điện hiệu suất cao và máy biến áp điện thế cao.

Ở tâm vĩ mô hơn, lõi ngoài Trái Đất chủ yếu được cấu tạo từ sắt và hợp kim của sắt với ~8% đến 10% các nguyên tố nhẹ (chẳng hạn như Si, O, S, C và H) [4-6]. Các nguyên tố nhẹ này có ảnh hưởng lớn đến các tính chất nhiệt động và tính chất điện của sắt cũng như sự phân chia của chúng giữa lõi trong và lõi ngoài trái đất ở các điều kiện (P-T) liên quan. Nguyên tố nhẹ Si được xác định là chiếm từ 5 đến 10% khối lượng lõi Trái Đất [4] và là một trong những vật liệu hứa hẹn nhất cho nguyên tố nhẹ chính có ảnh hưởng đáng kể đến trạng thái nhiệt của lõi Trái Đất cũng như sự hình thành và phát triển của từ trường Trái Đất. Do đó, sơ đồ pha và phương trình trạng thái của hợp kim Fe-Si đã thu hút được sự quan tâm đặc biệt trong những năm gần đây [4][5].

Trong những năm gần đây, hợp kim FeSi giàu sắt đã thu hút được nhiều sự quan tâm từ các nhà nghiên cứu [4][7][8], nghiên cứu về các tính chất nhiệt động của hợp kim Fe-Si ở điều kiện áp suất lõi Trái Đất (như Fe-7.9wt%Si, Fe-17wt%Si, Fe-18wt%Si, Fe-33.5%Si,...) [9-11] cũng đã được thực hiện. Nhờ sự phát triển của kỹ thuật ô mạng để kim cương (Diamond-anvil cell - DAC) mà các nhà thực nghiệm đã có thể thực hiện các phép

<sup>1</sup>Khoa Khoa học Tự nhiên, Trường Đại học Hồng Đức; Email: nguyenthihongvatly@hdu.edu.vn

<sup>2</sup> Trường phổ thông Hermann Gmeiner Đà Nẵng

đo nhiệt độ nóng chảy của vật liệu ở những áp suất siêu cao (đến hàng trăm GPa) [12]. Các phép đo nhiệt độ nóng chảy, giản đồ pha và phương trình trạng thái sử dụng phương pháp nhiễu xạ tia X (X-ray diffraction - XRD) trong DAC với nguồn laser đốt nóng đã được thực hiện cho các hợp kim sắt Fe-FeSi, Fe-Ni-Si và Fe-Ni-S, Fe-X (X = Si, S, O) [13-15]. Phương pháp sóng shock cho hợp kim Fe-O-S với áp suất từ 106 GPa đến 232 GPa [16] và hợp kim Fe-Ni-Si [17] cũng được thực hiện. Gần đây, Li và cộng sự đã nghiên cứu một cách hệ thống ảnh hưởng phi điều hòa đến tính chất đàn hồi của sắt và các hợp kim  $Fe_{1-x}M_x$  (M = Al, V, Cr, Co, và Ni) bằng mô phỏng phiếm hàm mật độ (Density Functional Theory - DFT) [18]. Tuy nhiên, một vấn đề còn tồn tại đó là các nghiên cứu lý thuyết về tính chất nhiệt động của hợp kim chủ yếu là trong khoảng nhiệt độ và áp suất thấp. Ở vùng nhiệt độ và áp suất cao, các kết quả tính toán từ các phương pháp nghiên cứu nói trên chưa phù hợp tốt với thực nghiệm, nhiều thí nghiệm cần được làm khớp vì chưa đạt được đến điều kiện nhiệt độ và áp suất mong muốn. Giá trị thu được của các đại lượng nhiệt động của hợp kim sắt ở áp suất cao giữa các nghiên cứu vẫn còn gây tranh cãi, chưa có sự thống nhất, thậm chí là mâu thuẫn trong các tính toán lý thuyết, đo đạc thực nghiệm và mô phỏng, giá trị sai khác có thể lên đến hàng ngàn Kenvin.

Trong bài báo, chúng tôi sử dụng phương pháp bán thực nghiệm trong mô hình Debye. Sử dụng biểu thức của hệ số Grüneisen trong mô hình Debye do nhóm của Burakovsky đề xuất chúng tôi suy ra biểu thức phụ thuộc thể tích của tần số và nhiệt độ Debye. Đồng thời chúng tôi kết hợp mô hình Debye với định luật nóng chảy Lindemann để rút ra biểu thức phụ thuộc thể tích của nhiệt độ nóng chảy của hợp kim hai thành phần. Để đánh giá ảnh hưởng của áp suất đến các đại lượng nhiệt động được đưa ra chúng tôi sử dụng phương trình trạng thái Vinet. Kết quả tính toán số cho hợp kim Fe-18wt%Si đến áp suất 120 GPa cho thấy sự phù hợp khá tốt với các số liệu thực nghiệm thu thập được.

## 2. NỘI DUNG NGHIÊN CỨU

### 2.1. Lý thuyết và phương pháp nghiên cứu

#### 2.1.1. Hệ số Grüneisen trong mô hình Debye

Mô hình Debye giả thiết rằng trong vật rắn có  $N$  nguyên tử dao động với tần số biến thiên từ 0 đến giá trị cực đại  $\omega_D$ . Giá trị tần số cực đại  $\omega_D$  được gọi là tần số Debye. Cũng trong mô hình này, ảnh hưởng của thể tích tinh thể đến tần số dao động phonon được mô tả bởi một hệ số đặc trưng gọi là hệ số Grüneisen  $\gamma_G$  dưới dạng [19]

$$\gamma_G = -\frac{\partial \ln \omega_D}{\partial \ln V}, \quad (1)$$

trong đó  $V$  là thể tích của tinh thể.

Ở vùng áp suất thấp, hệ số Grüneisen được xem như là hằng số, không phụ thuộc vào sự thay đổi của áp suất. Tuy nhiên, ở vùng áp suất cao, các nghiên cứu gần đây chỉ ra rằng, hệ số Grüneisen sẽ giảm dần khi áp suất tăng [20]. Để đánh giá ảnh hưởng của thể tích (áp suất) đến hệ số Grüneisen, trong thời gian gần đây, nhóm của Burakovsky đã xây dựng được biểu thức của hệ số Grüneisen dưới dạng [21]

$$\gamma_G = \frac{1}{2} + \gamma_1 \eta^{\frac{1}{3}} + \gamma_2 \eta^5, \quad (2)$$

trong đó,  $\eta = \frac{V}{V_0}$  là hệ số nén, các tham số  $\gamma_1, \gamma_2, s > 1$  là các giá trị phụ thuộc vào vật liệu nghiên cứu và có thể được xác định bằng cách làm khớp biểu thức (2) với các dữ liệu thực nghiệm của hệ số Grüneisen.

### 2.1.2. Tần số và nhiệt độ Debye

Để đánh giá ảnh hưởng của thể tích đến tần số Debye, chúng tôi dựa trên hệ số Grüneisen được định nghĩa trong mô hình Debye kết hợp đề xuất của Burakovsky và cộng sự về hệ số Grüneisen. Thay biểu thức của hệ số Grüneisen (2) vào phương trình (1) và lấy tích phân chúng tôi thu được biểu thức phụ thuộc thể tích của tần số Debye và nhiệt độ Debye tương ứng như sau

$$\omega_D(\eta) = \omega_{0D} \eta^{-1/2} \exp \left[ -3\gamma_1(\eta^{1/3} - 1) - \frac{\gamma_2}{s}(\eta^s - 1) \right] \quad (3)$$

$$\theta_D(\eta) = \frac{\hbar \omega_D(\eta)}{k_B} = \theta_{0D} \eta^{-1/2} \exp \left[ -3\gamma_1(\eta^{1/3} - 1) - \frac{\gamma_2}{s}(\eta^s - 1) \right] \quad (4)$$

trong đó  $\omega_{0D}$  và  $\theta_{0D} = \frac{\hbar \omega_{0D}}{k_B}$  tương ứng là tần số và nhiệt độ Debye của hợp kim ở áp suất không. Các đại lượng này có thể được xác định từ các phép đo thực nghiệm hoặc từ mô hình Debye tương quan phi điều hòa [22].

Các biểu thức (3) và (4) cho phép chúng ta xác định được ảnh hưởng của sự thay đổi thể tích đến tần số và nhiệt độ Debye.

### 2.2. Nhiệt độ nóng chảy

Để nghiên cứu bài toán nóng chảy của vật liệu, chúng tôi kết hợp mô hình Debye với định luật nóng chảy Lindemann [23]. Với nỗ lực tiên đoán điểm nóng chảy của các tinh thể, năm 1910, trong công trình “The calculation of molecular vibration frequencies”, F.A. Lindemann xây dựng điều kiện nóng chảy như sau: Quá trình nóng chảy của vật liệu sẽ bắt đầu diễn ra khi tỉ số giữa căn bậc hai của độ dịch chuyển bình phương trung bình  $\langle u^2 \rangle$  và khoảng cách lân cận gần nhất giữa các nguyên tử  $a(P, T)$  tiến đến một giá trị tới hạn (hay giá trị ngưỡng) [24].

Điều kiện nóng chảy Lindemann cũng đã được nhóm của Wang và cộng sự [25] chỉ ra là tương đương với công thức sau:

$$T_m = \text{const.} V^{2/3} \cdot \theta_D^2 \quad (5)$$

trong đó thể tích tinh thể  $V$  và nhiệt độ Debye  $\theta_D$  là các đại lượng phụ thuộc vào áp suất.

Kết hợp phương trình (5) với các phương trình (1) và (2) rồi lấy tích phân, chúng tôi thu được biểu thức giải tích tường minh của nhiệt độ nóng chảy  $T_m$  phụ thuộc vào hệ số nén  $\eta$  là

$$T_m = T_0 \eta^{-1/3} \exp \left\{ 6\gamma_1(1 - \eta^{1/3}) + \frac{2\gamma_2}{s}(1 - \eta^s) \right\} \quad (6)$$

trong đó  $T_0$  là nhiệt độ nóng chảy của vật liệu ở điều kiện thường có thể được thu thập từ các phép đo thực nghiệm trước đây.

Để xác định được ảnh hưởng của áp suất đến các đại lượng nhiệt động (tần số, nhiệt độ Debye và nhiệt độ nóng chảy) chúng ta cần biết mối liên hệ giữa áp suất  $P$  và hệ số nén  $\eta$ , hay phương trình trạng thái (Equation of state - EOS) của vật liệu. Trong bài báo, chúng tôi sẽ sử dụng phương trình Vinet để đánh giá ảnh hưởng của áp suất đến các tính chất nhiệt động của vật liệu. Vinet EOS được xây dựng có dạng sau [26]

$$P = 3K_0\eta^{-2/3}(1 - \eta^{1/3}) \exp \left[ \frac{3}{2}(K'_0 - 1)(1 - \eta^{1/3}) \right] \quad (7)$$

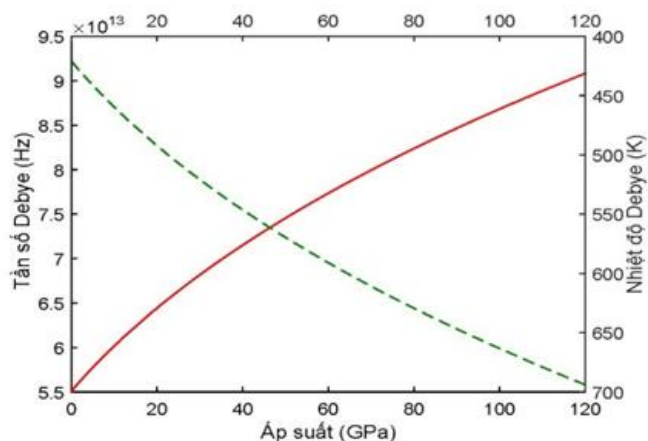
trong đó,  $K_0, K'_0$  tương ứng là các môđun nén khối đẳng nhiệt và đạo hàm bậc nhất theo áp suất của nó. Các giá trị  $K_0, K'_0$  có thể được xác định bằng đo đạc thực nghiệm hoặc mô phỏng DFT.

Như vậy, bằng cách kết hợp các biểu thức giải tích mà chúng tôi đã rút ra ở (3), (4), (6) với Vinet EOS (7), chúng tôi có thể nghiên cứu được ảnh hưởng của áp suất đến các tính chất nhiệt động (tần số Debye, nhiệt độ Debye và nhiệt độ nóng chảy) của vật liệu.

### 2.3. Tính toán số và thảo luận kết quả

Trong phần này, chúng tôi trình bày kết quả nghiên cứu ảnh hưởng của áp suất đến các tính chất nhiệt động của hợp kim Fe-18wt%Si. Để đánh giá được ảnh hưởng của áp suất đến tần số Debye, nhiệt độ Debye và nhiệt độ nóng chảy, chúng ta cần biết được sự phụ thuộc thể tích (hay áp suất) của hệ số Grüneisen của vật liệu. Trong hiểu biết của chúng tôi, cho đến hiện nay, chưa có công trình nghiên cứu thực nghiệm (và cả lý thuyết) nào được thực hiện để nghiên cứu hệ số Grüneisen của các hợp kim sắt dưới áp suất cao. Tuy vậy, dựa trên các nghiên cứu về các tính chất nhiệt động, đàn hồi và phương trình trạng thái [26] các nhà khoa học cho thấy sự gia tăng nồng độ của Si trong hợp kim Fe-Si không làm thay đổi quá nhiều các tính chất cơ-nhiệt động của hợp kim ở áp suất cao [27]. Điều này dẫn đến giả thiết rằng hệ số Grüneisen của hợp kim Fe-Si có thể được mô tả gần đúng bằng hệ số Grüneisen của kim loại sắt. Giả thiết này đã được Lin và cộng sự sử dụng thành công để nghiên cứu tính chất đàn hồi của một số hợp kim Fe-Si như  $Fe_{85}Si_{15}$ ,  $Fe_{71}Si_{29}$ ,  $\epsilon$ -FeSi [10]. Để xác định được giá trị của bộ tham số  $\gamma_1, \gamma_2, s$  của kim loại sắt, chúng tôi thực hiện làm khớp phương trình (2) với dữ liệu thực nghiệm  $\gamma_G$  của sắt [28]. Giá trị làm khớp của  $\gamma_1, \gamma_2$  và  $s$  của kim loại sắt trong gần đúng bình phương tối thiểu tương ứng là  $\gamma_1 = -0,1603$ ,  $\gamma_2 = 1,4092$ , và  $s = 1,0003$ . Đồng thời chúng tôi cũng sử dụng các tham số cơ-nhiệt động của Fe-17wt%Si ( $Fe_{71}Si_{29}$ ) trong công trình của nhóm Edmund [27] cụ thể là  $K_0 = 172,1(\pm 1,2)$  GPa,  $K'_0 = 4,9(\pm 1)$ ,  $T_0 = 1473$ K,  $\theta_{0D} = 421$  K (tại  $P = 0$ ).

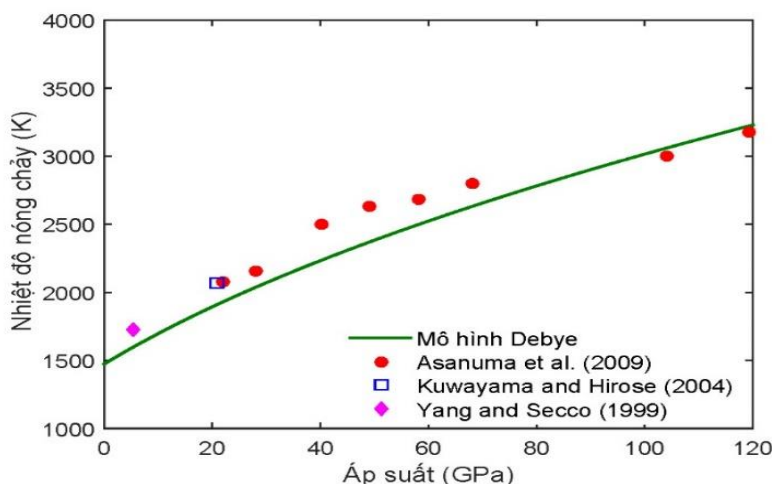
Hình 1 đã biểu diễn sự phụ thuộc áp suất của tần số và nhiệt độ Debye của hợp kim Fe-18wt%Si đến 120 GPa. Kết quả tính toán lý thuyết cho thấy, tần số và nhiệt độ Debye của hợp kim Fe-18wt%Si tăng nhanh theo áp suất. Khi áp suất tăng từ 0 đến 120 GPa, tần số và nhiệt độ Debye tăng khoảng 2,6 lần



**Hình 1. Tần số Debye (đường liền nét) và nhiệt độ Debye (đường nét đứt) của hợp kim Fe-18wt%Si dưới ảnh hưởng của áp suất**

Sự tăng nhanh của tần số (và nhiệt độ Debye) có thể được giải thích do sự hạn chế dao động của nguyên tử tại nút mạng khi áp suất tăng cao, do không tìm thấy dữ liệu thực nghiệm (cũng như lý thuyết) các đại lượng nhiệt động của Fe-18wt%Si, các phép so sánh đã được bỏ qua.

Trên hình 2 là đồ thị nhiệt độ nóng chảy của hợp kim Fe-18wt%Si dưới ảnh hưởng của áp suất đến 120 GPa. Các kết quả thực nghiệm của các nhóm Asanuma và cộng sự [9] (hình tròn đậm, dựa trên sự thay đổi hiệu suất đốt nóng của tia laser), Kuwayama and Hirose [29] (hình vuông), Yang and Secco [11] (hình kim cương đậm, dựa trên sự thay đổi điện trở suất của mẫu hợp kim Fe-Si) cũng được chúng tôi biểu diễn để so sánh.



**Hình 2. Nhiệt độ nóng chảy của hợp kim Fe-18wt%Si dưới ảnh hưởng của áp suất**

Từ hình vẽ có thể nhận thấy, kết quả tính toán lý thuyết từ mô hình Debye mô tả khá tốt quy luật biến thiên của nhiệt độ nóng chảy của hợp kim Fe-18wt%Si dưới ảnh hưởng của áp suất: Nhiệt độ nóng chảy tăng dần theo áp suất nhưng với tốc độ giảm dần ở áp suất cao. Cụ thể là, ở thời điểm ban đầu, tốc độ biến thiên của nhiệt độ nóng chảy theo áp suất là  $\frac{dT_m}{dP} = 27,6\text{K/GPa}$ . Tuy nhiên ở áp suất 120 GPa, độ dốc của đường cong nóng chảy chỉ còn là  $\frac{dT_m}{dP} = 2,3\text{K/GPa}$ .

### 3. KẾT LUẬN

Trong bài báo này, chúng tôi đã xây dựng được biểu thức giải tích tường minh phụ thuộc vào thể tích (áp suất) của tần số Debye, nhiệt độ Debye và nhiệt độ nóng chảy của hợp kim FeSi. Kết quả tính số cho thấy khi áp suất tăng sẽ dẫn đến sự tăng nhanh của tần số Debye, nhiệt độ Debye và nhiệt độ nóng chảy. Các kết quả tính số đạt được phù hợp tốt với thực nghiệm cho thấy rằng lý thuyết mà chúng tôi xây dựng có thể được sử dụng để tiên đoán được các tính chất nhiệt động của các vật liệu khác dưới ảnh hưởng của áp suất. Đây đồng thời cũng là những thông tin vật lý quan trọng có thể giúp ích cho các nghiên cứu về thành phần, động lực học cũng như tiến hoá của Trái Đất và các hành tinh.

## TÀI LIỆU THAM KHẢO

- [1] G. Ouyang, et al. (2019), *Review of Fe-6.5 wt%Si high silicon steel-A promising soft magnetic material for sub-kHz application*, J. Magn. Mater., vol. 481, 234-250.
- [2] Y. F. Liang, et al. (2015), *Fabrication of Fe-6.5wt%Si Ribbons by Melt Spinning Method on Large Scale*, Adv. Mater. Sci. Eng, 1-5.
- [3] G. Kumari, et al. (2023), *Improving the soft magnetic properties of binder jet printed iron-silicon alloy through boron addition.pdf*, Mater. Chem. Phys., vol. 296, 12718.
- [4] J. K. Wicks, et al. (2018), *Crystal structure and equation of state of Fe-Si alloys at super-Earth core conditions*, Sci. Adv., vol. 4, 5864.
- [5] Y. Zhang, et al. (2022), *Thermal conductivity of Fe-Si alloys and thermal stratification in Earth's core*, PNAS, 119(1), 1-8.
- [6] K.D. Litasov, et al. (2016), *Composition of the Earth's core: A review*, Russ. Geol. Geophys., vol. 57, 22-26.
- [7] T. Mohri, et al. (2017), *Mechanical properties of Fe-rich Si alloy from Hamiltonian*, Comput. Mater, 3(1), 1-14.
- [8] S. Yokoo (2023), *Composition-dependent thermal equation of state of B2 Fe-Si alloys at high pressure*, J. Am. Mineral., 3(108).
- [9] H. Asanuma et al. (2009), *Melting of iron-silicon alloy up to the core-mantle boundary pressure: Implications to the thermal structure of the Earth's core*, Phys. Chem. Miner. 37(6), 353-359.
- [10] J. F. Lin, et al. (2003), *Static compression of iron-silicon alloys: Implications for silicon in the Earth's core*, J Geophys Res., 108(B1), 2045.
- [11] H. Yang, et al. (1999), *Melting Boundary of Fe-17%Si up to 5.5 GPa and the Timing of Core Formation*, Geophys. Res. Lett., 26(2), 263-266.
- [12] Y. Ping, et al. (2013), *Solid Iron Compressed Up to 560 GPa*, Phys. Rev. Lett., 111, 065501.
- [13] G. Morard, et al. (2011), *Melting of Fe-Ni-Si and Fe-Ni-S alloys at megabar pressures: implications for the core-mantle boundary temperature*, Phys Chem Miner., 38, 767-776.
- [14] G. Morard, et al. (2014), *Properties of iron alloys under the Earth's core conditions*, Comptes Rendus Geosci., 346, 130-139.
- [15] R. A. Fischer et al. (2013), *Phase relations in the Fe-FeSi system at high pressures and temperatures*, Earth Planet. Sci. Lett., 373, 54-64.
- [16] H. Huang et al. (2010), *Melting behavior of Fe-O-S at high pressure: A discussion on the melting depression induced by O and S*, Journal of Geophysical Research: Solid Earth, 115(5).
- [17] Y. Zhang, et al. (2018), *Shock compression and melting of an Fe-Ni-Si alloy: implications for the temperature profile of the Earth's core and the heat flux across the core-mantle boundary*, Journal of Geophysical Research: Solid Earth, 123(2) 1314-1327.
- [18] X. Li, et al (2017), *Elastic anharmonicity of bcc Fe and Fe-based random alloys from first-principles calculations*, Phys. Rev. B - Condens. Matter Mater. Phys., 95(2), 1-11.
- [19] E. Grüneisen (1912), *Theorie des festen Zustandes einatomiger Elemente*, Ann. Phys., 344(12), 257-306.

- [20] R. Boehler (1983), *Melting temperature, adiabats, and Grüneisen parameter of lithium, sodium and potassium versus pressure*, Phys. Rev. B, 27(11), 6754-6762.
- [21] L. Burakovsky, et al. (2004), *Analytic model of the Grüneisen parameter all densities*, J. Phys. Chem. Solids, vol. 65, no. 8-9, 1581-1587.
- [22] N. V. Hung, et al. (2010), *Anharmonic correlated Debye model Debye-Waller factors*, Phys. B Condens. Matter, 405(11), 2519-2525.
- [23] L. Burakovsky, et al. (2000), *Analysis of dislocation mechanism for melting of elements: Pressure dependence*, J. Appl. Phys., 88(11), 6294-6301.
- [24] F. Lindemann (1910), *The calculation of molecular vibration frequencies*, Phys. Z, vol. 11, 609-612.
- [25] Y. N. Wu, et al. (2011), *Melting of copper under high pressures by molecular dynamics simulation*, Chem. Phys. Lett., vol. 515, no. 4-6, 217-220.
- [26] P. Vinet, et al. (1987), *Compressibility of solids*, J. Geophys. Res. Geophys Res, 92(B9), 9319-9325.
- [27] E. Edmund (2018), *The Elasticity of Iron-Alloys at Extreme Conditions*, Sorbonne University Doctoral School 397 - Physics and Chemistry of Materials.
- [28] O. L. Anderson, et al. (2001), *Experimental vibrational Grüneisen ratio values for  $\epsilon$ -iron up to 330 gpa at 300 k*, Geophys. Res. Lett., 28(2), 399-402.
- [29] K. Kuwayama, et al. (2004), *Phase relation in the system Fe-FeSi at 21 Gpa*, Am. Mineral., vol. 89, 273-276.

## THE EFFECT OF PRESSURE ON THE THERMODYNAMIC PROPERTIES OF FeSi ALLOY

Nguyen Thi Hong, Huynh Mai Thuan, Tran Thi Hai, Nguyen Thi Dung,  
Nguyen Thi Thao, Nguyen Thi Loan

### ABSTRACT

*In this paper, we investigate the effects of pressure on the Debye frequency, Debye temperature, and melting temperature of two-component alloys using a semi-empirical approach within the Debye model. Numerical calculations were conducted for the Fe-18wt%Si ferrosilicon alloy up to a pressure of 120 GPa. Our results are compared with previous experimental and theoretical data, demonstrating good agreement. This validation is crucial for confirming the accuracy of our developed theory and suggests that the current model can be extensively applied to study the thermodynamic properties of other materials.*

**Keywords:** *Melting, high pressure, ferrosilicon (FeSi), lindemann melting law, Debye model, Debye frequency and temperature.*

\* Ngày nộp bài: 03/7/2023; Ngày gửi phản biện: 15/7/2023; Ngày duyệt đăng: 10/12/2023

\* Bài báo là kết quả nghiên cứu từ đề tài NCKH cấp cơ sở (mã số ĐT-2022-17) của Trường Đại học Hồng Đức.