

4
2015



ISSN 1859 - 2171

ĐẠI HỌC THÁI NGUYÊN
THAI NGUYEN UNIVERSITY

TẠP CHÍ

KHOA HỌC & CÔNG NGHỆ

JOURNAL OF SCIENCE AND TECHNOLOGY

CHUYÊN SAN KHOA HỌC TỰ NHIÊN - KỸ THUẬT
NATURAL SCIENCE TECHNOLOGY

Tập 132, số 02, 2015



ĐẠI HỌC KHOA HỌC VÀ CÔNG NGHỆ HÀ NỘI
HANOI UNIVERSITY OF SCIENCE AND TECHNOLOGY

TẠP CHÍ

KHOA HỌC & CÔNG NGHỆ

SCIENCE AND TECHNOLOGY

QUẢN LÝ VÀ CÔNG NGHỆ THÔNG TIN
INFORMATION MANAGEMENT AND TECHNOLOGY

ISSN 1676-7445

ISSN 1676-7445

132(02)

Năm 2015

Tạp chí Khoa học và Công nghệ

Journal of Science and Technology

TẠP CHÍ KHOA HỌC & CÔNG NGHỆ

CHUYÊN SAN KHOA HỌC TỰ NHIÊN - KỸ THUẬT

Mục lục	Trang
Nguyễn Văn Huân, Nguyễn Thị Hằng, Lê Anh Tú - Thuật toán phân đoạn khách hàng trong Marketing điện tử dựa vào quan hệ khách hàng sử dụng luật kết hợp	3
Đinh Văn Nam - Phát triển ứng dụng chuyển đổi tín hiệu số sang tín hiệu tương tự thực hiện trên kit phát triển Spartan -3E	13
Đỗ Thị Chi, Lê Sơn Thái, Đỗ Năng Toàn - Nghiên cứu một số kỹ thuật phát hiện va chạm áp dụng trong mô phỏng chuyển động cơ học	17
Đỗ Thị Mai - Xây dựng mô hình toán học và tính toán luật điều khiển tối ưu cho vòng điều khiển nhiệt độ từ bảng dữ liệu thực nghiệm	25
Đỗ Trung Hải - Ứng dụng hệ mờ - neuron Takagi - Sugeno trong điều khiển bám hệ động học phi tuyến	31
Lê Thị Thu Huyền, Hoàng Thị Thương, Vũ Thị Oanh - Điều khiển máy giặt sử dụng các thuật toán thông minh trên nền vi điều khiển	37
Ngô Minh Đức, Lê Tiên Phong, Ngô Đức Minh - Nghiên cứu điều khiển bộ biến đổi điện tử công suất khai thác nguồn pin mặt trời trên mô hình thiết bị thực	43
Lưu Thị Liễu, Đỗ Thị Loan, Đào Thị Hằng, Nguyễn Thị Phương Thanh - Nghiên cứu một số kỹ thuật nâng cao chất lượng ảnh văn bản	51
Ngô Thị Lan, Trần Hồng Quân, Nguyễn Thị Thanh Nhân, Lê Thu Trang - Phân tích câu hỏi tiếng Việt trong hệ thống hỏi đáp dựa vào cộng đồng	57
Đoàn Văn Ban, Nguyễn Hiền Trinh - Dạng chuẩn của cây đước gắn nhãn trong khai phá các đồ thị con phổ biến	63
Nguyễn Quốc Bảo, Nguyễn Thành Trung, Nguyễn Thu Phương, Phạm Thị Hương - Tăng cường mô hình âm học cho nhận dạng tiếng nói tiếng Việt sử dụng đặc trưng âm học làm đầu vào cho mạng neuron	71
Phạm Thành Nam, Đào Mạnh Tuấn, Nguyễn Thị Thảo - Giao thức truyền thông coap trong mạng cảm biến không dây	77
Lê Khánh Dương, Nguyễn Anh Chuyên, Trịnh Minh Đức - Sử dụng cơ chế liên tầng trong điều khiển cửa sổ tranh chấp của gói tin quảng bá nhằm nâng cao chất lượng dịch vụ trong mạng Vanet	83
Nguyễn Đức Thảo, Dương Hòa An, Trần Hoài Linh - Thiết kế thiết bị thu thập tín hiệu nhịp thở và thuật toán loại trừ ảnh hưởng tới nhịp tim	87
Nguyễn Hữu Công, Vũ Ngọc Kiên, Đỗ Trung Hải, Bùi Mạnh Cường - Ứng dụng thuật toán giảm bậc cho bài toán điều khiển robot hai bánh	95
Vũ Việt Vũ, Phùng Thị Thu Hiền - Nghiên cứu cải tiến chất lượng thuật toán phân cụm nửa giám sát k-means bằng phương pháp học tích cực	103
Quách Xuân Trường, Nguyễn Tuấn Anh, Nguyễn Văn Sự - Khai phá dữ liệu điểm sinh viên dựa trên bảng quyết định theo tiếp cận lý thuyết tập thô	109
Dương Phạm Tường Minh, Lương Việt Dũng - Mô hình hóa và mô phỏng số cho tấm composite trục hướng dạng các - tông lượn sóng	117
Nguyễn Hồng Kông, Vũ Lai Hoàng, Đặng Quốc Khánh, Trần Văn Sơn - Khảo sát các tính chất cơ - lý của composit Cu - TiC chế tạo bằng phương pháp luyện kim bột	123
Đặng Xuân Thường, Đàm Thị Hạnh, Đỗ Văn Hải, Hoàng Văn Hùng - Mô phỏng mức độ ô nhiễm môi trường nước biển khu vực ven biển phường Bãi Cháy, thành phố Hạ Long, tỉnh Quảng Ninh	129

Hoàng Văn Hùng, Nguyễn Hồng Nhung, Ngô Thị Bích Lập, Nguyễn Hoàng - Ứng dụng công nghệ GIS trong quản lý bụi thải và mô phỏng ô nhiễm không khí tại mỏ than Khánh Hoà, tỉnh Thái Nguyên	135
Nguyễn Thị Tuyền, Đào Thị Thu - Ứng dụng hệ suy diễn mờ (ANFIS) giải quyết bài toán phân ngành cho sinh viên khoa Công nghệ Thông tin, trường Đại học Công nghệ Thông tin & Truyền thông - ĐHTN.	141
Phạm Hồng Nam - Một số ứng dụng của d-dãy distinguish	147
Đỗ Nam Tiến, Nguyễn Văn Nam, Nguyễn Thu Anh - Giải pháp tìm kiếm trong cơ sở dữ liệu ảnh bệnh thùy sản với thông tin mô tả mờ	155
Nguyễn Gia Đăng, Nguyễn Minh Tuấn, Nguyễn Trung Quân, Đỗ Thị Loan - Ứng dụng ASP.Net MVC5, Entity Framework trong xây dựng hệ thống quy trình quản lý sản xuất	163
Ngô Mạnh Tường - Phương pháp không lưới RBF-FD sử dụng nội suy Hermite RBF giải phương trình Poisson	171
Ngô Thị Kim Quy, Đỗ Thanh Phúc - Phương pháp nghiệm trên và dưới giải bài toán giá trị biên tuần hoàn cấp bốn	177
Nguyễn Thị Phương Dung - Phức Koszul liên kết với đối xứng Hecke	183
Trương Thị Thùy Dung - Tính ổn định của ánh xạ nghiệm của bài toán tựa cân bằng yếu	189
Nguyễn Văn Hiếu - Đánh giá môi trường chất lượng nước mặt của lưu vực sông Công tỉnh Thái Nguyên bằng chỉ số WQI và phần mềm Arcgis	195
Nguyễn Bá Đức - Các biểu thức tính các tham số nhiệt động và các cumulant theo các tham số cấu trúc mới qua thể tương tác hiệu dụng trong XAFS	201

THUẬN
DỰA V

TÓM T

Lợi
đảm
một
tiền
mức
chú
ngo
hệ k
Bài
ngh
trợ
nhu
đến
chê
Tù

GIỚI T

Khách
đôi-với
bất cứ
kinh đ
khách h
càng n
có lãi,
vậy, n
luôn từ
giải ph
quan t
truyền
hút nh
doanh
doanh
Để giữ
hay tr
khách
lại có
nhưng
dụng p
market
tùy th

* Tel: 09

THE CALCULATION EXPRESSIONS OF CUMULANTS AND THERMODYNAMIC PARAMETERS ACCORDING TO NEW STRUCTURAL PARAMETERS BY POTENTIAL EFFECTIVE INTERACTION IN XAFS

Nguyễn Bá Đức*
Tan Trao University

SUMMARY

On the basis of quantum statistical theory with phonon interaction procedure, the expressions describing asymmetric component or cumulants include the first cumulant or thermal expansion, the second cumulant or the mean square relative displacement (MSRD) or Debye-Waller factor, the third cumulant and thermodynamic parameters including the anharmonic effects contributions of cubic crystals (face center cubic - fcc, body center cubic - bcc) has been formulated. By using potential effective interaction in the anharmonic correlated Einstein model has derived new structural parameters, this parameters can provide the distribution of atoms. The expansion of cumulants and thermodynamic parameters through new structural parameters has been performed in X ray absorption fine structure (XAFS) theory. Numerical results for copper (Cu) crystals are found to be good agreement with experimental.

Keywords: *anharmonic, XAFS, cumulants, thermodynamic, parameters*

INTRODUCTION

In the harmonic approximation XAFS (X-ray Absorption Fine Structure) spectra, the theoretical calculations is generally well appropriate with the experimental results at low temperatures [2], because the anharmonic contributions from atomic thermal vibrations can be neglected. However, at the different high temperatures, the XAFS spectra provide apparently different structural information due to the anharmonic effects and these effects need to be evaluated. Furthermore, the XAFS spectra at low temperatures may not provide a correct picture of crystal structure [3]. Therefore, this work of the XAFS spectra including the anharmonic effects at high temperatures is to be needed. The expression of anharmonic XAFS spectra often is described as [4]:

$$\chi(k) = F(k) \frac{\exp[-2R/\lambda(k)]}{kR^2} \operatorname{Im} \left\{ e^{i\Phi(k)} \exp \left[2ikR + \sum_n \frac{(2ik)^n}{n!} \sigma^{(n)} \right] \right\}, \quad (1)$$

where $F(k)$ is the real specific atomic backscattering amplitude, $\Phi(k)$ is total phase

shift of photoelectron, k is wave number, λ is mean free path of the photoelectron, and $\sigma^{(n)}$ ($n=1, 2, 3, \dots$) are the cumulants to describe asymmetric components, they appear due to the thermal average of the function e^{-2ikr} , in which the asymmetric terms are expanded in a Taylor series around value $R = \langle r \rangle$ with r is instantaneous bond length between absorbing and backscattering atoms at T temperature and then are rewritten in terms of cumulants.

At first, the cumulant expansion approach has been used mainly fitting the XAFS spectra to extract physical parameters from experimental values. Thereafter, some procedure were formulated for the purpose of analytic calculation of cumulants, and the anharmonic correlated Einstein model [7] which has been given results good agreement with experimental values. The important development in this procedure is that model has been calculated into the interaction between absorbing and backscattering atoms with neighboring atoms in a cluster of nearest atoms at high temperatures. The potential interaction between the atoms becomes asymmetric due to the anharmonic effects and the asymmetric components were written in

* Tel: 0903 216482

terms of the cumulants. The first cumulant or net thermal expansion, the second cumulant or Debye-Waller factor, the third cumulant is description phase shift of anharmonic XAFS spectra. The purpose of this work is to formulate the cumulant expressions and to write thermodynamic parameters as general form through the new structure parameters by using the anharmonic correlated Einstein model.

FOMALISM

According to the anharmonic correlated Einstein model, effective interaction between absorbing and backscattering atoms with contributions of atomic neighbors is characterized by an effective potential [6]:

$$U(x) \approx k_{\text{eff}} x^2 / 2 + k_3 x^3 + \dots, \quad x = r - r_0 \quad (2)$$

where r is spontaneous bond length between absorbing and backscattering atoms, r_0 is its equilibrium value, k_{eff} is effective spring constant because it includes total contribution of neighboring atoms, k_3 is cubic anharmonicity parameter which gives an asymmetry in the pair distribution function. Because the oscillations of a pair single bond between of absorbing and backscattering atoms with masses M_1, M_2 , respectively, is affected by neighboring atoms, when taking into account these effects via an anharmonic correlated Einstein model, effective Einstein potential to be form:

$$U_E(x) = \frac{1}{2} k_{\text{eff}} x^2 + k_3 x^3 + \dots + \sum_{i=1}^2 \sum_{j \neq i} U \left(\frac{\mu}{M_i} \hat{R}_{12} \cdot \hat{R}_{ij} \right);$$

$$\mu = M_1 M_2 / (M_1 + M_2) \quad (3)$$

where \hat{R} is the unit bond length vector, μ is reduced mass of atomic mass M_1 and M_2 , the sum according to i, j is the contribution of cluster nearest atoms. The atomic vibration is calculated based on quantum statistical procedure with approximate quasi - harmonic vibration, in which the Hamiltonian of the system is written as harmonic term with respect to the equilibrium at a given temperature plus an anharmonic perturbation.

$$H = P^2 / 2\mu + U_E(x) = H_0 + U_E(a) + \delta U_E(y);$$

$$H_0 = P^2 / 2\mu + k_{\text{eff}} y^2 / 2$$

$$y = x - a, \quad a(T) = \langle x \rangle, \quad \langle y \rangle = 0 \quad (4)$$

with a is the net thermal expansion, y is the deviation from the equilibrium value of x at temperature T . Next, the use of potential interaction between each pair of atoms in the single bond can be expressed by anharmonic Morse potential for cubic crystals. Expanding to third order around its minimum, we have:

$$U_E(x) = D(e^{-2\alpha x} - 2e^{-\alpha x}) \approx D(-1 + \alpha^2 x^2 - \alpha^3 x^3 + \dots)$$

$$x = y + a \quad (5)$$

where α is expansion thermal parameter, D is the dissociation energy by $U(r_0) = -D$.

From expressions (4), (5) we have potential effective interaction Einstein generalize as:

$$U_E(x) = U_E(a) + k_{\text{eff}} y^2 / 2 + \delta U_E(y), \quad (6)$$

Substituting Eq. (5) into (3) and using Eq. (6) to calculate the second term in Eq. (3) with $\mu = M/2$ ($M_1 = M_2 = M$), sum of i is over absorber ($i=1$) and backscatterer ($i=2$), and the sum of j which is over all their near neighbors, excluding the absorber and backscatterer themselves, because they contribute in the $U(x)$, and calculation of $(\hat{R}_{12} \cdot \hat{R}_{ij})$ with lattice cubic crystals like cubic simple crystal (s.c), face cubic center (fcc) crystal and body cubic center (bcc) crystal, we obtain thermodynamic parameters like effective spring constant k_{eff} , the cubic anharmonic parameter giving an asymmetry in the pair distribution function k_3 and the anharmonic perturbation component $\delta U_E(y)$:

$$\text{S.c:} \quad k_{\text{eff}} = 3D\alpha^2(1 - 5\alpha a/4);$$

$$k_3 = -5D\alpha^3/4;$$

$$\delta U_E(y) = D\alpha^2[3ay - 5\alpha y^3/4] \quad (7)$$

$$\text{Fcc:} \quad k_{\text{eff}} = 5D\alpha^2(1 - 3\alpha a/2);$$

$$k_3 = -5D\alpha^3/4;$$

$$\delta U_E(y) = 5D\alpha^2[ay - \alpha y^3/4] \quad (8)$$

$$\text{Bcc:} \quad k_{\text{eff}} = 11D\alpha^2(1 - 45\alpha a/22)/3;$$

$$k_3 = -5D\alpha^3/4;$$

$$\delta U_E(y) = D\alpha^2[11ay/3 - 5\alpha y^3/4] \quad (9)$$

To compare the above expressions Eqs.(7), (8), (9) we see although different structures of cubic crystals and which have special

common factors, we call these factors as new structure factors c_1, c_2, c_3 , the parameters calculated statistically is in Table 1.

Table 1. *New structural parameters of cubic crystals*

Structure	c_1	c_2	c_3
s.c	5/4	1	3
fcc	5/4	6/5	5
bcc	5/4	18/11	11/3

The expressions of thermodynamic parameters for the structural cubic crystals generalize according to new structural parameters are the following forms:

$$k_{\text{eff}} = c_3(D\alpha^2 + c_2ak_3) = \mu\omega_E^2, k_3 = -c_1D\alpha^3 \quad (10)$$

$$\delta U_E(y) = \left[(c_3D\alpha^2a + 3a^2k_3)y + k_3y^3 \right] \approx \approx D\alpha^2 [c_3ay - c_1\alpha y^3] \quad (11)$$

To derive the analytical formulas for cumulants through new structural parameters for the crystals of cubic structure, we use perturbation theory [5]. The atomic vibration is quantized as phonon and anharmonicity is the result of phonon interaction. Accordingly, we express y in terms of annihilation and creation operators \hat{a}^+, \hat{a} [1], respectively:

$$y = \sigma^0(\hat{a} + \hat{a}^+); \sigma^0 = \sqrt{\hbar/2m\omega_E}; \hat{a}^+\hat{a} = n, \quad (12)$$

and use the harmonic oscillator states $|n\rangle$ as eigenstates with eigenvalues $E_n = n\hbar\omega_E$, ignoring the zero-point energy for convenience. The \hat{a}^+, \hat{a} operators satisfying the following properties

$$[\hat{a}, \hat{a}^+] = \hat{a}\hat{a}^+ - \hat{a}^+\hat{a} = 1; \hat{a}^+|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle;$$

$\hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle$. The cumulants are calculated by the average value [1, 5]:

$$\langle y^m \rangle = \frac{1}{Z} \text{Tr}(\rho y^m), \text{ with } m = 1, 2, 3, \dots,$$

$$\rho = \exp(-\beta H), \quad \beta = (k_B T)^{-1},$$

where Z is the overall statistic function, ρ with β is the statistical density matrix, k_B is Boltzmann's constant. The corresponding unperturbed quantities are $Z_0 = \text{Tr}(\rho_0)$, and $\rho_0 = \exp(-\beta H_0)$. To leading order in perturbation δU_E , $\rho = \rho_0 + \delta\rho$ with $\delta\rho$ is given by:

$$\frac{\partial \rho}{\partial \beta} = -H\rho; \quad \frac{\partial \rho_0}{\partial \beta} = -H_0\rho_0, \quad (13)$$

We obtained

$$\delta\rho = -\int_0^\infty e^{-\beta H_0} \delta \tilde{U}_E(\beta') d\beta';$$

$\delta \tilde{U}_E(\beta) = e^{\beta H_0} \delta U_E e^{-\beta H_0}$. If put unperturbed quantities equal to zero, then we have

$$Z_0 = \text{Tr}\rho_0 = \sum_n \exp(-n\beta\hbar\omega_E) = \sum_{n=0}^\infty z^n = \frac{1}{1-z},$$

where $z = e^{-\theta_E/T}$ is the temperature variable and determined by the $\theta_E = \hbar\omega_E/k_B$ is Einstein temperature. Now we are using above expressions to calculate analytics of the cumulants.

The cumulants even order:

$$\begin{aligned} \langle y^m \rangle \Big|_{\text{mchán}} &\approx \frac{1}{Z} \text{Tr}\rho y^m \approx \frac{1}{Z_0} \text{Tr}\rho_0 y^m = \\ &= \frac{1}{Z_0} \sum_n e^{-n\beta\hbar\omega_E} \langle n|y^m|n \rangle \end{aligned}$$

With $m = 2$ we have calculation expression of the second cumulant

$$\langle y^2 \rangle = \sigma^{(2)} = \frac{1}{Z_0} \sum_n e^{-n\beta\hbar\omega_E} \langle n|y^2|n \rangle. \quad (14)$$

Using matrix

$\langle n|y^2|n \rangle = \langle n|\hat{a}^+\hat{a} + \hat{a}\hat{a}^+|n \rangle = (\sigma_0)^2(2n+1)$ and substituting into (14) and applying the mathematical transformations and according to (10), (11) we have expression of second cumulant which is rewritten through c_1 structural parameter:

$$\sigma^{(2)} = \langle y^2 \rangle = \frac{\hbar\omega_E}{2c_1D\alpha^2} \frac{(1+z)}{(1-z)}. \quad (15)$$

The cumulants odd order:

$$\langle y^m \rangle \Big|_{\text{mđ}} \approx \frac{1}{Z} \text{Tr}\rho y^m \approx \frac{1}{Z_0} \text{Tr}\delta\rho y^m \quad (16)$$

With $m = 1, 3$ we have expression to calculate first cumulant and third cumulant. Transformation following matrix correlative with $\langle y \rangle$ and $\langle y^3 \rangle$, we have:

$$\langle n|y|n+1 \rangle = \sigma_0 \langle n|\hat{a} + \hat{a}^+|n+1 \rangle = \sigma_0 \sqrt{n+1} \langle n|n \rangle = \sigma_0 (n+1)^{1/2} \quad (17)$$

$$\begin{aligned} \langle n|y^3|n+1 \rangle &= (\sigma_0)^3 (3n\sqrt{n+1} + 3\sqrt{n+1}) \langle n|n \rangle = \\ &= 3(\sigma_0)^3 (n+1)^{3/2} \end{aligned} \quad (18)$$

$$\langle n|y^3|n+3 \rangle = 3(\sigma_0)^3 [(n+1)(n+2)(n+3)]^{1/2} \quad (19)$$

+ The first cumulant (m=1):

$$\sigma^{(1)} = \langle y \rangle = \frac{1}{Z_0} \sum_{mn'} \frac{e^{-\beta n \hbar \omega_E} - e^{-\beta n' \hbar \omega_E}}{n \hbar \omega_E - n' \hbar \omega_E} \times \langle n | D[\alpha^2 c_1 a y - \alpha^3 c_3 y^3] | n' \rangle \langle n' | y | n \rangle$$

with $n'=n+1$ and substituting (17) into (16) and transform, we have:

$$\langle y \rangle = -\frac{D\alpha^2}{\hbar\omega_E} (\sigma_0)^2 \left[c_1 a - 3c_3 \alpha (\sigma_0)^2 \frac{(1+z)}{(1-z)} \right] = -\frac{D\alpha^2}{\hbar\omega_E} \frac{\hbar\omega_E}{2k_{eff}} \left[c_1 a - 3c_3 \alpha (\sigma_0)^2 \frac{(1+z)}{(1-z)} \right]$$

because $\langle y \rangle = 0$ and approximate $k_{eff} \approx c_1 D\alpha^2$, the transformation and reduction we obtained first cumulant

$$\sigma^{(1)} = a = \frac{3c_3 \hbar\omega_E}{2c_1^2 D\alpha} \frac{(1+z)}{(1-z)} = \frac{3c_3 \alpha}{c_1} \times \sigma^{(2)} \quad (20)$$

+ The third cumulant (m=3)

$$\sigma^{(3)} = \langle y^3 \rangle = \frac{1}{Z_0} \sum_{mn'} \frac{e^{-\beta E_n} - e^{-\beta E_{n'}}}{E_n - E_{n'}} \times \langle n | \delta U_E | n' \rangle \langle n' | y^3 | n \rangle$$

From Eqs. (11, 21), we have:

$$\langle y^3 \rangle = \frac{D\alpha^2}{Z_0} \sum_{mn'} \frac{e^{-\beta n \hbar \omega_E} - e^{-\beta n' \hbar \omega_E}}{n \hbar \omega_E - n' \hbar \omega_E} \times \left[\langle n | c_1 a y | n' \rangle - \langle n | \alpha c_3 y^3 | n' \rangle \right] \langle n' | y^3 | n \rangle \quad (22)$$

Using Eqs. (18, 19), the calculation of Eq.(22) with $n'=n+1$, $n'=n+3$ and note that matrix only affect with y^3 and according to Eqs. (10, 11), we determine third cumulant:

$$\sigma^{(3)} = \frac{3c_3 \hbar\omega_E}{c_1^2 D\alpha} \frac{(1+10z+z^2)}{(1-z)^2} \times \sigma^{(2)}. \quad (23)$$

Table 2. The comparison of the results of σ^2 and $\sigma^{(3)}$ calculated by present theory with experimental data for Cu crystal at different temperatures

(K)	$\sigma^2 (A^2)$		$\sigma^3 (A^3)$	
	Present	Expt.	Present	Expt.
0	0,00298	0,00292	-	-
7	0,00333	0,00325	0,00010	-
95	0,01858	0,01823	0,00013	0,00013
83	0,01858	0,01823	-	-

DISCUSSION AND CONCLUSIONS

Developing further the anharmonic correlated Einstein model we obtained a general theory for calculating cumulants and thermodynamic parameters in X-ray Absorption Fine structure

(XAFS) theory including anharmonic contributions. The expressions described through new structural parameters agree with structural contributions of cubic crystals as face center cubic (fcc), body center cubic (bcc), and results published before [8]. The expression in this work is general case of present procedure when we insert the magnitudes of c_1, c_2, c_3 from Table 1 into the calculation of the thermodynamic parameters and above obtained expressions of cumulants. The results of the numerical calculations according to present method for cumulants are good agreement with experimental values (Table 2).

With the discovery of the XAFS spectra, it provides the number of atoms and the radius of each shell, the XAFS spectroscopy becomes a powerful structural analysis technique, but the problem remained to be solved is the distribution of these atoms. The factors c_1, c_2, c_3 introduced in the presented work contains the angle between the bond connecting absorber with each atom and the bond between absorber and backscatterer, that is why they can describe the nearest atoms distributions surround absorber and backscatterer atoms. Knowing structure of the crystals and the magnitudes of c_1, c_2, c_3 from Table 1 we can calculate the cumulants and then XAFS spectra. But for structure unknown substances we can extract the atomic number from the measured XAFS spectra, as well as, extract the factors c_1, c_2, c_3 according to our theory from the measured cumulants like Debye-Waller factor to get information about atomic distribution or structure.

The thermodynamic parameters expressions described by second cumulant or Debye-Waller factor are very convenient, when the second cumulant $\sigma^{(2)}$ is determined, it allows to predict the other cumulants according to Eqs. (20), (23), consequently reducing the numerical calculations and experimental measurements.

Acknowledgment

The author thanks Prof. Sci.Ph.D Nguyen Van Hung for useful discussions and for authorizing the author to use some results published.

REFERENCES

1. Nguyen Quang Bau, Bui Bang Doan, Nguyen Van Hung (1999) Statistical Physics, The publisher National University, Hanoi.
2. Beni, G. and Platzman, P.M. (1976) "Temperature and polarization dependence of extended x-ray absorption fine-structure spectra" *Phys. Rev. B* (14) pp. 1514.
3. Born, M., and Huang, K. (1954) *Dynamical Theory of Crystal Lattices* Clarendon Press., Oxford.
4. Crozier, E. D., Rehr, J. J., and Ingalls, R. (1998) *X-ray absorption* edited by D. C. Koningsberger and R. Prins, Wiley New York.
5. Feynman, R. P. (1972) *Statistics Mechanics*, Benjamin, Reading.
6. Hung, N. V. and Duc, N. B., and Dinh Quoc Vuong, (2001), "Theory of thermal expansion and cumulants in XAFS technique", *J. Commun. in Phys* (11) pp. 1-9.
7. Hung, N. V. and Rehr, J. J., (1997) "Anharmonic correlated Einstein-model Debye-Waller factors" *Phys. Rev. B* (56), pp. 43.
8. Hung, N. V., Vu Kim Thai, and Nguyen Ba Duc, (2000), "Calculation of thermodynamic parameters of bcc crystals in XAFS theory" *J. Science of VNU Hanoi* (XVI) pp. 11-17

TÓM TẮT

CÁC BIỂU THỨC TÍNH CÁC THAM SỐ NHIỆT ĐỘNG VÀ CÁC CUMULANT THEO CÁC THAM SỐ CẤU TRÚC MỚI QUA THỂ TƯƠNG TÁC HIỆU DỤNG TRONG XAFS

Nguyễn Bá Đức*

Trường Đại học Tân Trào

Trên cơ sở của lý thuyết thống kê lượng tử với tương tác phonon, các biểu thức mô tả tính bất đối xứng hay các cumulant bao gồm cumulant bậc một hay dẫn nở mạng, cumulant bậc hai hay độ dịch chuyển tương đối trung bình toàn phương (MSRD) hay hệ số Debye-Waller, cumulant bậc ba và các tham số nhiệt động bao gồm đóng góp của các hiệu ứng phi điều hòa đối với các tinh thể lập phương (lập phương tâm diện fcc, lập phương tâm khối bcc) đã được xây dựng. Sử dụng thể tương tác hiệu dụng trong mô hình Einstein tương quan phi điều hòa đã xác định được các hệ số cấu trúc mới, các hệ số này có thể xác định được phân bố của các nguyên tử. Khai triển các cumulant và các tham số nhiệt động qua các tham số cấu trúc mới đã được thực hiện trong lý thuyết phổ cấu trúc tinh thể hấp thụ tia X (XAFS). Kết quả tính số cho tinh thể Cu đã trùng tốt với kết quả thực nghiệm.

Từ khóa: điều hòa; XAFS; cumulant; nhiệt động; tham số

Ngày nhận bài: 05/11/2014; Ngày phản biện: 10/01/2015; Ngày duyệt đăng: 05/3/2015
Phản biện khoa học: TS. Nguyễn Văn Đăng – Trường Đại học Khoa học - DHTN

* Tel: 0903 216482

