

ISSN 1859-1531



BỘ GIÁO DỤC VÀ ĐÀO TẠO  
ĐẠI HỌC ĐÀ NẴNG

Tap chí

# Khoa học & Công nghệ

THE UNIVERSITY OF DANANG

## JOURNAL OF SCIENCE AND TECHNOLOGY

11(84)  
2014

QUYỂN 1



# MỤC LỤC

ISSN 1859-1531 - Tạp chí KHCN ĐHQĐN, Số 11(84).2014, Quyển 1

## KHOA HỌC KỸ THUẬT

Nghiên cứu thực nghiệm tính năng động cơ dual fuel biogas-diesel <i>Experimental study of performance of biogas - diesel dual fuel engine</i> Bùi Văn Ga, Dương Việt Dũng, Nguyễn Việt Hải, Nguyễn Văn Anh, Võ Anh Vũ	1
Ảnh hưởng của hiện tượng trượt giữa nền và móng đến phản ứng của công trình chịu tải trọng động đất <i>The effect of sliding base on earthquake response of buildings</i> Bùi Quang Hiếu	7
Phân tích nội lực cầu vòm ống thép nhồi bê tông chịu tác động của động đất <i>Internal force analysis for concrete steel tubular arch bridge under earthquake impact</i> Hoàng Phương Hoa, Trần Đình Hoàng	10
Điều khiển phân nhánh và hỗn độn trong mô hình động cơ đồng bộ nam châm vĩnh cửu <i>Control of bifurcation and chaos in the model of the permanent-magnet synchronous motor</i> Nguyễn Lê Hòa, Lê Tiến Dũng, Nguyễn Hoàng Mai, Đoàn Quang Vinh	15
Phân tích dao động của trụ cầu sông Hàn chịu va đập của tàu thủy <i>Analysis of Han-river pier vibration under impact of ship collision</i> Nguyễn Đức Hoàng, Nguyễn Xuân Toàn	21
So sánh một số đặc trưng của composite đơn hướng (sợi thủy tinh/epoxy) với nhựa epoxy-amin khi sản xuất trong khuôn hở <i>Comparison of some characteristics of unidirectional composites (glass fiber/epoxy) and epoxy-amine resin produced in the open-mold</i> Nguyễn Thanh Hội, Nguyễn Đình Lâm	26
Đề xuất tổ chức kiến trúc cảnh quan theo hướng sinh thái góp phần phát triển bền vững đô thị Đà Nẵng <i>Proposal to organize landscape architecture by ecological approach for sustainable development of Danang</i> Tô Văn Hùng	30
Tổng hợp epoxy bằng phương pháp epoxy hóa dầu đậu nành và ứng dụng cải thiện tính giòn của composite nhựa epoxy thương phẩm <i>Synthesis of epoxy by epoxidizing soybean oil and its use for improving brittle behavior of the commercial epoxy resin composite</i> Đoàn Thị Thu Loan, Nguyễn Đình Long	35
Nghiên cứu, lắp đặt mô hình điện năng lượng mặt trời có nối lưới điện tiêu thụ <i>Research and installation of a model of solar energy with consumption electricity grid</i> Lê Quang Nam, Trần Thanh Sơn	39
Hiện trạng và giải pháp trong quản lý chất thải rắn nông nghiệp tại huyện Lệ Thủy, tỉnh Quảng Bình <i>Current status and solutions for agricultural solid waste management in Lethuy district, Quangbinh province</i> Võ Thị Nho, Lê Phước Cường	43
Nghiên cứu các giải pháp thiết kế kiến trúc tiết kiệm năng lượng cho nhà ống tại thành phố Đà Nẵng <i>Study on energy efficiency solutions for tube houses in Danang city</i> Hồ Hồng Quyên	48
Chiết tách chất màu anthocyanins từ khoai lang tím <i>Extraction of anthocyanins pigment from purple sweet potatoes</i> Tạ Thị Tố Quyên, Huỳnh Thị Kim Cúc, Cù Thị Ngọc Thủy, Đào Hùng Cường	55
Đánh giá khả năng chịu tải công trình cầu theo quan điểm tích hợp của AASHTO - USA <i>Evaluating the load capacity of bridges based on the intergrated approach of AASHTO - USA</i> Nguyễn Duy Thảo	60
Đánh giá hoạt động của hệ thống McABR tiên tiến trong xử lý nước thải chế biến thủy sản <i>Performance assessment of advanced McABR system</i> Trần Minh Thảo, Phùng Minh Tùng, Đoàn Thanh Phương	65
Ảnh hưởng của quá trình gia nhiệt đến trị số độ kéo dài của nhựa đường đặc <i>Effects of heating process on value of ductility of bitumen</i> Trần Thị Thu Thảo	70

Mô hình phần tử hữu hạn và kết quả phân tích số cầu Nhật Lệ 2 tỉnh Quảng Bình dưới tác dụng của tải trọng di động <i>Finite element model and numerical analysis of Nhatle bridge no2 under moving load</i> Nguyễn Xuân Toàn, Nguyễn Hữu Tuấn	74
Xây dựng chương trình tính toán hệ số truyền nhiệt <i>Program for calculating the heat transfer coefficient</i> Phan Quý Trà	79
Nghiên cứu quá điện áp trong lưới điện phân phối <i>An investigation into overvoltage in power distribution networks</i> Đình Thành Việt, Trần Viết Thành	82
<b>KHOA HỌC TỰ NHIÊN</b>	
Thuật toán đẩy luồng trước tìm luồng cực đại trên mạng hỗn hợp mở rộng <i>Push-preflow maxflow algorithm on extended mixed networks</i> Trần Quốc Chiến, Trần Ngọc Việt, Nguyễn Đình Lâu	87
Các dạng hóa học và đánh giá rủi ro kim loại chì trong trầm tích mặt tại hồ Bàu Tràm, thành phố Đà Nẵng <i>Chemical forms and assessment of the risks caused by lead in the surface sediments of Baurtram lake, Danang city</i> Đoạn Chí Cường, Võ Văn Minh, Lê Thị Mai Hạnh	92
Tính các tham số nhiệt động và các cumulant của các tinh thể lập phương tâm diện (FCC) pha tạp theo lý thuyết phổ cấu trúc tinh tế của tia x (XAFS) <i>Calculating thermodynamic parameters and cumulants of dopant face cubic center (FCC) crystals in light of x-ray absorption fine structure (XAFS) theory</i> Nguyễn Bá Đức	97
Các tính chất quang học của ion europium trong thủy tinh $XB_2O_3 \cdot (80-X) TeO_2 \cdot 10ZnO \cdot 10Na_2O$ <i>Optical properties of ion europium in the <math>XB_2O_3 \cdot (80-X) TeO_2 \cdot 10ZnO \cdot 10Na_2O</math> glasses</i> Trần Thị Hồng	101
Sử dụng chỉ số tổ hợp sinh học IBI đánh giá chất lượng nước khu vực hạ lưu sông Thu Bồn, tỉnh Quảng Nam <i>Using the index of biological integrity IBI for assessing the water quality of the Thubon lower river in Quangnam province</i> Nguyễn Văn Khánh, Đàm Minh Anh, Trần Thị Hằng, Trương Phương Thanh	104
Xác định chủng vi khuẩn <i>Bacillus Sp.</i> phân giải protein và thử nghiệm xử lý nước thải thủy sản <i>To determine the protein-decomposing bacteria <i>Bacillus Sp.</i> and apply primarily in aquatic products processing wastewater treatment</i> Nguyễn Thị Lan Phương, Đỗ Thu Hà	108
Dẫn liệu mới về loài rùa cổ sọc <i>Mauremys sinensis</i> (Gray, 1834) ở Quảng Ngãi <i>New record of <i>Mauremys sinensis</i> (Gray, 1834) in Quangngai region</i> Lê Thị Thanh, Đinh Thị Phương Anh	113
Nghiên cứu mẫu ngẫu nhiên đơn giản và mẫu ngẫu nhiên phân tầng trong bài toán chọn mẫu nghiên cứu <i>Simple random sampling and stratified random sampling</i> Trần Thị Kim Thanh	116
Giải pháp trích rút và phân loại các thực thể danh từ riêng cho kho ngữ liệu phục vụ xử lý ngôn ngữ tự nhiên <i>Extraction and classification of named entities from corpora in natural language processing</i> Đặng Đại Thọ, Huỳnh Công Pháp, Doãn Hằng Diệu	120
Bổ sung dữ liệu vào từ điển UNL – tiếng Việt trong bộ công cụ UNL explorer <i>Expansion of UNL – Vietnamese dictionary on UNL explorer</i> Phan Thị Lệ Thuỳ, Võ Trung Hùng	125
Tương tác giữa keo nano bạc với ion thủy ngân (II) và sự thay đổi tính chất cộng hưởng plasmon bề mặt của nó <i>The interaction between silver nano particle and mercury (II) ion and the change of their surface plasmon resonance</i> Nguyễn Bá Trung	130

Tóm  
tác cũ  
diesel  
xi lanh  
CH<sub>4</sub> tr  
độ đin  
giảm  
60%.  
đại kh  
của đ  
chứa  
cơ die

Từ kh  
thị: vit

K

- D<sub>0</sub>:

- G<sub>cm</sub>:

- n: T

- P<sub>i</sub>:

- P<sub>e</sub>:

- S<sub>0</sub>:

bud

- S:

tiết

- W<sub>i</sub>:

- φ: F

- φ: g

1. G

T

cạn k

Nghi

năng

lúc r

thay

một

mặt l

hiệu

C

giải

[1].

kích

hơn

biog

trong

động

C

do r

biog

# TÍNH CÁC THAM SỐ NHIỆT ĐỘNG VÀ CÁC CUMULANT CỦA CÁC TINH THỂ LẬP PHƯƠNG TÂM DIỆN (FCC) PHA TẠP THEO LÝ THUYẾT PHỔ CẤU TRÚC TINH TẾ CỦA TIA X (XAFS)

## CALCULATING THERMODYNAMIC PARAMETERS AND CUMULANTS OF DOPANT FACE CUBIC CENTER (FCC) CRYSTALS IN LIGHT OF X-RAY ABSORPTION FINE STRUCTURE (XAFS) THEORY

Nguyễn Bá Đức

Trường Đại học Tân Trào, Tuyên Quang; Email: hieutruongdhtt@gmail.com

**Tóm tắt** - Một phương pháp mới để tính toán và phân tích các cumulant trong phổ XAFS đối với các tinh thể fcc pha tạp đã được xây dựng trên cơ sở lý thuyết thống kê lượng tử và tương tác phonon, với mô hình Einstein tương quan phi điều hòa được tổng quát hóa. Nghiên cứu này đã xây dựng được các biểu thức biểu diễn thành phần bất đối xứng của phổ XAFS phi điều hòa gồm cumulant bậc một hay hệ số dẫn nở mạng, cumulant bậc hai hay hệ số Debye-Waller, cumulant bậc ba và các đại lượng nhiệt động bao gồm các đóng góp của hiệu ứng phi điều hòa của các tinh thể lập phương tâm diện (fcc) bị pha tạp. Các kết quả tính số cho tinh thể đồng (Cu) được pha tạp với tinh thể niken (Ni) đã được thực hiện và trùng tốt với thực nghiệm.

**Từ khóa** - các từ khóa: phổ XAFS phi điều hòa, tham số nhiệt động, cumulant, tinh thể pha tạp, sự phụ thuộc nhiệt độ.

### 1. Mở đầu

Việc nghiên cứu cấu trúc của mạng tinh thể qua các tính chất nhiệt động của các nguyên tử trong vật chất là cần thiết và đã được thực hiện [3]. Tuy nhiên, hiện nay phương pháp phân tích phổ cấu trúc tinh tế của tia X (phổ XAFS) đang được phát triển và đã trở thành một kỹ thuật mạnh để phân tích cấu trúc của vật chất. Qua hàm của phổ XAFS ta xác định được các thông tin về số nguyên tử trên mỗi lớp vỏ, ảnh của phép chuyển Fourier của phổ XAFS xác định được thông tin về bán kính lớp nguyên tử [4]. (Phần này đã làm rõ hơn về nội dung nghiên cứu có liên quan và xu thế sử dụng XAFS hiện nay để nghiên cứu cấu trúc của vật rắn).

Các tham số nhiệt động của các tinh thể nguyên chất có cấu trúc lập phương đã được xây dựng qua mô hình Einstein tương quan phi điều hòa trong lý thuyết XAFS [6, 7], tuy nhiên với các tinh thể lập phương tâm diện (fcc) bị pha tạp chưa được đề cập đến. (Phần bổ sung này làm rõ hơn nội dung nghiên cứu mới) Mục đích của nghiên cứu này là sử dụng mô hình Einstein tương quan phi điều hòa trong phổ XAFS để xây dựng các biểu thức tính hằng số lực hiệu dụng, cumulant bậc 1 hay hệ số dẫn nở mạng, cumulant bậc hai hay độ dịch chuyển tương đối trung bình toàn phương (MSRD) hay còn gọi là hệ số Debye-Waller, cumulant bậc ba, tần số và nhiệt độ Einstein của tinh thể fcc bị pha tạp. Tinh thể fcc pha tạp bao gồm nguyên tử được pha tạp được coi như nguyên tử hấp thụ, các nguyên tử lân cận gần nhất là các nguyên tử gốc được coi như các nguyên tử tán xạ trong phương pháp XAFS. Việc tính số cho tinh thể đồng (Cu) được pha tạp bởi tinh thể niken (Ni) đã đưa ra được các hiệu ứng nhiệt động của tinh thể fcc bị ảnh

**Abstract** - A new procedure for calculating and analysing of X-ray absorption fine structure (XAFS) cumulants of dopant fcc crystals has been derived based on the quantum statistical theory in correspondence with the generalized inharmonic correlated Einstein model. This study has formulated the expressions describing the asymmetric component in inharmonic XAFS spectra comprising the first cumulant or thermal expansion, the second cumulant or the mean square relative displacement (MSRD) or the Debye-Waller factor, the third cumulant and thermodynamic parameters including the inharmonic effects contributions of dopant face cubic center (fcc) crystals. The numerical results for copper (Cu) doped with nickel (Ni) and pure Cu, Ni crystals are found to be in good agreement with the experiment.

**Key words** - inharmonic XAFS; thermodynamic parameters, cumulants; dopant crystal; temperature dependence.

hưởng do sự pha tạp của nguyên tử. Các kết quả tính số đã trùng tốt với các giá trị của thực nghiệm.

### 2. Lý thuyết

Biểu thức của phổ XAFS phi điều hòa thường được viết như sau [2,4]:

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

Trong đó,  $F(k)$  là biên độ tán xạ của nguyên tử,  $\Phi(k)$  là tổng độ dịch pha của quang điện tử,  $k$  là số sóng,  $\lambda$  là quãng đường tự do trung bình của quang điện tử và  $\sigma^{(n)}$  ( $n = 1, 2, 3, \dots$ ) là các cumulant biểu diễn các thành phần bất đối xứng, chúng xuất hiện do tính trung bình nhiệt hàm  $e^{-2ikr}$  [1], trong đó các số hạng bất đối xứng được khai triển theo chuỗi Taylor xung quanh giá trị  $R = \langle r \rangle$  với  $r$  là khoảng cách tức thời giữa nguyên tử hấp thụ và nguyên tử tán xạ tại nhiệt độ  $T$ . Theo mô hình Einstein tương quan phi điều hòa [7], tương tác giữa nguyên tử hấp thụ và nguyên tử tán xạ với ảnh hưởng của các nguyên tử lân cận được mô tả qua thể hiệu dụng Einstein phi điều hòa:

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

Thế này bao gồm tham số phi điều hòa  $k_3$ , đặc trưng cho tính phi điều hòa và tạo ra sự bất đối xứng của thế tương tác, hằng số đàn hồi hiệu dụng  $k_{\text{eff}}$ . Các đóng góp của chùm nguyên tử lân cận được mô tả trong phương trình (2) bằng tổng theo  $i$  từ  $i = 1$  ứng với nguyên tử hấp thụ (là

nguyên tử pha tạp) đến  $i = 2$  ứng với nguyên tử tán xạ (là nguyên tử gốc), còn tổng theo  $j$  chạy theo tất cả các nguyên tử lân cận gần nhất trừ nguyên tử hấp thụ và tán xạ vì chúng đã đóng góp trong  $U(x)$ ,  $\hat{R}$  là vectơ đơn vị,  $\mu = M_1 M_2 / (M_1 + M_2)$  gọi là khối lượng rút gọn của nguyên tử hấp thụ  $M_1$  và nguyên tử tán xạ  $M_2$ ,  $x = r - r_0$  là độ lệch tức thời của khoảng cách giữa hai nguyên tử từ vị trí cân bằng ứng với vị trí có giá trị thế năng cực tiểu.

Dao động của các nguyên tử đã được tính trên cơ sở thống kê lượng tử với gần đúng dao động chuẩn điều hoà [1], toán tử Hamiltonian của hệ được viết dưới dạng tổng của số hạng điều hoà đối với vị trí cân bằng tại một nhiệt độ xác định và phần phi điều hoà được coi như một nhiễu loạn, ta có:

$$H = \frac{P^2}{2\mu} + U_E(\chi) = H_0 + U_E(a) + \delta U_E(y);$$

$$H_0 = \frac{P^2}{2\mu} + \frac{1}{2} k_{\text{eff}} y^2$$

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

Với  $a$  là hệ số dẫn nở nhiệt mạng,  $y$  là độ lệch của  $x$  từ giá trị cân bằng tại nhiệt độ  $T$ . Sử dụng thế tương tác giữa mỗi cặp nguyên tử bằng thế phi điều hoà Morse cho các tinh thể lập phương và khai triển tới bậc ba quanh vị trí cực tiểu của nó, ta có biểu thức thế Morse cho tinh thể fcc nguyên chất:

$$U_E(\chi) = D(e^{-2\alpha x} - 2e^{-\alpha x}) \approx D(-1 + \alpha^2 x^2 - \alpha^3 x^3 + \dots) \quad (4)$$

Trong trường hợp các chất bị pha tạp, biểu thức thế Morse sẽ có dạng:

$$U_E(\chi) = D_{12}(-1 + \alpha_{12}^2 x^2 - \alpha_{12}^3 x^3 + \dots) \quad (5)$$

Trong các hệ thức (4), (5)  $\alpha$  là hệ số dẫn nở nhiệt,  $D$  là năng lượng phân ly vì  $U(r_0) = -D$ . Các tham số thế Morse này trong hệ thức (5) là giá trị trung bình của chúng đối với trường hợp các tinh thể nguyên chất và được tính bởi các hệ thức:

$$\alpha_{12}^2 = \frac{D_1 \alpha_1^2 + D_2 \alpha_2^2}{D_1 + D_2}; \quad \alpha_{12}^3 = \frac{D_1 \alpha_1^3 + D_2 \alpha_2^3}{D_1 + D_2};$$

$$D_{12} = \frac{D_1 + D_2}{2} \quad (6)$$

Từ các biểu thức (2) và (4), ta có thể tương tác hiệu dụng Einstein tổng quát:

$$U_E(\chi) = U_E(a) + \frac{1}{2} k_{\text{eff}} y^2 + \delta U_E(y) \quad (7)$$

Thay thế (5) với  $x = y + a$  vào (2), sử dụng biểu thức (7) và tính toán số hạng thứ hai của (2) với  $\mu_{12}$  được tính bằng trung bình cộng của khối lượng rút gọn của nguyên tử gốc và nguyên tử pha tạp, tổng theo  $i$  ứng với nguyên tử pha tạp và nguyên tử gốc, còn tổng theo  $j$  chạy theo tất cả các nguyên tử lân cận gần nhất và tính tích ( $\hat{R}_{12}, \hat{R}_{ij}$ ) đối

với các mạng tinh thể pha tạp cấu trúc fcc ta thu được các tham số nhiệt động  $k_{\text{eff}}$ ,  $k_3$ , và  $\delta U_E(y)$ :

$$k_3 = -5D_{12} \alpha_{12}^3 / 4; \quad (8)$$

$$k_{\text{eff}} = 5D_{12} \alpha_{12}^2 \approx \mu_{12} \omega_E^2; \quad (9)$$

$$\delta U_E(y) = 5D_{12} \alpha_{12}^2 (ay - \alpha_{12} y^3 / 4) \quad (10)$$

Để xây dựng các công thức tính giải tích các cumulant cho các tinh thể có cấu trúc lập phương, ta sử dụng lý thuyết nhiễu loạn [5]. Dao động của các nguyên tử đã được lượng tử hoá là phonon, nên khi tính tương tác phonon-phonon bao gồm hiệu ứng phi điều hoà chúng ta thu được các cumulant:

$$\sigma^{(1)} = a = \frac{3\hbar\omega_E}{40D_{12}\alpha_{12}} \frac{(1+z)}{(1-z)} \quad (11)$$

$$\sigma^{(2)} = \langle y^2 \rangle = \frac{\hbar\omega_E}{10D_{12}\alpha_{12}^2} \frac{(1+z)}{(1-z)} \quad (12)$$

$$\sigma^{(3)} = \frac{\hbar^2\omega_E^2}{200D_{12}^2\alpha_{12}^3} \frac{(1+10z+z^2)}{(1-z)^2} \quad (13)$$

Với  $z \equiv e^{-\beta\hbar\omega_E} = e^{-\theta_E/T}$  là biến số nhiệt độ và được xác định bằng nhiệt độ Einstein  $\theta_E = \hbar\omega_E / k_B$ .

### 3. Kết quả tính số và so sánh với thực nghiệm

Chúng ta sử dụng các hệ thức đã nhận được ở phần trước để tính số đối với tinh thể pha tạp Đồng - Niken (CuNi). Từ các tham số thế Morse  $D$  và  $\alpha$  của các tinh thể Cu, Ni nguyên chất đã biết [6], ta tính được các tham số  $D_{12}$  và  $\alpha_{12}$  theo hệ thức (6) đối với các tinh thể fcc pha tạp (Bảng 1).

**Bảng 1.** Giá trị các tham số thế Morse của các tinh thể Cu, Ni nguyên chất và tinh thể pha tạp CuNi

Tinh thể	$D(\text{eV})$	$\alpha(\text{\AA}^{-1})$
Cu-Cu	0,3429	1,3588
Ni-Ni	0,4205	1,4149
Cu-Ni	0,3817	1,3900

Thay các tham số nhiệt động  $D_{12}$  và  $\alpha_{12}$ , từ Bảng 1 vào các đại lượng trong hệ thức (8), (9), (10) với hằng số Boltzmann  $k_B = 8.617 \times 10^{-5} \text{ eV}\text{\AA}^{-1}$ , hằng số Plank  $\hbar = 6.5822 \times 10^{-16} \text{ eV}\cdot\text{s}$ , chúng ta tính được các tham số nhiệt động khác như hệ số đàn hồi hiệu dụng  $k_{\text{eff}}$ , khối lượng rút gọn  $\mu$ , tần số Einstein  $\omega_E$  và nhiệt độ Einstein  $\theta_E$  của tinh thể đồng pha tạp với niken (Bảng 2).

**Bảng 2.** Giá trị các tham số nhiệt động  $k_{\text{eff}}$ ,  $\mu$ ,  $\omega_E$ ,  $\theta_E$

Tinh thể	$k_{\text{eff}}$ ( $\text{eV}\text{\AA}^{-2}$ )	$\mu(\times 10^{-26})$ ( $\frac{\text{eV}}{\text{\AA}^2 \text{s}^{-2}}$ )	$\omega_E$ ( $10^{13} \text{ Hz}$ )	$\theta_E$ (K)
Cu-Cu	3,1656	0,3313	3,0928	235,9
Ni-Ni	4,2091	0,3060	3,6102	275,8

Cu-Ni	3,6874	0,3186	3,4019	259,8
-------	--------	--------	--------	-------

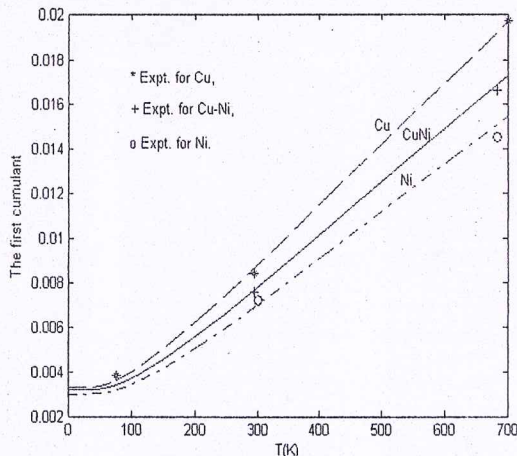
Thay các giá trị ở Bảng 2 vào các hệ thức (11), (12), (13), ta thu được các hệ thức của các cumulant biểu diễn theo biến số nhiệt độ  $z = e^{-\theta_E/T}$ , sau đó thay giá trị của nhiệt độ Einstein  $\theta_E$  (K) vào hệ thức của biến số nhiệt độ  $z$ , chúng ta có các hệ thức chỉ phụ thuộc vào nhiệt độ T của các cumulant.

$$\sigma^{(1)} = 3.165326 \times 10^{-3} \times \frac{1 + e^{-\frac{259,86}{T}}}{1 - e^{-\frac{259,86}{T}}} \text{ (Å)} \quad (14)$$

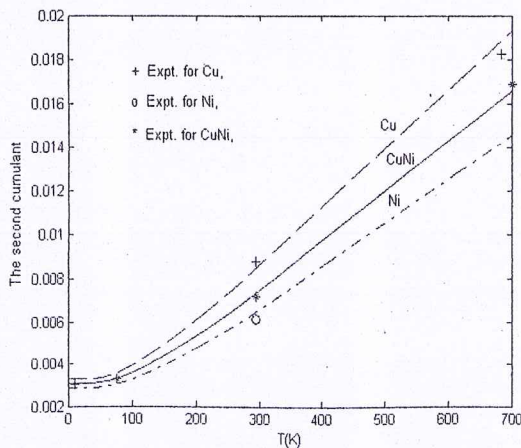
$$\sigma^{(2)} = 3,036284 \times 10^{-3} \times \frac{1 + e^{-\frac{259,86}{T}}}{1 - e^{-\frac{259,86}{T}}} \text{ (Å}^2) \quad (15)$$

$$\sigma^{(3)} = 0,0064072 \times 10^{-3} \times \frac{1 + 10e^{-\frac{259,86}{T}} + \left(e^{-\frac{259,86}{T}}\right)^2}{\left(1 - e^{-\frac{259,86}{T}}\right)^2} \text{ (Å}^3) \quad (16)$$

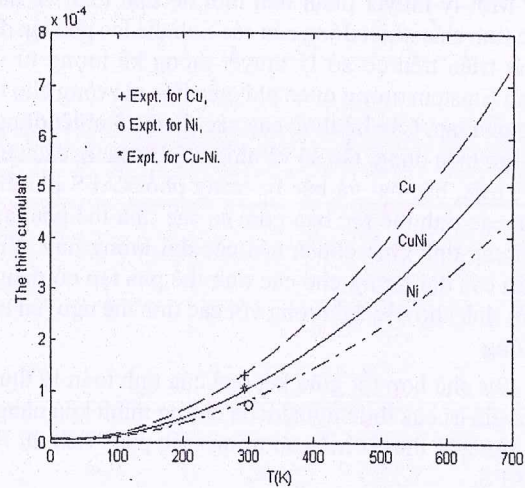
Từ các phương trình (14, 15, 16), chúng ta có các đồ thị mô tả sự phụ thuộc của các cumulant vào nhiệt độ T của các tinh thể Cu, Ni nguyên chất và tinh thể Cu bị pha tạp bằng tinh thể Ni biểu diễn theo các Hình (1), (2), (3).



Hình 1.



Hình 2.



Hình 3.

Trong các hình vẽ ta nhận thấy đường đồ thị biểu diễn sự phụ thuộc vào nhiệt độ của các cumulant với tinh thể bị pha tạp CuNi được xây dựng bằng lý thuyết hiện tại, đều tiệm cận với các giá trị đo được của thực nghiệm. Điều đó chứng tỏ sự đúng đắn của lý thuyết hiện tại (phần này chỉ rõ khi nhìn vào đồ thị cho thấy sự trùng khớp giữa lý thuyết hiện tại và số đo của thực nghiệm ở nhiệt độ phòng-theo ý kiến PB, đồ thị được vẽ bằng phần mềm Matlab 7.2). Hình 1 và Hình 3 mô tả sự phụ thuộc vào nhiệt độ của cumulant bậc 1  $\sigma^{(1)}(T)$  hay hệ số dẫn nở nhiệt mạng và cumulant bậc 3  $\sigma^{(3)}(T)$  của tinh thể Cu được pha tạp với Ni và các tinh thể Cu, Ni nguyên chất. Chúng đóng góp vào độ dịch pha của phổ XAFS do hiệu ứng phi điều hòa. Các kết quả tính toán lý thuyết đối với  $\sigma^{(1)}(T)$  đã trùng tốt với các giá trị thực nghiệm tại nhiệt độ 77K, 295K, 700K [8, 9] của tinh thể Cu nguyên chất, tại nhiệt độ 300K, 683K của tinh thể Ni nguyên chất và tinh thể CuNi pha tạp. Các kết quả tính lý thuyết đối với  $\sigma^{(3)}(T)$  cũng trùng tốt với các giá trị của thực nghiệm tại nhiệt độ 295K đối với Cu nguyên chất và tinh thể pha tạp CuNi, tại nhiệt độ 300K đối với tinh thể Ni nguyên chất [8, 9, 10]. Hình 2 mô tả sự phụ thuộc vào nhiệt độ của cumulant bậc 2  $\sigma^{(2)}(T)$  hay độ dịch chuyển tương đối trung bình toàn phương (MSRD), còn gọi là hệ số Debye-Waller của tinh thể pha tạp CuNi và các tinh thể nguyên chất Cu, Ni và so sánh với các giá trị đo được tại các nhiệt độ 77K, 295K và 700K cho tinh thể pha tạp CuNi [9] và tại nhiệt độ 10K, 295K và 683K đối với Cu nguyên chất và tại nhiệt độ 295K đối với Ni nguyên chất [8, 9, 10], các kết quả của lý thuyết cũng trùng tốt với các giá trị của thực nghiệm.

Chú ý rằng các giá trị thực nghiệm lấy từ phép đo phổ XAFS tại HASYLAB [7] và BUGH Wuppertal (DESY, Germany) [8]. Trong các đồ thị, chúng ta nhận thấy tại các nhiệt độ thấp, các cumulant  $\sigma^{(1)}, \sigma^2, \sigma^{(3)}$  chứa các đóng góp của năng lượng điểm không, đó là một hiệu ứng lượng tử. Tại các nhiệt độ cao  $\sigma^{(1)}, \sigma^2$  tỷ lệ tuyến tính với nhiệt độ T và  $\sigma^{(3)}$  tỷ lệ với bình phương nhiệt độ ( $T^2$ ), trùng với các kết quả của lý thuyết cổ điển và thực nghiệm.

#### 4. Kết luận

Một lý thuyết phân tích mới để tính toán và đánh giá các tính chất nhiệt động của các tinh thể fcc pha tạp đã được phát triển trên cơ sở lý thuyết thống kê lượng tử với mô hình Einstein tương quan phi điều hòa mở rộng cho tinh thể fcc pha tạp. Các hệ thức của các tham số nhiệt động, hằng số lực hiệu dụng, tần số và nhiệt độ Einstein, các cumulant bậc một, bậc hai và bậc ba trong phổ XAFS phi điều hòa của các tinh thể fcc bao gồm cả các tinh thể pha tạp trùng với các tính chất chuẩn của các đại lượng này. Việc tính toán các đại lượng cho các tinh thể pha tạp có dạng giống như tính cho các đại lượng với các tinh thể nguyên chất của chúng.

Sự phù hợp tốt giữa kết quả của tính toán lý thuyết với các giá trị của thực nghiệm đã chứng minh khả năng có thể sử dụng lý thuyết hiện tại trong việc phân tích dữ liệu phổ XAFS.

#### Lời cảm ơn

Tác giả xin cảm ơn GS. TSKH Nguyễn Văn Hùng đã đóng góp ý kiến thảo luận và cho phép sử dụng một số kết quả đã được công bố.

(BBT nhận bài: 15/09/2014, phân biện xong: 12/11/2014)

#### TÀI LIỆU THAM KHẢO

- [1] Nguyễn Quang Bái, Bùi Bằng Đoàn, Nguyễn Văn Hùng, *Vật lý thống kê*, Nhà xuất bản Đại học Quốc gia, Hà Nội (1999).
- [2] Beni, G. and Platzman, P.M. "Temperature and polarization dependence of extended x-ray absorption fine-structure spectra" *Phys. Rev. B* (14) (1976), pp. 1514.
- [3] Born, M., and Huang, K. *Dynamical Theory of Crystal Lattices* Clarendon Press., Oxford (1954).
- [4] Crozier, E. D., Rehr, J. J., and Ingalls, R. *X-ray absorption* edited by D. C. Koningsberger and R. Prins, Wiley New York, (1998).
- [5] Feynman, R. P. *Statistics Mechanics*, Benjamin, Reading, (1972).
- [6] N. V. Hung and N. B. Duc "Anharmonic-Correlated Einstein model Thermal expansion and XAFS Cumulants of Cubic Crystals: Comparison with Experiment and other Theories", *J. Communications in Physics*, vol. 10, N<sup>o</sup>. 1, (2000), pp. 15-21.
- [7] Hung, N. V. and Rehr, J. J., "Anharmonic correlated Einstein-model Debye-Waller factors", *Phys. Rev. B* (56), (1997), pp. 43.
- [8] Hung, N. V., Duc, N. B., Frahm, R. R., "A New Anharmonic Factor and EXAFS including anharmonic contributions", *J. Phys. Soc., Japan*, Vol. 72, N<sup>o</sup>. 5, (2002), pp 1254-1259.
- [9] L. Troger: unpublished.
- [10] Yokoyama T., Susukawa, T., and Ohta, T. "Anharmonic Interatomic Potentials of Metals and Metal Bromides Determined by EXAFS" *Jpn. J. Appl. Phys. B* (28), (1989) . pp. 1905.