

TÍNH CÁC THAM SỐ NHIỆT ĐỘNG VÀ 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

Tác giả: Nguyễn Bá Đức*

Tóm tắt bằng tiếng Việt:

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: Phổ XAFS phi điều hòa; tham số nhiệt động; cumulant; tinh thể pha tạp; sự phụ thuộc nhiệt độ.

Tóm tắt bằng tiếng Anh:

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.