

**XÁC ĐỊNH BIỂU THỨC TÍNH CÁC CUMULANT VÀ THAM SỐ NHIỆT ĐỘNG  
CỦA CÁC TINH THỂ CÓ CẤU TRÚC LẬP PHƯƠNG BẰNG MÔ HÌNH EINSTEIN  
TƯƠNG QUAN PHI ĐIỀU HÒA HIỆU DỤNG TRONG QUANG PHỔ XAFS**

**Define expressions to calculate cumulants and thermodynamic parameters of cubic crystals  
structure by the effective anharmonic correlated Einstein model in XAFS spectra.**

*Ngày nhận bài: 01/6/2016; ngày phân biên: 07/6/2016; ngày duyệt đăng: 20/6/2016*

**Nguyễn Bá Đức\***

**TÓM TẮT**

Sử dụng thế tương tác hiệu dụng trong mô hình Einstein tương quan phi điều hòa trên cơ sở thống kê lượng tử và tương tác phonon, các biểu thức biểu diễn thành phần bất đối xứng (cumulant) và các đại lượng nhiệt động qua các tham số cấu trúc mới bao gồm các đóng góp của hiệu ứng phi điều hòa của các tinh thể lập phương đã được xây dựng. Các tham số cấu trúc mới đã giúp mô tả sự phân bố của các nguyên tử. Việc khai triển các cumulant và các đại lượng nhiệt động qua các tham số cấu trúc mới đã được thực hiện.

**Từ khóa:** *phi điều hòa, XAFS, cumulant, nhiệt động, tham số.*

**ABSTRACT**

By using potential effective interaction in the anharmonic correlated Einstein model on the basis of quantum statistical theory with phonon interaction procedure, the expressions describing asymmetric component (cumulants) and thermodynamic parameters including the anharmonic effects contributions and by new structural parameters of cubic crystals has been formulated. This new parameters describing the distribution of atoms. The expansion of cumulants and thermodynamic parameters through new structural parameters has been performed.

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

**1. Mở đầu**

Trong phổ XAFS (X-ray Absorption Fine Structure) điều hòa, việc tính toán lý thuyết đã trùng tốt với thực nghiệm ở các nhiệt độ thấp. Nhưng tại các nhiệt độ cao khác nhau, phổ XAFS đã cho thấy thông tin về cấu trúc khác nhau do hiệu ứng phi điều hòa và những hiệu ứng này cần phải được đánh giá. Hơn

nữa, phổ XAFS ở nhiệt độ thấp không cung cấp một hình ảnh chính xác cấu trúc của tinh thể, do đó việc nghiên cứu phổ XAFS bao gồm cả hiệu ứng phi điều hòa ở nhiệt độ cao là cần thiết. Biểu thức của phổ XAFS phi điều hòa thường được viết như sau [4]:

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

\* Phó Giáo sư, Tiến sĩ, Giảng viên cao cấp - Đại học Tân Trào

trong đó, phần thực  $F(k)$  biểu diễn biên độ tán xạ 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  $e^{-2ikr}$ , 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  $T$  và được viết trong các số hạng của cumulant.

Phép gần đúng khai triển cumulant ban đầu chủ yếu là để làm khớp các phổ XAFS lý thuyết với các kết quả của thực nghiệm ở nhiệt độ cao. Sau đó đã có một số phương pháp được xây dựng với mục đích tính giải tích các cumulant và mô hình Einstein tương quan phi điều hoà [7] là mô hình đã cho kết quả trùng hợp tốt với thực nghiệm. Sự phát triển quan trọng trong phương pháp này là đã tính đến sự tương tác giữa nguyên tử hấp thụ và nguyên tử tán xạ với các nguyên tử lân cận trong một chùm nhỏ các nguyên tử khi nhiệt độ tăng cao, thế năng tương tác giữa các nguyên tử trở thành bất đối xứng do hiệu ứng phi điều hoà và các thành phần bất đối xứng đã được viết dưới dạng các cumulant. Cumulant bậc một biểu diễn sự bất đối xứng của thế cặp nguyên tử hay dẫn nở mạng, cumulant bậc hai đóng góp chính cho hệ số Debye-Waller nên được gọi là hệ số Debye-Waller, cumulant bậc ba biểu diễn sự dịch pha của các phổ XAFS do hiệu ứng phi điều hoà. Mục đích của nghiên cứu này là sử dụng mô hình Einstein tương quan phi điều hoà để xây dựng các biểu thức về các cumulant, các tham số nhiệt động dưới dạng tổng quát qua các tham số cấu trúc mới.

## 2. Lý thuyết

Vì dao động của một cặp nguyên tử hấp thụ và tán xạ có khối lượng  $M_1, M_2$  bị ảnh hưởng bởi chùm nguyên tử lân cận, nên khi tính đến các ảnh hưởng này, tương tác giữa nguyên tử hấp thụ và tán xạ qua thế hiệu dụng Einstein phi điều hoà dạng:

$$U_E(x) = U(x) + \dots + \sum_{i=1,2} \sum_{j \neq i} U \left( \frac{\mu}{M_i} \times \hat{R}_{i2} \cdot \hat{R}_{ij} \right) \quad (2)$$

trong đó  $\hat{R}$  là vectơ đơn vị,  $\mu = M_1 M_2 / (M_1 + M_2)$  gọi là khối lượng rút gọn, tổng theo  $i, j$  là sự đóng góp của chùm nguyên tử lân cận.  $U(x)$  là thế cặp phi điều hoà mô tả tương tác hiệu dụng giữa cặp nguyên tử hấp thụ và bức xạ:

$$U(x) \approx \frac{1}{2} k_{\text{eff}} x^2 + k_3 x^3 + \dots \quad (3)$$

với  $x = r - r_0$  là độ lệch tức thời của khoảng cách giữa hai nguyên tử từ vị trí cân bằng,  $k_{\text{eff}}$  là hệ số đàn hồi hiệu dụng,  $k_3$  là tham số bậc 3 đặc trưng cho tính phi điều hoà và tạo ra sự bất đối xứng của thế tương tác. Trên cơ sở thống kê lượng tử với gần đúng dao động chuẩn điều hoà, 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:

$$H = \frac{p^2}{2\mu} + U_E(x) = H_0 + U_E(a) + \delta U_E(y); \quad (4)$$

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

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

với  $a$  là hệ số dẫn nở nhiệt mạng,  $y$  là độ lệch của  $x$  từ giá trị cân bằng tại nhiệt độ  $T$ .

Bảng 1. Các biểu thức biểu diễn tham số nhiệt động của các hệ tinh thể lập phương

Tham số	Hệ s.c	Hệ fcc	Hệ bcc
$k_3$	$-5 D \alpha^3 / 4$	$-5 D \alpha^3 / 4$	$-5 D \alpha^3 / 4$
$k_{\text{eff}}$	$3 D \alpha^2 (1 - 5 \alpha a / 4)$	$5 D \alpha^2 (1 - 3 \alpha a / 2)$	$11 D \alpha^2 (1 - 45 \alpha a / 22) / 3$
$\delta U_E(y)$	$D \alpha^2 (3 a y - 5 \alpha y^3 / 4)$	$5 D \alpha^2 (a y - \alpha y^3 / 4)$	$D \alpha^2 (11 a y / 3 - 5 \alpha y^3 / 4)$

Sử dụng thế tương tác giữa mỗi cặp nguyên tử bằng thế phi điều hòa Morse cho các tinh thể lập phương và khai triển tới bậc ba quanh vị trí cực tiểu của nó, ta có:

$$U_E(x) = D(e^{-2\alpha x} - 2e^{-\alpha x}) \approx D(-1 + \alpha^2 x^2 - \alpha^3 x^3 + \dots) \quad (5)$$

trong đó  $\alpha$  là hệ số dẫn nở nhiệt,  $D$  là năng lượng phân ly vì  $U(r_0) = -D$ .

Từ các biểu thức (4) và (5) ta có thể tương tác hiệu dụng Einstein tổng quát:

$$U_E(x) = U_E(a) + \frac{1}{2} k_{\text{eff}} y^2 + \delta U_E(y), \quad (6)$$

Thay thế (5) với  $x = y + a$  vào (2), sử dụng biểu thức (6) và tính toán số hạng thứ hai của (2) với  $\mu = M/2$ , tổng theo  $i=1$  ứng với nguyên tử hấp thụ đến  $i=2$  ứng với nguyên tử tán xạ, 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  $U(x)$  và tính tích  $(\hat{R}_{12} \cdot \hat{R}_{ij})$  đối với các mạng tinh thể cấu trúc lập phương như s.c, fcc và bcc ta thu được các tham số nhiệt động  $k_{\text{eff}}$ ,  $k_3$ , và  $\delta U_E(y)$  theo Bảng 1.

So sánh các biểu thức trong Bảng 1, ta nhận thấy mặc dù các hệ lập phương có cấu trúc khác nhau nhưng các biểu thức có các hệ số chung đặc biệt, ta gọi các hệ số này là các tham số cấu trúc mới  $c_1, c_2$ , các hệ số này được tính toán và thống kê trong Bảng 2.

Bảng 2. Các tham số cấu trúc mới đối với các tinh thể lập phương

Cấu trúc	$c_1$	$c_2$
s.c	3	1
fcc	5	6/5
bcc	11/3	18/11

Tham số  $k_3$  như nhau với mọi cấu trúc, các tham số nhiệt động  $k_{\text{eff}}$ ,  $\delta U_E(y)$  cho cấu trúc lập phương được viết lại dưới dạng tổng quát hóa theo tham số cấu trúc mới như sau:

$$k_{\text{eff}} = c_1 (D\alpha^2 + c_2 a k_3) = \mu \omega_E^2;$$

$$\delta U_E(y) = D \alpha^2 [c_1 a y - 5 \alpha y^3 / 4] \quad (7)$$

Để xây dựng các công thức tính giải tích các cumulant qua các tham số cấu trúc mới 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 và tính phi điều hoà là kết quả của tương tác phonon. Theo đó, ta biểu diễn  $y$  trong các công thức trên qua các toán tử sinh hạt và huỷ hạt  $\hat{a}^+, \hat{a}$ :

$$y = \sigma^0 (\hat{a} + \hat{a}^+);$$

$$\sigma^0 = \sqrt{\hbar / 2m\omega_E};$$

$$\hat{a}^+ \hat{a} = n, \quad (8)$$

và sử dụng các trạng thái dao động điều hoà  $|n\rangle$  như các trạng thái riêng với các năng lượng là các giá trị riêng  $E_n = n\hbar\omega_E$ , để thuận tiện ta bỏ qua năng lượng điểm không. Các toán tử  $\hat{a}, \hat{a}^+$  thoả mãn các tính chất  $[\hat{a}, \hat{a}^+] = 1$ ;  $\hat{a}^+ |n\rangle = \sqrt{n+1} |n+1\rangle$ ;  $\hat{a} |n\rangle = \sqrt{n} |n-1\rangle$ . Các cumulant được tính trên cơ sở giá trị trung bình  $\langle y^m \rangle = \text{Tr}(\rho y^m) / Z$  với  $m = 1, 2, 3, \dots$ , trong đó  $Z$  là tổng thống kê,  $\rho = \exp(-\beta H)$  là ma trận mật độ thống kê,  $\beta = (k_B T)^{-1}$ ,  $k_B$  là hằng số Boltzmann. Tương ứng với trường hợp không nhiễu loạn thì  $Z_0 = \text{Tr}(\rho_0)$ , với  $\rho_0 = \exp(-\beta H_0)$ . Như đã biết trong nhiễu loạn  $\delta U_E$ ,  $\rho = \rho_0 + \delta\rho$  với  $\delta\rho$  cho bởi:

$$\partial \rho = -H \rho \partial \beta ;$$

$$\partial \rho_0 = -H_0 \rho_0 \partial \beta \tag{9}$$

ta nhận được:

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

$$\delta \tilde{U}_E(\beta) = e^{\beta H_0} \delta U_E e^{-\beta H_0} .$$

Đặt năng lượng điểm không bằng không, ta sẽ có:

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

trong đó  $z \equiv e^{-\beta \hbar \omega_E} = e^{-\theta_E / T}$  gọi là biến số nhiệt độ và được xác định bởi  $\theta_E = \hbar \omega_E / k_B$  là nhiệt độ Einstein. Sau đây ta sẽ sử dụng các công thức trên để tính giải tích các cumulant

• **Các cumulant bậc chẵn**

$$\langle y^m \rangle \Big|_{\text{mchẵn}} \approx \frac{1}{Z} \text{Tr} \rho y^m \approx \frac{1}{Z_0} \text{Tr} \rho_0 y^m = \frac{1}{Z_0} \sum_n e^{-n\beta \hbar \omega_E} \langle n | y^m | n \rangle = \langle y^3 \rangle = \frac{1}{Z_0} \sum_{m'} \frac{e^{-\beta E_n} - e^{-\beta E_{n'}}}{E_n - E_{n'}} \langle n | \delta U_E | n' \rangle \langle n' | y^3 | n \rangle . \tag{17}$$

Với  $m=2$ , ta có:

$$\langle y^2 \rangle = \sigma^{(2)} = \frac{1}{Z_0} \sum_n e^{-n\beta \hbar \omega_E} \langle n | y^2 | n \rangle . \tag{10}$$

Sử dụng yếu tố ma trận

$$\langle n | y^2 | n \rangle = \langle n | \hat{a}^+ \hat{a} + \hat{a} \hat{a}^+ | n \rangle = (\sigma_0)^2 (2n + 1) .$$

Thay vào (10), biến đổi toán học và sử dụng (7) ta nhận được cumulant bậc hai:

$$\sigma^{(2)} = \langle y^2 \rangle = \frac{\hbar \omega_E}{2c_1 D \alpha^2} \frac{(1+z)}{(1-z)} . \tag{11}$$

• **Các cumulant bậc lẻ**

$$\langle y^m \rangle \Big|_{\text{mlẻ}} \approx \frac{1}{Z} \text{Tr} \rho y^m \approx \frac{1}{Z_0} \text{Tr} \delta \rho y^m \tag{12}$$

Với  $m=1,3$  ta sẽ có biểu thức tính cumulant bậc 1 và bậc 3. Biến đổi theo các yếu tố ma trận tương ứng với  $\langle y \rangle$  và  $\langle y^3 \rangle$ , ta có:

$$\langle n | y | n+1 \rangle = \sigma_0 \langle n | \hat{a}^+ \hat{a} | n+1 \rangle = \sigma_0 \sqrt{n+1} \langle n | n \rangle = \sigma_0 (n+1)^{1/2} , \tag{13}$$

$$\langle n | y^3 | n+1 \rangle = (\sigma_0)^3 (3n\sqrt{n+1} + 3\sqrt{n+1}) \langle n | n \rangle = 3(\sigma_0)^3 (n+1)^{3/2} , \tag{14}$$

$$\langle n | y^3 | n+3 \rangle = 3(\sigma_0)^3 [(n+1)(n+2)(n+3)]^{1/2} \tag{15}$$

+ **Cumulant bậc một (m=1):**

$$\sigma^{(1)} = \langle y \rangle = \frac{1}{Z_0} \sum_{m'} \frac{e^{-\beta n \hbar \omega_E} - e^{-\beta n' \hbar \omega_E}}{n \hbar \omega_E - n' \hbar \omega_E} \langle n | \frac{D}{4} [4\alpha^2 c_1 a y - 5\alpha^3 y^3] | n' \rangle \langle n' | y | n \rangle$$

với  $n'=n+1$ , từ (13) và (12) sau khi biến đổi, ta có:

$$\langle y \rangle = \frac{D\alpha^2}{4\hbar\omega_E} (\sigma_0)^2 \left[ 4c_1 a - 15\alpha(\sigma_0)^2 \frac{(1+Z)}{(1-Z)} \right] = \frac{D\alpha^2 \hbar\omega_E}{4k_{eff}} \left[ 4c_1 a - 15\alpha(\sigma_0)^2 \frac{(1+Z)}{(1-Z)} \right] ,$$

vì  $\langle y \rangle = 0$  và lấy gần đúng  $k_{eff} \approx c_1 D \alpha^2$ ,

biến đổi và rút gọn ta sẽ có cumulant bậc một:

$$\sigma^{(1)} = a = \frac{15\hbar\omega_E}{8c_1^2 D \alpha} \frac{(1+z)}{(1-z)} = \frac{15\alpha}{4c_1} \times \sigma^{(2)} \tag{16}$$

+ **Cumulant bậc ba (m=3)**

Từ (7) và (17) ta có:

$$\langle y^3 \rangle = \frac{D\alpha^2}{Z_0} \sum_{m'} \frac{e^{-\beta n \hbar \omega_E} - e^{-\beta n' \hbar \omega_E}}{n \hbar \omega_E - n' \hbar \omega_E} \left[ \langle n | c_1 a y | n' \rangle - \langle n | \frac{5}{4} \alpha y^3 | n' \rangle \right] \langle n' | y^3 | n \rangle \tag{18}$$

Sử dụng hệ thức (14, 15), tính (18) lần lượt với  $n'=n+1$ ,  $n'=n+3$  và chú ý các yếu tố ma trận chỉ có tác dụng với  $y^3$ , kết hợp với (7), (8) ta thu được cumulant bậc 3:

$$\sigma^{(3)} = \frac{15(\hbar\omega_E)^2}{8c_1^3 D^2 \alpha^3} \frac{(1+10z+z^2)}{(1-z)^2} = \frac{15\hbar\omega_E}{4c_1^2 D \alpha} \frac{(1+10z+z^2)}{(1-z)^2} \times \sigma^{(2)} \tag{19}$$

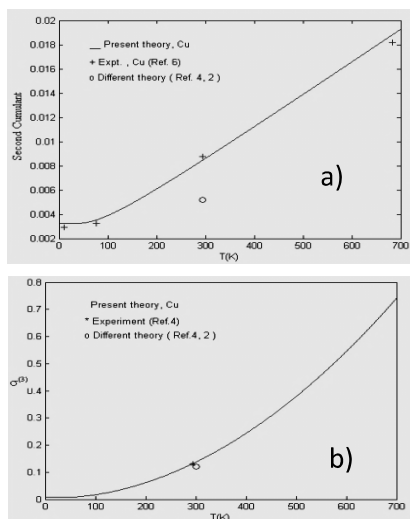
Thay giá trị của các đại lượng trong các hệ thức cumulant và tính số cho tinh thể đồng (Cu), ta thấy giá trị tính toán theo lý thuyết phù hợp với kết quả của thực nghiệm [6] (Bảng 3). Các đồ thị biểu diễn cumulant bậc hai (Hình 1a) và cumulant bậc ba (Hình 1b) cho thấy các kết quả tính số trùng tốt với thực nghiệm hơn các lý thuyết khác.

Bảng 3. So sánh kết quả của  $\sigma^2$  và  $\sigma^{(3)}$  được tính theo lý thuyết hiện tại với các số liệu thực nghiệm đối với tinh thể đồng (Cu) tại một số nhiệt độ khác nhau

T(K)	$\sigma^2(\text{Å}^2)$		$\sigma^3(\text{Å}^3)$	
	Present	Expt.	Present	Expt.
10	0,00298	0,00292	-	-
77	0,00333	0,00325	0,00010	-
295	0,01858	0,01823	0,000131	0,000130
683	0,01858	0,01823	-	-

### 3. Thảo luận và kết luận

Tiếp tục phát triển mô hình Einstein tương quan phi điều hòa ta đã thu được một lý thuyết tổng quát để tính các cumulant và tham số nhiệt động trong lý thuyết XAFS phi điều hòa. Các biểu thức được biểu diễn qua các tham số cấu trúc mới phù hợp với các kết quả đã được công bố [8]. Biểu thức trong bài báo này là trường hợp tổng quát của phương pháp đã được công bố khi đặt độ lớn của  $c_1, c_2$ , từ Bảng 2 vào biểu thức tính toán các tham số nhiệt động và các cumulant thu được ở các hệ thức (11, 16, 19). Kết quả tính toán của lý thuyết hiện tại cho các cumulant trùng tốt với số liệu của thực nghiệm đối với tinh thể đồng (Bảng 3) và được minh họa qua các đồ thị trong Hình 1.



Hình 1: Các đồ thị minh họa sự phụ thuộc vào nhiệt độ của các cumulant bậc hai  $\sigma^2$  và bậc ba  $\sigma^{(3)}$ , so sánh với các giá trị của thực nghiệm

chú ý rằng các số liệu thực nghiệm được lấy từ phép đo phổ XAFS tại phòng thí nghiệm HASYLAB (DESY, Germany) và đồ thị được chạy bằng phần mềm MATLAB.

Với việc tìm ra phổ XAFS đã cung cấp số lượng và bán kính của nguyên tử, phổ XAFS đã trở thành một kỹ thuật phân tích cấu trúc mạnh mẽ, nhưng vẫn còn vấn đề cần giải quyết đó là sự phân bố của các nguyên tử này. Các tham số  $c_1, c_2$ , trong bài có chứa góc giữa đường nối của nguyên tử hấp thụ với nguyên tử liên kết lân cận và đường nối giữa cặp nguyên tử hấp thụ và tán xạ cho nên chúng mô tả phân bố của các nguyên tử lân cận bao quanh nguyên tử hấp thụ và nguyên tử tán xạ. Biết cấu trúc của các tinh thể và độ lớn của  $c_1, c_2$ , từ Bảng 2, chúng ta có thể tính toán các cumulant và các tham số nhiệt động khác. Đối với cấu trúc của các chất chưa biết, chúng ta có thể rút ra số nguyên tử từ phép đo phổ XAFS, cũng như các tham số  $c_1, c_2$ , theo lý thuyết từ phép đo các cumulant, ta sẽ có được thông tin về phân bố hoặc cấu trúc nguyên tử.

Các biểu thức của tham số nhiệt động đều được biểu diễn qua cumulant bậc hai  $\sigma^{(2)}$  là rất thuận tiện bởi vì khi xác định được  $\sigma^{(2)}$  cho phép ta dự đoán các cumulant khác (Eq. 16, 19), do đó sẽ làm giảm các tính toán số học và các phép đo thực nghiệm.

### 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.

## TÀI LIỆU THAM KHẢO

1. Nguyễn Quang Báu, Bùi Bằng Đoàn, Nguyễn Văn Hùng (1999) *Vật Lý Thống Kê*, Nhà xuất bản Đại học Quốc gia, Hà nội;
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. N. V. Hung and N. B. Duc (2000) "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, pp. 15-21;
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;
9. Nguyen Ba Duc (2015), "Using the anharmonic correlated Einstein model for calculation the thermodynamic parameters and cumulants of dopant face cubic center crystals", *American Association for Science and Technology (AASCIT) - Journal of Physics (USA)*;
10. Nguyen Ba Duc, Nguyen Thi Lan Anh (2015), "Effective Anharmonic Einstein Potential for the Thermodynamic Parameters, Three First Cumulants and Anharmonic Perturbation Factor of Iron Doped Molybdenum Crystals", *American Association for Science and Technology (AASCIT) - Journal of Physics (USA)*.