

**ẢNH HƯỞNG CỦA NHIỆT ĐỘ VÀ ÁP SUẤT LÊN MỘT SỐ ĐẠI LƯỢNG
NHIỆT ĐỘNG CỦA KIM LOẠI ĐỒNG CẤU TRÚC FCC**
THE EFFECT OF TEMPERATURE AND PRESSURE ON SOME
THERMODYNAMIC CHARACTERISTICS OF FCC COPPER METAL

Nguyễn Thị Hồng^{1*},
Nguyễn Hoàng Đạt²,
Lê Hồ Hải Yến²,
Trịnh Bá Hưng²,
Đào Duy Quang³,
Trần Trung Hiếu³,
Ngô Việt Hoàng³

¹ Khoa Khoa học Tự nhiên, Trường Đại học Hồng Đức;

² K25 ĐHSP Vật lý, Khoa Khoa học Tự nhiên, Trường Đại học Hồng Đức

³ K28 ĐHSP Vật lý, Khoa Khoa học Tự nhiên, Trường Đại học Hồng Đức

*Tác giả liên hệ; Email: nguyenthihongvatly@hdu.edu.vn

DOI: <https://doi.org/10.70117/hdujs.3030-4628.90.09.2026.1203>

Ngày nộp bài: 16/03/2026; Ngày gửi phản biện: 01/04/2026; Ngày duyệt đăng: 25/09/2026

Từ khóa:

Đồng, hệ số Debye-Waller, mô hình Debye tương quan phi điều hòa, tần số và nhiệt độ Debye.

Keywords:

Copper, Debye-Waller factor, anharmonic correlated Debye model, Debye frequency and temperature.

TÓM TẮT

Trong nghiên cứu này, phương pháp bán thực nghiệm dựa trên mô hình Debye tương quan phi điều hòa được chúng tôi sử dụng để nghiên cứu sự phụ thuộc nhiệt độ và áp suất của các đại lượng nhiệt động bao gồm tần số Debye, nhiệt độ Debye và hệ số Debye-Waller (Debye-Waller factor - DWF) của kim loại đồng cấu trúc lập phương tâm mặt (face-centered cubic - FCC). Các tính toán số đối với tần số Debye, nhiệt độ Debye được thực hiện lên đến áp suất 450 GPa, đối với DWF được thực hiện ở nhiệt độ lên đến 1000 K và áp suất 50 GPa bằng cách sử dụng thế năng tương tác Morse với các tham số được suy ra trong sơ đồ nghịch đảo mạng tinh thể Möbius. Các kết quả thu được cho thấy sự phù hợp tốt với số liệu thực nghiệm và các công bố lý thuyết trước đây, góp phần bổ sung cơ sở dữ liệu và cung cấp thông tin hữu ích cho việc ứng dụng vật liệu này trong các lĩnh vực khoa học và công nghệ.

ABSTRACT

In this study, a semi-empirical method based on an anharmonic correlated Debye model was used to investigate the temperature and pressure dependence of thermodynamic quantities including Debye frequency, Debye temperature, and Debye-Waller coefficient of FCC-structured copper. Numerical calculations for Debye frequency and Debye temperature were performed up to a pressure of 450 GPa, and for DWF at temperature up to 1000 K and a

pressure of 50 GPa using Morse interaction potentials with parameters derived from the inverse Möbius crystal lattice scheme. The results obtained show good agreement with experimental data and previous theoretical publications, contributing to the database and providing useful information for the application of this material in scientific and technological fields.

1. ĐẶT VẤN ĐỀ

Đồng (Cu) là kim loại chuyển tiếp có độ dẫn điện và dẫn nhiệt cao, tính dẻo và khả năng chống ăn mòn tương đối tốt. Ở điều kiện thường, Cu tồn tại ở cấu trúc FCC và được sử dụng rộng rãi trong công nghiệp điện tử, trong các thiết bị truyền tải điện cao áp, hệ thống trao đổi nhiệt của lò phản ứng hạt nhân, trong công nghệ vật liệu cũng như công nghiệp hàng không vũ trụ và năng lượng [1]. Do đó, trong những thập kỷ qua, các tính chất nhiệt động của Cu đã được quan tâm nghiên cứu bằng nhiều phương pháp khác nhau bao gồm cả thực nghiệm và lý thuyết [1-17]. Một trong những phương pháp hiệu quả nhất để nghiên cứu cấu trúc và tính chất nhiệt động học của tinh thể là cấu trúc tinh thể phổ hấp thụ tia X mở rộng (X-ray absorption fine structure - XAFS) [1]. Khi chiếu chùm tia X vào tinh thể, ta thu được EXAFS, đây là kết quả giao thoa của sóng quang điện tử đến và sóng quang điện tử tán xạ [1]. EXAFS phi điều hòa cung cấp thông tin về các tính chất cấu trúc và nhiệt động học của vật liệu. Các dao động mạng ảnh hưởng mạnh mẽ đến biên độ EXAFS thông qua DWF. Trong công trình [2], J. Freund và cộng sự đã trình bày các kết quả của phép đo EXAFS của đồng ở áp suất từ 0 đến 10 GPa, các tác giả cũng trình bày hai mô hình về sự phụ thuộc của DWF vào áp suất: (1) mô hình Debye tương quan cùng với các tham số hóa đơn giản của phương trình trạng thái đẳng nhiệt và tham số Grüneisen; (2) mô hình để tính toán các momen của phân bố khoảng cách lân cận gần nhất từ sự khai triển đến bậc ba của thế năng. Trong công trình [3], J. C. Cezar và cộng sự sử dụng phép đo EXAFS và mô hình Einstein tương quan để nghiên cứu hệ số Debye-Waller, hay sự rối loạn của mẫu Cu và hợp kim của nó theo nhiệt độ. Tuy nhiên, các nghiên cứu về tần số và nhiệt độ Debye, DWF của đồng trong vùng áp suất cao vẫn còn rất hạn chế, kết quả giữa các phép đo vẫn còn có sự chênh lệch đáng kể, chưa có sự thống nhất.

Trong nghiên cứu này, sự phụ thuộc của nhiệt độ và áp suất lên một số đại lượng nhiệt động của đồng cấu trúc FCC bao gồm tần số và nhiệt độ Debye, DWF đã được khảo sát dựa trên việc áp dụng mô hình Debye tương quan phi điều hòa (Anharmonic correlated Debye model - ACDM). Kết quả nghiên cứu của chúng tôi được so sánh với một số dữ liệu thực nghiệm đã được công bố trước đó và cho thấy sự phù hợp khá tốt.

2. PHƯƠNG PHÁP NGHIÊN CỨU

2.1. Thế năng tương tác giữa các nguyên tử cấu trúc FCC

Dựa trên phép nghịch đảo Möbius trong lý thuyết số, Chen và cộng sự đã đề xuất phương pháp nghịch đảo mạng để thu được thế năng tương tác giữa các nguyên tử [4].

Trong cách tiếp cận này, năng lượng liên kết trên mỗi nguyên tử của tinh thể $E(r)$ có thể được biểu diễn bằng tổng của các thế năng tương tác $\varphi(r_{ij})$ sau

$$E(r) = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \varphi(r_{ij}) = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{\infty} z_k \varphi(v(k)a), \quad (1)$$

trong đó a là khoảng cách lân cận gần nhất giữa các nguyên tử, $v(k) = v_k = \frac{r_k}{a}$ là tỷ số giữa khoảng cách lân cận thứ k và khoảng cách lân cận gần nhất, và z_k là số các nguyên tử trên quả cầu phối vị thứ k .

Thế năng tương tác cặp $\varphi(r)$ được suy ra từ phép nghịch đảo có dạng

$$\varphi(r) = 2 \sum_{k=1}^{\infty} I(k) E(v(k)a) \quad (2)$$

trong đó $I(k)$ là hàm nghịch đảo Möbius phụ thuộc vào loại cấu trúc của vật liệu.

Trong nghiên cứu này, thế năng tương tác cặp $\varphi(r)$ giữa hai nguyên tử trung gian được giả định có dạng hàm thế Morse như sau

$$\varphi(r) = D \left[e^{-2\alpha(r-r_0)} - 2e^{-\alpha(r-r_0)} \right] \quad (3)$$

trong đó, tham số D là năng lượng phân ly, α mô tả độ rộng của thế năng và r_0 là khoảng cách lân cận gần nhất giữa hai nguyên tử ở trạng thái cân bằng.

Trong gần đúng khai triển bậc 4 của độ dời $x = r - r_0$, thế tương tác Morse có thể được viết dưới dạng:

$$\varphi(x) \approx D_0 \left(-1 + \alpha^2 x^2 - \alpha^3 x^3 + \frac{7}{12} \alpha^4 x^4 + \dots \right), \quad x = r - r_0. \quad (4)$$

Để đánh giá ảnh hưởng của hiệu ứng phi điều hoà đến các cumulant phổ EXAFS, GS. Nguyễn Văn Hùng và cộng sự đã phát triển mô hình Debye, trong đó xem xét bức tranh dao động địa phương bao gồm đóng góp của các nguyên tử hấp thụ và tán xạ, và các nguyên tử lân cận gần nhất của chúng. Mô hình này được đặt tên là mô hình Debye tương quan phi điều hoà. Thế năng hiệu dụng trong ACDM có dạng sau [5].

$$V_{\text{eff}}(x) = \varphi(x) + \sum_{j \neq i} \varphi \left(\frac{\mu}{M_i} x \hat{R}_{AB} \hat{R}_{ij} \right) = \frac{1}{2} k_{\text{eff}} x^2 + k_3 x^3 + k_4 x^4 + \dots \quad (5)$$

ở đây, $\varphi(x)$ mô tả thế tương tác cặp giữa hai nguyên tử A và B , với $x = r - r_0$ là độ lệch khỏi vị trí cân bằng. $\hat{R}_{AB}$ và $\hat{R}_{ij}$ lần lượt là vectơ đơn vị hướng từ nguyên tử A đến nguyên tử B và vectơ hướng từ nguyên tử i đến nguyên tử lân cận gần nhất j . Các đại lượng M_A và M_B lần lượt là khối lượng của hai nguyên tử tương tác. Đối với kim loại đồng tinh khiết thì $\mu = \frac{M_{\text{Cu}}}{2}$ là khối lượng rút gọn của cặp nguyên tử Cu-Cu, k_{eff} là hằng số lực liên kết hiệu dụng; k_3 và k_4 là hằng số lực phi điều hoà bậc ba và bậc bốn.

Giả sử nguyên tử hấp thụ ở đỉnh A còn nguyên tử tán xạ B ở tâm mặt của tinh thể kim loại đồng cấu trúc FCC. Nếu xét đến gần đúng tương tác trên quả cầu phối vị thứ nhất, không tính đến tương tác giữa nguyên tử hấp thụ A và nguyên tử tán xạ B thì mỗi nguyên tử A được tương tác với 11 nguyên tử xung quanh khác, mỗi nguyên tử B được tương tác với 11 nguyên tử xung quanh khác.

Tính toán thể tương tác theo phương trình (5) chúng tôi thu được biểu thức của thể tương tác hiệu dụng như sau:

$$V_{eff}^{FCC} = \varphi(x) + 8\varphi\left(\frac{x}{4}\right) + 8\varphi\left(\frac{-x}{4}\right) + \varphi\left(\frac{x}{2}\right) + \varphi\left(\frac{-x}{2}\right) \quad (6)$$

Thay biểu thức (4) vào (6) chúng tôi thu được:

$$V_{eff}^{FCC}(x) = -19D + \frac{5}{2}D\beta^2x^2 - D\beta^3x^3 + \frac{133}{192}D\beta^4x^4. \quad (7)$$

So sánh với biểu thức (5) ta thu được các hằng số lực hiệu dụng của hệ tinh thể cấu trúc FCC tại áp suất $P = 0$ tương ứng là

$$k_{eff} = 5D\alpha^2, \quad k_3 = -D\alpha^3, \quad k_4 = \frac{133}{192}D\alpha^4. \quad (8)$$

2.2. Hệ số Debye - Waller. Tần số và nhiệt độ Debye

Khi phân tích phổ EXAFS của Cu, người ta đã đề xuất phương pháp khai triển gần đúng các mômen của sự dịch chuyển nguyên tử được gọi là các cumulant EXAFS. Trong các cumulant phổ EXAFS đầu tiên của chất rắn [6], Cumulant bậc hai $\sigma^{(2)}$ mô tả phương sai của phân bố khoảng cách, tương ứng với độ dịch chuyển tương đối bình phương trung bình song song cũng được gọi là DWF có dạng sau

$$\sigma^{(2)} = \langle (r - r_0)^2 \rangle = \langle x^2 \rangle. \quad (9)$$

Trong ACDM, DWF được xác định bởi [6]

$$\sigma^{(2)} = -\sigma_0^2 \int_0^{\pi/a} \omega(q) \frac{1 + Z(q)}{1 - Z(q)} dq, \quad (10)$$

với $\sigma_0^2 = \frac{\hbar a}{2\pi k_{eff}}$ là đóng góp của dao động điểm không, tần số dao động phonon

$\omega(q)$ và $z(q)$ có dạng:

$$\omega(q) = 2\sqrt{\frac{k_{eff}}{M}} \left| \sin\left(\frac{qa}{2}\right) \right|, \quad z(q) = \exp(\beta\hbar\omega(q)), \quad \beta = \frac{1}{k_B T}, \quad (11)$$

với q là số sóng, $|q| \leq \frac{\pi}{a_h}$, M là tổng khối lượng của vật rắn, $a = a_0(\eta)^{1/3}$ là hằng

số mạng, $\eta = \frac{V}{V_0}$ là hệ số nén thể tích tinh thể, a_0 là hằng số mạng của kim loại ở áp suất không. V_0 là thể tích của tinh thể ở điều kiện môi trường.

Hiệu ứng phi điều hoà của mạng tinh thể dẫn đến sự phụ thuộc thể tích của tần số dao động phonon. Ảnh hưởng của thể tích tinh thể đến các tần số dao động phonon ω_i , được mô tả bởi hệ số Grüneisen γ_G dưới dạng [7].

$$\gamma_G = -\frac{\partial \ln \omega(q)}{\partial \ln V}, \quad (12)$$

Một số nghiên cứu gần đây [20] chỉ ra rằng, hệ số Grüneisen sẽ giảm dần theo áp suất ở vùng áp suất cao. Để đánh giá ảnh hưởng của thể tích (áp suất) đến hệ số Grüneisen, khá nhiều lý thuyết đã được đưa ra [9], [10], [11]. Ở nghiên cứu này, chúng tôi sẽ sử dụng đề xuất của Burakovsky và cộng sự về hệ số Grüneisen để nghiên cứu các tính chất nhiệt động của đồng. Theo đó, thông qua việc xem xét giá trị của hệ số Grüneisen tại các giới hạn áp suất thấp và áp suất siêu cao, Burakovsky và cộng sự đã xây dựng được biểu thức của hệ số Grüneisen dưới dạng [12]

$$\gamma_G = \frac{1}{2} + \gamma_1 \eta^{1/3} + \gamma_2 \eta^s, \quad (13)$$

trong đó $\gamma_1, \gamma_2, s > 1$ là các giá trị phụ thuộc vào vật liệu nghiên cứu.

Kết hợp biểu thức (12) và (13) và thực hiện các phép biến đổi toán học ta có:

$$\omega_D(\eta) = \omega_{0D} \eta^{-1/2} \exp \left[-3\gamma_1 (\eta^{1/3} - 1) - \frac{\gamma_2}{s} (\eta^s - 1) \right] \quad (14)$$

$$\theta_D(\eta) = \theta_{0D} \eta^{-1/2} \exp \left[-3\gamma_1 (\eta^{1/3} - 1) - \frac{\gamma_2}{s} (\eta^s - 1) \right] \quad (15)$$

với $\omega_{0D} = 2\sqrt{\frac{k_{eff}^0}{M}}$, $\theta_{0D} = \frac{\hbar \omega_{0D}}{k_B}$ và k_{eff}^0 là hằng số lực hiệu dụng tại áp suất không

được tính toán dựa trên Λ CDM theo biểu thức (8).

Để xem xét ảnh hưởng của áp suất đến các đại lượng nhiệt động đưa ra ở trên, chúng tôi sử dụng phương trình trạng thái Vinet được xây dựng có dạng sau [13]

$$P = 3K_0 \eta^{-2/3} (1 - \eta^{1/3}) \exp \left[\frac{3}{2} (K_0' - 1) (1 - \eta^{1/3}) \right], \quad (16)$$

với K_0 là mô đun nén khối đẳng nhiệt và K_0' là đạo hàm bậc nhất theo áp suất của K_0 .

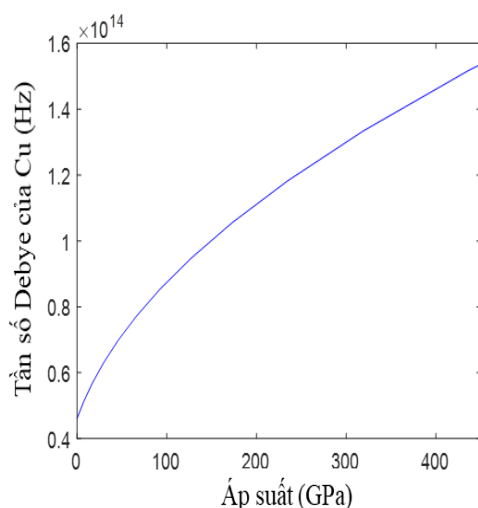
3. KẾT QUẢ NGHIÊN CỨU VÀ THẢO LUẬN

Để tính toán cho các đại lượng nhiệt động đã đưa ra ở Phần 2, chúng tôi sử dụng các tham số thực nghiệm từ các công trình đã được công bố trước đó đối với kim loại đồng được đưa ra ở Bảng 1. Việc lựa chọn các tham số được thực hiện trên cơ sở bảo đảm sự tương thích về ý nghĩa vật lý, định nghĩa, đơn vị, trạng thái tham chiếu và phạm vi áp dụng của chúng trong mô hình lý thuyết được sử dụng.

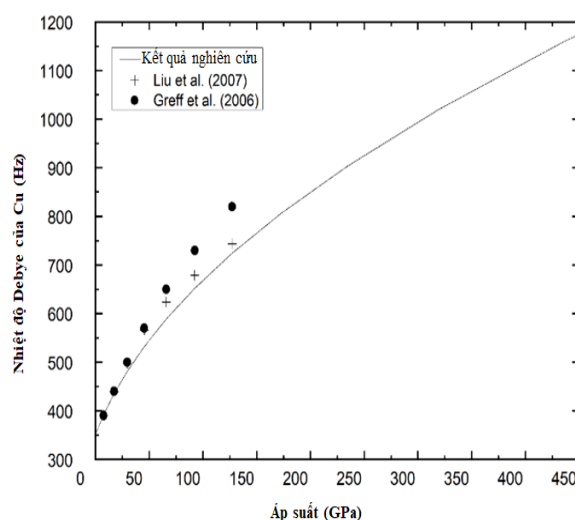
Bảng 1. Các tham số thế Morse D , α và r_0 , các tham số phi điều hòa γ_1, γ_2, s , môđun nén khối đẳng nhiệt và là đạo hàm bậc nhất theo áp suất của nó K_0, K'_0 của kim loại Cu ở điều kiện môi trường

Kim loại	K_0 (GPa)	K'_0	γ_1	γ_2	s	D (eV)	α ($\text{\AA}^{-1}$)	r_0 ($\text{\AA}^{-1}$)
Cu	133.41 [6]	5.37 [6]	0.9 [12]	0.78 [12]	4.7 [12]	0.3429 [14]	1.3588 [14]	2.866 [14]

Hình 1 trình bày sự phụ thuộc áp suất của tần số Debye của kim loại Cu vào áp suất trong khoảng từ 0 đến 450 GPa. Có thể quan sát thấy tần số Debye tăng theo áp suất, từ khoảng $0,45 \times 10^{14}$ Hz ở điều kiện gần áp suất thường lên đến xấp xỉ $1,5 \times 10^{14}$ Hz tại 450 GPa, tức là tăng hơn ba lần so với ban đầu. Đồ thị cũng cho thấy ở vùng áp suất thấp tần số Debye tăng nhanh, khi áp suất tiếp tục tăng cao thì tốc độ tăng giảm dần [chẳng hạn ở áp suất 7,5 GPa, độ dốc của đường cong là khoảng $6,29 \cdot 10^{11}$ Hz/GPa, nhưng tại áp suất 173 GPa thì độ dốc của đường cong giảm còn khoảng $2,18 \cdot 10^{11}$ Hz/GPa. Sự tăng theo áp suất của tần số Debye có thể được giải thích về mặt vật lí, khi áp suất tăng, khoảng cách liên nguyên tử trong mạng tinh thể của Cu giảm, làm tăng độ cứng của liên kết. Khi liên kết cứng hơn, các nguyên tử dao động nhanh hơn tần số cao hơn kéo theo đó tần số Debye cũng tăng lên. Tuy nhiên, ở vùng áp suất rất cao, nguyên tử bị nén chặt, làm giảm đáng kể khả năng nén khiến độ cứng tăng chậm lại và dẫn đến việc đường cong tần số (thường là mode phonon) tăng chậm dần thay vì tăng tuyến tính như ban đầu dẫn đến độ dốc của đường cong giảm dần.



Hình 1. Tần số Debye của Cu phụ thuộc áp suất

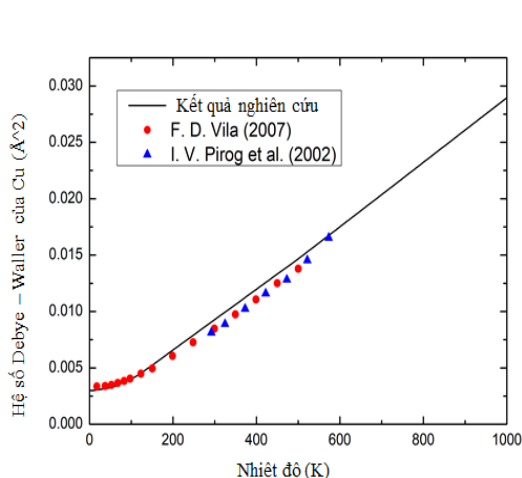


Hình 2. Nhiệt độ Debye của Cu phụ thuộc áp suất

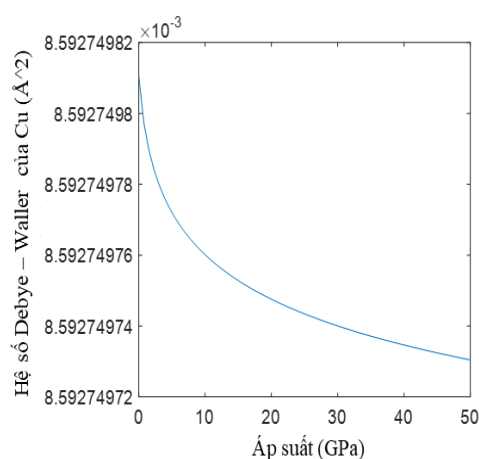
Sự phụ thuộc áp suất của nhiệt độ Debye θ_D của Cu được biểu thị trên Hình 2. Đồ thị cho thấy nhiệt độ Debye tăng theo áp suất trong toàn khoảng áp suất khảo sát đến 450 GPa. Ở vùng áp suất thấp, θ_D tăng khá nhanh gần như tuyến tính theo áp suất (độ dốc của đường cong nhiệt độ Debye ở áp suất 7,5 GPa là khoảng 4,805 K/GPa), điều này phù hợp với thực tế là khi áp suất thấp, sự thay đổi nhỏ về áp suất gây ra sự nén thể tích đáng kể, áp suất tăng dẫn đến khoảng cách giữa các nguyên tử giảm xuống nhanh, làm liên kết trong mạng tinh thể trở nên cứng hơn. Áp suất cao làm tăng mô-đun nén và tần số dao động mạng dẫn đến nhiệt độ Debye cũng tăng theo. Ở vùng áp suất cao, nhiệt độ Debye tăng chậm hơn theo áp suất do hiệu ứng “bão hòa” của độ cứng mạng tinh thể (độ dốc của đường cong nhiệt độ Debye ở áp suất 173 GPa là khoảng 1,66 K/GPa). Khi áp suất cực cao, các nguyên tử đã bị nén rất chặt, khiến việc tăng thêm áp suất ít làm thay đổi khoảng cách liên kết, dẫn đến tốc độ tăng nhiệt độ Debye giảm đi đáng kể so với vùng áp suất thấp. Trên Hình 2, một số dữ liệu thực nghiệm đã được công bố cũng được chúng tôi đưa vào để so sánh, kết quả nghiên cứu của chúng tôi có sự phù hợp khá tốt với các kết quả nghiên cứu của Liu [15] và của Greff cùng các cộng sự [20].

Kết quả tính toán sự phụ thuộc nhiệt độ của DWF của Cu được đưa ra trên Hình 3. Trên đồ thị, ở vùng nhiệt độ thấp (khoảng $T < 100\text{K}$), DWF của Cu tăng chậm theo nhiệt độ. Trong khoảng này, các nguyên tử Cu chỉ dao động yếu quanh vị trí cân bằng và chủ yếu chỉ có các dao động mạng tần số thấp được kích thích nên biên độ dao động chưa tăng nhiều. Khi nhiệt độ tăng lên ($T > 100\text{K}$), DWF tốc độ tăng của DWF theo nhiệt độ lớn hơn. Nhiệt độ càng tăng lên càng nhiều dao động mạng tinh thể được kích hoạt, đặc biệt khi nhiệt độ tiến gần đến nhiệt độ Debye của Cu ($\theta_D \approx 343\text{K}$). Vì vậy, biên độ dao động của các nguyên tử Cu tăng rõ rệt kéo theo DWF tăng mạnh theo nhiệt độ. Ở vùng nhiệt độ cao hơn ($T > 343\text{K}$), hầu hết các dao động mạng đã được kích thích đầy đủ. Trong vùng này, DWF tăng gần tuyến tính theo nhiệt độ, cho thấy dao động nhiệt đóng vai trò chi phối và hệ dao động mạng của Cu dần tuân theo các quy luật cổ điển. Điều này cũng phù hợp với quy luật Dulong-Petit đối với các tính chất nhiệt động của chất rắn ở nhiệt độ cao. Trên Hình 3, một số dữ liệu thực nghiệm đã được công bố cũng được chúng tôi đưa vào để so sánh, kết quả nghiên cứu của chúng tôi có sự phù hợp khá tốt với các dữ liệu của F.D. Vila [19] và của I.V. Pirog cùng các cộng sự [20].

Kết quả nghiên cứu cho DWF của Cu theo lý thuyết của chúng tôi và các giá trị thực nghiệm được đưa ra để so sánh có sự chênh lệch nằm trong khoảng từ 0,1% (ở nhiệt độ khoảng 120,4 K) đến khoảng 8,8% (ở nhiệt độ khoảng 473,27 K). Sai lệch trong các tính toán của chúng tôi có thể được giải thích do các nguyên nhân như tính toán của chúng tôi được giới hạn ở gần đúng, một số các tham số thực nghiệm được thu thập từ tài liệu khác nhau cũng là một nguyên nhân quan trọng dẫn đến sai số. Tuy nhiên, mức độ chênh lệch này tương đối thấp, điều này có thể xác nhận độ tin cậy trong phương pháp cũng như các tính toán lý thuyết của chúng tôi.



Hình 3. Hệ số Debye - Waller của Cu phụ thuộc nhiệt độ



Hình 4. Hệ số Debye - Waller của Cu phụ thuộc áp suất

Kết quả tính toán sự phụ thuộc áp suất của DWF của Cu được trình bày trên Hình 4. Đồ thị cho thấy DWF giảm dần theo áp suất. Sự giảm của DWF tuy không nhiều nhưng cũng là đáng kể so với biên độ EXAFS. DWF giảm theo áp suất chủ yếu vì áp suất nén ép làm giảm biên độ dao động nhiệt của các nguyên tử xung quanh vị trí cân bằng trong mạng tinh thể. Khi áp suất tăng, khoảng cách liên kết nguyên tử thu hẹp, làm tăng hằng số lực liên kết, dẫn đến các nguyên tử khó dao động mạnh hơn, do đó độ dịch chuyển bình phương trung bình giảm kéo theo sự giảm của DWF.

Do hiện nay chưa tìm thấy các số liệu thực nghiệm cũng như các kết quả lý thuyết tương ứng về Tần số Debye của Cu phụ thuộc áp suất và Hệ số Debye - Waller của Cu phụ thuộc áp suất, chúng tôi chưa thể thực hiện phép so sánh trực tiếp với kết quả thực nghiệm. Vì vậy, các kết quả trình bày trong nghiên cứu này được xem là các kết quả dự đoán lý thuyết, cung cấp những dữ liệu tham khảo ban đầu về sự phụ thuộc của các đại lượng nhiệt động của Cu vào áp suất. Các kết quả này có thể là cơ sở cho việc thiết kế và định hướng các nghiên cứu thực nghiệm ở điều kiện áp suất cao trong tương lai, đồng thời cho phép đánh giá và hoàn thiện mô hình khi các dữ liệu thực nghiệm tương ứng được công bố.

4. KẾT LUẬN

Trong bài báo này, ảnh hưởng của nhiệt độ và áp suất lên các đại lượng nhiệt động bao gồm tần số Debye, nhiệt độ Debye và DWF của kim loại đồng đã được khảo sát dựa trên mô hình Debye tương quan phi điều hòa. Nghiên cứu này đã xây dựng được biểu thức giải tích của thế tương tác giữa các nguyên tử trong tinh thể có bao hàm yếu tố phi điều hòa. Tính toán số đã được thực hiện lên đến nhiệt độ 1000 K, áp suất đến 50 GPa đối với DWF và áp suất lên tới 450 GPa đối với tần số và nhiệt độ Debye của kim loại đồng. Kết quả nghiên cứu của bài báo này cho thấy hiệu ứng phi điều hòa đóng góp đáng kể đối với

các đại lượng nhiệt động được nghiên cứu. Sự phù hợp khá tốt giữa các kết quả tính toán của chúng tôi với các dữ liệu thực nghiệm đã được công bố trước đó cho thấy hiệu quả của mô hình được phát triển. Điều này cho thấy phương pháp hiện tại mà chúng tôi đề cập có thể được áp dụng để nghiên cứu tính chất nhiệt động của các kim loại khác trong những điều kiện khắc nghiệt hơn.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

- [1] G. Bunker, “Application of the ratio method of EXAFS analysis to disordered systems” *Nucl. Instruments Methods Phys. Res.*, vol. 207, pp. 437–444, 1983, DOI: 10.1016/0167-5087(83)90655-5
- [2] J. Freund et al., “Extended x-ray-absorption fine-structure study of copper under high pressure” *Phys. Rev. B*, vol. 39, pp. 12537-12547, 1989, DOI:10.1103/PhysRevB.39.12537
- [3] J.C. Cezar et al., “DebyeWaller Factor Study of Co, Cu and CoCu Granular Alloy” *Phys. Scr.*, vol. T115, pp. 418-420, 2005, DOI:10.1238/Physica.Topical.115a00418
- [4] N. Chen, “Modified Mobius Inverse Formula and Its Applications in Physics” *Phys. Rev. Lett.*, 64(11):1193-1195, 1990, DOI: 10.1103/PhysRevLett.66.957.
- [5] N. Van Hung et al., “Anharmonic correlated Einstein-model Debye-Waller factors” *Phys. Rev. B - Condens. Matter Mater. Phys.*, vol. 56, pp. 43–46, 1997, DOI:10.1103/PhysRevB.56.43.
- [6] N. Van Hung et al., “Anharmonic correlated Debye model Debye-Waller factors” *Phys. B Condens. Matter*, vol. 405, pp. 2519–2525, 2010, DOI:10.1016/j.physb.2010.03.013.
- [7] E. Grüneisen, “Theorie des festen Zustandes einatomiger Elemente” *Ann. Phys.*, vol. 344, pp. 257-306, 1912, DOI: 10.1002/andp.19123441202.
- [8] R. Boehler, “Melting temperature, adiabats, and Grüneisen parameter of lithium, sodium and potassium versus pressure” *Phys. Rev. B*, vol. 27, pp. 6754-6762, 1983, DOI:10.1103/PhysRevB.27.6754.
- [9] J. C. Graf et al., “High-Pressure Debye-Waller and Grüneisen Parameters of Gold and Copper” *Shock compression Condens. Matter*, vol. 65, pp. 65-68, 2004, DOI:10.1063/1.1780185.
- [10] R. Jeanloz, “Shock wave equation of state and finite strain theory” *J. Geophys. Res.*, vol. 94, pp. 5873–5886, 1989, DOI:10.1029/JB094iB05p05873.
- [11] C. Nie et al., “A comparative study of Burakovsky’s and Jacobs’s volume dependence Grüneisen parameter for fcc aluminum” *Phys. B Condens. Matter*, vol. 468-469, pp. 7-10, 2015, DOI:10.1016/j.physb.2015.04.006.
- [12] L. Burakovsky, “Analytic model of the Grüneisen parameter all densities” *J. Phys. Chem. Solids*, vol. 65, pp. 1581-1587, 2004, DOI: 10.1016/j.jpcs.2003.10.076

- [13] P.F. Vinet et al., “Compressibility of solids” *J. Geophys. Res. Geophys Res*, vol. 92, pp. 9319-9325, 1987, DOI:10.1029/JB092iB09p09319
- [14] H. O. Pamu et al., “Evaluation of Morse Parameters for Metals” *phys. stat. sol.*, vol. 37, pp. 695-699, 1976, DOI: 10.1002/pssb.2220370222
- [15] Y.B. Liu et al., “Thermodynamic properties of Cu under high pressure” *Phys. B*, vol. 394, pp. 14-17, 2007, DOI:10.1016/j.physb.2007.02.003
- [16] A. Kuzmin et al., "The Use of the Correlated Debye Model for Extended X-Ray Absorption Fine Structure-Based Thermometry in Body-Centered Cubic and Face-Centered Cubic Metals" *Application and Material Science*, vol. 222, e2400623, 2025, DOI:10.1002/pssa.202400623
- [17] Q. Y. Feng et al., “Revision of the high Poisson ratio phenomenon in copper prior to shock melting” *Phys. Rev. B*, vol. 113, pp. 094110-094115, 2026, DOI:10.1103/PhysRevB.113.094110
- [18] C.W. Greeff et al., “Theoretical investigation of the Cu EOS standard” *J. Phys. Chem. Solids*, vol. 67, pp. 2033–2040, 2006, DOI:10.1016/j.jpcs.2006.05.053
- [19] F.D. Vila et al., “Theoretical x-ray absorption Debye-Waller factors” *Phys. Rev. B*, vol. 76, pp. 14301, 2007, DOI:10.1103/PhysRevB.76.144104
- [20] I. V. Pirog et al., “Anharmonic pair potential study in face-centred-cubic structure metals” *J. Phys. Condens. Matter*, vol. 14, pp. 1825-1832, 2002, DOI:10.1088/0953-8984/14/8/313

Tuyên bố về xung đột lợi ích: Các tác giả tuyên bố không có xung đột lợi ích.

Thông tin tài trợ (nếu có): Nghiên cứu này không nhận được tài trợ từ bên ngoài.