

Ảnh hưởng của áp suất đến tần số Einstein, nhiệt độ Einstein và hệ số Debye-Waller phổ EXAFS của kim loại kẽm

Investigation of pressure effects on Einstein frequency, Einstein temperature, and EXAFS Debye-Waller factors of zinc metal

Nguyễn Thị Hồng^a, Trần Thị Hải^a, Nguyễn Thị Dung^a, Hồ Khắc Hiếu^{b,c,*}
Nguyen Thi Hong^a, Tran Thi Hai^a, Nguyen Thi Dung^a, Ho Khắc Hiếu^{b,c,*}

^aTrường Đại học Hồng Đức, 565 Quang Trung, Đông Vệ, Thanh Hóa 441430, Việt Nam

^aHong Duc University, 565 Quang Trung, Dong Ve, Thanh Hoa 441430, Viet Nam

^bViện Nghiên cứu và Phát triển Công nghệ cao, Đại học Duy Tân, Đà Nẵng, Việt Nam

^bInstitute of Research and Development, Duy Tan University, Da Nang, 550000, Viet Nam

^cKhoa Môi trường và Khoa học tự nhiên, Trường Công nghệ và Kỹ thuật, Đại học Duy Tân, Đà Nẵng, Việt Nam

^cFaculty of Environmental and Natural Sciences, School of Engineering and Technology, Duy Tan University, Da Nang, 550000, Viet Nam

(Ngày nhận bài: 22/10/2024, ngày phản biện xong: 04/11/2024, ngày chấp nhận đăng: 27/02/2025)

Tóm tắt

Trong nghiên cứu này, ảnh hưởng của áp suất đến tần số và nhiệt độ Einstein, và hệ số Debye-Waller của cấu trúc tinh thể phổ hấp thụ tia X mở rộng (EXAFS) của kim loại kẽm được chúng tôi khảo sát dựa trên mô hình Einstein tương quan phi điều hòa. Chúng tôi đã xây dựng được biểu thức giải tích tường minh của các đại lượng nhiệt động này theo hàm của áp suất và tỉ lệ trục $e = c/a$. Tính toán số được chúng tôi áp dụng cho kim loại kẽm đến 30 GPa. Kết quả tính số của chúng tôi cho thấy, tần số và nhiệt độ Einstein của kim loại này tăng mạnh theo áp suất, trong khi hệ số Debye-Waller lại giảm nhanh theo áp suất. Ngoài ra, chúng tôi cũng chỉ ra ảnh hưởng của tỉ lệ trục đến các đại lượng nhiệt động này và không thể bỏ qua.

Từ khóa: Áp suất cao; mô hình Einstein; tần số Einstein; nhiệt độ Einstein; hệ số Debye-Waller.

Abstract

This study investigates the impacts of pressure on the Einstein frequency and Einstein temperature, along with the extended X-ray absorption fine structure (EXAFS) Debye-Waller factor of zinc, using the anharmonic correlated Einstein model. Analytical expressions are derived to represent these thermodynamic properties as functions of both pressure and the axial $e = c/a$. We conduct numerical calculations for zinc metal up to 30 GPa. The findings reveal that the Einstein frequency and Einstein temperature of zinc increase substantially with rising pressure, while the Debye-Waller factor decreases sharply. Moreover, the influence of the axial ratio on these properties proves to be non-negligible.

Keywords: High pressure; Einstein model; Einstein frequency; Einstein temperature; Debye-Waller factor.

*Tác giả liên hệ: Hồ Khắc Hiếu
Email: hieuhk@duytan.edu.vn

1. Mở đầu

Kẽm (Zn) là một kim loại chuyển tiếp với số nguyên tử 30. Ở điều kiện thường, kẽm có cấu trúc tinh thể lục giác xếp chặt (hexagonal close-packed - hcp) [1]. Kim loại này có nhiều tính chất vật lý và hóa học thú vị, được ứng dụng rộng rãi trong nhiều ngành công nghiệp. Chẳng hạn, kẽm thể hiện tính siêu dẻo, khả năng chống ăn mòn cao nên được ứng dụng như lớp phủ chống ăn mòn trên thép [2], pin kẽm và sản xuất hợp kim [3], [4] trong ngành công nghiệp ô tô, kỹ thuật hạt nhân, hàng không vũ trụ và vận tải. Vì vậy, hiểu chính xác các tính chất nhiệt động kim loại này trong phạm vi rộng của nhiệt độ và áp suất có ý nghĩa quan trọng trong việc mở rộng các ứng dụng tiềm năng cũng như phát triển vật liệu tiên tiến dựa trên kim loại kẽm. Cũng vì lý do đó, tính chất nhiệt động của kim loại kẽm đã thu hút sự quan tâm nghiên cứu của đông đảo các nhà vật lý lý thuyết cũng như thực nghiệm trong nhiều thập kỷ [4–6].

Tuy vậy, trong hiểu biết của chúng tôi, cho đến nay rất ít các công trình thực hiện khảo sát ảnh hưởng của áp suất đến các đại lượng nhiệt động như hệ số Debye-Waller, tần số và nhiệt độ Einstein của kim loại Zn. Gần đây sử dụng mô hình Debye tương quan, Hồng và cộng sự đã khảo sát ảnh hưởng của áp suất đến hệ số Debye-Waller, tần số và nhiệt độ Debye của kẽm [7]. Những nghiên cứu khác chủ yếu được thực hiện ở áp suất bằng không. Một khía cạnh quan trọng nữa là ở áp suất không, kim loại này kết tinh theo cấu trúc hcp với tỉ lệ trục $e = c/a$ khác với giá trị lý tưởng $\sqrt{8/3}$ [8]. Tuy nhiên, các nghiên cứu

trước đây về tính chất nhiệt động của kẽm chủ yếu chỉ xem xét trường hợp kim loại kẽm có tỉ lệ c/a lý tưởng [9].

Trong bài báo này, chúng tôi khảo sát ảnh hưởng của áp suất đến tần số Einstein, nhiệt độ Einstein và hệ số Debye-Waller (Debye-Waller factor - DWF) của tinh thể kim loại kẽm có cấu trúc hcp. Nghiên cứu được thực hiện dựa trên việc phát triển mô hình Einstein tương quan phi điều hòa (Anharmonic correlated Einstein model - ACEM) trong trường hợp áp suất khác không và có tính đến ảnh hưởng của tỉ lệ trục không lý tưởng. Giá trị lý thuyết nhiệt độ và tần số Einstein của Zn thu được sẽ được so sánh với các kết quả từ các nghiên cứu thực nghiệm trước đây để kiểm chứng phương pháp nghiên cứu của chúng tôi.

2. Phương pháp lý thuyết

2.1. ACEM và áp dụng cho tinh thể hcp

Trong phần này, chúng tôi giới thiệu sơ lược những kết quả chính của ACEM được sử dụng để nghiên cứu các cumulant cũng như ảnh hưởng của phi điều hòa đến phổ EXAFS. ACEM được phát triển bởi nhóm tác giả Hùng & Rehr vào năm 1997 [10] dựa trên mô hình Einstein [11]. Trong mô hình ACEM, nhóm tác giả Hùng & Rehr đã đề xuất một thể tương tác hiệu dụng phi điều hòa $\varphi_{eff}(x)$. Thể tương tác này bao gồm tương tác giữa nguyên tử hấp thụ (A) và nguyên tử tán xạ (B), cũng như tương tác giữa chúng và các nguyên tử lân cận gần nhất. Theo đó, thể tương tác hiệu dụng $\varphi_{eff}(x)$ được biểu diễn dưới dạng [10], [12]

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

trong biểu thức trên $x = r - r_0$ là độ dời của nguyên tử (với r là khoảng cách giữa hai nguyên tử và r_0 là giá trị ở trạng thái cân bằng); $\varphi(x)$ là thể tương tác cặp giữa các nguyên tử và tổng

$\sum_{\substack{i=1,2 \\ j \neq i}} \varphi \left(\frac{\mu}{M_i} x \hat{R}_{12} \cdot \hat{R}_{ij} \right)$ mô tả đóng góp tương tác giữa các nguyên tử lân cận của các nguyên tử hấp thụ và tán xạ; $\hat{R}$ là vector đơn vị; k_{eff} là hệ

số đàn hồi hiệu dụng; k_3 là hệ số phi điều hòa và

$$\mu = \frac{M_1 M_2}{M_1 + M_2} \text{ là khối lượng rút gọn.}$$

Trong ACEM, các cumulant phổ EXAFS được xác định trong gần đúng dao động chuẩn điều hòa và là các giá trị trung bình nhiệt động của $y = x - a$ với $a(T) = \langle r - r_0 \rangle = \sigma^{(1)}$ là cumulant bậc 1. Biểu thức giải tích của các cumulant bậc 2 hay hệ số Debye-Waller phổ EXAFS trong ACEM có dạng [10], [11]

$$\sigma^2(T) = \frac{\hbar \omega_E}{2k_{eff}} \frac{1+z}{1-z} = \sigma_0^2 \frac{1+z}{1-z}, \quad (2)$$

trong đó $\sigma_0^2 = \frac{\hbar \omega_E}{2k_{eff}}$ là đóng góp của dao động

điểm không vào hệ số Debye-Waller phổ

$$\begin{aligned} \varphi_{eff}^{hcp}(x) = & \varphi(x) + 4\varphi(c_1 x) + 4\varphi(-c_1 x) + 2\varphi(c_2 x) + 2\varphi(-c_2 x) + \\ & + 2\varphi(c_3 x) + 2\varphi(-c_3 x) + \varphi(c_4 x) + \varphi(-c_4 x), \end{aligned} \quad (3)$$

trong đó c_1, c_2, c_3 và c_4 là các tham số cấu trúc và được định nghĩa bởi

$$c_1 = \frac{\sqrt{3}x}{2(3e^2 + 4)^{1/2}}; \quad c_2 = \frac{(3e^2 - 2)}{2(4 + 3e^2)}; \quad c_3 = \frac{(2 + 3e^2)}{2(4 + 3e^2)}; \quad c_4 = \frac{(4 - 3e^2)}{2(4 + 3e^2)}. \quad (4)$$

Để khai triển thế hiệu dụng (3) chúng tôi sử dụng thế cặp Morse để mô tả tương tác giữa các nguyên tử dưới dạng

$$\varphi(x) = D \left[e^{-2\alpha(r-r_0)} - 2e^{-\alpha(r-r_0)} \right] \approx D(-1 + \alpha^2 x^2 - \alpha^3 x^3), \quad (5)$$

trong đó α là độ rộng thế và D là năng lượng phân ly.

Thay (5) vào (3), thế tương tác hiệu dụng của tinh thể cấu trúc hcp trở thành [7], [14]

$$\varphi_{eff}^{hcp}(x) = -19D + (1 + 8c_1^2 + 4c_2^2 + 4c_3^2 + 2c_4^2)D\alpha^2 x^2 - D\alpha^3 x^3. \quad (6)$$

Từ đó, hệ số đàn hồi hiệu dụng k_{eff} là

$$\begin{aligned} (k_{eff})_{hcp} = & 2(1 + 8c_1^2 + 4c_2^2 + 4c_3^2 + 2c_4^2)D\alpha^2 \\ = & \frac{112 + 60e^2 + 63e^4}{(4 + 3e^2)^2} D\alpha^2. \end{aligned} \quad (7)$$

2.2. Các đại lượng nhiệt động dưới ảnh hưởng của áp suất

Để đánh giá ảnh hưởng của áp suất đến tần số Einstein, nhiệt độ Einstein và hệ số Debye-

EXAFS, $\omega_E = \sqrt{k_{eff}/m}$ là tần số Einstein, $\theta_E = \hbar \omega_E / k_B$ là nhiệt độ Einstein, $\hbar$ là hằng số Planck thu gọn, k_B là hằng số Boltzmann và $z = e^{-\beta \hbar \omega_E} = e^{-\theta_E/T}$, $\beta = 1/k_B T$.

Tiếp theo, sử dụng những kết quả của ACEM, chúng tôi sẽ áp dụng cho tinh thể có cấu trúc hcp [13]. Ở cấu trúc này, mỗi nguyên tử sẽ có mười hai nguyên tử lân cận gần nhất, tạo ra hai mươi hai cặp tương tác giữa nguyên tử A và B với các nguyên tử lân cận (ngoại trừ cặp tương tác A-B). Lưu ý rằng tương tác giữa A và B đã được mô tả bởi $\varphi(x)$ trong biểu thức thế tương tác (1). Do đó, thế hiệu dụng φ_{eff}^{hcp} của tinh thể hcp có thể được viết như sau [7], [14]

Waller phổ EXAFS chúng tôi dựa trên định nghĩa của hệ số Grüneisen sau [15]

$$\gamma_G = -\frac{\partial \ln \omega_E}{\partial \ln V}, \quad (8)$$

ở đây V là thể tích của tinh thể.

Ở vùng áp suất thấp, hệ số Grüneisen gần như không phụ thuộc vào sự thay đổi áp suất. Tuy nhiên, ở vùng áp suất cao, các nghiên cứu cho thấy sự giảm dần của hệ số Grüneisen khi áp suất tăng. Có nhiều lý thuyết cũng như mô hình khác nhau đã được đề xuất để nghiên cứu ảnh hưởng của áp suất đến hệ số Grüneisen, trong đó đề xuất của Burakovsky và cộng sự có tính tổng quát nhất [16]. Theo Burakovsky và cộng sự, hệ số

Grüneisen có thể được mô tả theo hàm của hệ số nén $\eta = V/V_0$ dưới dạng [16]

$$\gamma_G = \frac{1}{2} + \gamma_1 \eta^{1/3} + \gamma_2 \eta^q, \quad (9)$$

trong đó $\gamma_1, \gamma_2, q > 1$ là các đại lượng phụ thuộc vào vật liệu nghiên cứu.

Kết hợp biểu thức hệ số Grüneisen (9) và định nghĩa (8), chúng tôi rút ra được biểu thức phụ thuộc hệ số nén $\eta = V/V_0$ của tần số Einstein, nhiệt độ Einstein và hằng số lực hiệu dụng tương ứng là

$$\omega_E(\eta) = \omega_{0E} \eta^{-1/2} \exp \left[3\gamma_1 (1 - \eta^{1/3}) + \frac{\gamma_2}{q} (1 - \eta^q) \right], \quad (10)$$

$$\theta_E(\eta) = \theta_{0E} \eta^{-1/2} \exp \left[3\gamma_1 (1 - \eta^{1/3}) + \frac{\gamma_2}{q} (1 - \eta^q) \right], \quad (11)$$

$$k_{eff}(\eta) = k_{0eff} \eta^{-1} \exp \left[6\gamma_1 (1 - \eta^{1/3}) + \frac{2\gamma_2}{q} (1 - \eta^q) \right], \quad (12)$$

trong đó ω_{0E}, θ_{0E} và k_{0eff} tương ứng là tần số Einstein, nhiệt độ Einstein và hằng số lực hiệu dụng ở áp suất $P = 0$.

$$\sigma^2(\eta, T) = \frac{\hbar \omega_E(\eta)}{2k_{eff}(\eta)} \frac{1 + z(\eta, T)}{1 - z(\eta, T)}, \quad (13)$$

trong đó $z(\eta, T) = e^{-\theta_E(\eta)/T}$.

Để mô tả mối liên hệ giữa áp suất và hệ số nén $\eta = V/V_0$ chúng tôi sử dụng phương trình trạng thái Vinet có dạng [17]

$$P = 3K_0 \eta^{-2/3} (1 - \eta^{1/3}) \exp \left[\frac{3}{2} (K_1 - 1) (1 - \eta^{1/3}) \right], \quad (14)$$

trong đó K_0, K_1 tương ứng là hệ số nén khối và đạo hàm bậc nhất theo áp suất của nó.

Như vậy, dựa trên sự kết hợp giữa phương trình trạng thái Vinet (14) và các phương trình (10), (11) và (13) chúng ta có thể xác định được sự phụ thuộc áp suất của tần số Einstein, nhiệt độ Einstein và cumulant bậc 2 phổ EXAFS của vật liệu.

3. Tính toán số cho kim loại kẽm và thảo luận

Trong phần này, chúng tôi sẽ thực hiện tính số để khảo sát ảnh hưởng của áp suất đến tần số Einstein, nhiệt độ Einstein và hệ số Debye-

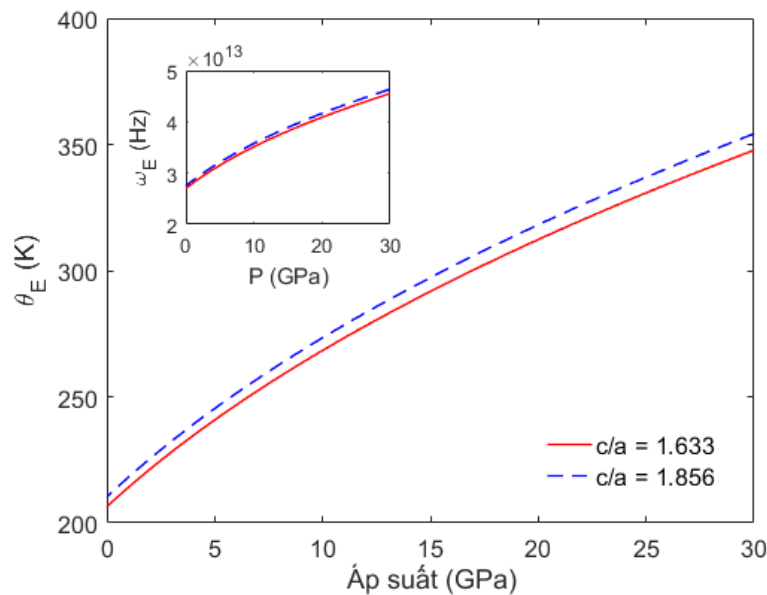
Waller của kim loại kẽm từ 0 đến 30 GPa. Trong khoảng áp suất này kim loại kẽm vẫn ổn định ở cấu trúc hcp. Để thực hiện tính số, chúng tôi sử dụng các giá trị tham số thế Morse [9] $\alpha = 1.7054 \text{ \AA}^{-1}$, $D = 0.1698 \text{ eV}$; hệ số Grüneisen [16] $\gamma_1 = 0.99$, $\gamma_2 = 1.05$, $q = 3.8$; mô đun nén khối $K_0 = 66.4 \text{ GPa}$ và đạo hàm bậc nhất theo áp suất của mô đun nén khối $K_1 = 5.20$ của Zn [5].

Sử dụng các số liệu trên chúng tôi xác định được giá trị tần số và nhiệt độ Einstein của Zn ở áp suất bằng không. Chúng tôi xét hai trường hợp: Trường hợp tinh thể hcp lý tưởng

$c/a = \sqrt{8/3} \approx 1.633$ và thực nghiệm $a = 2.665 \text{ \AA}$, $c = 4.947 \text{ \AA}$ [18], hay $c/a = 4.947 / 2.665 \approx 1.856$ (không lý tưởng). Cụ thể là, khi $c/a = 1.633$, tần số và nhiệt độ Einstein trong tính toán của chúng tôi có giá trị tương ứng là $2.7 \times 10^{13} \text{ Hz}$ và 206.4 K . Trường hợp $c/a = 1.856$, tần số và nhiệt độ Einstein tương ứng là $2.75 \times 10^{13} \text{ Hz}$ và 210.3 K . Những giá trị nhiệt độ Einstein mà lý thuyết chúng tôi thu được khá phù hợp với các giá trị đo thực nghiệm 223.4 K [7], 221.3 K [19] và 226.3 K [19]. Trên Hình 1, chúng tôi biểu diễn sự phụ thuộc áp suất của tần số và nhiệt độ Einstein của kim loại kẽm trong hai trường hợp tỉ số trục lý tưởng ($c/a = 1.633$) và không lý tưởng ($c/a = 1.856$). Từ Hình 1 có thể nhận thấy, tần số và nhiệt độ Einstein của kẽm tăng nhanh theo áp suất, khoảng 67.8% trong khoảng áp suất 0-30

GPa. Đối với trường hợp tỉ số trục lý tưởng, tần số và nhiệt độ Einstein của kẽm có giá trị nhỏ hơn trường hợp tỉ lệ trục không lý tưởng. Như vậy có thể thấy, tỉ lệ trục ảnh hưởng đến tần số và nhiệt độ Einstein. Do đó khi khảo sát các vật liệu có cấu trúchcp chúng ta cần chú ý đến ảnh hưởng của tỉ lệ trục c/a .

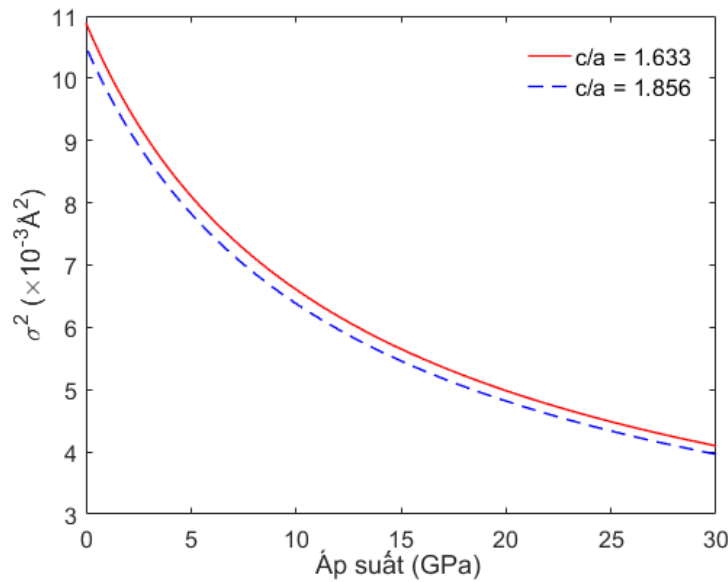
Từ sự phụ thuộc áp suất của tần số Einstein chúng ta có thể xác định được ảnh hưởng của áp suất đến hằng số lực hiệu dụng và cumulant bậc hai phổ EXAFS. Trên Hình 2, chúng tôi biểu diễn đồ thị hệ số Debye-Waller theo hàm của áp suất. Trái ngược với tần số và nhiệt độ Debye, hệ số Debye-Waller phổ EXAFS giảm nhanh theo áp suất và cumulant bậc 2 trường hợp tỉ số trục lý tưởng có giá trị lớn hơn trường hợp tỉ lệ trục không lý tưởng. Ở điều kiện thường ($P = 0$ và nhiệt độ phòng), mô hình



Hình 1. Ảnh hưởng của áp suất đến tần số Einstein và nhiệt độ Einstein của kẽm trong trường hợp lý tưởng ($c/a = 1.633$) và không lý tưởng ($c/a = 1.856$).

ACEM của chúng tôi cho giá trị σ^2 là $10.89 \times 10^{-3} \text{ \AA}^2$ (c/a lý tưởng) và $10.51 \times 10^{-3} \text{ \AA}^2$ (c/a không lý tưởng). Kết quả này khá phù hợp với giá trị $10.4(9) \times 10^{-3} \text{ \AA}^2$ trong phép đo phổ

EXAFS gần đây của John và cộng sự [1]. Có thể nhận thấy, giá trị lý thuyết trong trường hợp c/a không lý tưởng phù hợp hơn với phép đo thực nghiệm [1].



Hình 2. Ảnh hưởng của áp suất đến hệ số Debye-Waller phổ EXAFS của kẽm trong trường hợp lý tưởng ($c/a = 1.633$) và không lý tưởng ($c/a = 1.856$).

4. Kết luận

Trong bài báo này, dựa trên ACEM chúng tôi đã khảo sát ảnh hưởng của áp suất đến các đại lượng nhiệt động (bao gồm tần số và nhiệt độ Einstein, và hệ số Debye-Waller) của kim loại kẽm có kể đến ảnh hưởng của tỉ lệ trục c/a . Chúng tôi đã thực hiện tính số cho Zn trong khoảng áp suất từ 0 đến 30 GPa. Kết quả cho thấy, tần số và nhiệt độ Einstein của kim loại này tăng mạnh theo áp suất (khoảng 67.8% trong khoảng áp suất được khảo sát) nhưng hệ số Debye-Waller phổ EXAFS lại giảm nhanh theo áp suất. Ngoài ra, chúng tôi cũng chỉ ra ảnh hưởng của tỉ lệ trục c/a đến tần số và nhiệt độ Einstein cũng như hệ số Debye-Waller phổ EXAFS của kẽm là không thể bỏ qua.

Tài liệu tham khảo

- [1] John, M. W., Sier, D., Ekanayake, R. S. K., Schalken, M. J., Tran, C. Q., Johannessen, B., Jonge, M. D. de, Kappen, P., & Chantler, C. T. (2023). "High-accuracy transmission and fluorescence XAFS of zinc at 10 K, 50 K, 100 K and 150 K using the hybrid technique". *Journal of Synchrotron Radiation* 30(1), 147-168. DOI: 10.1107/S1600577522010293.
- [2] Marder, A. R. (2000). "The metallurgy of zinc-coated steel". *Progress in Materials Science* 45(3), 191-271. DOI: 10.1016/S0079-6425(98)00006-1.
- [3] Javed, M. S., Asim, S., Najam, T., Khalid, M., Hussain, I., Ahmad, A., Assiri, M. A., & Han, W. (2023). "Recent progress in flexible Zn-ion hybrid supercapacitors: Fundamentals, fabrication designs, and applications". *Carbon Energy* 5(1), e271. DOI: 10.1002/cey2.271.
- [4] Zhang, Y., Zhang, Y., Feng, Y., Wang, Y., & Zhang, L. (2023). "Enhancing electrochemical performance in aqueous rechargeable Zn-ion batteries through bimetallic oxides of manganese and cobalt as electrode". *Vacuum* 215, 112285. DOI: 10.1016/j.vacuum.2023.112285.
- [5] Liu, G., Wang, J., & Shen, Y. (2018). "Density functional theory study of $\{101\bar{n}\}$ twin boundaries of Zn under high pressure". *Computational Materials Science* 151, 106-116. DOI: 10.1016/j.commatsci.2018.04.046.
- [6] Wang, F., Borodin, O., Gao, T., Fan, X., Sun, W., Han, F., Faraone, A., Dura, J. A., Xu, K., & Wang, C. (2018). "Highly reversible zinc metal anode for aqueous batteries". *Nature Materials* 17(6), 543-549. DOI: 10.1038/s41563-018-0063-z.
- [7] Hong, N. T., Hai, T. T., Dung, N. T., & Hieu, H. K. (2024). "Pressure and non-ideal axial ratio effects on thermodynamic properties of hexagonal close-packed Mg and Zn metals". *High Pressure Research* 44(2), 143-158. DOI: 10.1080/08957959.2024.2343003.
- [8] Errandonea, D., MacLeod, S. G., Ruiz-Fuertes, J., Burakovsky, L., McMahon, M. I., Wilson, C. W., Ibañez, J., Daisenberger, D., & Popescu, C. (2018). "High-pressure/high-temperature phase diagram of zinc". *Journal of Physics: Condensed Matter* 30(29), 295402. DOI: 10.1088/1361-648X/aacac0.

- [9] Hung, N. V., Tien, T. S., Duc, N. B., & Vuong, D. Q. (2014). "High-order expanded XAFS Debye–Waller factors of HCP crystals based on classical anharmonic correlated Einstein model". *Modern Physics Letters B* 28(21), 1450174. DOI: 10.1142/S0217984914501747.
- [10] Hung, N. V., & Rehr, J. J. (1997). "Anharmonic correlated Einstein-model Debye-Waller factors". *Phys. Rev. B* 56(1), 43. DOI: 10.1103/PhysRevB.56.43.
- [11] Frenkel, A. I., & Rehr, J. J. (1993). "Thermal expansion and x-ray-absorption fine-structure cumulants". *Phys. Rev. B* 48(1), 585. DOI: 10.1103/PhysRevB.48.585.
- [12] Hanh, P. T. M., Hieu, H. K., & Hong, N. T. (2021). "Temperature measurement by extended X-ray absorption fine structure: A new theoretical development". *Vacuum* 189, 110274. DOI: 10.1016/j.vacuum.2021.110274.
- [13] Ye, Q., Hu, Y., Duan, X., Liu, H., Zhang, H., Zhang, C., Sun, L., Yang, W., Xu, W., Cai, Q., Wang, Z., & Jiang, S. (2020). "Theoretical development and experimental validation on the measurement of temperature by extended X-ray absorption fine structure". *Journal Synchrotron Radiation* 27(2), 436-445. DOI: 10.1107/S1600577520000752.
- [14] Hieu, H. K., Lam, L. T., Tam, N. T., & Hong, N. T. (2024). "Investigation of Debye temperature and temperature-dependent EXAFS cumulants of Zn, Zr, α -Ti, Ru and Hf metals". *Physica Scripta* 99(7), 075980. DOI: 10.1088/1402-4896/ad5805.
- [15] Hieu, H. K., & Ha, N. N. (2013). "High pressure melting curves of silver, gold and copper". *AIP Advances* 3(11), 112125. DOI: 10.1063/1.4834437.
- [16] Burakovsky, L., & Preston, D. L. (2004). "Analytic model of the Grüneisen parameter all densities". *Journal of Physics and Chemistry of Solids* 65(8-9), 1581-1587. DOI: 10.1016/j.jpcs.2003.10.076.
- [17] Vinet, P., Ferrante, J., Rose, J. H., & Smith, J. R. (1987). "Compressibility of solids". *Journal Geophysical Research: Solid Earth* 92(B9), 9319-9325. DOI: 10.1029/JB092iB09p09319.
- [18] Lynch, R. W., & Drickamer, H. G. (1965). "The effect of pressure on the resistance and lattice parameters of cadmium and zinc". *Journal of Physics and Chemistry of Solids* 26(1), 63-68. DOI: 10.1016/0022-3697(65)90073-9.
- [19] Skelton, E. F., & Katz, J. L. (1968). "Examination of the Thermal Variation of the Mean Square Atomic Displacements in Zinc and Evaluation of the Associated Debye Temperature". *Phys. Rev.* 171(3), 801. DOI: 10.1103/PhysRev.171.801.