

## TRÍCH YẾU LUẬN ÁN TIẾN SĨ

**Tên tác giả:** Vũ Quang Thọ

**Tên luận án:** *Nghiên cứu các đại lượng nhiệt động của vật liệu trong lý thuyết XAFS phi điều hòa.*

**Ngành khoa học của luận án:** Lý thuyết chất rắn

**Chuyên ngành:** Vật lý lý thuyết và Vật lý toán

**Mã số:** 9 44 01 03

**Tên đơn vị đào tạo Sau đại học:** Trường Đại học Sư phạm Hà Nội 2.

### 1. Mục đích và đối tượng nghiên cứu của luận án

- Nghiên cứu và mở rộng lý thuyết phi điều hòa trong phổ XAFS. Xác định các tham số nhiệt động, các cumulant tới bậc 4, hệ số nhiễu loạn phi điều hòa, hệ số phi điều hòa, độ dịch chuyển tương đối trung bình bình phương của các kim loại và hợp kim.

- Nghiên cứu sự phụ thuộc của các tham số nhiệt động cũng như các cumulant vào tỷ lệ của chất pha tạp tại một nhiệt độ và áp suất.

- Thực hiện tính toán số và so sánh với các số liệu thực nghiệm thu thập được để kiểm nghiệm lý thuyết.

### 2. Thông tin người hướng dẫn.

Họ và tên: **Nguyễn Bá Đức.**

Đơn vị công tác: Trường Đại học Tân Trào

Học hàm: Phó Giáo sư Năm phong: 2015

Học vị: Tiến sĩ Năm bảo vệ: 2003

Chuyên ngành: Vật lý lý thuyết và vật lý toán.

Họ và tên: **Hồ Khắc Hiếu.**

Đơn vị công tác: Trường Đại học Duy Tân – Đà Nẵng

Học hàm: Phó Giáo sư Năm phong: 2015

Học vị: Tiến sĩ Năm bảo vệ: 2010

Chuyên ngành: Vật lý lý thuyết.

### 3. Cơ sở đào tạo: Trường Đại học Sư Phạm Hà Nội 2.

### 4. Những đóng góp mới của luận án.

Luận án đã trực tiếp đóng góp vào việc giải quyết một số vấn đề quan trọng và thời sự của lý thuyết XAFS hiện đại, cụ thể là:

- Luận án đã xây dựng được các biểu thức giải tích chung về các tham số nhiệt động qua các hệ số cấu trúc với các đóng góp phi điều hòa.

+ Các biểu thức nhận được bao chứa các kết quả cổ điển ở giới hạn nhiệt độ cao và chứa đóng góp năng lượng điểm không, một hiệu ứng lượng tử tại nhiệt độ thấp.

+ Hệ số giãn nở nhiệt có dáng điệu của nhiệt dung đẳng tích, nên nó thỏa mãn lý thuyết cơ bản của sự giãn nở nhiệt.

- Luận án đã xây dựng được thể năng tương tác hiệu dụng biểu diễn quan hệ giữa thể tương tác cặp và thể tương tác hiệu dụng của hệ với đóng góp của các nguyên tử lân cận.

+ Đưa ra các hệ số cấu trúc mà qua nó có thể làm đơn giản việc ghi nhớ các biểu thức nhiệt động và các cumulant cũng như có thể suy đoán được cấu trúc của vật liệu khi biết các hệ số này.

- Luận án đã mở rộng nghiên cứu để tính các tham số nhiệt động và các cumulant cho hệ có cấu trúc lập phương pha tạp.

+ Mô tả được sự phụ thuộc của các tham số nhiệt động và của các cumulant vào tỷ lệ pha tạp của vật liệu.

+ Phát hiện ra điểm bất thường về cấu trúc với hợp kim CuAg50 mở ra một hướng nghiên cứu mới cho nghiên cứu sinh về loại vật liệu này.

- Luận án đã nghiên cứu sự phụ thuộc của các tham số nhiệt động vào nhiệt độ và có sự ảnh hưởng của áp suất theo mô hình Debye tương quan phi điều hòa hiệu dụng trong phổ XAFS phi điều hòa.

**T/M TẬP THỂ HƯỚNG DẪN**

**NGHIÊN CỨU SINH**

**PGS.TS Nguyễn Bá Đức**

**Vũ Quang Thọ**

**PGS.TS Hồ Khắc Hiếu**