NGHIÊN CỨU PHƯỜNG TRÌNH TRẠNG THÁI VÀ HỆ SỐ DEBYE-WALLER CỦA KIM LOẠI RHODIUM BẰNG PHƯỜNG PHÁP THỐNG KÊ MOMENT Hồ Khắc Hiếu^{1, 2}

¹Viện Nghiên cứu và Phát triển Công nghệ cao, Đại học Duy Tân, Đà Nẵng, Việt Nam ²Khoa Môi trường và Khoa học Tự nhiên, Đại học Duy Tân, Đà Nẵng, Việt Nam Email: hieuhk@duytan.edu.vn

(Ngày nhận bài: 21/10/2024, ngày nhận bài chỉnh sửa: 19/11/2024, ngày duyệt đăng: 21/11/2024) **TÓM TẮT**

Phương trình trạng thái của kim loại Rh được nghiên cứu dựa trên phương pháp thống kê moment có kể đến các đóng góp phi điều hòa do dao động nhiệt của mạng tinh thể. Chúng tôi thực hiện các tính toán số cho kim loại Rh đến áp suất 50 GPa, và suy ra module nén khối $K_0 = 250,12$ GPa và đạo hàm bậc nhất theo áp suất $K_1 = 5,23$ bằng cách làm khớp phương trình trạng thái của chúng tôi với phương trình trạng thái Vinet. Ngoài ra, chúng tôi cũng khảo sát ảnh hưởng của áp suất đến độ dịch chuyển trung bình bình phương hay hệ số Debye-Waller của Rh. Các tính toán lý thuyết của chúng tôi cho thấy sự giảm mạnh của thể tích tương đối và hệ số Debye-Waller của kim loại Rh khi áp suất tăng, đặc biệt là ở vùng áp suất nhỏ hơn 10 GPa.

Từ khóa: Phương trình trạng thái, hệ số Debye-Waller, phương pháp moment, áp suất cao, Rh

1. Giới thiệu

Rhodium (Rh) là môt kim loai quý, nổi tiếng với khả năng chống ăn mòn và oxy hóa vượt trội ngay cả ở nhiệt độ cao. Kim loại này đóng vai trò quan trọng trong việc tăng cường độ bền của hợp kim, là vật liệu chủ chốt trong cặp nhiệt điện ở nhiệt độ cao (Tougas, Amani, & Gregory, 2013) và các quá trình khử xúc tác (Dey & Dhal, 2020). Ngoài ra, các hạt nano Rh được sử dụng như chất xúc tác điện để sản xuất năng lượng xanh từ hydro (Jiang et al., 2021). Các đồng vị của Rh cũng được ứng dụng trong công nghê hat nhân, đặc biệt là trong các sản phẩm phân hạch và tái chế chất thải hạt nhân (Swift et al., 2019).

Kim loại Rh có cấu trúc tinh thể lập phương tâm diện (Face-centered cubic – FCC) và được các nghiên cứu lý thuyết dự đoán ổn định cấu trúc đến áp suất 500 GPa (Cazorla, Alfè, & Gillan, 2008; Smirnov, 2023). Sự ổn định cấu trúc này góp phần vào đặc tính nhiệt độ nóng chảy cao, độ cứng và tính trơ hóa học của Rh (Yusenko et al., 2019). Tuy nhiên, các nghiên cứu thực nghiệm về tính chất vật lý của kim loại này ở áp suất cao vẫn còn hạn chế. Các nghiên cứu với tế bào đế kim cương (Diamond anvil cell – DAC) đã nén kim loại Rh đến khoảng 83 GPa ở nhiệt độ phòng (Young, Cynn, Söderlind, & Landa, 2016). Điều này làm nổi bật nhu cầu nghiên cứu thêm để hiểu rõ hơn về tính chất của Rh trong điều kiên khắc nghiệt.

Phương trình trạng thái và tính chất nhiệt động của Rh ở áp suất và nhiệt độ cao là những chủ đề nghiên cứu quan trọng. Phương trình trạng thái của kim loại này đã được xác định từ các thí nghiệm sóng xung kích (Swift et al.,

2019; Walsh, Rice, McQueen, & Yarger, 1957) và nén tĩnh (Frost, Smith, McBride, Smith, & Glenzer, 2023; McHardy et al., 2024; Young et al., 2016; Yusenko et al., 2019). Tuy nhiên, trong hiểu biết của chúng tôi, độ dịch chuyển trung bình bình phương (Meansquared displacement – MSD) và hệ số Debye-Waller của Rh ở áp suất cao vẫn chưa được nghiên cứu. Khoảng trống kiến thức này đặc biệt gây trở ngại cho các ứng dung liên quan đến đông học và gia nhiêt của kim loại Rh ở áp suất cao. Chẳng hạn MSD có vai trò quan trọng trong nghiên cứu nhiệt độ nóng chảy của vật liệu dựa trên điều kiện nóng chảy Lindemann.

Trong nghiên cứu này, chúng tôi thực hiện nghiên cứu phương trình trạng thái, MSD và hệ số Debye-Waller phụ thuộc áp suất của kim loại Rh bằng phương pháp thống kê moment (Vu, Tran, Vu, Duong & Ho, 2018; Nguyen & Vu, 1988; Nguyen & Vu, 1990). Các tính toán số cho Rh sẽ được thực hiện lên đến áp suất 50 GPa. Trước tiên, chúng tôi xem xét sư phu thuộc của áp suất vào sự thay đổi thể tích tương đối. Từ đó chúng tôi xác định được module nén khối và đao hàm bâc nhất theo áp suất dựa trên việc làm khớp kết quả lý thuyết của chúng tôi với phương trình trạng thái Vinet trong gần đúng bình phương tối thiểu. Các kết quả thu được sẽ được so sánh với các phép đo thực nghiêm và các tính toán lý thuyết trước đây để kiểm nghiêm các phương pháp lý thuyết được sử dung.

2. Phương pháp nghiên cứu

Phương pháp thống kê moment là một phương pháp được phát triển từ cơ học thống kê và được sử dụng hiệu quả trong nghiên cứu các tính chất nhiệt động và cơ học của vật liệu (Masuda-Jindo, Vu, & Pham, 2003; Vu, Tran, Vu, Duong & Ho, 2018). Trong phần này, chúng tôi tóm lược một số kết quả chính của phương pháp thống kê moment trong nghiên cứu tính chất nhiệt động của tinh thể.

Giả thiết hệ lượng tử có Hamiltonian là

$$\hat{H} = \hat{H}_0 - \alpha \hat{V}, \tag{1}$$

với α là tham số và \hat{V} là toán tử tùy ý.

Khi đó, năng lượng tự do của hệ có thể được xác định bởi (Nguyen & Vu, 1988)

$$\psi(\alpha) = \psi_0 - \int_{\alpha}^{\alpha} \langle \hat{V} \rangle_{\alpha} \, d\alpha,$$

$$\hat{V}_{\alpha} = -\frac{\partial \psi(\alpha)}{\partial \alpha},$$
(2)

trong đó ψ_0 là năng lượng tự do ứng với Hamiltonian \hat{H}_0 .

Áp dụng phương pháp thống kê moment cho hệ tinh thể có cấu trúc FCC, các tác giả thu được biểu thức năng lượng tự do của hệ như sau (Nguyen & Vu, 1988)

$$\psi = U_0 + 3N\theta \left[x + \ln\left(1 - e^{-2x}\right) \right] + \frac{3N\theta^2}{k^2} \left[\gamma_2 X^2 - \frac{2\gamma_1}{3} \left(1 + \frac{X}{2}\right) \right] + \frac{6N\theta^3}{k^4} \left(1 + \frac{X}{2}\right) \times \left[\frac{4}{3} \gamma_2^2 X - 2\left(\gamma_1^2 + 2\gamma_1 \gamma_2\right) (1 + X) \right]$$
(3)

trong đó $\varphi(r)$ là thế năng tương tác giữa các nguyên tử, $U_0 = \frac{N}{2} \sum_i \varphi_{io}(r_i)$,

N là số hạt trong hệ, $x = \hbar \omega/2\theta$, $X = x \coth x$, $\theta = k_B T$ (k_B là hằng số Boltzmann), *m* là khối lượng nguyên tử, và các tham số *k*, γ_1 và γ_2 được định nghĩa là

$$k = \frac{1}{2} \sum_{i} \frac{\partial^{2} \varphi_{i0}}{\partial u_{i}^{2}} = m\omega^{2},$$

$$\gamma_{1} = \frac{1}{48} \left(\frac{\partial^{4} \varphi_{i0}}{\partial u_{ix}^{4}} \right)_{eq};$$

$$\gamma_{2} = \frac{6}{48} \left(\frac{\partial^{4} \varphi_{i0}}{\partial u_{ix}^{4} \partial u_{iy}^{4}} \right)_{eq},$$
(4)

 $\gamma = 4(\gamma_1 + \gamma_2).$ Trong lý thuyết nhiệt động lực học, chúng ta có mối liện hệ giữa án suất *P*

chúng ta có mối liên hệ giữa áp suất Pvà năng lượng tự do ψ như sau

$$P = -\left(\frac{\partial\psi}{\partial V}\right) = -\frac{r}{3V}\left(\frac{\partial\psi}{\partial r}\right),\tag{5}$$

với r là khoảng cách giữa các nguyên tử và V là thể tích của hệ.

Thay biểu thức năng lượng tự do (3) vào biểu thức (5) chúng ta có thể dễ dàng thu được phương trình sau (Nguyen & Vu, 1988)

$$Pv = -r \left[\frac{1}{6} \frac{\partial u_0}{\partial r} + \frac{1}{2k} \frac{\partial k}{\partial r} \theta X \right], \tag{6}$$

với v = V/N là thể tích nguyên tử và $u_0 = \sum_i \varphi_{io}(r_i)$ là tổng thế năng tác dụng lên nguyên tử thứ 0.

Phương trình (6) cho chúng ta mối liên hệ giữa áp suất, nhiệt độ và thể tích hay phương trình trạng thái của tinh thể đó. Bằng cách giải phương trình (6) chúng ta có thể thu được khoảng cách lân cận gần nhất giữa hai nguyên tử r(P,T) ở nhiệt độ T và áp suất P. Do đó, sự thay đổi thể tích tương đối (hay còn gọi là hệ số nén) của tinh thể tại nhiệt độ T khi áp suất tăng từ 0 lên P có thể được xác định bởi

$$\eta = \frac{V}{V_0} = \left[\frac{r(P,T)}{r(0,T)}\right]^3,\tag{7}$$

trong đó V_0 là thể tích của hệ ở áp suất không.

Hơn thế, khi xem xét tổng các ngoại lực tác động lên nguyên tử trung tâm có kể đến lực phụ p do dao động nhiệt của mạng tinh thể, các tác giả đã thu được phương trình vi phân sau

$$\gamma \theta^{2} \frac{d^{2} y}{da^{2}} + 3\gamma \theta y \frac{dy}{da} + ky$$

$$+ \frac{\gamma \theta}{k} (X - 1) y - p = 0,$$
(8)

trong đó $y = \langle u_i \rangle$.

Phương trình vi phân phi tuyến bậc hai (8) có nghiệm gần đúng là độ dời y_0 được xác định bởi (Masuda-Jindo, Vu, & Pham, 2003; Nguyen & Vu, 1988)

$$y_0 \approx \sqrt{\frac{2\gamma\theta^2 A}{3k^3}},\tag{9}$$

trong đó

$$A = a_1 + \frac{\gamma^2 \theta^2}{k^4} a_2 + \frac{\gamma^3 \theta^3}{k^6} a_3 + \frac{\gamma^4 \theta^4}{k^8} a_4 + \frac{\gamma^5 \theta^5}{k^{10}} a_5 + \frac{\gamma^6 \theta^6}{k^{12}} a_6,$$

với các hệ số a_i $(i = \overline{1,6})$ có dạng như ở tài liệu (Nguyen & Vu, 1988).

Hệ số A_1 có dạng (Nguyen & Vu, 1988)

$$A_{1} = \frac{1}{k} + \frac{2\gamma^{2}\theta^{2}}{k^{5}} \left(1 + \frac{X}{2}\right) (X+1) . \quad (10)$$

Ngoài ra, trong phương pháp thống kê moment chúng ta có mối liên hệ giữa các moment bậc một và bậc hai như sau (Nguyen & Vu, 1988)

trong đó, $\delta_{\alpha\gamma} = 1$ nếu $\alpha = \gamma$, và $\delta_{\alpha\gamma} = 0$ nếu $\alpha \neq \gamma$.

Sử dụng phương trình (11), chúng ta dễ dàng thu được biểu thức xác định được MSD của nguyên tử ở nhiệt độ T

$$\langle u^2 \rangle (T) = y_0^2 + \theta A_1 + \frac{\theta}{k} (X-1).$$
 (12)

Tại áp suất *P* và nhiệt độ *T*, biểu thức của $\langle u^2 \rangle (P,T)$ có thể được viết lại

$$\langle u^2 \rangle (P,T) = y_0^2 (P,T) + \theta A_1 (P,T) + \frac{\theta}{k(P,T)} (X-1).$$
(13)

với $\gamma(P,T)$, k(P,T) và độ dời

$$y_0(P,T) = \sqrt{\frac{2\gamma(P,T)\theta^2}{3k^3(P,T)}} A(P,T) \text{ duoc}$$

tính ở áp suất *P* và nhiệt độ *T*.

3. Kết quả và thảo luận

Trong phần này, dựa trên các kết quả giải tích đã trình bày ở phần trước, chúng tôi sẽ thực hiện tính toán số cho kim loại Rh đến áp suất 50 GPa. Ở đây chúng ta cũng cần lưu ý rằng, Cazorla và cộng sự đã dự đoán cấu trúc của Rh ổn định ở pha FCC ít nhất đến áp suất 500 GPa (Cazorla et al., 2008). Giả sử rằng, tương tác giữa các nguyên tử trong hệ Rh có thể được mô tả bởi thế Lennard-Jones có dạng (Magomedov, 2021)

$$\varphi(r) = \frac{D}{b-a} \left[a \left(\frac{r_0}{r} \right)^b - b \left(\frac{r_0}{r} \right)^a \right], \quad (14)$$

trong đó *D* là năng lượng phân ly, r_0 là giá trị khoảng cách cân bằng, *a* và *b* là các tham số không thứ nguyên. Đối với kim loại Rh, giá trị của các tham số thế được sử dụng để tính số là $D/k_B = 11203, 27 \text{ K}; r_0 = 2,6847 \text{ Å}; m = 3,45 và n = 5,88 (Magomedov, 2021).$

Trên hình 1, chúng tôi biểu diễn sự thay đổi thể tích tương đối V/V_0 của Rh khi áp suất tăng đến 50 GPa ở nhiệt độ phòng. Ở hình vẽ này, ngoài kết quả tính toán lý thuyết, chúng tôi cũng đưa vào dữ liệu thực nghiệm đo bằng phương pháp nhiễu xạ tia X trong DAC (Frost et al., 2023) và thí nghiệm đốt nóng bằng laser của McHardy và cộng sự (McHardy et al., 2024) để so sánh. Như có thể quan sát trên hình 1, giá trị tỉ số V/V₀ của kim loại Rh thay đổi (giảm) đáng kể theo áp suất. Ngoài ra, chúng ta cũng có thể thấy rằng mối quan hệ áp suất-thể tích của Rh trong dự đoán lý thuyết từ phương pháp thống kê moment của chúng tôi khá phù hợp với kết quả thực nghiệm của McHardy và cộng sự (McHardy et al., 2024), và phù hợp tốt với phép đo được thực hiện bởi Frost và cộng sự đến áp suất 50 GPa. Kết quả này cho phép chúng tôi kết luận rằng sự kết hợp giữa phương pháp thống kê moment và thế năng Lennard-Jones có thể dự đoán tốt sự thay đối thể tích tương đối V/V_0 theo áp suất (tức là phương trình trạng thái) của kim loai Rh.



Hình 1: Sự thay đổi thể tích tương đối của kim loại Rh dưới áp suất. Kết quả thực nghiệm của Frost và cộng sự (Frost et al., 2023), McHardy và cộng sự (McHardy et al., 2024) cũng được chúng tôi biểu diễn để so sánh

Ngoài ra, thực hiện làm khớp kết quả của phương pháp thống kê moment với phương trình trạng thái Vinet (Vinet, Ferrante, Rose, & Smith, 1987) trong gần đúng bình phương tối thiểu, chúng tôi thu được giá trị của module nén khối K_0 và đạo hàm bậc nhất của nó theo áp suất K_1 tại P = 0 của Rh tương ứng là $K_0 = 250,12$ GPa và $K_1 = 5,23$. Ở đây chú ý rằng, phương trình trạng thái Vinet có dạng sau (Vinet et al., 1987)

$$P = 3K_0 \eta^{-2/3} \left(1 - \eta^{1/3} \right) \\ \times \exp\left[\frac{3}{2} \left(K_1 - 1 \right) \left(1 - \eta^{1/3} \right) \right].$$
(15)

Giá trị K_0 và K_1 trong nghiên cứu của chúng tôi phù hợp tốt với kết quả $K_0 = 241,3(65)$ GPa và $K_1 = 5,34(24)$ của Frost và cộng sự (Frost et al., 2023), và $K_0 = 257(2)$ GPa và $K_1 = 5,44(8)$ của McHardy và cộng sự (McHardy et al., 2024). Các kết quả này của K_0 và K_1 được chúng tôi tóm lược ở bảng 1 cùng với giá trị sai số của phương pháp thống kê moment so với kết quả thực nghiệm. Từ bảng 1 có thể nhận thấy, sự khác nhau giữa tính toán của chúng tôi và các giá trị thực nghiệm (Frost et al., 2023; McHardy et al., 2024) nhỏ hơn 5%.

Bảng 1: Module nén khối K_0 và đạo hàm bậc nhất của module nén khối theo áp suất K_1 của Rh xác định bằng phương pháp thống kê moment (PPTKMM) và các giá trị thực nghiệm

	K_0 (GPa)	$\delta_{\scriptscriptstyle K_0}$	K_1	$\delta_{\scriptscriptstyle K_1}$
PPTKMM	250,12	-	5,23	-
Frost và cộng sự	241,3 (65)	3,66%	5,34	2,06%
McHardy và cộng sự	257(2)	2,68%	5,44(8)	3,86%

Trên hình 2, chúng tôi biểu diễn sự phụ thuộc áp suất (đến 50 GPa ở nhiệt độ phòng) của MSD của kim loại Rh. Từ hình vẽ có thể nhận thấy, MSD giảm rất nhanh theo áp suất, đặc biệt là vùng áp suất dưới 10 GPa. Độ dốc $\left| d \left\langle u^2 \right\rangle / dP \right|$ của đường MSD trong khoảng áp suất 0–10 GPa là 3,6211×10⁻⁵ Å²/GPa; và trong toàn

khoảng 0–50 GPa là 2,2742×10⁻⁵ Å²/GPa. Trong gần đúng bình phương tối thiểu, đường cong MSD trong tính toán của chúng tôi có thể được làm khóp bằng hàm bậc ba theo *P* như sau $\langle u^2 \rangle = 3,2831 \times 10^{-3} - 4,0649 \times 10^{-5} P$

+5,1298×10⁻⁷ P^2 - 3,3371×10⁻⁹ P^3 (Å²). Ở đây chú ý rằng, do chưa có các

nghiên cứu về ảnh hưởng của áp suất đến MSD của Rh, phép so sánh được chúng tôi bỏ qua. Và kết quả nghiên cứu về ảnh hưởng của áp suất đến MSD của Rh có thể được sử dụng làm tài liệu tham khảo cho các thí nghiệm DAC ở áp suất cao trong tương lai.



Hình 2: Độ dịch chuyển trung bình bình phương của kim loại Rh dưới áp suất

Sử dụng giá trị MSD thu được của kim loại Rh, trên hình 3 chúng tôi biểu diễn ảnh hưởng của áp suất đến hệ số Debye-Waller $\exp\left(-k\left\langle u^2\right\rangle\right)$ với các giá trị k khác nhau. Hệ số Debye-Waller $\exp\left(-k\left\langle u^2\right\rangle\right)$ thường được sử dụng trong vật lý chất rắn để mô tả sự suy giảm tán xạ tia X hoặc tán xạ neutron có trật tự do chuyển động nhiệt gây ra. Có thể thấy, hệ số Debye-Waller tăng chậm theo áp suất. Điều này trái ngược với ảnh hưởng của nhiệt độ đến hệ số Debye-Waller. Ngoài ra, với giá trị kcàng lớn, ảnh hưởng của áp suất đến hệ số Debye-Waller càng rõ ràng. Cụ thể là, trong khoảng áp suất 0-50 GPa, sự thay đổi của hệ số Debye-Waller với k= 2 Å⁻² và k = 6 Å⁻² tương ứng là 0,2% và 0,7%.



Hình 3: Anh hưởng của áp suất đến hệ số Debye-Waller $\exp(-k\langle u^2 \rangle)$ của Rh

4. Kết luận

Trong bài báo này, sử dụng phương pháp thống kê moment có kể đến đóng góp phi điều hòa do dao động nhiệt của mạng tinh thể, chúng tôi đã nghiên cứu phương trình trạng thái và hệ số Debye-Waller phụ thuộc áp suất của Rh đến 50 GPa. Kết quả tính số của chúng tôi cho thấy sự phụ thuộc mạnh của cả thể tích tương đối (hay tham số mạng) và MSD của Rh vào áp suất, đặc biệt là vùng nhỏ hơn 10 GPa. Phương pháp thống kê moment tái hiện chính xác phương trình trạng thái cho Rh, phù hợp với các phép đo DAC trước đây lên đến 50 GPa nhưng có sự sai lệch nhỏ so với phép đo đốt nóng bằng laser gần đây. Kết quả nghiên cứu về ảnh hưởng của áp suất đến MSD của Rh có thể được sử dụng làm tài liệu tham khảo cho các thí nghiệm ở áp suất cao trong tương lai. Ngoài ra, chúng tôi cũng suy ra module nén khối $K_0 = 250,12$ GPa và đạo hàm bậc nhất theo áp suất $K_1 = 5,23$ của Rh bằng cách làm khớp phương trình trạng thái của chúng tôi với phương trình trạng thái Vinet.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

- Cazorla, C., Alfè, D., & Gillan, M. J. (2008). Zero-temperature generalized phase diagram of the 4d transition metals under pressure. *Phys. Rev. B*, 77(22), 224103. doi:10.1103/PhysRevB.77.224103.
- Dey, S., & Dhal, G. C. (2020). Applications of Rhodium and Ruthenium Catalysts for CO Oxidation: an Overview. *Polytechnica*, *3*(1), 26–42. doi:10.1007/s41050-020-00023-5.
- Frost, M., Smith, D., McBride, E. E., Smith, J. S., & Glenzer, S. H. (2023). The equations of state of statically compressed palladium and rhodium. *Journal of Applied Physics*, *134*(3), 035901. doi:10.1063/5.0161038.
- Jiang, A., Chen, J., Liu, S., Wang, Z., Li, Q., Xia, D., & Dong, M. (2021). Intermetallic Rhodium Alloy Nanoparticles for Electrocatalysis. *ACS Appl. Nano Mater.*, 4(12), 13716–13723. doi:10.1021/acsanm.1c03128.
- Magomedov, M. N. (2021). Temperature and Pressure Dependences of the Surface Energy for a Macro- and Nanocrystal. *Physics of the Solid State*, 63(10), 1465–1479. doi:10.1134/S1063783421090250.
- Masuda-Jindo, K., Vu, V. H., & Pham, D. T. (2003). Thermodynamic quantities of metals investigated by an analytic statistical moment method. *Phys. Rev. B*, 67(9), 094301. doi:10.1103/PhysRevB.67.094301.
- McHardy, J. D., Storm, C. V., Duff, M. J., Lonsdale, C. M., Woolman, G. A., McMahon, M. I., Giordano, N., et al. (2024). Thermal equation of state of rhodium to 191 GPa and 2700 K using double-sided flash laser heating in a diamond anvil cell. *Phys. Rev. B*, 109(9), 094113. doi:10.1103/PhysRevB.109.094113.
- Nguyen, T., & Vu, V. H. (1988). Investigation of the Thermodynamic Properties of Anharmonic Crystals by the Momentum Method. I. General Results for Face-

Centred Cubic Crystals. *Phys. Stat. Sol.* (*b*), 149(2), 511–519. doi:10.1002/pssb.2221490212.

- Nguyen, T., & Vu, V. H. (1990). Investigation of the Thermodynamic Properties of Anharmonic Crystals by Momentum Method. IV. The Limiting of Absolute Stability and the Melting Temperature of Crystals. *Physica status solidi (b)*, *162*(2), 379–385. doi:https://doi.org/10.1002/pssb.2221620207.
- Smirnov, N. A. (2023). Ab initio calculations of structural stability, thermodynamic and elastic properties of Ni, Pd, Rh, and Ir at high pressures. *Journal of Applied Physics*, 134(2), 025901. doi:10.1063/5.0158737.
- Swift, D. C., Lockard, T., Heuze, O., Frost, M., Glenzer, S., McClellan, K. J., Hamel, S., et al. (2019). Equations of state for ruthenium and rhodium. Retrieved from https://arxiv.org/abs/1909.05391.
- Tougas, I. M., Amani, M., & Gregory, O. J. (2013). Metallic and Ceramic Thin Film Thermocouples for Gas Turbine Engines. *Sensors*, 13(11), 15324–15347. doi:10.3390/s131115324.
- Vinet, P., Ferrante, J., Rose, J. H., & Smith, J. R. (1987). Compressibility of solids. *Journal of Geophysical Research: Solid Earth*, 92(B9), 9319–9325. doi:10.1029/JB092iB09p09319.
- Vu, V. H., Tran, X. L., Vu, T. T. H., Duong, D. P., & Ho, K. H. (2018). Investigation of elastic moduli and constants of zinc-blende AlyGa1-yAs alloy by statistical moment method. *The European Physical Journal B*, 91(2), 44. Retrieved from https://doi.org/10.1140/epjb/e2018-80540-0.
- Walsh, J. M., Rice, M. H., McQueen, R. G., & Yarger, F. L. (1957). Shock-Wave Compressions of Twenty-Seven Metals. Equations of State of Metals. *Phys. Rev.*, 108(2), 196–216. doi:10.1103/PhysRev.108.196.
- Young, D. A., Cynn, H., Söderlind, P., & Landa, A. (2016). Zero-Kelvin Compression Isotherms of the Elements 1 <= Z <= 92 to 100 GPa. Journal of Physical and Chemical Reference Data, 45(4), 043101. doi:10.1063/1.4963086.
- Yusenko, K. V., Khandarkhaeva, S., Fedotenko, T., Pakhomova, A., Gromilov, S. A., Dubrovinsky, L., & Dubrovinskaia, N. (2019). Equations of state of rhodium, iridium and their alloys up to 70 GPa. *Journal of Alloys and Compounds*, 788, 212–218. doi:https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2019.02.206.

INVESTIGATION OF EQUATION-OF-STATE AND DEBYE-WALLER FACTOR OF RHODIUM METAL BY STATISTICAL MOMENT METHOD *Ho Khac Hieu*^{1, 2}

¹Institute of Research and Development, Duy Tan University ²Faculty of Environmental and Natural Sciences, Duy Tan University Email: hieuhk@duytan.edu.vn (Received: 21/10/2024, Revised: 19/11/2024, Accepted for publication: 21/11/2024) *ABSTRACT*

Equation-of-state of Rh metal has been studied using the statistical moment method taking into account the anharmonicity caused by thermal lattice vibrations. Numerical calculations have been carried out for Rh metal up to a pressure of 50 GPa. The bulk modulus $K_0 = 250.12$ GPa and its first pressure derivative at zero pressure $K_1 = 5.23$ are obtained by fitting our derived equation-of-statewith the Vinet equation-of-state. Furthermore, we also investigate the pressure effects on the atomic mean-squared displacement corresponding to the Debye-Waller factor of Rh. Our theoretical calculations indicate the strong reduction of the relative volume change and Debye-Waller factor of Rh when pressure increases, particularly at pressure below 10 GPa.

Keywords: equation-of-state, Debye-Waller factor, statistical moment method, high pressure, Rh