

Materiālu termometrija, izmantojot EXAFS spektroskopiju

Aleksejs Kuzmins, Vitalijs Dimitrijevs, Inga Pudža, Aleksandrs Kaļinko
Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

Paplašinātā rentgenabsorbcijas sīkstruktūras (EXAFS) spektroskopija ir vērtīgs instruments, kas sniedz informāciju par lokālo atomāro struktūru un režģa dinamiku. Izmaiņas starpatomu attālumos, kas rodas atomu svārstību dēļ, tiek aprakstītas ar temperatūras atkarīgo vidējo kvadrātisko relatīvo nobīdi (MSRD), kas ir pazīstama arī kā Debaja–Vallera faktors. Šajā pētījumā mēs parādījām, kā zināšanas par MSRD var izmantot parauga temperatūras noteikšanai, analizējot EXAFS spektru, izmantojot daudzskārtējas izkliedes formālismu [1]. Šī metode tika pārbaudīta uz vairākiem monoatomāriem metāliem (bcc Cr, Mo un W; fcc Cu un Ag), kur režģa dinamikas korelētais Debaja modelis [2] nodrošina diezgan precīzu termiskās nesakārtotības ietekmes aprakstu pat tālākajās koordinācijas sfērās. Mēs noskaidrojām [3], ka metodes precizitāte ir atkarīga no temperatūras diapazona. Metode nav precīza zemās temperatūrās, kur dominē kvantu efekti un MSRD vērtības mainās tikai nedaudz. Tajā pašā laikā metode ir diezgan precīza augstās temperatūrās, kur MSRD parāda lineāru atkarību no temperatūras.

Šo pētījumu atbalstīja Latvijas Zinātnes padomes projekts Nr. LZP-2022/1-0608.

Materials thermometry using EXAFS spectroscopy

Alexei Kuzmin, Vitalijs Dimitrijevs, Inga Pudza, Aleksandr Kalinko
Institute of Solid State Physics, University of Latvia

Extended X-ray absorption fine structure (EXAFS) spectroscopy is a valuable tool that provides information on the local atomic structure and lattice dynamics. Variations in interatomic distances due to atomic vibrations are described by the temperature-dependent mean-square relative displacement (MSRD), also known as the Debye–Waller factor. In this study, we demonstrate how knowledge of MSRDs can be employed to determine the sample temperature by analyzing the EXAFS spectrum using the multiple-scattering formalism [1]. The method was tested on several monatomic metals (bcc Cr, Mo, and W; fcc Cu and Ag), where the correlated Debye model of lattice dynamics [2] provides a fairly accurate description of thermal disorder effects up to distant coordination shells. We found [3] that the accuracy of the method strongly depends on the temperature range. The method fails at low temperatures, where quantum effects dominate, and MSRD values change only slightly. At the same time, it is rather accurate at higher temperatures, where the MSRD shows a linear dependence on temperature.

This study was supported by the Latvian Council of Science project No. LZP-2022/1-0608.

[1] J. J. Rehr, R. C. Albers, *Rev. Mod. Phys.* 72 (2000) 621.

[2] E. Sevillano, H. Meuth, J. J. Rehr, *Phys. Rev. B* 20 (1979) 4908.

[3] A. Kuzmin, V. Dimitrijevs, I. Pudza, A. Kalinko, *Phys. Status Solidi A* (2024) 2400623.