

NiO režģa dinamikas EXAFS pētījumi ar apgriezto Monte-Karlo un spēka lauka metodēm

Julija Lukasevica¹, Andris Anspoks¹, Aleksandr Kalinko^{1,2}, Alexei Kuzmin¹

¹*Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts*

²*Deutsches Elektronen-Synchrotron (DESY) – A Research Centre of the Helmholtz Association*

NiO režģa dinamiku izpētīja pie septiņām temperatūrām no 10 K līdz 300 K, izmantojot Ni K malas rentgenabsorbcijas spektroskopiju apvienojumā ar apgrieztā Monte Carlo simulācijām. Salīdzinājumam veica režģa dinamikas aprēķinus ar empīrisko potenciālu. Potenciāla modeli apstiprināja, salīdzinot eksperimentālos NiO Ni K malas izstieptās rentgenabsorbcijas sīkstruktūras (EXAFS) spektrus ar molekulārās dinamikas modelēšanas rezultātiem pie 300 K.

Abu metožu rezultātā noteica Ni-O un Ni-Ni atomu pāru vidējās kvadrātiskās relatīvās nobīdes (MSRD), parādot to atkarību no temperatūras un no starpatomu attālumiem. Novēroja negaidītu MSRD vērtību niķeļa 3. koordinācijas sfēras O atomiem.

EXAFS study of NiO lattice dynamics using reverse Monte Carlo and force field methods

Julija Lukasevica¹, Andris Anspoks¹, Aleksandr Kalinko^{1,2}, Alexei Kuzmin¹

¹*Institute of Solid State Physics, University of Latvia*

²*Deutsches Elektronen-Synchrotron (DESY) – A Research Centre of the Helmholtz Association*

Lattice dynamics of bulk NiO was studied at seven temperatures from 10 K to 300 K using the Ni K-edge X-ray absorption spectroscopy combined with the reverse Monte Carlo simulations. Lattice dynamics calculations with empirical potential were also performed for comparison. The potential model was validated by comparing the experimental Ni K-edge extended X-ray absorption fine structure (EXAFS) spectrum of NiO with the results of molecular dynamics simulations at 300 K.

As a result of both calculation methods, the mean-square relative displacements (MSRDs) for Ni-O and Ni-Ni atom pairs were determined, showing their temperature and interatomic distance dependencies. An unexpected increase in the MSRD values for O atoms in the 3rd coordination shell of nickel was observed.