

## **Režģa dinamikas analīze metālos ar heksagonālu struktūru ar EXAFS spektroskopiju un Apgrieztas Monte-Karlo metodi**

Vitalijs Dimitrijevs, Aleksejs Kuzmins  
*Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts*

Mūsdienas izstieptai rentgenabsorbcijas sīkstruktūras (EXAFS) analīzei tiek pielietotas divas metodes, kuras balstās uz Molekulārās Dinamikas (MD) un Apgrieztās Monte-Karlo (RMC) simulācijām. Galvenais MD ierobežojums ir saistīts ar starpatomu mijiedarbības potenciālu. Mūsdienas pieejamie potenciāli metāliem ar heksagonālu struktūru nevar precīzi aprakstīt šīs struktūras  $c/a$  parametru. Šī darbā ietvaros tika pētītas Co, Ti un Zr metāliskas folijas ar mazāko par 10  $\mu\text{m}$  biezumu, izmantojot RMC metodi. EXAFS spektri tika uzņemti temperatūras diapazonā no 10 līdz 300 K pie attiecīgu metālu K-malām caurejošā režīmā P65 līnijā DESY PETRA-III sinhrotronu centrā. Veicot EXAFS spektra RMC simulācijas, tika iegūta informācija par lokālo režģa dinamiku – vidējas kvadrātiskas relatīvas nobīdes (MSRD) atomu pāriem, attālums starp kuriem nepārsniedz 9 Å. MSRD atkarība no temperatūras un attāluma tika izmantota, lai novērtētu starpatomu mijiedarbības spēku un korelācijas efekta nozīmību. Tika izdarīti secinājumi par heksagonālas struktūras  $c/a$  parametra ietekmi uz MSRD.

### **Study of lattice dynamics in metals with hexagonal structure by EXAFS spectroscopy combined with reverse Monte-Carlo simulations**

Vitalijs Dimitrijevs, Alexei Kuzmin  
*Institute of Solid State Physics, University of Latvia*

Nowadays two methods based on Molecular Dynamics (MD) and reverse Monte-Carlo (RMC) simulations exist for the advanced analysis of the extended X-ray absorption fine structure (EXAFS) spectra. The main restriction of the MD method is related to the quality of interaction potentials. In particular, the existing potentials for metals with the hexagonal structure are not able to reproduce accurately the  $c/a$  ratio of the lattice parameters. Therefore, the RMC method was used in the present study of hcp Co, Ti, and Zr metallic foils with a thickness smaller than 10  $\mu\text{m}$ . The temperature-dependent (10-300 K) EXAFS spectra were measured at the K-edges of metals in transmission mode at the P65 beamline of the DESY PETRA-III synchrotron radiation facility. The RMC simulations of EXAFS spectra allowed us to extract information on the local lattice dynamics in terms of the mean-squared relative displacements (MSRDs) for atom pairs located at distances up to 9 Å. Temperature and distance dependencies of MSRDs were used to evaluate the strength of interatomic interactions and the importance of correlation effects. The impact of the hexagonal structure  $c/a$  ratio on MSRD will be discussed.