

# Niķeļa oksīda režģa dinamikas pētījums plašā temperatūras diapazonā, izmantojot EXAFS spektroskopiju

Julija Lukaševiča, Aleksejs Kuzmins  
*Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts*

Istabas temperatūrā NiO ir antiferromagnētisks Motta-Hubbarda izolators ar nedaudz rombiski izkropļotu kristālrežģi (telpiskā grupa  $R-3m$ ). Turklāt, starp visiem pārejas metālu monoksīdiem NiO ir visaugstākā magnētiskās fāzes pārejas temperatūra ( $T_N = 525$  K) no antiferromagnētiskā uz paramagnētisko stāvokli ar kubisku režģi (telpiskā grupa  $Fm-3m$ ).

NiO režģa dinamiku izpētīja plašā temperatūru diapazonā no 10 K līdz 900 K. Ni-Ni un Ni-O atomu pāru vidējo kvadrātisko relatīvo nobīžu (MSRD) atkarību no temperatūras ieguva, izmantojot Ni K malas rentgenabsorbcijas spektroskopiju apvienojumā ar apgrieztā Monte Karlo simulācijām. Iegūtās MSRD vērtības aproksimēja, izmantojot Einšteina modeli un salīdzināja ar literatūras datiem.

Mēs konstatējām, ka virs fāzes pārejas temperatūras  $T_N$  Ni-Ni un Ni-O atomu pāru MSRD vērtības ir zemākas, nekā gaidīts teorijā. Papildus, visā temperatūras diapazonā ir novērota samazināta korelācija starp absorbējošajiem Ni un 3. koordinācijas sfēras O atomiem.

## Study of nickel oxide lattice dynamics in a wide temperature range using EXAFS spectroscopy

Julija Lukaševiča, Alexei Kuzmin  
*Institute of Solid State Physics, University of Latvia*

At room temperature, NiO is an antiferromagnetic Mott-Hubbard insulator with a slightly rhombohedrally distorted crystal lattice (space group  $R-3m$ ). Moreover, among all transition metal monoxides, NiO has the highest temperature ( $T_N = 525$  K) of magnetic phase transition from an antiferromagnetic to a paramagnetic state with a cubic lattice (space group  $Fm-3m$ ).

In this study, NiO lattice dynamics was investigated over a wide temperature range from 10 K to 900 K. The temperature dependence of the mean square relative displacement (MSRD) values for Ni-O and Ni-Ni atomic pairs was obtained using Ni K-edge X-ray absorption spectroscopy combined with reverse Monte Carlo simulations. The obtained MSRD values were approximated using the Einstein model and compared with literature data.

We found that above the phase transition temperature  $T_N$ , the MSRD values for Ni-Ni and Ni-O atomic pairs are lower than expected from the theory. Additionally, a reduced correlation between the absorbing Ni and O atoms of the 3rd coordination shell was discovered over the whole temperature range.

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