

Augstas entropijas materiālu EXAFS spektroskopija

Aleksejs Kuzmins

Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

Augstas entropijas materiāli (HEM) tika atklāti 2000. gadu sākumā [1,2]. Tie sastāv no pieciem vai vairākiem galvenajiem elementiem gandrīz vienādās atomu proporcijās un ietver dažādus sakausējumus un keramiskas savienojumus [3]. HEM piemīt sastāva ziņā nesakārtota un strukturāli lokāli izkropļota atomu vide, padarot rentgenabsorbcijas spektroskopiju par ideālu eksperimentālu metodi, lai pētītu HEM lokālo elektronisko un atomāro struktūru. Taču šo sarežģīto uzdevumu ir grūti risināt, izmantojot tradicionālās datu analīzes pieejas, un tam ir jāizmanto avancētas metodes, kā piemēram, reversā Monte Karlo (RMC) simulācijas [4]. Šajā darbā mēs sniedzam pārskatu par RMC metodes pielietošanu rentgenabsorbcijas sīkas struktūras (EXAFS) spektru vienlaicīgai daudzu malū analīzei. Šāda pieeja ļauj rekonstruēt strukturālo modeli, kas atbilst visiem pieejamajiem eksperimentālajiem datiem. Tiks sniegti vairāki piemēri, īpašu uzmanību pievēršot augstas entropijas oksīdiem [5] un sakausējumiem [6].

Šo pētījumu atbalstīja Latvijas Zinātnes padomes projekts Nr. LZP-2023/1-0476.

EXAFS spectroscopy of high-entropy materials

Alexei Kuzmin

Institute of Solid State Physics, University of Latvia

High-entropy materials (HEMs) were discovered in the early 2000s [1,2]. They are composed of five or more principal elements in nearly equal atomic proportions and include different alloys and ceramic compounds [3]. HEMs exhibit a compositionally disordered and structurally locally distorted atomic environment, making X-ray absorption spectroscopy an ideal experimental tool for studying HEM local electronic and atomic structure. However, this challenging task is difficult to address using conventional data analysis approaches and requires the use of advanced methods such as reverse Monte Carlo (RMC) simulations [4]. In this work, we provide an overview of the application of the RMC method to the simultaneous multi-edge analysis of extended X-ray absorption fine structure (EXAFS) spectra. Such an approach allows for the reconstruction of a structural model that is in agreement with all available experimental data. Several examples will be given with a focus on high-entropy oxides [5] and alloys [6].

This study was supported by the Latvian Council of Science project No. LZP-2023/1-0476.

- [1] J.-W. Yeh, S.-K. Chen, S.-J. Lin, J.-Y. Gan, T.-S. Chin, T.-T. Shun, C.-H. Tsau, S.-Y. Chang, *Adv. Eng. Mater.* 6 (2004) 299.
- [2] B. Cantor, I. Chang, P. Knight, A. Vincent, *Mater. Sci. Eng. A* 375-377 (2004) 213.
- [3] M.C. Gao, D.B. Miracle, D. Maurice, X. Yan, Y. Zhang, J. A. Hawk, *J. Mater. Res.* 33 (2018) 3138.
- [4] J. Timoshenko, A. Kuzmin, J. Purans, *J. Phys.: Condens. Matter* 26 (2014) 055401.
- [5] G. Bakradze, E. Welter, A. Kuzmin, *J. Phys. Chem. Solids* 172 (2023) 111052.
- [6] A. Smekhova, A. Kuzmin, K. Siemensmeyer, C. Luo, J. Taylor, S. Thakur, F. Radu, E. Weschke, A. Guilherme Buzanich, B. Xiao, A. Savan, K. V. Yusenko, A. Ludwig, *Nano Res.* 16 (2023) 5626.