

## EXAFS study for anharmonic vibration in solids

양 동 석

충북대학교 사범대학 과학교육부, Tel)043-261-2724, Fax:043-271-0526

Extended X-ray Absorption Fine Structure (EXAFS)는 주로 고체에서 어떤 원자 주위의 국소 구조를 파악하기 위한 도구로써 많이 이용되어왔으며, EXAFS spectrum이 시료의 온도에 민감하게 변화하는 것을 이용하여 고체 내에 있는 이온들의 진동을 분석하기 위한 도구로서도 현재 이용 중에 있다. 본 연구에서는 현재 사용되고 있는 EXAFS 분석 기법을 개선하여 고온에서 측정된 EXAFS spectrum을 보다 효과적으로 분석할 수 있는 방법을 제안하였고, 구리, 니켈, 은 등 결정 구조가 F.C.C인 금속에 대하여 분석해본 결과 매우 효과적인 분석이 될 수 있음을 확인하였다. 본 연구에서 이용한 이온간 potential은  $V(r)=D\{[(r-r_0)/\sigma_M]^2 - D\{[(r-r_0)/\sigma_M]^3$  로 표현된 유사 Morse potential을 사용하였다. 또한 EXAFS 변수와의 관계식은  $s = (8/9)(D/k_B T)$  및  $\delta = (3/4)(\sigma_M/D)k_B T$  이였고, 여기서  $k_B$  는 볼츠만 상수,  $T$  는 절대 온도이고,  $s$ 와  $\delta$ 는 다음 EXAFS spectrum에 관련된 구조 변수이다. 여기서 구조변수  $\delta$ 는 국소열팽창과 관계 있는 양으로  $\delta = \alpha r_0 T$  과 비교하여 선팽창 계수  $\alpha$ 를 구할 수 있었다. 본 연구에서 EXAFS 분석으로부터 측정된 선팽창 계수는  $\alpha_{Cu} = 1.4 \times 10^{-5} K^{-1}$ ,  $\alpha_{Ni} = 1.2 \times 10^{-5} K^{-1}$ ,  $\alpha_{Ag} = 1.4 \times 10^{-5} K^{-1}$  으로 다른 방법으로 측정된 선팽창 계수와 유사한 값을 얻었다. 또한 온도가 증가함에 따라 EXAFS spectrum의 진폭 및 위상의 변화는 금속 내에 있는 anharmonic vibration에 기인하는 것이며 이것은 또한 선팽창의 원인이 됨을 확인하였다.