Определение локальной атомной структуры по перекрывающимся EXELFS спектрам

Э.Ф. Хаметова1,2,\*), О.Р. Бакиева2)

1) Удмуртский государственный университет, Ижевск, Россия

2) ФТИ УдмФИЦ УрО РАН, Ижевск, Россия

\*) e-mail: elinaphanilevna851@gmail.com

В настоящее время самые актуальные разработки и инновации сконцентрированы вокруг материалов с низкой размерностью – это и сложная наноструктурированная керамика, и нанокомпозитные материалы для фотоники, и топологические сверхпроводники для нового поколения квантовых компьютеров. Одним из основных инструментов исследования локальной атомной структуры материалов является метод спектроскопии EXAFS (Extended X-ray Absorption Fine Structure) и EXELFS (Extended Electron Energy Loss Fine Structure). Анализ таких спектров дает информацию о парциальных координационных числах, длинах связи и параметрах их дисперсии. Однако, при исследовании многокомпонентных систем, до сих пор существует проблема анализа спектров, в которых происходит наложение сигналов нескольких химических элементов в одном энергетическом диапазоне.

В данной работе предложен метод решения проблемы перекрывающихся диапазонов экспериментальных EXELFS сигналов в геометрии эксперимента «на просвет», который реализуется в просвечивающих электронных микроскопах. Количественный анализ экспериментальных EXELFS спектров проведен методом Фурье с использованием пакета программ Ifeffit.

ЛИТЕРАТУРА

1. Nemtsova O., Bakieva O., Electron energy loss spectroscopy equation for spectra with overlapping oscillations and its solution by a regularization method, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms, **2016**, 368, 103-111.