МЕТОДИКА ОБРАБОТКИ И АНАЛИЗА EXELFS СПЕКТРОВ БЕЗ УЧЕТА АПРИОРНОЙ ИНФОРМАЦИИ

Э.Ф. Хаметова1,2,\*), О.Р. Бакиева2)

1) УдГУ, Ижевск, Россия

2) ФТИ УдмФИЦ УрО РАН, Ижевск, Россия

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

Один из современных методов исследования локальной атомной структуры - EXELFS метод (Extended Electron Energy Loss Fine Structure), основанный на электронном возбуждении. EXELFS спектры формируются в результате когерентного рассеяния вторичного электрона на локальном окружении возбуждаемого атома. Экспериментальные спектры содержат информацию о параметрах локальной атомной структуры: парциальных координационных числах, длинах химической связи и параметров тепловой дисперсии. Для проведения количественного анализа по экспериментальным EXELFS спектрам необходимо знание априорной информации об исследуемом объекте: группа симметрии, тип кристаллической решетки, значения параметров решетки (a, b, c), координаты уникальных положений атомов (x, y, z). Данная информация необходима для расчета амплитуд и фаз обратного рассеяния. Получение априорной информации требует от исследователя использования дополнительных методик анализа, что может сильно усложнить дизайн эксперимента, увеличив его трудоемкость. Таким образом, данная работа посвящена разработке метода для анализа EXELFS спектров, при использовании которого не требовалась бы начальная информация о кристаллографических параметрах. Апробация метода была проведена на экспериментальных спектрах титана и его оксидах в различных модификациях. Предложенный алгоритм позволяет проводить анализ локальной атомной структуры по экспериментальным EXELFS спектрам с использованием машинного обучения.

Исследования выполнены с использованием оборудования ЦКП «Центр физических и физико-химических методов анализа, исследования свойств и характеристик поверхности, наноструктур, материалов и изделий» УдмФИЦ УрО РАН в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования РФ (№ гос. регистрации 121030100002-0).