

## Методика обработки и анализа EXELFS спектров без учета априорной информации

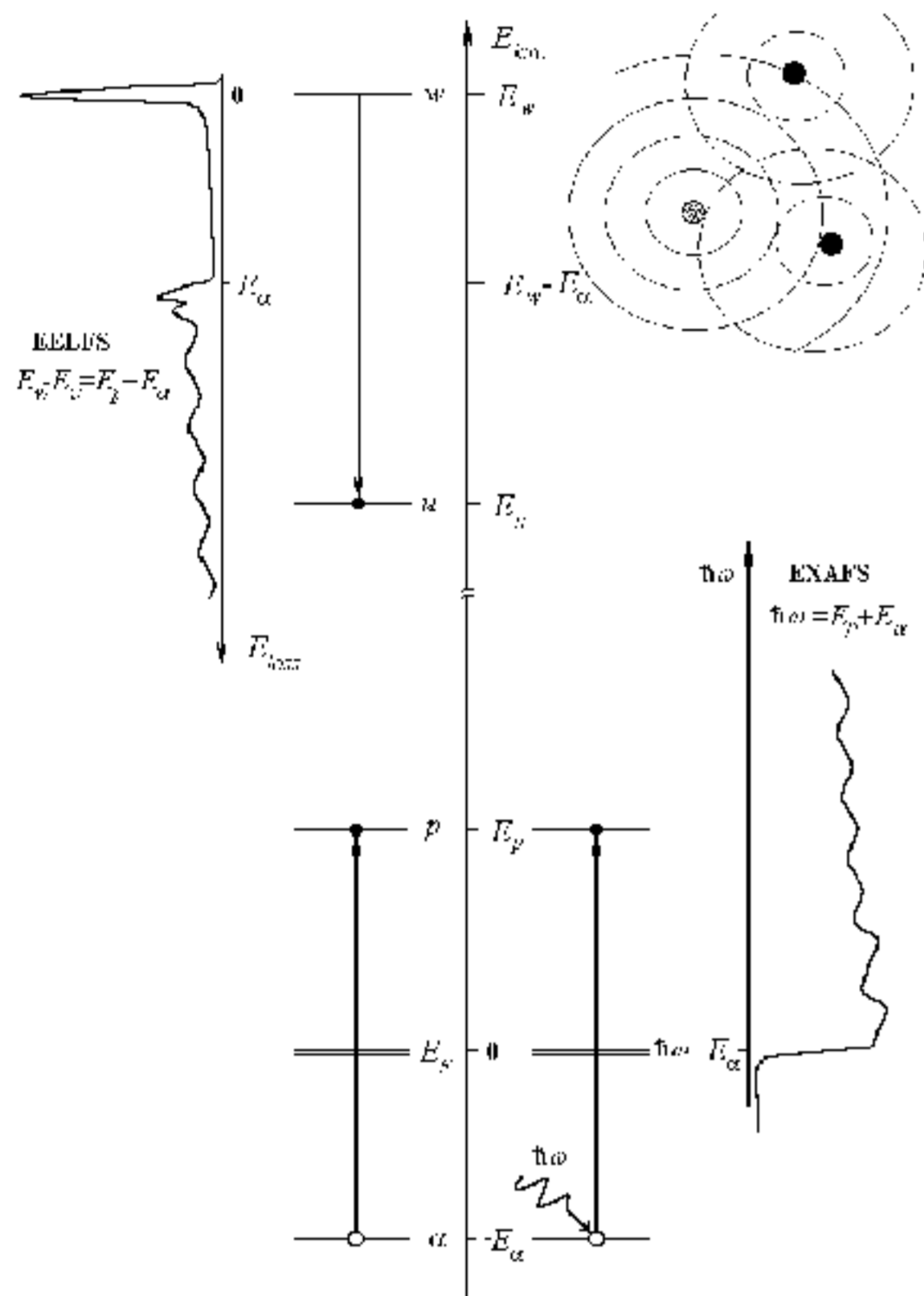


Э.Ф. Хаметова<sup>1,2)</sup>, О.Р. Бакиева<sup>2)</sup>

<sup>1)</sup> УдГУ, Ижевск, Россия

<sup>2)</sup> ФТИ УдмФИЦ УрО РАН, Ижевск, Россия

<sup>\*)</sup> e-mail: elinaphanilevna851@gmail.com



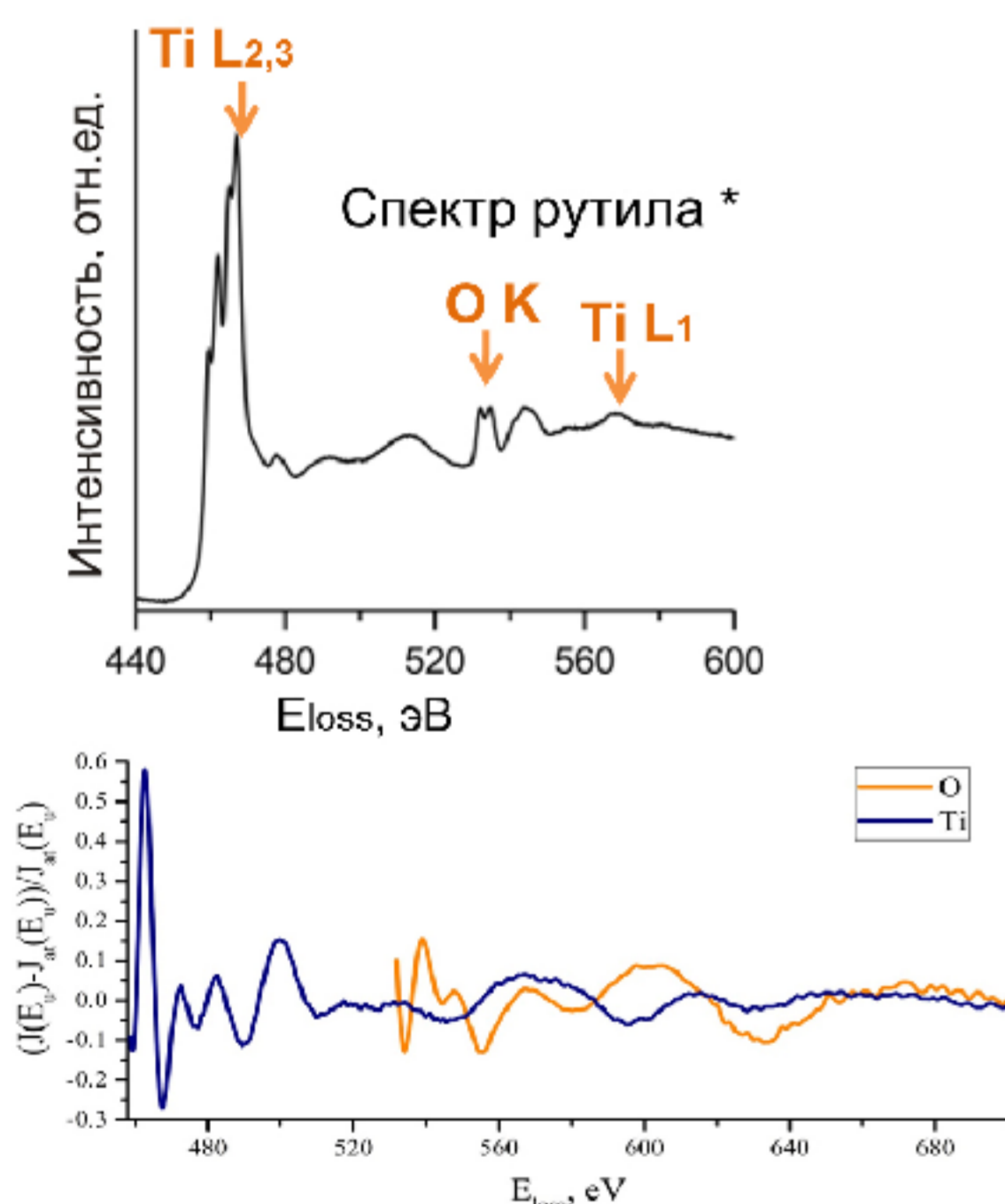
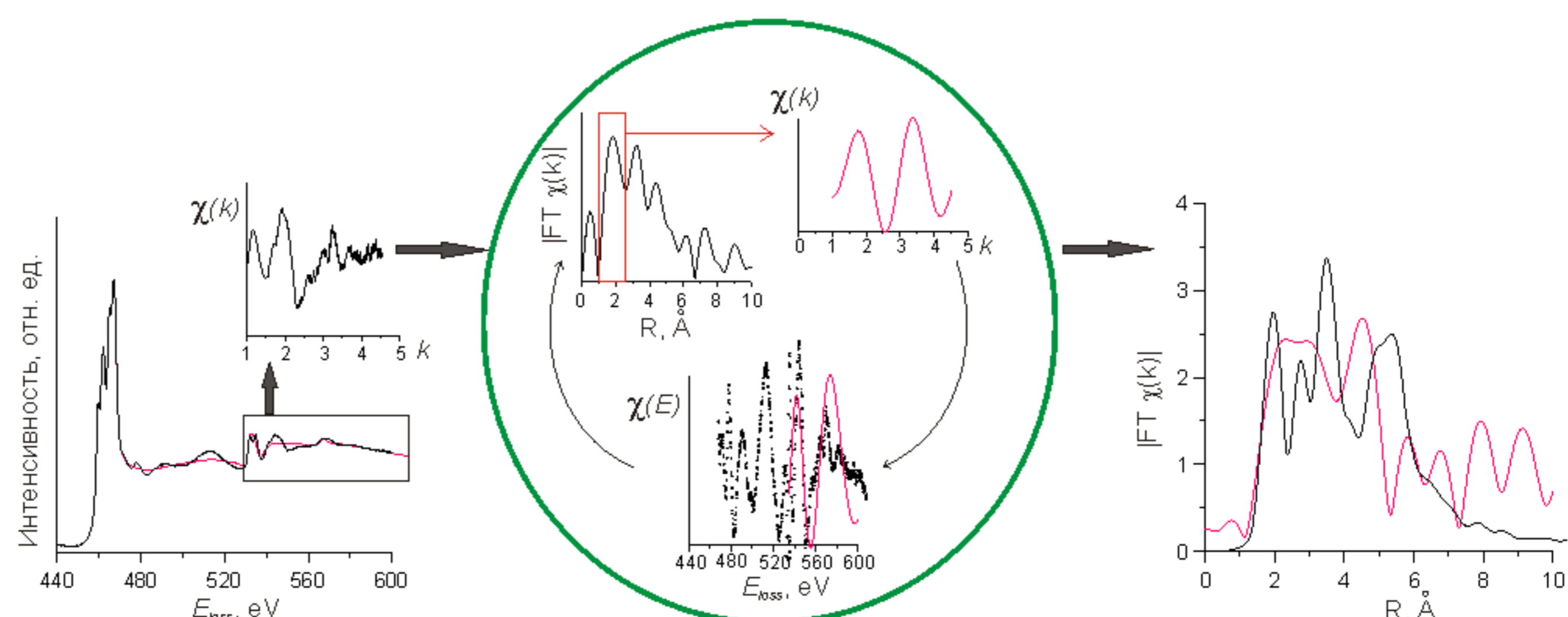
EXELFS (Extended Electron Energy Loss Fine Structure) спектроскопия - это один из современных методов исследования локальной атомной структуры вещества, основанный на возбуждении внутреннего уровня атома потоком моноэнергетичных электронов. В результате когерентного рассеяния вторичного электрона на ближайшем окружении возбуждаемого атома в спектрах регистрируются осцилляции интенсивности - тонкая структура. Протяженность этих осцилляций несколько сотен эВ, а период 15-20 эВ. Данные спектры относятся к EXAFS-подобным (EXAFS - Extended X-ray Absorption Fine Structure), следовательно содержат информацию о параметрах локальной атомной структуры: парциальных координационных числах, длинах химической связи и параметрах тепловой дисперсии. Для проведения количественного анализа по экспериментальным EXELFS спектрам необходимо знание априорной информации об исследуемом объекте. Обычно это кристаллографические характеристики исследуемого образца, необходимые для расчета параметров рассеяния вторичного электрона. Получение априорной информации требует от исследователя использования дополнительных методик анализа, что может усложнить схему эксперимента, увеличив его трудоемкость. Таким образом, данная работа посвящена разработке методики анализа EXELFS спектров, при использовании которой не требовалась бы информация о кристаллографических параметрах. Апробация метода была проведена на экспериментальном спектре титана и его оксиде TiO<sub>2</sub>. Предложенный алгоритм позволяет проводить анализ локальной атомной структуры по экспериментальным EXELFS спектрам с использованием машинного обучения.

### Классическая методика анализа данных EXELFS эксперимента

$$\frac{dJ_{\text{experiment}}(E_u) - dJ_{\text{at}}(E_u)}{dJ_{\text{at}}(E_u)} = \chi(k) = \text{Re} \left( \sum_j (-1)^j \exp(i2\delta_j^0) F_j(p^2, T) f_j(-\hat{p}_j, \hat{p}_j) \frac{\exp(ip^+ 2R_{0j})}{ipR_{0j}^2} \right)$$

Для определения параметров локальной атомной структуры из экспериментальных EXELFS данных необходимо провести предварительную обработку спектров - вычесть фон и отнормировать сигнал на бесструктурную функцию. Нормированные осциллирующие структуры могут быть проанализированы наиболее удобным способом - методом Фурье-преобразования, методом многопараметрической подгонки, решением обратной задачи на определение парных корреляционных функций.

### Предложенный алгоритм



\* Philip Ewels, Thierry Sikora, Virginie Serin, Chris P. Ewels and Luc Lajaunie. "A Complete Overhaul of the Electron Energy-Loss Spectroscopy and X-Ray Absorption Spectroscopy Database. eelsdb.eu." *Microscopy and Microanalysis*, available on CJO2016. doi:10.1017/S1431927616000179.