СИСТЕМА ИНТЕГРАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ ДЛЯ СОВМЕСТНОГО АНАЛИЗА EXAFS И EXELFS ДАННЫХ

И.К. Аверкиев, О.Р. Бакиева

УдмФИЦ УрО РАН, Ижевск, Россия

\*) e-mail: averkiev1997@mail.ru

Создание современных материалов требует комплексного подхода к исследованиям их структурных характеристик. Методы исследования, основанные на дифракционных явлениях в этих случаях не всегда применимы. Поэтому для исследования структурных характеристик, а именно локальной атомной структуры применяется метод EXAFS-спектроскопии, основанный на поглощении рентгеновского излучения и метод EXELFS-спектроскопии, основанный на электронном возбуждении. Поскольку спектры, полученные как с помощью рентгеновского, так и электронного возбуждения имеют одну природу – рассеяние вторичного электрона/фотоэлектрона на ближайшем окружении возбуждаемого атома, то анализ экспериментальных данных можно проводить в рамках решения одной задачи.

В работе представлен алгоритм объединения данных двух независимых экспериментов, EXAFS и EXELFS-спектроскопии, одну систему интегральных уравнений Фредгольма первого рода (обратная некорректно поставленная задача) и решении ее методом регуляризации по Тихонову. Предложенный алгоритм был апробирован на системах металл/легкий элемент (на соединениях Ti, TiH2, TiC, Ti2AlC). В ходе работ получены параметры локальной атомной структуры: длины химической связи, координационные числа, параметры тепловой дисперсии атомов. Предложенная методика определения параметров локальной атомной структуры может быть использована для широкого круга наноструктурированных материалов.

Работа выполнена в рамках Государственного задания Министерства науки и высшего образования РФ №1022040600207-2. Исследования проводились в центре коллективного пользования «Поверхность и новые материалы» УдмФИЦ УрО РАН.