ПРОБЛЕМА АНАЛИЗА НЕСКОЛЬКИХ СИГНАЛОВ В EXAFS СПЕКТРОСКОПИИ НА ПРИМЕРЕ BaTiO3

Э.Ф. Хаметова\*), О.Р. Бакиева

УдмФИЦ УрО РАН, Ижевск, Россия

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

В последние десятилетия в большинстве областей науки происходит усложнение объектов исследования. Появляются новые типы материалов, развиваются исследования сложных многокомпонентных систем. С середины 70-х годов для исследования структуры локального окружения заданного химического состава стало широко использоваться изучение дальней тонкой структуры рентгеновских спектров поглощения – (EXAFS-спектроскопия). В ходе проведения эксперимента регистрируется спектр, формирующийся в результате когерентного рассеяния фотоэлектрона на локальном окружении. Преимуществами метода являются: независимое получение кривой радиального распределения атомов (РРА) для локального окружения каждого из химических элементов исследуемого объекта; высокая чувствительность, благодаря использованию синхротронного излучения; возможность определять как межатомные расстояния и координационные числа в кривой РРА, так и вид атомов в окрестности изучаемого. Однако если в одном энергетическом диапазоне регистрируются сигналы поглощения нескольких атомов разной химической сортности, возникают проблемы при анализе таких спектров. В качестве примера можно рассмотреть титанат бария (BaTiO3). На спектре титаната бария наблюдается перекрытие Ti K (4965 эВ), Ba L3 (5247 эВ) и Ba L2 (5624 эВ).

Данная работа посвящена решению проблемы анализа EXAFS спектров, в которых происходит наложение сигналов нескольких химических элементов. Проведены модельные расчеты спектра BaTiO3 в диапазоне энергий 4961 – 7150 эВ, содержащих сигнал поглощения Ti K, Ba L3 и Ba L2.

Работа выполнена в рамках Государственного задания Министерства науки и высшего образования РФ №1022040600207-2.