

Проблема анализа нескольких сигналов в EXAFS спектроскопии на примере BaTiO₃

Хаметова Э.Ф., Бакиева О.Р.

УдмФИЦ УрО РАН, Ижевск, Россия
e-mail: elinaphanilevna851@gmail.com

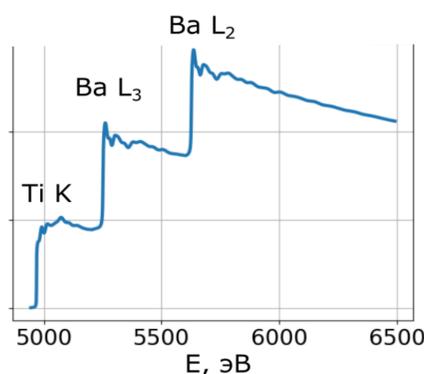
В последние десятилетия в большинстве областей науки происходит усложнение объектов исследования. Появляются новые типы материалов, развиваются исследования сложных многокомпонентных систем. На сегодняшний день для исследования структуры локального окружения заданного химического состава широко используется изучение дальней тонкой структуры рентгеновских спектров поглощения - EXAFS спектроскопия (Extended X-ray Absorption Fine Structure). Анализ экспериментального сигнала в EXAFS спектрах позволяет получить информацию о длине химической связи, координационном числе и параметре тепловой дисперсии атома. 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.

Модельные расчеты

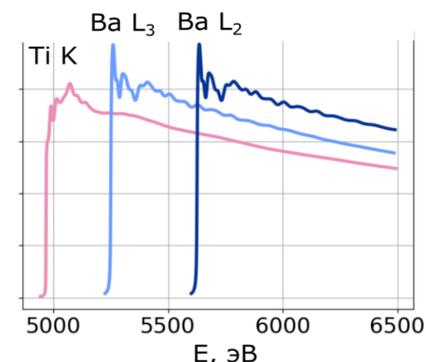
Титанат бария – это один из хорошо известных сегнетоэлектрических материалов. Он изучается многими исследовательскими группами для использования в многослойных конденсаторах, термисторах, электрооптических устройствах, сегнетоэлектрической керамики и др. В рамках данной работы производилось построение модельного EXAFS спектра BaTiO₃ в программном пакете FEFF с априорной информацией, приведенной в таблице.

Пространственная группа	Pm-3m
a=b=c	180Å
α=β=γ	90°



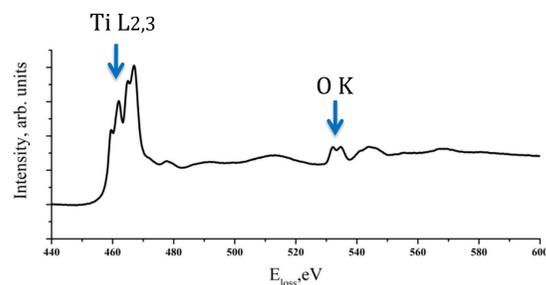
Изображение модельного EXAFS спектра титаната бария

$$\begin{aligned}\mu(k) &= \mu(k_{Ti}) + \mu(k_{Ba}) \\ \mu(k_{Ti}) &= \mu_0(k_{Ti})(1 + \chi(k_{Ti})) \\ \mu(k_{Ba}) &= \mu_0(k_{Ba})(1 + \chi(k_{Ba}))\end{aligned}$$



Края Ti K, Ba L₃, Ba L₂

Проблема перекрытия сигналов в электронной спектроскопии



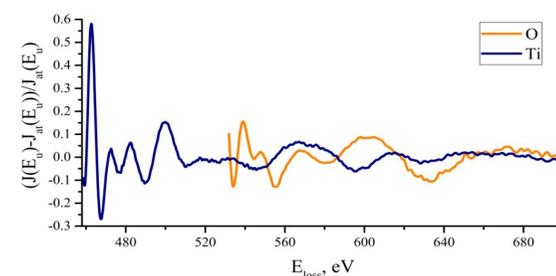
Экспериментальные спектры TiO₂ для рутила*

* 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.

Ранее проблема перекрытия сигналов нескольких краев решалась для электронной спектроскопии – EXELFS (Extended Electron Energy Loss Fine Structure).

Предложен алгоритм, по которому можно провести модельные расчеты края, вычесть его из экспериментального спектра. Конечный результат обрабатывать по всей длине спектра. Данный алгоритм планируется применять в дальнейшем в работе с рентгеновскими спектрами.

$$\begin{aligned}J &= J(E^{Ti}) + J(E^{Ba}) \\ J(E^{Ti}) &= J_{at}(E^{Ti}) \left(1 + \chi(E^{Ti})\right) \\ J(E^{Ba}) &= J_{at}(E^{Ba}) \left(1 + \chi(E^{Ba})\right)\end{aligned}$$



Выделенные тонкие структуры титана и кислорода в шкале энергетических потерь электронов

Выводы

В данной работе проведены расчеты модельной системы BaTiO₃. Смоделированы края поглощения Ti K, Ba L₃ и Ba L₂. Получен их суммарный сигнал. Согласно результатам расчета расстояние между краями Ti K и Ba L₃ составляет 282 эВ (8.60 – в k-пространстве), между краями Ba L₃ и Ba L₂ – 377 эВ (9.95 – в k-пространстве), что является недостаточным для корректного фурье-анализа. Для проведения количественного анализа планируется применить методы разработанные для решения аналогичной проблемы в электронной спектроскопии. Работа выполнена в рамках Государственного задания Министерства науки и высшего образования РФ №1022040600207-2.