

EXAFS спектроскопия - метод исследования локальной атомной структуры перспективных материалов

Бабанов Ю.А.



Создан метод получения структурной информации из экспериментальных данных далекой тонкой структуры рентгеновских спектров поглощения (EXAFS) на основе современных алгоритмов решения обратных некорректных задач. Метод не имеет аналогов в мировой практике. Эксперименты проводятся на установках с применением синхротронного излучения (Гренобль, Франция, ESRF; Асо, Япония, SPring-8; Берлин, Германия, BESSY-2). С использованием созданного метода получен ряд оригинальных результатов. Было установлено, что в аморфных сплавах типа металл-металлоид из-за сильного химического взаимодействия существует структурная единица типа тригональной призмы. При исследовании межфазной границы в мультислойных наноструктурах Fe/Cr определено концентрационное распределение атомов Fe и Cr.

За последние двадцать лет в мировой практике стал широко применяться новый структурный метод, основанный на анализе протяженной тонкой структуры рентгеновских спектров поглощения - EXAFS-спектроскопия. Протяженная тонкая структура спектров поглощения формируется в результате интерференции фотоэлектронных волн, рассеянных "однократно" точечными рассеивателями (атомами). Структурной задачей является определение расположения рассеивателей в пространстве по данным интерференционной картины.

В настоящее время метод успешно применяется при исследовании ближнего порядка газов, жидкостей и твердых тел в кристаллическом и аморфном состояниях, субмикронных частиц, фольг, наногетероструктур, массивных образцов и атомной структуры поверхности. Ряд уникальных особенностей метода EXAFS позволяет получать структурную информацию в случаях, когда другие методы бессильны.

Традиционно при получении структурной информации из EXAFS спектров используется метод Фурье-преобразования. Однако Фурье-преобразование является обратным при выполнении следующих условий: ядро интегрального уравнения, которое связывает исходные экспериментальные данные со структурной парной корреляционной функцией $g(r)$, долж-

но описываться синус функцией; а интервал, на котором определена интерференционная функция, должен быть бесконечным. Для интегрального EXAFS уравнения Фурье преобразование не является обратным. Во-первых, ядро этого уравнения не описывается одной синус-функцией, а имеет более сложный вид. Во-вторых, в силу приближенного характера теории метода приходится ограничивать интервал интегрирования в обратном k -пространстве, на котором задана интерференционная функция, не только со стороны больших k , но и со стороны малых k . Потеря этой информации в случае аморфных систем настолько существенна, что возник определенный пессимизм в отношении возможности структурных исследований таких систем методом EXAFS. Все это справедливо для простейших однокомпонентных систем.

Ситуация становится еще более сложной для многокомпонентных систем. Если система состоит из атомов n различных сортов, то в наблюдаемый EXAFS-спектр атомов определенного сорта вносят вклад n различных пар атомов (n различных парных корреляционных функций $g_{ij}(r)$), а всего в системе $N=n(n+1)/2$ независимых пар. Совершенно очевидно, что возникает необходимость проведения дополнительных независимых экспериментов. В математическом плане задача комбинирования данных EXAFS с

данными других структурных (например, дифракционных) методик сводится к решению системы линейных интегральных уравнений.

Получение структурной информации из данных EXAFS как для однокомпонентных, так и для

многокомпонентных систем, является обратной некорректной задачей, что требует использования специальных математических методов (например, метода регуляризации Тихонова).

Аморфные металлические сплавы

Аморфные металлические сплавы (АМС) обладают выдающимися технологическими свойствами, такими как высокая пластичность в сочетании с твердостью, низкая коэрцитивная сила, необычайно высокое сопротивление коррозии, радиационная стойкость и т.д..

При исследовании АМС Fe-B были впервые использованы данные новой комбинации – EXAFS на краю Fe и рентгеновская дифракция. В результате решения системы двух интегральных уравнений были определены парциальные функции Fe-Fe и Fe-B. Было показано, что

большинство атомов бора окружено 6 атомами железа. Преимущественными конфигурациями в этом случае являются тригональная призма и октаэдр. Эти структурные блоки, соединяясь между собой так, что атомы металла принадлежат двум и более блокам, образуют атомную структуру аморфного сплава Fe-B. Среднее число ближайших соседей атомов железа было равно 12. Преимущественная конфигурация – икосаэдр. Для этой конфигурации характерно наличие оси 5 порядка. Напомним, что ось 5-го порядка запрещена для идеальных кристаллов.

Мультислойные металлические наноструктуры

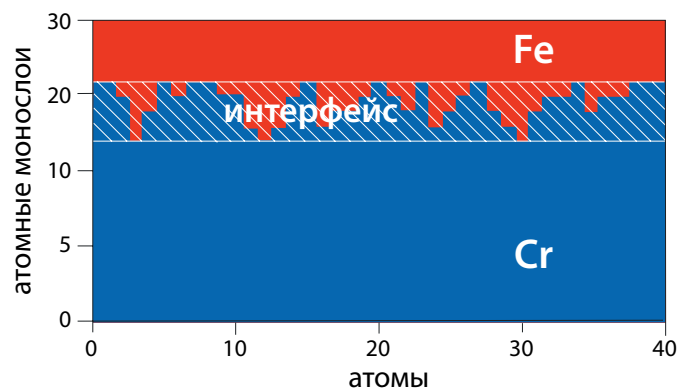
Свойства мультислойных магнитных наноструктур во многом зависят от структуры межслойных границ (интерфейсов).

В работах [4,5] была поставлена и решена задача послойного напыления в условиях сверхвысокого вакуума и *in situ* EXAFS исследования после напыления каждого нового атомного слоя в наногетероструктуре Cr/Fe. Полученные L-спектры Fe и Cr, аналогично спектрам других 3d-металлов, сильно перекрываются, что приводит к существенному усложнению ядра интегрального уравнения, описывающего эти спектры. Для случая перекрывающихся L-спектров была разработана новая методика анализа спектров поглощения с целью получения структурной информации.

По этой методике можно определить атомную структуру интерфейса мультислойных пленок Cr/Fe и его толщину.

Предложен алгоритм нахождения из EXAFS спектров концентрационного распределения атомов Fe и Cr в межслойной области.

Предложен алгоритм нахождения из EXAFS спектров концентрационного распределения атомов Fe и Cr в межслойной области.



На рисунке представлено типичное распределение атомов Cr и Fe в межслойной границе эпитаксиальной пленки Cr/Fe.

¹ Babanov Yu., Kiryanov S., Sidorenko A., Romashev L., Vyalikh D., Molodtsov S., Guentherodt G., Ruediger U., Dedkov Yu., Fonine Yu., Baberschke K., Wende H., Idzerda Y.U. Overlapping XAFS L-spectra of 3d metals: a new application of regularization method // *Physica Scripta*. T115 (2005) 194.

² Kiryanov S.A., Sidorenko A.F., Babanov Yu.A., Romashev L.N., Milyaev M.A., Kuznetsov V.L., Ustinov V.V., Vyalikh D.V. TEY study of local atomic structure of interfaces in Fe/Cr multilayer prepared *in situ* at synchrotron BESSY II // *NIM A*. 543 (2005) 196.

³ Babanov Yu.A., Vasin V.V., Ageev A.L., Ershov N.V. A new interpretation of EXAFS spectra in real space // *Phys. Stat. Sol.(b)* 105 (1981) 747.

⁴ Babanov Yu.A., Ershov N.V., Shvetsov V.R., Serikov A.V., Ageev A.L., Vasin V.V. A new method of determining partial radial distribution functions for amorphous alloys // *J. of Non-Cryst. Sol.* 79 (1986) 1.

⁵ Babanov Yu.A., Shvetsov V.R., Sidorenko A.F. Atomic structure of binary amorphous alloys by combined EXAFS and X-ray scattering // *Physica B*. 208 & 209 (1995) 375.