

Новый метод обработки спектров EXAFS в исследовании современных материалов и биологических молекул

М. Д. Шарков, А. В. Боббль, М. Е. Бойко, Е. М. Ершенко, С. Г. Конников, К. Ю. Погребицкий

ФТИ им. А. Ф. Иоффе, Санкт-Петербург, Россия
тел: (812) 292-79-85, эл. почта: mischar@mail.ioffe.ru

Разработана новая методика анализа спектров EXAFS (Extended X-Ray Absorption Fine Structure = дальняя тонкая структура спектров рентгеновского поглощения), состоящая из трех операций - определения энергии края поглощения, выделения осциллирующей составляющей спектра EXAFS и Фурье-преобразования этих осцилляций. На основе вариационного принципа построена процедура выделения осцилляций спектра [1]. Определены диапазоны нахождения нижней и верхней границ окна Фурье-преобразования осцилляций [2].

Применение разработанного метода

Проведен анализ спектра EXAFS человеческого белка церулоплазмينا. Сформулирована гипотеза о структуре белка в окрестности атомов Cu [2, 3]. Подтверждена гипотеза [4] о существовании в матрице белка треугольника из атомов Cu.

Проанализирован спектр EXAFS образца титаната лития $\text{Li}_4\text{Ti}_5\text{O}_{12}$. Установлено присутствие порядка 50% TiO_2 в составе образца [2].

Проанализированы спектры EXAFS двух образцов трифилита LiFePO_4 . Определены тенденции к изменению компонентного состава в образце трифилита.

Литература

1. М. Д. Шарков, К. Ю. Погребицкий, С. Г. Конников, ЖТФ 77, 8, (2007).
2. М. Д. Шарков, К. Ю. Погребицкий, М. Е. Бойко, ЖТФ, в печати (2011).
3. К. Ю. Погребицкий, М. Д. Шарков, ФТП 44 (6), (2010).
4. P. Bielli, L. Calabrese, Cell. Mol. Life Sci. 59, 1413 (2002).