

Выделение плавной составляющей EXAFS-спектра с помощью вариационного принципа

М. Д. Шарков

Физико-технический институт им. А. Ф. Иоффе РАН, С.-Петербург, Россия

Одним из важнейших шагов при обработке EXAFS-спектра $\mu(E)$ (где E — энергия бомбардирующих образец фотонов, а μ — коэффициент их поглощения) является выделение усредненного неперiodического фона $\mu_0(E)$. В настоящее время используется ограниченное количество методик обработки EXAFS-спектра, основанных преимущественно на его аппроксимации монотонной кривой известного типа через некоторый набор точек.

Есть, однако, и другой подход к вопросу выделения фона, основанный на поиске функции, минимизирующей определенный функционал, аргументом которого является функция $\mu_0(E)$, определяющая фон. Выбираются следующие критерии построения варьируемого функционала: близость фона к исходной EXAFS-кривой и ограничение искомой функции по величине производной, соответствующее требованию плавности фона. Поставленная вариационная задача эквивалентна решению дифференциального уравнения второго порядка для функции $\mu_0(E)$.

Такой способ построения $\mu_0(E)$ эффективен и прост для реализации; также он допускает несложную модификацию, позволяющую учитывать реальные экспериментальные данные при выделении фона. Наконец, есть возможность своего рода настройки кривой $\mu_0(E)$, поскольку имеются дополнительные определяющие $\mu_0(E)$ параметры. Основным фактором, влияющим на поведение фона EXAFS-кривой, является соотношение между вкладами в варьируемый функционал двух его главных компонент, отвечающих за близость $\mu_0(E)$ к $\mu(E)$ и плавность фона.