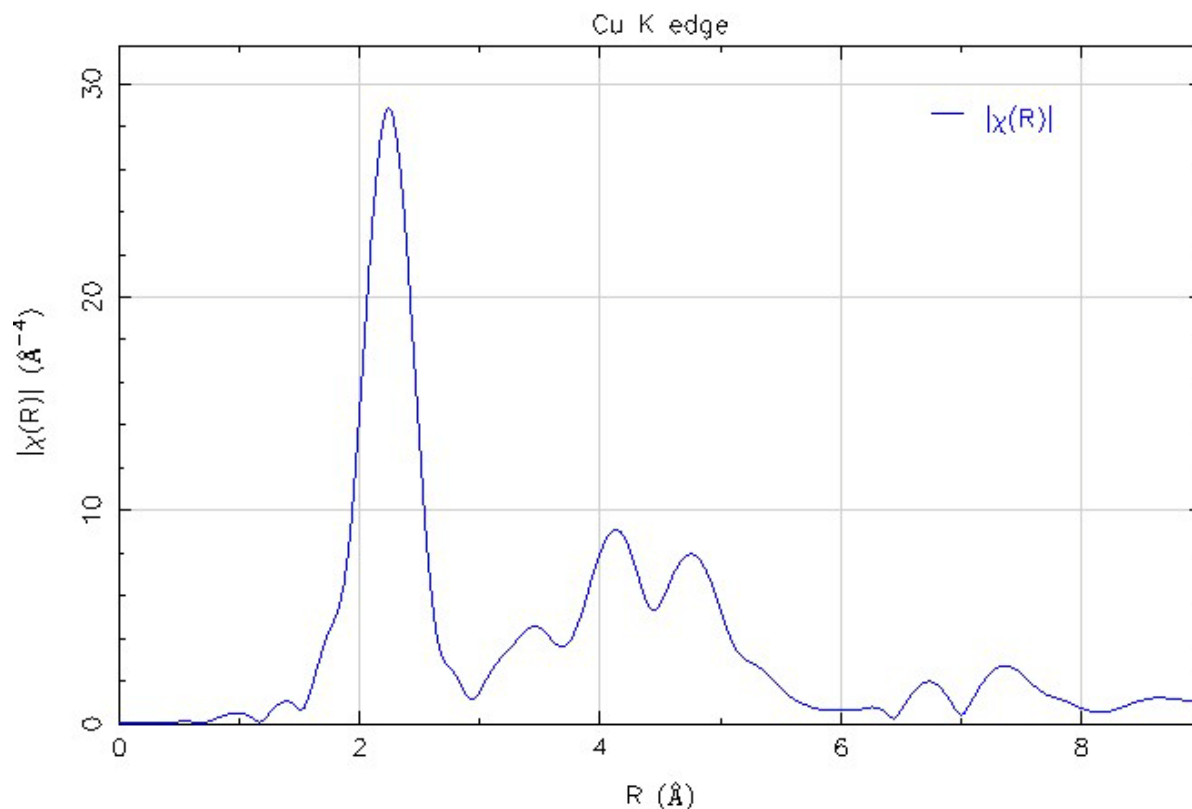


EXAFS数据处理



Fourier变换-R空间



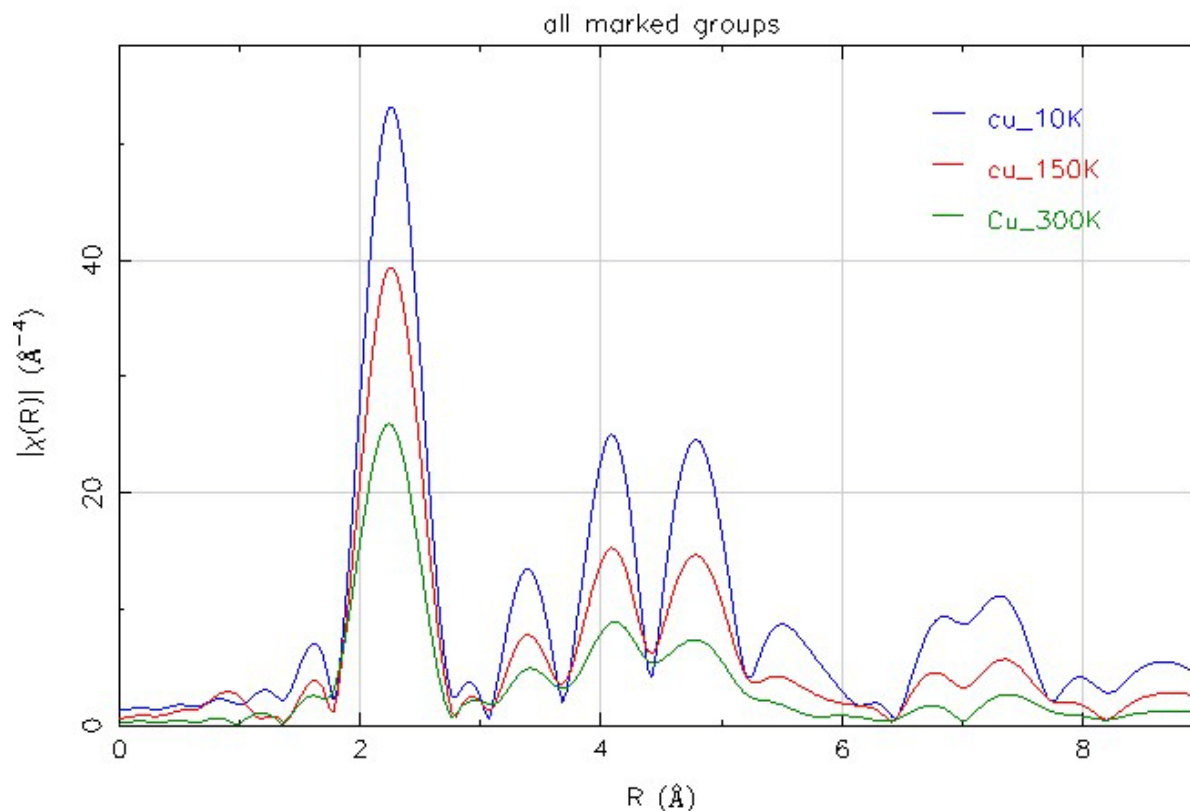
由于没有考虑相位修正，这里的R值与实际的键长相差0.2-0.5 Å。



EXAFS数据处理



Fourier变换-R空间

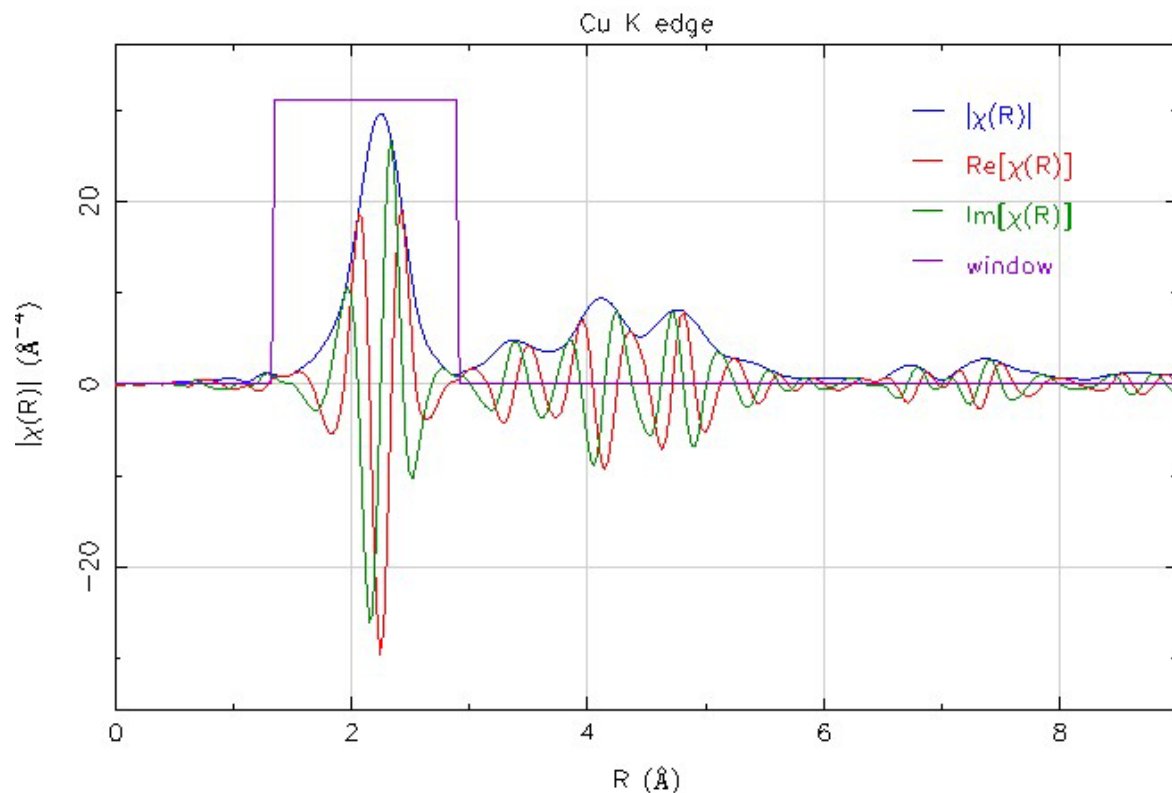
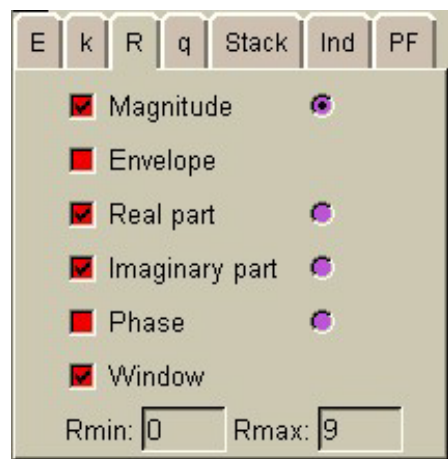


不同温度下Cu foil K边EXAFS在R空间的变化

EXAFS数据处理



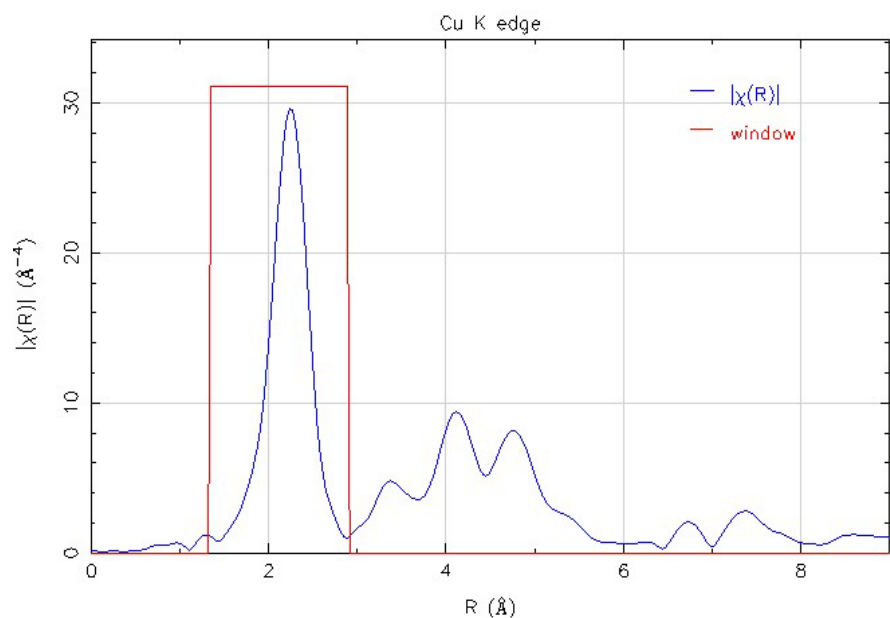
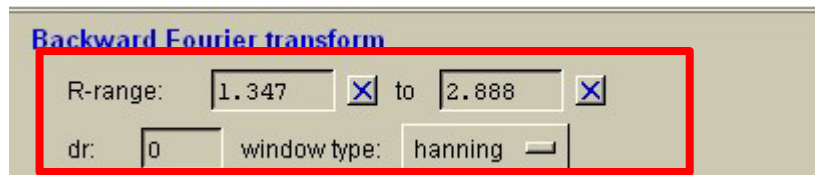
Fourier变换-R空间



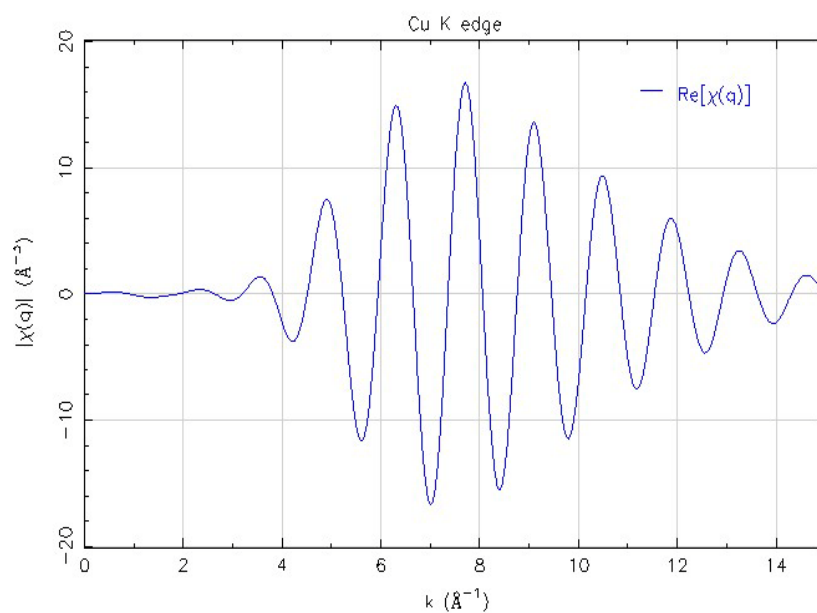
EXAFS数据处理



反Fourier变换



窗函数



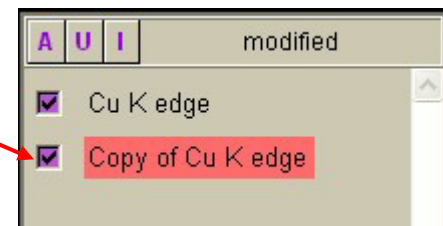
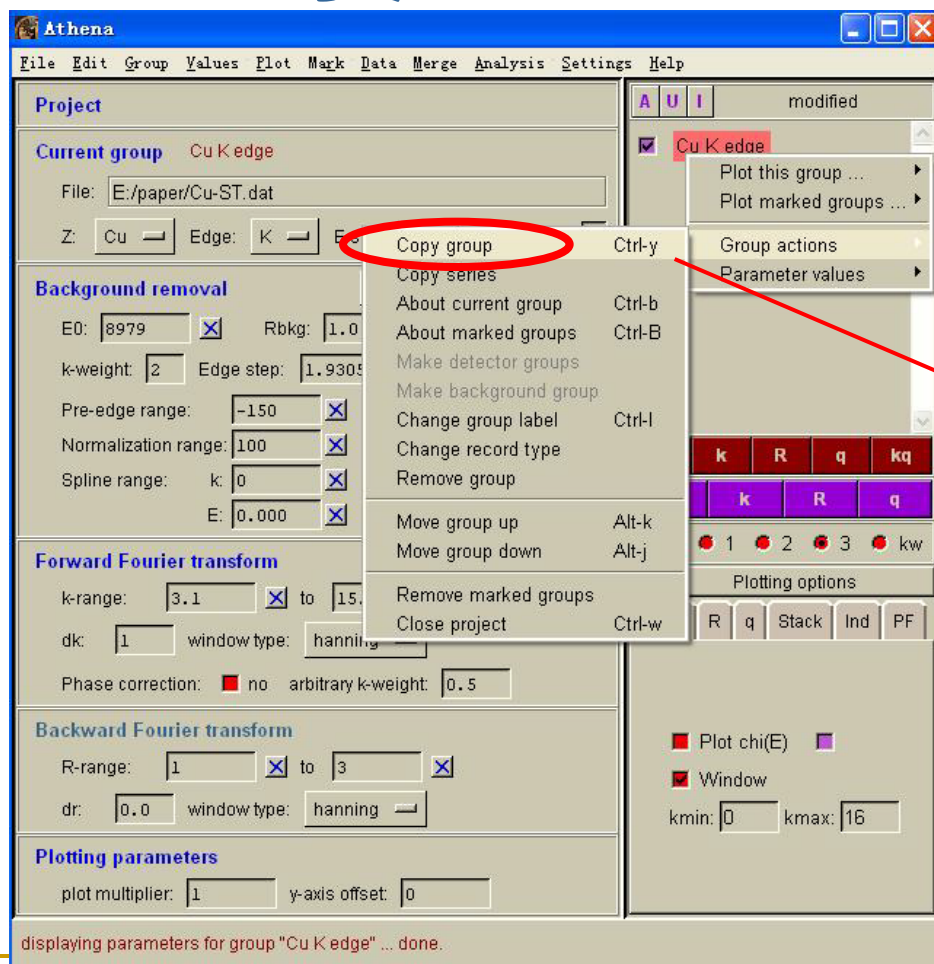
q空间



EXAFS数据处理



技巧一：复制数据

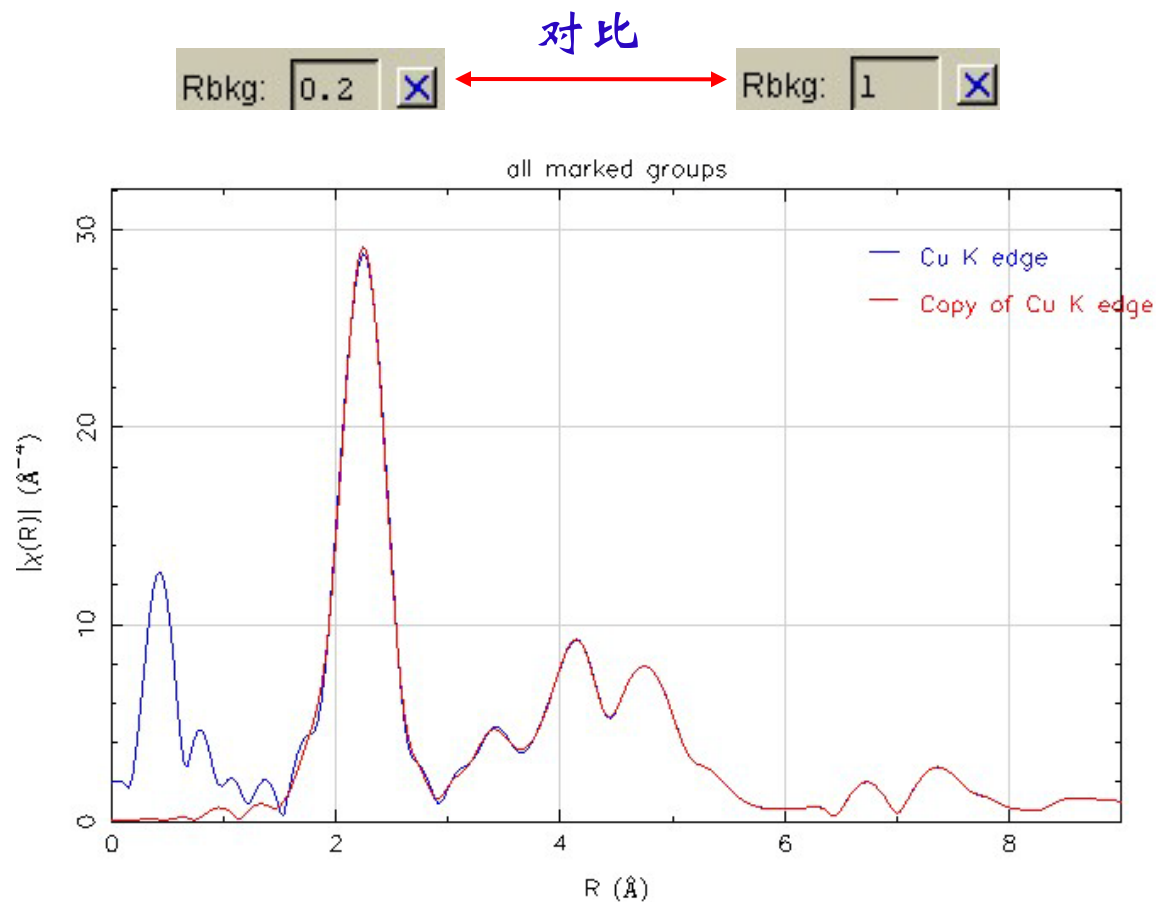


北京同步辐射装置EXAFS谱分析讲习班，2011年12月7-8日，北京

EXAFS数据处理



技巧一：复制数据

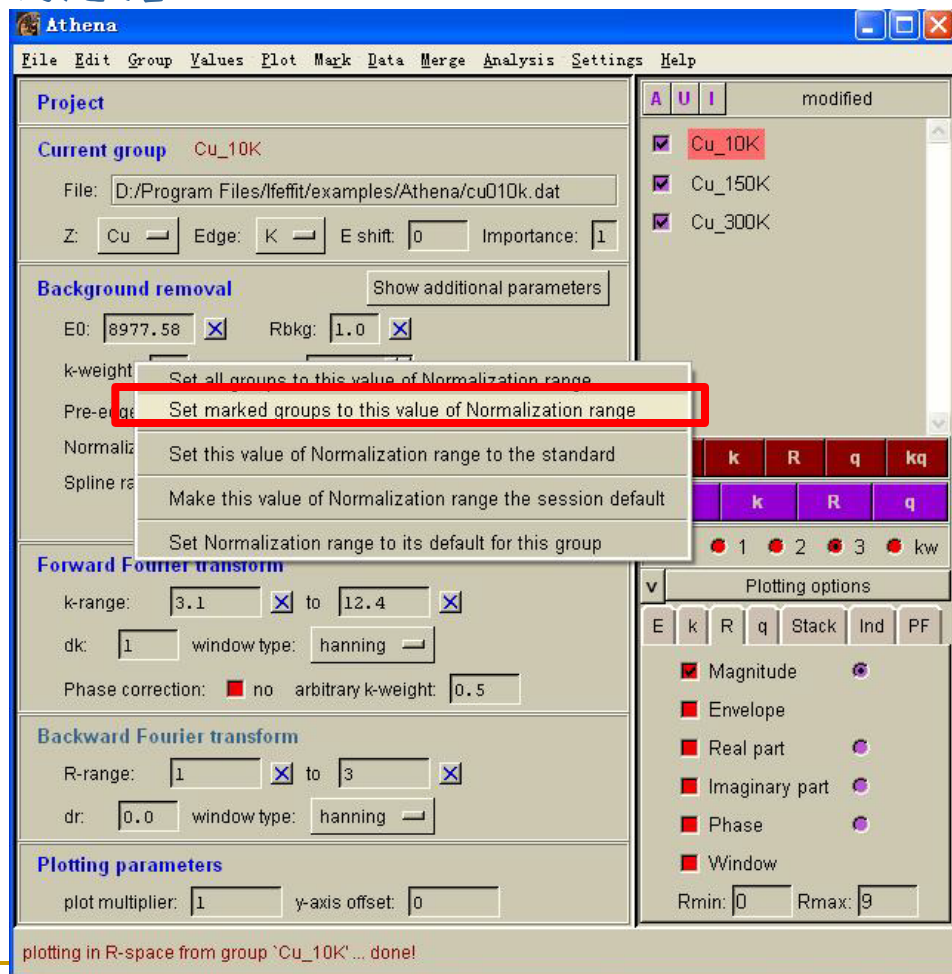


EXAFS数据处理



技巧二：批量处理多组数据

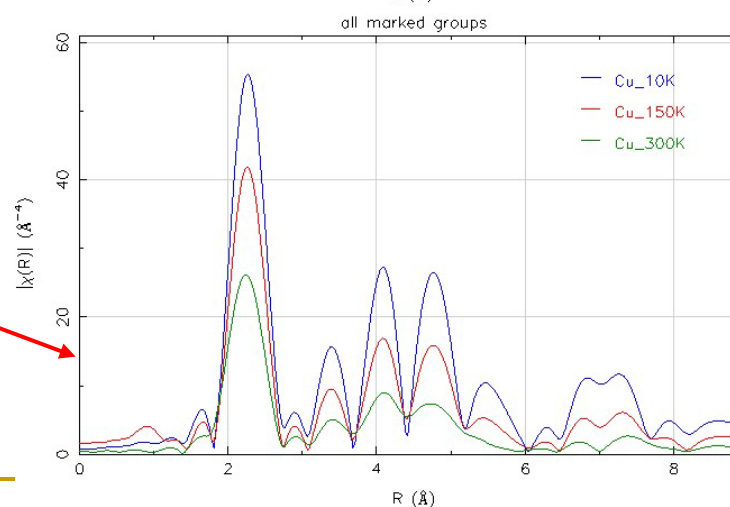
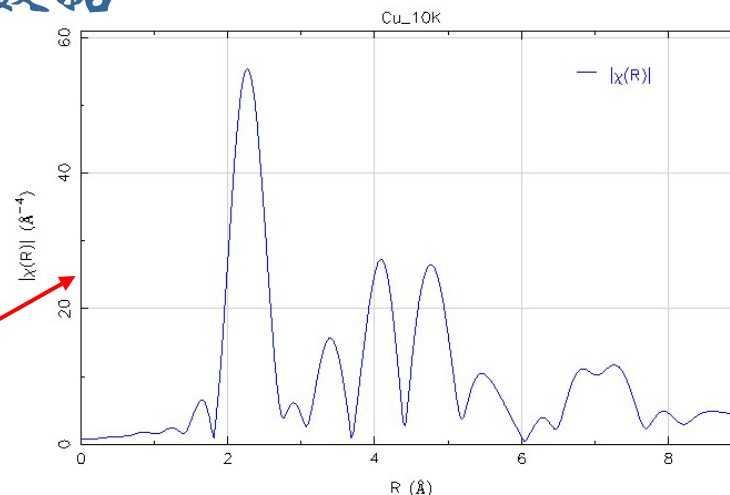
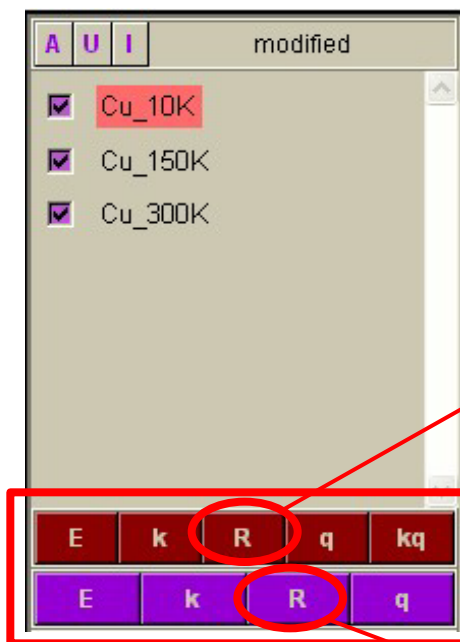
多组数据进行对比时，所有参数的设置尽量一致，例如Rbkg参数，归一化范围，样条函数范围，Fourier变换k的范围，窗函数等等。可以选择其中的一个group作为代表，优先处理，然后其他的group参数设置跟它一致。



EXAFS数据处理



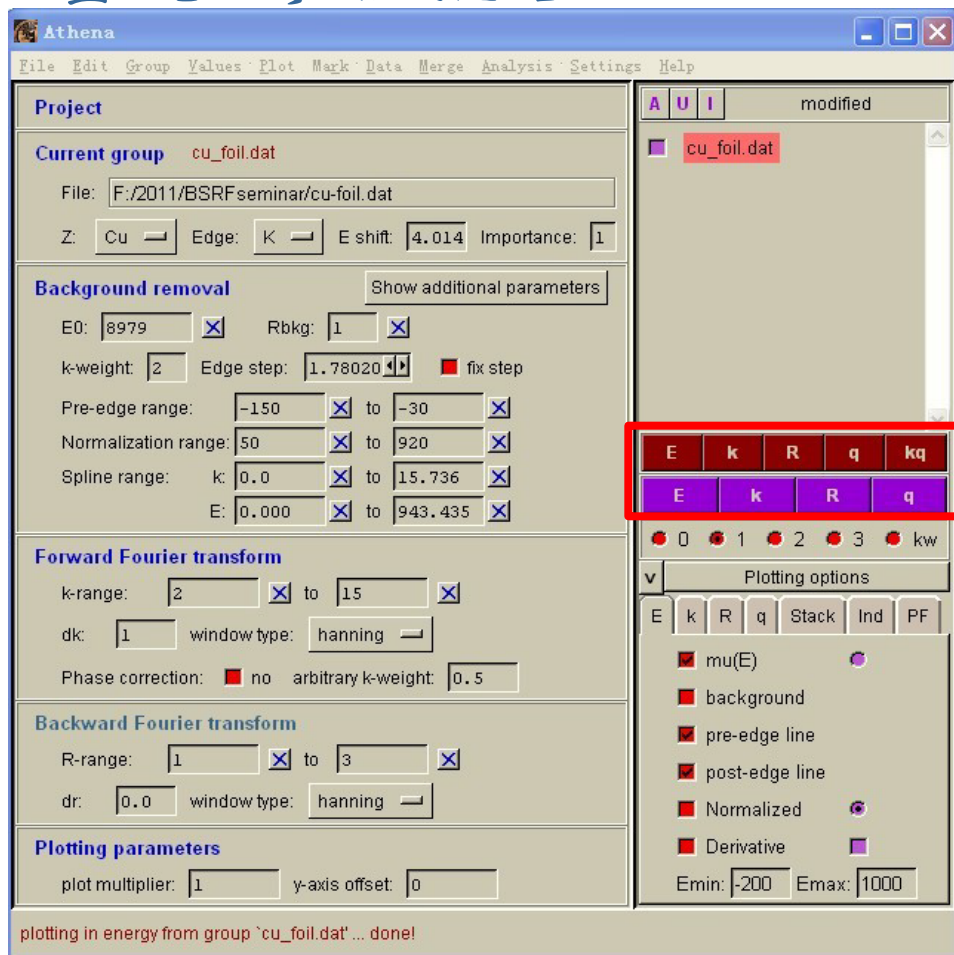
技巧二：批量处理多组数据



EXAFS数据处理



技巧二：批量处理多组数据

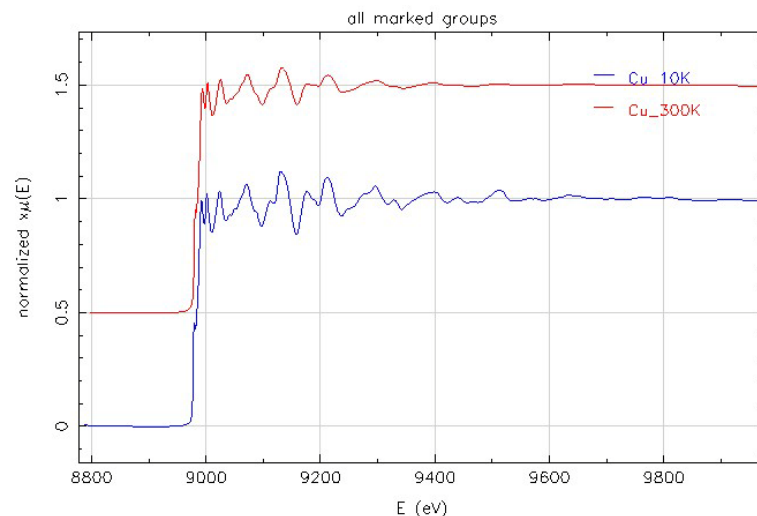
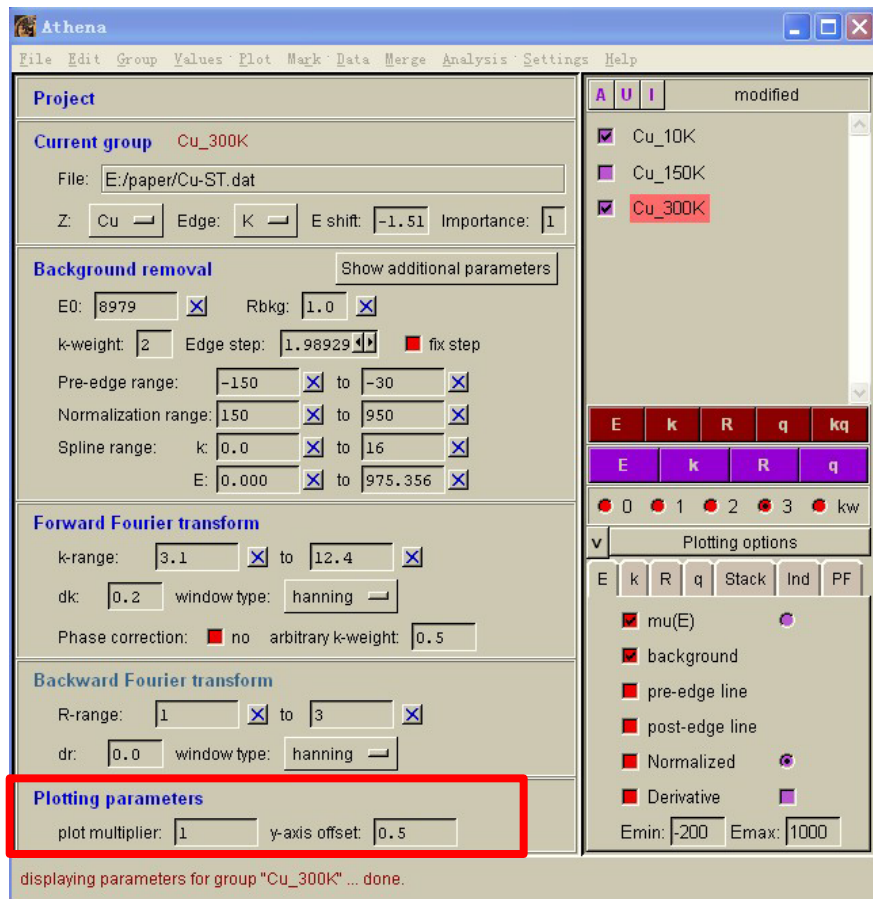


北京同步辐射装置EXAFS谱分析讲习班，2011年12月7-8日，北京

Athena图形显示



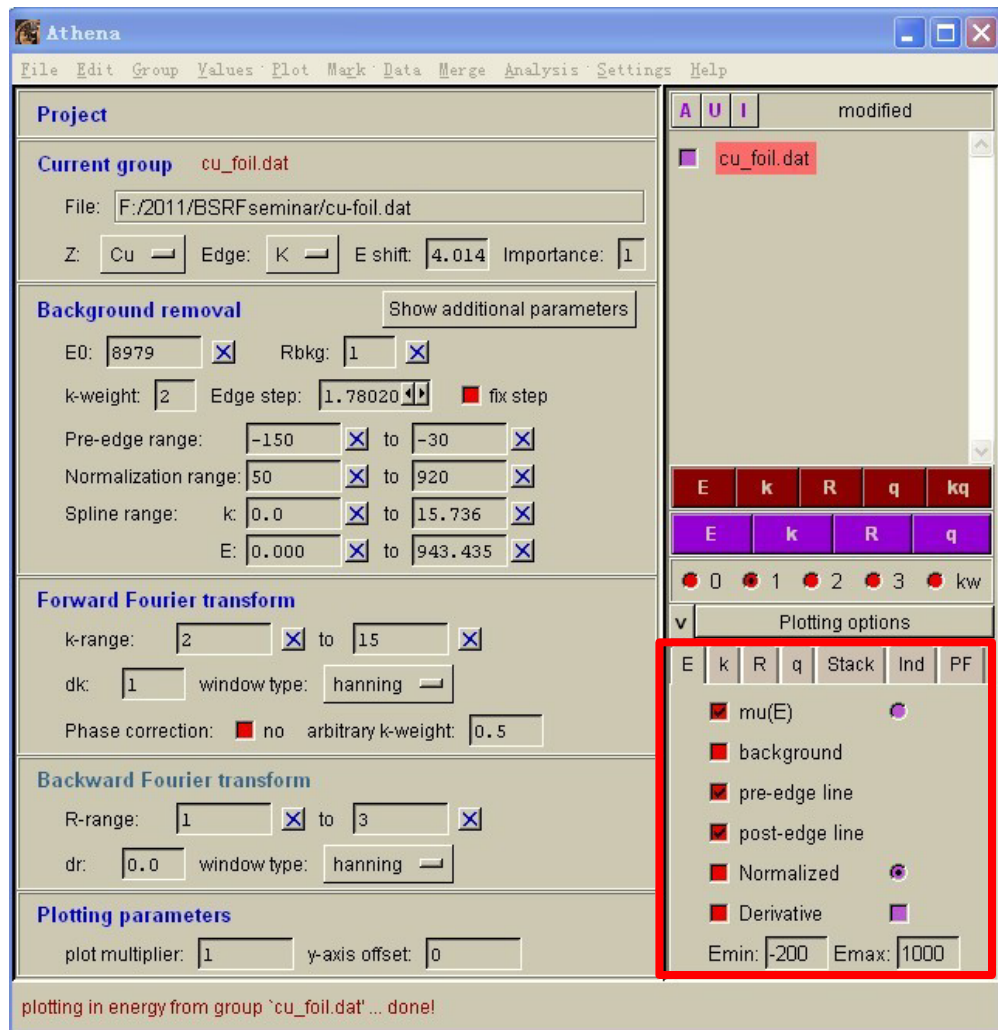
绘图参数 (一)



Athena图形显示



绘图参数 (二)



北京同步辐射装置EXAFS谱分析讲习班, 2011年12月7-8日, 北京

Athena图形显示



E	k	R	q	Stack	Ind	PF
<input checked="" type="checkbox"/> mu(E)	<input type="radio"/>					
<input checked="" type="checkbox"/> background						
<input type="checkbox"/> pre-edge line						
<input type="checkbox"/> post-edge line						
<input type="checkbox"/> Normalized	<input type="radio"/>					
<input type="checkbox"/> Derivative	<input type="radio"/>					
Emin: -200						Emax: 1000

E	k	R	q	Stack	Ind	PF
<input type="checkbox"/> Plot chi(E)	<input type="radio"/>					
<input checked="" type="checkbox"/> Window						
kmin: 0						kmax: 13

E	k	R	q	Stack	Ind	PF
<input checked="" type="checkbox"/> Magnitude	<input type="radio"/>					
<input type="checkbox"/> Envelope						
<input type="checkbox"/> Real part	<input type="radio"/>					
<input type="checkbox"/> Imaginary part	<input type="radio"/>					
<input type="checkbox"/> Phase	<input type="radio"/>					
<input type="checkbox"/> Window						
Rmin: 0						Rmax: 9

E	k	R	q	Stack	Ind	PF
<input type="checkbox"/> Magnitude	<input type="radio"/>					
<input type="checkbox"/> Envelope						
<input checked="" type="checkbox"/> Real part	<input type="radio"/>					
<input type="checkbox"/> Imaginary part	<input type="radio"/>					
<input type="checkbox"/> Phase	<input type="radio"/>					
<input type="checkbox"/> Window						
qmin: 0						qmax: 15

E	k	R	q	Stack	Ind	PF
Set y-offset values for all MARKED groups						
Initial value		0				
Increment		0				
Set y-offset values						
Reset						

E	k	R	q	Stack	Ind	PF
Plot indicators						
<input checked="" type="checkbox"/> Display indicators						
1:	R				<input checked="" type="checkbox"/>	
2:	R				<input checked="" type="checkbox"/>	
3:	R				<input checked="" type="checkbox"/>	
4:	R				<input checked="" type="checkbox"/>	
5:					<input checked="" type="checkbox"/>	

E	k	R	q	Stack	Ind	PF
Point finder						
The last plot was in R						
X:		<input checked="" type="checkbox"/>	find Y			
Y:		<input checked="" type="checkbox"/>	find X			
Clear						

Athena图形显示

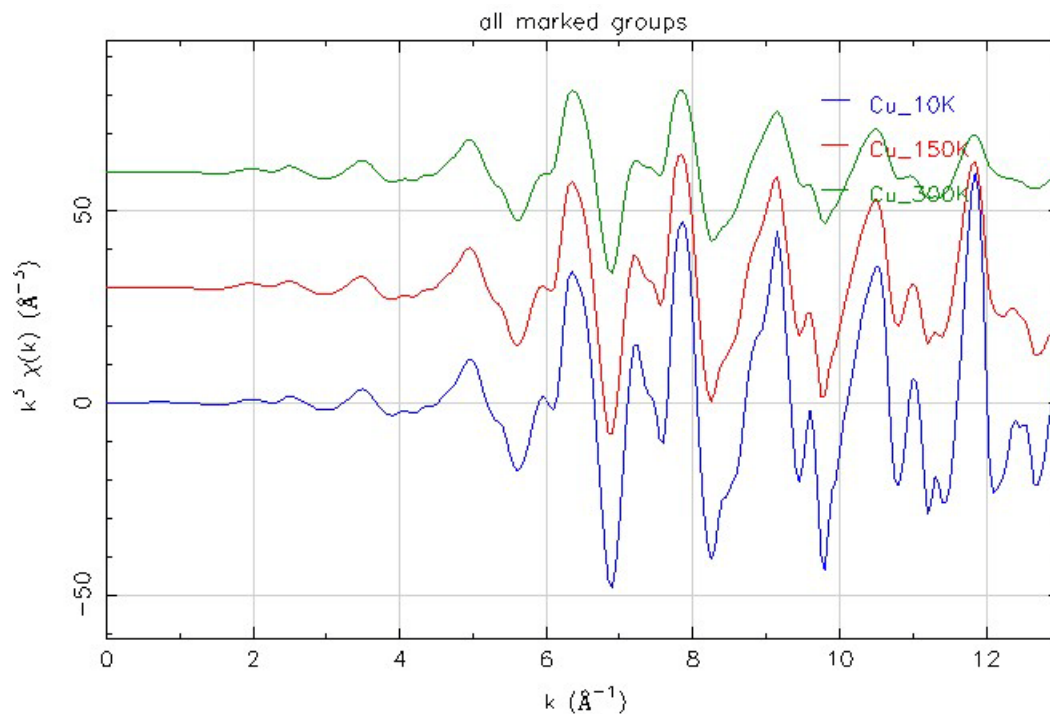


E k R q Stack Ind PF

Set y-offset values for all MARKED groups

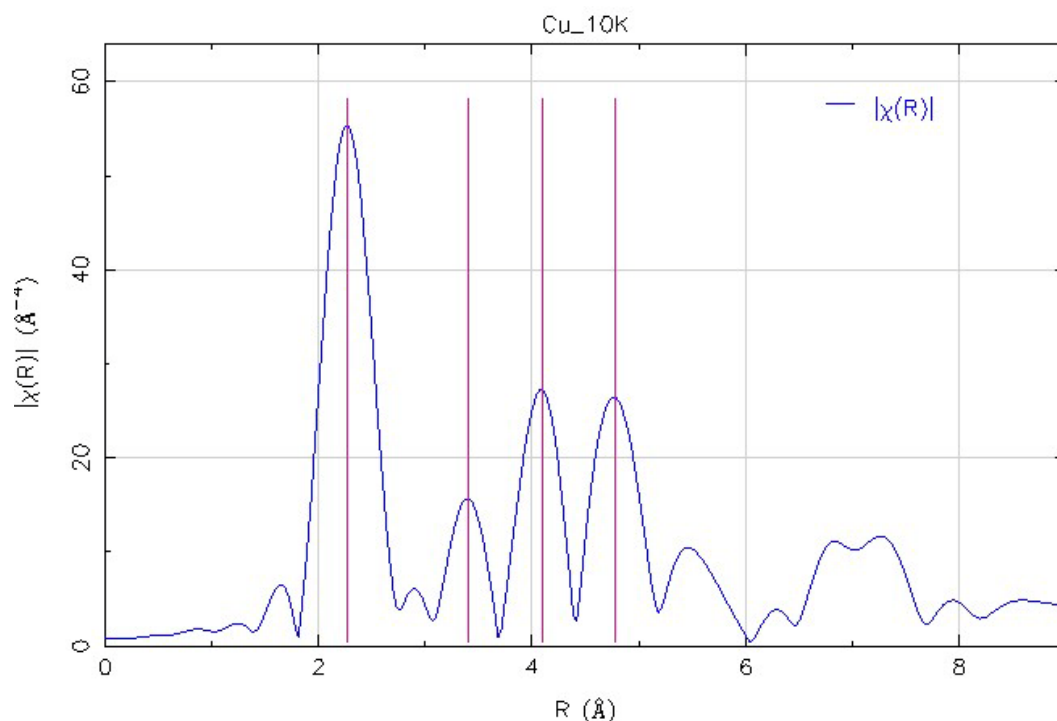
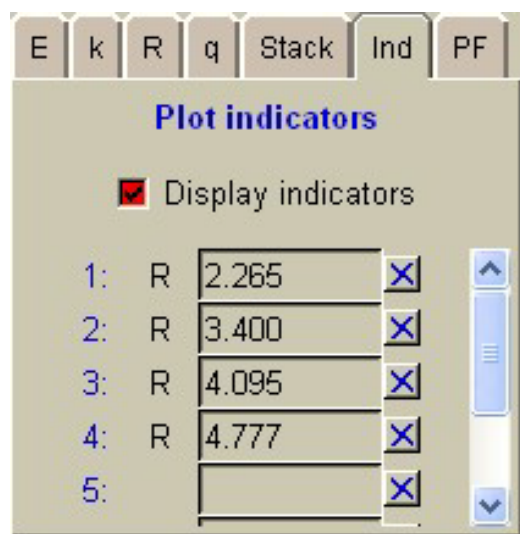
Initial value

Increment



产生堆叠效果

Athena图形显示



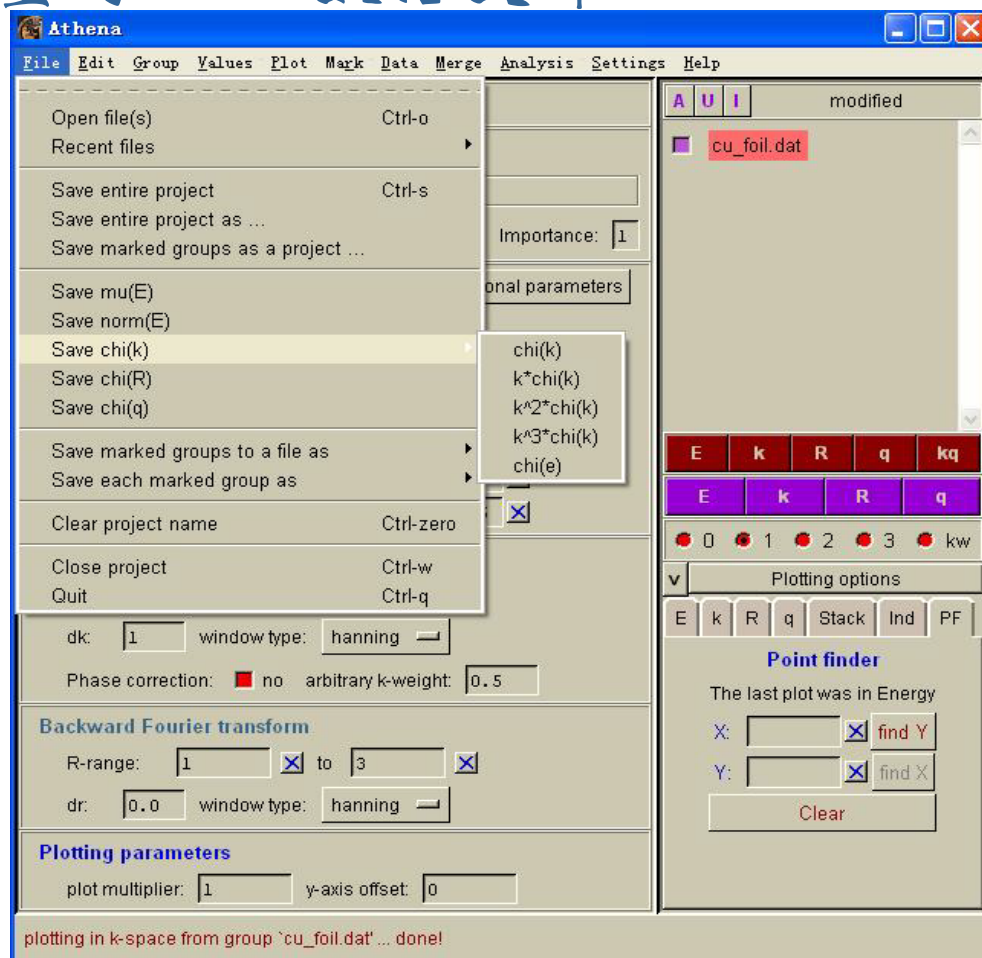
标示特殊位置

保存数据



可以保存多种类型的XAFS数据文件

- ◆ 工程文件.prj
- ◆ $\mu(E)$, $\text{norm}(E)$
- ◆ $\chi(k)$, $\chi(R)$, $\chi(q)$



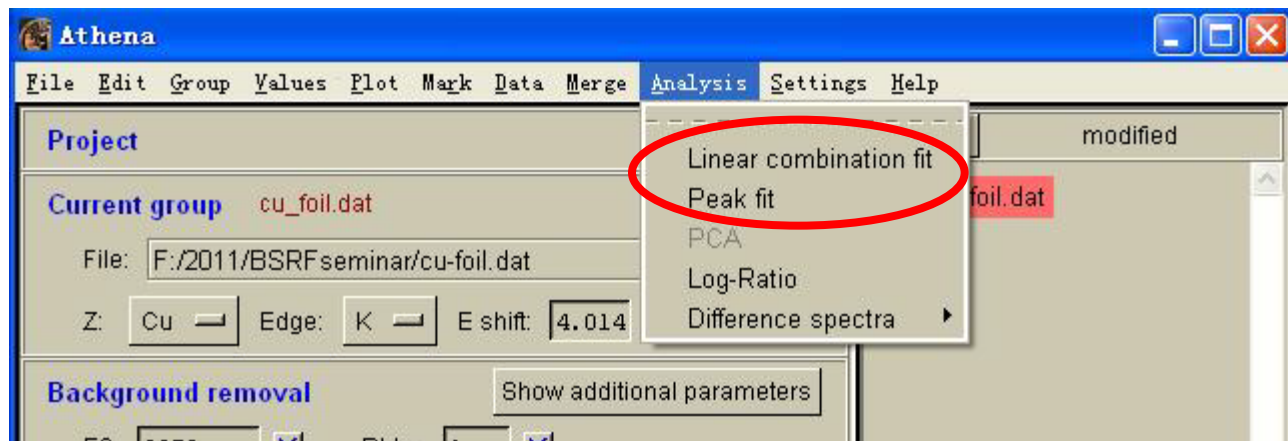
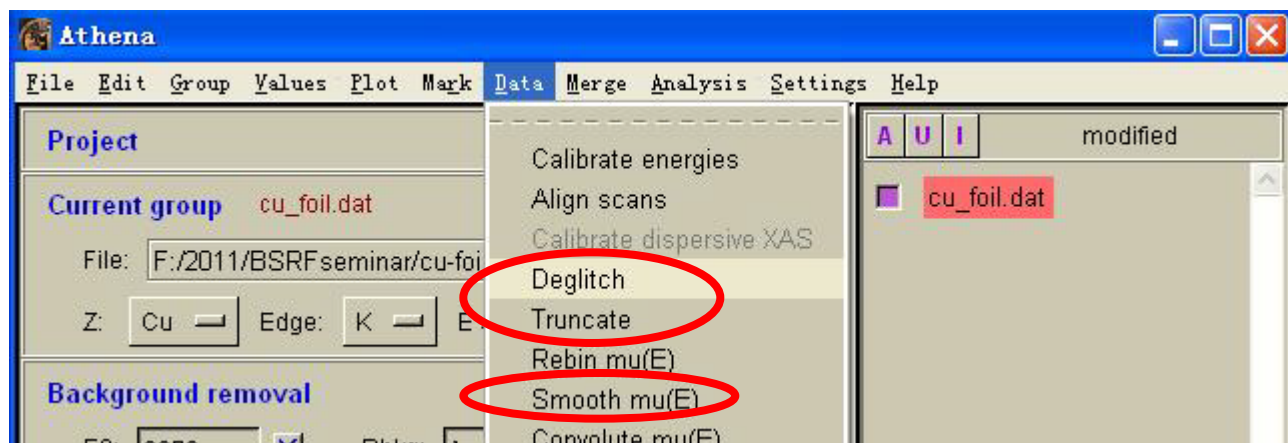
其他功能



- ◆ 去除glitch
- ◆ 截取数据
- ◆ 平滑数据
- ◆ 线性组合分析
- ◆ 边前峰的分峰拟合
- ◆



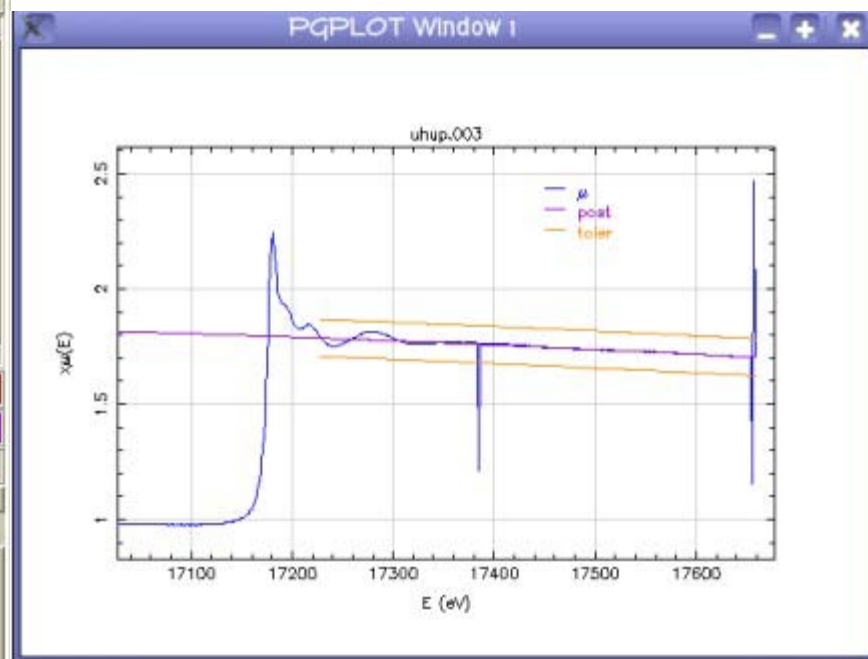
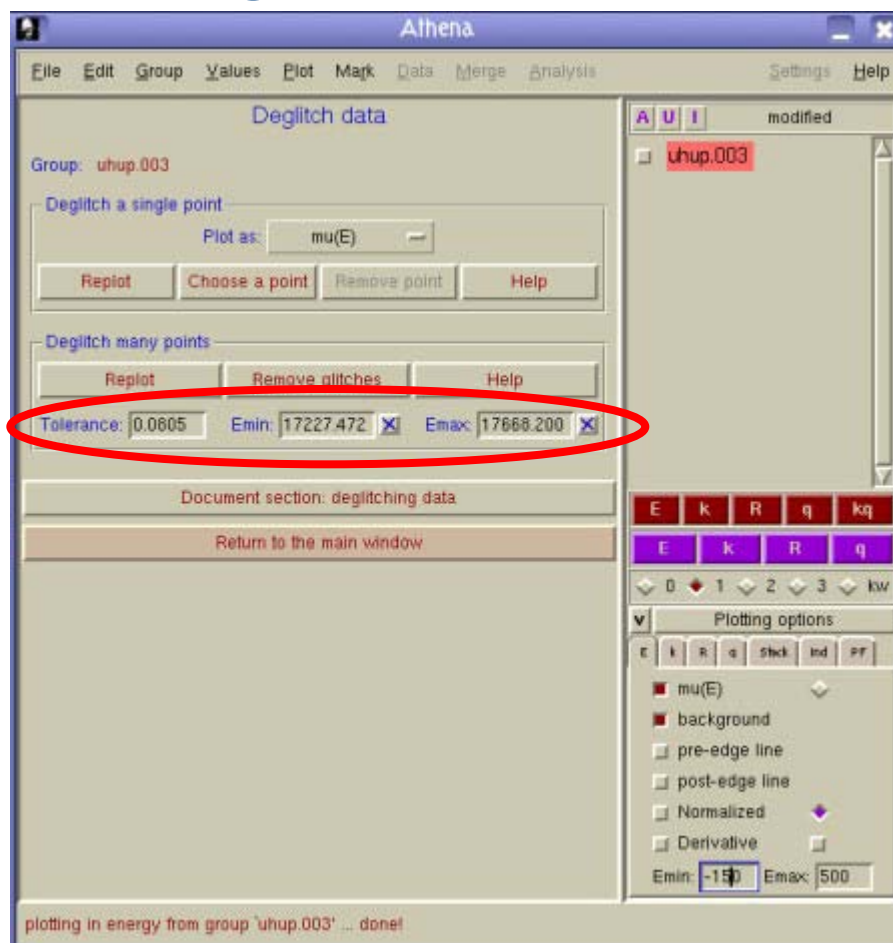
其他功能



其他功能



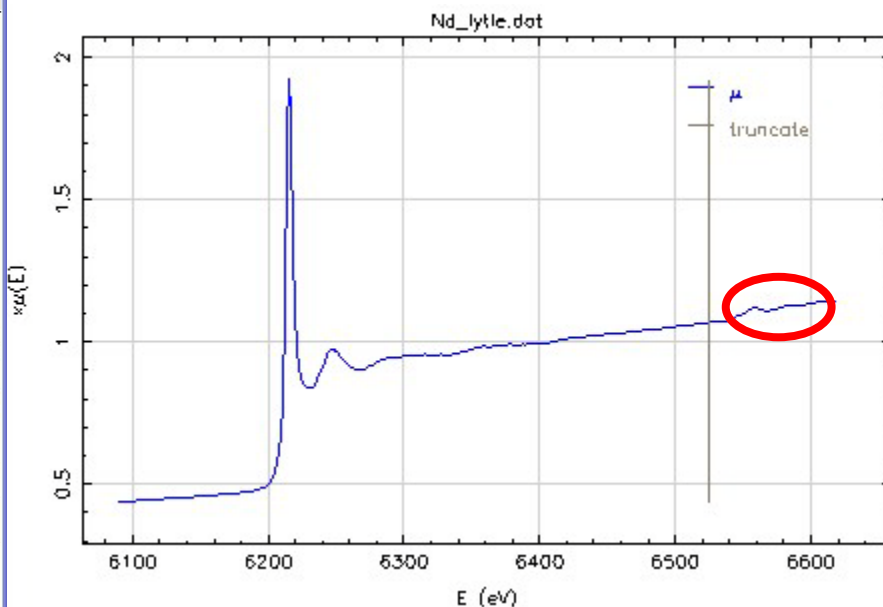
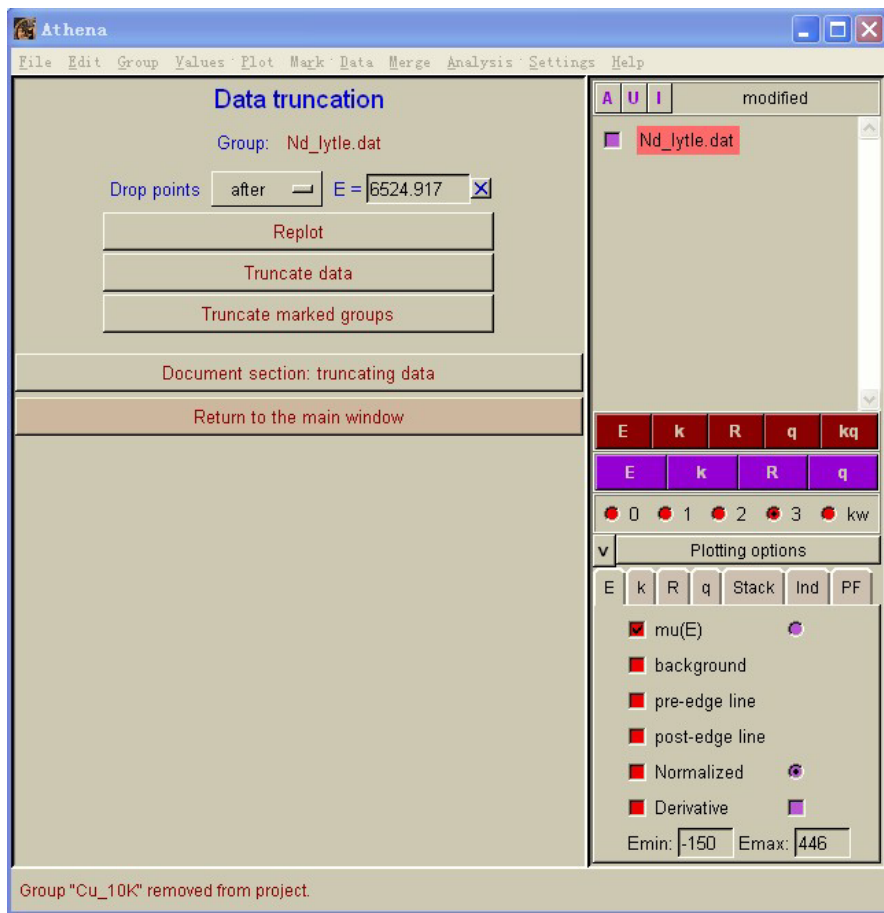
去除glitch



其他功能



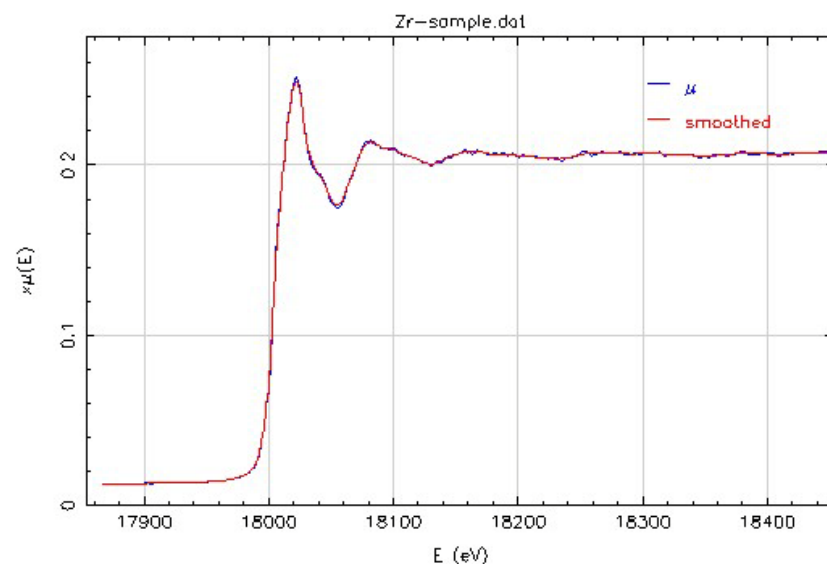
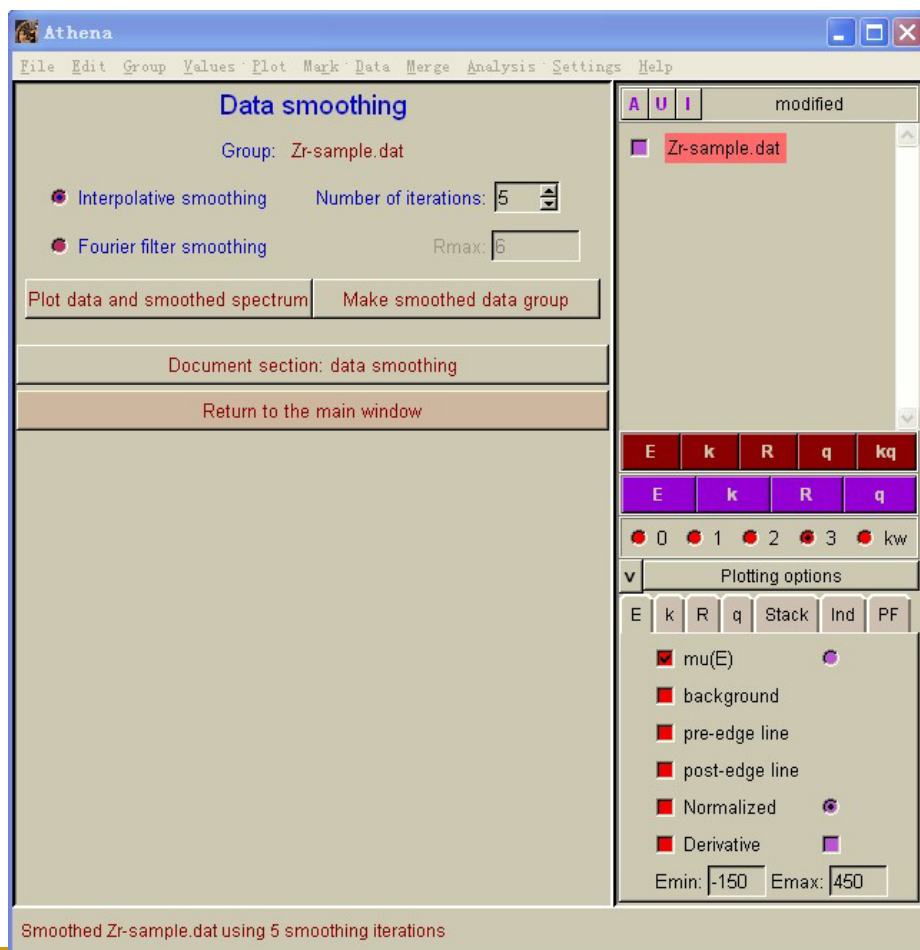
截取数据



其他功能



平滑数据

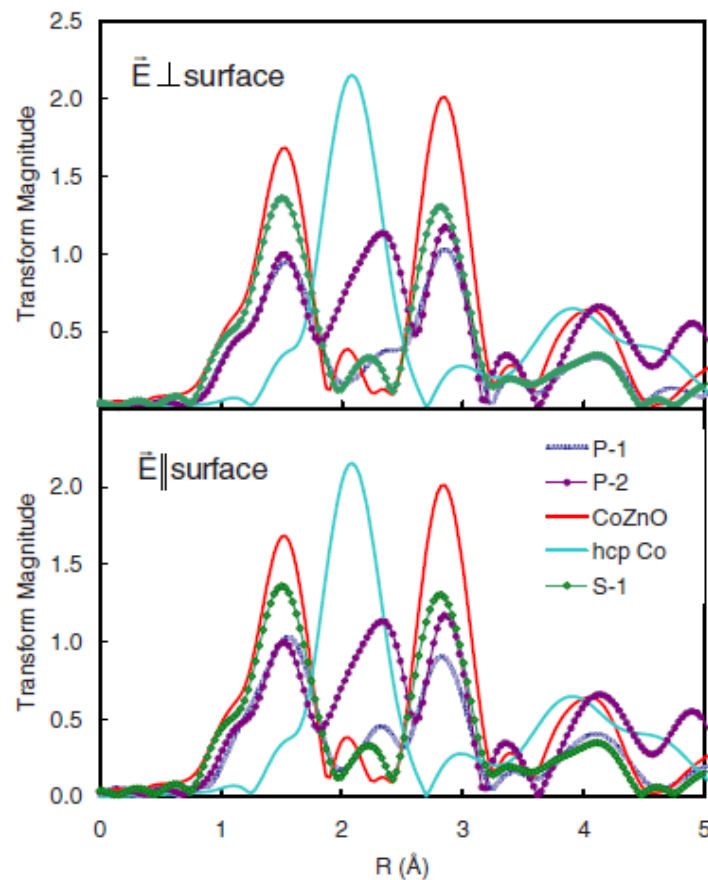
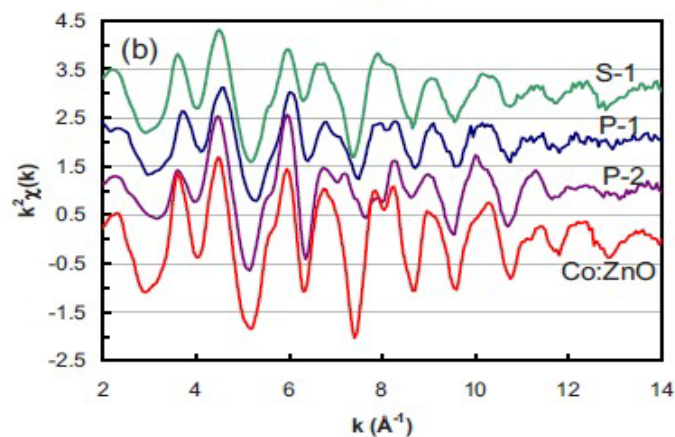
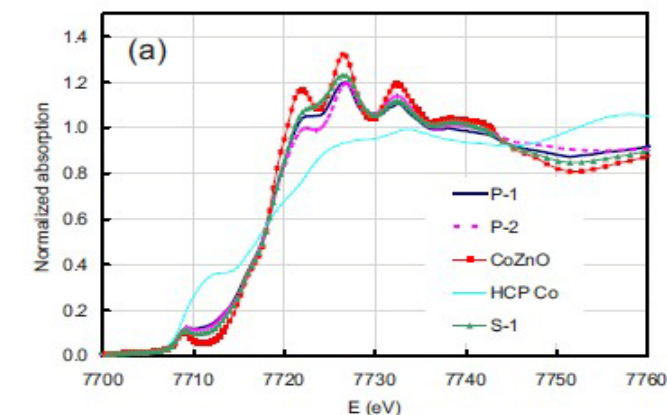


北京同步辐射装置EXAFS谱分析讲习班，2011年12月7-8日，北京

应用举例



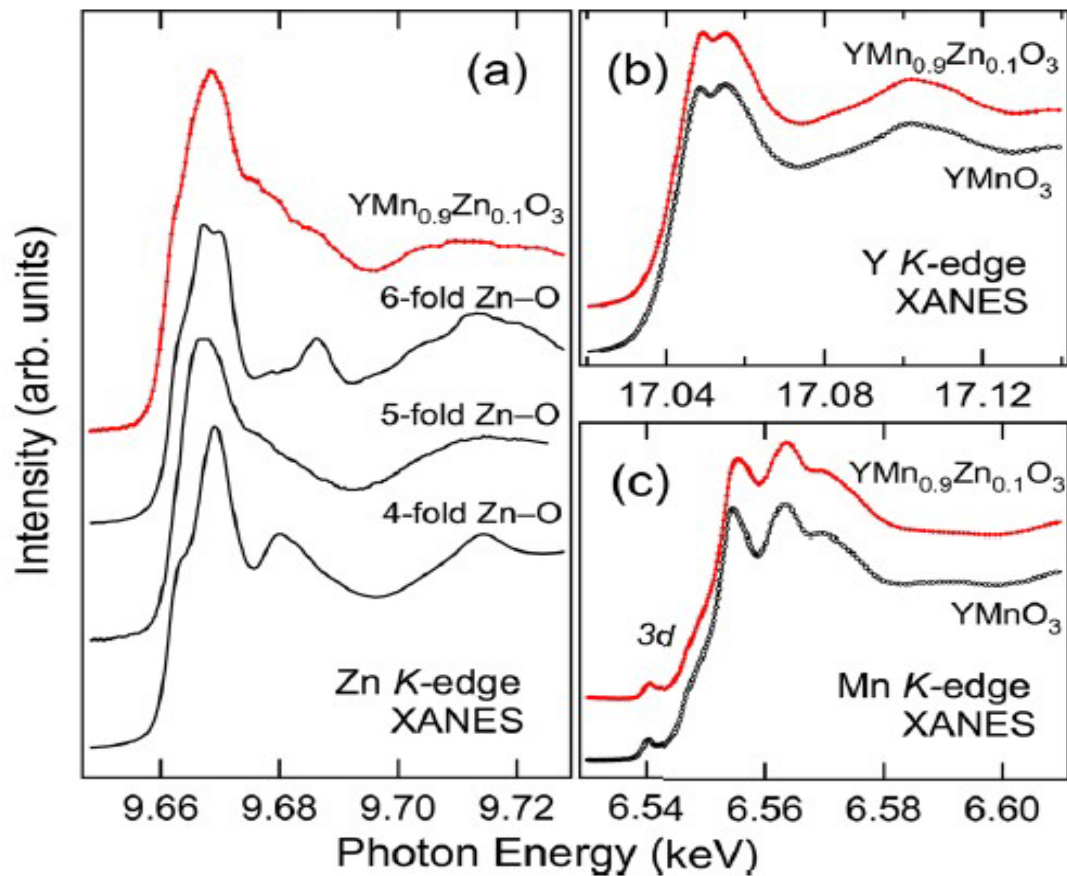
1 Co doped ZnO thin films



应用举例



2 Zn掺杂的多铁材料 YMnO_3



参考文献



- ◆ Athena说明文档

<http://cars9.uchicago.edu/ifeffit/Documentation>

- ◆ xafs.org

<http://www.xafs.org/Tutorials>

- ◆ 常用标样库

<http://ixs.iit.edu/database/>

<http://cars9.uchicago.edu/~newville/ModelLib/search.html>





谢谢!



北京同步辐射装置EXAFS谱分析讲习班，2011年12月7-8日，北京