



北京同步辐射装置
Beijing Synchrotron Radiation Facility

Artemis软件应用

郑黎荣

88235980-4

zhenglr@ihep.ac.cn



中国科学院高能物理研究所

主要内容:

- 软件简介
- 数据处理
 - a 单壳层拟合
 - b 多壳层拟合
 - c 多权重拟合
 - d 多Feff拟合
- 注意点及小技巧
- 上机练习

北京同步辐射装置
Beijing Synchrotron Radiation Facility

×射线吸收谱学实验
和数据解析讲习班

武汉·2014



中国科学院高能物理研究所



Artemis:阿尔忒弥斯,狩猎女神,阿波罗的妹妹;

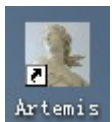
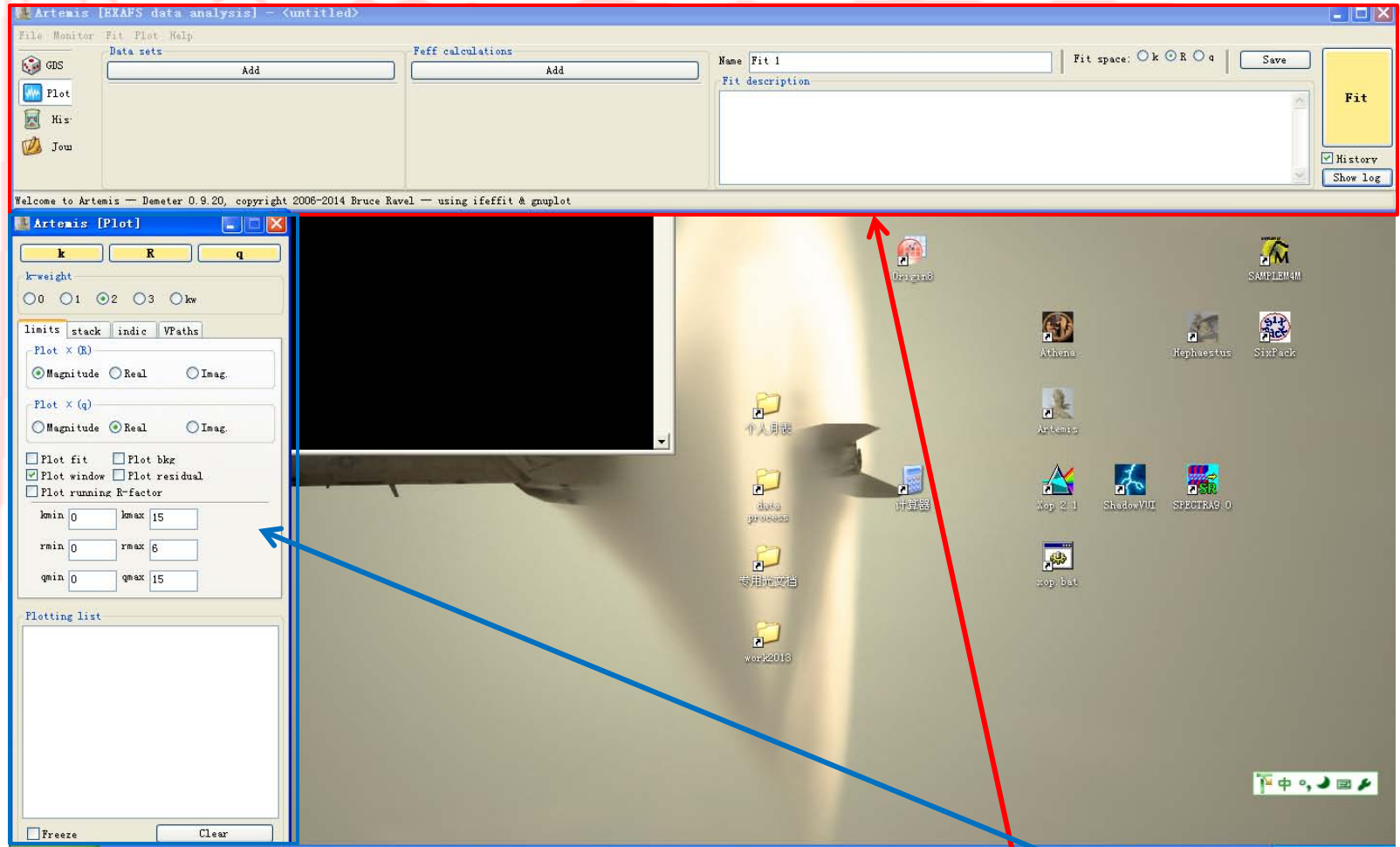
由Bruce.Ravel开发,利用设定的晶体(团簇)模型通过软件的计算,得到理论的散射振幅、相移函数、平均自由程;加上一定的未知结构参数,代入EXAFS理论表达式,对EXAFS振荡函数进行Levenberg-Marquardt非线性最小二乘法拟合,得到所求拟合参数的值。

本身不进行数据处理,通常应用于拟合经过athena处理后的EXAFS振荡函数,得到这些数据的配位数,配位键长,无序度因子等结构参数;

注: Demeter 正在研发中,因此会存在很多小bug,请大家发现后,上传至程序下载的网站



ARTEMIS软件简介



双击artemis图标，弹出以上界面（黑色窗口、主窗口、绘图窗口）

注：黑色窗口不能关闭！



中国科学院高能物理研究所

北京同步辐射装置
Beijing Synchrotron Radiation Facility

×射线吸收谱学实验
和数据分析讲习班

武汉·2014

ARTEMIS软件简介

File: 文件打开、保存等
Monitor: 监控（所有的命令、操作）
Fit: 拟合相关前置条件判定设置
Plot: 绘图设置
Help: 帮助文档



GDS: 拟合参数设置窗口
Plot: 绘图窗口
Histroy: 拟合结果窗口
Journal: 日志文件窗口

状态栏

北京同步辐射装置
Beijing Synchrotron Radiation Facility

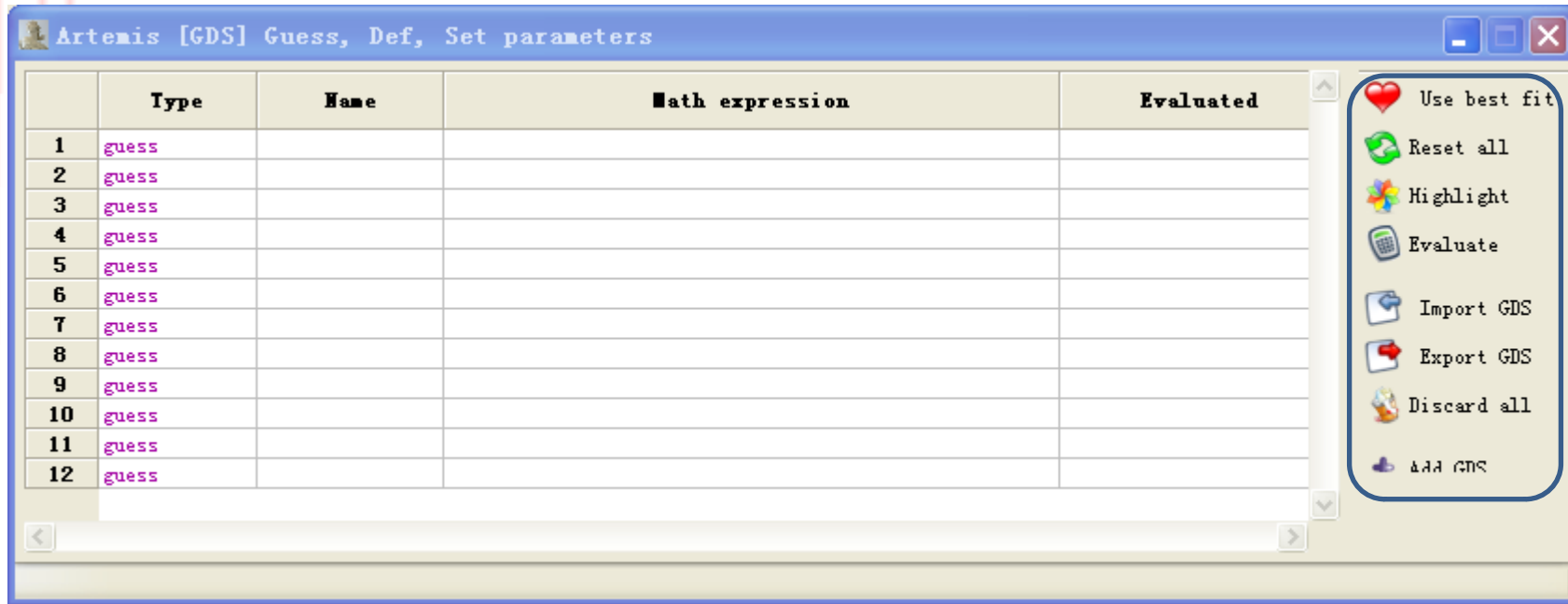
×射线吸收谱学实验
和数据分折讲习班

武汉·2014



中国科学院高能物理研究所

ARTEMIS软件简介

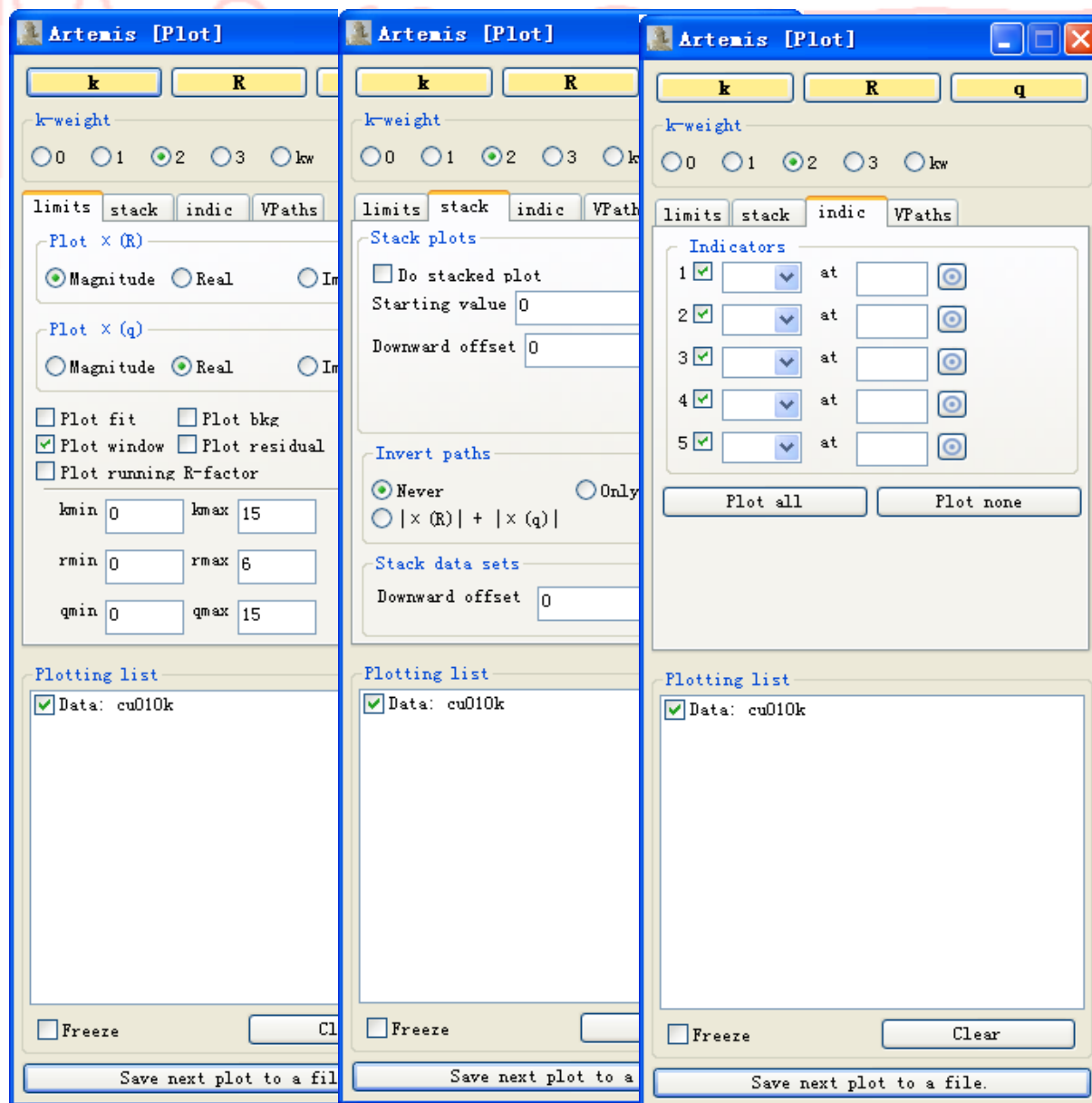


拟合参数设定窗口：设定拟合变量初始值、采用固定、限制和定义等方式，调整拟合变量的值；（确认设定的参数名称正确，一一对应）

ARTEMIS软件简介

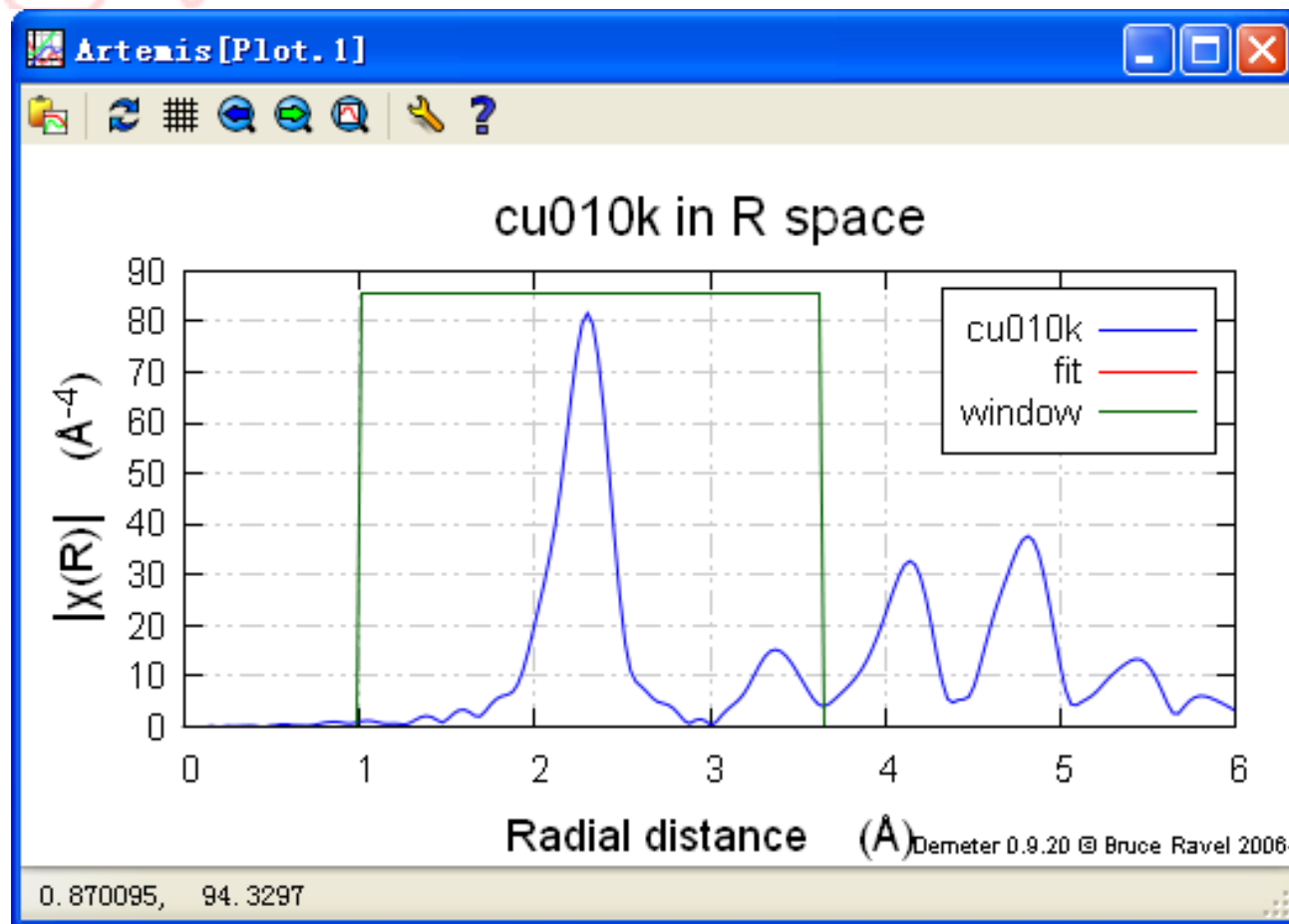
北京同步辐射装置
Beijing Synchrotron Radiation Facility

×射线吸收谱学实验
和数据分析讲习班



绘图控制窗口：
对artemis的数据、
背底、路径以及
贡献、拟合结果、
残差等进行绘制
及绘图的控制；

ARTEMIS软件简介



绘图窗口：数据、拟合结果等的图形化显示；

北京同步辐射装置
Beijing Synchrotron Radiation Facility

×射线吸收谱学实验
和数据分折讲习班

武汉·2014

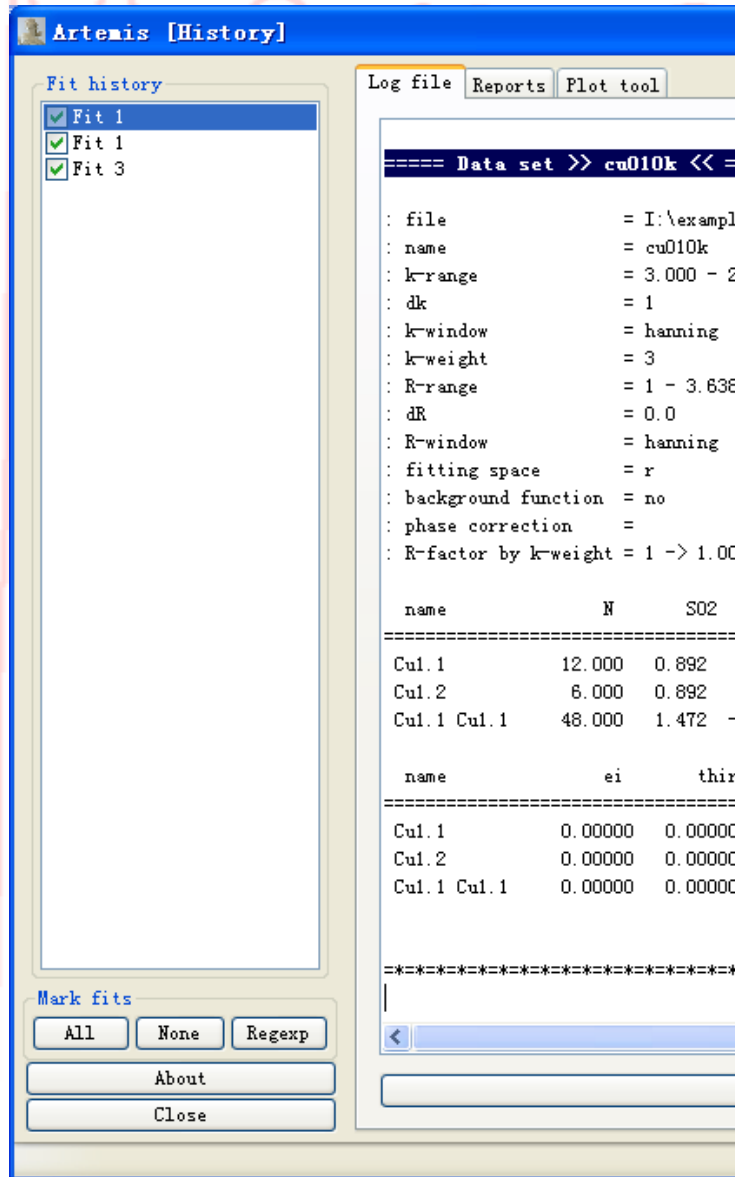


中国科学院高能物理研究所

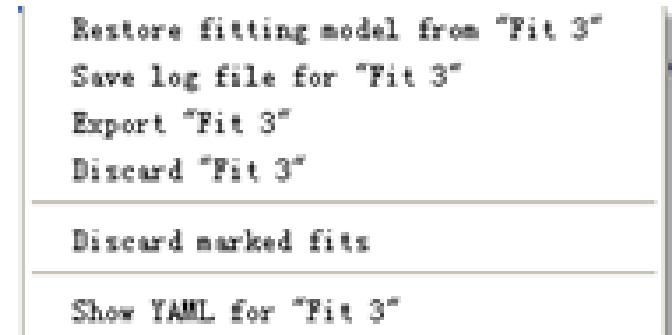
ARTEMIS软件简介

北京同步辐射装置
Beijing Synchrotron Radiation Facility

×射线吸收谱学实验
和数据分析讲习班



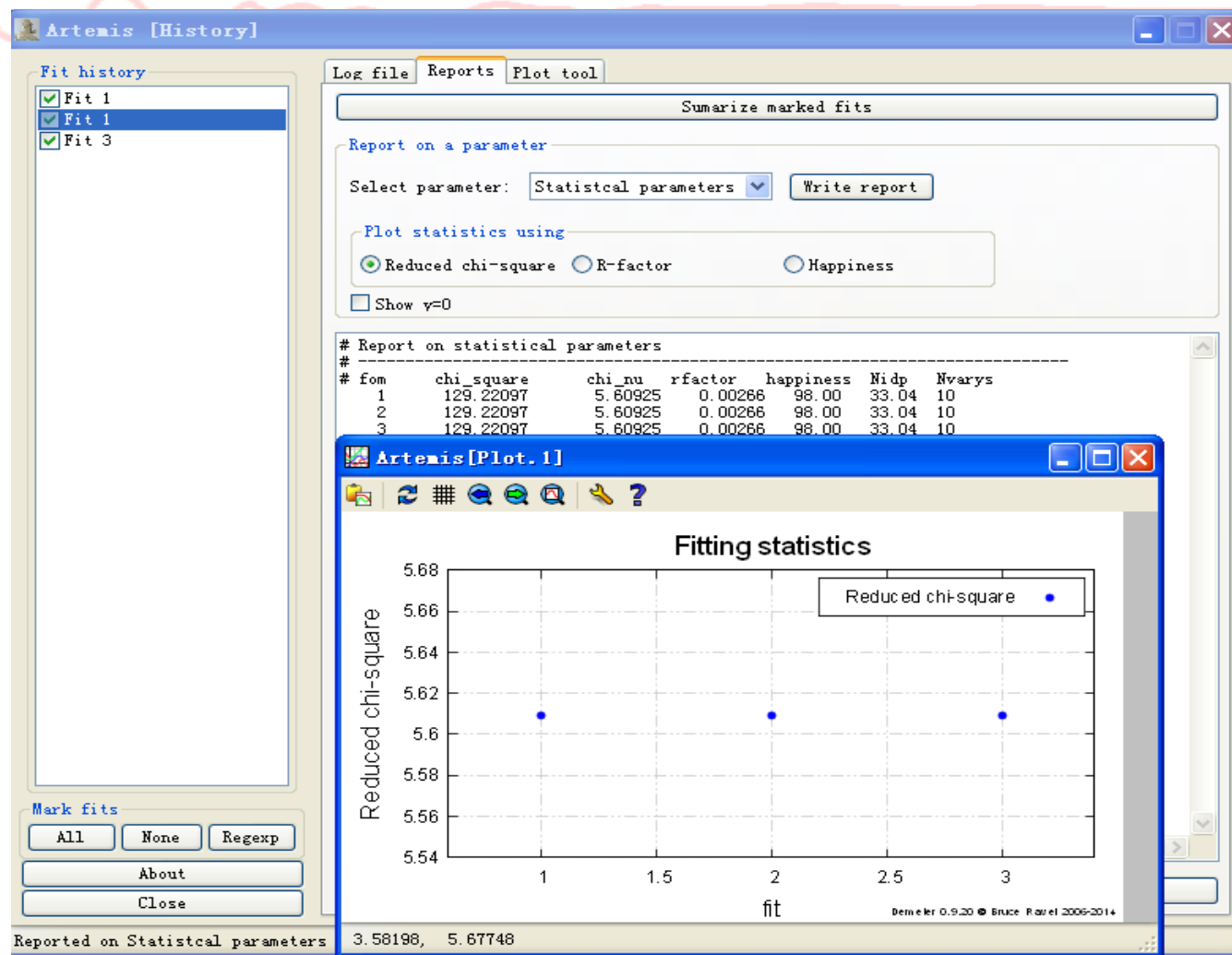
拟合历史窗口：多次拟合结果、多次拟合的统计量、拟合量的比较、添加至绘图窗口等；



中国科学院高能物理研究所

武汉·2014

ARTEMIS软件简介



Reports选项：可以选择多次拟合中的统计信息、键长、配位数等进行比较；

北京同步辐射装置
Beijing Synchrotron Radiation Facility

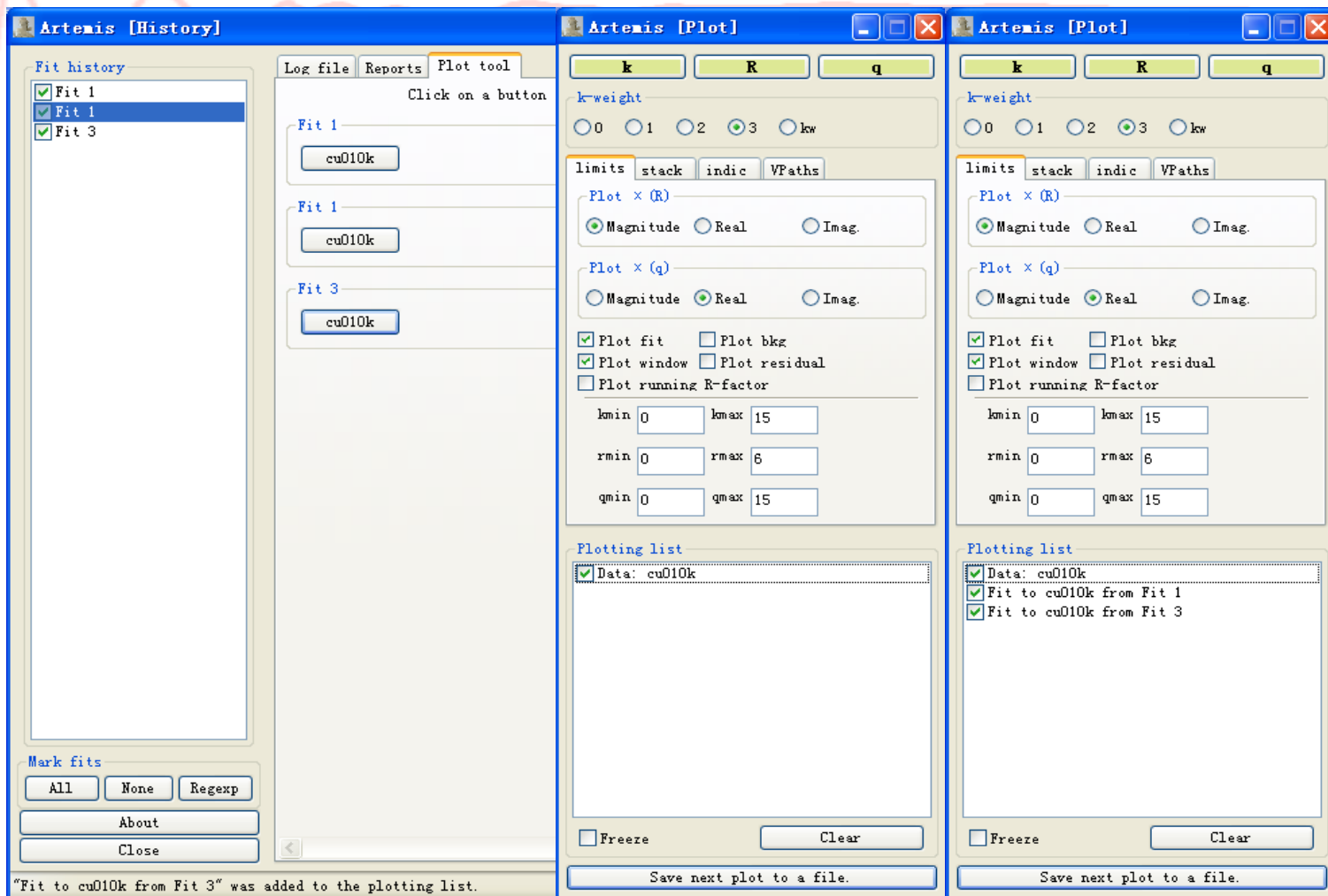
×射线吸收谱学实验
和数据分折讲习班

武汉·2014



中国科学院高能物理研究所

ARTEMIS软件简介



Plot tool选项：可以讲多次拟合结果添加至绘图操作窗口进行比较；

北京同步辐射装置
Beijing Synchrotron Radiation Facility

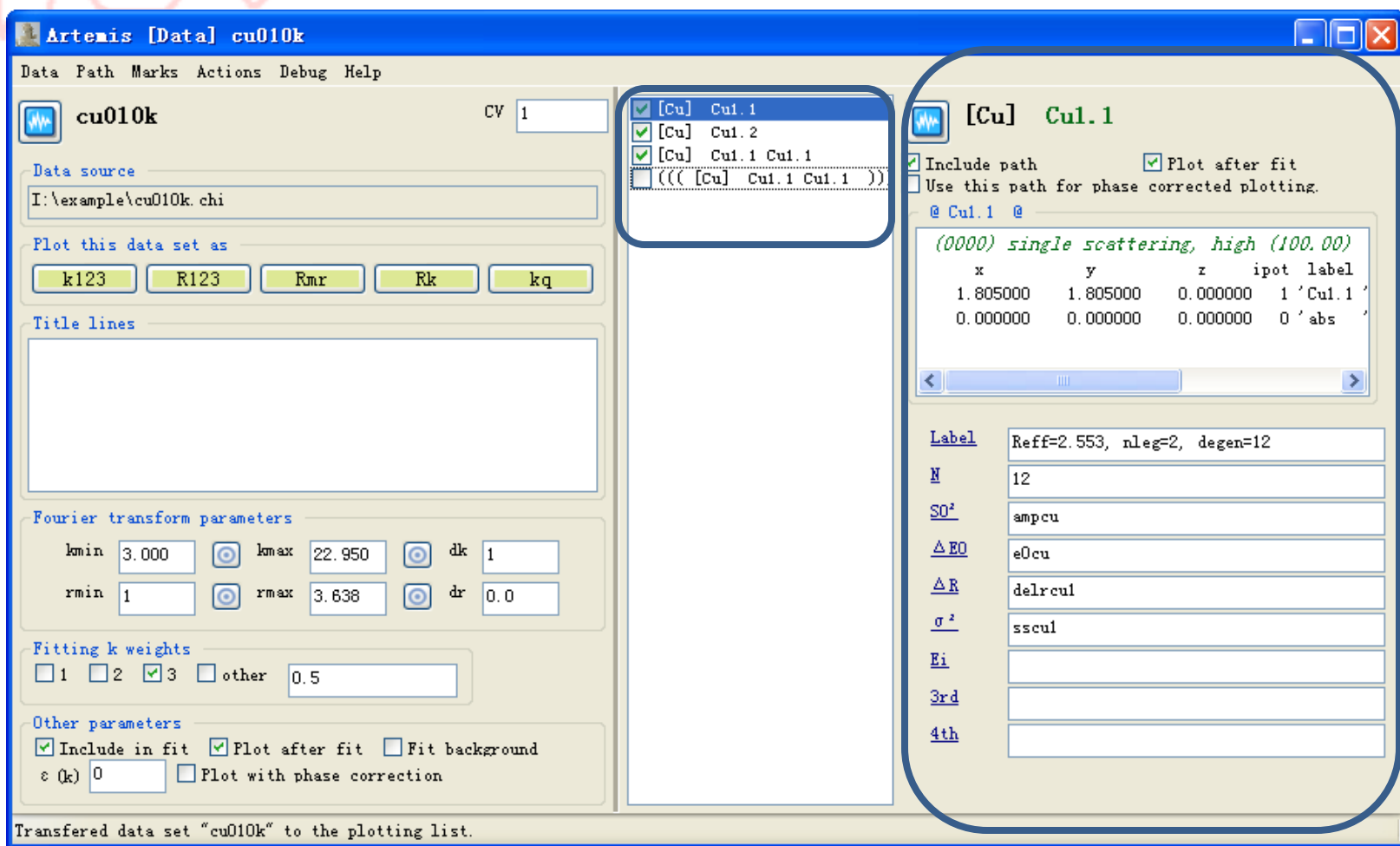
×射线吸收谱学实验
和数据分折讲习班

武汉·2014



中国科学院高能物理研究所

ARTEMIS软件简介



数据操作窗口：对导入数据进行各种处理，导入模型，导入路径、设定拟合参数等操作；

ARTEMIS软件简介

北京同步辐射装置
Beijing Synchrotron Radiation Facility

×射线吸收谱学实验
和数据分析讲习班

Artemis [Feff] Atoms and Feff

Rename Discard Feff in Demeter Feff doc

Atoms Feff Paths Path-like Console

Open file Save data Export Clear all Run Atoms Aggregate

Titles

name: copper
formula: Cu

Name: Cu
Space Group: f m 3 m
Edge: K Style: Feff8 - elem
☐ Self-consistency Rscf: 5.0

Aggregate degeneracy margins
Margin: 0.03 Beta: 3

Add a site

Lattice Constants

A: 3.61 B: 3.61 C: 3.61
 α : 90 β : 90 γ : 90

Radial distances
Cluster size: 6.00 Longest path: 5.0

Shift vector
0 0 0 insert

	Core	El.	x	y	z	Tag
1	<input checked="" type="checkbox"/>	Cu	0.00000	0.00000	0.00000	Cu1
2	<input type="checkbox"/>					
3	<input type="checkbox"/>					
4	<input type="checkbox"/>					
5	<input type="checkbox"/>					
6	<input type="checkbox"/>					

晶体学计算窗口：模型的建立、feff计算、路径导出等；相当于原ifeffit的theory选项

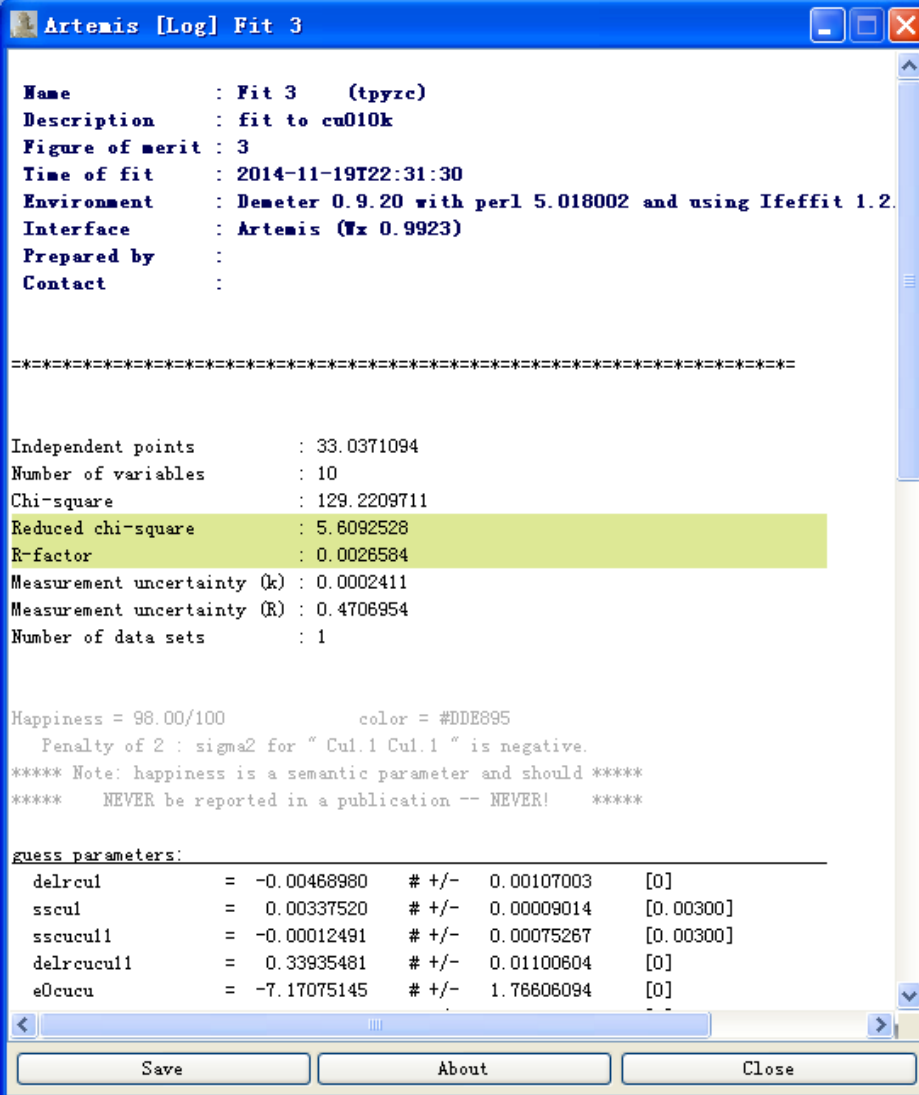


中国科学院高能物理研究所

武汉·2014

ARTEMIS软件简介

拟合结果窗口：拟合得到的结果、报错等信息；



```
Artemis [Log] Fit 3

Name      : Fit 3      (tpyzc)
Description : fit to cu010k
Figure of merit : 3
Time of fit   : 2014-11-19T22:31:30
Environment  : Demeter 0.9.20 with perl 5.018002 and using Ifeffit 1.2.
Interface    : Artemis (Vx 0.9923)
Prepared by  :
Contact      :

=====

Independent points      : 33.0371094
Number of variables     : 10
Chi-square             : 129.2209711
Reduced chi-square     : 5.6092528
R-factor               : 0.0026584
Measurement uncertainty (k) : 0.0002411
Measurement uncertainty (R) : 0.4706954
Number of data sets    : 1

Happiness = 98.00/100          color = #DDE895
Penalty of 2 : sigma2 for " Cul.1 Cul.1 " is negative.
***** Note: happiness is a semantic parameter and should *****
***** NEVER be reported in a publication -- NEVER! *****

guess parameters:
-----
delrcul      = -0.00468980    # +/- 0.00107003    [0]
sscul        = 0.00337520    # +/- 0.00009014    [0.00300]
sscucul1     = -0.00012491    # +/- 0.00075267    [0.00300]
delrcucul1   = 0.33935481    # +/- 0.01100604    [0]
e0cucu       = -7.17075145    # +/- 1.76606094    [0]
```



主要内容:

- 软件简介
- 数据处理
 - a 单壳层拟合
 - b 多壳层拟合
 - c 多权重拟合
 - d 多Feff拟合
- 注意点及小技巧
- 上机练习

北京同步辐射装置
Beijing Synchrotron Radiation Facility

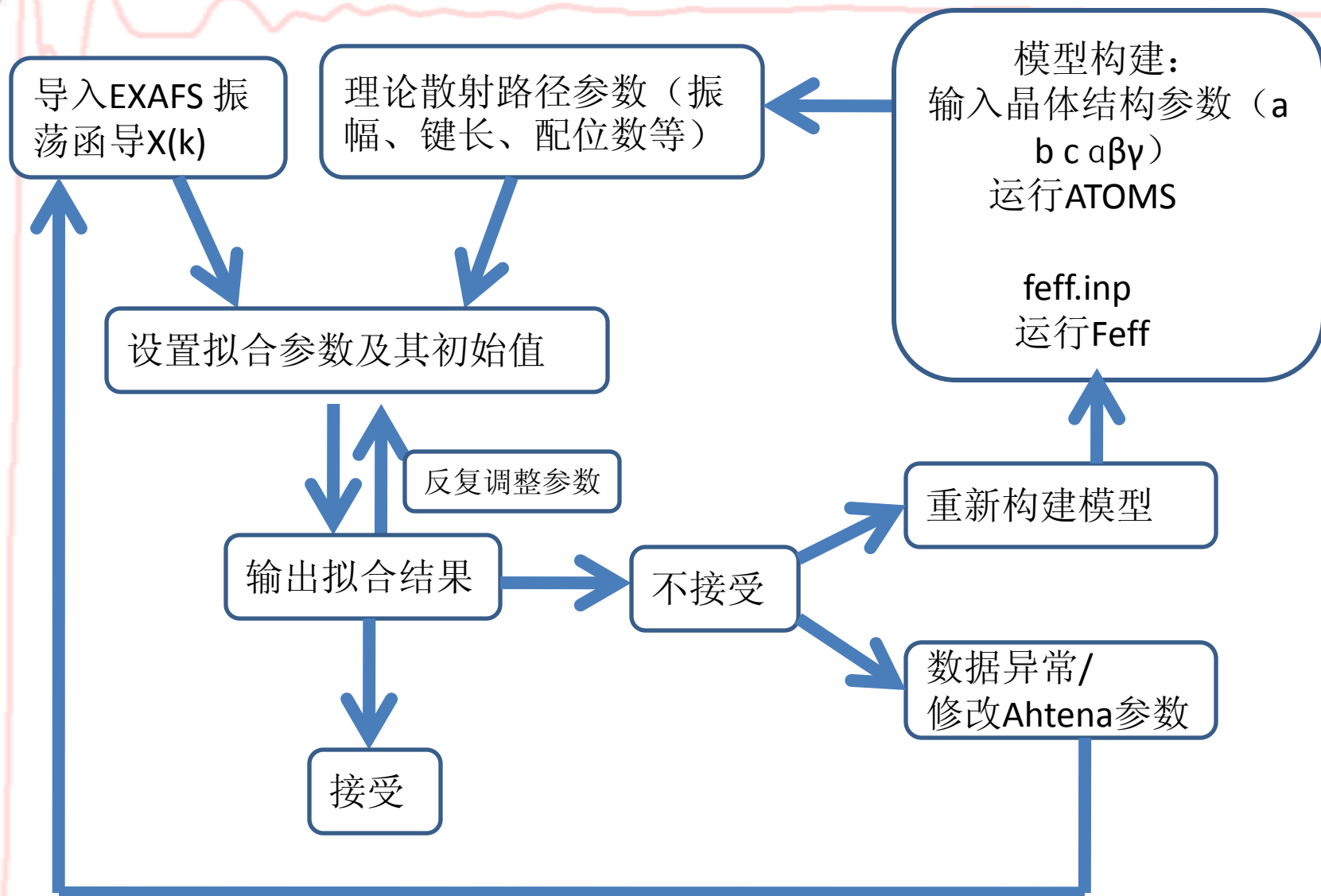
×射线吸收谱学实验
和数据解析讲习班

武汉·2014



中国科学院高能物理研究所

ARTEMIS 处理流程

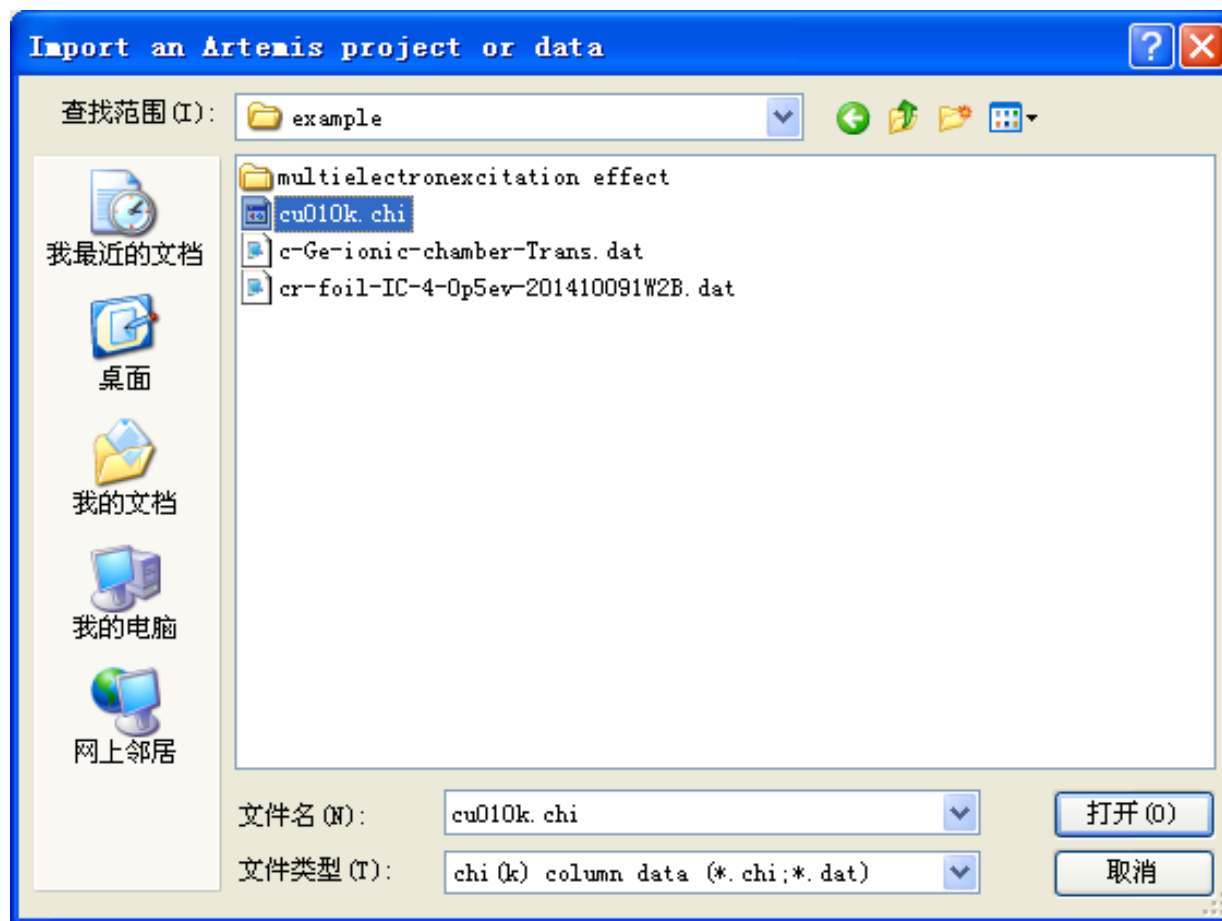




单壳层拟合-Cu

数据导入

数据处理



方式1：主窗口/File/open project or data (适用于多种数据格式)





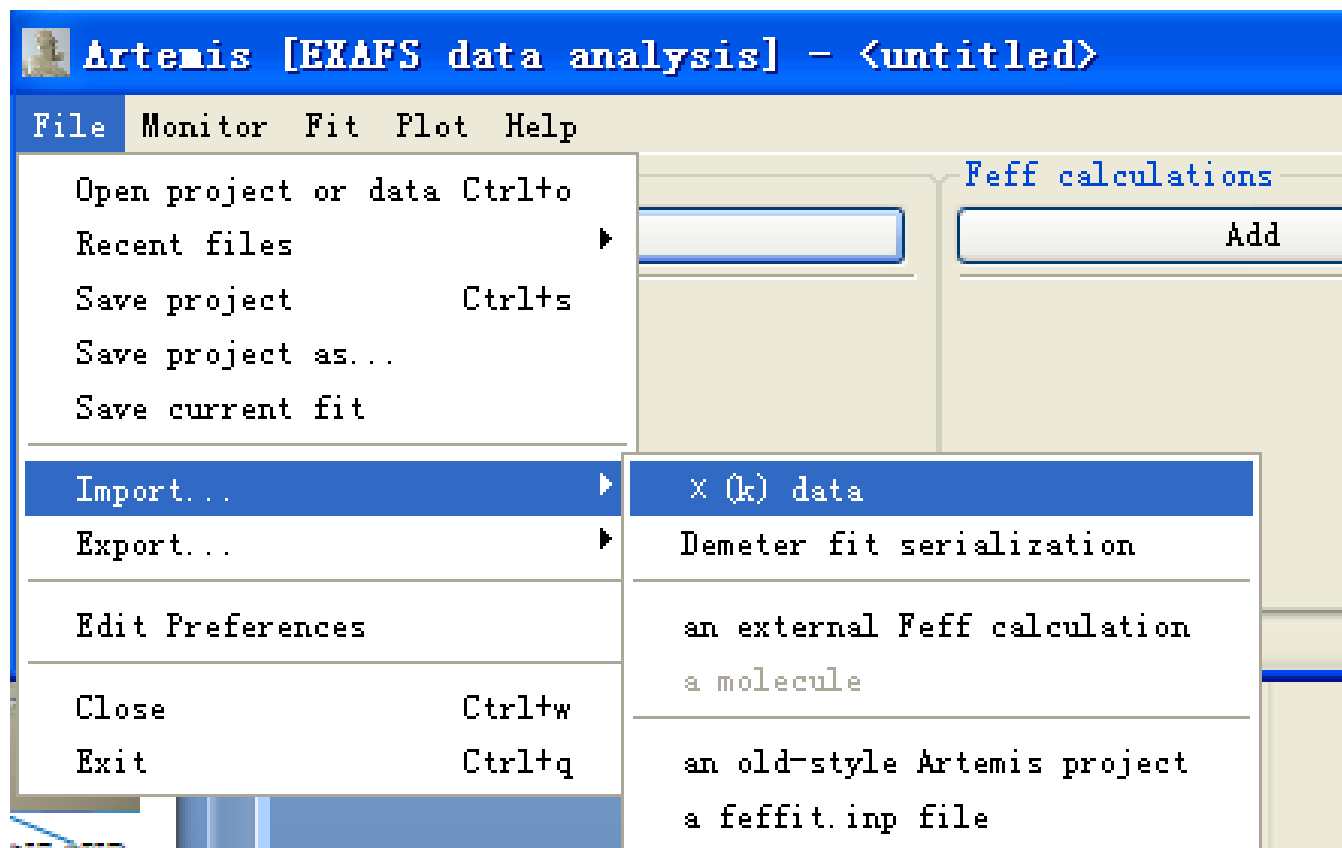
单壳层拟合-Cu

数据导入

数据处理

北京同步辐射装置
Beijing Synchrotron Radiation Facility

×射线吸收谱学实验
和数据分折讲习班



方式2: 主窗口/File/import/x(k) data

武汉·2014

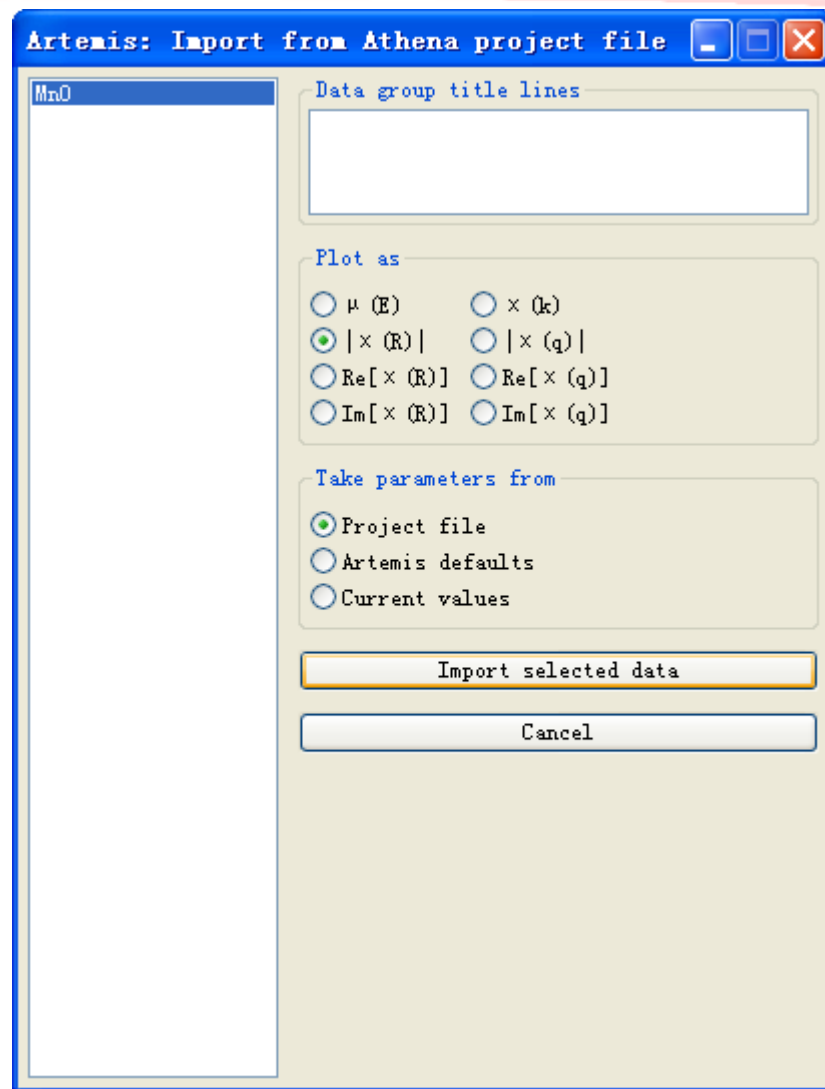
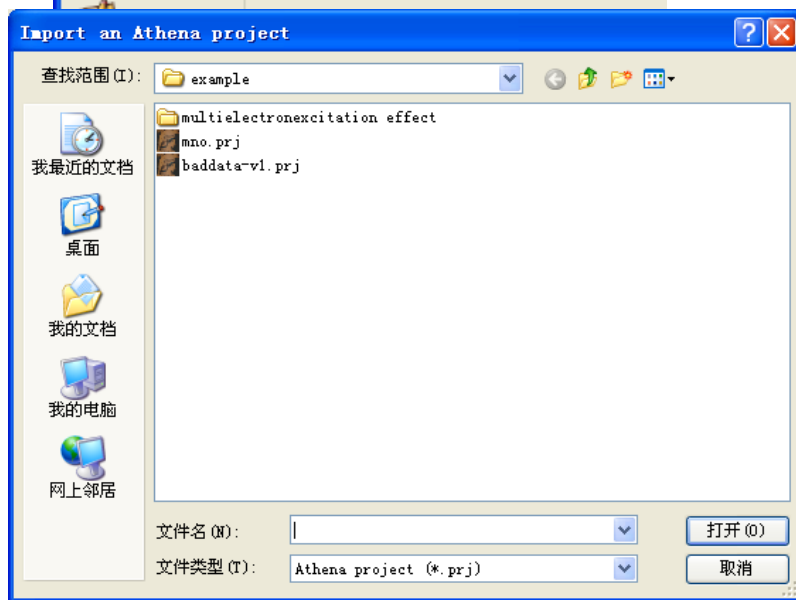
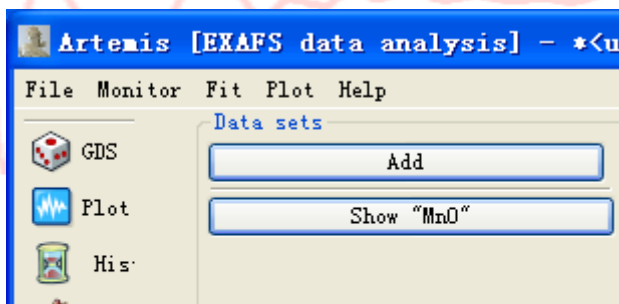


中国科学院高能物理研究所

单壳层拟合-Cu

数据导入

数据处理



方式3: 主窗口/Data sets/add (适用于prj文件)

推荐!

北京同步辐射装置
Beijing Synchrotron Radiation Facility

×射线吸收谱学实验
和数据分析讲习班

武汉·2014

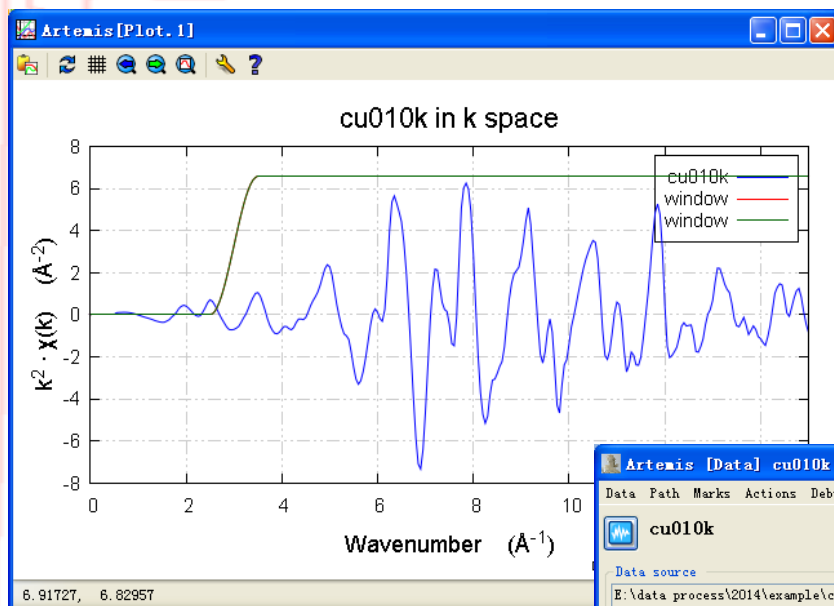


中国科学院高能物理研究所

单壳层拟合-Cu

数据导入

数据处理



绘图窗口

数据操作窗口

Artemis [Data] cu010k

Data Path Marks Actions Debug Help

cu010k CV 1

Data source
E:\data process\2014\example\cu010k.chi

Plot this data set as
k123 R123 Rmr Rk kq

Title lines

Fourier transform parameters
kmin 3.000 kmax 22.950 dk 1
rmin 1 rmax 3 dr 0.0

Fitting k weights
☒ 1 ☒ 2 ☒ 3 ☐ other 0.5

Other parameters
☒ Include in fit ☒ Plot after fit ☐ Fit background
☐ c(k) 0 ☐ Plot with phase correction

Transferred data set "cu010k" to the plotting list.

Path list

Drag paths from a Feff interpretation list and drop them in this space to add paths to this data set

[Import crystal data or a Feff calculation](#)

[Start a quick first shell fit](#)

[Import a structural unit](#)

[Import an empirical standard](#)

数据导入成功后，
会自动弹出，本页
的两个窗口；

北京同步辐射装置
Beijing Synchrotron Radiation Facility

×射线吸收谱学实验
和数据分析讲习班

武汉·2014

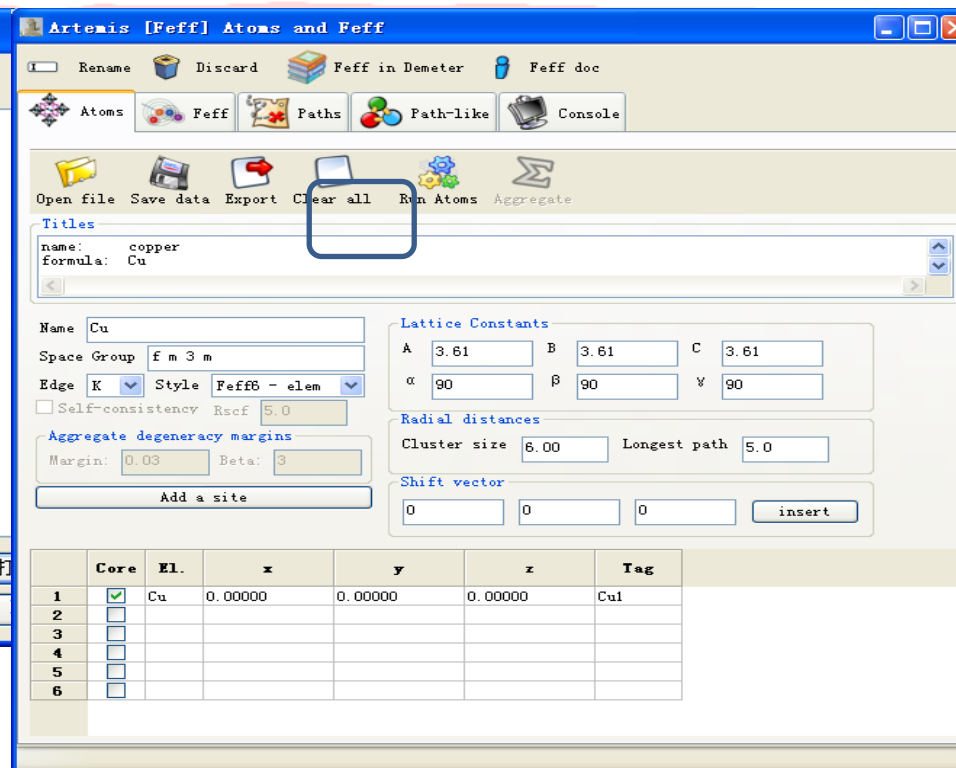
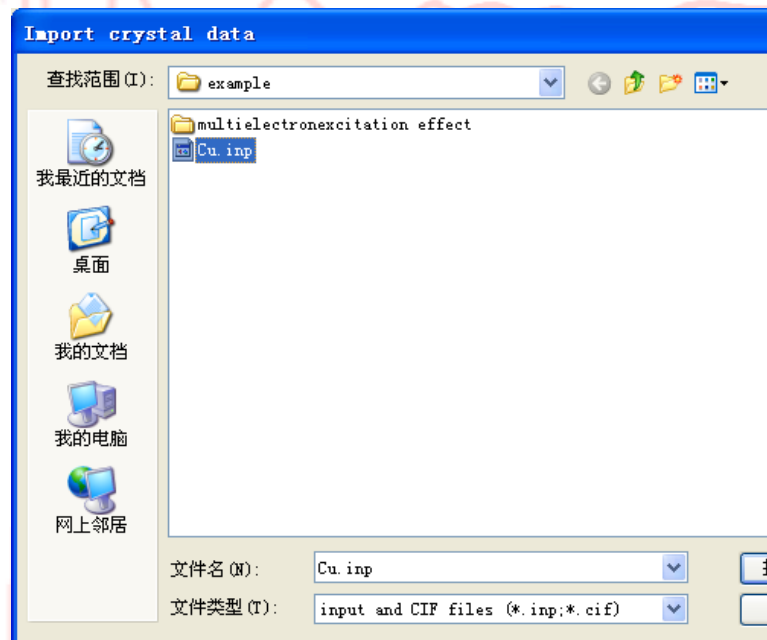


中国科学院高能物理研究所

单壳层拟合-Cu

模型建立

数据处理



方式1: 单击 数据操作窗口/Import crystal data or a Feff calculation 导入Cu.inp 弹出右侧 Atoms and Feff窗口 (inp文件在老版ifffit软件安装目录下share/atomdb中有部分; 也可以导入*.cif 文件)

方式2: 开始/所有程序/Demeter with strawberry perl/stand-alone Atoms 打开一个空白的页面;





单壳层拟合-Cu

模型建立

数据处理

北京同步辐射装置
Beijing Synchrotron Radiation Facility

构建模型：开始/所有程序/Demeter with strawberry perl/stand-alone Atoms

输入所需参数（空间群、晶体学参数、原子占位）；

选定所需计算的团簇尺寸，最长路径长度等

shift victor（部分空间群需要，如fd-3m）

全部输入后，建议将模型保存，便于后续再次调用；save data

晶体学数据库链接：

	Core	El.	x	y	z	Tag
1	<input checked="" type="checkbox"/>	Cu	0.00000	0.00000	0.00000	Cu1
2	<input type="checkbox"/>					
3	<input type="checkbox"/>					
4	<input type="checkbox"/>					
5	<input type="checkbox"/>					
6	<input type="checkbox"/>					

<http://www.springermaterials.com/docs/vsp.html>

<http://chem5.nchc.org.tw/icsd/index.php>

×射线吸收谱学实验
和数据分析讲习班

武汉·2014



中国科学院高能物理研究所

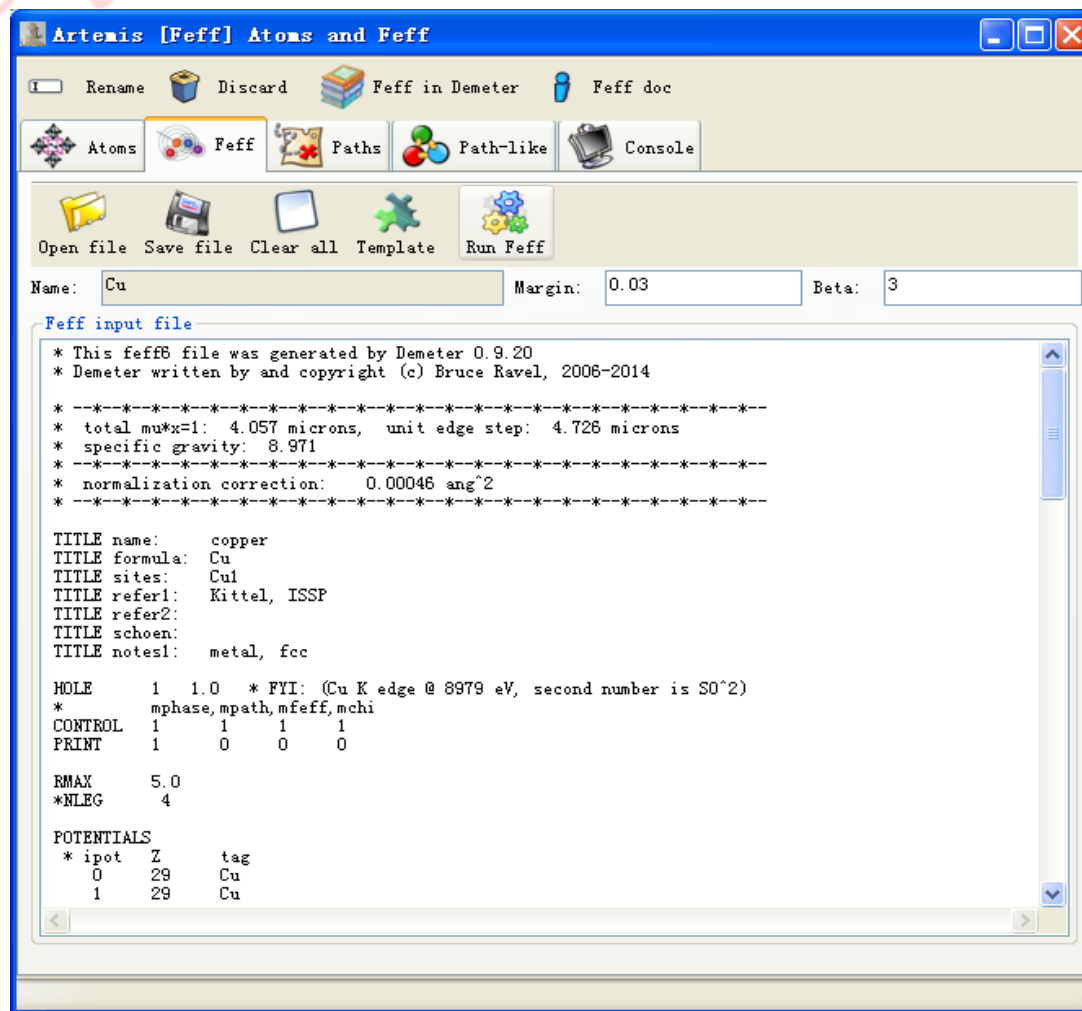
单壳层拟合-Cu

模型建立

数据处理

北京同步辐射装置
Beijing Synchrotron Radiation Facility

×射线吸收谱学实验
和数据分析讲习班



单击Run Atoms 可以弹出以上界面;



中国科学院高能物理研究所

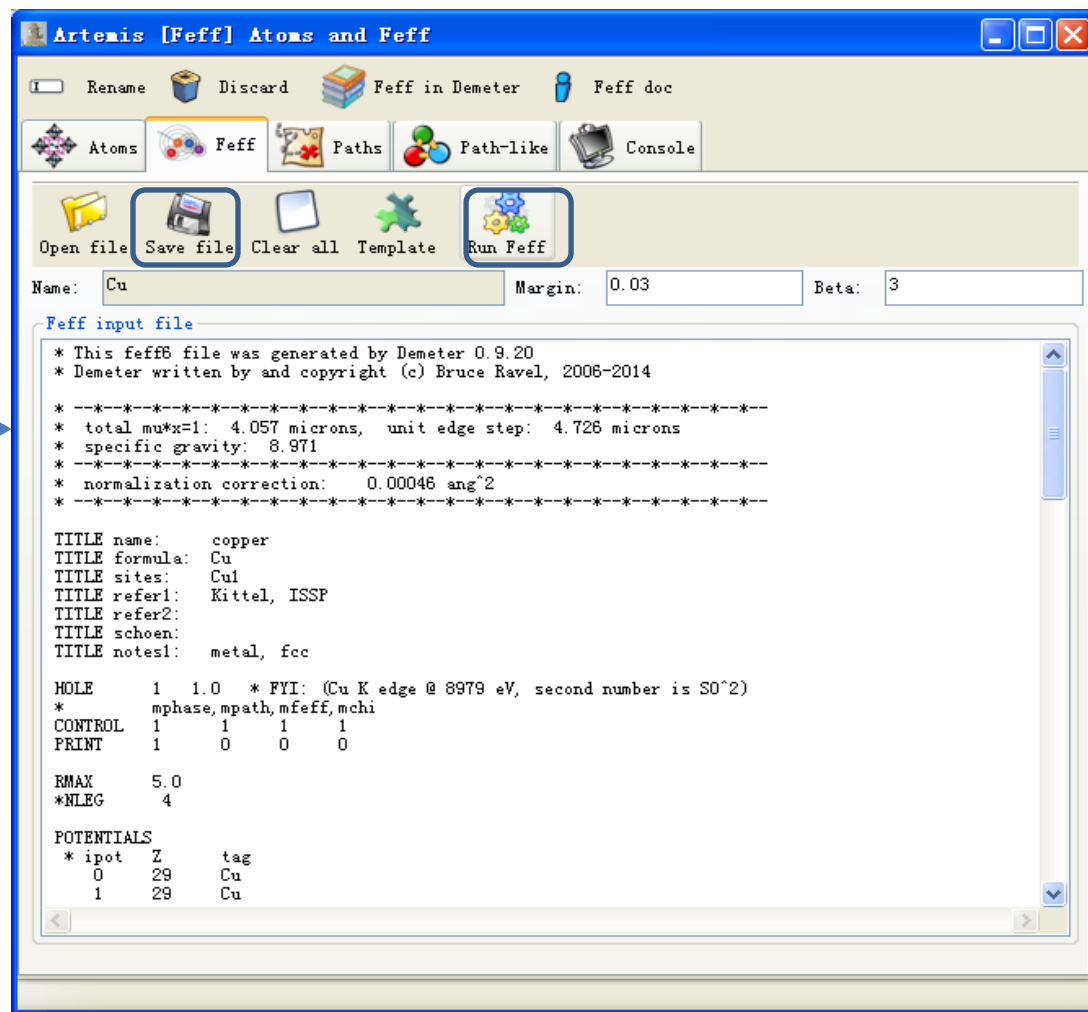


数据处理

北京同步辐射装置
Beijing Synchrotron Radiation Facility

×射线吸收谱学实验 和数据分折讲习班

Feff文件信息



单击Rum Atoms 可以弹出以上界面；检查路径文件是否正确（原子间距是否合理），点击save file 保存feff.inp;



中国科学院高能物理研究所

武汉·2014

单壳层拟合-Cu

模型建立

数据处理

北京同步辐射装置
Beijing Synchrotron Radiation Facility

×射线吸收谱学实验
和数据分析讲习班

Artemis [Feff] Atoms and Feff

Rename Discard Feff in Demeter Feff doc

Atoms Feff Paths Path-like Console

Save Plot paths $\times (k)$ $| \times (R) |$ $Re [\times (R)]$ $Im [\times (R)]$ Rank

Name of this Feff calculation: Cu

Description

```
# TITLE name: copper
# TITLE formula: Cu
# The central atom is denoted by this token: @
# Cluster size = 5.00 Å, containing 78 atoms
# 8 paths were found within 5.000 Å
# Forward scattering cutoff 20.00
# TITLE sites: Cu1
```

Scattering Paths

	Degen	Reff	Scattering path	Rank	Legs	Type
0000	12.000	2.5527	@ Cu1.1 @	100.00	2	single scattering
0001	6.000	3.6100	@ Cu1.2 @	22.98	2	single scattering
0002	48.000	3.8290	@ Cu1.1 Cu1.1 @	10.59	3	acute triangle
0003	24.000	4.3577	@ Cu1.1 Cu1.1 @	3.39	3	other double scattering
0004	48.000	4.3577	@ Cu1.1 Cu1.2 @	8.58	3	other double scattering
0005	24.000	4.4213	@ Cu1.3 @	55.41	2	single scattering
0006	48.000	4.7633	@ Cu1.1 Cu1.1 @	10.63	3	obtuse triangle
0007	96.000	4.7633	@ Cu1.1 Cu1.3 @	21.75	3	obtuse triangle

Degen Reff scattering path Rank Legs type

序号 理论配位数 理论键长 散射路径 相对理论振幅 散射路径数 散射类型

(第一条为定义100, 其他为相对值)

单击Rum Feff 可以弹出以上界面；左键Cu的第一路径，将其拖数据操作窗口的pathlist



中国科学院高能物理研究所

武汉·2014

单壳层拟合-Cu

拟合参数设定

数据处理

Artemis [Data] cu010k

Data Path Marks Actions Debug Help

cu010k CV 3

Data source
E:\data process\2014\example\cu010k.chi

Plot this data set as
k123 R123 Rmr Rk kq

Title lines

Fourier transform parameters
kmin 3.000 kmax 22.950 dk 1
rmin 1 rmax 3 dr 0.0

Fitting k weights
☒ 1 ☒ 2 ☒ 3 ☐ other 0.5

Other parameters
☒ Include in fit ☐ Plot after fit ☐ Fit background
☐ Plot with phase correction

[Cu] Cu1.1

[Cu] Cu1.1

☒ Include path ☐ Plot after fit
☐ Use this path for phase corrected plotting.

@ Cu1.1 @

(0000) single scattering, high (100.00)

x	y	z	ipos	label
1.805000	1.805000	0.000000	1	'Cu1.1'
0.000000	0.000000	0.000000	0	'abs'

路径信息描述

Label Reff=2.553, nleg=2, degen=12

N 12

SO² 1

ΔE_0

ΔR

σ^2

Ei

3rd

4th

拟合参数设定

Check here to make plots using phase corrected Fourier transforms. Note that the fit is NOT made using phase corrected transfo

左键Cu的第一路径，将其拖入pathlist，即可出现以上界面

北京同步辐射装置
Beijing Synchrotron Radiation Facility

×射线吸收谱学实验
和数据分折讲习班

武汉·2014

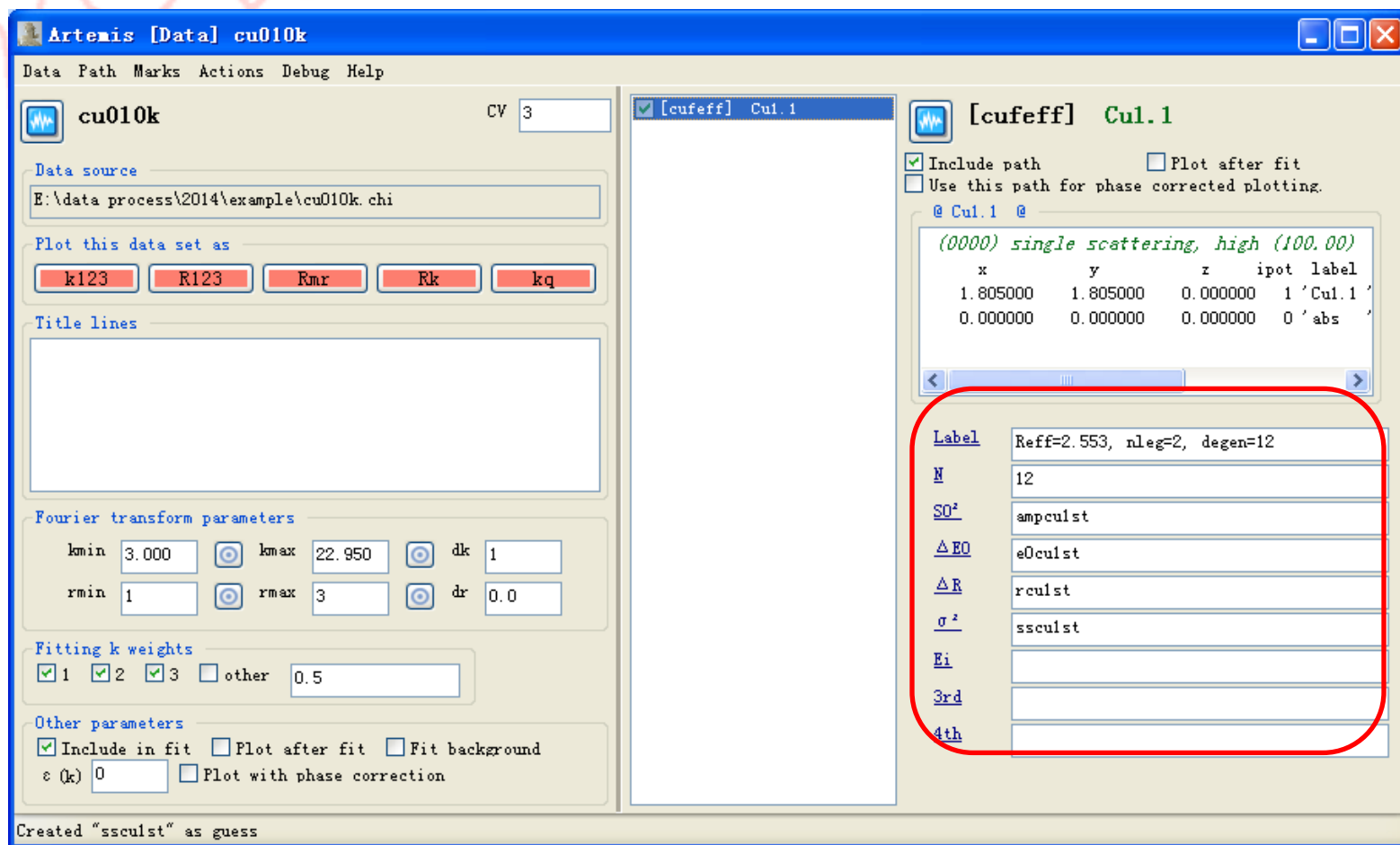


中国科学院高能物理研究所

单壳层拟合-Cu

拟合参数设定

数据处理



单击路径，在右侧红色框内输入需要拟合的变量(以字母与数字组成，其他符号可能出错)；并在变量处右键，选择guess变量，将其添加至GDS窗口

(注：artemis具有内部参量如E0等，注意添加相应后缀，减少程序警告)

北京同步辐射装置
Beijing Synchrotron Radiation Facility

×射线吸收谱学实验
和数据分折讲习班

武汉·2014



中国科学院高能物理研究所



单壳层拟合-Cu

拟合参数设定

数据处理

北京同步辐射装置
Beijing Synchrotron Radiation Facility

Artemis [GDS] Guess, Def, Set parameters

	Type	Name	Math expression	Evaluated
1	guess	ampculst	1.00000	
2	guess	e0culst	0	
3	guess	rculst	0	
4	guess	ssculst	0.00300	
5	guess			
6	guess			
7	guess			
8	guess			
9	guess			
10	guess			
11	guess			
12	guess			

Highlighted parameters matching /\Assculst\z/.

Use best fit
Reset all
Highlight
Evaluate
Import GDS
Export GDS
Discard all
Add GDS

设定拟合变量初始值、采用固定、限制和定义等方式，调整拟合变量的值；（确认设定的参数名称正确，一一对应）

×射线吸收谱学实验
和数据分析讲习班

武汉·2014



中国科学院高能物理研究所

ARTEMIS软件简介

Guess: 设定初始值, 不做限制;

guess enot=0

Def: 设定参数间的数学关系式;

def delr_1=alfa*reff

guess alfa=0.01

Set: 设定成固定值, 不做改变;

set S02=0.85

lguess: 多数据定义

lguess ss=0.003

当有多条路径

Skip: 忽略该参数; (相当于程序语言中的注释符)

Restrain: 设定参数限定在固定值附近;

r delr_res=(delr_1-reff-0.1)*factor

s factor=100;

g enot=0

r enot_res=scale*penalty(enot,-5,5)

s scale=2000;

After: 设定参数间的数学关系式;

(拟合结束后, 用参数的最优值代入)

其中Guess Def Set Skip
Restrain 较为常用;



$$\chi(K) = \sum_j \frac{N_j S_0^2 F_j(K)}{K R_j^2} \int g(R) e^{-2R_j/\lambda(K)} \sin[2KR_j + \delta_j(K)] dR$$

$g(R)$: 原子对分布函数

$$\chi(K) = \sum_j \frac{N_j S_0^2 F_j(K) e^{-2R_j/\lambda(K)} e^{-2K^2 \sigma_j^2}}{K R_j^2} \sin[2KR_j + \delta_j(K)]$$

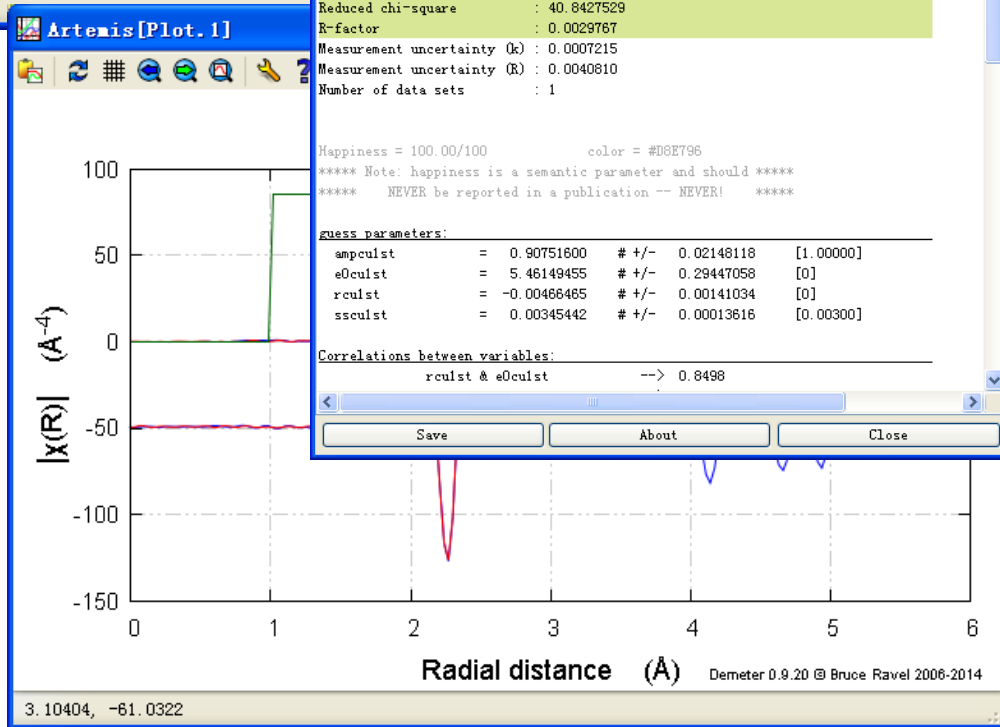
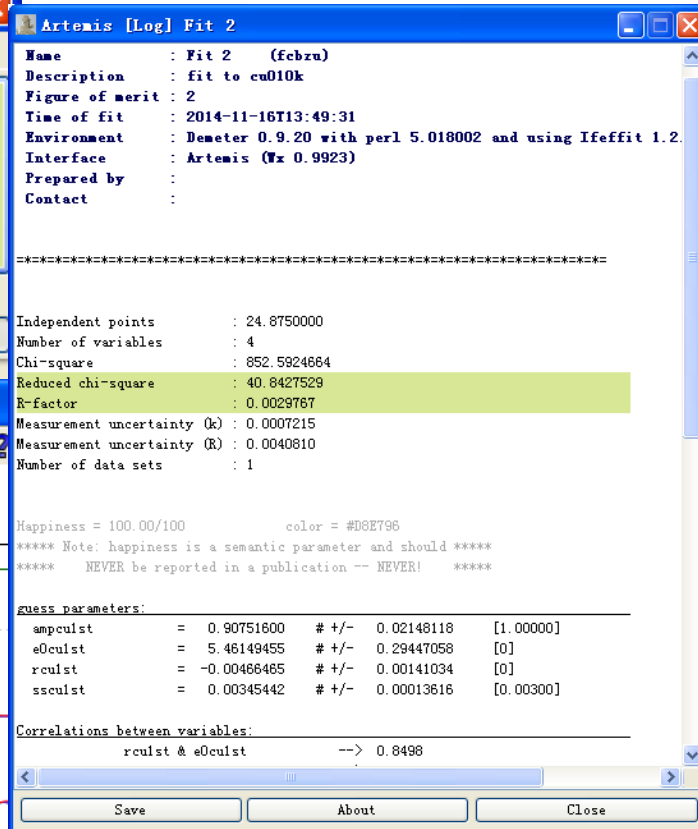
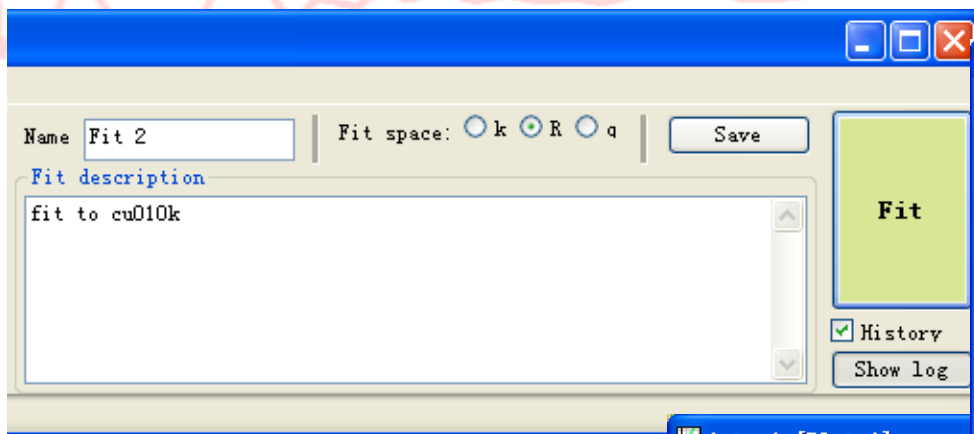
晶体等有序体系或弱无序体系（高斯分布）

$$\chi(K) = \sum_j \frac{N_j S_0^2 F_j(K)}{K R_j^2} \exp \left[-2K^2 \sigma_j^2 + \frac{2}{3} C_{4j} K^4 \right] e^{-2R_j/\lambda(K)} \sin \left[2KR_j + \delta_j(K) - \frac{4}{3} C_{3j} K^3 \right]$$

**中等无序体系：累积量展开

单壳层拟合-Cu

数据处理



单击操作界面的Fit键，
程序自动拟合，拟合
结束后，弹出绘图窗
口、拟合结果窗口；
如有错误，会弹出log
窗口提示；



单壳层拟合-Cu 拟合结果解读

数据处理

本次拟合的统计信息

拟合参数最优值与不确定度

```
Artemis [Log] Fit 1

Name      : Fit 1      (ntgtd)
Description : fit to cu010k
Figure of merit : 1
Time of fit   : 2014-11-20T01:21:32
Environment  : Demeter 0.9.20 with perl 5.018002 and using Ifeffit 1.2.
Interface    : Artemis (Wx 0.9923)
Prepared by  :
Contact      :

*****

Independent points      : 24.8750000
Number of variables     : 4
Chi-square              : 852.5924664
Reduced chi-square      : 40.8427529
R-factor                : 0.0029767
Measurement uncertainty (k) : 0.0007215
Measurement uncertainty (R) : 0.0040810
Number of data sets     : 1

Happiness = 100.00/100          color = #D8E796
***** Note: happiness is a semantic parameter and should *****
***** NEVER be reported in a publication -- NEVER! *****

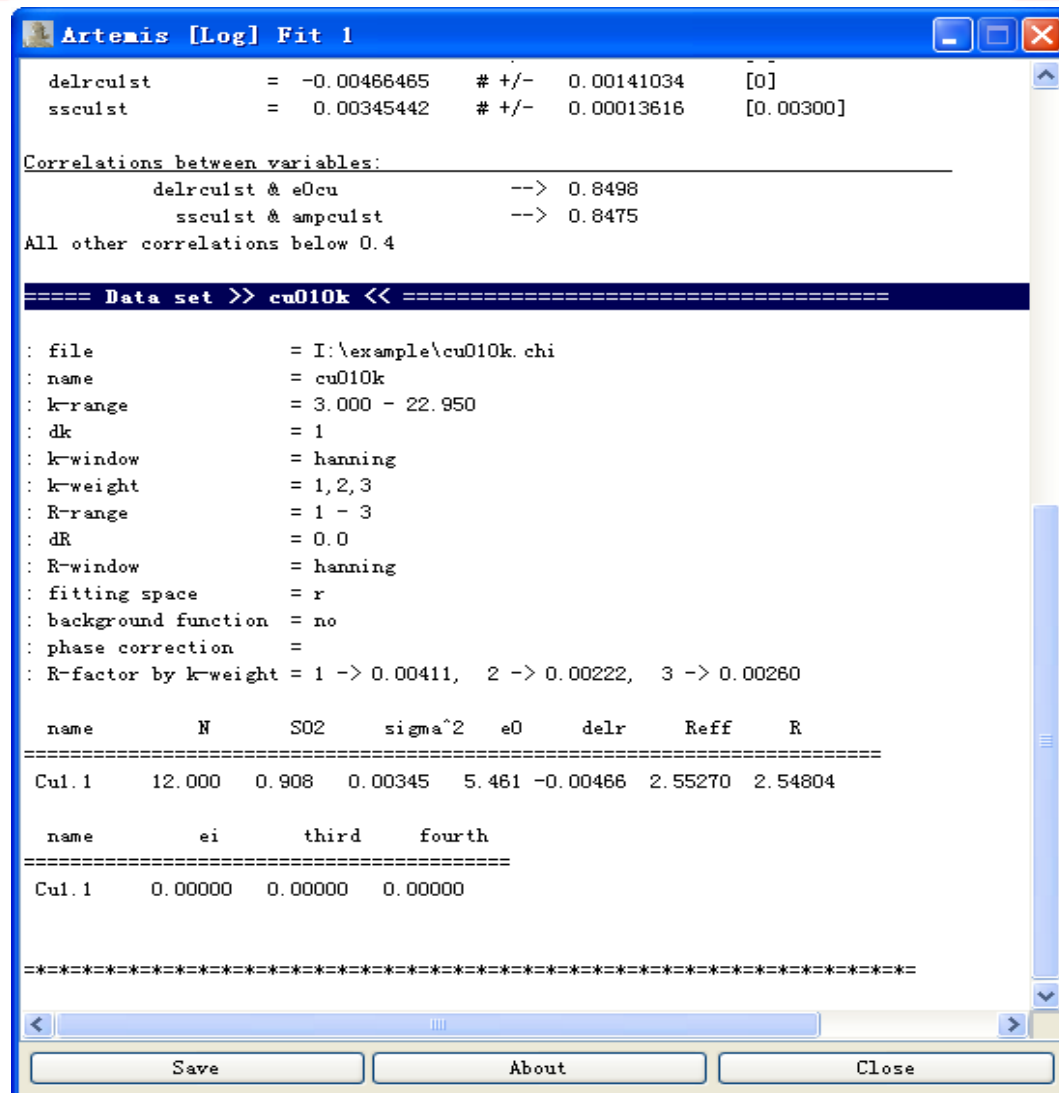
guess parameters:
-----
ampculst      = 0.90751600    # +/- 0.02148118    [1.00000]
e0cu          = 5.46149455    # +/- 0.29447058    [0]
delrculst     = -0.00466465    # +/- 0.00141034    [0]
ssculst       = 0.00345442    # +/- 0.00013616    [0.00300]

Correlations between variables:
-----
<----->
Save      About      Close
```

单壳层拟合-Cu 拟合结果解读

数据处理

拟合参数相关性



各壳层的拟合结果

北京同步辐射装置
Beijing Synchrotron Radiation Facility

×射线吸收谱学实验
和数据分折讲习班

武汉·2014



中国科学院高能物理研究所

单壳层拟合-Cu 统计信息定义

数据处理

Chi-square
$$\chi^2 = \frac{N_{ldp}}{\epsilon N_{data}} \sum_{i=\min}^{\max} \left[\text{Re} (\chi_d(r_i) - \chi_t(r_i))^2 + \text{Im} (\chi_d(r_i) - \chi_t(r_i))^2 \right]$$

Reduced Chi-square
$$\chi_\nu^2 = \frac{\chi^2}{\nu}$$
$$\nu = N_{ldp} - N_{var}$$

不确定度
$$\epsilon = \text{measurement uncertainty}$$

R-factor
$$\mathcal{R} = \frac{\sum_{i=\min}^{\max} \left[\text{Re} (\chi_d(r_i) - \chi_t(r_i))^2 + \text{Im} (\chi_d(r_i) - \chi_t(r_i))^2 \right]}{\sum_{i=\min}^{\max} \left[\text{Re} (\chi_d(r_i))^2 + \text{Im} (\chi_d(r_i))^2 \right]}$$

Reduced Chi-square : 单一无法判定拟合结果的好坏;
在拟合过程中如果变小, 说明拟合结果更优;

R-factor : <0.02 good; 0.02-0.05 模型稍有差异或数据质量欠佳; 0.05-0.1
模型偏差大或数据质量很差; >0.1 模型错;



单壳层拟合-Cu

数据处理

- 影响峰强 {
- N: 配位数
 - S02: 振幅衰减因子 (0.7, 1)
 - Sigma²: 无序度因子 (Debye-Waller factor) (0.003, 0.02)
 - C₄: 4阶累积量
- 影响峰位 {
- R: 原子间距; (delR < 0.5A)
 - C₃: 3阶累积量
 - E_i: 能移展宽
 - ΔE₀: 能量零点偏移 (+-10eV以内)
- 拟合精度 {
- N: +-20%
 - R: 0.01A
 - 原子种类: +-4

注1: 实际拟合中, S02可以小于0.7;

注2: 重金属原子 (Pb), ΔE0可能大于10ev

单壳层拟合-Cu

数据处理

北京同步辐射装置
Beijing Synchrotron Radiation Facility

×射线吸收谱学实验
和数据分折讲习班

单击操作界面左侧
History键，弹出历史
窗口，查看多次拟合
结果；

The screenshot displays the Artemis [EXAFS data analysis] software interface. The main window is titled "Artemis [EXAFS data analysis]" and has a menu bar with "File", "Monitor", "Fit", "Plot", and "Help". On the left, there is a "Data sets" panel with buttons for "GDS", "Plot", "His" (History), and "Jow". Below this panel is a text area with the prompt "Use this space to fully describe this". The "History" window is open, showing a list of fits: "Fit 1" and "Fit 2". "Fit 2" is selected. The "Log file" tab is active, displaying the following information:

Name : Fit 2 (fcbzu)
Description : fit to cu010k
Figure of merit : 2
Time of fit : 2014-11-16T13:49:31
Environment : Demeter 0.9.20 with perl 5.018002 and using Ifeffit 1.2.1
Interface : Artemis (Wx 0.9923)
Prepared by :
Contact :
=====

Independent points : 24.8750000
Number of variables : 4
Chi-square : 852.5924664
Reduced chi-square : 40.8427529
R-factor : 0.0029767
Measurement uncertainty (k) : 0.0007215
Measurement uncertainty (R) : 0.0040810
Number of data sets : 1

Happiness = 100.00/100 color = #D8E796
**** Note: happiness is a semantic parameter and should ****
**** NEVER be reported in a publication -- NEVER! ****

guess parameters:

parameter	value	error	lower bound	upper bound
ampc1st	0.90751600	0.02148118	[1.00000]	
e0c1st	5.46149455	0.29447058	[0]	
rc1st	-0.00466465	0.00141034	[0]	

Buttons at the bottom of the History window include "Mark fits", "All", "None", "Regexp", "About", and "Close". A "Save this log" button is also present at the bottom of the Log file tab.



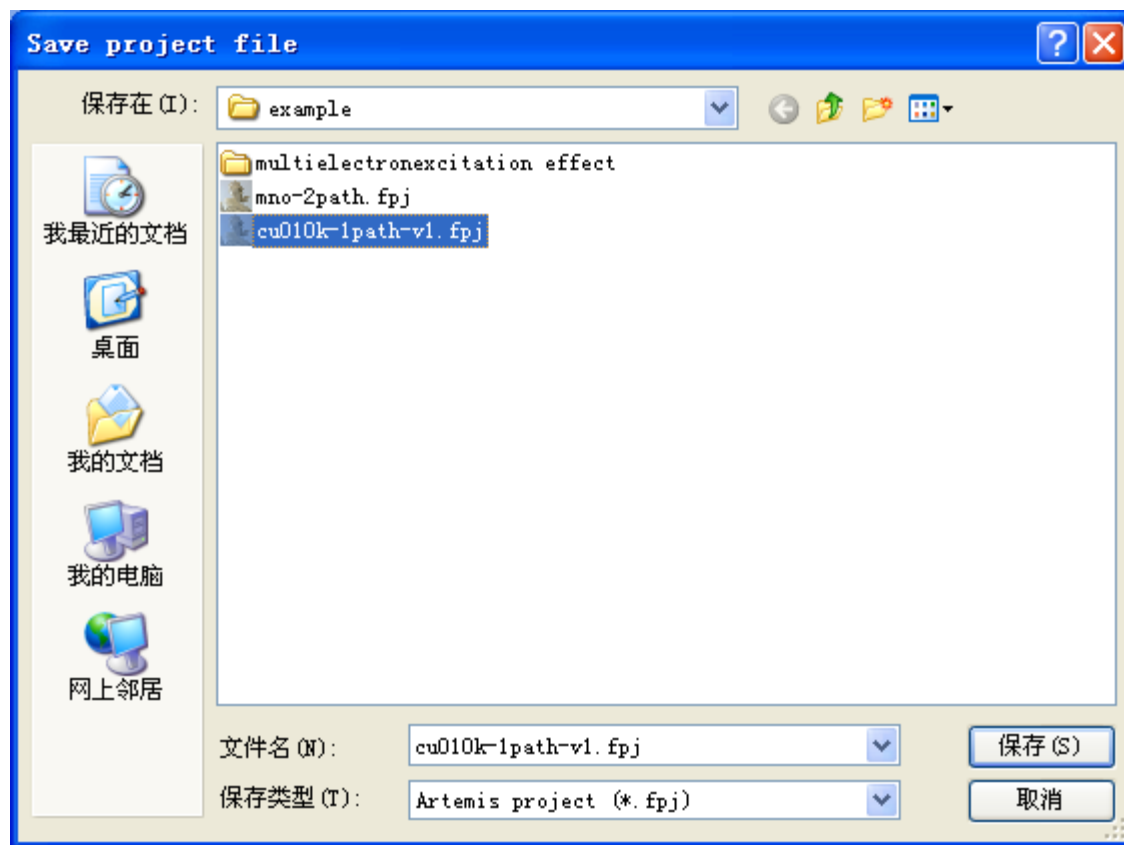


单壳层拟合-Cu 结果输出

数据处理

北京同步辐射装置
Beijing Synchrotron Radiation Facility

×射线吸收谱学实验
和数据分折讲习班



主窗口/file/save project as

武汉·2014

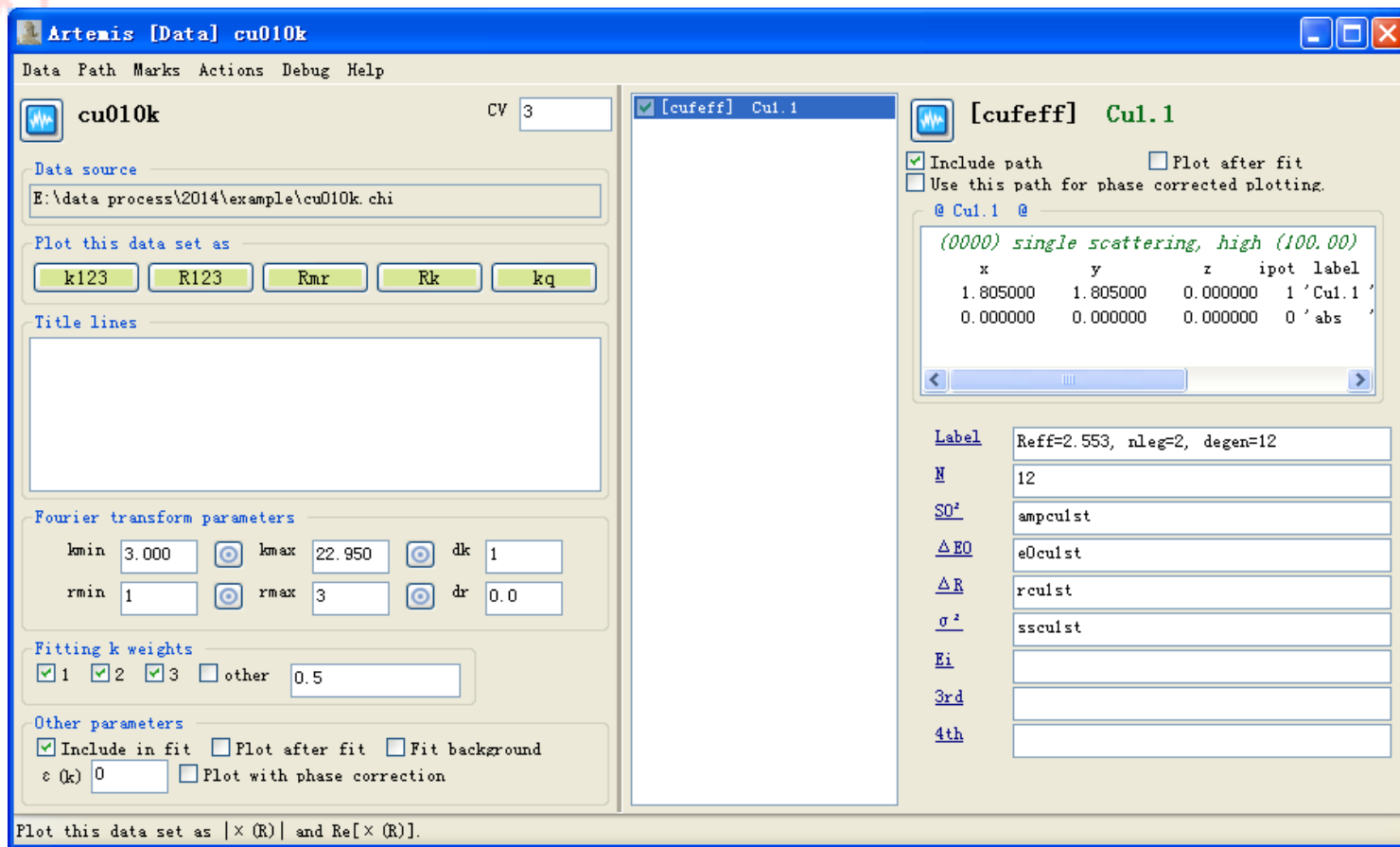


中国科学院高能物理研究所

单壳层拟合-Cu

保存拟合结果

数据处理



数据操作窗口/file/save project as

北京同步辐射装置
Beijing Synchrotron Radiation Facility

×射线吸收谱学实验
和数据分折讲习班

武汉·2014



中国科学院高能物理研究所

主要内容:

- 软件简介
- 数据处理
 - a 单壳层拟合
 - b 多壳层拟合
 - c 多权重拟合
 - d 多Feff拟合
- 注意点及小技巧
- 上机练习

北京同步辐射装置
Beijing Synchrotron Radiation Facility

×射线吸收谱学实验
和数据解析讲习班

武汉·2014

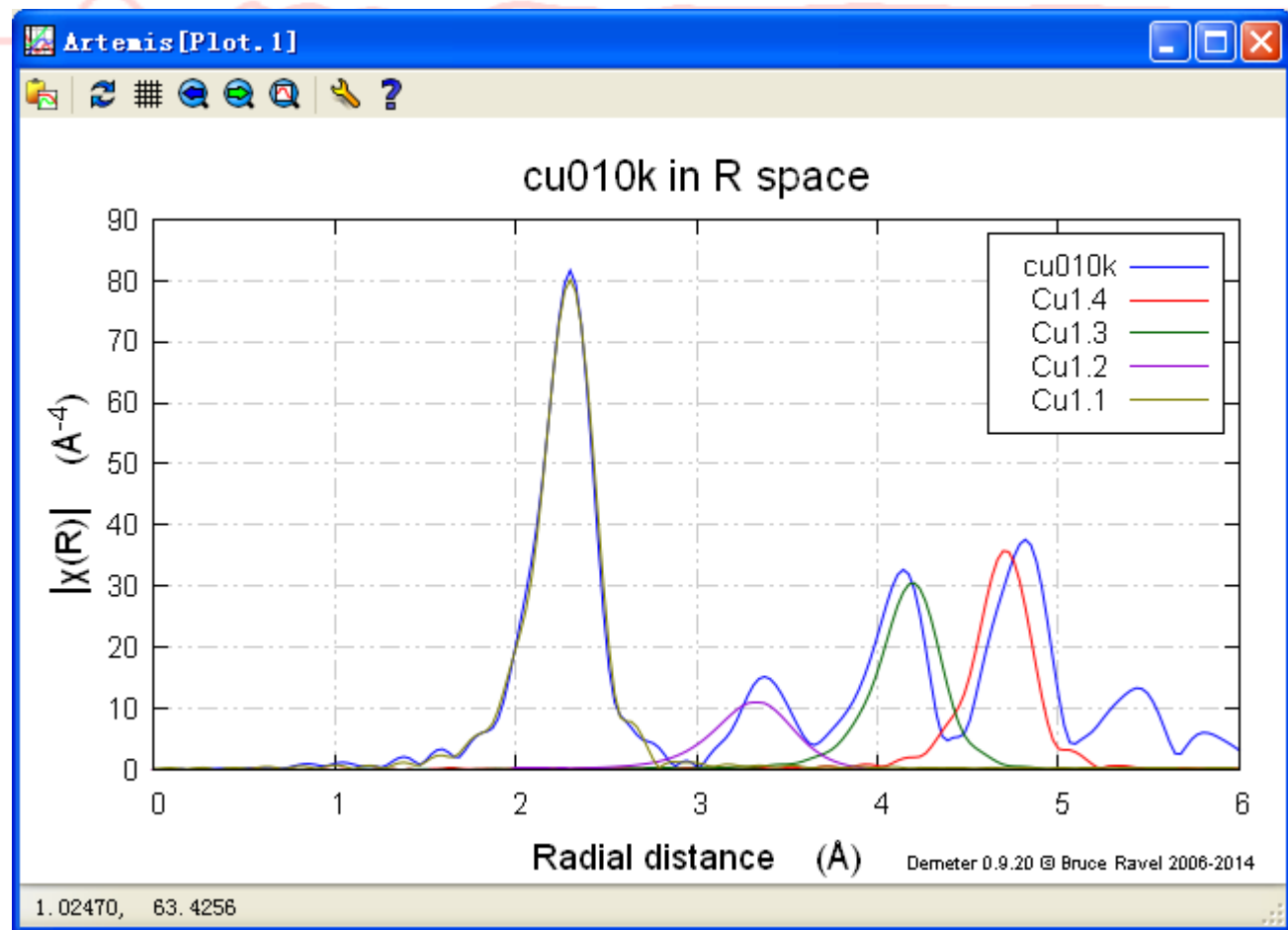


中国科学院高能物理研究所



多壳层拟合-Cu

数据处理



- 1数据操作窗口：扩大rmax至5.1A；
- 2将R小于5.4A的单散路径（leg=2）添加到pathlist中；
- 利用绘图窗口，确认路径对需要拟合的区域有贡献；

北京同步辐射装置
Beijing Synchrotron Radiation Facility

×射线吸收谱学实验
和数据分折讲习班

武汉·2014



中国科学院高能物理研究所



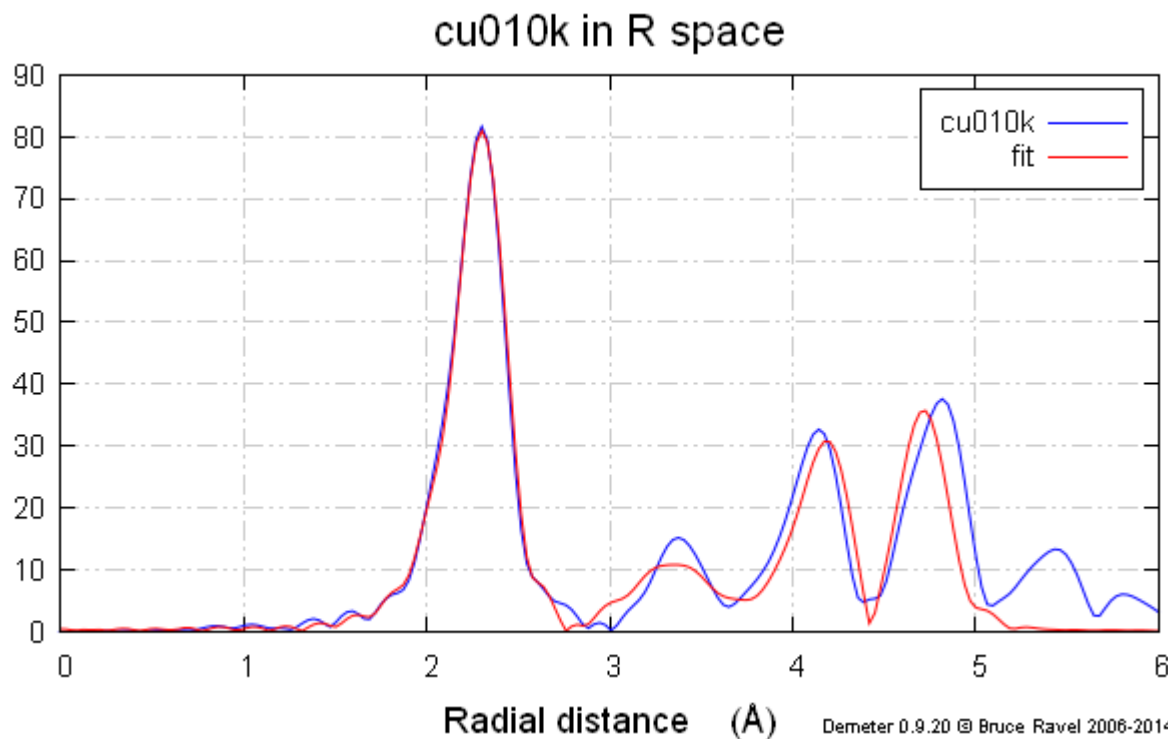
多壳层拟合-Cu

数据处理

北京同步辐射装置
Beijing Synchrotron Radiation Facility

<input type="checkbox"/>	[Cu]	Cu1.1
<input type="checkbox"/>	[Cu]	Cu1.2
<input type="checkbox"/>	[Cu]	Cu1.3
<input checked="" type="checkbox"/>	[Cu]	Cu1.4

	Type	Name
1	guess	ampcu4st
2	guess	E0cu
3	guess	delrcu4st
4	guess	sscu4st
5	guess	ampcu3st
6	guess	delrcu3st
7	guess	sscu3st
8	guess	ampcu2st
9	guess	delrcu2st
10	guess	sscu2st
11	guess	ampcu1st
12	guess	delrcu1st
13	guess	sscu1st



将4条单散路径的参数都设置后添加进GDS窗口，（4pathx4拟合参数）

×射线吸收谱学实验
和数据分析讲习班

武汉·2014



中国科学院高能物理研究所



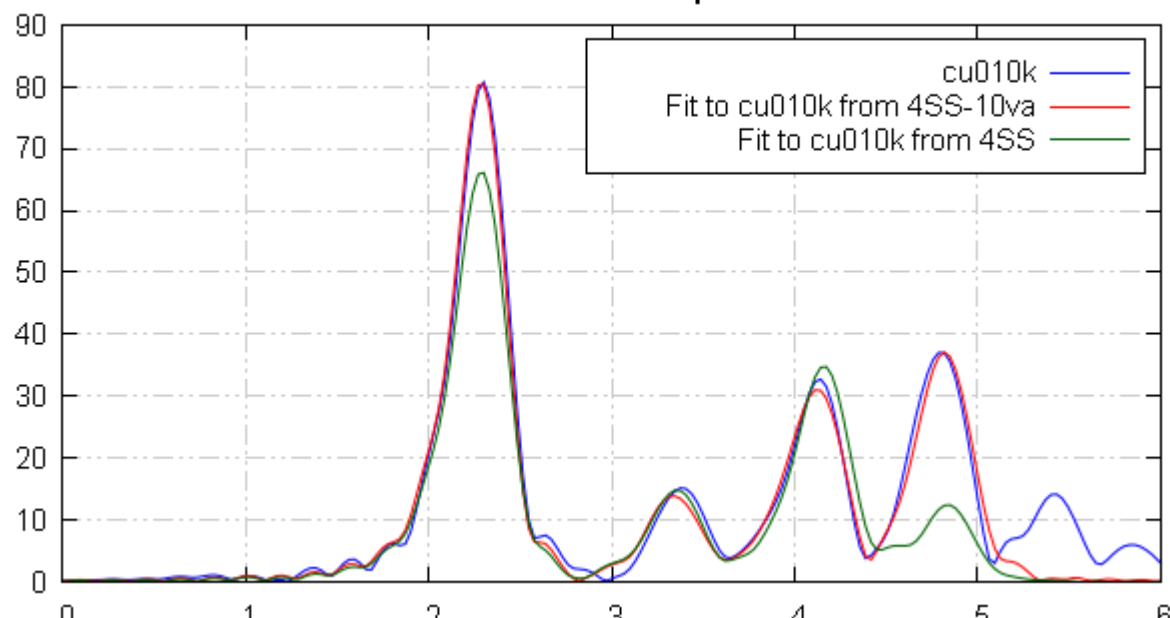
多壳层拟合-Cu

数据处理

北京同步辐射装置
Beijing Synchrotron Radiation Facility

×射线吸收谱学实验
和数据分折讲习班

cu010k in R space



name	N	S02	sigma^2	e0	delr	Reff	R
Cu1.1	12.000	0.886	0.00335	4.017	-0.01007	2.55270	2.54263
Cu1.2	6.000	0.885	0.00458	5.075	-0.01424	3.61000	3.59576
Cu1.3	24.000	0.919	0.00480	0.443	-0.01744	4.42130	4.40386
Cu1.4	12.000	-2.847	0.00425	2.652	-0.02014	5.10530	5.08516

4SS path 使用16个拟合参量 ($\Delta R = \alpha \cdot \text{reff}$) vs 使用4个拟合参量





多壳层拟合-Cu

数据处理

$N_{idp} \approx 2 \Delta k \Delta R / \pi$ 最大对立拟合参数个数例:

k-range 2.3-20.3; R-range 1.7-5.1 $N_{idp} \approx 38.9$

每一条路径需要至少4个独立拟合参数; 因此最多可以选取9条独立路径;

如果 $N_{var} > N_{idp}$ 独立拟合参数多于可用独立节点数, 此时拟合的结果是多解中的某一个解

数据操作窗口/Data/show N_{idp}

独立节点概念!!!





多壳层拟合-Cu

数据处理

拟合策略:

相同原子所有路径S02可设成统一

相同原子所有路径 σ^2 可设成统一

相同原子 $\Delta E0$ 可设成统一

配位数可以通过模型限定或合理限定

ΔR 可以用热膨胀或与结构关联起来

稳定性:

改变K、R的选取范围

放松对变量的限制

设定部分变量、放开部分变量

北京同步辐射装置
Beijing Synchrotron Radiation Facility

×射线吸收谱学实验
和数据分折讲习班

武汉·2014



中国科学院高能物理研究所

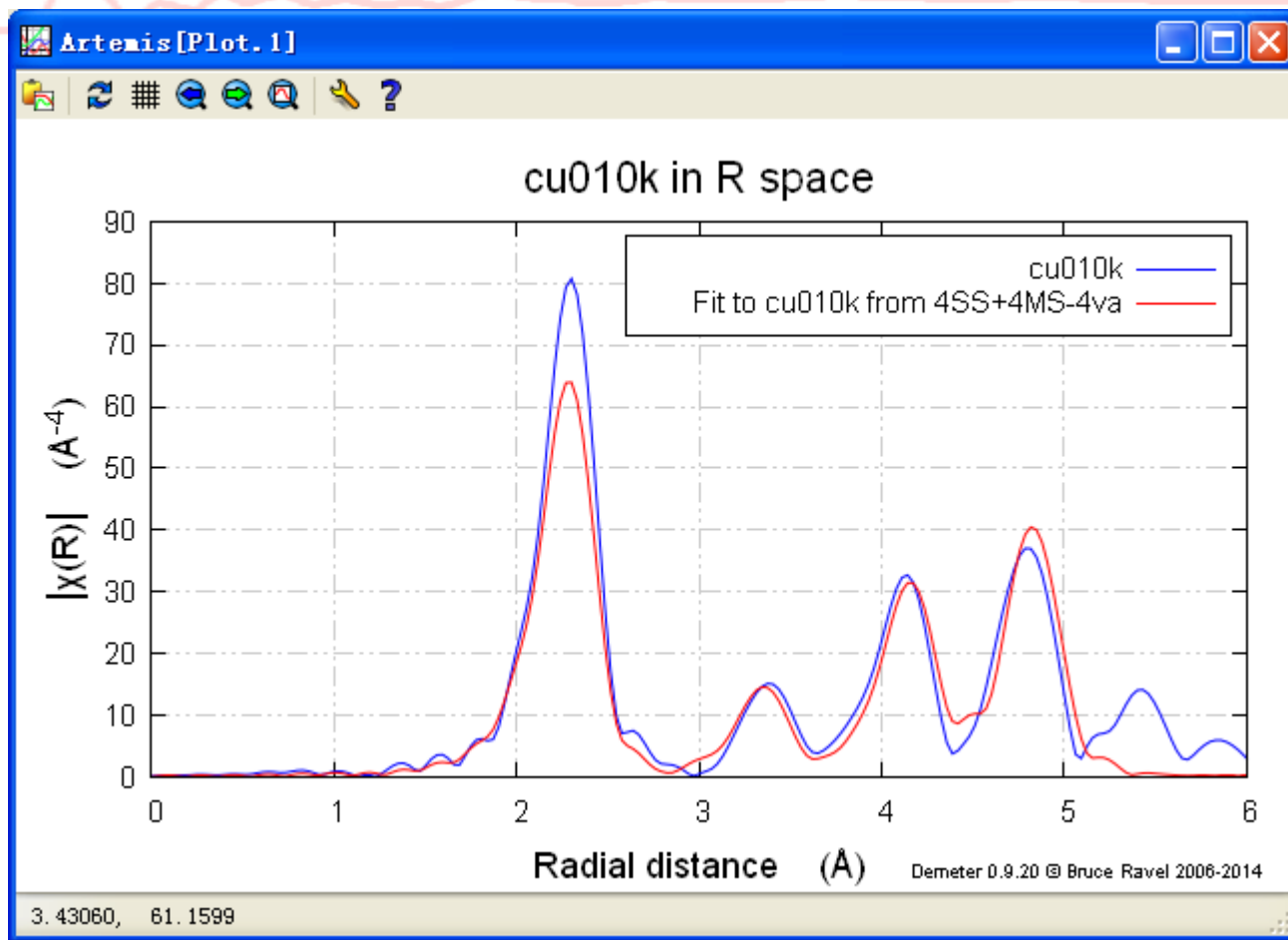


多壳层拟合-Cu

数据处理

北京同步辐射装置
Beijing Synchrotron Radiation Facility

×射线吸收谱学实验
和数据分折讲习班



路径选取: 增加了键长4-5.4Å的3leg MS 共4条

参数设置: 统一S02、 $\Delta E0$ 、 σ^2 , $\Delta R = \alpha \cdot r_{eff}$

武汉·2014



中国科学院高能物理研究所

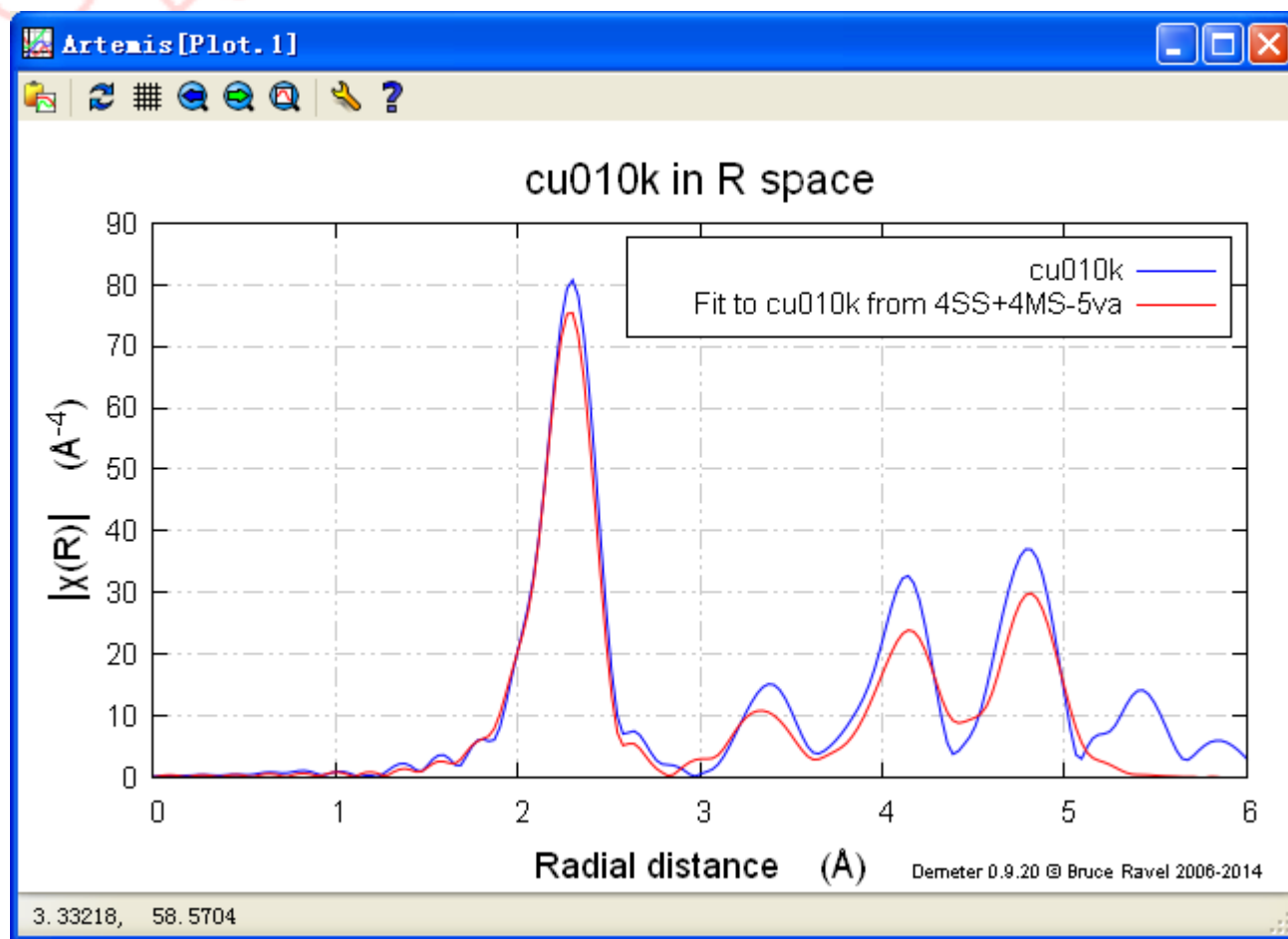


多壳层拟合-Cu

数据处理

北京同步辐射装置
Beijing Synchrotron Radiation Facility

×射线吸收谱学实验
和数据分折讲习班



参数设置：将1st path的ss 设置成独立

武汉·2014



中国科学院高能物理研究所



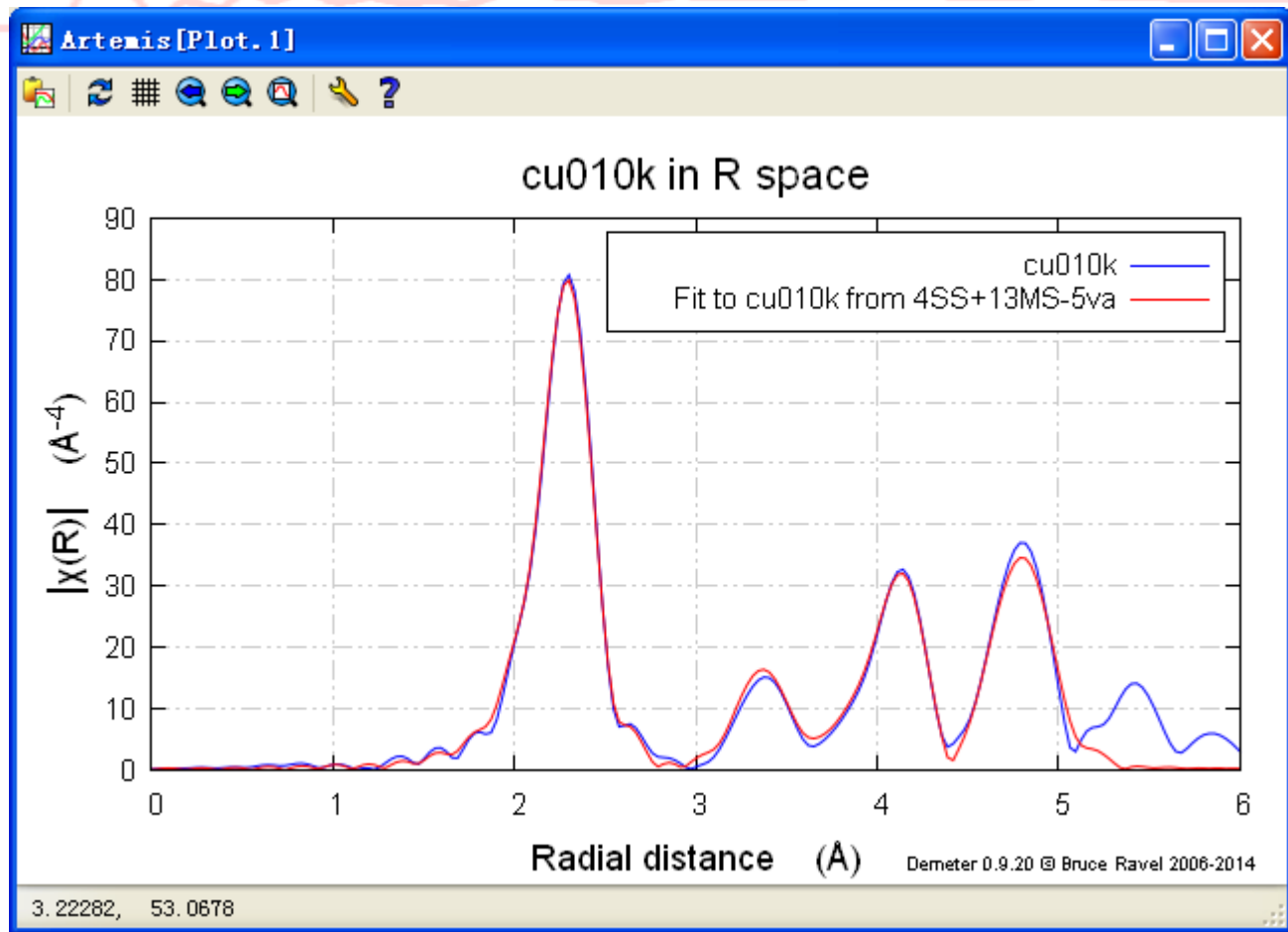
多壳层拟合-Cu

数据处理

北京同步辐射装置
Beijing Synchrotron Radiation Facility

×射线吸收谱学实验
和数据分析讲习班

武汉·2014



路径选取：增加了键长小于5.4Å的 MS 共9条

参数设置：统一S02、 $\Delta E0$ 、 σ^2 ， $\Delta R = \alpha \cdot \text{reff}$ ；1stpath σ^2 独立；



中国科学院高能物理研究所

主要内容:

- 软件简介
- 数据处理
 - a 单壳层拟合
 - b 多壳层拟合
 - c 多权重拟合
 - d 多Feff拟合
- 注意点及小技巧
- 上机练习

北京同步辐射装置
Beijing Synchrotron Radiation Facility

×射线吸收谱学实验
和数据解析讲习班

武汉·2014

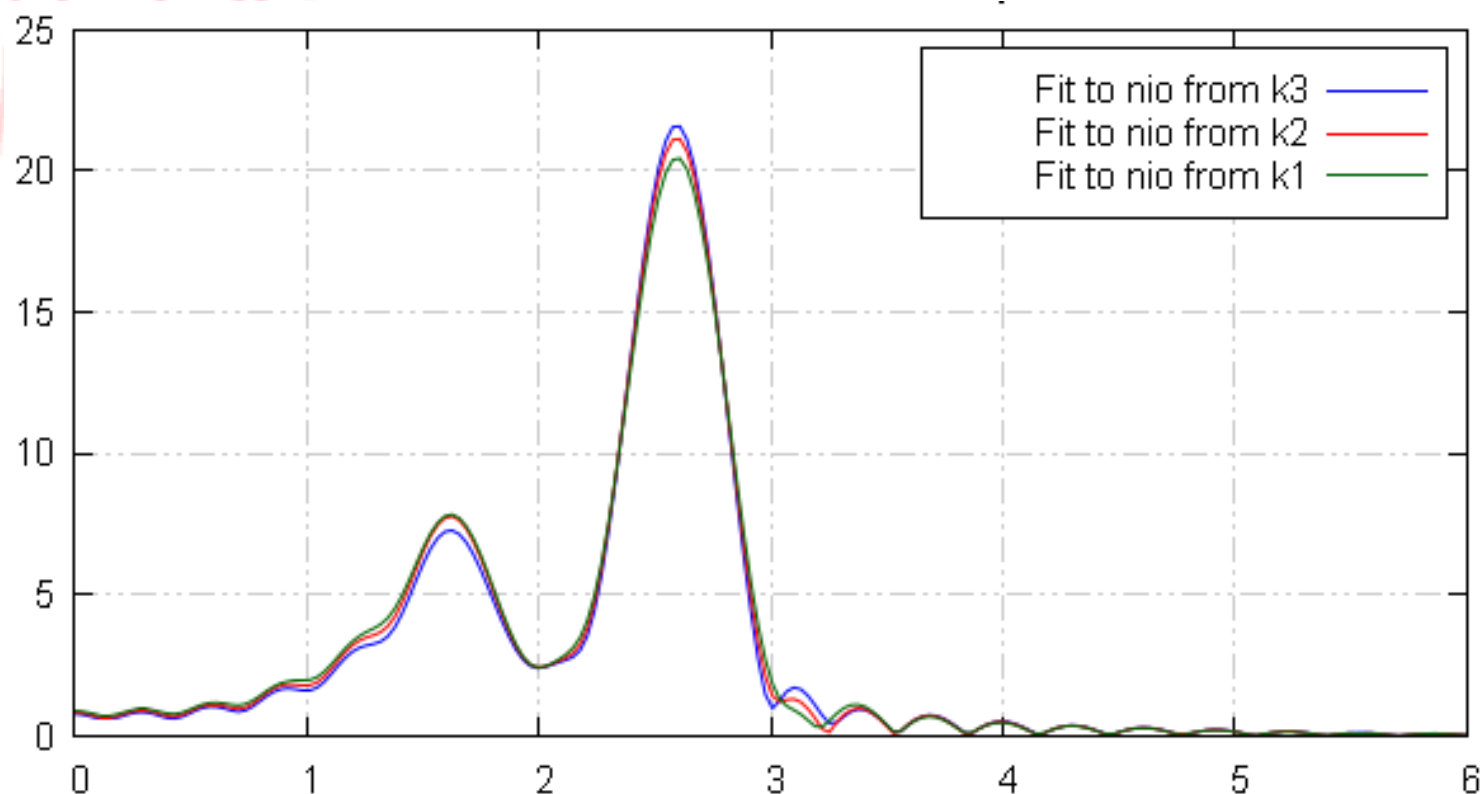


中国科学院高能物理研究所



多权重拟合-NiO

数据处理



不同原子对于k的响应不同； σ^2 、 ΔR 、 ΔE_0 对k的响应为非线性；

数据操作窗口左下：

Fitting k weights

☐ 1 ☒ 2 ☒ 3 ☐ other



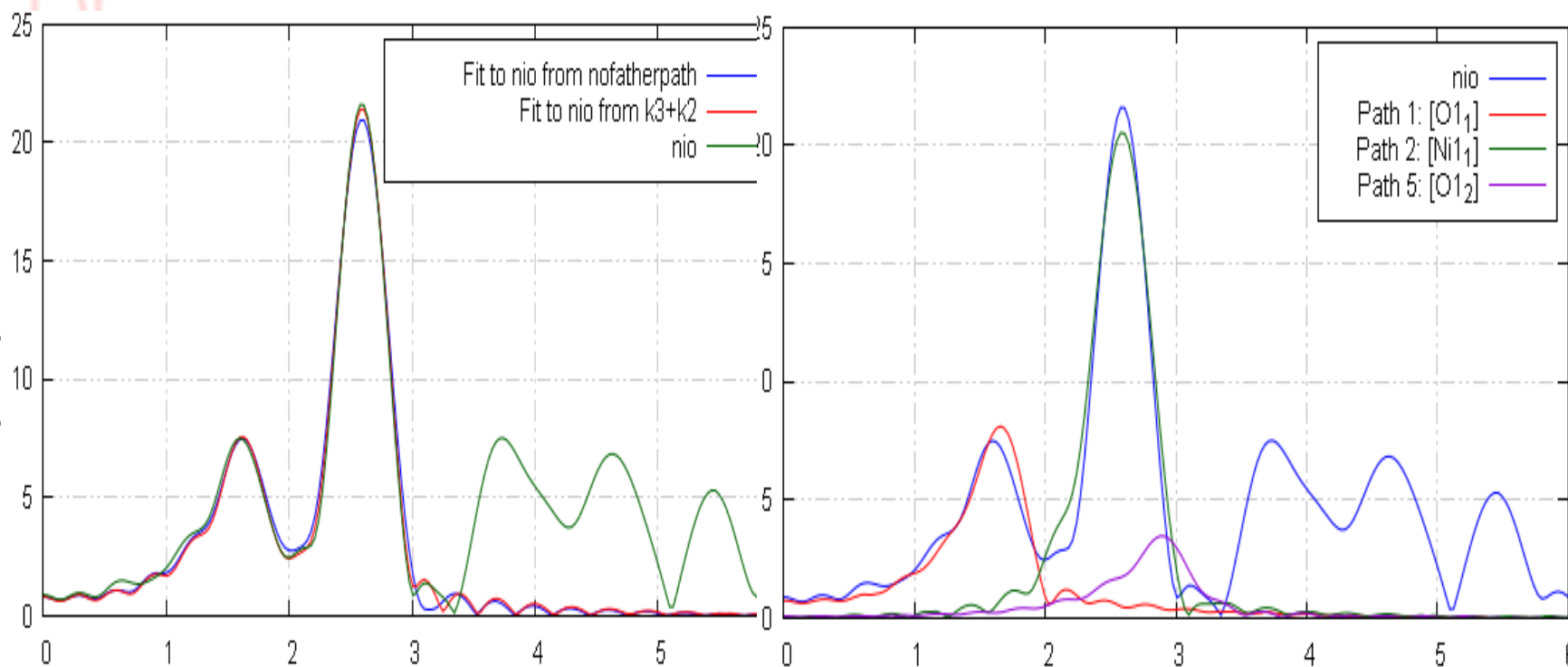


多权重拟合-NiO

数据处理

北京同步辐射装置
Beijing Synchrotron Radiation Facility

×射线吸收谱学实验
和数据分折讲习班



3.6A路径对3A路径的一个作用



主要内容:

- 软件简介
- 数据处理
 - a 单壳层拟合
 - b 多壳层拟合
 - c 多权重拟合
 - d 多Feff拟合
- 注意点及小技巧
- 上机练习

北京同步辐射装置
Beijing Synchrotron Radiation Facility

×射线吸收谱学实验
和数据解析讲习班

武汉·2014



中国科学院高能物理研究所



多Feff拟合

数据处理

例YBa₂Cu₃O₇: Cu有两种占位

```
title YBCO: Y Ba2 Cu3 O7
space = P M M M
rmax = 7.2 a=3.817 b=3.882 c=11.671
core = cu1
atoms
! At.type x y z tag
Y 0.5 0.5 0.5
Ba 0.5 0.5 0.1839
Cu 0 0 0 cu1
Cu 0 0 0.3546 cu2
O 0 0 0.5 O1
O 0 0 0.1589 O2
O 0 0 0.3780 O3
O 0.5 0 0.3783 O4
```

北京同步辐射装置
Beijing Synchrotron Radiation Facility

×射线吸收谱学实验
和数据分折讲习班

武汉·2014



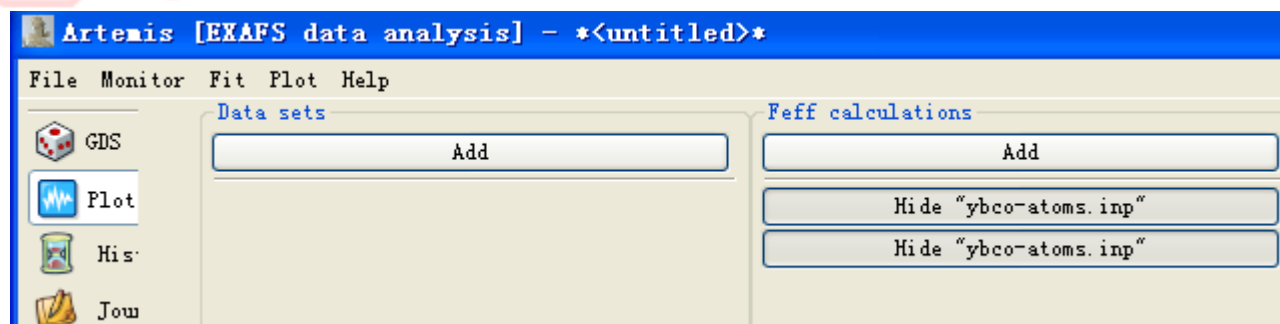
中国科学院高能物理研究所



多Feff拟合

数据处理

北京同步辐射装置
Beijing Synchrotron Radiation Facility



	Core	El.	x	y	z
1	<input type="checkbox"/>	Y	0.5	0.5	0.5
2	<input type="checkbox"/>	Ba	0.5	0.5	0.184
3	<input checked="" type="checkbox"/>	Cu	0	0	0
4	<input type="checkbox"/>	Cu	0	0	0.356
5	<input type="checkbox"/>	0	0	0.5	0
6	<input type="checkbox"/>	0	0	0	0.158
7	<input type="checkbox"/>	0	0	0.5	0.379
8	<input type="checkbox"/>	0	0.5	0	0.377

	Core	El.	x	y	z	Tag
1	<input type="checkbox"/>	Y	0.5	0.5	0.5	Y
2	<input type="checkbox"/>	Ba	0.5	0.5	0.184	Ba
3	<input type="checkbox"/>	Cu	0	0	0	cu1
4	<input checked="" type="checkbox"/>	Cu	0	0	0.356	cu2
5	<input type="checkbox"/>	0	0	0.5	0	o1
6	<input type="checkbox"/>	0	0	0	0.158	o2
7	<input type="checkbox"/>	0	0	0.5	0.379	o3
8	<input type="checkbox"/>	0	0.5	0	0.377	o4

<u>Label</u>	Reff=1.927, nleg=2, degen=2
<u>N</u>	2
<u>SO²</u>	1/3*ampsite1
<u>ΔEO</u>	enoto
<u>ΔR</u>	alpha*reff
<u>σ²</u>	sssitel

<u>Label</u>	Reff=1.846, nleg=2, degen=2
<u>N</u>	2
<u>SO²</u>	2/3*ampsite2
<u>ΔEO</u>	enoto
<u>ΔR</u>	alpha*reff
<u>σ²</u>	sssitel2
<u>Ei</u>	
<u>3rd</u>	

×射线吸收谱学实验
和数据分析讲习班

武汉·2014



中国科学院高能物理研究所



多Feff拟合

数据处理

北京同步辐射装置
Beijing Synchrotron Radiation Facility

<u>Label</u>	Reff=1.927, nleg=2, degen=2
<u>N</u>	2
<u>SO²</u>	1/3*ampsite1
<u>ΔEQ</u>	enoto
<u>ΔR</u>	alpha*reff
<u>σ²</u>	sssitel

<u>Label</u>	Reff=1.846, nleg=2, degen=2
<u>N</u>	2
<u>SO²</u>	2/3*ampsite2
<u>ΔEQ</u>	enoto
<u>ΔR</u>	alpha*reff
<u>σ²</u>	sssiste2

XAFS信号获取的信息为样品的统计平均值

修正拟合参数（占位1 配位数*1/3， 占位2 配位数*2/3）

×射线吸收谱学实验
和数据分折讲习班

武汉·2014



中国科学院高能物理研究所

主要内容:

- 软件简介
- 数据处理
 - a 单壳层拟合
 - b 多壳层拟合
 - c 多权重拟合
 - d 多Feff拟合
- 注意点及小技巧
- 上机练习

北京同步辐射装置
Beijing Synchrotron Radiation Facility

×射线吸收谱学实验
和数据解析讲习班

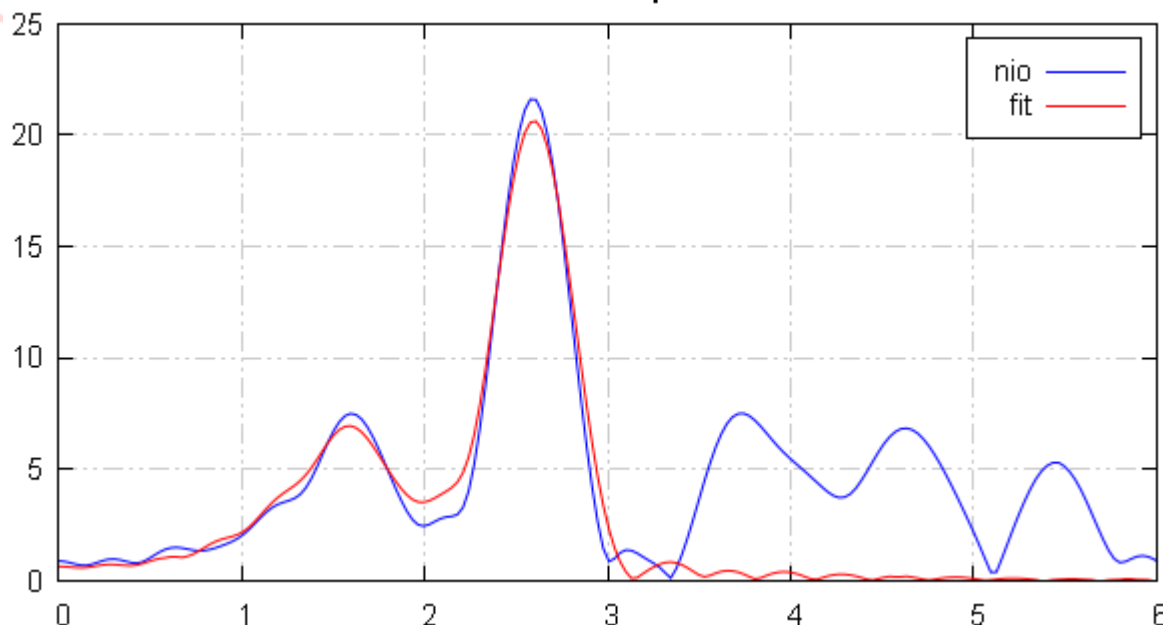
武汉·2014



中国科学院高能物理研究所

例子1:错误的模型

NiO 样品用NiS模型进行拟合;



guess parameters:

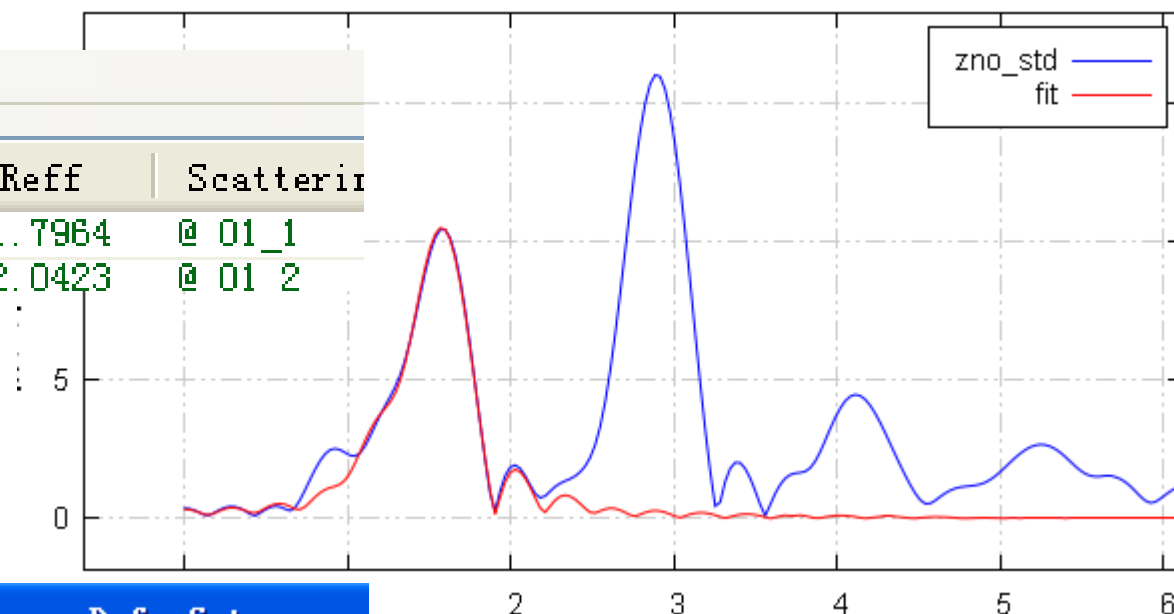
enots	=	-23.43613266	# +/-	4.70512291	[0]
amp	=	1.48776701	# +/-	0.18008590	[1.00000]
enotni	=	0.30571123	# +/-	1.31951599	[0]
delrni	=	0.01799916	# +/-	0.00786207	[0]
ssni	=	0.00792367	# +/-	0.00085477	[0.00300]
delrs	=	0.11081540	# +/-	0.02757453	[0]
ssS	=	0.01427525	# +/-	0.00171318	[0.00300]

例子2:壳层很接近

ZnO 第一配位拟合

Scattering Paths

	Degen	Reff	Scattering
0000	1.000	1.7984	@ 01_1
0001	3.000	2.0423	@ 01_2



Artemis [GDS] Guess, Def, Set param

	Type	Name	
1	guess	amp1	1.00000
2	guess	enot	0
3	def	delr1	reff*alpha
4	guess	ss1	0.00300
5	def	delr2	reff*alpha
6	guess	alpha	0.00500
7	guess	ss2	0.00300
8	guess	amp2	1

guess parameters:

amp1 = -0.40030956 # +/- 1.07284
 enot = 6.57718523 # +/- 3.510053
 ss1 = 0.01180511 # +/- 0.0230933
 alpha = -0.03166901 # +/- 0.007028
 ss2 = 0.00406466 # +/- 0.0015860
 amp2 = 1.11763518 # +/- 0.33260

北京同步辐射装置
Beijing Synchrotron Radiation Facility

×射线吸收谱学实验
和数据分折讲习班

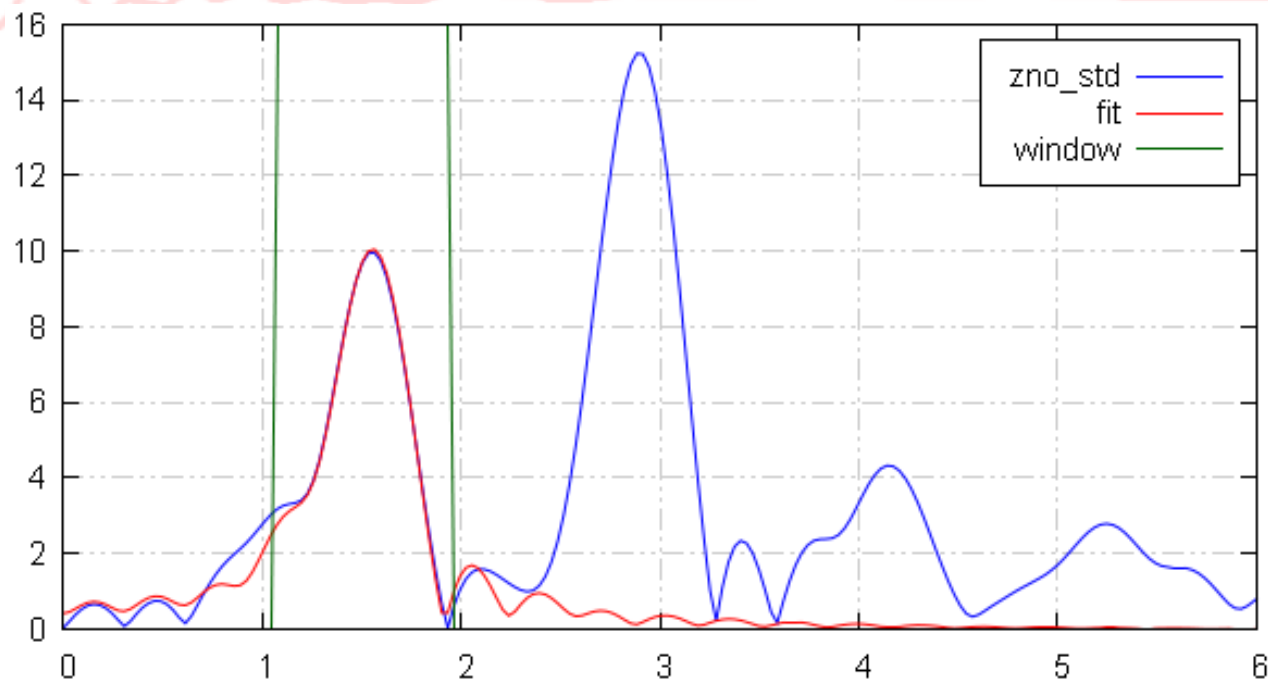
武汉·2014



中国科学院高能物理研究所

例子2:壳层很接近

ZnO 第一配位拟合



Artemis [GDS] Guess, Def, Set paramet			
	Type	Name	
1	guess	ampl	1.00000
2	guess	enot	0
3	def	delr1	reff*alpha
4	guess	ss1	0.00300
5	def	delr2	reff*alpha
6	guess	alpha	0.00500
7	guess	ss2	0.00300
8	def	amp2	3*ampl
9	guess		
10	guess		

guess parameters:

amp1 = 0.41601459

enot = 5.23135495

ss1 = 0.19461402

alpha = -0.03403929

ss2 = 0.00454527

def parameters:

delr1 = -0.06951845

delr2 = -0.06951845

amp2 = 1.24804377

北京同步辐射装置
Beijing Synchrotron Radiation Facility

×射线吸收谱学实验
和数据分折讲习班

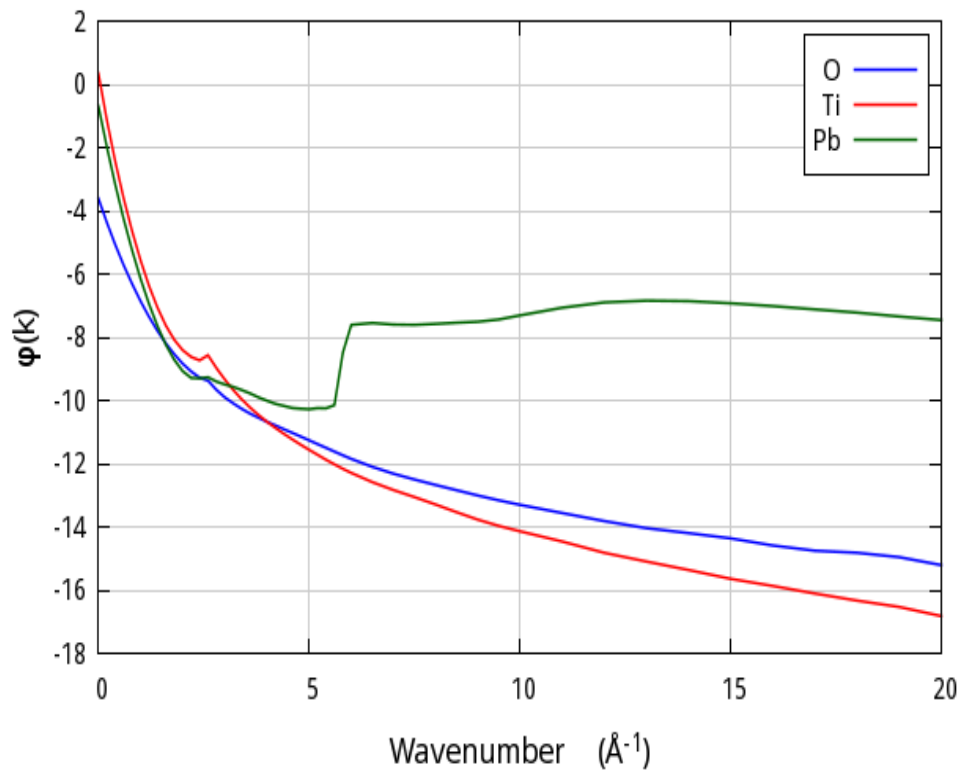
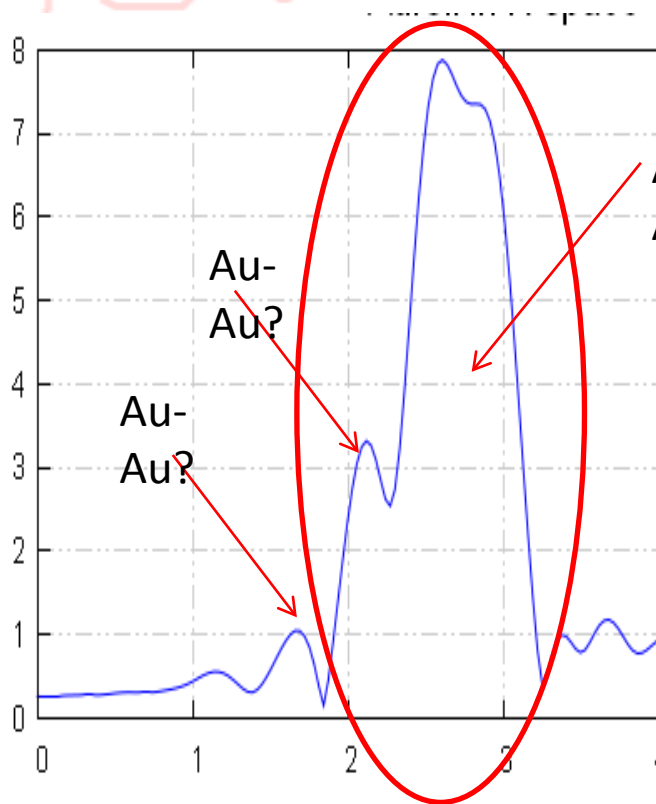
武汉·2014



中国科学院高能物理研究所

例子3: 重金属峰劈裂

Aufoil 第一配位拟合



重金属的相移因子存在突变, 会使得其配位峰在R空间表现出峰的劈裂

北京同步辐射装置
Beijing Synchrotron Radiation Facility

×射线吸收谱学实验
和数据分折讲习班

武汉·2014

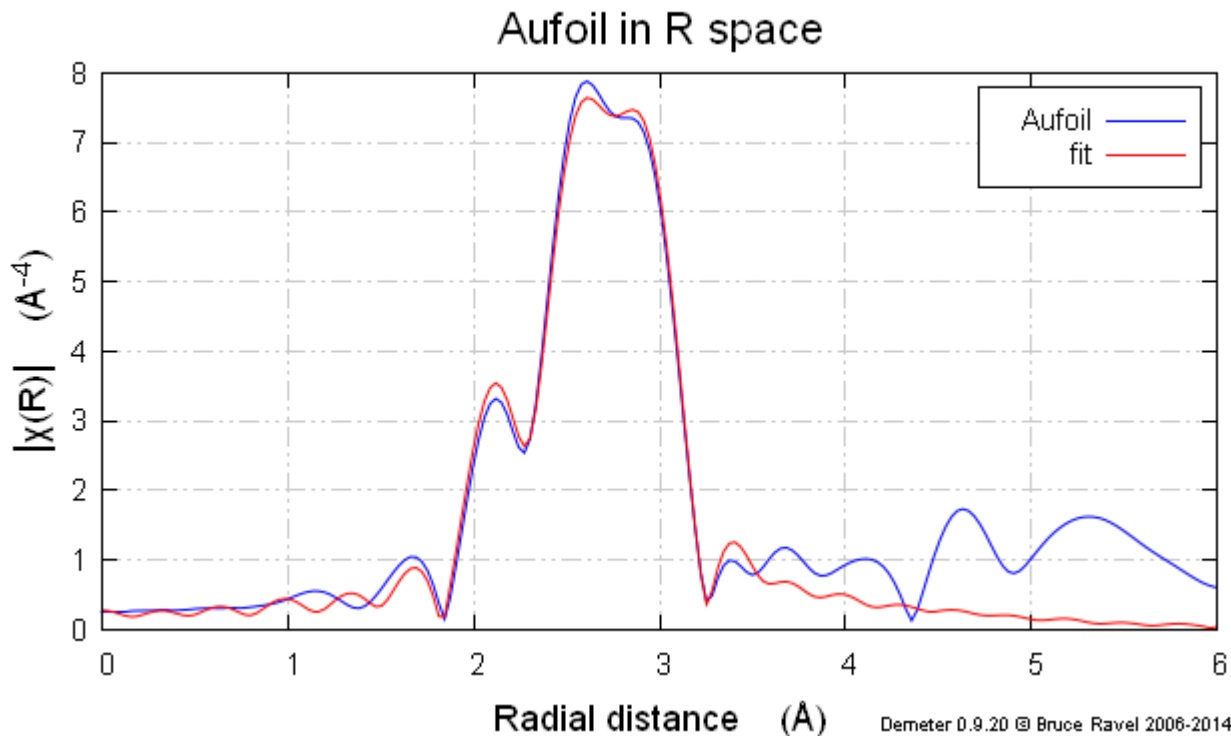


中国科学院高能物理研究所

例子3: 重金属峰劈裂

Aufoil 第一配位拟合

北京同步辐射装置
Beijing Synchrotron Radiation Facility



guess parameters:

<u>amp</u>	=	0.75277174	# +/-	0.03214521	[1.00000]
<u>enot</u>	=	4.28305889	# +/-	0.42210268	[0]
<u>delr</u>	=	-0.02419204	# +/-	0.00196120	[0]
<u>ss</u>	=	0.00751967	# +/-	0.00023077	[0.00300]

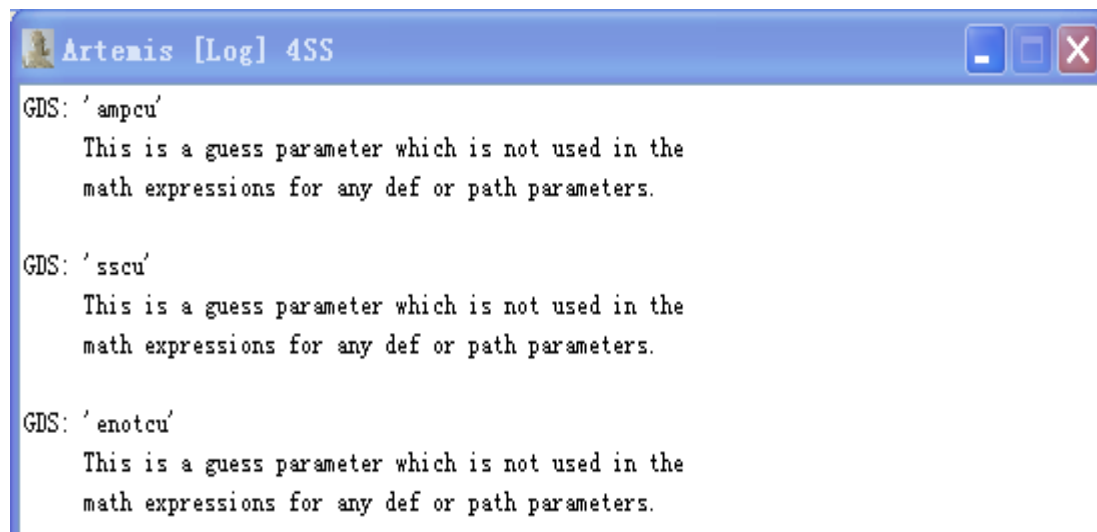
×射线吸收谱学实验
和数据分折讲习班

武汉·2014



中国科学院高能物理研究所

易犯错误



```
Artemis [Log] 4SS

GDS: 'ampcu'
      This is a guess parameter which is not used in the
      math expressions for any def or path parameters.

GDS: 'sscu'
      This is a guess parameter which is not used in the
      math expressions for any def or path parameters.

GDS: 'enotcu'
      This is a guess parameter which is not used in the
      math expressions for any def or path parameters.
```

北京同步辐射装置
Beijing Synchrotron Radiation Facility

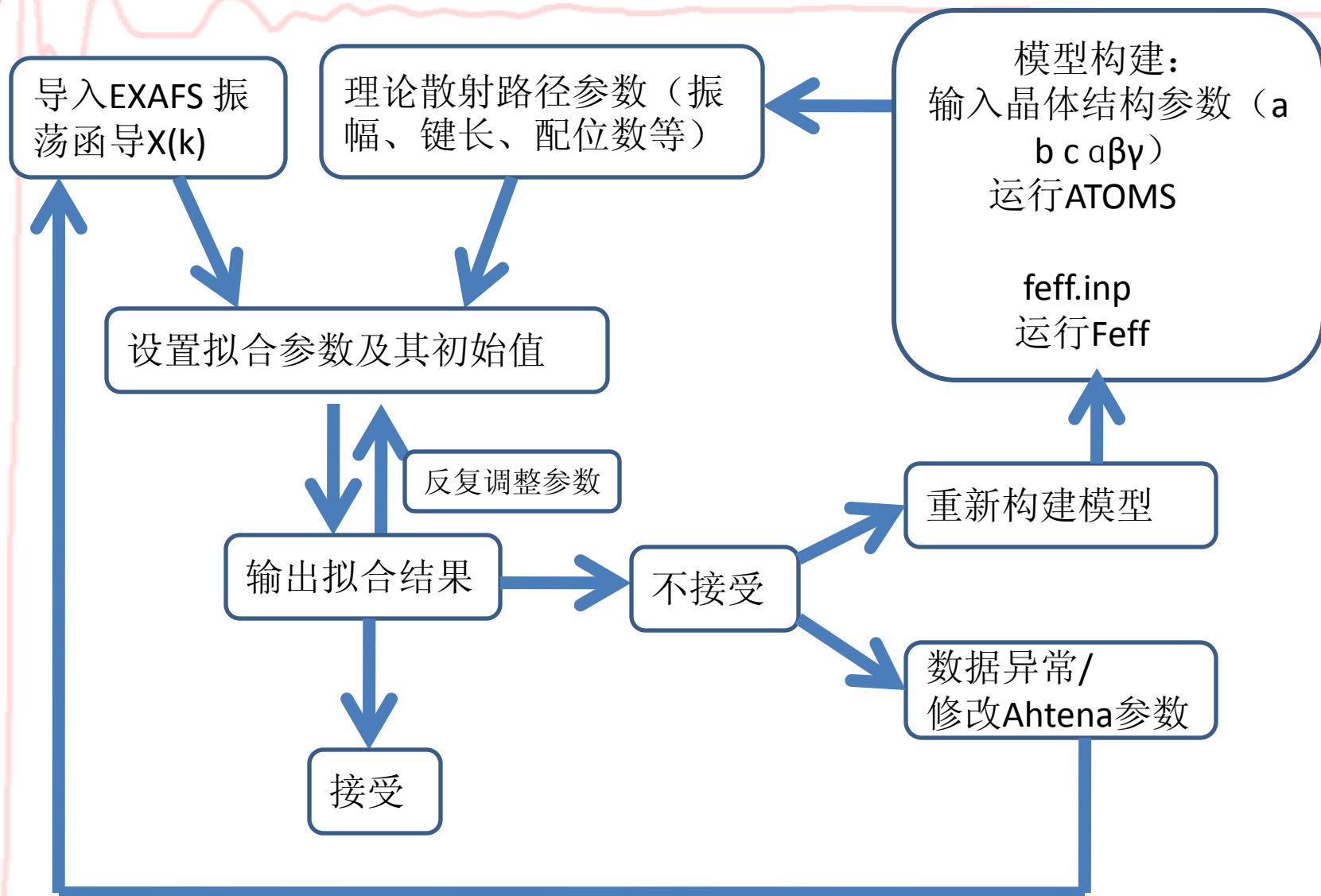
×射线吸收谱学实验
和数据解析讲习班

武汉·2014



中国科学院高能物理研究所

ARTEMIS 处理流程





北京同步辐射装置
Beijing Synchrotron Radiation Facility

良好的数据 准确的模型

×射线吸收谱学实验
和数据分析讲习班

武汉·2014



中国科学院高能物理研究所

上机练习：C0304 拟合演示

Reference

Depero L.E., Levrangi P., Sberveglieri G.: "Structural Models for Cobalt-Tin Oxide Thin Films", J. Solid State Chem. **116** (1995) 256-264.

Data

Published Crystallographic Data

Space Group: *F*-43*m*

Cell Parameters:

Lattice Constant [nm]	Angle [°]	Constants' Ratio	Volume <i>V</i> [nm ³]
<i>a</i> = 0.8083 <i>b</i> = 0.8083 <i>c</i> = 0.8083	α = 90 β = 90 γ = 90	<i>a</i> / <i>b</i> = 1.000 <i>b</i> / <i>c</i> = 1.000 <i>c</i> / <i>a</i> = 1.000	0.52810

Standardized Crystallographic Data

Space Group: *F*-43*m*

Cell Parameters:

Unit Cell				Niggli-reduced Cell			
Lattice Constant [nm]	Angle [°]	Constants' Ratio	Volume <i>V</i> [nm ³]	Lattice Constant [nm]	Angle [°]	Constants' Ratio	Volume <i>V</i> [nm ³]
<i>a</i> = 0.8083 <i>b</i> = 0.8083 <i>c</i> = 0.8083	α = 90 β = 90 γ = 90	<i>a</i> / <i>b</i> = 1.000 <i>b</i> / <i>c</i> = 1.000 <i>c</i> / <i>a</i> = 1.000	0.5281	<i>a</i> = 0.57155 <i>b</i> = 0.57155 <i>c</i> = 0.57155	α = 60. β = 60. γ = 60.	<i>a</i> / <i>b</i> = 1.000 <i>b</i> / <i>c</i> = 1.000 <i>c</i> / <i>a</i> = 1.000	0.13202

Atom Coordinates:

Site	Element	Wyckoff Symbol	Symmetry	x	y	z	Occupation	Coordination Number	Atomic Environment Type
O1	O	16e	.3 <i>m</i>	0.140	0.140	0.140	1		
Co1	Co	16e	.3 <i>m</i>	0.375	0.375	0.375	1		
O2	O	16e	.3 <i>m</i>	0.610	0.610	0.610	1		
Co2	Co	4 <i>d</i>	-43 <i>m</i>	3/4	3/4	3/4	1		
Co3	Co	4 <i>a</i>	-43 <i>m</i>	0	0	0	1		

Note: Atom coordinates assigned by the editor.

http://www.springermaterials.com/docs/VSP/datasheet/lpf-sd/01101000/LPFSD_1101456.html

上机练习：C0304 拟合演示

北京同步辐射装置
Beijing Synchrotron Radiation Facility

×射线吸收谱学实验
和数据分析讲习班

Stand-alone Atoms

File Help

Atoms Feff Paths Console Document Configure

Open file Save data Export Clear all Run Atoms

Titles

Name: co3o4-216

Space Group: 216

Edge: K Style: Feff6 - elem

☐ Self-consistency Rscf: 5.0

Add a site

Lattice Constants

A: 8.083 B: 8.083 C: 8.083

α : β : γ :

Radial distances

Cluster size: 8.0 Longest path: 5.0

Shift vector

0 0 0 insert

	Core	El.	x	y	z	Tag
1	<input checked="" type="checkbox"/>	co	0	0	0	Co1
2	<input type="checkbox"/>	co	0.75	0.75	0.75	Co2
3	<input type="checkbox"/>	co	0.375	0.375	0.375	Co3
4	<input type="checkbox"/>	o	0.14	0.14	0.14	O1
5	<input type="checkbox"/>	o	0.61	0.61	0.61	O2
6	<input type="checkbox"/>					

武汉·2014

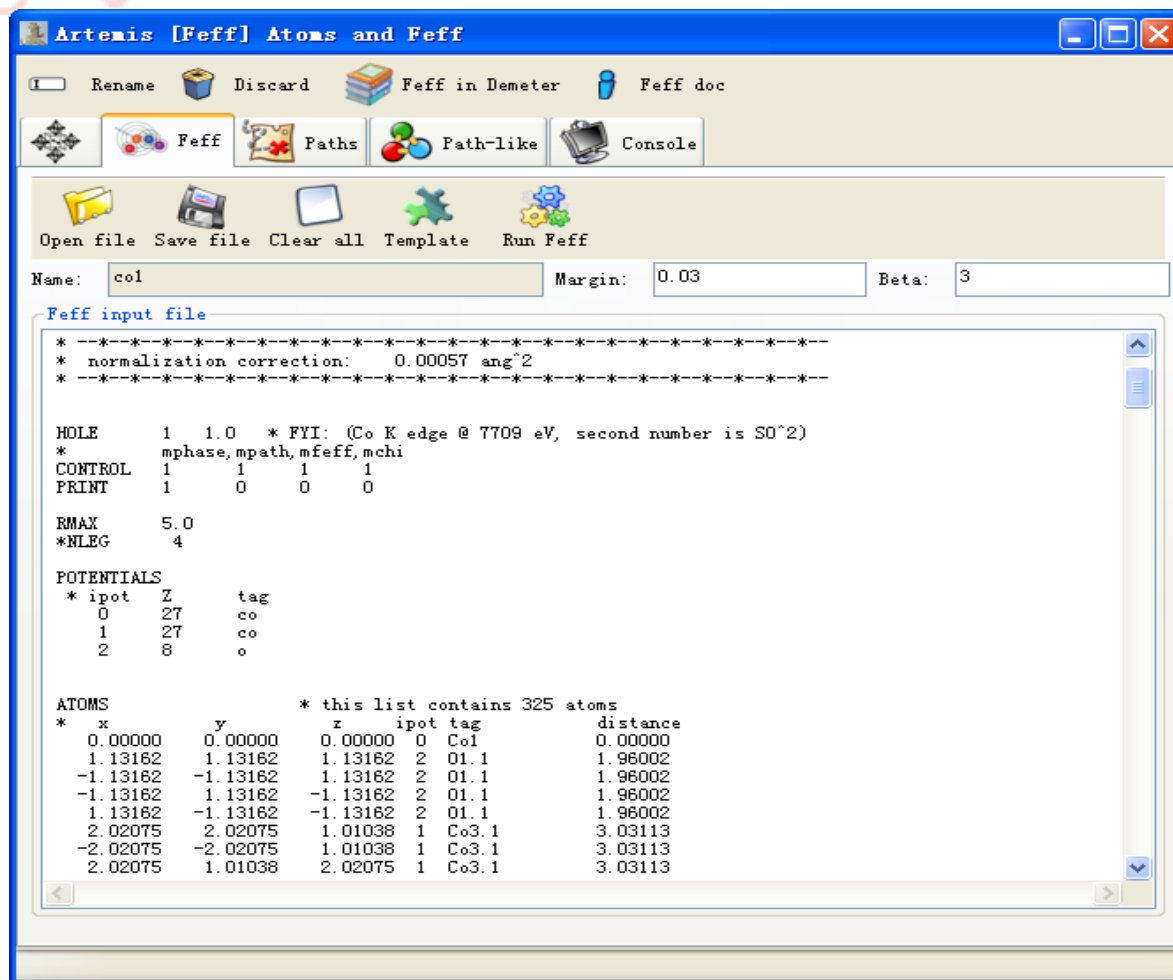


中国科学院高能物理研究所

上机练习：C0304 拟合演示

北京同步辐射装置
Beijing Synchrotron Radiation Facility

×射线吸收谱学实验
和数据分析讲习班

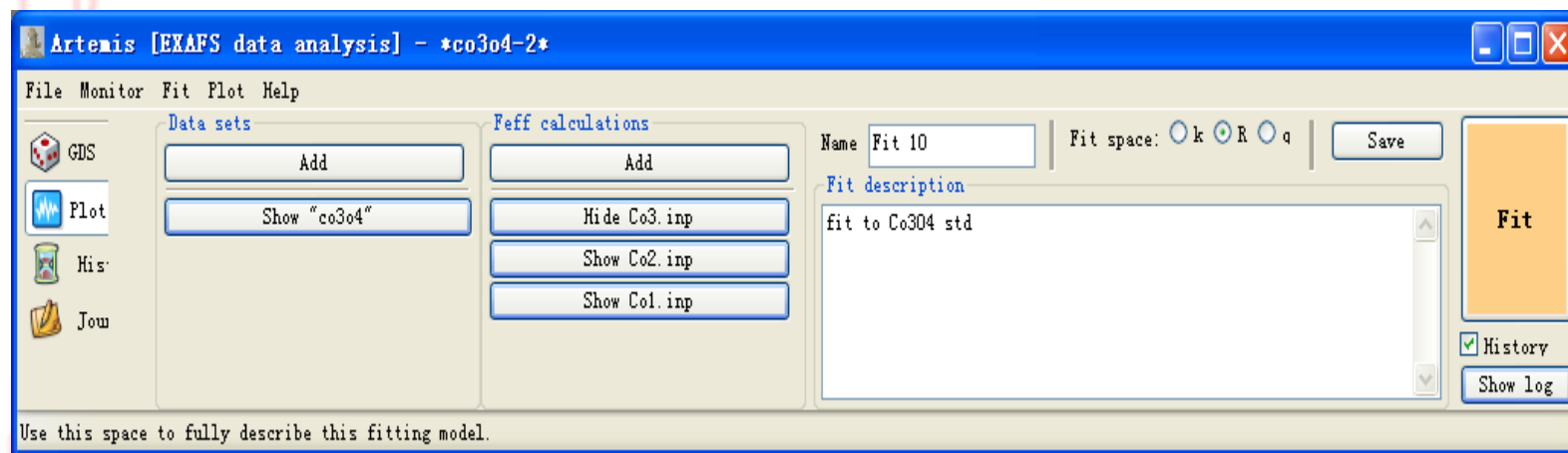


改变吸收原子选择，点击run atoms，将feff文件保存co1.inp, co2.inp, co3.inp;



中国科学院高能物理研究所

上机练习：C0304 拟合演示



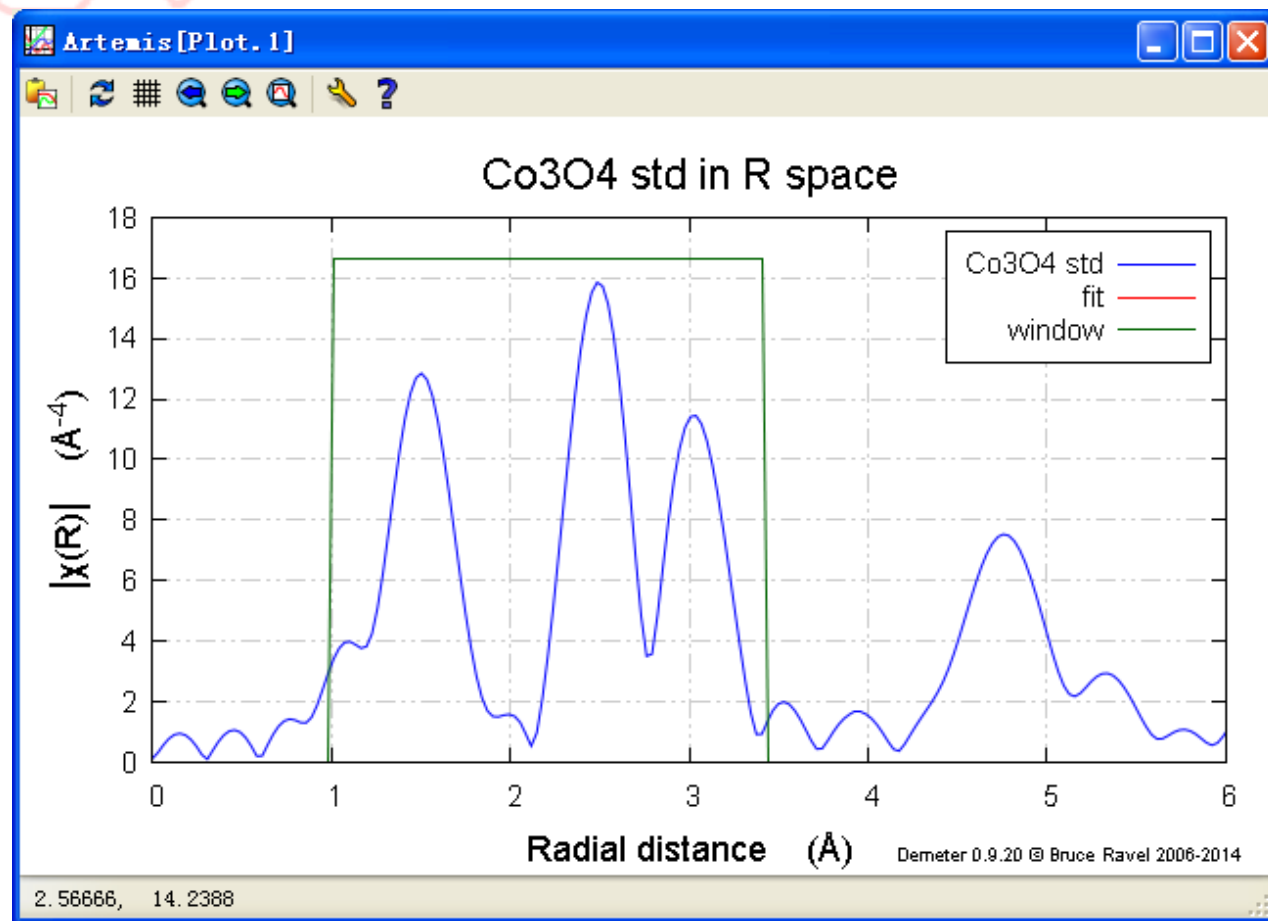
Data sets Add已处理好的Co3O4.prj

Feff calculation Add 保存的 co1.inp , co2.inp , co3.inp

弹出下述窗口



上机练习：C0304 拟合演示



北京同步辐射装置
Beijing Synchrotron Radiation Facility

×射线吸收谱学实验
和数据分折讲习班

武汉·2014

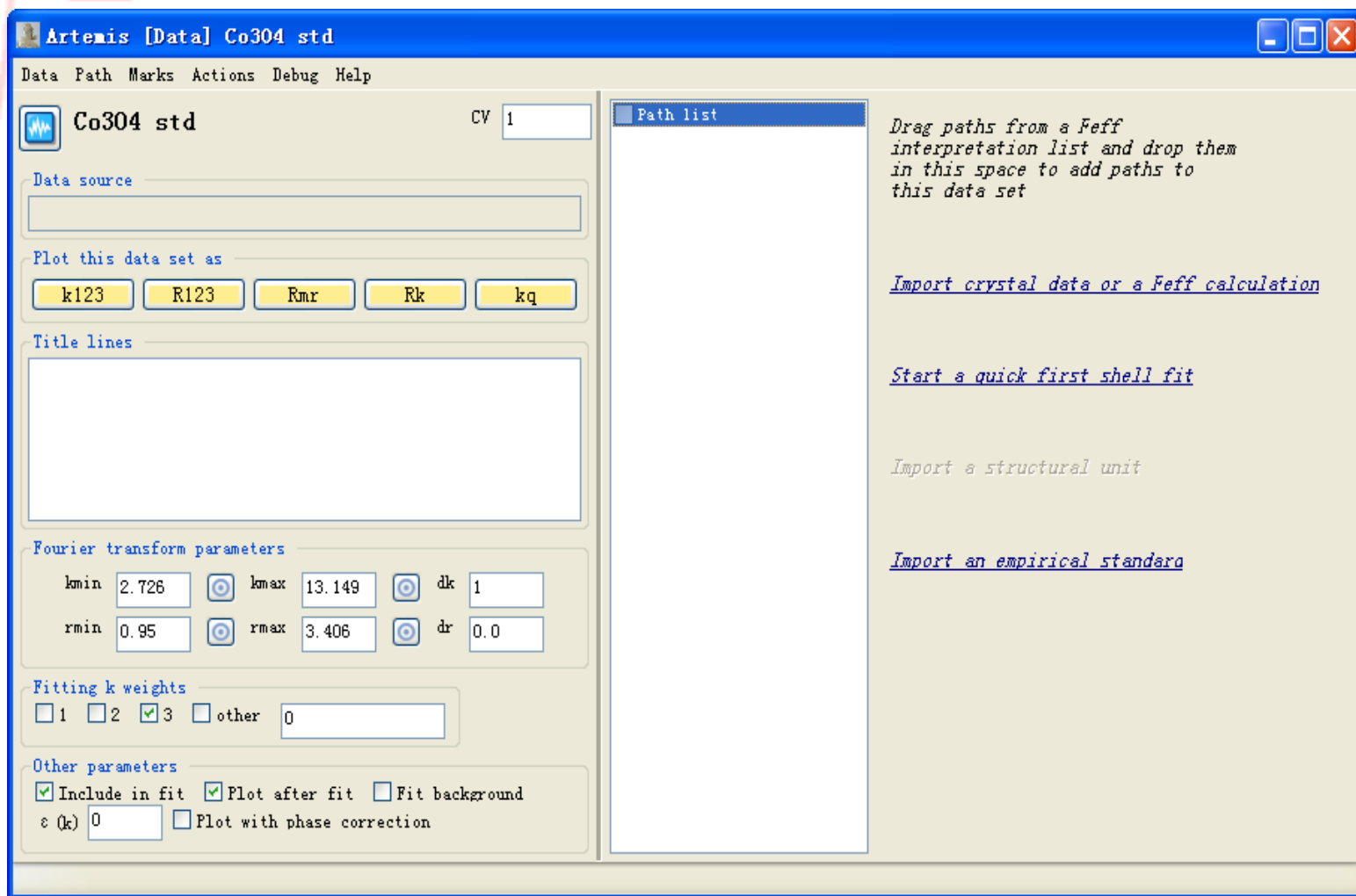


中国科学院高能物理研究所

上机练习：C0304 拟合演示

北京同步辐射装置
Beijing Synchrotron Radiation Facility

×射线吸收谱学实验
和数据分折讲习班



此时自由节点数为16.3

武汉·2014



中国科学院高能物理研究所

上机练习：C0304 拟合演示

北京同步辐射装置
Beijing Synchrotron Radiation Facility

×射线吸收谱学实验
和数据分折讲习班

Artemis [Feff] Atoms and Feff

Rename Discard Feff in Demeter Feff doc

Feff Paths Path-like Console

Save Plot paths k $|R|$ Re Im Rank

Name of this Feff calculation: co3

Description

```
# This paths.dat file was written by Demeter 0.9.20
# Distance fuzz = 0.030 Å
# The central atom is denoted by this token: @
# Cluster size = 5.00 Å, containing 244 atoms
# 25 paths were found within 5.000 Å
# Forward scattering cutoff 20.00
# Angle fuzz = 3.00 degrees
```

Scattering Paths

	Degen	Reff	Scattering path	Rank	Legs	Type
0000	4.000	1.9600	@ 02.1 @	100.00	2	single scattering
0001	12.000	3.3510	@ Co2.1 @	89.68	2	single scattering
0002	12.000	3.3939	@ 01.1 @	81.61	2	single scattering
0003	4.000	3.5000	@ Co1.1 @	26.88	2	single scattering
0004	12.000	3.5604	@ 02.1 02.1 @	13.38	3	other double scattering
0005	24.000	3.6092	@ 02.1 Co2.1 @	31.20	3	obtuse triangle
0006	12.000	3.8673	@ 02.1 Co2.1 02.1 @	5.36	4	dog-leg
0007	4.000	3.9200	@ 02.1 02.1 @	3.97	4	rattle
0008	12.000	3.9201	@ 02.1 02.1 @	5.56	4	hinge
0009	48.000	4.1110	@ 02.1 01.1 @	31.53	3	other double scattering
0010	12.000	4.2679	@ 02.2 @	45.22	2	single scattering
0011	48.000	4.3261	@ Co2.1 01.1 @	22.64	3	other double scattering
0012	24.000	4.3714	@ 02.1 02.2 @	59.49	3	obtuse triangle
0013	24.000	4.4270	@ 02.1 Co1.1 @	4.39	3	other double scattering
0014	24.000	4.4270	@ 01.1 Co1.1 @	8.30	3	other double scattering
0015	24.000	4.4433	@ 02.1 Co2.1 @	3.71	3	other double scattering

Co1.inp

武汉·2014

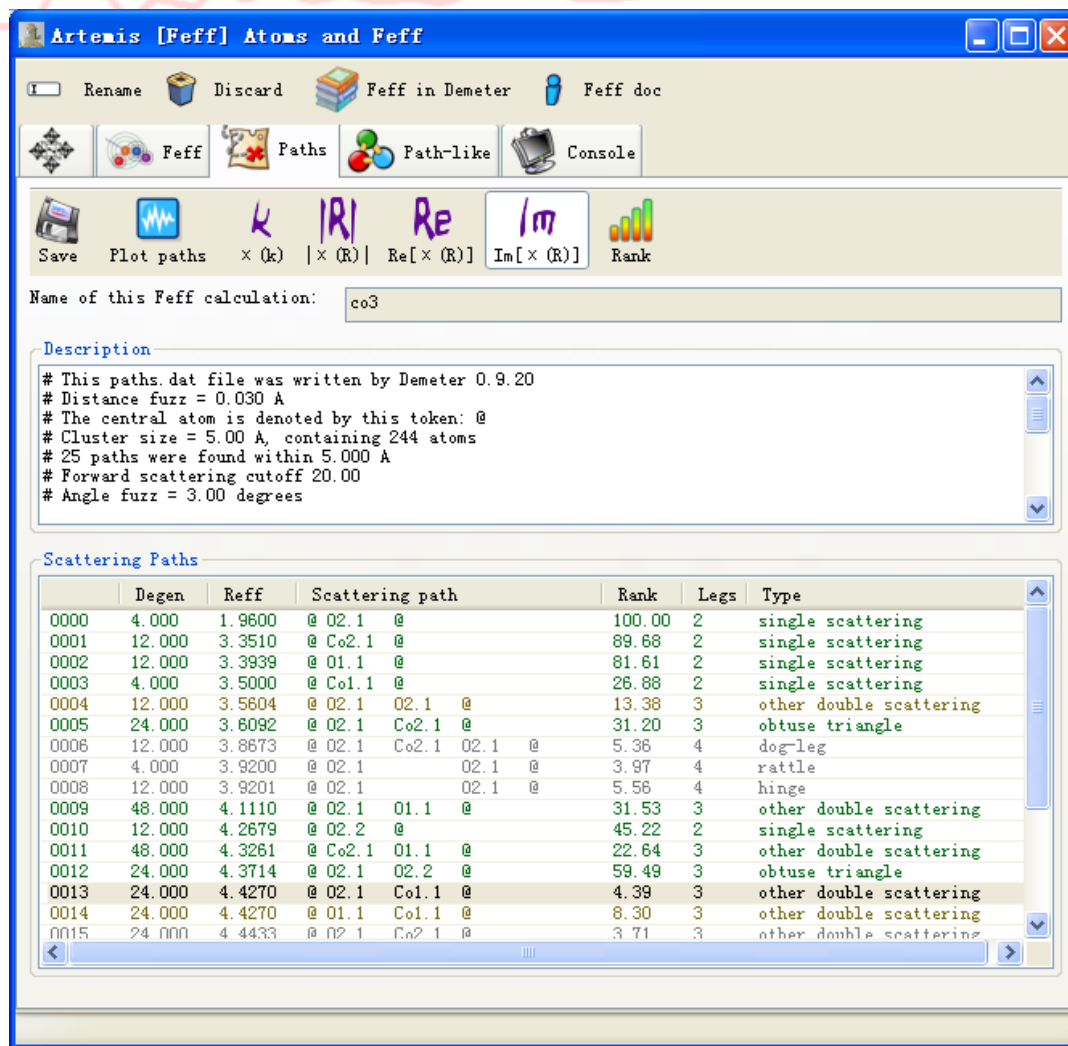


中国科学院高能物理研究所

上机练习：C0304 拟合演示

北京同步辐射装置
Beijing Synchrotron Radiation Facility

×射线吸收谱学实验
和数据分折讲习班



Co2.inp

武汉·2014

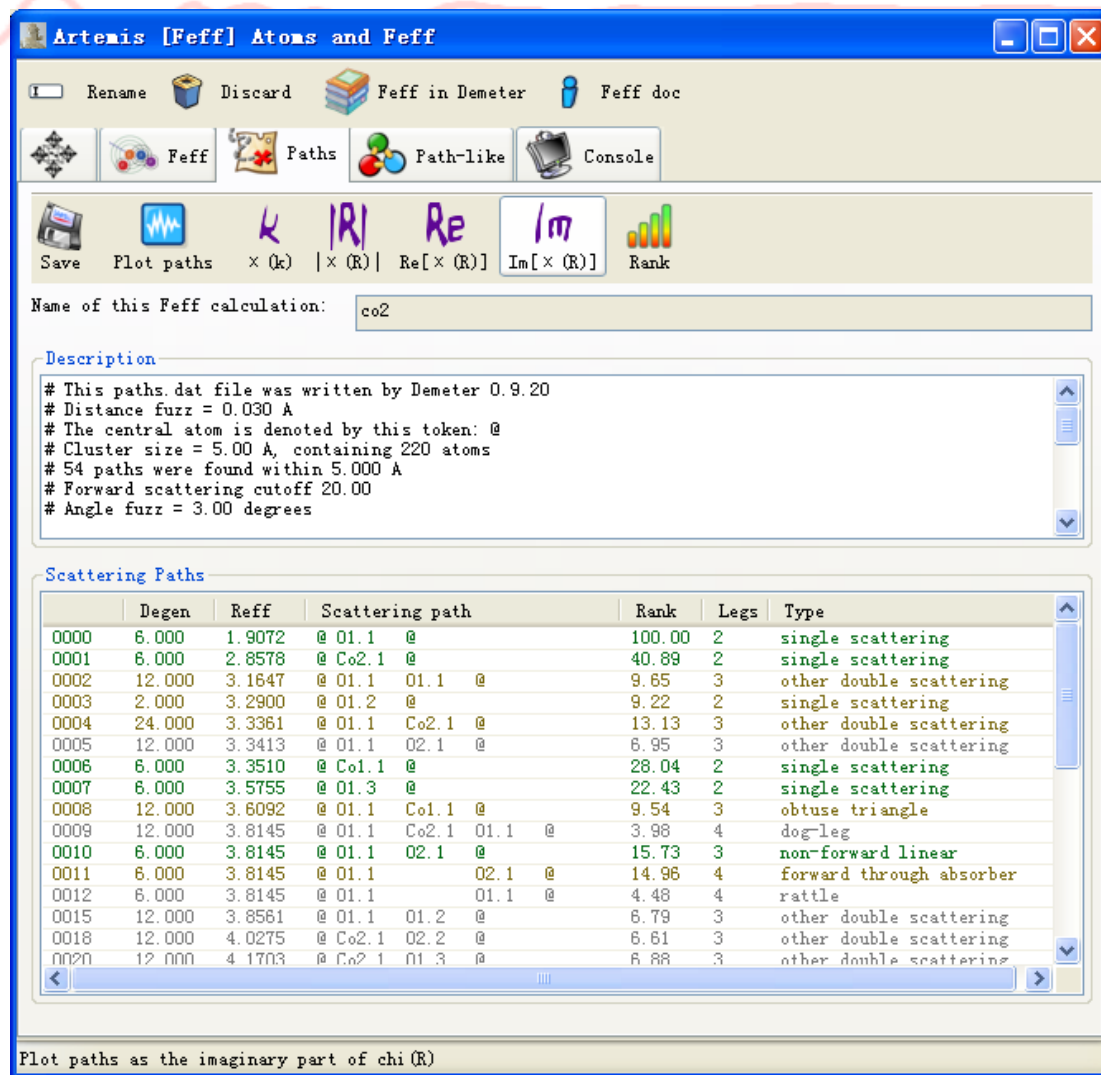


中国科学院高能物理研究所

上机练习: C0304 拟合演示

北京同步辐射装置
Beijing Synchrotron Radiation Facility

X射线吸收谱学实验
和数据分折讲习班



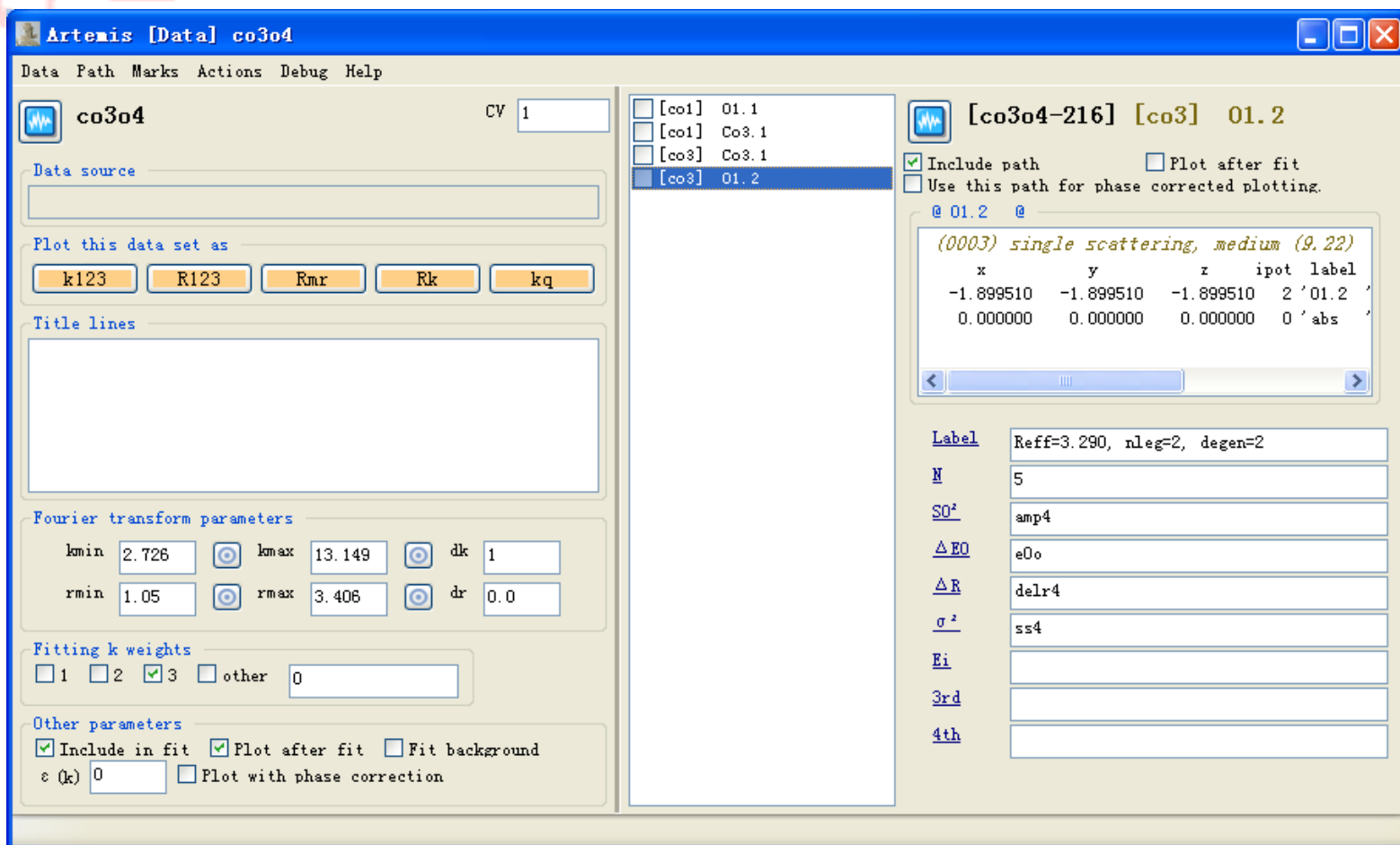
Co3.inp



中国科学院高能物理研究所

武汉·2014

上机练习：C0304 拟合演示



可以发现其中Co1与Co2是等效的，选定拟合范围内的单散路径；
取Co1 0000, 0001路径；Co3 0001, 0003路径；

上机练习：C0304 拟合演示

Artemis [GDS] Guess, Def, Set parameters

	Type	Name	Math expression	Evaluated
1	guess	amp1	1.00000	
2	guess	e0o	0	
3	guess	delr1	0	
4	guess	ss1	0.00300	
5	guess	amp2	1.00000	
6	guess	e0co	0	
7	guess	delr2	0	
8	guess	ss2	0.00300	
9	guess	amp3	1.00000	
10	guess	delr3	0	
11	guess	ss3	0.00300	
12	guess	amp4	1.00000	
13	guess	delr4	0	
14	guess	ss4	0.00300	
15	guess			

Highlighted parameters matching /\Ass4\z/.

Use best fit
 Reset all
 Highlight
 Evaluate
 Import GDS
 Export GDS
 Discard all
 Add GDS

将Co-O 键的 $\Delta E0$ 都定义为e0o，将Co-Co键的 $\Delta E0$ 都定义为e0co，共计14个变量，点击fit，进行拟合；

上机练习：C0304 拟合演示

北京同步辐射装置
Beijing Synchrotron Radiation Facility

修正配位数:

Co-O: 1.96Å $(4 \times 2 + 6) / 3 \approx 5$

Co-Co: 3.35Å $(12 \times 2 + 6) / 3 = 10$

Co-Co: 2.86Å $6 / 3 = 2$

Co-O : 3.29 $(2 \times 2 + 12) / 3 \approx 5$

×射线吸收谱学实验
和数据解析讲习班

武汉·2014

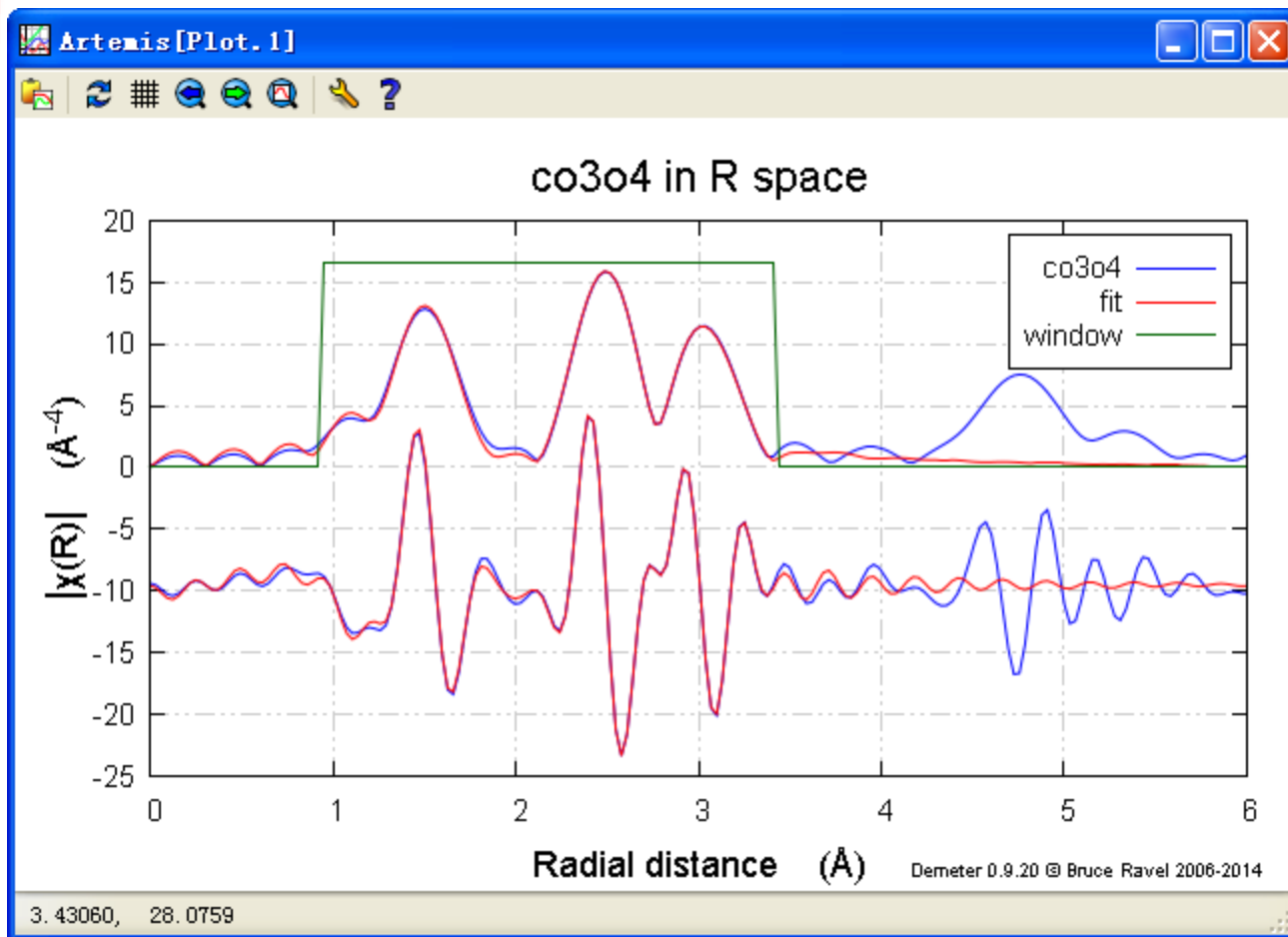


中国科学院高能物理研究所

上机练习：C0304 拟合演示

北京同步辐射装置
Beijing Synchrotron Radiation Facility

×射线吸收谱学实验
和数据分折讲习班



武汉·2014



中国科学院高能物理研究所



上机练习：C0304 拟合演示

北京同步辐射装置
Beijing Synchrotron Radiation Facility

guess parameters:

amp1	=	0.83174481	# +/-	0.08238543	[1.00000]
e0o	=	1.08015878	# +/-	1.42360753	[0]
delr1	=	-0.04007808	# +/-	0.00633760	[0]
ss1	=	0.00306295	# +/-	0.00073505	[0.00300]
amp2	=	0.68725780	# +/-	0.63433740	[1.00000]
e0co	=	0.77772083	# +/-	3.80396605	[0]
delr2	=	0.02189250	# +/-	0.04425948	[0]
ss2	=	0.00727293	# +/-	0.00647593	[0.00300]
amp3	=	1.72326511	# +/-	0.77381487	[1.00000]
delr3	=	0.00231561	# +/-	0.02508694	[0]
ss3	=	0.00359278	# +/-	0.00215945	[0.00300]
amp4	=	0.11528173	# +/-	0.38697501	[1.00000]
delr4	=	0.01077481	# +/-	0.06934321	[0]
ss4	=	-0.00601522	# +/-	0.01031920	[0.00300]

拟合结果可以看到，其中ss4 异常，amp3，amp4 数值离合理值0.7-1很大；

可能存在的原因：未考虑3.4-3.6A 对拟合区域的影响；未考虑多散的影响；

×射线吸收谱学实验
和数据分析讲习班

武汉·2014



中国科学院高能物理研究所

谢谢