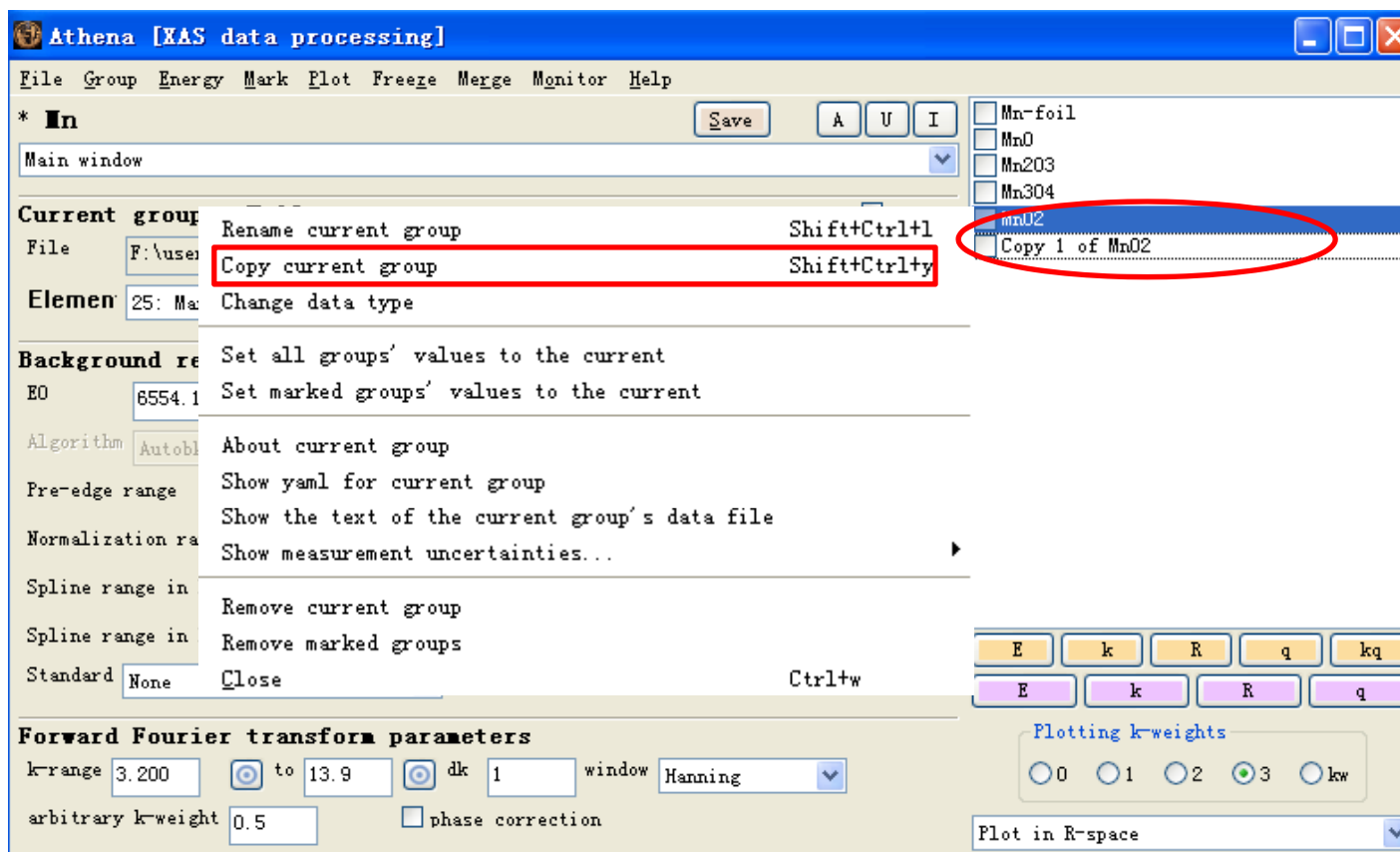




# ATHENA功能介绍

## 复制数据

可以进行参数比较：例如Rbkg、归一化范围、k-range等



# 主要内容



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

- XAFS数据处理的一般步骤
- Athena软件功能介绍
- 应用举例
- 实例分析与总结
- 上机练习



北京同步辐射装置  
Beijing Synchrotron Radiation Facility

×射线吸收谱学实验  
和数据分折讲习班

武汉·2014

# ATHENA软件应用举例

## XANES应用-铂纳米颗粒的电子结构和电荷转移研究

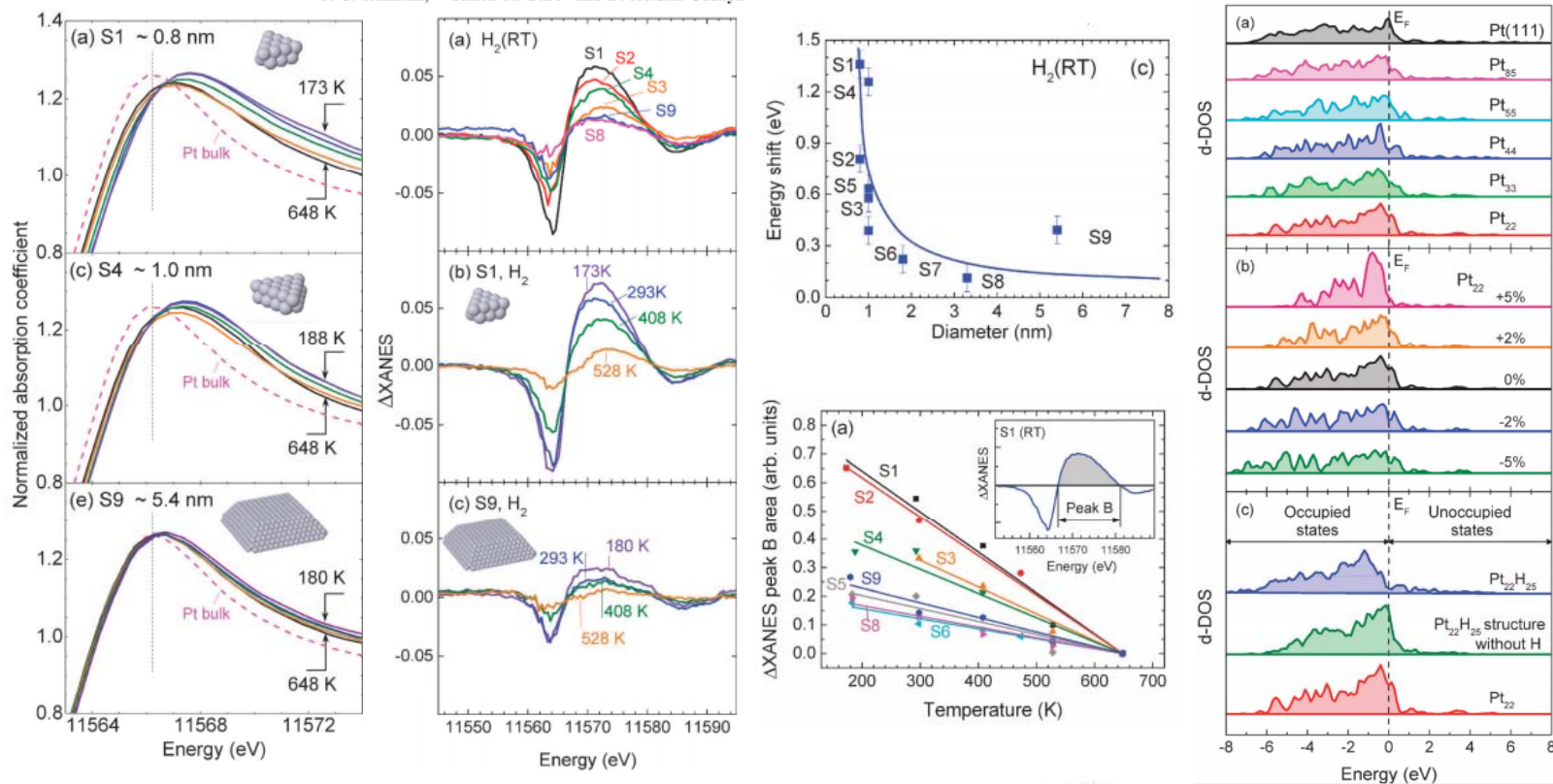
Cite this: *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 2012, **14**, 11766–11779

[www.rsc.org/pccp](http://www.rsc.org/pccp)

PAPER

Electronic properties and charge transfer phenomena in Pt nanoparticles on  $\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$ : size, shape, support, and adsorbate effects†

F. Beharfarid,<sup>a</sup> L. K. Ono,<sup>a</sup> S. Mostafa,<sup>a</sup> J. R. Croy,<sup>a</sup> G. Shafai,<sup>a</sup> S. Hong,<sup>a</sup> T. S. Rahman,<sup>a\*</sup> Simon R. Bare<sup>b</sup> and B. Roldan Cuenya<sup>a\*</sup>

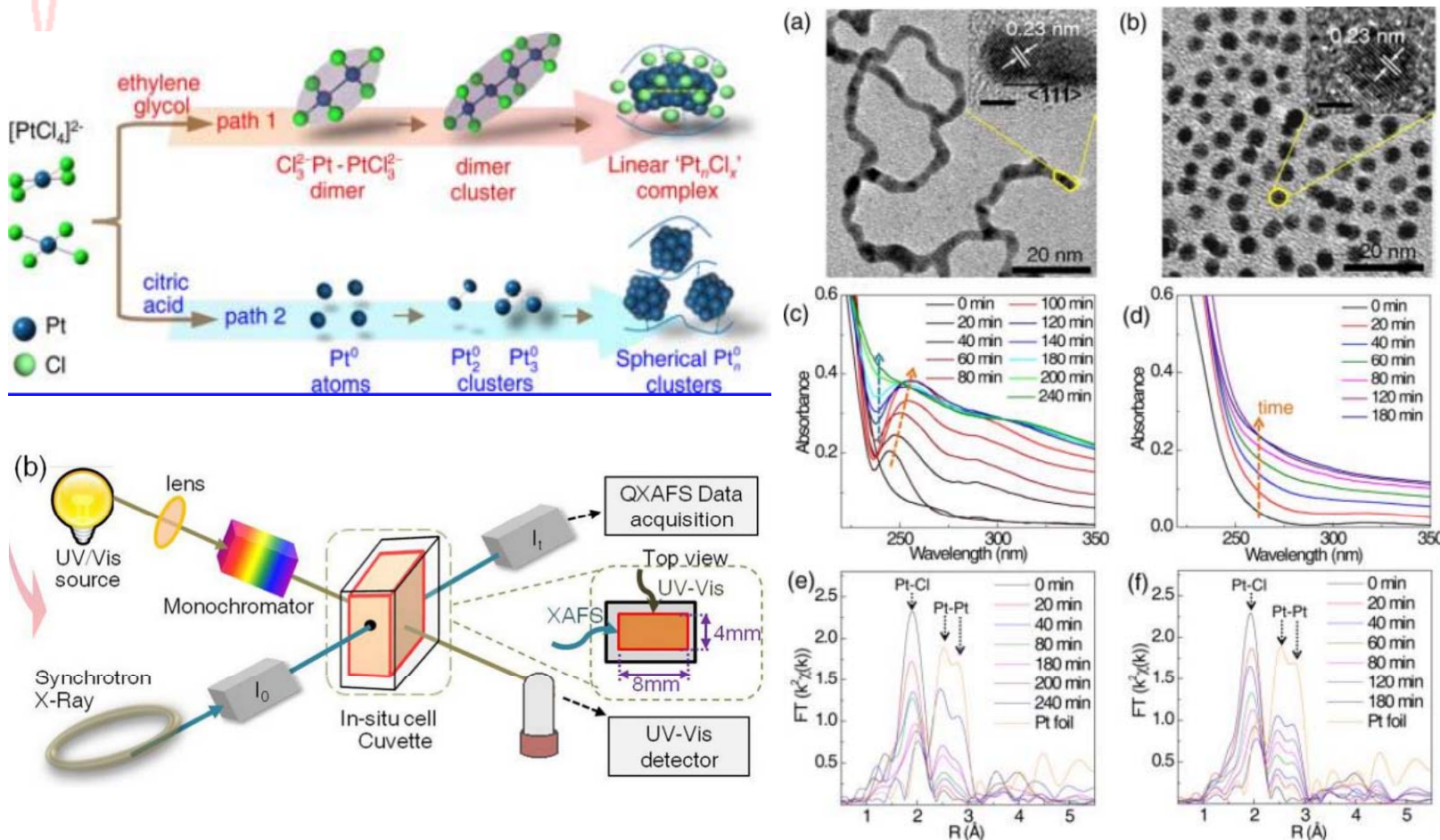


中国科学院高能物理研究所



# ATHENA软件应用举例

## EXAFS应用-不同形态铂纳米晶的生长过程原位研究



Tao Yao et al., Probing Nucleation Pathways for Morphological Manipulation of Platinum Nanocrystals, *J. Am. Chem. Soc.* 2012, 134, 9410-9416

# 主要内容



北京同步辐射装置  
Beijing Synchrotron Radiation Facility

X射线吸收谱学实验  
和数据分析讲习班

武汉·2014

- XAFS数据处理的一般步骤
- Athena软件功能介绍
- 应用举例
- 实例分析与总结
- 上机练习





北京同步辐射装置  
Beijing Synchrotron Radiation Facility

×射线吸收谱学实验  
和数据分析讲习班

武汉·2014

# 实例分析与总结

- ◆ 打开数据文件时遇到的问题
- ◆ 数据信噪比判断
- ◆ 关于能量坐标



中国科学院高能物理研究所

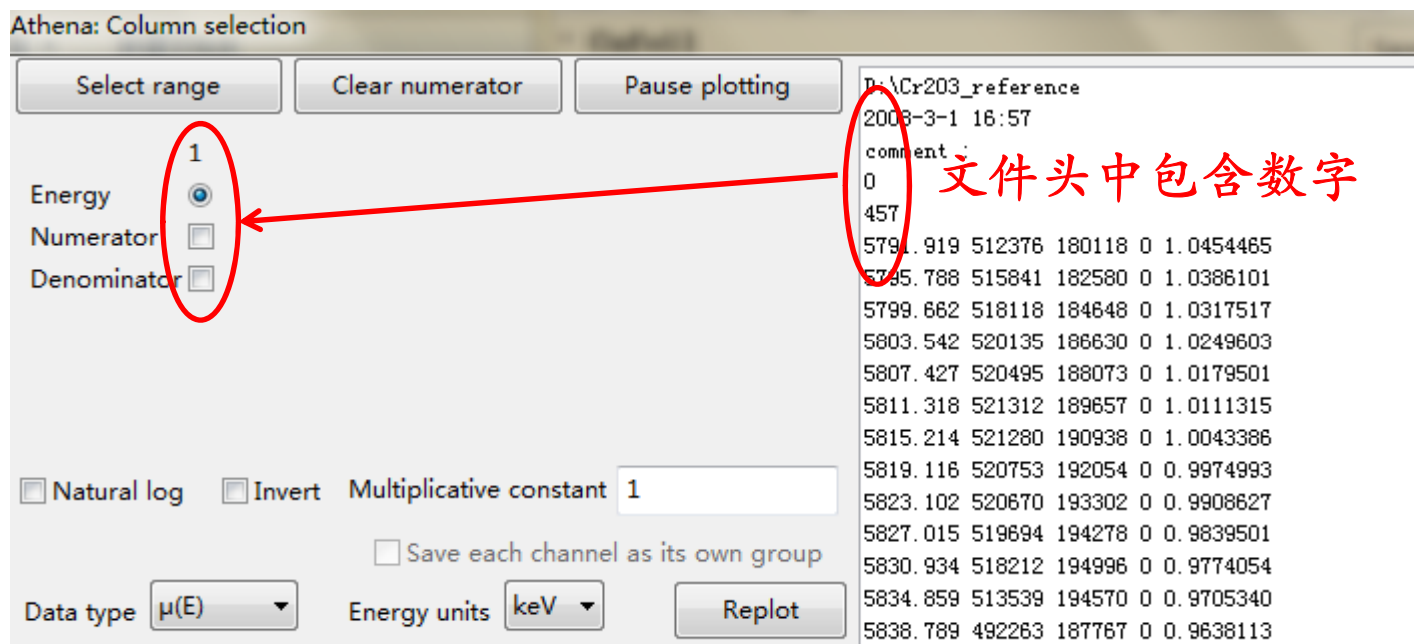


# 实例分析与总结

## Athena打开文件时

### 文件打不开?

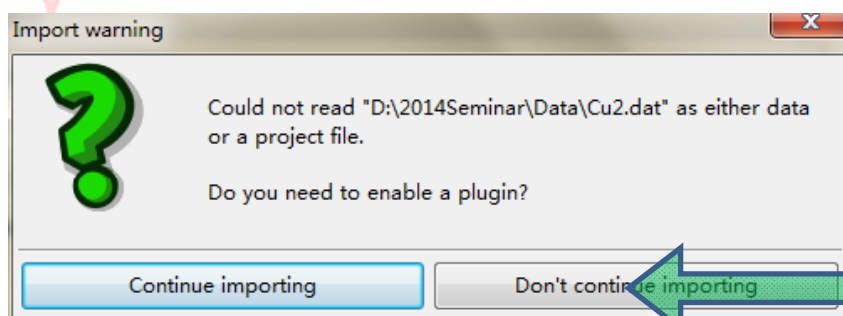
- ◆ 文件名或者路径包含中文
- ◆ 文件格式: 文件头和数据列
- ◆ 文件中存在异常数据点





# 实例分析与总结

## Athena打开文件时



文件中存在异常数据点

Cu2.dat - 记事本

文件(F)	编辑(E)	格式(O)	查看(V)	帮助(H)
9127.863	131284	13875	761294	2.2472781
9128.860	130992	13654	749266	2.2611076
9129.858	130462	13464	738868	2.2710254
9130.856	130302	13373	733897	2.2766132
9132.053	129512	13266	728070	2.2785692
9133.052	130509	13386	734784	2.2772328
INF	0	0	0	0
9135.049	130340	13483	740360	2.2687206
9136.048	130129	13546	743943	2.2623981
9137.047	129726	13600	746994	2.2553954
9138.047	129838	13722	753856	2.2472871
9139.046	129704	13832	760119	2.2382740
9140.046	129593	13964	767490	2.2279162
9141.046	128983	14064	773126	2.2160623

LD2Y-3.dat - 记事本

文件(F) 编辑(E) 格式(O) 查看(V) 帮助(H)

2.450000E+0	2.230009E+1	2.980753E+5	3.000000E+0	2.959629E+0	2011-11-28	11:56:59	1.474924E+10
2.451000E+0	2.771271E+1	2.978887E+5	3.000000E+0	2.958931E+0	2011-11-28	11:57:09	1.475017E+10
2.452000E+0	3.212971E+1	2.977123E+5	3.000000E+0	2.956764E+0	2011-11-28	11:57:15	1.475167E+10
2.453000E+0	3.484134E+1	2.974723E+5	3.000000E+0	2.956259E+0	2011-11-28	11:57:20	1.474964E+10
2.454000E+0	3.576607E+1	2.972013E+5	3.000000E+0	2.963703E+0	2011-11-28	11:57:26	1.474589E+10
2.455000E+0	3.783664E+1	2.976313E+5	3.000000E+0	2.960094E+0	2011-11-28	11:57:31	1.478083E+10
2.456000E+0	4.496189E+1	2.970440E+5	3.000000E+0	2.958060E+0	2011-11-28	11:57:36	1.474999E+10
2.457000E+0	3.756085E+1	2.969000E+5	3.000000E+0	2.955205E+0	2011-11-28	11:57:42	1.476282E+10
2.458000E+0	5.244810E+1	2.967947E+5	3.000000E+0	2.955302E+0	2011-11-28	11:57:47	1.476818E+10
2.459000E+0	4.471975E+1	2.964020E+5	3.000000E+0	2.951716E+0	2011-11-28	11:57:53	1.475763E+10
2.460000E+0	5.271718E+1	2.964190E+5	5.000000E+0	4.931978E+0	2011-11-28	11:57:58	1.476975E+10
2.460500E+0	5.167106E+1	2.962646E+5	5.000000E+0	4.935065E+0	2011-11-28	11:58:05	1.476678E+10
2.461000E+0	5.881941E+1	2.961014E+5	5.000000E+0	4.930346E+0	2011-11-28	11:58:12	1.476332E+10
2.461500E+0	6.386001E+1	2.962560E+5	5.000000E+0	4.932665E+0	2011-11-28	11:58:19	1.477749E+10
2.462000E+0	6.786453E+1	2.961550E+5	5.000000E+0	4.936305E+0	2011-11-28	11:58:25	1.477747E+10
2.462500E+0	6.809414E+1	2.960330E+5	5.000000E+0	4.934345E+0	2011-11-28	11:58:32	1.477629E+10

非数据列

非数据列





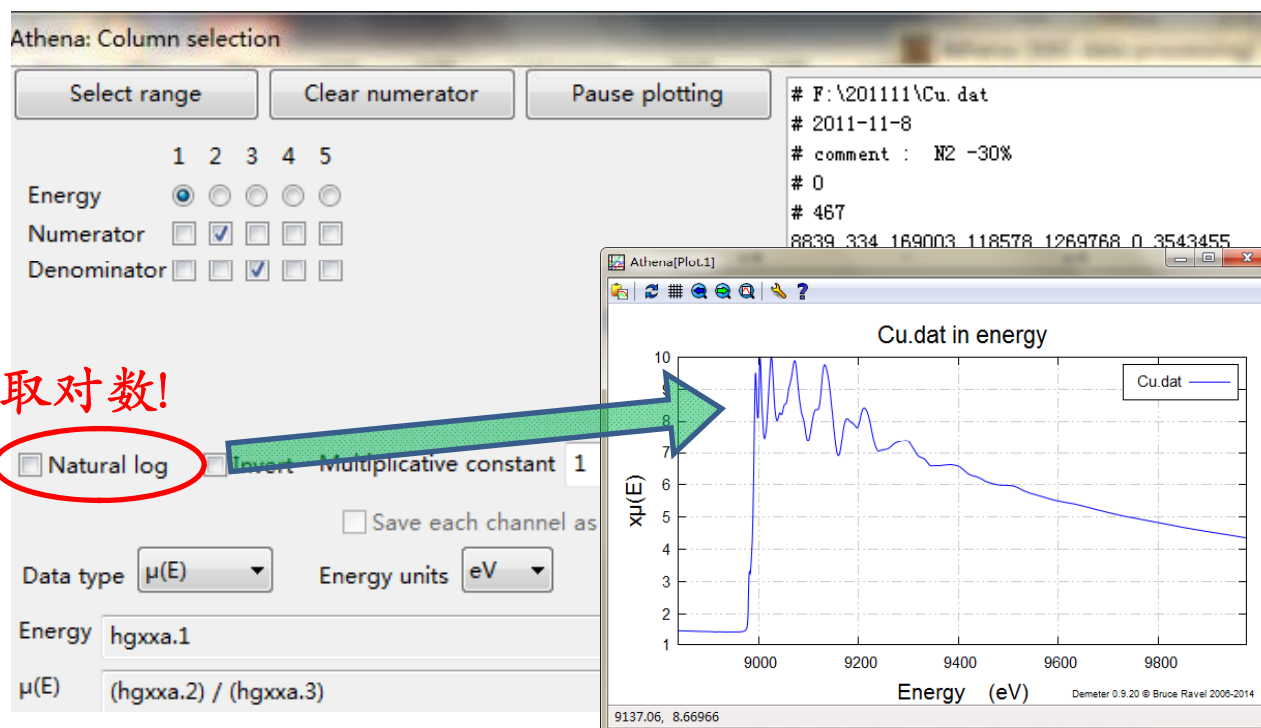


# 实例分析与总结

## Athena打开文件时

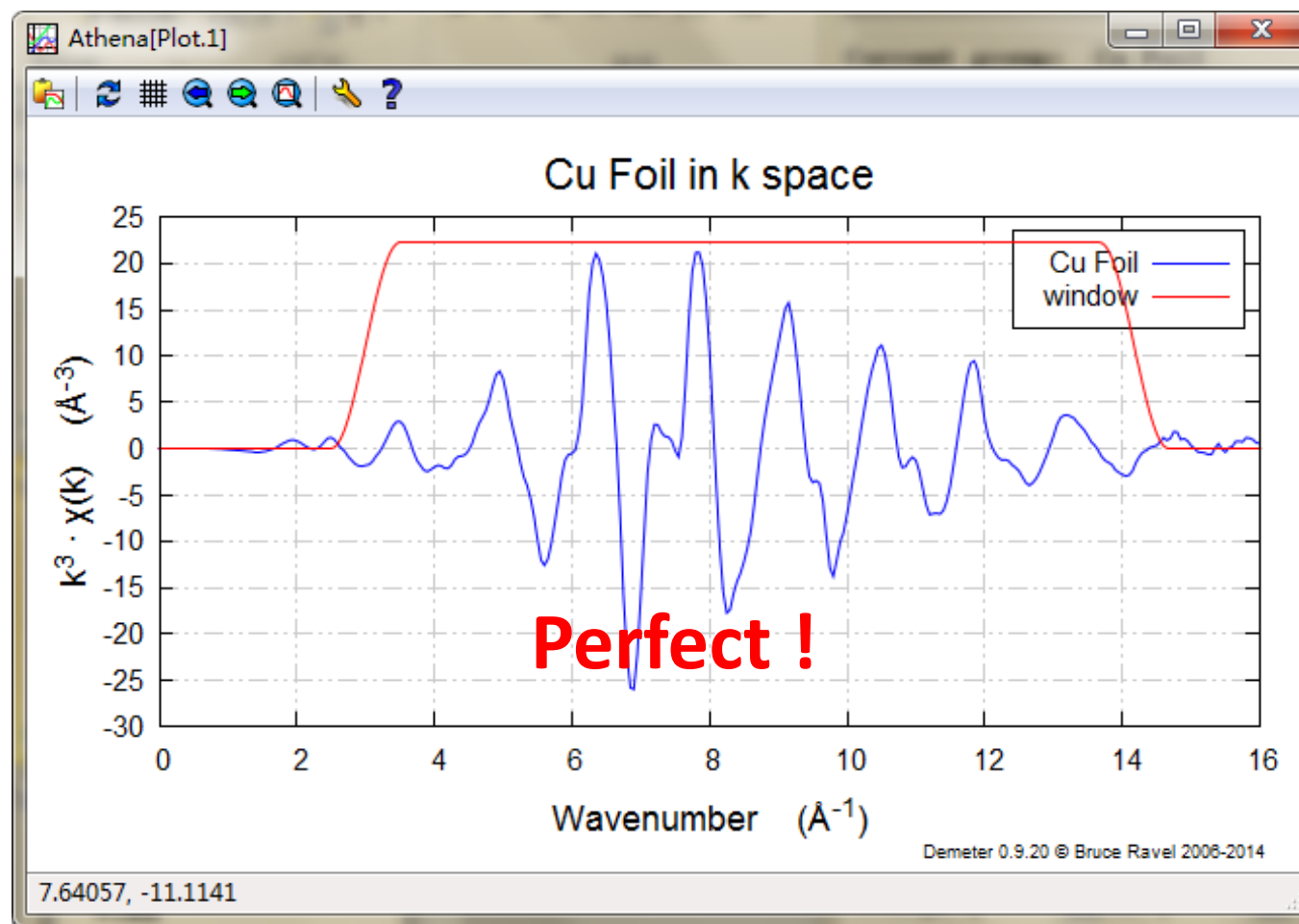
文件打开方式不对?

- ◆ 透射数据没有取对数
- ◆ 数据列选择不对



# 常见问题

数据信噪比 在K空间中进行判断



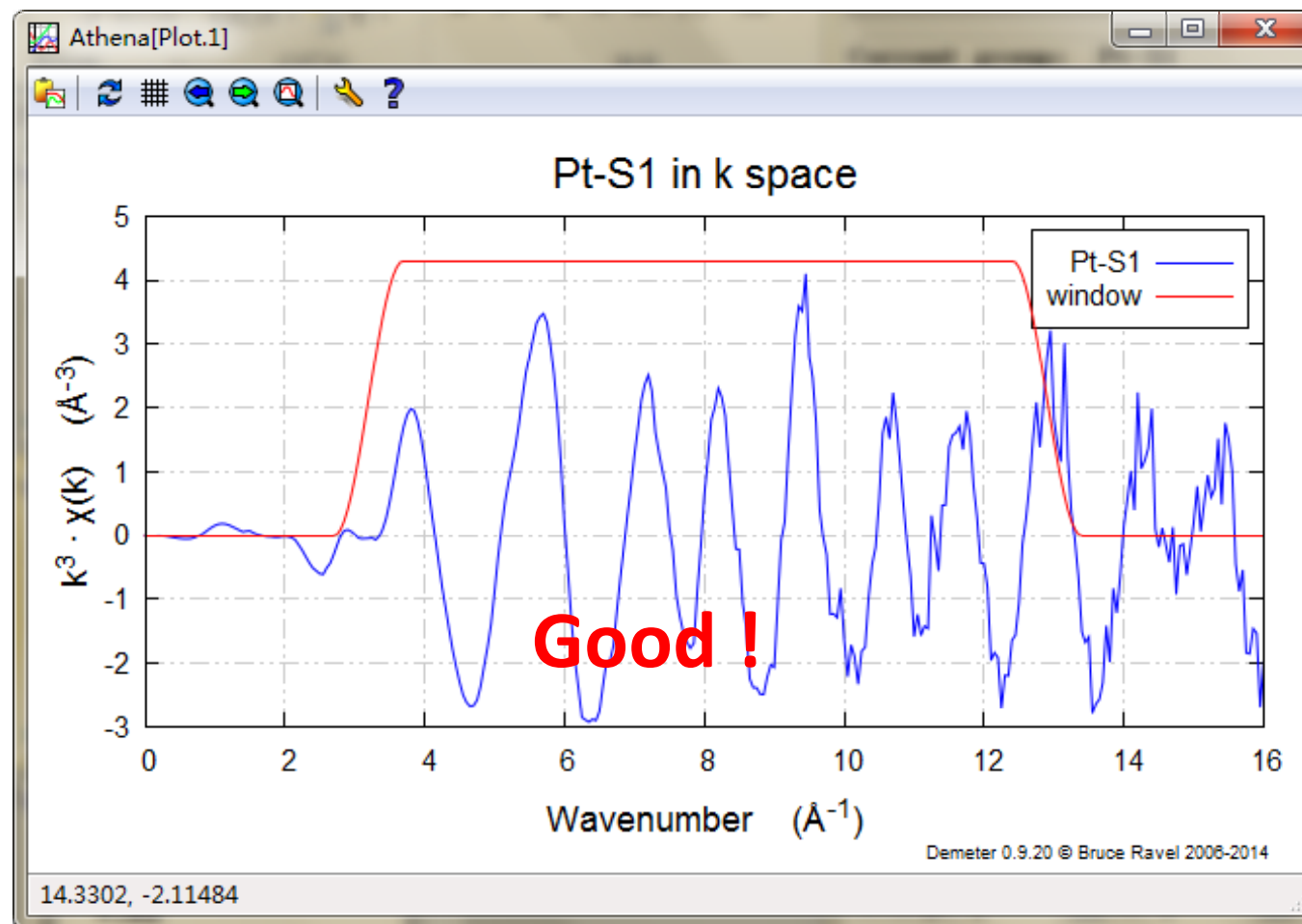
北京同步辐射装置  
Beijing Synchrotron Radiation Facility

×射线吸收谱学实验  
和数据分折讲习班

武汉·2014

# 常见问题

数据信噪比 在K空间中进行判断



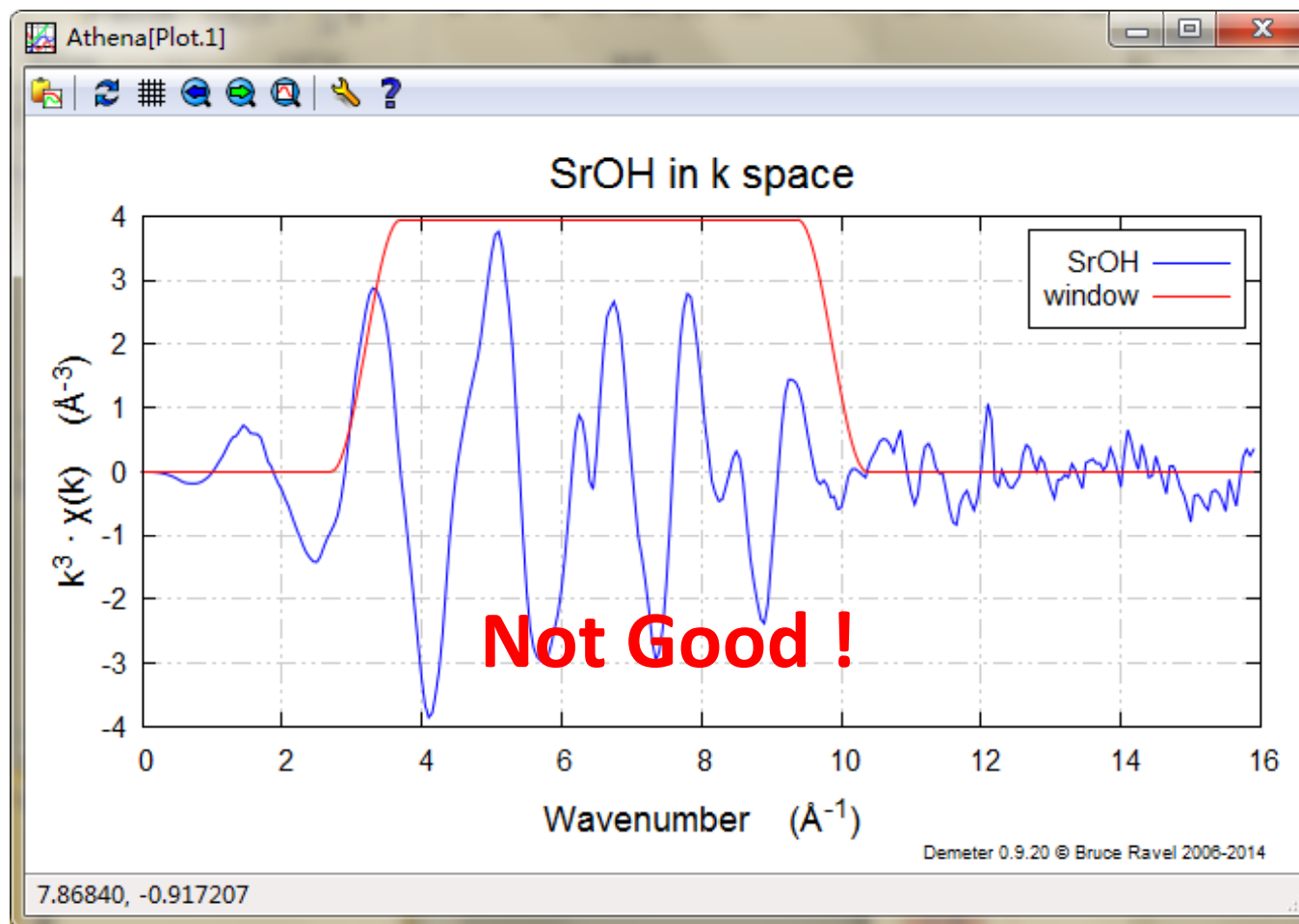
北京同步辐射装置  
Beijing Synchrotron Radiation Facility

×射线吸收谱学实验  
和数据分折讲习班

武汉·2014

# 常见问题

数据信噪比 在K空间中进行判断



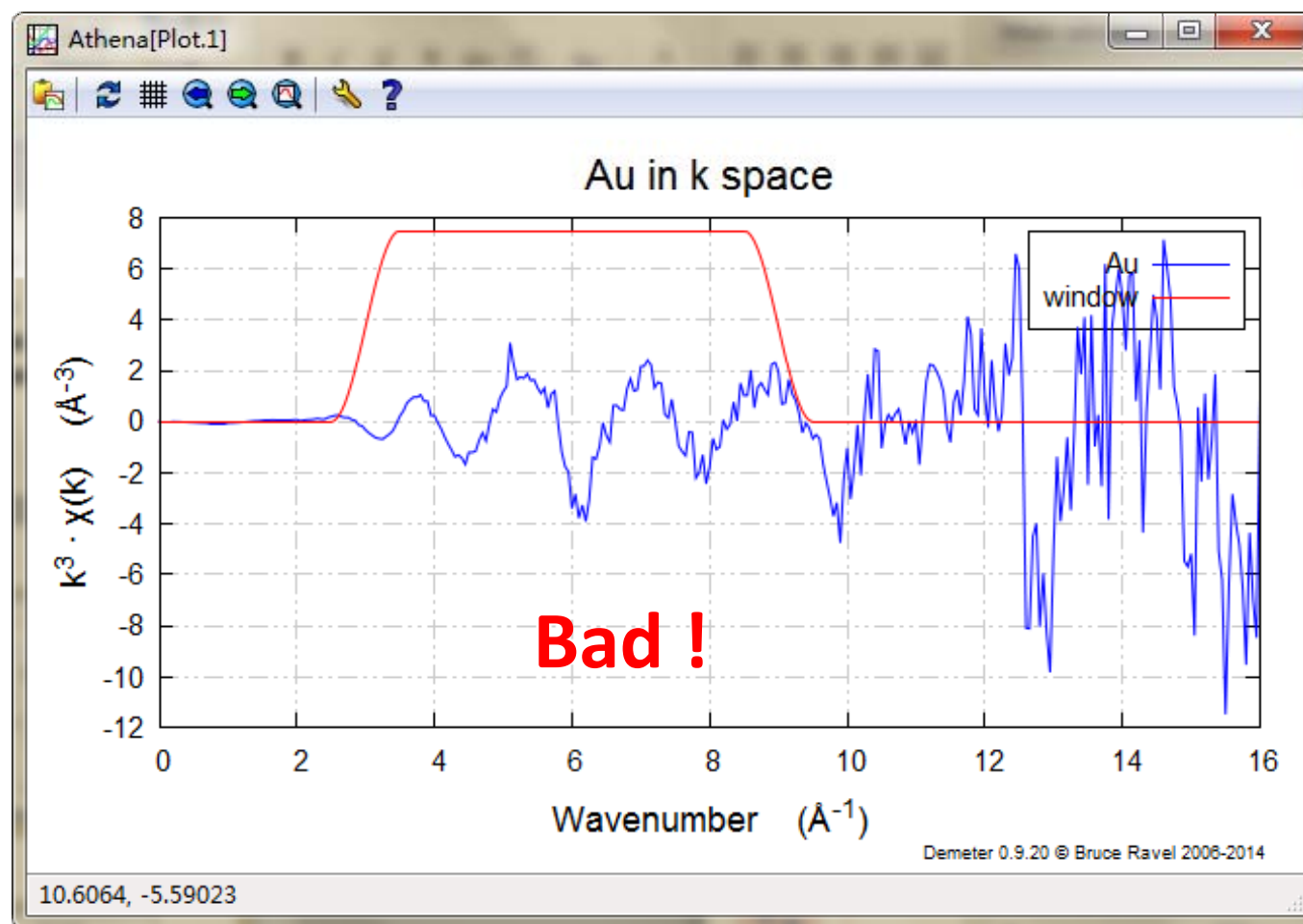
北京同步辐射装置  
Beijing Synchrotron Radiation Facility

×射线吸收谱学实验  
和数据分折讲习班

武汉·2014

# 常见问题

数据信噪比 在K空间中进行判断



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



# 常见问题



北京同步辐射装置  
Beijing Synchrotron Radiation Facility

## 关于能量坐标

- ◆ 能量坐标的确定
- ◆ 能量坐标的调整 (**Align Data**)
- ◆ 价态比较

×射线吸收谱学实验  
和数据分析讲习班

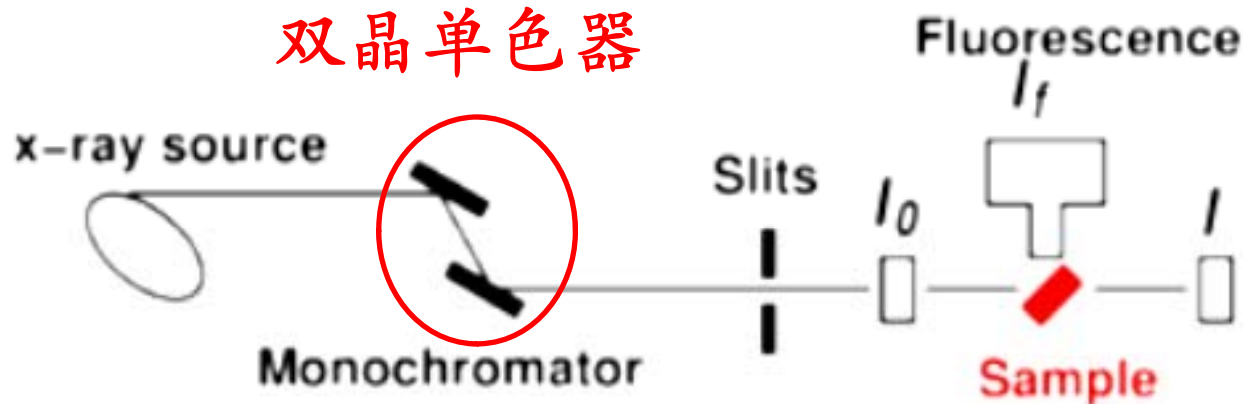
武汉·2014

# 常见问题

## 关于能量坐标

### ➤ 实验上对能量坐标的确定

#### 双晶单色器



$$\text{布拉格公式：} 2d\sin\theta = n\lambda$$

实验前利用标准金属foil进行能量标定，消除机械误差，  
但是每次标定可能会存在1-2eV的人为误差。



北京同步辐射装置  
Beijing Synchrotron Radiation Facility

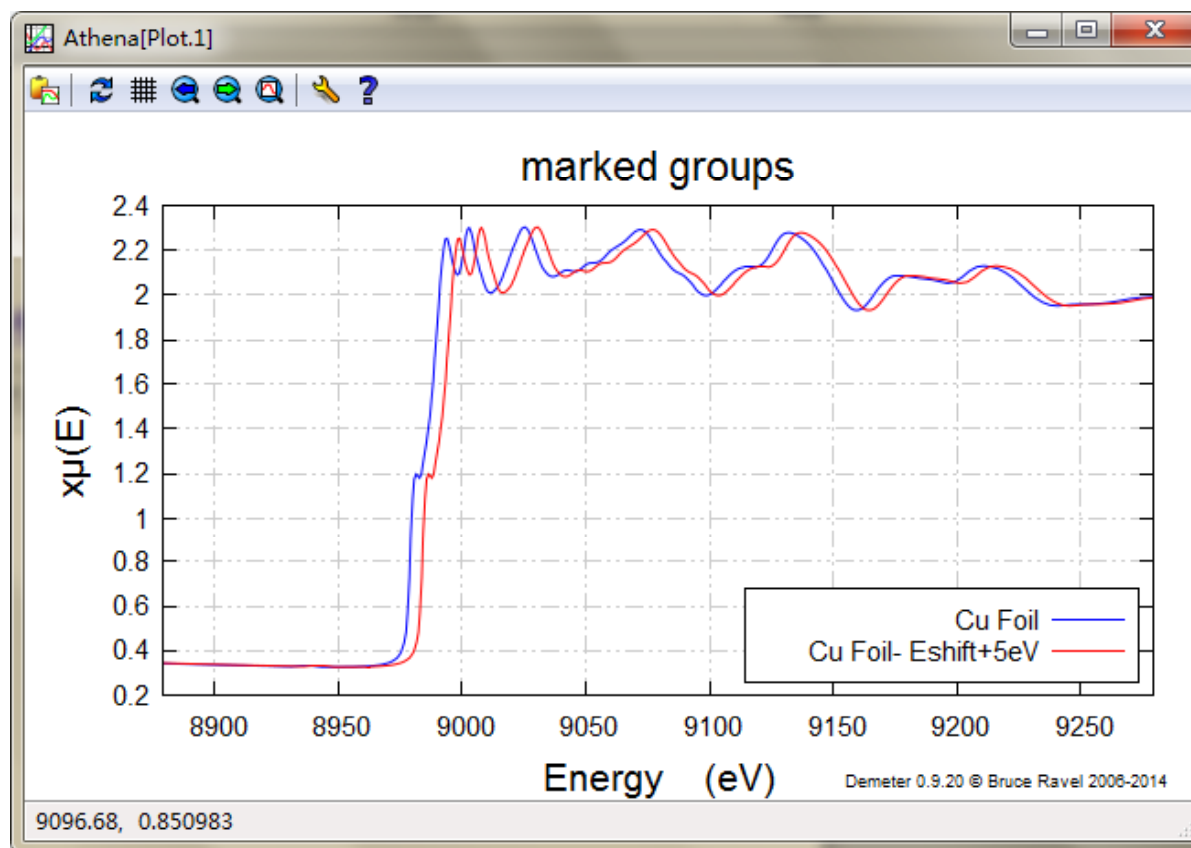
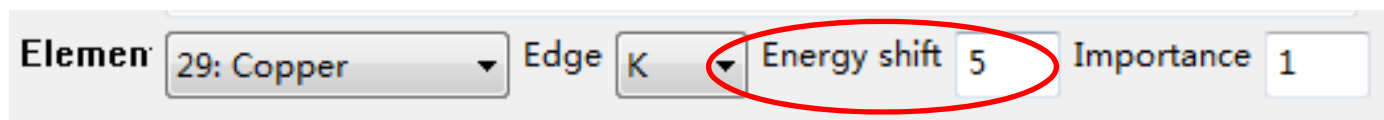
×射线吸收谱学实验  
和数据分析讲习班

武汉·2014

# 常见问题

## 关于能量坐标

### ➤ Athena软件对能量坐标的调整



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

# 常见问题

## 关于能量坐标

- Athena软件Align Data功能：调节E-shift

Align data

Aligning Cu Foil- Eshift+5eV

Standard

Plot as

Fit as

Shift by  eV    Uncertainty

<input type="button" value="-5"/>	<input type="button" value="+5"/>
<input type="button" value="-1"/>	<input type="button" value="+1"/>
<input type="button" value="-0.5"/>	<input type="button" value="+0.5"/>
<input type="button" value="-0.1"/>	<input type="button" value="+0.1"/>



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

# 常见问题



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

## 关于能量坐标

### ➤ 关于价态分析

- ◆ 由于能量标定误差的存在，进行价态比较时，建议使用同一批次的样品；
- ◆ 对于不同批次的样品，需要有1-2个标样或者样品在每个批次都进行采集，可以利用Athena软件的Align Data功能对能量坐标进行调整；
- ◆ 最好的方式是采用“三电离室模式”



# 常见问题



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

## 关于能量坐标

### ➤ 关于能量坐标的调整(Align Data)

- ◆ 合并多次扫描的数据
- ◆ 不同批次的样品进行价态比较

### ➤ 关于能量坐标的校准(Calibrate Data)

- ◆ 当绝对能量坐标与实际能量差别很大的时候

### ➤ 关于 $E_0$ 的确定

- ◆ 在能量坐标上选取相对应的电离阈值位置

# 主要内容



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

- XAFS数据处理的一般步骤
- Athena软件功能介绍
- 应用举例
- 实例分析与总结
- 上机练习



中国科学院高能物理研究所

# 上机练习



北京同步辐射装置  
Beijing Synchrotron Radiation Facility

×射线吸收谱学实验  
和数据分折讲习班

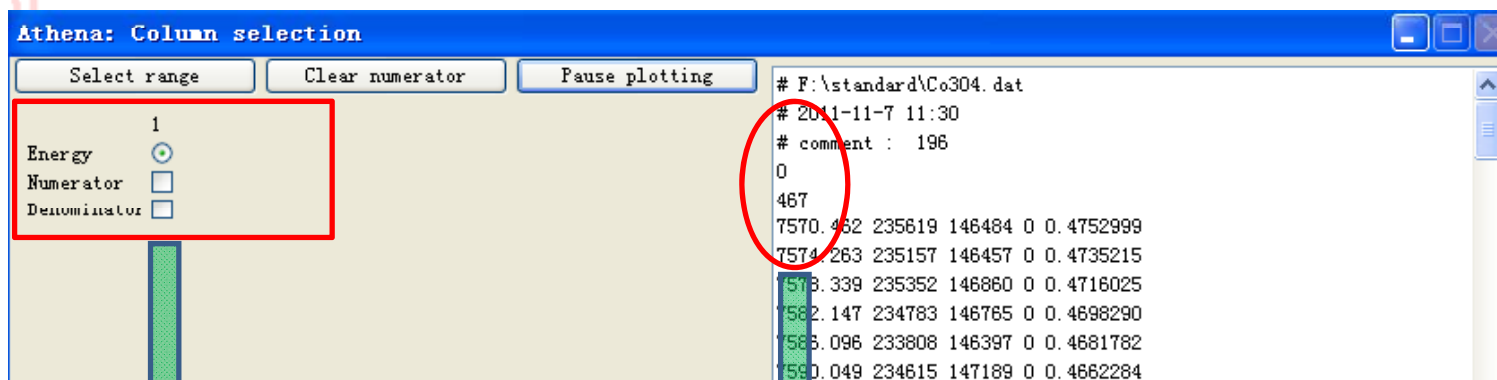
武汉·2014

## 以 $\text{Co}_3\text{O}_4$ 为例

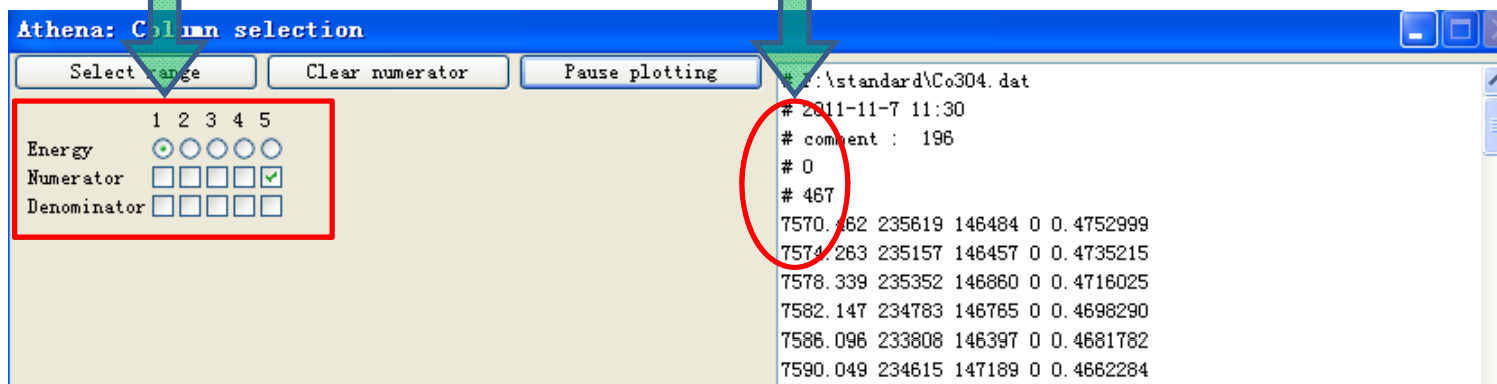
1. 打开数据文件
2. 预处理
3. 扣除边前本底及归一化
4. 确定 $E_0$ 及E-k转换
5. 扣除原子吸收本底background
6. Fourier变换
7. 反Fourier变换
8. 保存文件

# 上机练习

## 1、打开数据文件



数据文件头中包含纯数字行，可以在其前面加“#”注释，或者把文件头部分直接删除。



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

# 上机练习

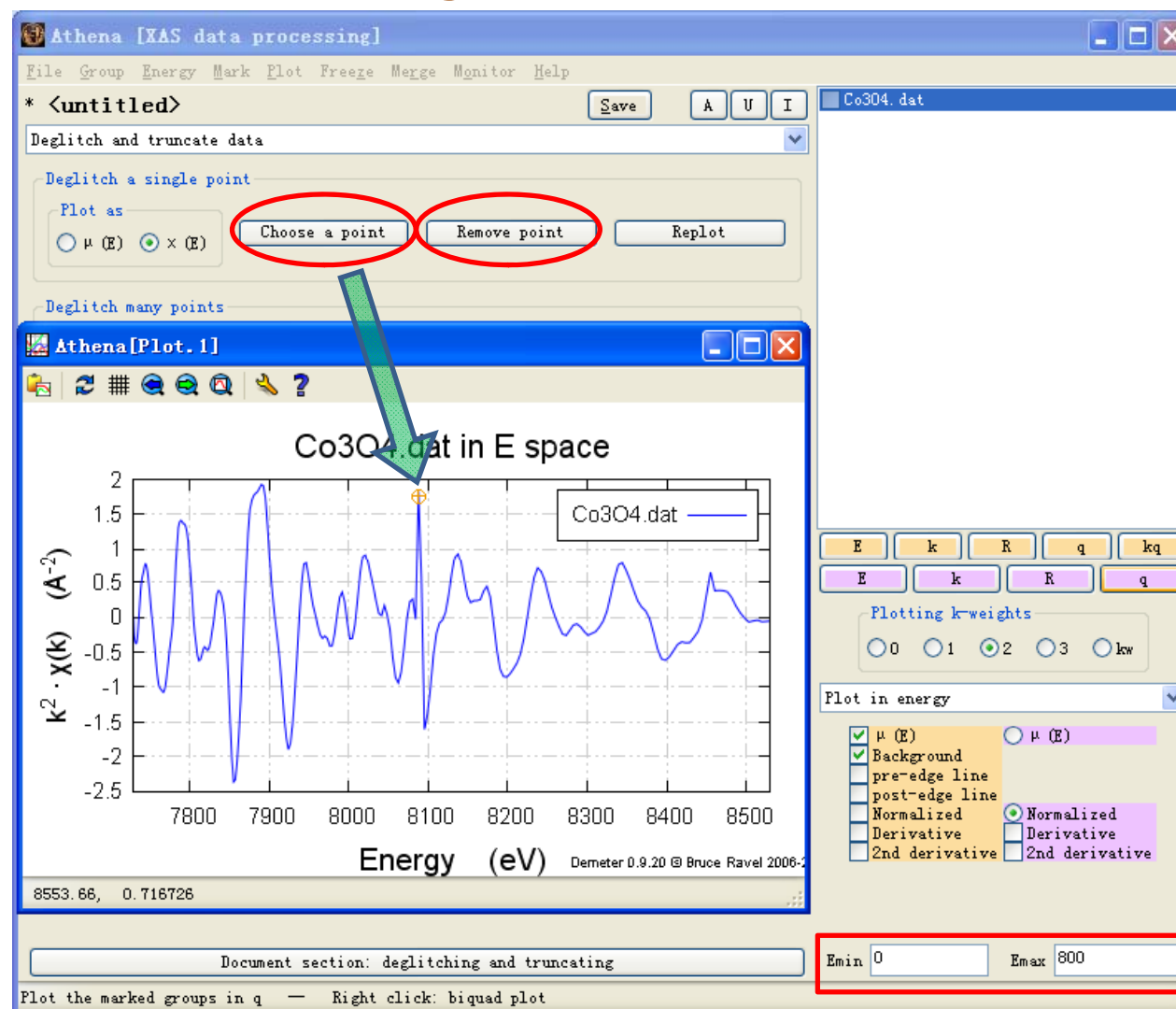
## 2、预处理 - deglitch



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

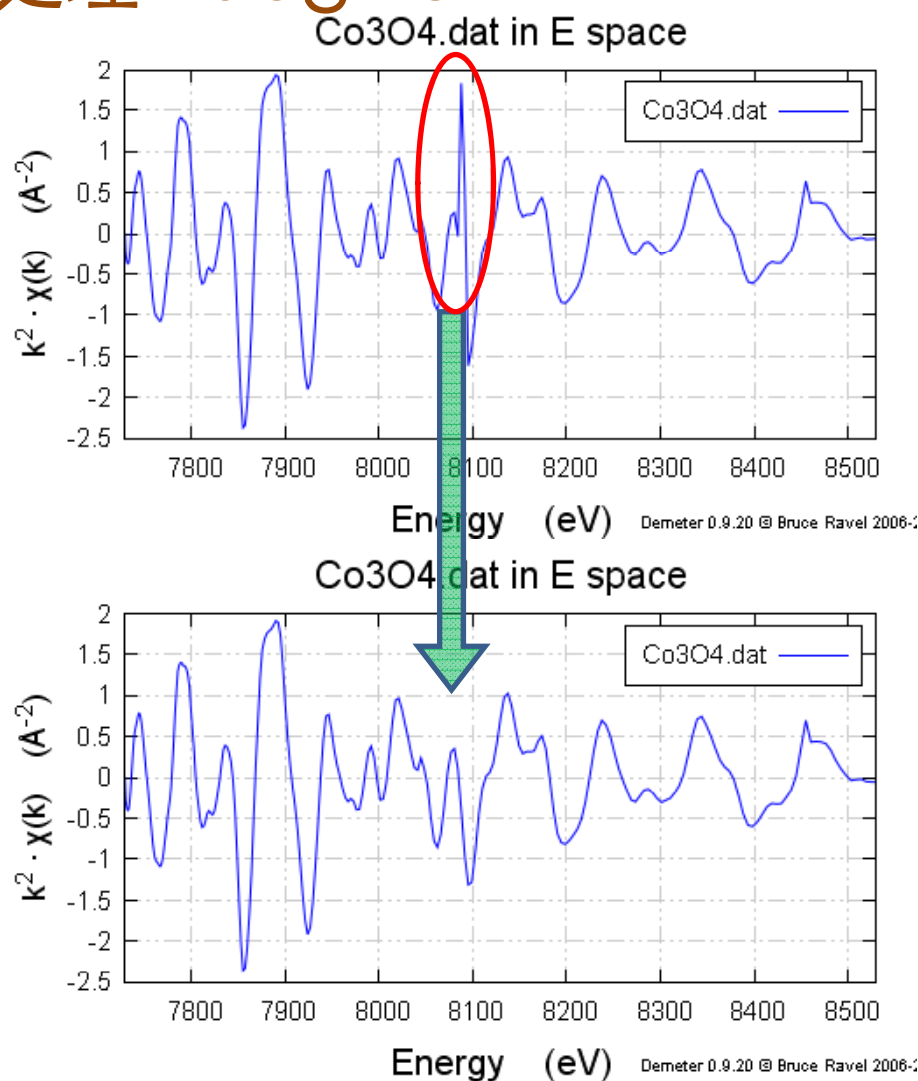


中国科学院高能物理研究所



# 上机练习

## 2、预处理 - deglitch



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

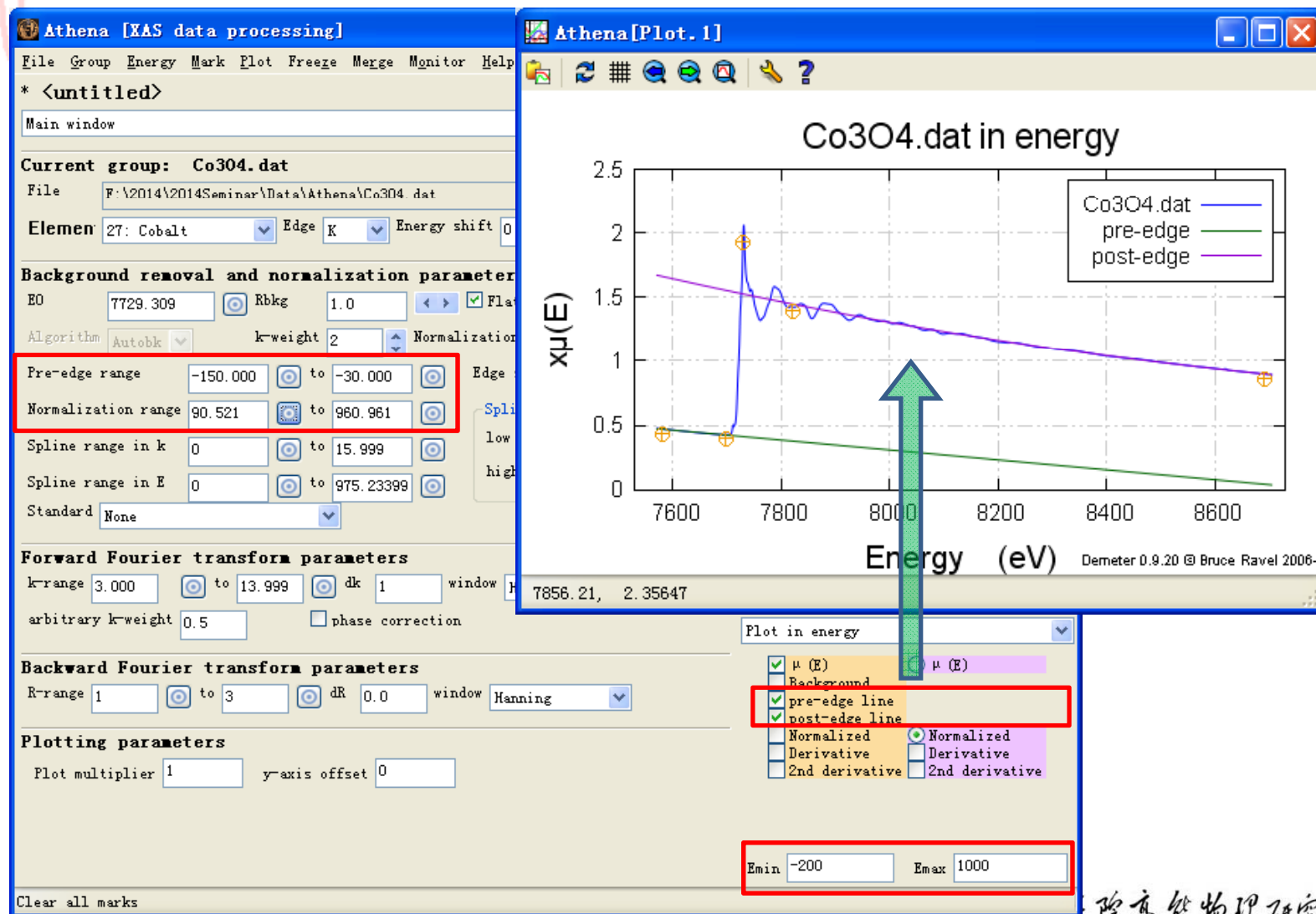
武汉·2014



中国科学院高能物理研究所

# 上机练习

## 3、扣除边前本底及归一化



北京同步辐射装置  
Beijing Synchrotron Radiation Facility

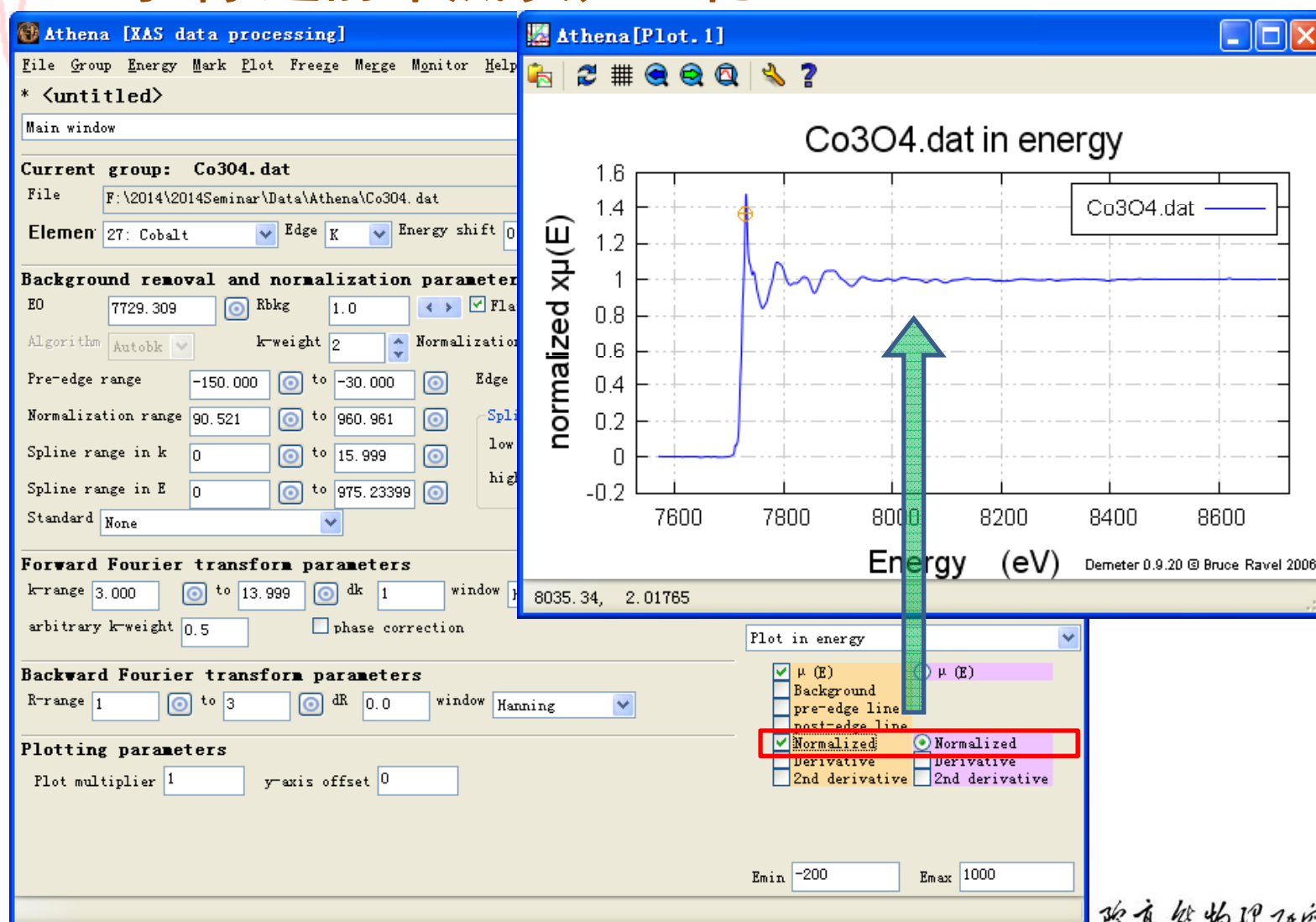
×射线吸收谱学实验  
和数据分折讲习班

武汉·2014

中国科学院高能物理研究所

# 上机练习

## 3、扣除边前本底及归一化



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

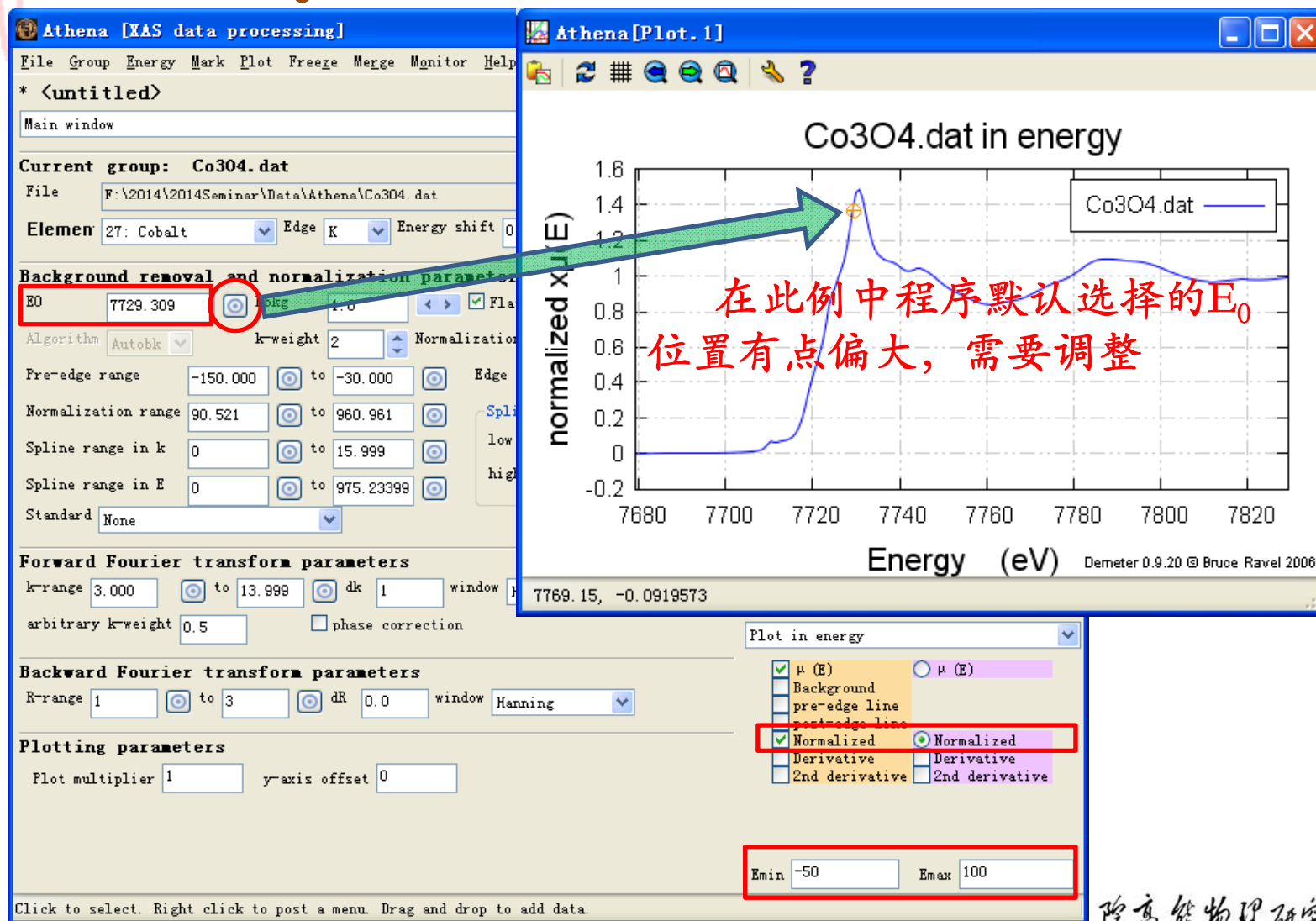
## 4、确定 $E_0$ 及E-k转换



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



院高能物理研究所

# 上机练习

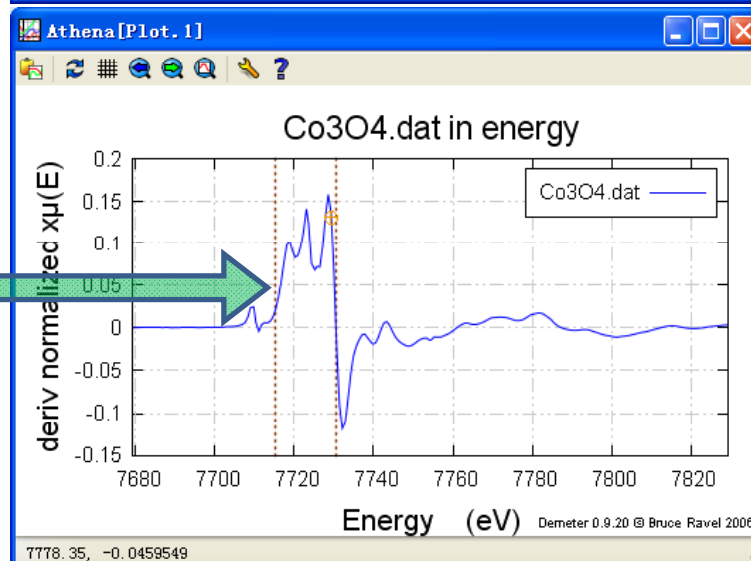
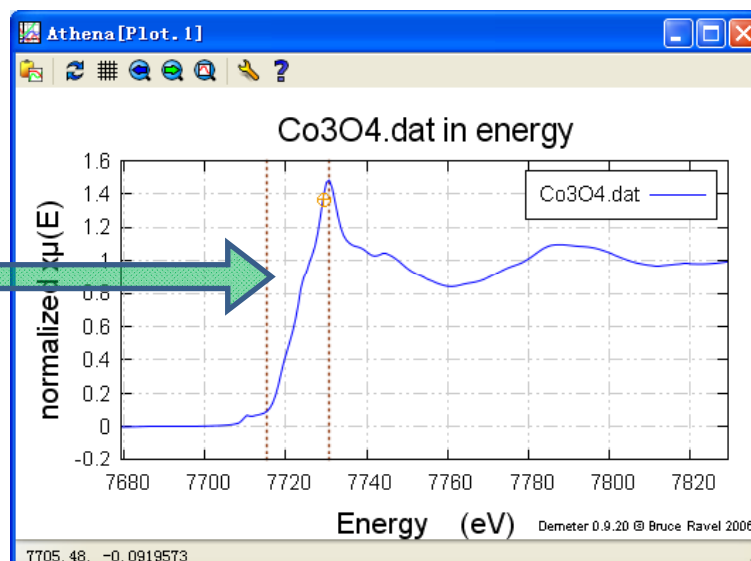
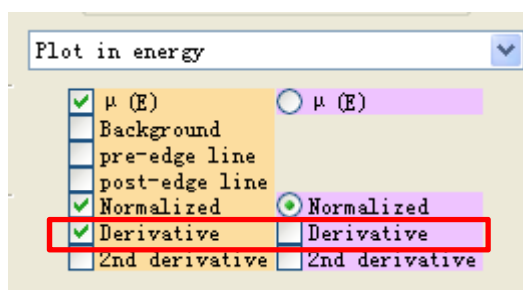
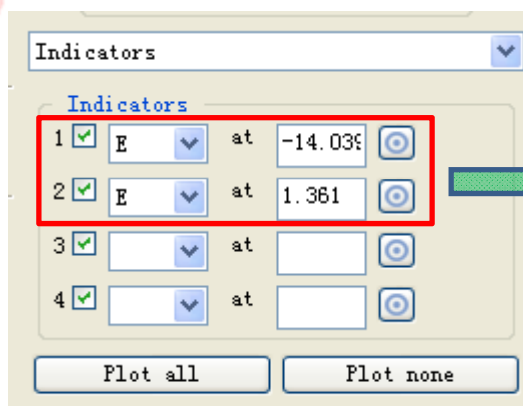
## 4、确定 $E_0$ 及E-k转换



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



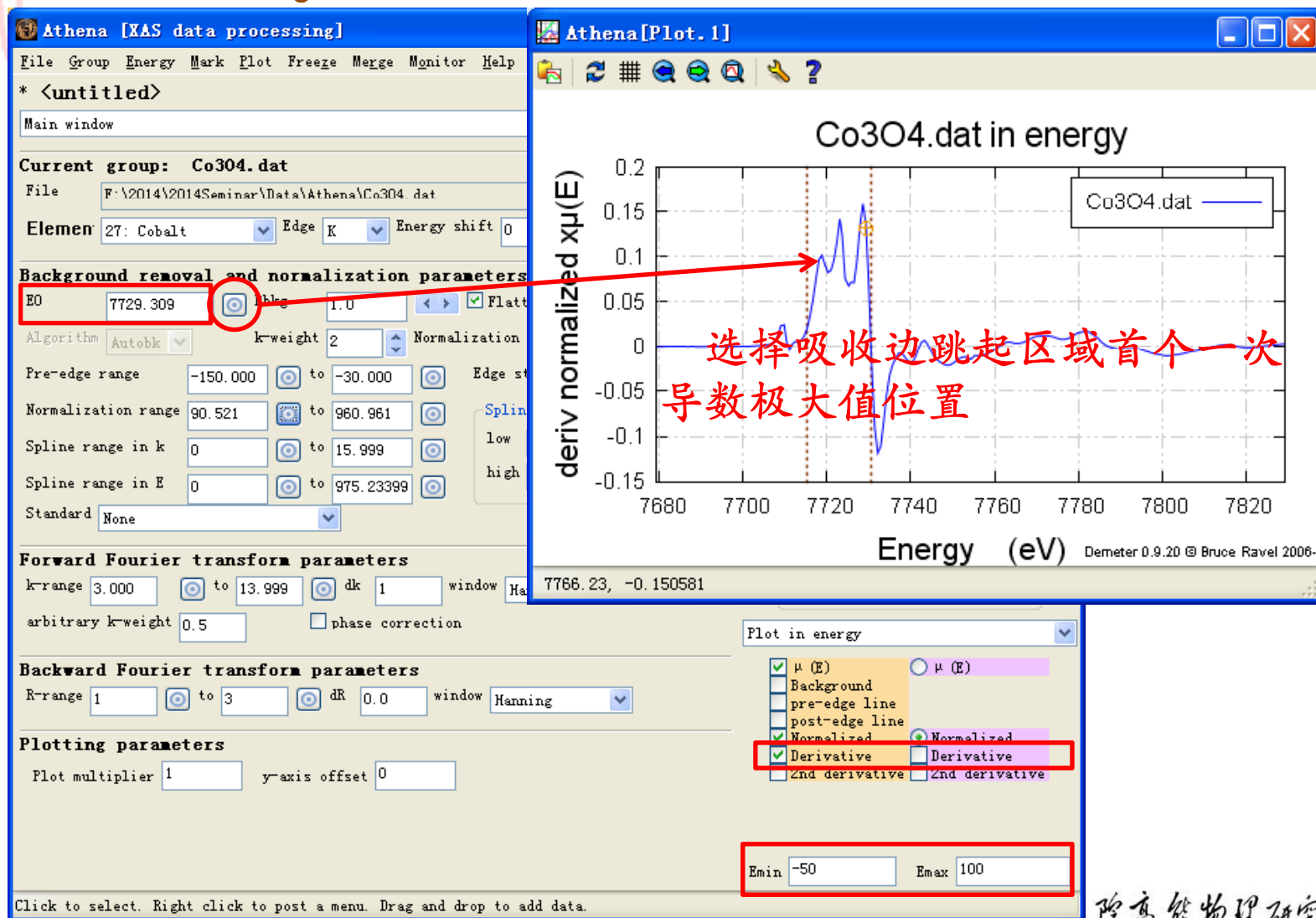
理研究所





# 上机练习

#### 4、确定 $E_0$ 及E-k转换



院高能物理研究所

武汉·2014

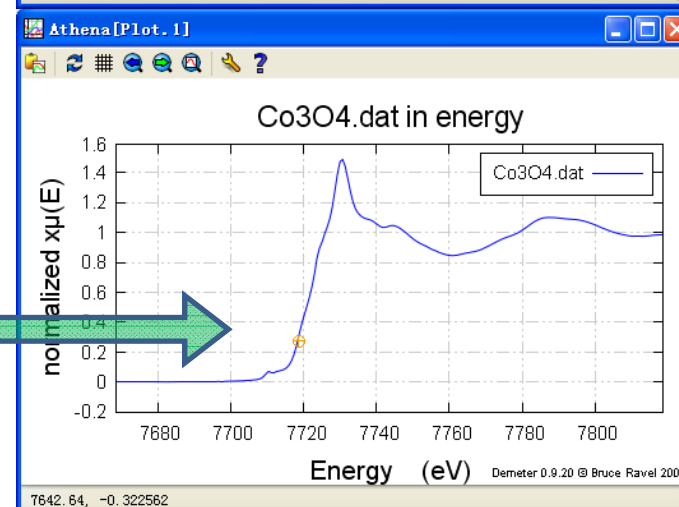
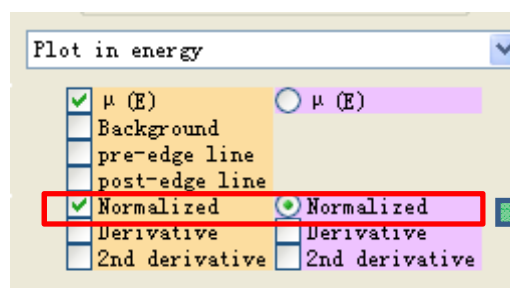
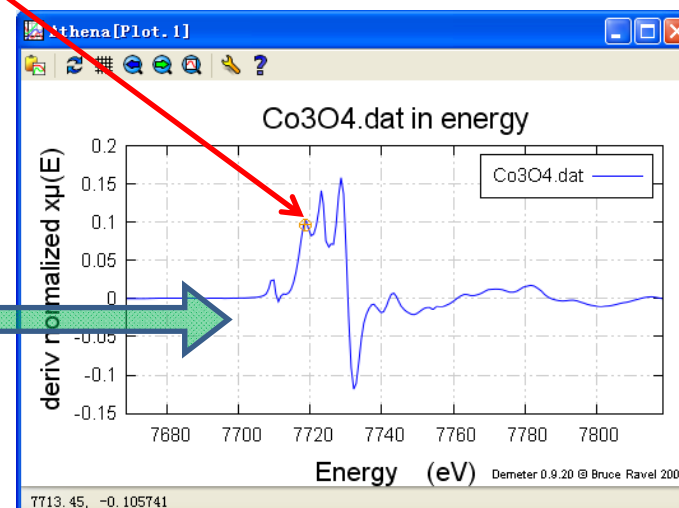
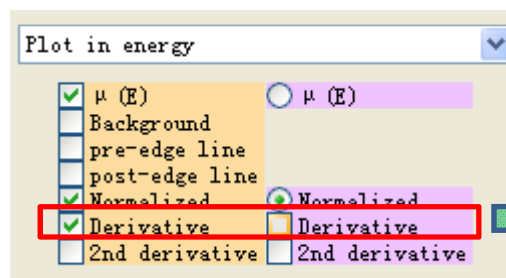
# ×射线吸收谱学实验 和数据分折讲习班

# 上机练习

## 4、确定 $E_0$ 及E-k转换

调整后的 $E_0$ 位置

$E_0$  7718.600



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

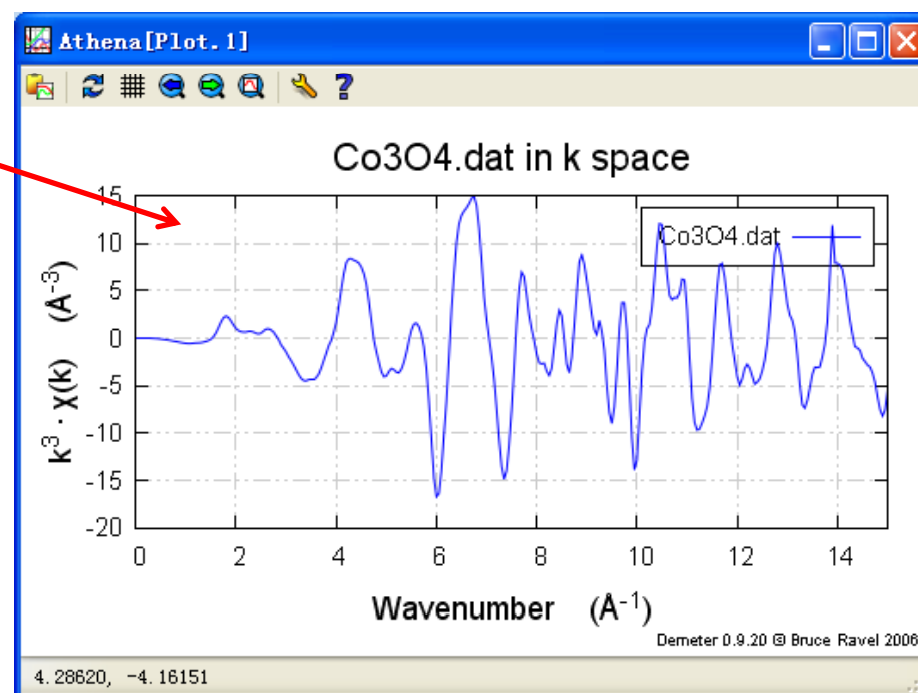
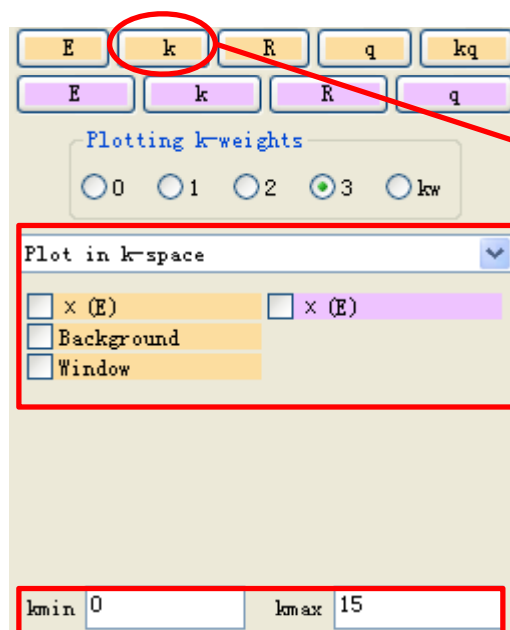
武汉·2014

物理研究所

# 上机练习

## 4、确定 $E_0$ 及E-k转换

由E空间变换到k空间



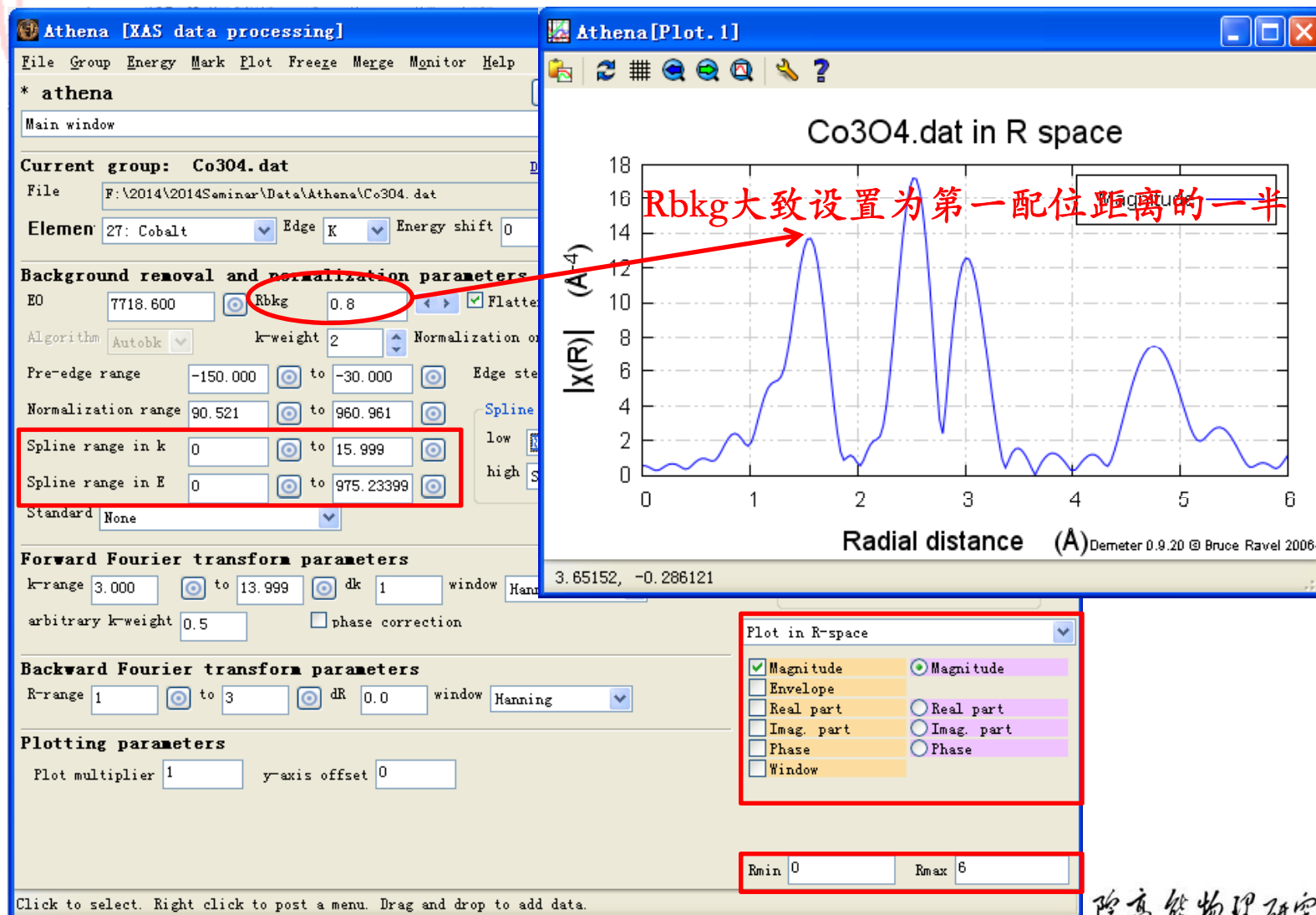
北京同步辐射装置  
Beijing Synchrotron Radiation Facility

×射线吸收谱学实验  
和数据分折讲习班

武汉·2014

# 上机练习

## 5、扣除原子吸收本底background



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

高能物理研究所

# 上机练习

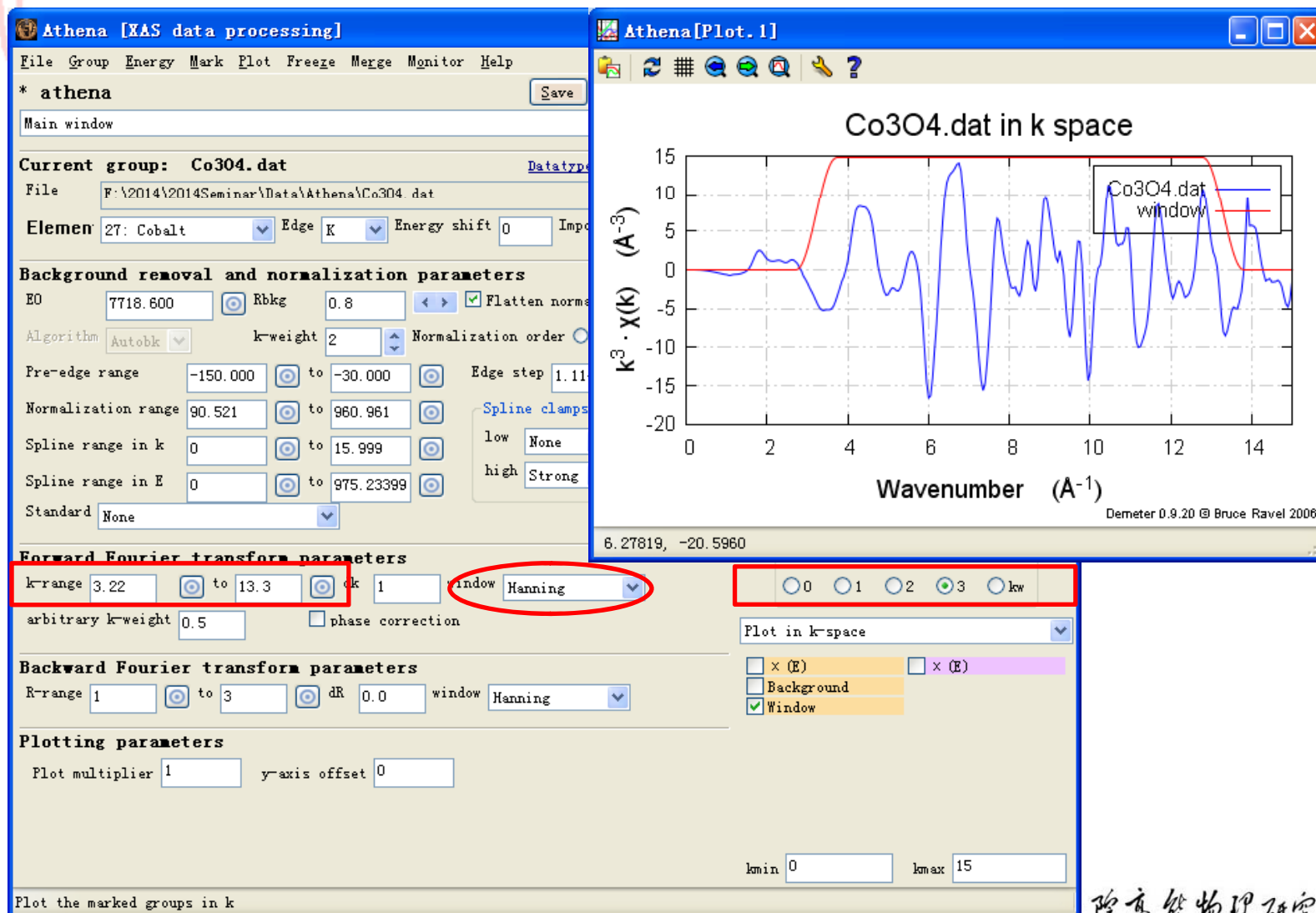
## 6、Fourier变换



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



院高能物理研究所

# 上机练习

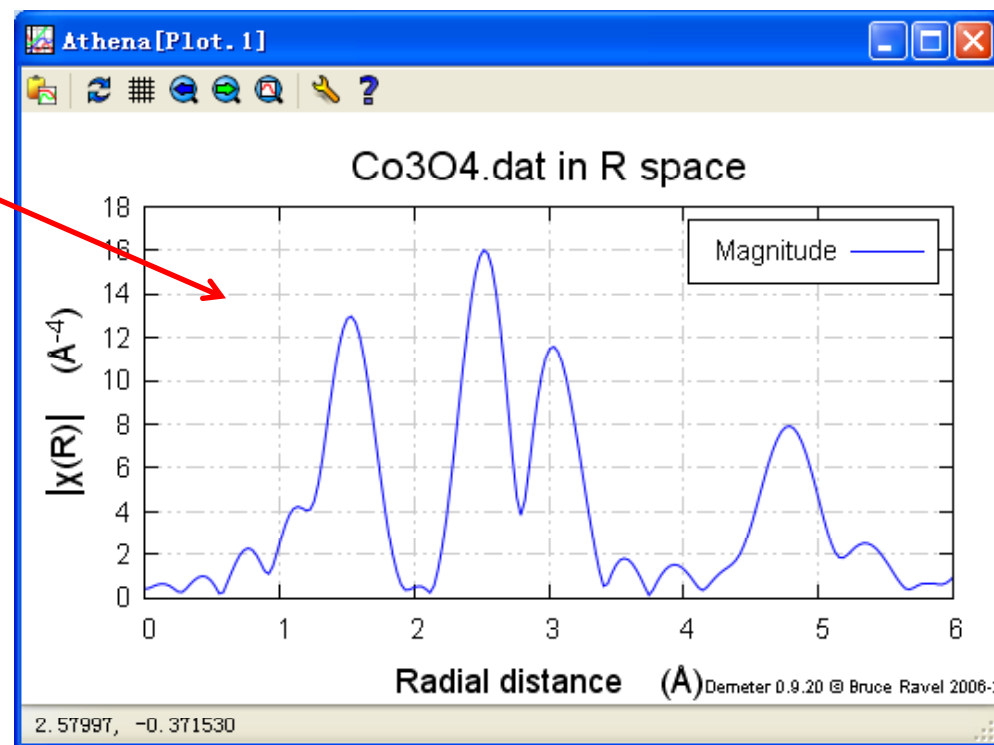
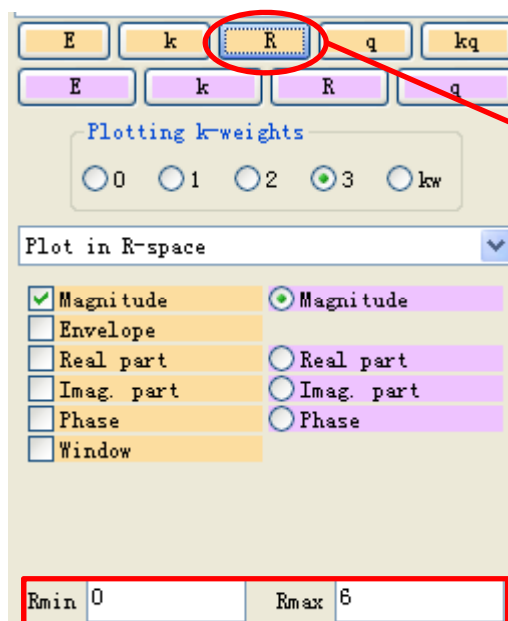
## 6、Fourier变换



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

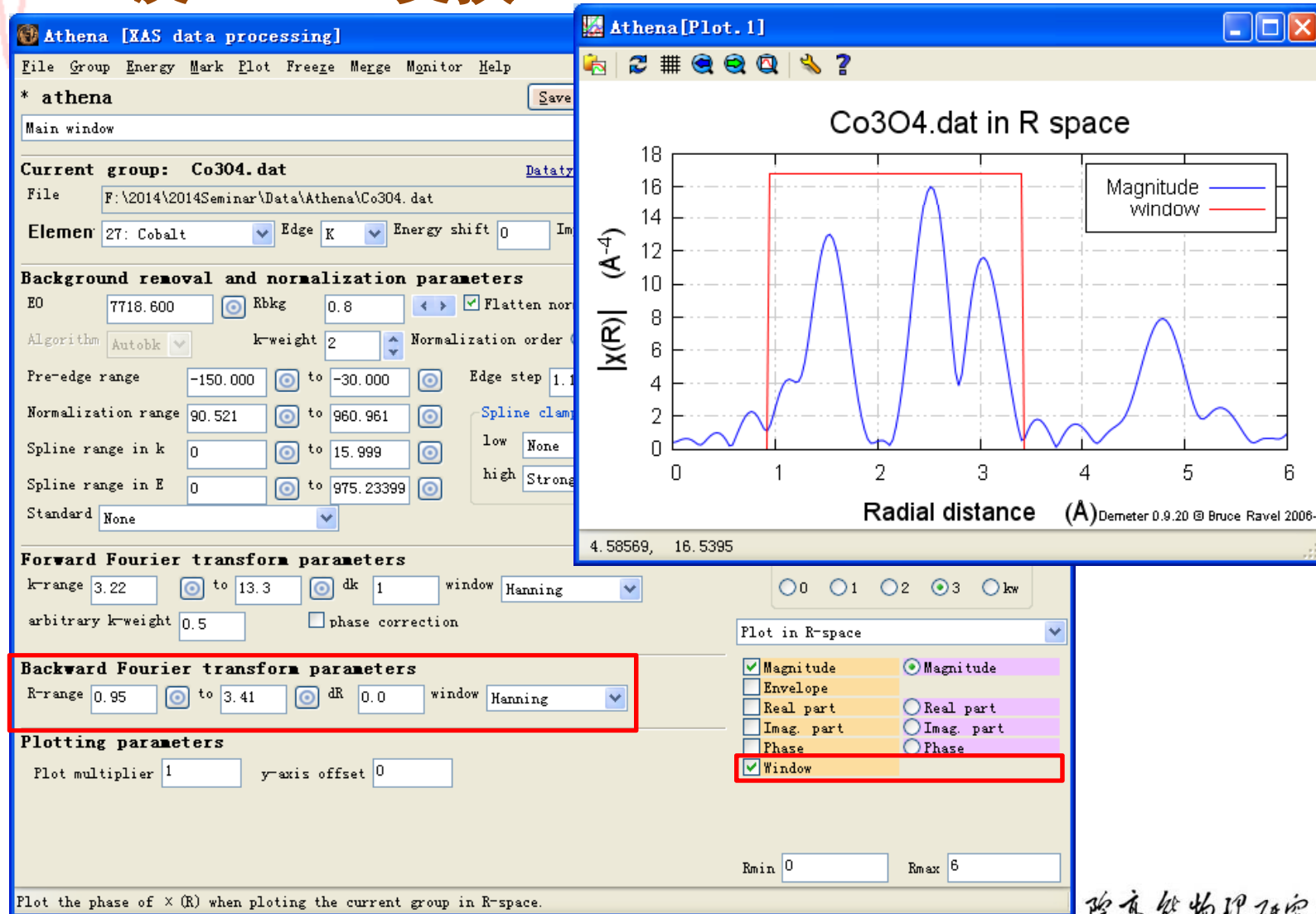


中国科学院高能物理研究所



# 上机练习

## 7、反Fourier变换



北京同步辐射装置  
Beijing Synchrotron Radiation Facility

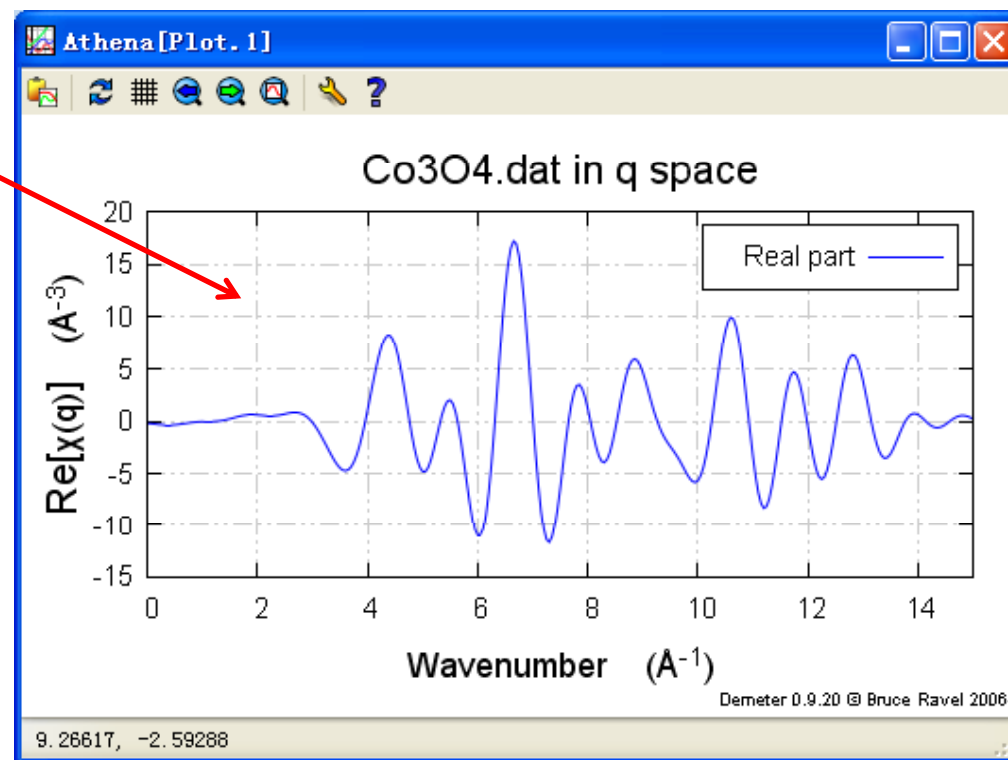
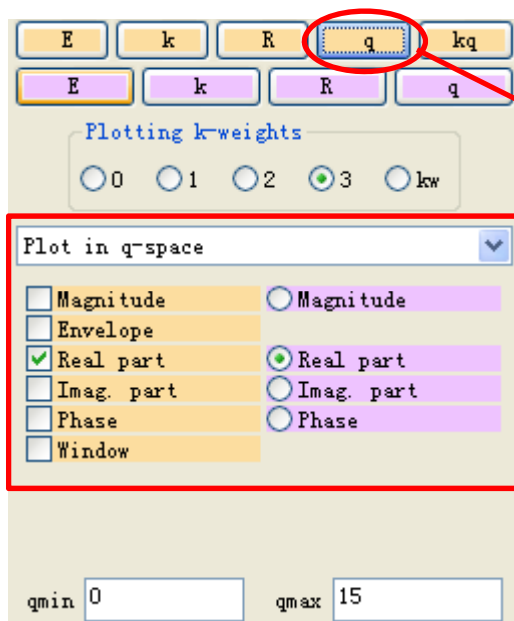
×射线吸收谱学实验  
和数据分折讲习班

武汉·2014

中国科学院高能物理研究所

# 上机练习

## 7、反Fourier变换



将某一或者某几个指定配位层所包含的XAFS信号提取出来，而后就可以将其导入Artemis程序中进行拟合。



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

# 上机练习

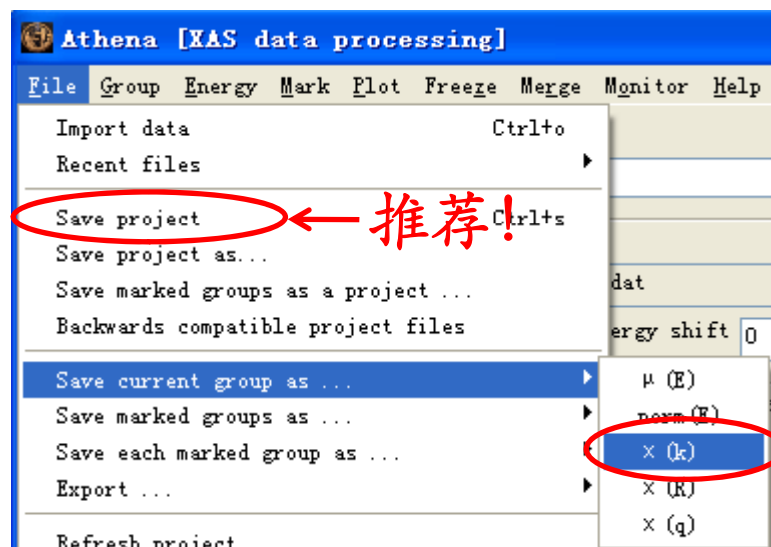


北京同步辐射装置  
Beijing Synchrotron Radiation Facility

×射线吸收谱学实验  
和数据分折讲习班

武汉·2014

## 8、保存文件



Athena提供了多种文件保存格式，如果要提供给Artemis进行拟合，需要将数据保存成  $\chi(k)$ ，或者工程文件 (\*.prj)。推荐后者，将文件保存为Co3O4.prj，以备Artemis拟合使用。



谢谢