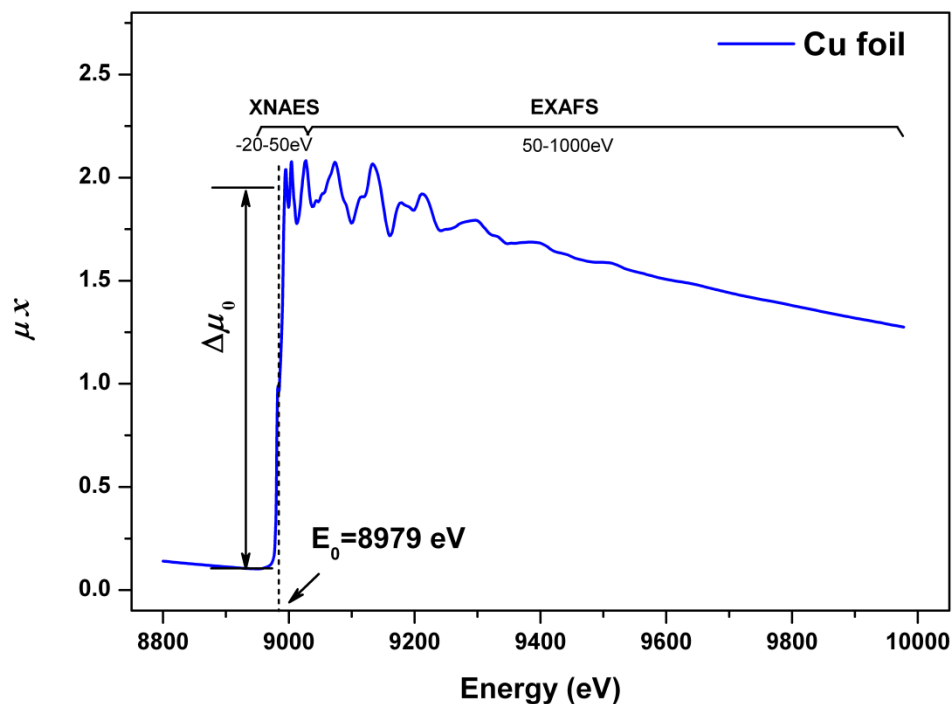
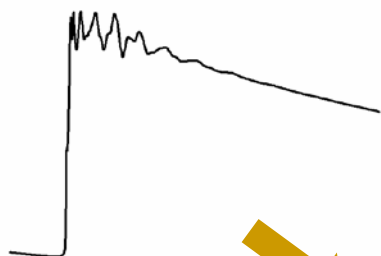


$\mu(E)$ 曲线



- ◆ 边前区 (Pre-edge): -150 至 -20eV, 本底吸收
- ◆ 近边区 (XANES): -20 至 50eV, X射线吸收近边结构
- ◆ 远边区 (EXAFS): 50 至 1000eV, 扩展X射线吸收精细结构

EXAFS数据处理



原始实验数据 $\mu(E)$

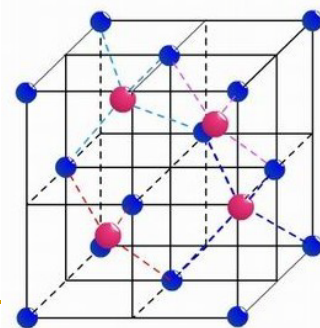


提取精细结构振荡函数 $\chi(k)$

$$\chi(k) = \sum_j \frac{N_j S_0^2 F_j(k) \exp(-2R_j / \lambda)}{k R_j^2} \exp(-2k^2 \sigma_j^2) \sin[2kR_j + \phi_j(k)]$$



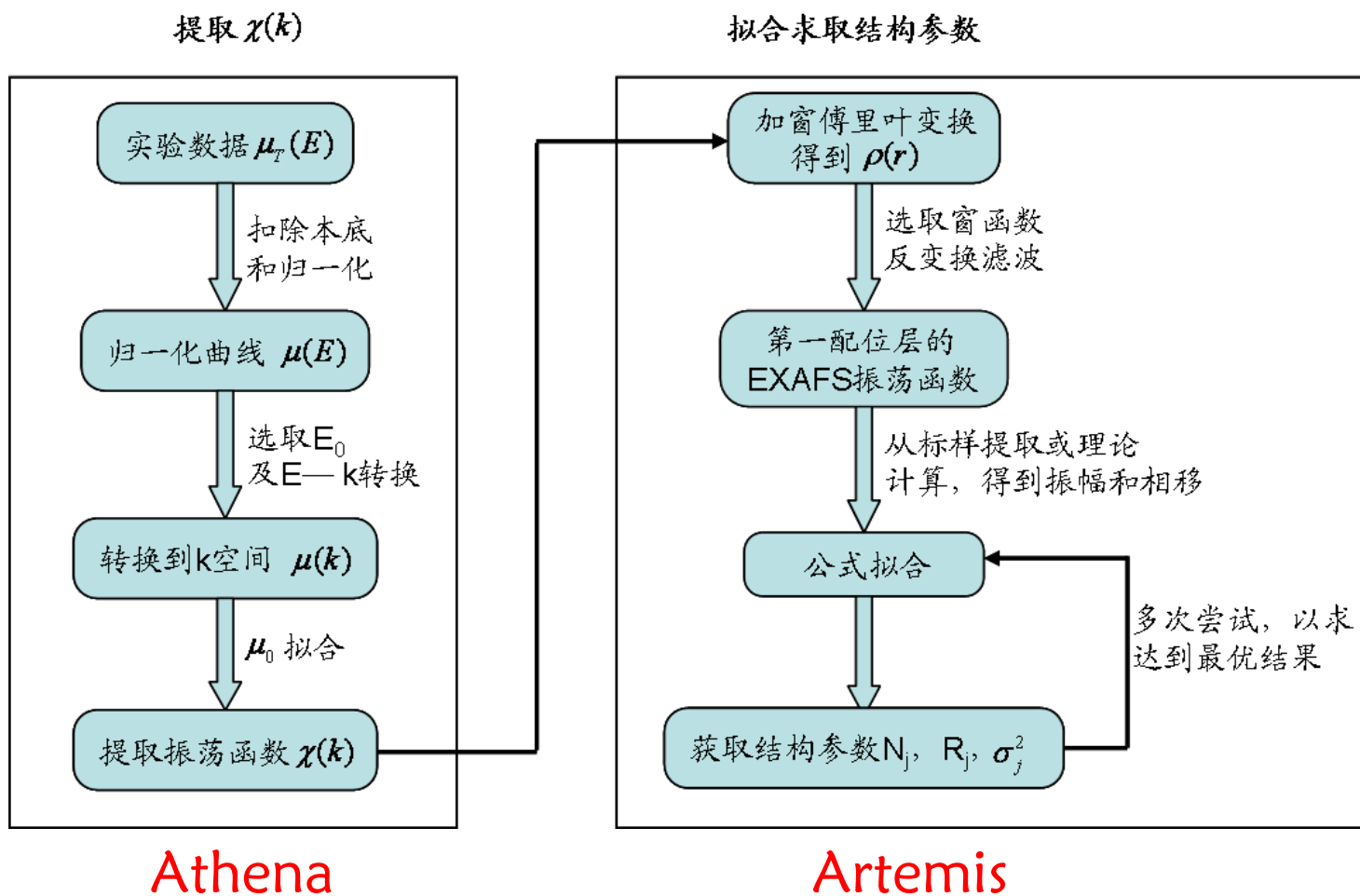
拟合求取结构参数



EXAFS数据处理



基本步骤



EXAFS数据处理



- ◆ 扣除边前和归一化
- ◆ 确定 E_0 和E-k转换
- ◆ 扣除背底 (Rbkg)
- ◆ Fourier变换 (k的范围和权重)
- ◆ 提取 $\chi(k)$



EXAFS数据处理



◆ 扣除边前

- **原因：**原始数据得到的是样品总的吸收系数，它不仅包括吸收原子的光电跃迁造成的吸收，还包括吸收原子中的其他电子以及除吸收原子外其他原子的吸收。处理XAFS谱时，需要把后者扣除掉。
- **方案：**例如迭代低次多项式、正交多项式、傅立叶变换过滤法、外推法等等。一般使用外推法，应用Victoreen公式 ($\mu(\lambda) = C\lambda^3 - D\lambda^4$) 拟合吸收边前的吸收曲线，将它延长到吸收边以后，作为本底部分扣除。



EXAFS数据处理



◆ 归一化

➤ **原因：**由于设备、数据采集模式、入射光强度、样品厚度等等的不同，一系列的原始数据的吸收谱记录下来的吸收强度会有所不同，不具有可比性。为了对这些数据进行比较，需要将它们归一化，统一成可比数据。

➤ **方案：**归一化的方案并不唯一，例如可以在边后选取两点，其连线与吸收边的交点定为1，或者取边后两点，计算这一段数据围成的面积（以该段数据最低点作x轴平行线为该图形的底），然后找到将这个图形面积一分为二的横线，定其纵坐标为1，等等。



EXAFS数据处理



扣除边前和归一化

Athena

File Edit Group Values Plot Mark Data Merge Analysis Settings Help

Project

Current group cu_foil.dat

File: F:/2011/BSRFseminar/cu-foil.dat

Z: Cu Edge: K E shift: 4.014 Importance: 1

Background removal Show additional parameters

E0: 8979 Rbkg: 1

k-weight: 2 Edge step: 1.78020 fix step

Pre-edge range: -150 to -30

Normalization range: 50 to 920

Spline range: k: 0.0 to 15.736

E: 0.000 to 943.435

Forward Fourier transform

k-range: 2 to 15

dk: 1 window type: hanning

Phase correction: no arbitrary k-weight: 0.5

Backward Fourier transform

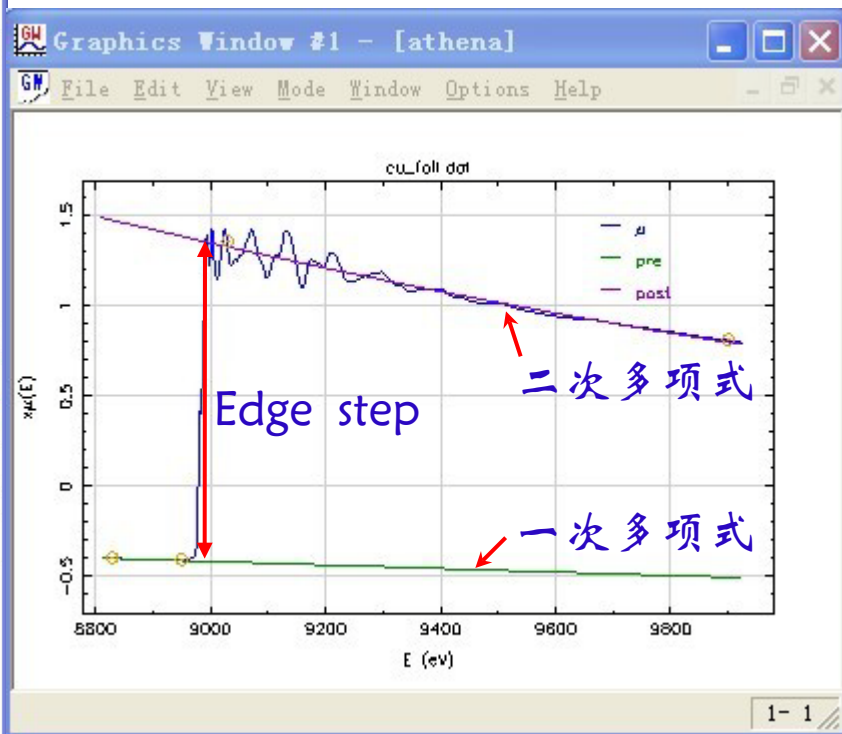
R-range: 1 to 3

dr: 0.0 window type: hanning

Plotting parameters

plot multiplier: 1 y-axis offset: 0

plotting in energy from group 'cu_foil.dat' ... done!



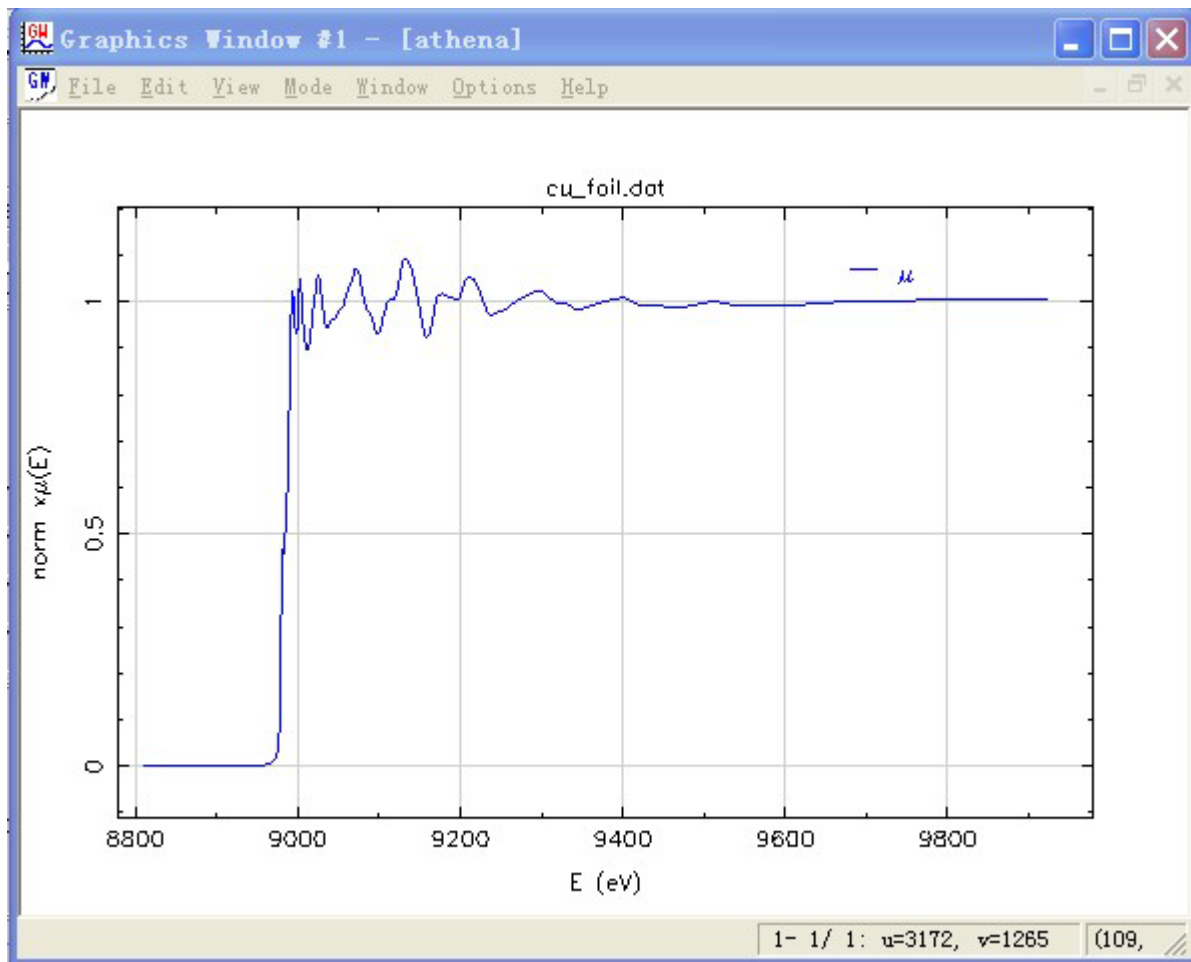
北京同步辐射装置EXAFS谱分析讲习班, 2011年12月7-8日, 北京



EXAFS数据处理



扣除边前和归一化



EXAFS数据处理



◆ 确定 E_0 和E-k转换

➤ **原理:** $\chi(k)$ 是 k 的函数, $k = \sqrt{2m(E - E_0)} / \hbar$

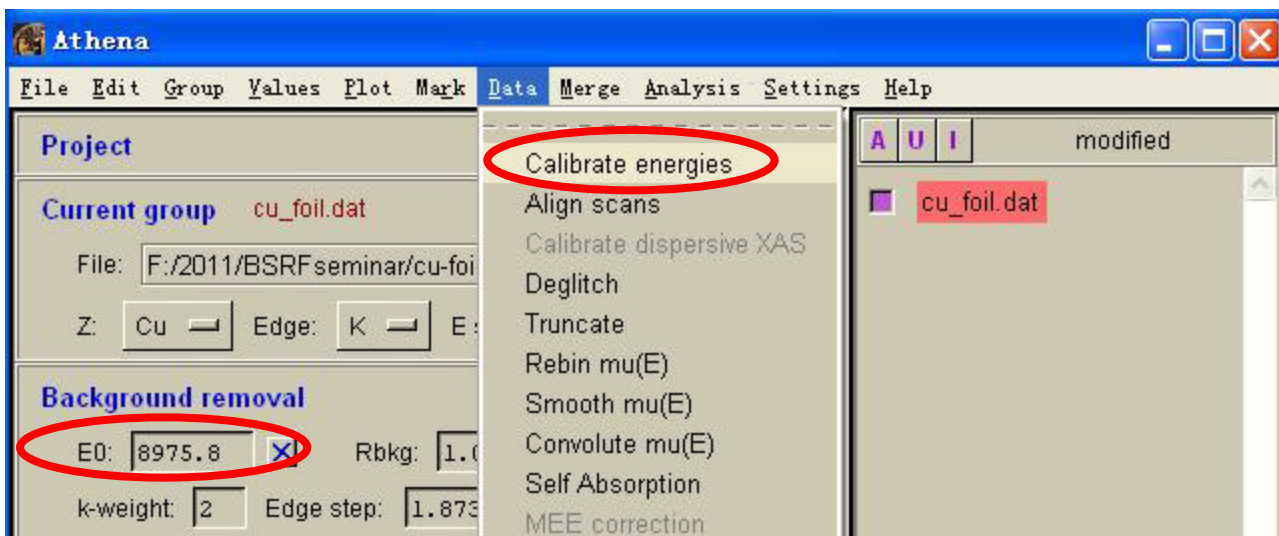
➤ **方案:** 确定 E_0 的方案有很多, 例如吸收台阶起始位置、第一吸收峰顶、台阶半高、吸收边拐点等等。此时的 E_0 精确值并不重要, 但是对于同一系列的样品, E_0 的确定方案要一致。



EXAFS数据处理



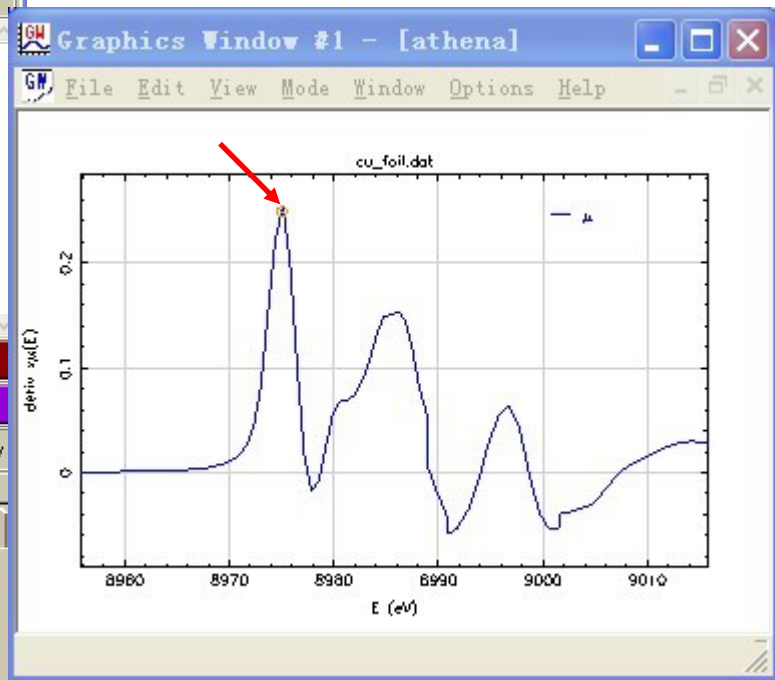
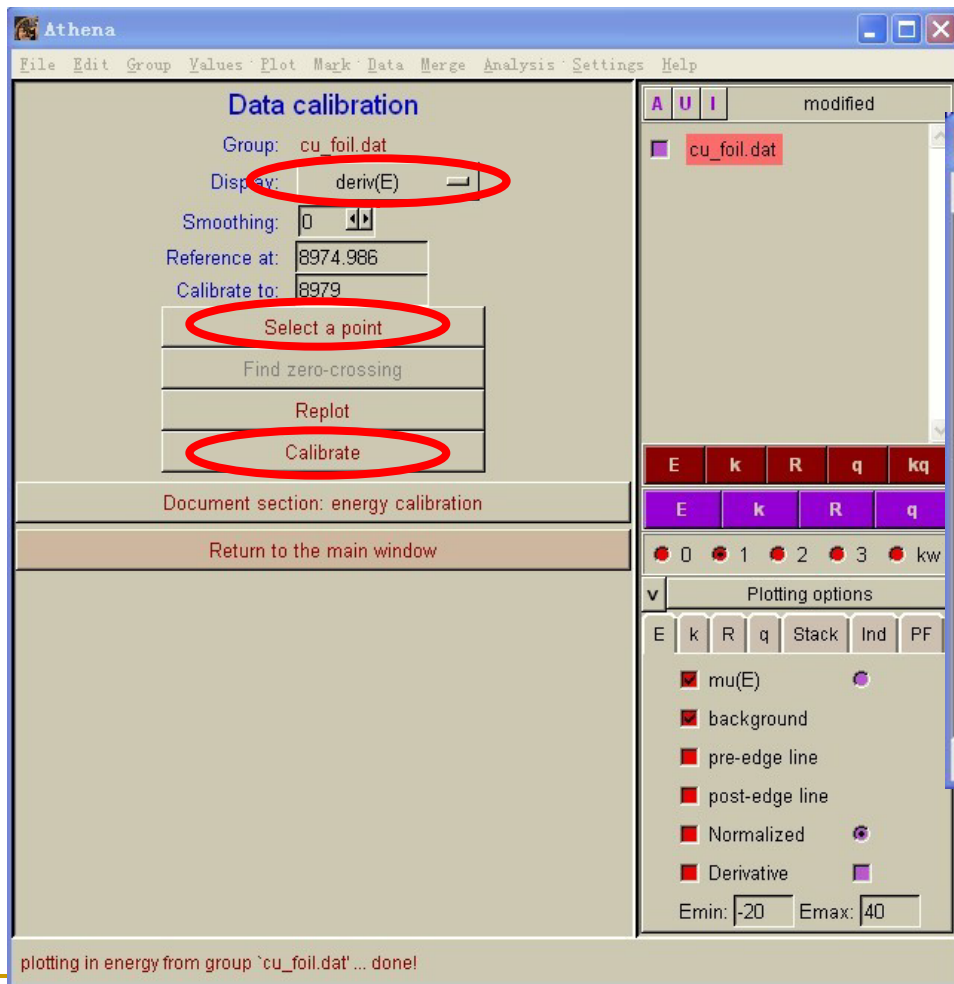
确定 E_0 和E-k转换



EXAFS数据处理



确定 E_0 和E-k转换



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



确定 E_0 和E-k转换

Athena

File Edit Group Values Plot Mark Data Merge Analysis Settings Help

Project

Current group: cu_foil.dat

File: F:/2011/BSRFseminar/cu-foil.dat

Z: Cu Edge: K E shift: 4.014 Importance: 1

Background removal Show additional parameters

E0: 8979 Rbkg: 1.0

k-weight: 2 Edge step: 1.87406 fix step

Pre-edge range: -150 to -30

Normalization range: 150 to 843.4510

Spline range: k: 0.0 to 15.736

E: 0.000 to 943.435

A U I modified

cu_foil.dat

E k R q kq

E k R q



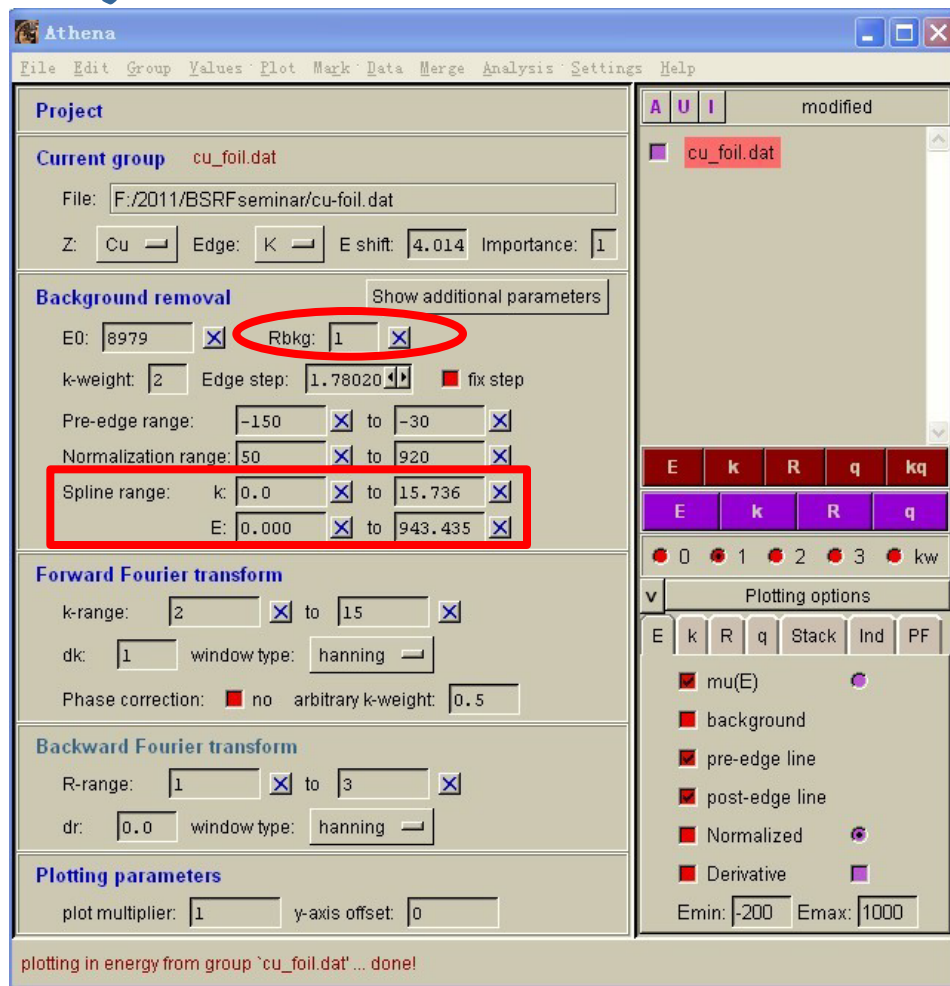
EXAFS数据处理



扣除背底 (AUTOBK)

◆ Rbkg参数

◆ 样条函数的范围



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



扣除背底 (AUTOBK)

◆ Rbkg参数

◆ 样条函数的范围

一般认为在第一配位层以内($R \leq R_1$)是没有配位原子的

Athena

File Edit Group Values Plot Mark Data Merge Analysis Settings Help

Project

Current group: cu_foil.dat

File: F:/2011/BSRFseminar/cu-foil.dat

Z: Cu Edge: K E shift: 4.014 Importance: 1

Background removal Show additional parameters

E0: 8979 Rbkg: 1

k-weight: 2 Edge step: 1.78020 fix step

Pre-edge range: -150 to -30

Normalization range: 50 to 920

Spline range: k: 0.0 to 15.736

E: 0.000 to 943.435

Forward Fourier transform

k-range: 2 to 15

dk: 1 window type: hanning

Phase correction: no arbitrary k-weight: 0.5

Backward Fourier transform

R-range: 1 to 3

dr: 0.0 window type: hanning

Plotting parameters

plot multiplier: 1 y-axis offset: 0

plotting in energy from group `cu_foil.dat' ... done!

EXAFS数据处理



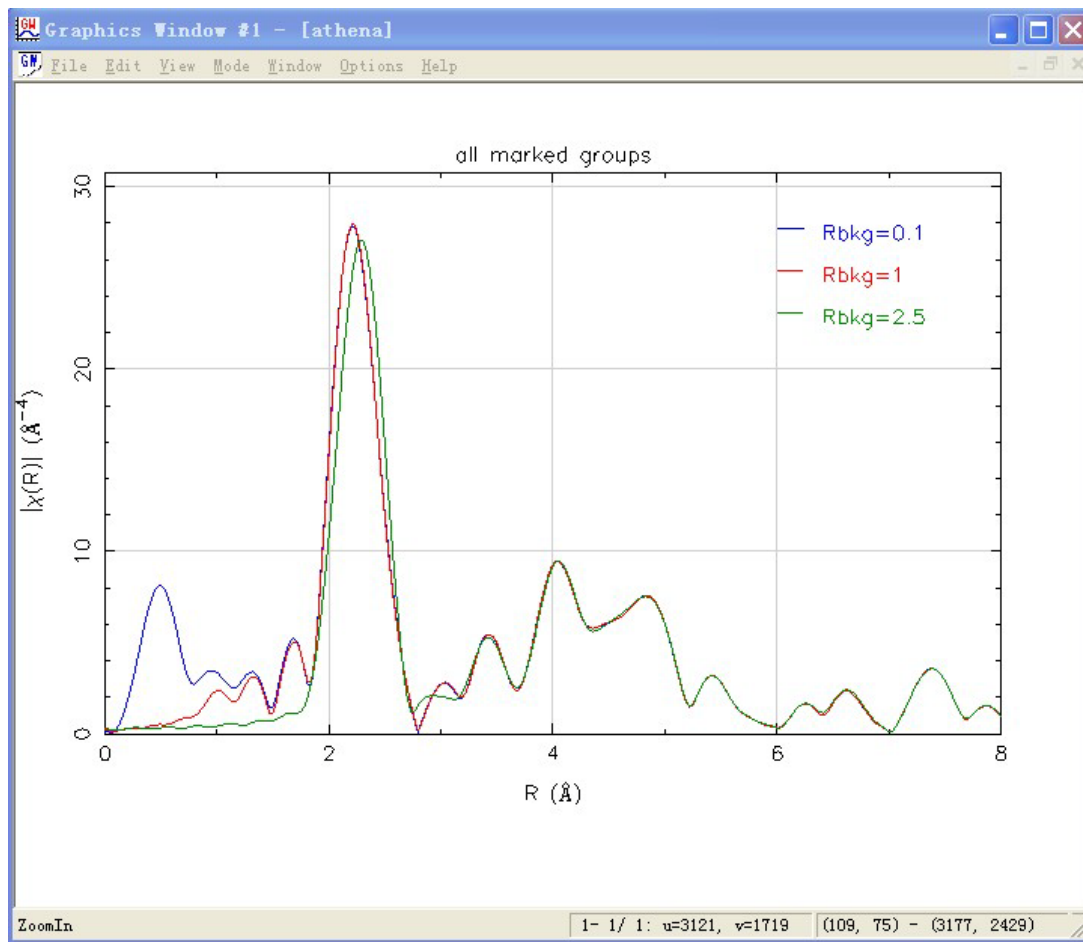
扣除背底 (AUTOBK)

◆ Rbkg

◆ 样条函数的范围

如果Rbkg太小，背底扣除不干净，引进低频噪声；Rbkg太大，有可能将有用信号当成背底扣除掉，从而影响配位信号。

通常选择为第一配位距离的一半为佳！



EXAFS数据处理



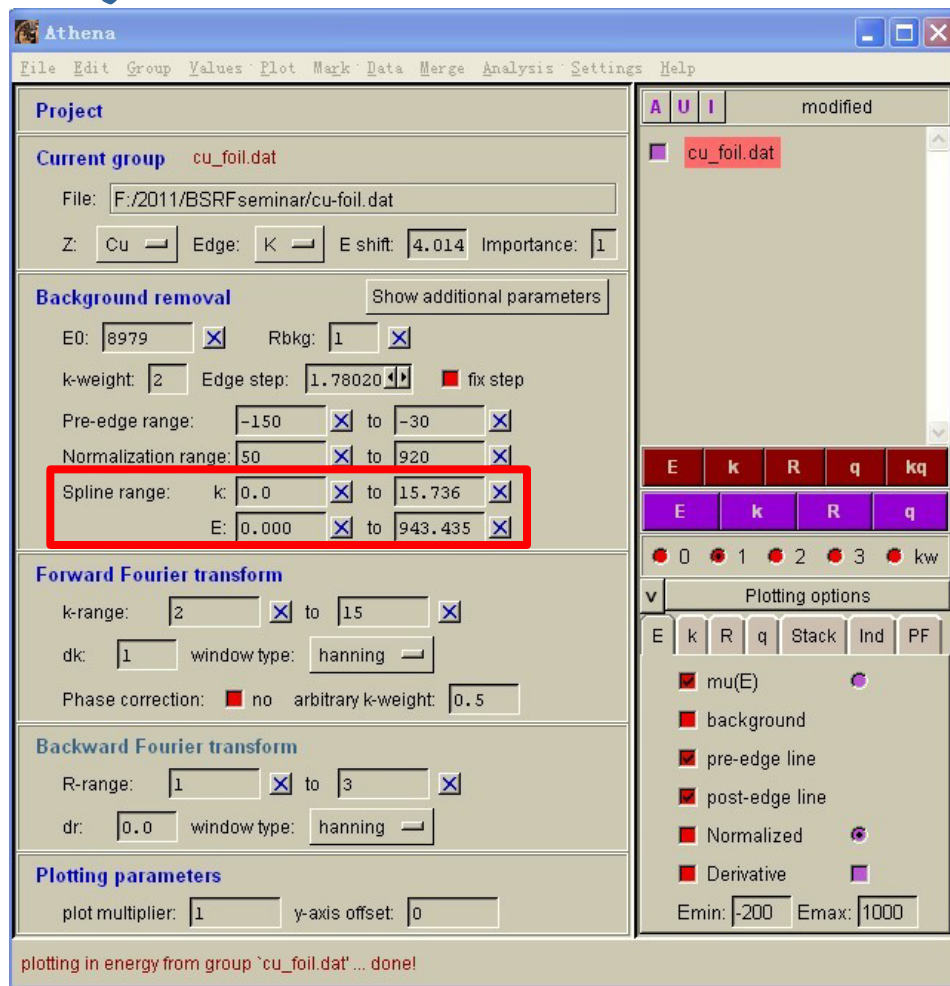
扣除背底 (AUTOBK)

◆ Rbkg

◆ 样条函数的范围

k左边界：一般从0开始，如果白线峰很强，可以适当向后增加；

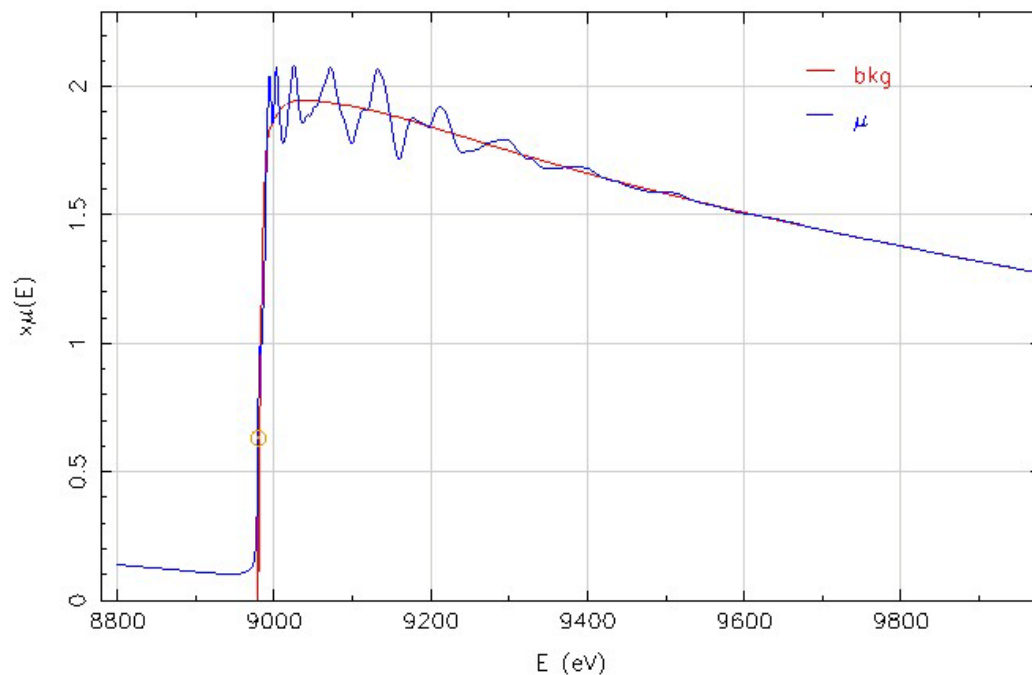
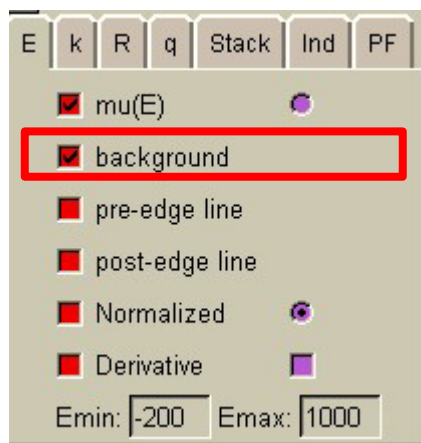
k右边界：取数据的最长部分，但如果高k部分数据的噪声太大，需要适当收缩。



EXAFS数据处理



扣除背底 (AUTOBK)



EXAFS数据处理



◆ 加窗Fourier变换

➤ 原理:
$$\rho(r) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{k_{\min}}^{k_{\max}} W(k) k^n \chi(k) e^{-i2kr} dk$$

➤ 参数: k 的取值范围 $[k_{\min}, k_{\max}]$; 窗函数 $W(k)$; k 的权重 k^n

➤ 说明: Fourier变换在数学上要求全空间积分, 但实验数据达不到要求。如果将 $\chi(k)$ 两端强行设置为0, 会给傅立叶变换带来边瓣, 因此要在变换中加入一个窗函数 $W(k)$, 使其两端缓慢变为0, 减少干扰。



EXAFS数据处理



Fourier变换

◆ k的范围

◆ k的权重

◆ 窗函数

Athena

File Edit Group Values Plot Mark Data Merge Analysis Settings Help

Project

Current group: cu_foil.dat

File: F:/2011/BSRFseminar/cu-foil.dat

Z: Cu Edge: K E shift: 4.014 Importance: 1

Background removal Show additional parameters

E0: 8979 Rbkg: 1

k-weight: 2 Edge step: 1.78020 fix step

Pre-edge range: -150 to -30

Normalization range: 50 to 920

Spline range: k: 0.0 to 15.736

E: 0.000 to 943.435

Forward Fourier transform

k-range: 2 to 15

dk: 1 window type: hanning

Phase correction: no arbitrary k-weight: 0.5

Backward Fourier transform

R-range: 1 to 3

dr: 0.0 window type: hanning

Plotting parameters

plot multiplier: 1 y-axis offset: 0

plotting in energy from group 'cu_foil.dat' ... done!

A U I modified

cu_foil.dat

E k R q kq

E k R q

0 1 2 3 kw

v Plotting options

E k R q Stack Ind PF

mu(E)

background

pre-edge line

post-edge line

Normalized

Derivative

Emin: -200 Emax: 1000



EXAFS数据处理



Fourier 变换

◆ k的范围

◆ k的权重

◆ 窗函数

➢ k_{min} : 2-4之间, 去掉XANES部分

➢ k_{max} : 根据信噪比选择比较平滑的区域, 越大越好

➢ k的起点和终点尽量靠近 $y=0$ 的节点位置, 并尽量是一个完整的振荡周期

The screenshot shows the Athena software interface with the following settings:

- Project:** Current group: cu_foil.dat, File: F:/2011/BSRFseminar/cu-foil.dat, Z: Cu, Edge: K, E shift: 4.014, Importance: 1
- Background removal:** E0: 8979, Rbkg: 1, k-weight: 2, Edge step: 1.78020, Pre-edge range: -150 to -30, Normalization range: 50 to 920, Spline range: k: 0.0 to 15.736, E: 0.000 to 943.435
- Forward Fourier transform:** k-range: 2 to 15 (highlighted), dk: 1, window type: hanning, Phase correction: no, arbitrary k-weight: 0.5
- Backward Fourier transform:** R-range: 1 to 3, dr: 0.0, window type: hanning
- Plotting parameters:** plot multiplier: 1, y-axis offset: 0

Plotting options: mu(E), background, pre-edge line, post-edge line, Normalized, Derivative, Emin: -200, Emax: 1000



EXAFS数据处理



Fourier 变换

◆ k 的范围

◆ k 的权重

◆ 窗函数

一般认为: $Z < 36$, $n=3$;

$36 < Z < 57$, $n=2$;

$Z > 57$, $n=1$.

k 权重可以提高高 k 部分的信号, 但同时也会放大噪声, 所以还要兼顾高 k 部分的信噪比。

plotting in energy from group `cu_foil.dat' ... done!



EXAFS数据处理

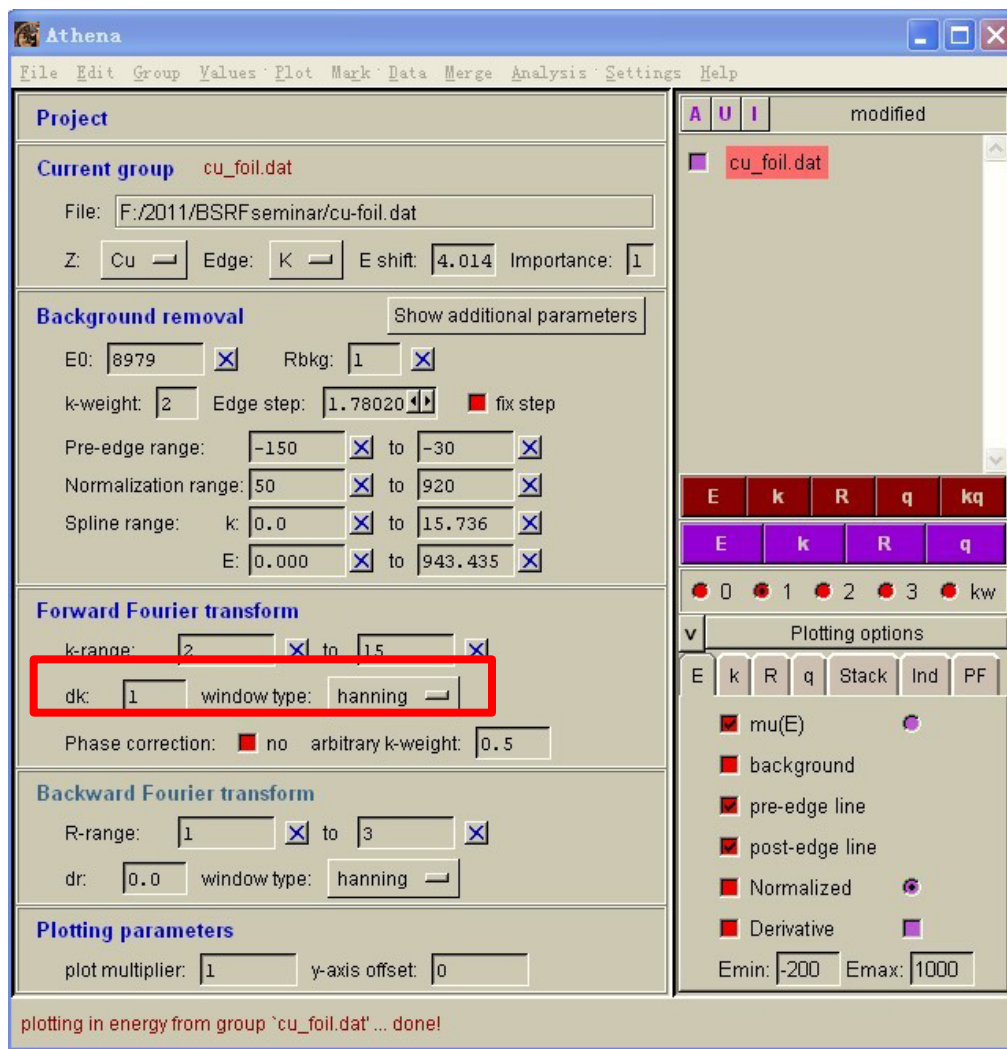


Fourier变换

◆ k的范围

◆ k的权重

◆ 窗函数



EXAFS数据处理



Fourier 变换

Hanning 窗函数

$$w(k) = \begin{cases} 0 & k < k_1 \\ \sin^2 \left[\frac{\pi(k-k_1)}{2(k_2-k_1)} \right] & k_1 < k < k_2 \\ 1 & k_2 < k < k_3 \\ \cos^2 \left[\frac{\pi(k-k_3)}{2(k_4-k_3)} \right] & k_3 < k < k_4 \\ 0 & k > k_4 \end{cases}$$

$$dk = k_2 - k_1 = k_4 - k_3$$

$$k_{\min} = \frac{k_1 + k_2}{2}, \quad k_{\max} = \frac{k_3 + k_4}{2}$$

k-range: to

dk: window type:

