



北京同步辐射装置
Beijing Synchrotron Radiation Facility

XAFS数据处理之 -Athena软件及其应用

储胜启

吸收谱实验站 (XAFS, 1W1B)

chusq@ihep.ac.cn

武汉, 2014.11.20



中国科学院高能物理研究所

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

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

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

主要内容

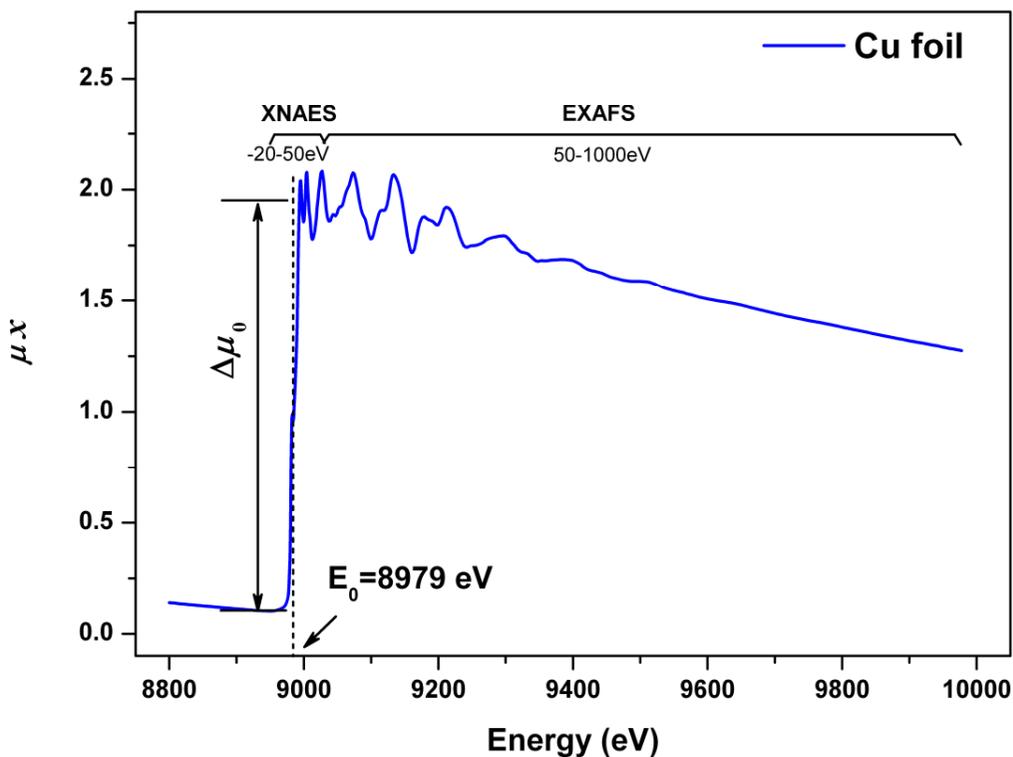
- ◆ XAFS曲线的基本特征
- ◆ 区域划分：边前、XANES、EXAFS
- ◆ 数据预判断：XAFS数据是否“正常”？
- ◆ 数据处理的基本流程



XAFS数据处理的一般步骤

XAFS曲线：吸收系数随入射X光能量的变化曲线

- ◆ 原始数据 $\mu(E)$
 - ✓ 横坐标：入射X光子能量 E (eV or keV)
 - ✓ 纵坐标：样品吸收系数 μ



- ◆ 边前区 (Pre-edge)
- ◆ 近边区 (XANES)
- ◆ 远边区 (EXAFS)



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

XAFS数据的区域划分

区域划分	能量范围 (eV)	特征	包含的信息	分析方法
边前区	-200至-20	近似线性	吸收本底信号	作为本底扣除
XANES	-20至50	包括吸收边及其附近比较强的振荡信号	包含吸收原子的化学态及几何结构信息，具有“指纹效应”	价态比较，PCA，LCA理论计算等
EXAFS	50至1000	振荡信号随能量的递增很快衰减，300eV之后比较平缓	吸收原子的近邻配位结构信息	构建模型进行拟合得到相关的结构参数

XAFS数据处理的一般步骤



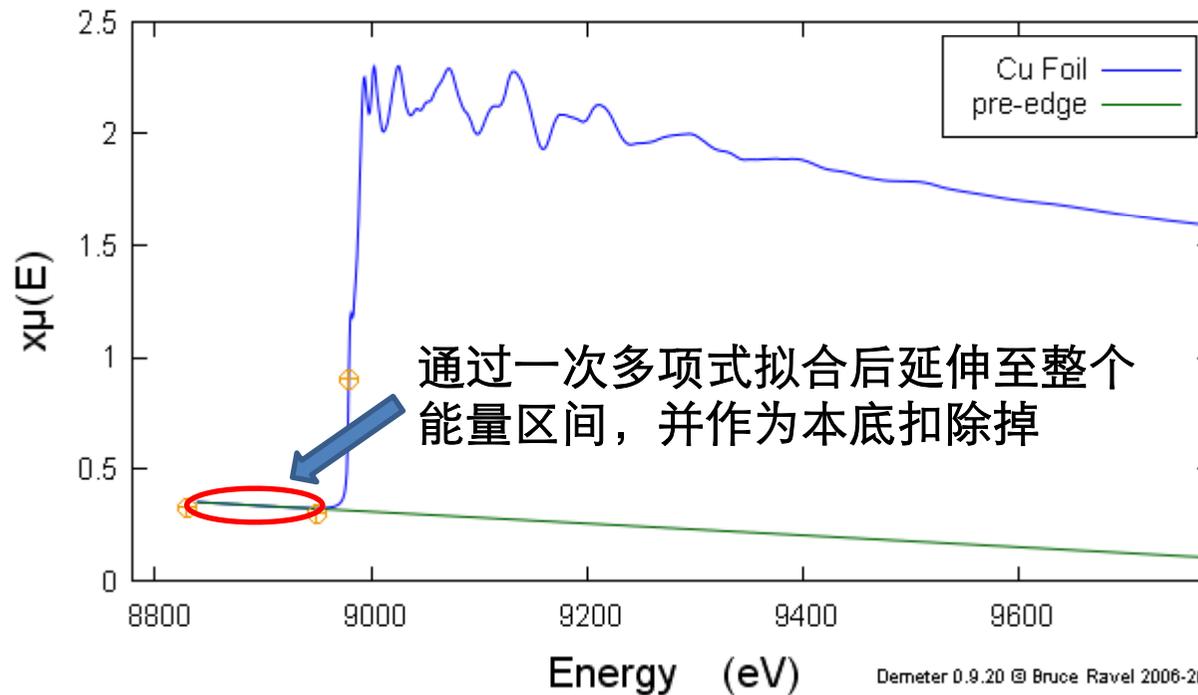
北京同步辐射装置
Beijing Synchrotron Radiation Facility

X射线吸收谱学实验
和数据分析讲习班

武汉·2014

XAFS数据的区域划分

区域划分	能量范围 (eV)	特征	包含的信息	分析方法
边前区	-200至-20	近似线性	样品中其他原子产生的本底信号	通过多项式拟合后直接扣除



Demeter 0.9.20 © Bruce Ravel 2006-2014



中国科学院高能物理研究所



北京同步辐射装置
Beijing Synchrotron Radiation Facility

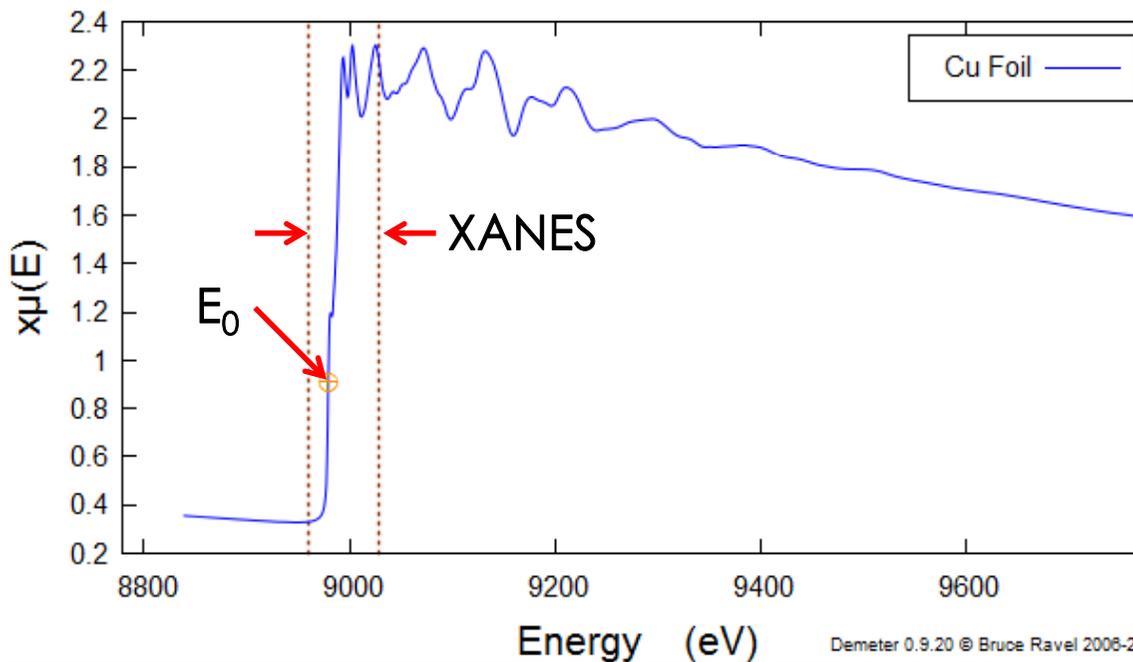
X射线吸收谱学实验
和数据分析讲习班

武汉·2014

XAFS数据处理的一般步骤

XAFS数据的区域划分

区域划分	能量范围 (eV)	特征	包含的信息	分析方法
XANES	-20至50	包括吸收边及其附近比较强的振荡信号	包含吸收原子的化学态及几何结构信息，具有“指纹效应”	价态分析，PCA，LCA理论计算等





北京同步辐射装置
Beijing Synchrotron Radiation Facility

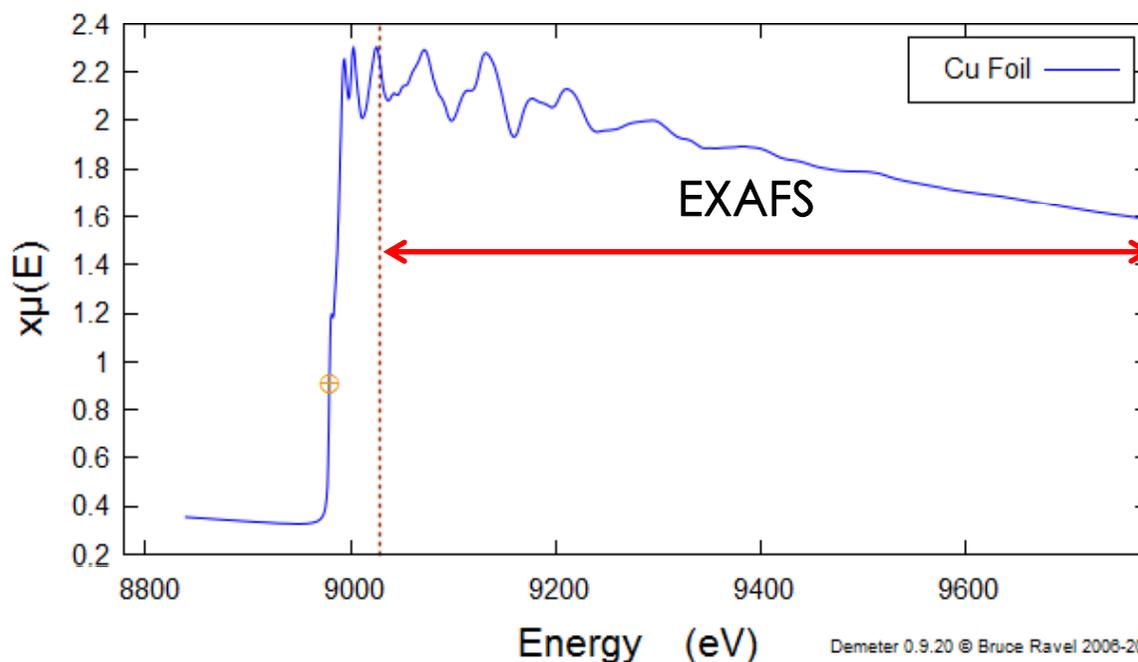
×射线吸收谱学实验
和数据分析讲习班

武汉·2014

XAFS数据处理的一般步骤

XAFS数据的区域划分

区域划分	能量范围 (eV)	特征	包含的信息	分析方法
EXAFS	50至1000	振荡信号随能量的递增很快衰减, 300eV之后比较平缓	吸收原子的近邻配位结构信息	构建模型进行拟合得到相关的结构参数



Demeter 0.9.20 © Bruce Ravel 2006-2014



中国科学院高能物理研究所



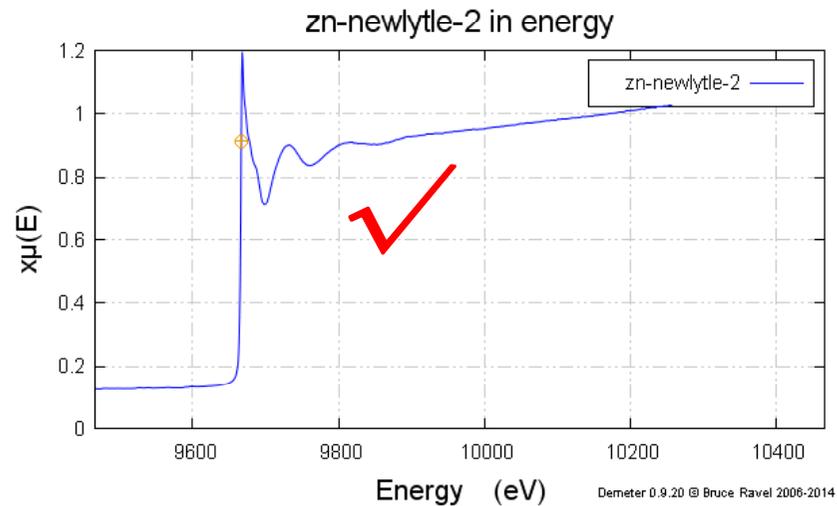
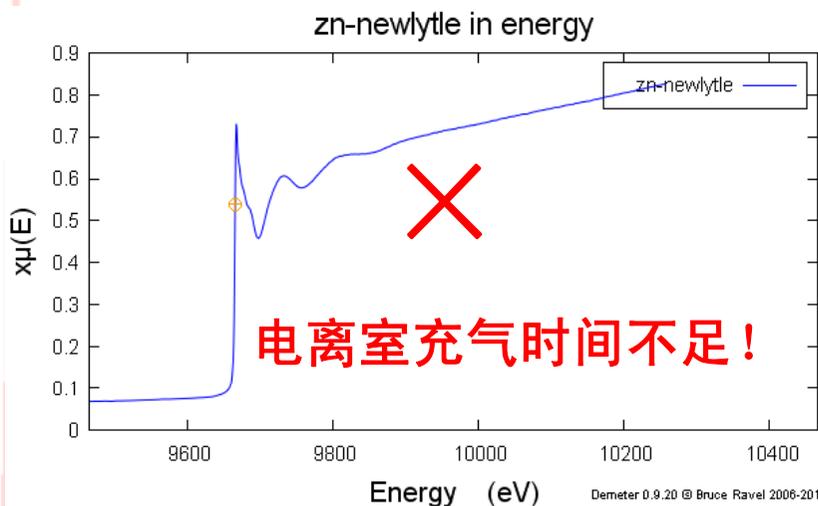
XAFS数据处理的一般步骤

XAFS数据的预判断

实验数据是否是一个“好”的数据？

- ①客观真实的，实验上可重复的
- ②信噪比最优的

严谨的实验设计！



客观正确的、信噪比好的实验数据是进行数据处理的前提和保证



XAFS数据处理的一般步骤

XAFS数据处理的基本流程

充分理解**E空间**、**k空间**、**R空间**三者之间的联系和转换关系，是掌握XAFS数据处理的关键



E-k转换公式 $k = \sqrt{2m(E - E_0)} / \hbar$

Fourier变换公式 $\tilde{\chi}(R) = FT(\chi(k)) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_0^\infty \chi(k)W(k)e^{i2kR} dk$



XAFS数据处理的一般步骤

XAFS数据处理的基本流程 - XANES

只需在E空间中进行

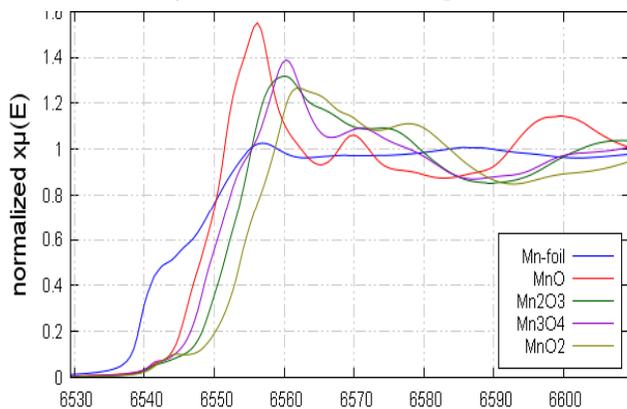
步骤	名称	主要目的	处理方法
1	预处理	去除一些干扰数据，或者合并多次扫描的数据	截断、去除glitch、能量校准、合并数据等
2	扣除本底	扣除样品中除吸收原子外的其他原子的吸收信号	通过多项式拟合吸收边前部分，将它延长到吸收边以后，作为本底部分扣除
3	归一化	消除由于实验系统或者样品本身的差异导致的绝对吸收强度的不同，将数据统一成可比数据	方案不唯一，通常选取边后一段平滑区域进行多项式拟合，将其拟合曲线上的数值视为1，或者选取边后两点，其连线与吸收边的交点定为1等等



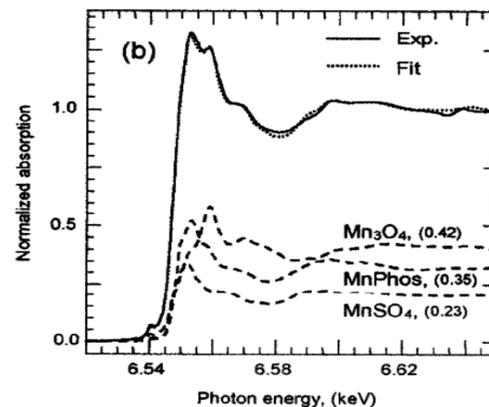
北京同步辐射装置
Beijing Synchrotron Radiation Facility

XAFS数据处理的一般步骤

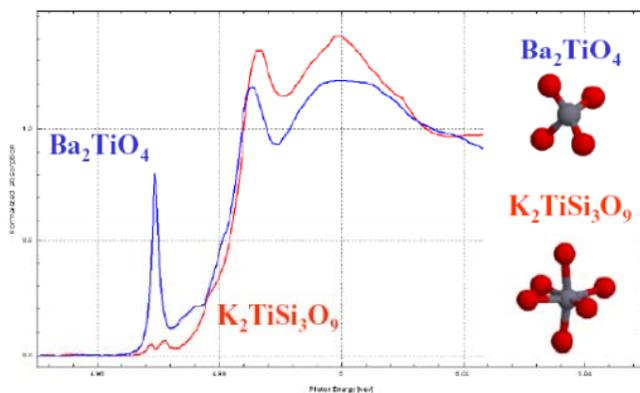
XAFS数据处理的基本流程 - XANES



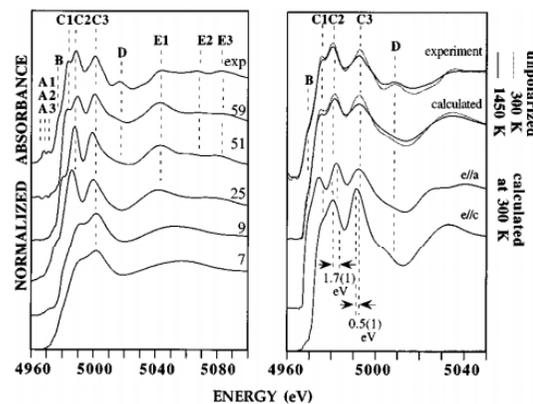
(a) 价态分析



(b) 组分分析



(c) 特征结构比较



(d) 理论分析

X射线吸收谱学实验
和数据分析讲习班

武汉·2014



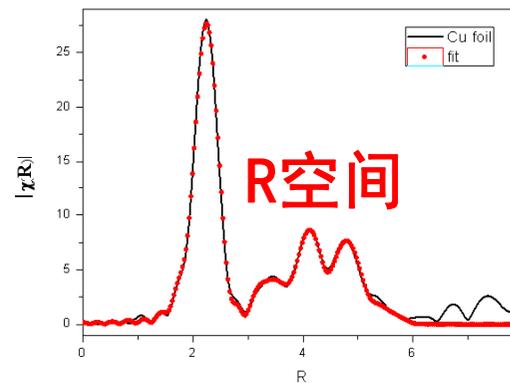
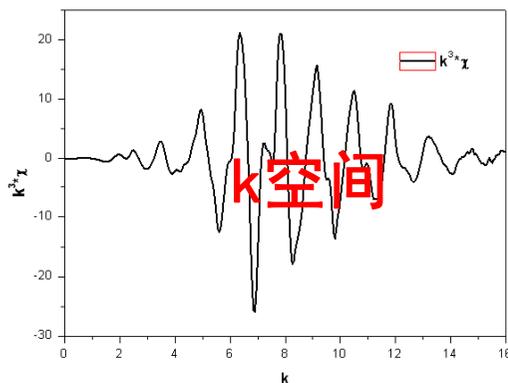
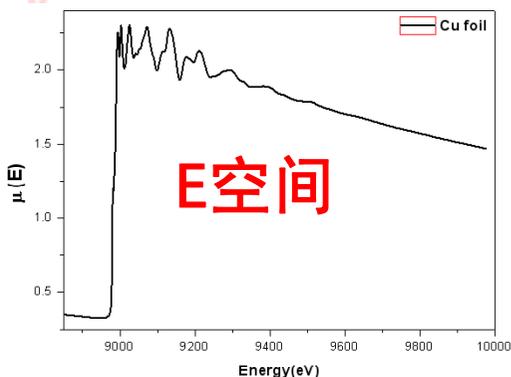
北京同步辐射装置
Beijing Synchrotron Radiation Facility

×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

XAFS数据处理的基本流程 - EXAFS



预处理

- ◆ 截断
- ◆ 合并
- ◆ 能量校准
- ◆ 去除glitch
- ◆

提取 $\chi(k)$ 函数

- ① 扣除本底及归一化
- ② 确定 E_0 及E-k转换
- ③ 去除Background
- ④ Fourier变换
- ⑤ 反Fourier变换

拟合

- ① 构建理论模型
- ② 参数设定
- ③ 拟合
- ④ 参数优化
- ⑤ 键长? 配位数?

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

ATHENA软件介绍

- ◆ Athena软件简介
- ◆ 下载、安装及界面介绍
- ◆ 新旧版本对比
- ◆ Athena主要功能



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

ATHENA软件介绍

Athena现在属于Demeter软件中的一个程序包

DEMETER下载链接:<http://bruceravel.github.io/demeter>

Demeter



X-ray Absorption Spectroscopy Using Feff and Ifeffit.

Windows Users:

↓ 0.9.20 (64 bit)

↓ 0.9.20 (32 bit)

👉 View On GitHub

Demeter © 2006-2014 Bruce Ravel

About Demeter

Demeter is a comprehensive system for processing and analyzing X-ray Absorption Spectroscopy data.

Demeter is:

- currently at version **0.9.20**
- available for **linux**, **Windows**, and **Macintosh**
- a set of **perl** modules and related files
- a programming tool -- it is the thing from which applications are built
- **free software**, freely available from a **git server**
- actively developed and maintained
- in use by its author and users for real data analysis problems
- a front end to **Feff6** and **Ifeffit** or **Larch**
- the code base for Athena and Artemis
- named for the **Greek goddess of the harvest**

To ask questions or report bugs :
» Use the **Ifeffit Mailing List** «

To cite Demeter in a publication, use



ATHENA软件介绍

Demeter软件安装

注意事项:

- (1) 安装软件时不能选择中文路径，也不能识别中文文件名！
- (2) 360安全卫士等一些电脑防护软件有可能导致程序不能正常使用
- (3) 可以免费使用
- (4) 请在文章中注明引用

B. Ravel and M. Newville, ATHENA, ARTEMIS, HEPHAESTUS: data analysis for X-ray absorption spectroscopy using IFEFFIT, Journal of Synchrotron Radiation **12**, 537–541 (2005) [doi:10.1107/S0909049505012719](https://doi.org/10.1107/S0909049505012719)



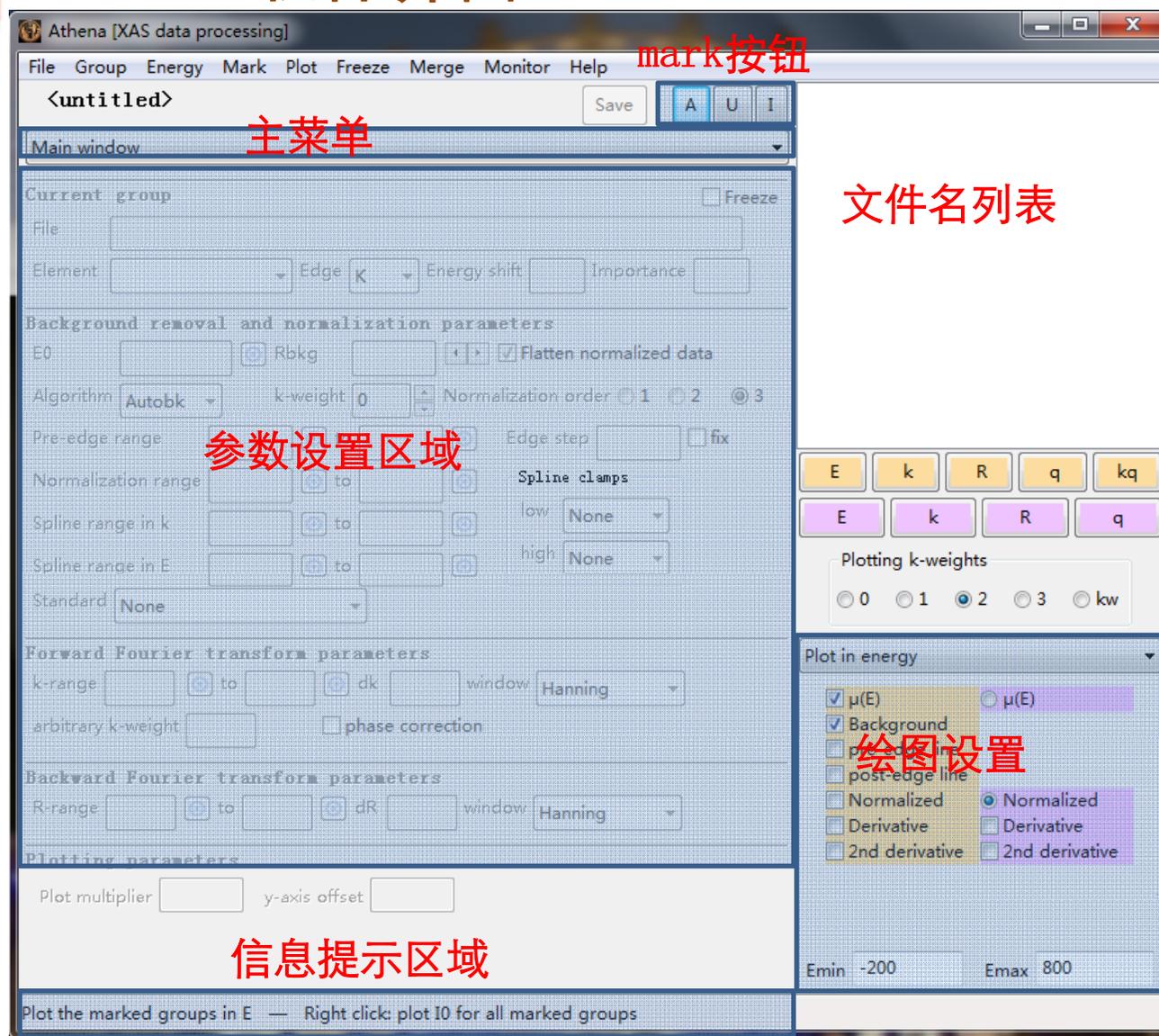
北京同步辐射装置
Beijing Synchrotron Radiation Facility

×射线吸收谱学实验
和数据分析讲习班

武汉·2014

ATHENA软件介绍

Athena软件界面



mark按钮

主菜单

文件名列表

参数设置区域

绘图按钮

k权重

绘图设置

信息提示区域

高能物理研究所



北京同步辐射装置
Beijing Synchrotron Radiation Facility

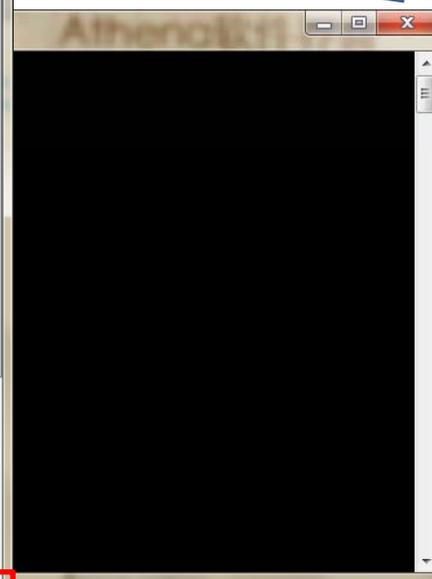
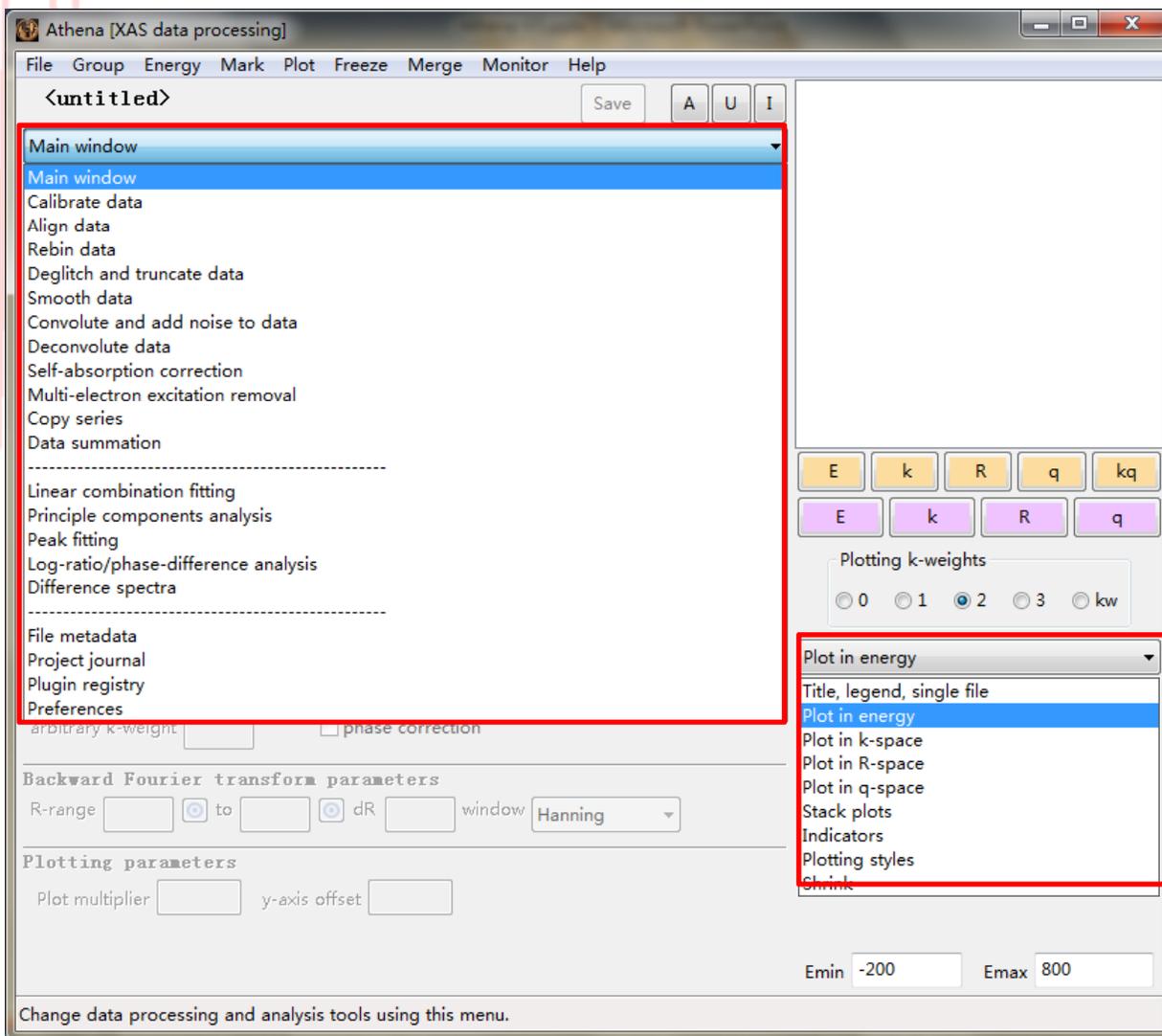
×射线吸收谱学实验
和数据分析讲习班

武汉·2014

ATHENA软件介绍

Athena软件界面

后台运行程序，
切勿关闭!





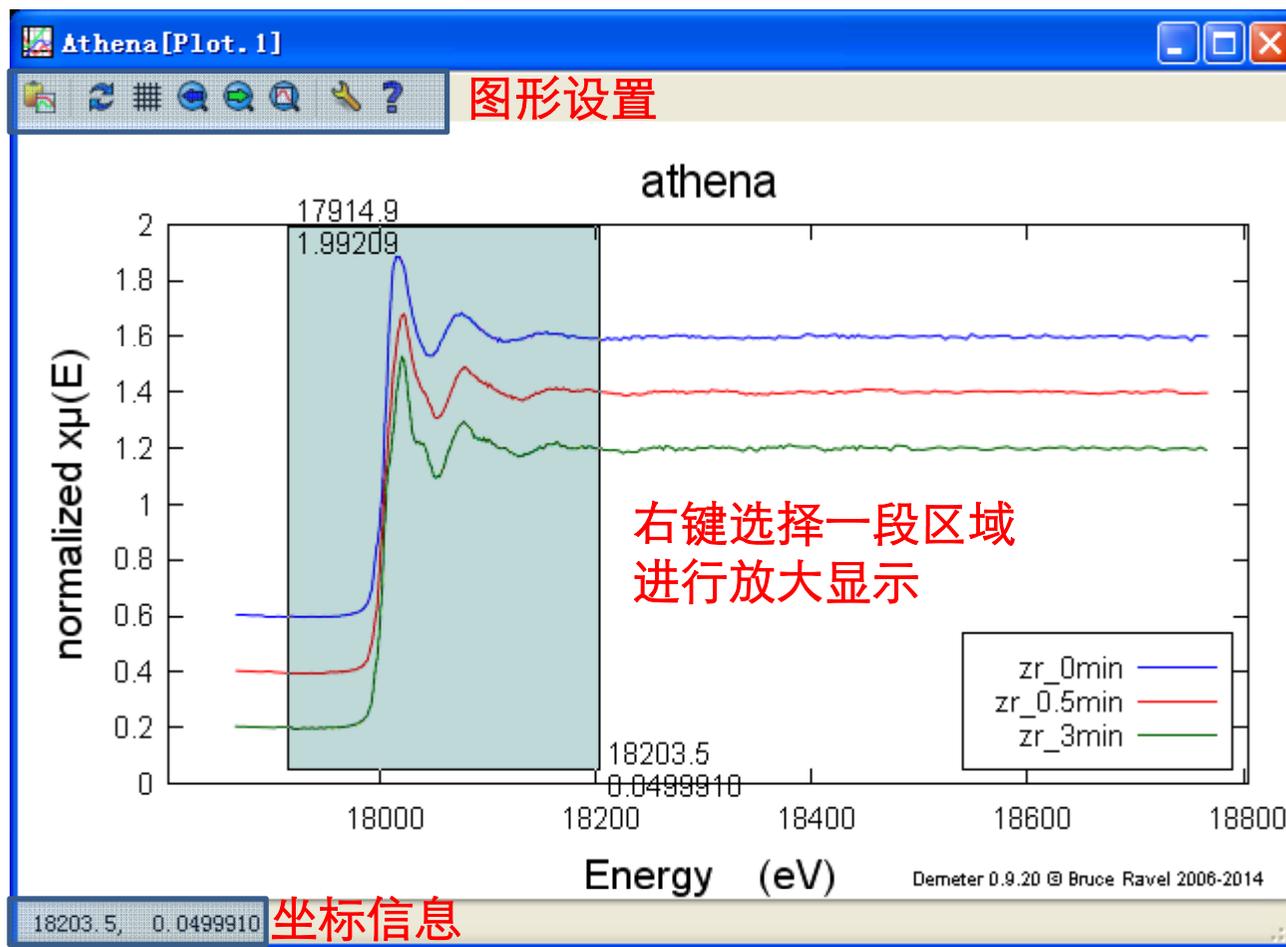
北京同步辐射装置
Beijing Synchrotron Radiation Facility

×射线吸收谱学实验
和数据分析讲习班

武汉·2014

ATHENA软件介绍

Athena软件界面





北京同步辐射装置
Beijing Synchrotron Radiation Facility

×射线吸收谱学实验
和数据分析讲习班

武汉·2014

ATHENA软件介绍

Athena软件版本比较

相比于IFEFFIT版本:

◆修正了一些bug

✓关闭图形窗口不再会导致程序崩溃

◆优化了界面

✓绘图窗口美化

◆改进了一些功能

✓PCA和LCA分析



ATHENA功能介绍

Athena主要功能

- ◆ 文件的打开、保存及显示
- ◆ 数据预处理
 - ✓ 截断数据
 - ✓ 去除glitch
 - ✓ 自吸收校正
 - ✓ 合并多次扫描的数据
- ◆ XAFS数据分析
 - ✓ 扣除边前背底和归一化
 - ✓ 确定 E_0 及E-k转换
 - ✓ 去除原子吸收本底 (AUTOBK)
 - ✓ Fourier变换和反Fourier变换
 - ✓ 提取 $\chi(k)$
- ◆ 批量处理
- ◆ PCA和LCA分析
- ◆ 分峰拟合
- ◆ 其他功能
 - ✓ 数据平滑
 - ✓ 卷积与反卷积
 - ✓ 去除多电子激发
 - ✓ 累积量展开及比值法
 - ✓ 差分谱方法
 - ✓ 绘图技巧
 - ✓





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

ATHENA功能介绍

Athena帮助文档 建议仔细阅读!

The screenshot displays the Athena [XAS data processing] application window. The main window is titled 'Difference spectra' and contains a control panel on the left with various settings like 'Standard: pb_Omin', 'Multiplier: 1', and 'Data: zr_3min'. A central plot window shows 'diff' spectra with 'Normalized Xμ(E)' on the y-axis and 'Energy (eV)' on the x-axis. The plot shows multiple curves for different scans (scan 1, 3, 5, 7, 9, 11, 13, 15, 17, 19, 21). A green arrow points from the plot area to a 'The Athena Users' Guide' window. At the bottom, a red circle highlights the 'Document section: difference spectra' button.

The best way to learn how to use ATHENA is to use ATHENA.



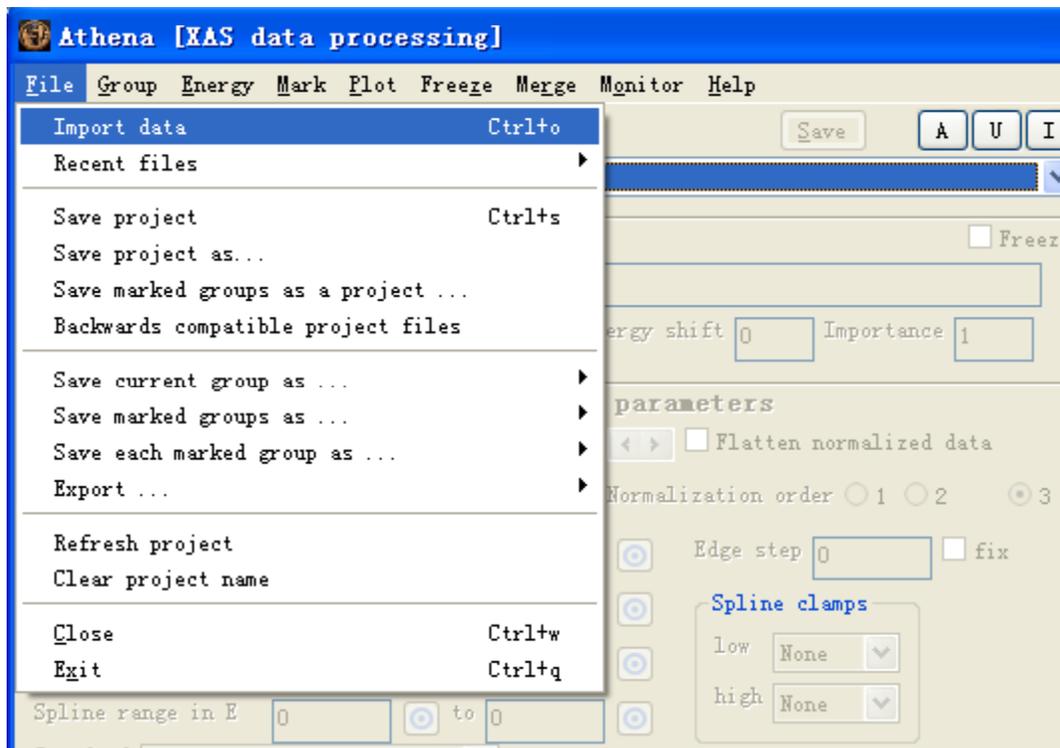
北京同步辐射装置
Beijing Synchrotron Radiation Facility

×射线吸收谱学实验
和数据分析讲习班

武汉·2014

ATHENA功能介绍

文件的打开和保存 “File” 菜单





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

ATHENA功能介绍

文件的打开

! 会导致程序意外崩溃

Athena: Column Selection

Select range Clear numerator Pause plotting

Energy	<input checked="" type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>
Numerator	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
Denominator	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>

根据数据格式选择相应的数据列

Natural log Invert Multiplicative constant 1

Data type $\mu(E)$ Energy units eV **Replot**

Energy ogtlz.1
 $\mu(E)$ (ogtlz.5) / (1)

Preprocess Rebin Reference

Import reference channel

Numerator	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
Denominator	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>

Replot reference Natural log Same element

OK Cancel About

```
#E:\XAFS data\201306-07\0618\chusq\Nifoil.dat
2013-6-18 17:35
#comment :
#0
485#
8174.785 473620 649514 4946 -0.3158198
8178.221 471628 647683 4472 -0.3172098
8181.819 469491 645562 4626 -0.3184714
8185.580 468311 645062 4584 -0.3202131
8189.409 466184 643198 4418 -0.3218714
8193.209 464740 642088 4304 -0.3232483
8197.045 463678 641534 4548 -0.3246721
8200.917 462406 640998 4714 -0.3265833
8204.760 460043 638637 4388 -0.3280163
8208.671 459484 638754 4593 -0.3294161
```

Athena[Plot. 1]

Nifoil.dat in energy

Energy (eV) Demeter 0.9.20 © Bruce Ravel 2006-2014

研究所



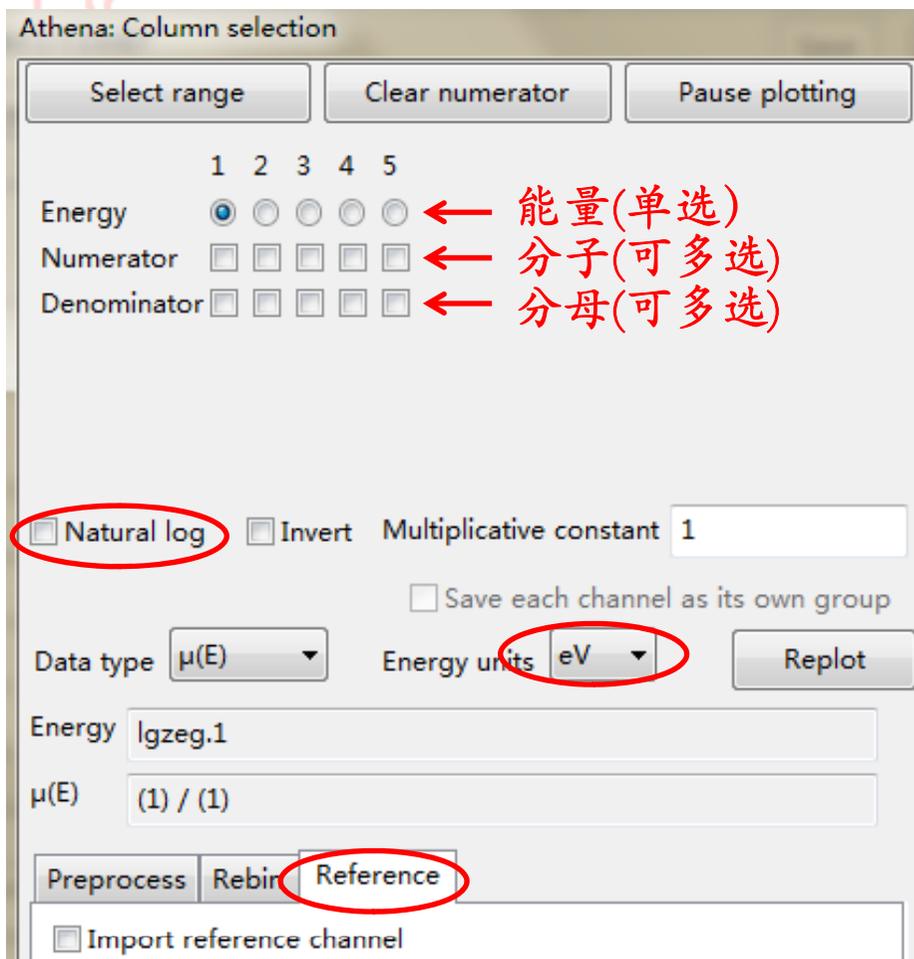
北京同步辐射装置
Beijing Synchrotron Radiation Facility

×射线吸收谱学实验
和数据分析讲习班

武汉·2014

ATHENA功能介绍

文件的打开



注意事项:

◆ 能量列及其单位

◆ 吸收系数列

- 透射模式: $\mu x = \ln(I_0/I_1)$
- 荧光模式: $\mu x = I_f/I_0$
- 全电子产额: $\mu x = I_e/I_0$
- 多元探测器:

$$\mu x = (I_{e1} + I_{e2} + \dots) / I_0$$

◆ 参考样品: 三电离室模式



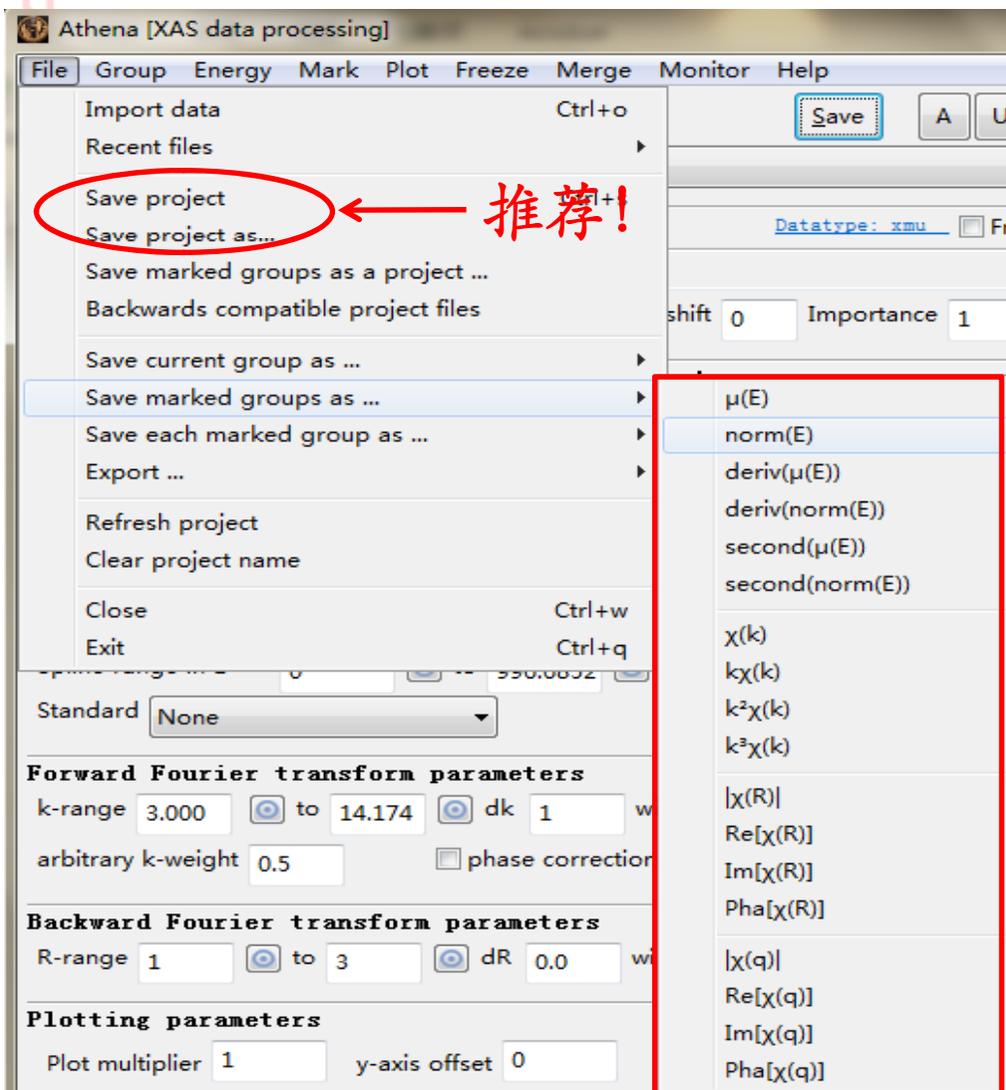
北京同步辐射装置
Beijing Synchrotron Radiation Facility

×射线吸收谱学实验
和数据分析讲习班

武汉·2014

ATHENA功能介绍

文件的保存



- $\mu(E)$
- Norm(E)
- $\chi(k)$ 、 $\chi(R)$ 、 $\chi(q)$
-

建议保存工程文件*.prj



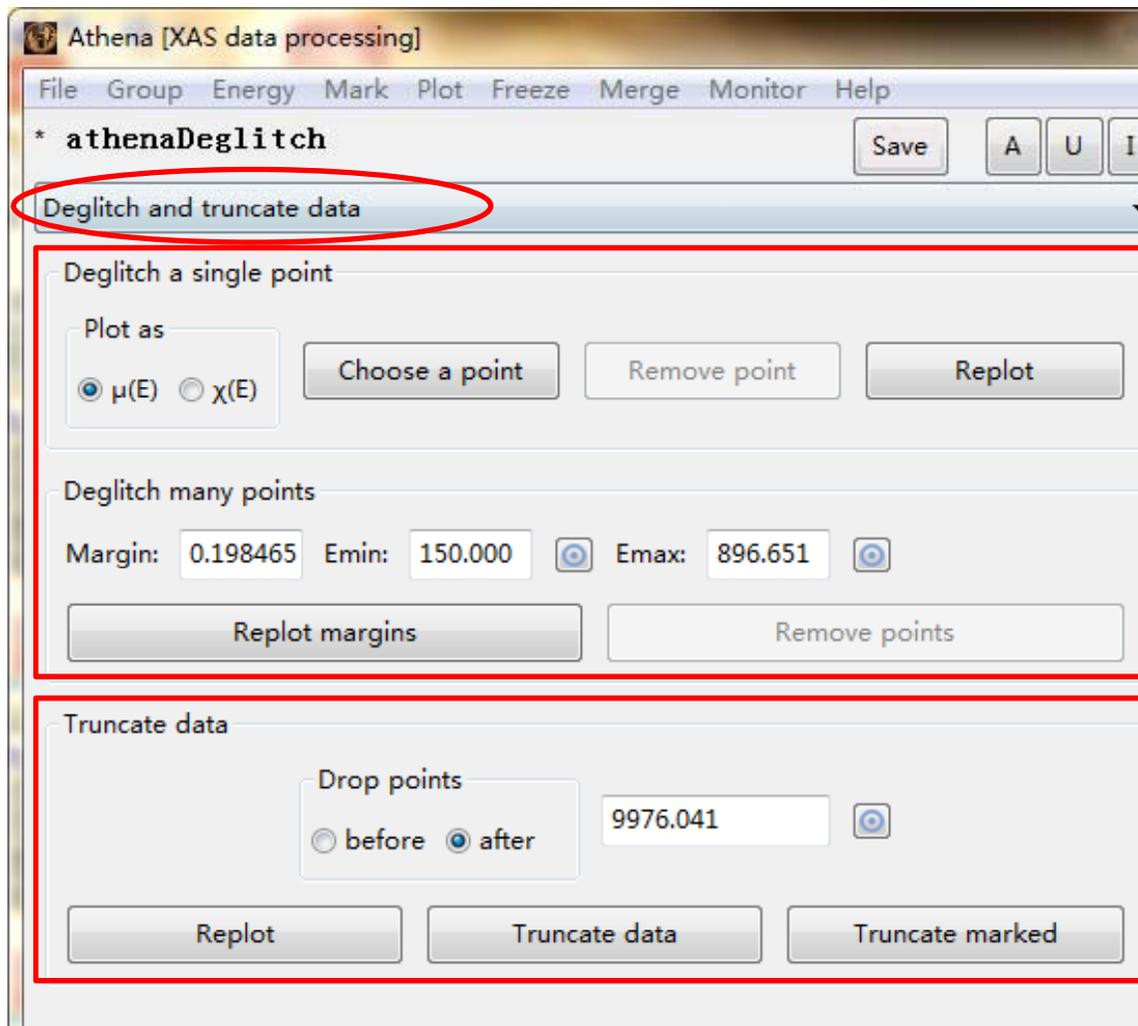
北京同步辐射装置
Beijing Synchrotron Radiation Facility

×射线吸收谱学实验
和数据分析讲习班

武汉·2014

ATHENA功能介绍

数据预处理 - 去除glitch和截断





北京同步辐射装置
Beijing Synchrotron Radiation Facility

×射线吸收谱学实验
和数据分析讲习班

武汉·2014

ATHENA功能介绍

数据预处理 - Deglitch

Athena [XAS data processing]

File Group Energy Mark Plot Freeze Merge Monitor Help

* athenaDeglitch Save A U I

Deglitch and truncate data

Deglitch a single point

Plot as

$\mu(E)$ $\chi(E)$

Choose a point Remove point Replot

Athena[Plot.1]

Cufoil in E space

$k^2 \cdot \chi(k)$ (\AA^{-2})

Energy (eV)

Demeter 0.9.20 © Bruce Ravel 2006-

9303.90, 5.88781

- ①选择plot方式
- ②点击Choose a point
- ③在图形窗口上选择需要去除的点(可以放大显示)
- ④点击Remove point



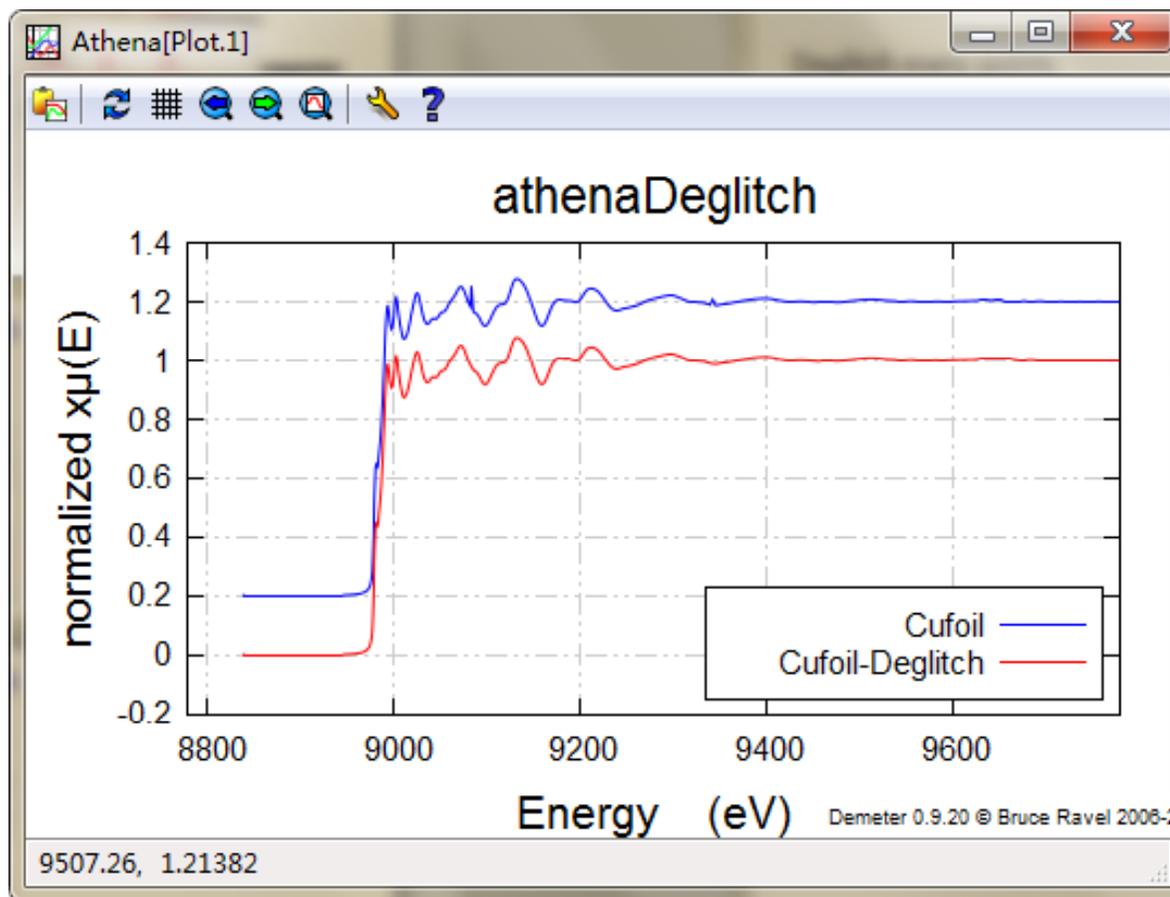
北京同步辐射装置
Beijing Synchrotron Radiation Facility

×射线吸收谱学实验
和数据分析讲习班

武汉·2014

ATHENA功能介绍

数据预处理 - Deglitch





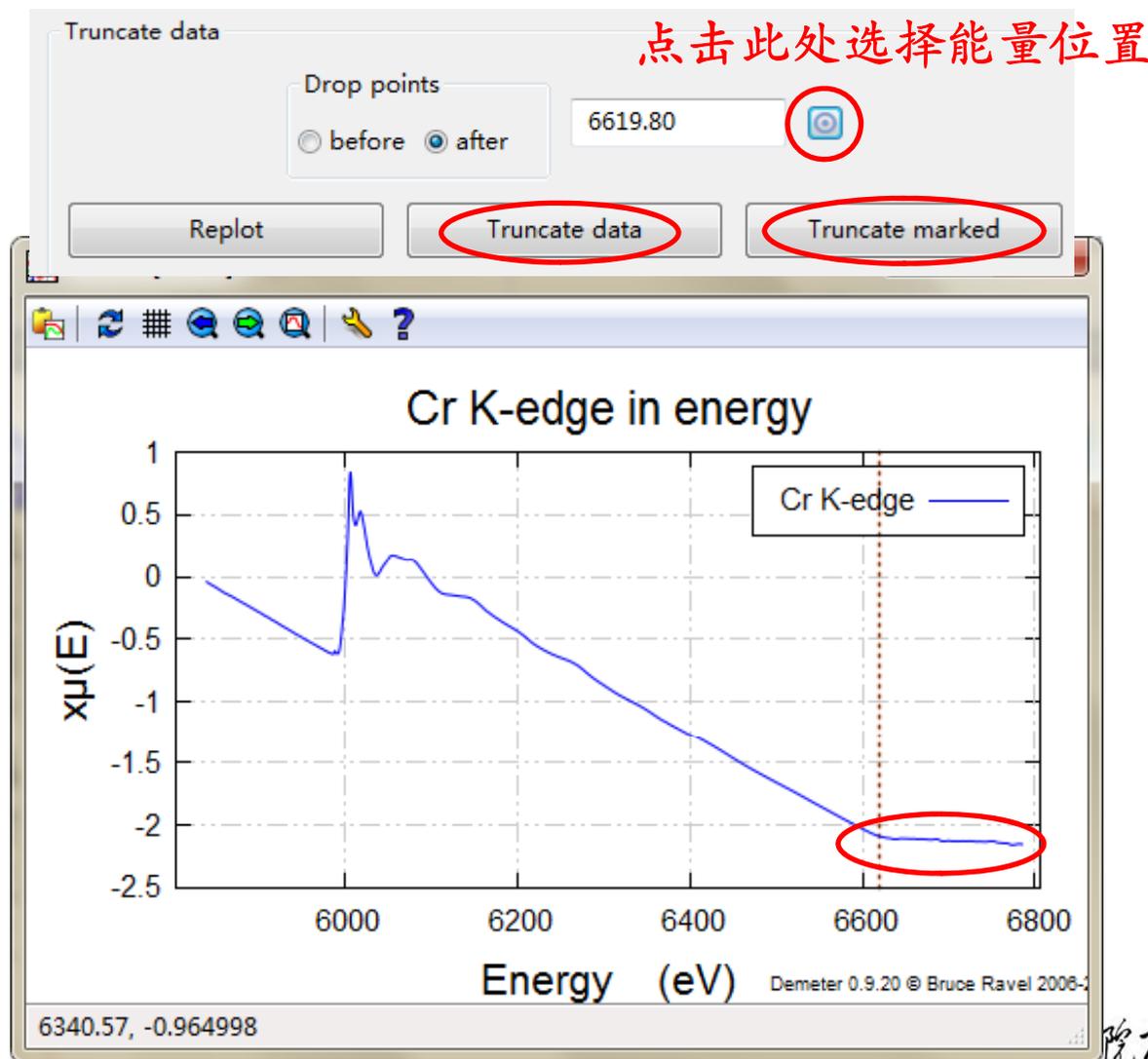
北京同步辐射装置
Beijing Synchrotron Radiation Facility

×射线吸收谱学实验
和数据分析讲习班

武汉·2014

ATHENA功能介绍

数据预处理 - 截断数据



院高能物理研究所



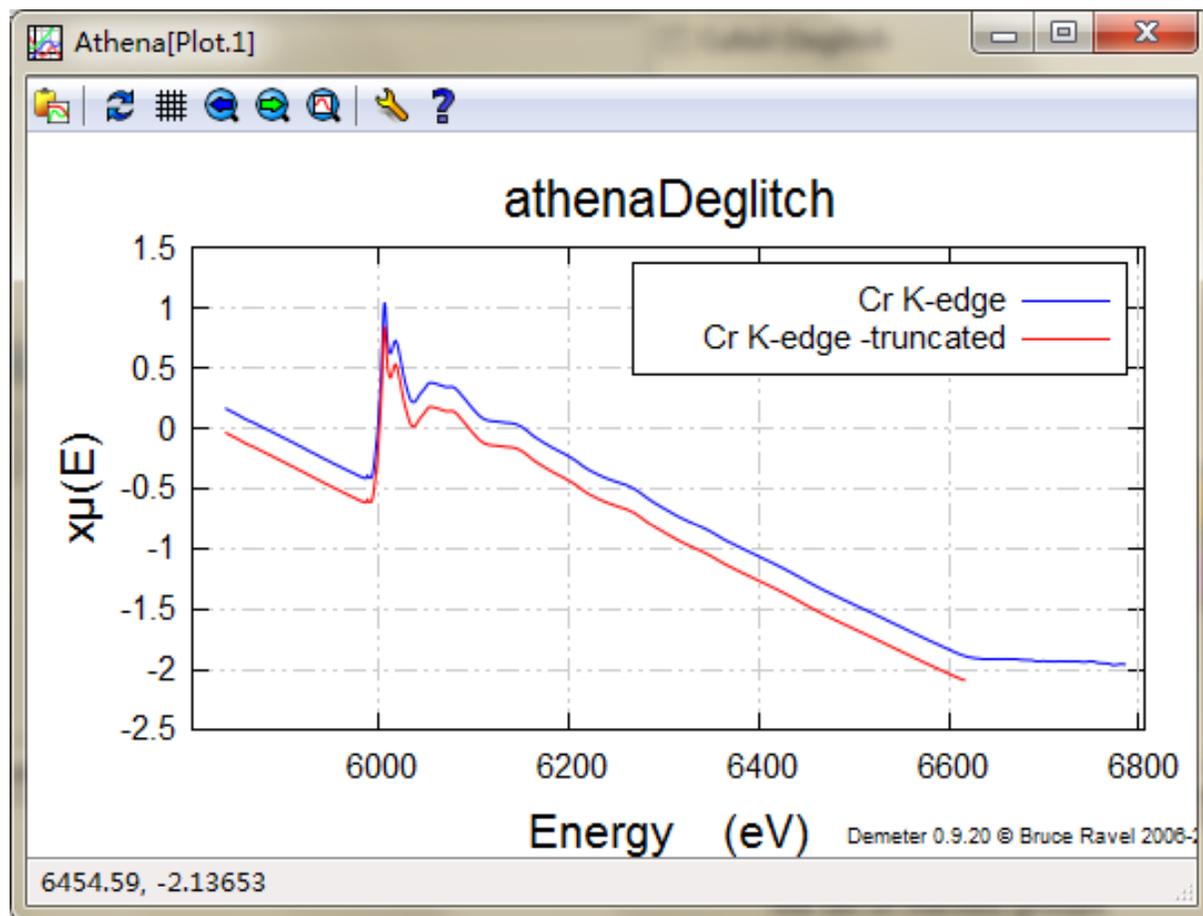
北京同步辐射装置
Beijing Synchrotron Radiation Facility

×射线吸收谱学实验
和数据分析讲习班

武汉·2014

ATHENA功能介绍

数据预处理 - 截断数据





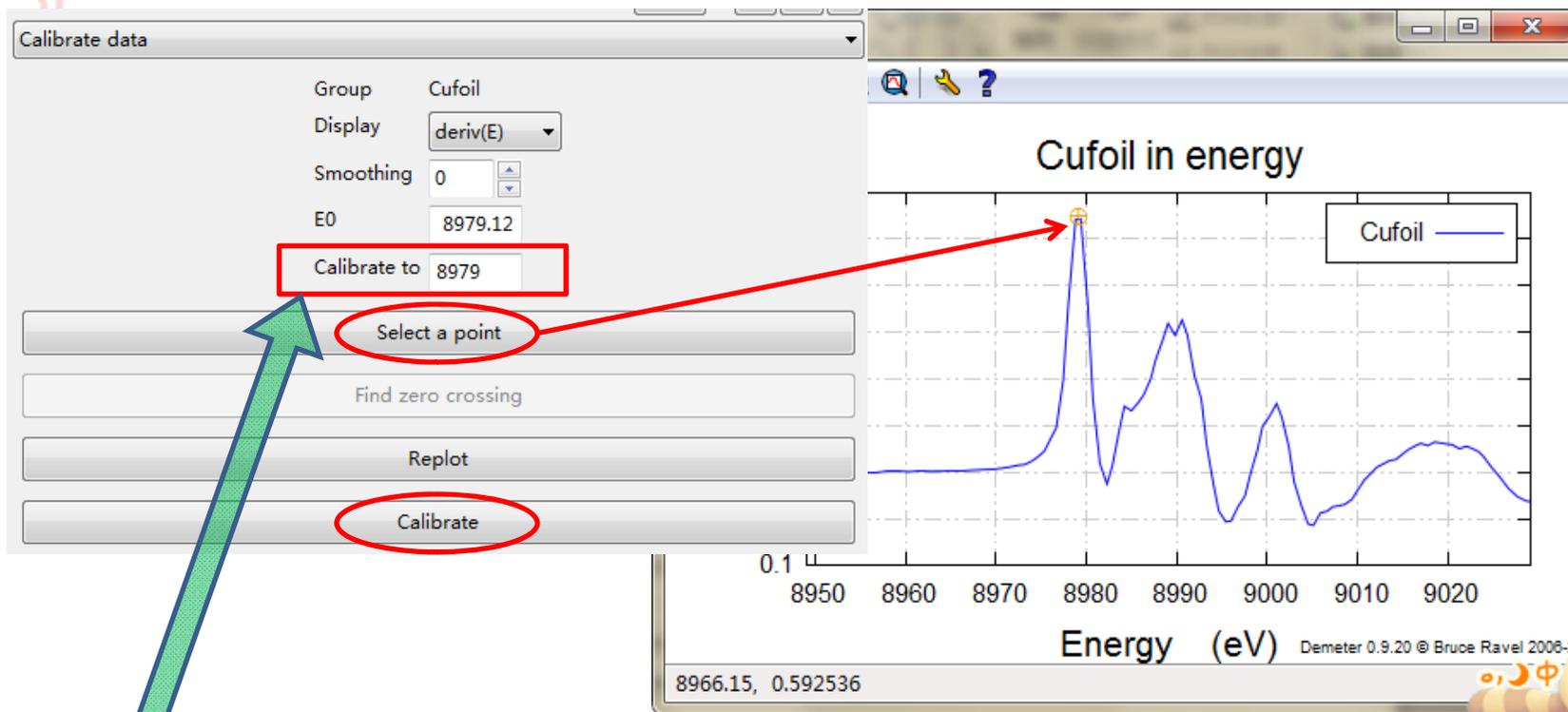
北京同步辐射装置
Beijing Synchrotron Radiation Facility

×射线吸收谱学实验
和数据分析讲习班

武汉·2014

ATHENA功能介绍

数据预处理 - 能量校准



只有当吸收边的位置确切知道的时候，或者某一特征峰的能量位置能够确定的时候，才可以进行能量校准！



ATHENA功能介绍

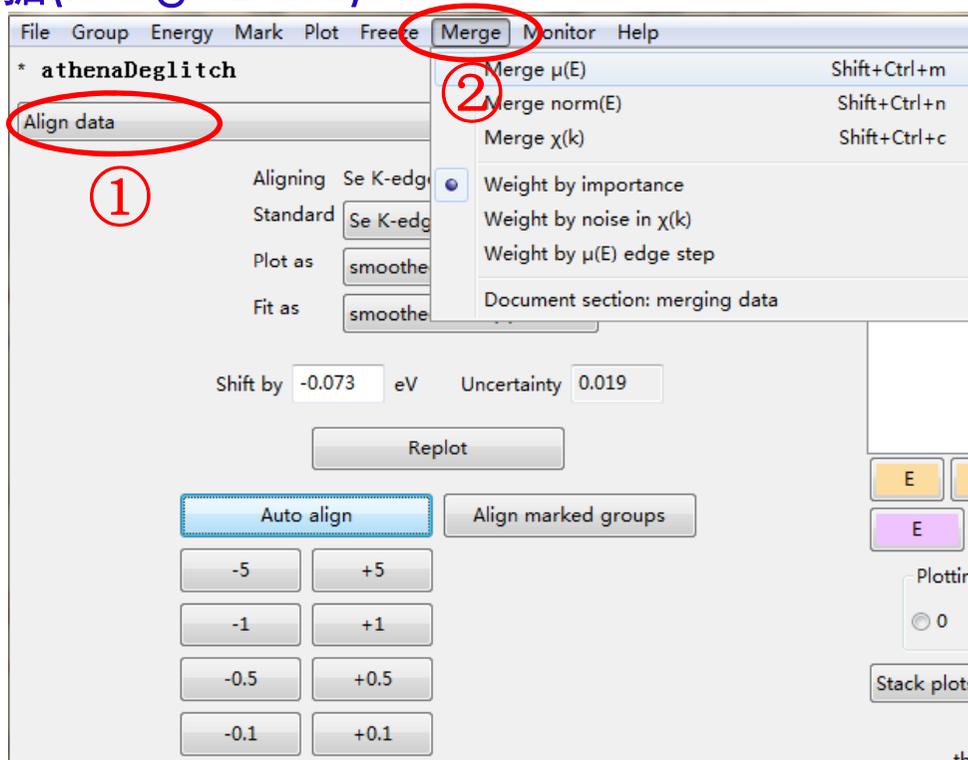
数据预处理 - 合并数据

分两步进行:

(1)调整能量坐标(Align Data)

选择其中一个数据作为标准, 将其余数据的能量坐标调整与之相一致

(2)合并数据(Merge Data)





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

ATHENA功能介绍

XAFS数据处理

1. 扣除边前本底及归一化
2. 确定E0及E-k转换
3. 扣除原子吸收本底background
4. Fourier变换
5. 反Fourier变换



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

ATHENA功能介绍

XAFS数据处理 - 1. 扣除边前本底及归一化

Parameter settings (参数设置):

- Pre-edge range: -150 to -30.000
- Normalization range: 80 to 980
- Spline range in k: 0 to 16.174
- Spline range in E: 0 to 996.6852

Plotting k-weights (能量空间绘图设置):

- Plot in energy: $\mu(E)$, Background, pre-edge line, post-edge line, Normalized, Normalized, Derivative, 2nd derivative

Energy display range (能量显示范围):

- Emin: -180, Emax: 1000

参数设置

能量空间绘图设置

能量显示范围

物理研究所



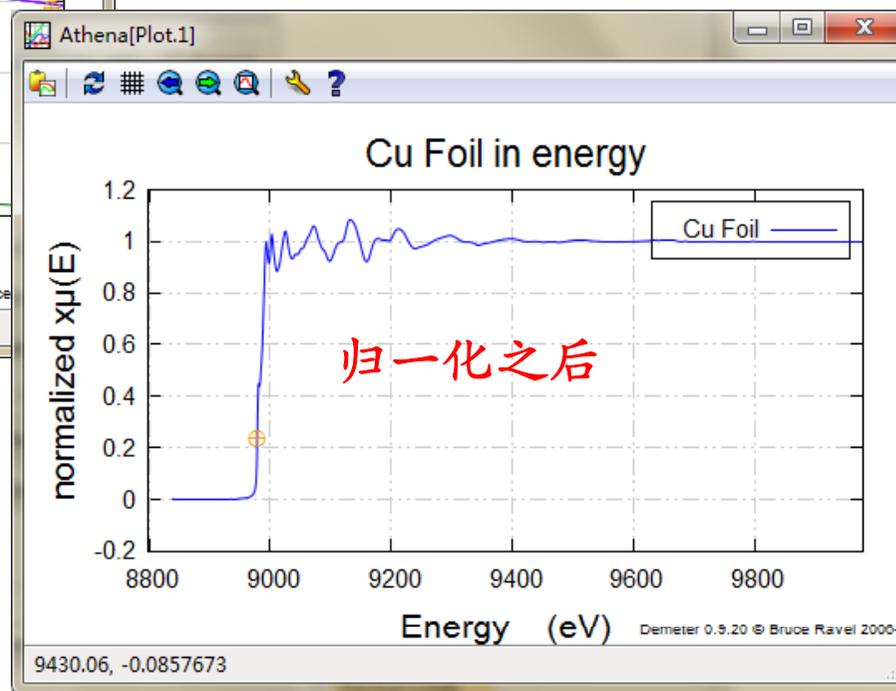
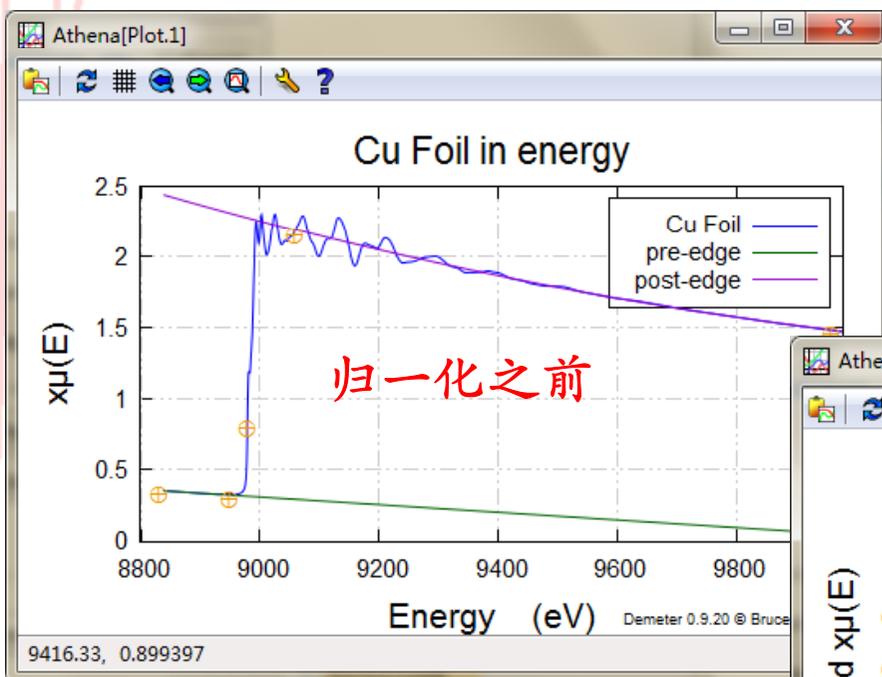
北京同步辐射装置
Beijing Synchrotron Radiation Facility

X射线吸收谱学实验
和数据分析讲习班

武汉·2014

ATHENA功能介绍

XAFS数据处理 - 1. 扣除边前本底及归一化





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

ATHENA功能介绍

XAFS数据处理 - 2.确定 E_0 及E-k转换

Athena [XAS data processing]

File Group Energy Mark Plot Freeze Merge Monitor Help

* Cufoil [Save] [A] [U] [I]

Main window

Current group: Cu Foil Datatype: xmu [Freeze]

File D:\2014Seminar\Cufoil.prj, 1

Element: 29: Copper Edge: K Energy shift: 0 Importance: 1

Background removal and normalization parameters

E0: 8979.080 Rbkg: 1 [Flatten normalized data]

Athena[Plot.1]

Cu Foil in energy

通常选择在吸收边跳起范围内的首个一次导数极大值位置

deriv xμ(E)

Energy (eV) Demeter 0.9.20 © Bruce Ravel 2008-

8987.82, 0.204341

Plotting k-weights: 0 1 2 3 kw

Plot in energy

μ(E) μ(E)

Background pre-edge line post-edge line Normalized

Derivative Derivative

2nd derivative 2nd derivative

Emin: -180 Emax: 1000

理研究所



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

ATHENA功能介绍

XAFS数据处理 - 3.扣除原子吸收本底Background

R_{bkg}设置

样条函数范围

k空间绘图设置

k显示范围

Athena [XAS data processing]

File Group Energy Mark Plot Freeze Merge Monitor Help

* Cufoil Save A U I

Main window

Current group: Cu Foil Datatype: xmu Freeze

File D:\2014Seminar\Cufoil.prj, 1

Element 29: Copper Edge K Energy shift 0 Importance 1

Background removal and normalization parameters

E0 8979.080 Rbkg 1 Flatten normalized data

Algorithm Autobk k-weight 2 Normalization order 1 2 3

Pre-edge range -150 to -30.000 Edge step 1.961108 fix

Normalization range 80 to 980 Spline clamps low None high Strong

Spline range in k 0 to 16.174

Spline range in E 0 to 996.6852

Standard None

Forward Fourier transform parameters

k-range 3.000 to 14.174 dk 1 window Hanning

arbitrary k-weight 0.5 phase correction

Backward Fourier transform parameters

R-range 1 to 3 dR 0.0 window Hanning

Plotting parameters

Plot multiplier 1 y-axis offset 0

Plot in k-space

$\chi(E)$ $\chi(E)$

Background

Window

kmin 0 kmax 16

Plot the marked groups in k

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

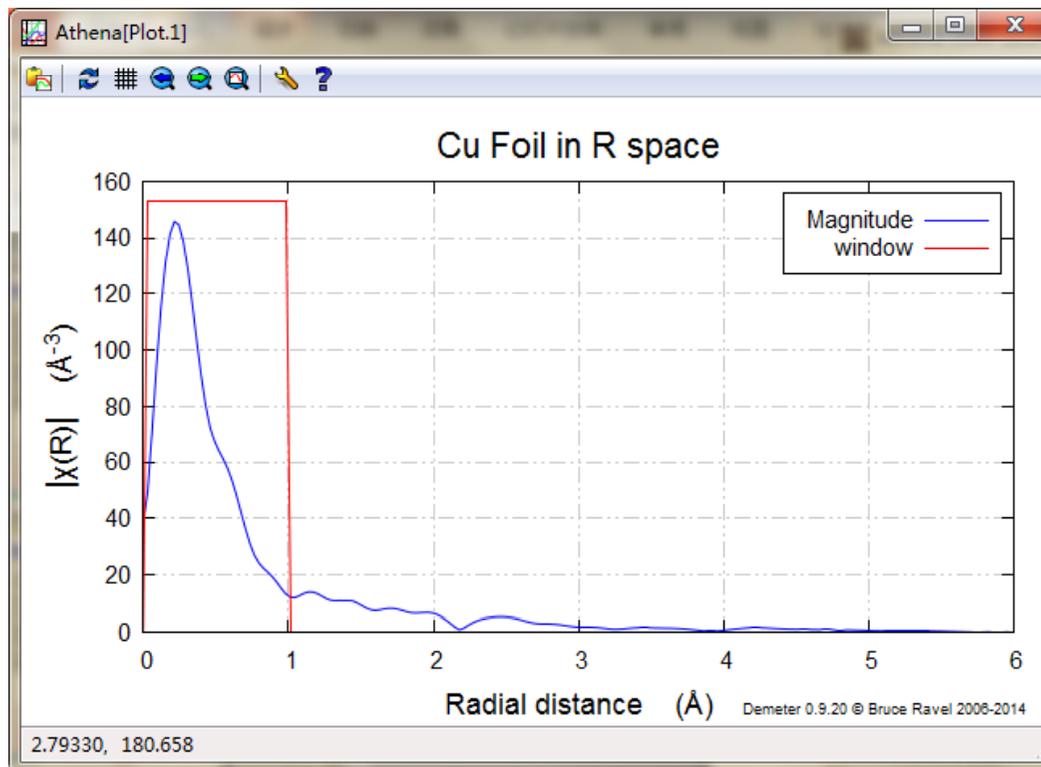
武汉·2014

ATHENA功能介绍

XAFS数据处理 - 3.扣除原子吸收本底Background

R_{bkg} 设置 Rbkg 0.001

物理上来看，第一配位层以内没有任何原子，因此在第一配位峰之前应该是平滑的。原子吸收本底background来源于孤立原子（周围没有配位原子）产生的缓变信号。

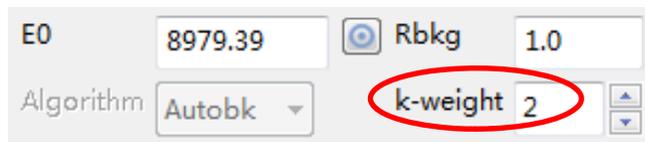




ATHENA功能介绍

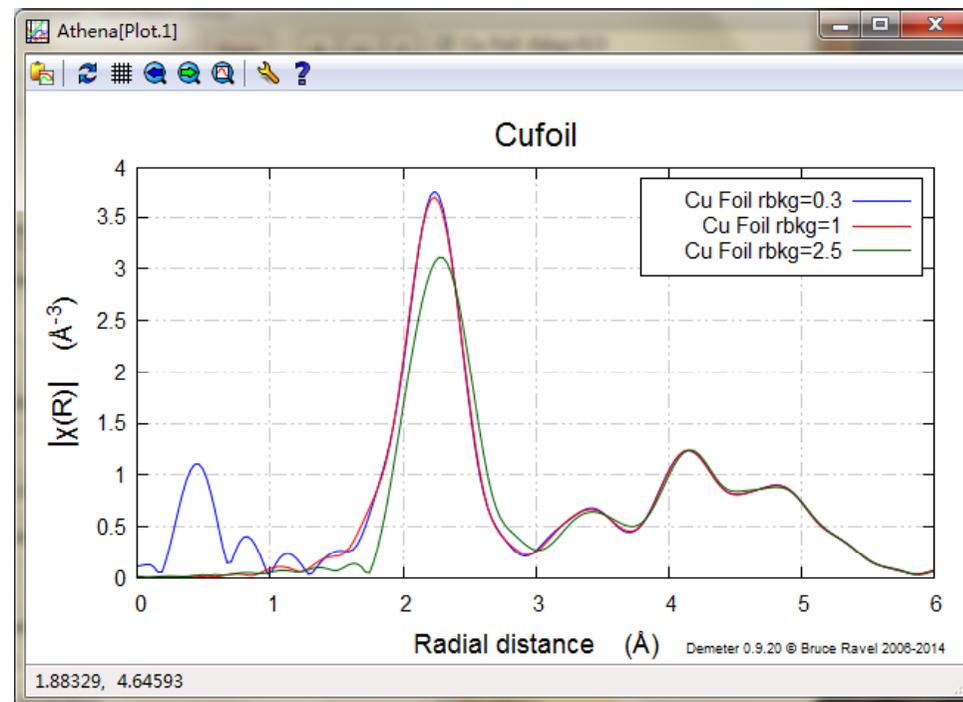
XAFS数据处理 - 3.扣除原子吸收本底Background

R_{bkg} 设置



- ◆ 不能太小，保证在 $R \leq R_{bkg}$ 内没有配位峰
- ◆ 不能太大，否则会影响到第一配位峰
- ◆ 主要会影响到第一配位峰

通常设置为第一配位距离的一半为佳！





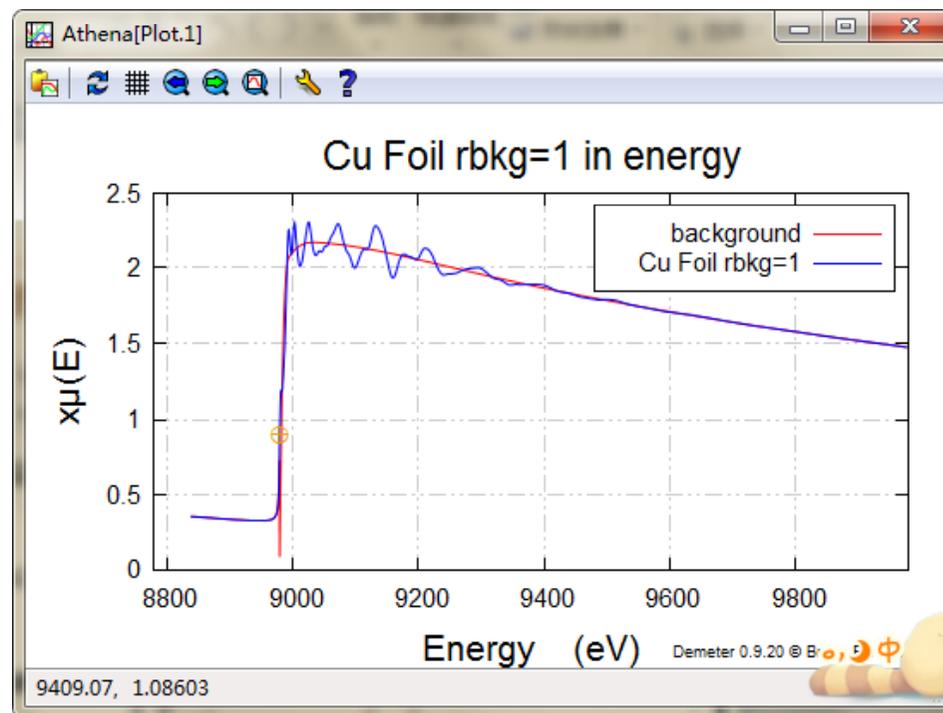
ATHENA功能介绍

XAFS数据处理 - 3.扣除原子吸收本底Background

样条函数范围

Spline range in k 0 to 16.174
Spline range in E 0 to 996.6852

- ◆ **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部分数据的信噪比太差，需要适当缩减。





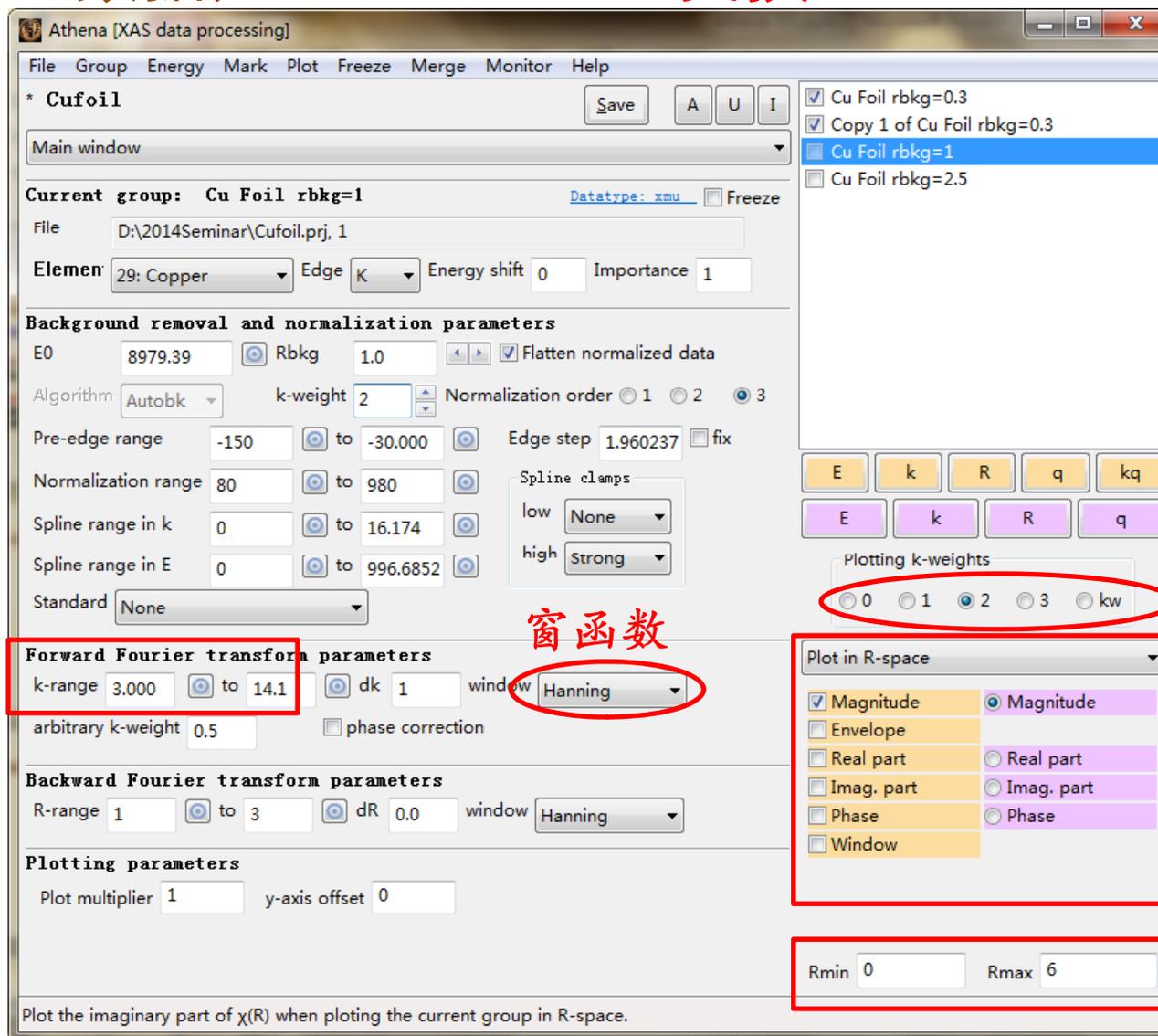
北京同步辐射装置
Beijing Synchrotron Radiation Facility

X射线吸收谱学实验
和数据分析讲习班

武汉·2014

ATHENA功能介绍

XAFS数据处理 - 4. Fourier变换



k的范围

窗函数

k的权重

物理研究所



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

武汉·2014

ATHENA功能介绍

XAFS数据处理 - 4. Fourier变换

k的权重



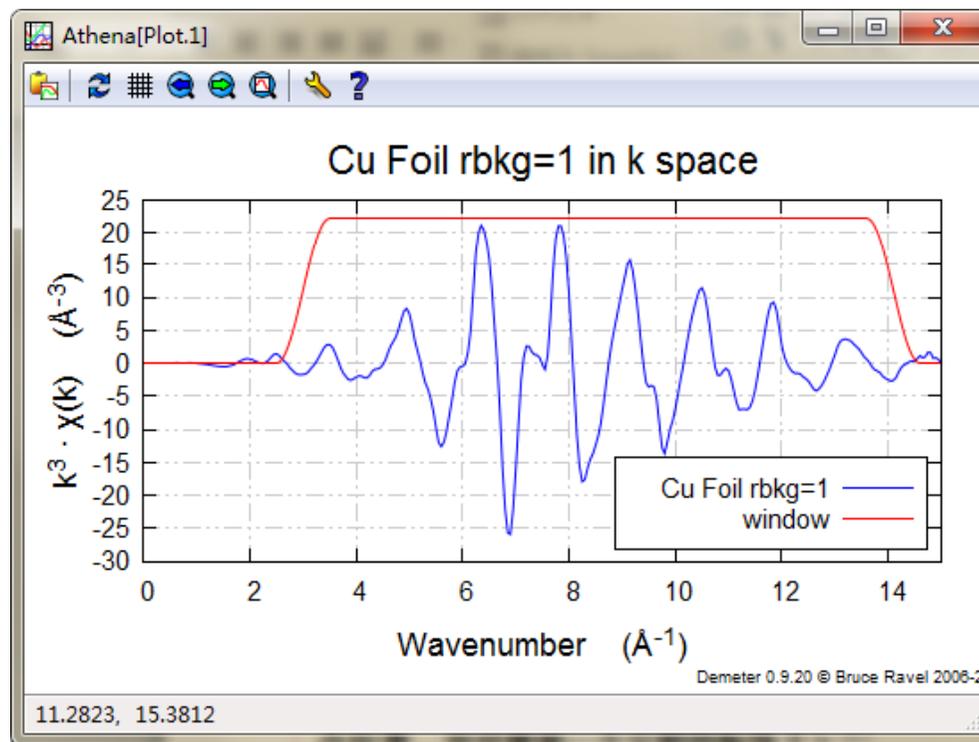
根据配位原子序数 Z :

$$Z < 36, n=3;$$

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

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

k权重可以提高高k部分的信号，但同时也会放大噪声，所以需要权衡考虑。





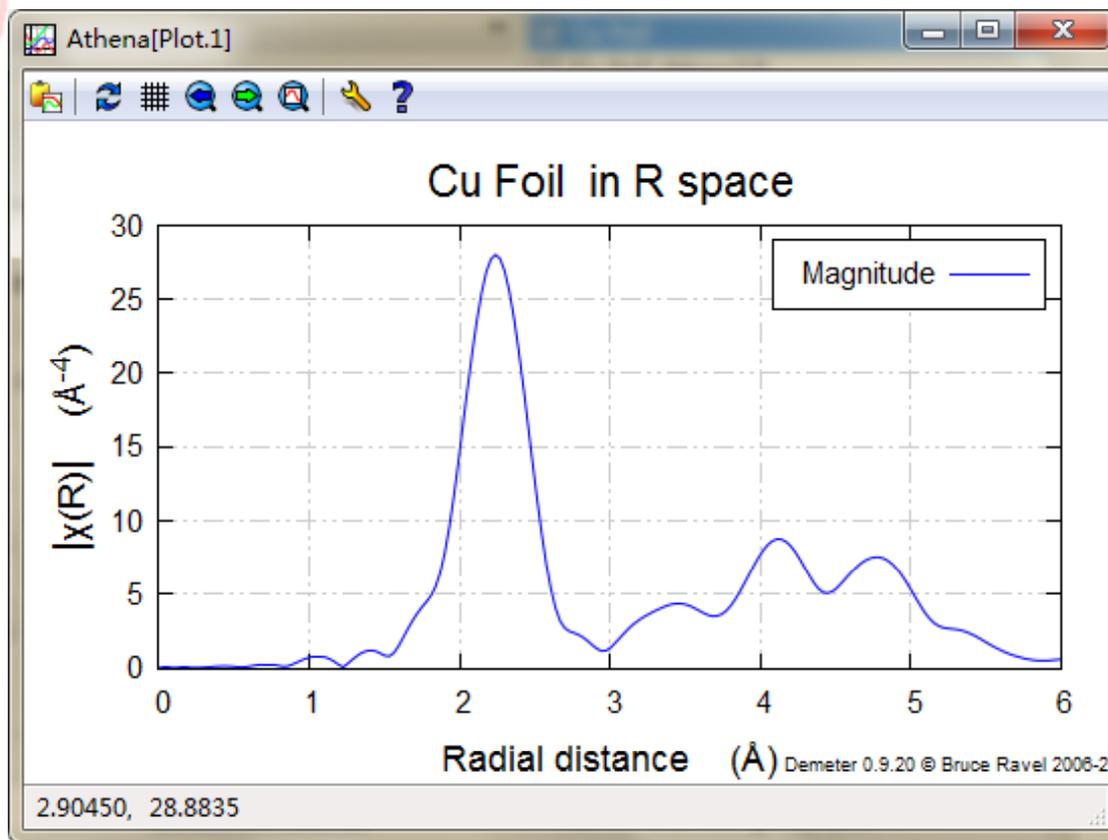
北京同步辐射装置
Beijing Synchrotron Radiation Facility

X射线吸收谱学实验
和数据分析讲习班

武汉·2014

ATHENA功能介绍

XAFS数据处理 - 4. Fourier变换



- ◆ 峰的位置 - R
- ◆ 峰的高度 - N
- ◆ 峰的面积 - σ^2

由于没有考虑相位修正，这里的R值比实际的键长小0.2-0.5 Å。

从图中可以观察相对变化趋势，但不能得到实际的参数值。



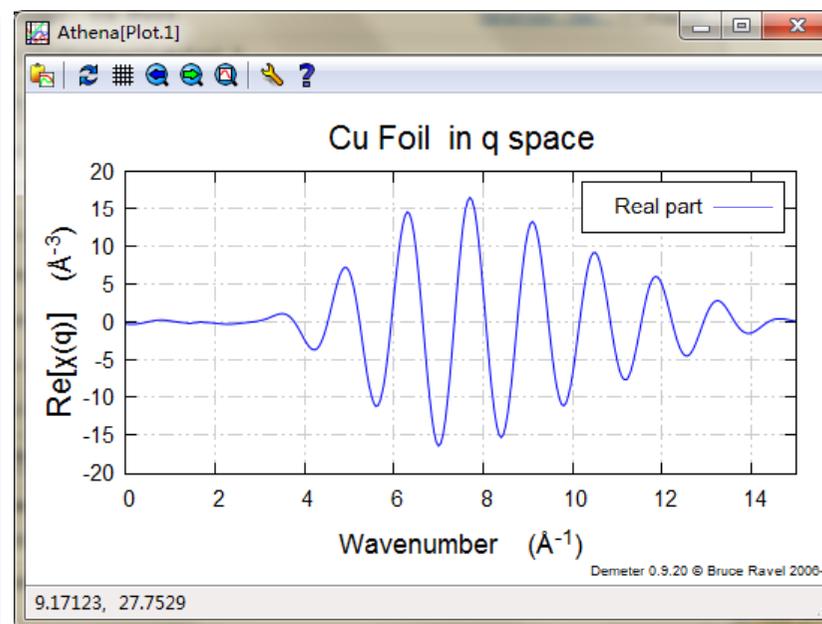
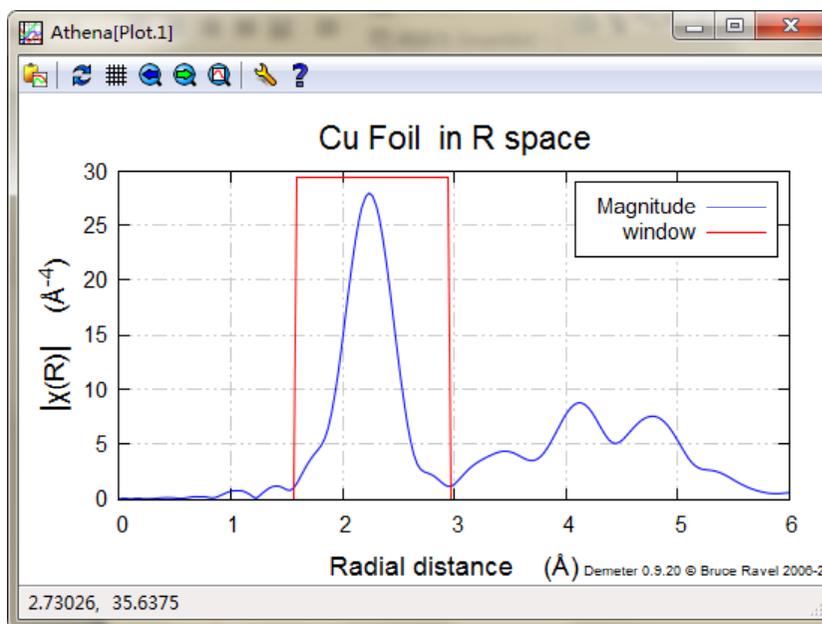
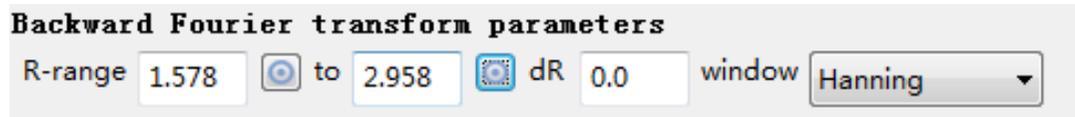
北京同步辐射装置
Beijing Synchrotron Radiation Facility

X射线吸收谱学实验
和数据分折讲习班

武汉·2014

ATHENA功能介绍

XAFS数据处理 - 5.反Fourier变换



可以单独提取某一特定配位层所包含的信息



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功能介绍

批量处理

标记菜单

标记按钮

右键菜单

绘图按钮

The screenshot shows the Athena [XAS data processing] window. The 'Mark' menu is open, listing actions such as 'Toggle current mark' (Shift+Ctrl+t), 'Mark all' (Shift+Ctrl+a), 'Clear all marks' (Shift+Ctrl+u), 'Invert marks' (Shift+Ctrl+i), 'Mark by regexp' (Shift+Ctrl+r), 'Unmark by regexp' (Shift+Ctrl+x), and 'Document section: marking groups'. The 'A U I' buttons are highlighted in red. The right-click context menu is also visible, showing options like 'Rename current group' (Shift+Ctrl+l), 'Copy current group' (Shift+Ctrl+ty), 'Change data type', 'Set all groups' values to the current', 'Set marked groups' values to the current', 'About current group', 'Show yaml for current group', 'Show the text of the current group's data file', 'Show measurement uncertainties...', 'Remove current group', 'Remove marked groups', and 'Close' (Ctrl+w). The 'E k R q kq' buttons are highlighted in red.



ATHENA功能介绍

批量处理 批量设置参数

多组数据进行对比时，一些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。可以选择其中的一组数据作为代表，优先处理，然后其他数据参数设置跟它一致。

The screenshot shows the Athena [XAS data processing] window. The 'Group' menu is open, with options like 'Rename current group', 'Copy current group', and 'Set all groups' values to the current'. The 'Forward Fourier transform parameters' dialog is also open, showing settings for k-range and kmax.

Group Menu:

- Rename current group (Shift+Ctrl+l)
- Copy current group (Shift+Ctrl+y)
- Change data type
- Set all groups' values to the current
- Set marked groups' values to the current
- About current group
- Show yaml for current group
- Show the text of the current group's data file
- Show measurement uncertainties...
- Remove current group
- Remove marked groups
- Close (Ctrl+w)

Forward Fourier transform parameters Dialog:

- Set all groups to this value of k-range
- Set marked groups to this value of k-range
- Set k-range to its default value
- Set kmax to Ifeffit's suggestion