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

Artemis:阿尔忒弥斯,狩猎女神，阿波罗的妹妹；

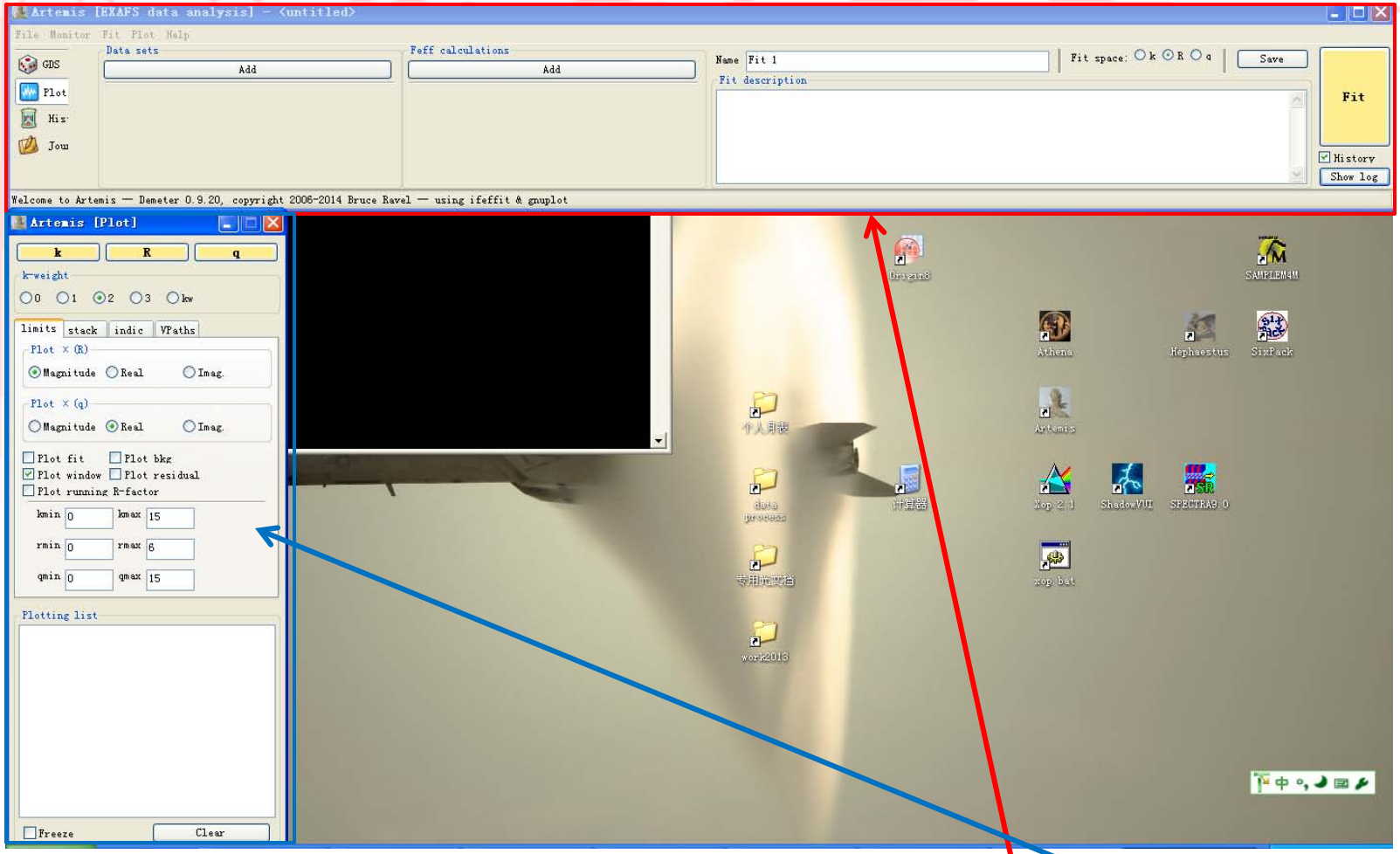
由Bruce.Ravel开发，利用设定的晶体（团簇）模型通过软件的计算，得到理论的散射振幅、相移函数、平均自由程；加上一定的未知结构参数，代入EXAFS理论表达式，对EXAFS振荡函数进行Levenberg-Marquardt非线性最小二乘法拟合，得到所求拟合参数的值。

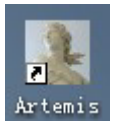
本身不进行数据处理，通常应用于拟合经过athena处理后的EXAFS振荡函数，得到这些数据的配位数，配位键长，无序度因子等结构参数；

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

北京同步辐射装置
Beijing Synchrotron Radiation Facility





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！

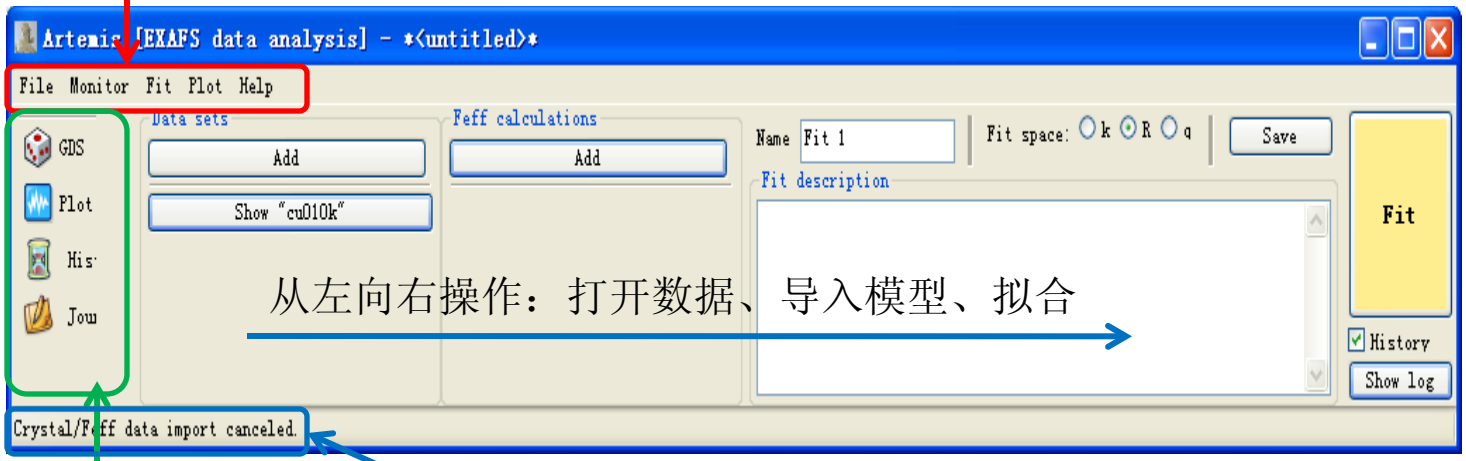
X射线吸收谱学实验和数据分析讲习班

武汉·2014

中国科学院高能物理研究所

ARTEMIS软件简介

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

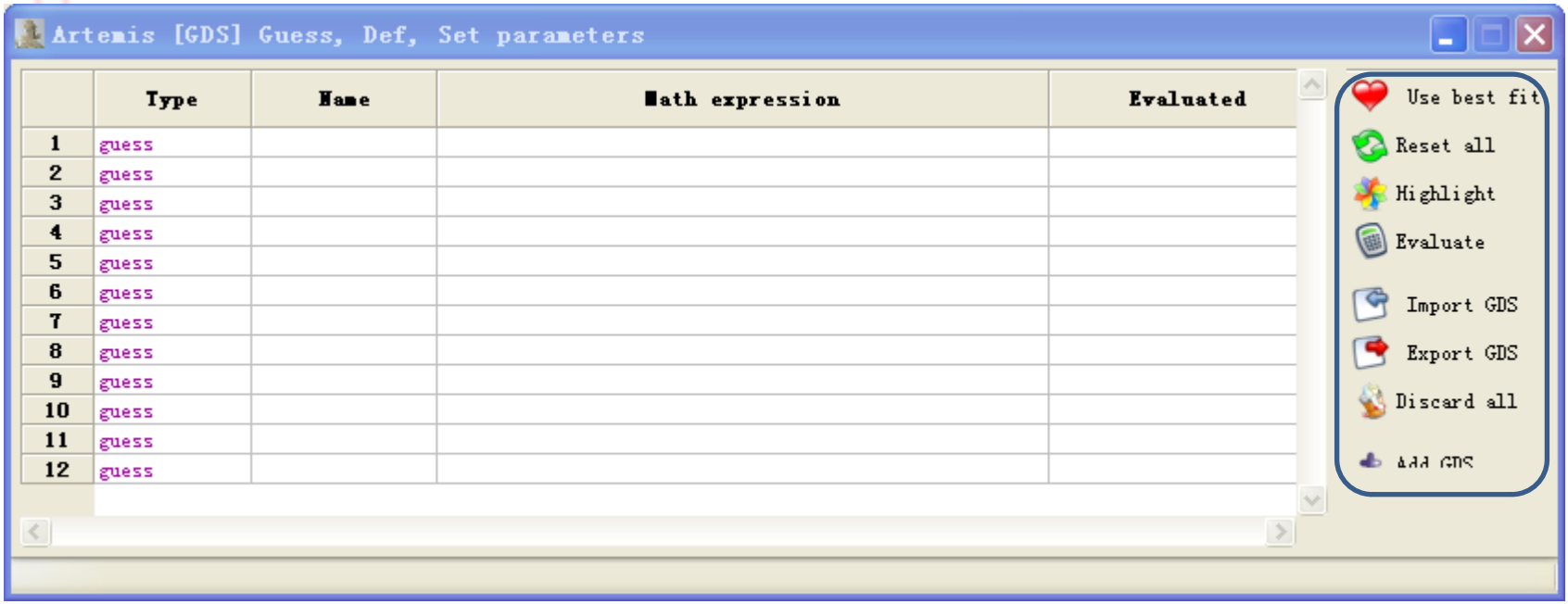


从左向右操作：打开数据、导入模型、拟合

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

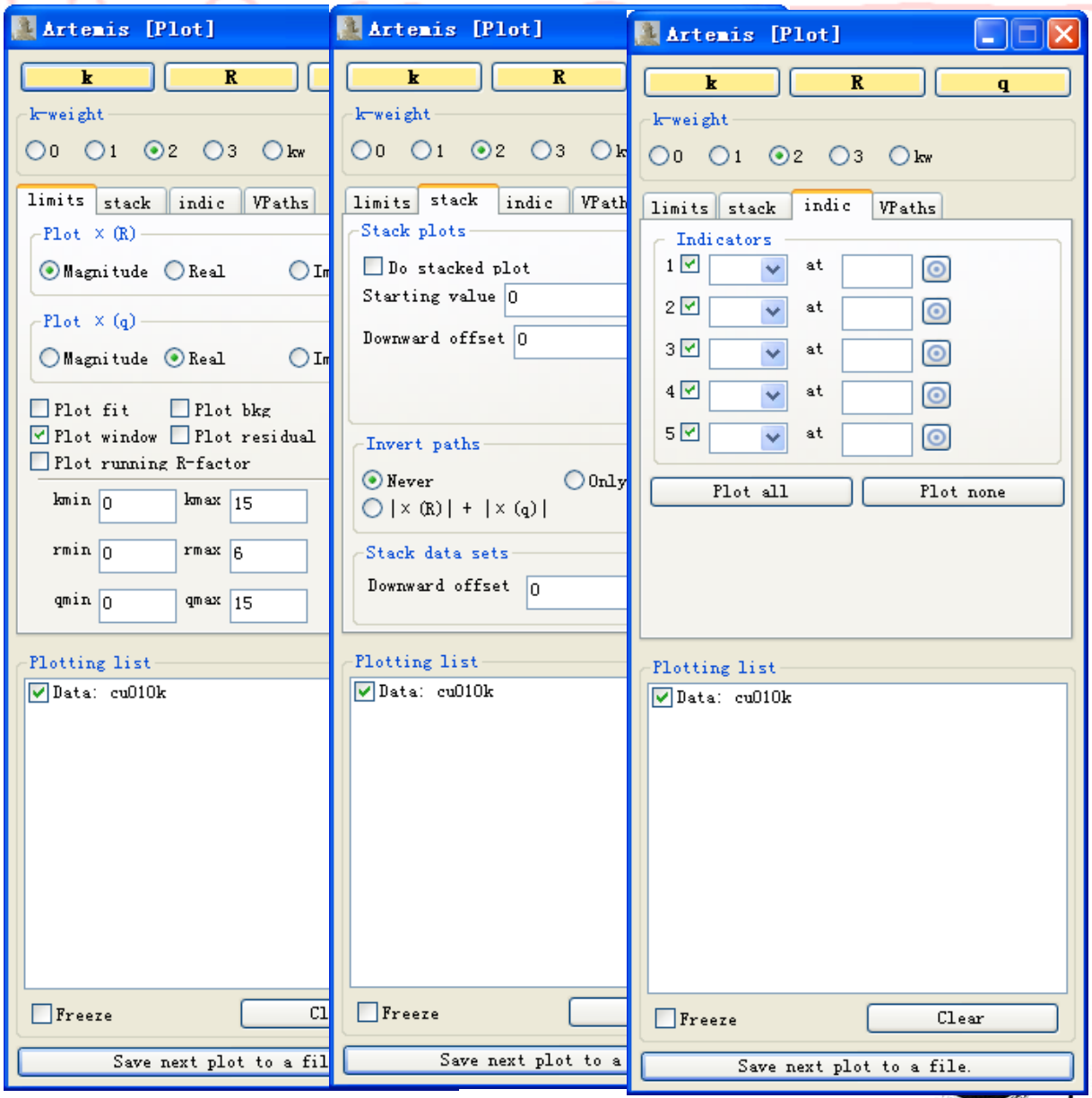
ARTEMIS软件简介



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）

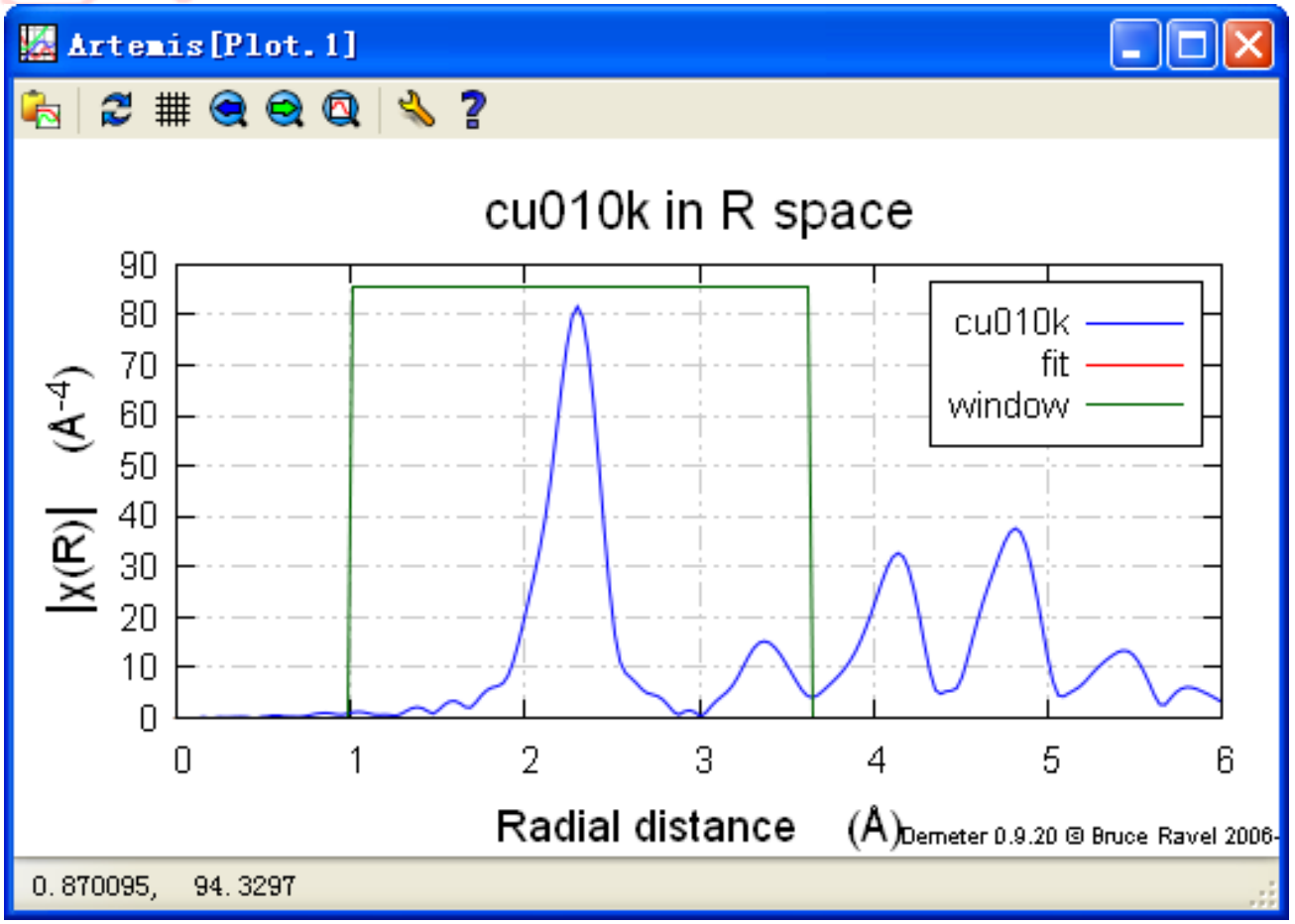
ARTEMIS软件简介

北京同步辐射装置
Beijing Synchrotron Radiation Facility



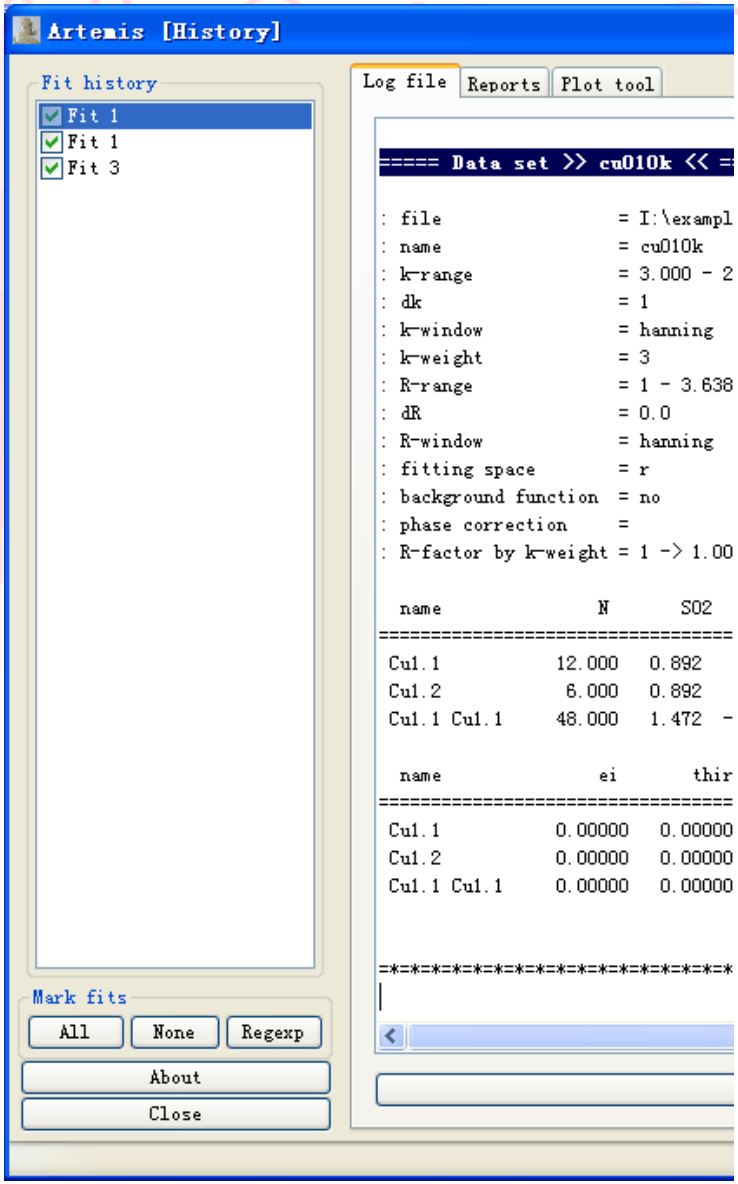
绘图控制窗口：
对artemis的数据、背底、路径以及贡献、拟合结果、残差等进行绘制及绘图的控制；

ARTEMIS软件简介

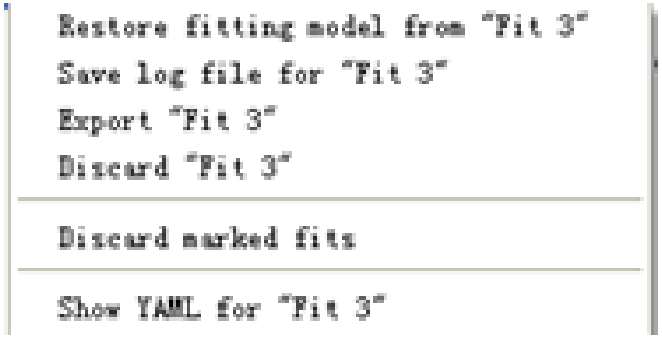


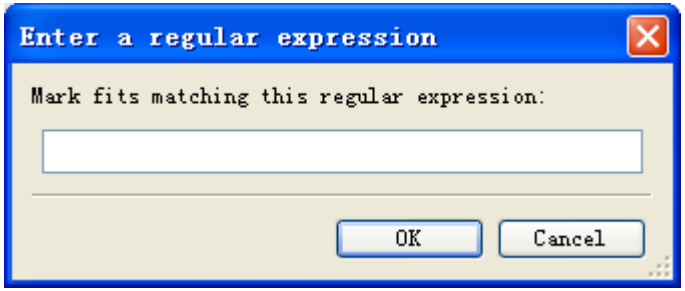
绘图窗口：数据、拟合结果等的图形化显示；

ARTEMIS软件简介

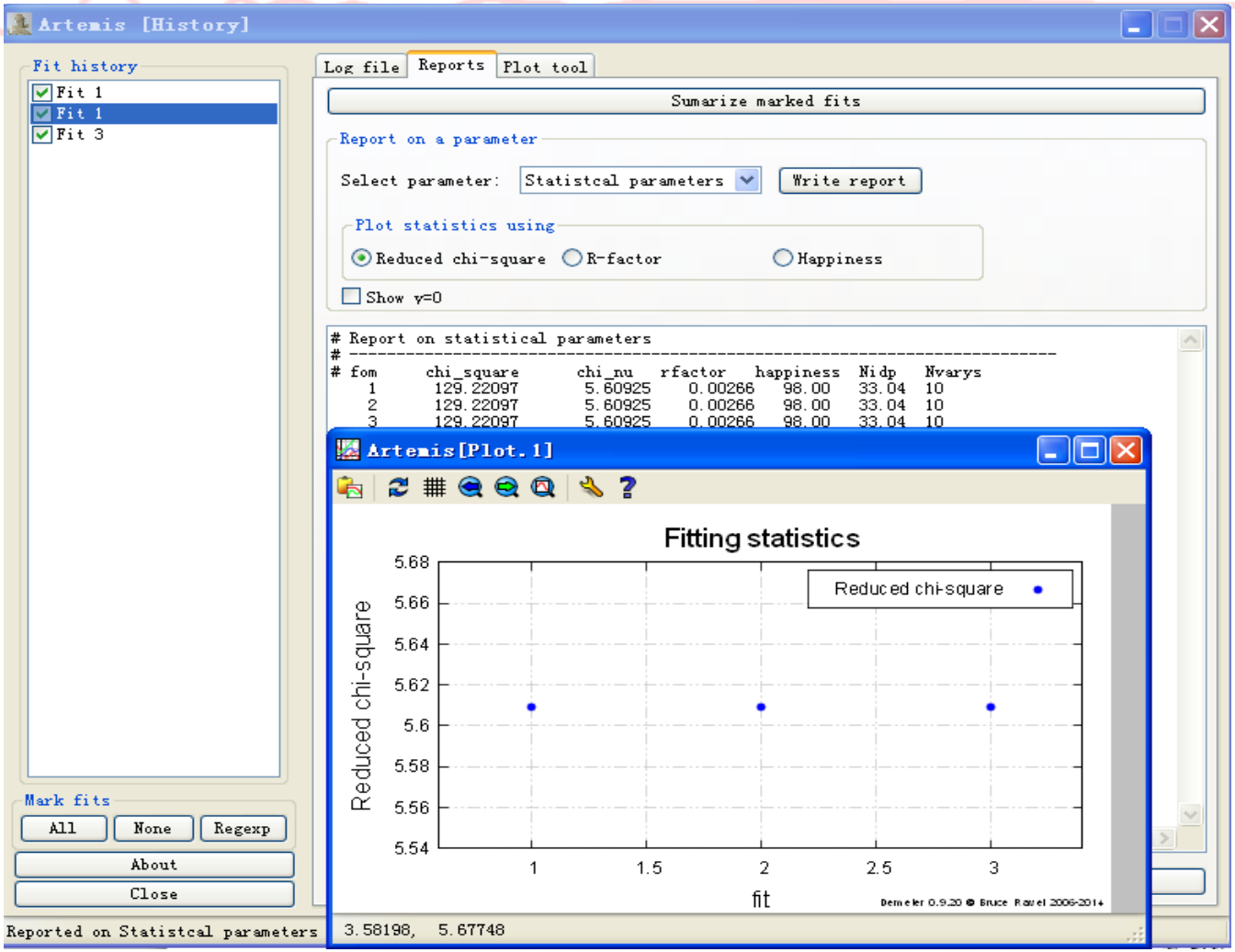


拟合历史窗口：多次拟合结果、多次拟合的统计量、拟合量的比较、添加至绘图窗口等；



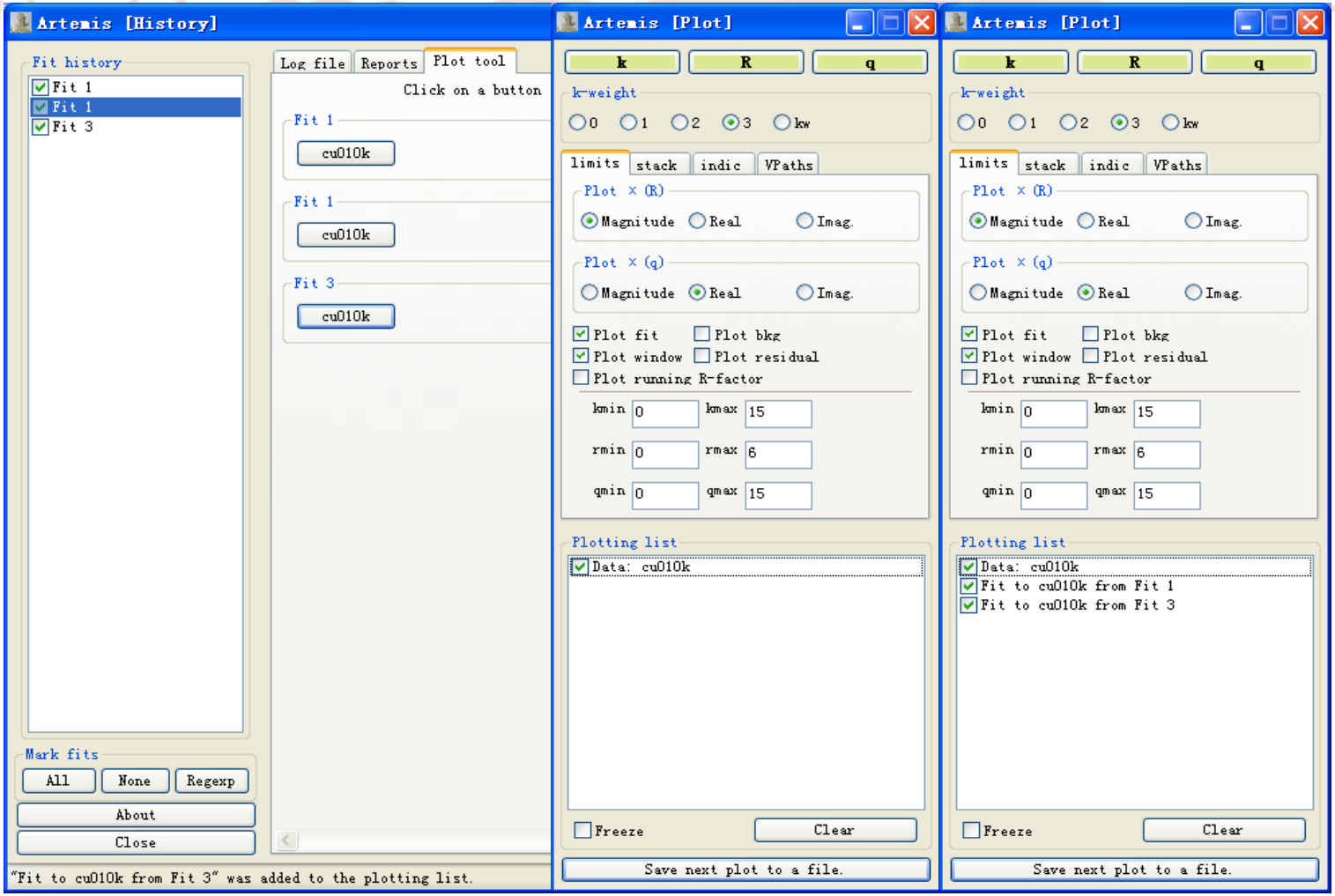


ARTEMIS软件简介



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；

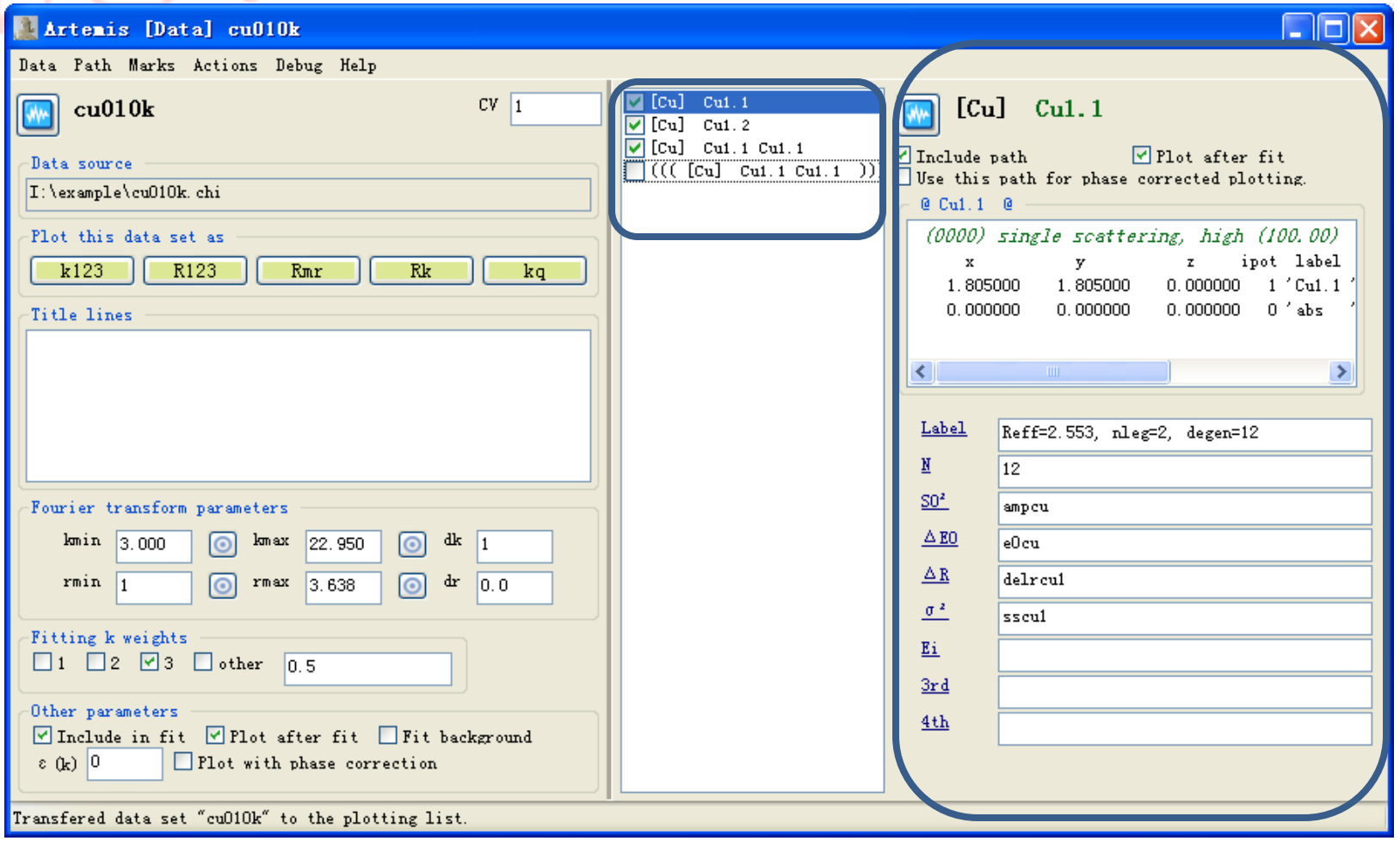
ARTEMIS软件简介



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；

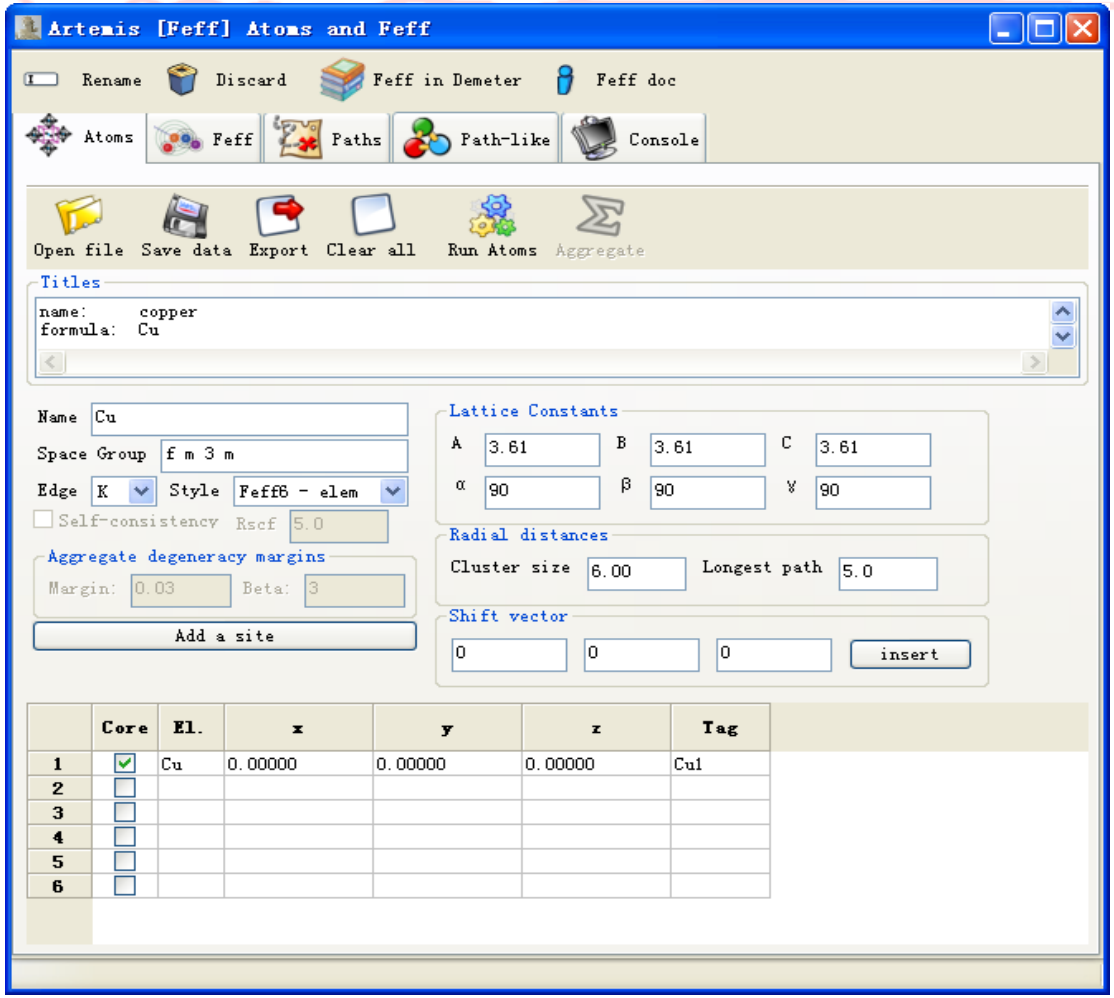
北京同步辐射装置
Beijing Synchrotron Radiation Facility
X射线吸收谱学实验和数据分析讲习班
武汉·2014
中国科学院高能物理研究所

ARTEMIS软件简介



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；

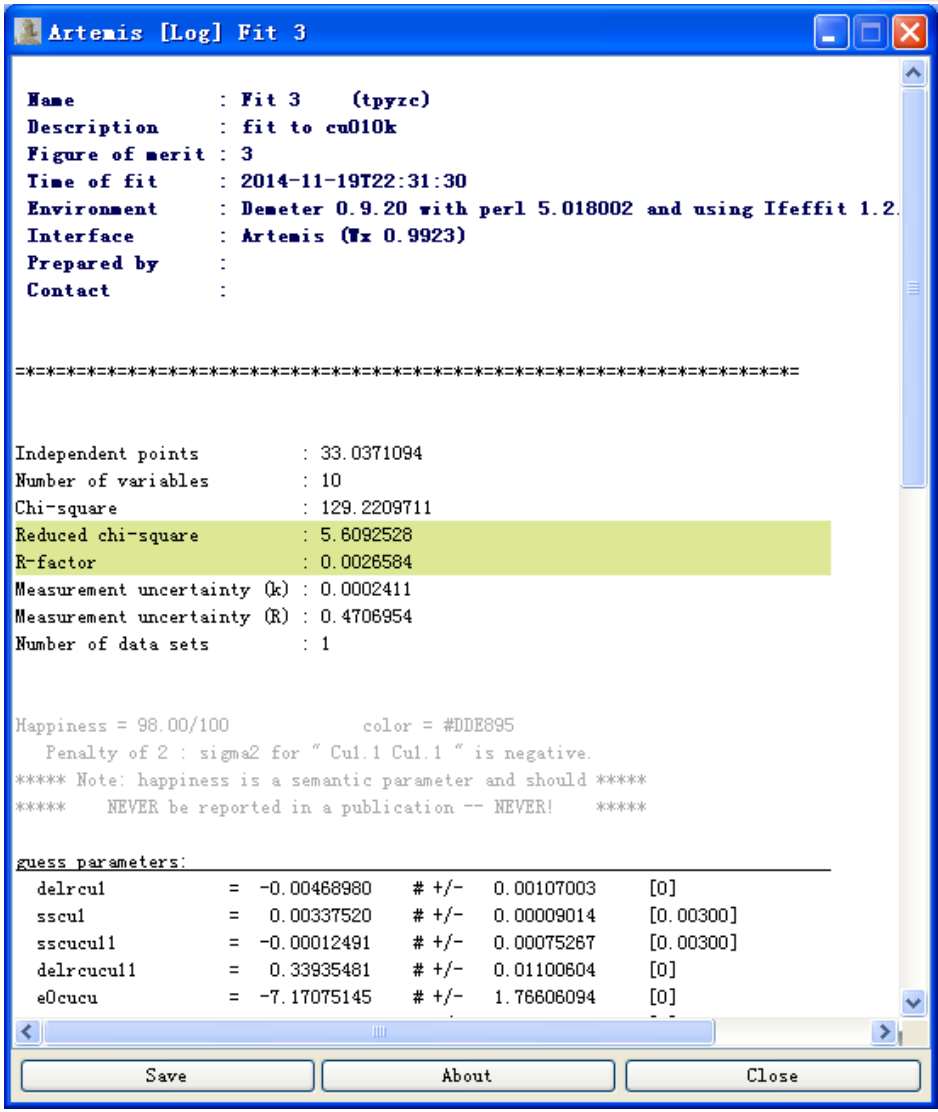
ARTEMIS软件简介



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

ARTEMIS软件简介

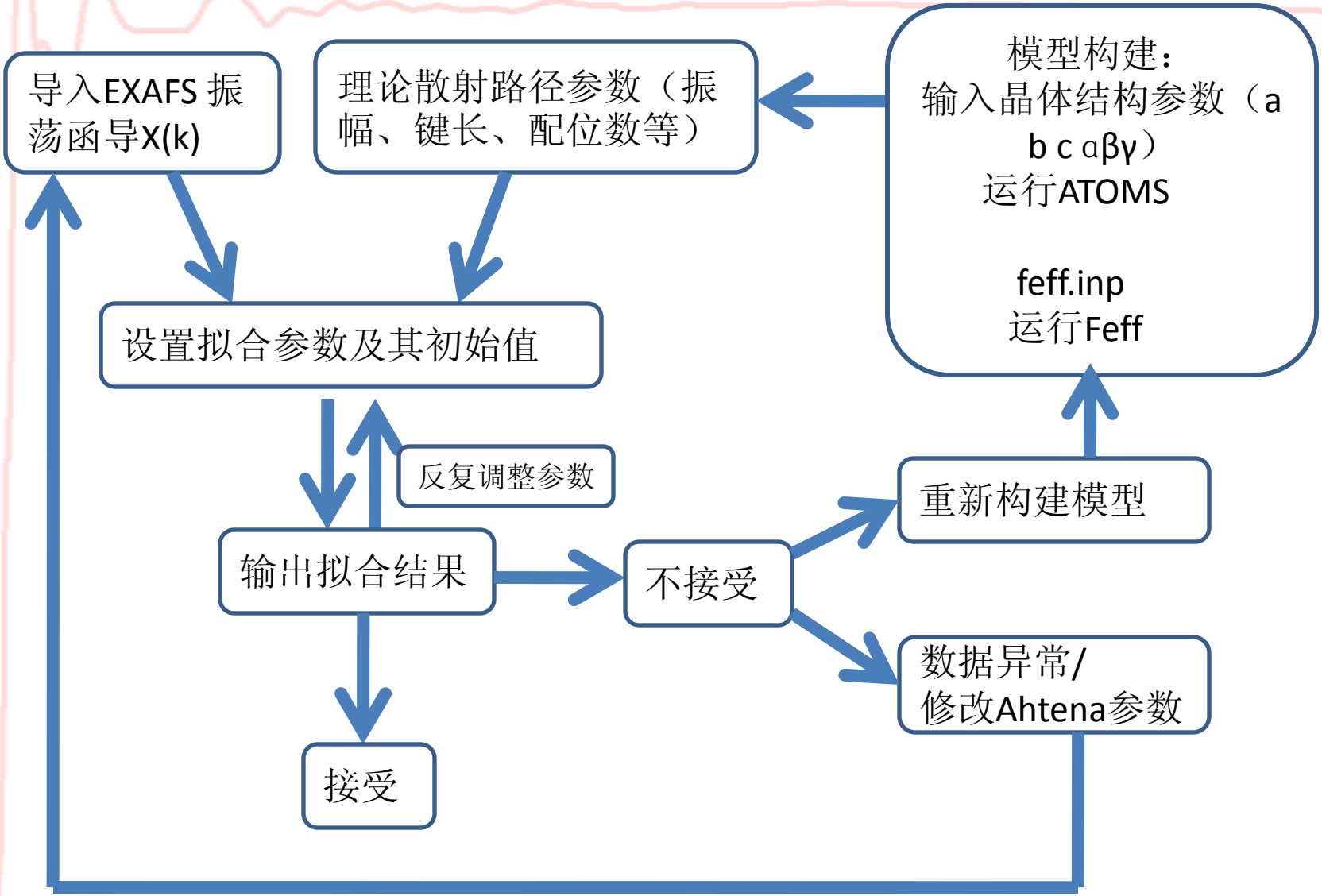
拟合结果窗口：拟合得到的结果、报错等信息；



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

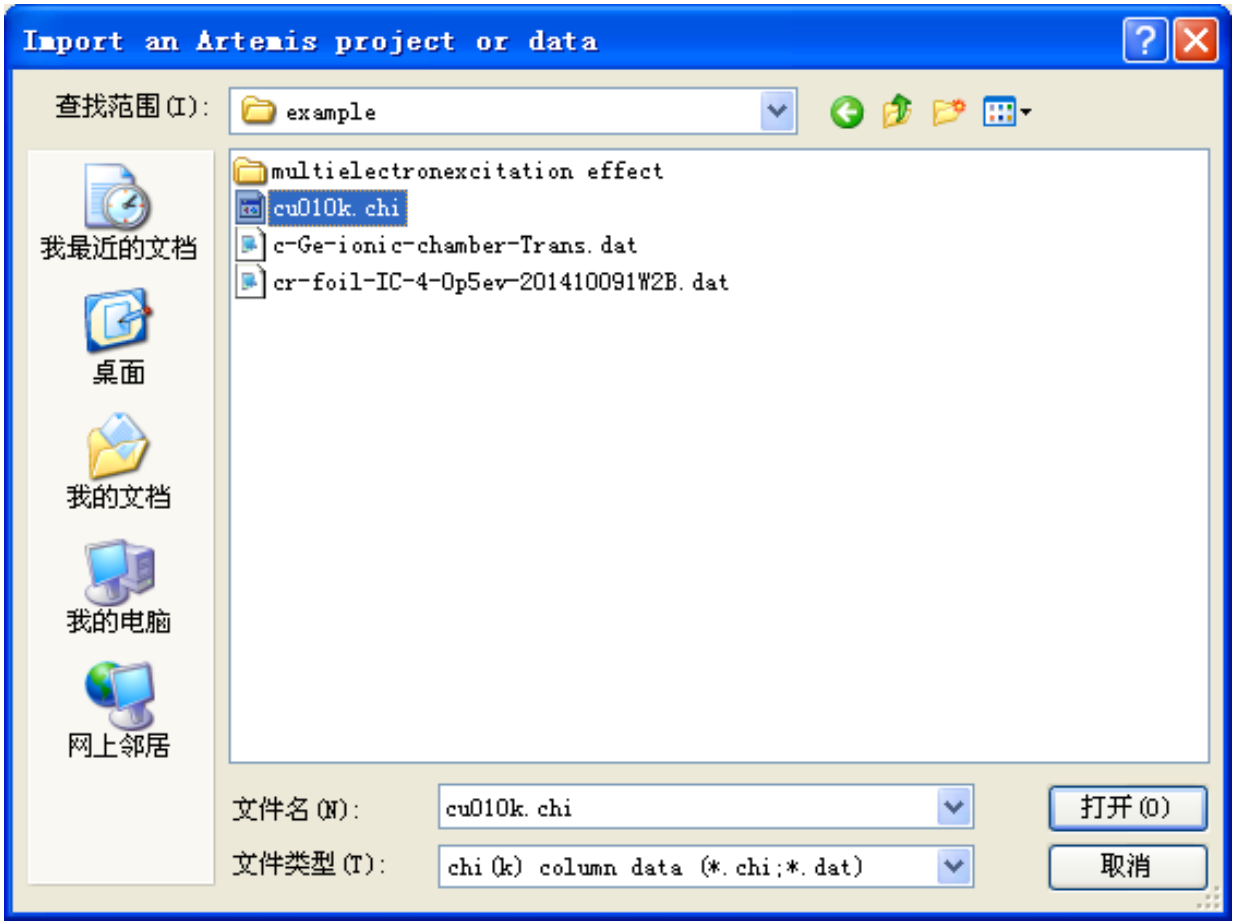
ARTEMIS 处理流程



单壳层拟合-Cu

数据导入

数据处理

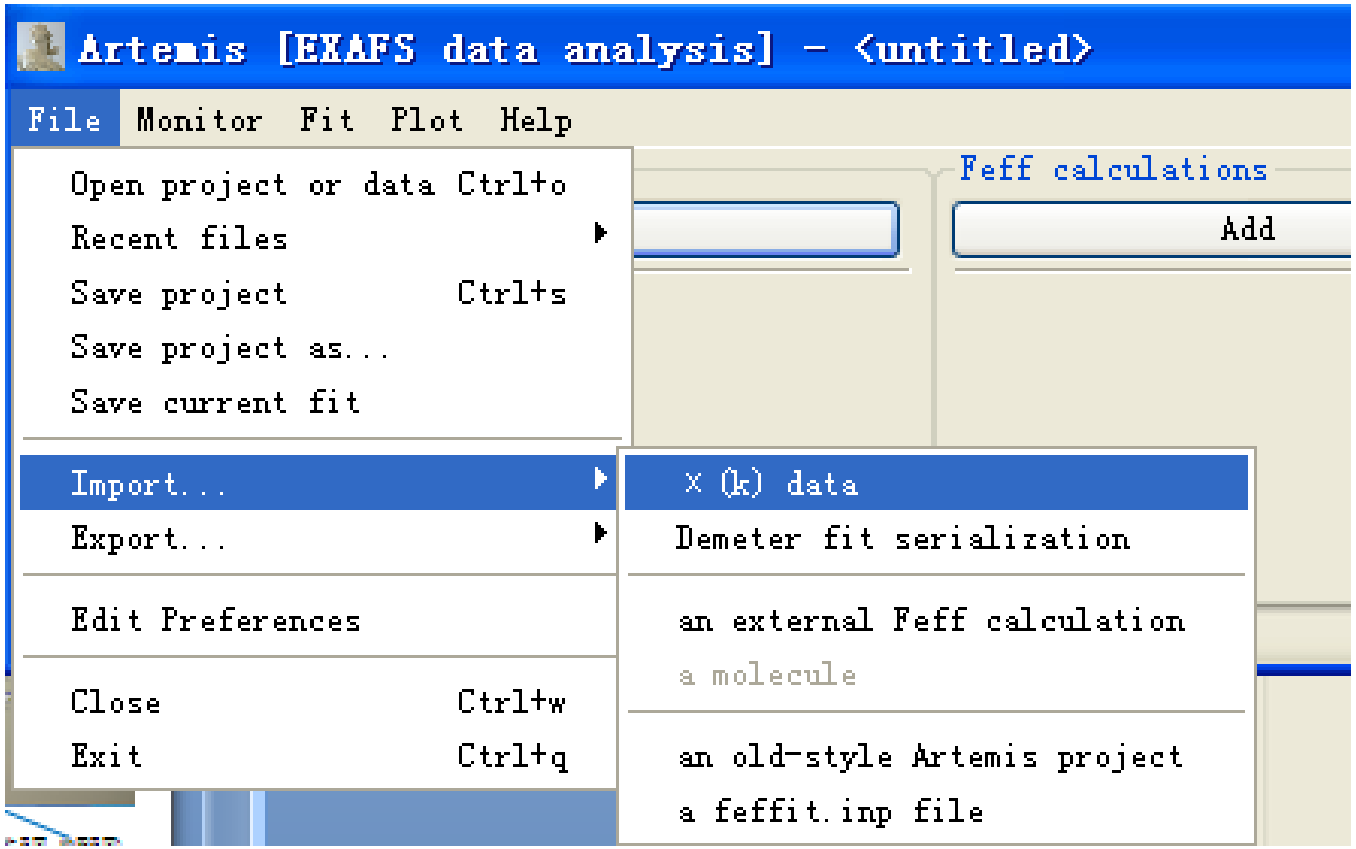


方式1： 主窗口/File/open prject or data (适用于多种数据格式)

单壳层拟合-Cu

数据导入

数据处理

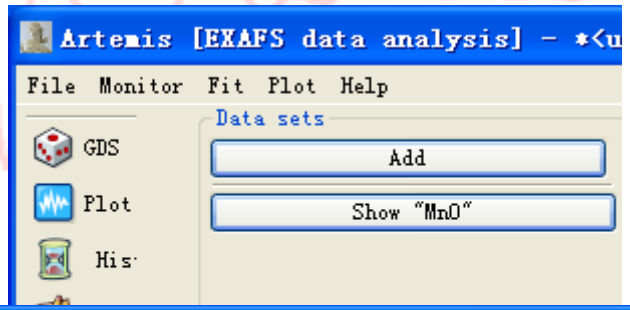


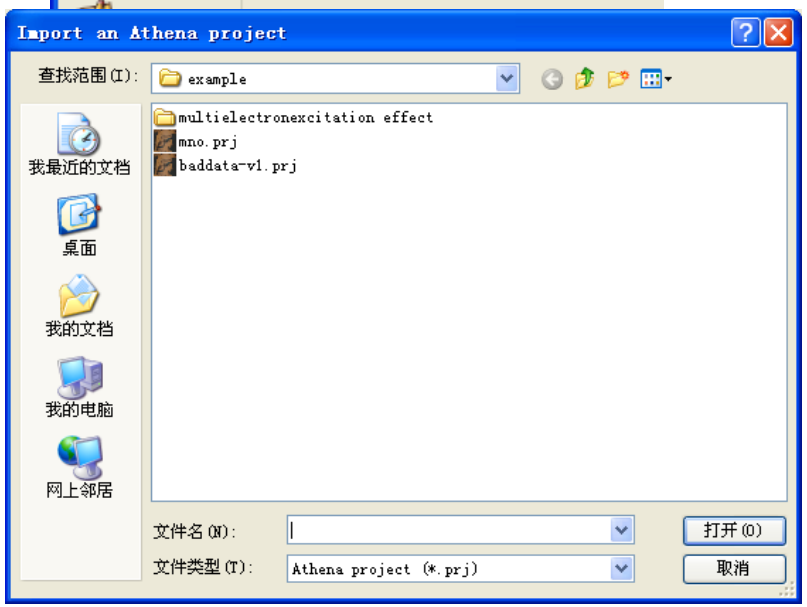
方式2：主窗口/File/import/x(k) data

单壳层拟合-Cu

数据导入

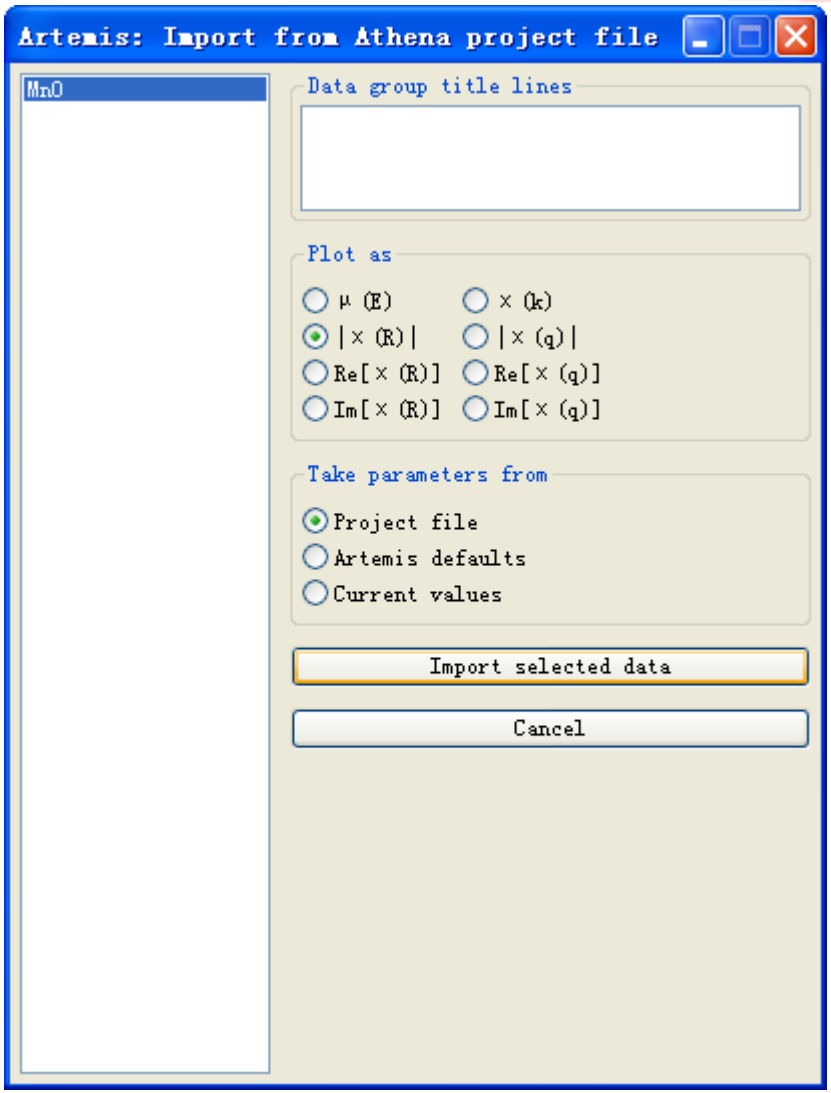
数据处理





方式3：主窗口/Data sets/add (适用于prj文件)

推荐！



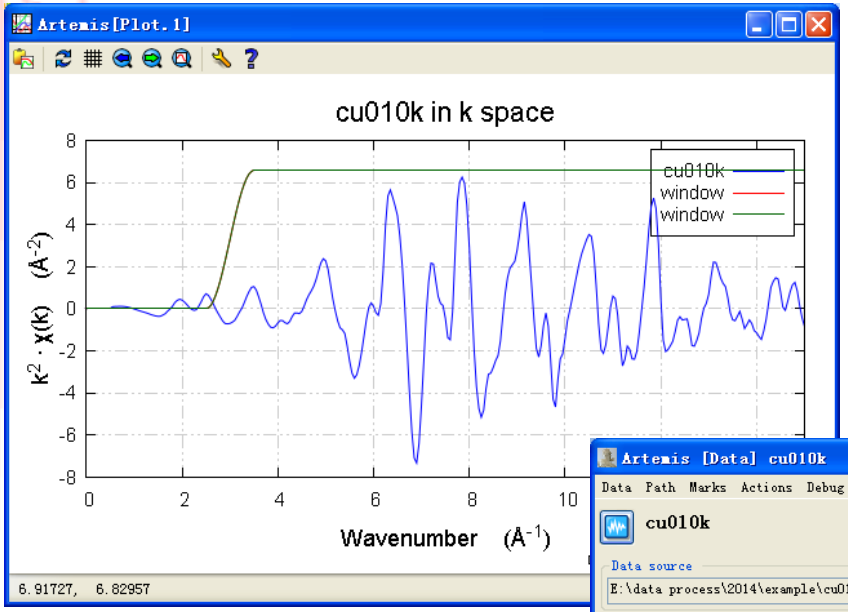
北京同步辐射装置 Beijing Synchrotron Radiation Facility
X射线吸收谱学实验和数据分析讲习班
武汉·2014
中国科学院高能物理研究所

单壳层拟合-Cu

数据导入

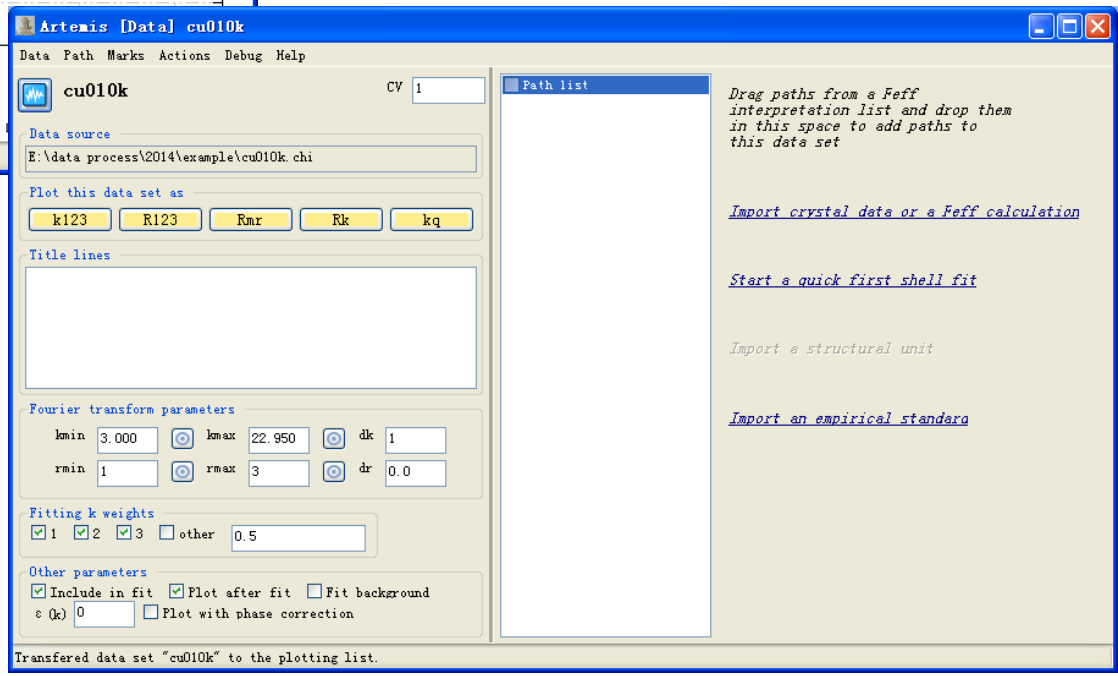
数据处理

北京同步辐射装置
Beijing Synchrotron Radiation Facility



绘图窗口

数据操作窗口



数据导入成功后，会自动弹出，本页的两个窗口；

X射线吸收谱学实验和数据分析讲习班

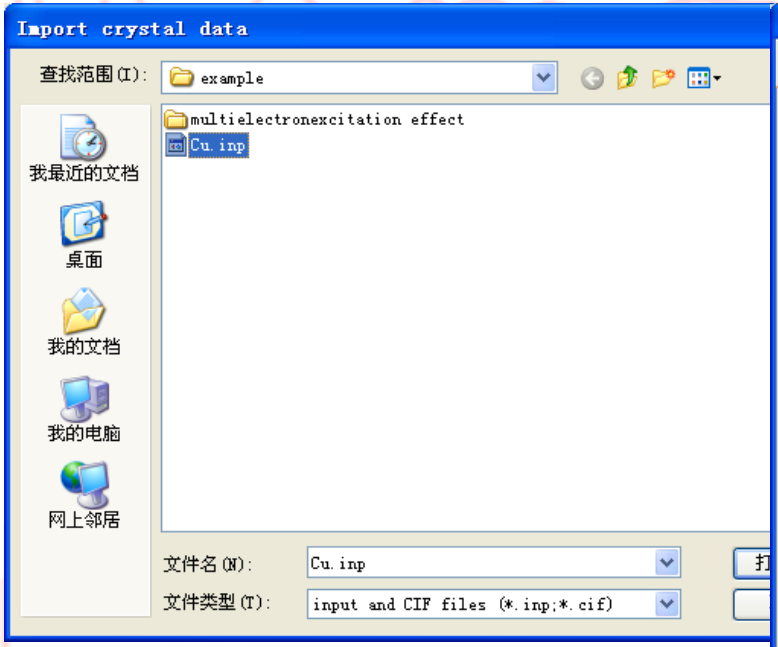
武汉·2014

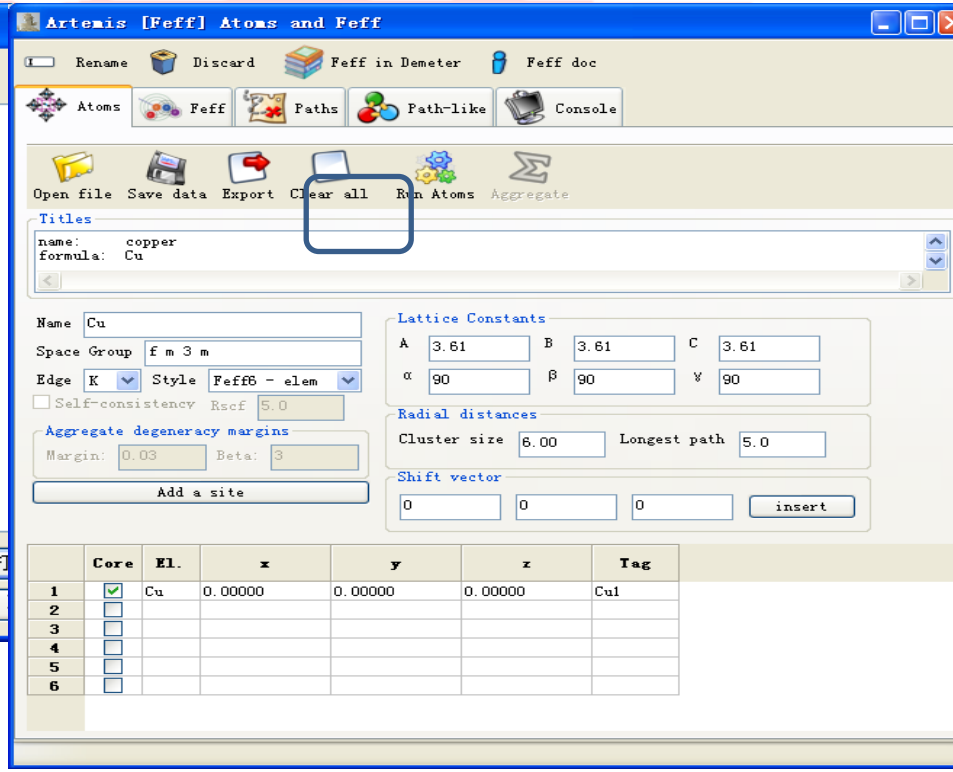
中国科学院高能物理研究所

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 cystal data or a Feff calculation 导入Cu.inp 弹出右侧Atoms and Feff窗口 (inp文件在老版ifeffit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

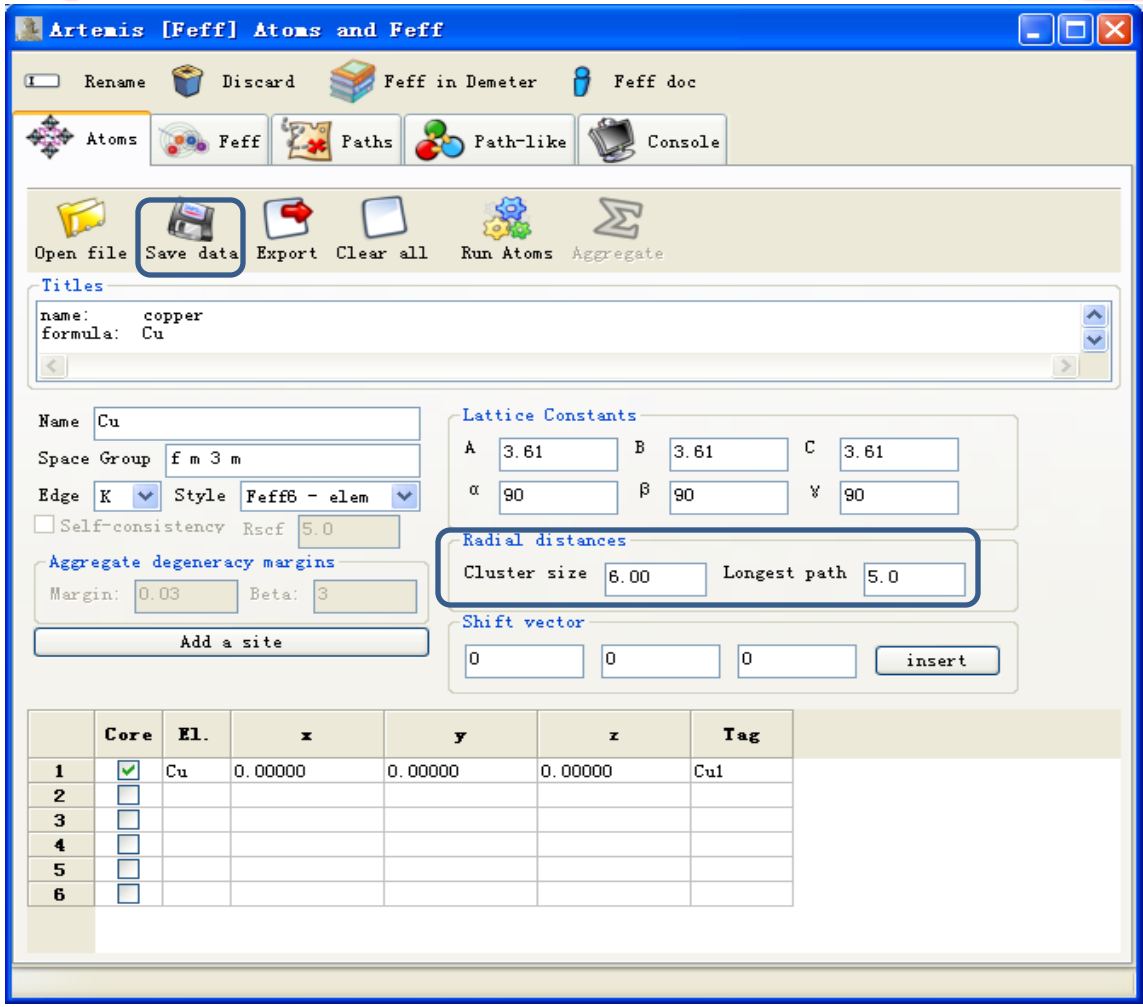
输入所需参数（空间群、晶体学参数、原子占位）；

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：



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

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

X射线吸收谱学实验和数据分析讲习班

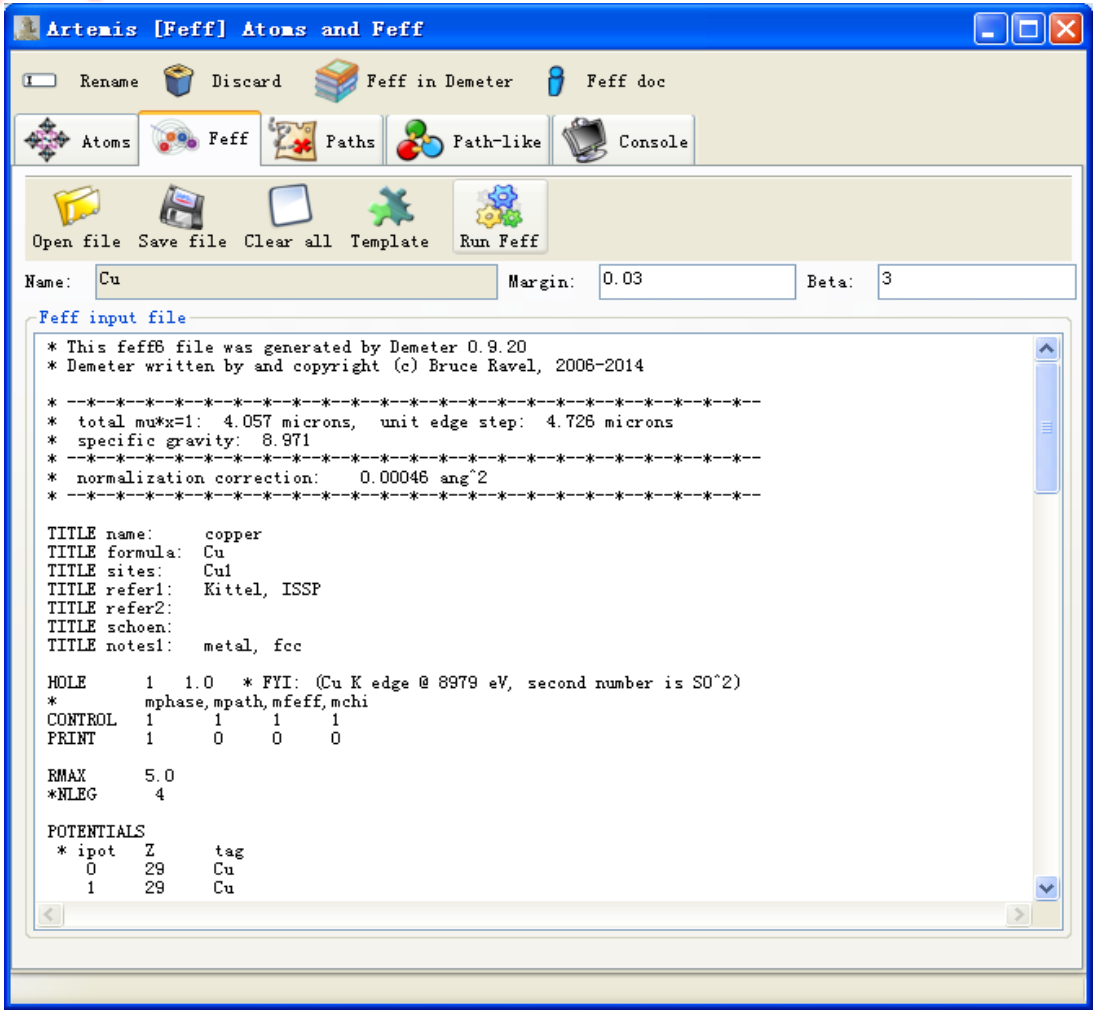
武汉·2014

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



单击Rum Atoms 可以弹出以上界面；

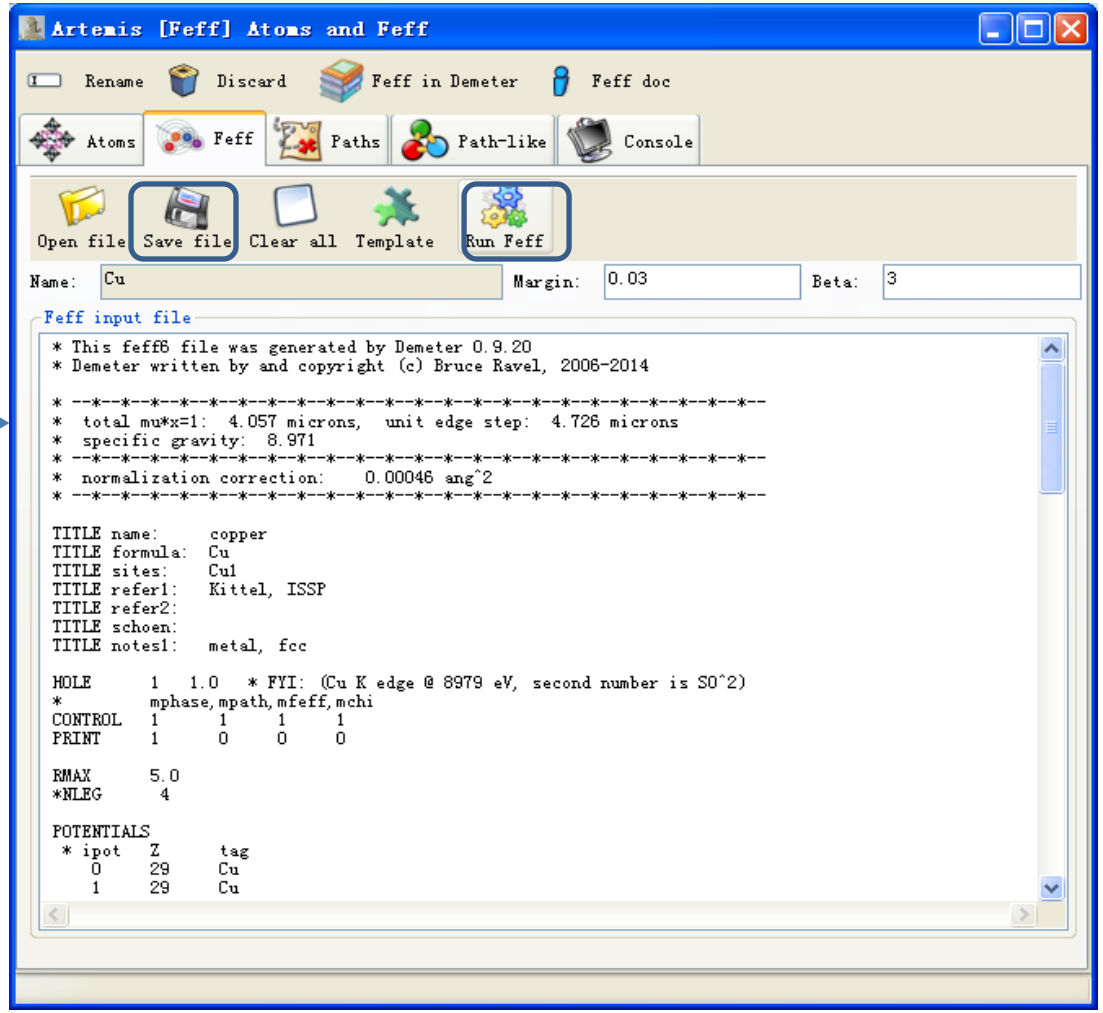
单壳层拟合-Cu

模型建立

数据处理

北京同步辐射装置
Beijing Synchrotron Radiation Facility

Feff文件信息

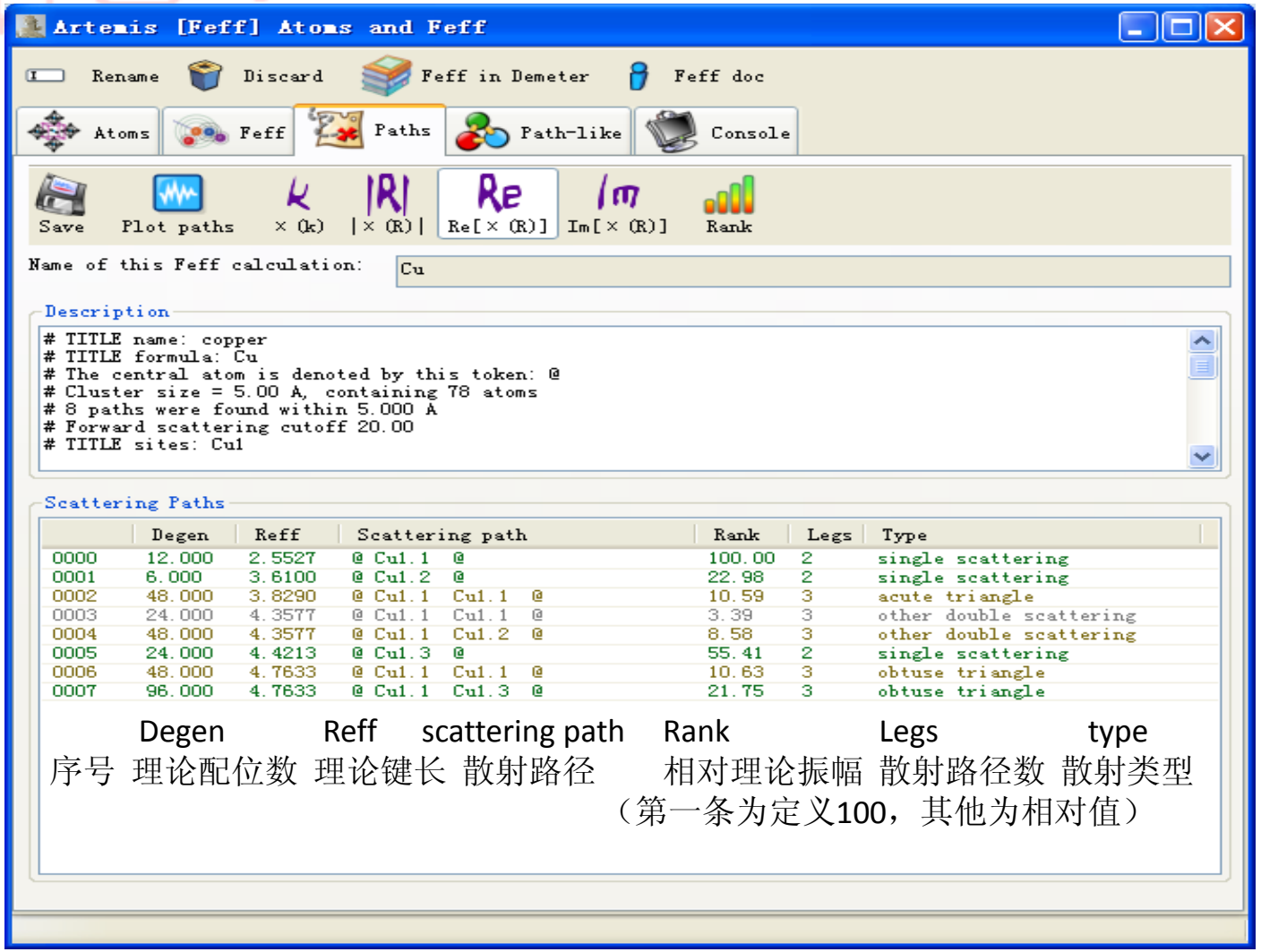


单击Rum Atoms 可以弹出以上界面；检查路径文件是否正确（原子间距是否合理），点击save file保存feff.inp;

单壳层拟合-Cu

模型建立

数据处理



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）

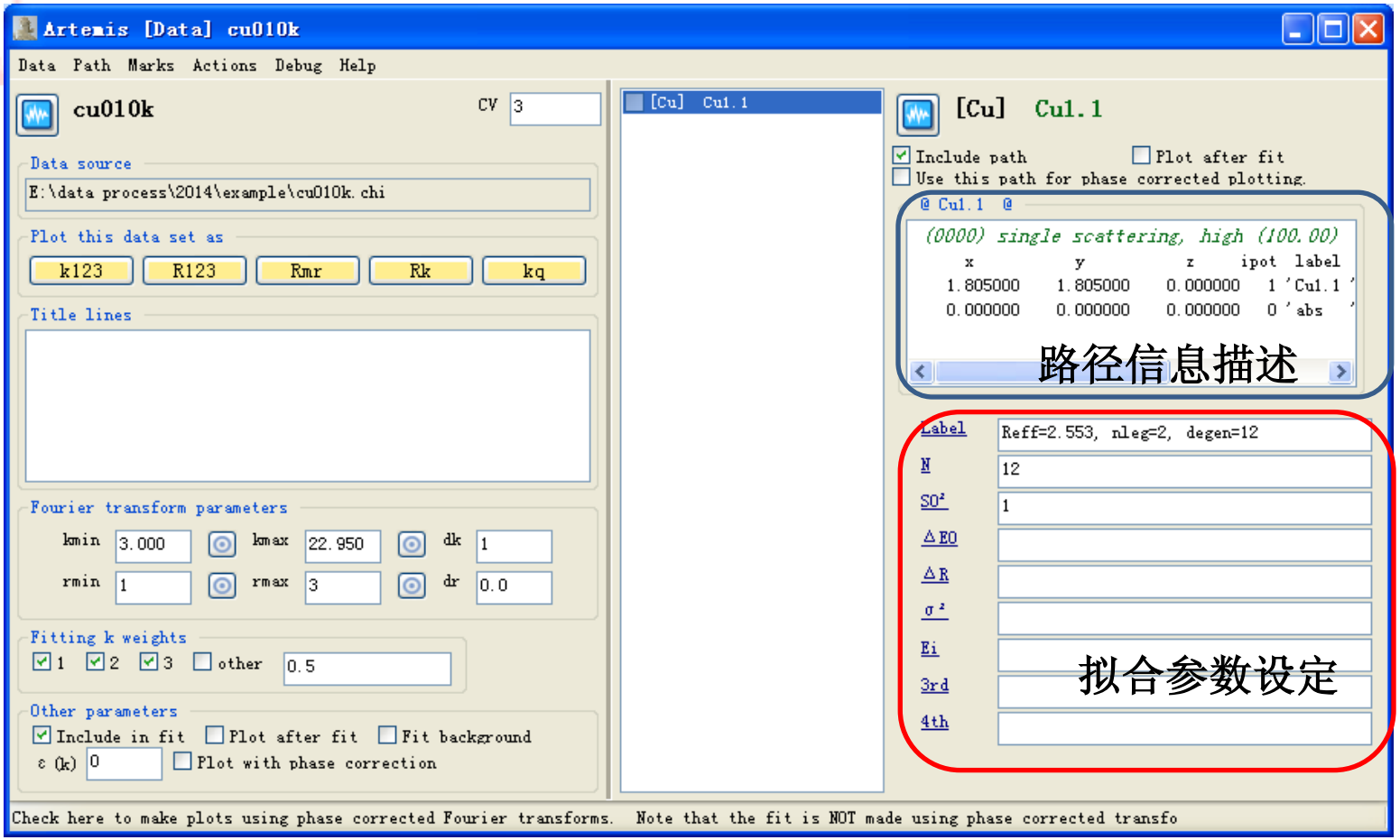
单击Rum Feff 可以弹出以上界面；左键Cu的第一路径，将其拖数据操作窗口的pathlist

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
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

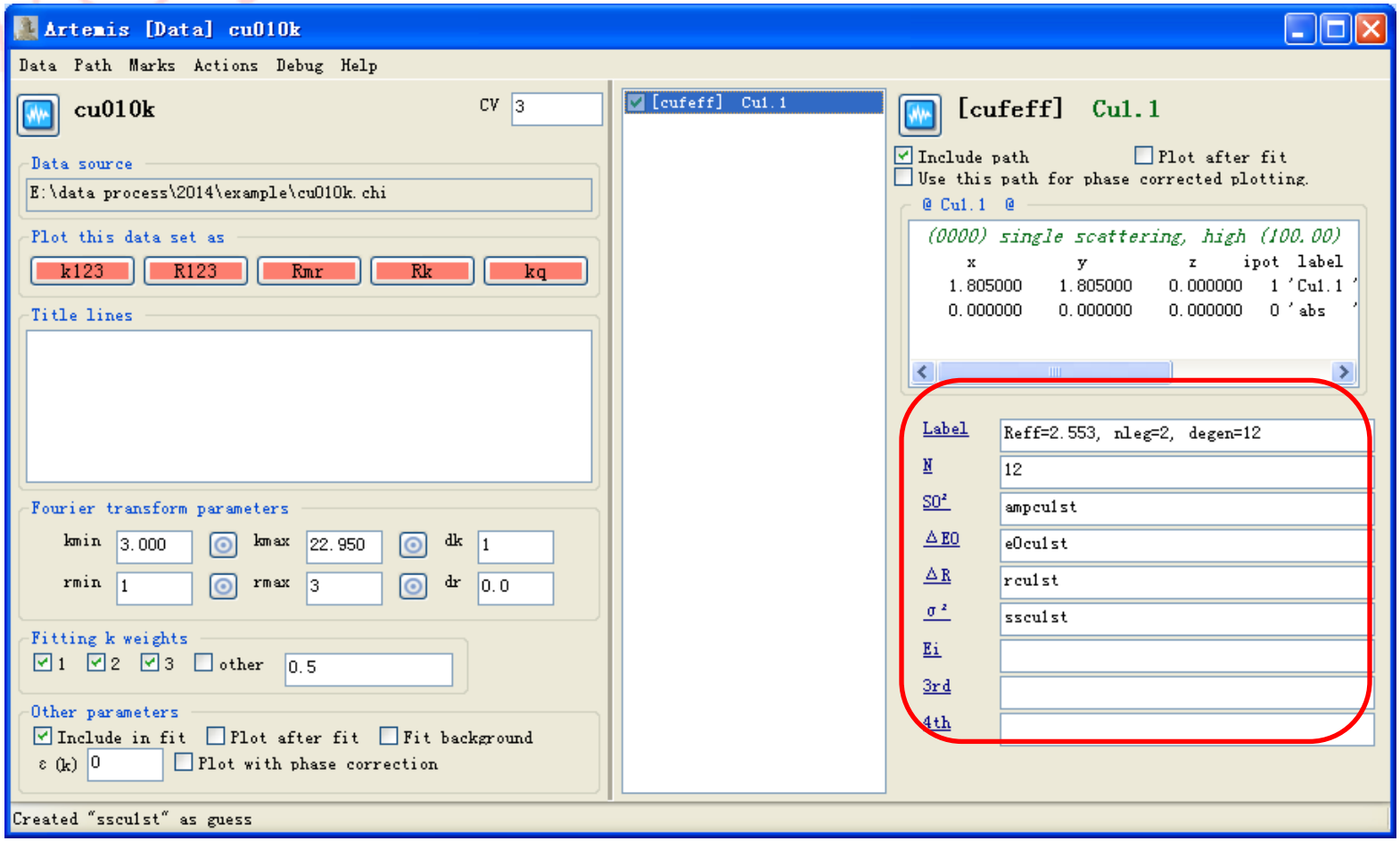


左键Cu的第一路径，将其拖入pathlist，即可出现以上界面

单壳层拟合-Cu

拟合参数设定

数据处理

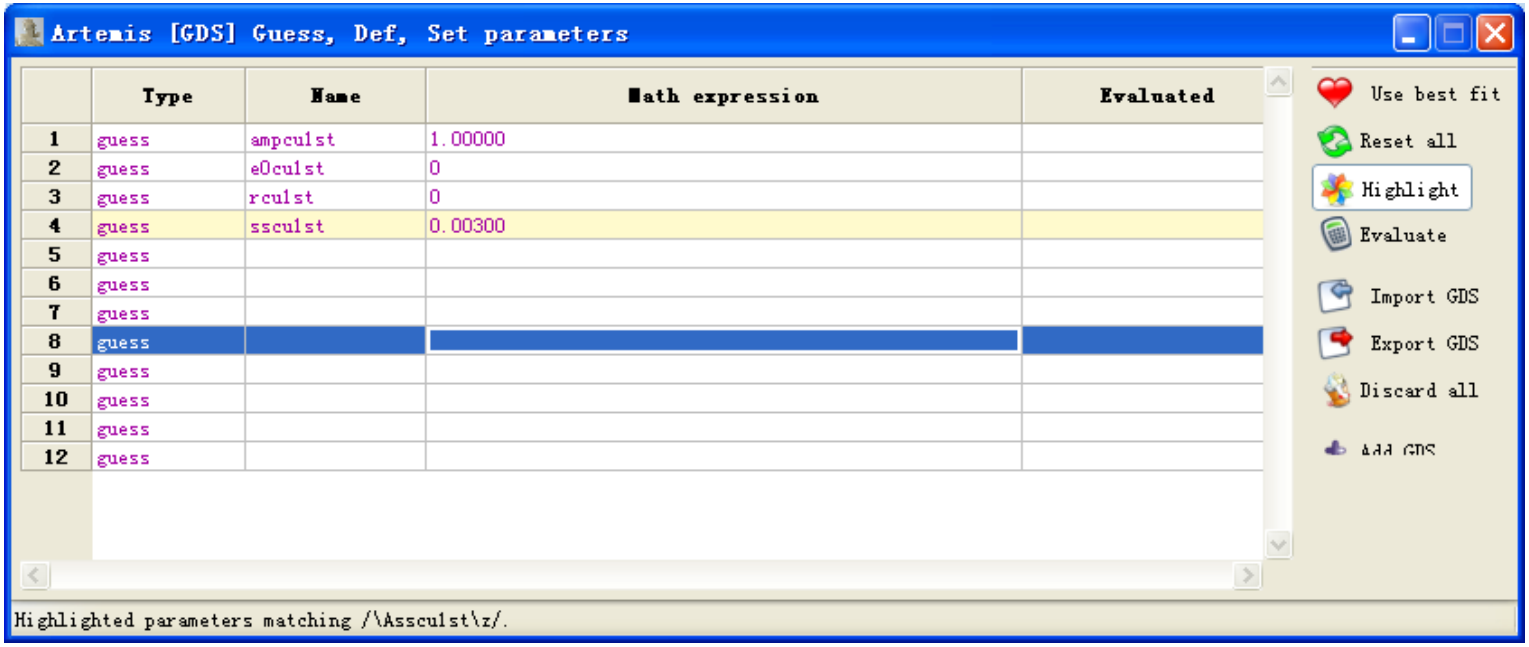


单击路径，在右侧红色框内输入需要拟合的变量(以字母与数字组成，其他符号可能出错)；并在变量处右键，选择guess 变量，将其添加至GDS窗口

（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）

单壳层拟合-Cu

拟合参数设定



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

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*penality(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；

单壳层拟合-Cu

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

g(R):原子对分布函数

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

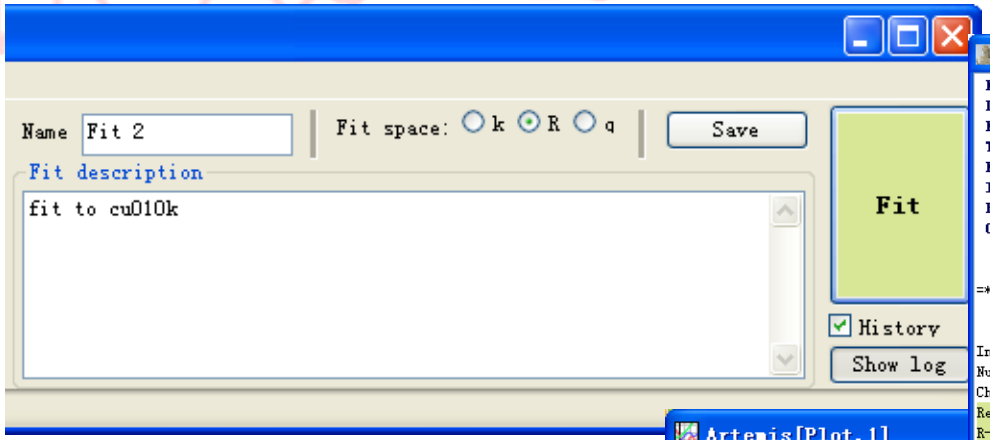
晶体等有序体系或弱无序体系（高斯分布）

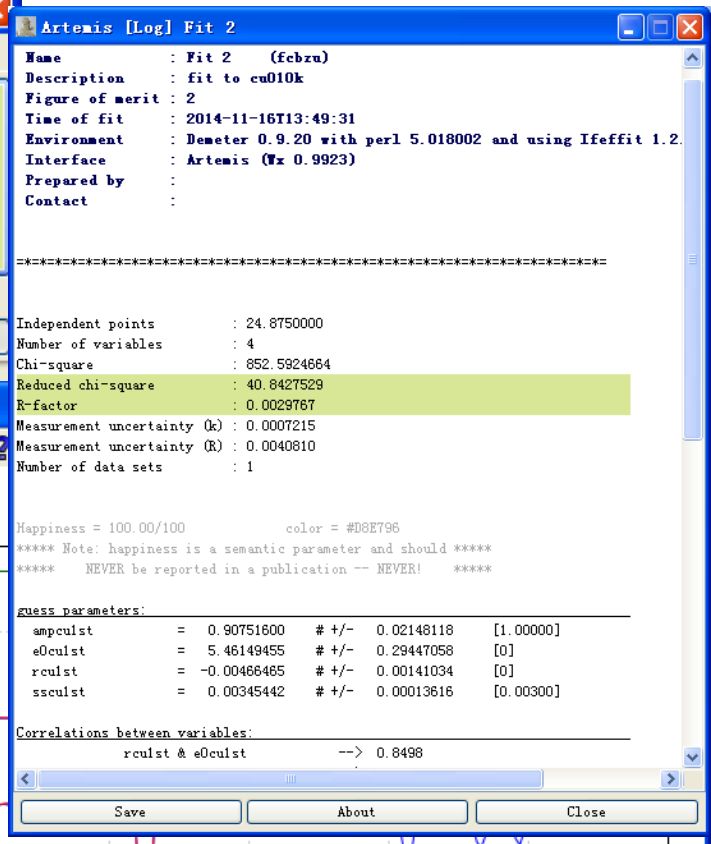
$$\chi(K)=\sum_j \frac{N_j S_0^2 F_j(K)}{KR_j^2}\exp\left[-2K^2\sigma_j^2+\frac{2}{3}C_{4j}K^4\right]e^{-2R_j/\lambda(K)}Sin[2KR_j+\delta_j(K)-\frac{4}{3}C_{3j}K^3]$$

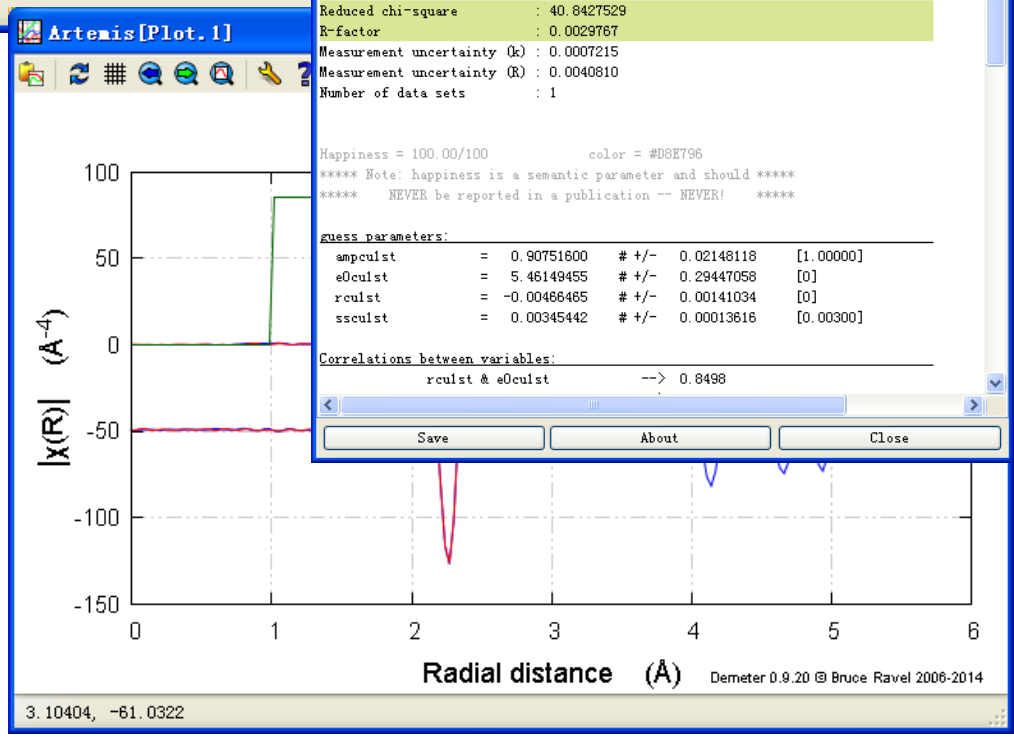
**中等无序体系：累积量展开

单壳层拟合-Cu

数据处理





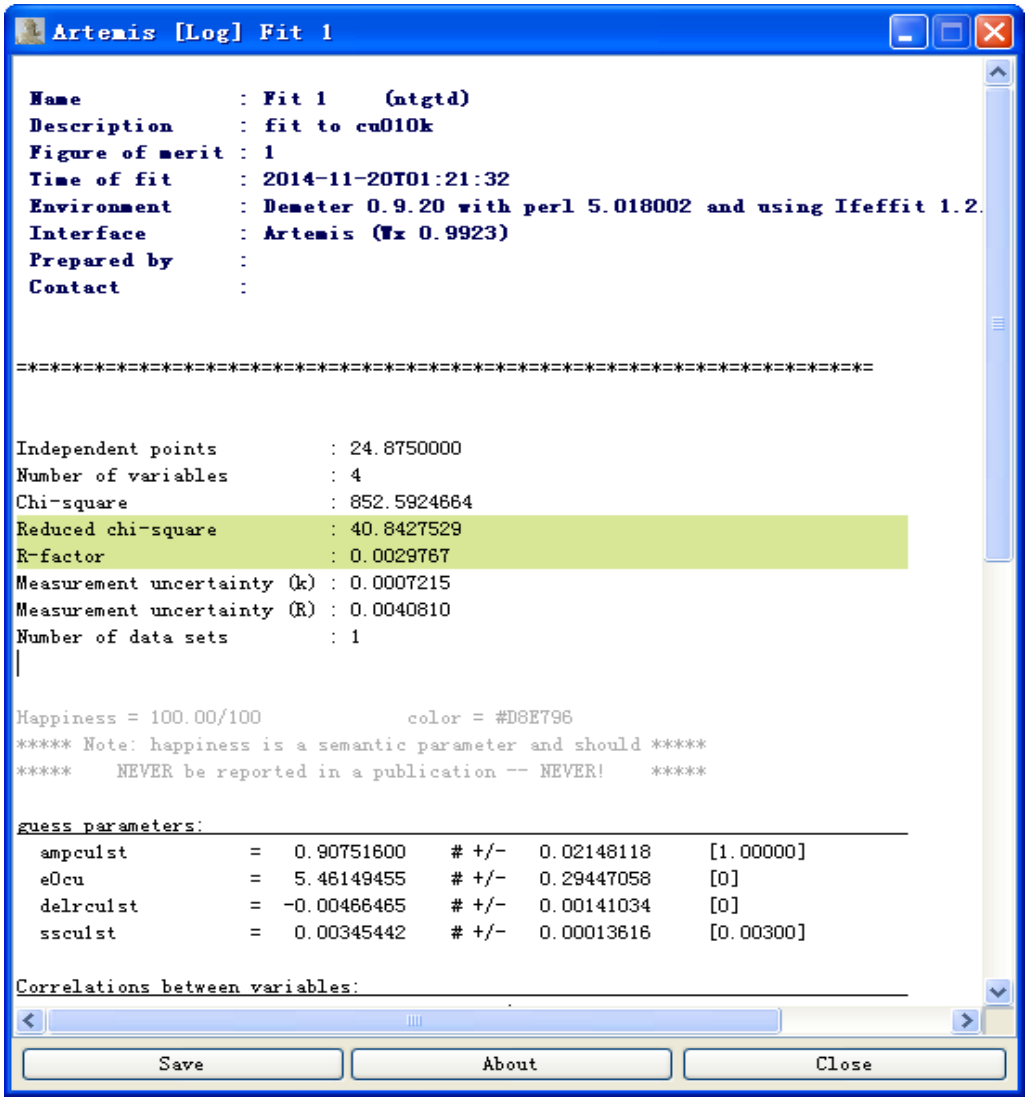


单击操作界面的Fit键，程序自动拟合，拟合结束后，弹出绘图窗口、拟合结果窗口；如有错误，会弹出log窗口提示；

单壳层拟合-Cu 拟合结果解读

本次拟合的统计信息

拟合参数最优值与不确定度



单壳层拟合-Cu 拟合结果解读

拟合参数相关性

各壳层的拟合结果

Artemis [Log] Fit 1

```
  delrcu1st          =  -0.00466465    # +/-    0.00141034     [0]
  sscu1st            =   0.00345442    # +/-    0.00013616     [0.00300]

Correlations between variables:
           delrcu1st & e0cu              -->  0.8498
             sscu1st & ampcu1st          -->  0.8475
All other correlations below 0.4

===== Data set >> cu010k << ===================================

: file                 = I:\example\cu010k.chi
: name                 = cu010k
: k-range              = 3.000 - 22.950
: dk                   = 1
: k-window             = hanning
: k-weight             = 1,2,3
: R-range              = 1 - 3
: dR                   = 0.0
: R-window             = hanning
: fitting space        = r
: background function  = no
: phase correction     =
: R-factor by k-weight = 1 -> 0.00411,  2 -> 0.00222,  3 -> 0.00260

  name         N       S02      sigma^2    e0      delr      Reff      R
================================================================================
 Cu1.1      12.000    0.908    0.00345    5.461 -0.00466  2.55270  2.54804

  name         ei       third      fourth
=========================================
 Cu1.1      0.00000   0.00000   0.00000


=*=*=*=*=*=*=*=*=*=*=*=*=*=*=*=*=*=*=*=*=*=*=*=*=*=*=*=*=*=*=*=*=*=*=*=*=*=*=*=*=
```

Save | About | Close

单壳层拟合-Cu 统计信息定义

Chi-square

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

Reduced Chi-square

$$\chi^2_\nu = \frac{\chi^2}{\nu}$$

$$\nu = N_{idp} - N_{var}$$

不确定度

$$\epsilon = \text{measurement uncertainty}$$

R-factor

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

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

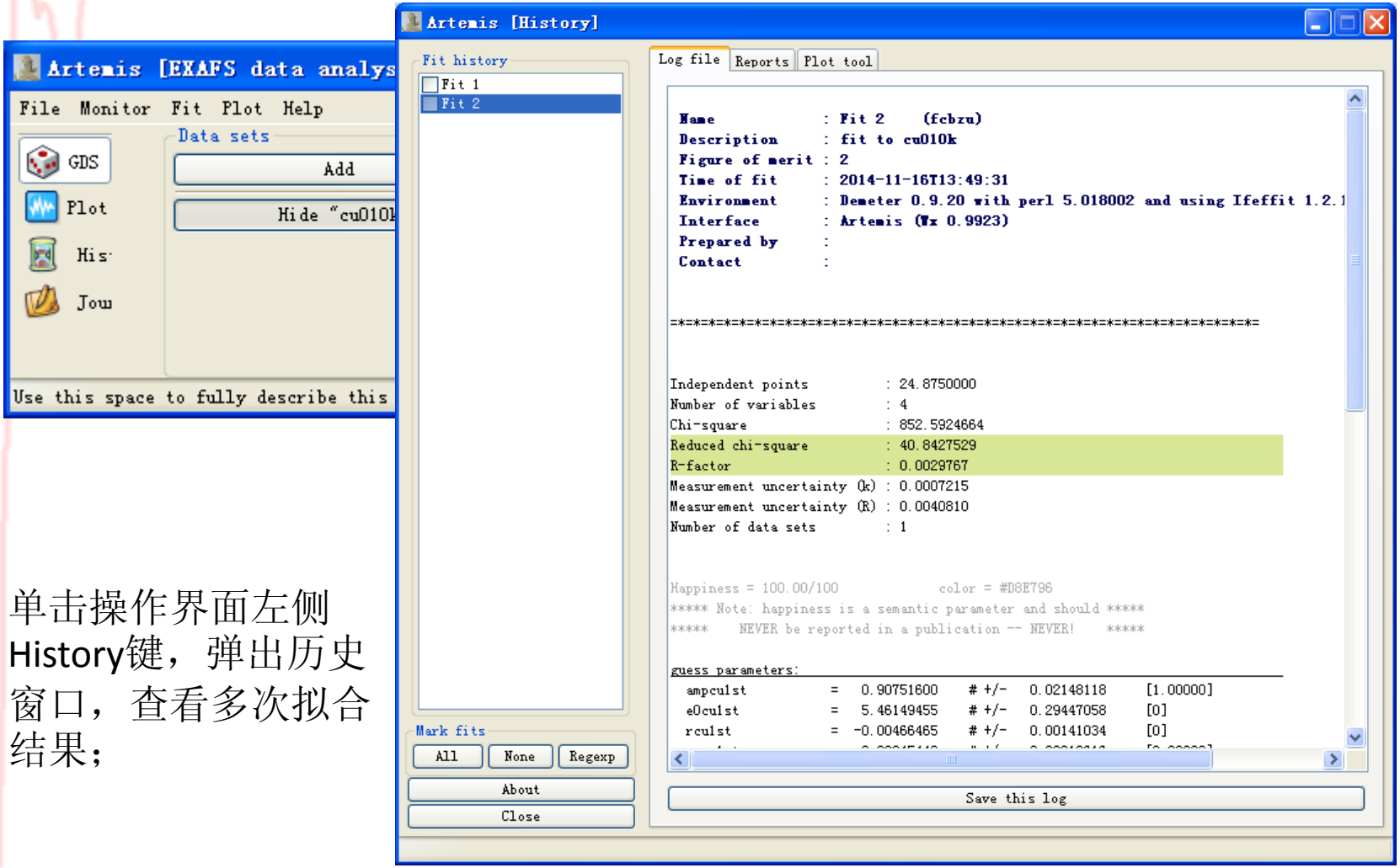
影响峰强
- N： 配位数
- S02：振幅衰减因子 （0.7 ,1）
- Sigma^2: 无序度因子（Debye-Waller factor） （0.003，0.02）
- C_4：4阶累积量

影响峰位
- R： 原子间距； （delR <0.5A）
- C_3：3阶累积量
- E_i：能移展宽
- $\triangle E_0$：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

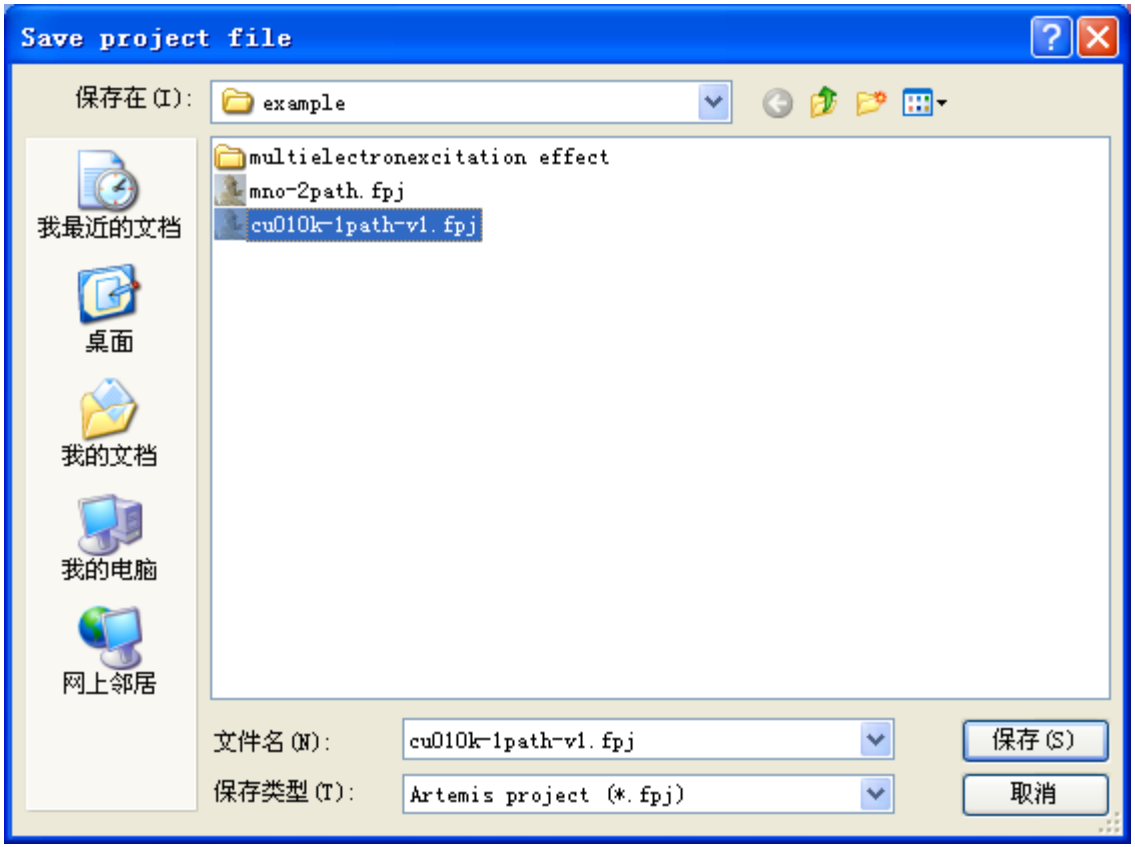
单壳层拟合-Cu



单击操作界面左侧History键，弹出历史窗口，查看多次拟合结果；

单壳层拟合-Cu

结果输出

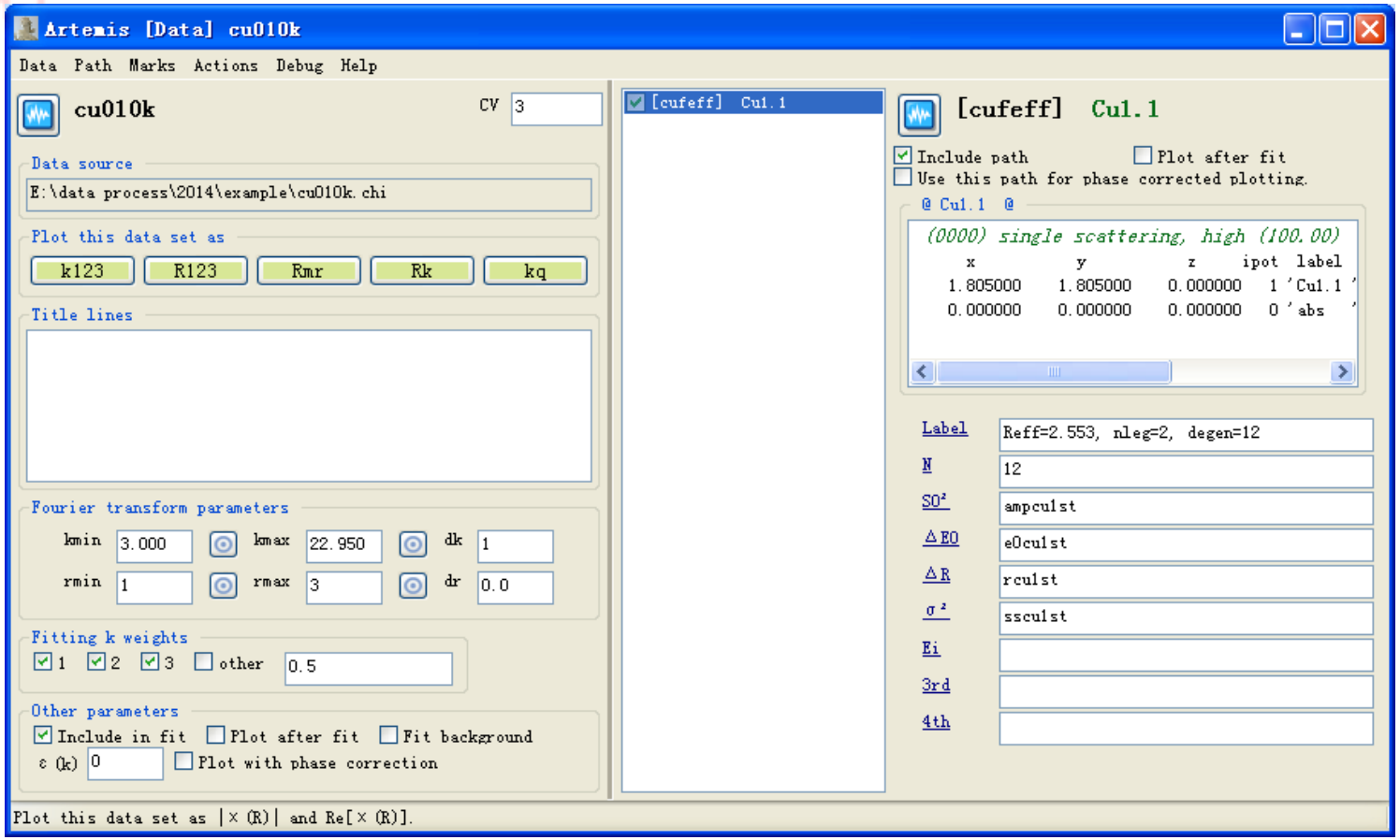


主窗口/file/save project as

单壳层拟合-Cu

保存拟合结果

数据处理



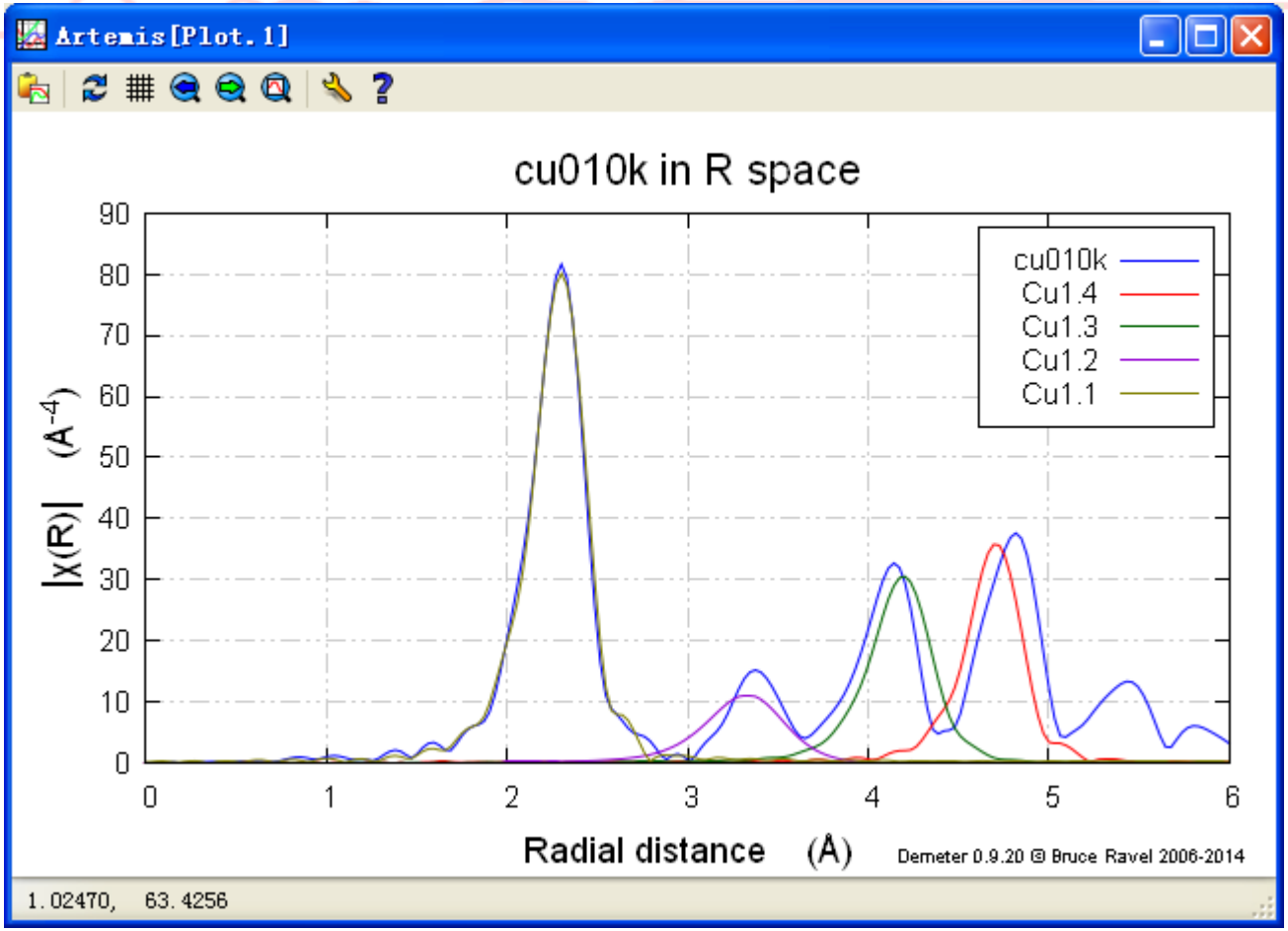
数据操作窗口/file/save project as

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

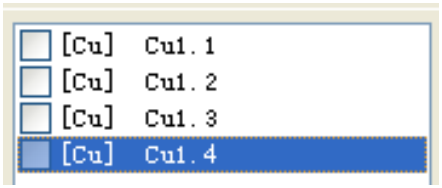
多壳层拟合-Cu

数据处理

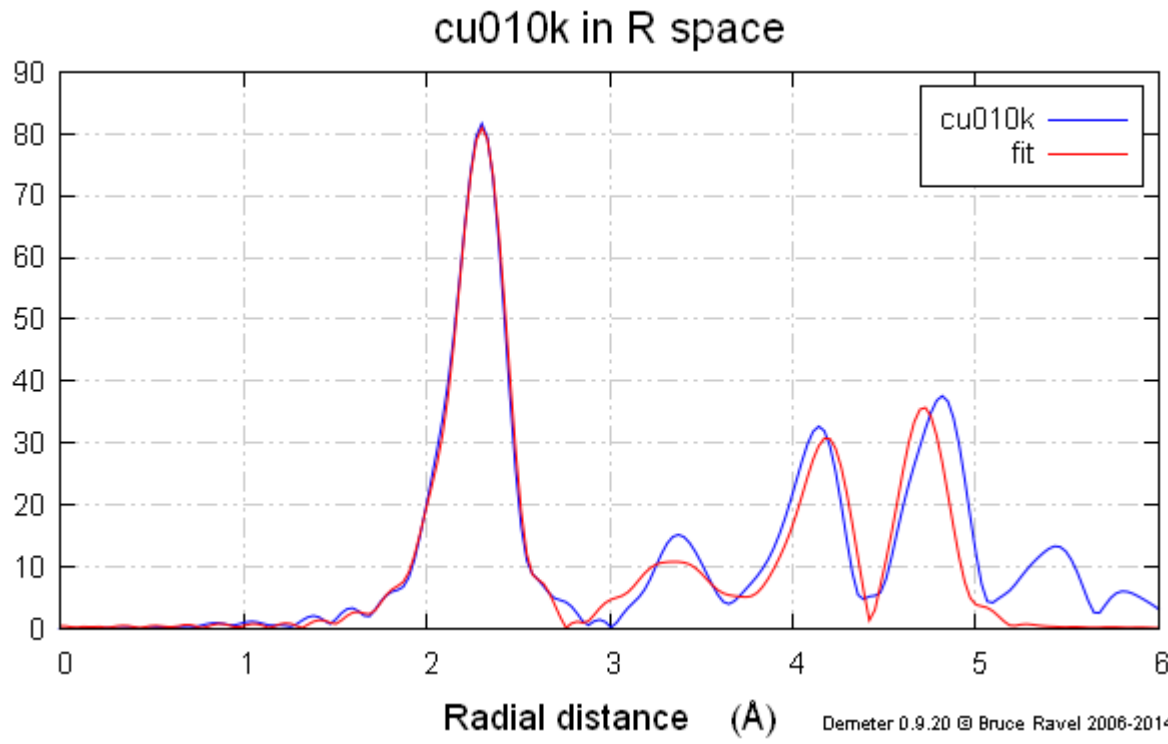


1数据操作窗口：扩大rmax至5.1A；
2将R小于5.4A的单散路径（leg=2）添加到pathlist中；
利用绘图窗口，确认路径对需要拟合的区域有贡献；

多壳层拟合-Cu

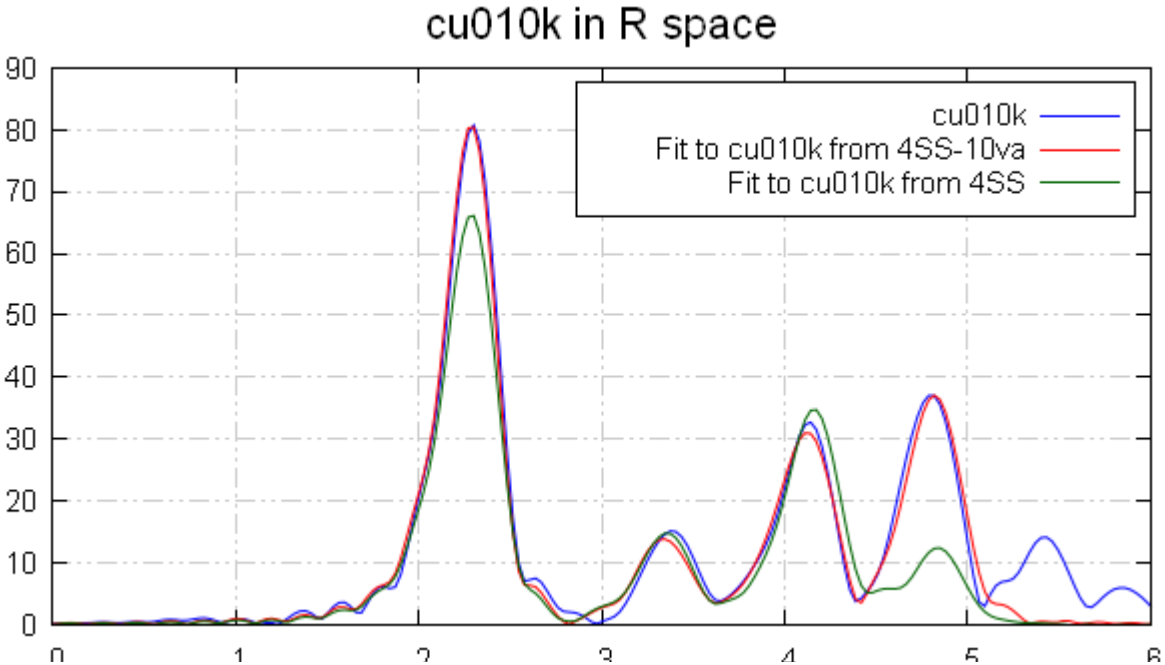


	Type	Name
1	guess	ampcu4st
2	guess	E0cu
3	guess	delrcu4st
4	guess	sscu4st
5	guess	ampcu3st
6	guess	delrcu3st
7	guess	sscu3st
8	guess	ampcu2st
9	guess	delrcu2st
10	guess	sscu2st
11	guess	ampcu1st
12	guess	delrcu1st
13	guess	sscu1st



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）

多壳层拟合-Cu



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（ △R=alpha*reff ）vs 使用4个拟合参量

多壳层拟合-Cu

Nidp≈2△k△R/π 最大对立拟合参数个数例：

k-range 2.3-20.3； R-range 1.7-5.1 Nidp≈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Nvar＞Nidp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 Nidp

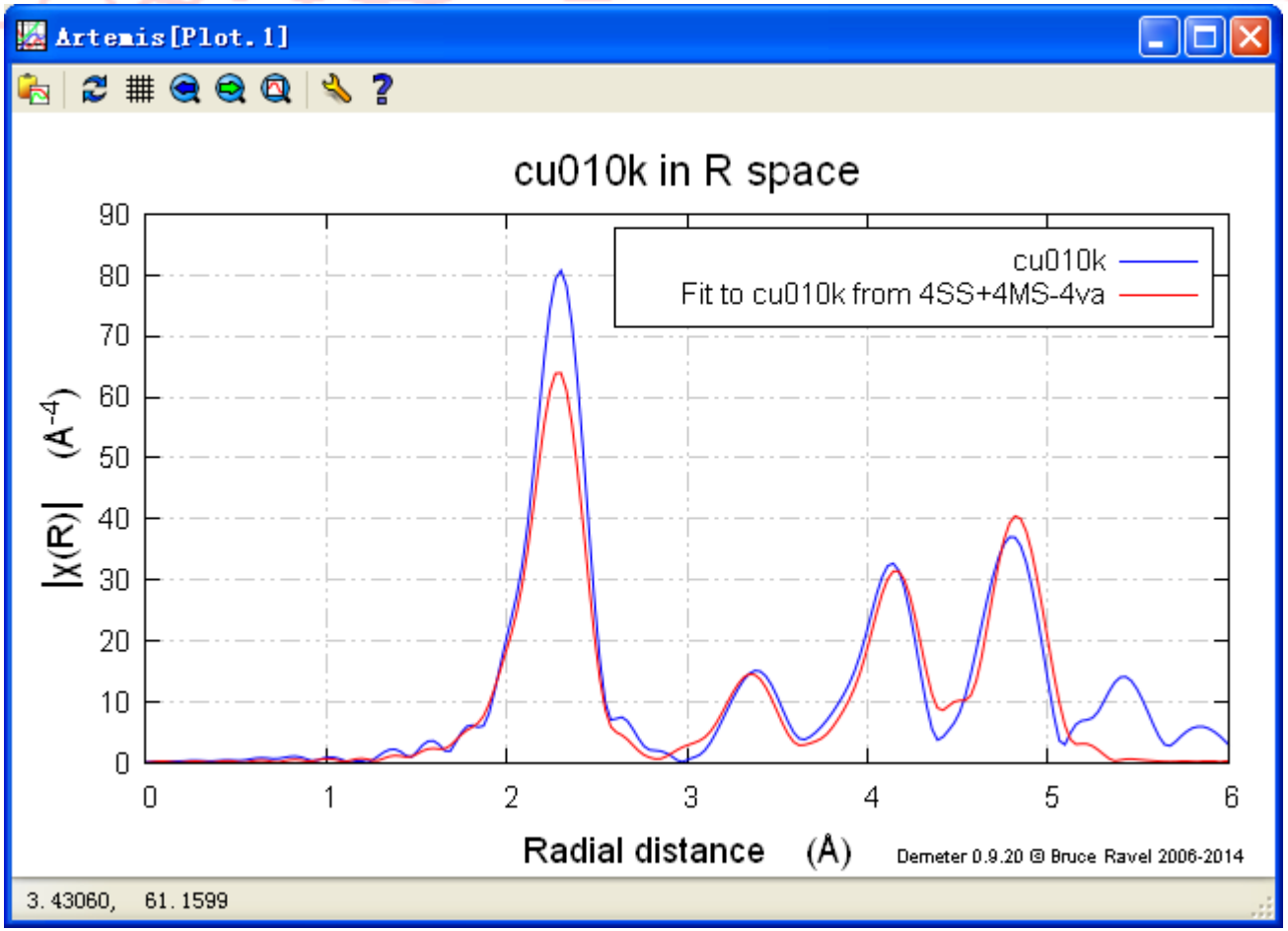
独立节点概念！！！

多壳层拟合-Cu

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sigma^2可设成统一
相同原子△E0可设成统一
配位数可以通过模型限定或合理限定
△R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

多壳层拟合-Cu

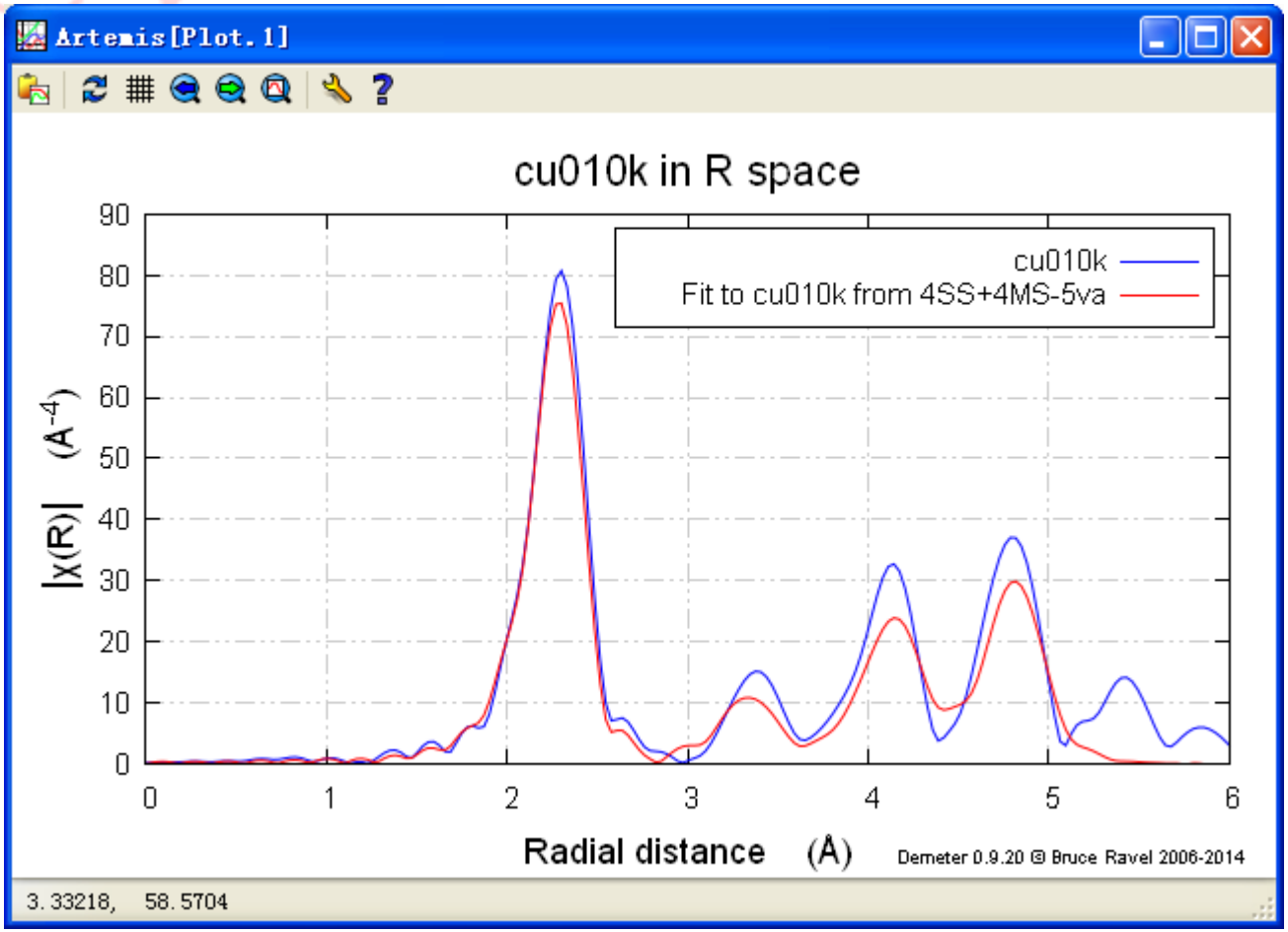
数据处理



路径选取：增加了键长4-5.4A的3leg MS 共4条

参数设置：统一S02、△E0、sigma^2，△R=alpha*reff

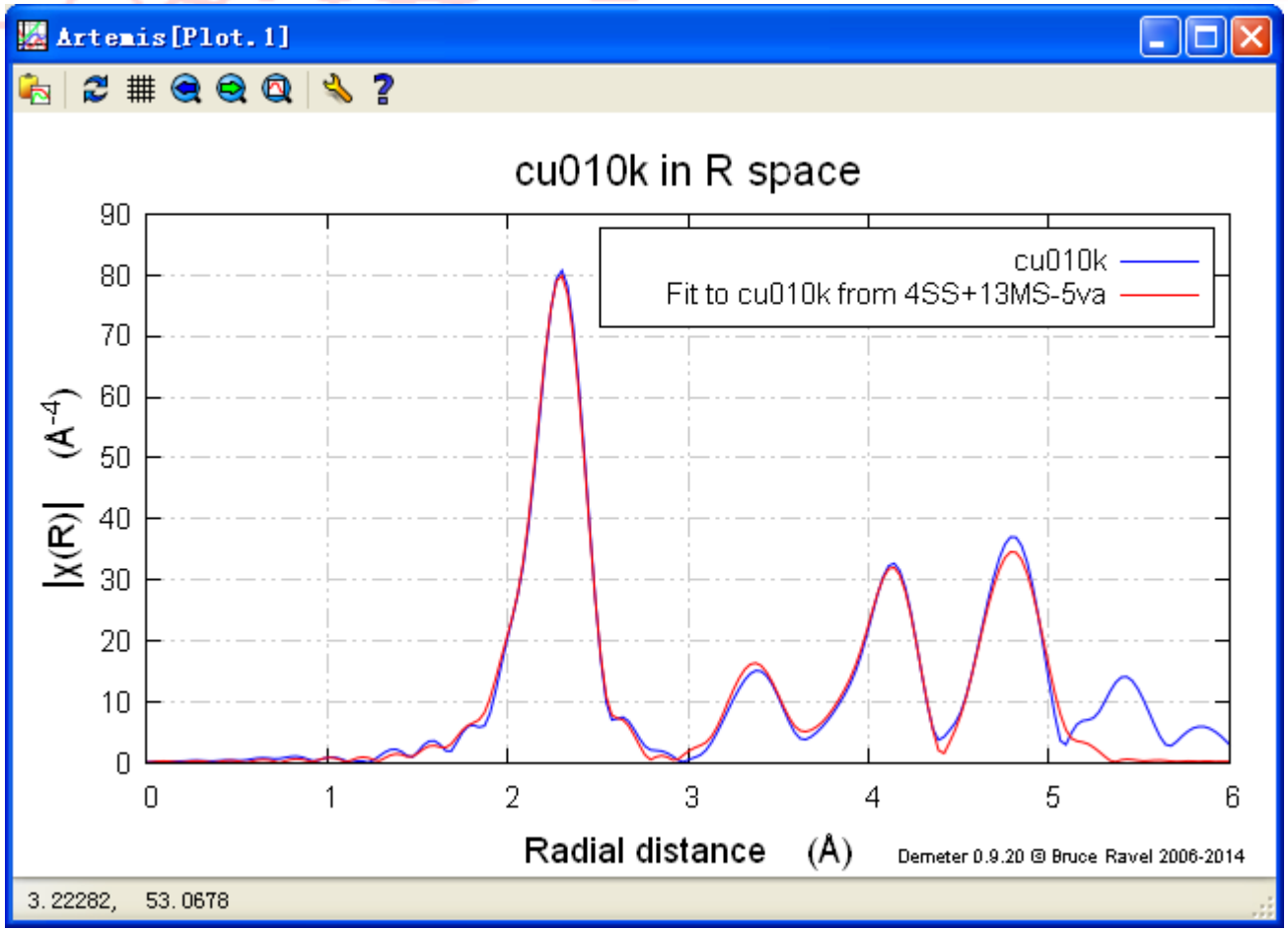
多壳层拟合-Cu



参数设置：将1st path的ss 设置成独立

多壳层拟合-Cu

数据处理



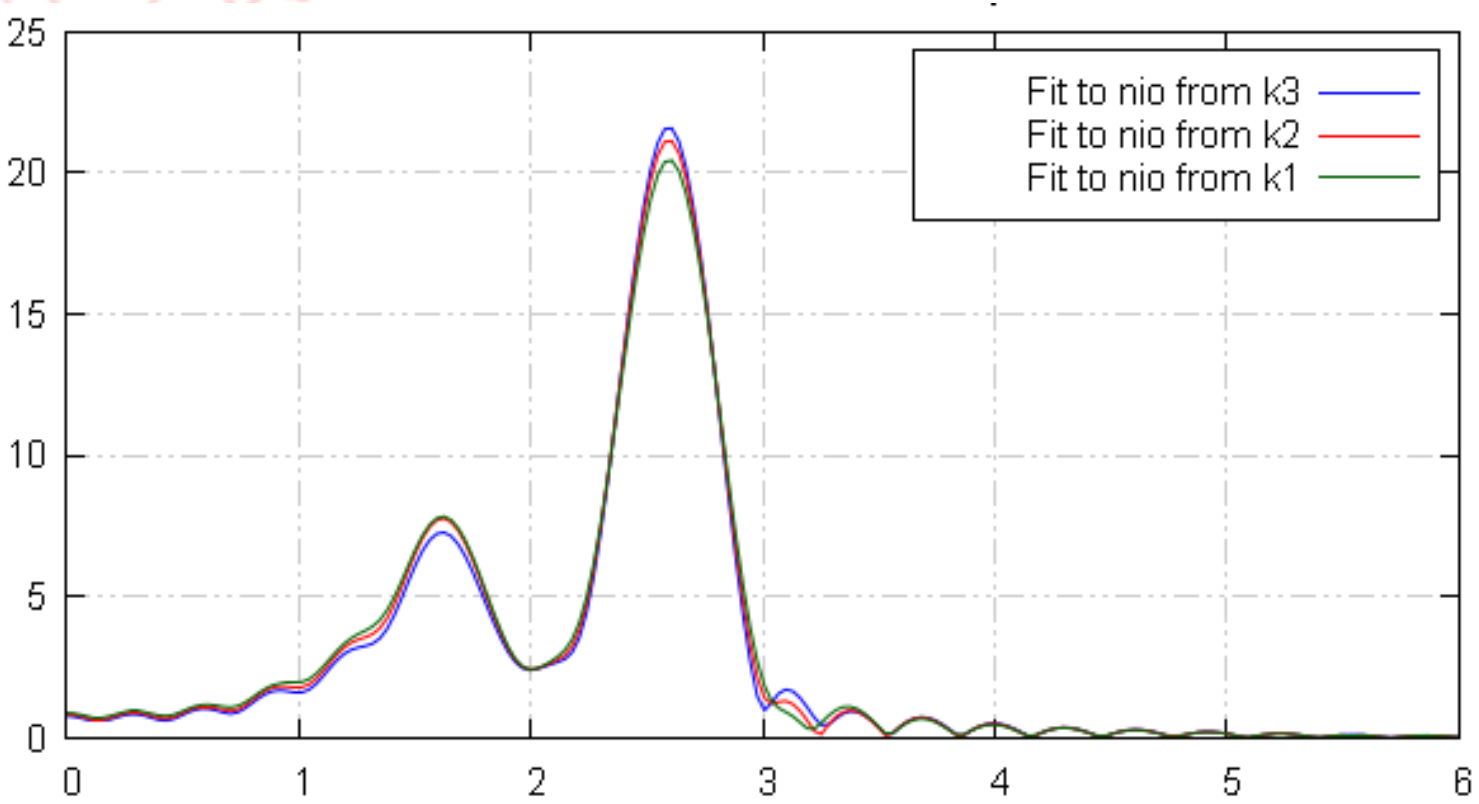
路径选取：增加了键长小于5.4A的 MS 共9条

参数设置：统一S02、△E0、sigma^2，△R=alpha*reff；1stpath sigma^2 独立；

主要内容：

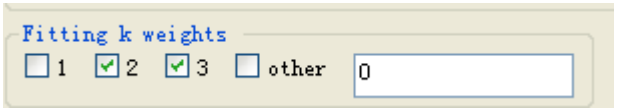
- 软件简介
- 数据处理
  - a 单壳层拟合
  - b 多壳层拟合
  - c 多权重拟合
  - d 多Feff拟合
- 注意点及小技巧
- 上机练习

多权重拟合-NiO

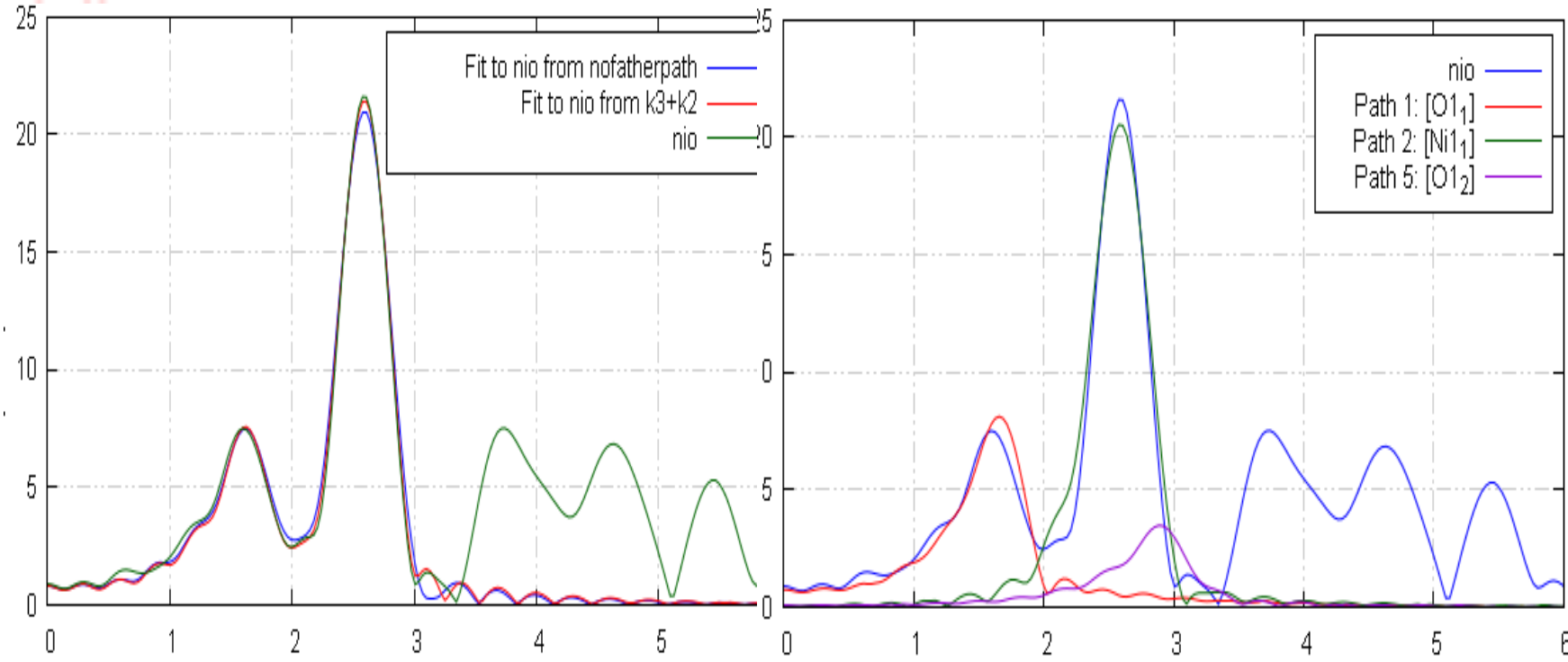


不同原子对于k的响应不同；sigma^2、△R、△E0对k的响应为非线性；

数据操作窗口左下：



多权重拟合-NiO



3.6A路径对3A路径的一个作用

主要内容：

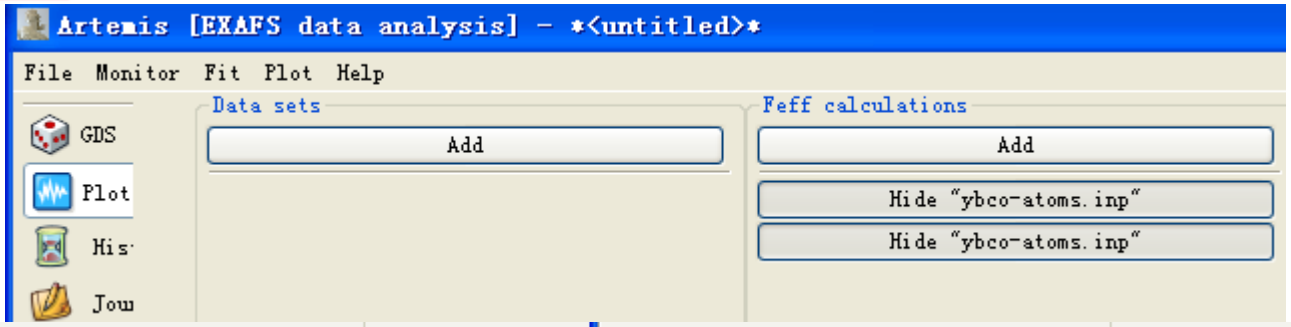
- 软件简介
- 数据处理
  - a 单壳层拟合
  - b 多壳层拟合
  - c 多权重拟合
  - d 多Feff拟合
- 注意点及小技巧
- 上机练习

多Feff拟合

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        0.5      0        O1
   O       0        0        0.1589   O2
   O       0        0.5      0.3780   O3
   O       0.5      0        0.3783   O4
```

多Feff拟合



	Core	El.	x	y	z
1	☐	Y	0.5	0.5	0.5
2	☐	Ba	0.5	0.5	0.184
3	☑	Cu	0	0	0
4	☐	Cu	0	0	0.356
5	☐	O	0	0.5	0
6	☐	O	0	0	0.158
7	☐	O	0	0.5	0.379
8	☐	O	0.5	0	0.377

	Core	El.	x	y	z	Tag
1	☐	Y	0.5	0.5	0.5	Y
2	☐	Ba	0.5	0.5	0.184	Ba
3	☐	Cu	0	0	0	cu1
4	☑	Cu	0	0	0.356	cu2
5	☐	O	0	0.5	0	o1
6	☐	O	0	0	0.158	o2
7	☐	O	0	0.5	0.379	o3
8	☐	O	0.5	0	0.377	o4

Label	Reff=1.927, nleg=2, degen=2
N	2
$S0^2$	1/3*ampsite1
$\Delta E0$	enoto
ΔR	alpha*reff
σ^2	sssite1

Label	Reff=1.846, nleg=2, degen=2
N	2
$S0^2$	2/3*ampsite2
$\Delta E0$	enoto
ΔR	alpha*reff
σ^2	sssite2
Ei	
3rd	

多Feff拟合

Label	Reff=1.927, nleg=2, degen=2
N	2
$S0^2$	1/3*ampsite1
△E0	enoto
△R	alpha*reff
σ^2	sssite1

Label	Reff=1.846, nleg=2, degen=2
N	2
$S0^2$	2/3*ampsite2
△E0	enoto
△R	alpha*reff
σ^2	sssite2

XAFS信号获取的信息为样品的统计平均值

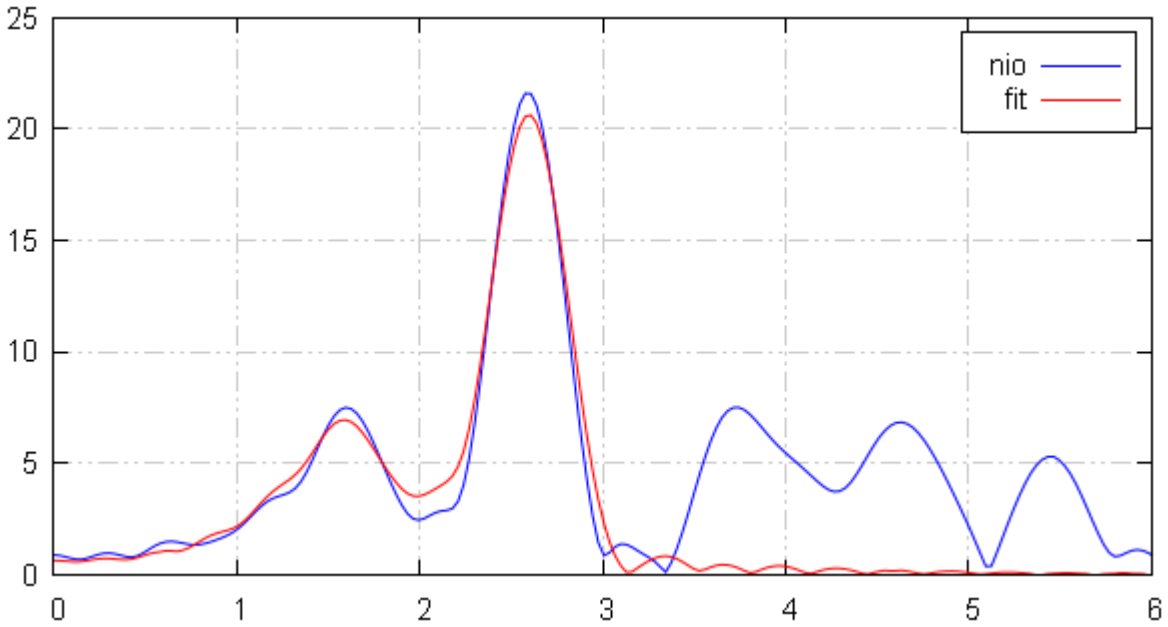
修正拟合参数（占位1 配位数*1/3，占位2 配位数*2/3）

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

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]

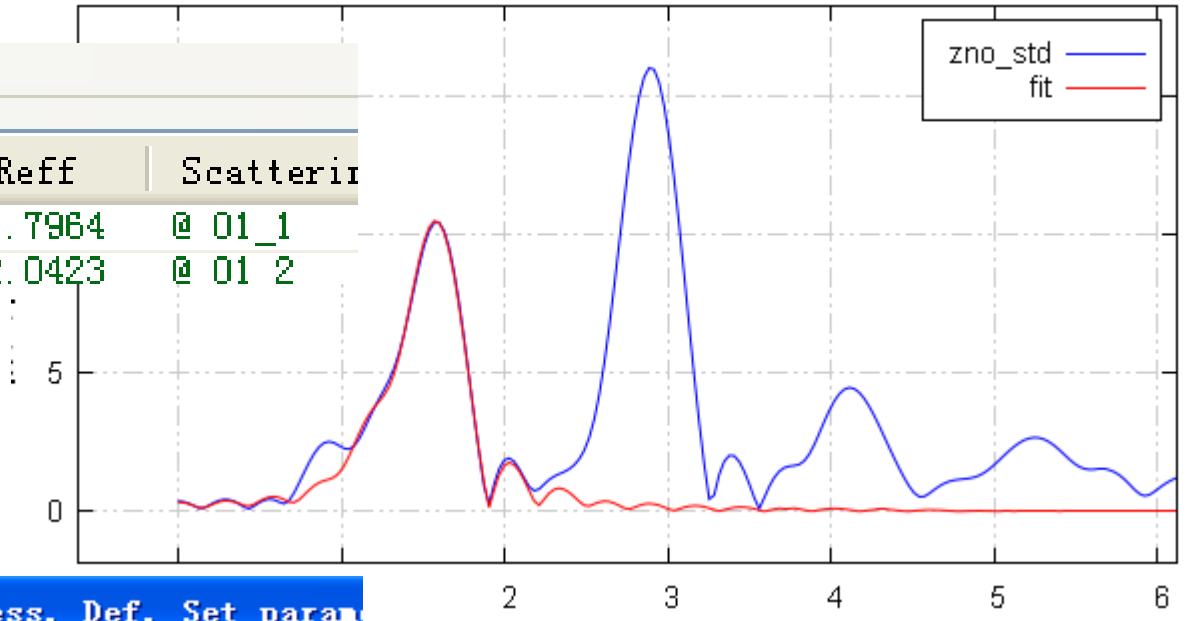
例子2:壳层很接近

ZnO 第一配位拟合

北京同步辐射装置
Beijing Synchrotron Radiation Facility

Scattering Paths

	Degen	Reff	Scatterir
0000	1.000	1.7964	@ 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	# +/- 0.023093
alpha	= -0.03166901	# +/- 0.00702
ss2	= 0.00406466	# +/- 0.001586
amp2	= 1.11763518	# +/- 0.33260

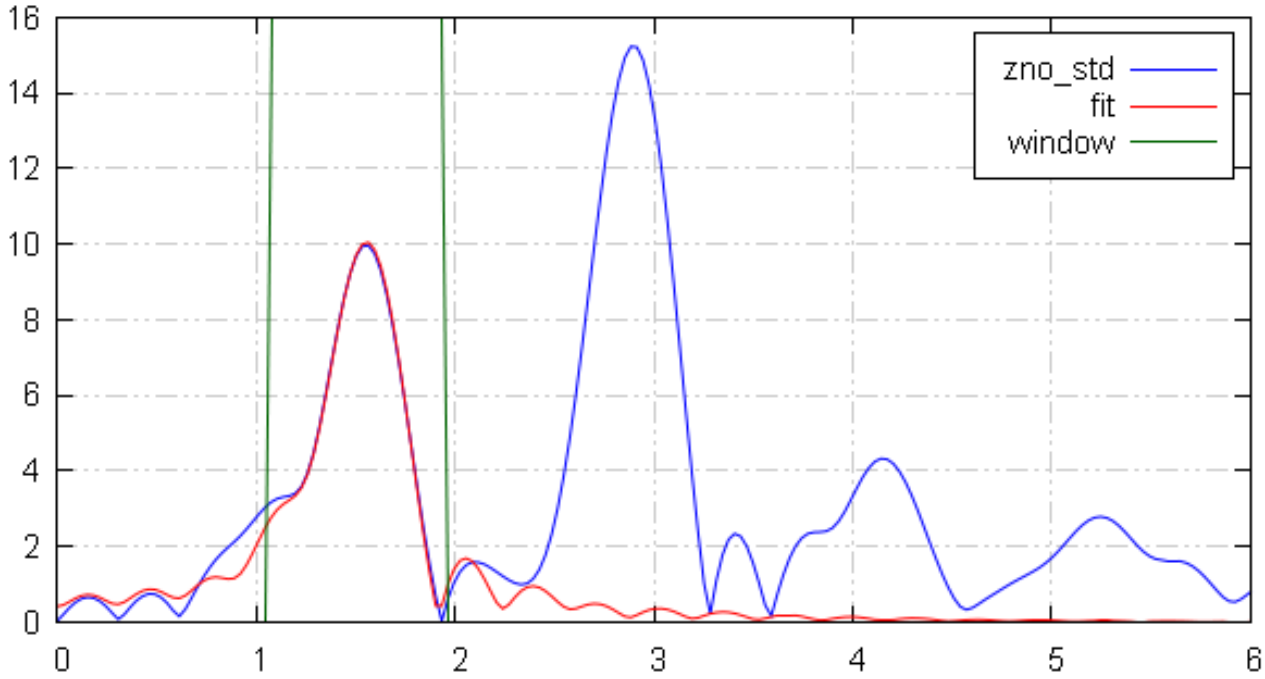
X射线吸收谱学实验和数据分析讲习班

武汉·2014

中国科学院高能物理研究所

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	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	def	amp2	3*amp1
9	guess		
10	guess		

guess parameters:

amp1 = 0.41601459

enot = 5.23135495

ss1 = 0.19461402

alpha = -0.03403929

ss2 = 0.00454527

def parameters:

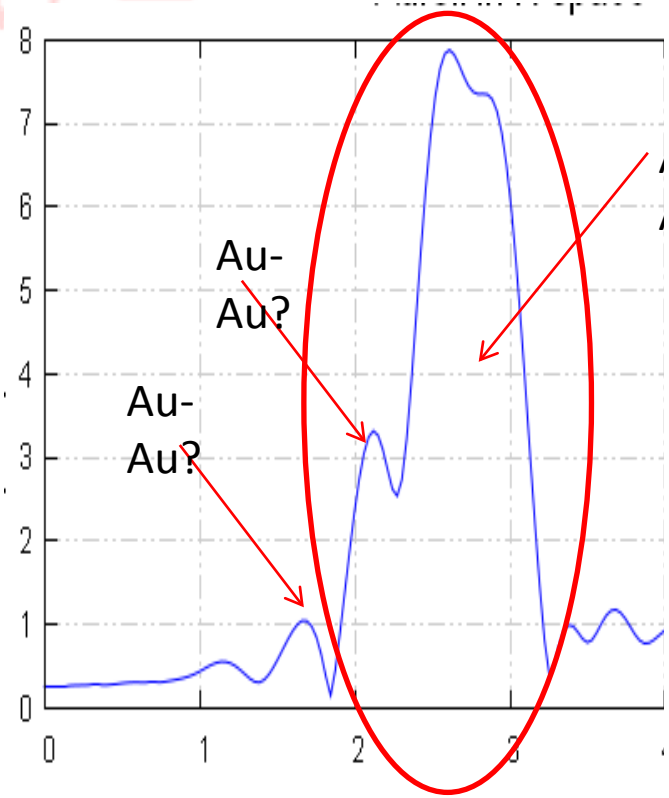
delr1 = -0.06951845

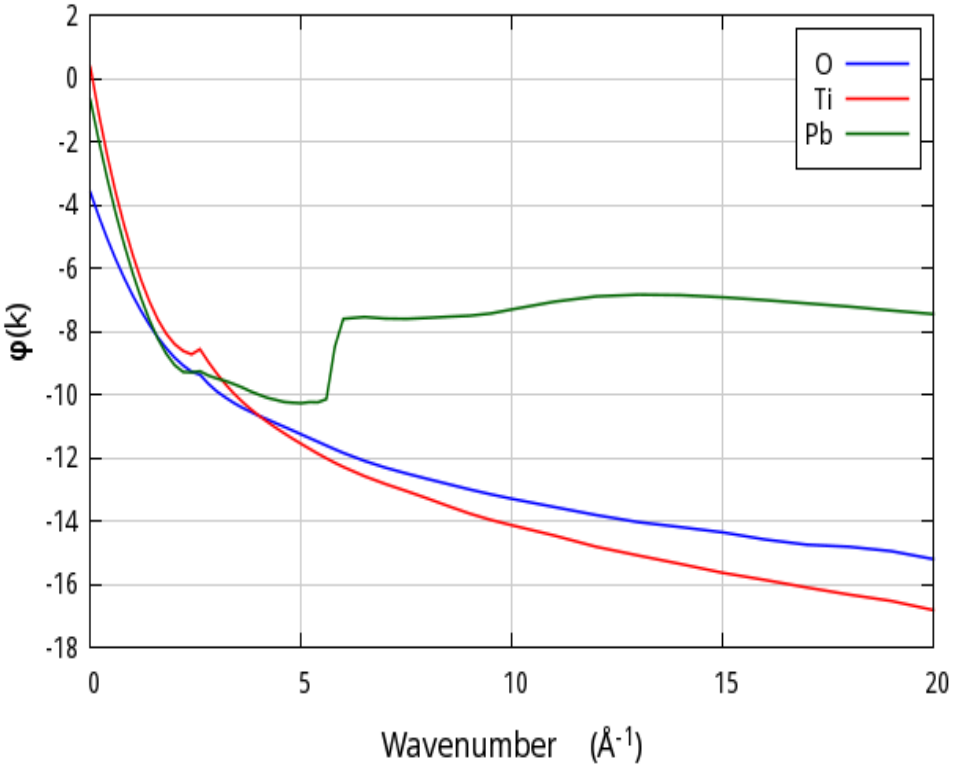
delr2 = -0.06951845

amp2 = 1.24804377

例子3:重金属峰劈裂

Aufoil 第一配位拟合

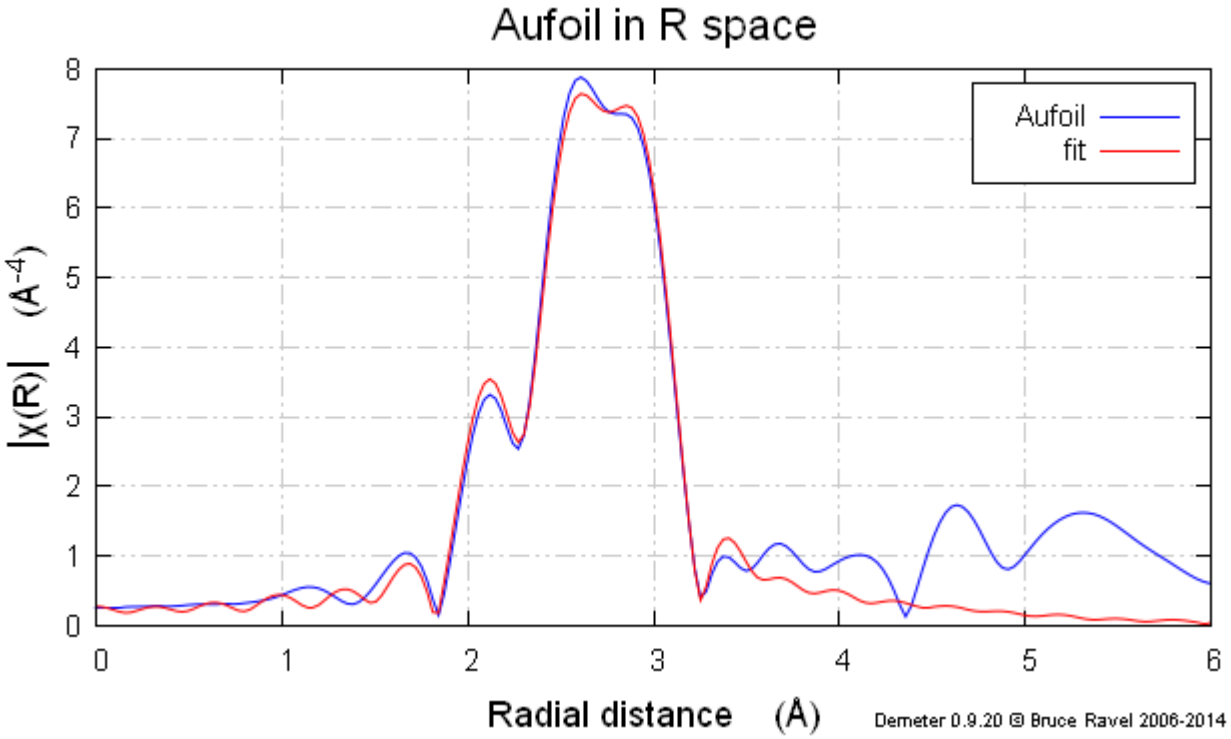




重金属的相移因子存在突变，会使得其配位峰在R空间表现出峰的劈裂

例子3:重金属峰劈裂

Aufoil 第一配位拟合

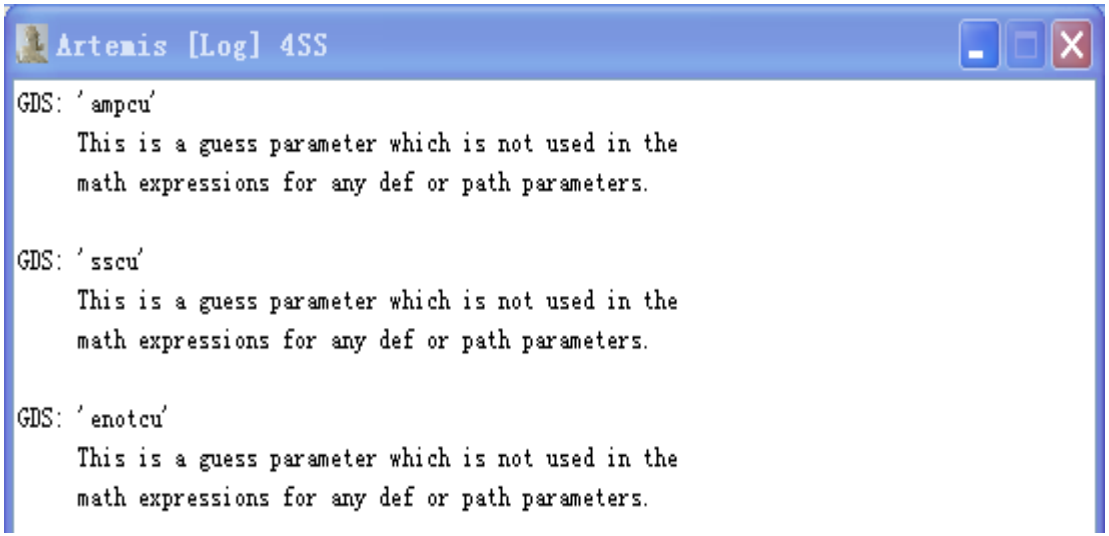


guess parameters:

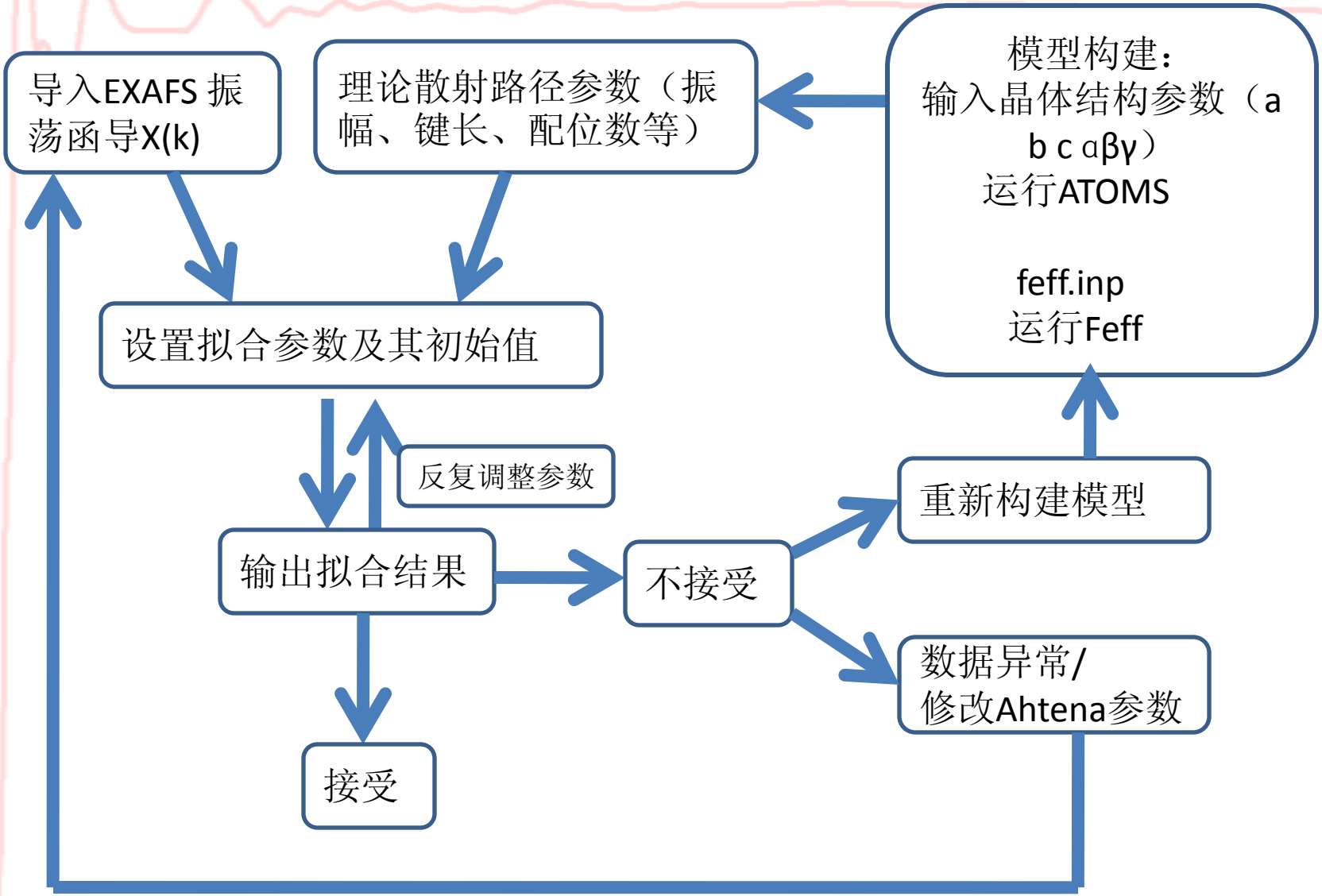
amp	= 0.75277174	# +/- 0.03214521	[1.00000]
enot	= 4.28305889	# +/- 0.42210268	[0]
delr	= -0.02419204	# +/- 0.00196120	[0]
ss	= 0.00751967	# +/- 0.00023077	[0.00300]

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
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.

ARTEMIS 处理流程



良好的数据
准确的模型

上机练习：CO304 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 *V* [nm^3]
a = 0.8083 *b* = 0.8083 *c* = 0.8083	*α* = 90 *β* = 90 *γ* = 90	*a*/*b* = 1.000 *b*/*c* = 1.000 *c*/*a* = 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 *V* [nm^3]	Lattice Constant [nm]	Angle [°]	Constants' Ratio	Volume *V* [nm^3]
a = 0.8083 *b* = 0.8083 *c* = 0.8083	*α* = 90 *β* = 90 *γ* = 90	*a*/*b* = 1.000 *b*/*c* = 1.000 *c*/*a* = 1.000	0.5281	*a* = 0.57155 *b* = 0.57155 *c* = 0.57155	*α* = 60. *β* = 60. *γ* = 60.	*a*/*b* = 1.000 *b*/*c* = 1.000 *c*/*a* = 1.000	0.13202

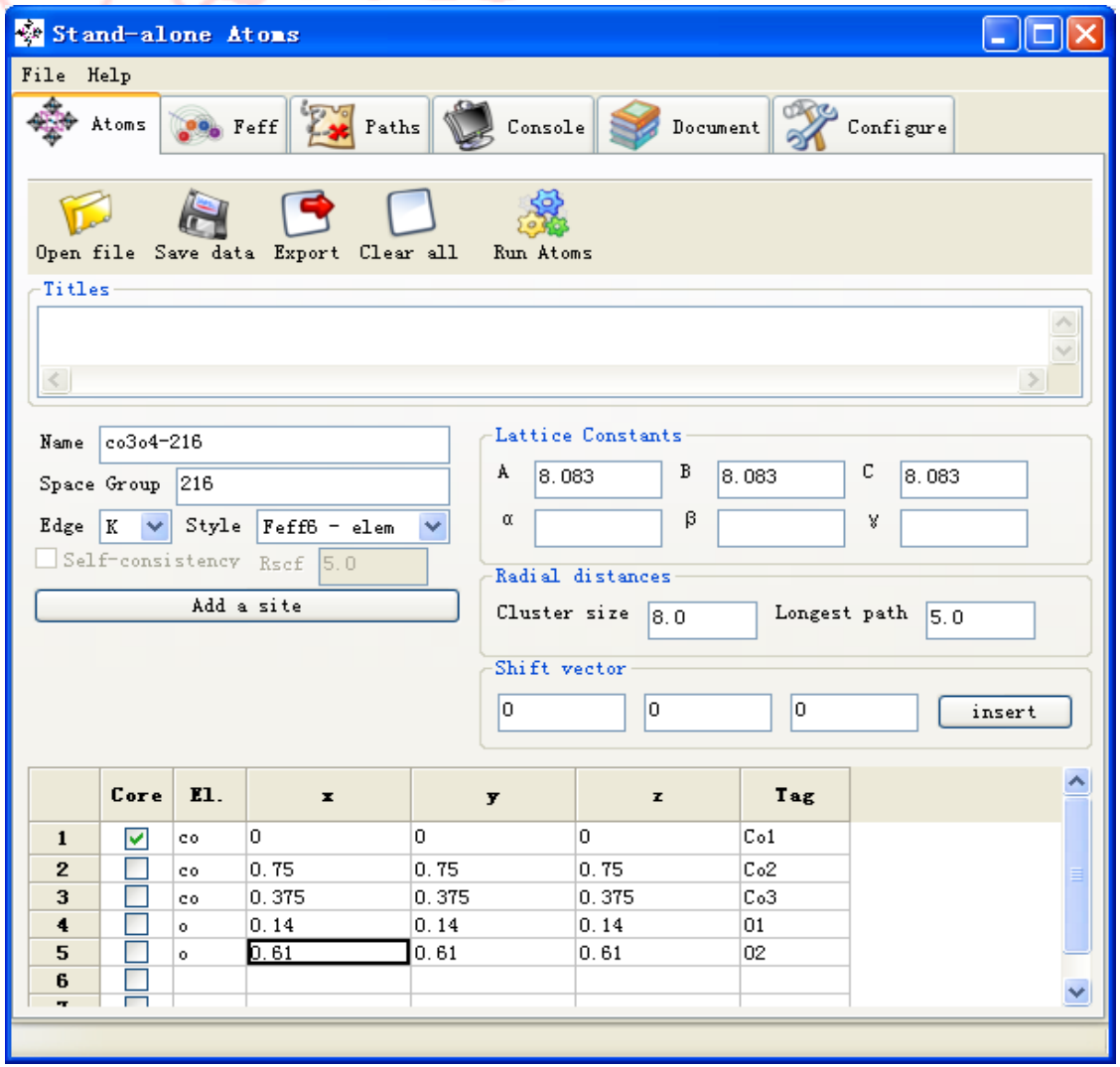
Atom Coordinates:

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

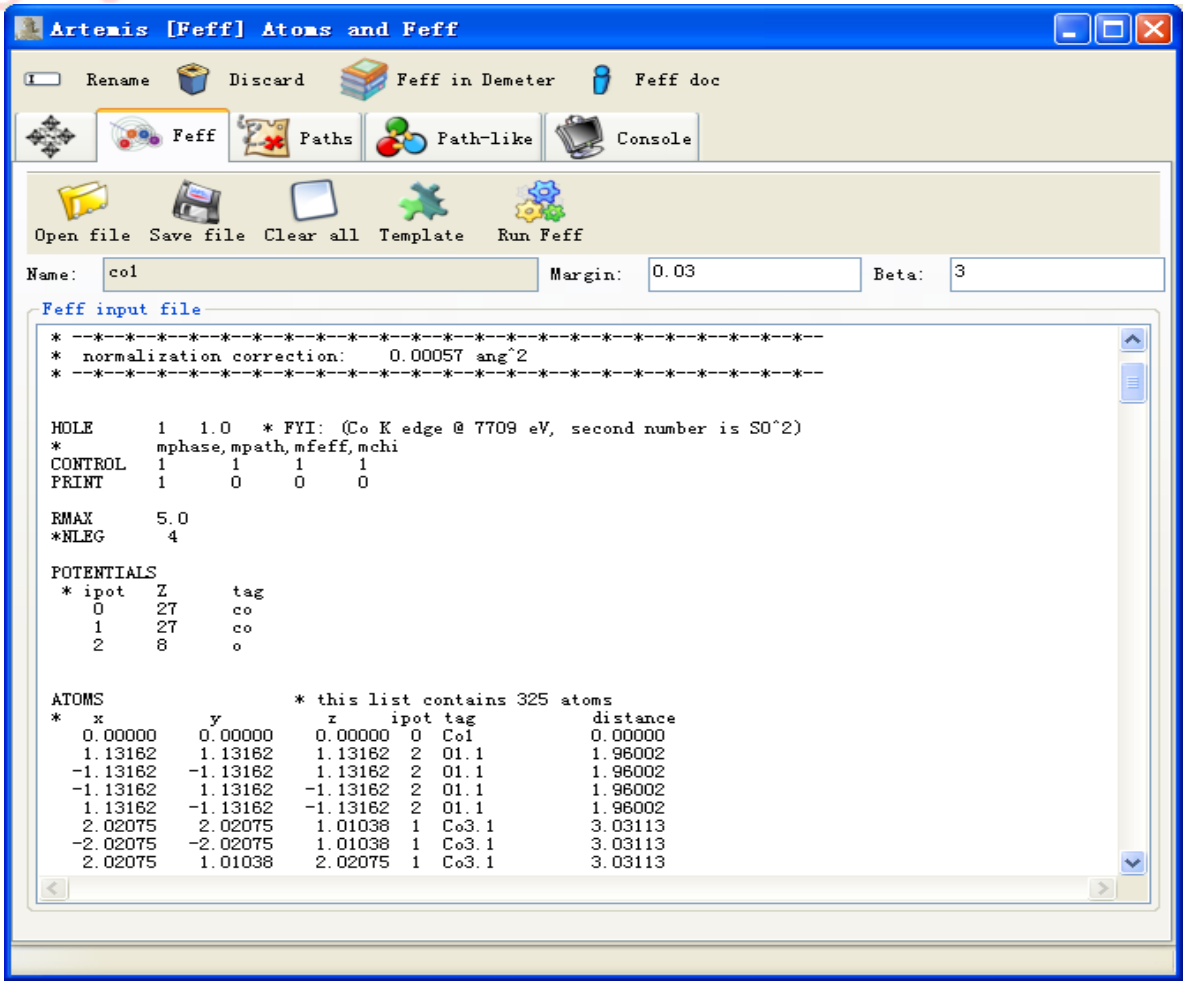
Note: Atom coordinates assigned by the editor.

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

上机练习：CO3O4 拟合演示

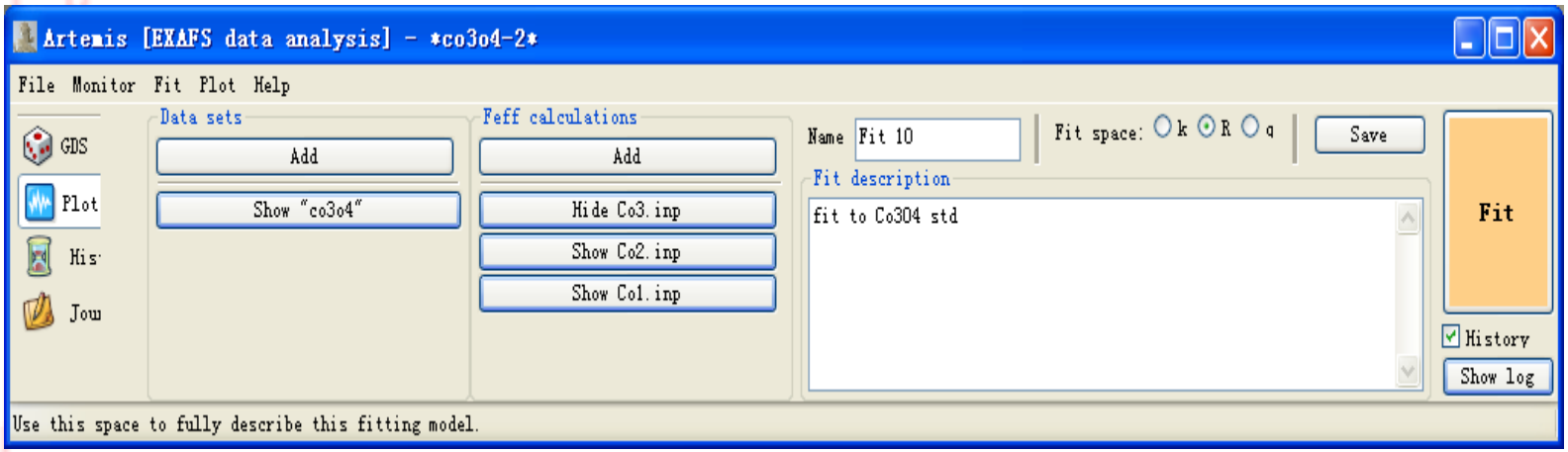


上机练习：CO304 拟合演示



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

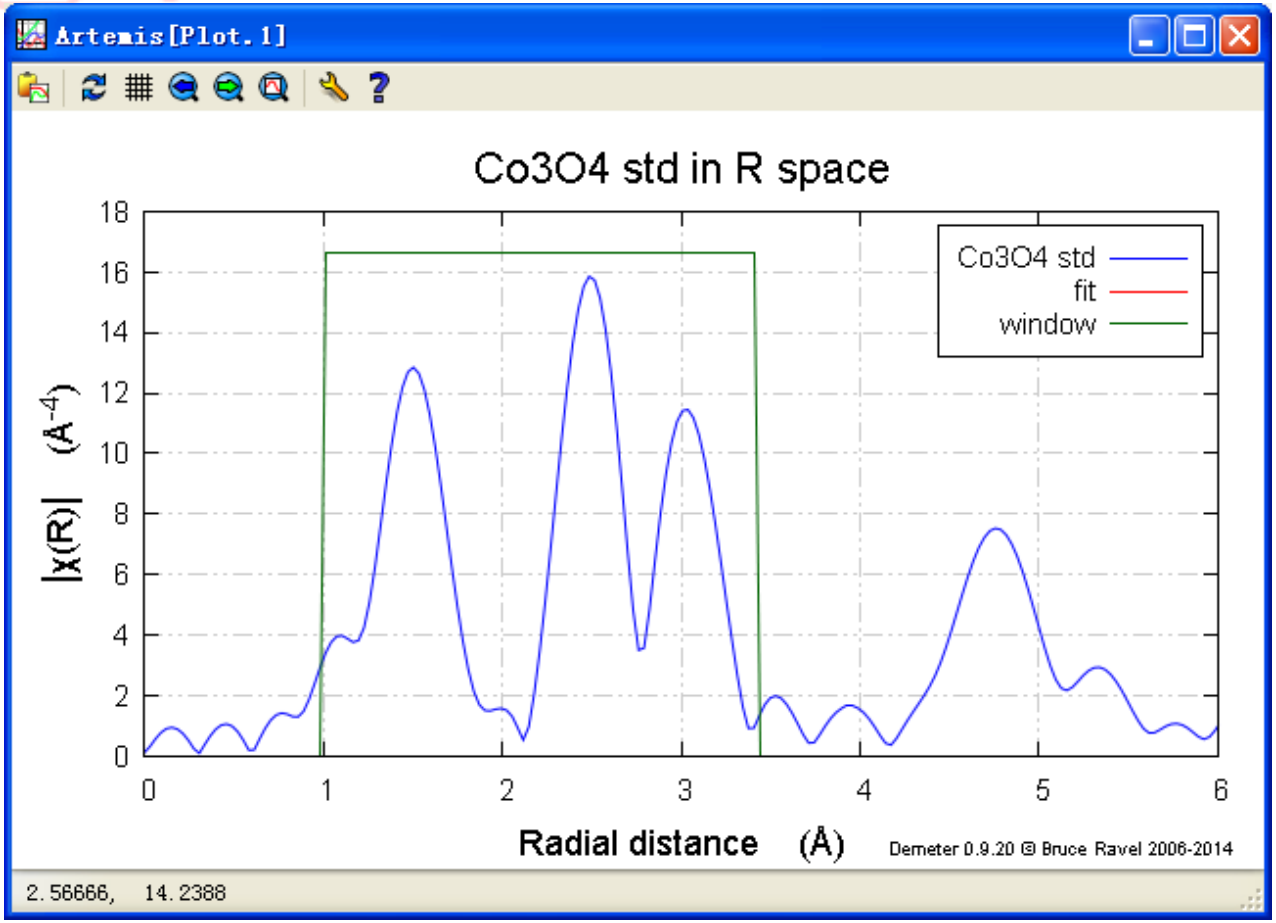
上机练习：CO3O4 拟合演示



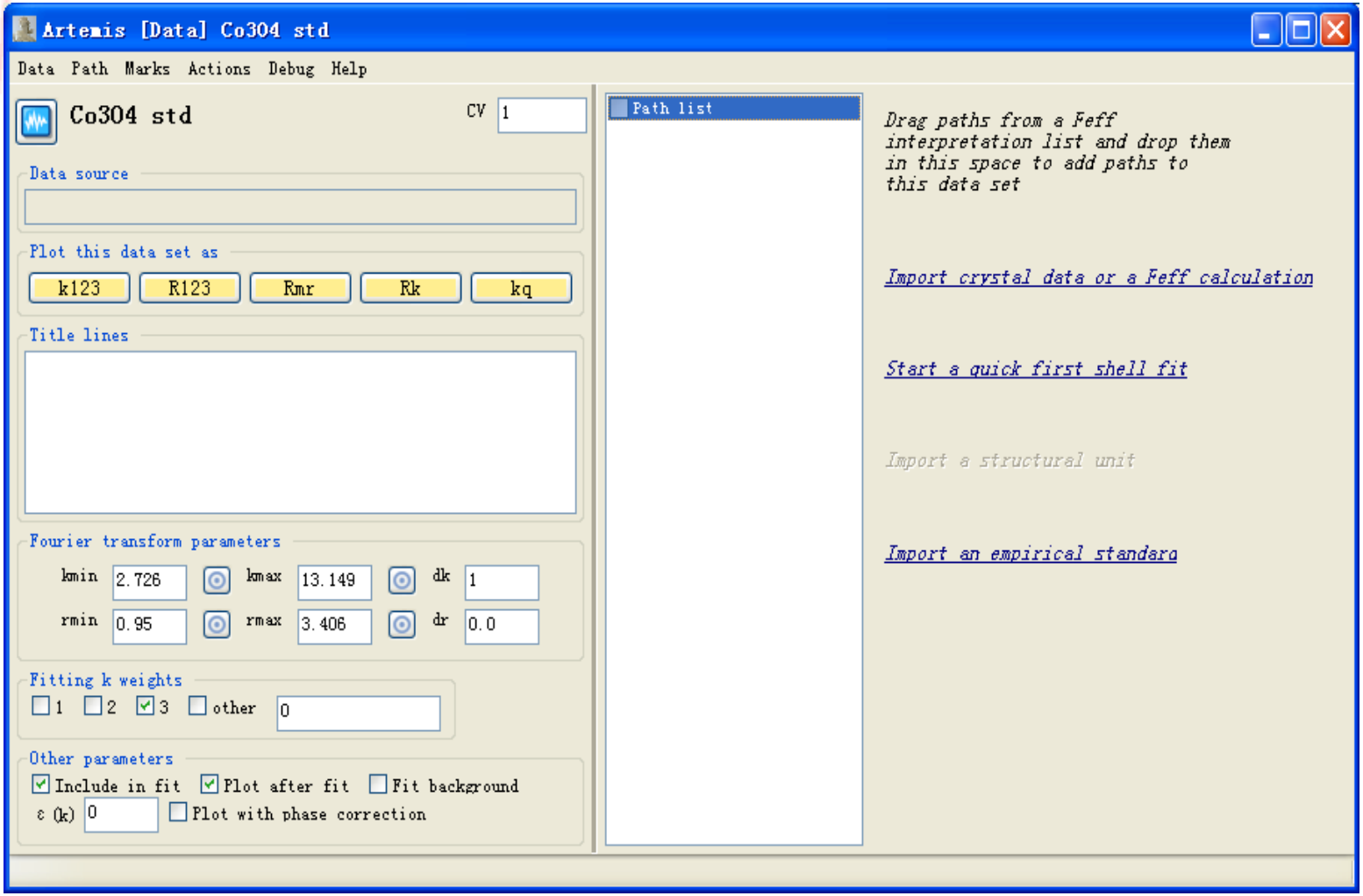
Data sets Add已处理好的Co3O4.prj
Feff calculation Add 保存的 co1.inp， co2.inp， co3.inp

弹出下述窗口

上机练习：CO3O4 拟合演示

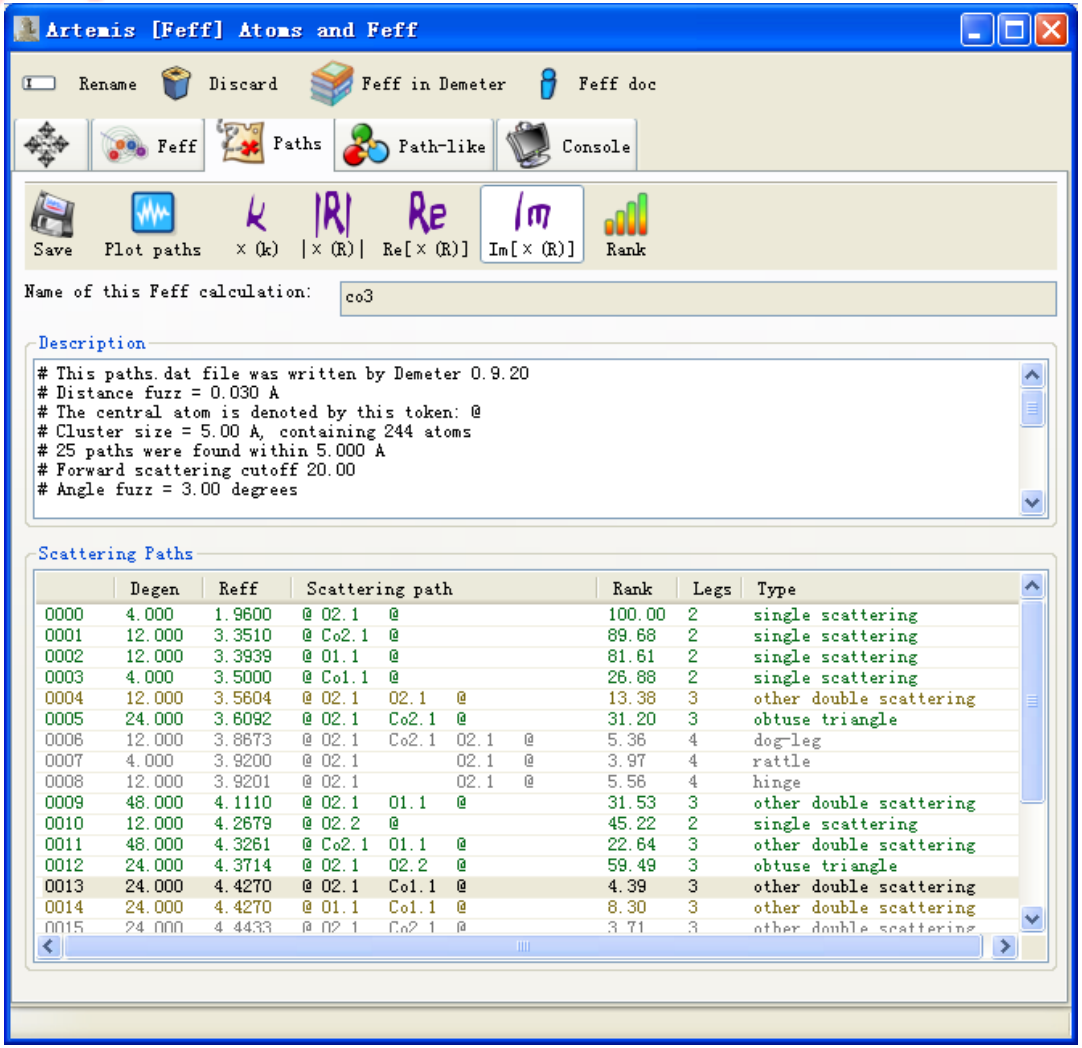


上机练习：C0304 拟合演示



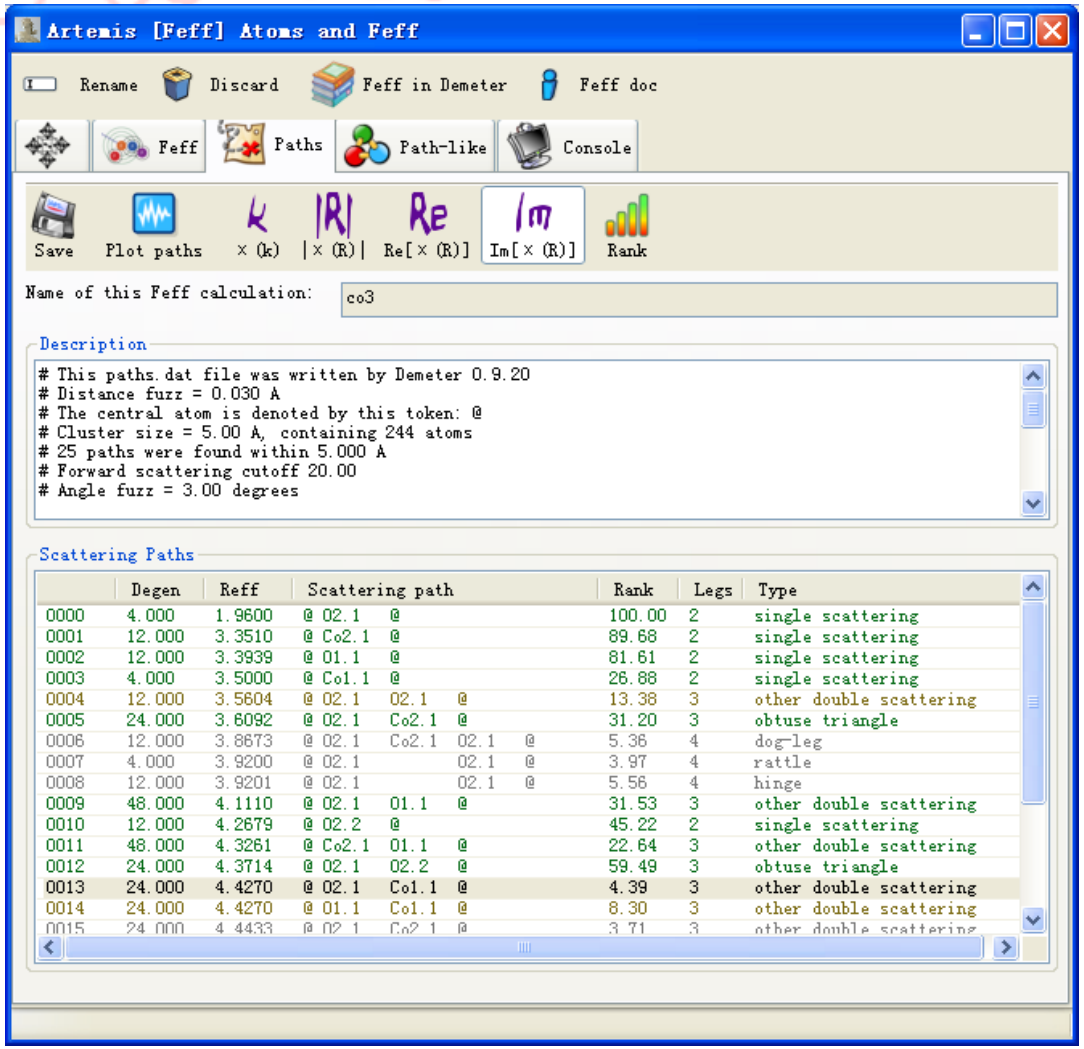
此时自由节点数为16.3

上机练习：C0304 拟合演示



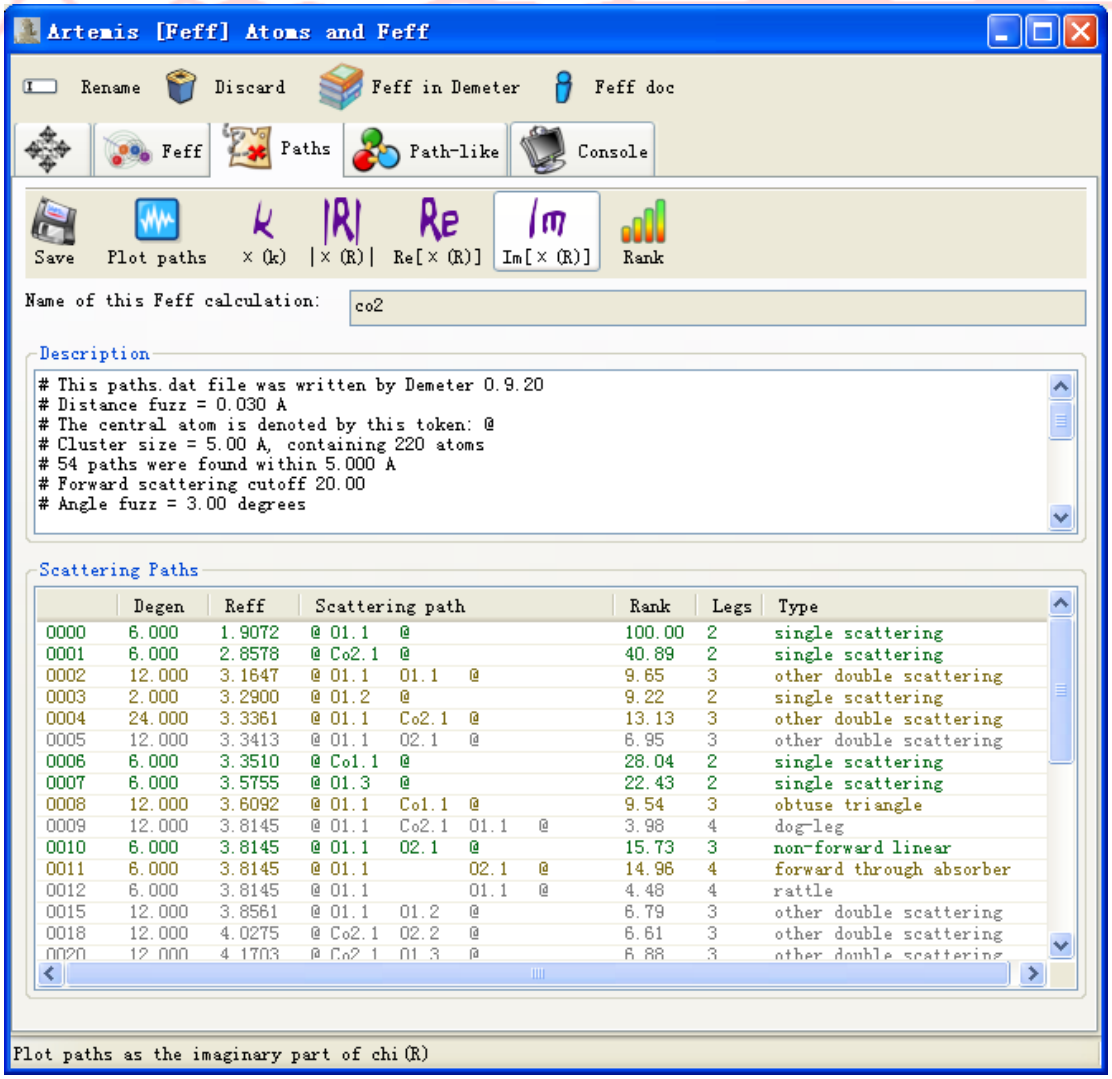
Co1.inp

上机练习：CO304 拟合演示



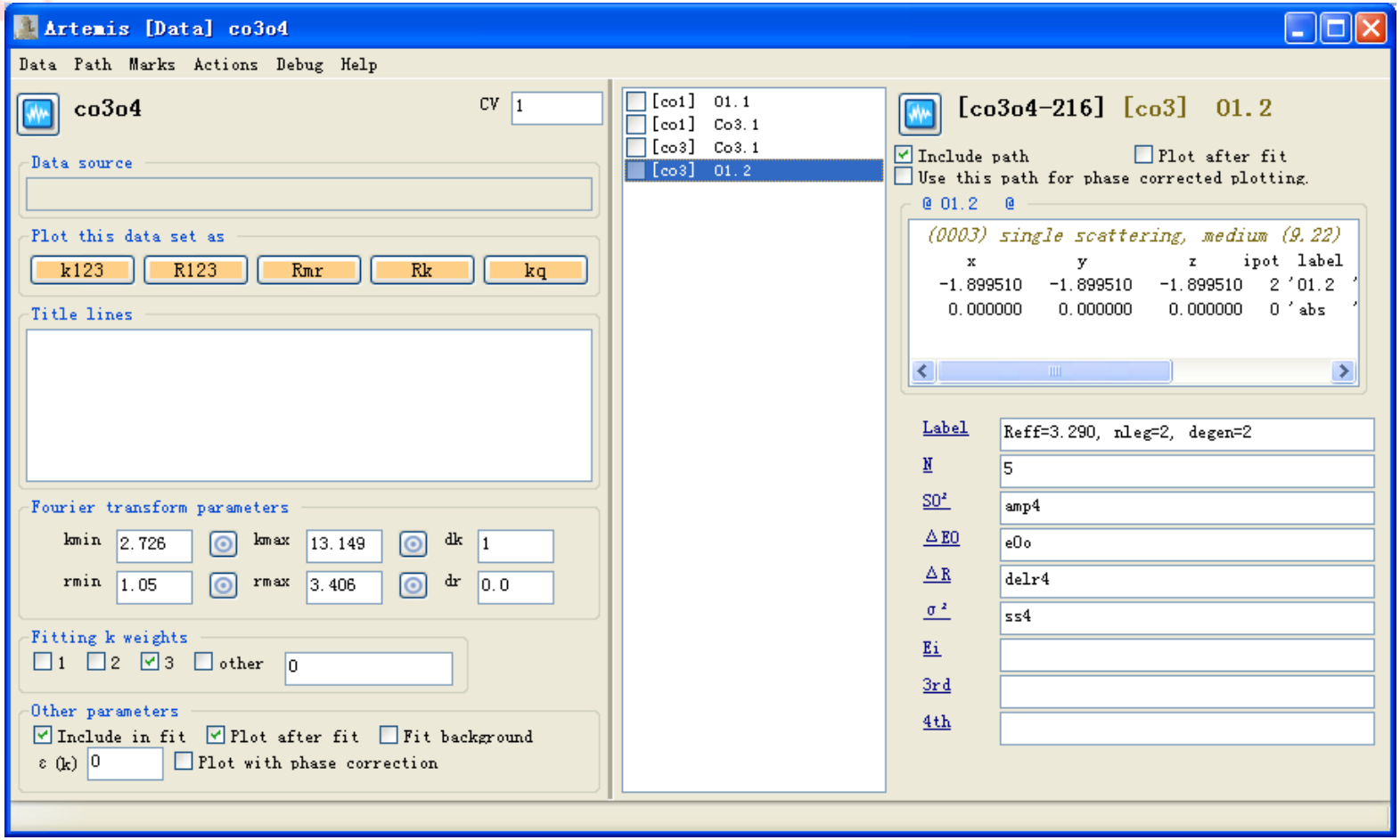
Co2.inp

上机练习：C0304 拟合演示



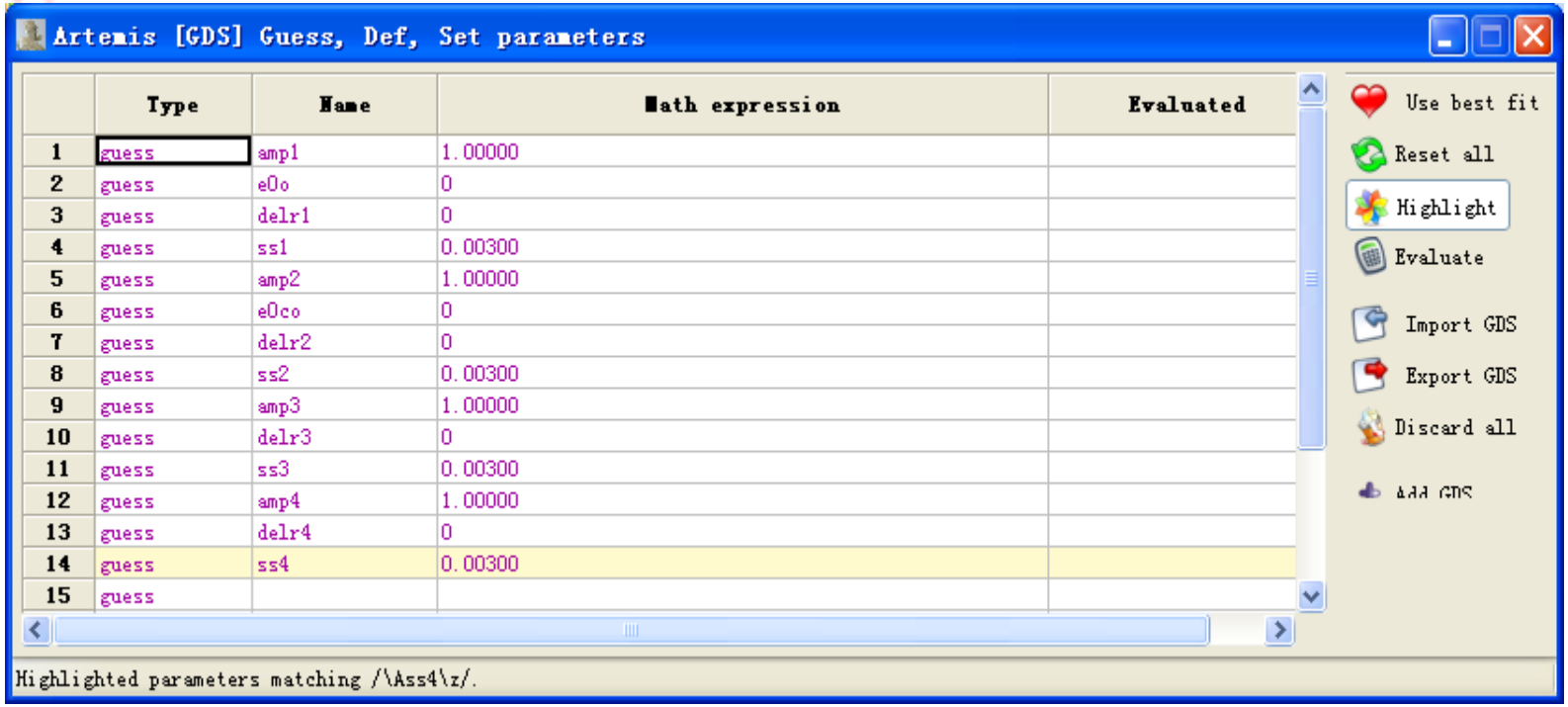
Co3.inp

上机练习：CO3O4 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



	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			

将Co-O 键的 ΔE0 都定义为e0o，将Co-Co键的的 ΔE0 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

修正配位数：

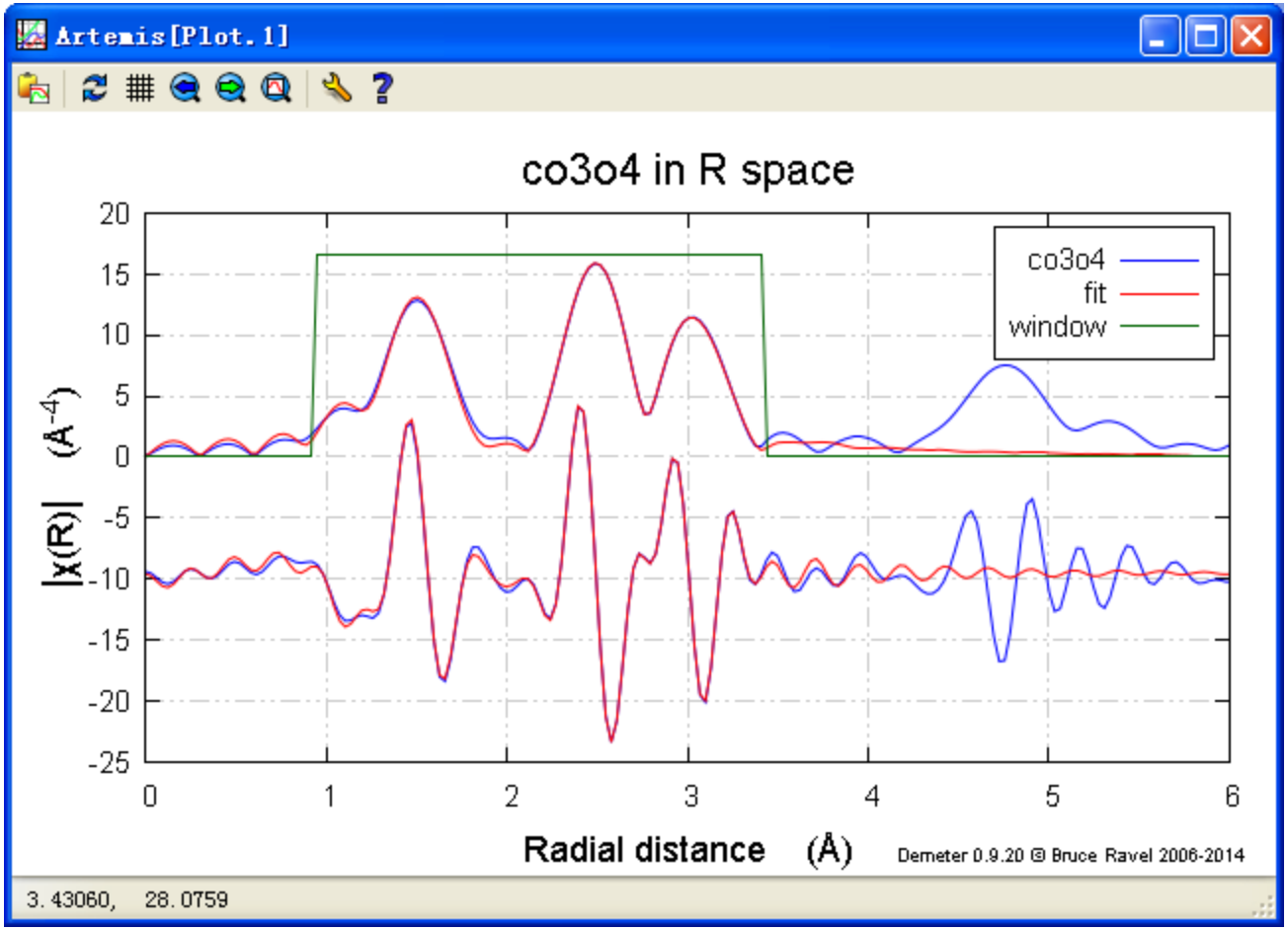
Co-O： 1.96A (4X2+6)/3 ≈5

Co-Co: 3.35A (12X2+6)/3=10

Co-Co: 2.86A 6/3 =2

Co-O： 3.29 (2X2+12)/3 ≈5

上机练习：CO3O4 拟合演示



上机练习：CO304 拟合演示

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；

谢谢