

# Моделирование NEXAFS-спектров некоторых углеродсодержащих веществ и углеродных материалов вблизи $K$ -края поглощения углерода с помощью пакета FDMNES

П. А. Макаров, С. В. Некипелов, В. Н. Сивков

XV Международная школа-конференция молодых учёных



20 октября 2023 г.



- 1 Введение
- 2 Основы XAS
- 3 Моделирование NEXAFS-спектров с помощью FDMNES
- 4 Заключение

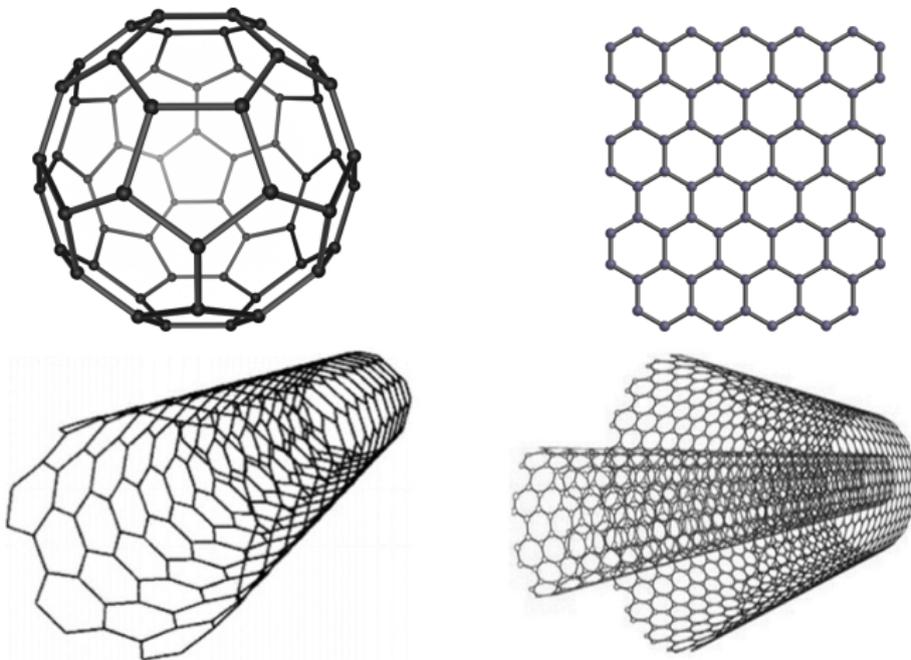
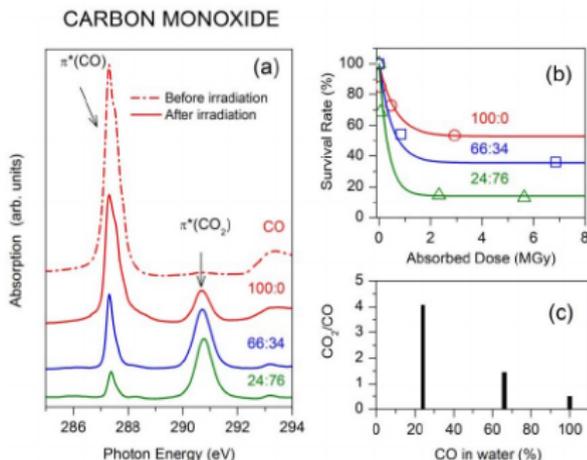


Рис. 1: Самые известные углеродные 0D-, 1D- и 2D-материалы

**NEXAFS : a unique tool to follow the photochemistry of small organic molecules in condensed water**Ph Parent<sup>1</sup>, C Laffon<sup>1</sup>, F Bournel<sup>1</sup>, J Lasne<sup>1</sup> and S Lacombe<sup>2</sup><sup>1</sup>Laboratoire de Chimie–Physique, Matière et Rayonnement, Université Pierre et Marie Curie (UPMC–Univ Paris 06) and CNRS (UMR 7614), 11 rue Pierre et Marie Curie, 75231 Paris Cedex 05, France - <sup>2</sup>Institut des Sciences Moléculaires d'Orsay, ISMO (FRE 3363), 91405 Orsay Cedex, France and Université Paris Sud 11, CNRS–Bât 351, 91405 Orsay Cedex, France.

**Figure 1.** (a) C K-edge NEXAFS spectra of CO:H<sub>2</sub>O mixtures: 100:0, 66:24 and 24:76, irradiated at 20 K (dotted line: before irradiation, full line : after irradiation). (b) Survival rate of CO in as function of the absorbed dose; experimental data and fit using Eq. (4) (full line). (c) The CO<sub>2</sub>/CO ratios as function of the CO concentration in water ice, calculated from the intensity ratios of the  $\pi^*$  transition of the two species

### Цель

Отработка методики использования пакета FDMNES для моделирования NEXAFS-спектров углеродсодержащих веществ и углеродных материалов.

### Задачи

- получение навыков конфигурации, использования и анализа результатов работы пакета FDMNES;
- моделирование NEXAFS-спектров некоторых углеродсодержащих веществ: угарного CO и углекислого CO<sub>2</sub> газов, метана CH<sub>4</sub> и этана C<sub>2</sub>H<sub>6</sub>, а также классических углеродных материалов: графита и алмаза;
- анализ полученных спектров и сравнение их с литературными данными.

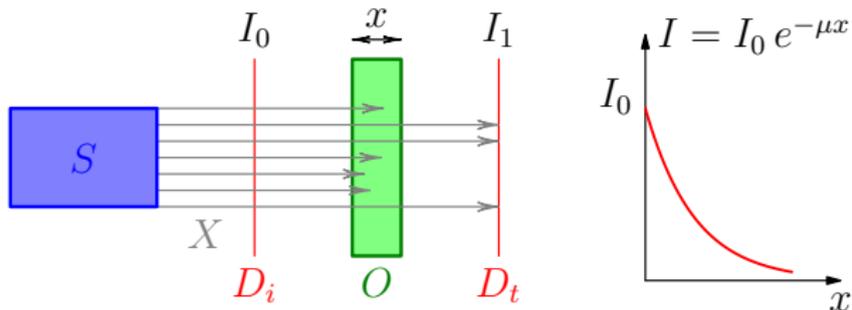


Рис. 2: Упрощённая схема XAS в режиме пропускания

$$\sigma \propto |\langle f | \hat{H} | i \rangle|^2, \quad (1)$$

$$\sigma = \frac{\mu}{\rho} \cdot \frac{M}{N_A}, \quad (2)$$

$$\frac{\mu}{\rho} \propto \frac{Z^4}{AE^3}. \quad (3)$$

Ослабление (attenuation):

- Фотопоглощение (photoabsorption);
- Рассеяние (scattering):
  - упругое (Rayleigh),
  - неупругое (Compton).

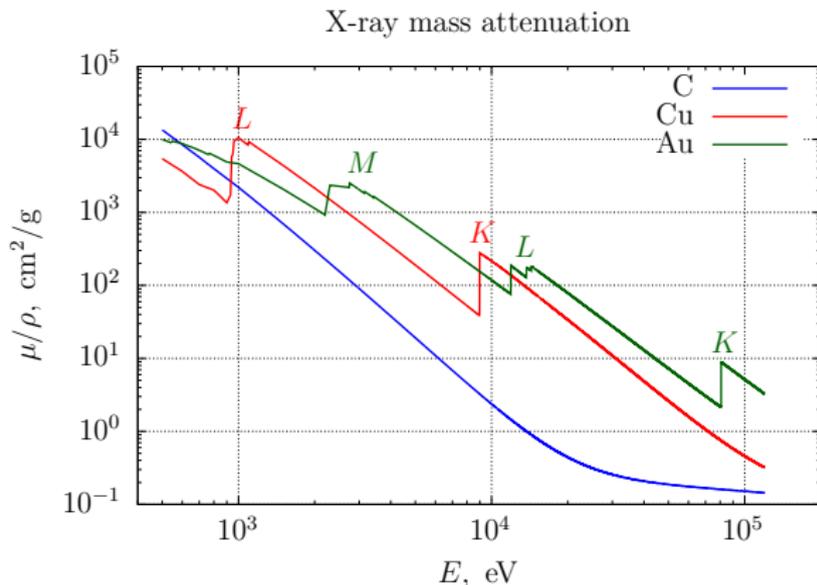


Рис. 3: Экспериментальные данные об энергетической зависимости массовых коэффициентов ослабления

X-ray Reference Data in SQLite — <https://xraypy.github.io/XrayDB>

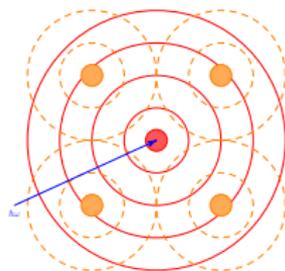
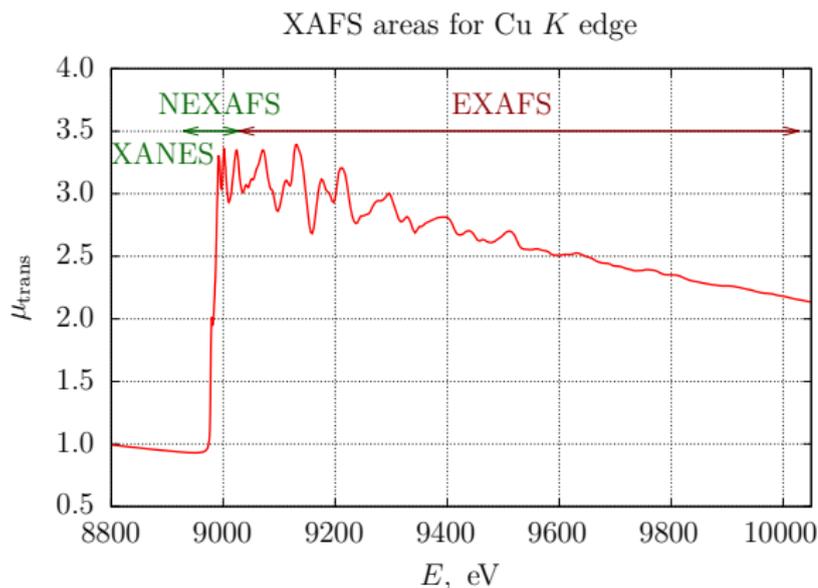


Рис. 4: Спектральные области XAFS на примере *K*-края меди

XAS lib — <https://xaslib.xrayabsorption.org>



FDMNES — Finite Difference Method Near Edge Structure.

- Разработчики: исследовательская группа SIM (Surfaces, Interfaces and Nanostructures), Institute Néel, CNRS.
- Сайт проекта: <https://fdmnes.neel.cnrs.fr/>.
- Язык программирования: Fortran 2003.
- Параллелизация: MPI — Message Passing Interface.
- Доступность: свободное скачивание, компиляция и использование.
- Последнее обновление: 05.10.2023.

# Моделирование NEXAFS-спектров с помощью FDMNES

## Алгоритм моделирования и примеры конфигурационных файлов

Инициализация расчёта  
Формирование списка задач  
Конфигурация вычислений

Вычисления FDMNES

Анализ результатов  
Изучение деталей расчёта  
Построение графиков

```
1 ! Input file for
2   FDMNES
3   3
4   Sim/Carbon/CO.txt
5   Sim/Carbon/CO2.txt
6   Sim/Carbon/CH4.txt
```

```
1 ! FDMNES indata file for the carbon
2   K-edge in CH4
3   File_out
4   Sim/Carbon/results/CH4
5   Enerpho
6   Range
7   280. 0.1 290. 0.5 320. 1. 335.
8
9   Radius
10  6.0
11
12  Molecule
13  1.087
14  6  0.0    0.0    0.0
15  1  1.0    0.0    0.0
16  1  1.0   109.5   0.0
17  1  1.0   109.5  120.0
18  1  1.0   109.5  240.0
19
20  Convolution
21
22  End
```

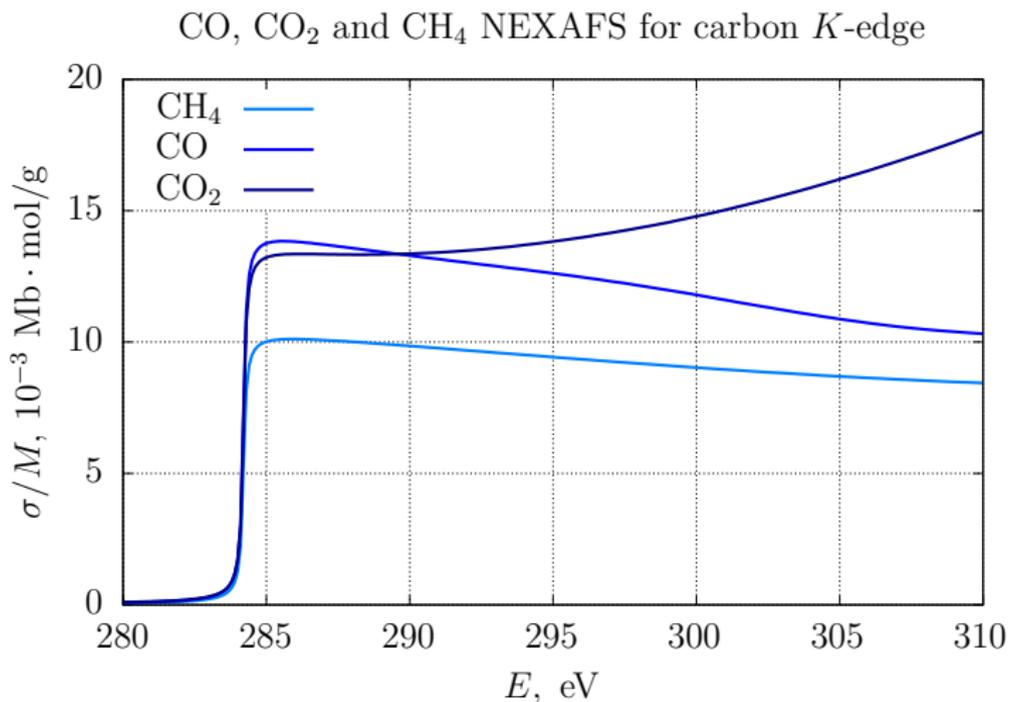


Рис. 5: NEXAFS-спектры молекул CO, CO<sub>2</sub> и CH<sub>4</sub>

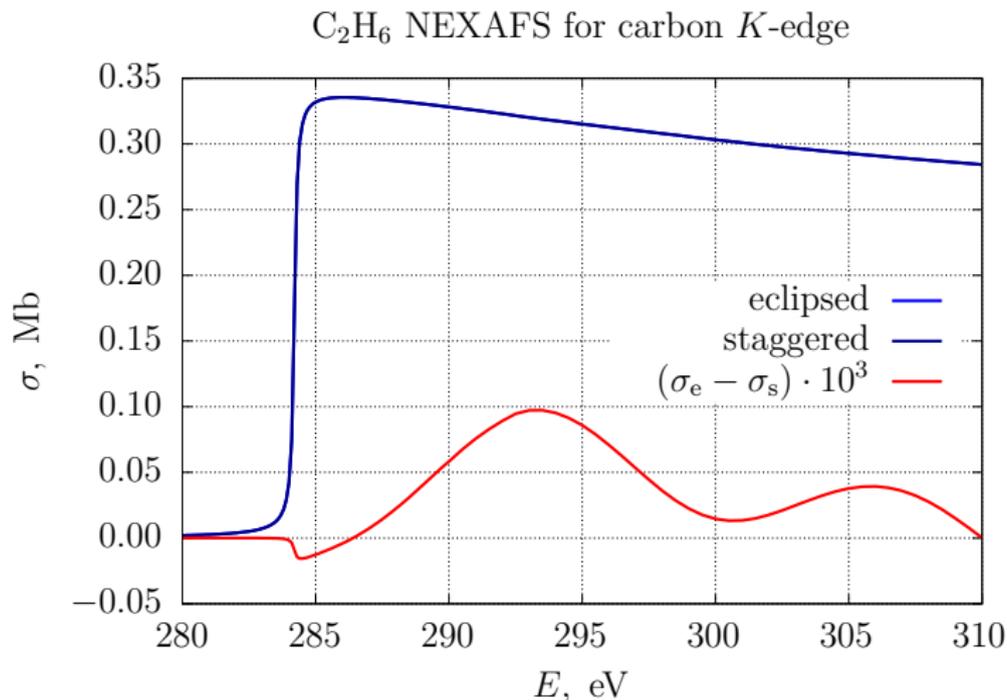


Рис. 6: NEXAFS-спектры молекулы  $C_2H_6$  в заслонённой (цис-) и заторможенной (транс-) конформациях

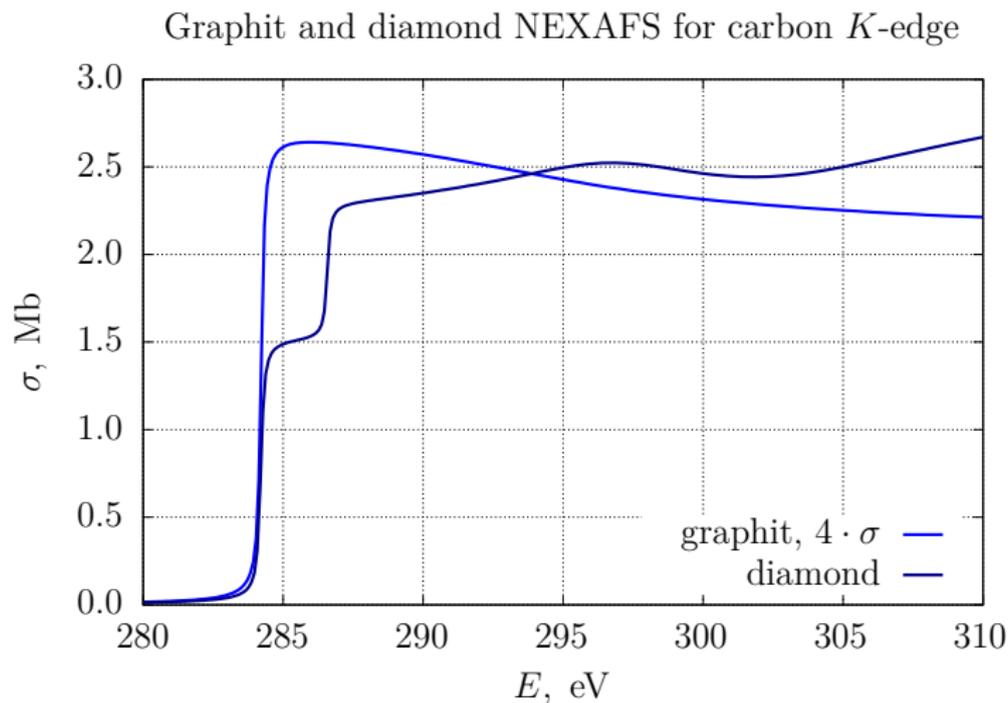


Рис. 7: NEXAFS-спектры графита и алмаза

## Основные результаты

- Получены навыки конфигурации, использования и анализа результатов работы пакета FDMNES;
- Выполнено моделирование NEXAFS-спектров молекул CO, CO<sub>2</sub>, CH<sub>4</sub> и C<sub>2</sub>H<sub>6</sub>, а также графита и алмаза;
- Проведён первичный анализ полученных спектров.

Благодарю за внимание!