

# 微秒时间分辨 ED-XAS 快速数据采集与 处理系统

吴晨潇<sup>1,2</sup> 刘 震<sup>2</sup> 魏向军<sup>2</sup> 姜 泳<sup>2</sup> 汪丽华<sup>2</sup> 王 芳<sup>1</sup> 马春旺<sup>1,3,4</sup>

1(河南师范大学 电子与电气工程学院 新乡 453007)

2(中国科学院上海高等研究院 上海 201204)

3(河南省科学院核科学与技术研究所 郑州 450046)

4(河南师范大学 物理学院 新乡 453007)

**摘要** 上海光源动力学研究线站(Dynamics-Line, D-Line)是全球首条将同步辐射红外光谱(Synchrotron Radiation Infrared Spectroscopy, SR-IR)与能量色散 X 射线吸收谱(Energy Dispersive X-ray Absorption Spectroscopy, ED-XAS)结合,同时探测物质原子结构、电子结构和分子结构动态变化的光束线站,对于复杂体系物质结构研究具有重要科学价值。不同于常规扫描型 X 射线吸收谱(XAS),ED-XAS 技术采用的是位置灵敏探测器,获得的是图像格式的数据文件,且入射光强度( $I_0$ )与样品吸收后的出射光强度( $I_1$ )并非同时采集,无法实时观测 ED-XAS 谱。基于 D-Line 线站的 ED-XAS 实验需求,开发了一套针对图像格式的快速数据采集与处理系统。采用 Python 语言开发面向对象的应用程序接口(Application Programming Interface, API),通过 API 对探测器进行通信和控制,并对数据进行预处理以获取  $I_0$ 、 $I_1$  和探测器本底信号强度( $I_{\text{dark}}$ )的 NumPy 数组格式,然后通过吸收系数公式进行计算 X 射线吸收精细结构谱(X-ray Absorption Fine Structure, XAFS),利用 matplotlib 库绘出 XAFS 谱图,最后采用 Qt Desinger 开发了一个快速响应前端交互界面,实现了 ED-XAS 谱图直观实时展示。该系统已用于用户实验,为快速结构变化的发现提供了重要的实时分析工具,显著提高了 ED-XAS 的实验效率。

**关键词** 能量色散 X 射线吸收谱, Python, 数据采集, 数据处理, D-Line

**中图分类号** TL99

**DOI:** 10.11889/j.0253-3219.2025.hjs.48.240429

**CSTR:** 32193.14.hjs.CN31-1342/TL.2025.48.240429

## Rapid data acquisition and processing system for microsecond time-resolved ED-XAS

WU Chenxiao<sup>1,2</sup> LIU Zhen<sup>2</sup> WEI Xiangjun<sup>2</sup> JIANG Yong<sup>2</sup> WANG Lihua<sup>2</sup>

WANG Fang<sup>1</sup> MA Chunwang<sup>1,3,4</sup>

1(College of Electronic and Electrical Engineering, Henan Normal University, Xinxiang 453007, China)

2(Shanghai Advanced Research Institute, Chinese Academy of Sciences, Shanghai 201204, China)

3(Institute of Nuclear Science and Technology, Henan Academy of Sciences, Zhengzhou 450046, China)

河南省自然科学基金(No.242300421048)、国家自然科学基金(No.U1932203, No.12305406)资助

第一作者: 吴晨潇, 女, 1999 年出生, 2021 年毕业于河南师范大学新联学院, 现为电子信息专业硕士研究生, 研究方向基于 ED-XAS 的数据采集与处理

通信作者: 马春旺, E-mail: machunwang@126.com; 刘震, E-mail: liuzhen@sari.ac.cn; 魏向军, E-mail: weixiangjun@sinap.ac.cn

收稿日期: 2024-10-28, 修回日期: 2024-12-11

Supported by Natural Science Foundation of Henan Province (No.242300421048), National Natural Science Foundation of China (No.U1932203, No.12305406)

First author: WU Chenxiao, female, born in 1999, graduated from Xinlian College of Henan Normal University in 2021, master student, major in electronic information, focusing on data collection and processing of ED-XAS

Corresponding author: MA Chunwang, E-mail: machunwang@126.com; LIU Zhen, E-mail: liuzhen@sari.ac.cn; WEI Xiangjun, E-mail: weixiangjun@sinap.ac.cn

Received date: 2024-10-28, revised date: 2024-12-11

**Abstract** [Background] The Dynamics Line (D-Line) at Shanghai Synchrotron Radiation Facility (SSRF) is the first beamline in the world that combines synchrotron radiation infrared spectroscopy (SR-IR) with energy dispersive X-ray absorption spectroscopy (ED-XAS) to simultaneously detect the dynamic changes of the atomic, electronic and molecular structures of matter, which has important scientific value for the study of the structure of complex materials. Unlike conventional scanning X-ray absorption spectroscopy (XAS), ED-XAS technique uses a position-sensitive detector to obtain data files in image format, and the intensities of incident X-ray beam ( $I_0$ ) and exit X-ray beam ( $I_1$ ) after sample absorption are not collected simultaneously, ED-XAS spectrum cannot be observed in real time. [Purpose] This study aims to develop a set of fast data acquisition and processing system for image format based on the requirements of ED-XAS experiments in D-Line. [Methods] Firstly, an object-oriented application programming interface (API) was developed using Python language, xiAPI Python interface, to access the XIMEA detector and obtain NumPy array format of  $I_0$ ,  $I_1$  and the intensity of detector background signal ( $I_{\text{dark}}$ ). Then XAFS spectrum was calculated using the absorption coefficient formula, and drawn through matplotlib library. Finally, a user-friendly operating interface was developed using Qt Designer to show the real-time XAFS spectrum. [Results & Conclusions] The results show that the connection with the detector in python language and the python third library This rapid data acquisition and processing system written by Python can quickly obtain the ED-XAS spectrum, it has been put into operation at ED-XAS station, providing an important analytical tool for the finding of rapid structural change and greatly improves the experimental efficiency.

**Key words** Energy dispersive X-ray absorption spectroscopy (ED-XAS), Python, Data acquisition, Data processing, Dynamics Line (D-Line)

X射线吸收谱(X-ray Absorption Spectroscopy, XAS)是研究物质局域原子结构和电子结构的有力工具,广泛应用于众多的科学领域。近几年,时间分辨X射线吸收精细结构谱(Time-Resolved X-ray Absorption Fine Structure, XAFS),即技术的发展及其在物质结构动态变化研究中的应用受到了广泛的关注,例如研究催化剂的氧化/还原动力学、物质的结构相变与电子相变等。常规XAFS技术是通过双晶单色器(Double Crystal Monochromator, DCM)的步进扫描(step-by-step)来获得XAFS谱,采集一张谱所需要的时间为10~20 min。基于channel-cut单色器的QXAFS技术(Quick XAFS)可实现秒至毫秒量级的XAFS测量<sup>[1]</sup>。

能量色散X射线吸收谱(Energy Dispersive X-ray Absorption Spectroscopy, ED-XAS)技术是一种基于弯曲晶体单色器(Polychromator)的XAFS技术。如图1所示,ED-XAS技术利用椭圆柱面弯曲晶体在水平方向色散出XAFS所需能量带宽,并聚焦到样品处(椭圆柱面弯曲晶体是一个强聚焦元件),经过样品吸收后再发散开来,采用位置灵敏探测器一次性同时采集所有能量点的信号,可在毫秒/微秒量级获得一个吸收谱<sup>[2-5]</sup>。与常规XAFS和QXAFS技术相比,ED-XAS技术利用椭圆柱面弯曲晶体的强聚焦功能获得微米尺寸光斑,且在采集过程中没

有光学部件的机械运动,因此,ED-XAS具有稳定性高、聚焦光斑小和采集时间快等特点,在催化、凝聚态物理、材料、地球科学等领域均有广泛应用。

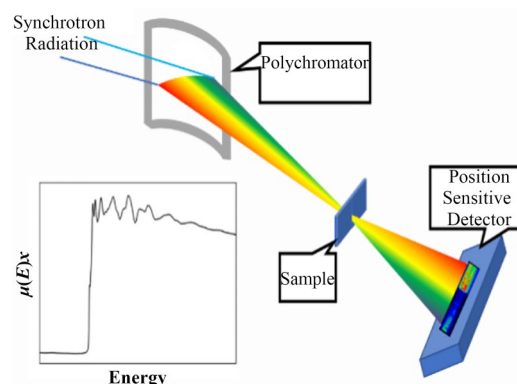


图1 ED-XAS技术示意图  
Fig.1 Schematic diagram of ED-XAS technology

双晶扫描型XAS通常采用的是电离室探测器,样品的吸收系数如式(1):

$$\mu(E) = -\ln(I_1/I_0) \quad (1)$$

式中: $I_0$ 为样品前电离室探测到的入射光强度; $I_1$ 为样品后电离室探测到的出射光强度。 $I_0$ 和 $I_1$ 数据同时采集并以txt格式存储,可以直接运算得到实时的吸收谱。

ED-XAS技术采用位置灵敏探测器,采集的数

据格式均为图片格式,且无法同时采集 $I_0$ 、 $I_1$ 和本底信号强度( $I_{\text{dark}}$ ),在实验过程中,需要分别采集 $I_0$ 、 $I_1$ 和 $I_{\text{dark}}$ ,造成无法实时显示ED-XAS谱图。为了预判实验结果,需要对数据进行快速处理及计算,并显示实时谱图,以便根据初步结果及时调整实验方案。国外的ED-XAS线站由于在探测器、控制硬件和软件环境等各有不同,数据采集与处理软件通常由线站技术人员自行开发。由于该技术在国内外首次建成并对公共用户开放,如何实现ED-XAS数据的快速采集与处理,实时展示实验结果,是用户实验站高效友好运行的关键。目前,国际上对此类工作尚无公开文献,国内也缺乏相关先例。

本文基于ED-XAS实验需求,开发了一套基于Python的快速数据采集与处理系统,完成了探测器控制、数据采集及ED-XAS数据的在线实时显示。另外,国内多个新光源也规划建设ED-XAS线站,该项研究将为国内ED-XAS技术的发展及海量图像数据处理与分析提供借鉴。

## 1 上海光源动力学研究线站简介

上海光源动力学研究线站<sup>[6]</sup>(Dynamics-Line, D-Line)是全球首条将同步辐射红外光谱(Synchrotron Radiation Infrared Spectroscopy, SR-IR)与ED-XAS联用的线站,其ED-XAS线站也是国内首个能量色散X射线吸收谱线站,开展复杂体系原子、电子以及分子结构的同时原位探测<sup>[7-9]</sup>,为催化反应过程的构效关系、物质结构相变过程、分子与纳米结构组装过程、材料的表界面反应动力学等前沿科学领域研究提供强有力的支撑<sup>[10-12]</sup>。D-Line的ED-XAS实验站

如图2所示。

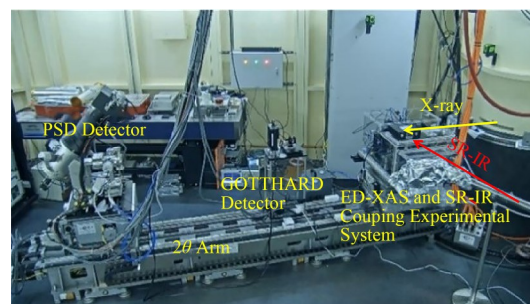


图2 D-Line的ED-XAS实验站2θ转臂实验系统实物图  
Fig.2 Photograph of the 2θ arm experimental system of D-Line ED-XAS branch

D-Line的ED-XAS线站主要性能参数如表1所示,主要开展时间分辨能量色散X射线吸收谱实验,并结合高温、高压、脉冲强磁场等原位条件,开展极端条件物质结构研究。另外,利用储存环电子束团的时间结构以及超快XAS技术,开展百皮秒时间分辨的物质瞬态结构研究。

## 2 系统搭建

### 2.1 快速数据采集与处理系统的硬件设备

如图3所示,快速数据采集与处理系统的硬件机构由两部分组成:一部分是位置灵敏探测器的控制部分,包括曝光时间、感兴趣区(Region of Interest, ROI)设置等;另一部分是数据采集部分,探测器通过插在电脑外设组件互连(Peripheral Component Interconnect, PCI)槽内的数据采集卡与上位机进行数据通信。

表1 D-Line ED-XAS分支线站的性能参数  
Table 1 Performance parameters of the D-Line ED-XAS branch

| 能量范围<br>Energy range / keV | 光斑尺寸<br>Spot size / $\mu\text{m}^2$ | 样品处通量<br>Flux at the sample                  | 能量分辨<br>Energy resolution                                                  | 时间分辨<br>Time resolution / $\mu\text{s}$ |
|----------------------------|-------------------------------------|----------------------------------------------|----------------------------------------------------------------------------|-----------------------------------------|
| 4.96~25.5                  | 3.6×21.6                            | $2.5 \times 10^{12}$ phs/s·300 eV BW@7.2 keV | 优于 $2 \times 10^{-4}$ @CuK吸收边<br>Better than $2 \times 10^{-4}$ @ CuK-edge | ~25                                     |

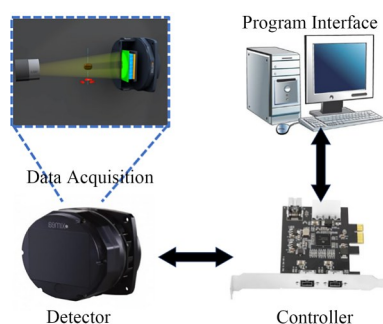


图3 系统硬件结构  
Fig.3 Block diagram of system hardware

位置灵敏探测器是基于CCD(Charge-Coupled Device)传感器 onsemi KAI-11002的X射线探测器(MH110XC-KK-FA, XIMEA),探测器的像素尺寸为 $9 \mu\text{m}$ ,有效像素面积为 $4008 \text{ pixels} \times 2672 \text{ pixels}$ ,适用X射线的能量范围为7~100 keV。此探测器将涂有闪烁体材料P43的光纤板直接连接到传感器上,具有高分辨率、闪烁体直接成像等特点。如图3所示,当X射线照射到探测器上,光纤板上的闪烁体发出可见光,通过光纤将可见光传输到传感器上并进行成像。科学级传感器与探测器芯一起用两级热电珀尔帖元件冷却。



探测器通过 IEEE 1394A 协议(即 FireWire)与计算机进行高速数据传输。IEEE 1394A 是一种兼容性良好的串行数据传输标准。本系统使用的采集卡是由摩羯(MOGE)公司生产的 PCIE 转 1394B 采集卡(型号 MC2276),其传输速度可达 800 Mbps。与 1394A 协议相比,1394B 进行了升级,支持更高的传输速率和更长的连接距离,同时保持对 1394A 设备的向下兼容。

## 2.2 快速数据采集与处理系统的软件设计

### 2.2.1 系统架构

本软件设计主要基于 Python 进行开发设计,Python 是一种解释性、交互式且面向对象的脚本编程语言,拥有丰富的科学计算扩展库,例如:NumPy、SciPy 和 matplotlib<sup>[13-15]</sup>,分别提供了高效的数组处理、数值计算以及数据可视化功能(在同步辐射领域中,Python 已广泛应用到光束线及实验站的相关设备控制和数据处理相关软件应用开发中)<sup>[16-22]</sup>。此外,图形用户界面(Graphical User Interface, GUI)框架(如 PyQt5<sup>[23]</sup>),能够有效支持前端用户界面的开发。

ED-XAS 快速数据采集与处理系统架构如图 4 所示,展示了探测器、采集卡及快速数据采集与处理系统等各个组件之间的调用关系和逻辑流程。该系统通过 Python 实现探测器控制、数据采集和处理功能,利用全局变量实现参数的互相传递与调用。同时,采用 PyQt5 构建用户界面,以使用户能够直观地与程序进行交互。

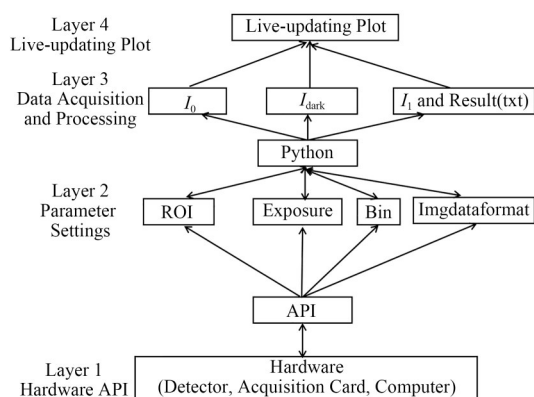


图4 快速数据采集与处理系统架构

Fig.4 Architecture of rapid data acquisition and processing system

### 2.2.2 快速数据采集与处理系统

Python 与 XIMEA 探测器之间通过面向对象的应用程序接口(Application Programming Interface, API)进行通信与控制。Ximea xiAPI Python 库封装了底层驱动细节,为 Python 提供了高层次的面向对

象编程接口,实现充分利用 XIMEA 探测器的特性与功能。通过调用 xiapi.Camera 函数,可以获取探测器并通过采集卡与计算机建立通信连接,xiapi 类中包含的方法如下:

```

cam=xiapi.Camera()#连接探测器
cam.open_device()#启动探测器
cam.start_acquisition()#开始数据采集
cam.stop_acquisition()#停止数据采集
cam.close_device()#关闭探测器

```

对于 XAFS 实验,特别是近边谱的分析,对于能量分辨率有一定的要求,利用 cam.set\_downsampling() 函数用于合并探测器像素数,以满足 XAFS 实验对能量分辨率的要求;ED-XAS 技术利用位置灵敏探测器进行数据采集,每个像素保持在其线性范围内至关重要,利用 cam.set\_exposure() 和 cam.set\_imgdataformat() 函数分别设置探测器的曝光时间和采集图像的单通道位深实现这一功能。

ED-XAS 技术通过“成像”方式进行数据采集,探测器获取的数据显示为二维图像格式,其中每个像素的灰度值代表 X 射线的光强。可以使用 get\_image\_data\_numpy() 函数获取图像中每个像素的灰度值,该函数以 NumPy 数组的形式返回数据,以获得色散出能量带宽 X 射线的光强。

为减小光斑有效积分区域外探测器的本底噪声对数据信噪比的影响,本系统采用自动识别光斑有效积分区域。探测器采集入射 X 射线并获取其全部像素灰度值的 NumPy 数组,利用函数 np.sum() 对 NumPy 数组进行横向积分,利用函数 scipy.optimize.curve\_fit() 函数进行高斯拟合并确定半峰全宽值(Full Width at Half Maximum, FWHM)范围,即光斑有效积分区域,如图 5 所示,并将此参数设置为全局变量。利用函数 np.sum() 分别对  $I_0$ 、 $I_1$  和  $I_{\text{dark}}$  在 FWHM 范围内的原始 NumPy 数组进行纵向积分,获得色散出能量带宽 X 射线的强度信息。

为了减少随机噪声,在实验过程中,采用多次采集并取平均值的方法来获得入射 X 射线的强度。首先,在不放置样品的情况下采集  $I_0$ ,然后关闭光闸以获取探测器的本底噪声( $I_{\text{dark}}$ ),并分别获得  $I_0$  和  $I_{\text{dark}}$  在 FWHM 范围内的纵向积分 NumPy 数组,并构建为全局变量,实现参数在整个系统里的传递和调用,提高系统运行效率。采集经过样品吸收后的 X 射线强度  $I_1$ ,并获得  $I_1$  在 FWHM 范围内的纵向积分 NumPy 数组,同时,调用全局变量  $I_0$  和  $I_{\text{dark}}$  的纵向积分 NumPy 数组,通过吸收系数公式(2)计算得到实时的 ED-XAS 谱图。

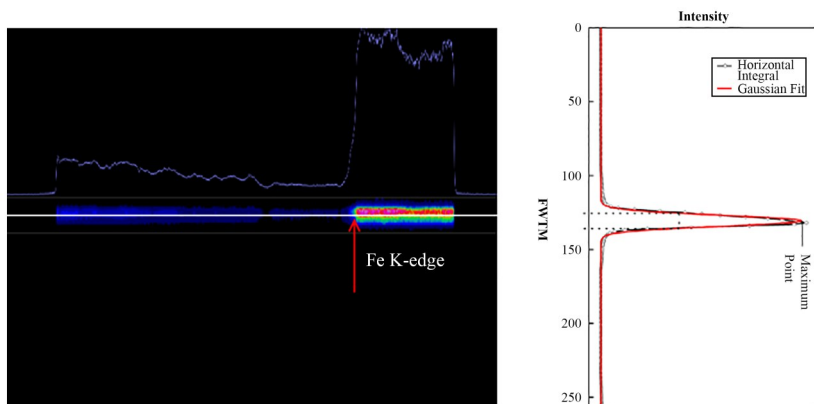


图5 Fe箔的 $I_1$ 二维图片以及高斯拟合的横向积分图  
Fig.5 The  $I_1$  2D picture of Fe foil and the transverse integration plot of the Gaussian fit

$$\mu = \ln \frac{I_0 - I_{\text{dark}}}{I_1 - I_{\text{dark}}} \quad (2)$$

此外,为提高程序的灵活性和响应速度,利用 while not self.global\_stop\_flag 和 if self.stopped: 结构,使在采集 $I_0$ 、 $I_{\text{dark}}$ 和 $I_1$ 的过程中安全地停止线程。

### 2.2.3 系统界面设计

本系统基于Python、PyQt5库和Qt Designer构建了GUI。该GUI采用面向对象的编程范例,搭建了一个独特的框架。通过Qt Designer进行软件界面布局,将Python代码与UI文件进行绑定,从而实现界面与逻辑代码的有效分离。利用QWidget组件及其子类,开发了一个响应迅速的前端交互界面。Checkbox组件被用于数据的预览模式,用户可以通过

过选择Checkbox实现数据保存模式。此外,QChart组件和Matplotlib库被结合使用,以实时显示ED-XAS谱图,从而实现数据的快速采集与处理界面的可视化。

用户界面主要分为三部分,如图6所示。第一部分为探测器参数设置界面,可实现与探测器的交互,对探测器的曝光时间和ROI进行设置;第二部分为数据采集系统界面,包含采集 $I_0$ 、 $I_{\text{dark}}$ 和 $I_1$ 的图谱数量设置界面、采集进度条显示以及保存实验数据等功能;第三部分为数据可视化界面,分别为采集 $I_0$ 、 $I_{\text{dark}}$ 和 $I_1$ 实时谱图界面以及获取最终ED-XAS谱图界面。

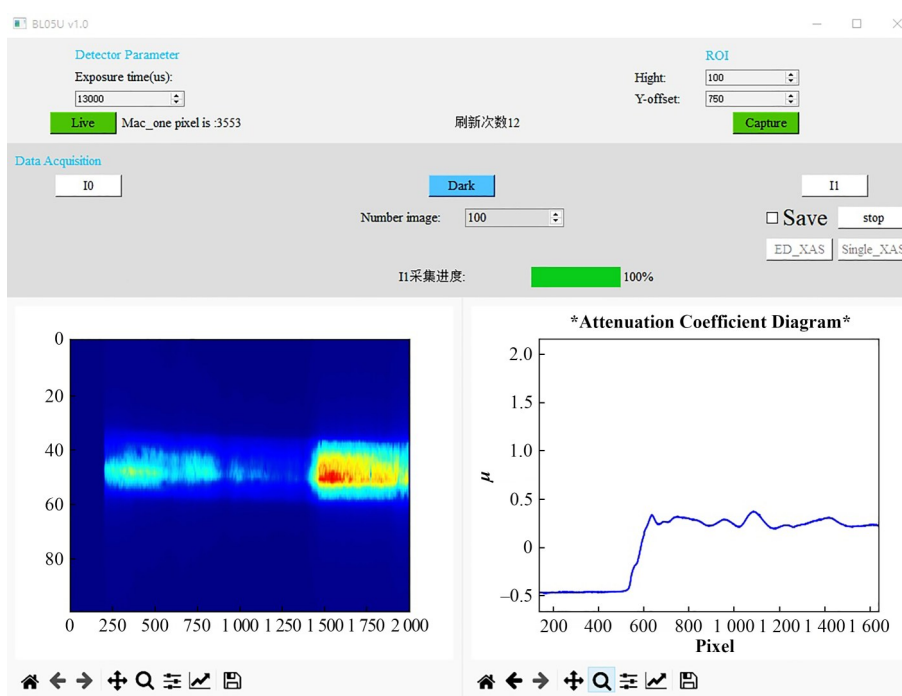


图6 数据快速采集与处理系统主界面  
Fig.6 Main interface of the fast data acquisition and processing system

连接探测器后,设置曝光时间,点击Live按钮,依据“Mac\_one point is”数据显示来判断探测器像素的线性度,通过调整曝光时间,使其值小于像素最大计数的90%。为了进一步提高时间分辨能力,通过设置ROI参数提高探测器的采集速率及数据传输速率。依次分别设置采集 $I_0$ 、 $I_{\text{dark}}$ 和 $I_1$ 的图谱数量并进行采集,采集进度以进度条的形式显示,且采集过程中, $I_0$ 、 $I_{\text{dark}}$ 和 $I_1$ 的实时图像以及谱线在线显示在数据可视化界面。

需要说明的是,本系统获得的快速ED-XAS谱纵坐标为每一个像素点对应的衰减系数 $\mu(E)$ ,横坐标仍然是探测器像素位置的值(Pixel),但只需要与扫描双晶单色器获得的标准谱比对就能将Pixel转化成能量刻度。

### 3 系统测试

为了测试本系统数据采集与处理的可行性以及实时性,在上海光源D-Line的ED-XAS线站通过使用本系统采集了标准样品Cu箔的K-edge XAFS谱图。实验条件:弯曲晶体单色器为Bragg Si(111),探测器曝光时间500  $\mu\text{s}$ ,探测器采集频率约为7 Hz。

如图7所示,通过测试,使用本系统所测得Cu箔K-edge XAFS谱与采用双晶单色器扫描测得Cu箔K-edge XAFS谱完全吻合,验证了本系统的可行性。

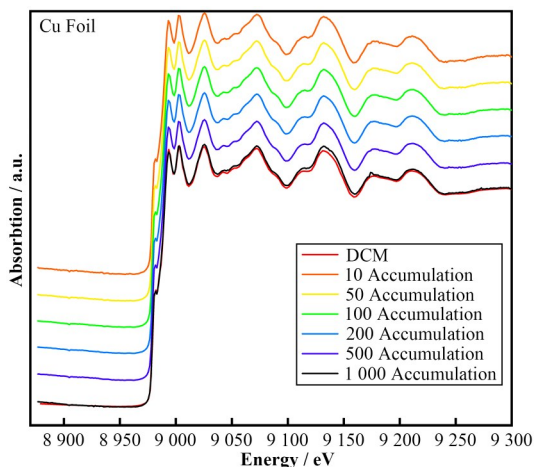


图7 不同张数Cu箔K-edge ED-XAS谱以及采用DCM扫描测得Cu foil K-edge ED-XAS谱(彩图见网络版)

Fig.7 The sequence of Cu foil K-edge ED-XAS spectra obtained by the system and DCM (color online)

此外,我们使用本系统在同一条件下采集了6组Cu箔K-edge ED-XAS谱,表2比较了不同采集张数下的本系统处理数据的速度,由此看出,使用本系统进行ED-XAS数据采集与处理,可以快速并实时地获取ED-XAS谱图。

表2 采集张数不同,系统处理数据并获取XAFS谱所需要的时间(去除探测器采集数据时间)

Table 2 The time required for the system to process the data and acquire the XAFS spectrum depending on the number of images collected (time to remove the data collected by the detector)

| 采集张数<br>The number of images collected | 处理速度<br>Processing speed / s |
|----------------------------------------|------------------------------|
| 10                                     | 0.57                         |
| 50                                     | 1.74                         |
| 100                                    | 3.01                         |
| 200                                    | 3.13                         |
| 500                                    | 3.47                         |
| 1 000                                  | 7.14                         |

### 4 结语

本文基于上海光源D-Line的ED-XAS线站,开发了一套基于Python的ED-XAS快速数据采集与处理系统,完成了对位置灵敏探测器的控制、快速数据采集及处理,可自动识别光斑有效积分区域,实现了ED-XAS谱图的实时在线显示。利用本系统采集10张图谱并实时在线显示,其处理速度可达0.57 s,满足用户对时间分辨实验的需求。本系统已部署至上海光源D-Line的ED-XAS线站,并对实验用户正式开放运行,提升了线站实验效率和实验机时的利用效率,为快速结构变化的发现提供了重要的分析工具。

致谢 感谢上海光源BL05U组对本工作提供的支持和帮助。

作者贡献声明 吴晨潇负责软件开发,系统测试和调试、论文撰写;刘震负责软件调试与论文修改;魏向军负责全面指导,文章审阅修改;姜泳和汪丽华负责资料的搜集和整理;王芳提供了研究思路和应用方面的意见,为工作的进行提供了经验支持;马春旺负责研究方案的提出及设计。

### 参考文献

- Frahm R. Quick scanning exafs: first experiments[J]. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment, 1988, **270**(2 - 3): 578 - 581. DOI: 10.1016/0168-9002(88)90732-2.
- Matsushita T, Phizackerley R P. A fast X-ray absorption spectrometer for use with synchrotron radiation[J]. Japanese Journal of Applied Physics, 1981, **20**(11): 2223. DOI: 10.1143/jjap.20.2223.
- Phizackerley R P, Rek Z U, Stephenson G B, et al. An

- energy-dispersive spectrometer for the rapid measurement of X-ray absorption spectra using synchrotron radiation[J]. *Journal of Applied Crystallography*, 1983, **16**(2): 220 – 232. DOI: 10.1107/s0021889883010286.
- 4 Headspith J, Salvini G, Thomas S L, *et al.* XSTRIP—a silicon microstrip-based X-ray detector for ultra-fast X-ray spectroscopy studies[J]. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*, 2003, **512**(1 – 2): 239 – 244. DOI: 10.1016/s0168-9002(03)01899-0.
- 5 Kantor I, Labiche J C, Collet E, *et al.* A new detector for sub-millisecond EXAFS spectroscopy at the European Synchrotron Radiation Facility[J]. *Journal of Synchrotron Radiation*, 2014, **21**(Pt 6): 1240 – 1246. DOI: 10.1107/S1600577514014805.
- 6 Liu Z, Wang L H, Jiang Y, *et al.* The dynamics beamline at SSRF[J]. *Nuclear Science and Techniques*, 2024, **35**(9): 153. DOI: 10.1007/s41365-024-01467-5.
- 7 Hu J T, Wei Z Y, Zhang Y L, *et al.* Edge-rich molybdenum disulfide tailors carbon-chain growth for selective hydrogenation of carbon monoxide to higher alcohols[J]. *Nature Communications*, 2023, **14**: 6808. DOI: 10.1038/s41467-023-42325-z.
- 8 Mao J, Liu H, Cui X J, *et al.* Direct conversion of methane with O<sub>2</sub> at room temperature over edge-rich MoS<sub>2</sub> [J]. *Nature Catalysis*, 2023, **6**: 1052 – 1061. DOI: 10.1038/s41929-023-01030-2.
- 9 Zhang Z N, Liu Z, Jiang Y, *et al.* *In situ* investigation of synchrotron radiation damage effect of ancient paintings by time-resolved ED-XAS and IR combined techniques [J]. *X-Ray Spectrometry*, 2022, **51**(4): 394 – 402. DOI: 10.1002/xrs.3289.
- 10 Ren Z G, Sun Y H, Lei Q, *et al.* Accumulative delocalized Mo 4d electrons to bound the volume expansion and accelerate kinetics in Mo<sub>6</sub>S<sub>8</sub> cathode for high-performance aqueous Cu<sup>2+</sup> storage[J]. *ACS Nano*, 2023, **17**(19): 19144 – 19154. DOI: 10.1021/acs.nano.3c05282.
- 11 Yuan D S, Ma S C, Kong X, *et al.* Confined Mn<sup>2+</sup> enables effective aerobic oxidation catalysis[J]. *Science China Chemistry*, 2024, **67**(5): 1545 – 1553. DOI: 10.1007/s11426-023-1994-2.
- 12 Bu K J, Hu Q Y, Qi X H, *et al.* Nested order-disorder framework containing a crystalline matrix with self-filled amorphous-like innards[J]. *Nature Communications*, 2022, **13**: 4650. DOI: 10.1038/s41467-022-32419-5.
- 13 Oliphant T E. *Guide to numpy*[M]. USA: Trelgol Publishing, 2006.
- 14 NumPy developers. NumPy[EB/OL]. 2024-11-20. <https://numpy.org/>.
- 15 Hunter J D. Matplotlib: a 2D graphics environment[J]. *Computing in Science & Engineering*, 2007, **9**(3): 90 – 95. DOI: 10.1109/MCSE.2007.55.
- 16 Wojdyla J A, Kaminski J W, Panepucci E, *et al.* DA+ data acquisition and analysis software at the Swiss Light Source macromolecular crystallography beamlines[J]. *Journal of Synchrotron Radiation*, 2018, **25**(Pt 1): 293 – 303. DOI: 10.1107/S1600577517014503.
- 17 Zhou Y N, Jiang Z, Zheng L F, *et al.* QXAFS data acquisition system based on EPICS at SSRF[J]. *Applied Mechanics and Materials*, 2014, **687**: 3336 – 3341. DOI: 10.4028/www.scientific.net/amm.687-691.3336.
- 18 曾孟麒, 尹亮, 尹聪聪, 等. 基于EPICS的SHINE束线站定时设备控制系统[J]. *核技术*, 2023, **46**(7): 070102. DOI: 10.11889/j.0253-3219.2023.hjs.46.070102.
- ZENG Mengqi, YIN Liang, YIN Congcong, *et al.* Development and implementation of an EPICS-based timing equipment control system for SHINE beamlines and endstations[J]. *Nuclear Techniques*, 2023, **46**(7): 070102. DOI: 10.11889/j.0253-3219.2023.hjs.46.070102.
- 19 Khan L U, Khan Z U, Blois L, *et al.* Strategy to probe the local atomic structure of luminescent rare earth complexes by X-ray absorption near-edge spectroscopy simulation using a machine learning-based PyFitIt approach[J]. *Inorganic Chemistry*, 2023, **62**(6): 2738 – 2750. DOI: 10.1021/acs.inorgchem.2c03850.
- 20 Marini C, Roqué -Rosell J, Campeny M, *et al.* MAP2XANES: a Jupyter interactive notebook for elemental mapping and XANES speciation[J]. *Journal of Synchrotron Radiation*, 2021, **28**(Pt 4): 1245 – 1252. DOI: 10.1107/S1600577521003593.
- 21 Newville M. Larch: an analysis package for XAFS and related spectroscopies[J]. *Journal of Physics: Conference Series*, 2013, **430**: 012007. DOI: 10.1088/1742-6596/430/1/012007.
- 22 Prestipino C. *PrestoPronto*: a software package for large



- 
- EXAFS data sets[M]. International Tables for Crystallography. Chester, England: International Union of Crystallography, 2021: 816 – 821. DOI: 10.1107/s1574870720003432.
- 23 Perez-Aguilar J E, Caine A, Bare S R, *et al.* CatMass: software for calculating optimal sample masses for X-ray absorption spectroscopy experiments involving complex sample compositions[J]. Journal of Synchrotron Radiation, 2023, **30**(Pt 5): 1023 – 1029. DOI: 10.1107/S160057752300615X.