

通过机器学习理解 X 射线吸收谱：实验结果到理论计算的自动匹配

Saturday, 29 June 2024 14:15 (15 minutes)

通过机器学习理解 X 射线吸收谱：实验结果到理论计算的自动匹配

王可心, 卢项尉, 王天阳, 陈留国, 刘功发, 陈凯 *

中国科学技术大学国家同步辐射实验室

Email: kaichen2021@ustc.edu.cn

过去十年, 材料信息学显著加快了新材料性能的分析。加速相关材料发现的关键因素之一是高通量实验中的动态数据分析, 引发了对材料特性快速而准确的自动估计的需求。X 射线吸收光谱 (XAS) 是一种广泛使用的材料表征技术, 用于确定氧化态、配位环境和其他局部原子结构信息。XAS 分析依赖于测量光谱与可靠参考光谱的比较。然而, 现有的 XAS 光谱数据库在可用参考光谱的数量和化学覆盖范围方面都非常有限 [1]。在参考光谱的基础上, 实现实验结果到理论计算的自动匹配的关键要求是相似性度量函数的选择, 以及上述函数在实验结果中可能存在的峰移、峰展宽和噪声等情况下的适用性 [2]。我们利用 Quanta 一种量子多体计算程序计算了 Co 元素两种价态 ($2+$, $3+$) 在不同晶体场劈裂下的 L-edge 吸收谱作为参考谱 (Fig. 1a), 通过 Pearson 函数计算相似度可以在空间中准确区分元素的价态及晶体场信息 (Fig. 1b)。在此基础上, 实现了来自于不同样品 (价态和自旋态) 实验吸收谱和理论计算结果 (Fig. 1c), 以及更复杂的具有混合价态 (Fig. 1d) 以及混合自旋态 (Fig. 1e) 的实验吸收谱和理论计算的自动匹配。该方法可帮助同步辐射吸收谱学用户快速而准确理解实验数据, 加速新材料物性的研究和发现。

Fig 1: 实验结果到理论计算的自动匹配。(a) Co 元素两种价态 ($2+$, $3+$) 在不同晶体场劈裂下的 L-edge 吸收谱 (b) Pearson 函数计算相似度的空间分布。不同样品 (c), 混合价态 (d) 以及混合自旋态 (e) 的实验吸收谱和理论计算结果的自动匹配。

[1]: Chen Zheng et al., npj Computational Materials: 4, No: 12 (2018).

[2]: Yuta Suzuki et al., npj Computational Materials: 5, No: 39 (2019).

Summary

Primary author: CHEN, kai (University of Science and Technology of China)

Presenter: CHEN, kai (University of Science and Technology of China)

Session Classification: 先进光源数据与软件