

Titlu Faza: Realizarea unui pachet software performant si multifunctional pentru analiza datelor multidimensionale rezultate din spectro-microscopie I: realizarea si testarea pachetului software și II: elaborarea si diseminarea manualului de utilizare.

Obiective:

Dezvoltarea un pachet de programe sub platforma Igor Pro pentru extragerea rapidă de informații din date multidimensionale (cuburi și hipercuburi de date), precum și pentru analiza automată prin simulări (sau “deconvoluții”) ale spectrelor individuale. Realizarea unui manual de utilizare pentru pachetul software dezvoltat în faza anterioară. Diseminarea manualului de utilizare și a pachetului software în comunitatea științifică a spectro-microscopiei de fotoelectroni.

Rezultate estimate initial:

Principalul rezultat estimat este un pachet integrat software și documentația aferentă pentru analiza datelor de spectromicroscopie, care se obțin în momentul de față la facilitățile moderne de radiație de sincrotron. Pachetul va funcționa sub platforma Igor Pro, folosită pe larg în comunitatea științei materialelor și a suprafețelor folosind tehnici spectroscopice și spectromicroscopice.

Rezultate obtinute:

Spectro-microscopia de fotoelectroni este o tehnică experimentală presupunând înregistrarea câte unui spectru de fotoelectroni în puncte distincte de pe suprafața probei. Rezoluția tehnicii depinde de analizorul de electroni folosit, dar în mod special și de rezoluția spațială a sursei de raze X. Este binecunoscută dificultatea de a se propune “optici de raze X” care să ofere o focalizare nanoscopice a acestora. Monocromatoarele curbate care sunt adaptate pe surse convenționale de raze X pot conduce la o rezoluție spațială de 2 – 20  $\mu\text{m}$ . În INCDFM există o astfel de instalație produsă de Kratos, care a și fost exploatată în modul spectromicroscopic recent [1]. Pentru rezoluții spațiale mai bune, se utilizează radiația de sincrotron împreună cu optici de focalizare de tipul “Fresnel zone plates”. În ultima vreme, grupul de Știința Suprafețelor și Interfețelor din INCD Fizica Materialelor a obținut timp de fascicul pe linii care dispun de asemenea facilități, cum ar fi linia SpectroMicroscopy de la sincrotronul Elettra din Trieste, Italia [2–4] sau linia Antares (Analysis Nano-spot Angle Resolved photo Emission Spectroscopy) de la sincrotronul Soleil de la Saclay, Franța [5]. Prima linie are rezoluția spațială estimată de 0,6  $\mu\text{m}$ , iar a doua de cca. 100 nm. În cadrul acestei faze s-au obținut următoarele rezultate:

- a) Realizarea de module pentru analiza rapidă și vizualizarea imediată a spectrelor.
- b) Realizarea de module pentru vizualizarea imediată a intensităților integrate pe regiuni de interes.
- c) Realizarea de module de generare de filme din date înregistrate la momente de timp diferite sau în regiuni energetice diferite.
- d) Realizarea de module pentru fitarea automată a datelor experimentale și reprezentarea dependențelor parametrilor de fitare.

De asemenea, s-a testat în mod exhaustiv fitarea automată a datelor de spectromicroscopie și pe seturi de date obținute la Antares. S-a optimizat programul de fitare automată, scăzându-se durata unei fitări de la 7 secunde la 2,5 secunde, ceea ce înseamnă că un set de date cu 10 000 spectre poate fi realizat în cca. 7 ore. În Figura 1 prezentăm primul astfel de rezultat obținut.

## Bibilografie:

- [1] C. Beșleagă, L. Abramiuc, V. Stancu, A.G. Tomulescu, M. Sima, L. Trincă, N. Plugaru, L. Pintilie, G.A. Nemneș, M. Iliescu, H.G. Svavarsson, A. Manolescu, I. Pintilie, *J. Phys. Chem. Lett.* **7**, 5168–5175 (2016).
- [2] D.G. Popescu, M.A. Hușanu, L. Trupină, L. Hrib, L. Pintilie, A. Barinov, S. Lizzit, P. Lacovig, C.M. Teodorescu, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **17**, 509–520 (2015).
- [3] M.A. Hușanu, D.G. Popescu, C.A. Tache, N.G. Apostol, A. Barinov, S. Lizzit, P. Lacovig, C.M. Teodorescu, *Appl. Surf. Sci.* **352**, 73–81 (2015).
- [4] L.E. Abramiuc, L.C. Tănase, A. Barinov, N.G. Apostol, C. Chirilă, L. Trupină, L. Pintilie, C.M. Teodorescu, *Nanoscale* **9**, 11055–11067 (2017).
- [5] A. Pancotti, J. Wang, P. Chen, L. Tortech, C.M. Teodorescu, E. Frantzeskakis, N. Barrett, *Phys. Rev. B* **87**, 184116(1–10) (2013).

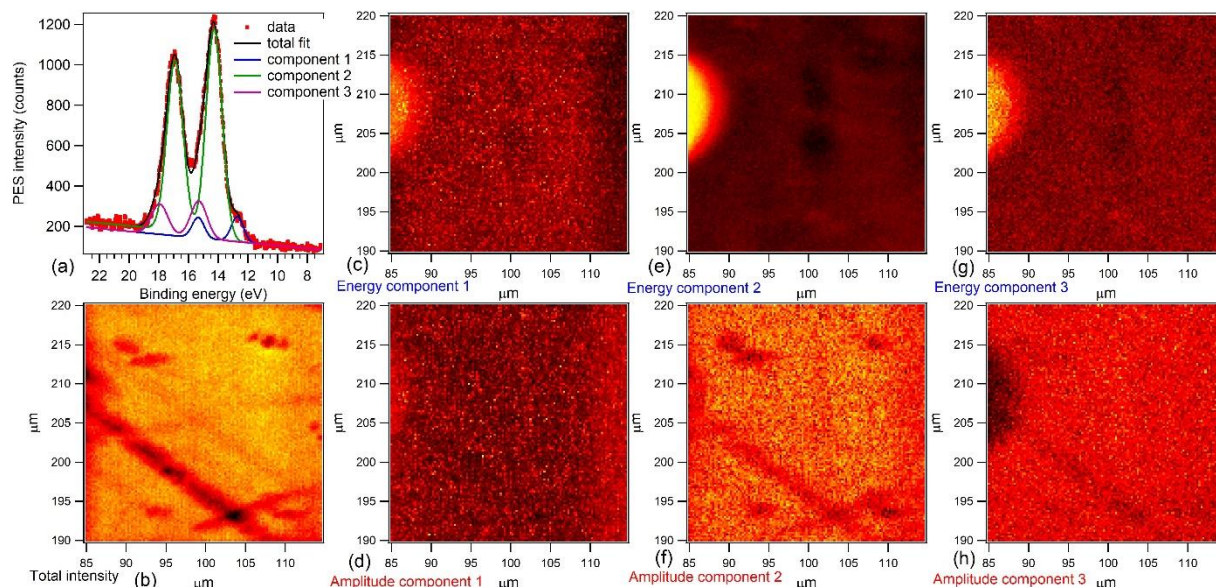


Figura 1. Analiză prin fit automat a datelor spectro-microscopice obținute la Antares. (a) reprezintă un exemplu de spectru obținut pentru un punct, împreună cu fitul cu 3 dubleți; (b) reprezintă harta intensităților totale, generată de programul de achiziție Antares; (c, e, g) hărți ale energiilor de legătură pentru cele 3 componente din fit; (d, f, h) hărți ale amplitudinilor integrale pentru cele 3 componente. Proba analizată a fost un strat subțire de 200 nm  $\text{Pb}(\text{Zr},\text{Ti})\text{O}_3(001)$  după procedura standard de curățare prin încălzire în atmosferă de oxigen (5 mPa, 4 ore).

## Concluzii si perspective:

Faptul ca punem la dispozitia comunității de spectro-microscopie aceste soft-uri ne va spori vizibilitatea (inclusiv acumulare de citări) pe termen lung și mediu; aceasta acțiune va demonstra ca suntem un grup implicat în comunitate și ne va oferi un fel de statut de "user" privilegiat, ne așteptăm așadar ca pe viitor să obținem mult mai ușor timp de fascicul pe aceste linii. O ora de fascicul la Antares (de exemplu) este evaluată la cca. 1000 Euro, iar în cursul unei sesiuni obținem 5-7 zile de fascicul, deci între 120 000 și 168 000 Euro. În concluzie, avantajele estimate ale dezvoltării acestui software, scrierii manualului și popularizării pentru institut se pot cifra la 1–2 milioane de lei anual.