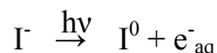


Analysis of time-resolved X-ray absorption spectra via the MXAN code

Aqueous Γ^- is a prototype model system to investigate the details of hydration and of solvation dynamics in liquid media. Solvation dynamics include the change of the solvent shell structure around a solute upon electronic changes of the latter. It is therefore at the core of condensed phase Chemistry and of Biology.

In our study we have probed the solvent shell and the electronic structure of atomic ions (Γ^-) in water, after ejecting an electron from the ion with a femtosecond laser pulse:



Once we get the experimental spectrum, an important step is to analyze it and find the optimum way to do it.

Usually we used to fit the EXAFS region of the spectrum with the standard FEFF code.

This standard method has a drawback:

The fact of calculating the ground state and the excited state from the obtained transient signal and fitting them increases the noise on the signal and then makes the calculated bond distance variation less precise.

With the MXAN code we perform the analysis as follows:

-It fits transient signals in energy space and thus avoids the noise induced by fitting the ground state and the excited state.

The purpose of my visit to the National Laboratory of Frascati (INFN) was to learn about this code.

During my visit, I got acquainted with the various details of the MXAN program. With this knowledge, I can now start to perform the extensive calculations and fits required to interpret the ground state $\Gamma^-/\text{H}_2\text{O}$ XAFS spectrum.

About MXAN:

MXAN is a program which is able to fit the XANES part (from the edge to about 200 eV) of experimental X-ray Absorption data for getting quantitative structural information. The method is based on the fitting between the experimental spectrum and several theoretical calculations generated by changing the relevant geometrical parameters of the site around the absorbing atom.

We can also make “one shot” calculation for a given geometry, which delivers the XAFS for a given input structure.

The x-ray photo-absorption cross section is calculated using the full multiple scattering scheme which is a method to solve the Schrödinger equation in real space. It is defined through Fermi’s “golden rule”.

The MXAN procedure needs three input files containing respectively the experimental data to be fitted, the starting atomic coordinates of the cluster (the putative structure), and the commands and options necessary for the chosen minimization strategy, respectively. At First, some photo-absorption cross section calculations were done. The calculations show striking differences compared to the experimental spectrum (fig.1).

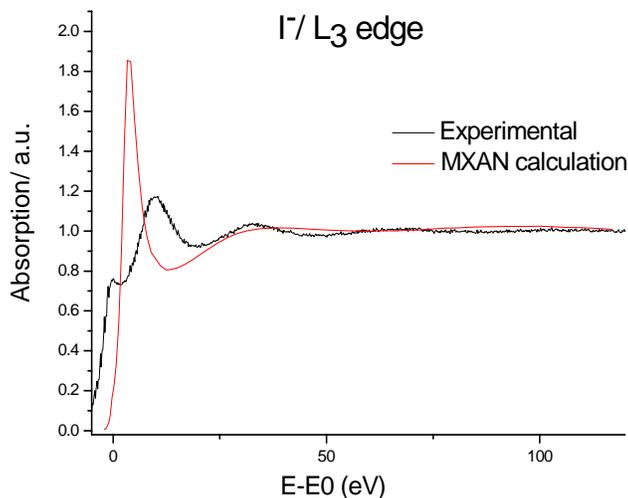


Fig.1: Experimental photo-absorption cross section of I/ H₂O together with calculation for one single theoretically determined solvent shell structure

The idea is to calculate the absorption cross-section averaged over 177 frames and compare it to the experimental one and do a fit trying to minimize its square residue function given by:

$$S^2 = n \frac{\sum_{i=1}^m w_i [(y_i^{\text{th}} - y_i^{\text{exp}}) \varepsilon_i^{-1}]^2}{\sum_{i=1}^m w_i}$$

Where n is the number of independent parameters, m the number of data points, y_i^{th} and y_i^{exp} the theoretical and experimental values of absorption, ε_i the individual errors in the experimental data set, and w_i is a statistical weight.

To do these 177 calculations, we must generate 177 coordination files with the I⁻ ion centered at (0,0,0) and oxygen and hydrogen atoms in a 6Å radius sphere around the I⁻. Once we have generated these files, we can rapidly obtain the averaged spectrum and do the fit with an on-going automatic procedure for the calculation.

Effectuer une réservation : Confirmation

Réservation confirmée

Référence de réservation:

EBP6NM6

easyJet n'émet pas de billets Veuillez donc noter soigneusement ces renseignements. A l'enregistrement, vous n'aurez besoin que de votre passeport (ou toute autre [pièce d'identité valide avec photo](#)) et votre référence de réservation.

Mlle AMAL EL NAHHAS voyagera le:

	Dimanche 11 juin	Genève à Rome Ciampino
Vols	L'enregistrement commence à Dim 11 juin 16:50 et ferme à Dim 11 juin 18:20	vol 943; dép. Dim 11 juin 18:50 arr. Dim 11 juin 20:15
	Dimanche 18 aout	Rome Ciampino à Genève
	L'enregistrement commence à Dim 18 juin 18:45 et ferme à Dim 18 juin 20:15	vol 944; dép. Dim 18 juin 20:45 arr. Dim 18 juin 22:15

Paielements

Lundi 29 mai	Mastercard se terminant par 2529	CHF 361.40
	Total payé	

Informations importantes



Pas besoin de billet. easyJet est une compagnie aérienne qui n'émet pas de billets, et votre réservation est maintenant confirmée. Vous n'avez pas besoin de nous contacter avant le départ, pour reconfirmer votre voyage.



Informations sur l'enregistrement. L'enregistrement commence deux heures avant l'heure de départ du vol et ferme *exactement* 30 minutes avant le départ. Si vous êtes en retard, votre aerez perdu votre siège et vous ne recevrez aucun remboursement.



Passeports et pièces d'identité. [Une pièce d'identité avec photo, conforme à la loi en vigueur](#) , est obligatoire pour tous les vols, y compris les vols domestiques.



Bagages sécurisés. Faites attention lorsque vous faites vos bagages ! Vous ne pouvez pas emporter de [produits dangereux](#) et certains articles (briquets ou allumettes par exemple) ne peuvent être transportés que dans certaines parties de l'avion.



Franchise de bagages. Chaque passager payant a droit à un bagage à main standard, de 55 x 40 x 20 cm, et à un bagage en soute ne pesant pas plus de 20 kg. [Des frais supplémentaires](#) peuvent s'appliquer si vous dépassez ce quota.



Placement à bord. easyJet ne vous attribue pas de siège à l'enregistrement, vous pouvez donc choisir librement ou vous installer à bord. L'embarquement s'effectue cependant par ordre d'arrivée : plus tôt vous vous enregistrez, plus tôt vous embarquez et donc, plus vous avez le choix !



Besoins spécifiques et conditions d'accès. Veuillez nous prévenir de vos besoins spécifiques ou conditions d'accès avant en remplissant une demande lors de votre réservation en ligne ou en téléphonant à notre centre. Les passagers ayant des besoins spécifiques doivent enregistrer au moins 90 minutes avant l'heure de départ. [Cliquez ici pour vous connecter et modifier votre réservation.](#)

Besoin de modifier votre réservation ?

Vous pouvez changer le nom des passagers ou les dates et horaires des vols sur Internet, 24 heures sur 24 ! Les changements en ligne vous permettent aussi d'économiser de l'argent : vous recevez une remise de CHF 12.5 par personne et par vol par rapport au tarif de modification par téléphone.

Conditions du contrat

Le transport est soumis à la politique tarifaire en vigueur, aux [conditions de transport](#), et [aux réglementations correspondantes](#), que vous pouvez consulter sur ce site ou obtenir gratuitement sur demande aux bureaux du transporteur. Le transport par nos soins est régi par les réglementations et limites de responsabilité définies par la Convention de Varsovie.

Avis important. Si le trajet du passager se termine ou fait escale dans un pays autre que le pays de départ, la Convention de Varsovie peut s'appliquer. Elle gouverne, et dans la plupart des cas limite, la responsabilité du transporteur en cas de décès ou de blessures corporelles du passager et en cas de perte ou endommagement de bagages.