

# BL04B2 解析ソフトマニュアル

## 1. パラメーターファイルの準備

-----ここから、パラメーターファイルの例-----

```
// Num of data, [number of multidetectors (max 4): 0: 1 column, not other parameters], [shift for each multidetector: obligatory, if previous >0], [coefficients to multiply incoming data: optional]
```

```
1 7 0.0 8.0 16.0 24.1 32.02 40.0 48.0 (←データの数、スペースを空けて検出器の数 (現在は 7) スペースを空けて、7つの検出器の角度を入力、これらの値は CeO2 を使ってキャリブレーションする必要がある)
```

```
// signal and background file name
```

```
sio-1.dat siobg-1.dat (←試料データファイル名のあと、スペースを空けてバックグラウンドデータファイル名を入力。バックグラウンドのデータファイルが必要ない時は試料ファイル名のみでも実行可能)
```

```
// other param for v12 or later
```

```
// Number of elements species
```

```
2 (←試料に含まれる元素の数を入力、SiO2 ガラスの場合だと Si と O なので 2)
```

```
// atomic number and the number of each species
```

```
14 0.3333 0.295 -0.0139 0.0048 (←1 番目の元素の原子番号、組成、吸収係数1、異常散乱項 f', f'')
```

```
8 0.6667 0.195 -0.0055 0.0003 (←2 番目の元素の原子番号、組成、吸収係数、異常散乱項 f', f'')
```

```
// incident energy [keV]
```

```
61.4 (←X 線の入射エネルギーを入力)
```

```
// density of sample [g/cm3]
```

```
2.20 (←試料の密度[g/cm3]を入力)
```

```
// {1:Flat Plate (2  $\theta$  only) 2:Cylindrical 3:Flat Plate ( $\theta$  -2  $\theta$ )} {Thickness or Diameter [cm]}
```

```
1 0.2 (←試料の形状 (平板なら 1 (2  $\theta$  only scan) or 3 ( $\theta$  -2  $\theta$  scan), 円筒、玉なら 2)、厚さ[cm]を入力)
```

```
// Total Mass Attenuation Coefficient [cm2/g]
```

```
0.0 (←自動的にソフトが計算するので通常は 0.0 で良い)
```

```
// Polarization factor
```

```
0.05 (←通常は 0.05 で良い)
```

-----ここまで-----

<sup>1</sup> 質量吸収係数は例えば、<http://lipro.msl.titech.ac.jp/abcoeff/abcoeff2.html> (東工大佐々木研 HP) より引用する。

<sup>2</sup> 異常散乱項 f', f'' は例えば、<http://lipro.msl.titech.ac.jp/scatfac/scatfac.html> (東工大佐々木研 HP) より引用する。また、これらの項は吸収端から十分エネルギーが離れた高エネルギー X 線回折実験では影響は極めて小さいので、いずれの値も「0」としても解析を最終結果はほとんど変わらない。

## 2. 解析ソフトの使い方

(1) 「AXS.pxt」をダブルクリックすると下の図のような「BL04B2\_Ana」ウィンドウが出てくる。これからの手順では、左上→左下、右上→右下のように操作していく。

The screenshot shows the 'BL04B2\_Ana' software window. The interface is organized into several panels with different background patterns:

- Top Left (Green background):** Contains a red 'BL04B2 Analysis' header and a 'Load Data' button. Below are input fields for 'Density of sample',  $\mu/\rho$ , 'Polarization Factor', 'B.G. a', 'B.G. b',  $2\theta_0$ , and 'Dead time'. A 'Pol. corr.' checkbox is checked. A button labeled 'Abs, Pol & BKG Correction' is present.
- Middle Left (Green background):** Features a 'Smoothing' checkbox and a 'Combine Data' button.
- Bottom Left (Green background):** Includes 'Auto norm.' (checked), 'Calculation of S(Q)', 'Norm. factor', 'Recoil factor', 'Dump coeff.', and 'fitting to Scattering factor with Q range between 15 and 20'. A 'Subtract Compton scattering' checkbox is checked.
- Bottom Left (Light Green background):** Contains 'Set S(Q=0)', 'Q-range from 0 to 20', and 'with delta-Q 0.05'. A button labeled 'Interpolation of S(Q)' is at the bottom.
- Top Right (Light Green background):** Titled 'Calculation of G(r)', it has a 'Window Function' dropdown set to 'not use', 'r range from 0.01 to 100', and 'with delta-r 0.01'.
- Middle Right (Light Blue background):** Titled 'Set experimental density', it has 'Manual adjust' selected, an 'Auto adjust' option, a 'Show on graph' button, and a 'Number density' input field.
- Middle Right (Light Blue background):** A button labeled 'Transform G(r) into' followed by a dropdown set to 'T(r)'. Below it is a 'Coord. number fit' section with a 'with baseline fit' checkbox.
- Bottom Right (Light Blue background):** A 'Set g(r) to zero' button with a checked 'First range' checkbox, and 'from 0 to 0' input fields. Below is a 'Transform G(r) to S(Q)' button.
- Bottom Right (Light Blue background):** A 'Set this S(Q) as initial' button, followed by a '100% backtransformed S(Q)' dropdown.
- Bottom Right (Light Blue background):** A 'Save dataset' button, followed by a dropdown set to 'Original Q, S(Q) -> RMC'.

- (2) **Load Data** をクリックすると、パラメーターファイルを求められるので、指定して「開く」と、パラメーターファイルの中身が読み込まれ、「BL04B2\_Ana」 ウィンドウ内にも表示される。
- (3) **Abs, Pol & BKG Correction** をクリックすると、吸収補正、偏光因子補正、バックグラウンドの補正を実行する。もし値を変更したい場合は「BL04B2\_Ana」 ウィンドウに直接入力して、**Abs, Pol & BKG Correction** をクリックすると、変更した値で補正できる。
- (4) **Combine Data** をクリックすると、 $Q$  によって分割されたデータが、ひとつなぎのデータとして、つなぎ合わされる。
- (5) **Calculation of  $S(Q)$**  をクリックすると、構造因子  $S(Q)$  が計算され、「Observed  $S(Q)$ 」 ウィンドウに結果が表示される。 $S(Q)$  の high- $Q$  側が 1 の周りで上手く振動しない場合は、Dump coeff を 1e-05 程度のところで値を調整しながら **Calculation of  $S(Q)$**  をクリックして  $S(Q)$  の high  $Q$  側をチェックする。Recoil factor は Compton 散乱を調整する因子で、1 を目安に値を変えて、Dump coeff と組み合わせて  $S(Q)$  が 1 の周りに振動するように調整する。正しい  $S(Q)$  が得られたかどうかは、後の操作 (10) で確認できるため、とりあえず先に進んでも良い。このプロセスはトライアルアンドエラー的に行う必要がある。
- (6) 実際に使う  $Q$  範囲、および  $Q$  の間隔を入力して **Interpolation of  $S(Q)$**  をクリックすると、 $Q$  の間隔が一定になり、フーリエ変換による  $G(r)$  の導出に備える。
- (7) **Calculation of  $G(r)$**  をクリックすると、 $G(r)$  が計算され、「 $G(r)$ 」 ウィンドウに結果が表示される。
- (8) **Transform  $G(r)$  into** をクリックすると、 $T(r)$  かまたは RDF、 $g(r)$  を計算する。どれを計算するかは、すぐ右の  **$T(r)$**  プルダウンメニューの中から、あらかじめ選択しておく。原則として、一度目は、 $g(r)$  を選択する。

(9)実験から得られる  $S(Q)$  は実験的なエラーが含まれているため、 $g(r)$  の低い  $r$  領域にそれを反映した物理的に意味のない相関が観測される。そこで、本来 0 であるべき領域を見極めて、

**Set  $g(r)$  to zero** をクリックして、 $g(r)$  の低  $r$  領域を 0 にする。

$r$  の領域は **from**  **to**  に入力しておく。この操作は次の(10)の結果に反映される。物理的な意味のあるところまで 0 にしないように、 $r$  領域の設定は注意が必要。

(10) **Transform  $G(r)$  to  $S(Q)$**  をクリックすると、 $G(r)$  から  $S(Q)$  へ逆フーリエ変換される。

ここで、もともとの  $S(Q)$  と、逆フーリエで導出した  $S(Q)$  が  $Q < 1 \text{ \AA}^{-1}$  で大きく異なっていると  $g(r)$  の  $r$  の低い領域を 0 にしたことによる artifact がうまれている可能性が高いため、(3)~(5)の操作を繰り返す。特に(5)の「Recoil factor」と「Dump coeff」で調整できることが多い。

(11) **Set this  $S(Q)$  as initial** をクリックすると、逆フーリエ変換で計算された  $S(Q)$  を基にして、(7)や(8)の操作で  $G(r)$  などを計算することができる。このとき、**100% backtransformed  $S(Q)$**  プルダウンで実験データを少し反映させることもできる。例えば、「85%backtransformed  $S(Q)$ 」を選択しておく、逆フーリエ変換により得られた  $S(Q)$  が 85%、もともとの  $S(Q)$  が 15%の割合の新しい  $S(Q)$  を使うこともできる。この操作は物理的な意味はないが、逆フーリエ変換を行うことにより、原子散乱因子の打ち切りから生じるゴーストピークまでも消してしまうことがあるため、完全に  $r$  の小さいところを 0 にしないことを考慮した経験的な措置である。

(12)最終的な結果のファイル出力は **Save dataset** のクリックで行う。このとき何を出力するかはすぐ下の **Original Q,  $S(Q)$  → RMC** プルダウンから選択しておく。具体的には以下の選択肢がある。

「Original Q,  $S(Q)$  → RMC」 (←(5)で導出した  $S(Q)$  を RMC 形式で出力する。)

「interpolated Q,  $S(Q)$ 」 (←(6)で導出した  $S(Q)$  を RMC 形式で出力する。 $Q$  の間隔が一定になっている。)

「BckTrSF(85%) Q,  $S(Q)$  → RMC」(←(10)で逆フーリエ変換により導出した  $S(Q)$  85%、(5)で導出した  $S(Q)$  15%の割合で合成した  $S(Q)$  を RMC 形式で出力する。)

「SmBckTrSF(85%) Q,  $S(Q)$  → RMC」 (←85%逆変換のデータを更にスムージングした  $S(Q)$  を RMC 形式で出力する。)

「Original Q,  $S(Q)$ , errs(Q)」 (←(5)で導出した  $S(Q)$  とエラーを出力する。)

「interpolated Q,  $S(Q)$ 」

「BckTrSF(85%) Q,  $S(Q)$ 」

「SmBckTrSF(85%) Q,  $S(Q)$ 」

「BckTrSF(100%) Q,  $S(Q)$ 」

「r,  $g(r)$ 」

「r, G(r)」

「r, T(r)」

「r, RDF(r)」

「2theta, corrected raw sample, err」

「const. step, Q, I(Q), <f<sup>2</sup>>, <f<sup>2</sup>>」

「const. step, 85% sm. I(Q), <f<sup>2</sup>>, <f<sup>2</sup>>」