

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 3 0.0 16.0 32.0 (←データの数、スペースを空けて検出器の数（現在は3）スペースを空けて、3つの検出器の角度を
入力、0.0, 16.0, 32.0 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, f2)
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:Cylindrical} {Thickness or Diameter [cm]}
1 0.2 (←試料の形状（平板なら1、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)
```

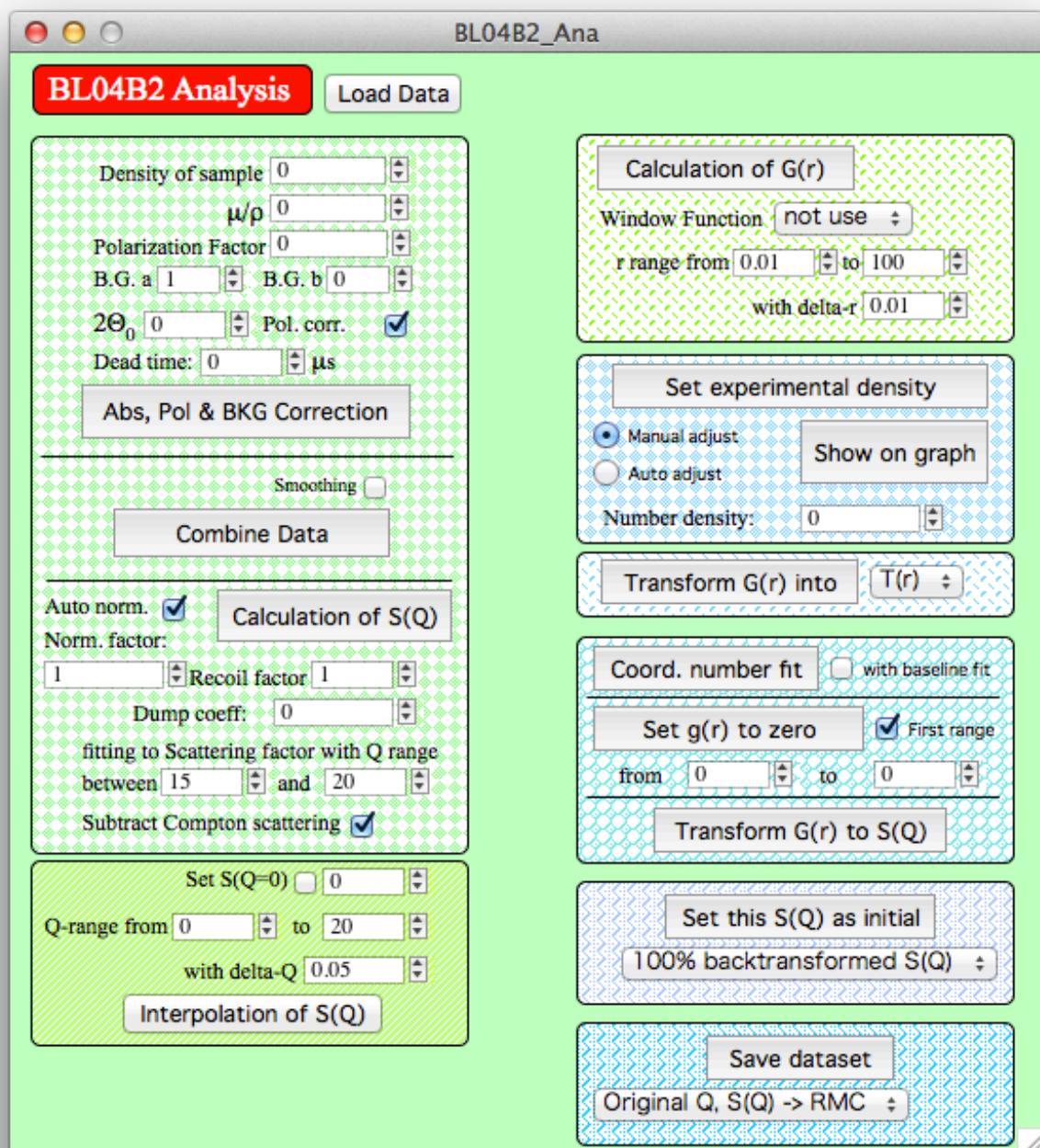
-----ここまで-----

¹ 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。

² 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。これから手順では、左上→左下、右上→右下のように操作していく。



(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みても良い。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。

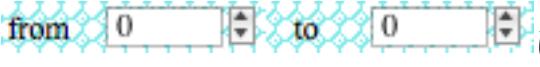
(6) 実際に使う Q 範囲、および Q の間隔を入力して **Interpolation of S(Q)** をクリックすると、 Q の間隔が一定になり、フーリエ変換による $G(r)$ の導出に備える。

(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、

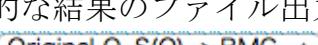
Set g(r) to zero をクリックして、 $g(r)$ の低 r 領域を 0 にする。

r の領域は  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 が生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、 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)」を選択しておくと、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  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), <f2>, <f>2」

「const. step, 85% sm. I(Q), <f2>, <f>2」