



Athenaによる 動径構造関数の導出

Athenaの位置づけ



Demeter
XAFS解析プログラム



Athena
測定データの解析
(データの読み込みからフーリエ変換まで)



Artemis
EXAFSデータへのモデルフィッティング



Hephaestus
各元素のデータベース
(吸収端や蛍光線のエネルギー、吸収係数の計算機能など)

- 最新のDemeterを入手する
- Athenaの起動と測定データの読み込み
- 解析操作の基本
- バックグラウンド処理の調整
- 複数データの比較方法
- Athenaのその他の機能

最新のDemeterを 入手する

- 最新のAthenaを入手する
- **Athenaの起動**と測定データの読み込み
- 解析操作の基本
- バックグラウンド処理の調整
- Athenaのその他の機能

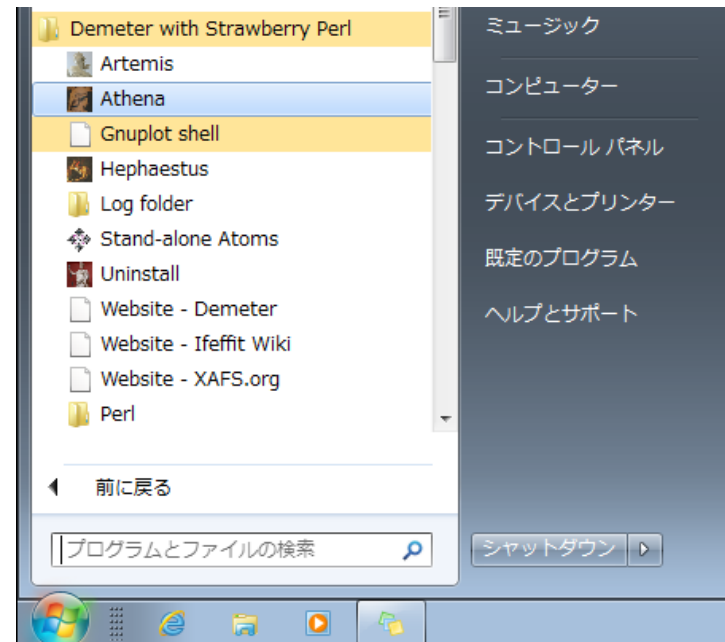
Athenaの起動

- ショートカットから

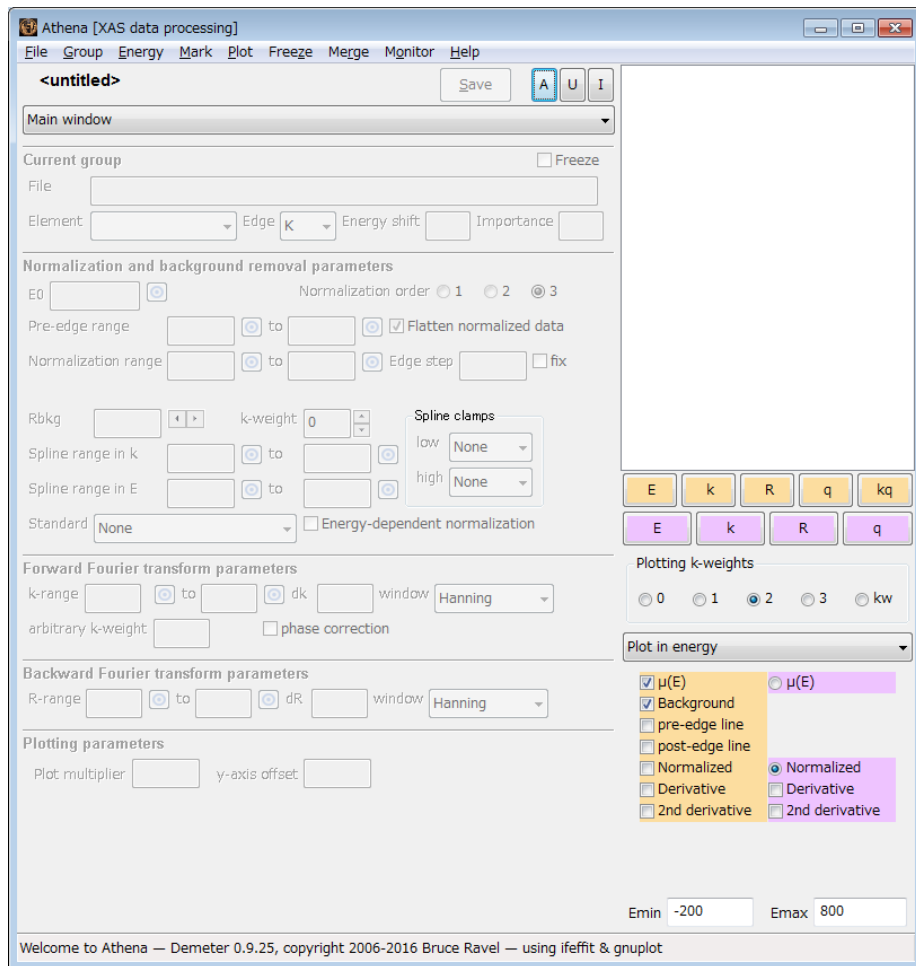


- スタートメニューから
スタート

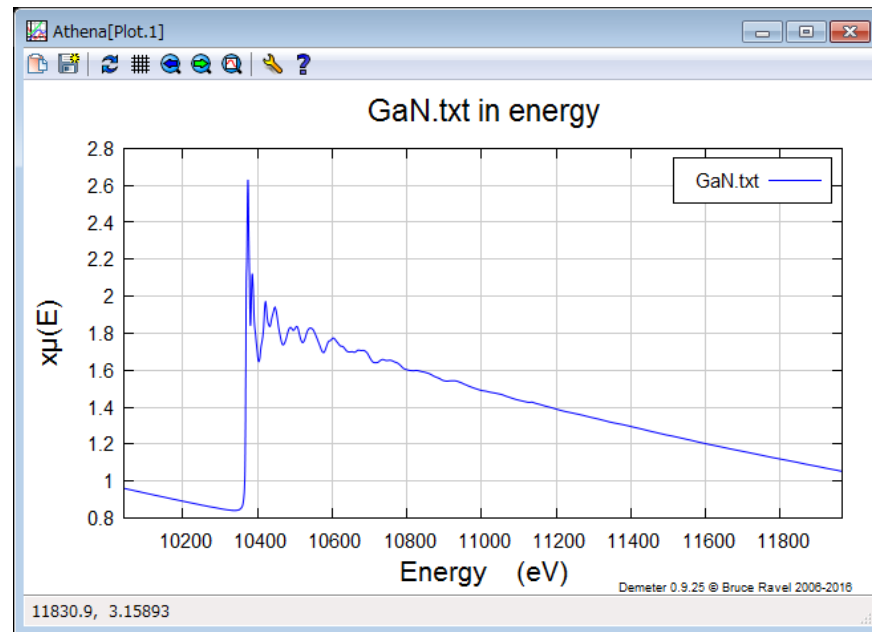
- Demeter with Strawberry Perl
- Athena



起動直後の画面

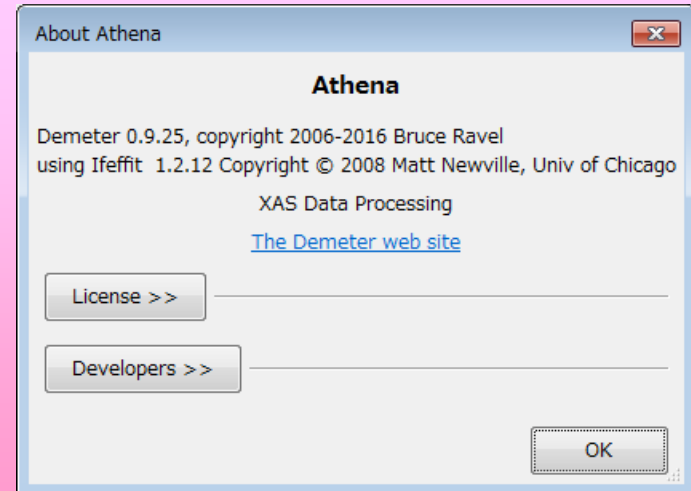
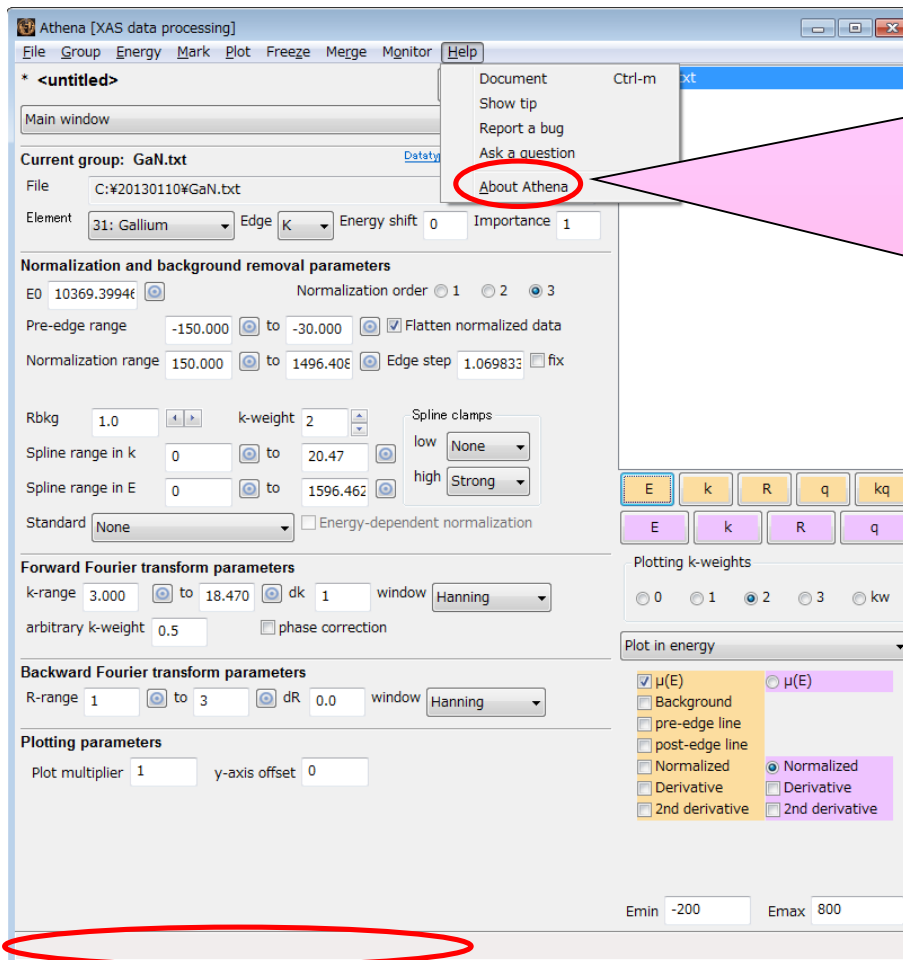


Athenaメイン画面



グラフ画面
(Athena起動直後は
グラフ表示なし)

バージョンの確認



[Help] – [About Athena]

Athena — Demeter 0.9.25, copyright 2006-2016

起動時にステータスバーに表示される

- 最新のAthenaを入手する
- Athenaの起動と**測定データの読み込み**
- 解析操作の基本
- バックグラウンド処理の調整
- Athenaのその他の機能

測定データの読み込み


その前に...

データファイルはお持ちですか？



イベント情報 > 講習会 / 実習用データ

▶▶ 産業利用に役立つXAFSIによる先端材料の局所状態解析2017 [実習用データ]

Title	file name	Download file
2017.1.30-31 実習用データ	practice_data_201701.zip	 88KB

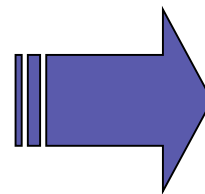
※ダウンロード & 解凍し、当日お持ちください。

※データの保存先

お持ち頂くノートPCのCドライブ直下に、解凍後生成される [practice_data_201701] フォルダに保存してください。



クリック



ダウンロード



practice_data_201701.zip

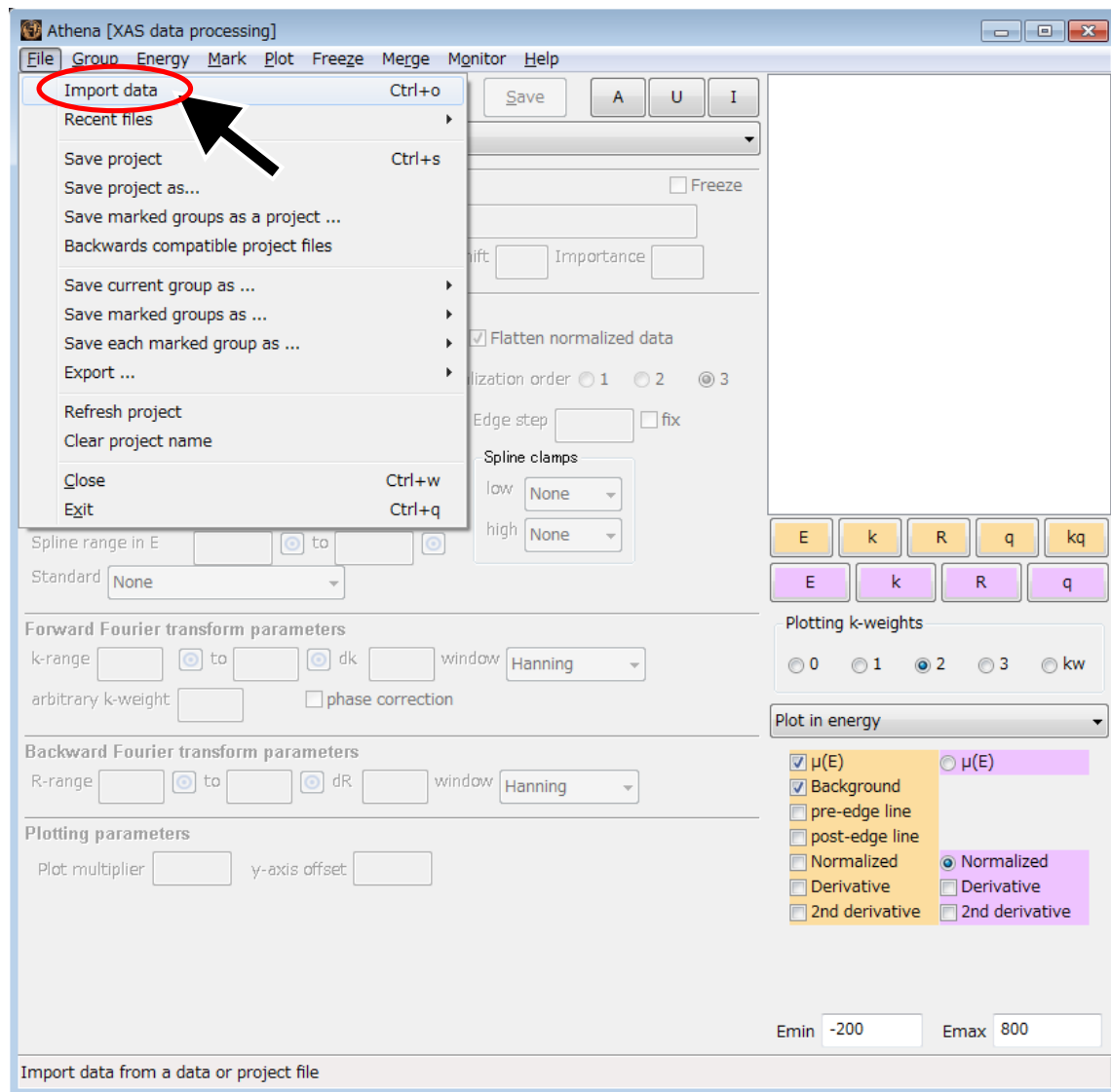
http://support.spring8.or.jp/Doc_lecture/Text_170130.html

測定データの読み込み

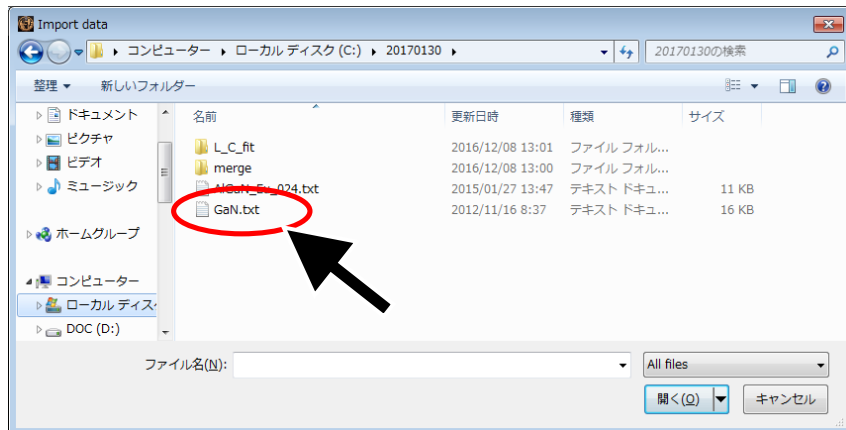
[File] – [Import data]

もしくは

Ctrl-o



ファイルオープンダイアログ



データファイル

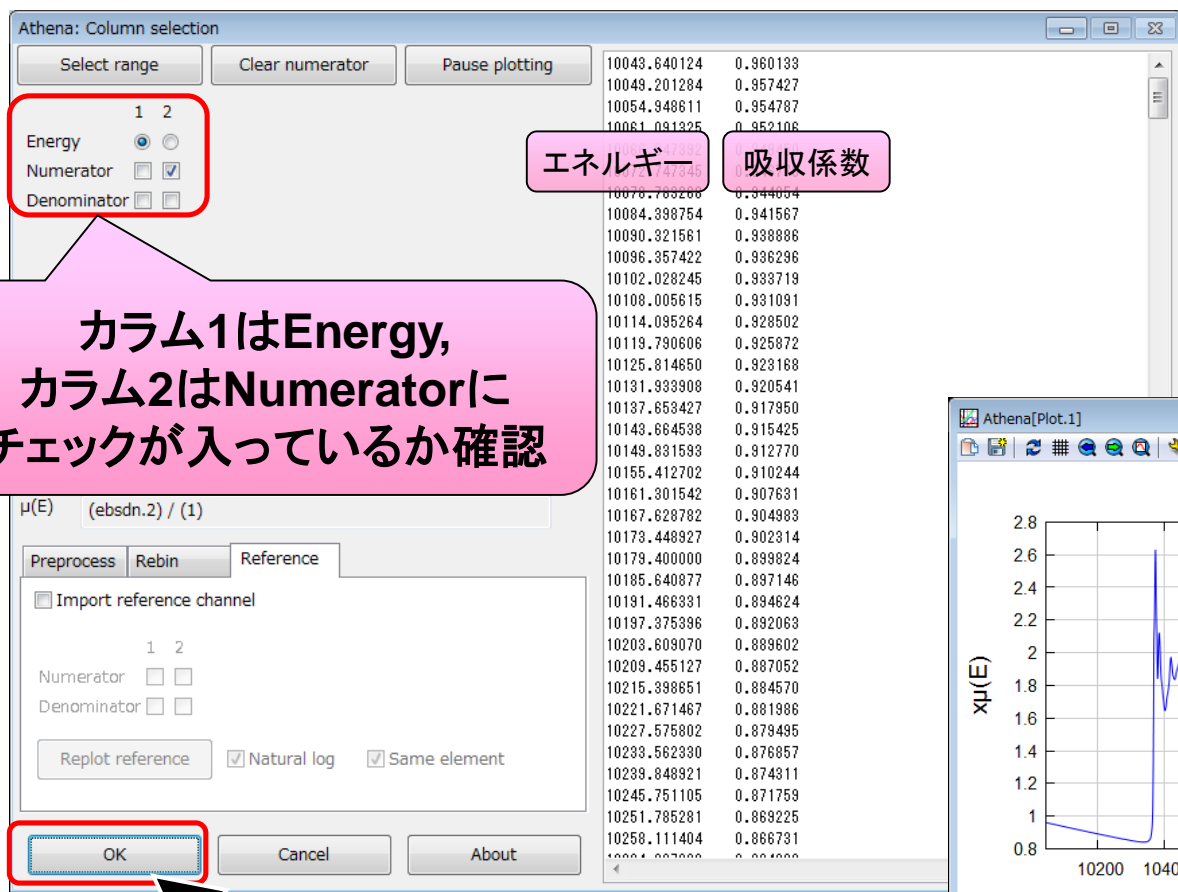
GaN.txt

の選択

読込可能ファイル形式

- カンマ区切り、タブ区切り、スペース区切りテキスト
 - Athenaプロジェクトファイル(.prj)
 - Athenaで出力したデータファイル(.norm, .chi等)
- ※ 必ずエネルギーに対応する列を含むこと

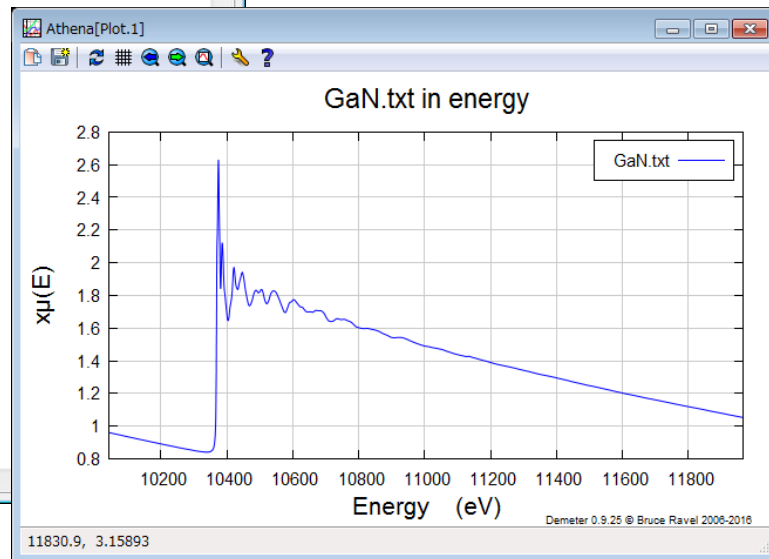
内容確認ダイアログ



コラム1はEnergy,
コラム2はNumeratorに
チェックが入っているか確認

2カラムのテキストファイル

ヘッダー等は 削除
もしくは
コメントアウト
(行の初めに「#」をつける)
しておく



OKボタンを押す

測定データの読み込み

読み込み直後

Athena [XAS data processing]

File Group Energy Mark Plot Freeze Merge Monitor Help

* <untitled> Save A U I

Main window

Current group: ZnO.txt

File C:\%20100113%ZnO.txt

Flamend 30: Zinc Edge K Energy shift 0 Importance 1

Background removal and normalization parameters

E0 9664.70221 Rbkg 1.0 Flatten normalized data

Algorithm Autobk k-weight 2 Normalization order 1 2 3

Pre-edge range -150.000 to -30.000 Edge step 0.933841 fix

Normalization range 150.000 to 1418.831

Spline range in k 0 to 19.966 Spline clamps low None high Strong

Spline range in E 0 to 1518.816

Standard None

Forward Fourier transform parameters

k-range 3.000 to 17.966 dk 1 window Hanning

arbitrary k-weight 0.5 phase correction

Backward Fourier transform parameters

R-range 1 to 3 dR 0.0 window Hanning

Plotting parameters

Plot multiplier 1 y-axis offset 0

Change data processing and analysis tools using this menu.

ZnO.txt

データグループ

E k R q kq

Eを選択

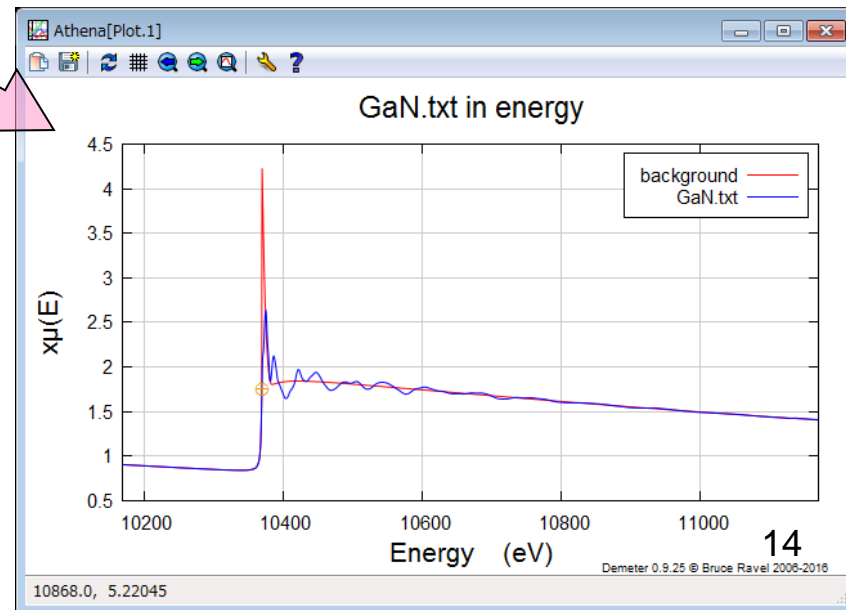
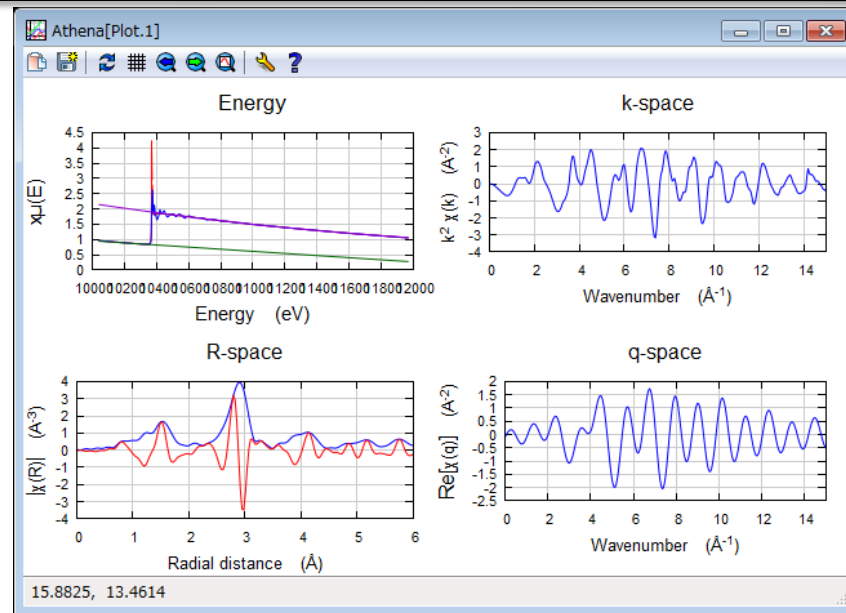
Plotting k-weight 0 1

Plot in energy

- $\mu(E)$ $\mu(k)$
- Background
- pre-edge line
- post-edge line
- Normalized Normalized
- Derivative Derivative
- 2nd derivative 2nd derivative

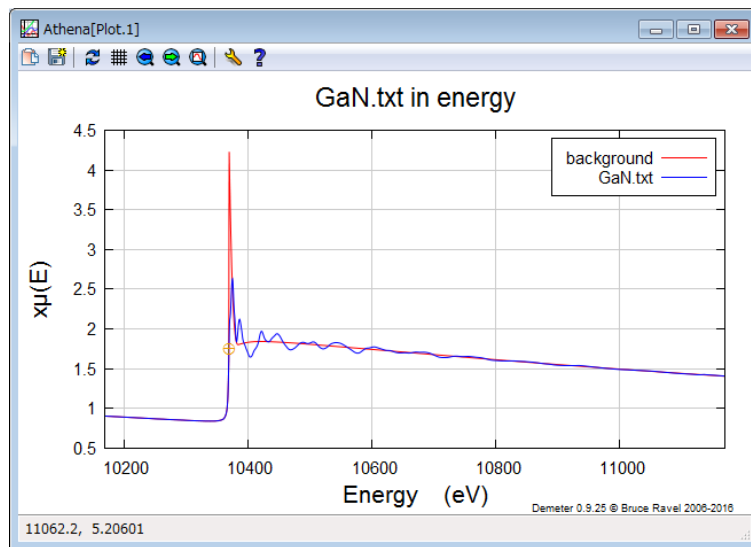
プロットオプション

Emin -200 Emax 800



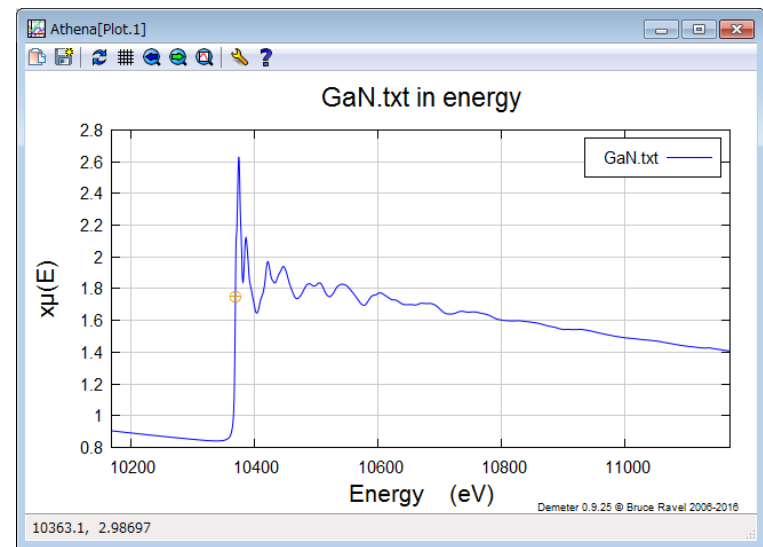
プロットオプションを操作する

mu(E) + background



- μ(E)
- Background
- pre-edge line
- post-edge line
- Normalized
- Derivative
- 2nd derivative

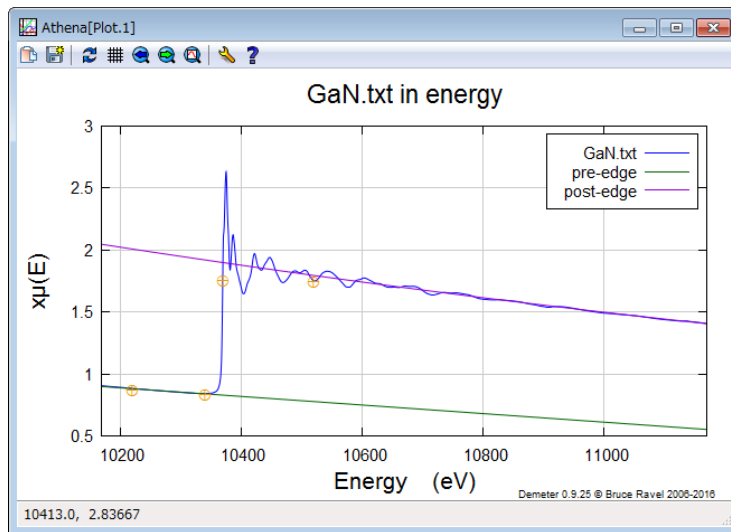
mu(E)



- μ(E)
- Background
- pre-edge line
- post-edge line
- Normalized
- Derivative
- 2nd derivative

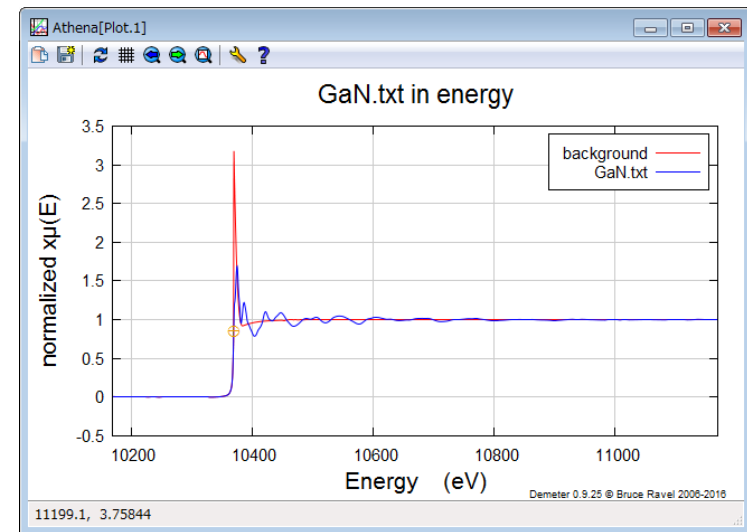
プロットオプションを操作する

mu(E)
+ pre-edge line
+ post-edge line



- $\mu(E)$
- Background
- pre-edge line
- post-edge line
- Normalized
- Derivative
- 2nd derivative

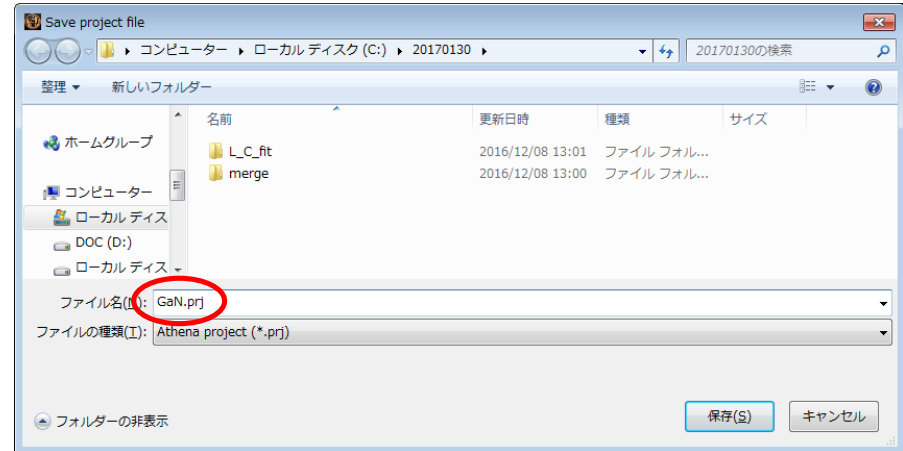
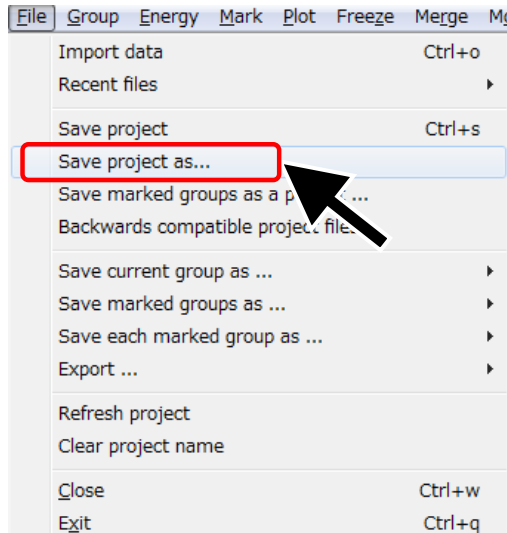
mu(E)
+ background
+ Normalized



- $\mu(E)$
- Background
- pre-edge line
- post-edge line
- Normalized
- Derivative
- 2nd derivative

プロジェクトファイルの保存

[File] – [Save entire project as...]

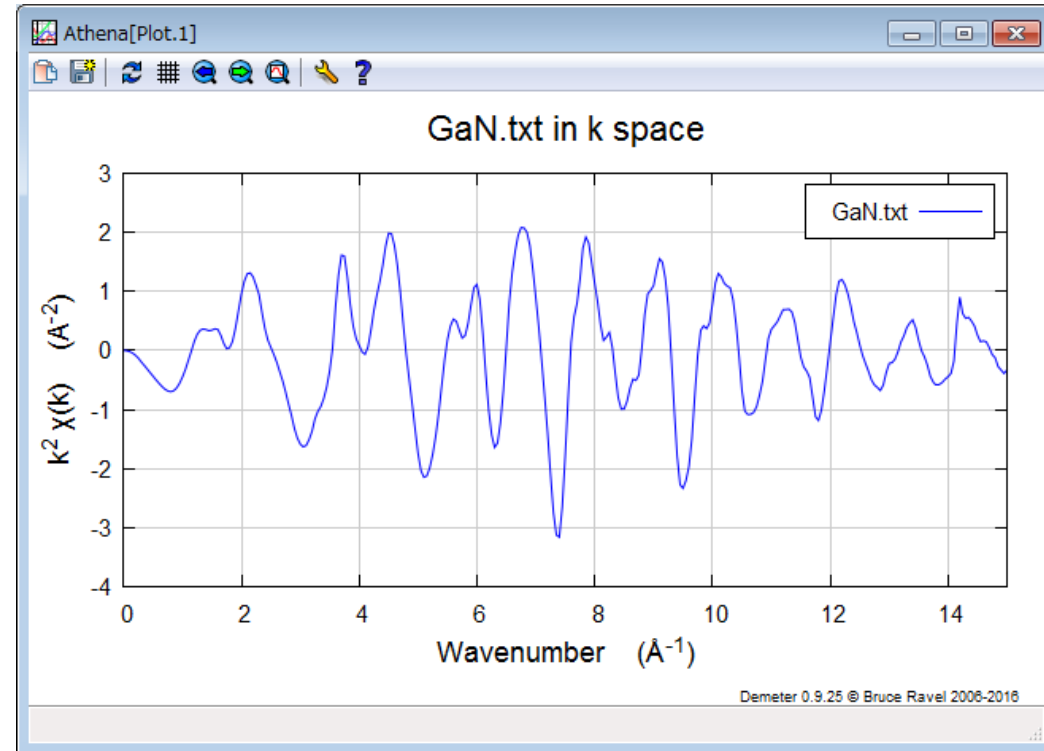
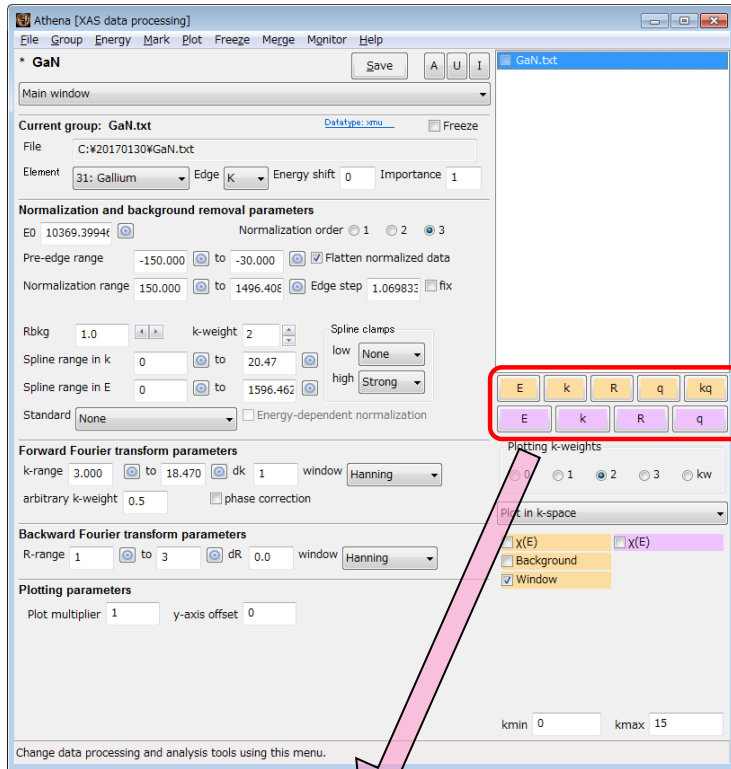


ファイル名 : GaN.prjで保存

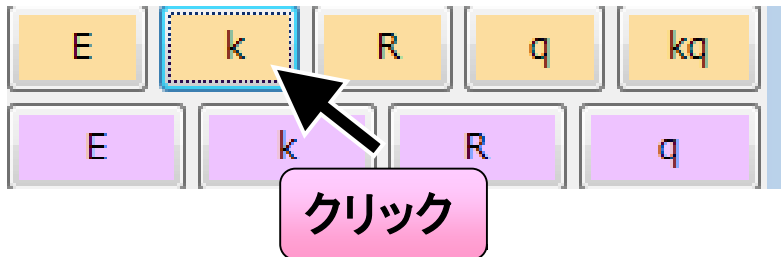
GaN.prjは
Artemisの実習で使用します。
大切に保存しておいてください。

- 最新のAthenaを入手する
- Athenaの起動と測定データの読み込み
- **解析操作の基本**
- バックグラウンド処理の調整
- Athenaのその他の機能

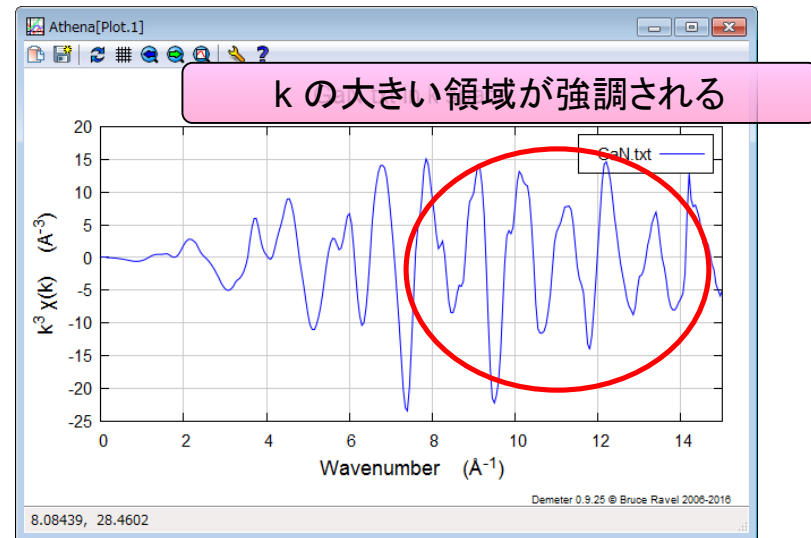
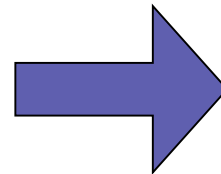
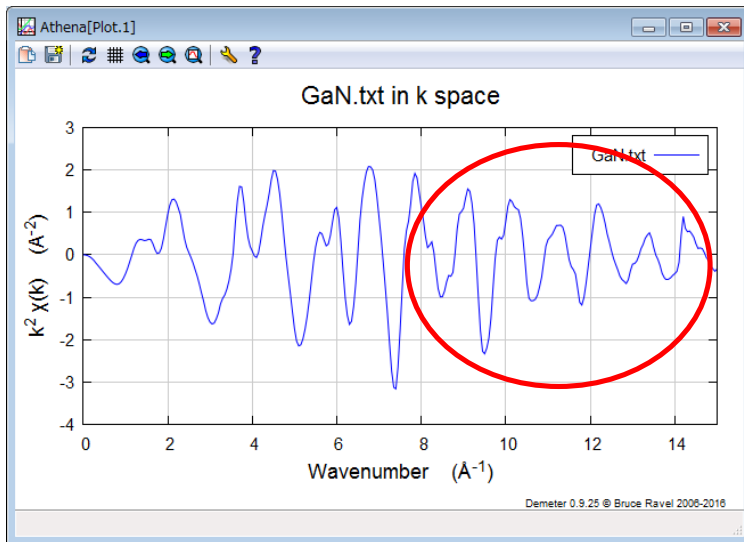
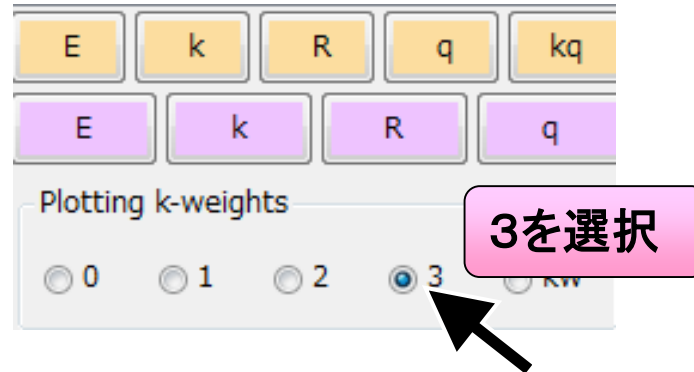
EXAFS振動の表示



EXAFS振動



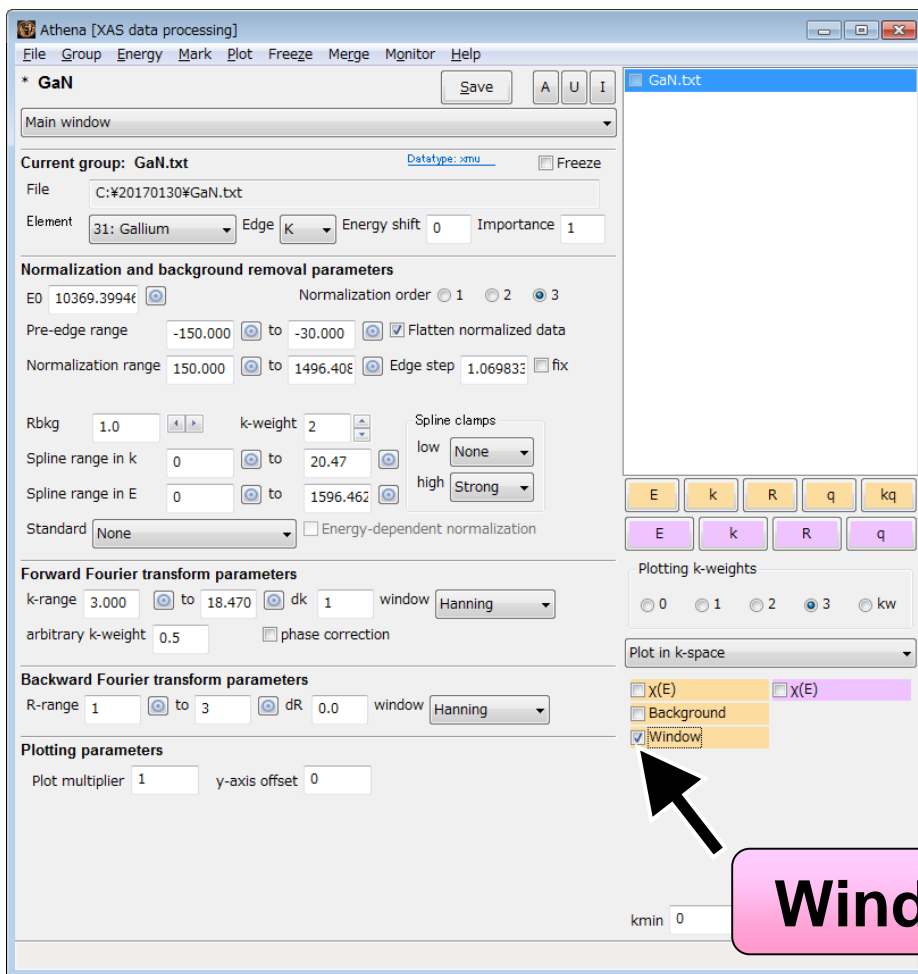
EXAFS振動の強調処理



$$n = 2$$
$$k^2 \cdot \chi(k)$$

$$n = 3$$
$$k^3 \cdot \chi(k)$$

フーリエ変換パラメータ



Athena [XAS data processing]

File Group Energy Mark Plot Freeze Merge Monitor Help

* GaN Save A U I GaN.txt

Main window

Current group: GaN.txt Datatype: xmu Freeze

File C:\¥20170130\GaN.txt

Element 31: Gallium Edge K Energy shift 0 Importance 1

Normalization and background removal parameters

E0 10369.3994e Normalization order 1 2 3

Pre-edge range -150.000 to -30.000 Flatten normalized data

Normalization range 150.000 to 1496.40e Edge step 1.06983e fix

Rbkg 1.0 k-weight 2 Spline clamps low None high Strong

Spline range in k 0 to 20.47

Spline range in E 0 to 1596.462

Standard None Energy-dependent normalization

Forward Fourier transform parameters

k-range 3.000 to 18.470 dk 1 window Hanning

arbitrary k-weight 0.5 phase correction

Backward Fourier transform parameters

R-range 1 to 3 dR 0.0 window Hanning

Plotting parameters

Plot multiplier 1 y-axis offset 0

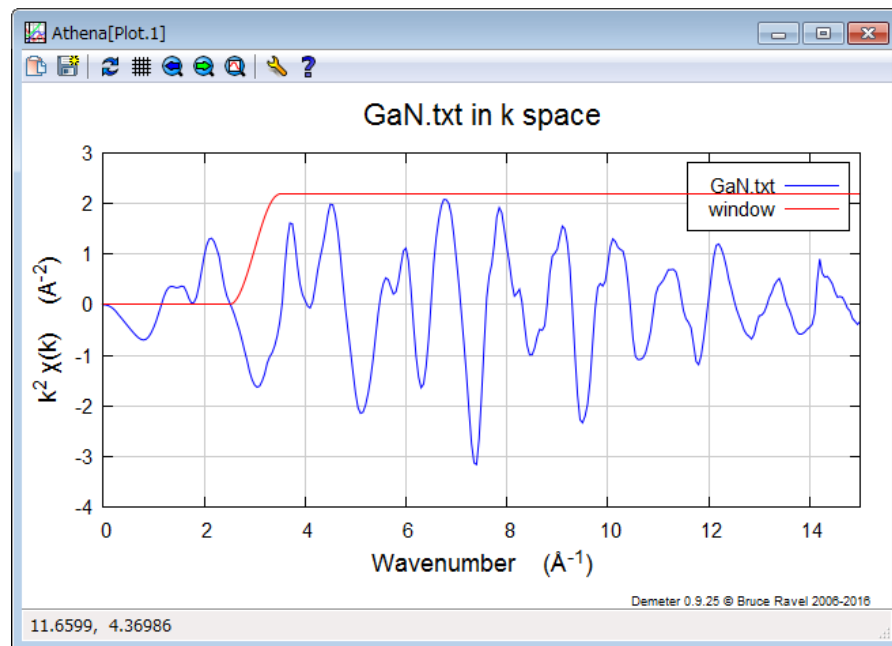
Plot in k-space

X(E) X(E)

Background

Window

kmin 0



Windowをチェック

フーリエ変換パラメータ

Athena [XAS data processing]

File Group Energy Mark Plot Freeze Merge Monitor Help

* GaN Save A U I GaN.txt

Main window

Current group: GaN.txt Datatype: xmu Freeze

File C:\¥20170130¥GaN.txt

Element 31: Gallium Edge K Energy shift 0 Importance 1

Normalization and background removal parameters

E0 10369.3994e Normalization order 1 2 3

Pre-edge range -150.000 to -30.000 Flatten normalized data

Normalization range 150.000 to 1496.40e Edge step 1.06983e fix

Rbkg 1.0 k-weight 2 Spline clamps

Forward Fourier transform parameters

k-range 3.000 to 14 dk 1 window Hanning

arbitrary k-weight 0.5 phase correction

Backward Fourier transform parameters

R-range 1 to 3 dR 0.0 window Hanning

Plotting parameters

Plot multiplier 1 y-axis offset 0

Plotting k-weights

0 1 2 3 kw

Plot in k-space

X(E) X(E)

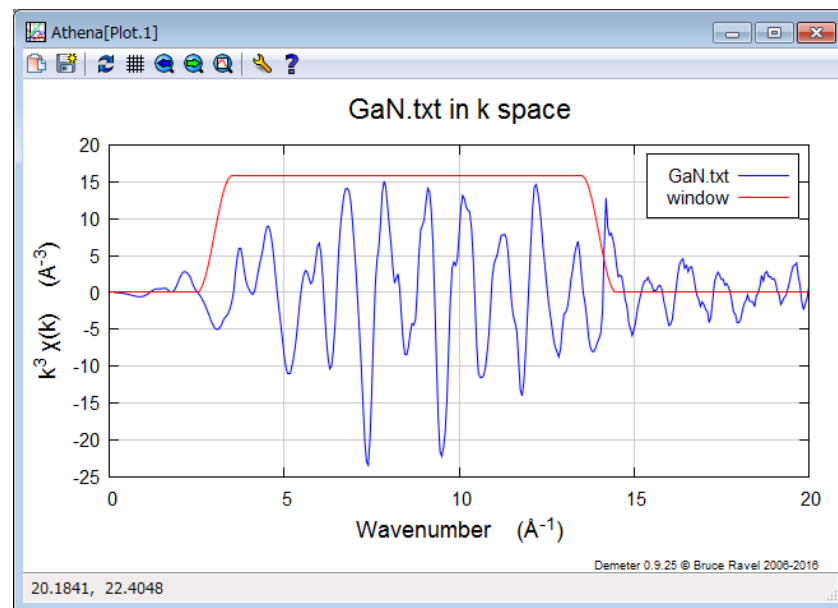
Background

Window

kmin 0 kmax 20

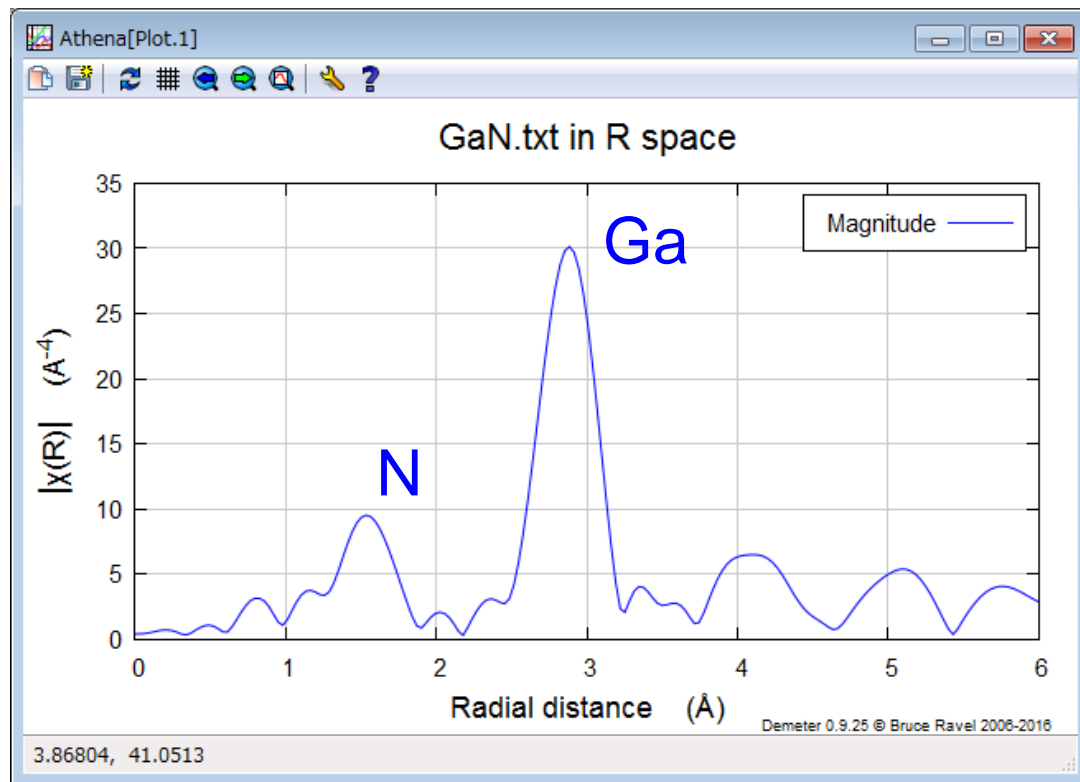
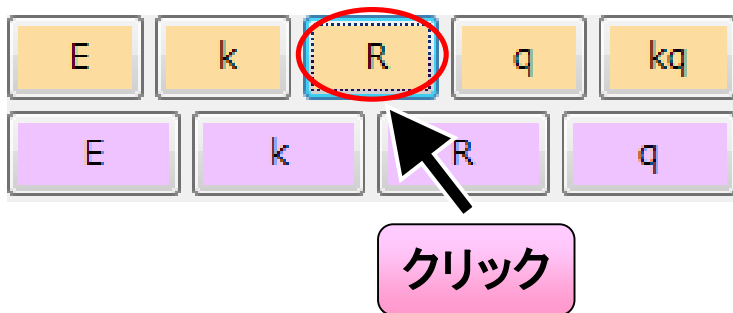
Change data processing and analysis tools using this menu.

ウィンドウの範囲を3~14にする

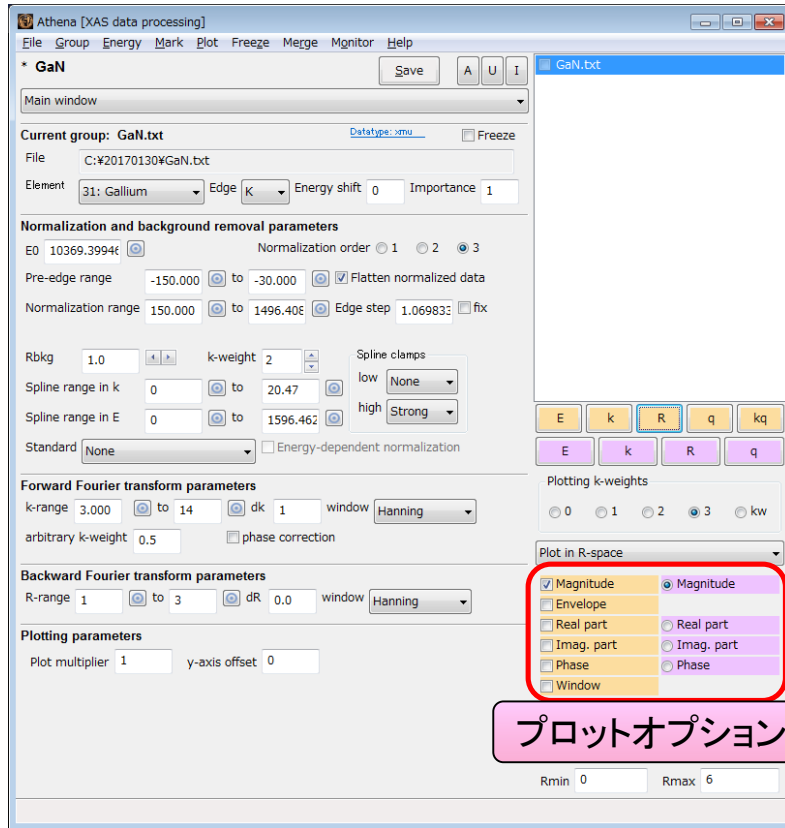


k の範囲を最大20まで広げる

フーリエ変換スペクトルの表示



FTプロットのバリエーション



Athena [XAS data processing]

File Group Energy Mark Plot Freeze Merge Monitor Help

* GaN Save A U I GaN.txt

Main window

Current group: GaN.txt Datatype: xmu Freeze

File C:\20170130\GaN.txt

Element 31: Gallium Edge K Energy shift 0 Importance 1

Normalization and background removal parameters

EO 10369.3994e Normalization order 1 2 3

Pre-edge range -150.000 to -30.000 Flatten normalized data

Normalization range 150.000 to 1496.40e Edge step 1.06983e fix

Rbkg 1.0 k-weight 2 Spline clamps low None high Strong

Spline range in k 0 to 20.47

Spline range in E 0 to 1596.46e

Standard None Energy-dependent normalization

Forward Fourier transform parameters

k-range 3.000 to 14 dk 1 window Hanning

arbitrary k-weight 0.5 phase correction

Backward Fourier transform parameters

R-range 1 to 3 dR 0.0 window Hanning

Plotting parameters

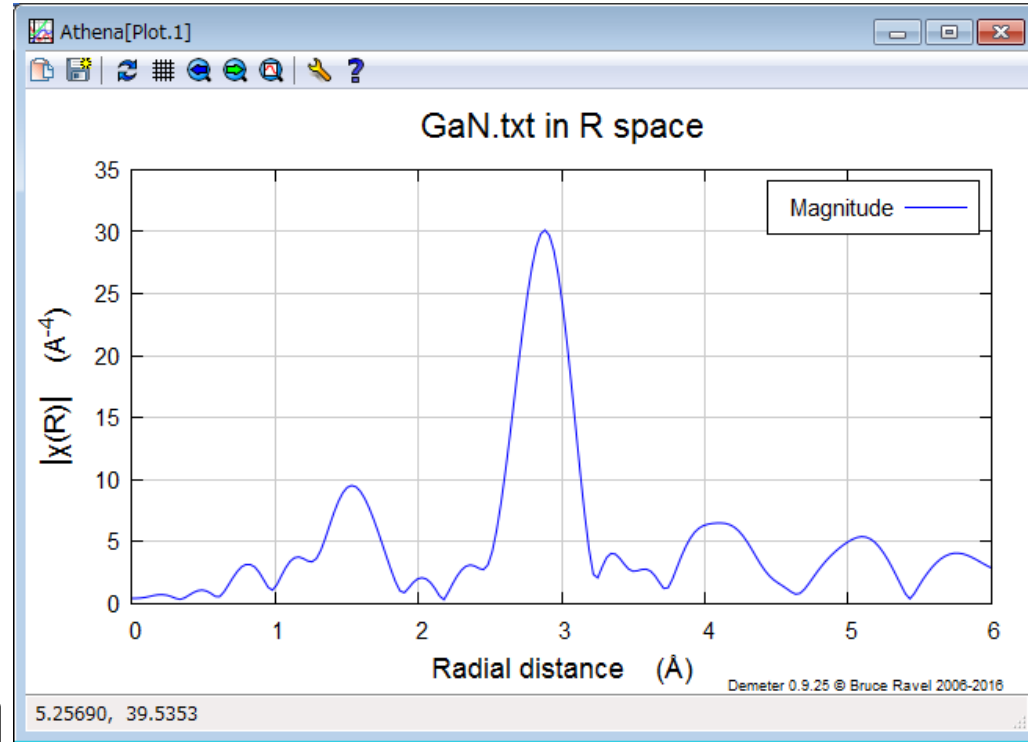
Plot multiplier 1 y-axis offset 0

Plot in R-space

- Magnitude Magnitude
- Envelope
- Real part Real part
- Imag. part Imag. part
- Phase Phase
- Window

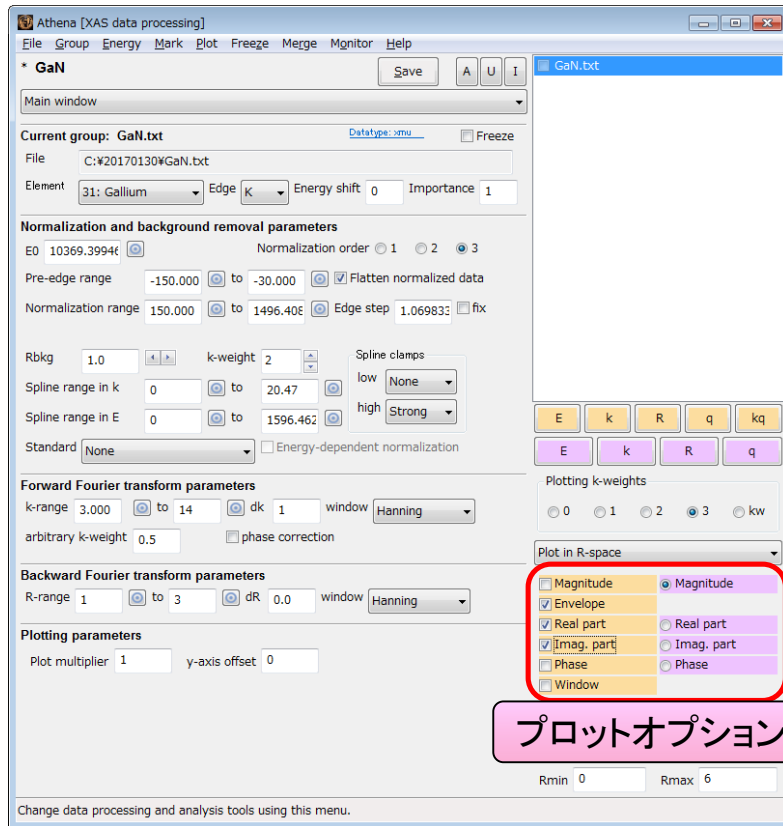
Rmin 0 Rmax 6

プロットオプション



Magnitude (default)

FTプロットのバリエーション



Athena [XAS data processing]

File Group Energy Mark Plot Freeze Merge Mgnitor Help

* GaN Save A U I GaN.txt

Main window

Current group: GaN.txt Datatype: xmu Freeze

File C:\W20170130\GaN.txt

Element 31: Gallium Edge K Energy shift 0 Importance 1

Normalization and background removal parameters

EO 10369.3994e Normalization order 1 2 3

Pre-edge range -150.000 to -30.000 Flatten normalized data

Normalization range 150.000 to 1496.40e Edge step 1.06983e fix

Rbkg 1.0 k-weight 2 Spline clamps low None

Spline range in k 0 to 20.47 high Strong

Spline range in E 0 to 1596.46e Energy-dependent normalization

Standard None

Forward Fourier transform parameters

k-range 3.000 to 14 dk 1 window Hanning

arbitrary k-weight 0.5 phase correction

Backward Fourier transform parameters

R-range 1 to 3 dR 0.0 window Hanning

Plotting parameters

Plot multiplier 1 y-axis offset 0

Plot in R-space

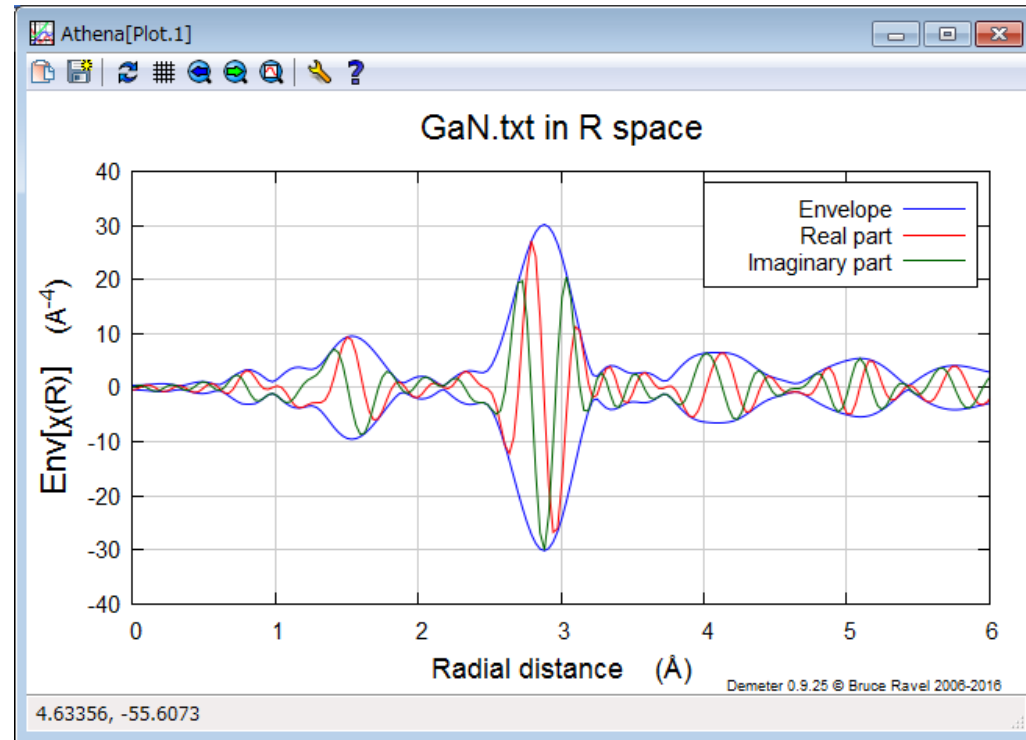
- Magnitude
- Envelope
- Real part
- Imag. part
- Phase
- Window

Plotting k-weights 0 1 2 3 kw

Rmin 0 Rmax 6

Change data processing and analysis tools using this menu.

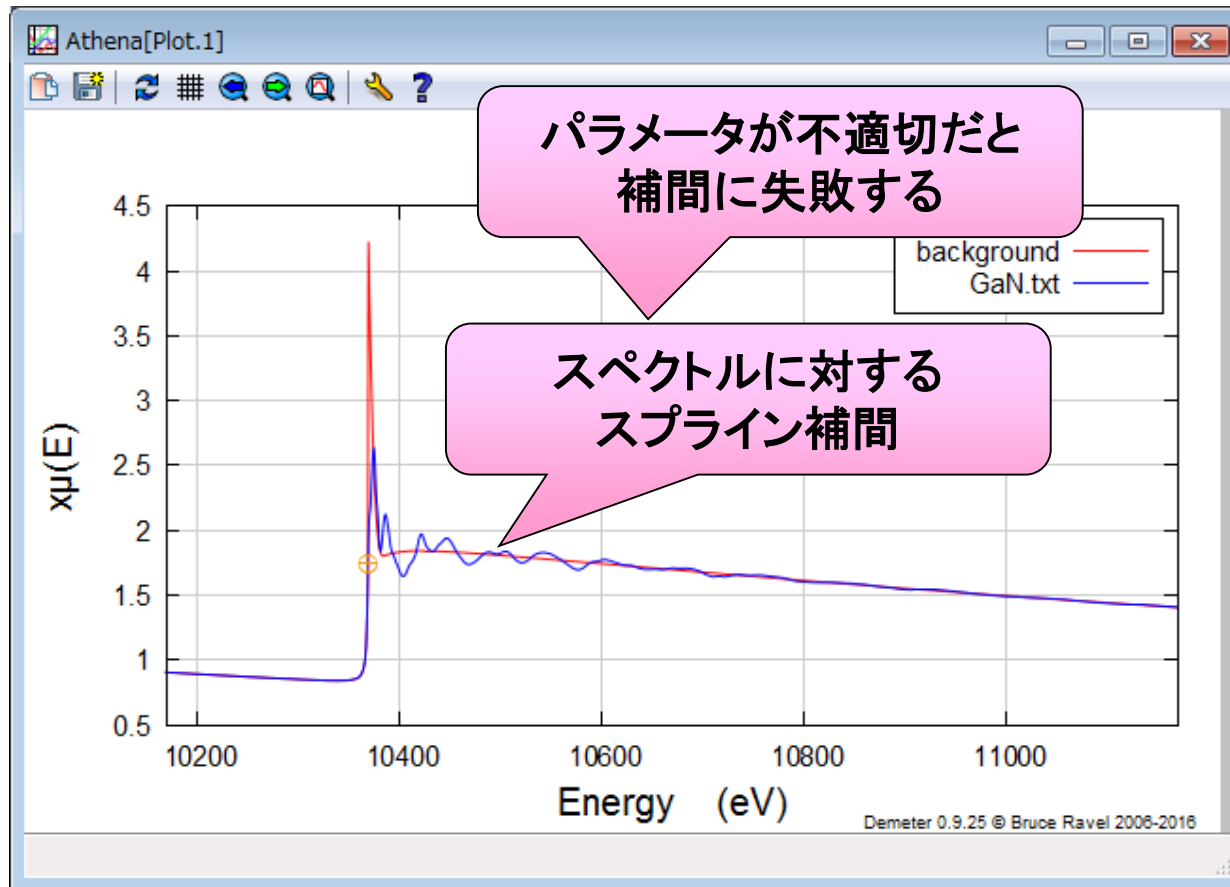
プロットオプション

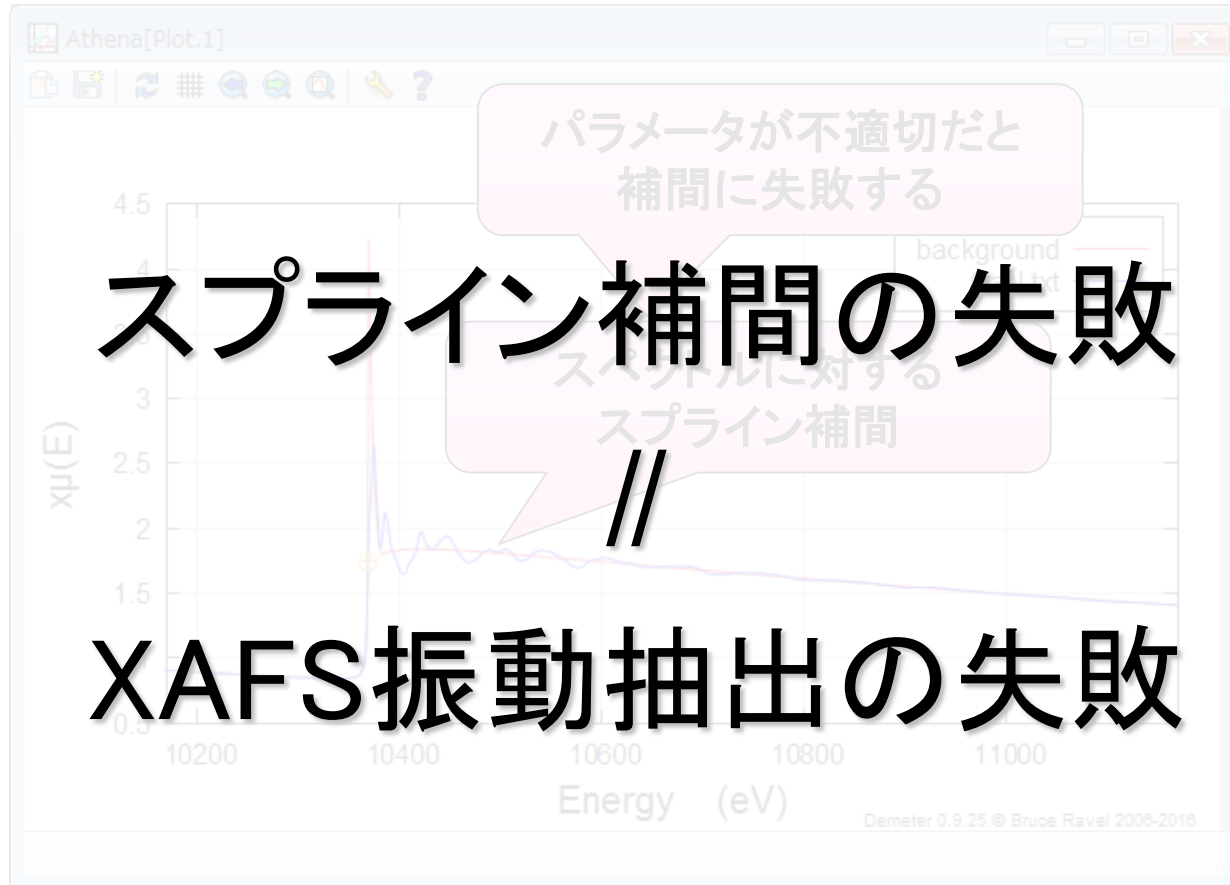


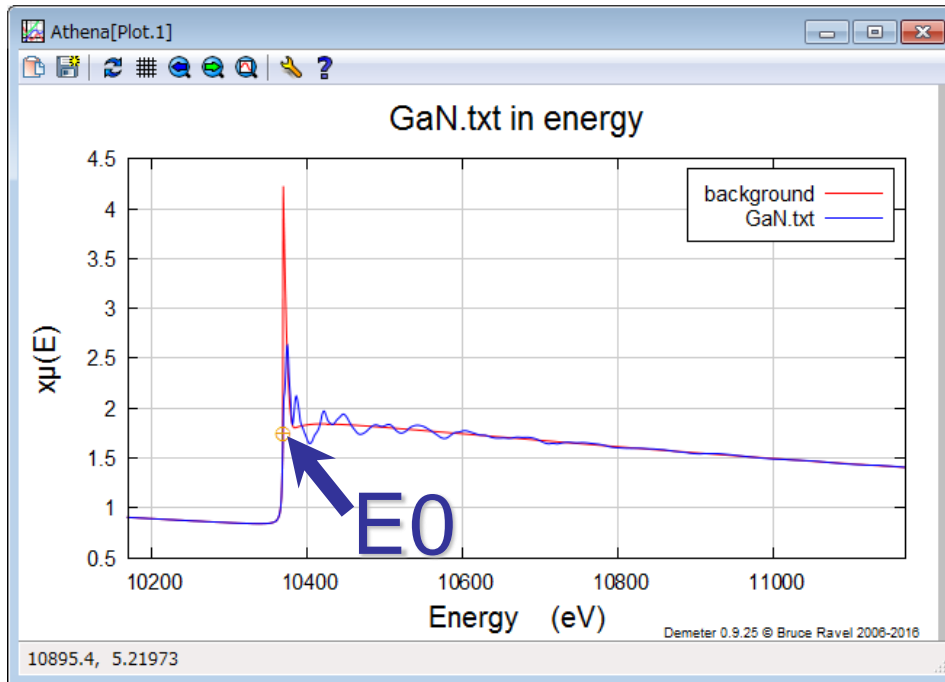
Envelop
+ Real part
+ Imaginary part

- 最新のAthenaを入手する
- Athenaの起動と測定データの読み込み
- 解析操作の基本
- **バックグラウンド処理の調整**
- Athenaのその他の機能

「バックグラウンド」とは





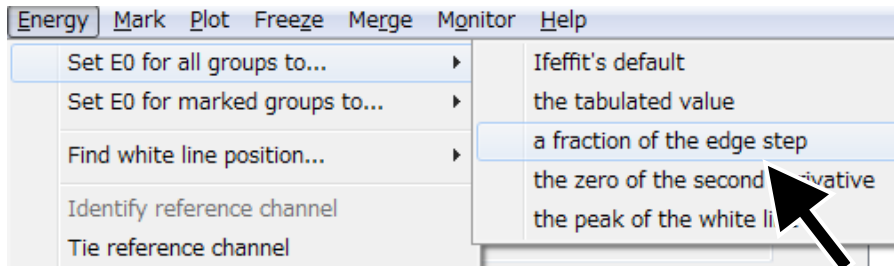


- XAFS振動の周期や振幅に影響
- 任意性がある
- デフォルト: $\mu(E)$ 1回微分のピーク位置

**S/Nや吸収端近傍の構造によっては
デフォルトのアルゴリズムに頼れない**

E0の調整方法 その1

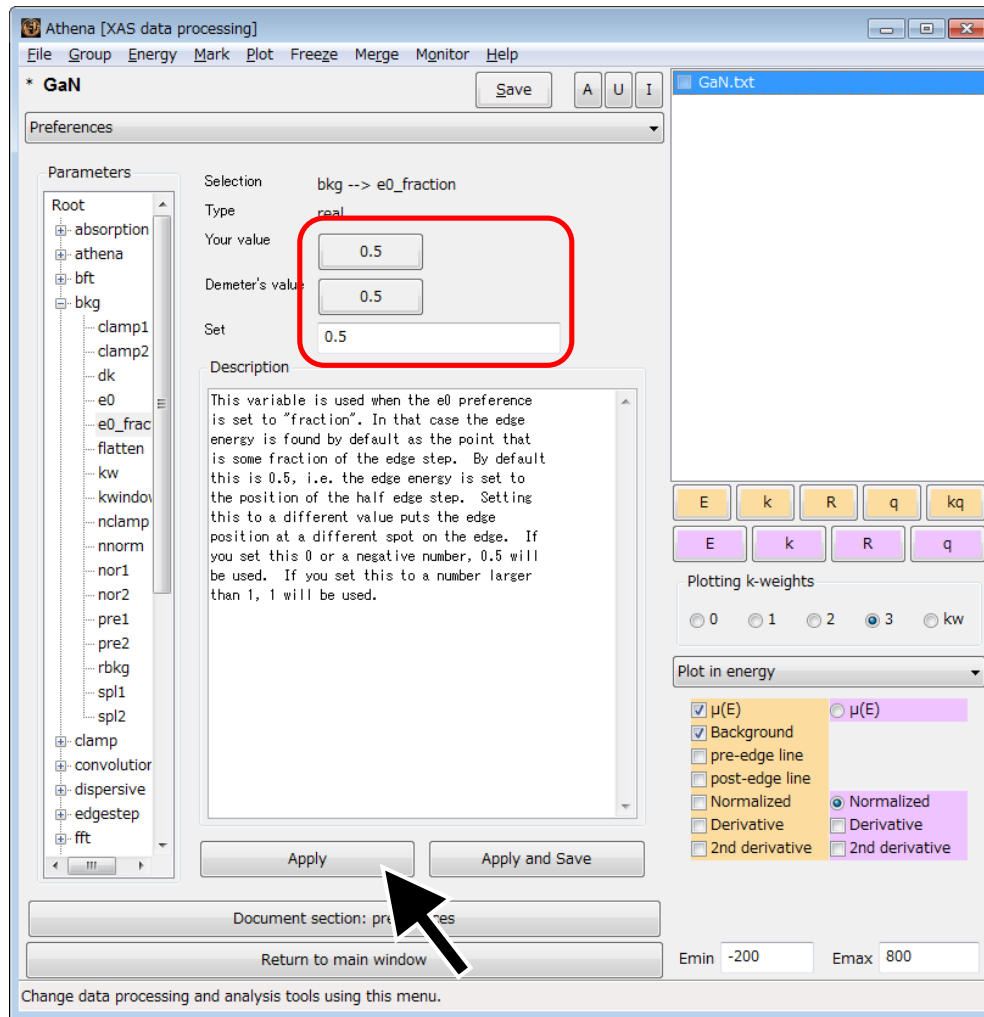
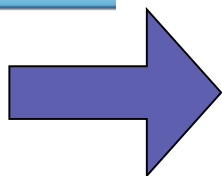
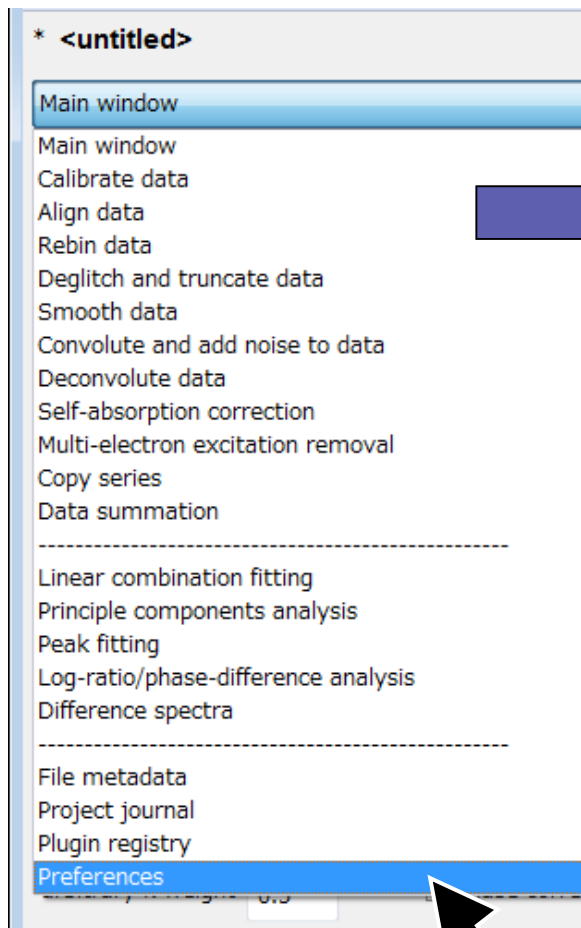
アルゴリズムを選択



項目	アルゴリズム
Iffefit's default	一回微分曲線の第一ピーク
the tabulated value	テーブル値
a fraction of the edge step	規格化後エッジジャンプの0.5
the zero of the second derivative	二回微分曲線のゼロ交差点
the peak of the white line	ホワイトラインのピーク

E0の調整方法 その1

fraction値の設定



直接数値を編集

Normalization and background removal parameters

E0 Normalization order 1 2 3

Pre-edge range to Flatten normalized data

Normalization range to Edge step fix

Rbkg k-weight

Spline range in k to

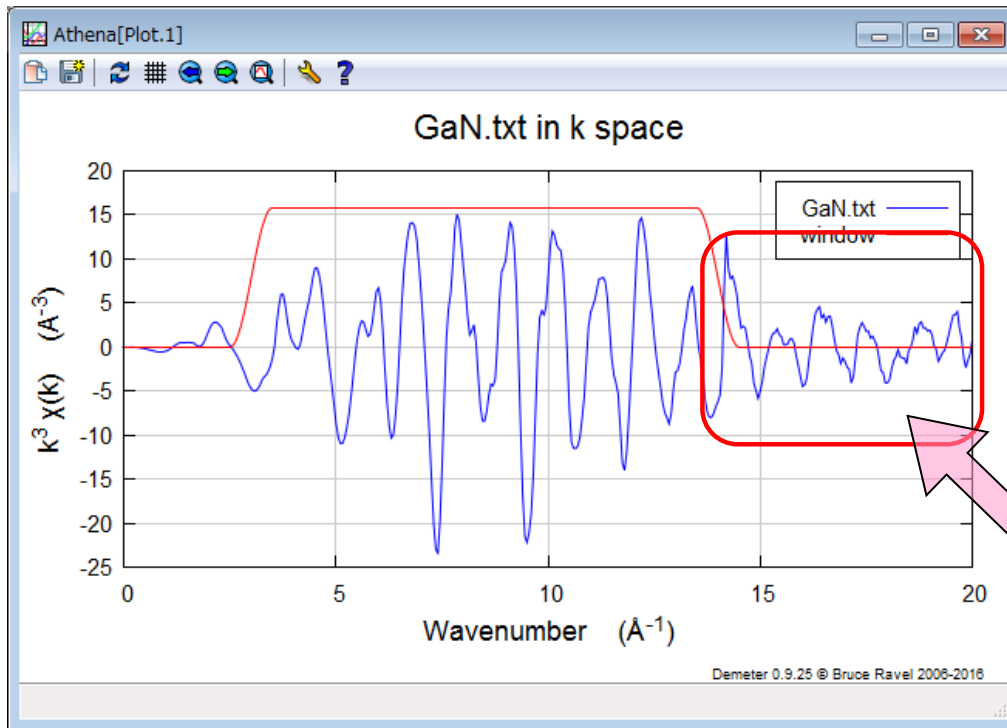
Spline range in E to

Standard Energy-dependent normalization

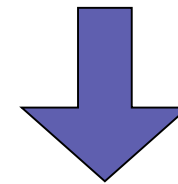
Spline clamps
low
high

スプライン領域の変更

k の大きな領域でS/Nが悪い場合



バックグラウンドの決定に悪影響



計算領域から除去したい

スプライン領域の変更

Athena [XAS data processing]

File Group Energy Mark Plot Freeze Merge Monitor Help

* GaN Save A U I GaN.txt

Main window

Current group: GaN.txt Datatype: xmu Freeze

File C:\20170130\GaN.txt

Element 31: Gallium Edge K Energy shift 0 Importance 1

Normalization and background removal parameters

E0 10369.3994 Normalization order 1 2 3

Spline range in k 0 to 9 low None

Spline range in E 0 to 308.6087 high Strong

Standard None Energy-dependent normalization

Forward Fourier transform parameters

k-range 3.000 to 8 dk 1 window Hanning

arbitrary k-weight 0.5

Backward Fourier transform parameters

R-range 1 to 3

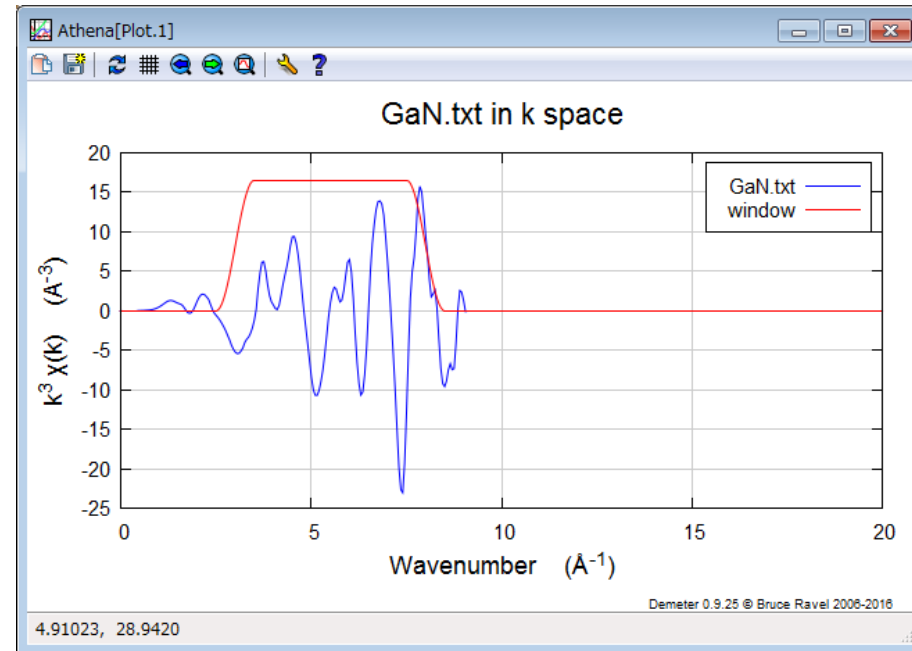
Plotting parameters

Plot multiplier 1 y-axis offset 0

kmin 0 kmax 20

Click to select. Right click to post a menu. Drag and drop to add data.

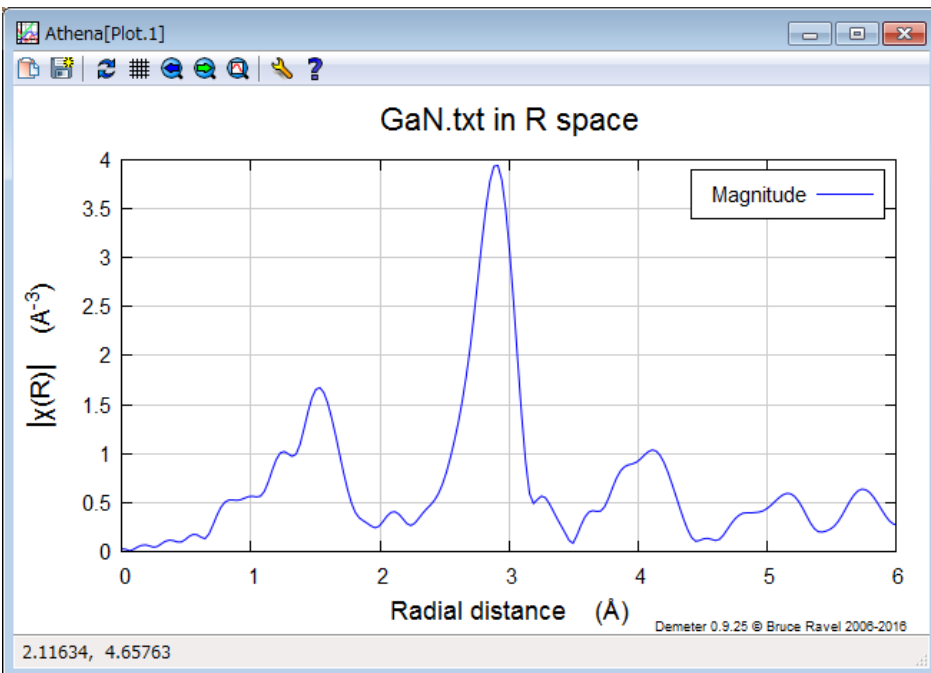
EXAFS振動



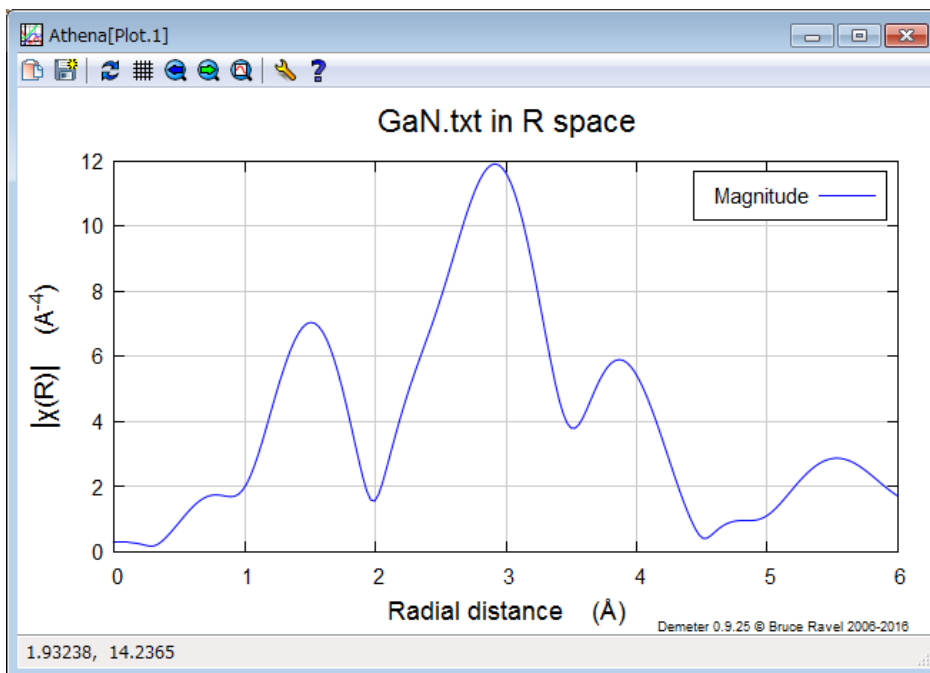
演算範囲が制限される

(注)ただし、一連の系列のデータ解析をする場合は、同じ範囲にする。

スプライン領域変更の効果



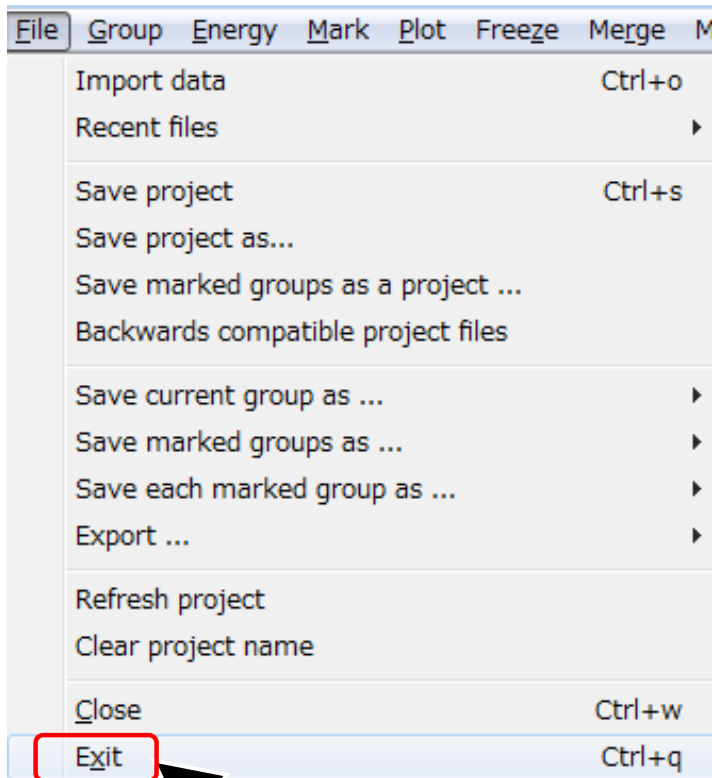
スプライン変更前



変更後

Athenaの終了

[File] – [Exit]



**Athenaを終了させて
再度起動しましょう。**
(GaN.prjを上書きしないように)

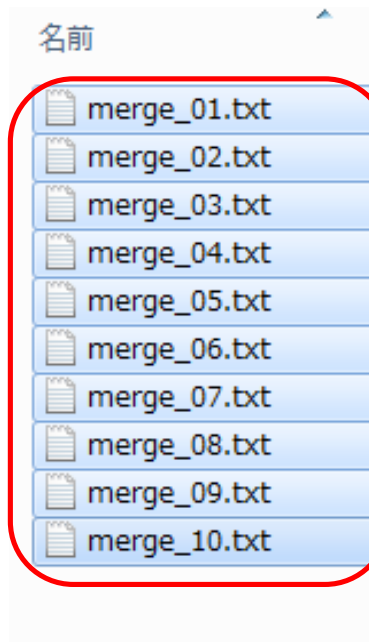
- 最新のAthenaを入手する
- Athenaの起動と測定データの読み込み
- 解析操作の基本
- バックグラウンド処理の調整
- Athenaのその他の機能

付録1: データの足し合わせ (merge) SPring 8

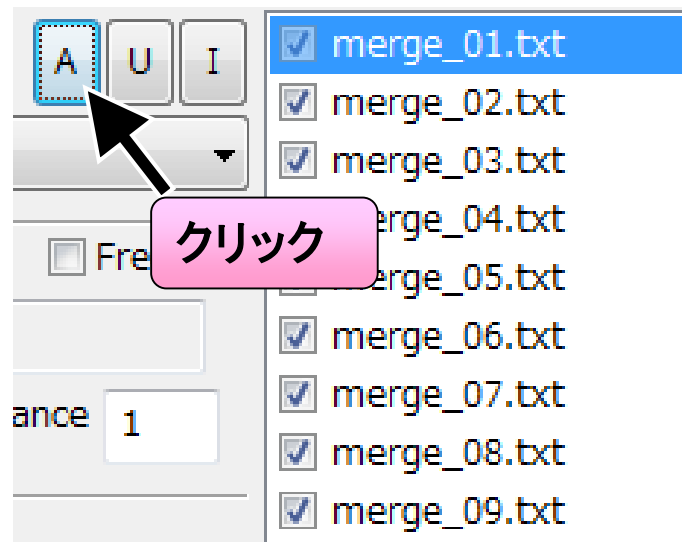
繰り返し(loop)測定によって積算時間を稼いだ時などに
データを足し合わせたい場合

測定データの一括読み込み

step1



step2

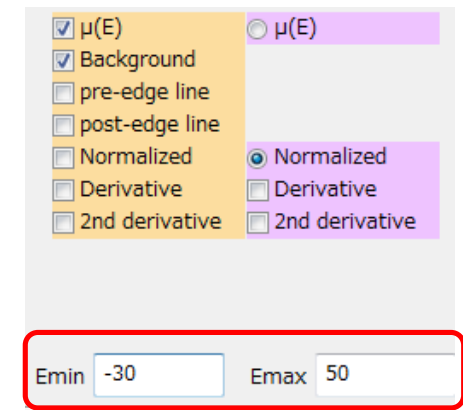


A: 全データ選択

U : 全データ選択解除

I : 選択データ反転

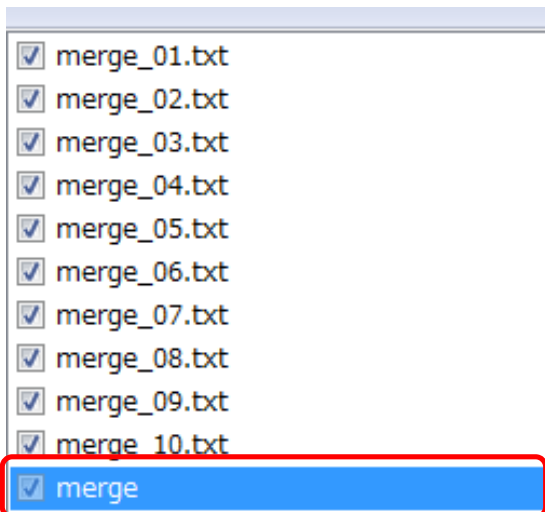
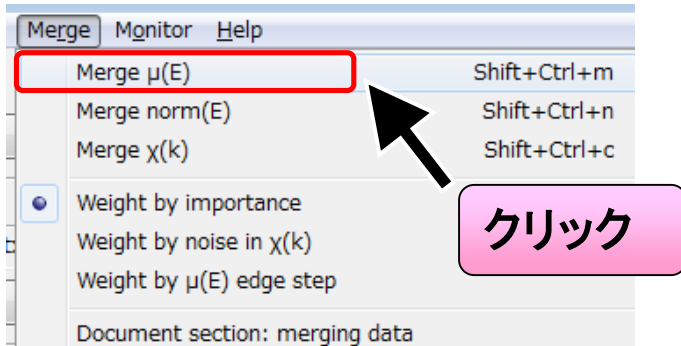
step3



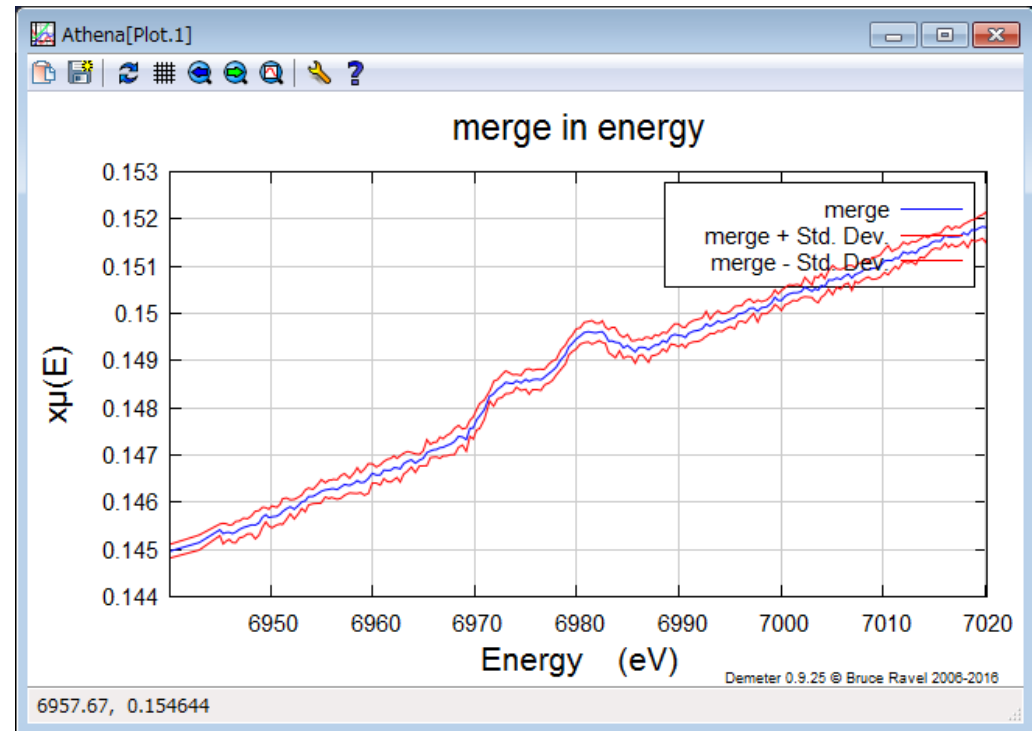
表示範囲を調整

データの足し合わせ (merge)

データの足し合わせ



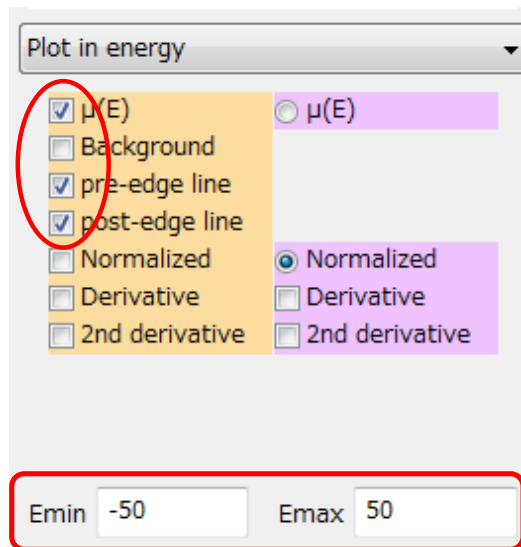
“merge”が追加される



足し合わせデータ“merge”と
標準偏差が表示

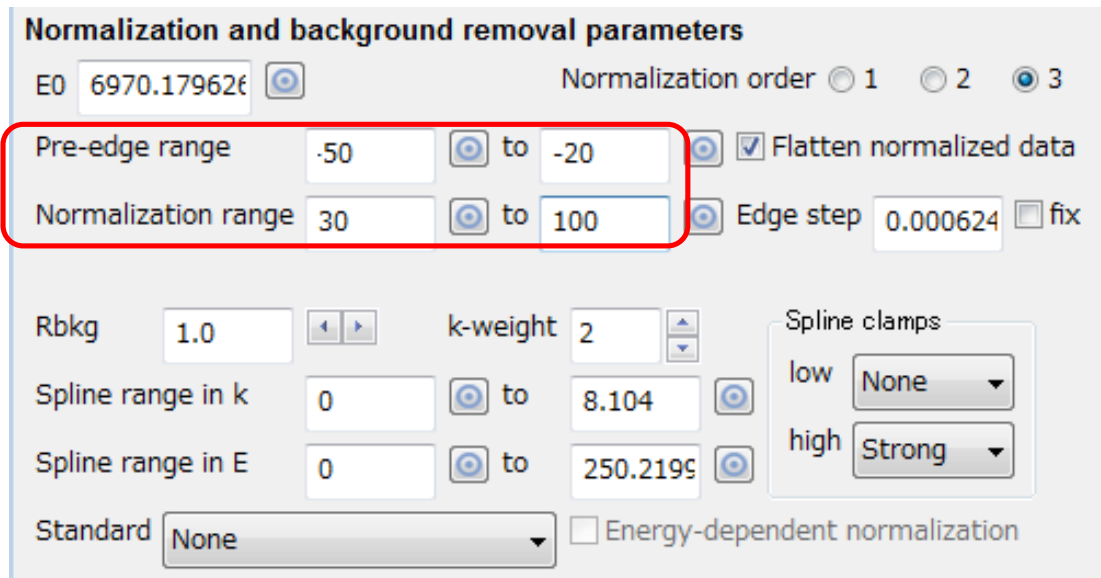
Pre-edge line & Post-edge line

step1



backgroundの選択を解除
pre-edge line, post-edge lineを選択
プロット範囲を変更

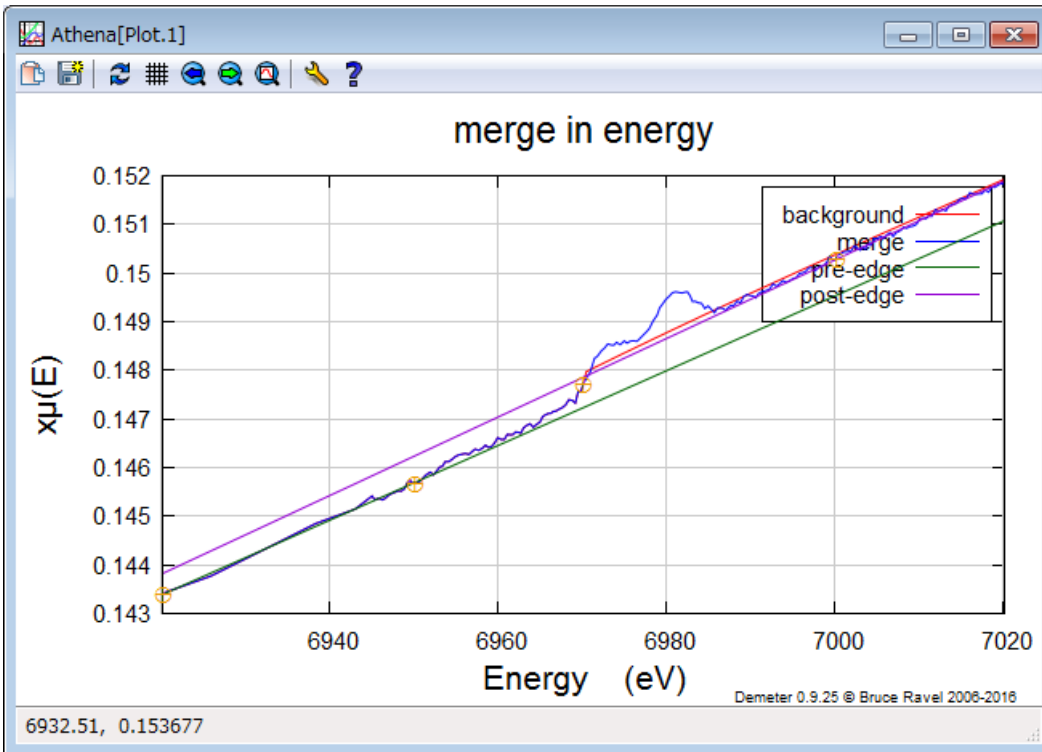
step2



パラメータの変更:

pre-edge line → Pre-edge range
post-edge line → Normalization range

Pre-edge line & Post-edge line

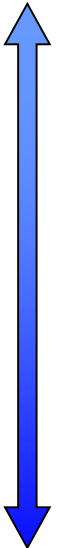


- 規格化の基準となる
- バックグラウンド決定に影響

化学状態が既知(標準試料の化学状態)の重ね合わせと考えられる場合

データ構成

Rh1.txt 標準試料
Rh2.txt
Rh3.txt
Rh4.txt
Rh5.txt 標準試料



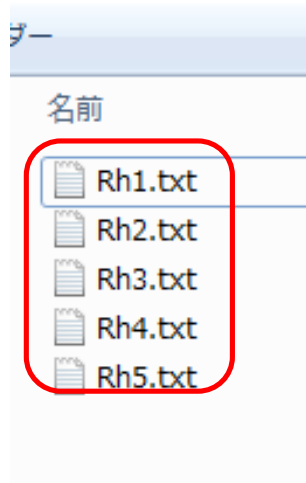
1,5の重ね合わせの重みを求める

1,5の化学状態が混ざっている

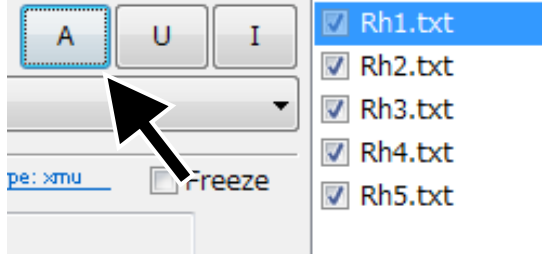
Linear combination fit

データの読み込み

step1

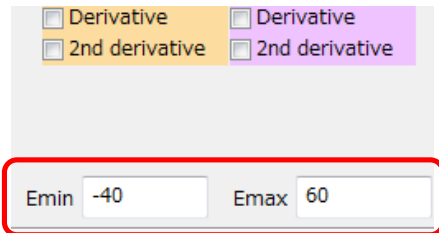


step2



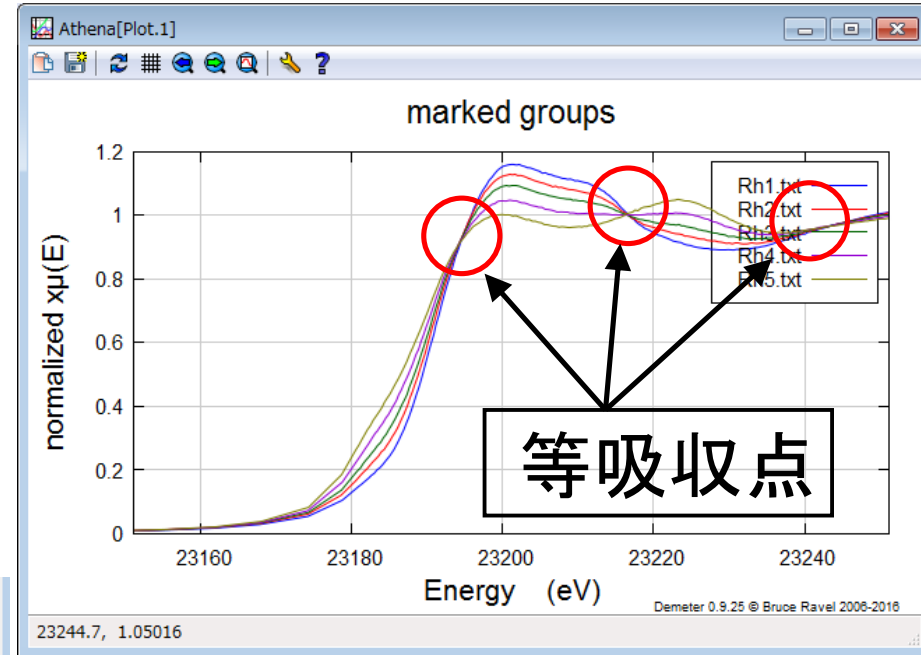
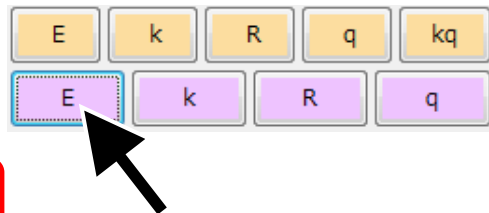
全データ選択

step3



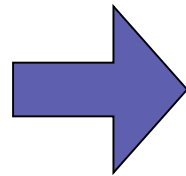
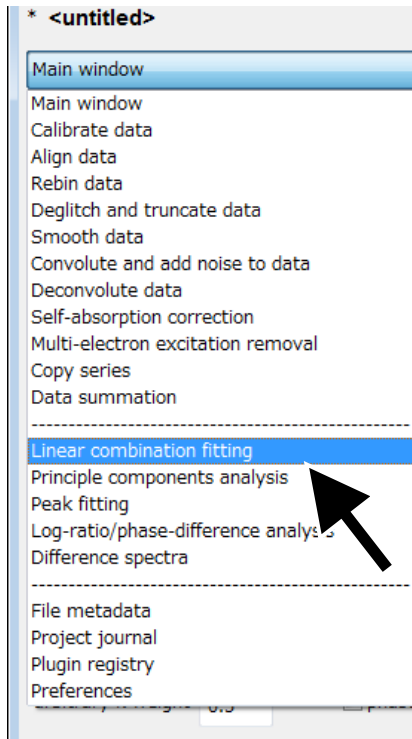
表示範囲を調整

step4

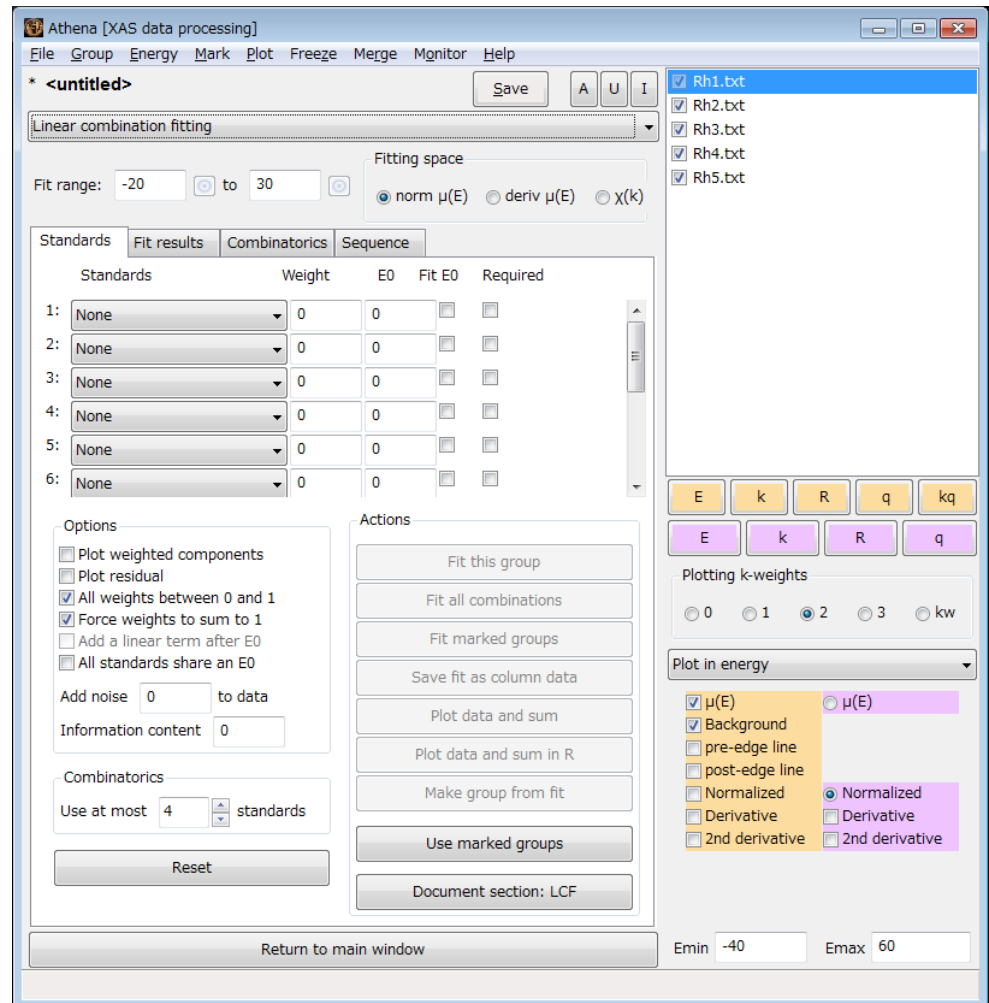


Rh1からRh5へ連続的に変化

フィッティングパラメータの設定



モードが変更



Linear combination fit

フィッティング実行

Rh1, 5選択

Rh2, 3, 4選択

クリック

Linear combination fit

解析結果の表示

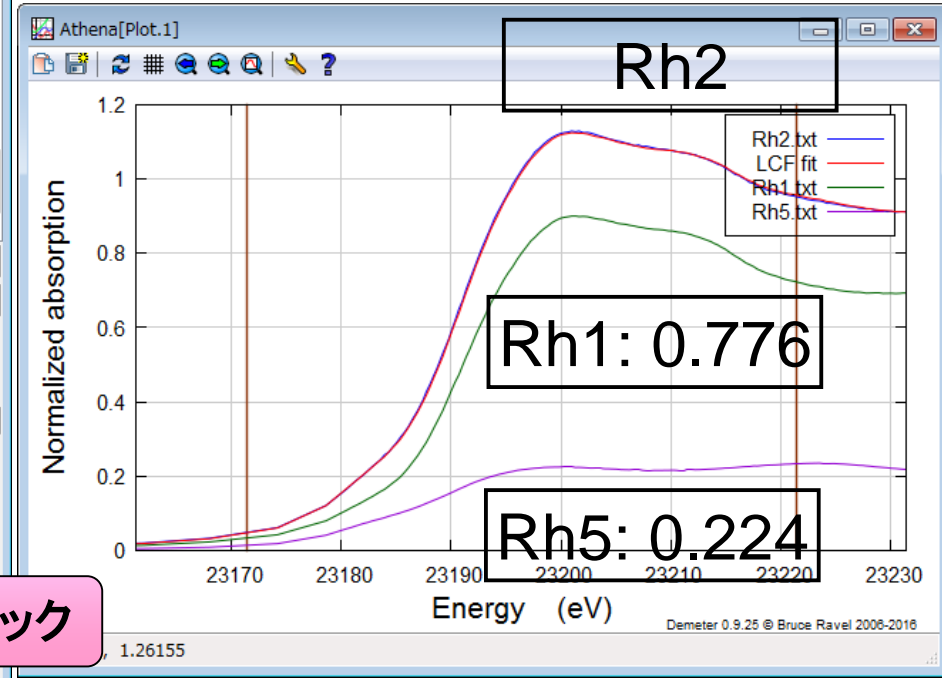
Standardsを選択

Standards	Weight	E0	Fit E0	Required
1: Rh1.txt	0.776	0.000		
2: Rh5.txt	0.224	0.000		

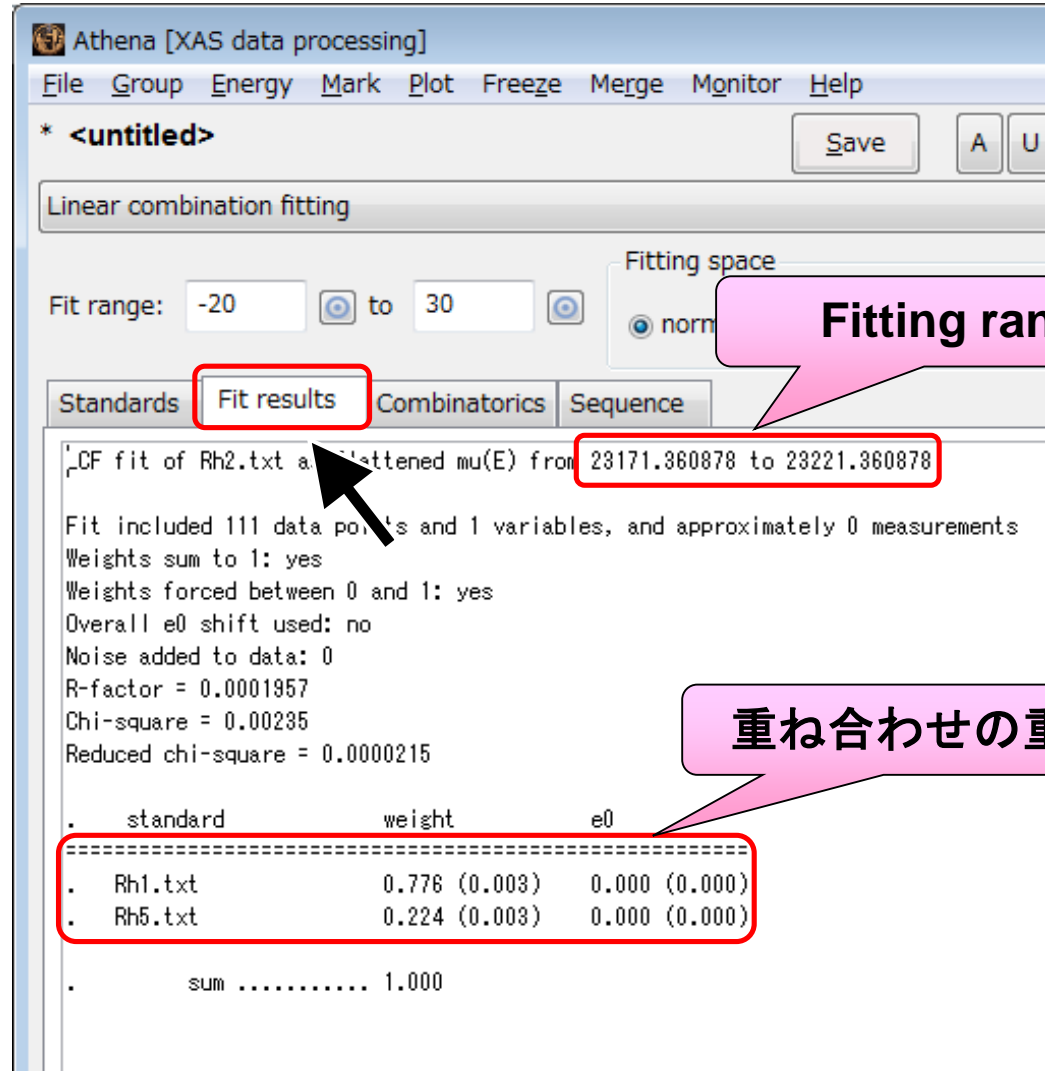
Plot weighted components をチェック

Plot data and sum をクリック

Rh2を選択



レポートの作成 1 - データ個別詳細 -



Athena [XAS data processing]

File Group Energy Mark Plot Freeze Merge Monitor Help

* <untitled> Save A U

Linear combination fitting

Fit range: -20 to 30 Fitting space: norm

Standards Fit results Combinatorics Sequence

CF fit of Rh2.txt and flattened mu(E) from 23171.360878 to 23221.360878

Fit included 111 data points and 1 variables, and approximately 0 measurements
Weights sum to 1: yes
Weights forced between 0 and 1: yes
Overall e0 shift used: no
Noise added to data: 0
R-factor = 0.0001957
Chi-square = 0.00235
Reduced chi-square = 0.0000215

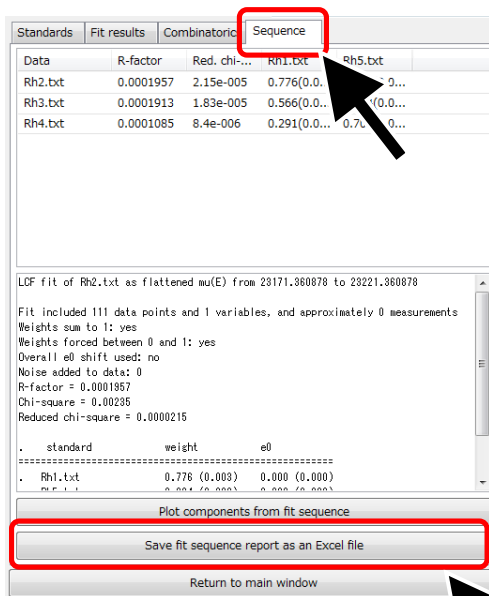
standard	weight	e0
Rh1.txt	0.776 (0.003)	0.000 (0.000)
Rh5.txt	0.224 (0.003)	0.000 (0.000)
sum	1.000	

Fitting range

重ね合わせの重み

Linear combination fit

レポートの作成 2 - 全データ概要 -



Data	R-factor	Red. chi-sq	Rh1.txt	Rh5.txt
Rh2.txt	0.0001957	2.15e-005	0.776(0.000)	0.0001957
Rh3.txt	0.0001913	1.83e-005	0.566(0.000)	0.0001913
Rh4.txt	0.0001065	8.4e-006	0.291(0.000)	0.0001065

LCF fit of Rh2.txt as flattened mu(E) from 23171.360878 to 23221.360878

Fit included 111 data points and 1 variables, and approximately 0 measurements

Weights sum to 1: yes

Weights forced between 0 and 1: yes

Overall e0 shift used: no

Noise added to data: 0

R-factor = 0.0001957

Chi-square = 0.00235

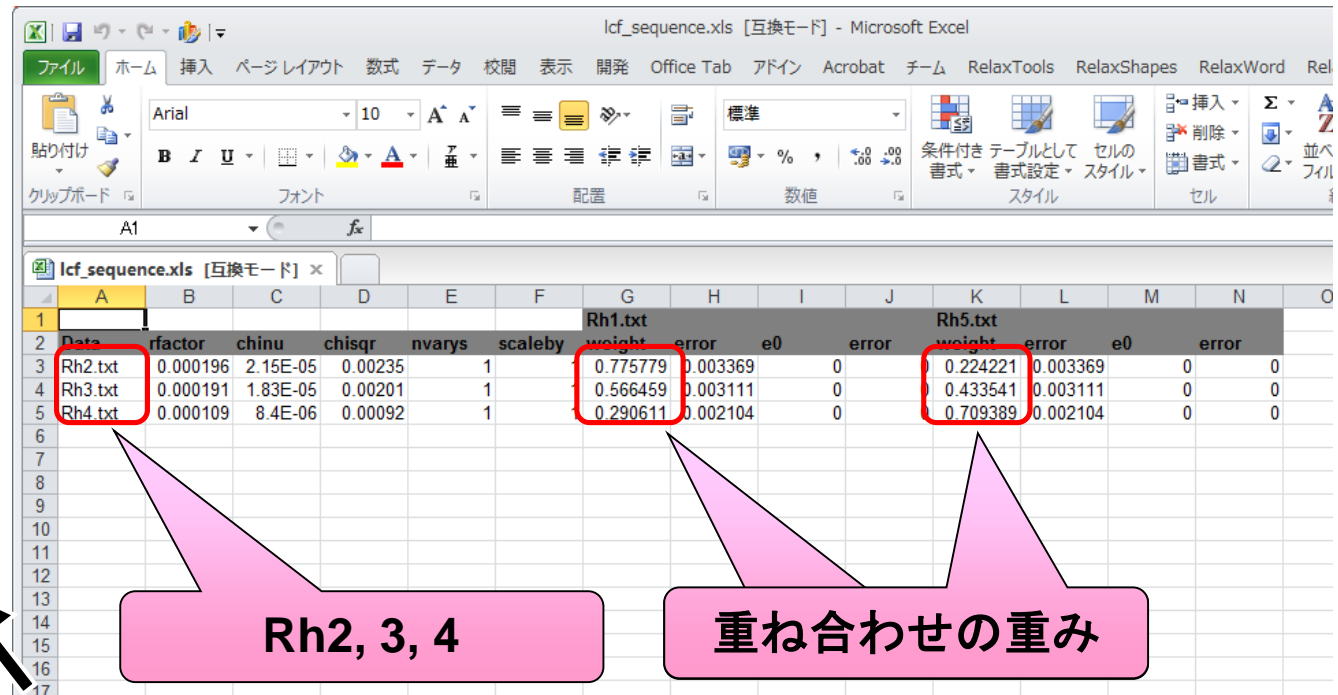
Reduced chi-square = 0.000215

standard	weight	e0
Rh1.txt	0.776 (0.003)	0.000 (0.000)

Plot components from fit sequence

Save fit sequence report as an Excel file

Return to main window



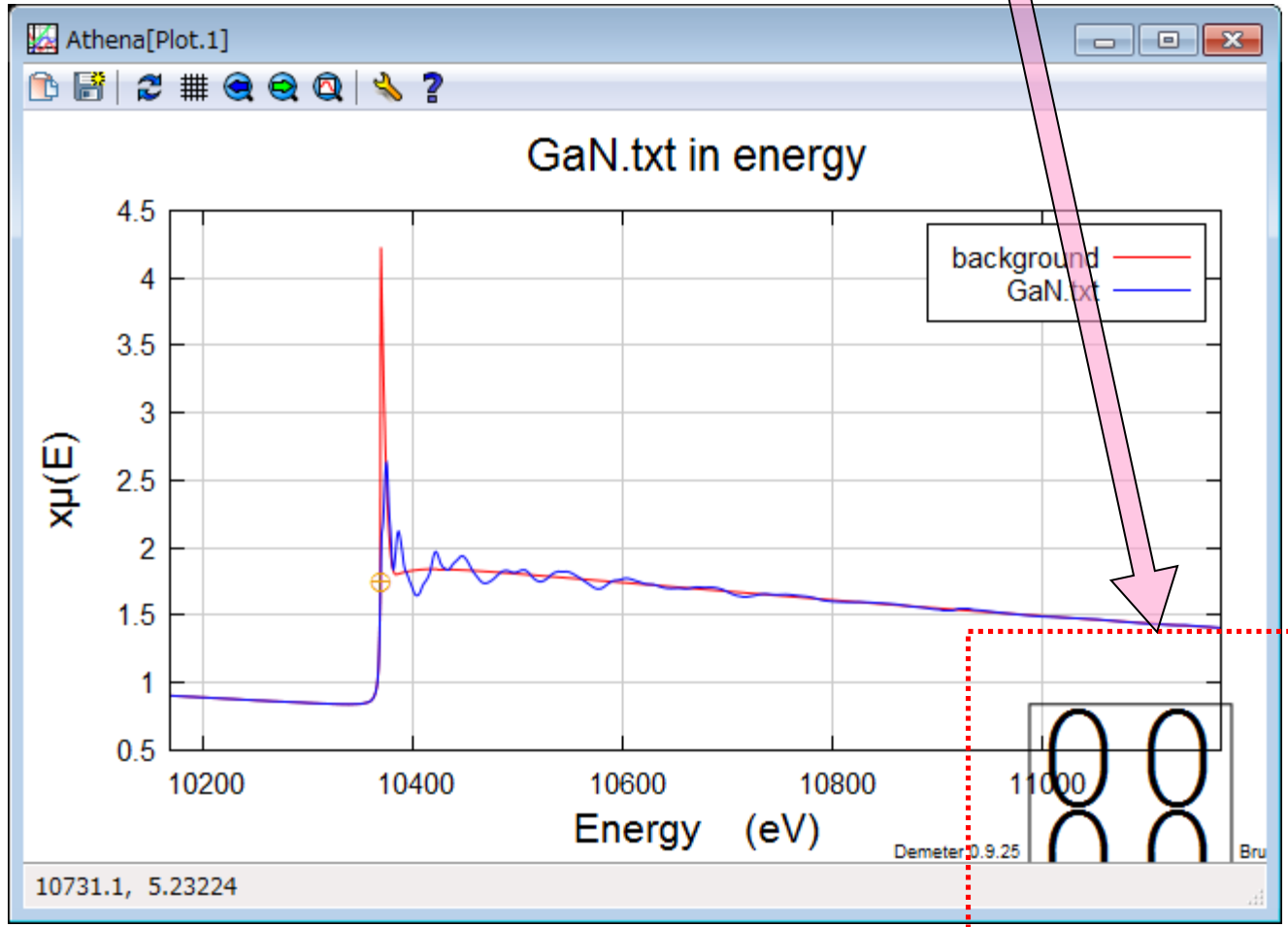
	Rh1.txt	Rh2.txt	Rh3.txt	Rh4.txt	Rh5.txt
weight	0.775779	0.000196	0.000191	0.000109	0.224221
error	0.003369	2.15E-05	1.83E-05	8.4E-06	0.003369

Rh2, 3, 4

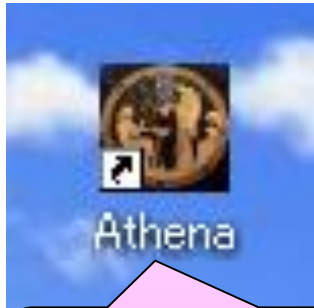
重ね合わせの重み

デフォルトファイル名:
lcf_sequence.xls

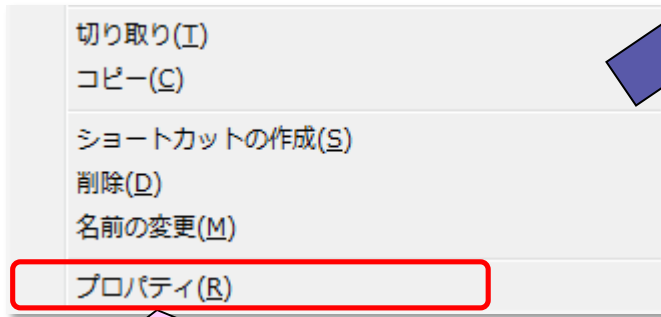
Athenaのグラフ画面で下図のような文字化けが現れる場合の修正方法



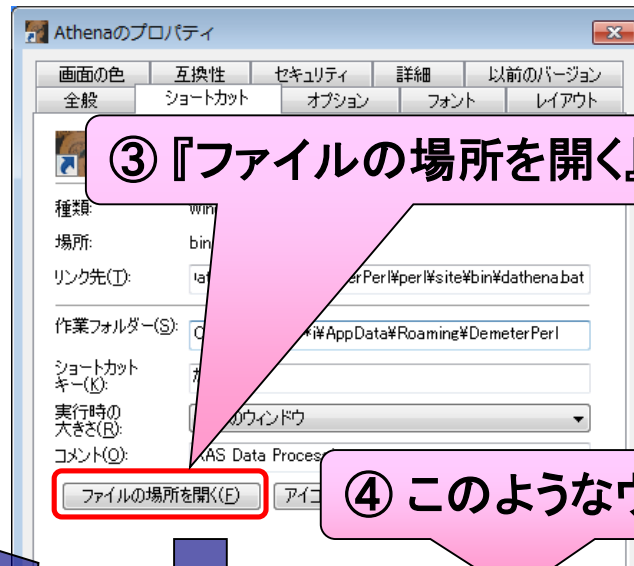
修正方法①



① Athenaのショートカットアイコン上で右クリック

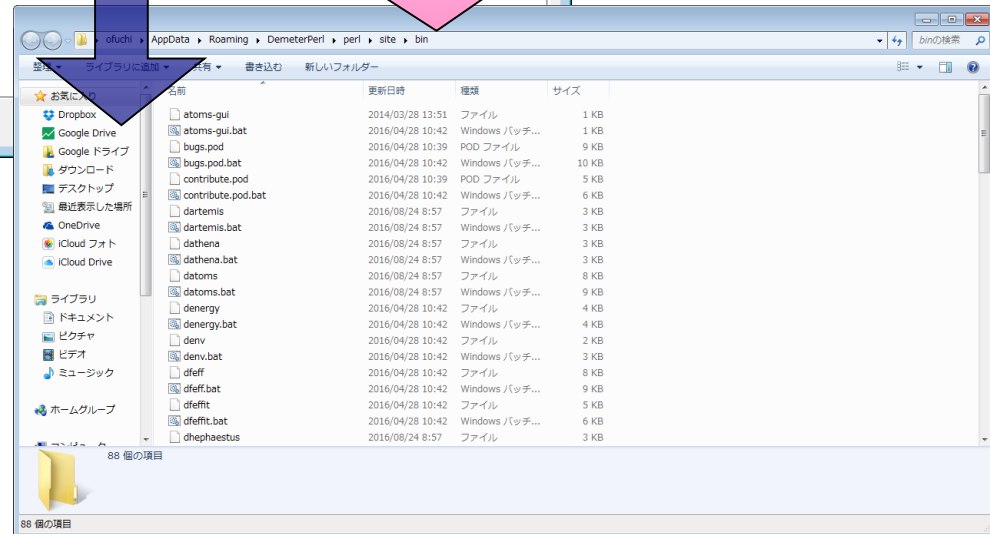


② 『プロパティ』をクリック



③ 『ファイルの場所を開く』をクリック

④ このようなウィンドウが開く



修正方法②

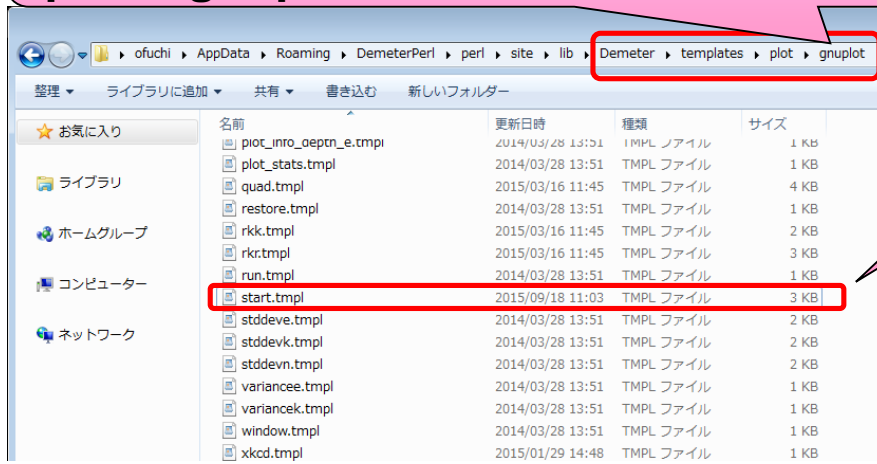
⑤ siteをクリックして一つ上の階層に戻る



⑥ libフォルダを開く



⑦ libを開いたら、Demeter > templates > plot > gnuplot まで進む

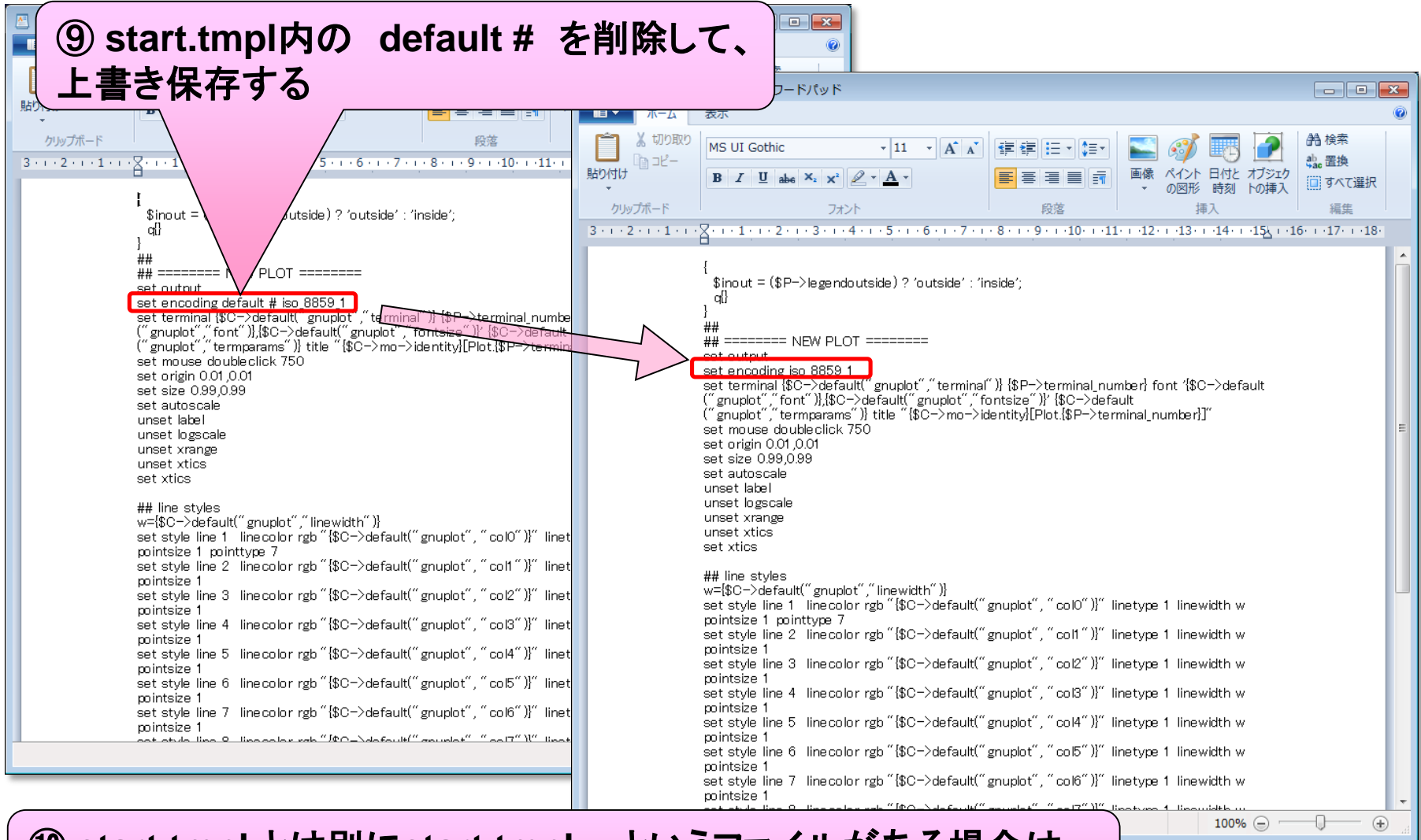


⑧ gnuplot内の start.tmpl をワードパットで開く

(ワードパットでの開き方)
start.tmpl上で右クリック
→プログラムから開く
→ワードパットを選択)

修正方法③

⑨ start.tpl内の default # を削除して、
上書き保存する



⑩ start.tpl とは別に start.tpl~ というファイルがある場合は、
これも⑨と同様の手順で書き換える

修正方法④

⑪ Athenaを再起動し、バグが修正されていることを確認する

