



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)

Outline

- 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Athenaを入手する



最新のDemeterを
入手する

Outline

- 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
- 複数データの比較方法
- Athenaのその他の機能

Athenaの起動

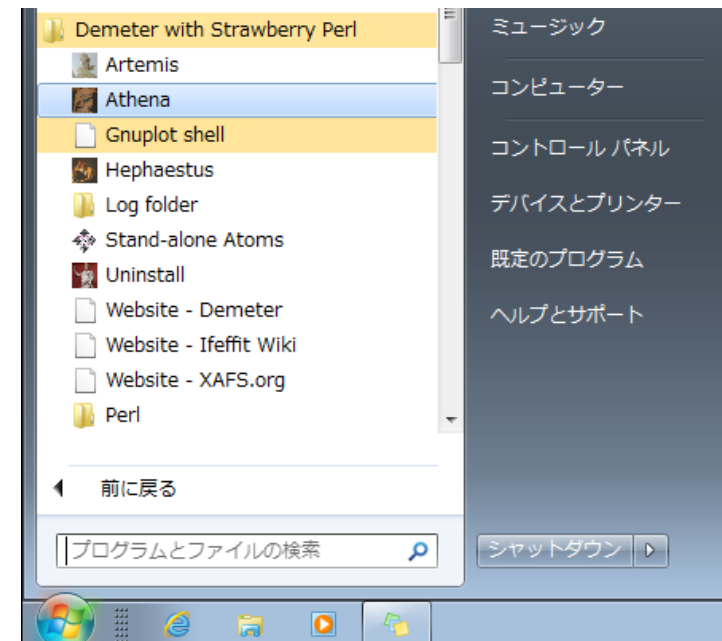
Athenaの起動

- ショートカットから

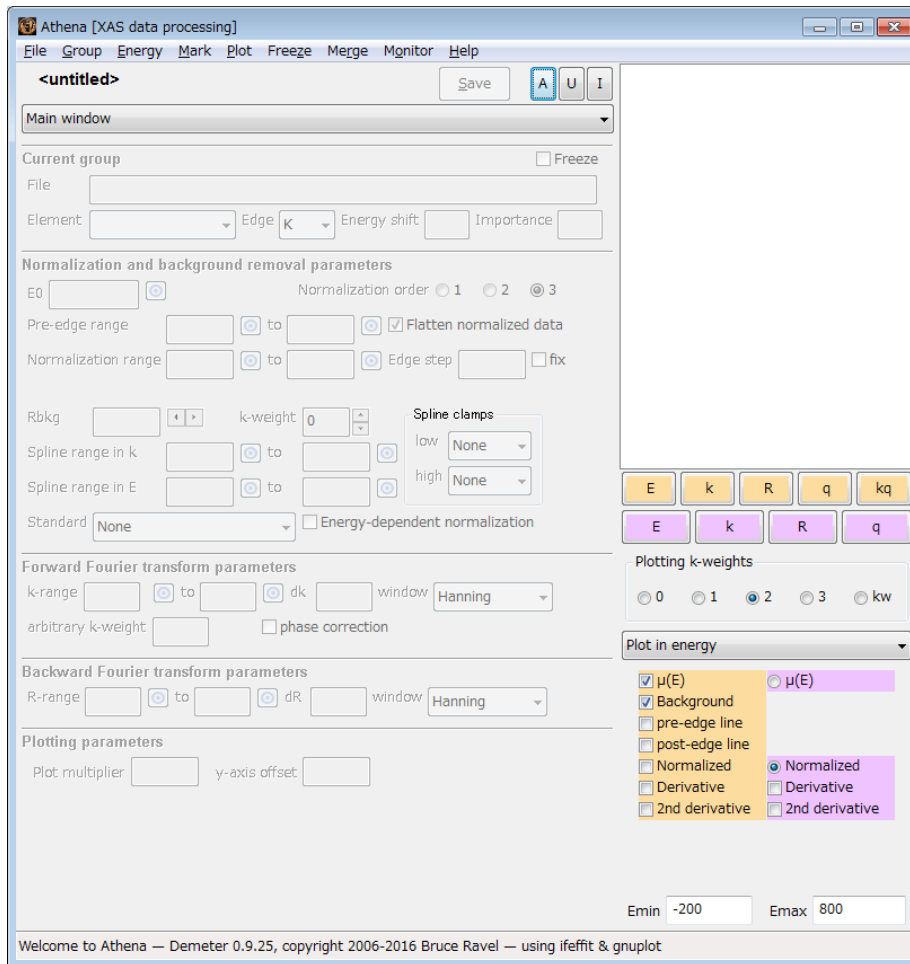


- スタートメニューから
スタート

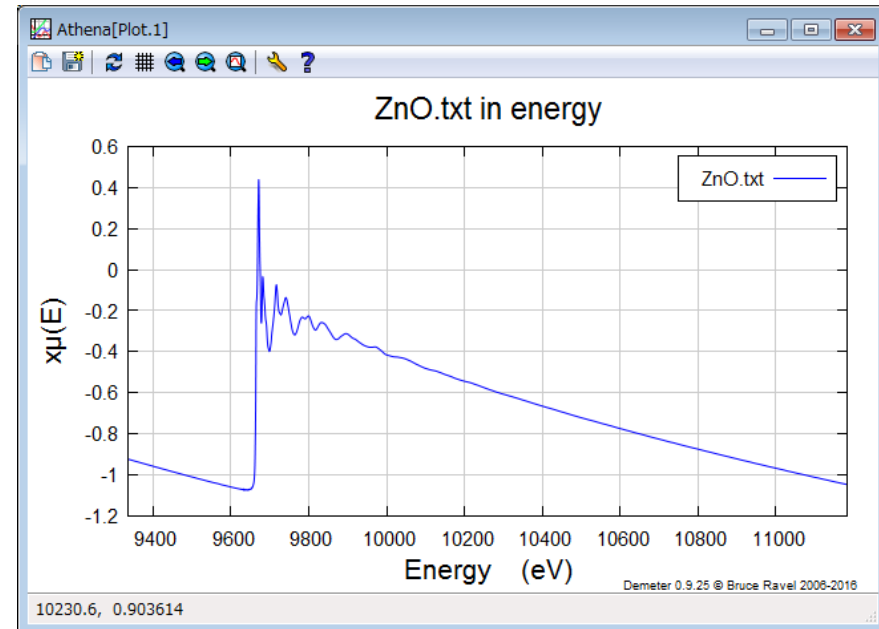
- Demeter with Strawberry Perl
- Athena



起動直後の画面

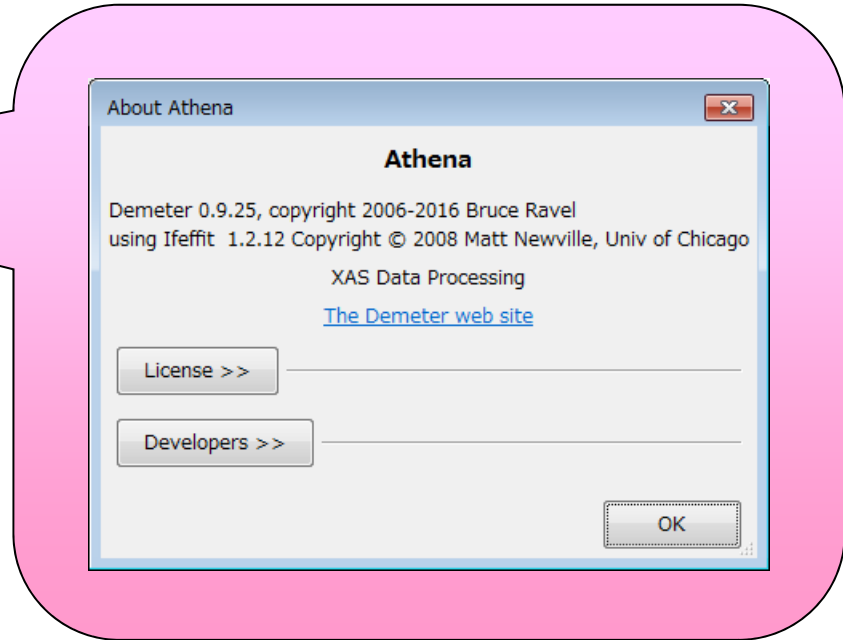
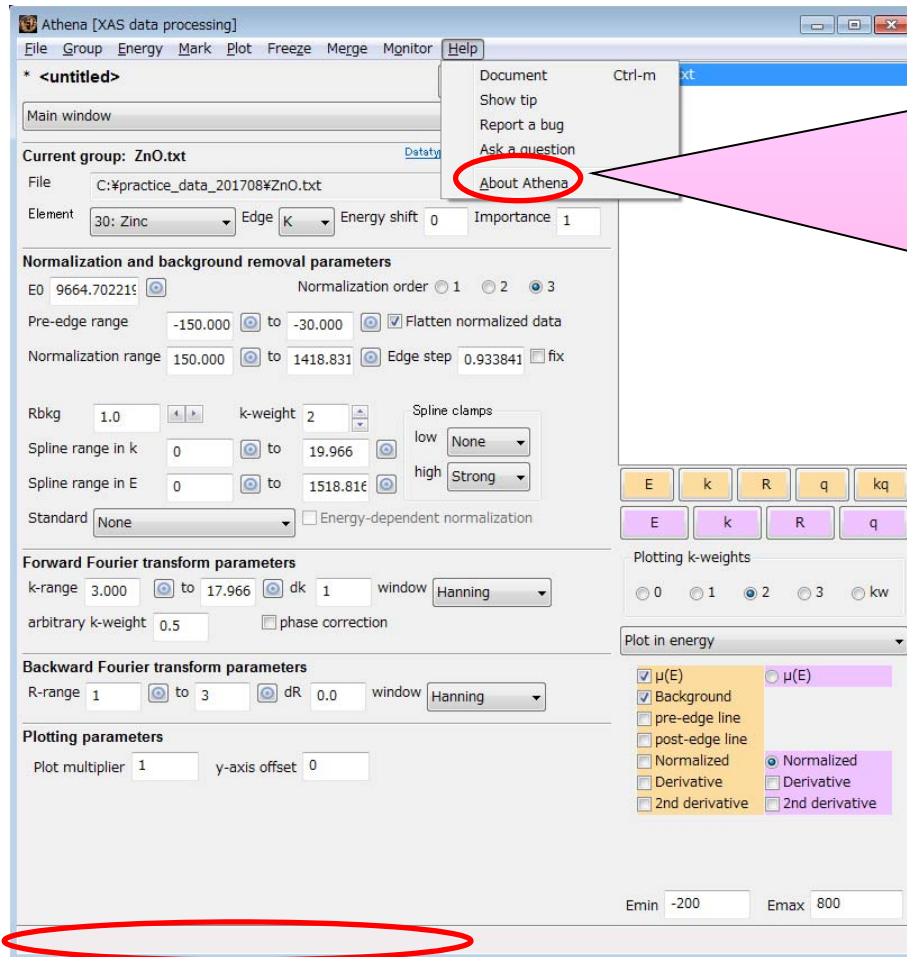


Athenaメイン画面



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

Outline

- 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
- 複数データの比較方法
- 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

産業利用を目的としたXAFSデータ解析講習会2017 [実習用データ]

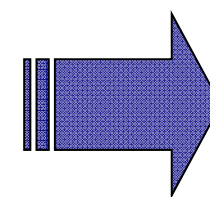
Title	file name	Download file
2017.8.3 実習用データ	practice_data_201708.zip	 72KB

※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_201708]フォルダを保存してください。

クリック



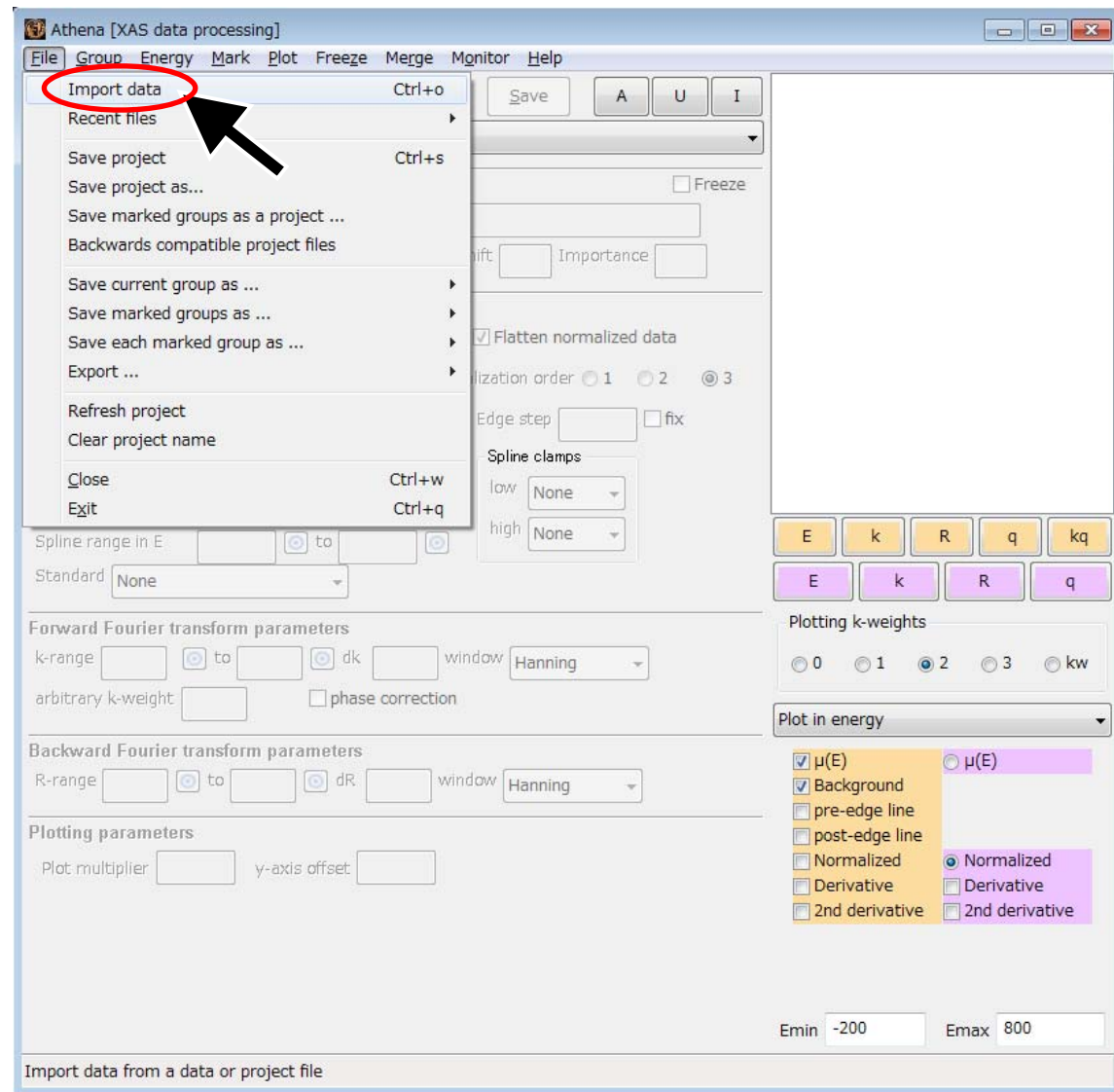
ダウンロード practice_data_201708.zip

測定データの読み込み

[File] – [Import data]

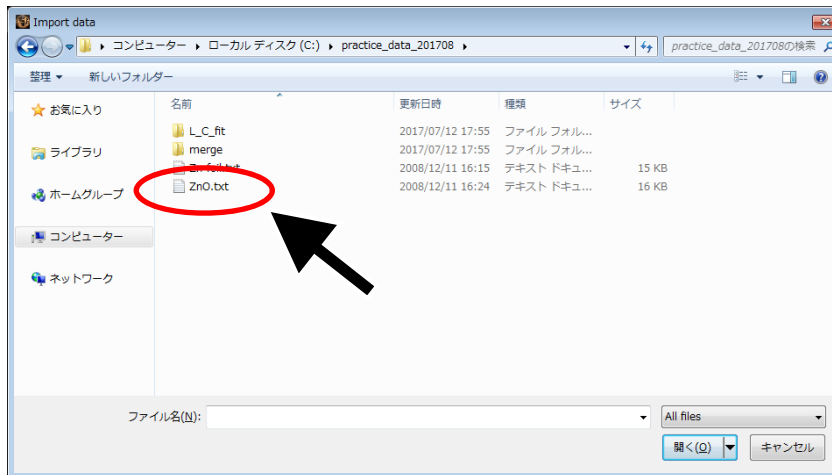
もしくは

Ctrl-o



測定データの読み込み

ファイルオープンダイアログ



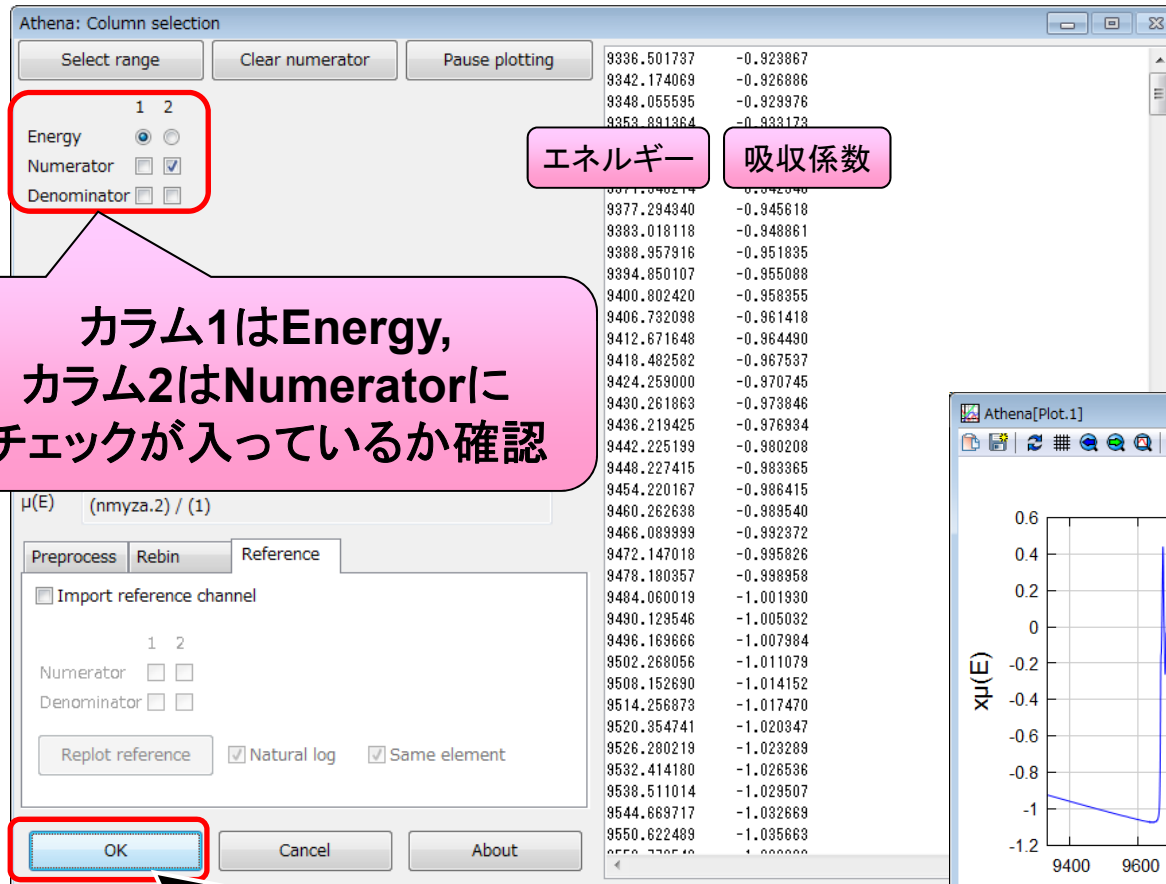
データファイル
ZnO.txt
の選択

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

測定データの読み込み

内容確認ダイアログ

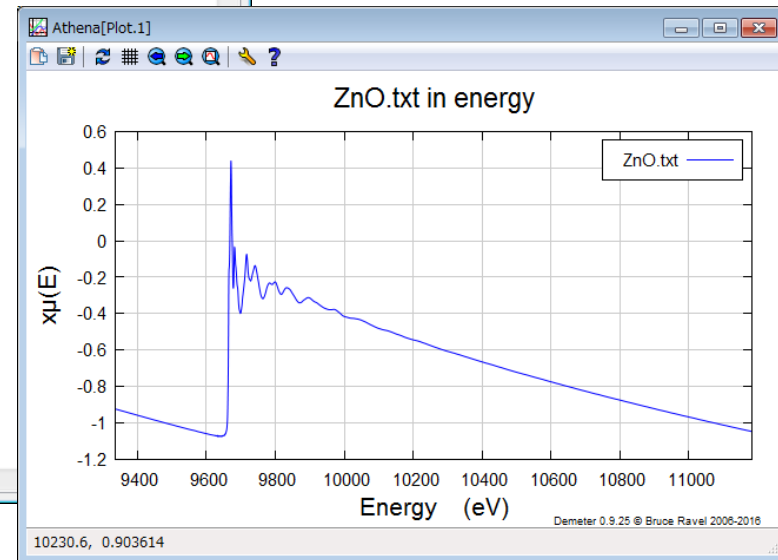


コラム1はEnergy,
コラム2はNumeratorに
チェックが入っているか確認

OKボタンを押す

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



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>

Main window

Current group: ZnO.txt

File C:*20100113*ZnO.txt

Element 30: Zinc Edge K Energy shift 0 Importance 1

Normalization and background removal parameters

E0 9664.702215 Normalization order 1 2 3

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

Normalization range 150.000 to 1418.831 Edge step 0.933841 fix

Rbkg 1.0 k-weight 2 Spline clamps low None

Spline range in k 0 to 19.966 high Strong

Spline range in E 0 to 1518.816

Standard None Energy-dependent normalization

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

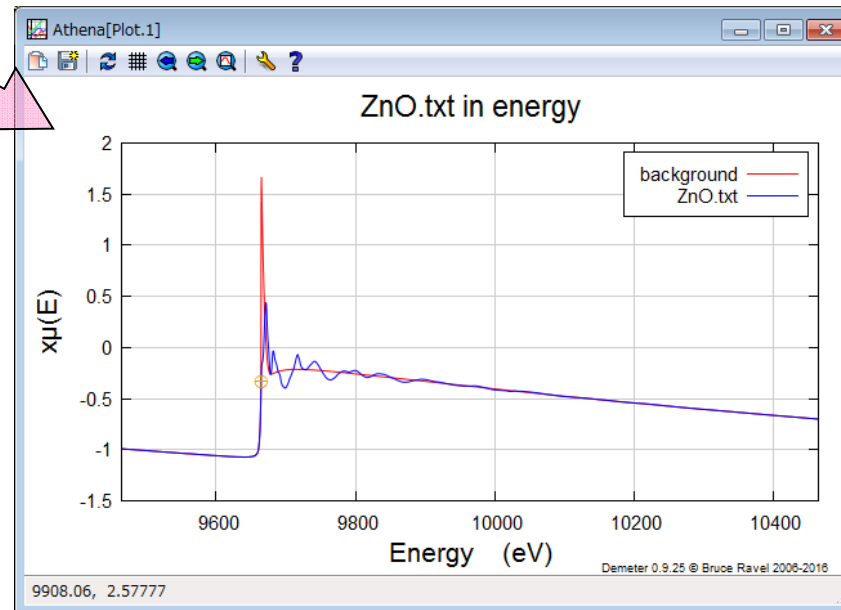
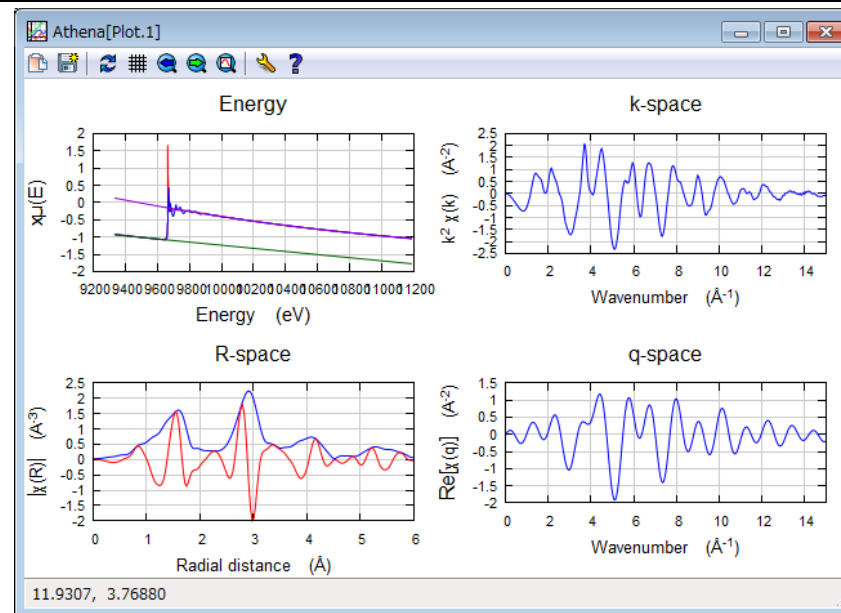
Imported ZnO.txt from C:*20100113*ZnO.txt

ZnO.txt

データグループ

Eを選択

プロットオプション

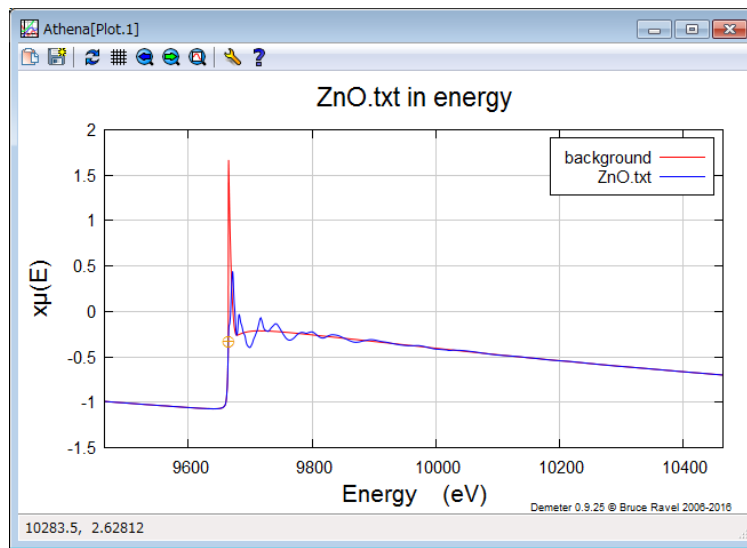


mu(E)プロットのバリエーション



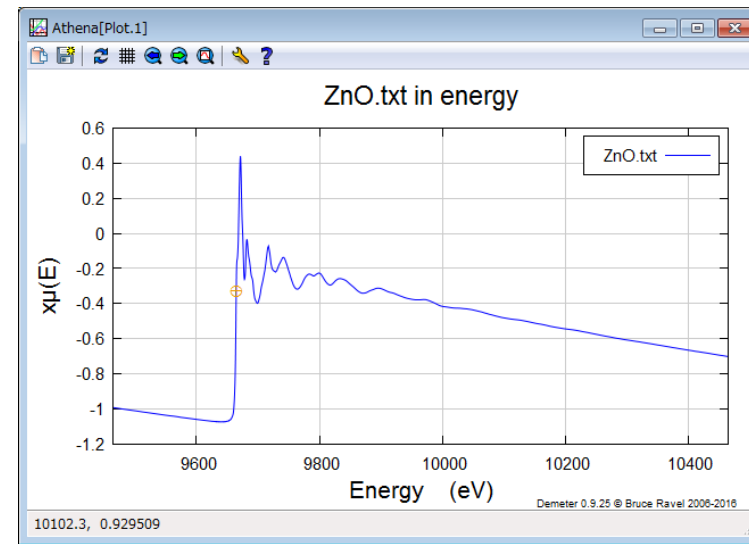
プロットオプションを操作する

mu(E) + background



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

mu(E)

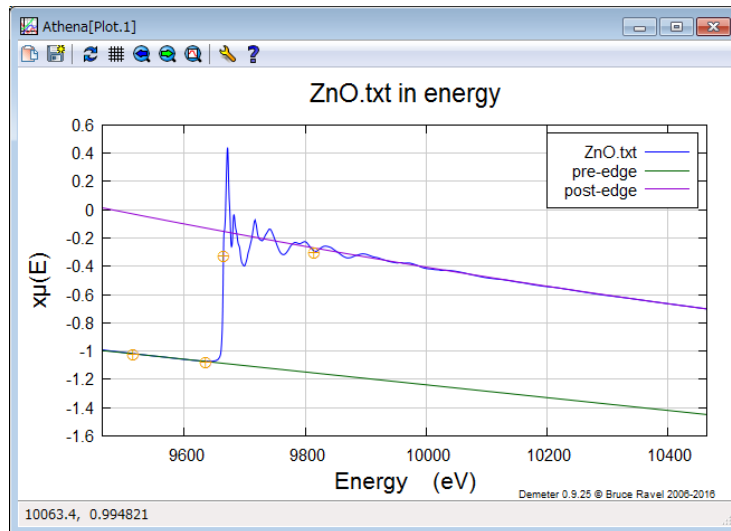


- $\mu(E)$
- Background
- pre-edge line
- post-edge line
- Normalized
- Derivative
- 2nd derivative

mu(E)プロットのバリエーション SPring 8

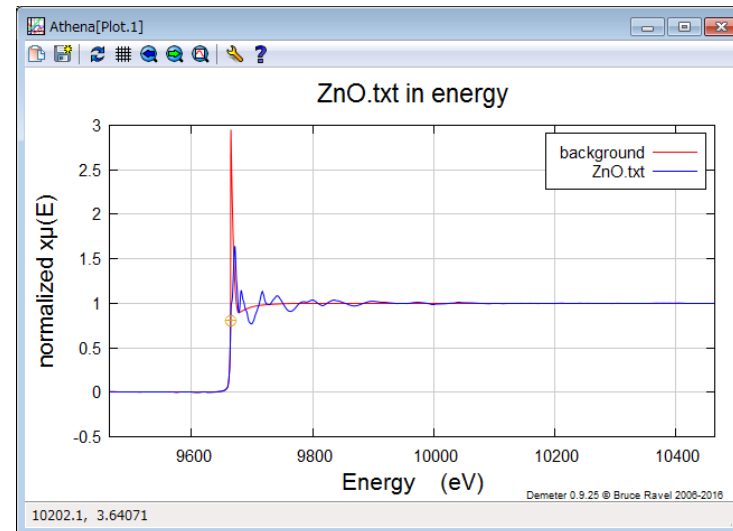
プロットオプションを操作する

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



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

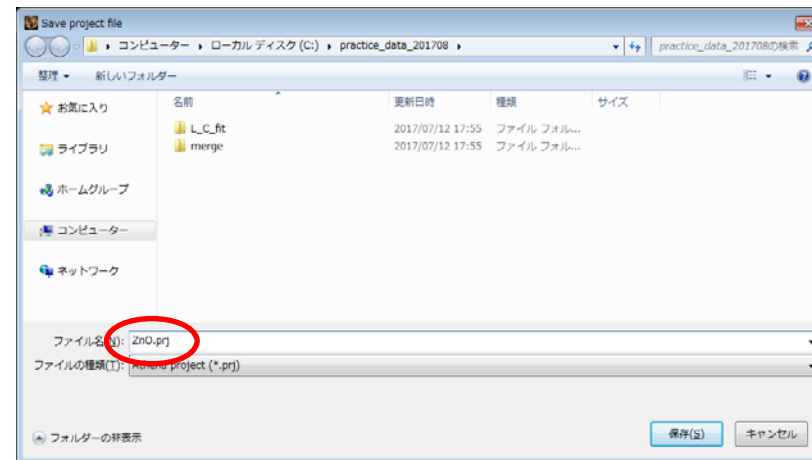
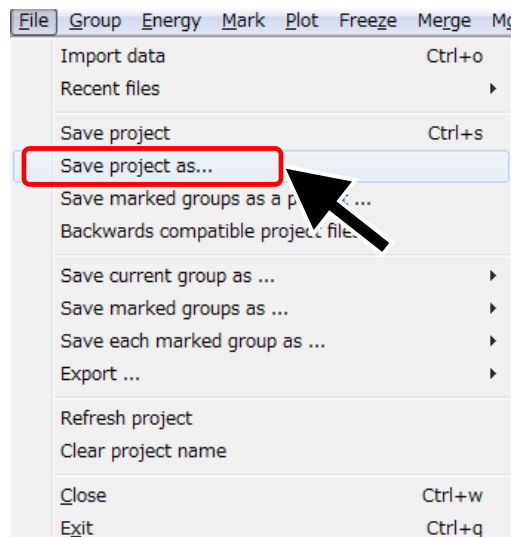
mu(E)
+ background
+ Normalized



- $\mu(E)$
- 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...]



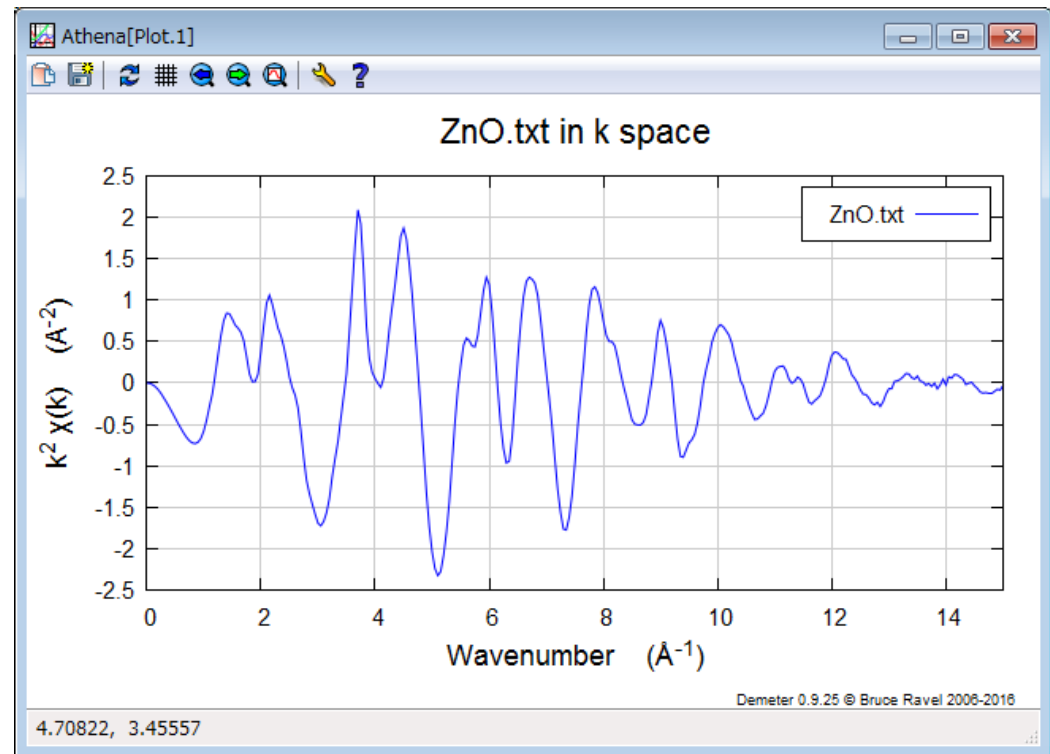
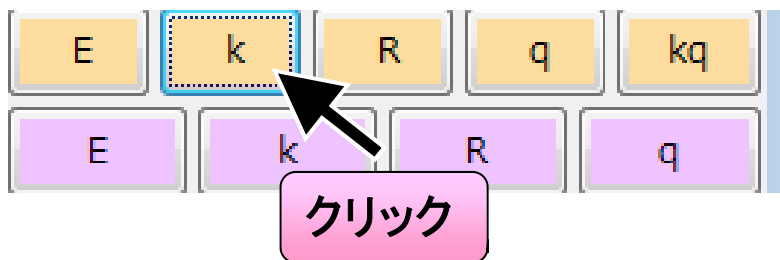
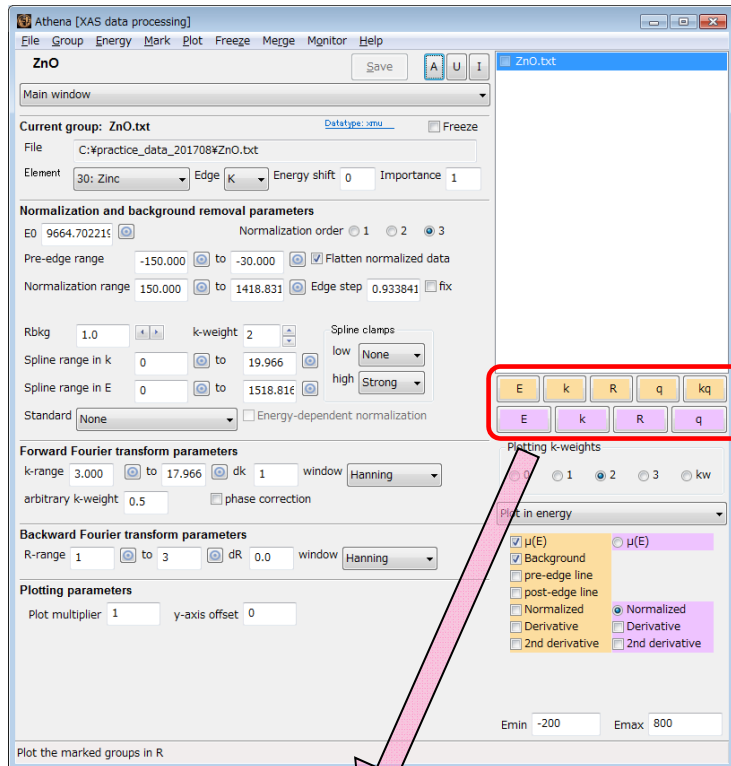
ファイル名 : ZnO.prjで保存

ZnO.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。

Outline

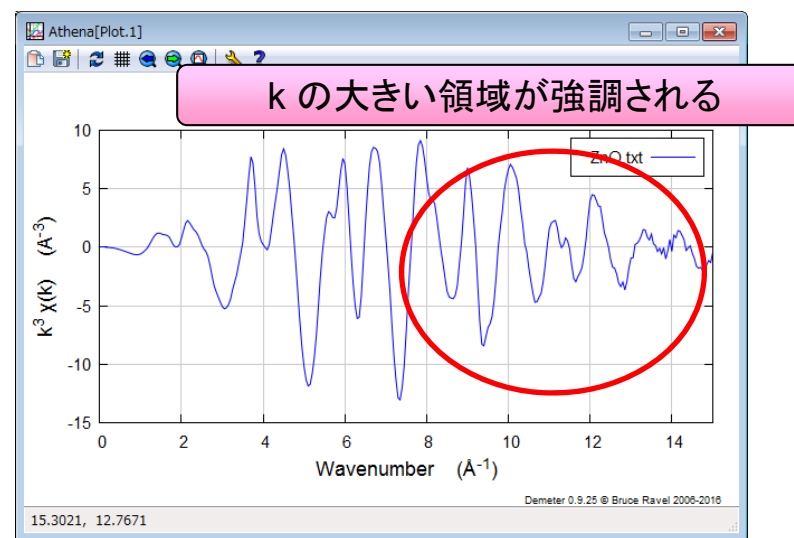
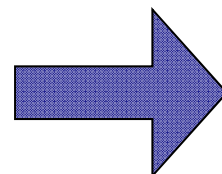
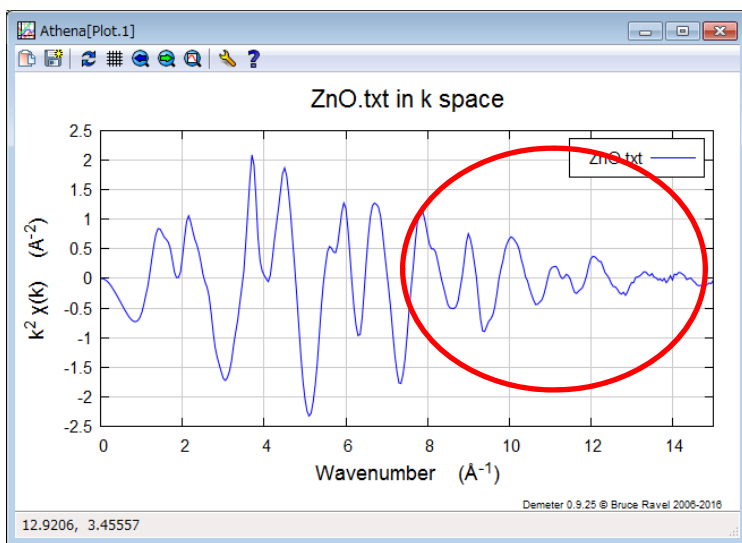
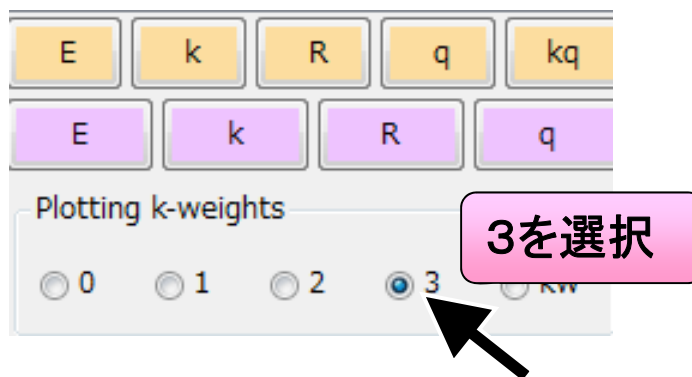
- 最新のAthenaを入手する
- Athenaの起動と測定データの読み込み
- **解析操作の基本**
- バックグラウンド処理の調整
- 複数データの比較方法
- Athenaのその他の機能

EXAFS振動の表示



EXAFS振動

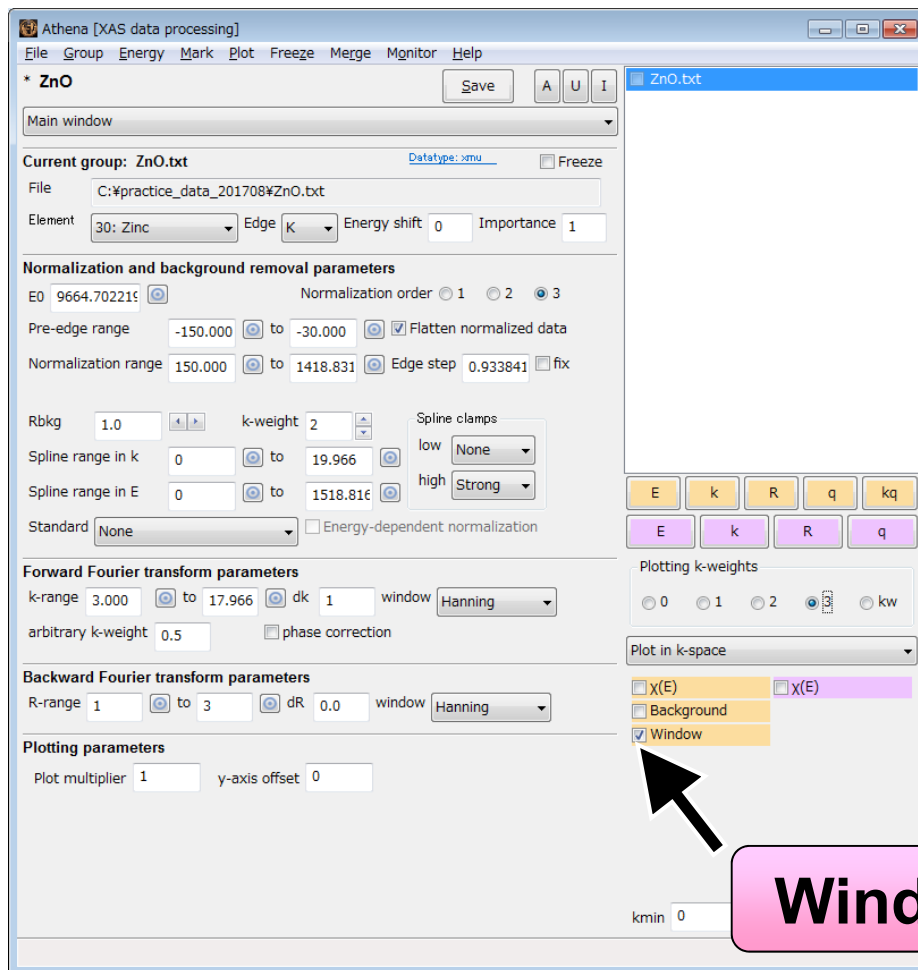
EXAFS振動の強調処理



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

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

フーリエ変換パラメータ



Athena [XAS data processing]

* ZnO

Main window

Current group: ZnO.txt

File: C:\practice_data_201708\ZnO.txt

Element: 30: Zinc Edge: K Energy shift: 0 Importance: 1

Normalization and background removal parameters

E0: 9664.70221e Normalization order: 1 2 3

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

Normalization range: 150.000 to 1418.831 Edge step: 0.933841 fix

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

Spline range in k: 0 to 19.966

Spline range in E: 0 to 1518.81e

Standard: None Energy-dependent normalization

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

Plot in k-space

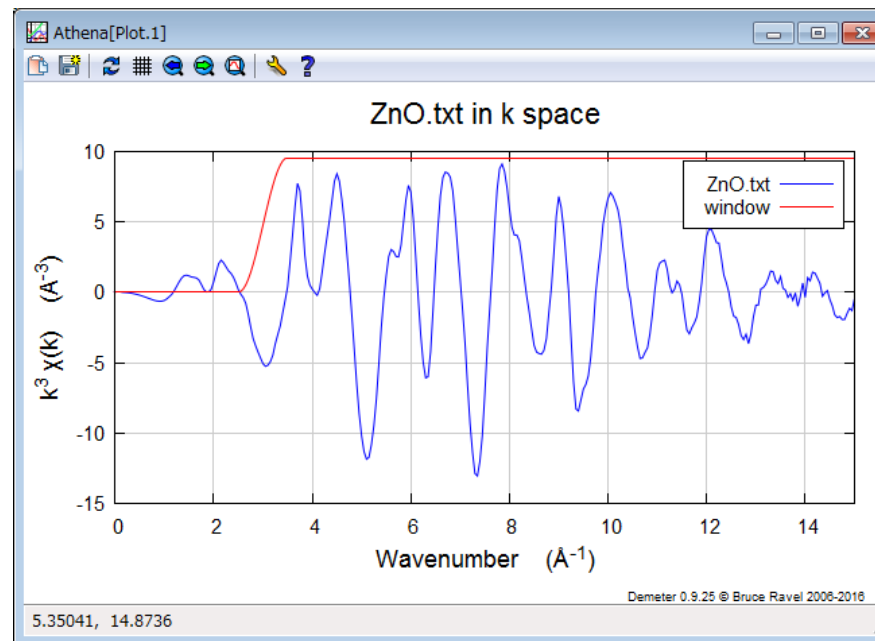
X(E) X(E)

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

* ZnO Save A U I ZnO.txt

Main window

Current group: ZnO.txt Datatype: xmu Freeze

File C:\practice_data_201708\ZnO.txt

Element 30: Zinc Edge K Energy shift 0 Importance 1

Normalization and background removal parameters

E0 9664.70221 Normalization order 1 2 3

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

Normalization range 150.000 to 1418.831 Edge step 0.933841 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

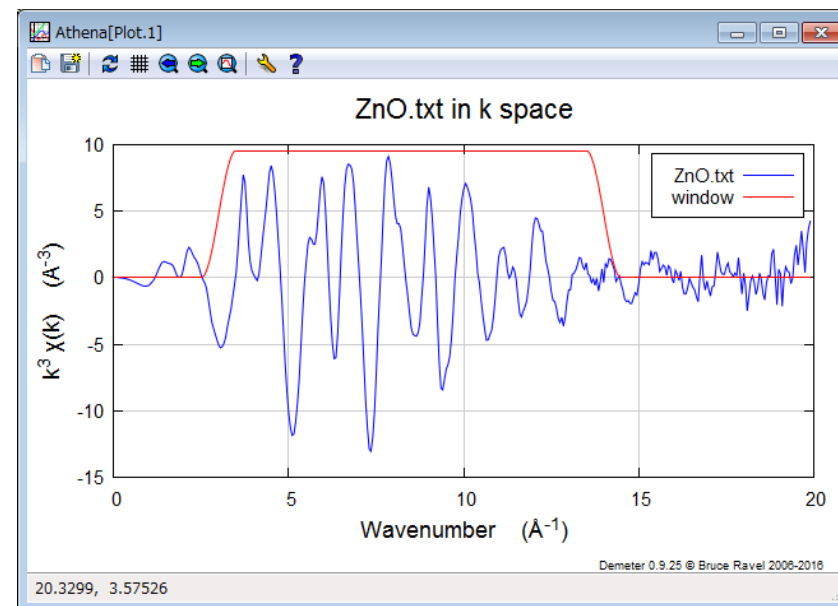
X(E) X(E)

Background

Window

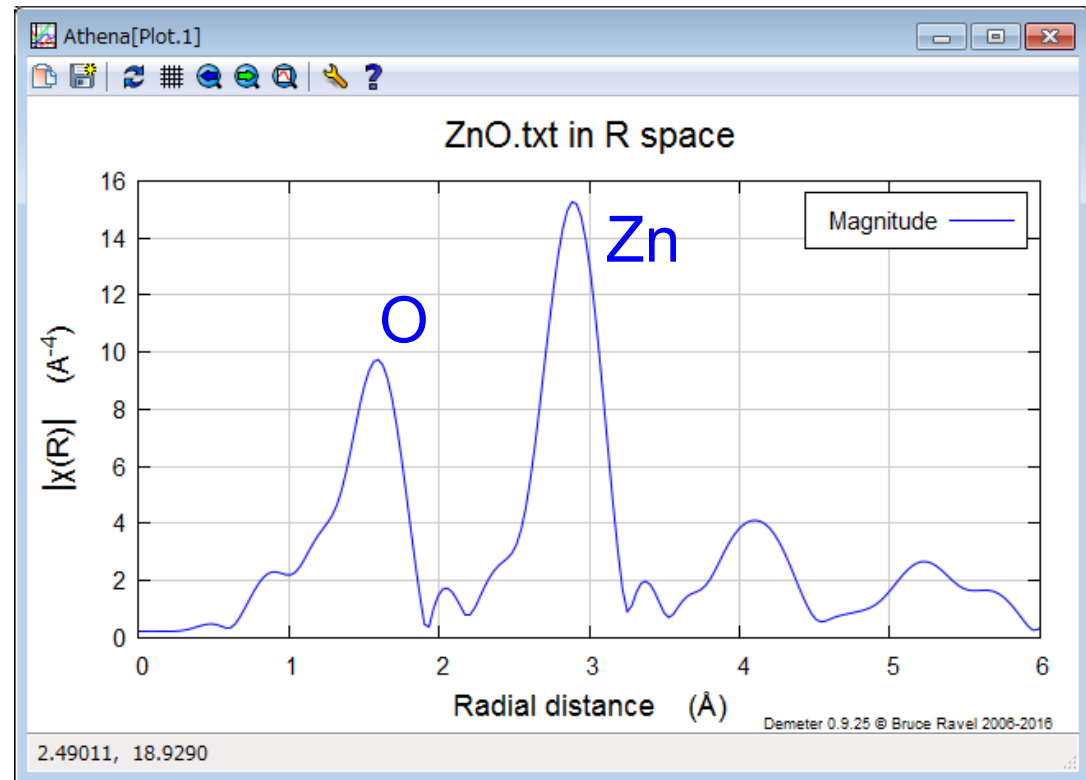
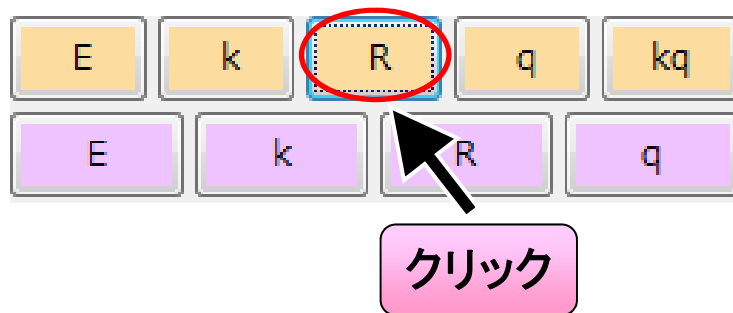
kmin 0 kmax 20

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 SPring 8



FTプロットのバリエーション

Athena [XAS data processing]

* ZnO

Main window

Current group: ZnO.txt

File: C:\practice_data_201708\ZnO.txt

Element: 30: Zinc Edge: K Energy shift: 0 Importance: 1

Normalization and background removal parameters

EO: 9664.702215 Normalization order: 1 2 3

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

Normalization range: 150.000 to 1418.831 Edge step: 0.933841 fix

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

Spline range in k: 0 to 19.966

Spline range in E: 0 to 1518.816

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

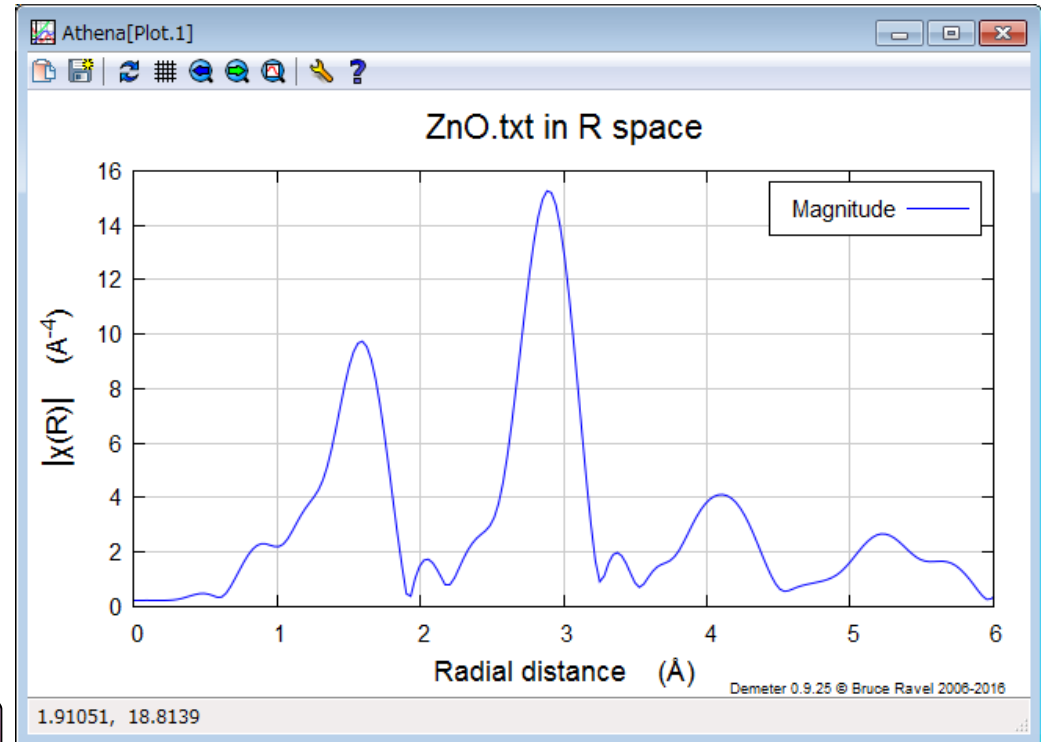
- Magnitude
- Envelope
- Real part
- Imag. part
- Phase
- Window

Plotting k-weights

- 0
- 1
- 2
- 3
- kw

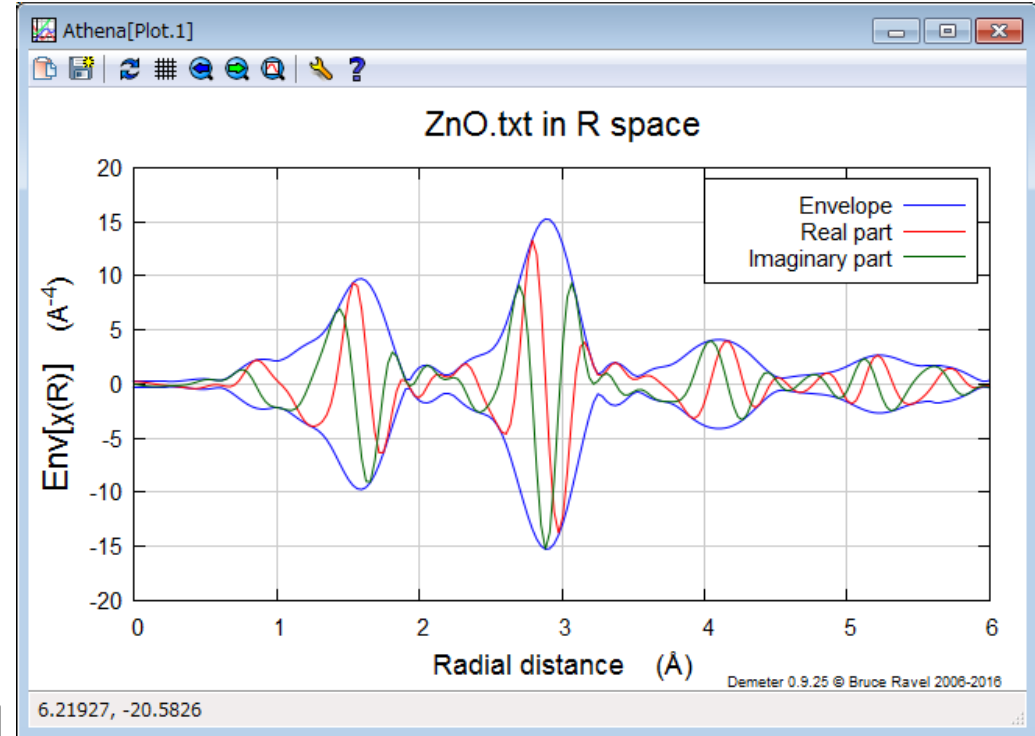
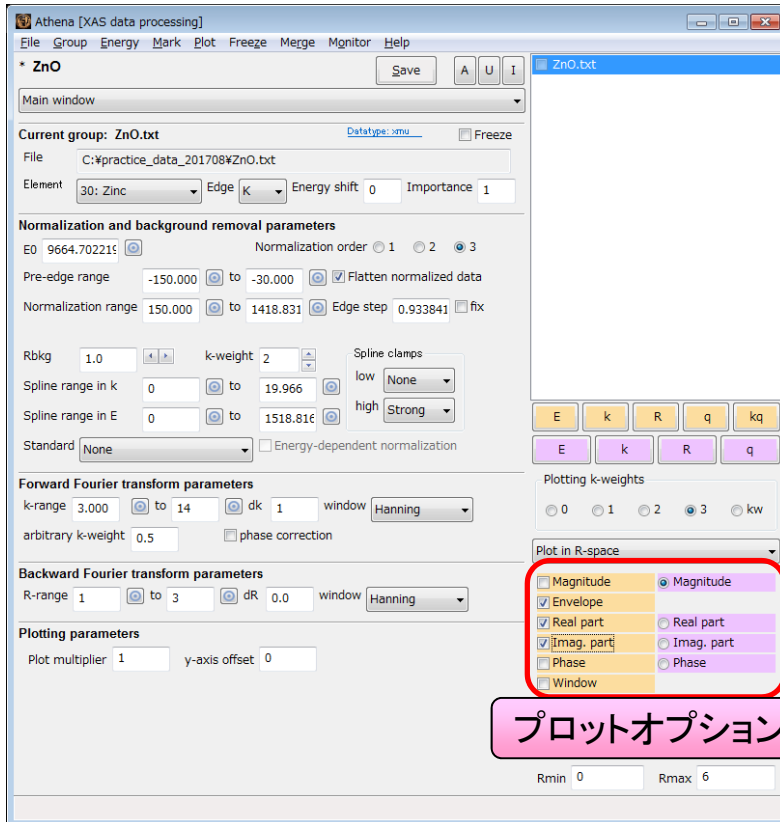
Rmin: 0 Rmax: 6

プロットオプション



Magnitude (default)

FTプロットのバリエーション

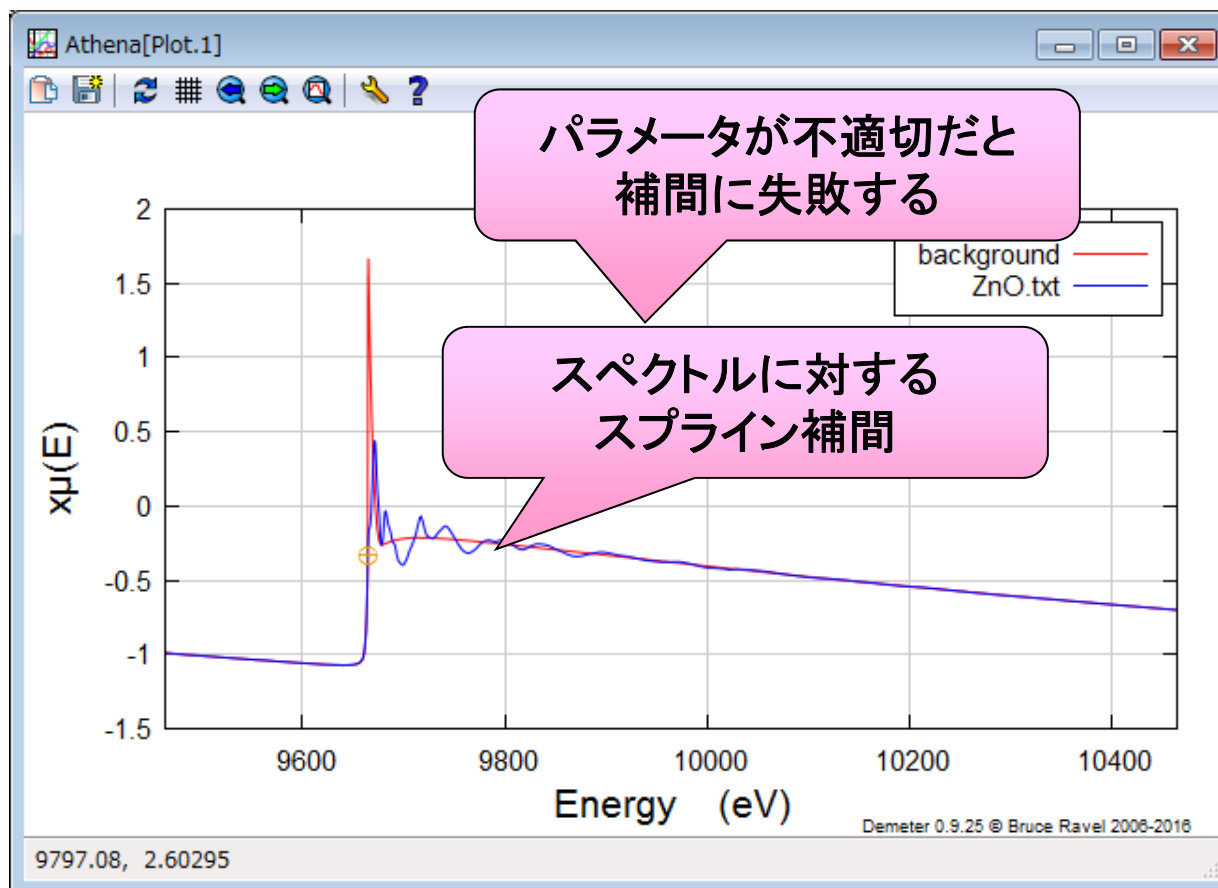


Envelop
+ Real part
+ Imaginary part

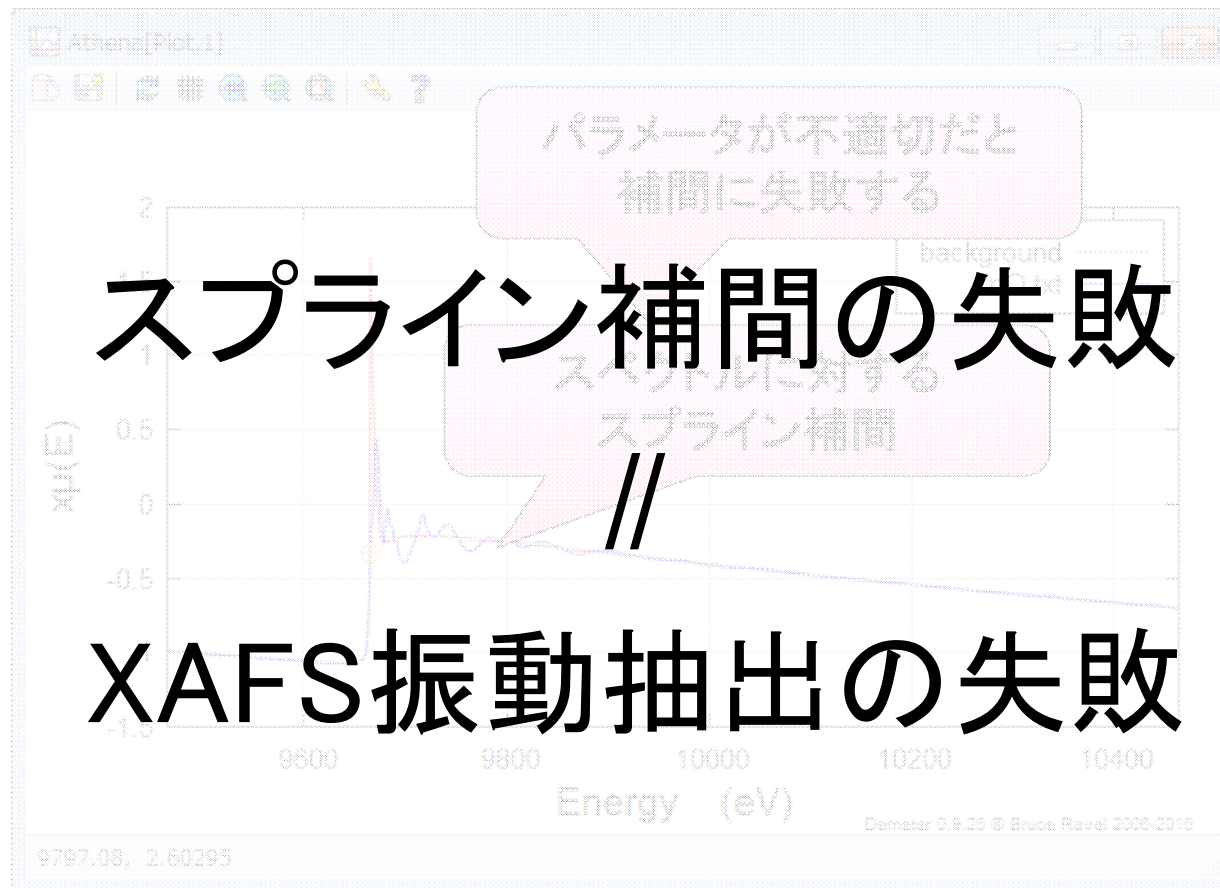
Outline

- 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**
- 複数データの比較方法
- Athenaのその他の機能

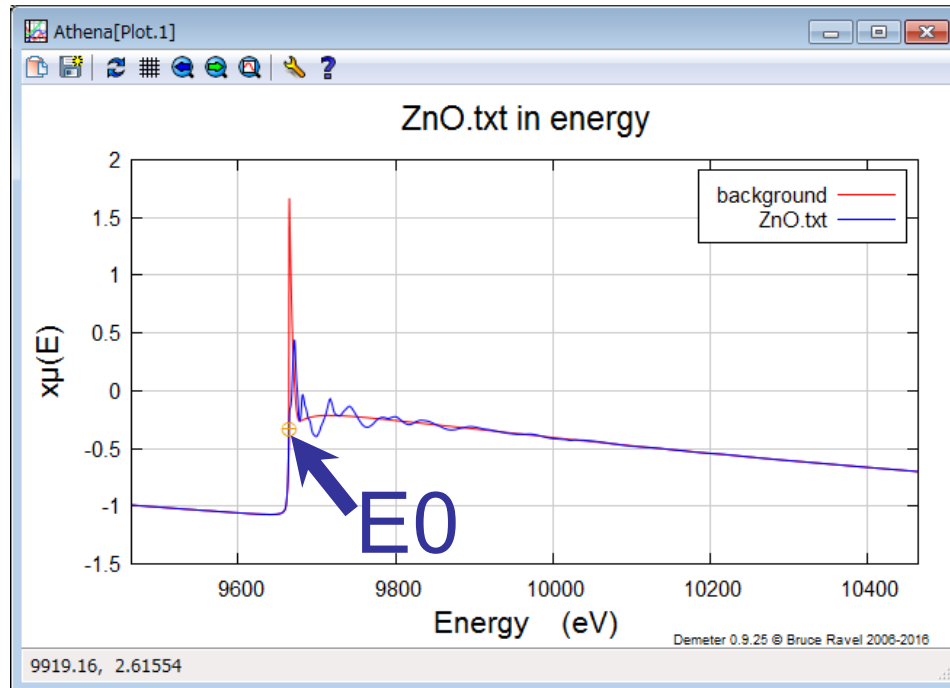
「バックグラウンド」とは



「バックグラウンド」とは



吸収端エネルギー (E0)の調整

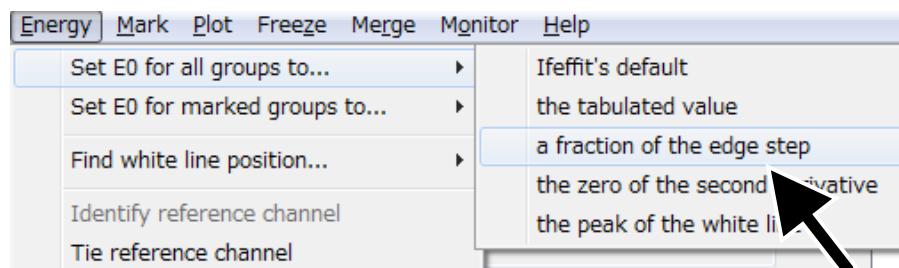


- XAFS振動の周期や振幅に影響
- 任意性がある
- デフォルト: $\mu(E)$ 1回微分のピーク位置

**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

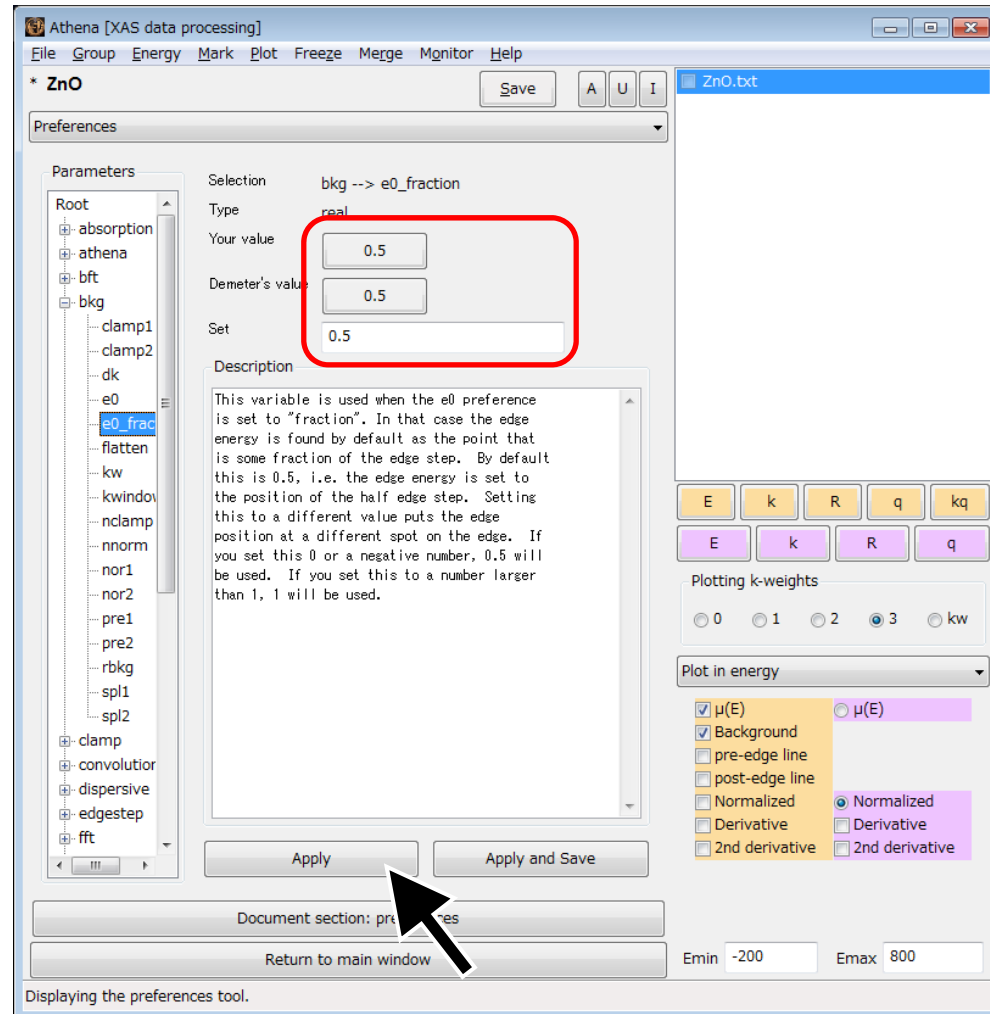
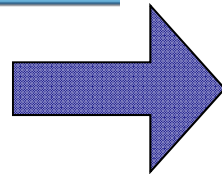
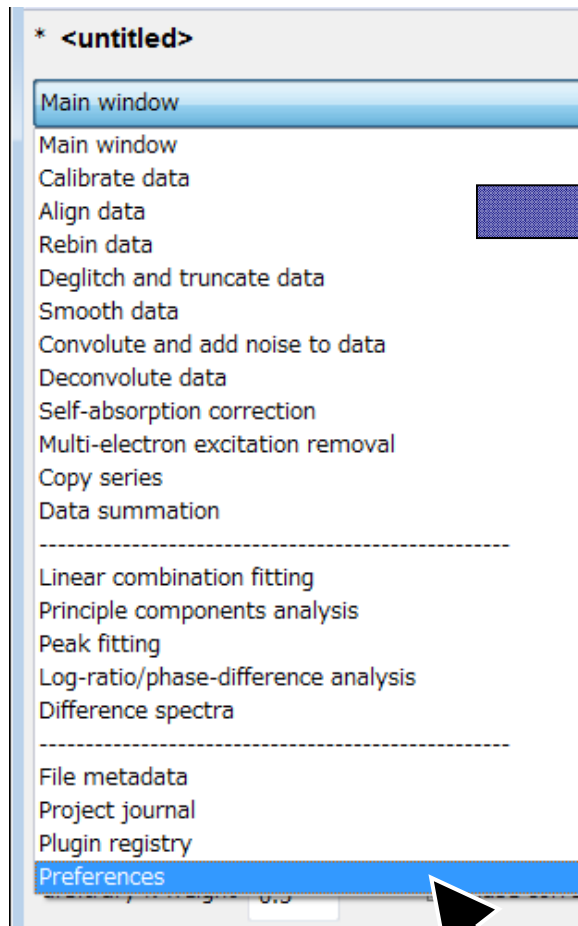
アルゴリズムを選択



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







E0の調整方法 その2



直接数値を編集



Normalization and background removal parameters



E0 9664.70221e  Normalization order 1 2 3


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



Normalization range 150.000  to 1418.831  Edge step 0.933841 fix

Rbkg 1.0  k-weight 2 

Spline range in k 0  to 19.966 

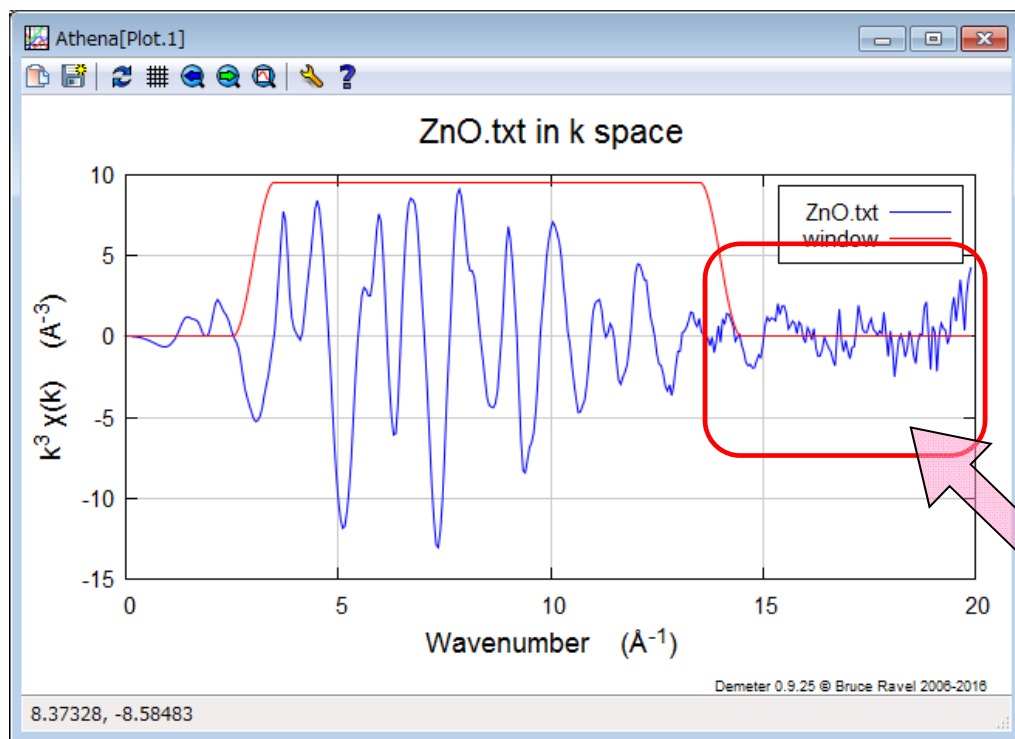
Spline range in E 0  to 1518.81e 

Standard None  Energy-dependent normalization

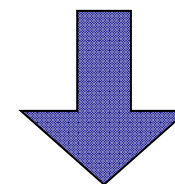
Spline clamps
low None 
high Strong 

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

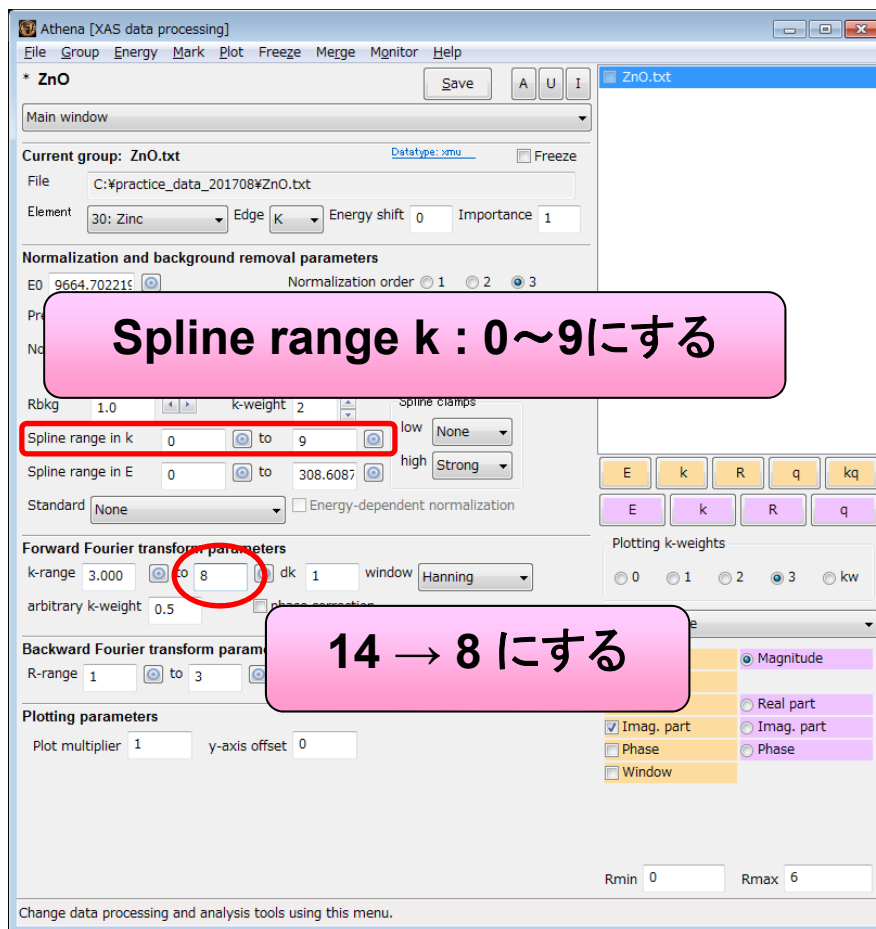


バックグラウンドの決定に悪影響



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]

Current group: ZnO.txt

File: C:\practice_data_201708\ZnO.txt

Element: 30: Zinc Edge: K Energy shift: 0 Importance: 1

Normalization and background removal parameters

E0: 9664.70221 eV Normalization order: 1 2 3

Spline range in k: 0 to 9

Spline range in E: 0 to 308.6087 eV

Forward Fourier transform parameters

k-range: 3.000 to 8 dk: 1 window: Hanning

Backward Fourier transform parameters

R-range: 1 to 3

Plotting parameters

Plot multiplier: 1 y-axis offset: 0

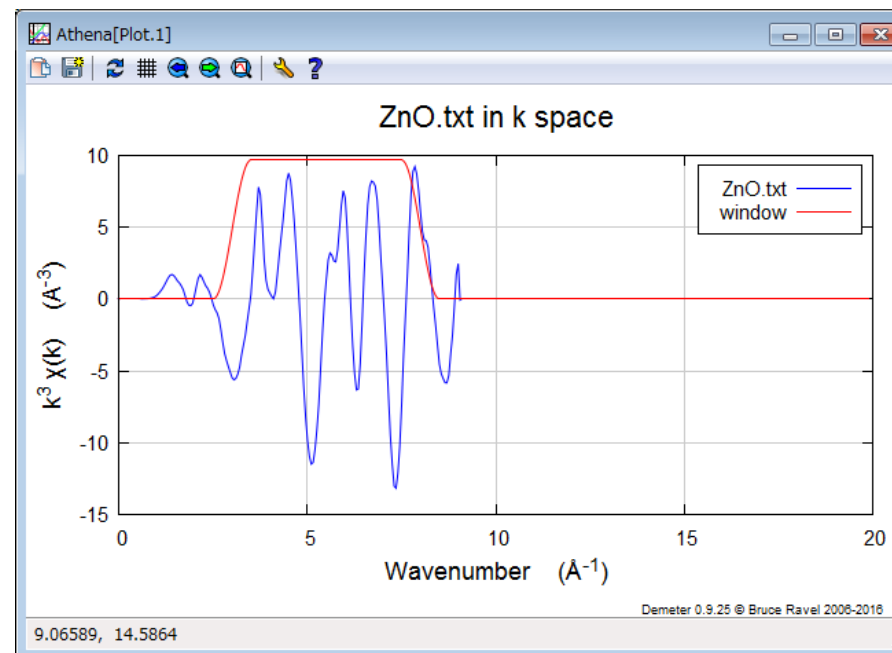
Rmin: 0 Rmax: 6

Change data processing and analysis tools using this menu.

Spline range k : 0~9にする

14 → 8 にする

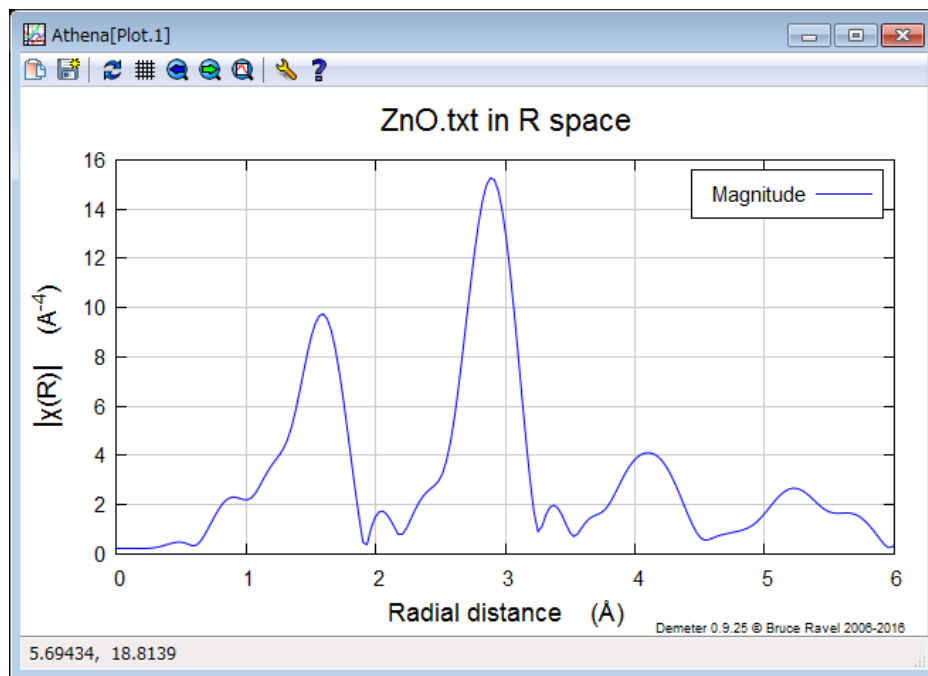
EXAFS振動



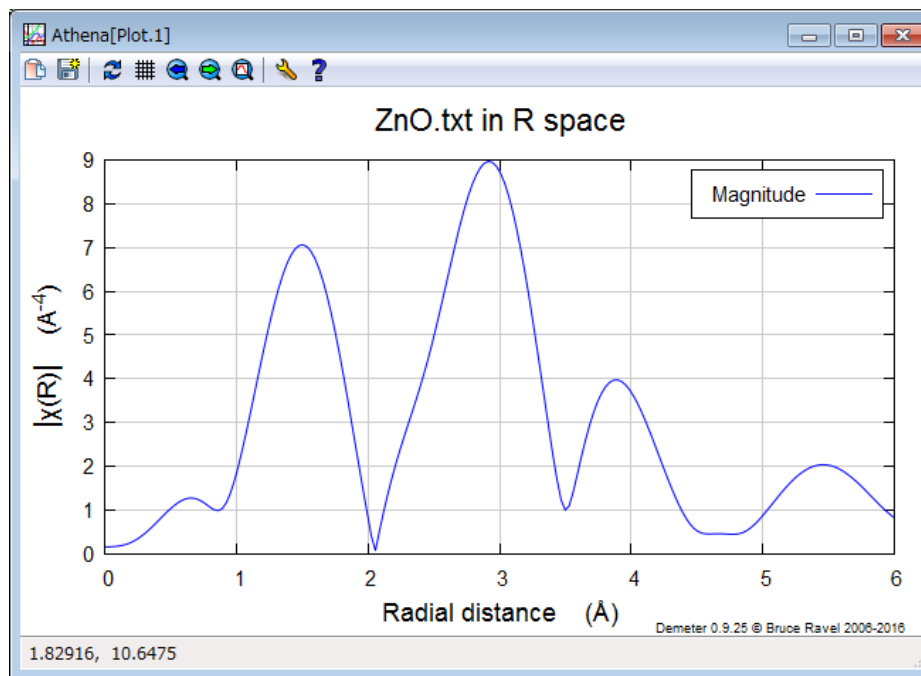
演算範囲が制限される

(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

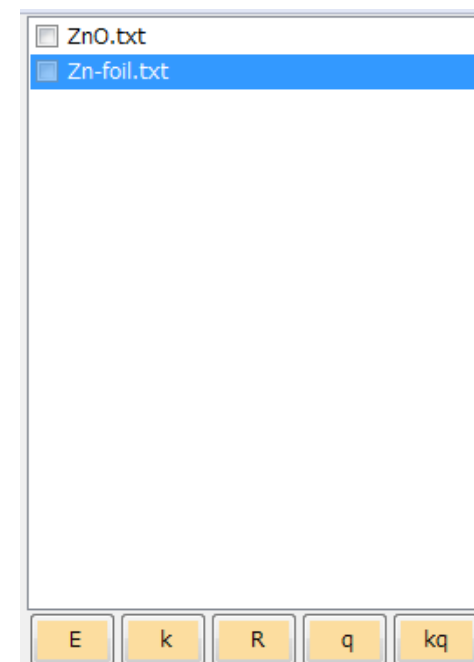
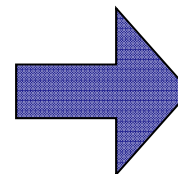
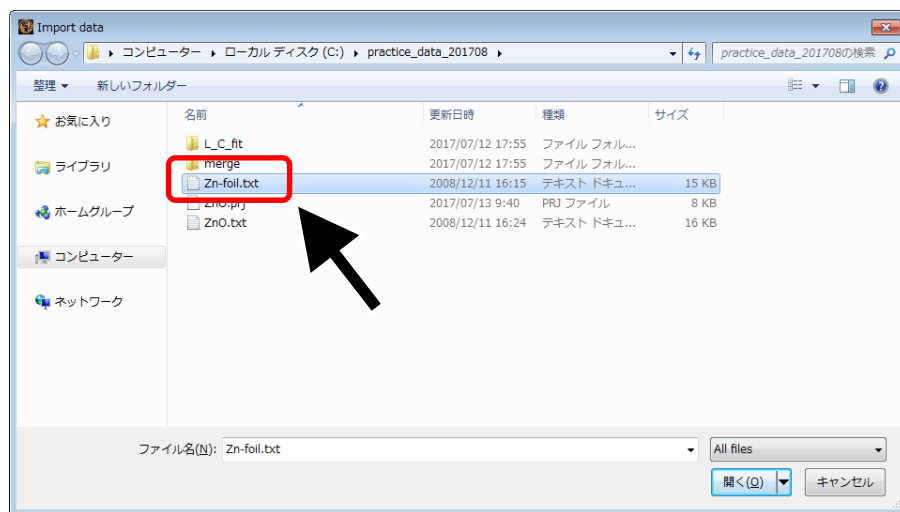


変更後

Outline

- 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
- **複数データの比較方法**
- Athenaのその他の機能

データの追加



Zn-foil.txtを開く

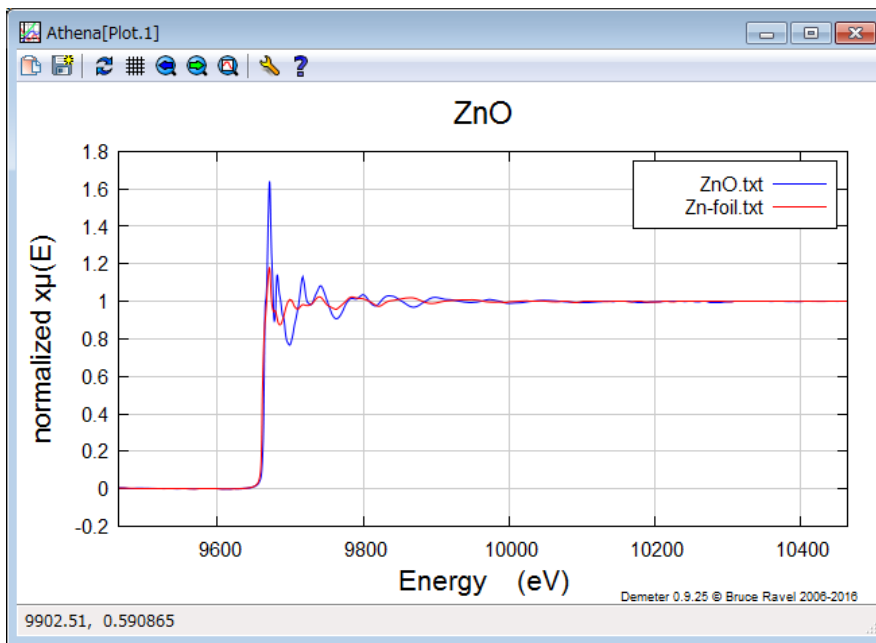
データグループに
追加される

吸収スペクトルの複数表示



表示したいデータの
チェックボックスを
チェック

紫色のボタンを
クリック



重ねて表示される

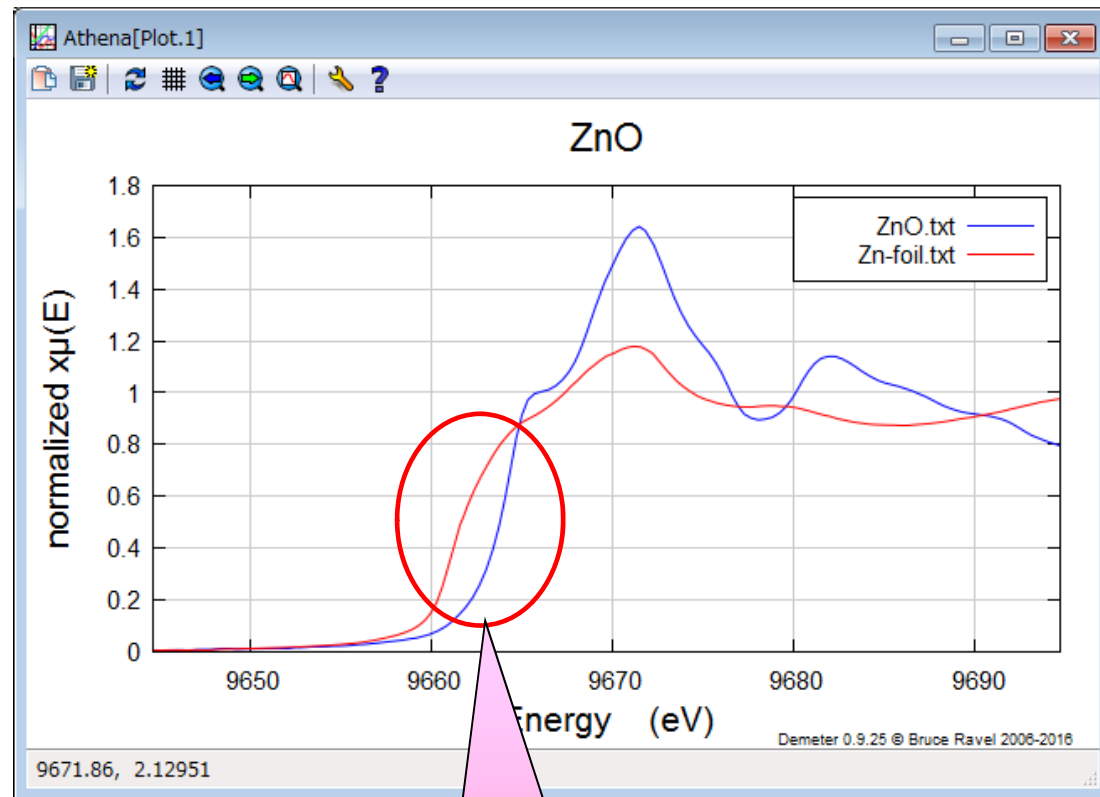
XANES領域の比較

Plotting options for Athena:

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

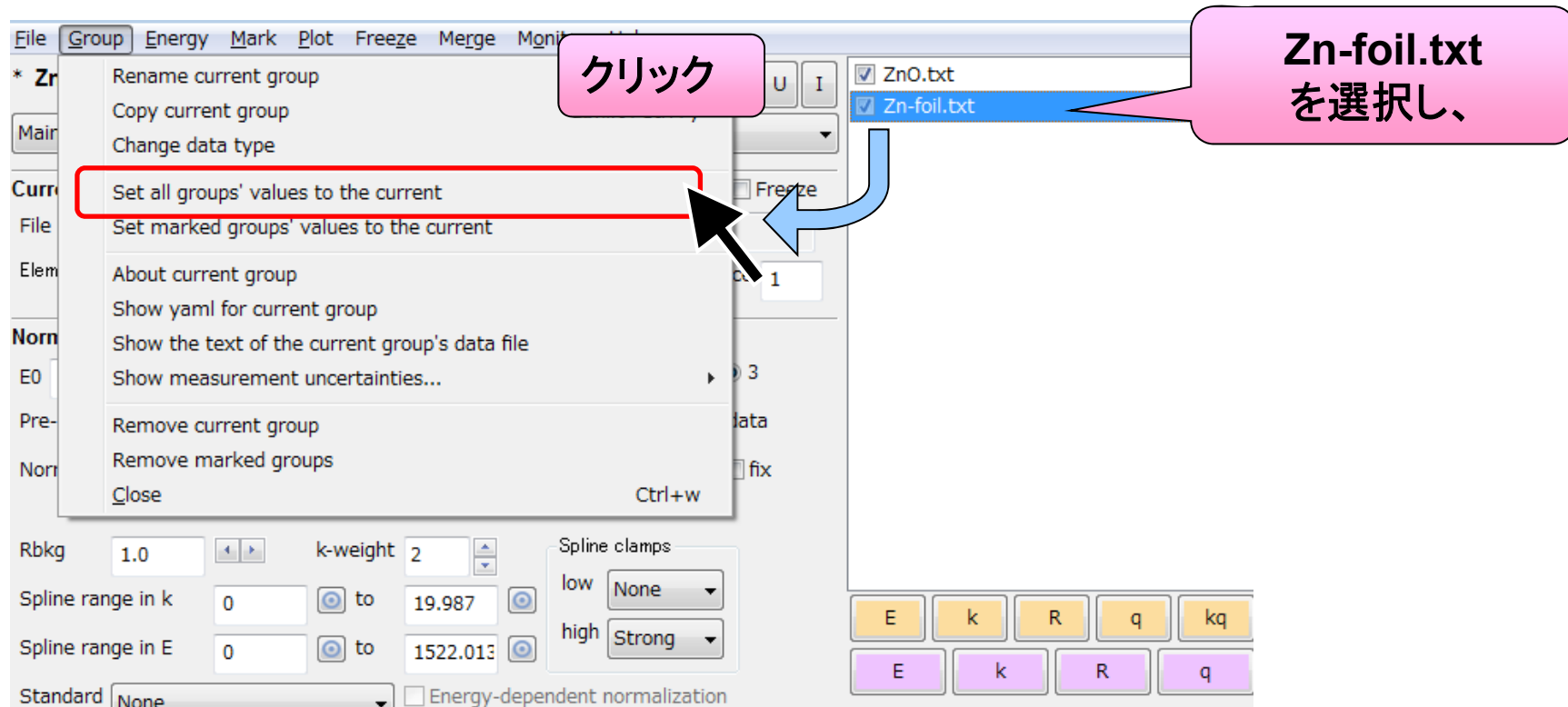
Emin: -20 Emax: 30

プロット範囲を変更
(E0に対する相対値)



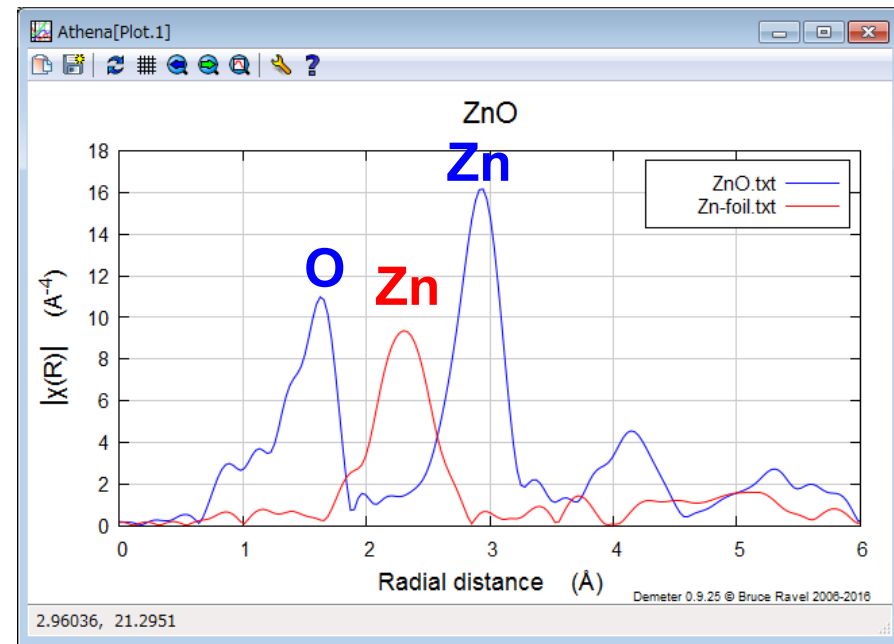
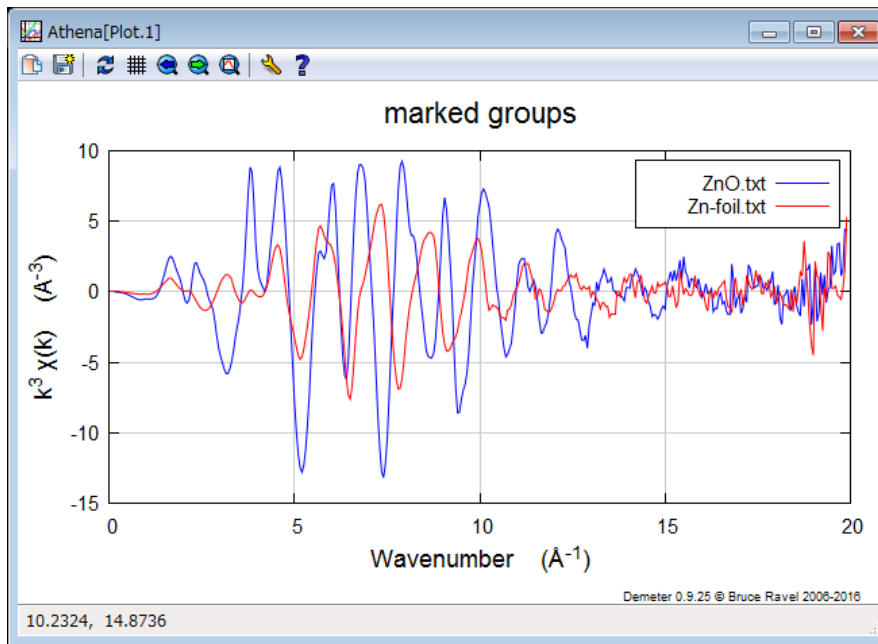
価数の違いによる
ケミカルシフト

解析パラメータを一致させる



ZnOもZn-foilのパラメータになる

ZnとZnOの比較

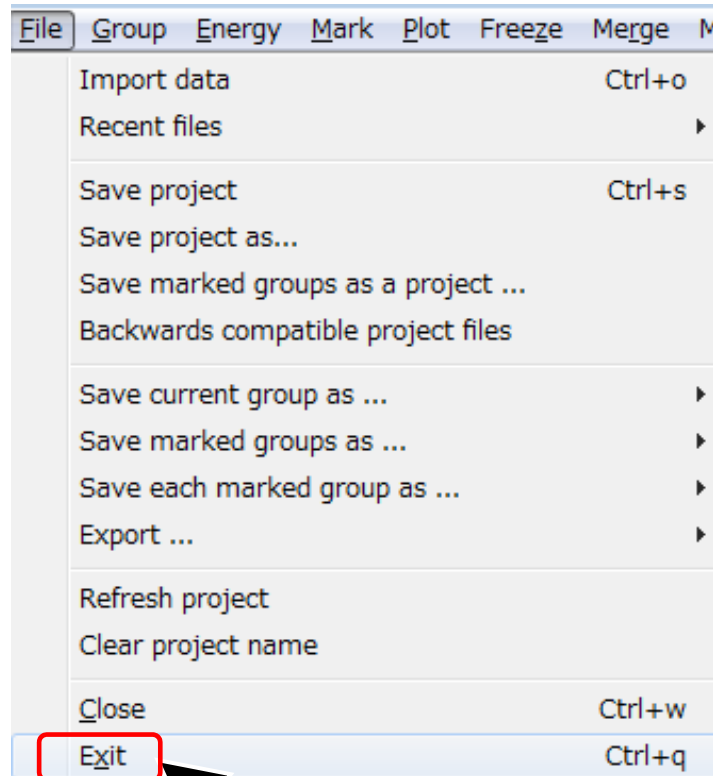


振動周期 ⇒ 結合距離

振幅 ⇒ 散乱元素種、配位数

Athenaの終了

[File] – [Exit]



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

Outline

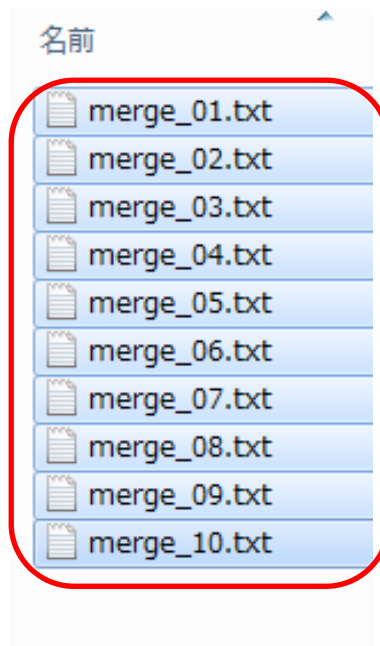
- 最新のAthenaを入手する
- Athenaの起動と測定データの読み込み
- 解析操作の基本
- バックグラウンド処理の調整
- 複数データの比較方法
- Athenaのその他の機能

付録1: データの足し合わせ (merge)

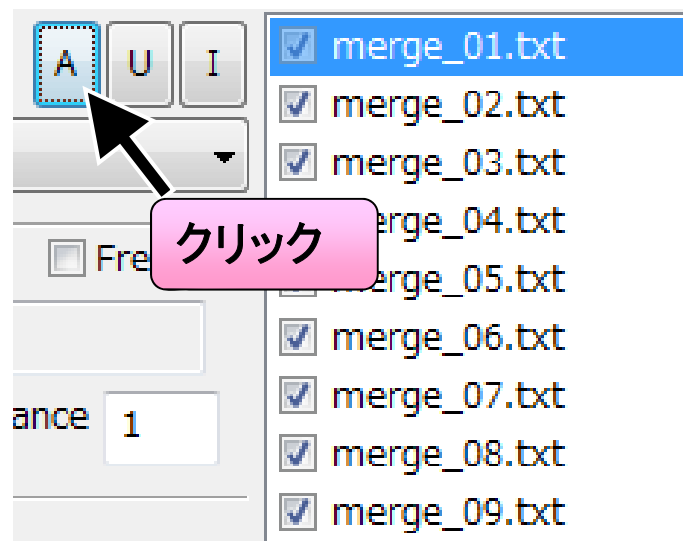
繰り返し(loop)測定によって積算時間を稼いだ時などに
データを足し合わせたい場合

測定データの一括読み込み

step1



step2

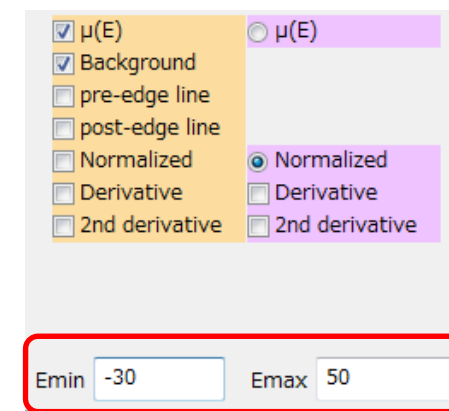


A: 全データ選択

U : 全データ選択解除

I : 選択データ反転

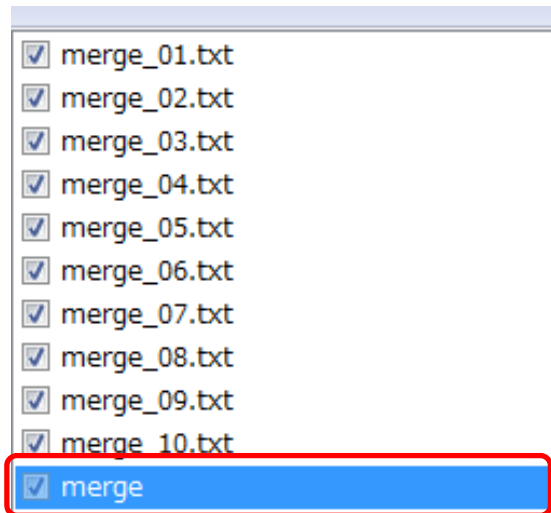
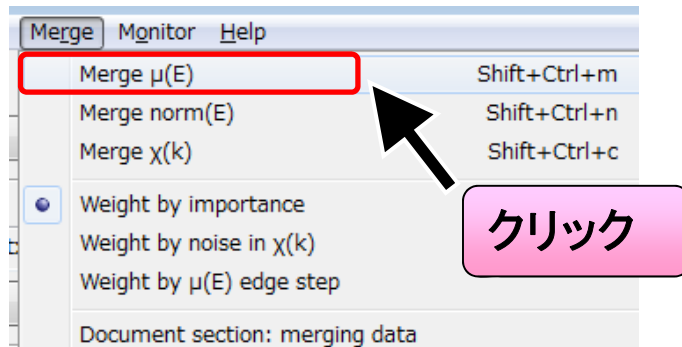
step3



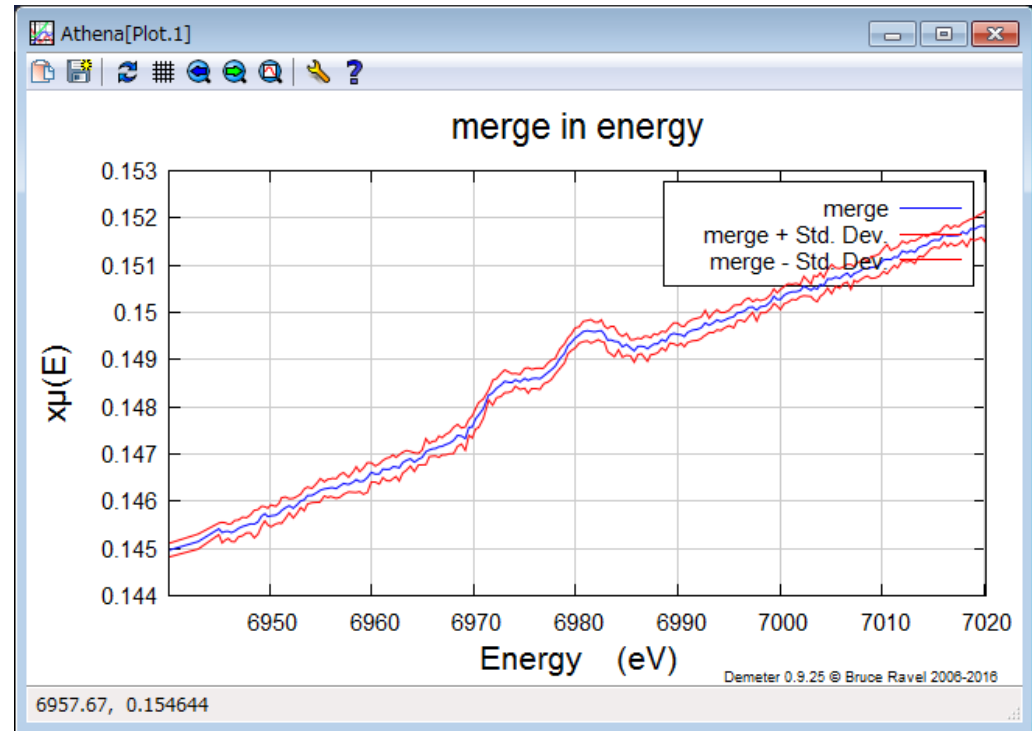
表示範囲を調整

データの足し合わせ (merge) SPring 8

データの足し合わせ



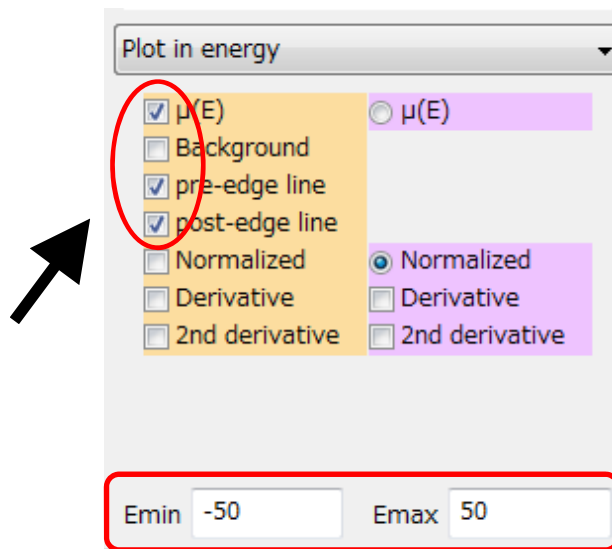
“merge”が追加される



足し合わせデータ“merge”と
標準偏差が表示

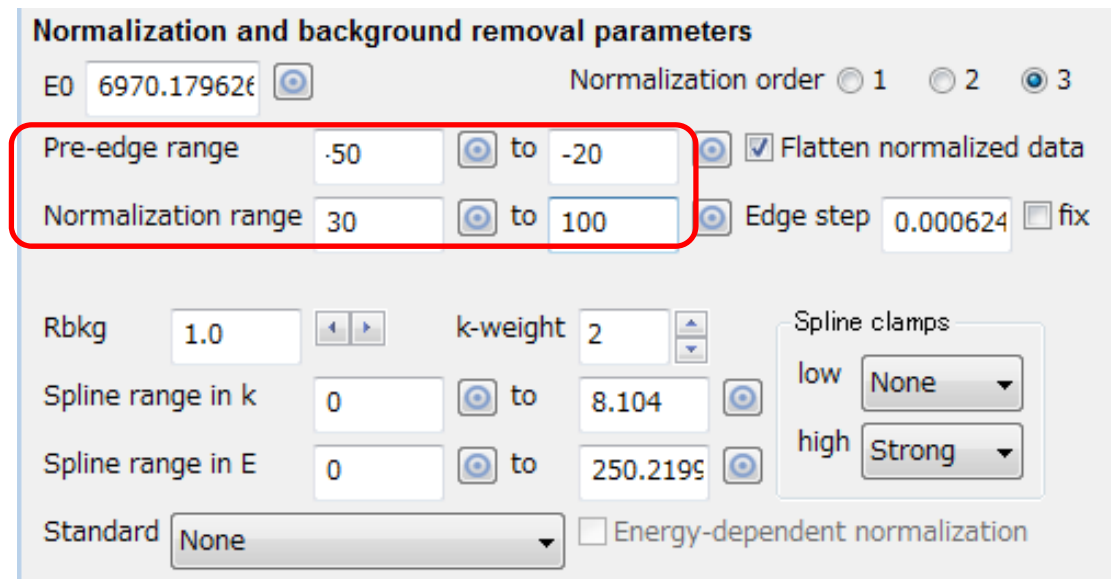
Pre-edge line & Post-edge line

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

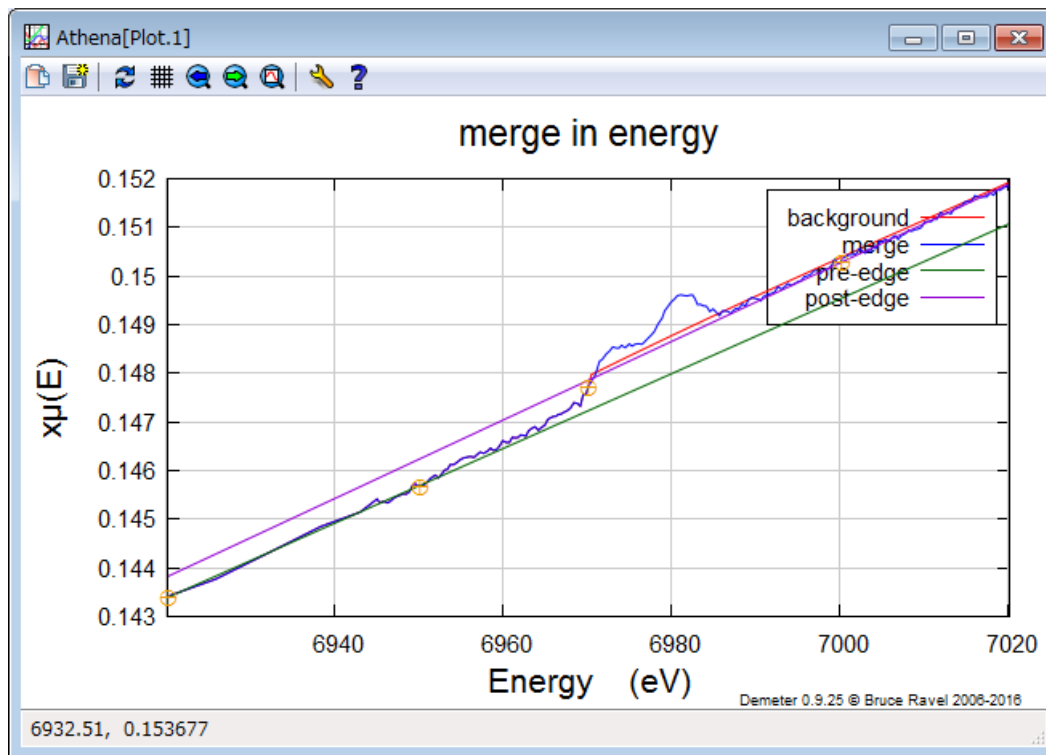


パラメータの変更:

pre-edge line → Pre-edge range

post-edge line → Normalization range

Pre-edge line & Post-edge line

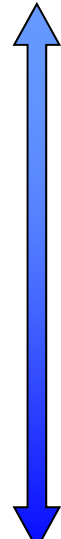


- 規格化の基準となる
- バックグラウンド決定に影響

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

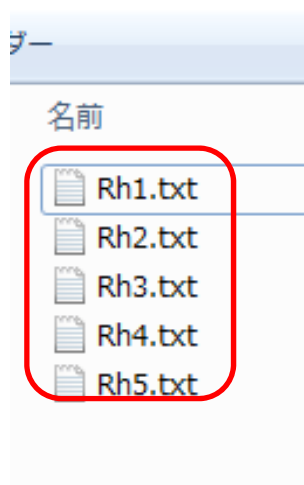
1,5の化学状態が混ざっている

dir:20170130¥L_C_fit

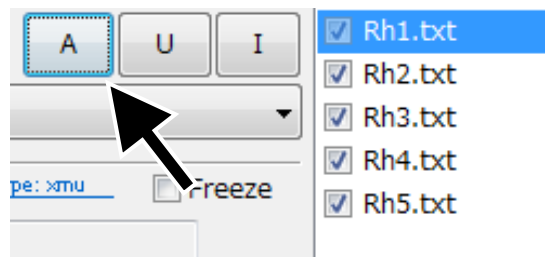
Linear combination fit

データの読み込み

step1

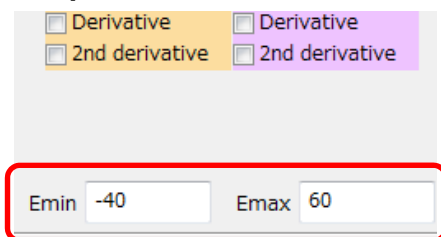


step2



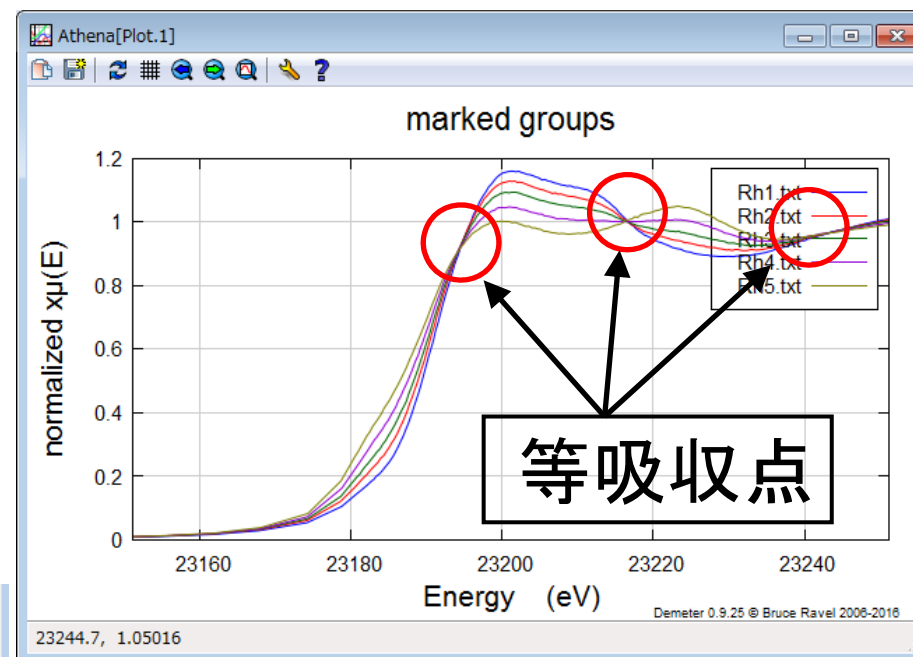
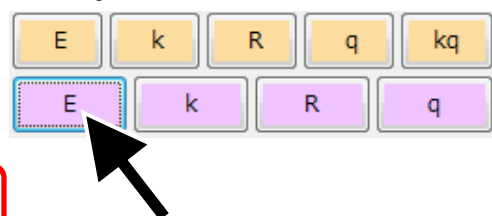
全データ選択

step3



表示範囲を調整

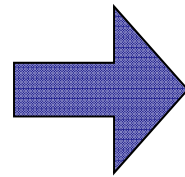
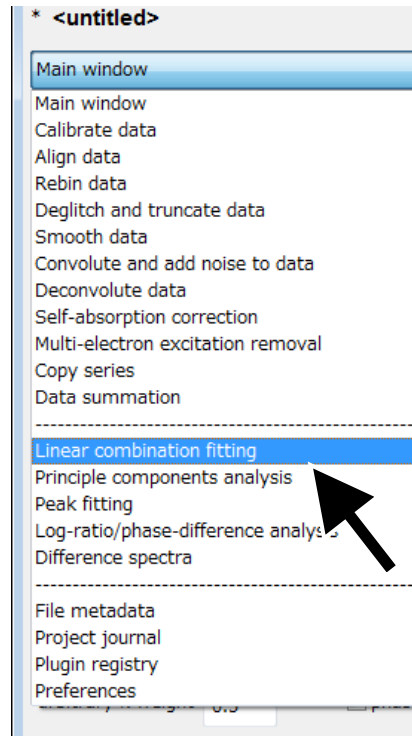
step4



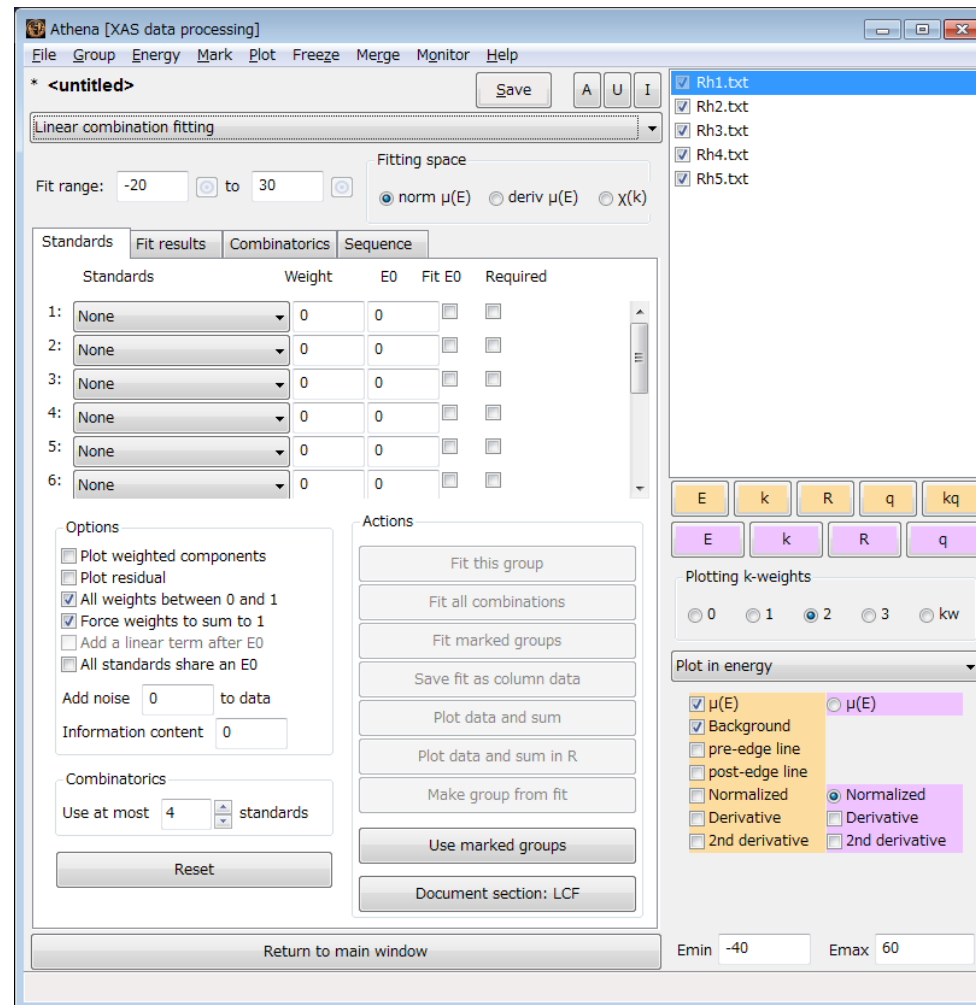
Rh1からRh5へ連続的に変化

Linear combination fit

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

Athena [XAS data processing]

File Group Energy Mark Plot Freeze Merge Monitor Help

* <untitled> Save A U I

Linear combination fitting

Fit range: -20 to 30 Fitting space: norm $\mu(E)$ deriv $\mu(E)$ $\chi(k)$

Standards	Weight	E0	Fit E0	Required
1: Rh1.txt	0.500	0	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
2: Rh5.txt	0.500	0	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
3: None	0	0	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
4: None	0	0	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
5: None	0	0	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
6: None	0	0	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>

Options

- Plot weighted components
- Plot residual
- All weights between 0 and 1
- Force weights to sum to 1
- Add a linear term after E0
- All standards share an E0

Add noise 0 to data

Information content 0

Combinatorics

Use at most 4 standards

Reset

Actions

- Fit this group
- Fit all combinations
- Fit marked groups**
- Save fit as column data
- Plot data and sum
- Plot data and sum in R
- Make group from fit
- Use marked groups
- Document section: LCF

Return to main window Emin -40 Emax 60

Change data processing and analysis tools using this menu.

Rh1, 5選択

Rh2, 3, 4選択

クリック

Linear combination fit

解析結果の表示

The image shows the Athena software interface for XAS data processing. The main window is titled 'Athena [XAS data processing]' and contains several panels. The 'Standards' panel is highlighted with a red box and a callout 'Standardsを選択' (Select Standards). The 'Options' panel has 'Plot weighted component' checked, also highlighted with a red box and a callout 'Plot weighted components をチェック' (Check Plot weighted components). The 'Actions' panel has 'Plot data and sum' highlighted with a red box and a callout 'Plot data and sum をクリック' (Click Plot data and sum). The 'Rh2.txt' file is selected in the file list, with a callout 'Rh2を選択' (Select Rh2). The plot window 'Athena[Plot.1]' shows 'Normalized absorption' vs 'Energy (eV)'. The plot includes data points, a linear combination fit (LCF fit), and individual standard fits (Rh1.txt, Rh2.txt, Rh5.txt). Callouts indicate 'Rh2' for the peak at approximately 23200 eV and 'Rh1: 0.776' and 'Rh5: 0.224' for the fitted components. The plot also shows vertical lines for the energy range and a legend for the different data series.

Standards

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

Options

- Plot weighted component
- Plot residual
- All weights between 0 and 1
- Force weights to sum to 1
- Add a linear term after E0
- All standards share an E0

Actions

- Fit this group
- Fit all combinations
- Fit marked groups
- Save fit as column data
- Plot data and sum
- Plot data and sum in R
- Make group

Plot in energy

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

Normalized absorption

Energy (eV)

Rh2

Rh1: 0.776

Rh5: 0.224

Legend: Rh2.txt, LCF fit, Rh1.txt, Rh5.txt

Linear combination fit

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

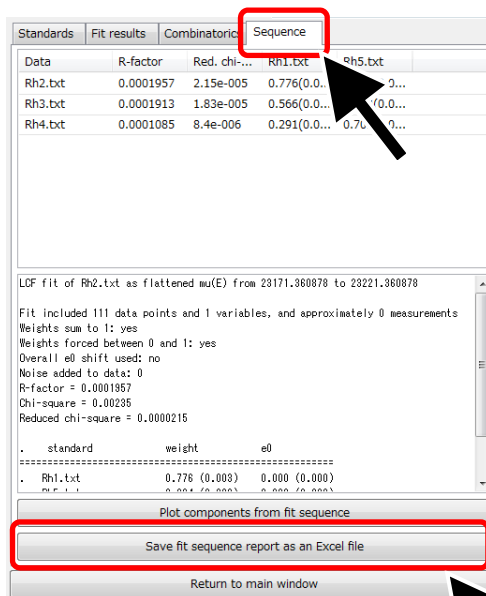
standard	weight	e0
Rh1.txt	0.776 (0.003)	0.000 (0.000)
Rh5.txt	0.224 (0.003)	0.000 (0.000)
sum	1.000	

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 -

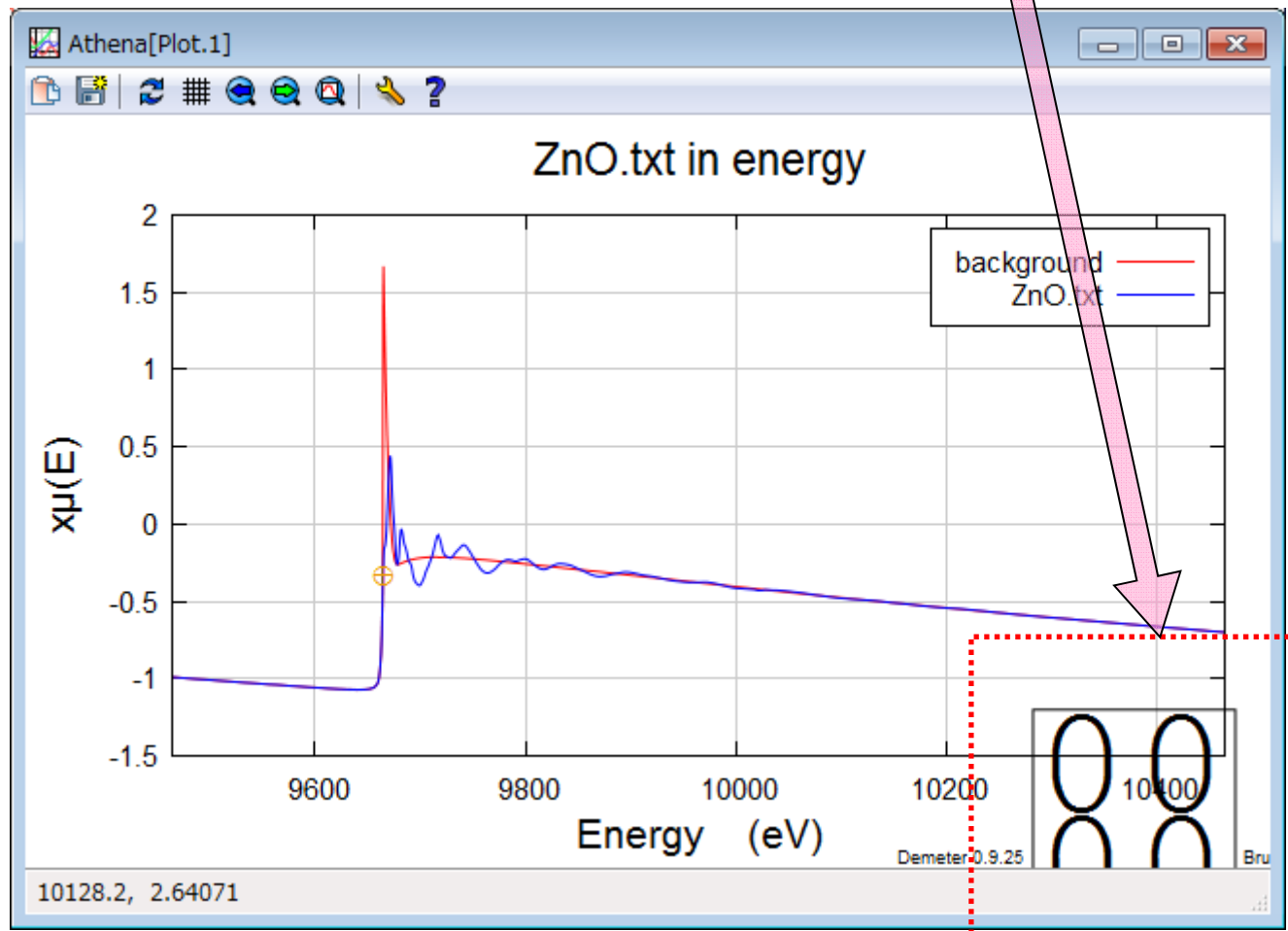


デフォルトファイル名:
lcf_sequence.xls

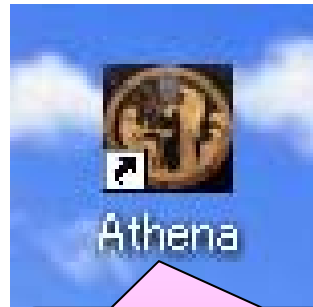
	Rh1.txt	Rh2.txt	Rh3.txt	Rh4.txt	Rh5.txt
rfactor		0.000196	0.000191	0.000109	
chinu		2.15E-05	1.83E-05	8.4E-06	
chisqr		0.00235	0.00201	0.00092	
nvarys		1	1	1	
scaleby					
weight		0.775779	0.566459	0.290611	0.224221
error		0.003369	0.003111	0.002104	0.003369
e0		0	0	0	0

付録3: グラフ画面の文字化け修正方法 SPring 8

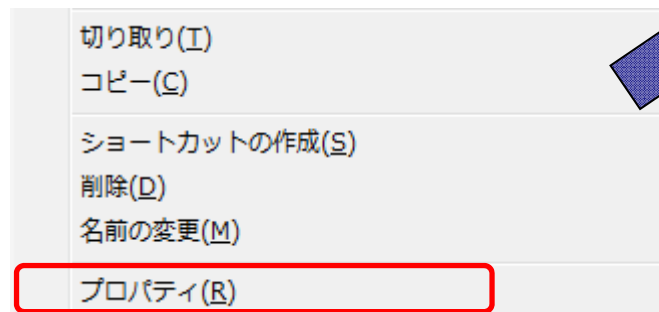
Athenaのグラフ画面で下図のような文字化けが現れる場合の修正方法



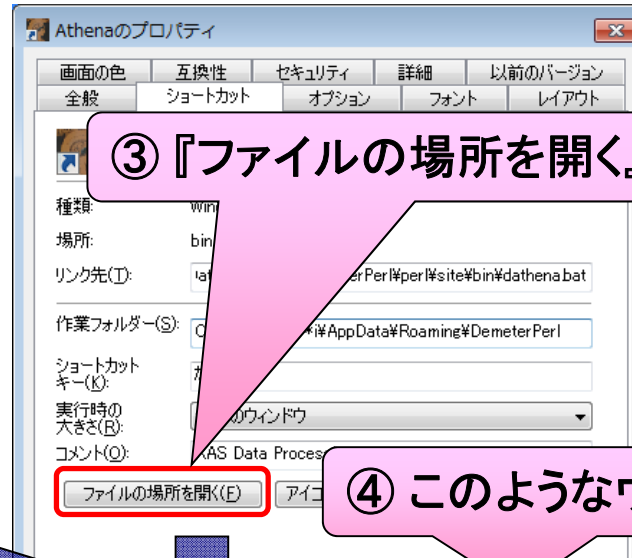
修正方法①



① Athenaのショートカットアイコン上で右クリック

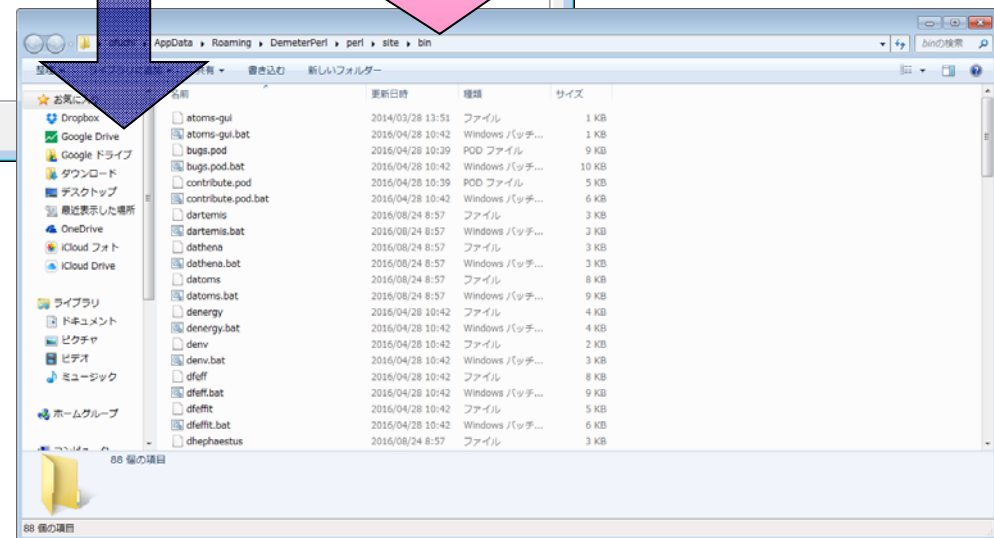


② 『プロパティ』をクリック

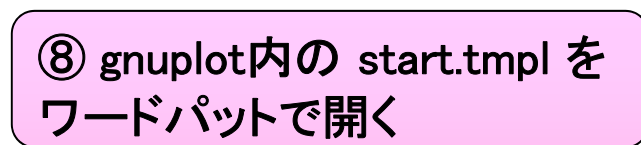
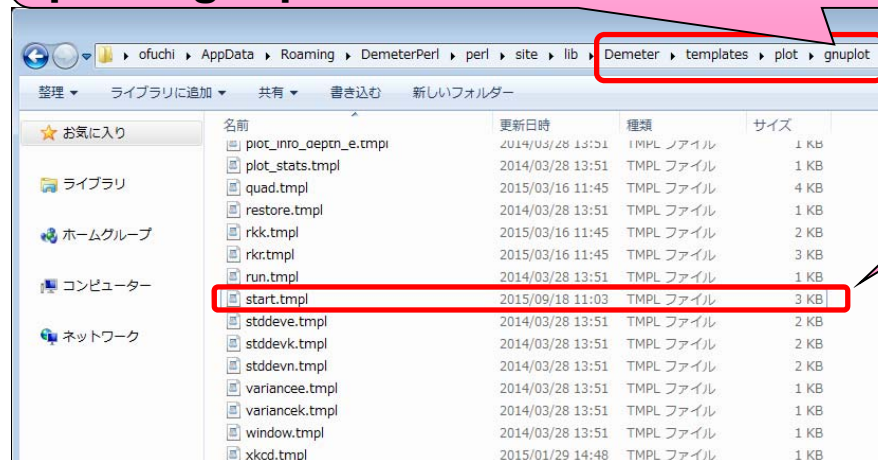


③ 『ファイルの場所を開く』をクリック

④ このようなウィンドウが開く



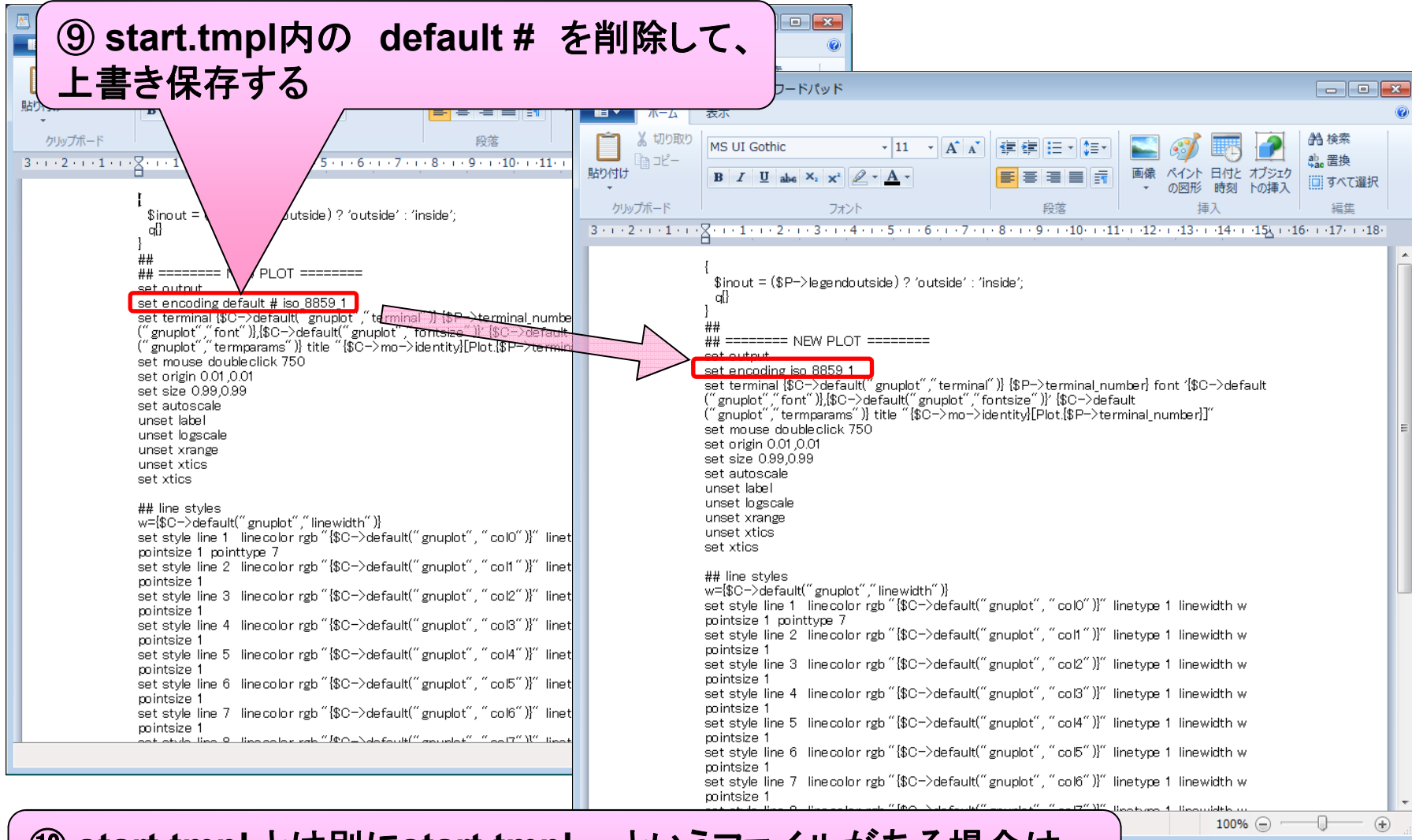
修正方法②



(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

