

## XAFS データ変換プログラムマニュアル

2017.11.30 大淵 博宣

### ● XAFS データ変換プログラムの起動

XAFS\_DataConverter(Ver.3.0).xls を開く。図 1 のような画面が表示される。



シート  
図 1 XAFS\_DataConverter(Ver.3.0).xls 起動時の画面

- (i) 「19SSD」シート：STEP SCAN モードで 19 素子 SSD を用いた蛍光法にて測定したデータを変換する。
- (ii) 「19SSD\_QXAFS」シート：QUICK SCAN モードで 19 素子 SSD を用いた蛍光法にて測定したデータを変換する。
- (iii) 「deadtime」シート：19 素子 SSD の数え落とし補正データを読み込む。
- (iv) 「trans&fluo&CEY」シート：STEP SCAN モードで透過法、ライトル検出器による蛍光法、転換電子収量法にて測定したデータを変換する。
- (v) 「trans&fluo&CEY\_QXAFS」シート：QUICK SCAN モードで透過法、ライトル検出器による蛍光法、転換電子収量法にて測定したデータを変換する。
- (vi) 「パス設定」：変換プログラムがあるパスを設定する。  
(XAFS\_DataConverter(Ver.3.0).xls を初めて起動した際は必ず設定する。)

(i) 「19SSD」 シート

図 2 「19SSD」 シート画面

- 1) 「19SSD」シートの 1-1 から IN ボタンを押し、測定データを読み込む。1-2 に出力される XLS ファイル名が表示される。ファイル名を変えたい場合はここで変更する。
- 2) 1-3 で実行ボタンを押し、XLS ファイルを作成する。
- 3) 出力された XLS ファイルを開き、各 SSD 素子のデータに不具合がないか確認する。不具合があった場合は、その素子のデータを除く (Appendix I 参照)。
- 3) 出力するファイル形式を選択する (Appendix III 参照)。
  - ・ for REX (.ex3) : REX2000 形式で出力
  - ・ for Athena, Artemis (.txt) : Athena 形式で出力
  - ・ for REX & Athena (.ex3 & .txt) : REX2000 形式と Athena 形式の両方を出力
- 4) 2-3 で実行ボタンを押し、EX3 ファイルを作成する。

(ii) 「19SSD\_QXAFS」 シート

19SSD (Quick scan) help

1-0. パラメータファイルを読み込む  
IN (par) C:\SSDB\par\Cu-K\_Si111.par

1-1. 測定データを読み込む  
IN (dat) C:\SSDB\20120613\01\_Cu-K\Cu-K\_CuO\_Si111\_50ms\_120613.dat  
※1-1 実行時、1-2のfull\_pathを自動更新します

1-2. 出力ファイル名を指定  
OUT (xls) C:\SSDB\20120613\01\_Cu-K\Cu-K\_CuO\_Si111\_50ms\_120613.xls

1-3. XLSファイル作成  
実行 ※1-3 実行時、1-2のfull\_pathを2-1、2-2に自動更新します

2-1.  
IN (xls) C:\SSDB\20120613\01\_Cu-K\Cu-K\_CuO\_Si111\_50ms\_120613.xls  
※1-3 で指定したファイルなら省略可  
※2-1 実行時、2-2のfull\_pathを自動更新します

2-2. 出力ファイル名を指定  
OUT (ex3) C:\SSDB\20120613\01\_Cu-K\Cu-K\_CuO\_Si111\_50ms\_120613.ex3

2-3. EX3, TXTファイル作成  
実行  
出力ファイル選択  
 for REX (.ex3)  
 for Athena, Artemis (.txt)  
 for REX & Athena (.ex3 & .txt)

図 3 「19SSD\_QXAFS」 シート画面

- 1) 「19SSD\_QXAFS」シートの 1-0 から Input ボタンを押し、パラメータファイル (\*.par)を読み込む。
- 2) 1-1 から Input ボタンを押し、測定データを読み込む。
- 3) 1-3 で実行ボタンを押し、XLS ファイルを作成する。
- 4) 出力するファイル形式を選択する(Appendix III 参照)。
  - ・ for REX (.ex3) : REX2000 形式で出力
  - ・ for Athena, Artemis (.txt) : Athena 形式で出力
  - ・ for REX & Athena (.ex3 & .txt) : REX2000 形式と Athena 形式の両方を出力
- 5) 2-3 で実行ボタンを押し、EX3 ファイルを作成する。

(iii) 「deadtime」シート

deadtime help

1) 測定データを読み込む

(dat)

※1)実行時、2)のfull pathを自動更新します

---

2) 出力ファイル名を指定

(xls)

※2)実行時、2)のfull pathを自動更新します

---

3) XLSファイル作成 & set path

※3)実行時、2)のfull pathを19SSDのシート 1-0に自動更新します

---

set path 新機能 (2007.11.8)

※既存ファイルまたは、3)で作成したファイルを読み込む

図 4 「deadtime」シート画面

1) 「deadtime」シートの 4) set path から数え落とし補正用データ(deadtime\*.xls)を読み込む。

(iv) 「trans&fluo&CEY」 シート

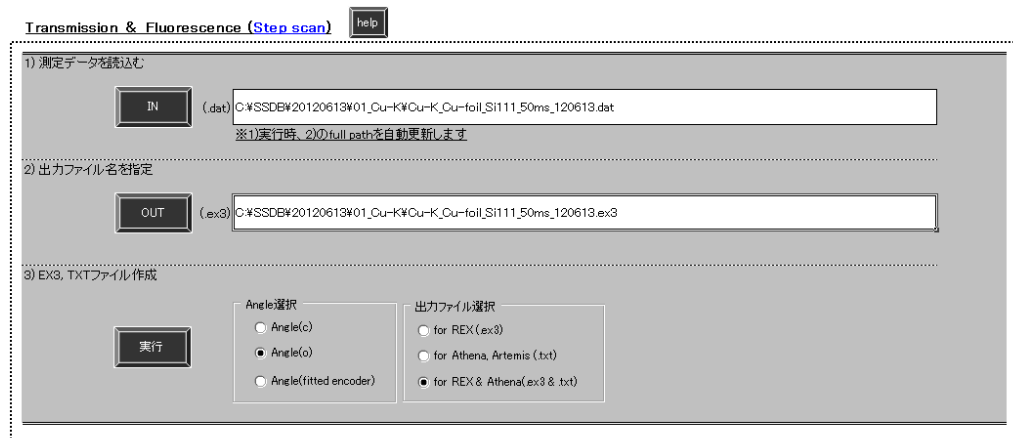


図 5 「trans&fluo&CEY」 シート画面

1) 「trans&fluo&CEY」シートの 1)から IN ボタンを押し、測定データを読み込む。2) に出される EX3 ファイル名が表示される。ファイル名を変えたい場合はここで変更する。

2) 3)で Angle 選択でモノクロ角度の出力形式を選択する。

- ・ Angle(c) : パソコンの値

- ・ Angle(o) : エンコーダーの読み取り値(通常はこれを選択してください。)

- ・ Angle(fitted encoder) : 数十 keV 以上の高エネルギー領域で測定した場合、EXAFS 振動の高波数側で短い周期の振動が現れることがある。これを選択することにより振動がなくなることがある(Appendix II 参照)。

(注 : 必ず Angle(o)との比較を行なってください。)

4) 出力するファイル形式を選択する(Appendix III 参照)。

- ・ for REX (.ex3) : REX2000 形式で出力

- ・ for Athena, Artemis (.txt) : Athena 形式で出力

- ・ for REX & Athena (.ex3 & .txt) : REX2000 形式と Athena 形式の両方を出力

5) 実行ボタンを押し、EX3 ファイルを作成する。

(v) 「trans&fluo&CEY\_QXAFS」 シート

図 6 「trans&fluo&CEY\_QXAFS」シート画面

- 1) 「trans&fluo&CEY\_QXAFS」シートの1からINボタンを押し、パラメータファイル(\*.par)を読み込む。
- 2) 2)からINボタンを押し、測定データを読み込む。3)に出力されるEX3ファイル名が表示される。ファイル名を変えたい場合はここで変更する。
- 3) 4)でAngle選択でモノクロ角度の出力形式を選択する。
  - ・ Angle(c) : パソコンの値
  - ・ Angle(o) : エンコーダーの読み取り値(通常はこれを選択してください。)
  - ・ Angle(fitted encoder) : 数十 keV 以上の高エネルギー領域で測定した場合、EXAFS 振動の高波数側で短い周期の振動が現れることがある。これを選択することにより振動がなくなることがある(Appendix II 参照)。

(注 : 必ず Angle(o) との比較を行なってください。)
- 4) 出力するファイル形式を選択する(Appendix III 参照)。
  - ・ for REX (.ex3) : REX2000 形式で出力
  - ・ for Athena, Artemis (.txt) : Athena 形式で出力
  - ・ for REX & Athena (.ex3 & .txt) : REX2000 形式と Athena 形式の両方を出力
- 5) 実行ボタンを押し、EX3 ファイル又は TXT ファイルを出力する。

(vi) 「パス設定」シート

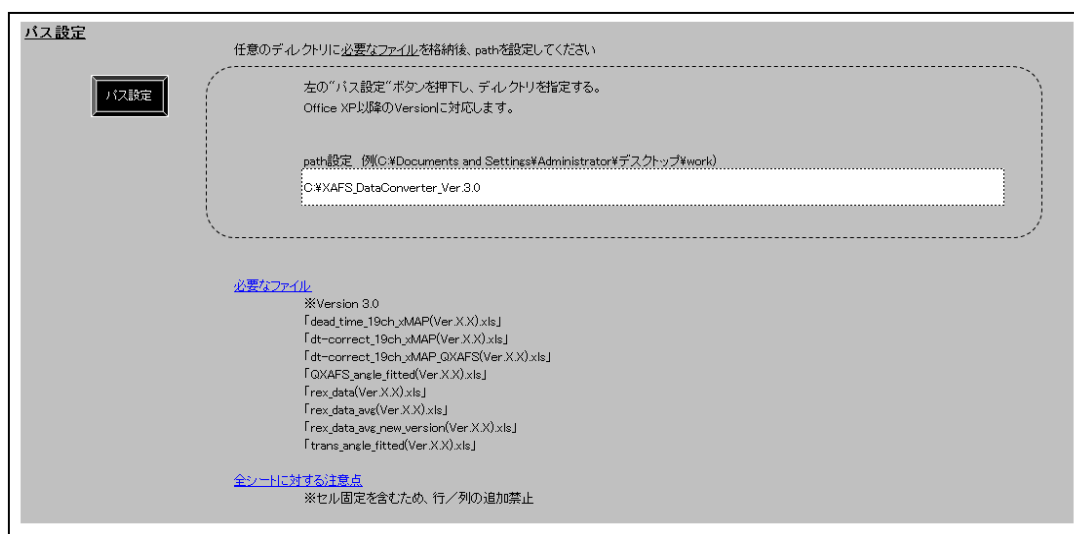


図7 「パス設定」シート画面

- 1) 「パス設定」シートで必要なファイルが置いてある path を設定する。  
(XAFS\_DataConverter(Ver.3.0).xls を初めて起動した際は必ず設定する。)

# Appendix

## I. SSD の各素子データ除去方法

(1) 「19SSD」「19SSD\_QXAFS」シートにて、測定データから変換された XLS ファイルを開く(図 8)。

Energy (eV)	B/B
6649.959672	305.9047031
6655.700221	348.9680796
6661.269127	338.5515904
6667.124996	374.9727913
6672.959223	379.934097
6678.540461	358.9505653
6684.143340	329.7076541
6690.027694	319.3279427
6695.685791	305.9734944
6701.612980	293.7693011
6707.215629	266.0514867
6713.191874	192.2952617
6719.014532	176.6703455
6724.959642	157.2094709
6730.726439	152.2884969
6736.583896	239.8223595
6742.541195	142.9392586
6748.329267	208.8309584
6754.384534	147.6266969
6760.131461	161.2967054
6766.233055	197.6484853
6772.004490	178.0415188
6778.136709	253.8901002
6783.684528	198.1833737
6790.089219	185.7304000
6795.977153	211.1298013
6802.017476	238.6987013
6808.020597	196.3995456
6814.006357	237.3471346
6820.115638	207.8159489
6826.002939	231.1201328
6832.254243	222.8089591
6838.169602	274.8066972
6844.414284	236.3951111
6850.323001	238.4573208
6856.619564	246.1913716
6862.324500	205.2952919
6868.803697	300.3430039
6874.997726	201.6391989
6881.059867	247.9014889
6887.175067	245.9248589
6893.349022	346.0071293
6899.549673	258.9104889
6905.670221	303.3754591
6911.997110	309.3871118
6918.048642	214.2721919
6924.428404	346.4825711

図 8 XLS ファイル

(2) 画面下の「corrected\_data」シートを選択する。「corrected\_data」シートでは、図 9 のように全ての素子を足し合わせた XAFS スペクトル(左側)と各素子の XAFS スペクトル(右側)が表示される。

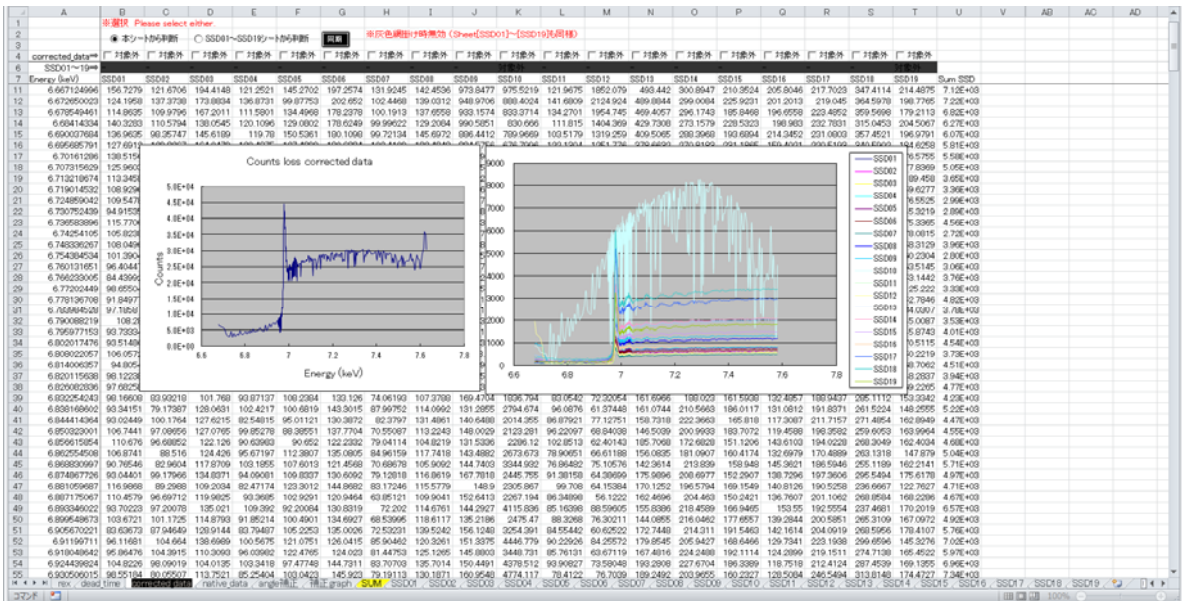


図 9 「corrected\_data」シート画面



(3) 「corrected\_data」シートから各素子のスペクトルの足し合わせを判断する場合、画面上の「本シートから判断」にチェックを入れ、足し合わせに含めない素子番号の「対象外」にチェックを入れる。

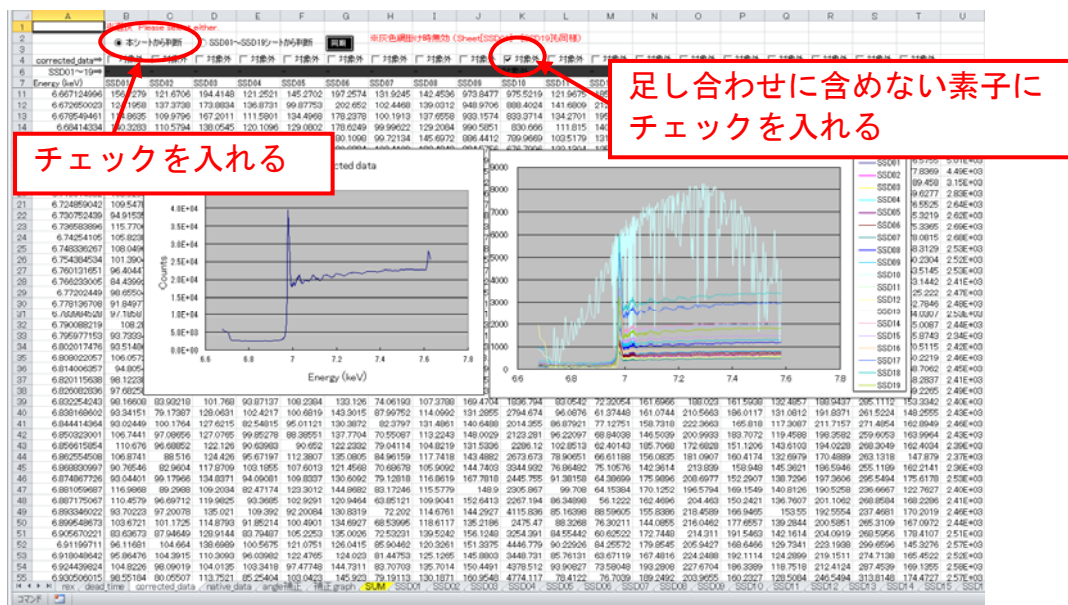


図 10 「corrected\_data」シートからデータを選択する場合

(4) 「SSD01(～19)」シートから各素子のスペクトルの足し合わせを判断する場合、画面上の「SSD01～SSD19シートから判断」にチェックを入れ(図 11(a))、足し合わせに含めない素子の「SSD01(～19)」シート中の「対象外」にチェックを入れる(図 11(b))。

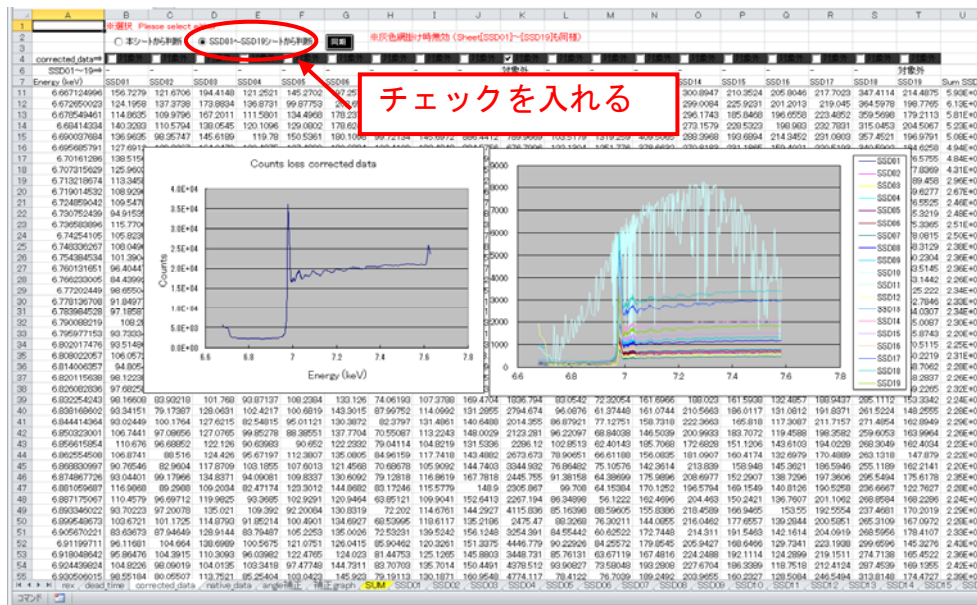


図 11 各 SSD シートからデータを選択する場合

(a) 「corrected\_data」シート画面



(b) 「SSD\*\*( \*\*: 素子番号(1~19))」シート画面

- (5) 足し合わせのチェックが終わったら、XLS ファイルを保存し、Excel を終了する。

## II. Angle 選択の fitted encoder 処理について

本ビームラインでは、高エネルギー領域で測定した XAFS スペクトルの高エネルギー側に EXAFS 振動とは異なる短周期の振動成分が重複することがある。一例として、Pd-K 端、Si(111)面で測定した  $\text{Pd}(\text{NH}_3)_4\text{Cl}_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$  の規格化 EXAFS を図 12 に示す。波数が大きくなるにつれて、短周期の振動成分が顕著となる。この短周期の振動成分は試料に起因するものではなく、結晶分光器のエンコーダに起因するものである。

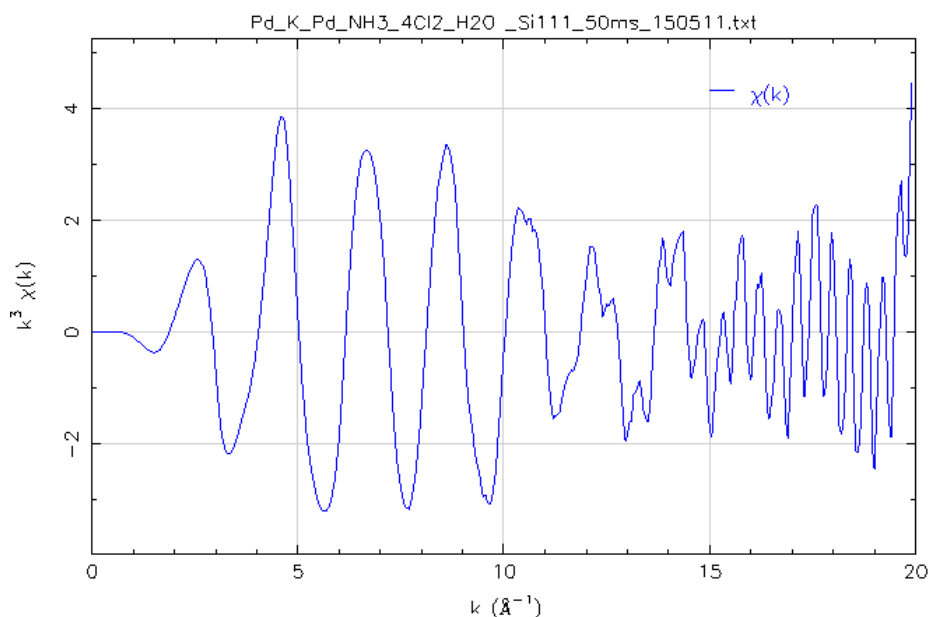


図 12  $\text{Pd}(\text{NH}_3)_4\text{Cl}_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$  の規格化 EXAFS(Pd-K、Si(111)面)  
(XAFS\_DataConverter にてデータ変換する際の Angle 選択は Angle(o)を指定)

図 12 の XAFS スペクトルを測定した際の結晶分光器の角度(PC 及びエンコーダ値)を図 13 に示す。PC の角度に対し、エンコーダ値に周期的なずれが生じていることが分かる。規格化 EXAFS の低波数側では試料由来の振動成分の方が大きいため、この周期的なずれの影響は無視できる。しかしながら、振動成分の振幅が小さくなる高波数側では影響が無視できなくなり、図 12 のような短周期的な振動成分が現れるようになる。このエンコーダ値の周期的なずれは本ビームライン固有の問題ではなく、他のビームラインでも見られる症状である。(BL19B2、BL46XU では確認済み。但し、周期的なずれの程度、ずれが生じるエネルギー領域はビームラインによって異なる。多くの場合、EXAFS 振動成分に比べて周期が大きく異なるため、測定データには影響がない。)

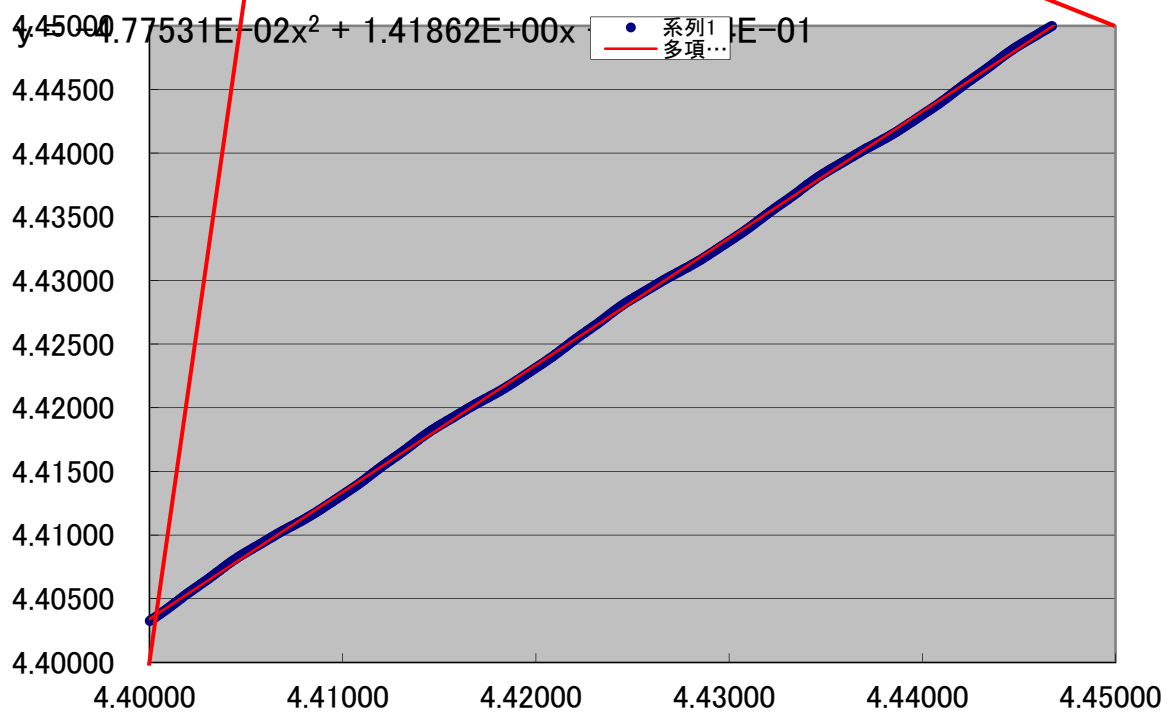
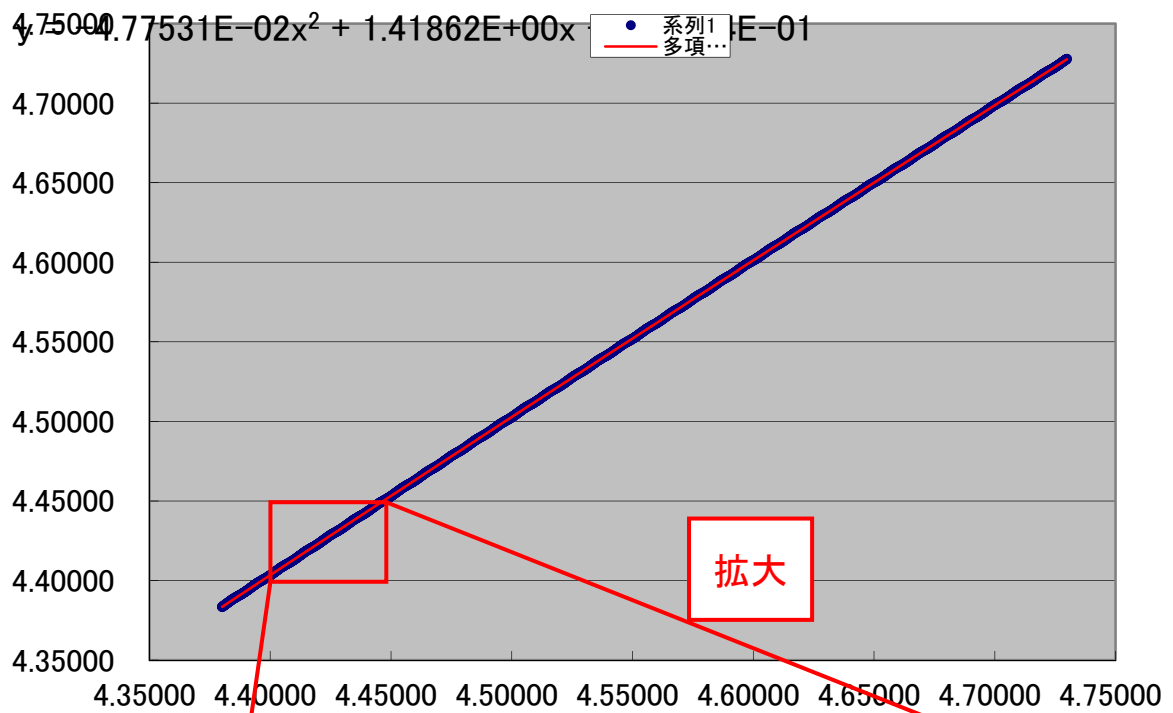


図 13 分光結晶の角度

(XAFS\_DataConverter の「Excel ファイル(角度補正確認用)を出力する」で作成したファイルより)

XAFS データ変換プログラムでは、この周期的なずれを多項式近似(図 13 中の赤線)で補正処理(fitted encoder 処理)を行っている。図 14 に fitted encoder 処理の有無による規格化 EXAFS スペクトル形状の比較を示す。fitted encoder 処理により、高波数側の短周期的な振動成分が現れなくなっていることが分かる。

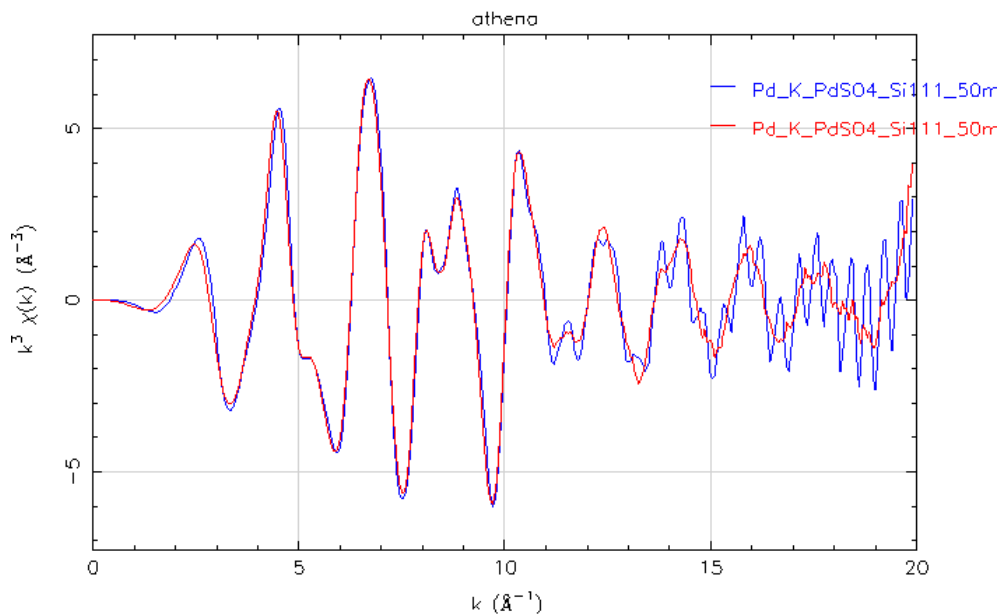


図 14 Pd(NH<sub>3</sub>)<sub>4</sub>Cl<sub>2</sub> · H<sub>2</sub>O の規格化 EXAFS(Pd-K 端、Si(111)面)  
(青線 : fitted encoder 処理なし、赤線 : fitted encoder 処理あり)

fitted encoder 処理を行うと、XANES スペクトルは図 15 に示されるように元データから変調が生じる。このため、XANES スペクトルの議論を行う場合は、fitted encoder 処理を行ったデータとそうでないデータが混在しないよう注意が必要である。

また、高エネルギー領域での全ての EXAFS スペクトルの高波数側にエンコーダ由来の振動成分が現れる訳ではない。図 16 に Si(311)面で測定した Pd(NH<sub>3</sub>)<sub>4</sub>Cl<sub>2</sub> · H<sub>2</sub>O の規格化 EXAFS を示す。Si(111)面で測定した場合とは異なり、高波数側に短周期の振動成分は観測されず、fitted encoder 処理を行ってもスペクトル形状はほぼ変化しない。このことから、fitted encoder 処理を行わない場合(Angle(o))と行った場合(Angle(fitted encoder))のスペクトルと比較することで、高波数側に短周期振動がエンコーダ由来かどうかを判別することが可能である。

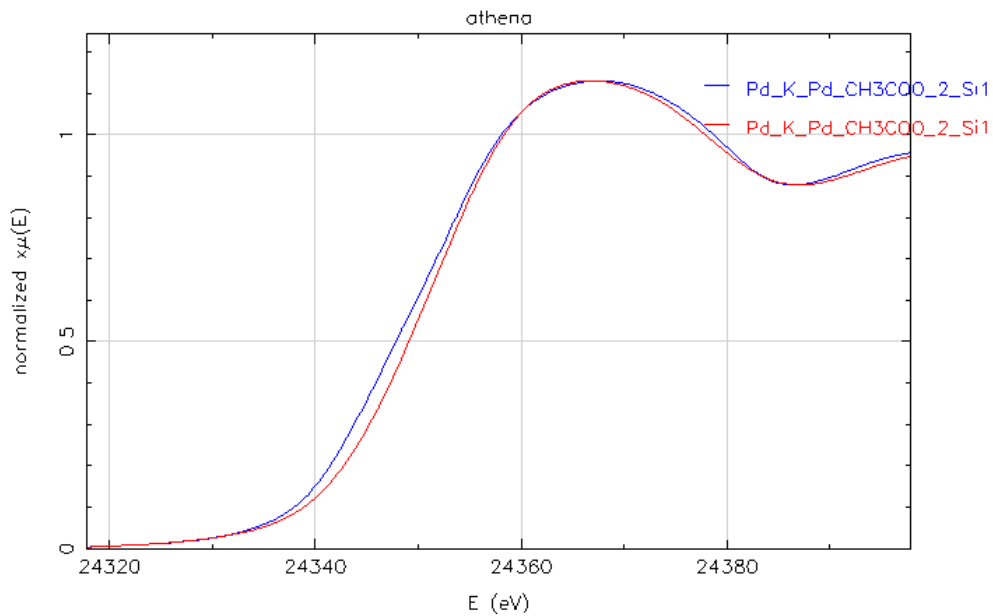


図 15 Pd(NH<sub>3</sub>)<sub>4</sub>Cl<sub>2</sub> · H<sub>2</sub>O の XANES スペクトル(Pd-K 端、Si(111)面)  
 (青線 : fitted encoder 処理なし、赤線 : fitted encoder 処理あり)

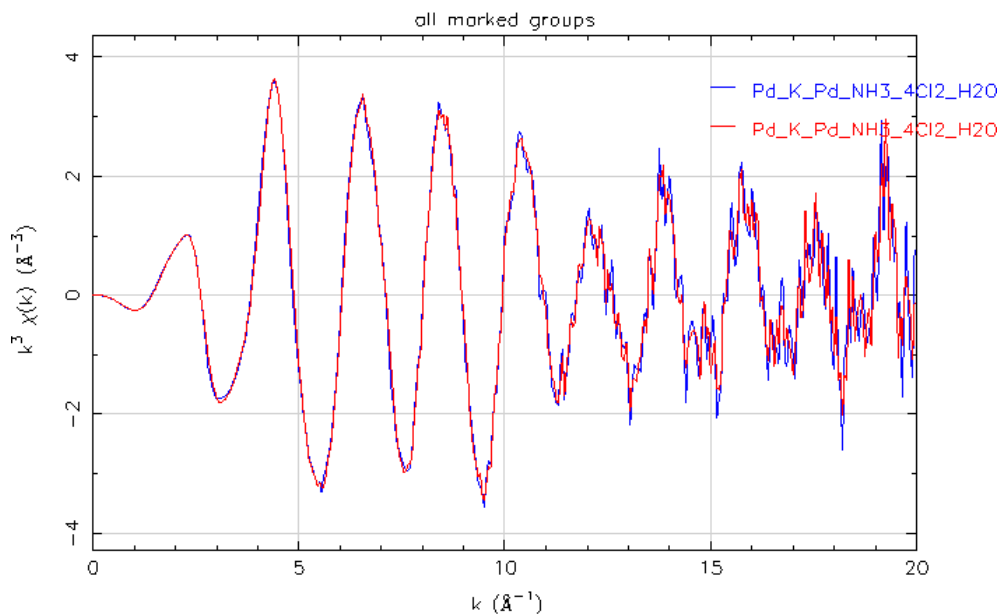


図 16 Pd(NH<sub>3</sub>)<sub>4</sub>Cl<sub>2</sub> · H<sub>2</sub>O の規格化 EXAFS(Pd-K 端、Si(311)面)  
 (青線 : fitted encoder 処理なし、赤線 : fitted encoder 処理あり)

### III. REX2000 及び Athena 形式の入射 X 線エネルギー値について

本プログラムを用いて REX2000 及び Athena 形式ファイルの入射 X 線エネルギー値 E は下記の式で変換される。

$$E=12398/2d\sin\theta$$

E : 入射 X 線エネルギー値[eV]

d : モノクロ結晶面間隔[Å]

$\theta$  : モノクロ角度[deg]

測定データを直接 REX2000 で読み込む場合同じ式でモノクロ角度から入射 X 線エネルギーに変換される。これに対し、Athena でプラグイン(※)を用いて読み込んだ場合は  $E=12398.42/2d\sin\theta$  で変換され、本プログラムで変換したエネルギー値とは僅かに異なるので注意が必要である(図 17、18)。

(※) Athena データ読み込みプラグイン

(<http://pfxafs.kek.jp/blog/2012/12/31/athena> データ読み込みプラグイン)

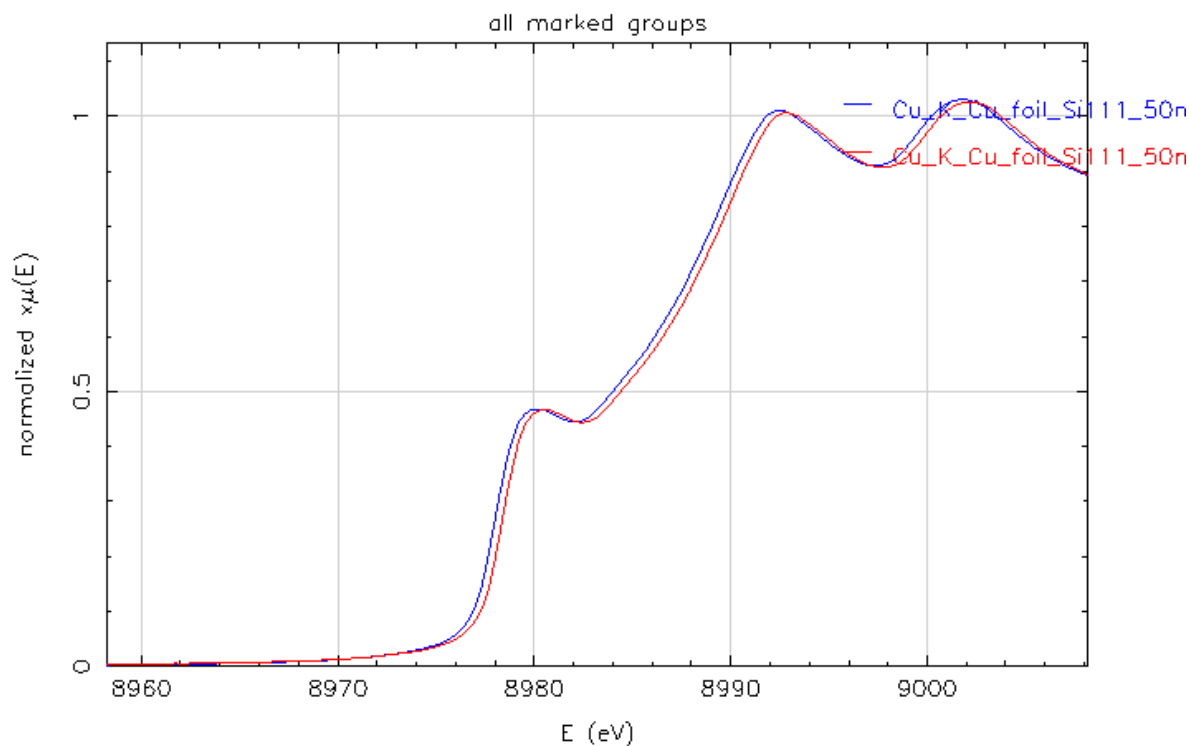


図 17 XAFS 解析プログラム Athena で表示した Cu 箔の XANES スペクトル  
(青線 : 本プログラムを用いて変換したデータ(拡張子 : txt)を読み込んだ場合、  
赤線 : 測定データ(拡張子 : dat)をプラグインで読み込んだ場合)

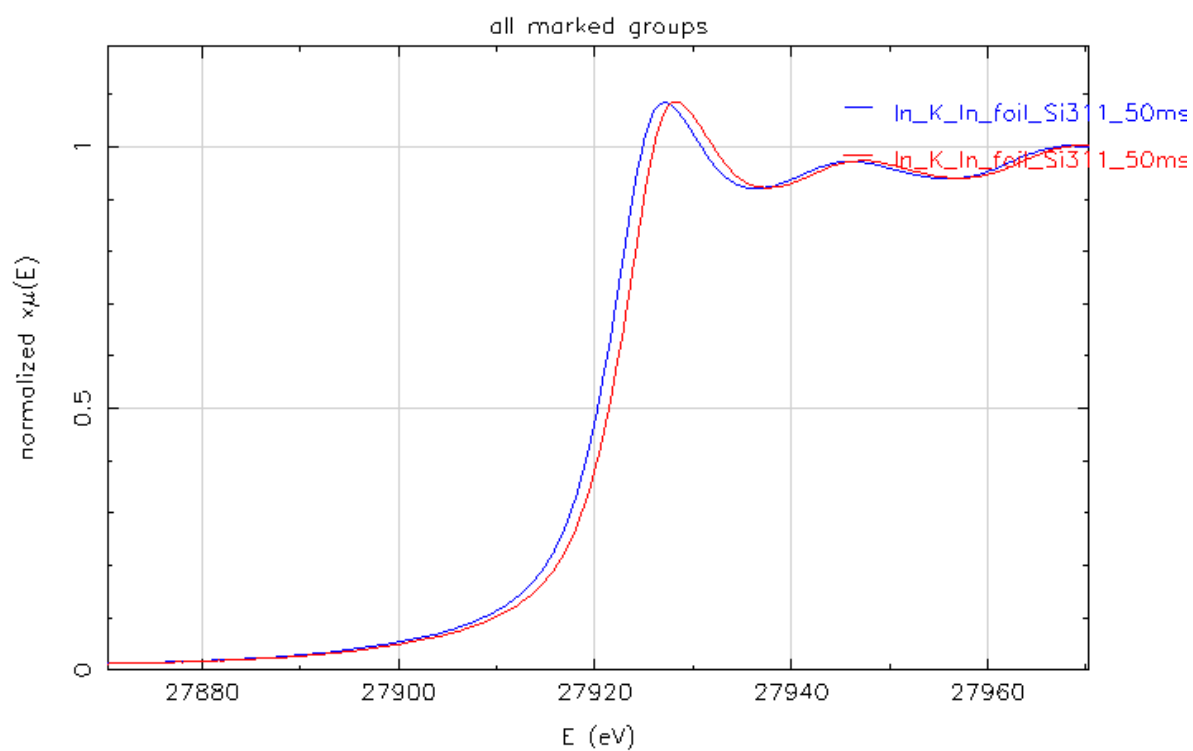


図 18 XAFS 解析プログラム Athena で表示した In 箔の XANES スペクトル  
 (青線：本プログラムを用いて変換したデータ(拡張子：txt)を読み込んだ場合、  
 赤線：測定データ(拡張子：dat)をプラグインで読み込んだ場合)



## 改訂履歴

改訂年月日	改訂者
2016.4.27	大淵 博宣
2017.11.30	大淵 博宣