

反射率解析ソフトAXRef利用法講習会

- Introduction: 光とX線と中性子
- 測定データの連結: Djoin
- データ解析実習用データ: Examples
- フーリエ法による膜厚: AXRef
- 散乱長と散乱長密度: Make_materi_file
- 多層モデルフィット: AXRef
- いろいろな解析法: AXRef



ソフトのダウンロード

<https://sunbeam.spring8.or.jp/>

ZIPファイル



AXRef講習
会2017.zip

解凍



AXRef講習
会2017

contents



0_Basics



1_Djoin



2_Examples_2017



3_Make_Materi_File



4_AXRef



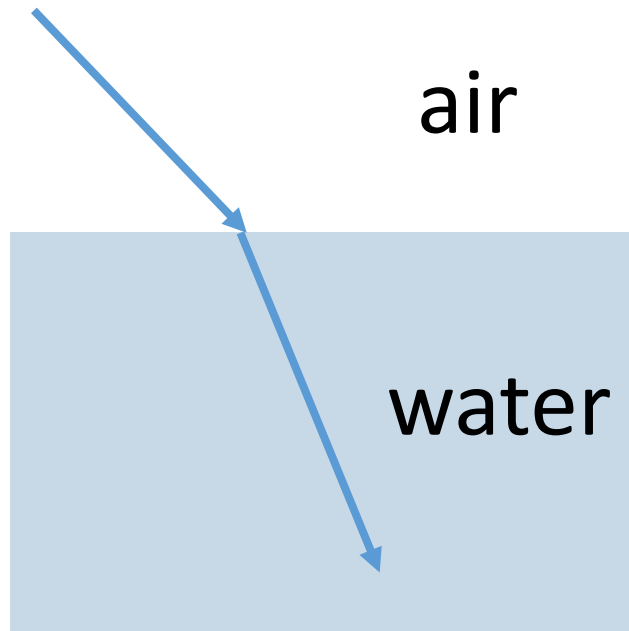
反射率解析ソフトAXRef利用法講習会.pdf

使い方:

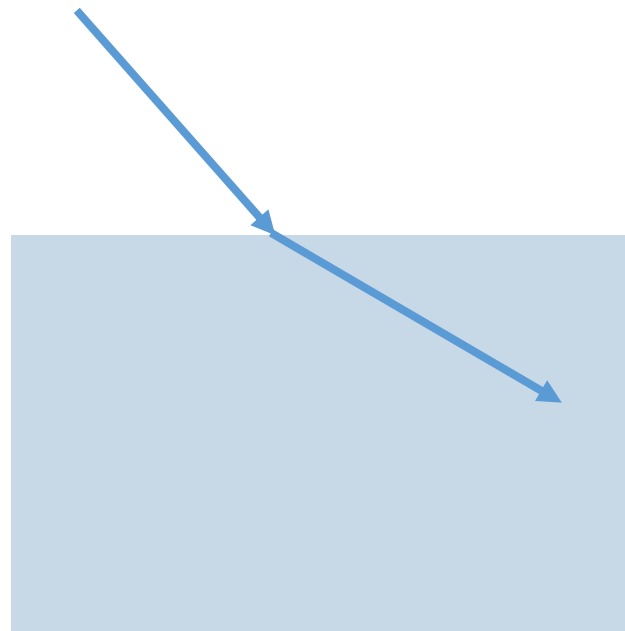
マニュアルが、各フォルダにあります。

● 光とX線と中性子

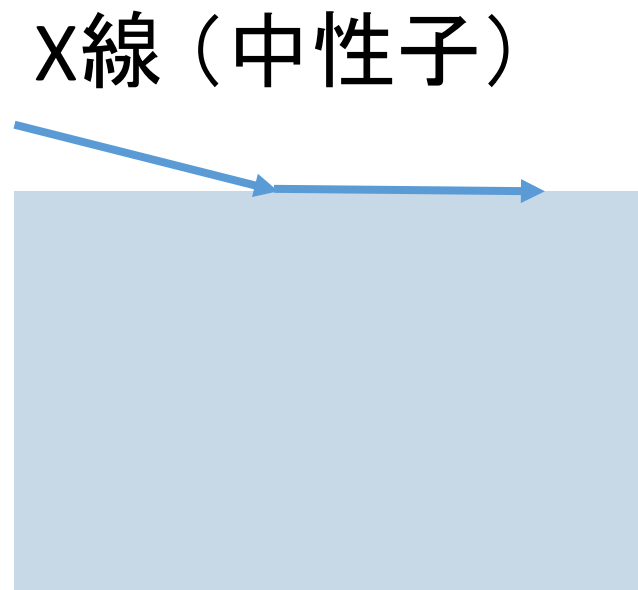
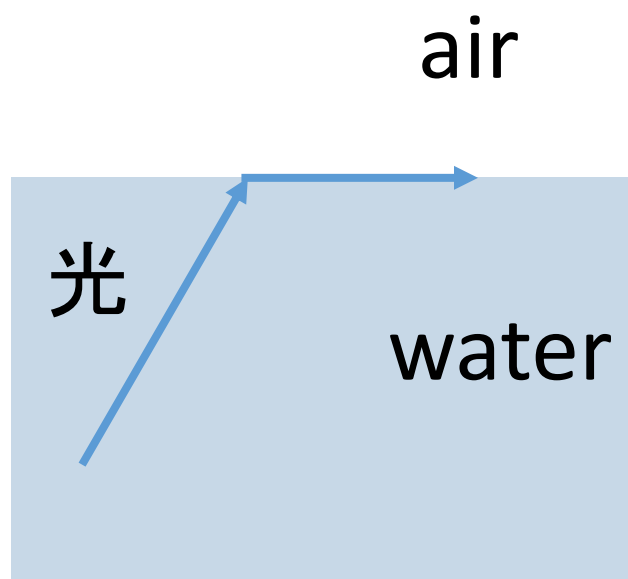
光

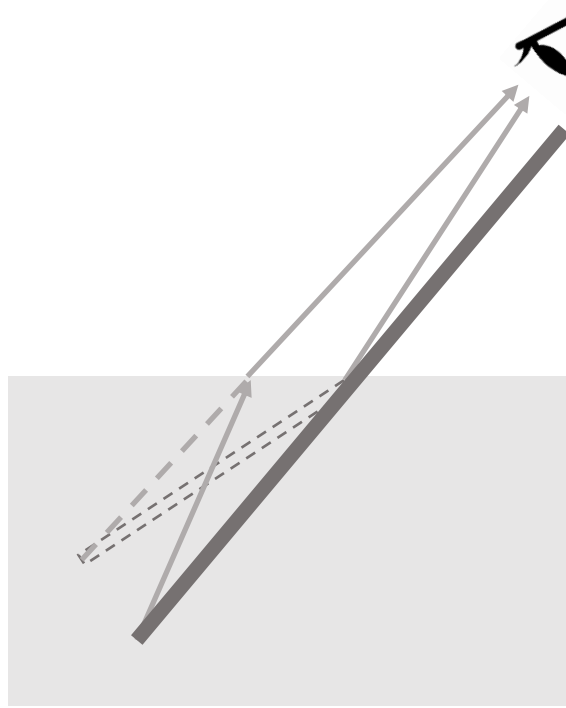


X線（中性子）

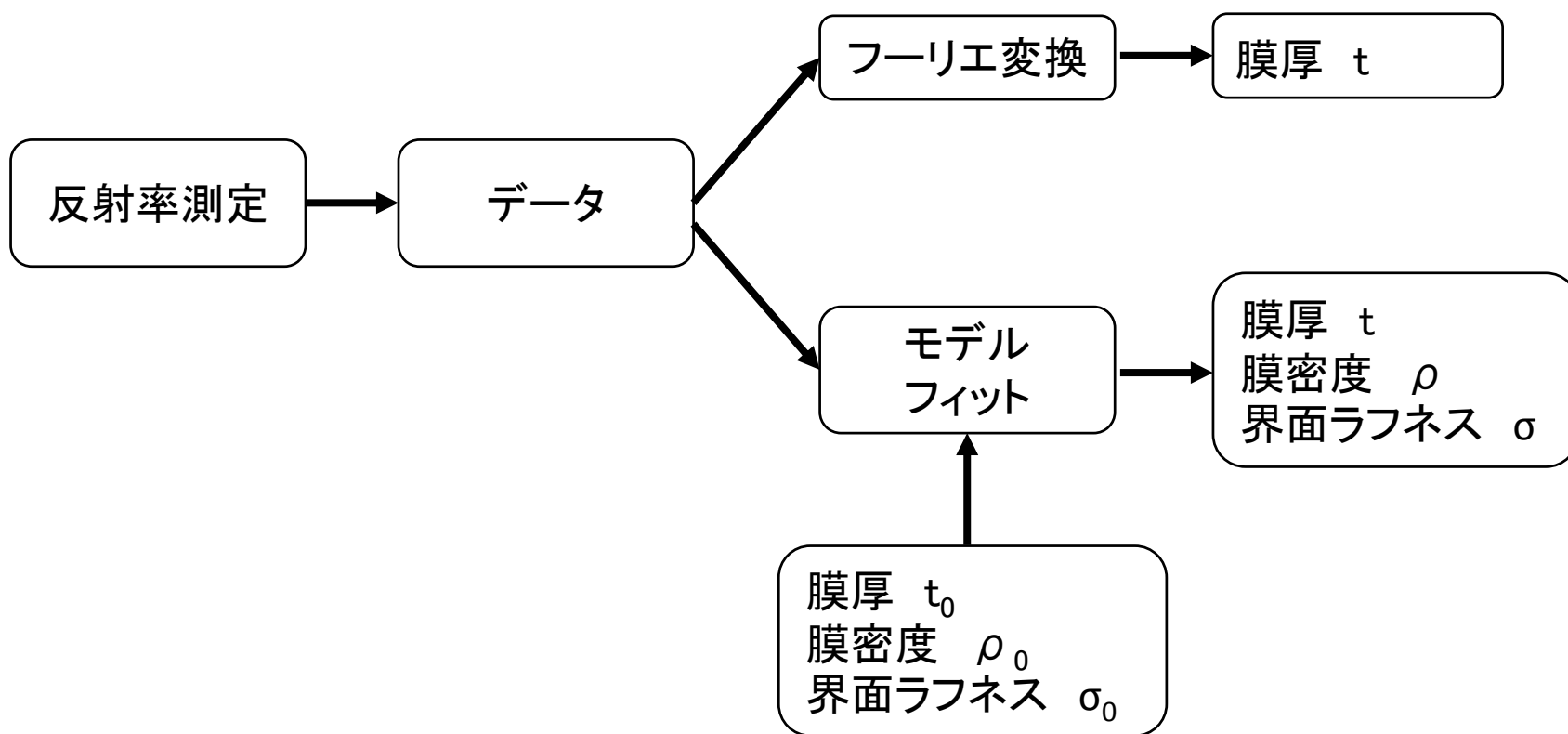


全反射





代表的なX線反射率法の流れ



●測定データの連結

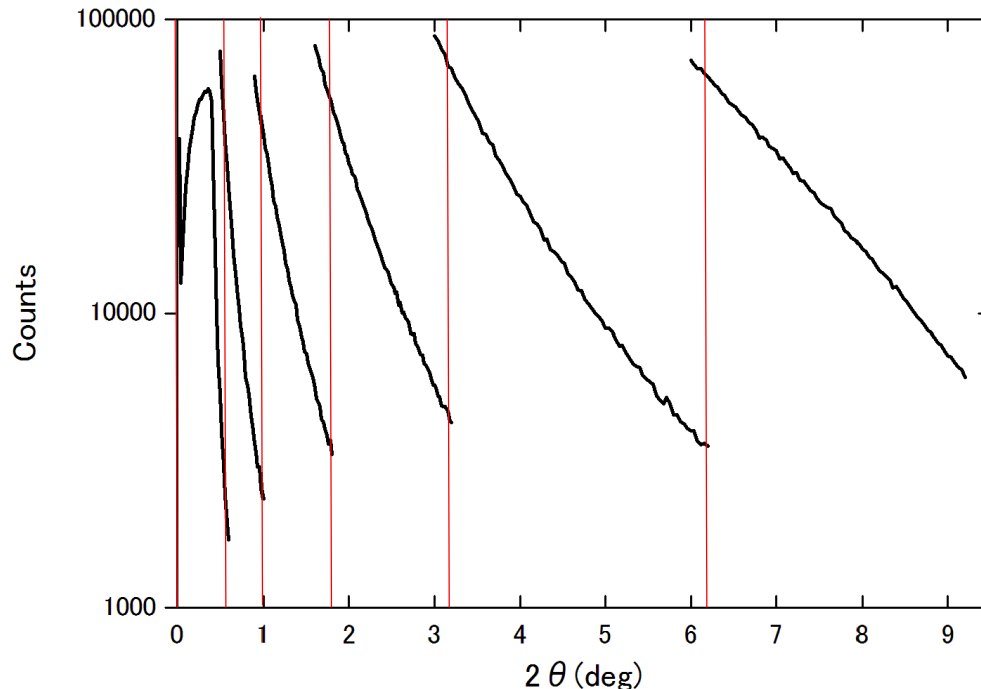
(1) アッテネータ減衰率換算法

既知のアッテネータ減衰率でデータ校正

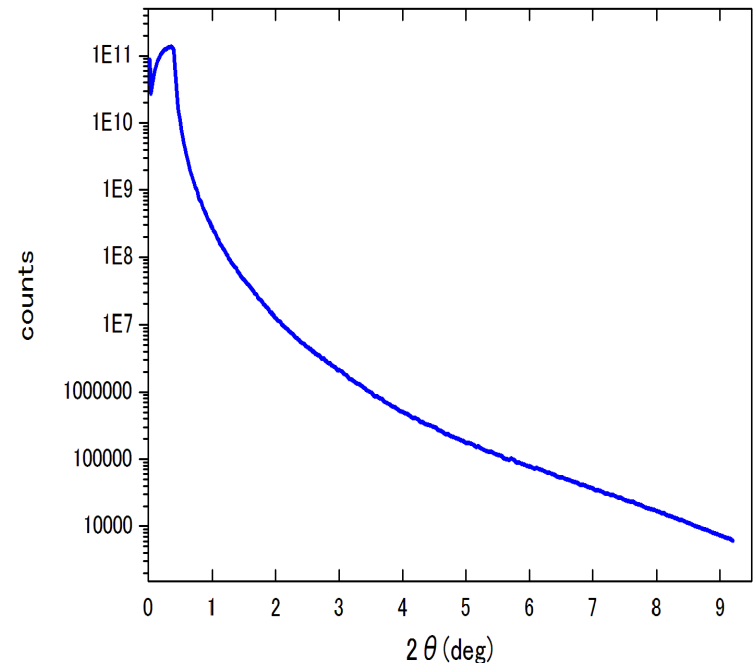
(2) データオーバーラップ法

オーバーラップ領域の強度が一致するように連結

分割測定(アッテネータ利用)



連結結果



分割条件: (最大) 数え落としが少ない角度 (最小) 統計的ばらつきが少ないカウント数

検出器前スリットは、
入射スリットより広めにする。
(本物を切らないように。
切ると補正は困難。)

試料チャッキング(静電、
真空)は、強すぎると試料が
たわむので弱めが良い。

●データ解析実習用データ: 20 Examples

***.dat : 反射率データ

***.mf : 各層のマテリアルファイル

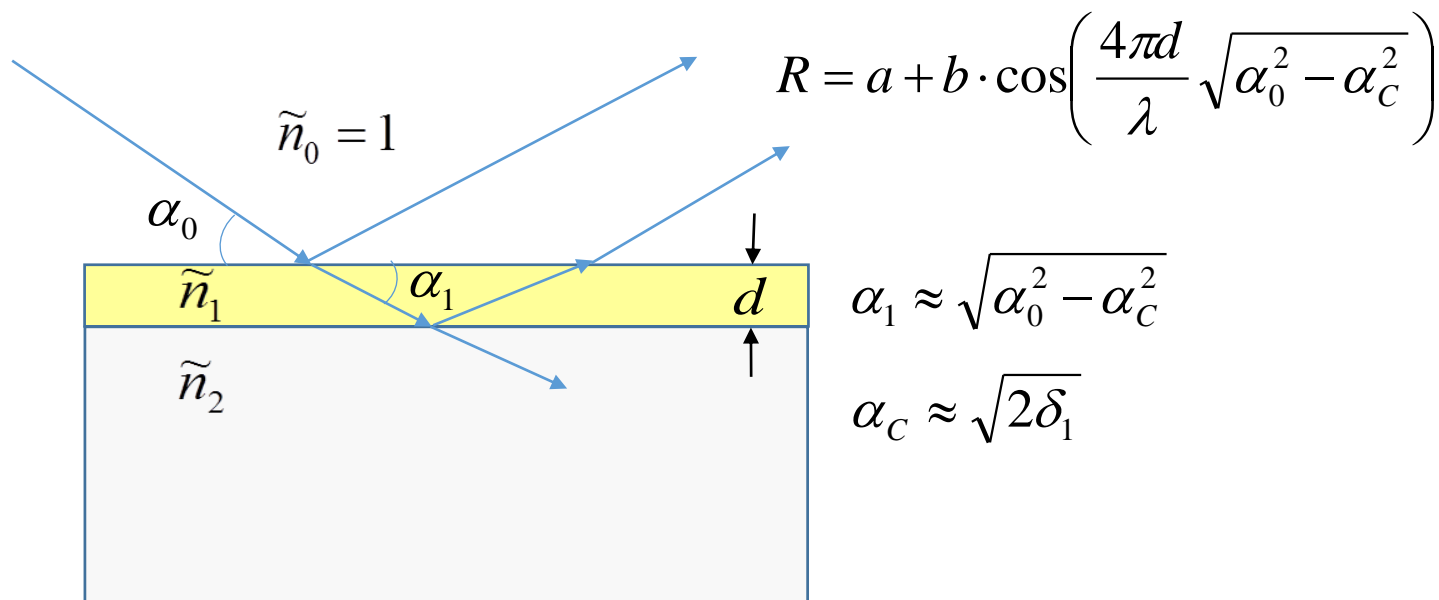
***.par : モデルフィット開始パラメータ

***.ans : モデルフィット正解パラメータ

parファイル: 開始パラメータ

ansファイル: 正解が得られるか? の実習

●フーリエ法による膜厚



R を $\sqrt{\alpha_0^2 - \alpha_c^2}$ でフーリエ変換すると膜厚 d が得られる。

フーリエ変換には窓関数を利用することが多い

(注意) 多層膜では、膜厚の組み合わせの位置にもピークが出る。

●散乱長と散乱長密度

散乱長(scattering length: SL)は物質固有の値を持つ（フィットパラメータではない）

質量密度(Mass density: ρ)
は材料の作製方法により変わる
(フィットパラメータ)

散乱長密度(scattering length density: SLD)
＝散乱長 × 質量密度

散乱長と質量密度を明確に区別しておく
マルチコントラスト法などに簡単に対応可能

●モデルフィット

非線形フィットライブラリ: Levenberg-Marquardt法など

●最小点に近い(正しい)初期値を選ぶ

●正しいパラメータ範囲に制限 MPFITなど

$$\rho > 0, t > 0$$



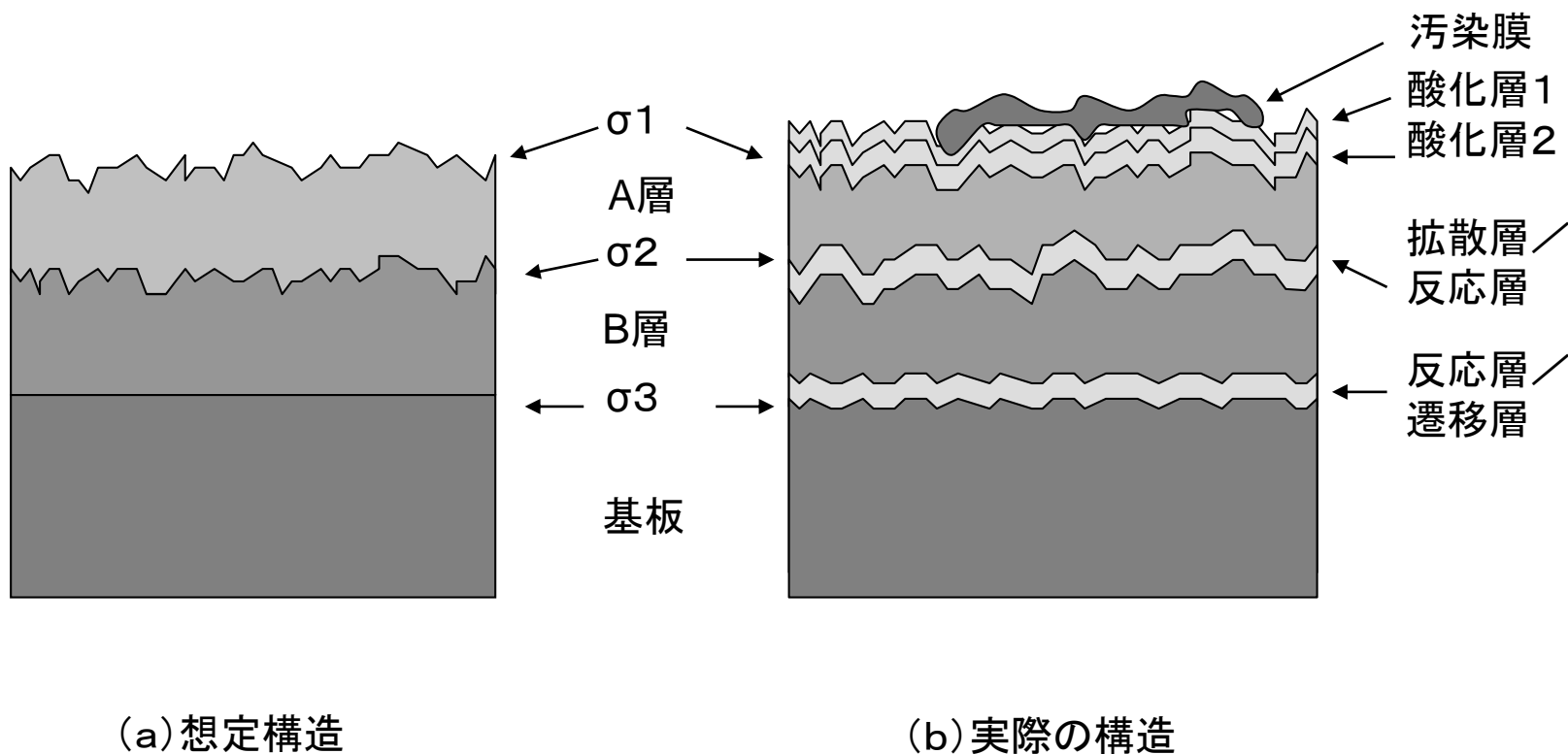
<https://www.physics.wisc.edu/~craigm/idl/cmpfit.html>

●アルゴリズムを工夫

遺伝的アルゴリズム(Genetic algorithm)など

データとフィットとの一致が悪い場合

●表面層、界面層の追加など、モデル構造を変えてみる。



想定した試料構造と実際の構造