

AXRef_2017 説明書

淡路

はじめに

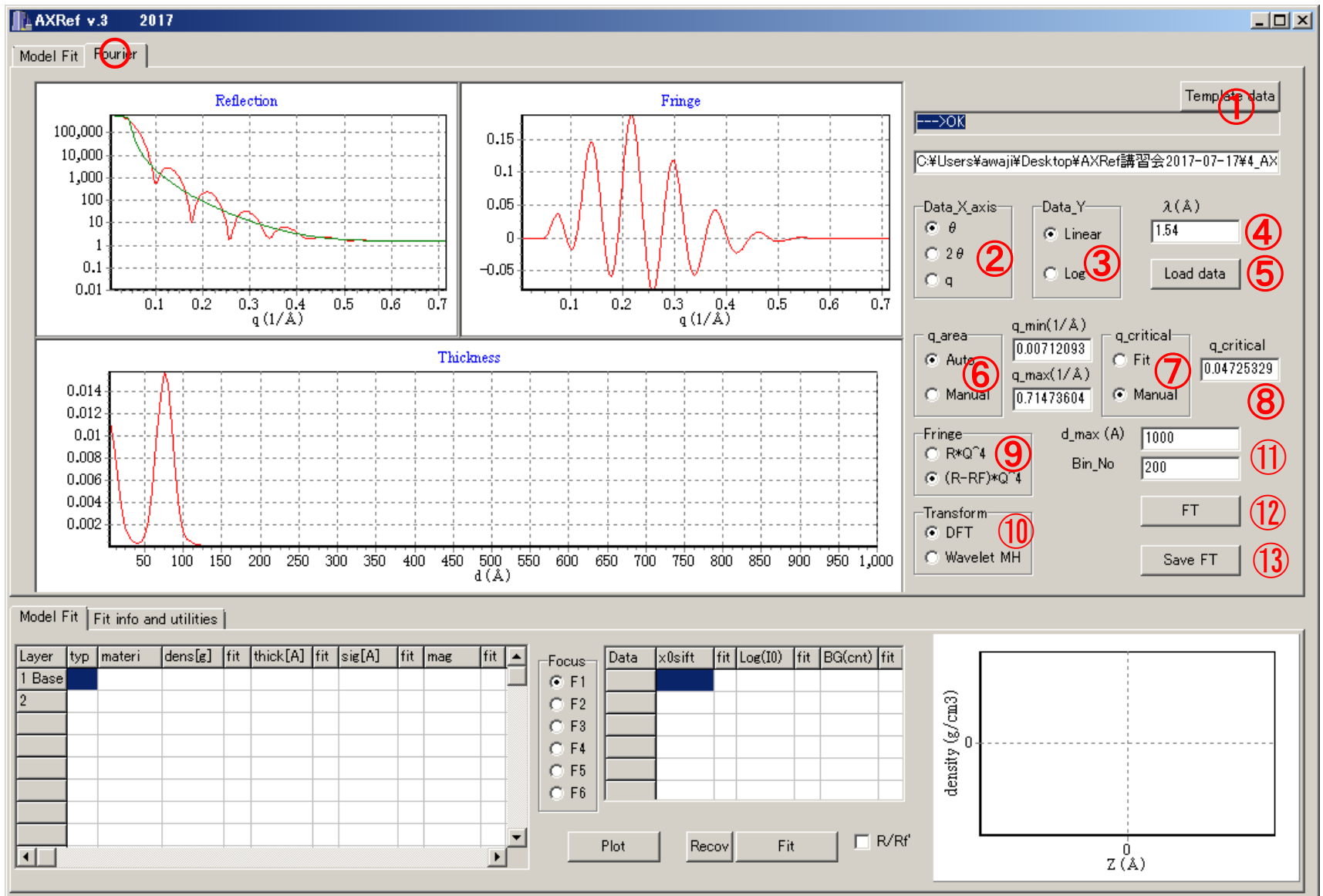
本ソフトは、X線・中性子反射率データの解析を行うためにWindows PC用に準備した、反射率計算・フィッティングソフトです。

ソフトウェア・インストール

¥4_AXRef_v2フォルダをWindows PCにコピーします。

フォルダ内のAXRef_2017.exeをクリックして実行しますが、フォルダ内の¥templateには、実行メニューの一つである「テンプレート」が入っているので、¥templateフォルダの中身は変えないようにします。

フーリエ解析タブ



フーリエ解析説明

○印の「Fourier」タブを選択します。

①「template」を押すと、データの例がロードされます。この例は、フォルダ内の¥ templateフォルダに保存されているtemplate.datです。この後、⑫ボタンで変換を実行できます。

通常のデータ解析では、解析対象のデータファイルをロードします。まず、②と③でデータのx軸とy軸の種類を選択します。④は波長を入力します。最後に⑤「Load data」で、読み込むデータファイルを指定し、読み込みます。

⑥でフーリエ変換するq範囲を指定します。初期値は「Auto」であり、データ読み込み時に最小値と最大値が表示されます。q範囲を限定したい場合は、「Manual」を選びqの範囲を入力します。

⑦では、データ読み込み時に、全反射臨界角 q_c を反射強度の半値から自動で計算します。もし、値を指定したい場合は、⑦「Manual」を選び、数値を⑧に入力します。

⑨ではフリンジ抽出のウェイトを q^4 とするか、フレネル反射率を引いた後、 q^4 を掛けます。

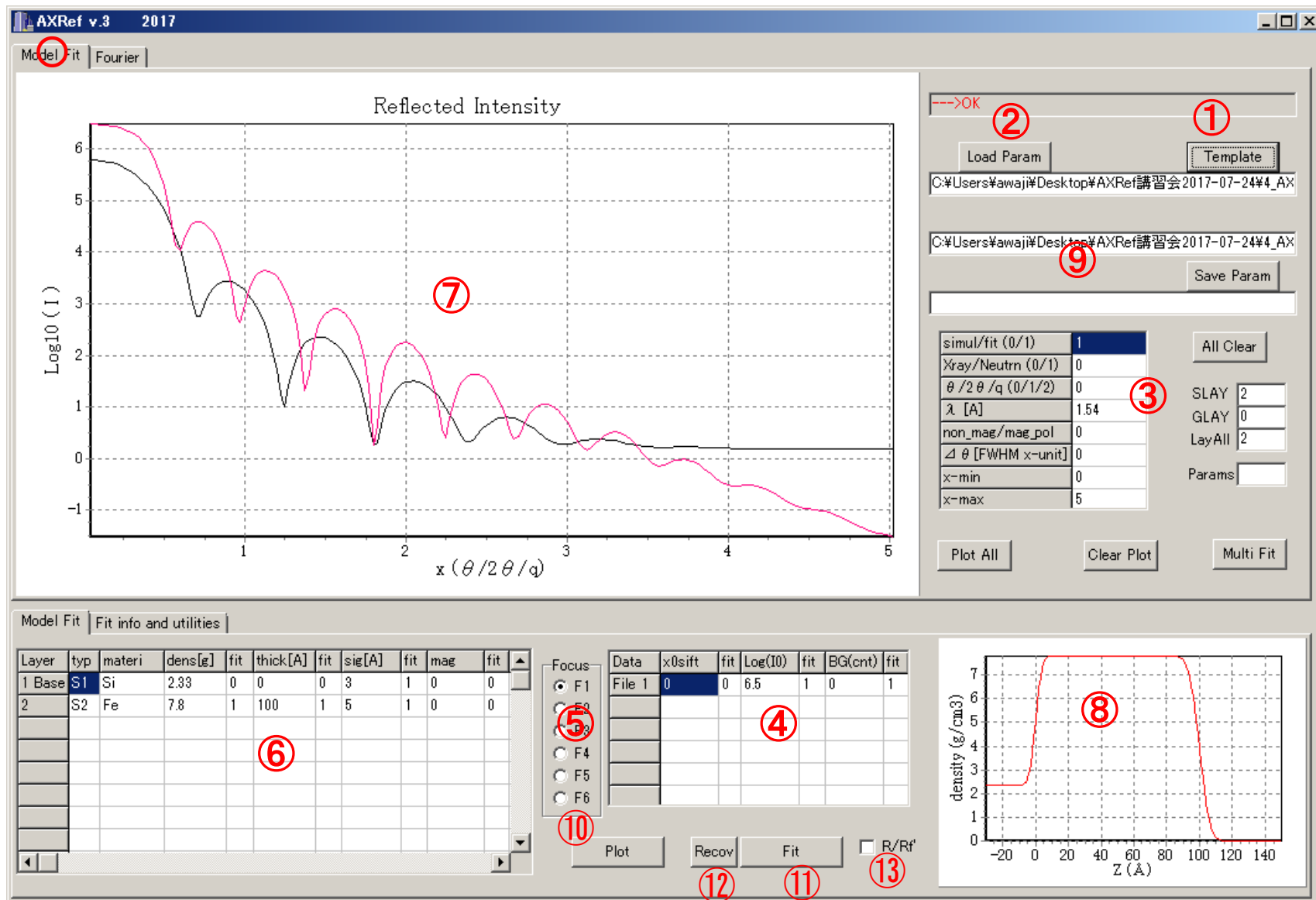
⑩では変換方式をDFT(離散フーリエ変換)かwavelet変換(5レベル)かを選びます。

⑪では膜厚変換後の膜厚の最大値と分割数を指定します。

⑫は変換ボタンです。

⑬では変換結果を、読み込まれたデータのフォルダに(データ名).FTの名前で保存します。

モデルフィット タブ



モデルフィット 説明

○印のタブで選びます。フィットは反射データ2000点まで、最大6データ、膜構造200層までの解析に対応しています。多データ同時解析では10000点までのデータに対応しています。

①「template」を押すと、データの例がロードされます。この例では、¥templateフォルダ内のパラメータファイルtemplate.parがロードされます。データは黒線、計算値は赤線でプロットされます。ここで解析を行うには、パラメータファイル(.par)、データファイル(.dat)、マテリアルファイル(.mf)が同じフォルダ内に保存されている必要があります。「Fit」⑪を押すとフィットが実行されます。

②通常の解析では、「Load Param」から、解析対象のパラメータファイルを呼び出します。このパラメータファイルは後述の説明などを参考にして、通常のエディタで作成することができます。このソフトでは、6個までのパラメータファイルが順次ロードでき、独立に、あるいは同時に解析することができます。6個になったら、「All clear」で全てをクリアする(消す)ことができます。

「Load Param」を押してパラメータファイルを指定するとファイルが読み込まれ、③-⑥のテーブルに表示されます。ここで③のプロパティテーブル部は、変更することはできません。もし変更したい場合は、元のパラメータファイルを変更し、再ロードします。

パラメータファイルの説明

パラメータファイルの拡張子は'.par'で、自由書式の英数半角(1バイト文字)フォントのアスキーファイルなので、「メモ帳」などで作成してください。('.par', '.mf', '.dat')ファイルのプロパティにおいて、開くプログラムに「メモ帳」を選んでおくと便利です。ここで、分離文字は「空白」ですので、タブは利用しないようにしてください。また、各行でセミコロン';'以降はコメントとして無視されます。

例1 シングルレイヤーによるモデル例

```
1      ; [CONTROL]—— (0/1=sim/fit)
0      ; (0/1=Lin/Log)
0      ; (0/1=Xray/Neutron)
0      ; (0/1/2=th, 2th, q)
0      ; (0/1=non_mag/mag)
1.540000      ; lamd(A)
0.00      ; beam divergence (FWHM)
0.000000      5.000000      ; x min xmax
template.dat      ; data file name
0.000000e+00      0      0.000000e+00      ; x0_shift, fit flag, fit error
6.500000e+00      1      0.000000e+00      ; Log(I0)
0.      1      0.000000e+00      ; BG(cps)
S1 Si.mf      ; layer, materi_name (Substrate)
2.330000e+00      0      0.000000e+00      ; rho(g/cm3), fit flag, fit error
0.000000e+00      0      0.000000e+00      ; t(A)
3.000000e+00      1      0.000000e+00      ; sig(A)
0.000000e+00      0      0.000000e+00      ; mag
S2 Fe.mf      ; layer, materi_name
7.800000e+00      1      0.000000e+00      ; rho(g/cm3)
1.000000e+02      1      0.000000e+00      ; t(A)
5.000000e+00      1      0.000000e+00      ; sig(A)
2.200000e+00      0      0.000000e+00      ; mag
```

プロパティテーブル部

- (0/1=sim/fit): シミュレーションかデータフィットか指定。
シミュレーションの場合、データ名は利用されませんので、ダミーのファイル名を指定します。
- (0/1=Lin/Log): データファイルが計数値か、そのLog値かを指定。
- (0/1=Xray/Neutron): X線のデータか、中性子のデータかを指定。
- (0/1/2=th, 2th, q): データのx軸が θ か 2θ か q かを指定。
- (0/1=non_mag/mag): 非磁性/磁性膜
- lamd(A): 波長を指定。
- beam divergence (FWHM): 入射ビームの発散角を半値幅(FWHM)で与える。単位はデータの横軸の単位となる。放射光など、発散角が小さい場合は、0が良い。
- x_minx_max: データの利用範囲を指定。シミュレーションではこの範囲で計算する。

データ部

- data file name: データファイル名。データはパラメータファイルと同じフォルダに保存する。
- x0_shift, fit flag, fit error: x軸原点のずれ, 固定/フィット(0/1), フィット誤差(出力)
(x0_shiftは装置の調整パラメータなので、通常はフィットしない。)
- rho(g/cm3), fit flag, fit error(出力)
- Log(I0): 反射強度のLOG初期値, fit flag, fit error(出力)
- BG(cps): バックグラウンド(cps) , fit flag, fit error(出力)

レイヤー部(×膜数)

●layer type, material_file(, multiple, sigjoin)

ここで、通常の層はS_nと書く。「S」はsingle layerの意味であり、nは1からの連続番号。

周期積層構造の場合はG_nと書く。「G」group layerの意味であり、nはグループ番号。グループ番号が同じ層までが同グループと認識される。また、この場合、周期の繰り返し数multiple、および、ラフネスの伝播フラグsigjoin(0/1)を指定します。

●rho(g/cm³): 密度、fit flag: 固定/フィット(0/1)、fit error: フィット誤差(出力)

●t(A): 膜厚、fit flag: 固定/フィット(0/1)、fit error: フィット誤差(出力)

●sig(A): ラフネス、fit flag: 固定/フィット(0/1)、fit error: フィット誤差(出力)

●mag: net spin amplitude(磁性電子数)。偏極中性子による磁性膜以外は0で良い。

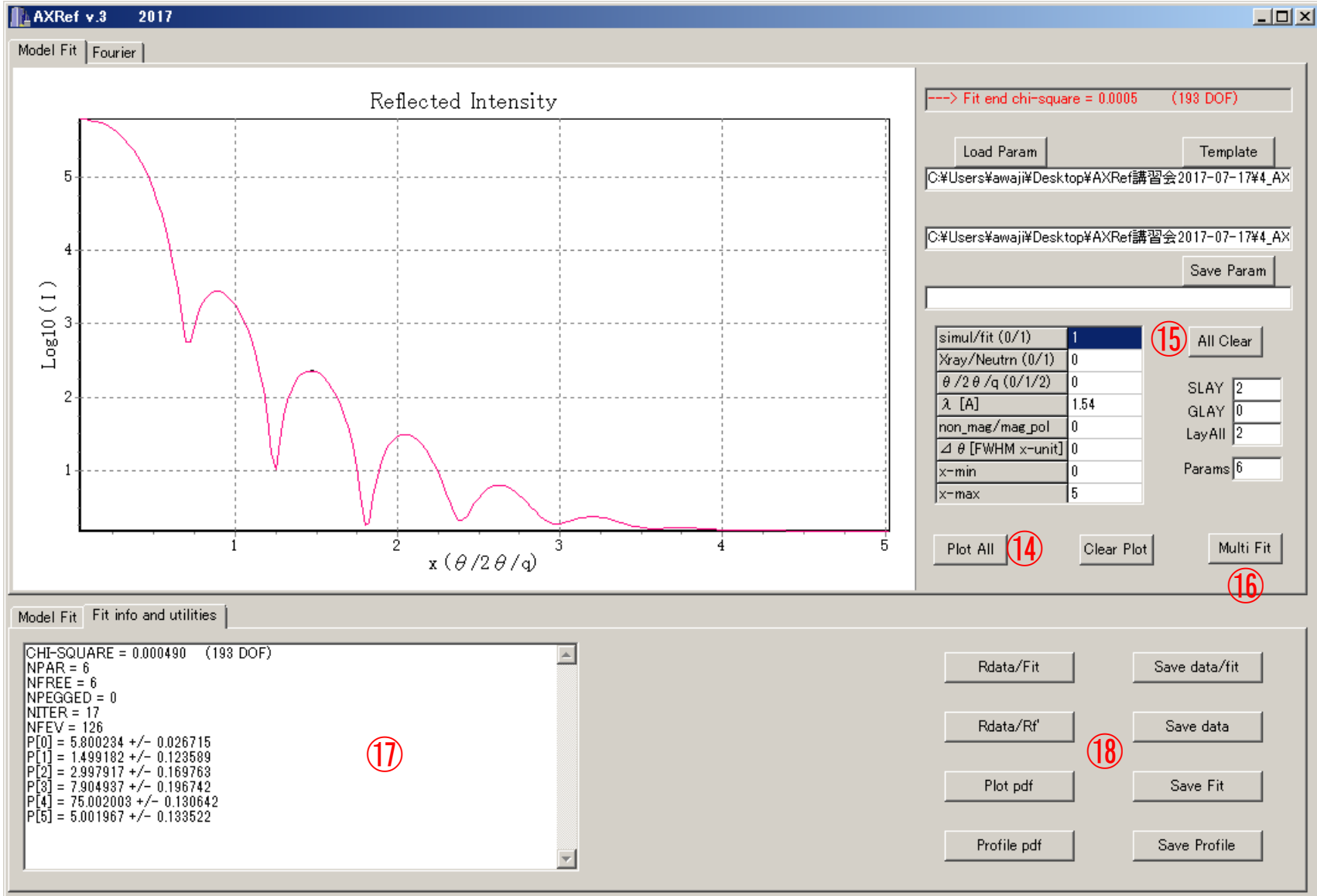
なお、**パラメータを拘束**したい場合は、fit flagとして、拘束する(同じ値にする)層の番号にマイナスをつけた値を指定する。拘束する層の番号は、指定する層より前に指定されている層である(層番号が小さい)必要がある。

パラメータテーブル部

- ④データパラメータには、各データのX0,I0,BGとフィットフラグが表示されます。テーブル値は、手動で変更することができます。
- ⑤はデータセット番号で、「Focus」を変える事により、対象を変更することができます。
- ⑥レイヤーテーブルには「Focus」で示されたデータのレイヤーパラメータが表示されます。右にスクロールすると散乱因子などの固定値情報も表示されています。固定値情報以外は、手動で変更することができます。(本ソフトでは、散乱長は固定値です。)
- ⑦プロット画面には、データと、レイヤーパラメータから計算された反射率が表示されます。
- ⑧プロファイル画面には、質量密度の深さプロファイルが表示されます。
- ⑨「save param」では、更新したパラメータをファイルとして保存することができます。なお、保存フォルダのデフォルトは、最後に開いたフォルダになっているので、注意してください
- ⑩「plot」ボタンでは、手動でモデルパラメータを変更した場合などに、再計算・表示ができます。

フィットの実行

- ⑪「fit」ボタンを押すと、fitフラグが1であるパラメータを変動させてデータをフィットします。
- ⑫「recov」ボタンを押すことで、ひとつ前のパラメータに戻すことができます。
- ⑬「R/Rf」にチェックを入れると**差分反射率**が表示されます。



その他

- ⑭「plot all」では登録されているすべてのデータが表示されます。
- ⑮「all clear」では登録されているすべてのデータが消されます。
- ⑯「multi fit」ボタンでは、同じモデル構造の複数データの同時フィットが行えます。(マルチコントラスト法)この利用は、モデル構造が同じである必要があります。設定されているすべてのデータを同時にフィットします。モデル構造は、最初のデータのパラメータファイルを用いてフィットされます。また、このフィットでは、「recov」ボタンでフィット前に戻すことはできません。
- ⑰「fit info」エリアにはフィット結果と関連情報が表示されます。
- ⑱「utilities」タブにはフィットデータの保存やプロットの印刷ユーティリティがあります。「Save data/fit」でのデータフォーマットは、R/Rf'がチェックされていない場合、x,y, yfit、されている場合、x,y, yfit, ysub, Δy , Δy_{fit} となります。