

AGDAS3 manual

on IgorPro

2006.6.2

AGNES 測定で得られた RAW データの読み込みと解析

RAW データから $S(Q, E)$, $G(Q, E)$ まで

- ・ AGDAS3 起動（動作環境、必要なファイル）
- ・ AGDAS3 解析手順その 1（各種データ読み込みと設定）
- ・ AGDAS3 解析手順その 2（QENS 解析）
- ・ AGDAS3 解析手順その 3（Elastic Scattering 解析）
- ・ その他の注意点

○解析の前に用意するもの

- ・ サンプル RAW データファイル(AGXXX.RAW)
- ・ Vanadium RAW データファイル(AGXXX.RAW)
- ・ ディテクタ情報ファイル(AGNES_DetMapXXXXX.txt)

ディテクタ情報ファイルについては、AGNES_DetMap manual を参照のこと

○AGDAS3 起動

動作環境

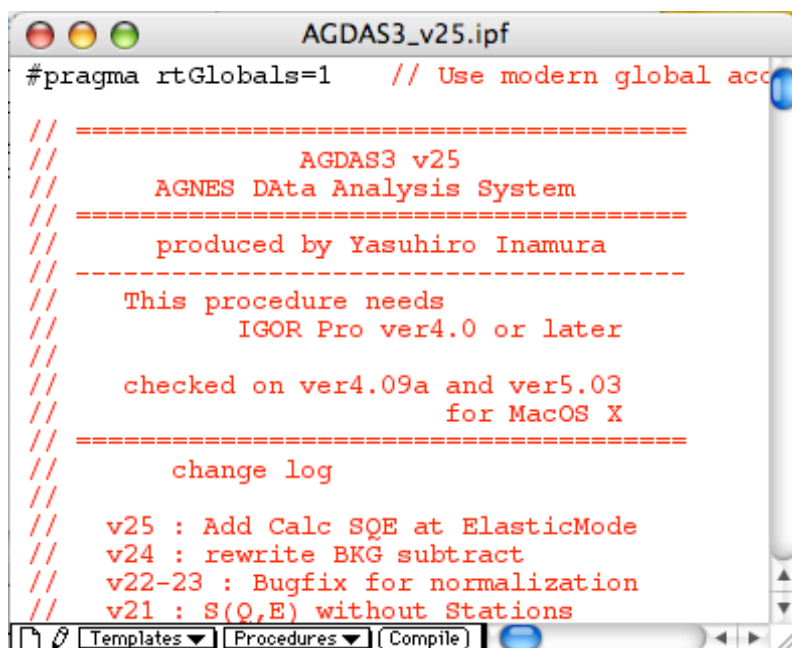
IgorPro ver 4.0 以降

IgorPro (Macintosh)にて動作確認

起動に必要なファイル

AGDAS3_v25.ipf (IgorPro プロシージャファイル)

起動手順

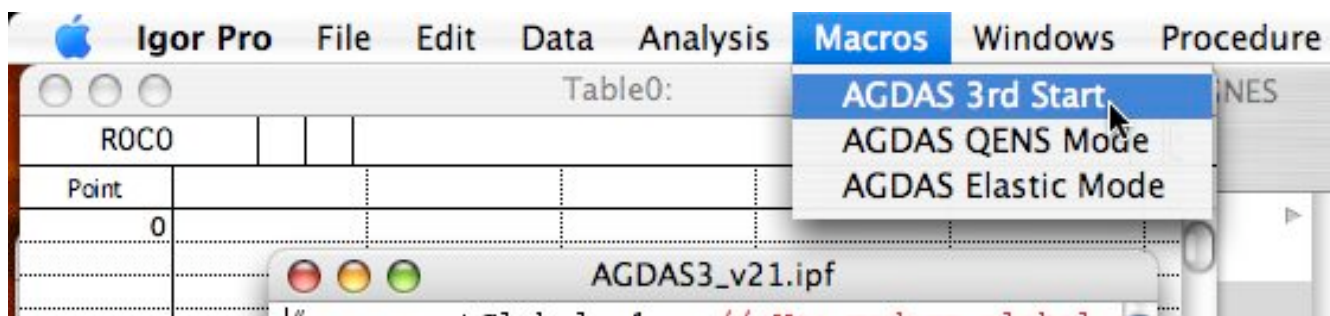


```

#pragma rtGlobals=1    // Use modern global access method
// =====
//                AGDAS3 v25
//      AGNES Data Analysis System
// =====
//      produced by Yasuhiro Inamura
// -----
//      This procedure needs
//                IGOR Pro ver4.0 or later
//
//      checked on ver4.09a and ver5.03
//                for MacOS X
// =====
//      change log
//
//      v25 : Add Calc SQE at ElasticMode
//      v24 : rewrite BKG subtract
//      v22-23 : Bugfix for normalization
//      v21 : S(Q,E) without Stations
  
```

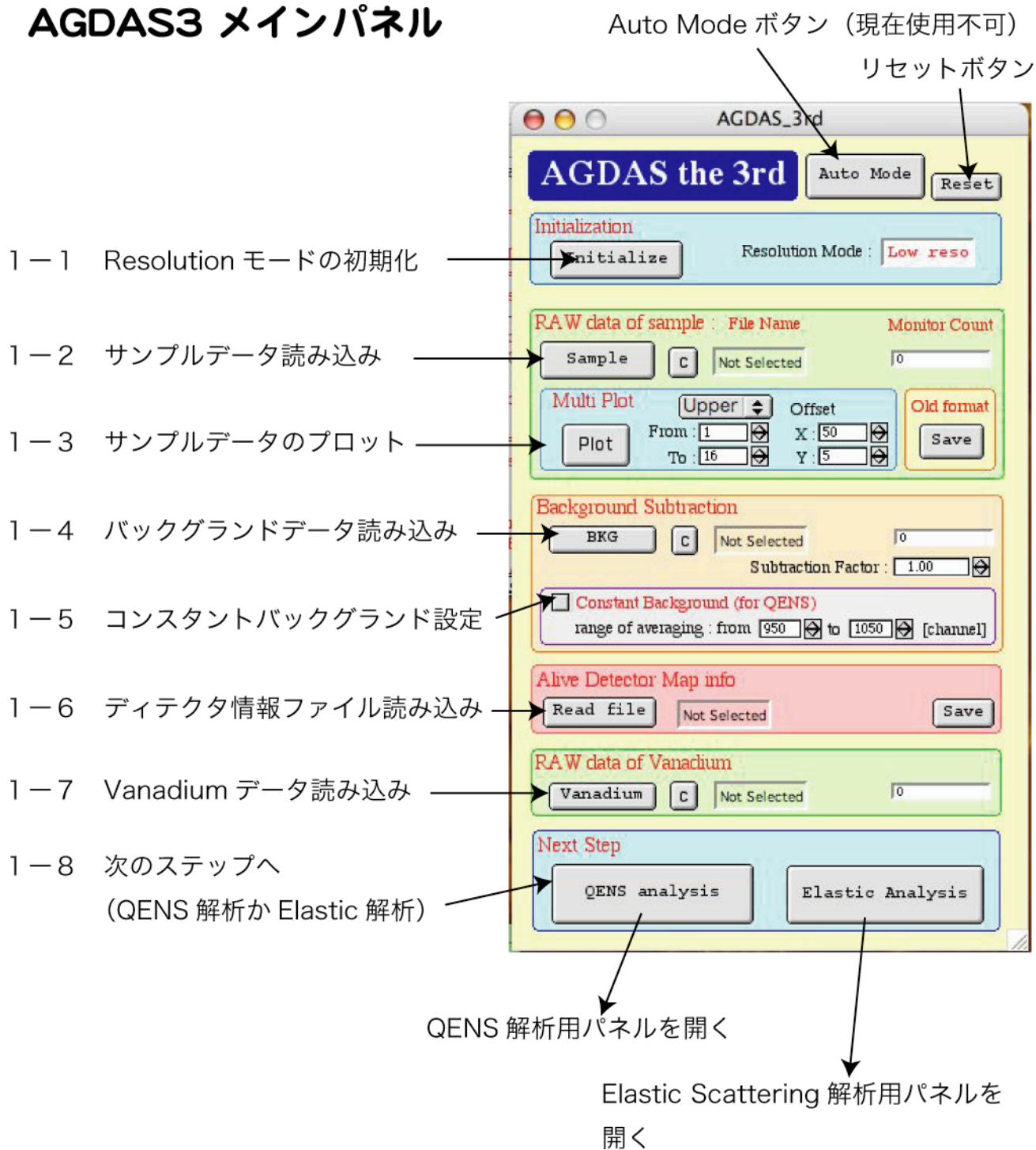
AGDAS3.ipf をダブルクリックで起動する。IgorPro アプリケーションが起動し、左図のようなウィンドウが開くので、ウィンドウ下部にある「Compile」ボタンを押す。

コンパイルは一瞬で済み、Macroメニューに「AGDAS 3rd Start」の項目が現れるのでそれを選択する（下図）。すると、AGDAS3 のメインパネルが開く（次ページ参照）。



AGDAS3 各種パネル

AGDAS3 メインパネル



QENS 解析用パネル

クローズボタン

2-1 Station グループの初期化

2-2 データファイル等の確認

2-3 Station グループピング

2-4 $S(Q,E)$ の算出

2-5 AGFIT 用データの出力

Elastic Scattering 解析用パネル

クローズボタン

3-1 データファイル等の確認

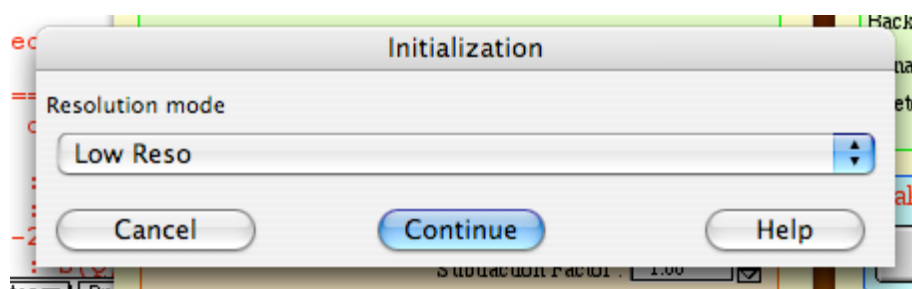
3-2 Elastic Peak の積分

○解析手順その 1 (各種データファイルの読み込みと設定)

1-1 Resolution モードのイニシャライズ

Resolution モードの決定

- I) メインウィンドウの「Initialize」ボタンを押す
- II) 下図のダイアログが現れるので、Resolution を選択する。



決定したら、「Continue」ボタンを押して終了する。

1-2 サンプル RAW データの読み込み

「Sample」ボタンを押すと、ファイル選択のダイアログが出るので選択する。
 メインウィンドウ上にファイル名とモニターカウントが表示される。
 RAW データを昔のフォーマット (Kaleida で読み込める) で書き出す場合は、Old 枠内の「Save」ボタンを押し、セーブ場所をダイアログで指定すればよい。間違ったファイルを選択した場合は、「C」ボタンで Clear するか、再度読み込めばよい。

1-3 RAW データのプロット、データの直接確認 (必要に応じて)

Multi Plot 枠の「Plot」ボタンでプロットできる。
 プルダウンメニューで上、中、下段の選択、プロット開始および終了のディテクタ番号、プロット間のずらし方(Offset)の変更が出来る。

1-4 バックグラウンドデータの読み込み (必要に応じて)

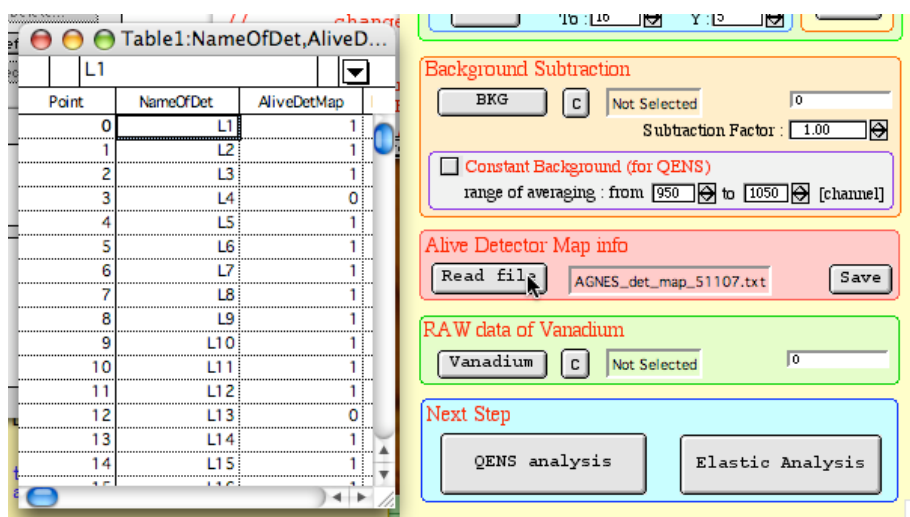
「BKG」ボタンを押すことでバックグラウンドの RAW データを読み込むことができる。QENS 解析や Elastic 解析の時には、モニターカウントでサンプルデータに対し規格化され、サンプルデータから直接引いたものが解析用データとして扱われる。バックグラウンドデータが読み込まれていると自動的に差し引かれることに注意。
 間違って読み込んだ場合は「C」ボタンで Clear すること。

1-5 コンスタントバックグラウンドの設定 (必要に応じて)

RAW データの段階で、シグナルのないと思われる TOF 領域の強度をコンスタントバックグラウンドと見なして、全タイムチャンネルからその強度を引く。必要ならチェックボタンにチェックを入れる。コンスタントバックグラウンドと見なす TOF 領域は設定できるが、設定した後でもう一度チェックボタンのチェックをやり直す必要があるので注意すること。

1-6 ディテクタ情報ファイルの読み込み

ディテクタの生死 (使用 or 不使用)、Elastic Peak 位置の情報のはいつているテキストファイルを読み込む。読み込むと、その内容が新しい Table として表示される。この情報は、必要なら直接 Table から書き換えることができる。



このファイルの詳細は AGNES_DetMap manual を参照のこと。

1-7 Vanadium データの読み込み

$S(Q, \omega)$ データの計算に必要である。「Vanadium」ボタンを押すと、ファイル選択ダイアログが出るので、RAW データファイルを選ぶ。

1-8 QENS 解析か Elastic 解析の選択

「QENS Analysis」ボタンか「Elastic Analysis」ボタンを押して、次のステップへと移る。「Macros」メニューから選択してもかまわない。

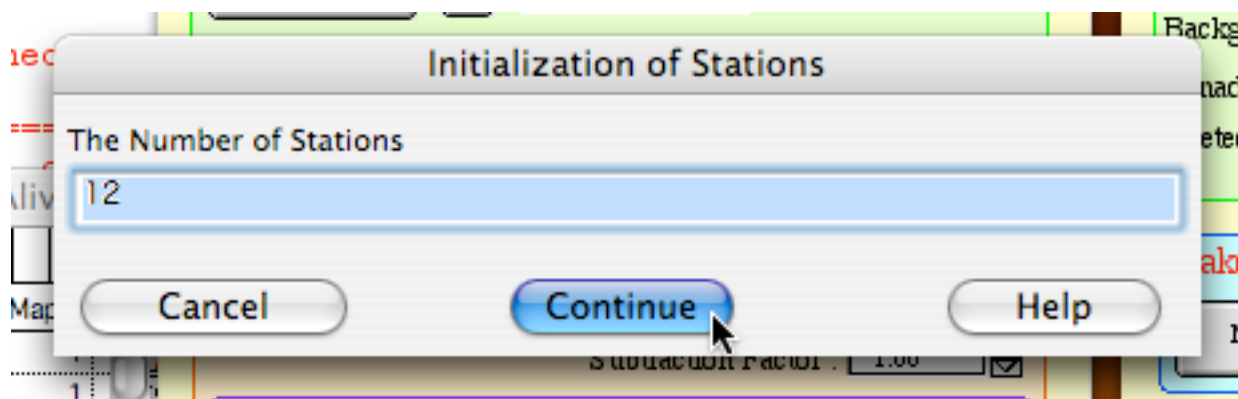
○解析手順その 2 (QENS 解析)

この解析を行うには、手順その 1 を前もって実行しておく必要がある。

2-1 Station データのイニシャライズ

まず初めにディテクタをまとめるにあたり、いくつのグループに分けるのかを設定する。このグループを”Station”と呼ぶ。

QENS 解析用パネルの「Initialize」ボタンを押すことで、Station の個数を設定するダイアログが開く



デフォルトは 12 個になっている。必要な数を入力して「Continue」ボタンを押す。すると、Station のまとめ方を示すテーブルが出現する。

Table0:Detector,StnTable										
ROCO		Upper								
Row	Detector	StnTable[][0]	StnTable[][1]	StnTable[][2]	StnTable[][3]	StnTable[][4]	StnTable[][5]	StnTable[][6]	S	
0	Upper	0	1	2	3	4	5	6	10	
1	Middle	10	10	10	10	10	10	10	10	
2	Lower	0	10	10	10	10	10	10	10	
3										

デフォルトでは、12 個の Station で 1 つの Station に 10 本のディテクタが含まれている。必要に応じてこの表を直接書き換えることで、グルーピングを変更できる。

Upper: 上段のディテクタ (全 104 本: 20°~123°)

Middle: 中段のディテクタ (全 120 本: 10°~129°)

Lower: 下段のディテクタ (全 104 本: 20°~123°)

(注意) Station 数が最初の設定ほど必要でない場合、最後のコラムに「-1」を入力することで、それ以降のコラムは無視される。なお、各 Station の個数の総和が実際のディテクタ個数より多くなならないよう注意。

2-2 利用するデータのチェック

「Loaded files」の欄に手順1で選んだファイルが表示されている。もし、それらが目的と異なる場合は、そのままメインパネルにて変更を行う。その際、再度メインパネルの「QENS Analysis」のボタンを押す必要はない。直接行き来できる。

2-3 Station 作成

1) グループニングの実行

手順2-1での設定に応じて各ディテクタのグループニングを行う。Make Station Data 枠内の「Make」ボタンを押す。Igor のコマンドウィンドウに作業過程が表示される。

この作業には2つのオプションがある。

☐ Add peak on reverse

チョッパ裏面からのピークを足す

☐ /counter /monitor

モニターカウントと各 Station 内のディテクタ数で割る。
各 Station の強度がディテクタ1本あたりとなる。

この作業以降、解析は Station ごとに進められる。各 Station を示すインデックスは、0 から始まることに注意。(Station の表と同じ)

なお、手順1イニシャライズで示した Station のグループニングの変更は、「Make」ボタンを押す直前まで可能である (Station 総数以外)。

2) Station データの取り出し、書き出し (必要なら)

Make Station Data 枠内の Save 枠で、Igor 上への Wave、もしくはテキストファイルとして書き出すことができる。

プルダウンメニューとボタンで、必要なデータを取り出す。

2-4 $S(Q, \omega)$ の計算

1) パラメータの入力

Make Dynamic Structure factor 枠内で、必要なパラメータを入力する。

Temperature of sample	測定温度
Reference temperature	ボーズスケールするときの基準温度
mean square displacement	平均二乗変位

2) 「Calculation」ボタンを押す

Igor のコマンドウィンドウに作業過程が流れる。

2-5 $S(Q, \omega)$ の計算結果を取り出す

1) Igor 内部への (Wave) として取り出す

Output 枠内で、取り出したいエネルギー範囲 (単位[meV]) と binning を設定し、

Take out 枠内のプルダウンメニューから、必要とするデータを選ぶ

SSQW	対称化した $S(Q, \omega)$
SQW	$S(Q, \omega)$
SBSL	ボーズスケールした対称化 $S(Q, \omega)$
BSL	ボーズスケールした $S(Q, \omega)$
DSP	状態密度

その後「Waves」ボタンを押すことで、Igor の wave として取り出すことができる。Binning に少し時間がかかるかもしれない。

Wave の名前は以下のフォーマットとなっている。

AG###_S**_SSQW	SSQW データ
	ここは取り出すデータによって変化する
AG###_S**_E	Energy Transfer E データ
AG###_S**_Q	Momentum Transfer Q データ
	(###はデータの Run Number、**は Station 番号)

2) AGFIT 用テキストファイルへの書き出し

Output 枠内で、取り出したいエネルギー範囲 (単位[meV]) と binning を設定し、For AGFIT 枠内の「Save」ボタンを押す。計算 (主に binning) が終わるとダイアログが開き、以下のようなファイル名をデフォルトとしてセーブしようとする。ファイル名の変更が必要ないなら、単に return キーを押してゆけば良い。ファイルの種類は2種類あり、まず各 Station の角度と Q 値を書き出したファイルが一つ、そして各 Station のデータファイルである。前にも書いたが、Station のインデックスは 0 から始まることに注意。

(XXX は Run ナンバー)

AGXXX_Angle_Q.txt	: 平均角度とその Q 値
AGXXX_stn0	: Station 0 データ
AGXXX_stn1	
.....	
AGXXX_stn11	

以降、書き出されたファイルを用いて、AGFIT による解析 (AGFIT manual) へと進む。

○解析手順その 3 (Elastic Scattering 解析)

この解析を行うには、手順その 1 を前もって実行しておく必要がある。

目的は、ElasticPeak 付近の強度を横軸 Q 値で取り出すことである。

3-1 各種設定のチェック

手順その 1 で設定したレゾリューションやデータファイル等のチェックを行う。もし変更が必要なら、そのままメインパネルにて変更を行う。その際、再度メインパネルの「Elastic Analysis」ボタンを押す必要はない。直接行き来できる。

3-2 強度の計算実行

1) 設定

「Intensity Integration」枠内のパラメータを設定する。

Width :

積分範囲を設定する。Elastic ピークの中心からの Time Channel の幅を入力する。(Half Width)

Add Reverse phase peak :

チョッパ裏面からのピークを加えるならチェックする。

Integration of S(Q,E) :

積分を、TOF の RAW データのまま行うのか、S(Q,E)への計算を行ってから行うのかを設定する。これにチェックした場合、以下のパラメータの設定も必要となる。

- Temperature of sample
- mean square displacement

2) 実行

「Calculation」ボタンを押す。計算結果はプロットされ、Wave に書き出される。

Wave の名前とそのデータは以下になる。(### : Run Number)

Wel_AG###o	Sample データ / 1 ディテクタ / モニターカウント
Wel_AG###v	Vanadium データ / 1 ディテクタ / モニターカウント
Wel_AG###	Wel_AG###o / Wel_AG###v
Wel_AG###_Q	Q 値

3) Save

上の 4 つのデータを 1 つのテキストファイルとして書き出す。「Save」ボタンを押すとダイアログが開くのでファイル名を指定する。

○その他の注意点

リセット

基本的に、手順通りに行われないと機能しないようにしているので、大きな問題は発生しないであろう。ただし、多少の前後（Vanadium は Initialize 後ならいつでも読み込める、など）は行うことが出来る。もし途中でわからなくなったら、メインパネルもしくは QENS 解析用パネル上部の「Reset」ボタンを押すことで、消すことの出来るデータはすべて抹消され、各種ウィンドウも書き直される。

パネル間のデータの関連

メインパネルで設定できるバックグラウンドデータやコンスタントバックグラウンドの補正は、読み込まれたり設定されると同時に行われ、その補正された結果がそのまま両方の解析で用いられる。なお QENS 解析と Elastic 解析は、同時に行えるようになっているが、試料温度など S(Q,E)計算に使うパラメータは共通である。

データのテキスト取り出し（まとめ）

データをテキストファイルの形で取り出すことができるのは4カ所。

RAW データ	メインパネル：Old format 「Save」ボタン
Station データ	QENS 解析パネル：Save to 「File」ボタン
SSQW データ	QENS 解析パネル：Output 「For AGFIT」ボタン
Elastic データ	Elastic 解析パネル：Integration 「Save」ボタン

Igor の使い手の方へ

基本的に、すべてのデータの保存や計算は

root:Packages:AGNES

のなかで行っている。そのため、デフォルトのデータフォルダとして最上階層の root にいる限り、データを見たりグラフを描くのに多少面倒になっている。そのため、root へ最小限のデータをコピーする機能をつけておいた。IgorPro のバージョンが5になると、階層が深くても直接 Wave を指定できるようになっているので問題はないだろう。