

AGFIT manual

on eMac

2006.6.9

AGNES 測定で得られた $S(Q, E)$ データの解析

中性子準弾性散乱解析

- ・ Resolution Function の算出
- ・ AGFIT の動作と設定ファイル
- ・ AGFIT_Reader によるプロット

○Resolution Function の算出

装置分解能関数 (Resolution Function) の決定を Vanadium もしくは試料の最低温度等、基準とする弾性散乱スペクトルから得る。

Resolution と見なす測定 of AGFIT 用のテキストデータを Kaleida Graph や適当なアプリケーションで読み込み、各 station ごとにフィッティングを行う。フィッティング関数はガウス関数である。

$$Y = A \times \exp\left(-\frac{(X - B)^2}{2C^2}\right) + D$$

フィッティング範囲は

E = -2.0 ~ 2.0 meV (Low Resolution Mode)

E = -1.0 ~ 1.0 meV (High Resolution Mode)

程度。

AGFIT による計算には、ここで得られる標準偏差 C を使用する。

この作業は、各サイクル、少なくとも各バナジウムごとに一度は行う必要があるだろう。

★AGDAS3 の内部関数を使う場合

AGDAS3 には、上記の関数ですべての Station のデータをフィッティングし、標準偏差 C を wave にする関数が搭載されている。(隠しコマンド)

1) AGDAS3 によって、Wave として SSQW (対称化された S(Q,w)) を取り出す。

2) 続けてコマンドウィンドウから

AGNES_Reso()

と打ち込む。

3) SSQW データに対してフィッティングが進行する。すべての Station についてフィッティングが終わると新しい Table が開き、各 Station の平均角度、標準偏差 C、平均 Q 値が表示される。

4) この Table からコピー&ペーストすることで、後述する AGFIT のコントロールファイルや AGFIT_Reader のパラメータファイルの作成が容易になる。

○AGFIT による解析

目的

分解能関数の寄与を考慮し、フィッティングを行う。

動作

ローレンツ関数（最大 2 個）とデルタ関数を用いてフィッティングする。

各関数は分解能関数（ガウス関数）でコンボリューションできる。

用意するファイル

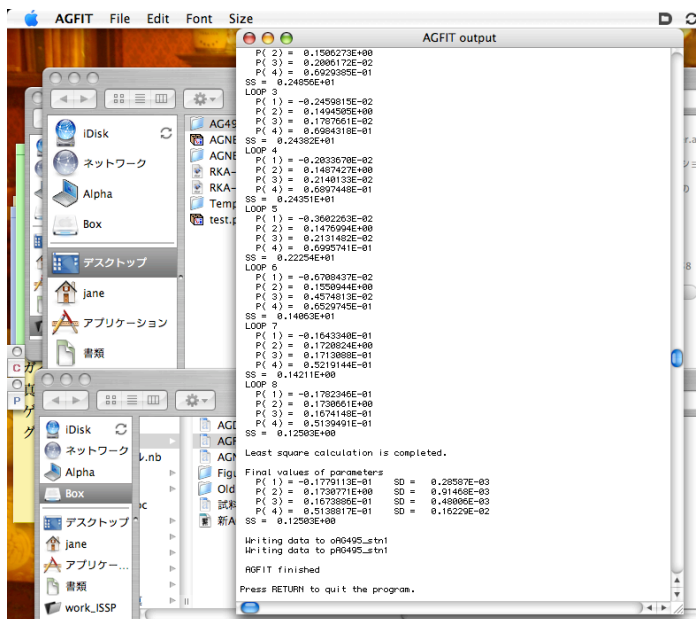
AGFIT or AGFIT.app（アプリケーション）

AGFIT.CNTL（コントロールファイル, 作成方法は後述）

AGXXX_stn*（データファイル, AGDAS3 により作成したもの）

AGFIT 実行方法

用意したファイルをすべて同じフォルダに入れて、AGFIT アプリケーションをダブル



クリックする。すると新しいウィンドウが現れ、自動的に AGFIT.CNTL、データファイルが読み込まれ、フィッティングが始まる。その経過はウィンドウに表示される（左図）。

計算が終わったなら、リターンキーを押すことでアプリケーションを終了する。

出力されるファイル

出力されるファイルは、コントロールファイルに設定されている。それらの名前はそれぞれの Station データファイル名の先頭に

o がつく： 各パラメータのフィッティング結果（出力ファイル名）

p がつく： プロット用データ（プロット用ファイル名）

とするのが伝統的である。またこの形式を踏襲すると、Igor 上でフィッティング結果を一気に複数表示できる AGFIT_Reader（後述）が使えるようになる。

コントロールファイルの構成

3 行目 ; 主題

5 行目 ; データファイル名、出力ファイル名、プロット用ファイル名

7 行目 ; 装置関数 (ガウス関数) の標準偏差

10 行目から 20 行目 ; 関数のパラメーター

コンマの左側は 0 または 1 を入力

0 はその行のパラメーターを固定、1 は変数にする

コンマの右側にはパラメーターの初期値または固定値を入力

フィッティング関数は次のとおり

$I(E) = P7 + G(E) @ [P6 * Del(E, P1) + P2 * \{Lor1(E, P1, P3) + P4 * Lor2(E, P1, P5)\}]$

G はガウス関数、Del はデルタ関数、Lor1 と Lor2 はローレンツ関数、

@ はコンボリューションを表す

10 行目 = P1 (全ての関数に共通のピークエネルギー)

12 行目 = P2 (第 1 ローレンツ関数の強度)

13 行目 = P3 (第 1 ローレンツ関数の半値半幅)

15 行目 = P4 (第 2 ローレンツ関数強度の第 1 ローレンツ関数強度に対する比)

16 行目 = P5 (第 2 ローレンツ関数の半値半幅)

18 行目 = P6 (デルタ関数の強度)

20 行目 = P7 (バックグラウンド)

例えば、ローレンツ関数 1 つだけを使うときは、P4, P5, P6 を 0 に固定

ローレンツ関数 1 つとデルタ関数を使うときは、P4, P5 を 0 に固定

ローレンツ関数 2 つ使うときは、P6 を 0 に固定 (下の例)

分解能関数のコンボリューションを行わないときは 6 行目に非常に小さい値を入れる (デルタ関数は使わない。)

22 行目 ; プロットファイルの作成エネルギー範囲 (範囲内に 800 点)

24 行目 ; 同様のフィッティングを続けて行う (1)、行わない (0)

★コントロールファイルについての注意点

AGFIT プログラム本体は MacOS X の Unix としての機能を用いるため、入力および出力されるテキストは、「行末コードが LF (Unix タイプ) 」である必要がある。通常は Windows タイプ (CR+LF) や、MacOS タイプ (CR) が用いられることが多いので、「行末コードの書き換え」が必須となる。

また、ファイルの終わりをプログラムが検知するために、何行か「空行」が必要であるため、必要なら手動で追加すること。

以上の点で不足があると、プログラムがエラーを吐いて動かないので注意。

MacOS X では、「mi」というフリーのテキストエディタが、ユーザインターフェイス的にも比較的容易に行末コードを書き換えることが出来るので、それを用いるとよいだろう。

Mi (<http://www.mimikaki.net/>)

ちなみに「CNTL ひな形」フォルダに準備されているコントロールファイルは上記の注意点を満たしているので、実際の解析にはこれらのファイルをコピーして使うべきである。

コントロールファイルの例

```

=====
**** Subject name ****
'01H2Ostn1'
**** File names (data, output, plot) ****
'01H2Ostn1','o01H2Ostn1','p01H2Ostn1'
**** Standard deviation of resolution function (Gaussian) ****
0.057373
**** Initial parameters (0:fixed, 1:variable) ****
=== PeaK energy ===
1,-0.01
=== Intensity and HWHM of 1st Lorentzian ===
1,0.02
1,0.2
=== Ratio of 2nd-to-1st Lorentzian Intensity and HWHM of 2nd Lorentzian ===
0,0
0,0
=== Intensity of Gaussian ===
0,0
=== Constant background ===
1,0.01
**** Energy region for calculated values ****
-2.0,2.0
**** Stop (0) or continue (1) caluculating next data****
0
=====
**** Subject name ****
'01H2Ostn2'
**** File names (data, output, plot) ****
'01H2Ostn2','o01H2Ostn2','p01H2Ostn2'
**** Standard deviation of resolution function (Gaussian) ****
0.054575
**** Initial parameters (0:fixed, 1:variable) ****
=== PeaK energy ===
1,-0.01
=== Intensity and HWHM of 1st Lorentzian ===
1,0.02
1,0.2
=== Ratio of 2nd-to-1st Lorentzian Intensity and HWHM of 2nd Lorentzian ===
0,0
0,0
=== Intensity of Gaussian ===
0,0
=== Constant background ===
1,0.01
**** Energy region for calculated values ****
-2.0,2.0
**** Stop (0) or continue (1) caluculating next data****
1

```

これでフィッティング結果がプロットファイルとして得られ、線幅などのパラメーターがアウトプットファイルとして得られました。あとはそのパラメーターを使用するなどして、好きなように解析しましょう！！

AGFIT_Reader の利用

目的 : AGFIT による複数のフィッティング結果を Igor に取り込み、表示する

準備 :

- 1) パラメータファイルを作る
パラメータファイル例

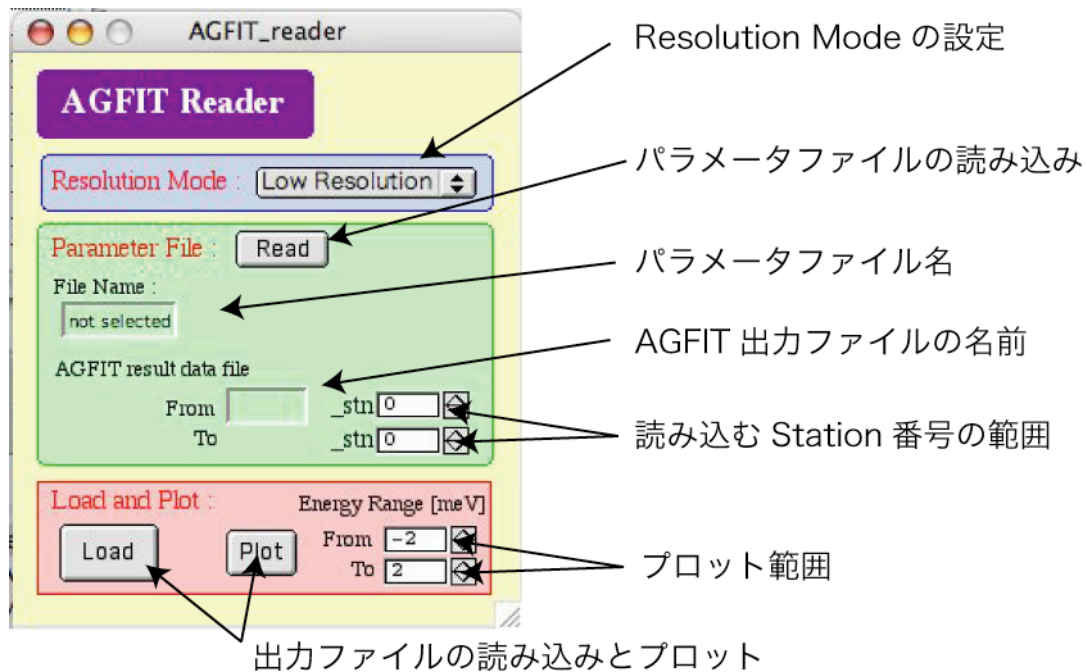
```
AG474
11
14.5,0.05505154
24.5,0.05612235
34.5,0.05742922
44.5,0.0592799
54.5,0.05972498
64.5,0.06277549
74.5,0.06434519
84.5,0.06719498
94.5,0.07003307
104.5,0.07239403
114.5,0.07551999
```

- 1 行目 : AGFIT 出力ファイルの基本部分を指定する。
読み込まれるフィッティング結果のファイル名は、
この文字列の先頭に o、末尾に”_stn##”(#:Station number) を
つけたものとなる。
上記の例ならば、
oAG474_stn0~oAG474_stn10 が読み込まれる。
- 2 行目 : データファイルの個数
- 3 行目以降 : 各 Station において、
〈平均角度〉, 〈装置関数 (ガウス関数) の標準偏差〉

- 2) パラメータファイルを AGFIT 出力ファイル (先頭が o のもの) と同じフォルダに入れる。

起動 :

- 1) AGFIT_Reader.ipf (Igor プロシージャファイル) をダブルクリックする。
起動したら、ウィンドウ下部の「compile」ボタンを押す
- 2) 「Macros」メニューから「AGFIT Reader」を選ぶ。するとパネルが開く。



使用方法：

- 1) Resolution モードをポップアップメニューから選ぶ。
(デフォルトで Low Resolution)
- 2) Parameter File 枠内の Read ボタンを押して、パラメータファイルを読み込む。
すると File Name と、AGFIT result data file の空欄が埋まる。
- 3) 読み込ませたい Station 番号の変更があれば、直接番号欄を書き換える。
- 4) 「Load」 ボタンを押すと、上記の名前を持ったファイルが読み込まれる。
- 5) 「Plot」 ボタンを押すことで、全 Station がプロットされる。
プロット範囲は直接パネル上で変更できる。

凡例

- 赤丸 : データ点
- 紺色実線 : フィット結果
- 黒点線 : 装置関数
- 水色点線 : 第 1 ローレンツ関数成分
- 紫色点線 : 第 2 ローレンツ関数成分
- 紺色点線 : ガウス関数成分

以上