

# KEK放射光利用技術入門コース - XAFSラーニング資料(解析演習編) -

## < 1 . Athena による XAFS データ処理 >

1章では、AthenaによるXAFSデータ処理を、構造が既知のCu箔を例として示す。Athenaの概要、データ処理の流れ、バックグラウンドの処理、EXAFS振動の抽出を学習する。バックグラウンドをいかに上手に処理するかがEXAFS振動の抽出やフーリエ変換後の実空間でのEXAFSスペクトルに大きく影響する。

Nanotech CUPAL KEK 事務局

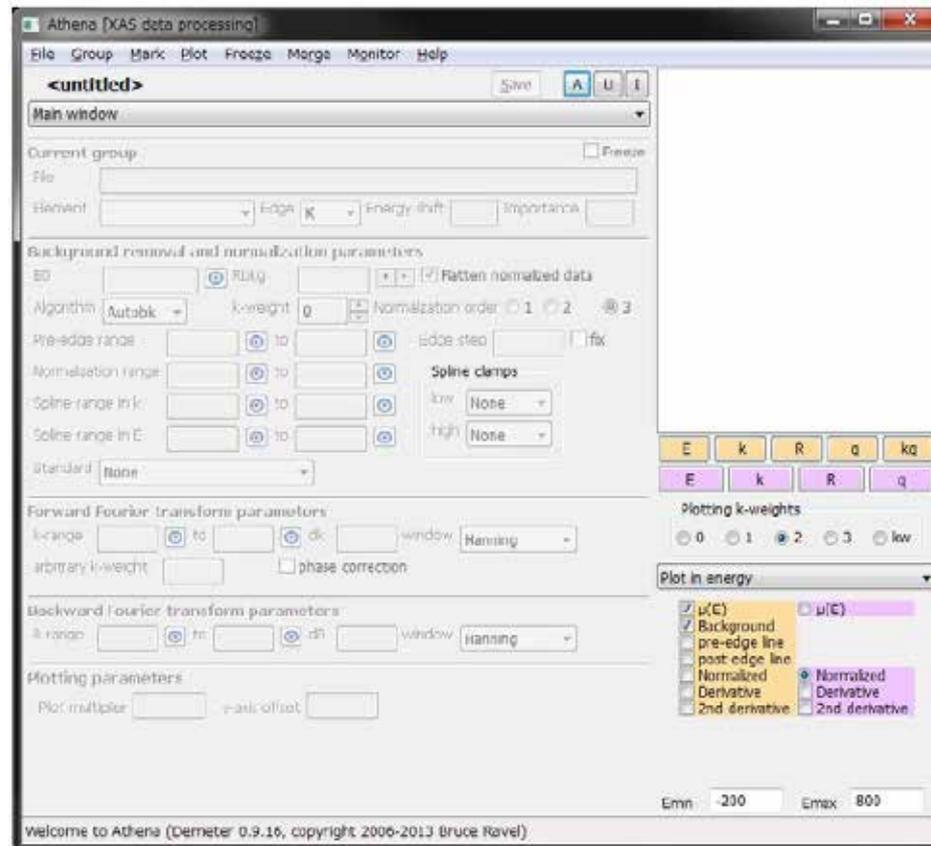
# 目次

- 1 . AthenaによるXAFSデータ処理
  - 1 . 1 Athenaの概要
  - 1 . 2 データ処理のフロー
  - 1 . 3 バックグラウンド処理
  - 1 . 4 EXAFS振動の抽出

# 1.1 Athenaの概要(1)

## Athenaの起動

- 操作**
1. デスクトップ上の(D)AthenaあるいはスタートメニューのDemeter with strawberry perlからAthenaを選択してAthenaを起動する。
  2. 起動を確認できたら、一旦Athenaを閉じる。



Athenaメインウィンドウ

# 1.1 Athenaの概要(2)

## プラグインの有効化

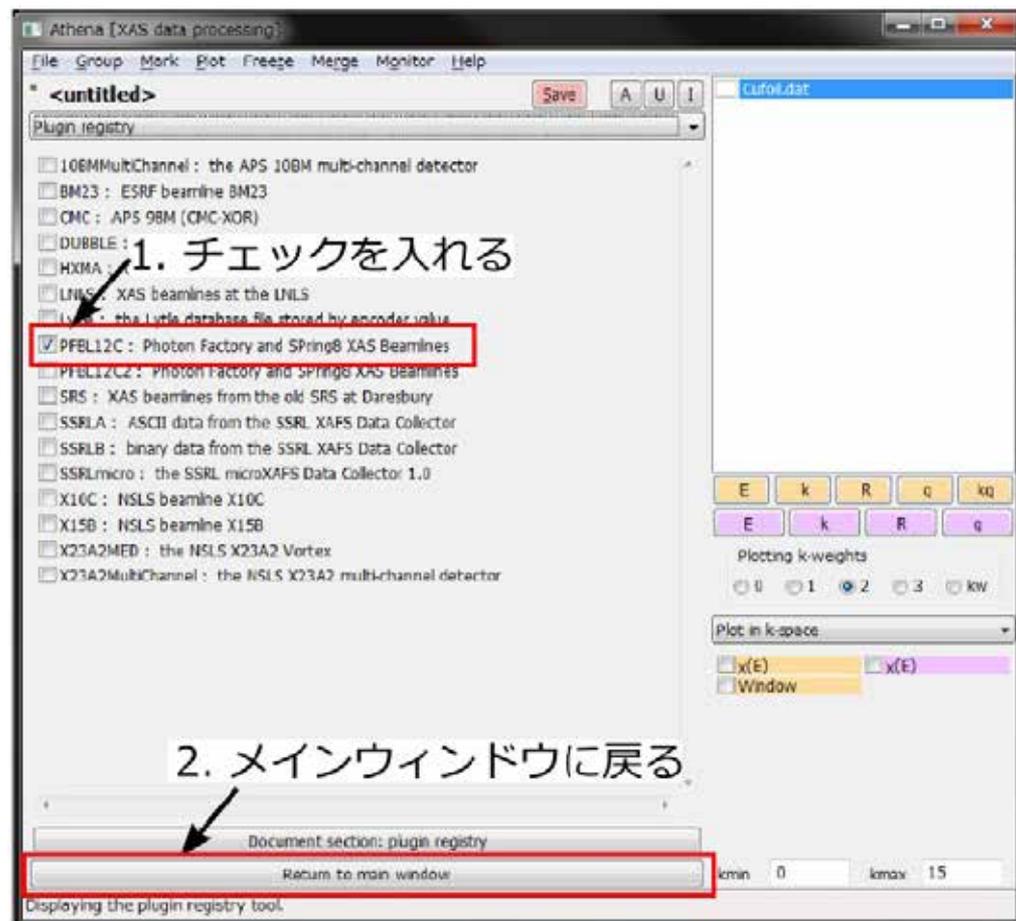
Athenaを使ってPF、SPring-8、SAGA-LS、あいちSR等で測定したXAFSデータを読み込むには、同梱されたプラグインを有効化する必要がある。

### 操作

1. Athenaを起動する。Athenaメインウィンドウの左上の"Main Window"と書かれているところを左クリックして、"Plugin registry"をクリックする。
2. メインウィンドウ左側のプラグイン一覧からPFBL12Cの横のチェックボックスにチェックを入れ、左下の"Return to main window"をクリックする。



これでPFBL12C.pmプラグインが有効化され、PF等の測定データを読み込める状態になる。



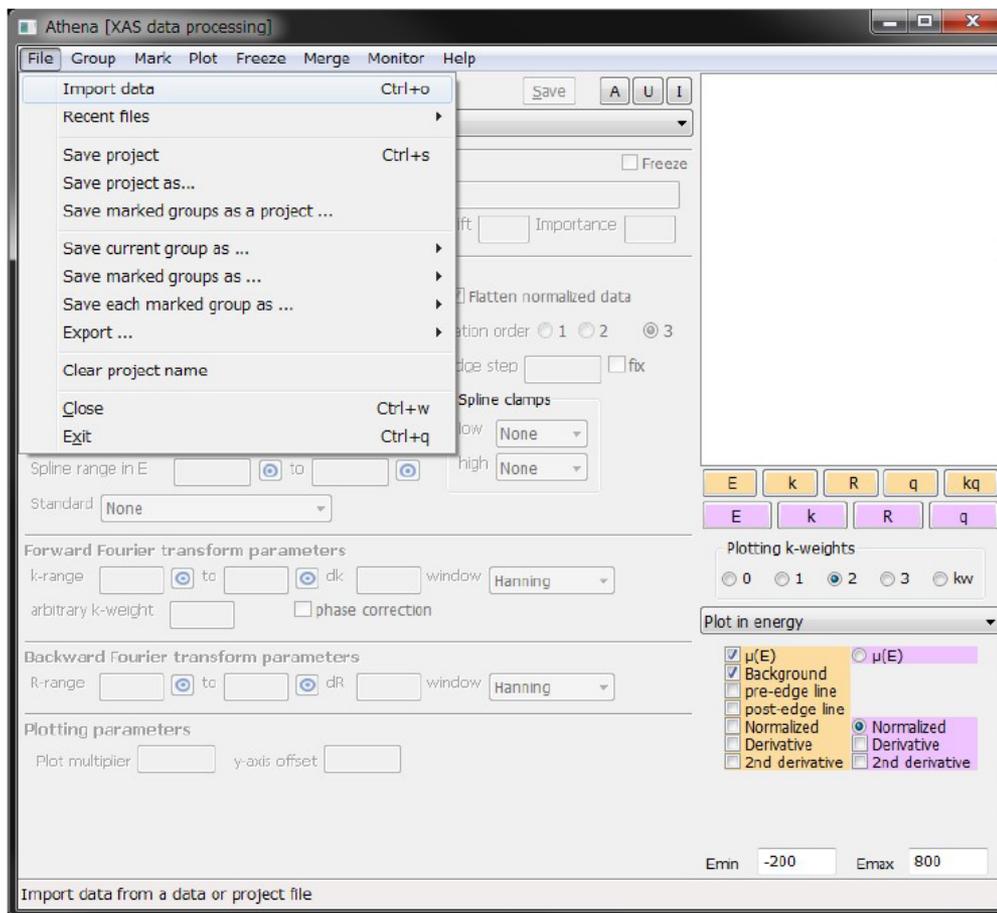
# 1.1 Athenaの概要(3)

## 測定データの読み込み(1)

**操作** メニューバーの“File” から“Import data” を選択し、xxx.dat ファイルを選択して、“Open” をクリックする。(xxx.datは適当なデータファイル) 例)Cufoil.dat

Cufoil.dat は透過法で測定された銅箔の Cu K-edge XAFS スペクトルデータである。

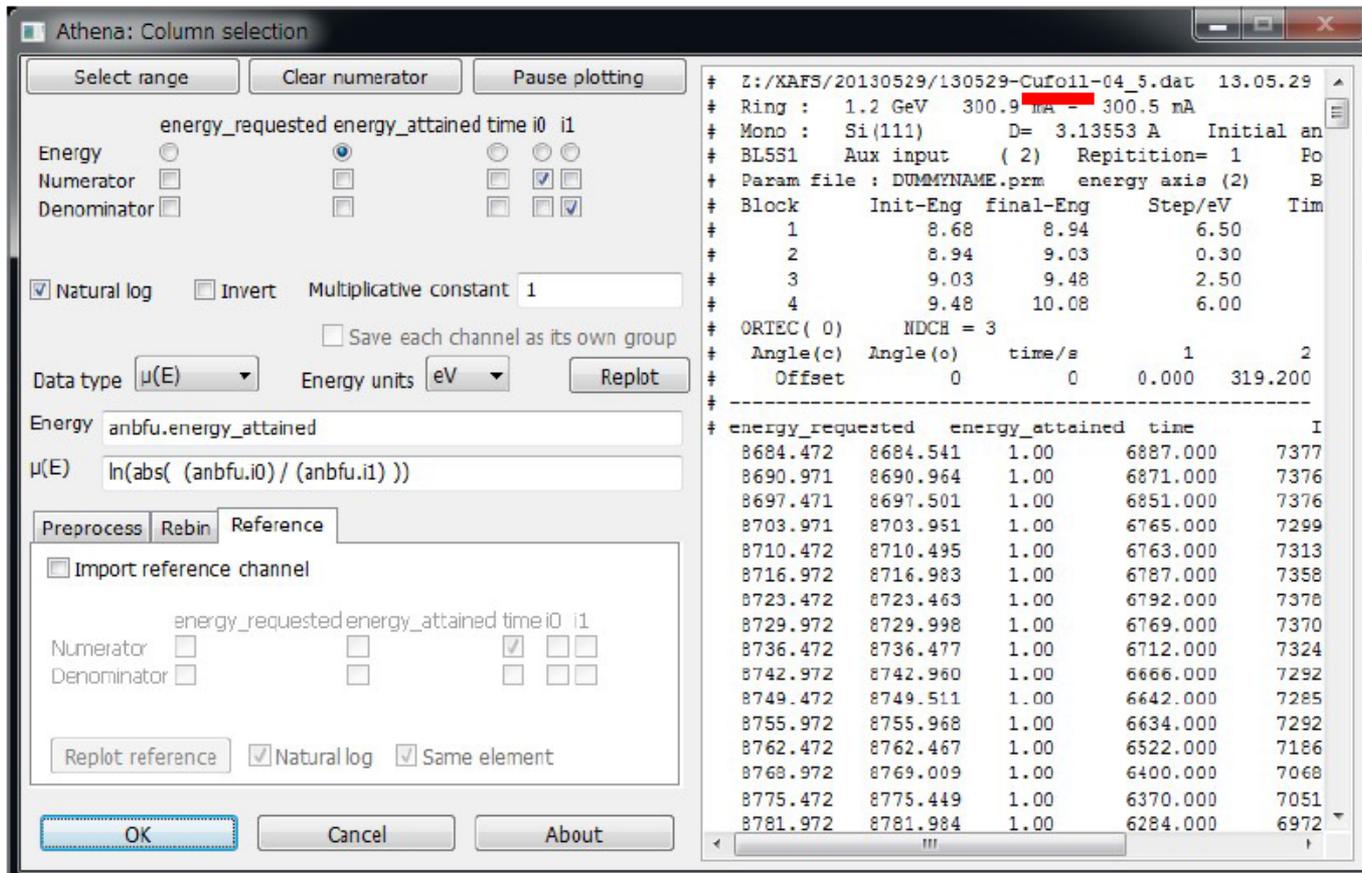
以下、1章に引き続き34ページまでで構造が既知であるCu箔での解析例を通して、AthenaによるXAFSデータ処理の大まかな流れを理解する。



# 1.1 Athenaの概要(4)

## 測定データの読み込み(2)

ファイルを Open した後に表 されるウィンドウ



The screenshot shows the 'Athena: Column selection' dialog box. The left pane contains controls for data processing, and the right pane displays a table of data columns and their values.

**Left Pane Controls:**

- Buttons: Select range, Clear numerator, Pause plotting
- Radio buttons: energy\_requested, energy\_attained, time i0, i1
- Energy:  Numerator  Denominator
- Natural log  Invert Multiplicative constant: 1
- Save each channel as its own group
- Data type:  $\mu(E)$  Energy units: eV Replot
- Energy: anbfu.energy\_attained
- $\mu(E)$ :  $\ln(\text{abs}((\text{anbfu.i0}) / (\text{anbfu.i1})))$
- Preprocess | Rebin | Reference
- Import reference channel
- Radio buttons: energy\_requested, energy\_attained, time i0, i1
- Numerator  Denominator
- Replot reference  Natural log  Same element
- Buttons: OK, Cancel, About

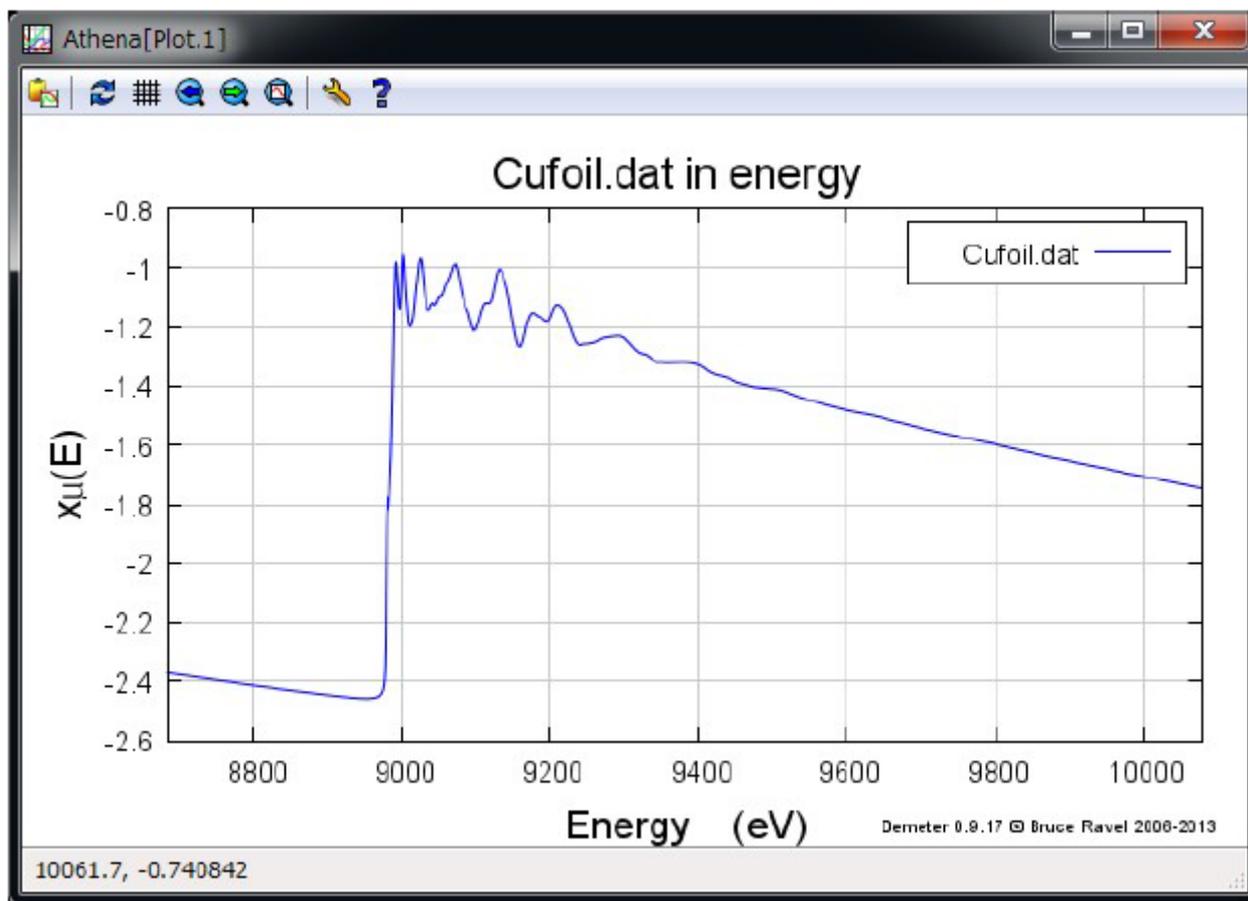
**Right Pane Table:**

```
# Z:/XAFS/20130529/130529-Cufo11-04_5.dat 13.05.29
# Ring : 1.2 GeV 300.9 mA - 300.5 mA
# Mono : Si(111) D= 3.13553 A Initial an
# BL551 Aux input (2) Repitition= 1 Po
+ Param file : DUMMYNAME.prm energy axis (2) B
# Block Init-Eng final-Eng Step/eV Tim
# 1 8.68 8.94 6.50
# 2 8.94 9.03 0.30
# 3 9.03 9.48 2.50
# 4 9.48 10.08 6.00
# ORTEC( 0) NDCH = 3
+ Angle(c) Angle(o) time/s 1 2
# Offset 0 0 0.000 319.200
# -----
# energy_requested energy_attained time I
8684.472 8684.541 1.00 6887.000 7377
8690.971 8690.964 1.00 6871.000 7376
8697.471 8697.501 1.00 6851.000 7376
8703.971 8703.951 1.00 6765.000 7299
8710.472 8710.495 1.00 6763.000 7313
8716.972 8716.983 1.00 6787.000 7358
8723.472 8723.463 1.00 6792.000 7376
8729.972 8729.998 1.00 6769.000 7370
8736.472 8736.477 1.00 6712.000 7324
8742.972 8742.960 1.00 6666.000 7292
8749.472 8749.511 1.00 6642.000 7285
8755.972 8755.968 1.00 6634.000 7292
8762.472 8762.467 1.00 6522.000 7186
8768.972 8769.009 1.00 6400.000 7068
8775.472 8775.449 1.00 6370.000 7051
8781.972 8781.984 1.00 6284.000 6972
```

# 1.1 Athenaの概要(5)

## 測定データの読み込み(3)

読み込まれたデータの表



# 1.1 Athenaの概要(6)

## 測定データの読み込み(4)

### 読み込みオプションの意味

Energy: エネルギー。分光器の角度エンコーダの値から計算したエネルギーを  
いるため、energy\_attained を選択する。

Numerator: 分子(透過法の場合はi0をチェック)

Denominator: 分母(透過法の場合はi1をチェック)

Natural log: 吸収スペクトルを計算する際に自然対数を取る際に選択する。  
(透過法の場合はチェック)

Data type: Athena内部でどういうデータと見なすか?  $\mu(E)$ になっていることを確認する。

### Energy にどちらを選択すべきか?

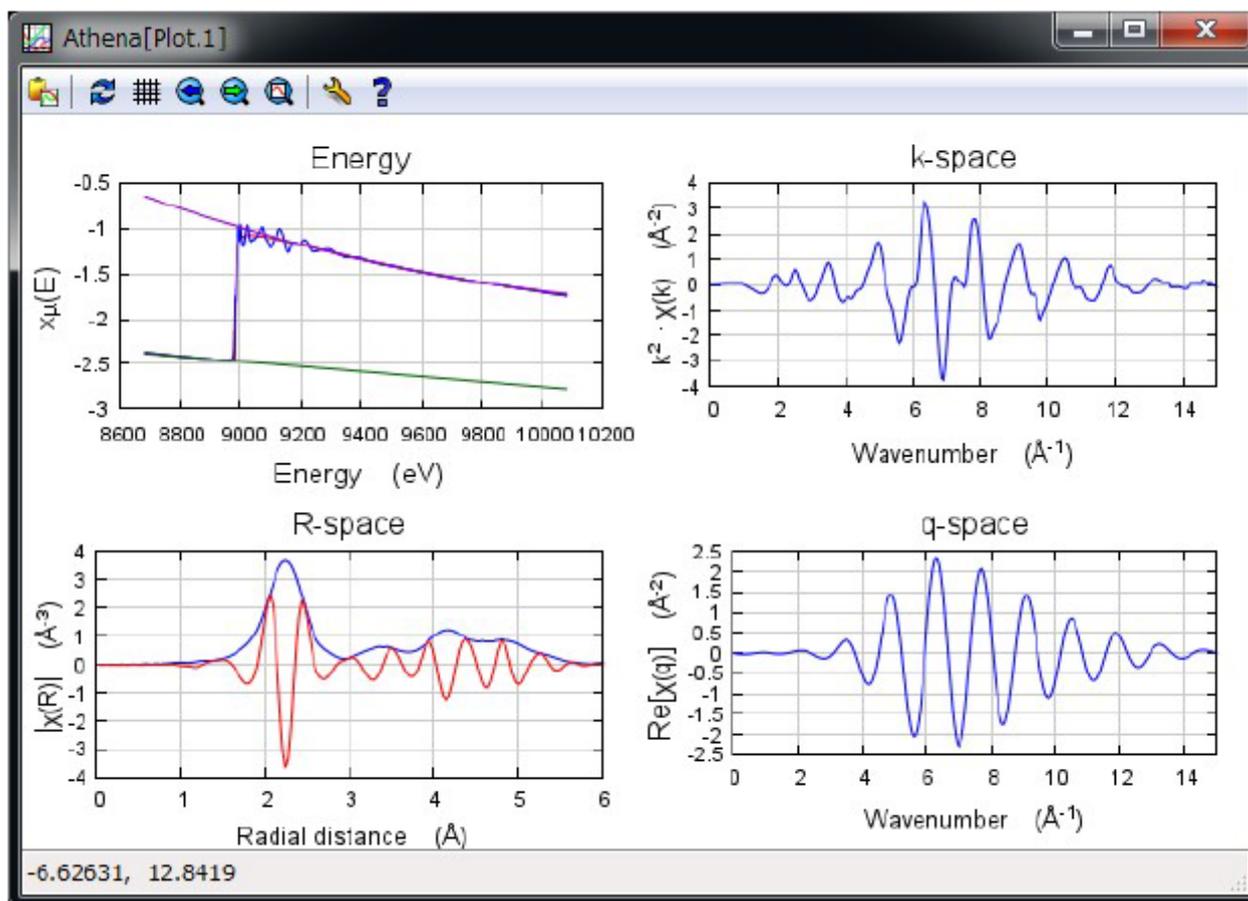
Energy に対しては、energy\_requested と energy\_attained のいずれかを選択する。  
energy\_requested が XAFS 測定時に分光器を動かす際に目標位置、  
energy\_attained が分光器の接続されている角度エンコーダの位置からプラグイン  
によって計算されたエネルギーに対応する。

通常、XAFS測定前に角度エンコーダの較正を行うので、energy\_attained を選択する。

# 1.1 Athenaの概要(7)

## 測定データの読み込み(5)

操作 6ページの読み込みオプションウィンドウ左下のOKをクリックする。  
プロットウィンドウにAthenaの既定のパラメータで解析された結果が自動的に表示される。

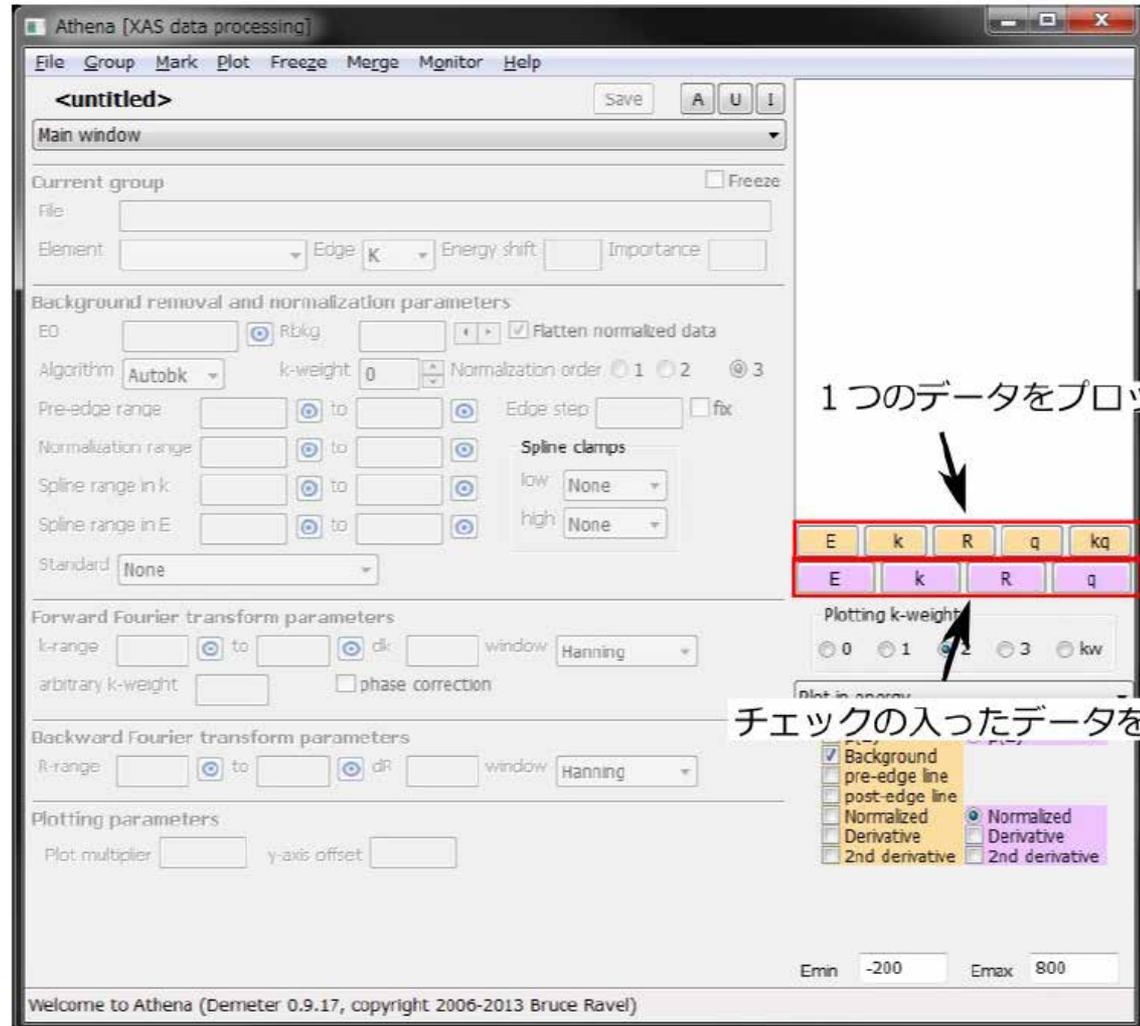


# 1.1 Athenaの概要(8)

## メインウィンドウの説明(プロット)

オレンジ色のボタン:  
5つある各ボタンをクリック  
することで、以下に対応した  
グラフがプロットされる。

- E: エネルギーに対して EXAFS をプロット
- K: 波数に対する EXAFS 振動をプロット
- R: フーリエ変換後の EXAFS スペクトル(動径分布関数)をプロット
- Q: 逆フーリエ変換後の EXAFS 振動をプロット
- Kq: 元の EXAFS 振動と逆フーリエ変換後の EXAFS 振動を重ねてプロット



1つのデータをプロット

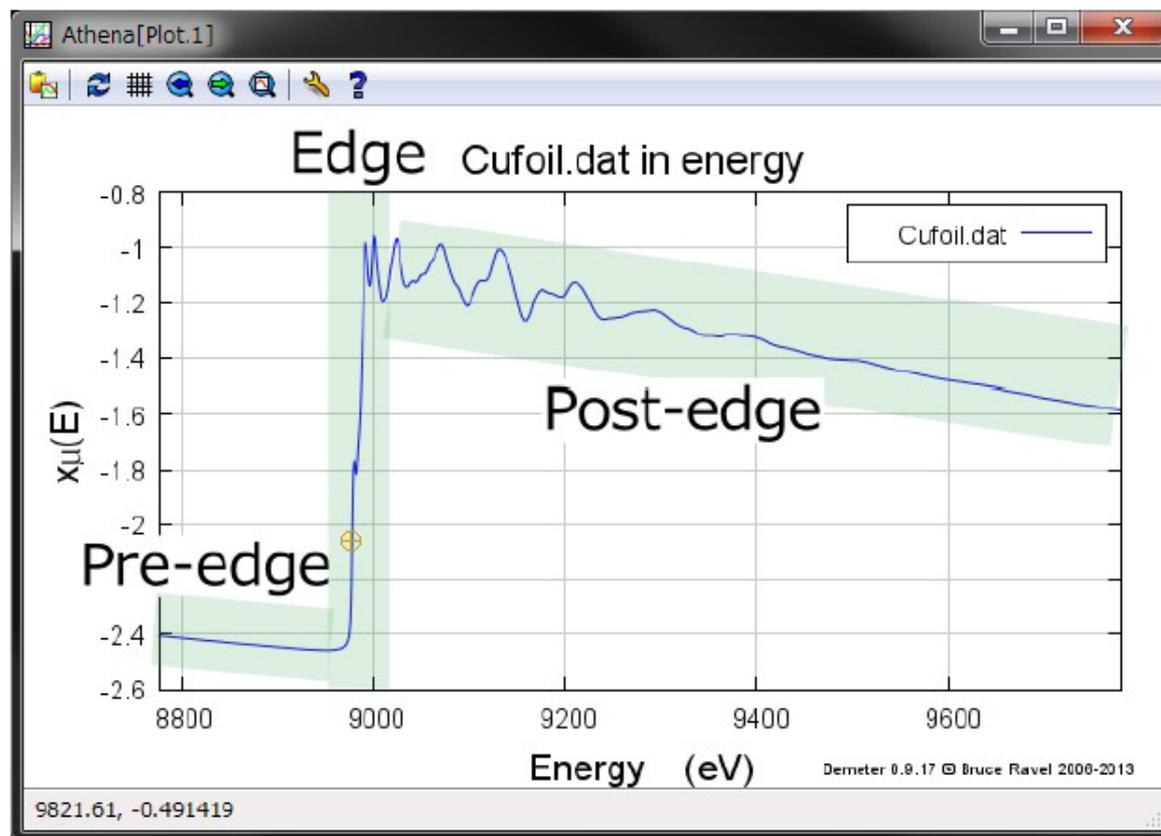
チェックの入ったデータをプロット

## XAFS スペクトルの用語の確認

Pre-edge (プレエッジ): 吸収端の前の領域。但し、吸収端付近の特徴的なピークを指すこともある。

(Absorption) Edge: 吸収端。X線の吸収量が急激に大きくなる場所

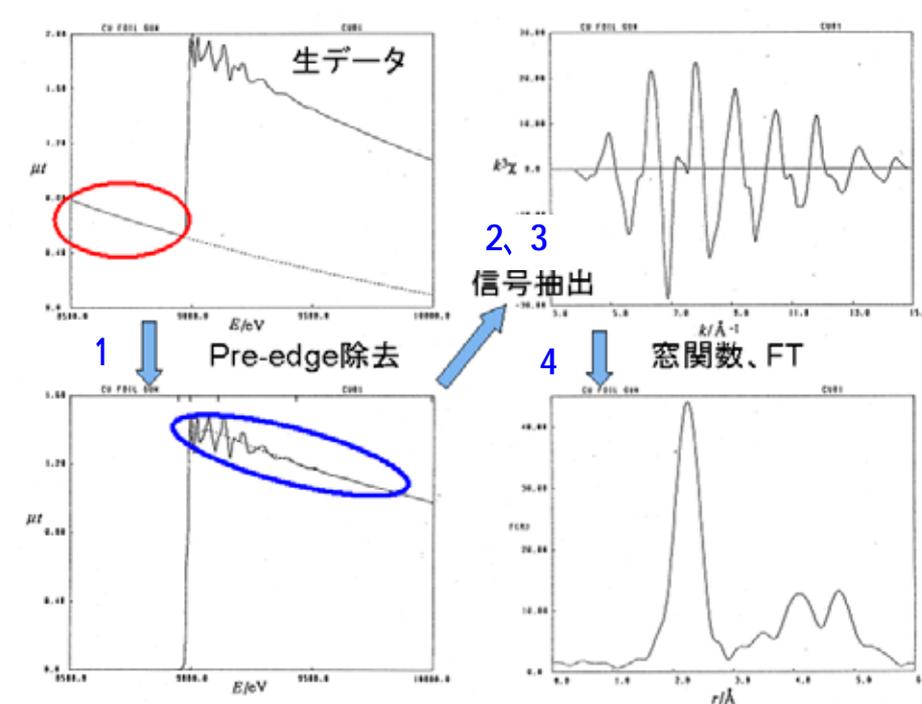
Post-edge (ポストエッジ): 吸収端の後の領域



# 1.2 XAFSデータ処理のフロー(2)

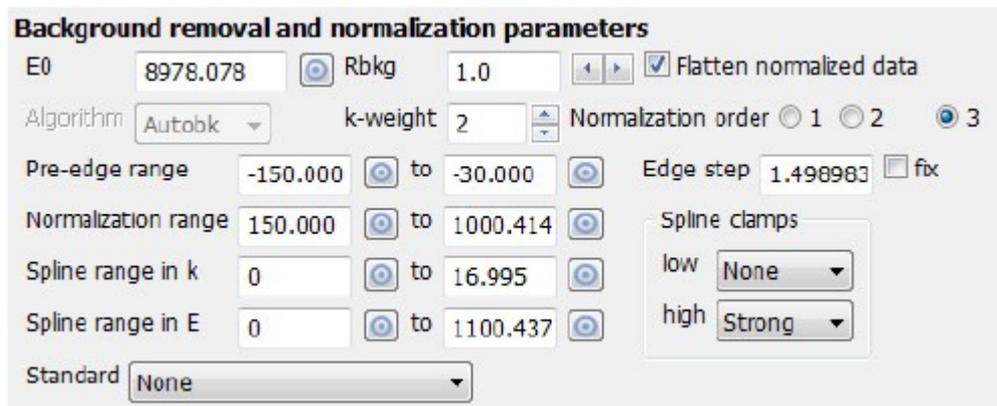
## 大まかなフロー

1. バックグラウンド吸収である Pre-edge 領域を「直線」でフィッティングして、実験値から差し引く。
2. Post-edge領域を「多項式」でフィッティングして、XAFS スペクトルを「規格化」する。  
Athenaの場合は「多項式」として定数(ゼロ次関数)、一次関数(直線)、二次関数、三次関数を選択することができる。
3. Post-edge領域を「スプライン曲線」でフィッティングして、EXAFS 振動を抽出する。
4. EXAFS振動をフーリエ変換して、原子間距離に関係したピークを示すスペクトルを得る。



## 1.3 バックグラウンド処理(1)

10ページの2段目のBackground removal and normalization parameters の欄で、スペクトルのバックグラウンドや規格化に関するパラメータを設定する。



**Background removal and normalization parameters**

E0: 8978.078  Rbkg: 1.0  Flatten normalized data

Algorithm: Autobk k-weight: 2 Normalization order:  1  2  3

Pre-edge range: -150.000 to -30.000 Edge step: 1.498983  fix

Normalization range: 150.000 to 1000.414 Spline clamps: low: None high: Strong

Spline range in k: 0 to 16.995

Spline range in E: 0 to 1100.437

Standard: None

バックグラウンドは Victoreen の式を用いて引くべきではないのか？

例えば、REX2000 のようなXAFS解析ソフトでは、Victoreen の式を用いてバックグラウンドを引くことができる。Athena およびバックエンドである Iffeffit の作者はバックグラウンドを直線で引いてもデバイワラー因子にわずかに影響を及ぼすだけだと説明している。Athena のやり方で問題はあまりないが、解析ソフトが違ふとこのような微妙な違いがあることを理解しておく。

なぜ規格化を行うのか？

透過法によるXAFS測定では、対象元素の吸収端エネルギーでの吸収量はX線光路上にある対象元素の量に対応しているはずである。試料は、単位面積あたりの対象元素の量を考えて調製されるが、厳密な量は分からない。そこで、吸収端の吸収量を1に規格化することで、単位対象元素量に対するスペクトルを得る。

## 1.3 バックグラウンド処理(2)

### パラメータの説明

- E0:** 「吸収端」の値 (Athena では吸収スペクトルの立ち上がりの一次微分の極大値を自動的に E0 に設定する)
- Pre-edge range:** プレエッジ(吸収端より前)のバックグラウンドを引くのに使うデータの範囲(E0に対する相対値)
- Normalization range:** ポストエッジの規格用の関数を引くときに使うデータの範囲(E0に対する相対値)
- Normalization order:** ポストエッジの規格用の関数を引く時の多項式の次数
- Rbkg:** バックグラウンド関数を引くときに使うパラメータの1つ
- k-weight:** バックグラウンド関数を引くときに使うパラメータの1つ
- Spline range in k:** バックグラウンド関数を引く時に使うデータ範囲をE0に対する波数 k で指定したもの
- Spline range in E:** バックグラウンド関数を引くときに使うデータ範囲を E0 に対するエネルギー E で指定したもの
- Edge step:** 吸収端のジャンプの値
- Spline clamps:** バックグラウンド関数を引く時に使うパラメータの一つ
- Standard:** 同時に測定した標準試料データの設定項目(通常、使わない)

# 1.3 バックグラウンド処理(3)

## EXAFS 振動を抽出する時に考えること

X線吸収スペクトルについて、大まかには以下の様な式で表現することができる。

$$\mu(E) = \mu_0(E) * (1 + \chi(E))$$

$\mu(E)$ : 吸収スペクトル

$\mu_0(E)$ : 単純な原子のX線吸収スペクトル

$\chi(E)$ : X線吸収により飛び出した光電子と近接原子の相互作用による吸収スペクトルの変化(EXAFS!)

この式を EXAFS 振動  $\chi(E)$  について変形すると、

$$\chi(E) = (\mu(E) - \mu_0(E)) / \mu_0(E)$$

となる。但し、Athena では  $\mu_0(E)$  ではなく、 $\mu_0(E_0)$  を使う。(Athena 以外では異なる規格化を行うこともある。) すなわち、

$$\chi(E) = (\mu(E) - \mu_0(E)) / \mu_0(E_0)$$

つまり、 $\mu_0(E)$  と  $\mu_0(E_0)$  を計算することで  $\chi(E)$  を求めることができる。ここで、

$\mu_0(E)$ : 単純な原子のX線吸収スペクトル

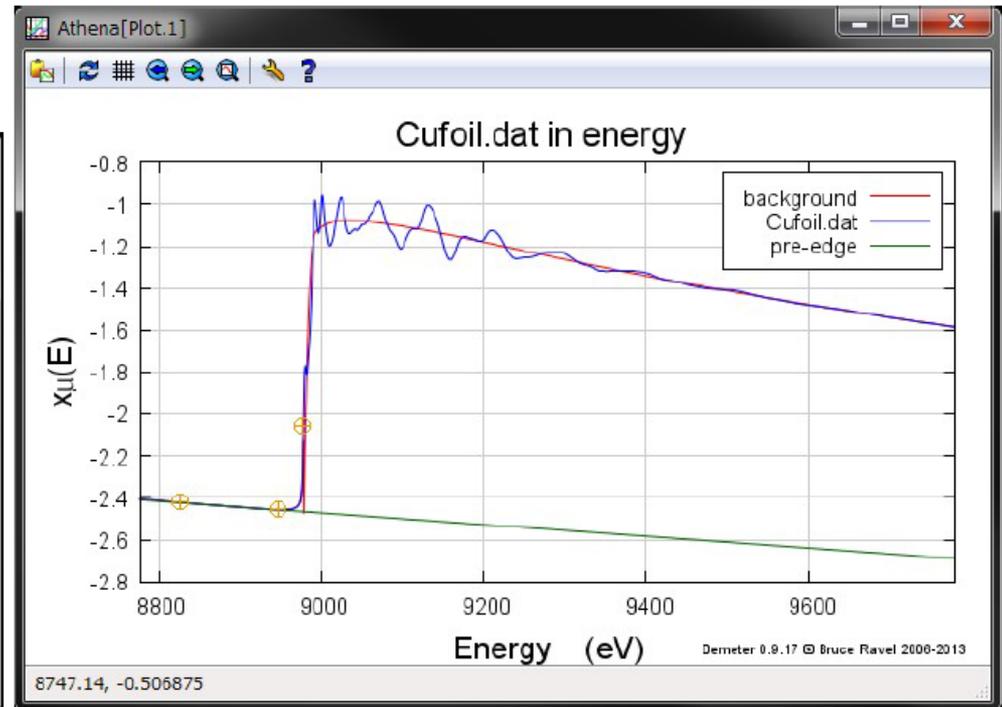
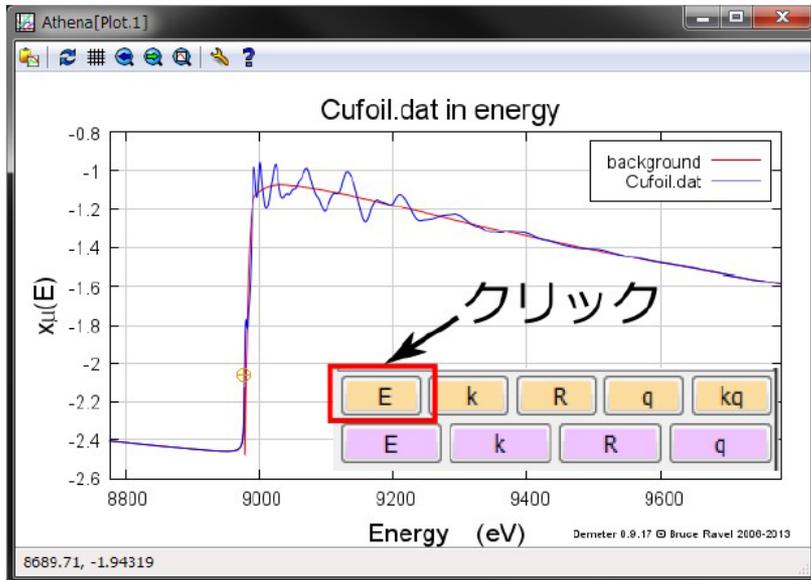
$\mu_0(E_0)$ : 吸収端のジャンプ

であるため、これらを正しく求めるために、まずバックグラウンドを差し引く。

# 1.3 バックグラウンド処理(4)

## プレッジの差し引き方(1)

- 操作**
1. エネルギーに対して XAFS 1. スペクトルをプロットするには10ページのオレンジ色の E ボタンをクリックし、左図を出し、このオレンジ色のEボタンをもう一度クリックする。
  2. エネルギーに対する XAFS を表示している状態で、メインウィンドウ右下の pre-edge line のチェックボックスを入れる。デフォルトで右図の緑色のラインが表示される。



## 1.3 バックグラウンド処理(5)

### プレッジの差し引き方(2)

Athena でのプレッジは前述の通り「直線」で引かれるため、単にどの範囲のデータ点を利用して近似直線を引くかという Pre-edge range というパラメータしかない。既定では吸収端  $E_0$  のエネルギーからの相対値で  $-150\text{ eV}$  から  $-30\text{ eV}$  の範囲のデータ点を利用する。

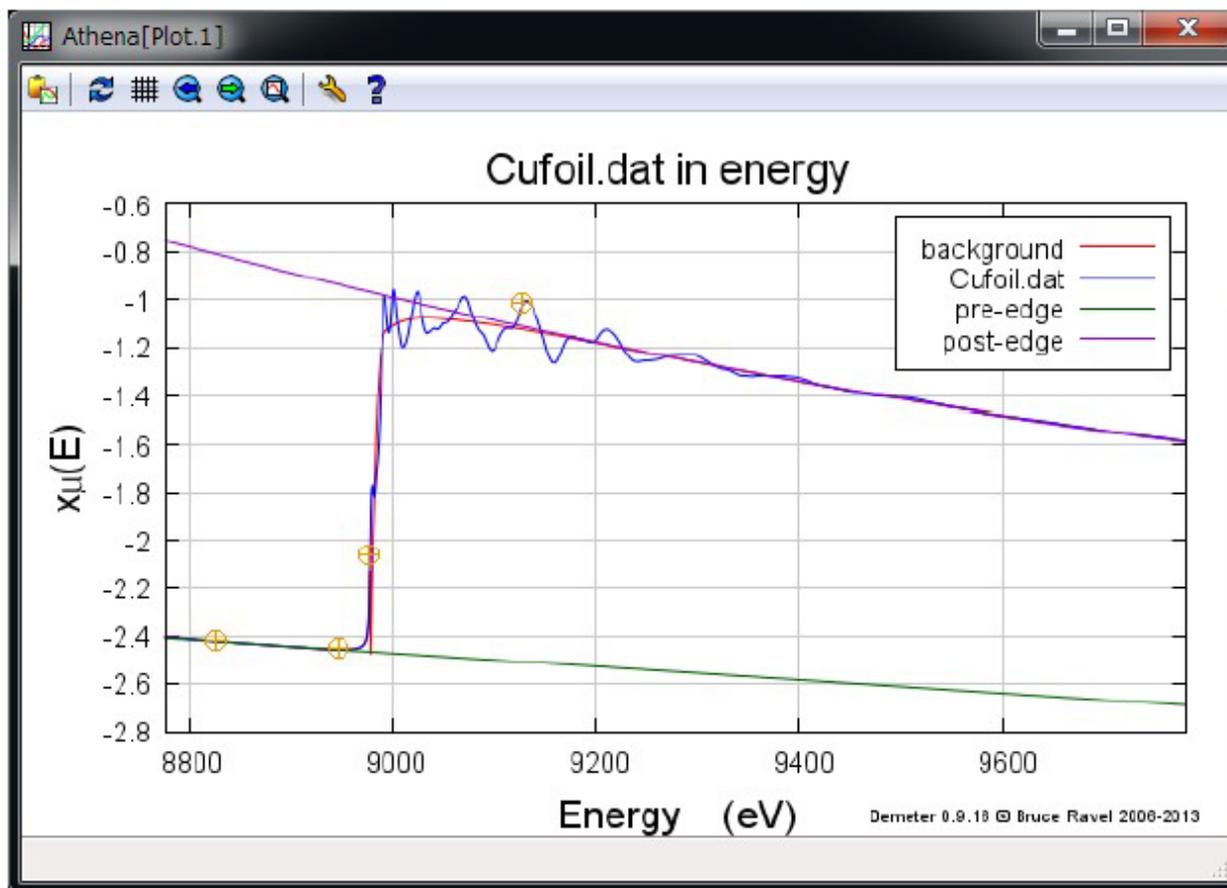
### プレッジの引き方について

透過法による測定でプレッジがうまく引けないということは、あまりない。一方で、蛍光法による測定の場合には直線で引くのが困難な場合がある。基本的な目安としては、吸収端前後で全体としてのスペクトルの傾きが近くなるように引くということが考えられるが、経験によるところも櫛きい。

# 1.3 バックグラウンド処理(6)

## 規格化の差し引き方(1)

**操作** エネルギーに対するXAFSを示している状態(16ページ左)で、10ページのメインウィンドウ右下のpost-edgelineのチェックボックスを入れる post-edgelineが紫色の線として表示される。



## 1.3 バックグラウンド処理(7)

### 規格化の差し引き方(2)

Athenaでのポストエッジは12ページに記述したように「多項式」で示されるため、どの範囲のデータ点を利用して近似曲線を引くかのNormalization (Post-edge) range および Normalization order という2つのパラメータが存在する。

Normalization range: 規格化を行うために使うデータの範囲(E0に対する相対値)

Normalization order: ポストエッジのバックグラウンド関数を引く際に何次の多項式を使うか?

例題としたCufoil.dat の場合は吸収端 E0 のエネルギーからの相対値で 150 eV から 1000 eV 程度の範囲のデータ点を利用する。高エネルギー側をどの範囲まで取るかはデータに応じて適当な値を設定する。

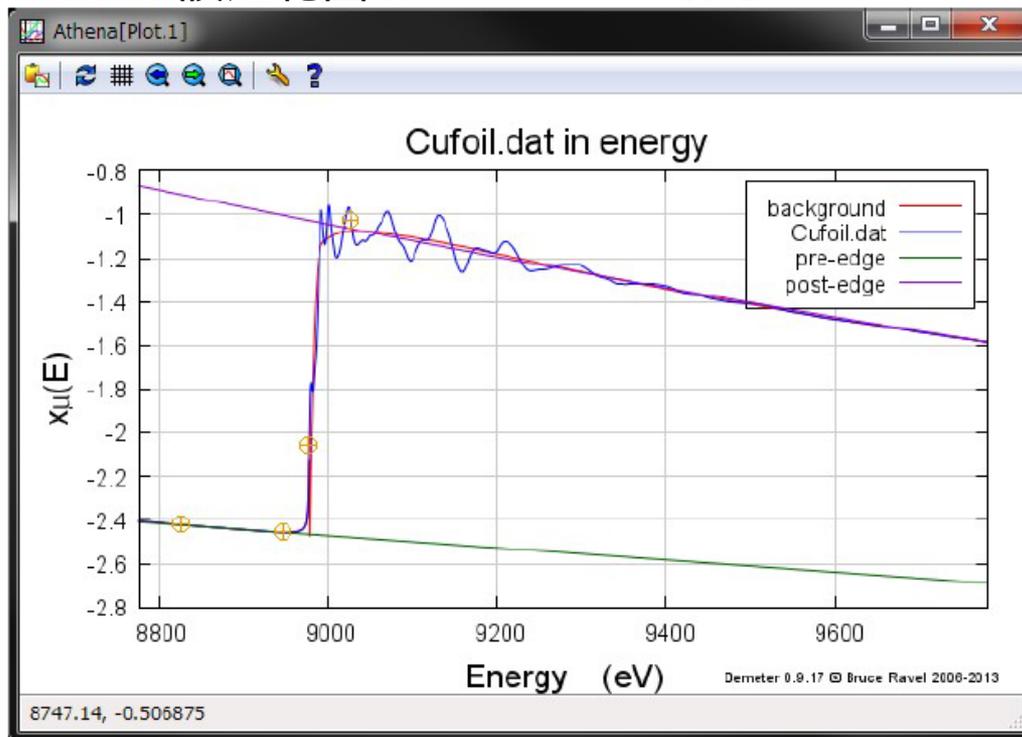
この時、吸収端付近で紫色の線が振動の中心から外れている。このため、例えば、低エネルギー側の範囲を 50 eV、高エネルギー側の範囲を 1100 eV に変更すると、ポストエッジの線が20ページに示すように振動の中心を通るようになる。

- 操作**
1. Background removal and normalization parameters の欄の Normalization range 1. を 50 to 1100 に変更する。
  2. エネルギーに対して XAFS スペクトルをプロットするためにオレンジ色の E ボタンをクリックする。

# 1.3 バックグラウンド処理(8)

## 規格化の差し引き方(3)

ポストエッジの設定範囲を150 ~ 1000eVから50 ~ 1100eVに変更後



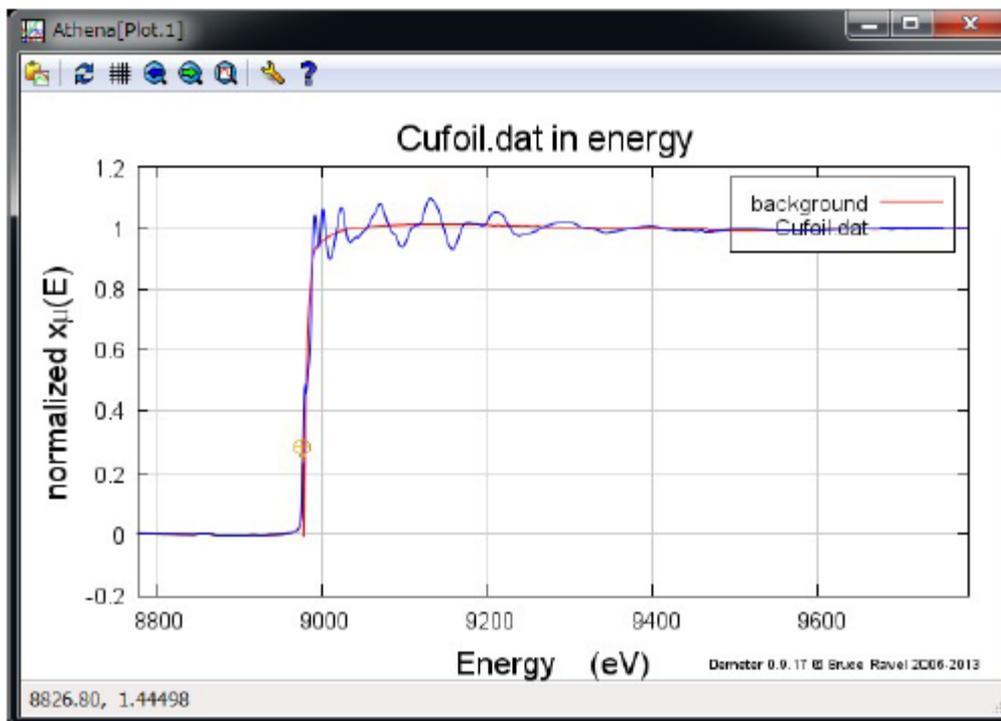
ポストエッジの引き方の目安: ポストエッジについては、できるだけEXAFS振動の「真ん中」を通るように引く必要がある。但し、吸収端直後 +50eV 程度の振動の中心まで通るようにする必要はない。+50 eV 程度までの範囲では、隣接原子の散乱による効果以外に他の複雑な効果(「多重散乱」)も入っているため、通常 EXAFS 解析には利用しないためである。吸収端直後の振動の中心よりも、+50eVより高エネルギー側について振動の中心を通すことを優先する。

# 1.3 バックグラウンド処理(9)

## 規格化された XAFS スペクトルの表示(1)

メインウィンドウの“E”をクリックし、エネルギーに対するXAFSを表示している状態で、メインウィンドウ右下のNormalizedにチェックを入れると、ここまでで決定したプレエッジとポストエッジを用いて規格化されたXAFSスペクトルがプロットウィンドウに表示される。

- 操作**
1. エネルギーに対するXAFSスペクトルをプロットするためにオレンジ色のEボタンをクリックする。
  2. XAFSを表示している状態で、Normalizedのチェックボックスにチェックを入れる。

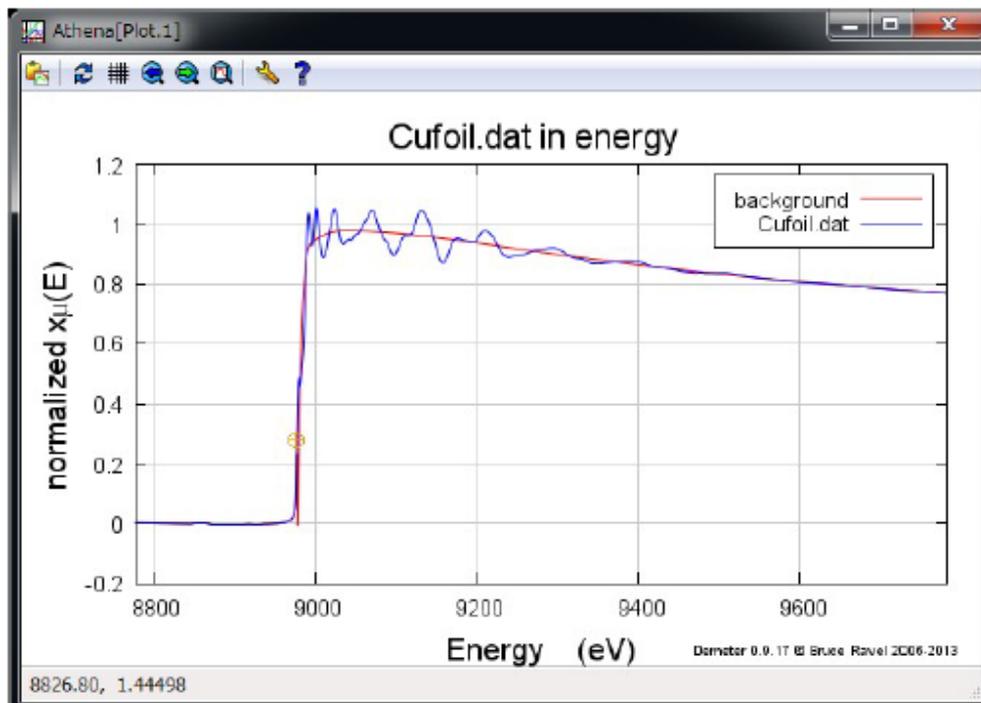


規格化(およびフラット化)  
された XAFS スペクトル

# 1.3 バックグラウンド処理(10)

## 規格化された XAFS スペクトルの表 (2)

21ページに表示された規格化された XAFS スペクトルは、「真の」規格化された XAFS スペクトルとは異なる。通常は、メインウィンドウの Background removal and normalization parameters 欄にある "Flatten normalized data" にチェックが入っている。この場合、Athena は吸収端より高エネルギー側について、規格化されたスペクトルからプレエッジの線とポストエッジの線の差分を差し引いたスペクトルを表示する。結果として XAFS スペクトルの吸収が 1 になるようにフラット化される。但し、"Flatten normalized data" は EXAFS スペクトルの抽出には影響を与えず、エネルギーに対して XAFS をプロットする時だけに適用される。"Flatten normalized data" のチェックを外すと、「真の」規格化された XAFS スペクトルがプロットされる。



### 操作

1. メインウィンドウの Background removal and normalization parameters の欄にある "Flatten normalized data" のチェックボックスのチェックを外す。
2. エネルギーに対して XAFS スペクトルをプロットするためにオレンジ色の E ボタンをクリックする。

「真の」規格化された XAFS スペクトル

## 1.3 バックグラウンド処理(11)

### RbKg(1)

ここまでは、「プレエッジ」と「ポストエッジ」を引くことにより、スペクトルの前処理を行った。次にEXAFS 振動を抽出するために「バックグラウンド」=「単純な原子のX線吸収スペクトルの近似曲線」=「スプライン曲線」を引く。

**Rbkg:** バックグラウンド関数を引くときに使うパラメータの1つ。

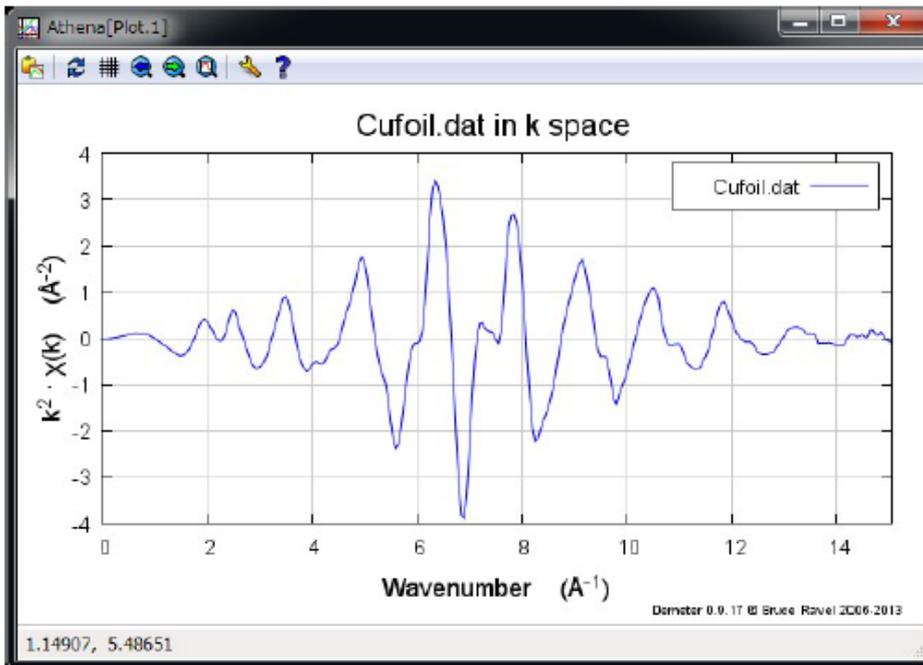
- ・Rbkg の値を変えることで、「フーリエ変換後の EXAFS スペクトルの横軸について設定値以下のピークが極力小さくなるように」バックグラウンドを引くことができる。
- ・Rbkg の挙動についてはバックグラウンド関数を引く際に利用される Autobk のアルゴリズムを理解する必要があるが、ここでは Rbkg の値を実際に大きく変えてみることで、バックグラウンド関数への影響についておおよそを理解する。
- ・Rbkg の影響は、EXAFS スペクトル、特にフーリエ変換後の EXAFS スペクトルを見ることでよく理解される。このため、先ずEXAFS 振動  $\chi(k)$ 、およびフーリエ変換後の EXAFS スペクトルのプロットの方法について、簡単に説明する。

# 1.3 バックグラウンド処理(12)

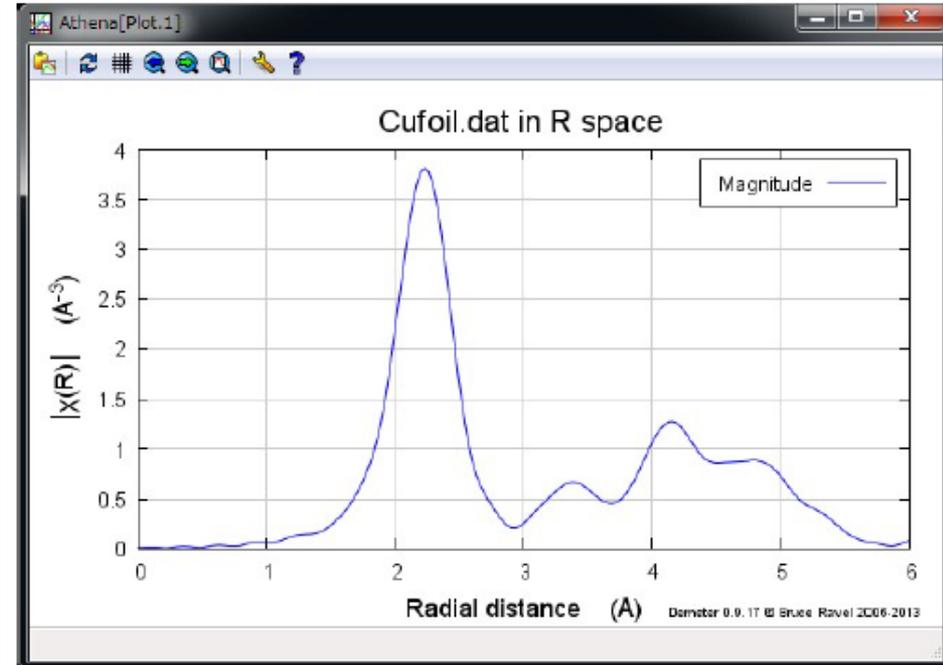
RbKg(2)



- 操作**
- 1.メインウィンドウのオレンジ色のkボタンをクリックしてEXAFS振動  $\chi(E)$  をプロットする。
  - 2.メインウィンドウのRボタンをクリックしてフーリエ変換後のEXAFSスペクトルをプロットする。



波数に対するEXAFS振動



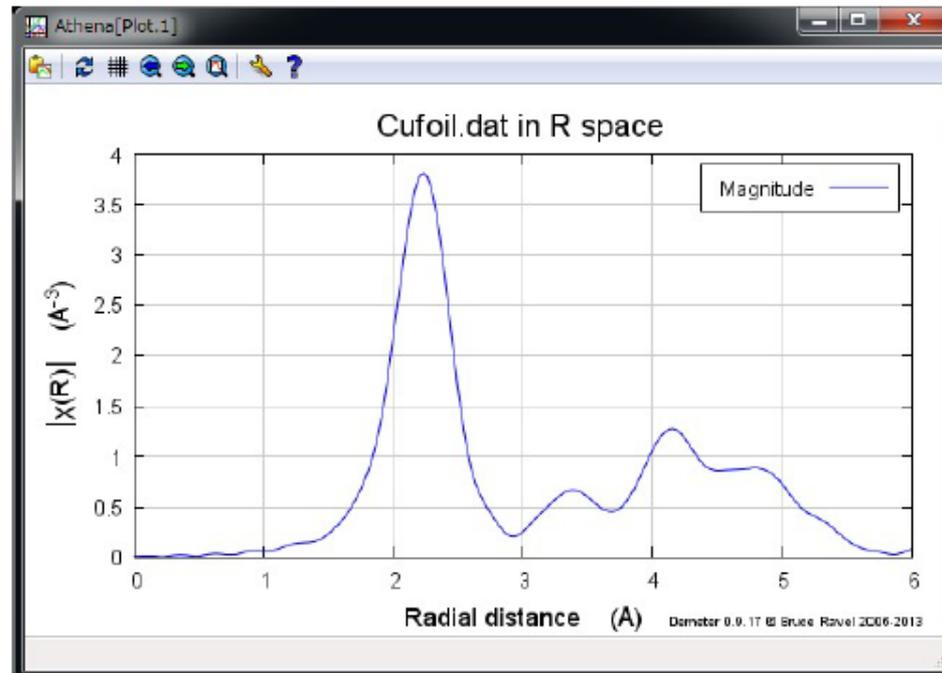
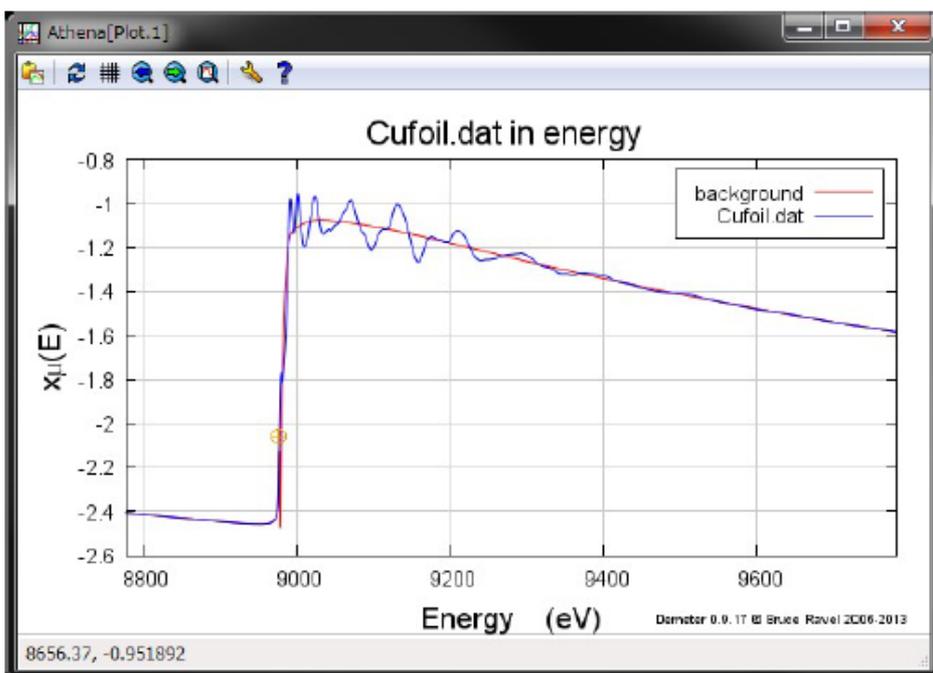
EXAFS振動をフーリエ変換することで、原子間距離に応じたピークを示すスペクトル(動径分布関数)を得ることができる。

# 1.3 バックグラウンド処理(13)

## RbKg(3) 効果の確認 [1]

Rbkg を変化させることで、「フーリエ変換後のEXAFSスペクトルのピークが適正になるように」バックグラウンドを引くことができる。例えば、Rbkg = 1の時には左図赤線のバックグラウンドで、右図のEXAFS スペクトルが得られる。

- 操作**
1. エネルギーに対してXAFSスペクトルをプロットするためにオレンジ色のE ボタンをクリックする。
  2. エネルギーに対するXAFS を表示している状態で、メインウィンドウ右下のpre-edge、post-edgd、Normalizedのチェックボックスのチェックを外す。
  3. フーリエ変換後の EXAFS スペクトルを表示するためにオレンジ色の R ボタンをクリックする。



Rbkg = 1の時の各プロット

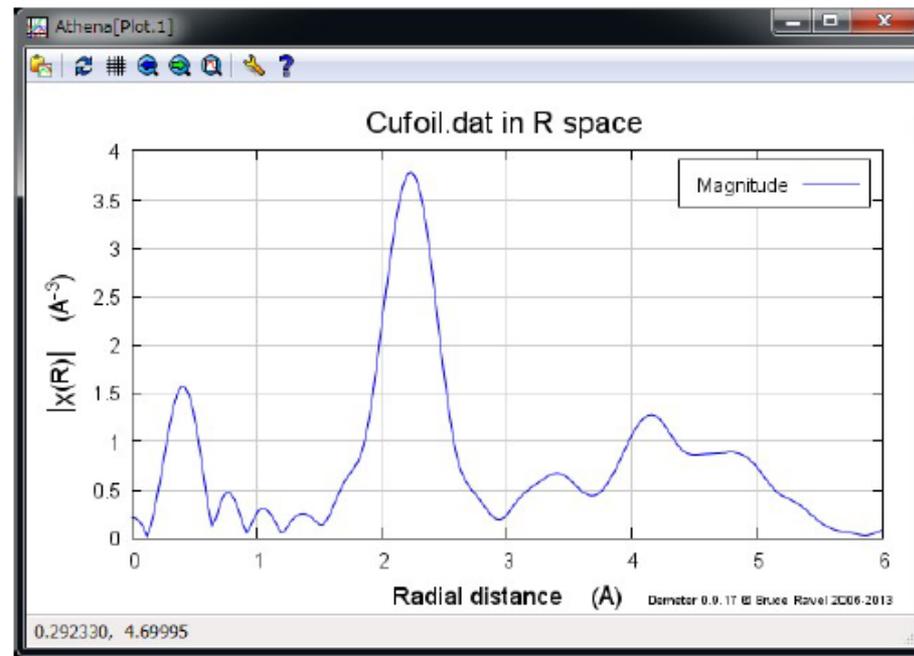
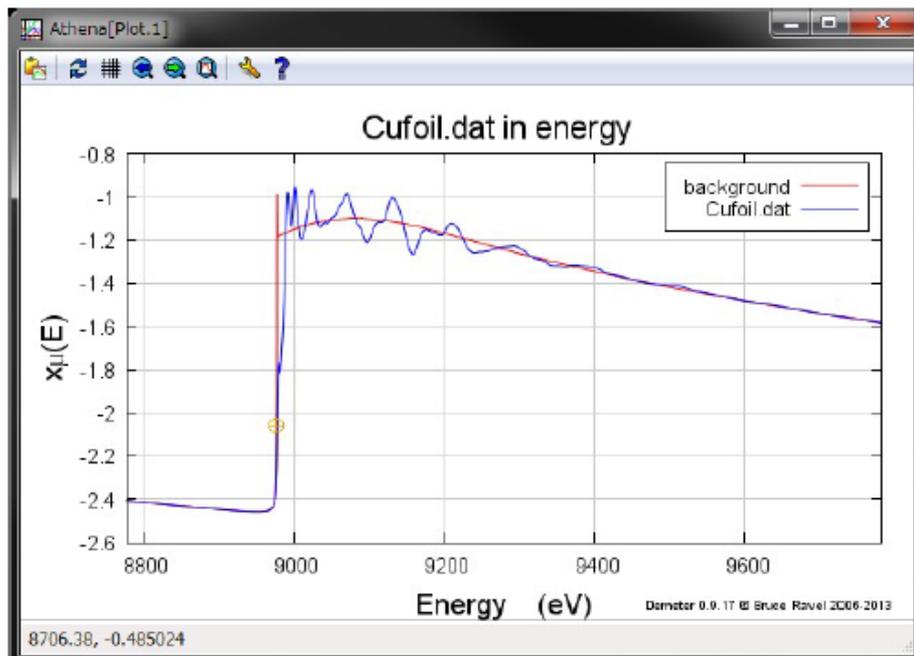
# 1.3 バックグラウンド処理(14)

## Rbkg(4) 効果の確認 [2]

Rbkg =0.2と変更すると、左図赤線のバックグラウンドで、右図のEXAFS スペクトルとなる。

- 操作**
1. メインウィンドウのBackground removal and normalization parametersの欄にあるRbkgを1 0.2とする。
  2. エネルギーに対するXAFSスペクトルをプロットするため、オレンジ色のE ボタンをクリックする。
  3. フーリエ変換後の EXAFS スペクトルを表示するため、オレンジ色のR ボタンをクリックする。

フーリエ変換後のEXAFSスペクトルを表示すると、右図の0.2-0.6 辺りに**明らかにおかしなピーク**が出現する。X線を吸収した原子から0.6 以内の原子間距離では他の原子が存在することができないからである。



Rbkg =0.2の時の各プロット

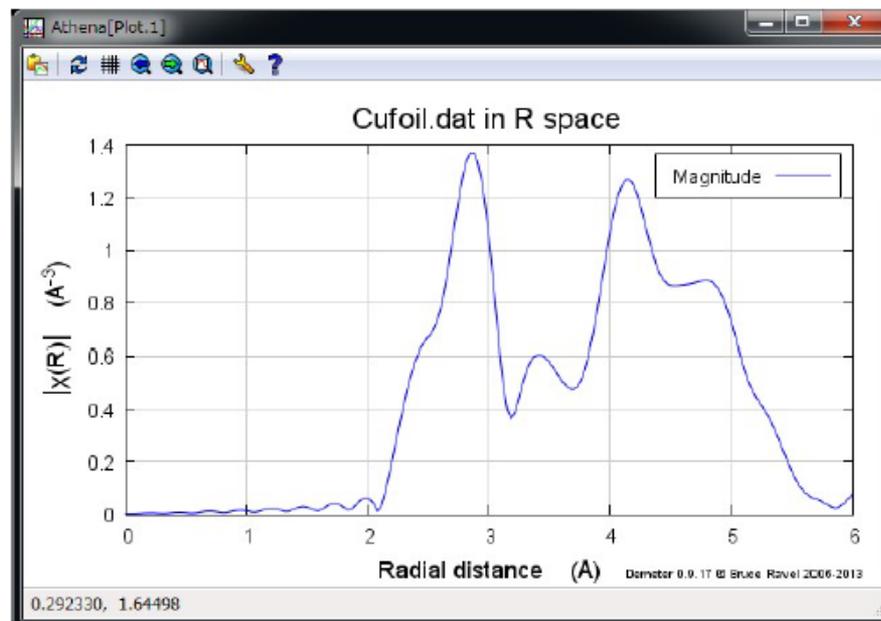
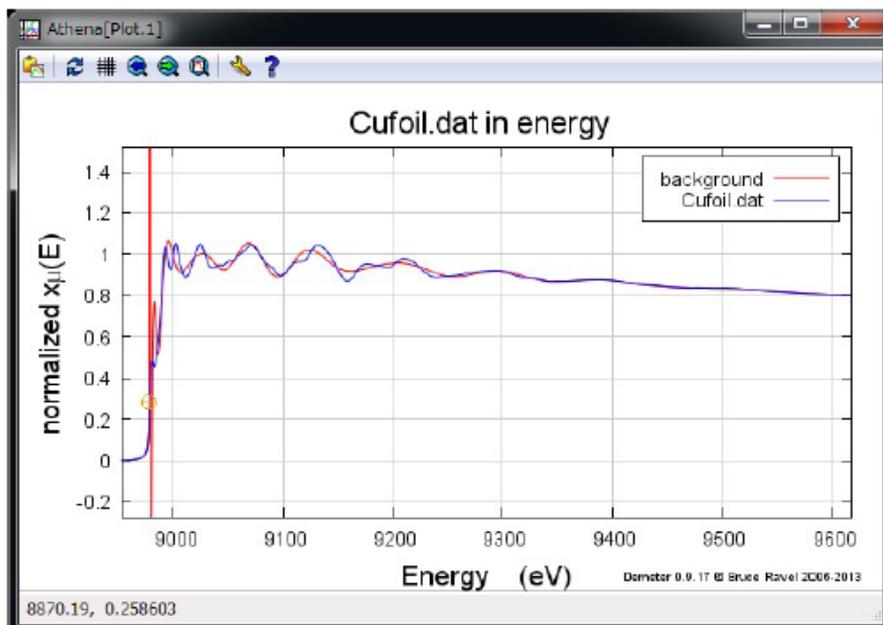
# 1.3 バックグラウンド処理(15)

## RbKg(5) 効果の確認 [3]

Rbkg =3と変更すると、左図赤線のバックグラウンドで、右図のEXAFS スペクトルとなる。

- 操作**
1. メインウィンドウのBackground removal and normalization parametersの欄にあるRbkgを0.2 3.0とする。
  2. E ボタンとR ボタンをそれぞれクリックする。

Rbkgの値を大きくすると、バックグラウンド関数が元のスペクトルへの追従性が強くなる。フーリエ変換後のEXAFSスペクトルではRbkg=1.0の時とは明らかに異なってくる。即ち、Rbkgはバックグラウンド関数(スプライン関数)の「自由度(元のスペクトルへの追従度)」を決め、基本的には「フーリエ変換後のEXAFSスペクトルの横軸について設定値以下のピークが極力小さくなるように」バックグラウンドを引く役目をしている。



Rbkg =3の時の各プロット

## 1.3 バックグラウンド処理(16)

### RbKg(6) 値に対する考え方(まとめ)

- (1) Rbkg の値は、「フーリエ変換後の EXAFS スペクトルの横軸について設定値以下のピークが極力際さくするように」バックグラウンドを引くことを意味する。
- (2) Rbkg の値は、通常1.0、場合によって 1.0 ~ 1.3 程度への変更が一般的である。  
Rbkgを変える状況は、例えばフーリエ変換後の EXAFS スペクトルで、通常は散乱原子が存在することはあり得ない1Å以下にピーク(ゴーストピーク)が生じる場合である。フーリエ変換後の EXAFS スペクトルの短い距離にピークが出現することは、EXAFS 振動に長周期波が混ざっていることに対応する。Rbkg の値を大きくすると、元のスペクトルに追従しやすくなって、長周期のノイズの成分に追従し、結果的に「ゴーストピーク」を消す効果がある。
- (3) Rbkg の値を1.0から大きく変える必要があるようなスペクトルは基本的に測定し直しす方が良い。

## 1.3 バックグラウンド処理(17)

### Spline clamp

Spline clamp では“low”と“high”の項目について、“none”、“slight”、“weak”、“medium”、“strong”、“rigid”の6通りの選択肢がある。“low”と“high”はそれぞれバックグラウンド関数の始点付近と終点付近を示し、大まかには「バックグラウンド関数をどの程度スペクトルに追従させるか」に対応する。

### k-weight

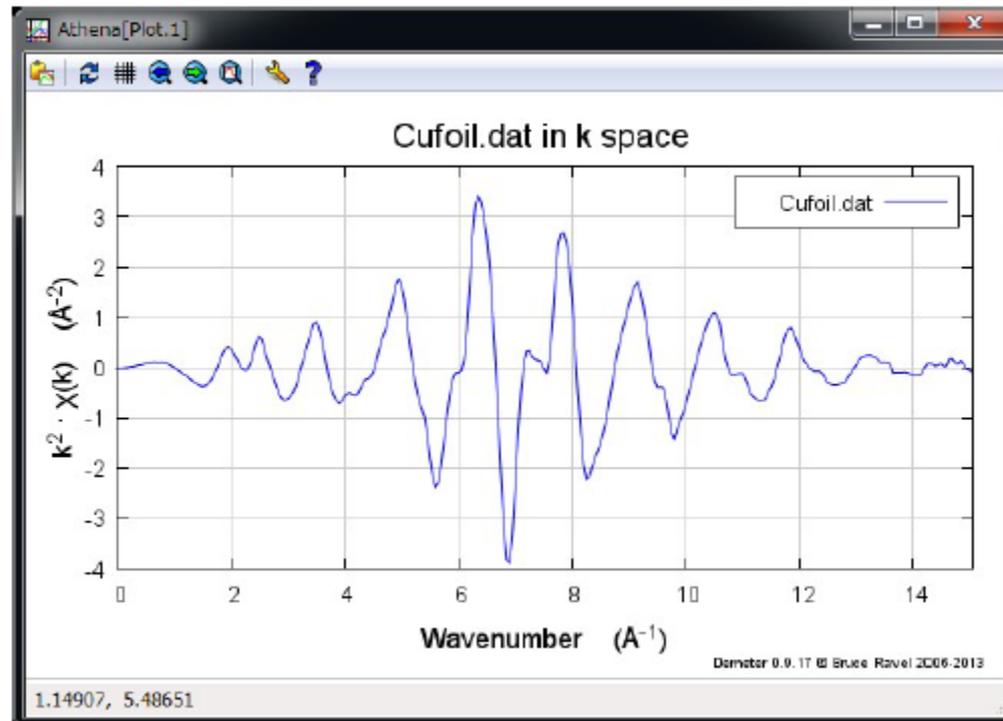
k-weight は、「バックグラウンドを引く際に、吸収端近くか高エネルギー側か、どこを重視するか」のパラメータである。すなわち、k-weight が 2 や 3 の場合は、高エネルギー側を重視する(できるだけ高エネルギー側までうまく EXAFS 振動を抽出したい)のに対して、k-weight が 1 の場合は、吸収端近くを重視する。後者は、高エネルギーの EXAFS 振動を抽出するのが困難な時、せめて吸収端近くで EXAFS 振動を抽出したいとの意図である。

ほとんどの場合、k-weight は既定値の 2 で問題になることはない。この値でうまくバックグラウンド関数を引くことができない時は、スペクトルを再測定する方がよい。ただし、高エネルギー側の振動がノイズに埋もれてしまっている場合には、k-weight を 1 にすることで上手くバックグラウンド関数を引けることがある。いずれにせよ、このような場合では得られた EXAFS 振動の解釈には注意を要する。

# 1.4 EXAFS振動の抽出(1)

29ページまでで、Background removal and normalization parameters にあるパラメータを最適化して、スペクトルの前処理と EXAFS 振動を抽出するパラメータを決定した。結果として抽出された EXAFS 振動を以下の操作で表示する。

**操作** 波数に対してEXAFS振動をプロットするためにオレンジ色のk ボタンをクリックする。



波数kに対するCu foilの EXAFS 振動

# 1.4 EXAFS振動の抽出(2)

## EXAFS振動のフーリエ変換

EXAFS 振動をフーリエ変換することで、原子間距離に応じたピークを示すスペクトルを得ることができる。Forward Fourier transform parameters の欄では、EXAFS 振動をフーリエ変換する際のパラメータを設定する。

## フーリエ変換のパラメータとその決め方

k-range: 窓関数の範囲

dk: 窓関数の傾きの範囲

window: 窓関数の種類 (Hanningでよい)

arbitrary k-weight: k-weight を 0, 1, 2, 3 以外の任意の値にしたい場合に入力

phase correction: 位相シフトの補正の有無

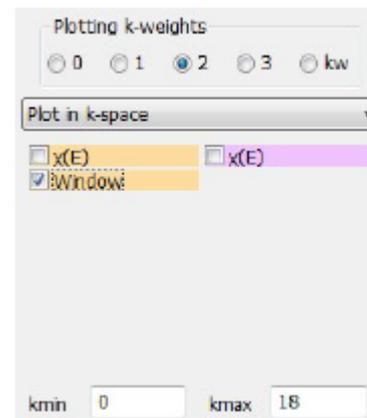
EXAFS 振動から原子間距離に相当するところにピークを持つスペクトル(動径分布)を得るためにフーリエ変換を行う。

1. 窓関数を決定する(窓関数に関するパラメータは k-range, dk, window )。
2. フーリエ変換する(プロット用の R ボタンをクリックする)。

フーリエ変換の範囲を機械的にあるいは数学的に決める手法はない。基本的には EXAFS 振動を自分で判断し、ノイズの影響が少ないと思われる範囲を設定する。(後述の例を参照)



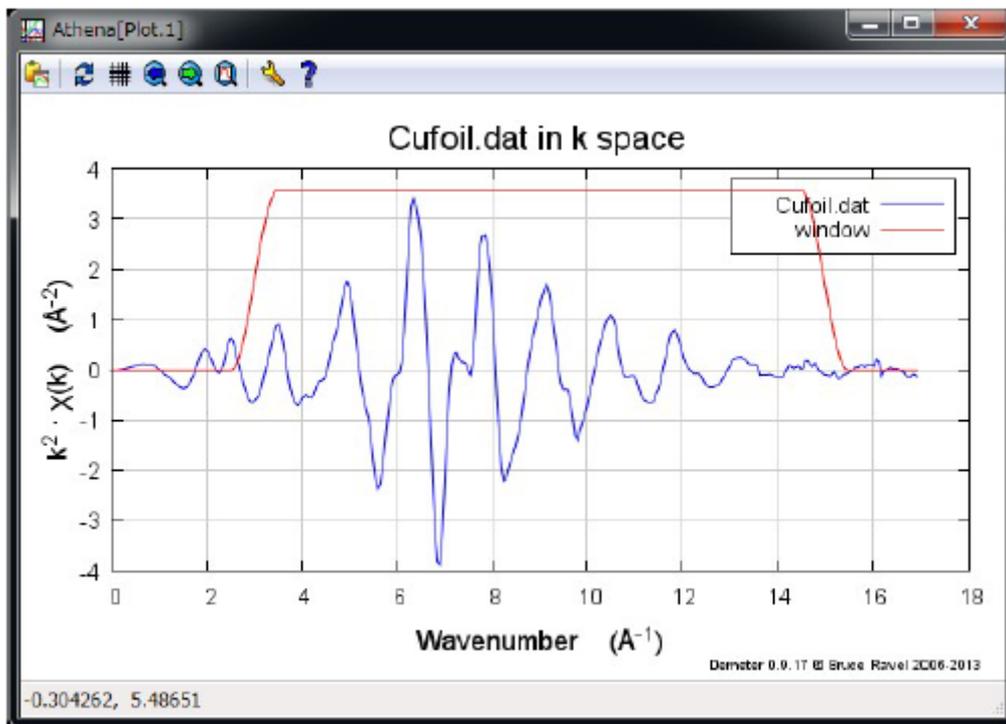
フーリエ変換パラメータ



EXAFSプロットオプション  
(メインウィンドウ右下)

# 1.4 EXAFS振動の抽出(3)

- 操作**
1. 波数に対して EXAFS 振動をプロットするためにオレンジ色の k ボタンをクリックする。
  2. EXAFS プロットオプションの kmax を 18 に変更する
  3. EXAFS プロットオプションの Window にチェックを入れる
  4. EXAFS プロットオプションの Plotting k-weights を 3 に変更する



## 窓関数の意味

抽出されたEXAFS振動について、低エネルギー側の  $0 \sim 2 \text{ \AA}^{-1}$  付近は、エネルギーでは  $0\text{-}35\text{ eV}$  程度である。これは一般に複雑な過程である「多重散乱」の影響を受ける XANES 領域に当たる。また高エネルギー側では種々のノイズの影響により真の EXAFS 振動とは異なる振動が含まれてしまう。EXAFS 解析では、これらの影響を避けるため低エネルギー側およびノイズが含まれる領域を除いた部分だけをフーリエ変換することが必要であり、窓関数はこのために使用する。窓関数には Hanning 関数が用いられることが多い。

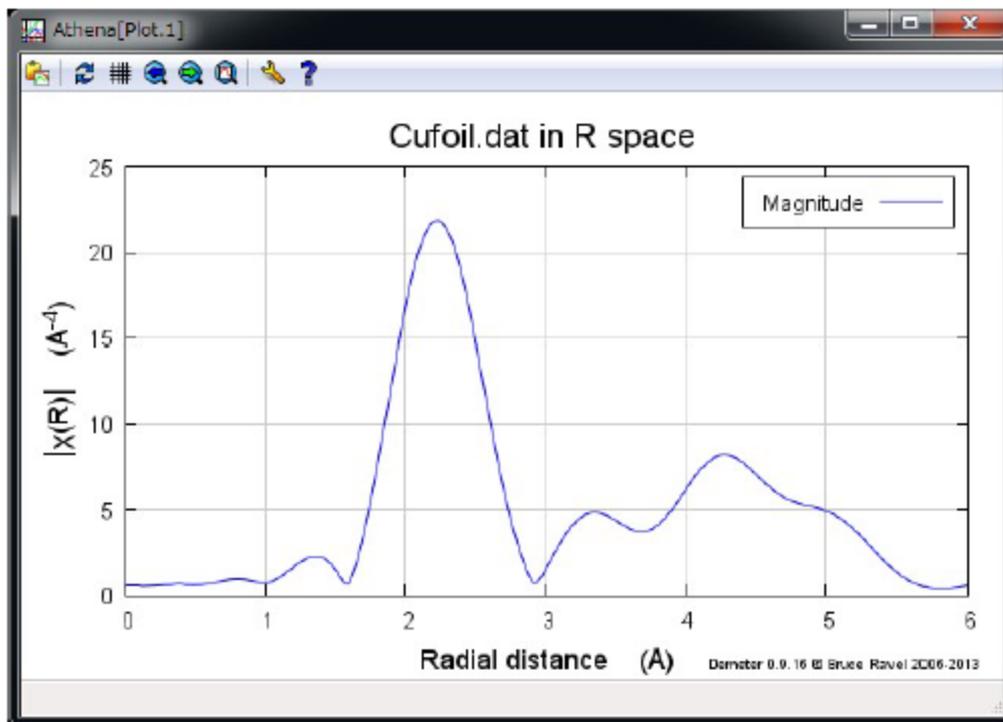
窓関数とともにプロットされた EXAFS 振動

# 1.4 EXAFS振動の抽出(4)

## フーリエ変換パラメータの影響(1) k-range

フーリエ変換パラメータは、フーリエ変換後のEXAFSスペクトルに影響を与える。各パラメータを変更して、フーリエ変換後のEXAFSスペクトルを表示することでその影響について理解する。

- 操作**
1. k-range を 3 to 14.995 から 3 to 10 に変更する。
  2. フーリエ変換後のEXAFSスペクトルを表示するためにオレンジ色のRボタンをクリック。



k-range : 3 to 10

k-range を狭くすると、全体的にピークの半値幅が広がってぼやけたスペクトルになる。

k-rangeは、低エネルギー側は3、高エネルギー側は「ノイズの影響が小さいと思われる範囲で」できるだけ大きな値を取るべきである。文献がある場合には参考にするとよい。

# 1.4 EXAFS振動の抽出(5)

## フーリエ変換パラメータの影響(2) dk

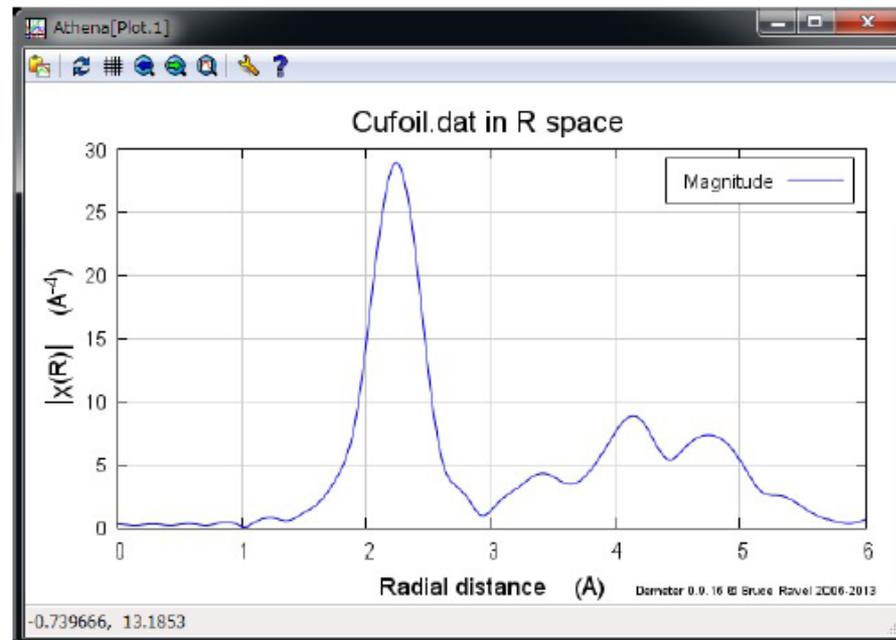
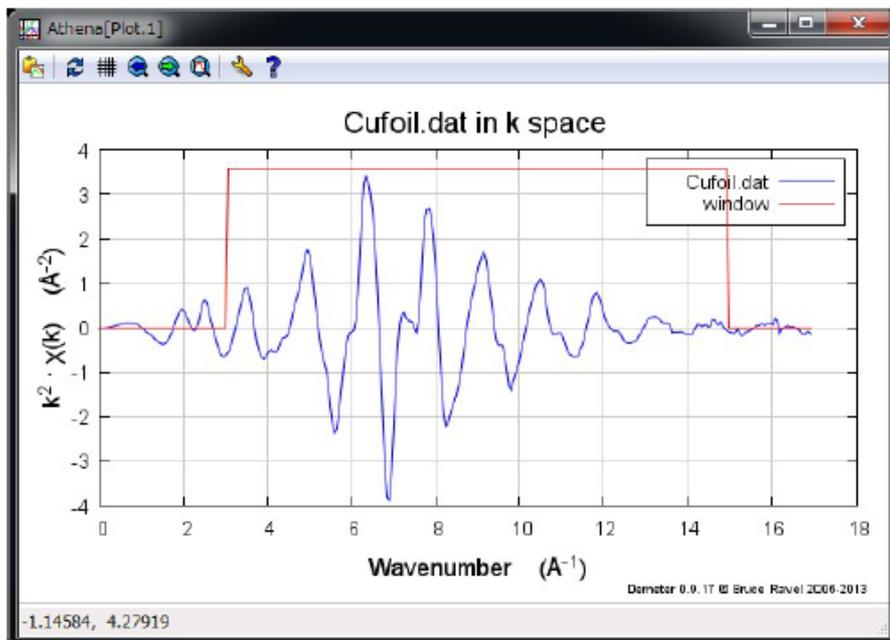
- 操作**
1. dk を 1 から 0 に変更する。
  2. 波数に対する EXAFS 振動を表示するためにオレンジ色の k ボタンをクリック(左図)。
  3. フーリエ変換後の EXAFS スペクトルを表示するためにオレンジ色の R ボタンをクリック(右図)。

dk=0では、赤線で示されている Hanning 窓関数の傾きのある範囲が無くなる。

dk は、元の取得データが良い場合には、フーリエ変換後の EXAFS スペクトルにあまり影響しない。

dk は、基本的には既定値の 1 で問題ない。

比較したい一連のスペクトルについては、同じパラメータを用いる。



## 解析演習編第1部 / 全3部

資料作成・監修

京都大学 触媒・電池元素戦略研究拠点 朝倉博行 助教

Nanotech CUPAL KEK 事務局

2018年4月10日作成