

# ArtemisとFEFF(Ver.6)を 利用したカーブフィッティング

---

JASRI 内山 智貴

【注意事項】 全角文字は避けてください！

コンピュータのアカウント名に全角の文字（例：内山、ウチヤマ）が入っているとAthenaからのデータインポートやフィッティングが実行できない可能性があります。OSのバージョンによっては、コンピュータ名が全角文字でもNGです。

\*Artemisは C:¥Users¥アカウント名¥Desktop のパスを経由して各フォルダにアクセスするようです。

その場合は、半角の名称で別のアカウントを作ってください。

データを格納するフォルダも半角の名称で作ってください。

Artemisには未知のバグが多数存在するため、こまめに保存することをおすすめします。

1. EXAFS解析の流れ
2. Artemisを使用した解析  
構造モデルの作成  
理論計算結果の比較  
カーブフィッティング

## Artemis立ち上げ

- ① Athenaデータ読み込み
- ② 構造モデルの作成(Atoms)  
モデル作成に必要な情報
  - ・吸収元素の種類、吸収端
  - ・結晶構造パラメータ（空間群、座標等）
- ③ EXAFSの理論計算（FEFF）
  - ・Artemisに予め組み込まれている
- ④ フィッティングパラメータの作成
- ⑤ フィッティング実行
- ⑥ 束縛条件下でのフィッティング
- ⑦ 解析結果の保存

Athenaでデータ処理しておく！

- ・ Background、Baselineの処理
- ・  $\chi(k)$ (EXAFS振動)の抽出
- ・  $\chi(k)$ をFT-EXAFSに変換

Atoms: FEFFの実行ファイルを作成するためのプログラム  
.cif ファイルを入手しておく  
モデル作成の手間が幾分省ける

FEFF: 光電子の散乱過程と散乱強度を計算するためのプログラム

# Artemis 立ち上げの前に

Athena [XAS data processing]

File Group Energy Mark Plot Freeze Merge Monitor Help

\* GaN\_exp Save A U I GaN.txt

Main window

Current group: GaN.txt Datatype: xmu Freeze

File C:\Users\Uchiyama\Desktop\GaN\_exp.prj, 1

Element 31: Gallium Edge k Energy shift 0 Importance 1

**Normalization and background removal parameters**

E0 10368.3914 Normalization order 1 2 3

Pre-edge range -150 to -30 Flatten normalized data

Normalization range 150 to 1523 Edge step 1.069081 fix

Rbkg 1.0 k-weight 2 Spline clamps

Spline range in k 0 to 20 low None

Spline range in E 0 to 1523.993 high Strong

Standard None Energy-dependent normalization

**Forward Fourier transform parameters**

k-range 3 to 15 dk 1 window Hanning

arbitrary k-weight 0.5 phase correction

**Backward Fourier transform parameters**

R-range 1 to 3 dR 0.0 window Hanning

**Plotting parameters**

Plot multiplier 1 y-axis offset 0

E k R q kq

E k R q

Plotting k-weights

0 1 2 3 kw

Plot in R-space

Magnitude Envelope Real part Imag. part Phase Window

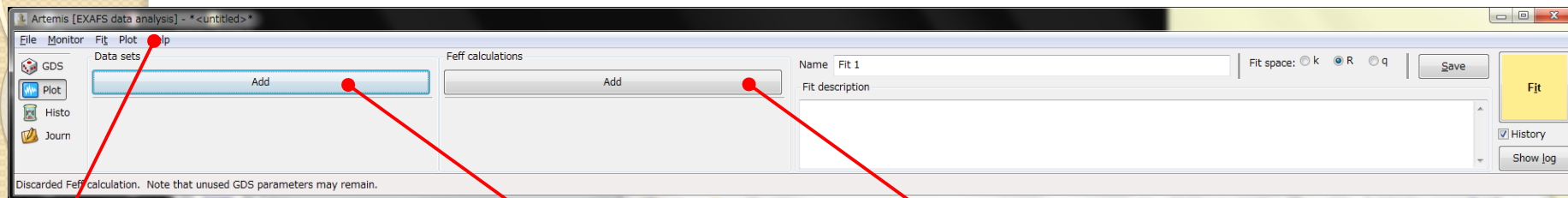
Magnitude

Rmin 0 Rmax 6

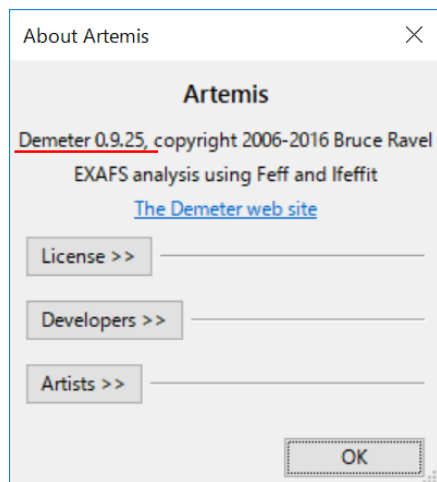
Plot the envelope of  $\chi(R)$  when plotting the current group in R-space.

以降では、この解析パラメータで  
フィッティングを実施します

# Artemis 立ち上げ



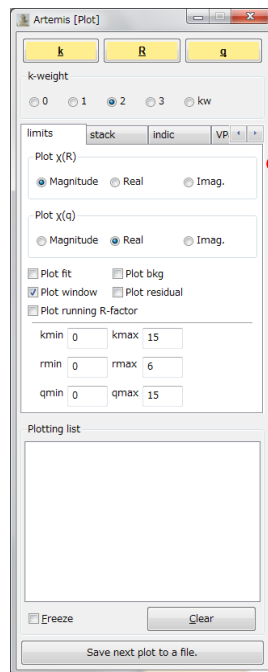
Help > About Artemis からバージョンを確認できる



\*最新版は 0.9.25 です (2017年2月3日現在)

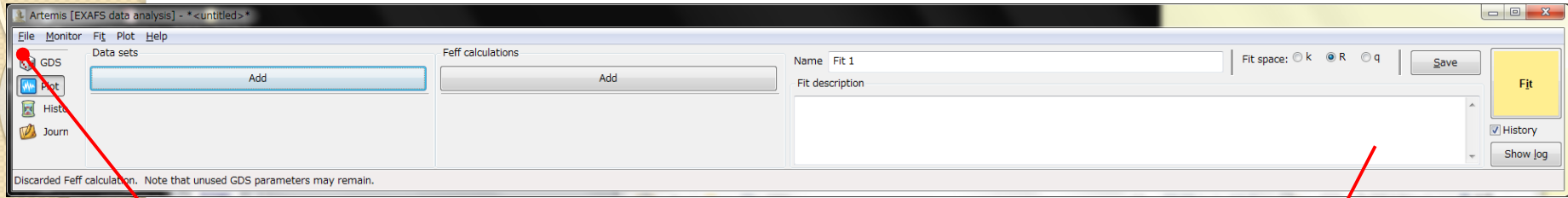
Data sets Addボタン Athenaデータ (実験データ) を読み込む

Feff calculations Addボタン .cif ファイルを読み込むのに使う (今回は使いません)



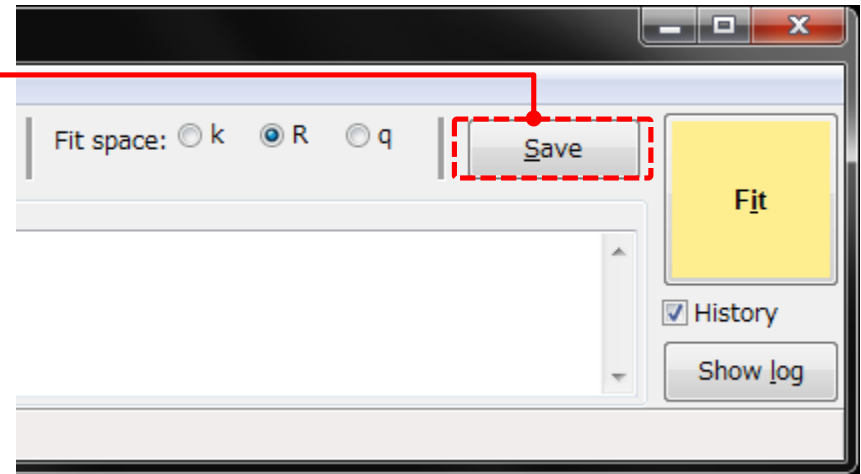
プロットオプションウィンドウ 基本的な使い方は Athena と同じ

# Artemis 保存の方法



File > Save project as

Save ボタンでも  
保存できる



①

# Athenaデータ読み込み

File > Open project or data

or

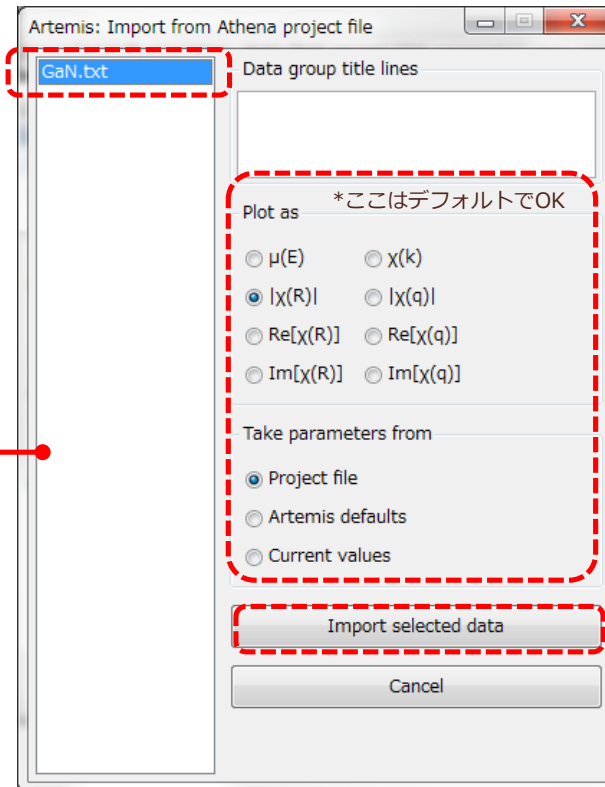
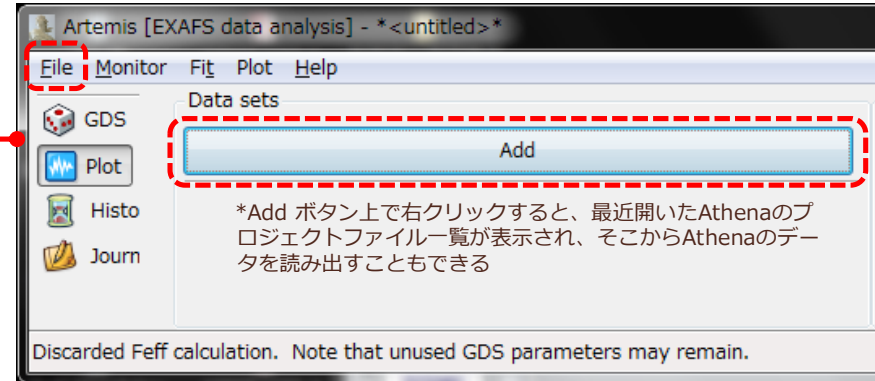
Ctrl + o

or

Data sets Add ボタン

GaN.prj を選択 > 開く

GaN.txt を選択 > Import selected data

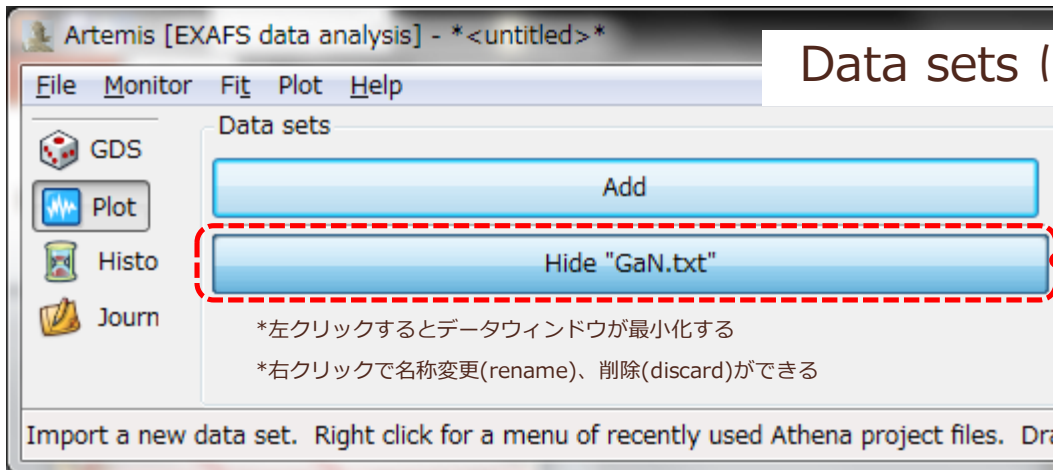
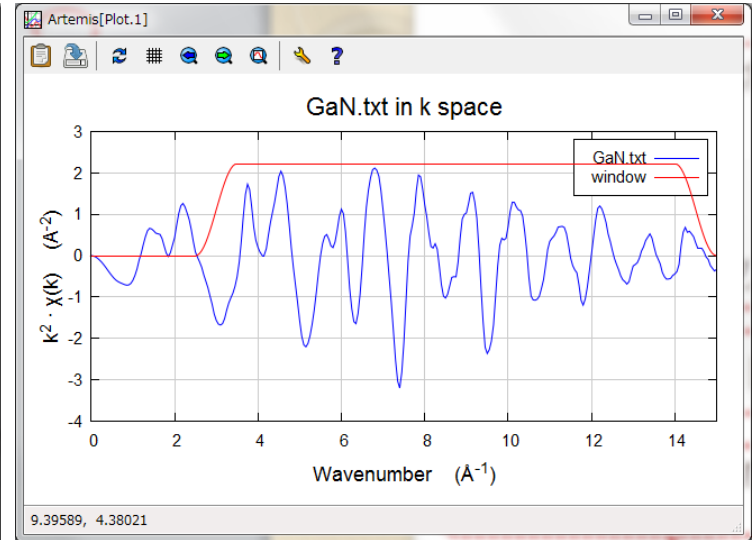
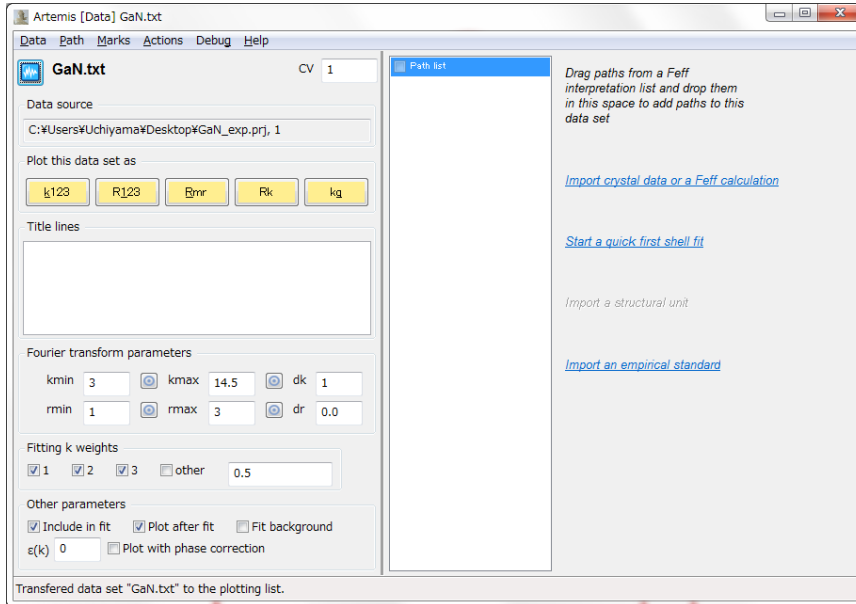




①

# Athenaデータ読み込み

データウィンドウとプロットウィンドウが新たに立ち上がる



Data sets に GaN.txt が追加される

- \*左クリックするとデータウィンドウが最小化する
- \*右クリックで名称変更(rename)、削除(discard)ができる

# ①

# Athenaデータ読み込み

## データウィンドウ詳細

k123:  $k^n \chi(k)$  ( $n = 1, 2, 3$ )をプロット  
R123: k123をフーリエ変換したものをプロット  
Rmr: Rと虚数部をプロット  
Rk: Rとkをプロット  
kq: kとq(逆フーリエ変換)をプロット

フーリエ変換する範囲

逆フーリエ変換 (フィッティング) する範囲

$k^n \chi(k)$  ( $n = 1, 2, 3$ )のうち、どのデータをフィットするかを選択 (複数選択可)

Include in fit: GaN.txtのデータをフィッティングする () or しない ()

Plot after fit: フィット後、プロットウィンドウに結果を表示する () or しない ()

Fit background:

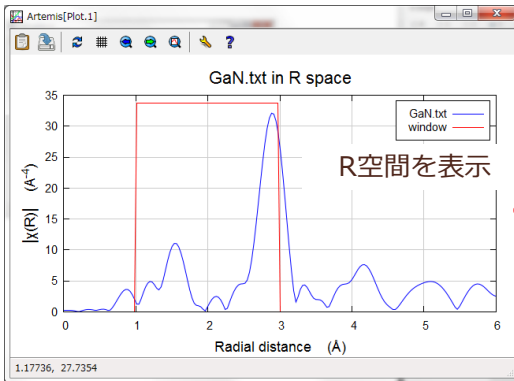
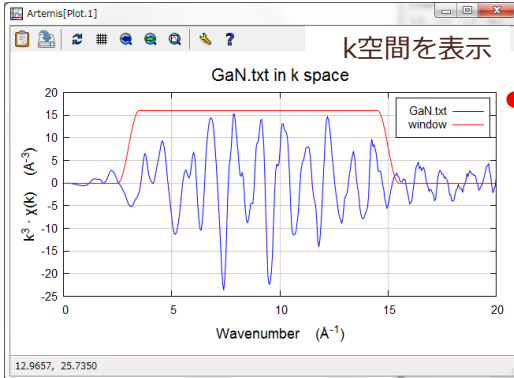
Plot with phase correction: これら2つのオプションの詳細はDemeterのWebページを参照して下さい

通常はチェックを外しておく

# ①

# Athenaデータ読み込み

## プロットウィンドウ



kの重み付けを指定

プロットするデータの種類を指定

横軸のスケールを指定

プロットするデータを選択 (複数選択可)

右クリックでdiscardを選ぶとlistから削除

Clear: Plotting listをクリアする

Save next plot to a file:

このボタンを押して、上部にあるk,R,qのボタンを押すと保存先を指定するウィンドウが出現し、該当するプロットが.txtで保存できる

①

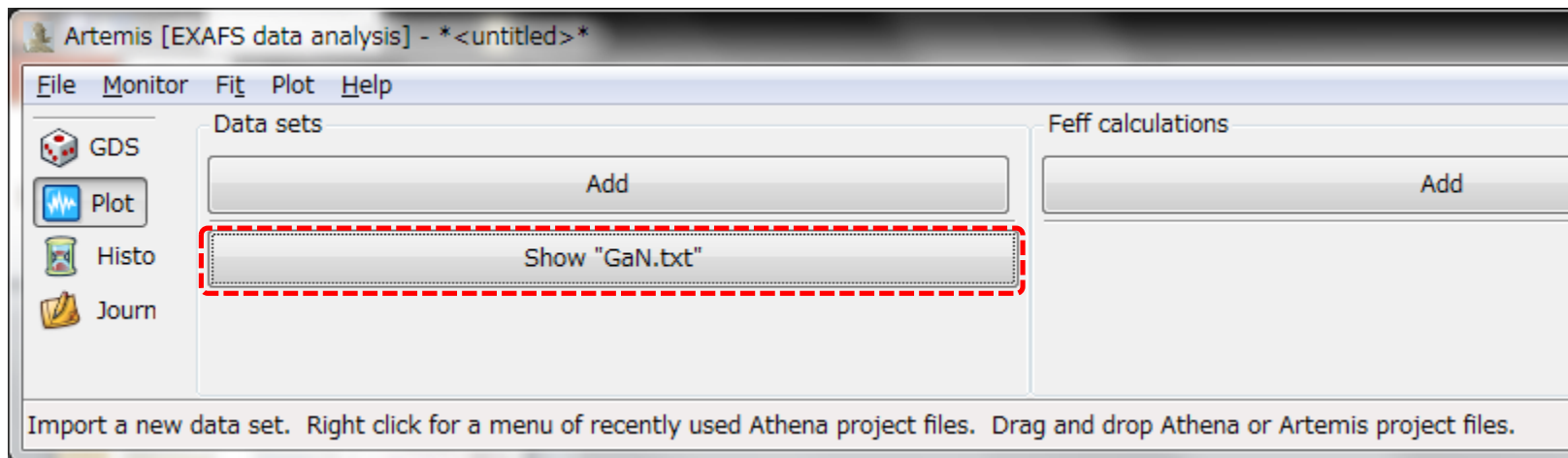
# Athenaデータ読み込み

よくやってしまう操作ミス

- (A) データウィンドウを × で消してしまった
- (B) プロットウィンドウを × で消してしまった
- (C) Plotting list からデータを消してしまった
- (D) Clear ボタンを押して、Plotting list が真っ白になった

安心してください！ 復旧できますよ！

(A) データウィンドウを × で消しても、最小化されているだけなので、Showボタンから復帰できます



# ①

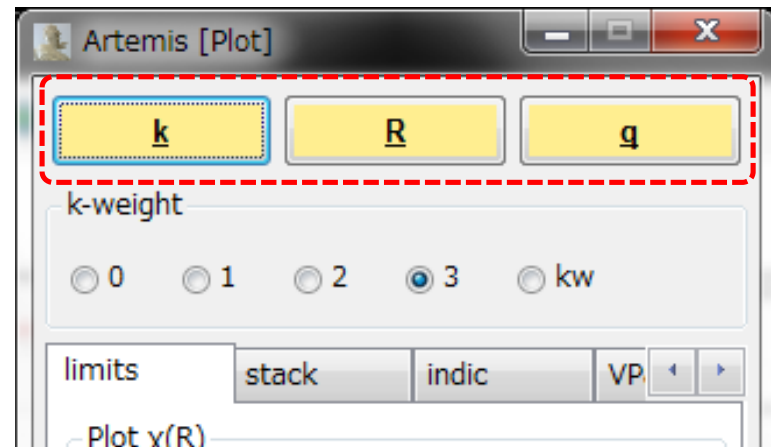
# Athenaデータ読み込み

よくやってしまう操作ミス

- (A) データウィンドウを × で消してしまった
- (B) プロットウィンドウを × で消してしまった
- (C) Plotting list からデータを消してしまった
- (D) Clear ボタンを押して、Plotting list が真っ白になった

安心してください！ 復旧できますよ！

(B) プロットオプションウィンドウのk, R, qのいずれかを押しとプロットウィンドウが復活します



①

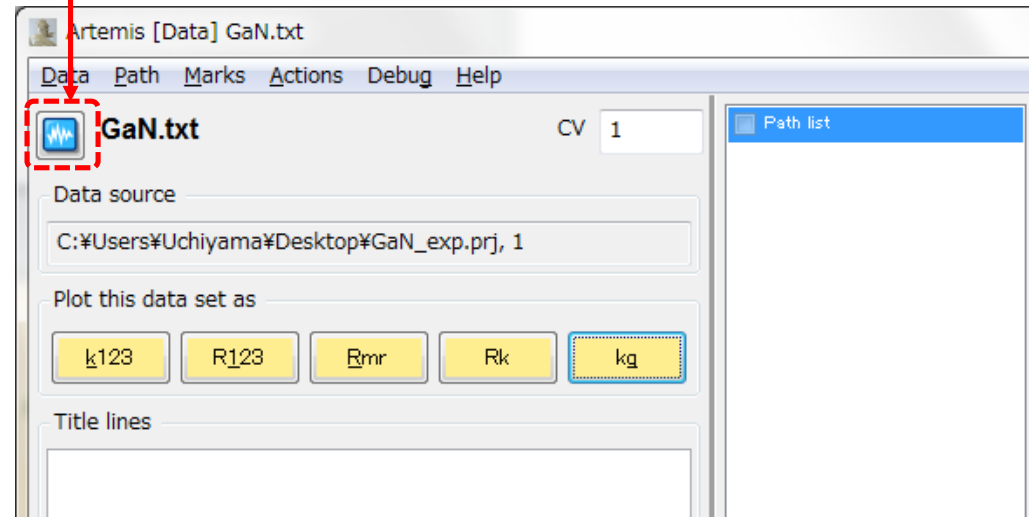
# Athenaデータ読み込み

よくやってしまう操作ミス

- (A) データウィンドウを × で消してしまった
- (B) プロットウィンドウを × で消してしまった
- (C) Plotting list からデータを消してしまった
- (D) Clear ボタンを押して、Plotting list が真っ白になった

安心してください！ 復旧できますよ！

(C,D) データウィンドウのこのボタンを押すと、該当するデータが Plotting listに追加されます



## Artemis立ち上げ

- ① Athenaデータ読み込み
- ② **構造モデルの作成(Atoms)**  
モデル作成に必要な情報
  - ・吸収元素の種類、吸収端
  - ・結晶構造パラメータ（空間群、座標等）
- ③ EXAFSの理論計算（FEFF）
  - ・Artemisに予め組み込まれている
- ④ フィッティングパラメータの作成
- ⑤ フィッティング実行
- ⑥ モデル妥当性の検証
- ⑦ 解析結果の保存

Athenaでデータ処理しておく！

- ・ Background、Baselineの処理
- ・  $\chi(k)$ (EXAFS振動)の抽出
- ・  $\chi(k)$ をFT-EXAFSに変換

Atoms: FEFFの実行ファイルを作成するためのプログラム  
.cif ファイルを入手しておく  
モデル作成の手間が幾分省ける

FEFF: 光電子の散乱過程と散乱強度を計算するためのプログラム

# ②

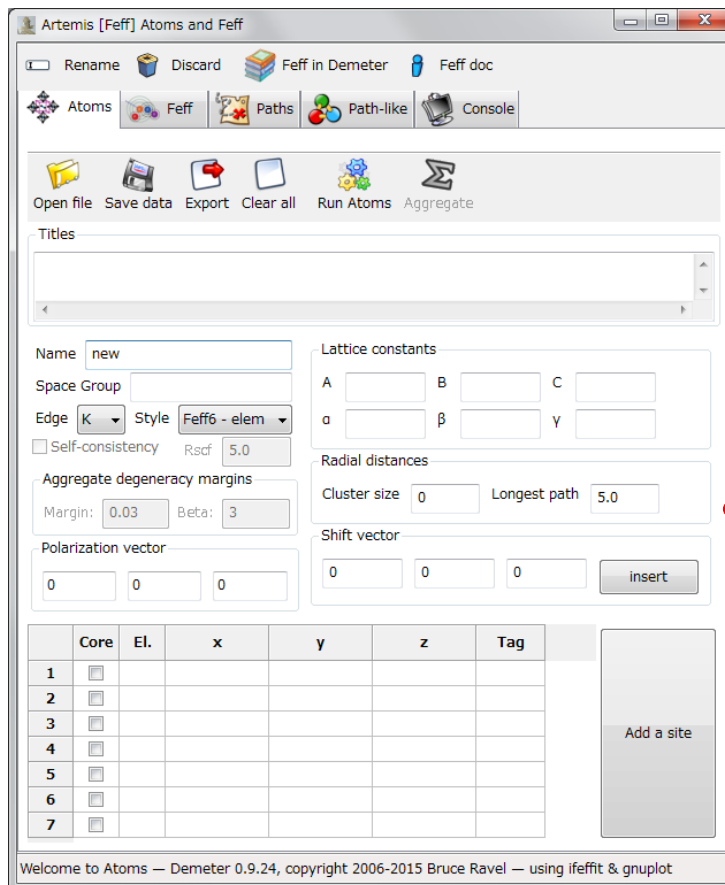
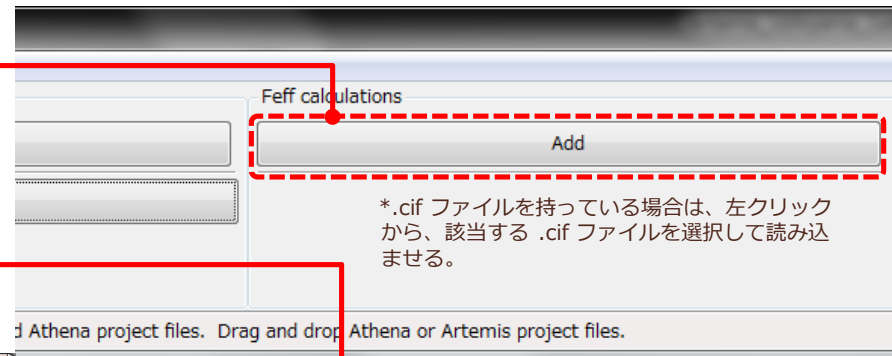
# 構造モデルの作成

Feff calculations Addボタン

右クリック

[---] Open a blank Atoms window

を選択 > OK



Recent Feff or crystal data file

Start a new Atoms input or select a recent Feff input file, Atoms

[-----] Open a blank Atoms window

Atoms のウィンドウが立ち上がる



# ②

# 構造モデルの作成

## Atomsウィンドウ詳細

.cif ファイルを持っていれば、  
ここから読み込むことも可能

## 結晶構造情報を入力する

GaNの結晶構造情報

空間群 P63mc (186)

原子座標

Ga: 1/3, 2/3, 0

N: 1/3, 2/3, 3/8

格子定数

$a = 3.186 \text{ \AA}$

$b = 3.186 \text{ \AA}$

$c = 5.176 \text{ \AA}$

$\alpha = 90^\circ$

$\beta = 90^\circ$

$\gamma = 120^\circ$

Artemis [Feff] Atoms and Feff

Rename Discard Feff in Demeter Feff doc

Atoms Feff Paths Path-like Console

Open file Save data Export Clear all Run Atoms Aggregate

Titles

\*2つ以上のサイトを同じ元素が占有している構造に対して用いると、平均のEXAFSを計算する。  
例：3種類のTiサイトを有するBaTi<sub>2</sub>O<sub>5</sub>など

Name new

Space Group

Edge K Style Feff6 - elem

Self-consistency Rscf 5.0

Aggregate degeneracy margins  
Margin: 0.03 Beta: 3

Lattice constants  
A B C  
a β γ

Radial distances  
Cluster size 0 Longest path 5.0

Shift vector  
0 0 0 insert

	Core	El.	x	y	z	Tag
1	<input type="checkbox"/>					
2	<input type="checkbox"/>					
3	<input type="checkbox"/>					
4	<input type="checkbox"/>					
5	<input type="checkbox"/>					
6	<input type="checkbox"/>					
7	<input type="checkbox"/>					

Add a site

Welcome to Atoms — Demeter 0.9.24, copyright 2006-2015 Bruce Ravel — using ifeffit & gnuplot

# ② 構造モデルの作成

入力例 : GaN

名称 (実質何でもよい) 186 でもよい

Name GaN

Space Group P63mc

Edge K Style Feff6 - elem

Self-consistency Rscf 5.0

Aggregate degeneracy margins

margin 5.0 Beta: 3

Polarization vector

0 0 0

Lattice constants

A 3.186 B 3.186 C 5.176

$\alpha$  90  $\beta$  90  $\gamma$  120

Radial distances

Cluster size 8 Longest path 5.0

Shift vector

0 0 0 insert

	Core	El.	x	y	z	Tag
1	<input checked="" type="checkbox"/>	Ga	0.3333	0.6667	0.0	Ga
2	<input type="checkbox"/>	N	0.3333	0.6667	0.375	N
3	<input type="checkbox"/>					
4	<input type="checkbox"/>	*部分置換モデルには、今のところ対応していない。				
5	<input type="checkbox"/>	置換量が微量の場合は、ちょっとした工夫で対応が可能。(例 : GaNに添加した微量EuのEu-L <sub>III</sub> -edge EXAFS ← 明日の実習で実施します。)				
6	<input type="checkbox"/>					
7	<input type="checkbox"/>					

Add a site

XAFSのデータは、GaのK-edge

FEFFで計算するモデルの大きさ  
(Gaを原点とする球の直径)

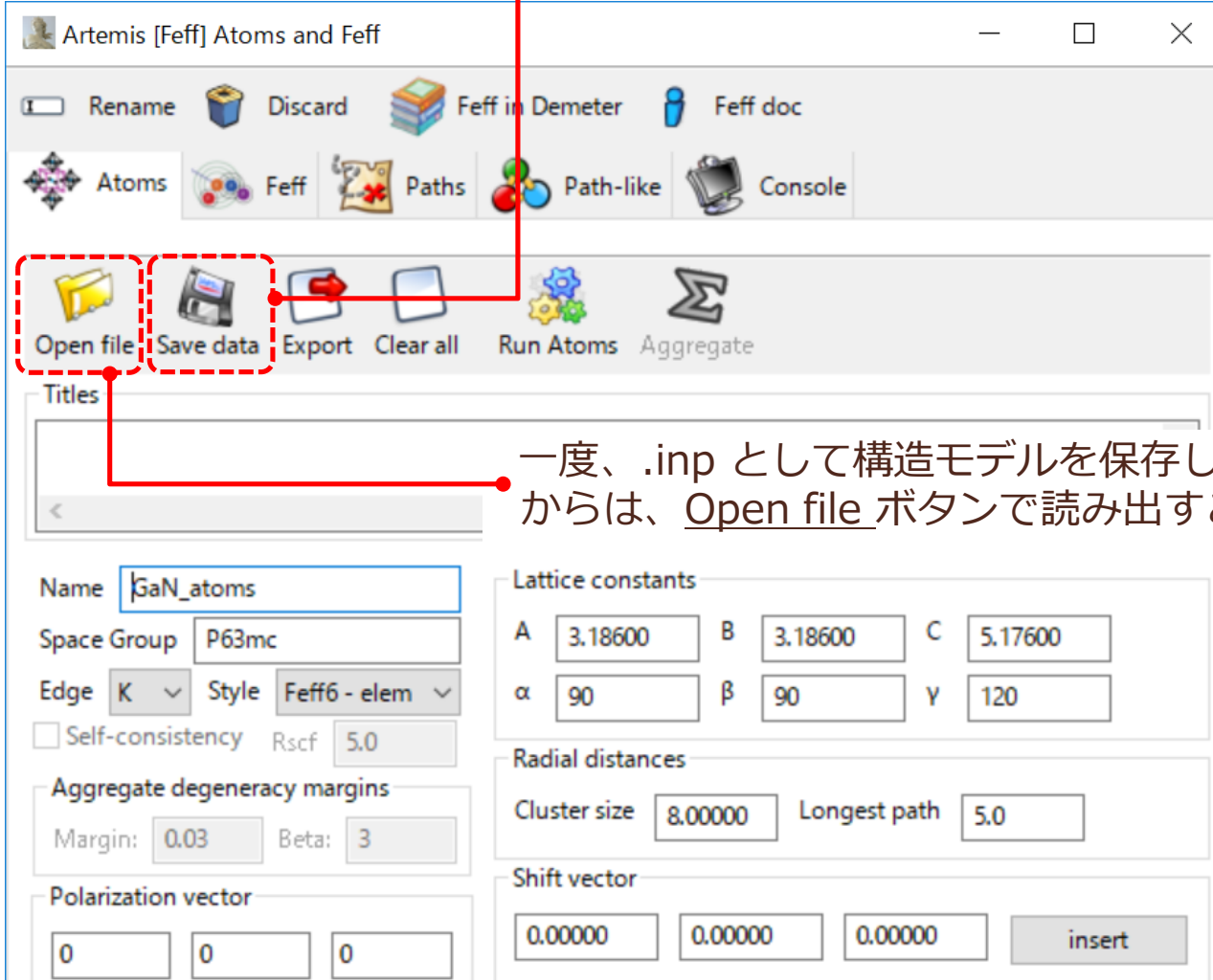
光電子が散乱される最大の距離

(=最長の結合距離)

入力値より長い距離は計算しない

## ② 構造モデルの保存

入力後、保存ボタン（フロッピーのマーク）で、この構造モデルを保存してください。  
保存名：GaN.inp



The screenshot shows the Artemis software interface. The title bar reads "Artemis [Feff] Atoms and Feff". The menu bar includes "Rename", "Discard", "Feff in Demeter", and "Feff doc". The toolbar contains "Atoms", "Feff", "Paths", "Path-like", and "Console". A red dashed box highlights the "Open file" and "Save data" buttons. A red arrow points from the text above to the "Save data" button. Below the toolbar, the "Titles" field is empty. The "Name" field contains "GaN\_atoms". The "Space Group" is "P63mc". The "Edge" is "K" and the "Style" is "Feff6 - elem". The "Self-consistency" checkbox is unchecked, and "Rscf" is "5.0". The "Aggregate degeneracy margins" section shows "Margin: 0.03" and "Beta: 3". The "Polarization vector" section shows three input fields with "0". The "Lattice constants" section shows "A: 3.18600", "B: 3.18600", "C: 5.17600", "α: 90", "β: 90", and "γ: 120". The "Radial distances" section shows "Cluster size: 8.00000" and "Longest path: 5.0". The "Shift vector" section shows three input fields with "0.00000" and an "insert" button.

一度、.inp として構造モデルを保存しておけば、次回からは、Open file ボタンで読み出すことができる。

## Artemis立ち上げ

- ① Athenaデータ読み込み
- ② 構造モデルの作成(Atoms)  
モデル作成に必要な情報
  - ・吸収元素の種類、吸収端
  - ・結晶構造パラメータ（空間群、座標等）
- ③ **EXAFSの理論計算 (FEFF)**
  - ・ Artemisに予め組み込まれている
- ④ フィッティングパラメータの作成
- ⑤ フィッティング実行
- ⑥ 束縛条件下でのフィッティング
- ⑦ 解析結果の保存

Athenaでデータ処理しておく！

- ・ Background、Baselineの処理
- ・  $\chi(k)$ (EXAFS振動)の抽出
- ・  $\chi(k)$ をFT-EXAFSに変換

Atoms: FEFFの実行ファイルを作成するためのプログラム  
.cif ファイルを入手しておく  
モデル作成の手間が幾分省ける

FEFF: 光電子の散乱過程と散乱強度を計算するためのプログラム





# ③

# EXAFSの理論計算

## EXAFS 計算結果の見方

Artemis [Feff] Atoms and Feff

Save Plot paths  $\chi(k)$   $|\chi(R)|$   $Re[\chi(R)]$   $Im[\chi(R)]$  Rank

Name of this Feff calculation: GaN

Description

```

# This paths.dat file was written by Demeter 0.9.24
# Distance fuzz = 0.030 A
# The central atom is denoted by this token: @
# Cluster size = 5.00 A, containing 182 atoms
# 24 paths were found within 5.000 A
# Forward scattering cutoff 20.00
# Angle fuzz = 3.00 degrees
    
```

Degen	Reff	Scattering path	Rank	L	Type
1	4.00	@ N.1 @	100.00	2	single scattering
2	12.00	@ Ga.1 @	97.82	2	single scattering
3	4.00	@ N.2 @	7.30	2	single scattering
4	12.00	@ N.1 N.2 @	14.66	2	other double scatter
5	24.00	@ N.1 Ga.1 @	28.44	2	other double scatter
6	9.00	@ N.4 @	45.78	2	single scattering
7	4.00	@ N.1 N.1 @	5.73	4	rattle
9	12.00	@ N.1 Ga.1 N.1 @	4.57	4	dog-leg
11	6.00	@ N.2 N.3 @	3.55	2	other double scatter
13	36.00	@ N.2 Ga.1 @	5.60	2	other double scatter
14	36.00	@ N.2 N.4 @	19.69	2	other double scatter
15	36.00	@ Ga.1 N.4 @	12.02	2	other double scatter
16	6.00	@ Ga.3 @	20.21	2	single scattering
19	6.00	@ N.6 @	17.91	2	single scattering
20	48.00	@ Ga.1 Ga.1 @	5.22	4	acute triangle
21	12.00	@ N.2 Ga.1 @	4.12	2	obtuse triangle
22	12.00	@ N.2 N.6 @	10.42	2	obtuse triangle
23	12.00	@ Ga.1 N.6 @	3.01	2	obtuse triangle
24	8.00	@ N.7 @	21.64	2	single scattering

Feff calculation complete!

**Degen**  
多重度 (= 配位数)

**Reff**  
結合距離

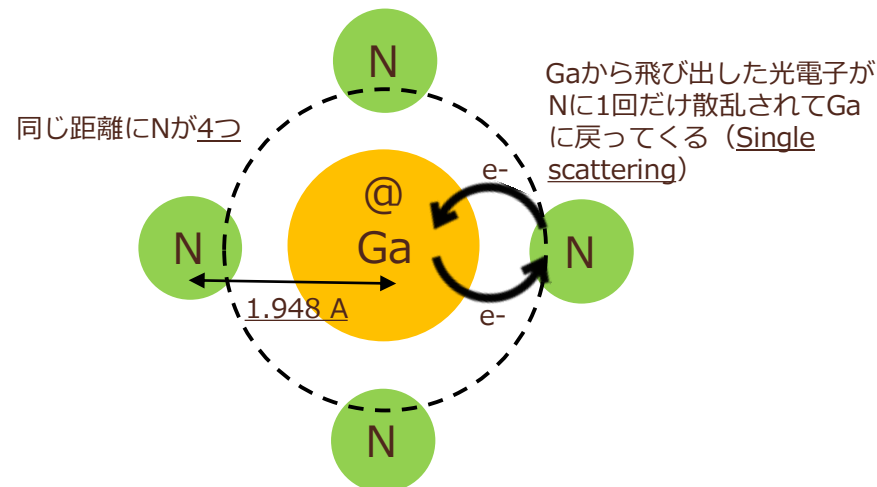
**Scattering path**  
光電子の散乱過程を表示する  
@が吸収元素

**Rank**  
EXAFS振動への寄与  
(最も強いpathを100としている)

**Type**  
光電子の散乱過程、散乱回数  
Single scattering: 単散乱

Degen	Reff	Scattering path	Rank	L	Type
1	4.00	@ N.1 @	100.00	2	single scattering
2	12.00	@ Ga.1 @	97.82	2	single scattering

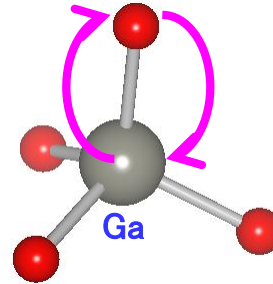
Scatteing path No.1 を平面図にすると。。。





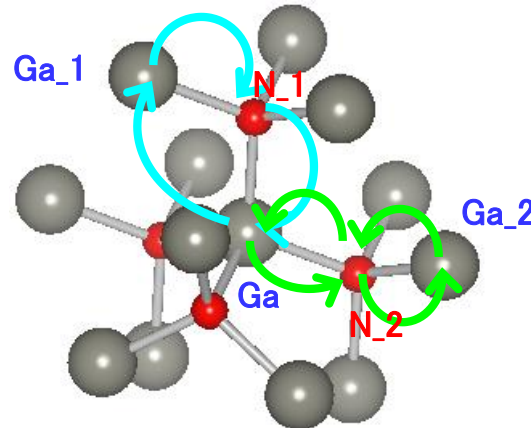
[補足]他の散乱パスはどのように記述されているのか？

**一回散乱**  
(single scattering path)



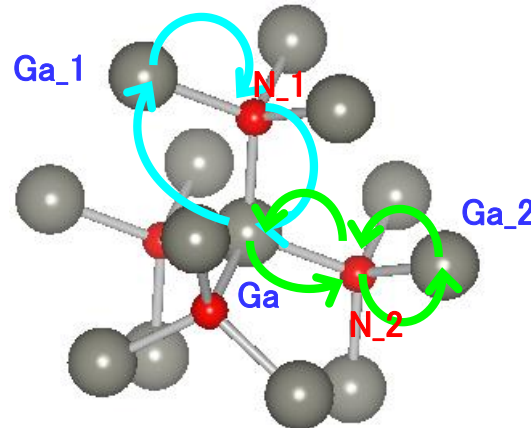
**二行程**  
(2 legs)

**二回散乱**  
(double scattering path)



**三行程**  
(3 legs)

**三回散乱**  
(triple scattering path)



**四行程**  
(4 legs)

Artemisで計算されるR (距離) = 光電子が散乱された距離の  $\frac{1}{2}$

1回散乱の R = 結合距離

2回以上の散乱過程のRは、もはや結合距離ではないことに注意



## EXAFS 計算結果をグラフに表示する

Artemis [Feff] Atoms and Feff

Name of this Feff calculation: GaN

Description

```

This paths.dat file was written by Demeter 0.9.24
Distance fuzz = 0.030 Å
The central atom is denoted by this token: @
Cluster size = 5.00 Å, containing 182 atoms
24 paths were found within 5.000 Å
Forward scattering cutoff 20.00
Angle fuzz = 3.00 degrees
    
```

Degen	Reff	Scattering path	Rank	L	Type
1	4.00	@ N.1 @	100.00	2	single scattering
2	12.00	@ Ga.1 @	97.82	2	single scattering
3	12.00	@ Ga.1 @	97.82	2	single scattering
4	12.00	@ Ga.1 @	97.82	2	single scattering
5	12.00	@ Ga.1 @	97.82	2	single scattering
6	12.00	@ Ga.1 @	97.82	2	single scattering
7	4.00	@ N.1 @	100.00	2	single scattering
8	4.00	@ N.1 @	100.00	2	single scattering
9	12.00	@ N.1 Ga.1 N.1 @	4.57	4	dog-leg
11	6.00	@ N.2 N.3 @	3.55	3	other double scattering
13	36.00	@ N.2 Ga.1 @	5.60	3	other double scattering
14	36.00	@ N.2 N.4 @	19.69	3	other double scattering
15	36.00	@ Ga.1 N.4 @	12.02	3	other double scattering
16	6.00	@ Ga.3 @	20.21	2	single scattering
19	6.00	@ N.6 @	17.91	2	single scattering
20	48.00	@ Ga.1 Ga.1 @	5.22	3	acute triangle
21	12.00	@ N.2 Ga.1 @	4.12	3	obtuse triangle
22	12.00	@ N.2 N.6 @	10.42	3	obtuse triangle
23	12.00	@ Ga.1 N.6 @	3.01	3	obtuse triangle
24	9.00	@ N.7 @	21.64	2	single scattering

表示したい散乱パスを選択 (複数選択はCtrlを押しながら)

データウィンドウの Path list 内に ドラッグ&ドロップ

表示したい散乱パスを  
左クリックで選択

[GaN] N.1  
[GaN] Ga.1

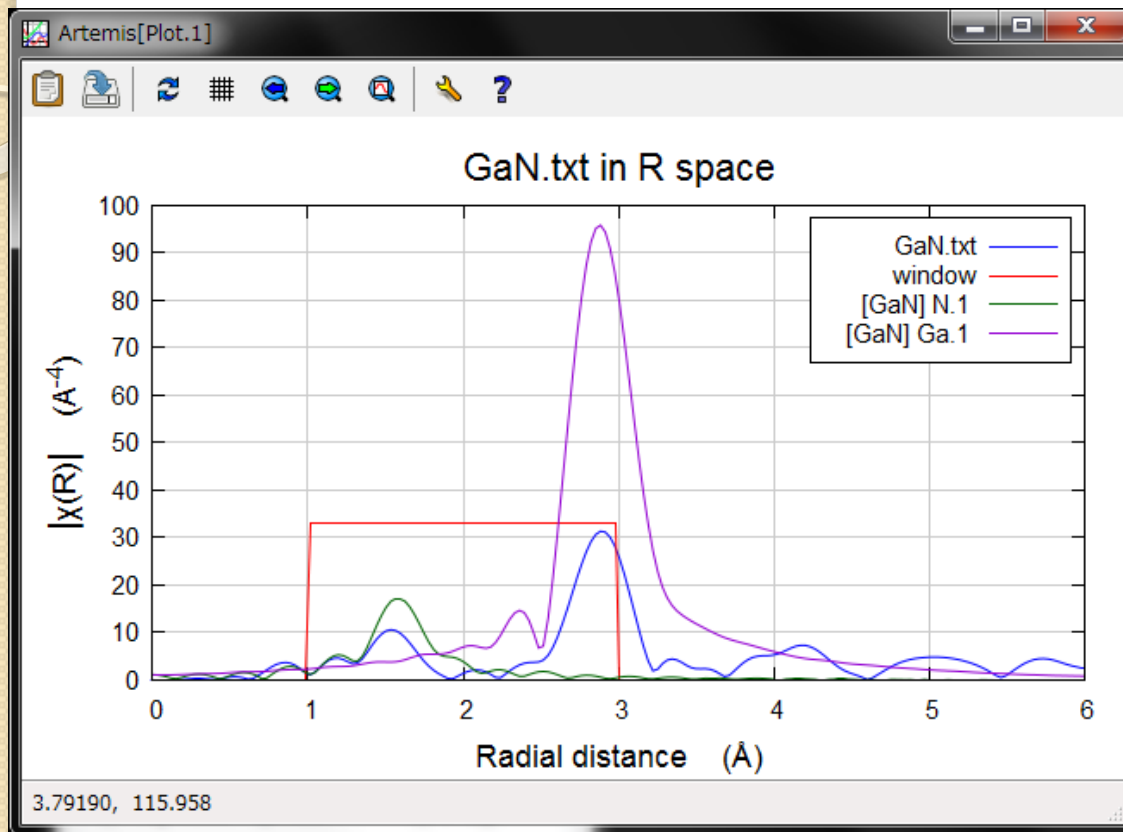
Include path  
 Use this path for phase corrected plotting.

このボタンを押すと、該当するデータがPlotting listに追加

Label Reff=1.948, nleg=2, degen=4

N 4  
S0² 1  
ΔE0  
ΔR  
σ²  
Ei  
3rd  
4th

EXAFS 計算結果をグラフに表示する



それぞれの散乱パスを足し合わせたEXAFSを表示したい場合は？

Artemis [Plot]

k R q

k-weight

0 1 2 3 kw

limits stack indic VP

Plot  $\chi(R)$

Magnitude Real Imag.

Plot  $\chi(q)$

Magnitude Real Imag.

Plot fit Plot bkg

Plot window Plot residual

Plot running R-factor

kmin 0 kmax 15

rmin 0 rmax 6

qmin 0 qmax 15

Plotting list

- Data: GaN.txt
- Path: [GaN] N.1 from GaN.txt
- Path: [GaN] Ga.1 from GaN.txt

追加を確認！

Freeze Clear

Save next plot to a file.

# ③

# EXAFSの理論計算

それぞれの散乱パスを足し合わせたEXAFSを表示する

Artemis [Data] GaN.txt

Data Path Marks Actions Debug Help

**GaN.txt** CV 1

Data source  
C:\Users\Uchiyama\Desktop\GaN\_exp.prj, 1

Plot this data set as  
k123 R123 Rmr Rk kg

Title lines

Fourier transform parameters  
kmin 3 kmax 14.5 dk 1  
rmin 1 rmax 3 dr 0.0

Fitting k weights  
 1  2  3  other 0.5

Other parameters  
 Include in fit  Plot after fit  Fit background  
 $\epsilon(k)$  0  Plot with phase correction

[GaN] N.1  
 [GaN] Ga.1

Include path  Plot after fit

足し合わせたいパスに☑を入れる

(1) single scattering, high (100.00)

x	y	z	ipot	label
0.000000	0.000000	1.947682	2	N.1
0.000000	0.000000	0.000000	0	abs

Label Reff=1.948, nleg=2, degen=4

N 4

S0² 1

$\Delta E0$

$\Delta R$

$\sigma^2$

Ei

3rd

4th

Transferred path "[GaN] Ga.1" to the plotting list.

③

# EXAFSの理論計算

それぞれの散乱パスを足し合わせたEXAFSを表示する

The screenshot shows the Artemis software interface for EXAFS analysis. The 'Actions' menu is open, and the option 'Make sum of marked paths and plot in R' is highlighted with a red dashed box. A red arrow points from this option to the text 'Actions > Make sum of marked paths and plot in R' and 'Alt + Shift + m'. The interface includes a menu bar (Data, Path, Marks, Actions, Debug, Help), a left sidebar with 'GaN.txt' selected, and a main workspace with a plot area and a table of fit parameters.

Artemis [Data] GaN.txt

Data Path Marks Actions Debug Help

**GaN.txt** [GaN] N.1

Data source: C:\Users\Uchiyama...  
Plot this data set as: k123 R123  
Title lines: [Empty]  
Fourier transform parameters: kmin 3, kmax 15, dk 1, rmin 1, rmax 3, dr 0.0  
Fitting k weights:  1,  2,  3, other 0.5  
Other parameters:  Include in fit,  Plot after fit,  Fit background,  $\epsilon(k)$  0,  Plot with phase correction

Actions > Make sum of marked paths and plot in R  
or  
Alt + Shift + m

0.000000	0.000000	1.947682	2	N.1
0.000000	0.000000	0.000000	0	'abs

Label: Reff=1.948, nleg=2, degen=4

N: 4  
S0<sup>2</sup>: 1  
 $\Delta E0$ :  
 $\Delta R$ :  
 $\sigma^2$ :  
Ei:  
3rd:  
4th:

# ③

# EXAFSの理論計算

それぞれの散乱パスを足し合わせたEXAFSを表示する

Enter a VPath name

Enter a name for this virtual path

GaN\_sum

OK Cancel

名前をつける > OK

Artemis [Data] GaN.txt

Data Path Marks Actions Debug Help

**GaN.txt** CV 1 [GaN] N.1

Data source  
C:\Users\Uchiyama\Desktop

Plot this data set as  
k123 R123

Title lines

Fourier transform parameters  
kmin 3 kmax 15 dk 1  
rmin 1 rmax 3 dr 0.0

Fitting k weights  
 1  2  3  other 0.5

Other parameters  
 Include in fit  Plot after fit  Fit background  
 $\epsilon(k)$  0  Plot with phase correction

[GaN] N.1  
 Include path  Plot after fit  
 Use this path for phase corrected plotting.

@ N.1 @

(1) single scattering, high (100.00)

x	y	z	ipot	label
0.000000	0.000000	1.947682	2	'N.1
0.000000	0.000000	0.000000	0	'abs

Label Reff=1.948, nleg=2, deseg=4

N 4

S0<sup>2</sup> 1

$\Delta E0$

$\Delta R$

$\sigma^2$

Ei

3rd

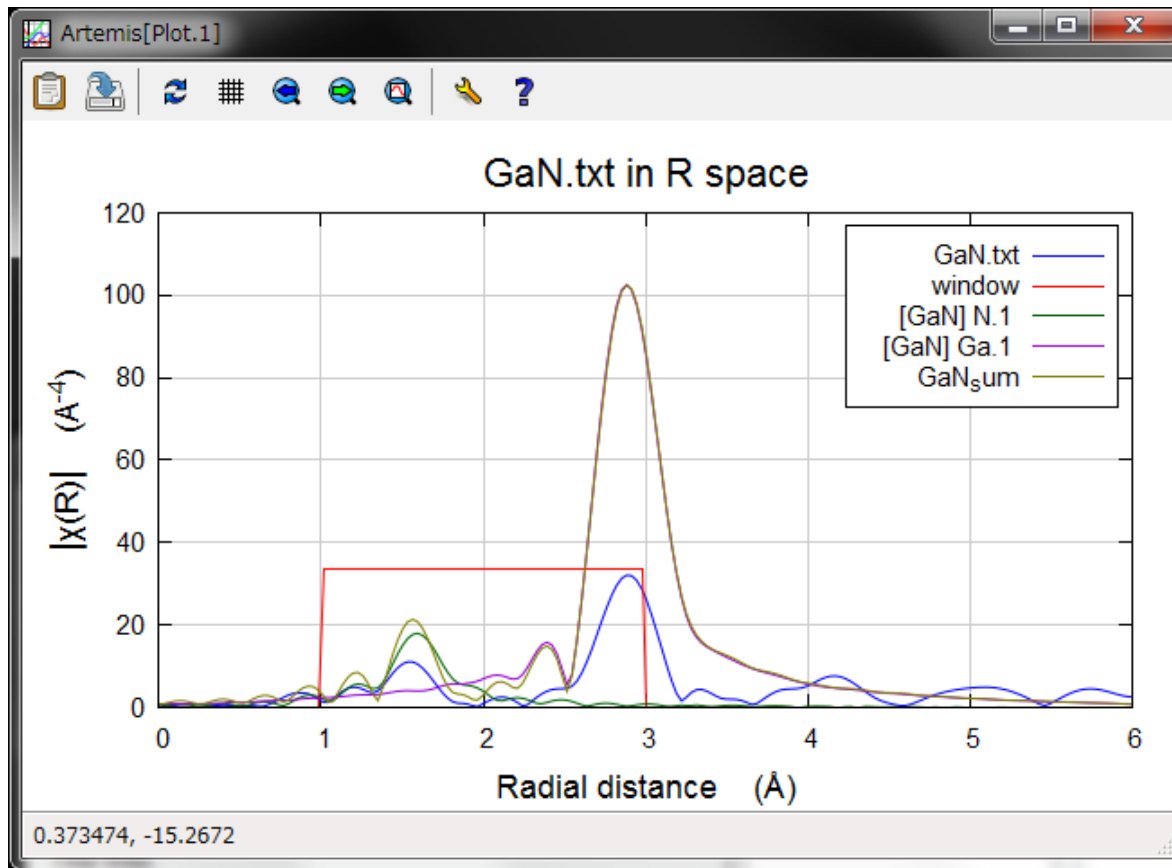
4th

These lines will be written to output files. Use them to describe this data set.

# ③

# EXAFSの理論計算

それぞれの散乱パスを足し合わせたEXAFSを表示する



Virtual Paths

GaN\_sum

タブが自動的にVpathsに移動するが、◀▶ボタン & 他のタブをクリックすれば移動できる

Plotting list

- Data: GaN.txt
- Path: [Ga] N.1 from GaN.txt
- Path: [Ga] Ga.1 from GaN.txt
- VPath: GaN\_sum

追加を確認！

散乱パス足し合わせの注意点

$$F.T.(\chi_{Ga-N}(k)) + F.T.(\chi_{Ga-Ga}(k)) \neq F.T.(\chi_{Ga-N}(k) + \chi_{Ga-Ga}(k))$$

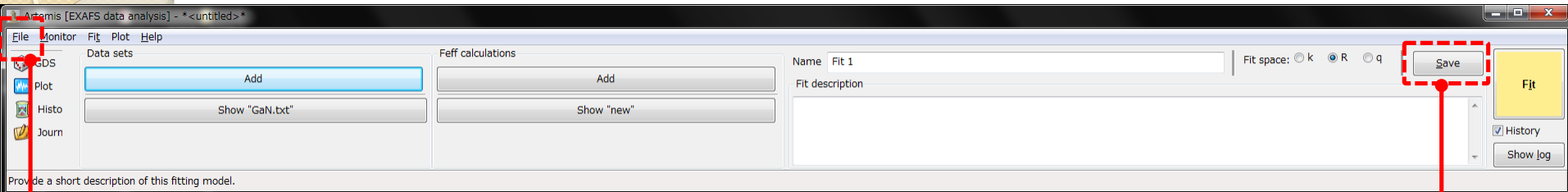
それぞれのEXAFS振動をF.T.してから足す (間違い)

それぞれのEXAFS振動を足してからF.T.する (こちらが正しい)

# ③

# EXAFSの理論計算

これまでのデータを保存する



File > Save project as

or

Ctrl + s

or

Save ボタン

→ Artemis-GaN.fpj

Artemisには、未知のバグが多数存在するのでこまめに上書き保存することをおすすめします。

動作がおかしくなったら、保存してArtemisを再立ち上げしてください。使い続けると突然クラッシュします。

内山がこれまでに会ったバグ（おそらくまだ修正されていない）

- フィッティングを一度も実行せずに保存し、Artemisを立ち下げると、二度と立ち上がらなくなる。
- Data sets に実験データをインポートした後、削除し、もう一度同じ実験データをインポートするとフィッティングする際にエラーを起こす。

\*バグの出方はOSにも依存します。



## Artemis立ち上げ

- ① Athenaデータ読み込み
- ② 構造モデルの作成(Atoms)  
モデル作成に必要な情報
  - ・吸収元素の種類、吸収端
  - ・結晶構造パラメータ（空間群、座標等）
- ③ EXAFSの理論計算（FEFF）
  - ・ Artemisに予め組み込まれている
- ④ **フィッティングパラメータの作成**
- ⑤ フィッティング実行
- ⑥ 束縛条件下でのフィッティング
- ⑦ 解析結果の保存

Athenaでデータ処理しておく！

- ・ Background、Baselineの処理
- ・  $\chi(k)$ (EXAFS振動)の抽出
- ・  $\chi(k)$ をFT-EXAFSに変換

Atoms: FEFFの実行ファイルを作成するためのプログラム  
.cif ファイルを入手しておく  
モデル作成の手間が幾分省ける

FEFF: 光電子の散乱過程と散乱強度を計算するためのプログラム



## &lt;EXAFSの基本式&gt;

EXAFS振動

$$\chi(k) = S_0^2 \sum_j \frac{N_j F_j(k_j) \exp(-2k_j^2 \sigma_j^2)}{k_j r_j^2} \sin(2k_j r_j + \phi_j(k))$$

$k_j = \sqrt{k^2 - \frac{2m}{\hbar^2}(E_0 - E_{j0})} = \sqrt{k^2 - \frac{2m}{\hbar^2} \Delta E_{j0}}$

振幅 Sin波

FEFFによる理論計算で求める  
パラメータ

$F_j(k)$  (後方散乱因子)

$\phi_j(k)$  (位相因子)

フィッティングで求めるパラメータ

$S_0^2$  (多体効果 (定数))

$r_j$  (距離)

$\sigma_j$  (デバイワラー因子)

$\Delta E_0$  ( $k$ の原点)

※ $N_j$  (配位数) は固定

まずは、第一配位圏のGa-N結合に対してフィッティングをかけてみる

Artemis上での変数を定義する

$S_0^2$  (多体効果 (定数)) → amp

$r_j$  (距離) → delr (\*FEFFで計算したRからの変位のみを計算)

$\sigma_j$  (デバイワラー因子) → ss

$\Delta E_0$  ( $k$ の原点) → enot

※ $N_j$  (配位数) は固定 → N=4

変数に使う文字は何でもよい (a,b,c,a1,b2...) が、プラス (+)、ハイフン (-)、アスタリスク (\*)、スラッシュ (/) を入れてしまうと、演算の意味になってしまうので、変数には使わないようにしてください。

$$\chi(k) = \frac{\text{amp}}{S_0^2} \sum_j \frac{N_j F_j(k_j) \exp(-2k_j^2 \text{ss} \sigma_j^2)}{kr_j^2} \sin(2k_j r_j + \phi_j(k_j))$$

$$r_j = R_j + \text{delr}$$

$$k_j = \sqrt{k^2 - \frac{2m}{\hbar^2}(E_0 - E_{j0})} = \sqrt{k^2 - \frac{2m}{\hbar^2} \text{enot}}$$

# ④ フィットティングパラメータの作成

まずは、第一配位圏のGa-N結合に対してフィッティングをかけてみる

## Artemisに変数を登録する

$S_0^2$  (多体効果) → amp

$r_j$  (距離) → delr

$\sigma_j$  (デバイワラー因子) → ss

$\Delta E_0$  ( $k$ の原点) → enot

※ $N_j$  (配位数) は固定 → N=4

Ga-N結合を選択

[GaN] N.1  
 [GaN] Ga.1

[GaN] N.1

Include path  Plot after fit  
 Use this path for phase corrected plotting.

@ N.1 @

(1) single scattering, high (100.00)

x	y	z	ipot	label
0.000000	0.000000	1.947682	2	'N.1
0.000000	0.000000	0.000000	0	'abs

Label: Ref: 1.948, nleg=2, degen=4

N	4
$S_0^2$	amp
$\Delta E_0$	enot
$\Delta R$	delr
$\sigma^2$	ss
E1	
3rd	
4th	

## ④

## フィッティングパラメータの作成

まずは、第一配位圏のGa-N結合に対してフィッティングをかけてみる

Artemis [Data] GaN.txt

Data Path Marks Actions Debug Help

**GaN.txt** CV 1

Data source  
C:\Users\Uchiyama\Desktop\GaN\_exp.prj, 1

Plot this data  
k123

Title lines

Fourier transform  
kmin 3  
rmin 1

Fitting k weights  
 1  2  3  other 0.5

Other parameters  
 Include in fit  Plot after fit  Fit background  
 $\epsilon(k)$  0  Plot with phase correction

[GaN] N.1  
 [GaN] Ga.1

Include path  Plot after fit  
 Use this path for phase corrected plotting.

@ N.1 @

(1) single scattering, high (100.00)

x	y	z	ipot	label
0.000000	0.000000	1.947682	2	'N.1
0.000000	0.000000	0.000000	0	'abs

Label Refr=1.948, nleg=2, degen=4

N 4

S0<sup>2</sup> amp

$\Delta E0$  enot

$\Delta R$  del r

$\sigma^2$  ss

Ei

3rd

4th

Guess amp  
Def amp  
Set amp  
Lguess amp  
Skip amp

Made a VPath from the marked groups

各パラメータの入力欄内で右クリックするとオプションウィンドウが出てくる

**guess:**  
独立なパラメータ

**def:**  
他のパラメータに依存するパラメータ  
数式で定義、定数でも可

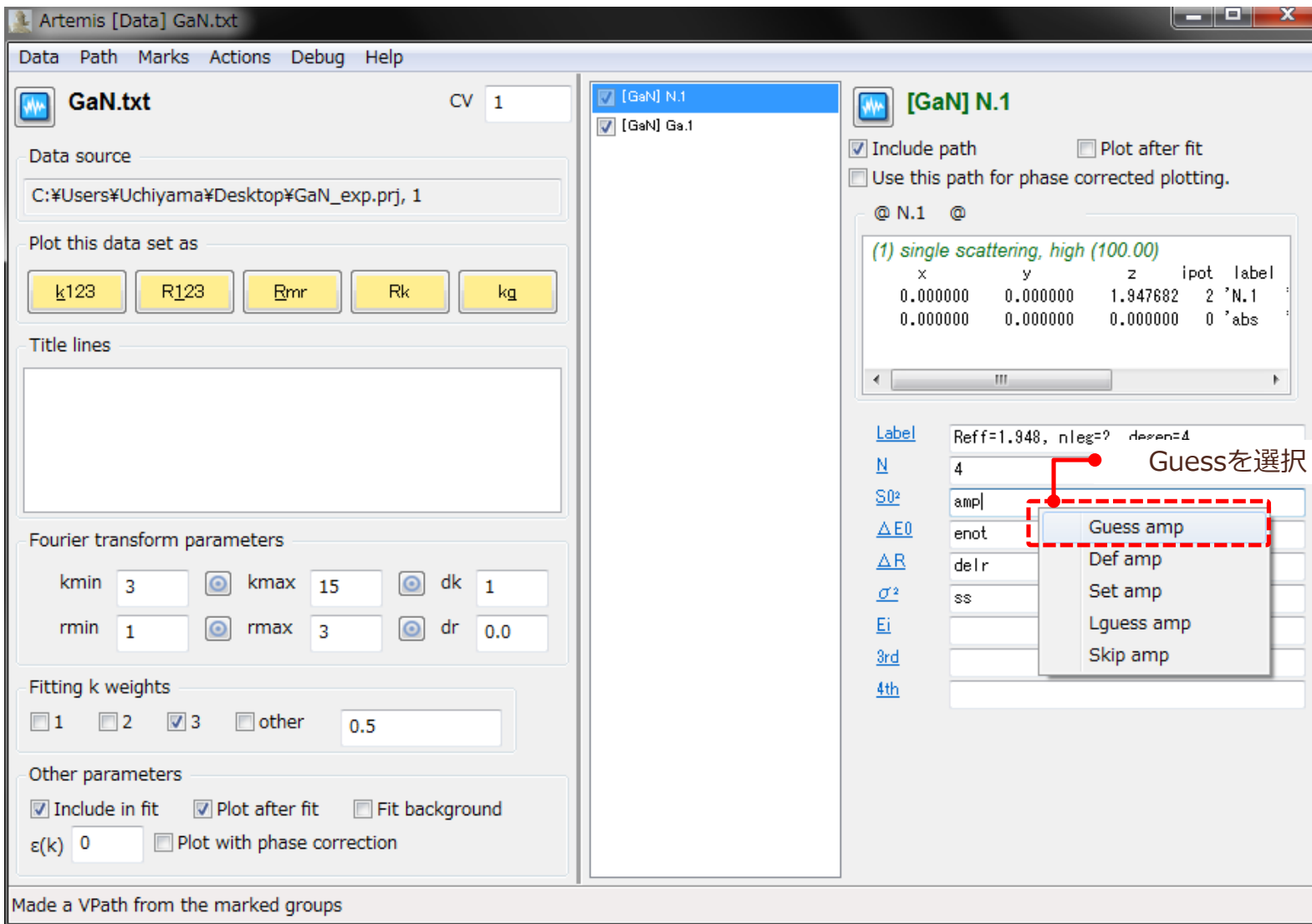
**set:**  
定数  
(数式でも定義可だが、フィッティング初期に計算後は更新されない)

**Skip:**  
フィッティングで考慮しないパラメータ

④

# フィッティングパラメータの作成

まずは、第一配位圏のGa-N結合に対してフィッティングをかけてみる



Artemis [Data] GaN.txt

Data Path Marks Actions Debug Help

**GaN.txt** CV 1

Data source  
C:\Users\Uchiyama\Desktop\GaN\_exp.prj, 1

Plot this data set as  
k<sub>123</sub> R<sub>123</sub> E<sub>mr</sub> R<sub>k</sub> k<sub>g</sub>

Title lines

Fourier transform parameters  
kmin 3 kmax 15 dk 1  
rmin 1 rmax 3 dr 0.0

Fitting k weights  
 1  2  3  other 0.5

Other parameters  
 Include in fit  Plot after fit  Fit background  
ε(k) 0  Plot with phase correction

[GaN] N.1  
[GaN] Ga.1

Include path  Plot after fit  
 Use this path for phase corrected plotting.

@ N.1 @

(1) single scattering, high (100.00)

x	y	z	ipot	label
0.000000	0.000000	1.947682	2	'N.1
0.000000	0.000000	0.000000	0	'abs

Label Ref=1.948, nleg=? degen=1

N 4

S<sub>0</sub><sup>2</sup> amp

△E<sub>0</sub> enot

△R del r

σ<sup>2</sup> ss

E<sub>i</sub>

3rd

4th

Guess amp  
Def amp  
Set amp  
Lguess amp  
Skip amp

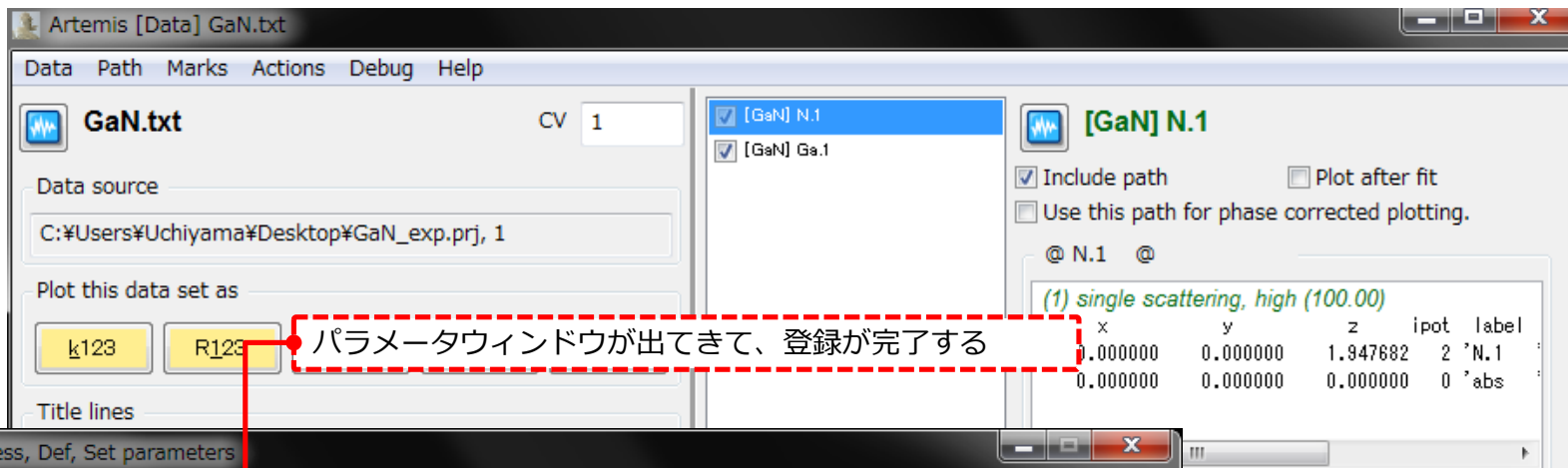
Guessを選択

Made a VPath from the marked groups

④

# フィッティングパラメータの作成

まずは、第一配位圏のGa-N結合に対してフィッティングをかけてみる



Artemis [Data] GaN.txt

Data Path Marks Actions Debug Help

**GaN.txt** CV 1

Data source  
C:\Users\Uchiyama\Desktop\GaN\_exp.prj, 1

Plot this data set as  
k123 R123

Title lines

[GaN] N.1  
[GaN] Ga.1

[GaN] N.1

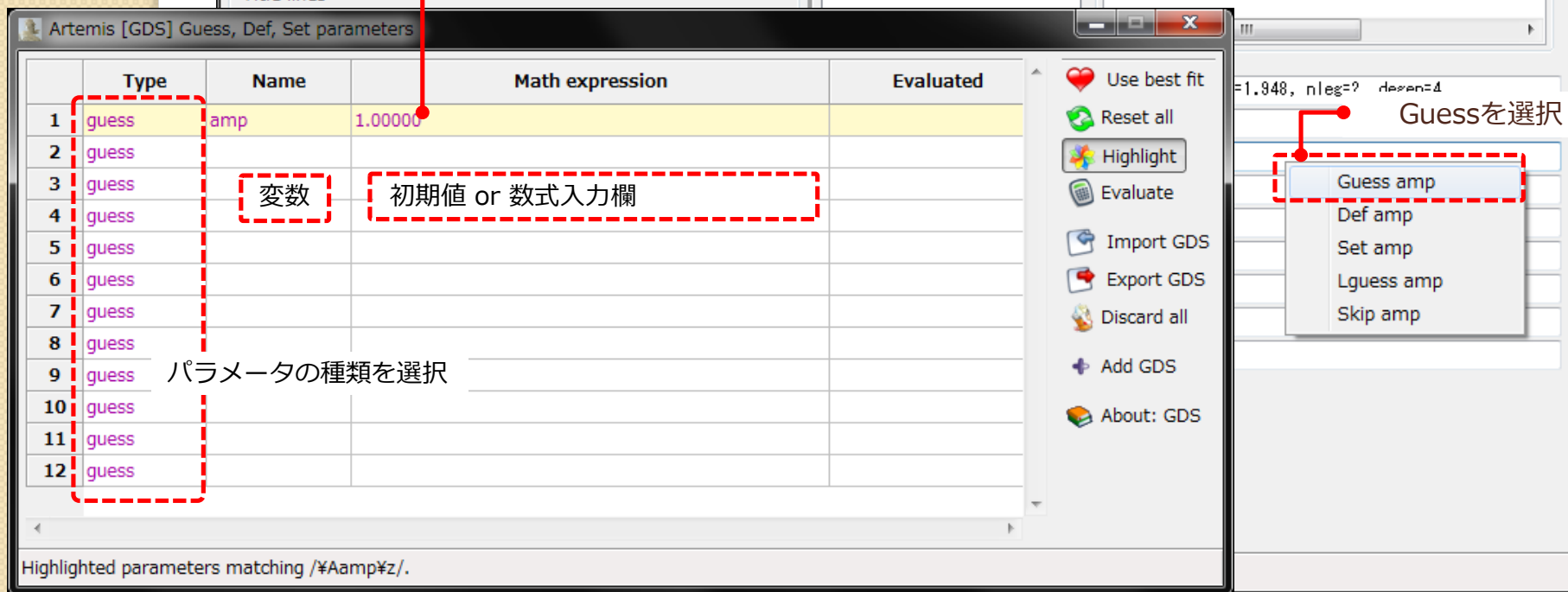
Include path  Plot after fit  
 Use this path for phase corrected plotting.

@ N.1 @

(1) single scattering, high (100.00)

x	y	z	ipot	label
0.000000	0.000000	1.947682	2	'N.1
0.000000	0.000000	0.000000	0	'abs

パラメータウィンドウが出てきて、登録が完了する



Artemis [GDS] Guess, Def, Set parameters

	Type	Name	Math expression	Evaluated
1	guess	amp	1.00000	
2	guess			
3	guess	変数	初期値 or 数式入力欄	
4	guess			
5	guess			
6	guess			
7	guess			
8	guess			
9	guess	パラメータの種類を選択		
10	guess			
11	guess			
12	guess			

Highlighted parameters matching /\*Aamp\*z/.

Use best fit  
Reset all  
Highlight  
Evaluate  
Import GDS  
Export GDS  
Discard all  
Add GDS  
About: GDS

Guess amp  
Def amp  
Set amp  
Lguess amp  
Skip amp

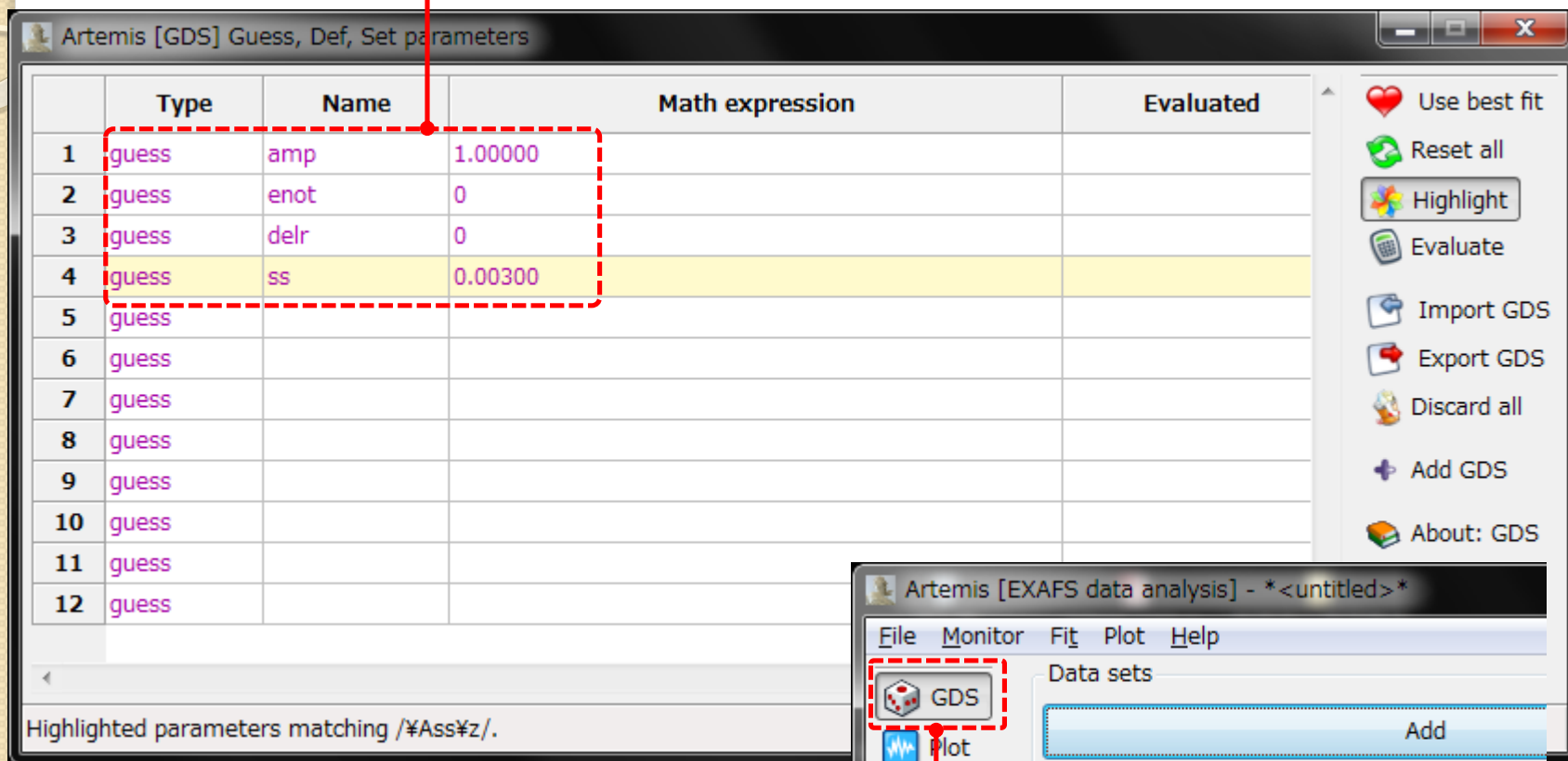
Guessを選択

④

# フィッティングパラメータの作成

まずは、第一配位圏のGa-N結合に対してフィッティングをかけてみる

全てのパラメータを登録する



The screenshot shows the Artemis software interface. The main window is titled "Artemis [GDS] Guess, Def, Set parameters" and contains a table with the following data:

	Type	Name	Math expression	Evaluated
1	guess	amp	1.00000	
2	guess	enot	0	
3	guess	delr	0	
4	guess	ss	0.00300	
5	guess			
6	guess			
7	guess			
8	guess			
9	guess			
10	guess			
11	guess			
12	guess			

Parameters 1 through 4 are highlighted in yellow. A red dashed box highlights the first four rows. A red arrow points from the text "全てのパラメータを登録する" to the "Name" column of the first row.

Below the table, it says: "Highlighted parameters matching /¥Ass¥z/."

The right sidebar contains the following buttons: Use best fit, Reset all, Highlight, Evaluate, Import GDS, Export GDS, Discard all, Add GDS, and About: GDS.

The bottom window is titled "Artemis [EXAFS data analysis] - \* <untitled> \*". It has a menu bar with File, Monitor, Fit, Plot, and Help. The "Data sets" section shows a list with "GDS" (highlighted with a red dashed box), "Plot", "Histo", and "Journ". Below the list are buttons for "Add" and "Hide 'GaN.txt'". A red arrow points from the text "ここを左クリックで復活します" to the "GDS" icon.

× で消してしまっても ここを左クリックで復活します

これでフィッティングパラメータの作成は完了！！

## Artemis立ち上げ

- ① Athenaデータ読み込み
- ② 構造モデルの作成(Atoms)  
モデル作成に必要な情報
  - ・吸収元素の種類、吸収端
  - ・結晶構造パラメータ（空間群、座標等）
- ③ EXAFSの理論計算（FEFF）
  - ・ Artemisに予め組み込まれている
- ④ フィッティングパラメータの作成
- ⑤ **フィッティング実行**
- ⑥ 束縛条件下でのフィッティング
- ⑦ 解析結果の保存

Athenaでデータ処理しておく！

- ・ Background、Baselineの処理
- ・  $\chi(k)$ (EXAFS振動)の抽出
- ・  $\chi(k)$ をFT-EXAFSに変換

Atoms: FEFFの実行ファイルを作成するためのプログラム  
.cif ファイルを入手しておく  
モデル作成の手間が幾分省ける

FEFF: 光電子の散乱過程と散乱強度を計算するためのプログラム



# ⑤ フィットニング実行

まずは、第一配位圏のGa-N結合に対してフィッティングをかけてみる

Artemis [Data] GaN.txt

Data Path Marks Actions Debug Help

**GaN.txt** CV 1

Data source  
C:\Users\Uchiyama\Desktop\GaN\_exp.prj, 1

Plot this data set as  
k123 R123 Rmr Rk kg

Title lines

Fourier transform parameters  
kmin 3 kmax 15 dk 1  
rmin 1 rmax 2 dr 0.0

Fitting k weights  
1 2  3 other 0.5

Other parameters  
 Include in fit  Plot after fit  Fit background  
ε(k) 0  Plot with phase corr

Plot this data set as |χ(R)| and Re[χ(R)].

Ga-N結合を選択

Include path, Plot after fit (to )

[GaN] N.1

Include path  Plot after fit  
 Use this path for phase corrected plotting.

@ N.1 @

(1) single scattering, high (100.00)

x	y	z	ipot	label
0.000000	0.000000	1.947682	2	'N.1
0.000000	0.000000	0.000000	0	'abs

Label Reff=1.948, nleg=2, degen=4

N 4

S0<sup>2</sup> amp

ΔE0 enot

ΔR delr

σ<sup>2</sup> ss

Ei

3rd

Ga-N結合のみを切り出す (フィッティングの範囲)

フィッティングに用いる k の範囲を指定

Include in fit, Plot after fit (to )

# ⑤ フィットTING実行

まずは、第一配位圏のGa-N結合に対してフィッティングをかけてみる

Artemis [Data] GaN.txt

Data Path Marks Actions Debug Help

**GaN.txt** CV 1

Data source  
C:\Users\Uchiyama\Desktop\GaN\_exp.prj, 1

Plot this data set as

k123 R123 Rmr Rk kg

Title lines

Fourier transform parameters

kmin 3 kmax 15 dk 1  
rmin 1 rmax 2 dr 0.0

Fitting k weights

1  2  3  other 0.5

Other parameters

Include in fit  Plot after fit  Fit background  
ε(k) 0  Plot with phase correction

Ga-Ga結合を選択

Include path, Plot after fitのチェックを外す (フィッティングから除外)

((( [GaN] Ga.1 )))

Include path  Plot after fit  
 Use this path for phase corrected plotting.

@ Ga.1 @

(2) single scattering, high (97.82)

x	y	z	ipot	label
-0.921314	-1.595650	2.592484	1	'Ga.1
0.000000	0.000000	0.000000	0	'abs

Label Reff=3.181, nleg=2, degen=12

N 12

S0² 1

ΔE0

ΔR

σ²

Ei

3rd

4th

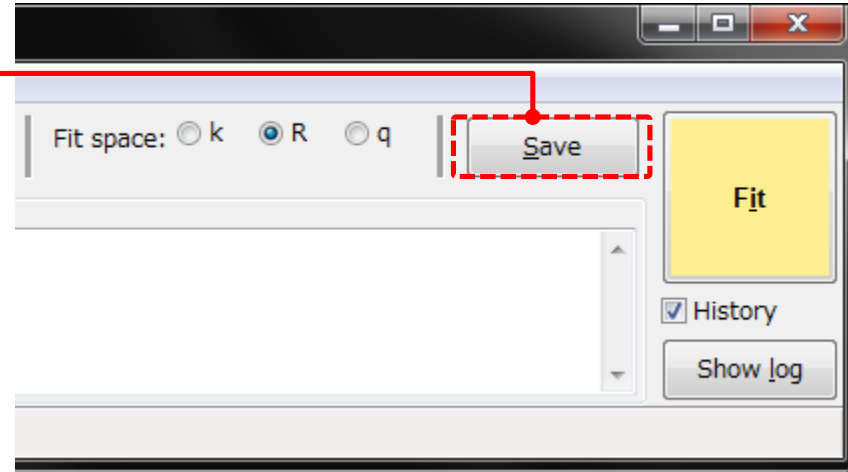
A user specified value for the measurement uncertainty. A value of 0 means to let Iffit determine the uncertainty.

# ⑤ フィットニング実行

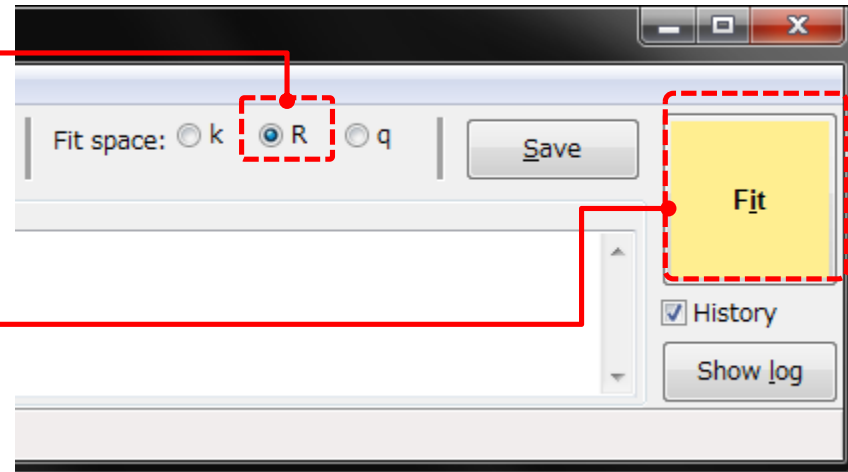
まずは、第一配位圏のGa-N結合に対してフィットニングをかけてみる

いよいよフィットニング！

その前に、保存！！



R を選択



フィットニングを実行

# ⑤ フィットニング実行

フィットニングが終了すると結果ウィンドウが出てくる

Artemis [Log] Fit 1

```

Name       : Fit 1 (netnk)
Description : fit to GaN.txt
Figure of merit : 1
Time of fit  : 2017-01-29T18:12:56
Environment : Demeter 0.9.24 with perl 5.018002 and using Iffffit
Interface   : Artemis (Wx 0.9923)
Prepared by :
Contact    :
        
```

色=フィットニングの良し悪し（緑>黄>赤 とフィットニング結果が悪くなるにつれて連続的に色が変化する）

```

Independent points : 7.4687500
Number of variables : 4
Chi-square         : 206.5127614
Reduced chi-square : 59.5352105
R-factor          : 0.044077
Number of data sets : 1
        
```

$$R = \sum_i \frac{[\text{Im}(\chi_{\text{data}}(R_i) - \chi_{\text{theory}}(R_i))]^2 + [\text{Re}(\chi_{\text{data}}(R_i) - \chi_{\text{theory}}(R_i))]^2}{[\text{Im}(\chi_{\text{data}}(R_i))]^2 + [\text{Re}(\chi_{\text{data}}(R_i))]^2}$$

guess parameters:

amp	=	0.93795870	# +/-	0.19811638	[1.00000]
enot	=	3.42552029	# +/-	3.11806458	[0]
detr	=	-0.00895755	# +/-	0.01290725	[0]
ss	=	0.00352033	# +/-	0.00139148	[0.00300]

Correlations between variables:

```

ss & amp      --> 0.8250
detr & enot   --> 0.8085
        
```

Save About Close

Artemis [Log] Fit 1

Correlations between variables:

```

ss & amp      --> 0.8250
detr & enot   --> 0.8085
All other correlations below 0.4
        
```

==== Data set =====

```

: Athena project = C:\users\Uchiyama\Desktop#practice_data_201701#GaN.prj, 1
: name           = GaN.txt
: k-range        = 3.000 - 15
: dk             = 1
: k-window       = Hanning
: k-weight       = 3
: R-range        = 1 - 2
: dR             = 0.0
: R-window       = Hanning
: fitting space  = r
: background function = no
: phase correction = no
: background removal = E0: 10369.399467, Rbkg: 1.0, range: [0:17.9968295076661], c
: epsilon_k by k-weight = 1.8 5e-004
: epsilon_r by k-weight = 2.0 8e-001
: R-factor by k-weight = 1 -> 0.00342, 2 -> 0.00991, 3 -> 0.04408
        
```

name	N	S02	sigma^2	e0	detr	Reff	R
[Ga-site] N1.1	4.000	0.938	0.00352	3.426	-0.00896	1.94770	1.93874

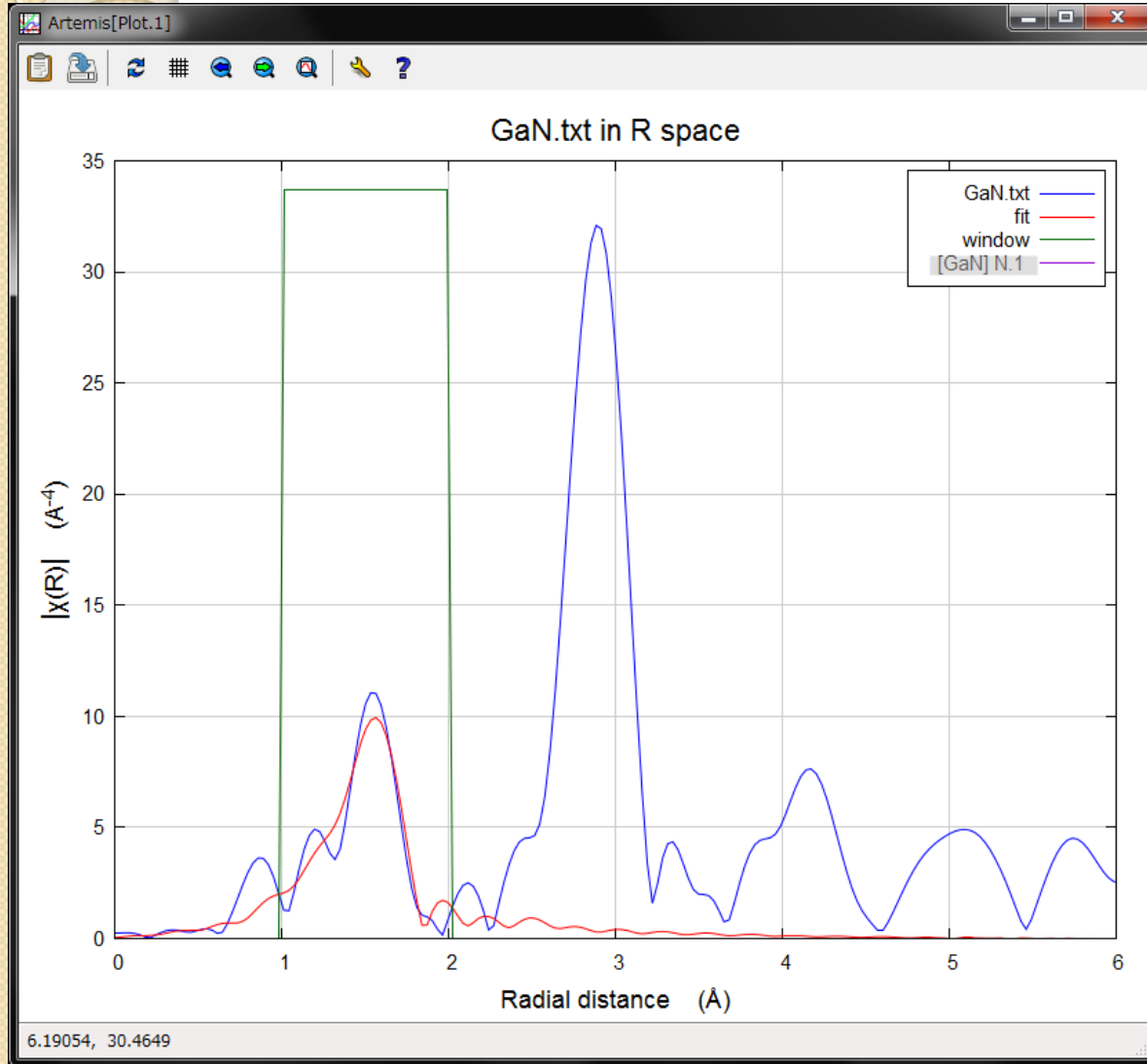
```

name      ei      third  fourth
[Ga-site] N1.1  0.00000  0.00  *数値の目安
amp (S02): 0.70 - 1.10
enot (ΔE, e0): < 10 eV
ss (σ²) : 0.003 - 0.020 Å²
        
```

Save About Close

# ⑤ フィットティング実行

フィッティングの結果をグラフ上で見る



Artemis [Plot]

**k** **R** **q**

k-weight  
 0  1  2  3  kw

limits **stack** indic VP

Plot  $\chi(R)$   
 Magnitude  Real  Imag.

**フィッティング結果をプロット**

Plot fit  Plot bkg  
 Plot window  Plot residual  
 Plot running R-factor

kmin 0 kmax 15  
 rmin 0 rmax 6  
 qmin 0 qmax 15

Plotting list  
 Data: GaN.txt  
 Path: [GaN] N.1 from GaN.txt

Freeze

Save next plot to a file.

# ⑤ フィットTING実行

第二配位圏のGa-Ga結合も考慮したフィッティングをかけてみる

Artemis [Data] GaN.txt

Data Path Marks Actions Debug Help

**GaN.txt** CV 1

Data source: C:\Users\Uchiyama\Desktop\GaN\_exp.prj, 1

Plot this data set as:

Title lines

Ga-Ga結合を選択

((( [GaN] Ga.1 )))

Include path  Plot after fit

Use this path for phase corrected plotting.

@ Ga.1 @

(2) single scattering, high (97.82)

x	y	z	ipot	label
-0.921314	-1.595850	2.592484	1	'Ga.1
0.000000	0.000000	0.000000	0	'abs

Ga-Ga結合に関する変数を新たに作成・登録

Artemis [GDS] Guess, Def, Set parameters

	Type	Name	Math expression	Evaluated
1	guess	amp		1.03382 +/- 0.21021
2	guess	enot		4.62857 +/- 3.07430
3	guess	delr		-0.00713 +/- 0.01230
4	guess	ss		0.00421 +/- 0.00133
5	guess	enot_2		
6	guess	delr_2		
7	guess	ss_2		
8	guess			
9	guess			
10	guess			
11	guess			
12	guess			

ss\_2: 0.00521642 +/- 0.00055896

Use best fit

Reset all

Highlight

Evaluate

Import GDS

Export GDS

Discard all

Add GDS

About: GDS

⑤

# フィッティング実行

第二配位圏のGa-Ga結合も考慮したフィッティングをかけてみる

Artemis [Data] GaN.txt

Data Path Marks Actions Debug Help

**GaN.txt** CV 1

Data source  
C:\Users\Uchiyama\Desktop\GaN\_exp.prj, 1

Plot this data set as

Title lines

Fourier transform parameters  
 kmin 3 kmax 15 dk 1  
 rmin 1.0 rmax 3.6 dr 0.0

Fitting k weights  
 1  2  3  other 0.5

Other parameters  
 Include in fit  Plot after fit  Fit background  
 $\epsilon(k)$  0  Plot with phase correction

Plot this data set as  $|\chi(R)|$  and  $\text{Re}[\chi(R)]$ .

Include path, Plot after fit (checked)

[GaN] N.1  
[GaN] Ga.1

Include path  Plot after fit  
 Use this path for phase corrected plotting.

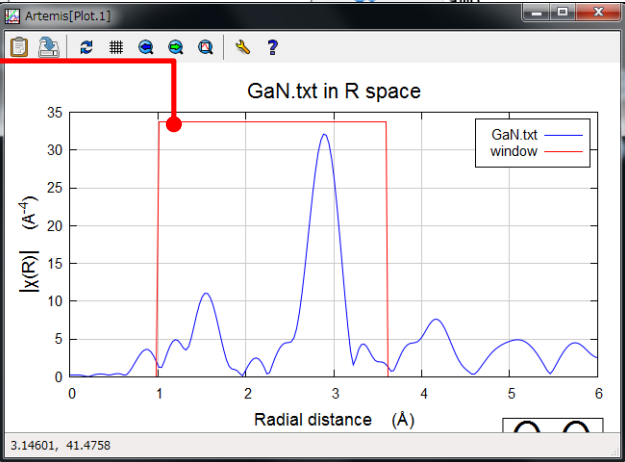
@ Ga.1 @

(2) single scattering, high (97.82)

x	y	z	ipot	label
-0.921314	-1.595650	2.592484	1	Ga.1
0.000000	0.000000	0.000000	0	abs

Label Reff=3.181, nleg=2, degen=12  
 N 12  
 S02 300

GaN.txt in R space



3.14601, 41.4758

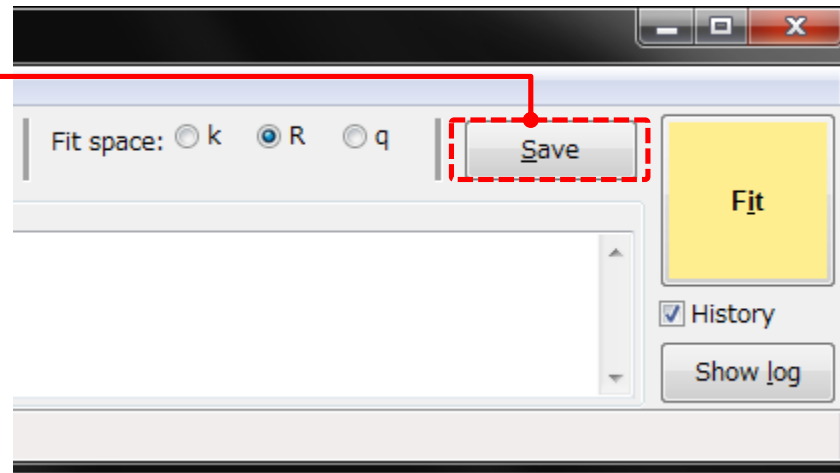
Ga-Ga結合を含むようにフィッティングの範囲を拡大する

# ⑤ フィットニング実行

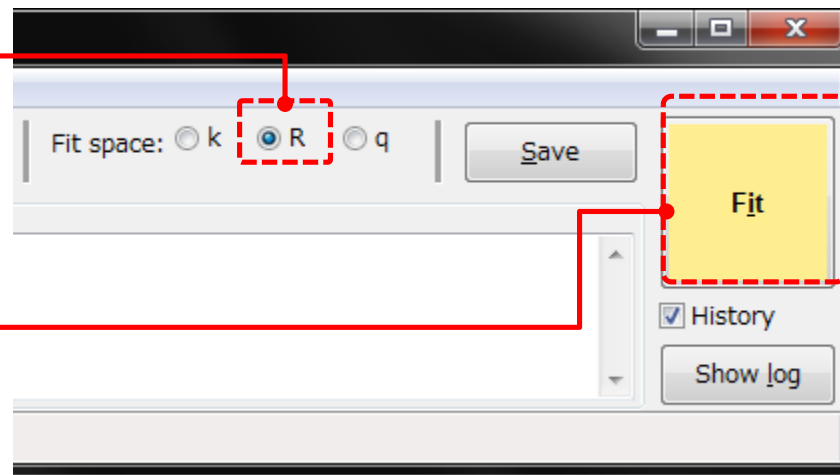
第二配位圏のGa-Ga結合も考慮したフィットニングをかけてみる

いよいよフィットニング！

その前に、保存！！



R を選択



フィットニングを実行



# ⑤

# フィッティング実行

フィッティングが終了すると結果ウィンドウが出てくる

Artemis [Log] Fit 2

```

Name      : Fit 2   (hymko)
Description : fit to GaN.txt
Figure of merit : 2
Time of fit  : 2017-01-29T18:17:45
Environment : Demeter 0.9.24 with perl 5.018002 and using Ifeffit 1.
Interface   : Artemis (Wx 0.9923)
Prepared by :
Contact     :

=====

Independent points      : 19.6054688
Number of variables    : 7
Chi-square              : 1216.7251559
Reduced chi-square     : 96.5235946
R-factor                : 0.0235056
Number of data sets    : 1

Happiness = 96.49/100      color = #E0E895
  An R-factor of 0.02351 gives a penalty of 3.50560.
***** Note: happiness is a semantic parameter and should *****
***** NEVER be reported in a publication -- NEVER! *****

guess parameters:
amp      = 0.94097098  # +/- 0.10111827  [1.00000]
enot     = 3.10499635  # +/- 3.69367682  [0]
delr     = -0.01013450 # +/- 0.01597814  [0]
ss       = 0.00958918  # +/- 0.00115216  [0.00300]
enot_2   = 2.72431374  # +/- 1.30105343  [0]
delr_2   = 0.00439529  # +/- 0.00577224  [0]
ss ?     = 0.00513552  # +/- 0.00052766  [0.00300]

```

Save About Close

Artemis [Log] Fit 2

```

SS_2 & SS      --> 0.4610
All other correlations below 0.4

==== Data set >> GaN.txt << =====

: Athena project      = C:\Users\Uchiyama\Desktop\practice_data_201701\GaN.prj, 1
: name                = GaN.txt
: k-range              = 3.000 - 15
: dk                  = 1
: k-window             = Hanning
: k-weight             = 3
: R-range              = 1 - 3.6
: dR                  = 0.0
: R-window             = Hanning
: fitting space        = r
: background function  = no
: phase correction     = no
: background removal   = E0: 10369.399467, Rbkg: 1.0, range: [0:17.9968295076661], c
: epsilon_k by k-weight = 1.615e-004
: epsilon_r by k-weight = 2.088e-001
: R-factor by k-weight = 1 -> 0.06669, 2 -> 0.03708, 3 -> 0.02351

name          N      S02      sigma^2    e0      delr      Reff      R
=====
[Ga-site] N1.1    4.000    0.941    0.00359    3.105 -0.01014  1.94770  1.93757
[Ga-site] Ga1.1  12.000    0.941    0.00514    2.724  0.00439  3.18060  3.18500

name          ei      third     fourth
=====
[Ga-site] N1.1    0.00000  0.00000  0.00000
[Ga-site] Ga1.1    0.00000  0.00000  0.00000

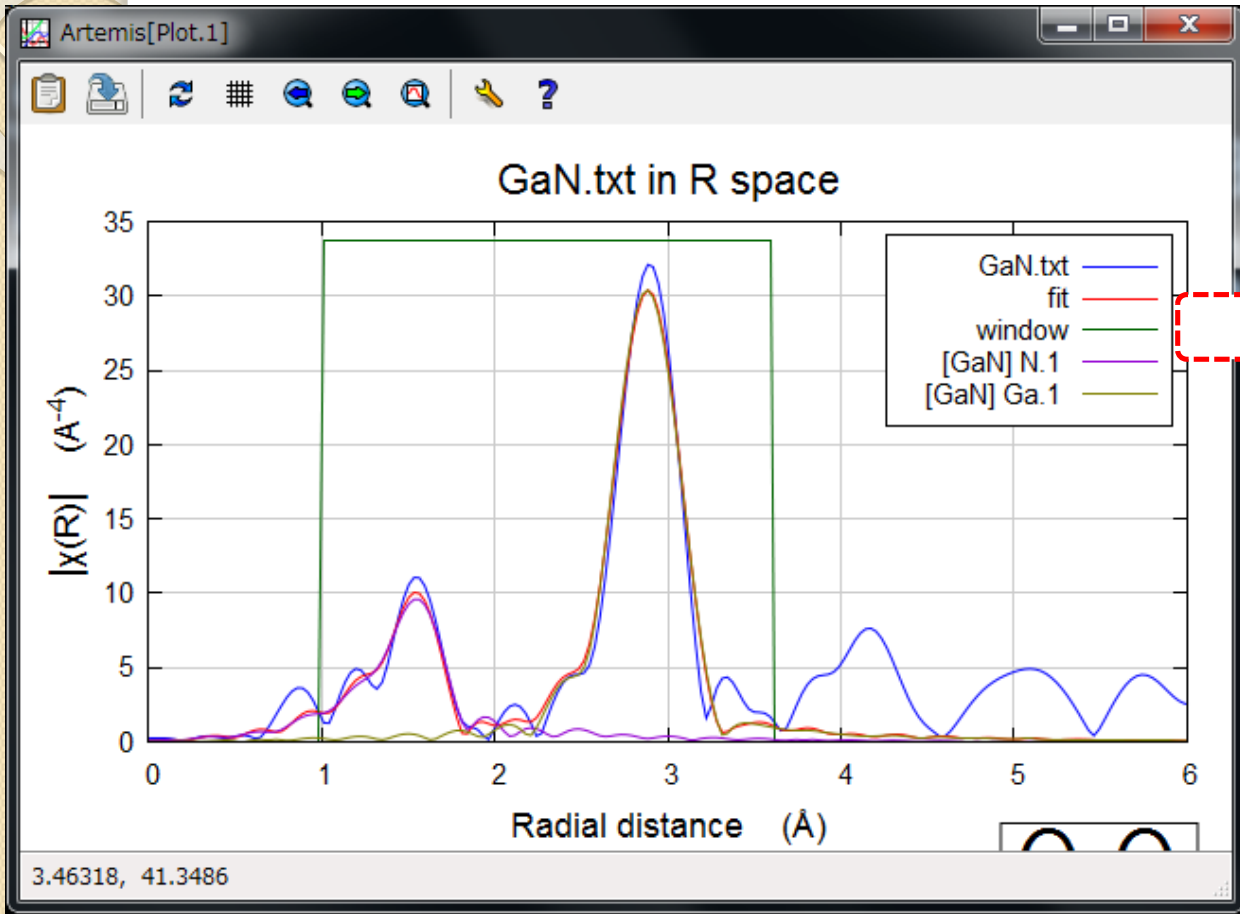
=====

```

Save About Close

# ⑤ フィットティング実行

フィッティングの結果をグラフ上で見る

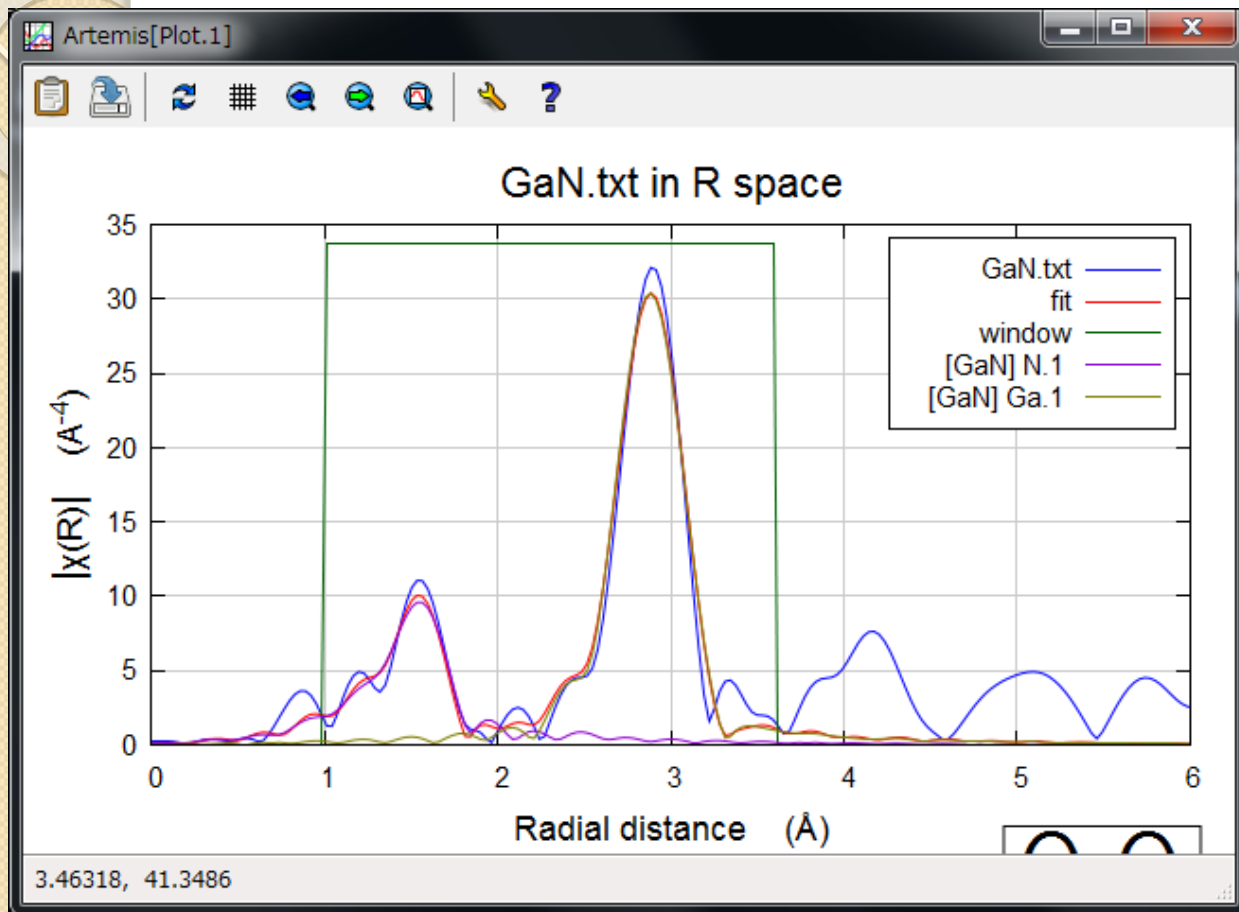


フィッティング結果をプロット

この結果を .txt で保存したい時は？

# ⑤ フィットティング実行

フィッティングの結果を .txt で保存する



保存したいプロットを選択

Save next plot to a file.  
を左クリックしてから

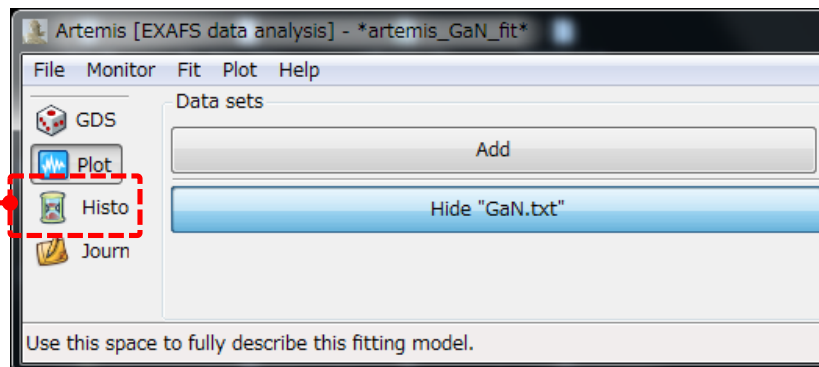
Save next plot to a file

を左クリックしてから

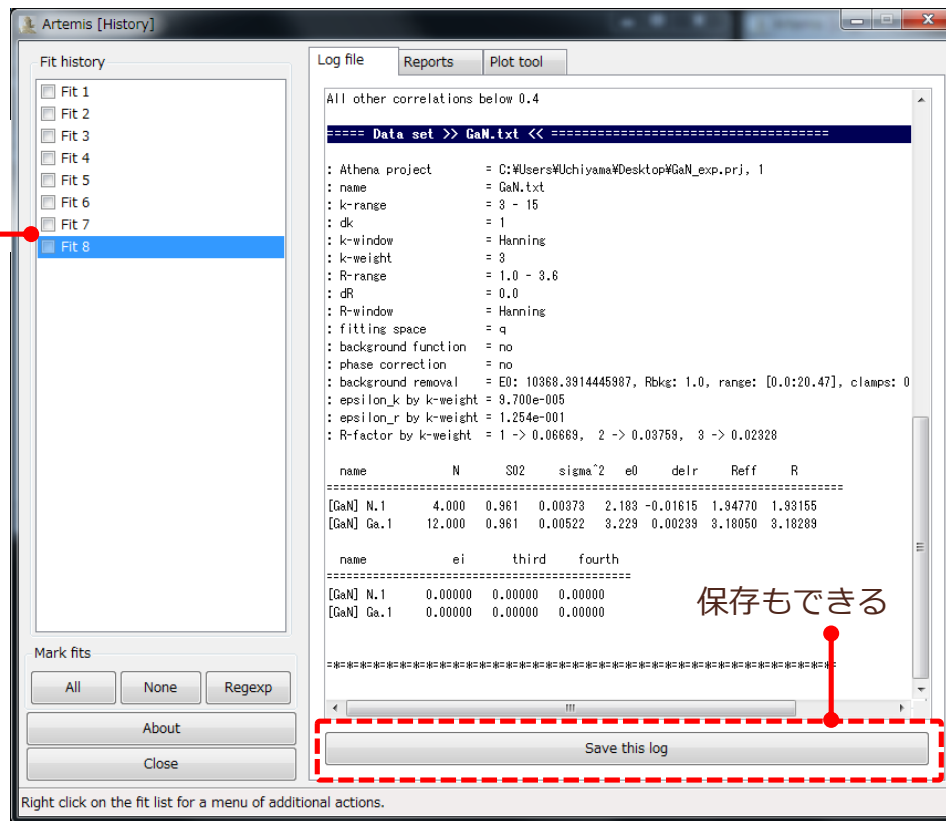
# ⑤ フィットティング実行

過去のフィッティングの結果を見る

History を左クリック



過去のフィッティング結果を選択



## Artemis立ち上げ

- ① Athenaデータ読み込み
- ② 構造モデルの作成(Atoms)  
モデル作成に必要な情報
  - ・吸収元素の種類、吸収端
  - ・結晶構造パラメータ（空間群、座標等）
- ③ EXAFSの理論計算（FEFF）
  - ・ Artemisに予め組み込まれている
- ④ フィッティングパラメータの作成
- ⑤ フィッティング実行
- ⑥ **束縛条件下でのフィッティング**
- ⑦ 解析結果の保存

Athenaでデータ処理しておく！

- ・ Background、Baselineの処理
- ・  $\chi(k)$ (EXAFS振動)の抽出
- ・  $\chi(k)$ をFT-EXAFSに変換

Atoms: FEFFの実行ファイルを作成するためのプログラム  
.cif ファイルを入手しておく  
モデル作成の手間が幾分省ける

FEFF: 光電子の散乱過程と散乱強度を計算するためのプログラム

## ⑥

## 束縛条件下でのフィッティング

変数に制限をかけてフィッティングをかけてみる

(case 1) Ga-N結合、Ga-Ga結合の距離を格子定数から算出し、定数として扱う

- ・ FEFFでは、格子定数から距離  $R$  を計算
- ・ フィッティングでは  $R$  からの変位  $\Delta r$  のみを最適化

$\Delta r (= \text{delr})$  を guess から set パラメータに変更し、“0” として扱えばよい

	Type	Name		Math expression	Evaluated
1	guess	amp	1.00000		0.96133 +/- 0.11075
2	guess	enot	0		2.18334 +/- 7.19794
3	set	delr	0		-0.01615 +/- 0.02866
4	guess	ss	0.00300		0.00373 +/- 0.00187
5	guess	enot_2	0		3.22860 +/- 1.29440
6	set	delr_2	0		0.00239 +/- 0.00571
7	guess	ss_2	0.00300		0.00522 +/- 0.00056
8	guess				
9	guess				
10	guess				
11	guess				
12	guess				

amp: 0.96132855 +/- 0.11074511

変数に制限をかけてフィッティングをかけてみる

(case 2) 結晶構造 (対称性) から、Ga-Ga結合は、Ga-N結合の1.633倍長い

- ・ FEFFでは、格子定数から距離  $R$  を計算
- ・ フィッティングでは  $R$  からの変位  $\Delta r$  のみを最適化

$$R(\text{Ga-Ga}) = 1.633 * R(\text{Ga-N})$$

$$R(\text{Ga-Ga}) + \Delta r (\text{Ga-Ga}) = 1.633 * R(\text{Ga-N}) + 1.633 * \Delta r (\text{Ga-N})$$

$$\rightarrow \Delta r (\text{Ga-Ga}) = 1.633 * \Delta r (\text{Ga-N})$$

delr\_2 を guess から def パラメータに変更し、"1.633\*delr" とすればよい

	Type	Name	Math expression	Evaluated
1	guess	amp	1.00000	0.95596 +/- 0.10437
2	guess	enot	0	5.09752 +/- 3.87233
3	guess	delr	0	
4	guess	ss	0.00300	0.00401 +/- 0.00190
5	guess	enot_2	0	2.75172 +/- 0.50243
6	def	delr_2	1.633*delr	
7	guess	ss_2	0.00300	0.00518 +/- 0.00053
8	guess			
9	guess			
10	guess			
11	guess			
12	guess			

ss\_2: 0.00517904 +/- 0.00052738



## ⑥

## 束縛条件下でのフィッティング

変数に制限をかけてフィッティングをかけてみる

(case 3) amp を 0.8~1.0 の間に収まるようにフィッティングする。

Amp 上で右クリック→Build restraint from amp を選択

Artemis [GDS] Guess, Def, Set parameters

	Type	Name	Math expression	Evaluated
1	guess	amp	1.00000	0.70287 +/- 0.01198
2	guess	enot	Copy amp	4.21186 +/- 5.00355
3	guess	delr	Cut amp	-0.00881 +/- 0.01888
4	guess	ss	Paste below amp	0.00217 +/- 0.00113
5	guess	enot_2	Insert blank line above amp	2.68594 +/- 1.73286
6	guess	delr_2	Insert blank line below amp	0.00316 +/- 0.00703
7	guess	ss_2		0.00389 +/- 0.00027
8				
9				
10				
11				
12	guess			

amp: 0.70287497 +/- 0.01197660

- Use best fit
- Reset all
- Highlight
- Evaluate
- Import GDS
- Export GDS
- Discard all
- Add GDS
- About: GDS



## ⑥

## 束縛条件下でのフィッティング

変数に制限をかけてフィッティングをかけてみる

(case 3) amp を 0.8~1.0 の間に収まるようにフィッティングする。

Artemis: Buil... — □ ×

Create a restraint for the parameter amp

Scale by

Lower bound

Upper bound

数値の制限を指定するウィンドウが出てくる

Scale by : 1000 デフォルトのまま OK

Lower bound : 数値の下限

Upper bound : 数値の上限

Make restraint で確定する

制限パラメータ restrain が追加される

Artemis [GDS] Guess, Def, Set parameters

	Type	Name	Math expression	Evaluated
1	guess	amp	1.00000	0.70287 +/- 0.01198
2	guess	enot	0	4.21186 +/- 5.00355
3	guess	delr	0	-0.00881 +/- 0.01888
4	guess	ss	0.00300	0.00217 +/- 0.00113
5	guess	enot_2	0	2.68594 +/- 1.73286
6	guess	delr_2	0	0.00316 +/- 0.00703
7	guess	ss_2	0.00300	0.00389 +/- 0.00027
8	restrain	res_amp	1000*penalty(amp, 0.8, 1.0)	
9				
10				
11				
12	guess			
13				

amp: 0.70287497 +/- 0.01197660

- Use best fit
- Reset all
- Highlight
- Evaluate
- Import GDS
- Export GDS
- Discard all
- Add GDS
- About: GDS

## Artemis立ち上げ

- ① Athenaデータ読み込み
- ② 構造モデルの作成(Atoms)  
モデル作成に必要な情報
  - ・吸収元素の種類、吸収端
  - ・結晶構造パラメータ（空間群、座標等）
- ③ EXAFSの理論計算（FEFF）
  - ・ Artemisに予め組み込まれている
- ④ フィッティングパラメータの作成
- ⑤ フィッティング実行
- ⑥ モデル妥当性の検証
- ⑦ **解析結果の保存**

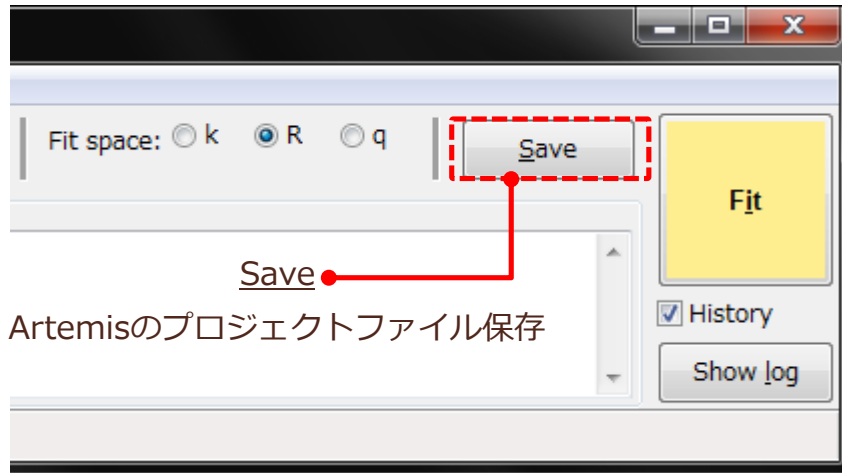
Athenaでデータ処理しておく！

- ・ Background、Baselineの処理
- ・  $\chi(k)$ (EXAFS振動)の抽出
- ・  $\chi(k)$ をFT-EXAFSに変換

Atoms: FEFFの実行ファイルを作成するためのプログラム  
.cif ファイルを入手しておく  
モデル作成の手間が幾分省ける

FEFF: 光電子の散乱過程と散乱強度を計算するためのプログラム

## ⑦ 解析結果の保存



こまめに保存することをおすすめします

# QFS (Quick-First-Shell Fit)

第1配位圏のみを解析するのに便利  
Athenaからデータインポートするまでは同じ

The screenshot shows the Artemis software interface for processing XAFS data. The window title is 'Artemis [Data] GaN.txt'. The main panel is divided into several sections:

- Data source:** G:%XAFS2017%GaN\_exp.prj, 1
- Plot this data set as:** Buttons for k123, R123, Rmr, Rk, and kq.
- Title lines:** A text area for entering titles.
- Fourier transform parameters:** Input fields for kmin (3), kmax (14.5), dk (1), rmin (1), rmax (3), and dr (0.0).
- Fitting k weights:** Checkboxes for 1, 2, 3, and other, with a value of 0.5.
- Other parameters:** Checkboxes for 'Include in fit', 'Plot after fit', and 'Fit background', and a checkbox for 'Plot with phase correction'.

On the right side, there is a 'Path list' area and a list of actions:

- Drag paths from a Feff interpretation list and drop them in this space to add paths to this data set
- [Import crystal data or a Feff calculation](#)
- [Start a quick first shell fit](#)** (highlighted with a red dashed box)
- [Import a structural unit](#)
- [Import an empirical standard](#)

At the bottom, a status bar reads: 'Transferred data set "GaN.txt" to the plotting list.'

# QFS (Quick-First-Shell Fit)

第1配位圏のみを解析するのに便利  
Athenaからのデータインポートするまでは同じ

Artemis [Data] GaN.txt

Data Path Marks Actions Debug Help

**GaN.txt** CV 2 Path list

Drag paths from a Feff interpretation list and drop them

Ga K-edge のデータ

第1配位圏は、Ga-N結合なので N に変える

Artemis: Set up a quick first shell path

Absorber: Ga Scatterer: 0

Edge: K Distance: 2.1

Auto-generate guess parameters

OK

Documentation: QFS

Cancel

フィッティングパラメータを自動的に作成し、登録する

予想される結合距離に変更する  
Ga-N の場合は、2.0

Fourier transform parameters

kmin 3 kmax 14.5 dk 1

rmin 1 rmax 3 dr 0.0

Fitting k weights

1  2  3  other 0.5

Other parameters

Include in fit  Plot after fit  Fit background

$\epsilon(k)$  0  Plot with phase correction

Transferred data set "GaN.txt" to the plotting list.

# QFS (Quick-First-Shell Fit)

Artemis [GDS] Guess, Def, Set parameters

	Type	Name	Math expression	Evaluated
1	guess	aa_ga_n_2	1.00000	
2	guess	ee_ga_n_2	0	
3	guess	dr_ga_n_2	0	
4	guess	ss_ga_n_2	0.00300	
5	guess			
6	guess			
7	guess			
8	guess			
9	guess			
10	guess			
11	guess			

Cut parameters amp, enot, delr, ss, enot\_2, delr\_2, ss\_2

パラメータを自動生成・登録  
N (配位数) は自分で変える

Artemis [Data] GaN.txt

Data Path Marks Actions Debug Help

**GaN.txt** CV 2

Data source  
G:\*\XAFS2017\GaN\_exp.prj, 1

Plot this data set as  
k123 R123 Rmr Rk kq

Title lines

Fourier transform parameters  
kmin 3 kmax 14.5 dk 1  
rmin 1 rmax 3 dr 0.0

Fitting k weights  
 1  2  3  other 0.5

Other parameters  
 Include in fit  Plot after fit  Fit background  
 $\epsilon(k)$  0  Plot with phase correction

**Ga(K)-N**

Include path  Plot after fit  
 Use this path for phase corrected plotting.

@ N @

```
(0) quick first shell path high
  x      y      z      ipot  label
  2.100000  0.000000  0.000000  2  'N
  0.000000  0.000000  0.000000  0  'abs
```

Label Ga-N path at 1000

N	1
S0 <sup>2</sup>	aa_ga_n_2
$\Delta E0$	ee_ga_n_2
$\Delta R$	dr_ga_n_2
$\sigma^2$	ss_ga_n_2
E	
3rd	
4th	

The user-supplied value of k-weight for use in the fit. You may choose any or all k-weights for fitting.

# 付録1：マニュアル・参考情報

## Html版マニュアル

<http://cars9.uchicago.edu/~ravel/software/doc/Artemis/Artemis.html>

## 各種参考情報

<http://xafs.org/Tutorials>

特にShelly D. Kelly 氏(Argonne Natl. Lab.) のAthenaとArtemisに関するtutorial

[http://xafs.org/Tutorials?action=AttachFile&do=get&target=Basics\\_of\\_XAFS\\_to\\_chi.pdf](http://xafs.org/Tutorials?action=AttachFile&do=get&target=Basics_of_XAFS_to_chi.pdf)

[http://xafs.org/Tutorials?action=AttachFile&do=get&target=Basics\\_of\\_XAFS\\_analysis.pdf](http://xafs.org/Tutorials?action=AttachFile&do=get&target=Basics_of_XAFS_analysis.pdf)

Iffefitのメーリングリスト（Iffefit, Athena, Artemisの開発者から回答してもらえる）

<http://millenia.cars.aps.anl.gov/mailman/listinfo/iffefit/>

メーリングリストのアーカイブ（過去に同様な質問がされていないかどうか確認しておく）

<http://millenia.cars.aps.anl.gov/pipermail/iffefit/>

# 付録 2 : 結晶構造データベース

- ICSD (Inorganic Crysta Structure Database)

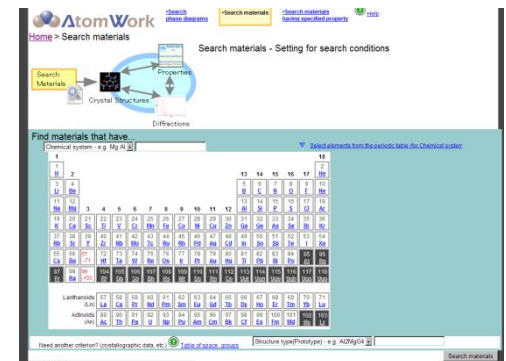
- <http://icsd.ill.eu/icsd/index.php>



- NIMS物質・材料データベース

- <http://mits.nims.go.jp/>

ユーザー登録が必要(無料)

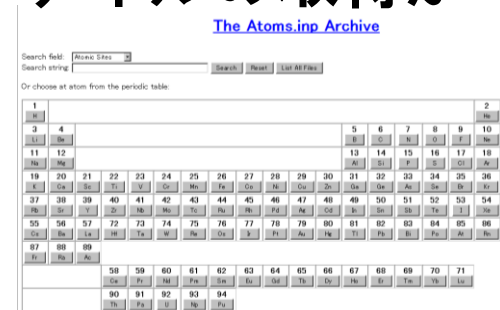


- The Atoms.inp Archive

- <http://cars9.uchicago.edu/~newville/adb/search.html>

ATOMS on the Webとリンクし、feff.inpファイルの取得が

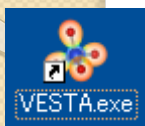
可能





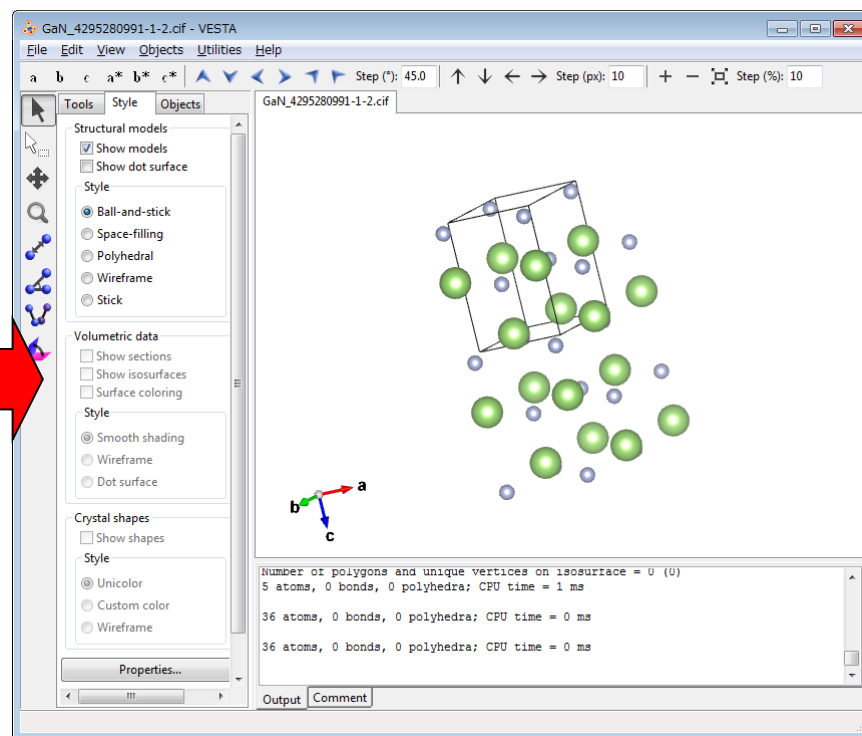
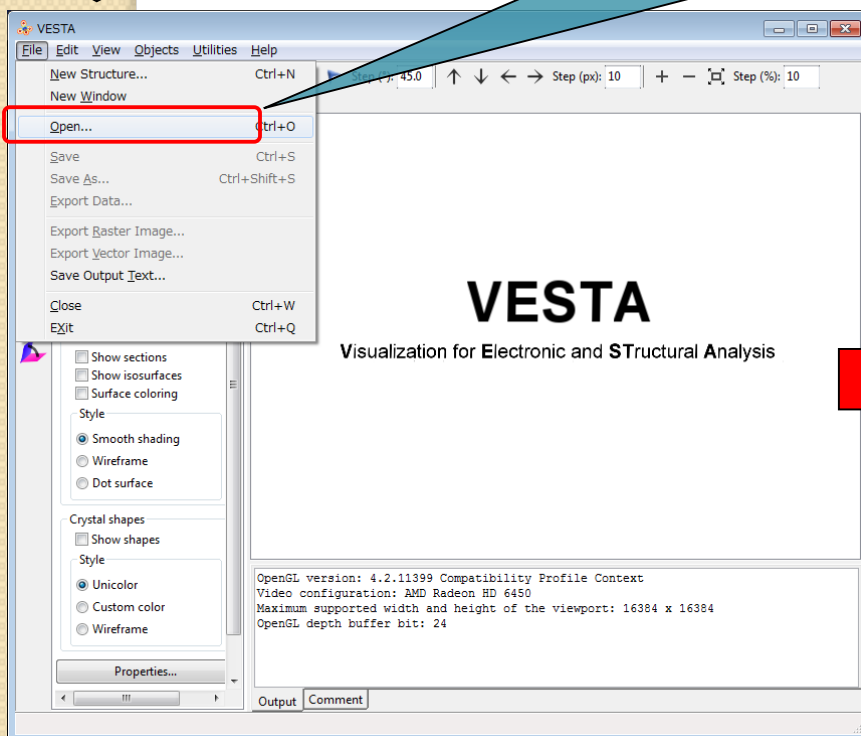
# 付録3：モデルの三次元可視化による確認 (可視化プログラム利用)

ここでは可視化プログラムの一つとしてVESTAを利用する。  
(<http://jp-minerals.org/vesta/jp/>)



プログラム起動

メニューから **File - Open** を選択



# 付録4 : atoms.inpをインターネット上で作成

http://cars9.uchicago.edu/~ravel/software/

XAS Analysis Software Using IFEFFIT

The software on this page is freely available and free of cost. It runs on most platforms, including linux, other unixes, Windows, and Macintosh OSX. Easy-to-use installer packages exist for many (but not all) common combinations of hardware and operating system.

Please read the [bug reports page](#) before reporting a problem with my software.

Are you subscribing to the IFEFFIT mailing list yet?

ATHENA  
Current release: 0.8.10.9  
Release date: 1 July, 2009

ATHENA is an interactive graphical utility for processing EXAFS data. It handles most of the common data handling chores of interest, including downloading, aligning, merging, background removal, Fourier transform, and much more.

ARTEMIS  
Current release: 0.8.013  
Release date: 15 December, 2008

ARTEMIS is an interactive graphical utility for fitting EXAFS data using theoretical standards from FEFF and sophisticated data modelling along with flexible data visualization and statistical analysis. ARTEMIS includes interfaces to ATOMS and FEFF.

HEPHAESTUS  
Current release: 0.18  
Release date: 15 December, 2008

HEPHAESTUS is a souped up periodic table for the X-ray absorption spectroscopist. It is especially handy at the beamline, providing a number of utilities involving tables of absorption coefficients and other chemical data.

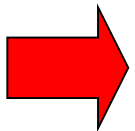
DEMETER  
Current release: 0.0.1  
Release date: 5 September, 2006

DEMETER is a set of Perl programming tools for creating IFEFFIT applications.

Atoms 3.0  
Current release: 3.0.1  
Release date: 29 October, 2003

ATOMS is a program providing crystallographic functionality for the X-ray absorption spectroscopist. Its primary function is to generate input files for the popular XAFS theory code, FEFF, from crystallographic data. It can also form other useful lists of atomic coordinates, make calculations using tables of absorption coefficients, and a few other interesting chores.

WebATOMSをクリック



文献などから既知の結晶構造を入力

ATOMS on the Web

ATOMS is a program for generating lists of atomic coordinates from crystallographic data. The primary use of ATOMS is to create input files suitable for running the *ab initio* XAFS program FEFF, however several other interesting output formats are available.

This web page demonstrates the main features of ATOMS. It consists of a rather large form which you may fill in with data describing your crystal. You may also search a database of input data for ATOMS. After clicking the "Run Atoms" button, your browser will display an input file suitable for running FEFF (or perhaps some other kind of interesting output file). You can get help about any of the parameters by following the link bound to the parameter name.

This web page does not offer all the features available in the version of ATOMS which you can run on your own computer. Please see the [ATOMS homepage](#) for complete details.

Operational Parameters

Space Group:  Rmax: 10 Edge:

Output Type:  feff6.inp Shift:

Lattice Constants and Angles

A:  B:  C:   
Alpha:  Beta:  Gamma:

Table of Crystallographic Sites

Cent.	Element	X	Y	Z	Tag
<input type="radio"/>	1	<input type="text"/>	<input type="text"/>	<input type="text"/>	<input type="text"/>
<input type="radio"/>	2	<input type="text"/>	<input type="text"/>	<input type="text"/>	<input type="text"/>
<input type="radio"/>	3	<input type="text"/>	<input type="text"/>	<input type="text"/>	<input type="text"/>
<input type="radio"/>	4	<input type="text"/>	<input type="text"/>	<input type="text"/>	<input type="text"/>
<input type="radio"/>	5	<input type="text"/>	<input type="text"/>	<input type="text"/>	<input type="text"/>
<input type="radio"/>	6	<input type="text"/>	<input type="text"/>	<input type="text"/>	<input type="text"/>
<input type="radio"/>	7	<input type="text"/>	<input type="text"/>	<input type="text"/>	<input type="text"/>
<input type="radio"/>	8	<input type="text"/>	<input type="text"/>	<input type="text"/>	<input type="text"/>
<input type="radio"/>	9	<input type="text"/>	<input type="text"/>	<input type="text"/>	<input type="text"/>
<input type="radio"/>	10	<input type="text"/>	<input type="text"/>	<input type="text"/>	<input type="text"/>

WebATOMS version 1.8 (Atoms 3.0beta10) (3 February, 2005)

ATOMS databaseをクリック

# atoms.inpをインターネットからダウンロード

## ① 目的の元素をクリック

The Atoms.inp Archive

Search field: Atomic Sites  
Search string: [ ] [Search] [Reset] [List All Files]

Or choose from atom from the periodic table:

1																	2
3	4											5	6	7	8	9	10
11	12											13	14	15	16	17	18
19	20	21	22	23	24	25	26	27	28	29	30	31	32	33	34	35	36
37	38	39	40	41	42	43	44	45	46	47	48	49	50	51	52	53	54
55	56	57	72	73	74	75	76	77	78	79	80	81	82	83	84	85	86
87	88	89															
		58	59	60	61	62	63	64	65	66	67	68	69	70	71		
		90	91	92	93	94											
		Th	Pa	U	Np	Pu											

[About the Atoms.inp Archive] [Atoms Home Page]

List of files with atom 'Zn' - 41 matches found

Choose one of the following files:

- Adamite.inp : Adamite
- Becherite.inp : Becherite
- Becherite\_02.inp : Becherite
- Bederite.inp : Bederite
- Ferri\_clinoholmquistite.inp : Ferri-clinoholmquistite
- Franklinfurnaceite.inp : Franklinfurnaceite
- Glaucochroite.inp : Glaucochroite
- Glaucochroite\_02.inp : Glaucochroite
- Glaucochroite\_03.inp : Glaucochroite
- Glaucochroite\_04.inp : Glaucochroite
- Harystonite.inp : Harystonite
- Hogboomite.inp : Hogboomite
- Holdenite.inp : Holdenite
- Hopeite.inp : Hopeite
- Kottigite.inp : Kottigite
- Lawsonbauerite.inp : Lawsonbauerite
- Legrandite.inp : Legrandite
- Melilite\_Ca2ZnGe1.25Si.75O7.inp : Melilite - Ca2ZnGe1.25Si.75O7
- Melilite\_Ca2ZnGe2O7.inp : Melilite - Ca2ZnGe2O7
- Nanuivite.inp : Nanuivite
- Paradamite.inp : Paradamite
- Reinerite.inp : Reinerite
- Scholzite.inp : Scholzite
- Sclarite.inp : Sclarite
- Villyaellenite.inp : Villyaellenite
- Wurtzite\_10H.inp : Wurtzite - 10H
- Wurtzite\_8H.inp : Wurtzite - 8H

## ② 目的の物質を探し出してチェック

- Nanuivite.inp : Nanuivite
- Paradamite.inp : Paradamite
- Reinerite.inp : Reinerite
- Scholzite.inp : Scholzite
- Sclarite.inp : Sclarite
- Villyaellenite.inp : Villyaellenite
- Wurtzite\_10H.inp : Wurtzite - 10H
- Wurtzite\_8H.inp : Wurtzite - 8H
- Zn(Zn.1Li.6Si.3)SiO4\_alpha.inp : Zn(Zn.1Li.6Si.3)SiO4 - alpha
- Zn(Zn.1Li.6Si.3)SiO4\_beta.inp : Zn(Zn.1Li.6Si.3)SiO4 - beta
- Zn.inp : zinc
- Zn2SiO4.inp : Willemite
- Zn4Si2O7\_OH\_2.inp : hemimorphite
- Zn5OH6\_CO3\_2.inp : hydrozincite
- ZnCO3.inp : Zinc Carbonate (smithsonite) (calcite structure)
- ZnF2.inp : ZnF2 (cassiterite like structure)
- ZnFe2O4.inp : franklinite
- ZnO.inp : zincite ZnO**
- ZnS-alter.inp : ZnS zinc sulfide (zincite structure, hexagonal)
- ZnS.inp : sphalerite ZnS (cubic zinc sulfide structure)
- ZnSO4.inp : zinc sulfate
- ZnSe.inp : ZnSe (cubic zinc sulfide structure)
- ZnTe.inp : ZnTe (cubic zinc sulfide structure)

[Get Atoms.inp] [Run WebAtoms]

[ Search again ] [About The Atoms.inp Archive] [Atoms Home Page]

Matt Newville (newville@cars.uchicago.edu)

## ③ Get Atoms.inpをクリック

```
title name: zincite ZnO
title formula: ZnO
title sites: Zn1_01
title refer1: wyckoff, vol 1, ch III, p 111
title refer2:
title schoen:
title notes:
space: p 63 m c
a = 3.2495 b = 3.2495 c = 5.2089
alpha= 90 beta= 90 gamma= 120
rmax = 6.00
core = Zn1
atom
Zn 0 0.33333 0.66666 0.00000 Zn1
O 0.33333 0.66666 0.34500 O1
-----
```