

プログラム SAngler 2.1.39 マニュアル

2020 年 6 月 15 日

高エネルギー加速器研究機構

物質構造科学研究所

放射光実験施設/構造生物学研究センター

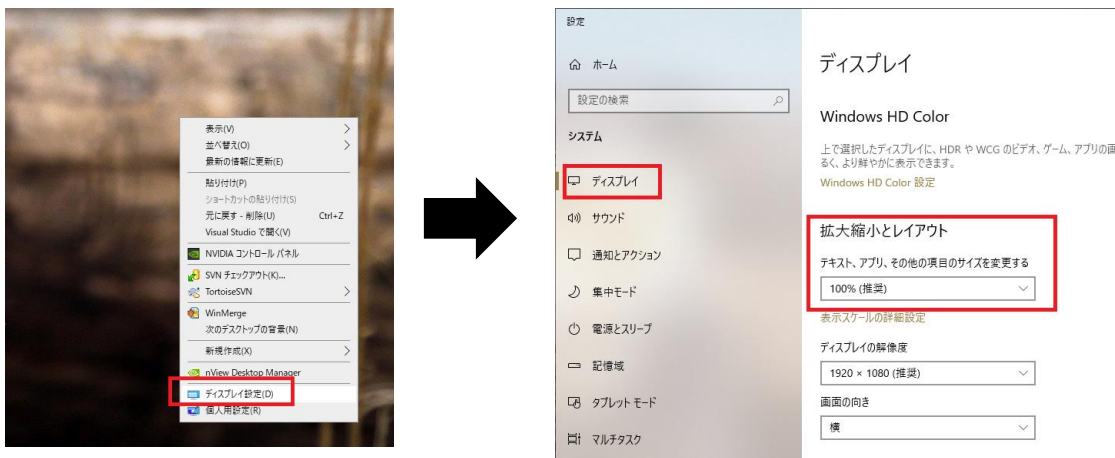
清水伸隆、谷田部景子、米澤健人

内容

1. はじめに.....	3
2. 使用する前に.....	3
3. 使用方法.....	5
① ソフトウェアの動作基本設定の確認.....	5
② ConfigSetting の設定.....	9
③ Detector の設定.....	13
④ Mask ファイルの作成.....	14
⑤ Uniformity 機能.....	20
⑥ ビームセンターとカメラ長の校正 (Calibration).....	24
⑦ 円周平均 (Average).....	28
(1) 測定したデータを順番に指定して処理する場合.....	28
(2) 指定したフォルダを監視し、更新されたイメージデータを自動で円周平均する場合 (Autorun) (同時にバックグラウンドの引き算も自動実行することもできる).....	39
⑧ PointPickViewer.....	43
⑨ 円周平均後の dat ファイルの平均 (DatAverage).....	50
⑩ Background の差引き 1 (Sub_1).....	52
⑪ Background の差引き 2 (Sub_2).....	56
⑫ Background の差引き 3 (Sub_3).....	63
⑬ 水を使用して散乱強度の単位を絶対散乱強度へ変換する (ABS_W).....	71
⑭ Glassy Carbon を使用して散乱強度の単位を絶対散乱強度へ変換する (ABS_GC).....	77
⑮ 解析 (Analysis).....	83
(1) LogY プロット.....	84
(2) Guinier プロット.....	87
(3) Kratky プロット.....	90
(4) N Kratky プロット.....	91
4. Reference.....	96
5. 補足.....	96

1. はじめに

- ① このマニュアルは、2020 年 6 月 15 日現在のバージョン 2.1.39 対応したものです。バージョンが上がると操作が変わる可能性がありますので、ご了承下さい。最新のマニュアルにてご確認下さい。
- ② SAngler の表示が崩れて、ボタンなどが隠れてクリックできないような場合は、ディスプレイ設定を変更すれば直る可能性があります。Windows 10 の場合はデスクトップで右クリックし、「ディスプレイ設定」から「拡大と縮小とレイアウト（テキスト、アプリ、その他の項目サイズを変更する）」において、表示のスケールを「100%」に変更して下さい。多くの場合は、（推奨）とされている設定で問題ありません。Windows 8.1 の場合も同様の設定を確認して下さい。



2. 使用する前に

- ① プログラムは Windows にのみ対応しています。現在の推奨動作環境は Windows 10 の 64bit です。Mac の仮想環境でも動作します。
- ② プログラムは 1 つの圧縮ファイルとして公開しております。ダウンロードして、HD 内のお好きな場所に解凍して下さい。
- ③ 圧縮ファイルを解凍すると、以下のファイルが生成します。

フォルダ	[system]	システムログが出力される場所。ConfigSetting で変更可。
	[autorg_kek]	autorg_kek のプログラム群が入っているフォルダ。
EXE, DLL	clsImgAggrPrj.dll	各 EXE で使用している DLL。
	RemoteTrace.dll	リモート制御用 DLL。
	SAngler.exe	SAngler 本体。

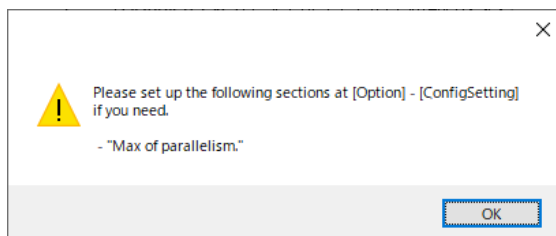
	ConfigCustom.exe	設定ファイル管理・編集用 EXE。
	SAnglerAnalysis.exe	SAngler 解析 EXE。
	AzimuthallIntensityHistogram.exe	円周上データ強度ヒストグラム EXE。
	PointPickViewer.exe	PointPick グラフビューワーEXE。
設定 ファイル	system.xml	システムログの保存期間やギニエ解析の条件など、SAngler で使用する基本設定が保存されている。
	facility.xml	施設名や使用するカウンタファイルの情報など、SAngler で使用する施設情報が設定されている。ConfigCustom.exe で設定可。
	detector.xml	検出器名、検出器が扱える画像の拡張子、イメージサイズ・画素数など、SAngler で使用する検出器情報が設定されている。ConfigCustom.exe で設定可。
	calibrant.xml	【Calibration】タブで使用する標準試料の名称、面間隔、次数など、SAngler で使用する標準試料情報が設定されている。 ConfigCustom.exe で設定可。
	config.xml	前回の条件が一部保存されている。
	az_config.xml	AzimuthallIntensityHistogram.exe で起動時に読み込まれる設定ファイル。このファイルがないとAzimuthallIntensityHistogram.exe は起動できません。
その他	Nist_GC_data.txt	【ABS_GC】タブで使用する SRM3600 (NIST) 基準データ。

- ④ Analysis のギニエ解析では、ATSAS の autorg と KEK で開発した自動ギニエ解析機能が両方使用可能です (ATSAS を利用する場合は、事前インストールが必要です)。

3. 使用方法

① ソフトウェアの動作基本設定の確認

- i. 「SAngler(.exe)」をダブルクリックして起動します。
※起動時に以下のエラーが出る場合があります。



Please set up the following sections at [Option] – [ConfigSetting] if you need.

- “autorg.exe” ...A

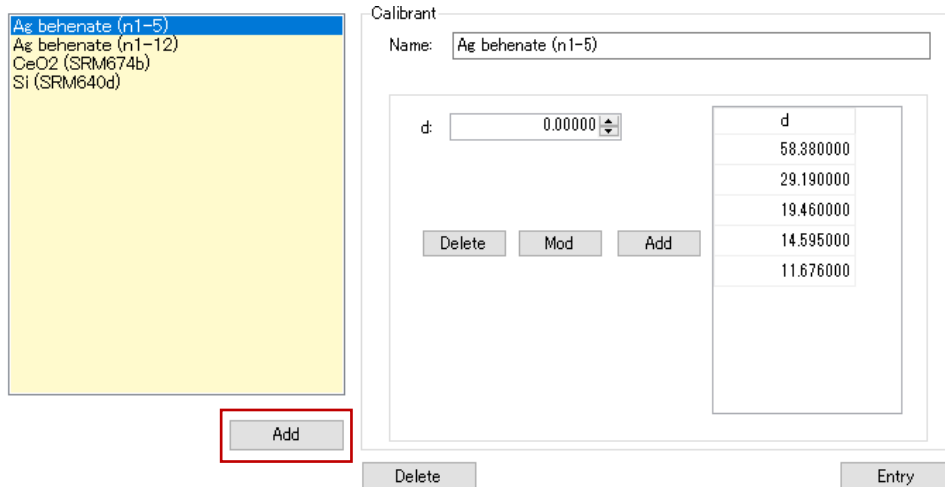
- “Max of parallelism.” ...B

- A : Analysis のギニエ解析において、ATSAS の autorg の機能が利用できます。ATSAS をインストールしていない場合、このメッセージが出ます。もしくは、ATSAS で指定される Default のディレクトリ以外にインストールした場合は、上記の通り[Option] - [ConfigSetting]にて autorg.exe のあるフォルダを指定して下さい（詳しくは「② ConfigSetting の設定」を参照してください）。
- B : 画像データを 1 次元のデータに円周平均する際、多数のファイルを高速で解析するために、PC のマルチスレッド環境に対応した処理を実行できません。上記と同じく[ConfigSetting]にて設定して下さい（詳しくは「② ConfigSetting の設定」を参照してください）。

- ii. ConfigSetting の設定

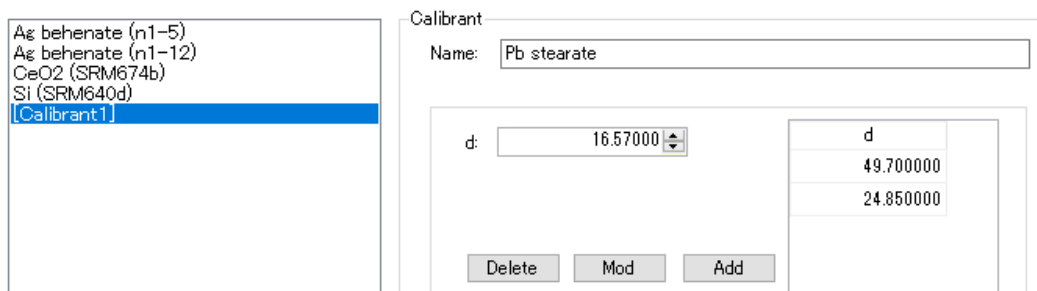
「② ConfigSetting の設定」をご覧ください。

- iii. 次に、[Option] - [ConfigCustom]を実行します。ここでは、計測した散乱強度を入射(積分)強度で規格化するために必要なカウンタファイルの仕様を登録する【Facility】タブ、利用可能な検出器の情報を設定する【Detector】タブ、校正用のベヘン酸銀などの情報を登録する【Calibrant】タブがあります。まず、【Calibrant】タブで新たな標準試料を登録する方法を説明します。
- iv. 【Calibrant】のタブに移動すると、初期設定では「Ag behenate (ベヘン酸銀) (n1-5)」、「Ag behenate (n1-12)」、「CeO₂ (SRM674b) (酸化セリウム、セリア)」、「Si (SRM640d)」の 3 種 4 パターンが登録されています。SRM (Standard Reference Materials) は、NIST (アメリカ国立標準技術研究所) から供給 (販売) されている校正用の標準物質です。

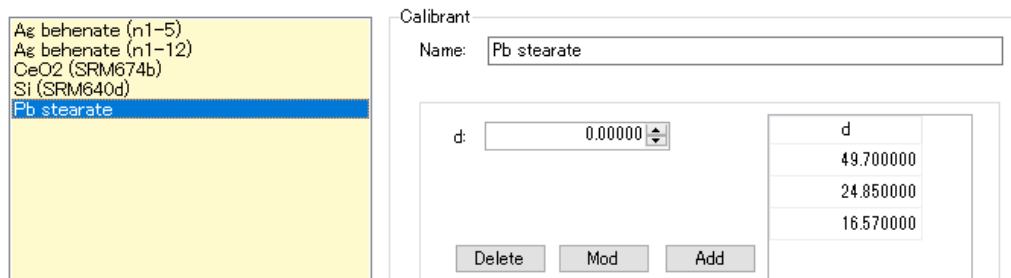


試しに Ag behenate (n1-5)をクリックすると、右側の表に面間隔 d: 58.38Å に基づき、1~5 次の値が記されています。ステアリン酸鉛等の別の試料のデータを Calibration に利用する場合は、新たに登録する必要があります。新たに追加する場合は、左下にある[Add](iv の図の赤枠)をクリックします。

- v. 新たに「Calibrant1」という項目が追加されます。右側の[Calibrant]の欄で試料名[Name]を編集し、[d]に値を入力して[Add]をクリックすると、右側の表に値が入ります。引き続き解析に必要な次数の値を順次入力して較正テーブルを完成させます。値を消したい場合は、その値を選択して[Delete]、値を修正する場合は、その値を選択して、[d]に表示された値を変更してから[Mod]をクリックします。

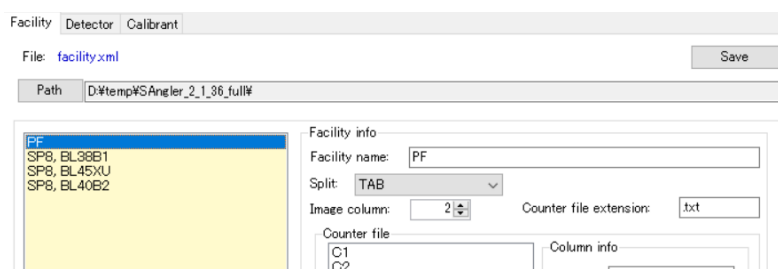


- vi. 較正テーブルの入力が終了したら、右下の[Entry]をクリックします。すると、今入力した較正試料が新たに追加されます。



vii. 追加の作業が完了したら右上の[Save]をクリックします。保存ファイルは同じフォルダ内にある「calibrant.xml」に上書きします。完了したら、右上の[x]でウィンドウを閉じます。ここで新たに登録した情報は、【Calibration】のタブ内で[Load]すると有効になります。

viii. 【Facility】タブでは、PFのビームラインとSPRing-8のBL38B1、BL45XU(2018年12月でSAXSは利用停止)、BL40B2に関して、入射 X 線強度等で散乱強度を規格化する際に必要なカウンタファイルの仕様が設定されています。



ix. 【Detector】のタブでは、対応している検出器に関して設定されています。現在、SAngrer では PILATUS シリーズ (tif、cbf ファイル) と R-AXIS シリーズのファイルフォーマットに対応しています。同じタイプの検出器であれば、ここに新たに設定することで対応することが出来ます。



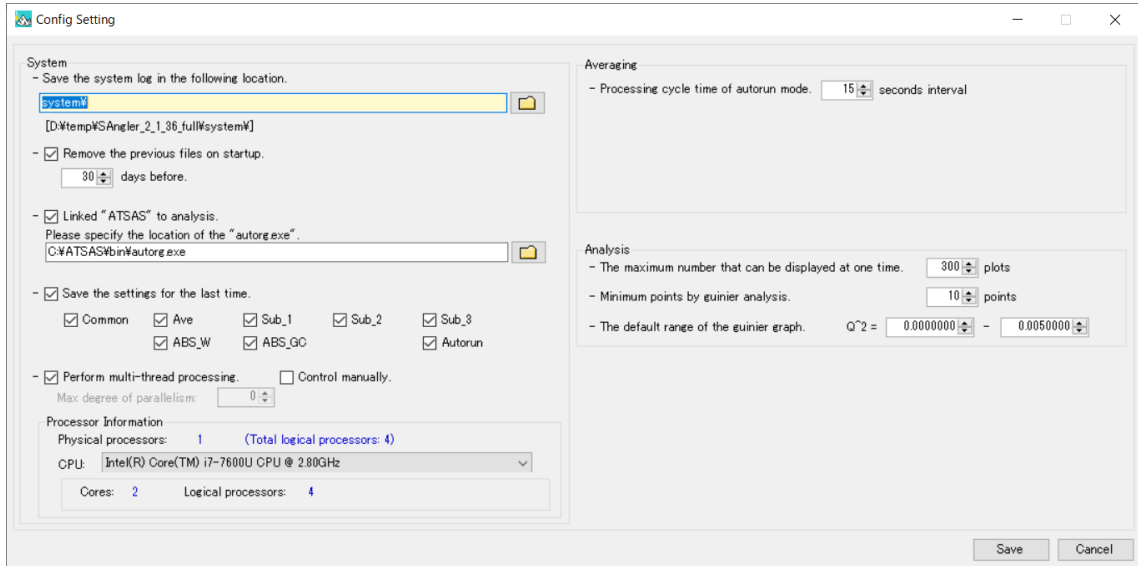
x. SAngrer のメインウィンドウには 7 つのタブがあります。【Detector】→【Mask】→【Cal】→【Ave】→ (ABS_W or ABS_GC) →【Sub_1】 or 【Sub_2】 or 【Sub_3】の順に進めて行くことで、順番にデータを処理することができます。また、バージョン 2.1.25 以降は、ログプロットやギニエプロット等を作成可能な【Analysis】タブが別プログラムとして独立しました。([Analysis] - [SAngrerAnalysis] から起動します。)

一方で、【ABS_W】と【ABS_GC】タブでは、水と Glassy Carbon (NIST SRM3600 を基準とする) の散乱強度を利用して、計測した試料の散乱強度 (counts) を絶対散乱強度 (cm^{-1}) に変換するた

めの変換係数(CF=Conversion Factor)を求めることができます。そのために、入射 X 線の(積分)強度(I_0)や試料を透過した X 線の(積分)強度(I_1)などを利用して透過率を求めるメニューが【Sub_2】、【Sub_3】タブや【ABS】タブにあります。また、入射 X 線の積分強度の値には、必ず Dark レベルがあります。従って、それらの値を使って散乱強度を規格化する場合は、必ず Dark レベルを引く必要があります。そういった機能も【Ave】、【Sub_2】、【Sub_3】、【ABS】タブには実装されています。


② ConfigSetting の設定

ConfigSetting では、SAngher の起動・終了時の設定、他の EXE との連動、解析時の設定など、SAngher の挙動に関する設定を行うことができます。



System	- Save the system log in the following location.	システムログが出力される場所。 初期値は「system¥」
	- Remove the previous files on startup.	システムログ自動削除期間。初期値は 30 日。それ以前のシステムログは削除されます。
	- Linked "ATSAS" to analysis.	Analysis で「ATSAS」を使用するかどうかの設定。使用する場合はチェックボックスにチェックを入れ、ATSAS がインストールされている場所を設定してください。
	- Save the settings for the last time.	前回の解析条件を保存する際に、どの情報を保存するか設定する。 保存したい項目のチェックボックスにチェックする。
	- Perform multi-thread processing.	<p>パラレル処理をする際はチェックボックスにチェックを入れる。処理スレッド制御を手動で設定する場合は [Control manually.] にチェックを入れ、スレッド数を入力します。</p> <p>総論理プロセッサ数より大きい数値を設定すると警告文が表示されます。</p> <p>※大きい数値でも設定することはできます。</p> <p>下の項目に現在の PC の情報が表示されますので、設定の参考にしてください。</p>

		Physical processors: 物理プロセッサ数 Total logical processors: 総論理プロセッサ数 Cores: コア数 Logical processors: 論理プロセッサ数
Averaging	- Processing cycle time of autorun mode.	Autorun 処理時の解析周期
Analysis	- The maximum number that can be displayed at one time.	同時に解析・表示できるデータ最大値
	- Minimum points by guinier analysis.	ギニエ解析に使用する最小ポイント数
	- The default range of the guinier graph.	ギニエ解析グラフを初期表示する範囲

- i. ウィンドウ左上部メニューから[Option] - [ConfigSetting]を実行します。
- ii. 【System】の欄では、system ログを保存するフォルダを指定します。SAngler は起動時に日付を確認し、system ログファイルを作成しています。system ログファイルは日付単位で管理されます。日付を跨いで稼働している場合は最初に書き込んだ system ログファイルに記録されます。system ログファイルは初期値では、SAngler のフォルダ内の「system」フォルダが設定されています。変更する場合は、をクリックして指定します。
- iii. system ログファイルは日付ごとに増えていきます。[Remove the previous files on startup.]チェックボックスにチェックを入れると起動時に確認を行い、指定した日数を超えた system ログファイルを自動的に削除します。初期設定ではログファイルは 30 日経つと消去されるように設定されています。
- iv. [Linked “ATSAS” to analysis]チェックボックスには初期設定でチェックが入っています。ギニエ解析を行う際に、ATSAS の autorg を利用する事ができるので、そのインストールパスが表示されています。ただし、ATSAS はご自身で別途インストールして頂く必要があります。2020 年 5 月 20 日現在、ATSAS の最新バージョンは 3.0.1 ですが、2.8.4 以前では実行ファイルのインストール場所が異なっていますのでご注意ください。ただ、2.8.4 以前でも ATSAS の標準ディレクトリにインストールされている場合は、SAngler は自動でそのディレクトリを認識して設定します。また、ATSAS はアカデミックフリーですが、商業ユースではライセンス料が発生します。ATSAS に関しては、詳しくは以下のサイトをご覧ください。
<http://www.embl-hamburg.de/biosaxs/software.html>
- v. [Save the setting for the last time.]チェックボックスでは前回の設定を保存する際にどの設定を

保存するか指定することができます。

Common: 共通情報。

- ・Facility 情報、カウンタファイル情報、検出器情報、Conversion Factor 情報、ファイルタイプ

Ave: 【Ave】タブの円周平均処理に関する情報。

- ・Mask 情報、波長、カメラ長、ビームセンター、傾き、イメージサイズ、出力情報、規格化情報

Sub_1: Sub_1 処理に関する情報。

- ・入力情報、出力情報、処理対象ファイル情報

Sub_2: Sub_2 処理に関する情報。

- ・出力情報、φ 値、Psv 値

Sub_3: Sub_3 処理に関する情報。

- ・出力情報、カウンタファイル、処理対象ファイル情報

ABS_W: ABS_W 処理に関する情報。

- ・Water ファイル情報

ABS_GC: ABS_GC 処理に関する情報。

- ・GC ファイル情報

Autorun: 【Ave】タブで円周平均処理を Autorun モードで処理する際の情報。

- ・Autorun 処理モード、ピックアップ Q 値、出力情報、カウンタファイル、プリフィックス情報

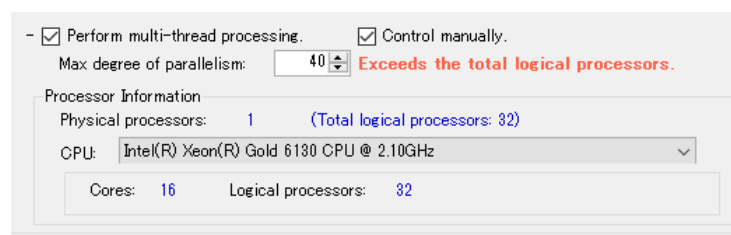
vi. [Perform multi-thread processing]チェックボックスではパラレル処理をするかどうかの設定を行います。

円周平均では多数のファイルを処理するため、高速化対応としてパラレル処理を実装しています。パラレル処理を行う場合はチェックボックスにチェックしてください。その際にパラレル処理時のスレッド上限を CPU が行うか、それとも手動で設定するか選択します。

手動で設定する場合は、[Control manually]チェックボックスにチェックを入れ、スレッド上限数を設定してください。

スレッド上限数はその PC のスペックや SAngler 以外の他の作業等に依存します。下部に現在の PC の情報を表示しています。その情報を参考に、スペック上限数を設定してください。

※ 論理プロセッサ数よりも大きい値を設定すると警告文が表示されますが、処理することは可能です。ですが PC に負荷をかけることとなりますので、おすすめはしません。



- vii. 【Averaging】では、円周平均でフォルダ自動監視機能 (Autorun) を利用する場合、初期設定では 15 秒おきに処理が実行されることになっていますが、測定スピード、処理スピードに合わせて適切な時間に変更して下さい。なお、パラレル処理を行わずに円周平均する場合、PILATUS 2M サイズであれば 1 枚あたり 1 秒の時間がかかります。
- viii. 【Analysis】の欄では、SAnalerAnalysis での動作や表示に関する設定を行いません。
- ・ SAnalerAnalysis では、一度に表示可能なデータ数の上限は 300 となっています。動作が不安定な場合は、減らしてみてください。
 - ・ ギニエ解析を行なう際に、直線近似に使用する測定点の最小値が設定されています。初期設定では 10 点です。10 点以下になる場合は、エラーが出ます。
 - ・ Guinier プロットを作成する場合に、Q 領域 (\AA^{-1}) の初期表示範囲を設定しています。初期値は 0.000~0.005 になっていますが、変更可能です。
- ix. 設定が完了したら[Save]をクリックして閉じます。「The setting changes will take effect after you restart SAnaler.」とダイアログが出ますので、一度 SAnaler を再起動して設定を反映させて下さい。

③ Detector の設定

使用した検出器の種類とモデル、画像データの形式を選択します。【Mask】タブ以降の処理では、データの形式がここで設定したものに固定されます。

- i. [Name]で検出器の名前を選択し、[Model]でモデル(サイズ)を選択します。
- ii. [File type]で画像データの形式(拡張子)を選択します。Pilatus では tif (32bit Tiff)か cbf (crystallography binary format)を、R-AXIS では stl か osc になります。

Detector

Name: Pilatus (0.172 x 0.172 [mm/px]) File type: cbf


Model: 2M (1475x1679) Width: 1475 Height: 1679 [px]

Set

- iii. [Set]をクリックすると、処理の規定値として固定されます。以降の処理中に変更する場合は、【Detector】タブにて再度[Set]します。
- iv. これで完了です。【Mask】タブに移動します。

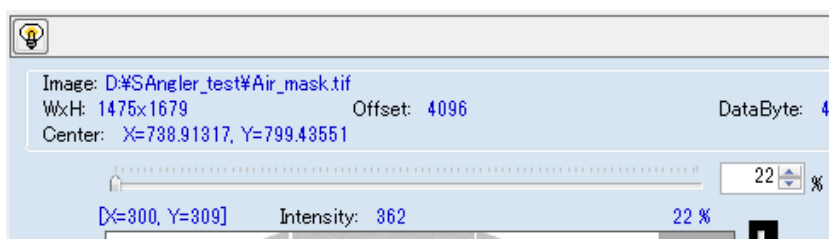
④ Mask ファイルの作成


PILATUS は、基本モジュールの 100K をモザイク状に並べて大面積化を達成しています。そのために、モジュール間には 3~5mm の GAP が存在しています。この GAP をマスクして処理することにより、継ぎ目の無いデータ同様の解析を行なうことができます。さらに、ピクセルの中には不良なものもあり(Bad pixel)、ビームストッパーの影などもマスクする必要があります。SAnghler では、マスクファイルは簡単に作成できます。

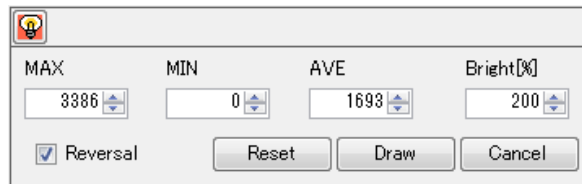
- i. まず Mask ファイルを作成するために、露光したイメージを読み込みます。Mask ファイル作成用に、試料無しで比較的長めに露光した空気散乱や Glassy Carbon のデータを取得することを推奨しますが、無くても構いません。無い場合は、適当なイメージを一枚読み込みます。[Image file:]で、 からイメージを選択します。ディレクトリ構成(文字列)を直接入力(コピーペースト)したり、ファイルを直接 Drag&Drop で指定することも可能です。



- ii. イメージを選択したら[Draw]をクリックします。
- iii. ウィンドウ右側にデータが表示されます。イメージの上にはファイルの情報やピクセル数、現在設定されているビームセンターなどが表示されています。イメージの上にマウスカーソルを持っていくとイメージの左上にそのピクセルの座標と強度が明示されます(以下の状態では[X=300, Y=309]、Intensity: 362)。画像の拡大と縮小は、マウスのスクロールで操作できますが、画像上部のスライダーバー、もしくは倍率の値を直接編集することでも変更できます。イメージの右側と下部にその地点を中心としたラインプロファイルも表示されます。



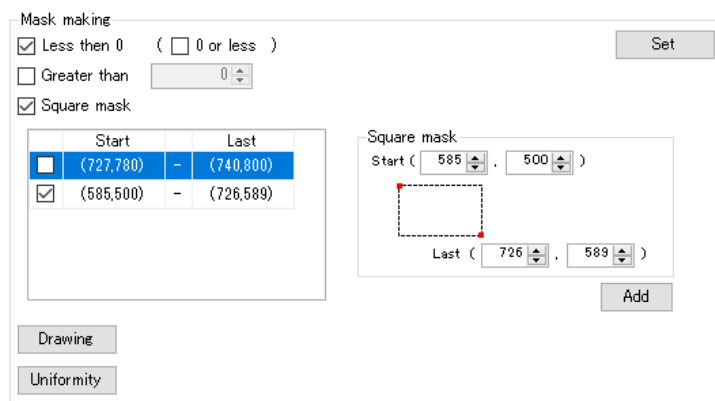
- iv.  マークをクリックすると、イメージのコントラストや明るさを調整する事ができます。[MAX]はそのイメージ内の最大カウント値、[MIN]は最小値(ゼロ以上で)を表しています。[AVE]は文字通り平均値を表していますが、この値を小さくすると表示が濃くなる、すなわち弱い散乱が見えるようになり、大きくすると表示が薄くなります。[Bright]では表示の明るさを調整します。[Reversal]のチェックを外すと白黒反転します。数値を変更したら[Draw]をクリックすると表示が変更されます。



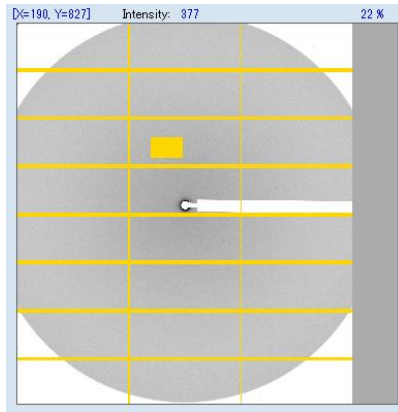
- v. 【Mask making】の欄でマスクの条件を選択します。[Less than 0]では、マイナスの値を自動的にマスクできます。PILATUS の GAP は-1、Bad pixel は-2 の値で出力されるように設定されていますので、これらをマスクしたい場合は、[Less than 0]にチェックを入れます。また、0 の値も含む場合は、(0 or less)にもチェックを入れます。マスク領域は黄色 ■ で表示されます。

※Bad pixel は、事前に設定されていれば「-2」で出力されますが、新たに生成した場合は、未設定の場合もあります。そのような pixel を見つけた場合は、0 or less にもチェックしておけば自動的にマスクできる可能性があります。

- vi. [Less than]とは逆に[Greater than]では設定した値より大きな値になっている pixel をマスクします。新たに生成した Bad pixel の中には、Dead pixel(常に値がゼロになる)ではなく Hot pixel(常に非常に大きな値を出力する)になっているものもあります。そのような pixel をマスクするための機能です。発見した pixel のカウント値よりも少し小さな値を設定しておけば、その pixel を確実にマスクできます。



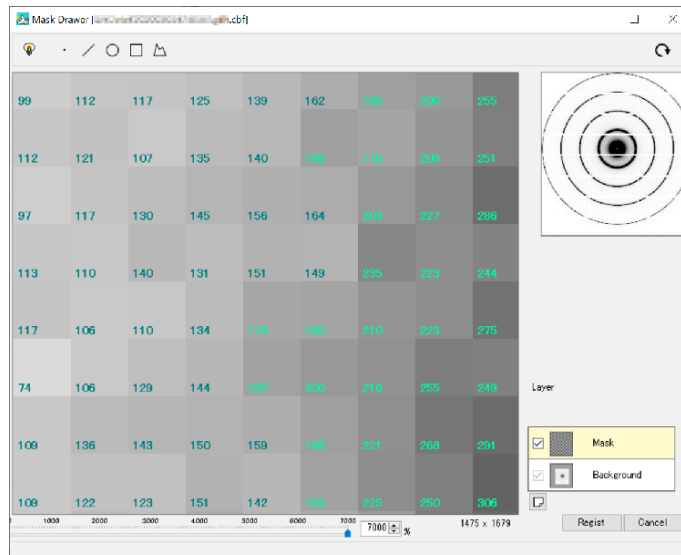
- vii. [Square mask]では、指定した四角形の範囲をマスクすることができます。画面の通り、四角形の左上(Start)と右下(Last)の pixel を指定します。1pixel だけを指定したい場合は、Start と Last に同じ座標を指定します。入力したら[Add]します。左側の欄に入力した内容が移ります。チェックを入れておくと適用されますが、チェックを外すと適用されません。[Set]をクリックすると入力した内容が確定し、マスク領域として設定されます。



左図で、中央付近にある四角形のマスクは、(vi)で入力したテストの領域です。以下の(viii)の(5)で消去します。

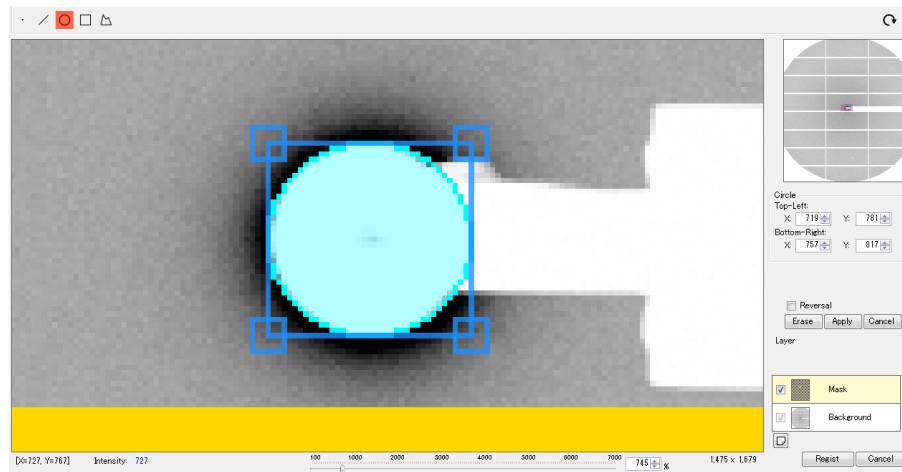
viii. 丸形や多角形(ポリゴン)のマスクを作成するためには、[Drawing]をクリックします。クリックするとMask drawer ウィンドウが新たに開きます。ウィンドウ内の画像データ上にマスクしたい領域を描画することで、色々な形状のマスクを作成することができます。画像は原寸で表示されていますが、マウスを左クリックしながらドラッグすることで表示領域を変更し、スクロールで拡大することができます。機能をまとめると、以下のようになります。

- ・ 点、線、円、四角形、多角形の範囲を描画して、その領域をマスクできます。
- ・ 円、四角形、多角形の範囲を描画して[Reversal]にチェックを入れると、マスク領域を反転させる(描画した領域以外をマスクする)ことができます。
- ・ 下部に表示されているスライダーバーを操作する、または直接数値を指定することで表示する倍率を変更することができます。(50~7000%まで)
最大倍率で表示すると、各セルの強度が表示されます。

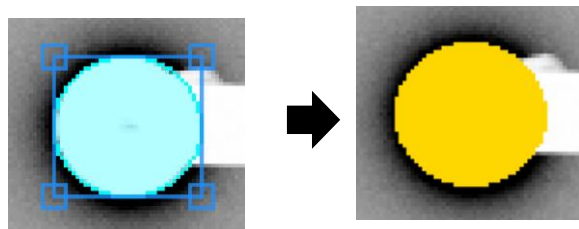


以下に、マスクの作成手順を説明します。GAP や Bad pixel などは別にマスクできますので、ここではビームストッパーの影をマスクするようになっています。

- (1) まず、ビーム中心付近をマウスのスクロールで拡大し、丸形の影をマスクします。ウィンドウ左上の○をクリックして、データの上で描画します。

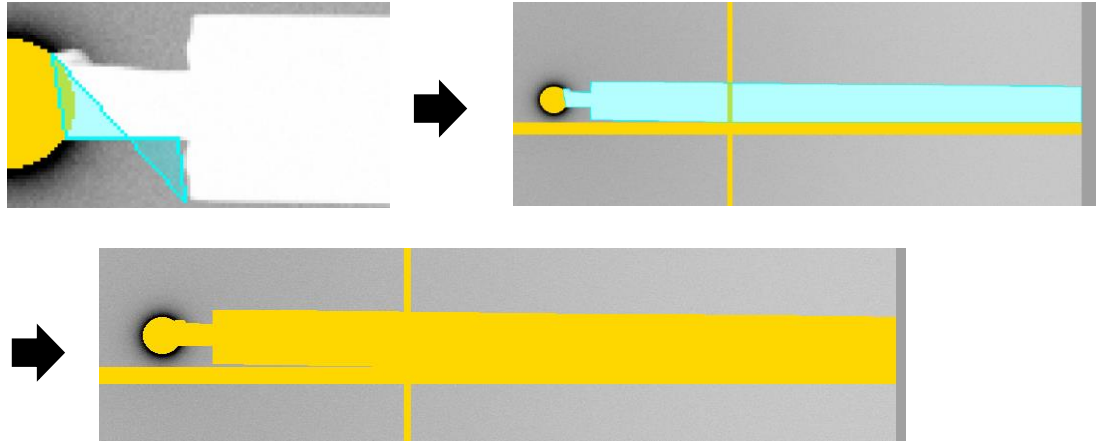


- (2) 円に外接する四角形の 4 つの角はクリックして移動させることができます。ここを動かしながら円のサイズや形を微調します。また、ウィンドウ右側にある[Circle]というメニューでも、Top - Left(左上)と Bottom - Right(右下)の座標を矢印キーで変更すれば同様に微調できます(値を直接入力した場合は、[Enter]を押すと適用されます)。完了したら[Apply]を押します。マスク領域が黄色になって適用されます。

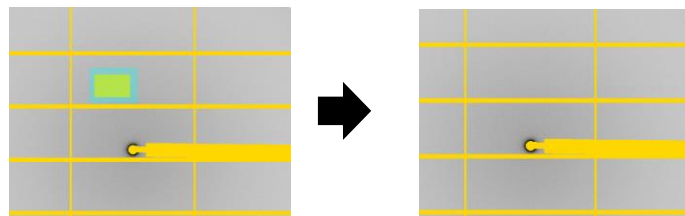


- (3) 完了したら、赤い背景になっている○のマークを再度クリックすると、描画モードが終了し、画像データを動かせるようになります。

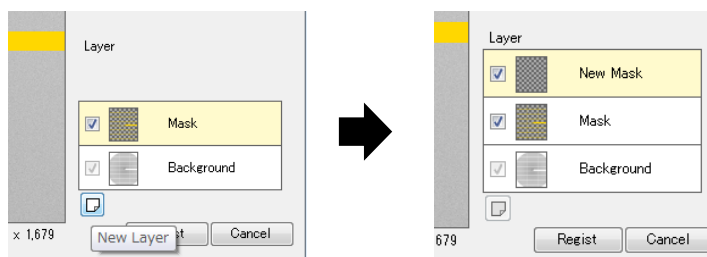
- (4) 続いて、ビームストッパーの柄の部分が多角形でマスクしていきます。多角形のマークをクリックして、多角形の頂点に当るピクセルを順番にクリックしていきます。画像を拡大すると、ストッパーの柄の根本側が表示範囲に入っていない。ウィンドウ右上に画像データのサブウィンドウがありますが、表示範囲は紫色で表示されています。マスク描画中は、この紫色の表示範囲をドラッグして動かすことで、表示範囲を変更する事ができます。完了したら[Apply]をクリックして確定します。



- (5) 作成したマスクを消したい場合は、黄色で示されているマスク領域を、同じように描画して[Erase]します。例えば、(vii)の所でテスト的に作成した四角形のマスクを消すためには、ウィンドウ左上の口をクリックして、消したい領域を覆うように四角形を作成します。そこで、ウィンドウ右側の[Erase]をクリックすると、消すことができます。



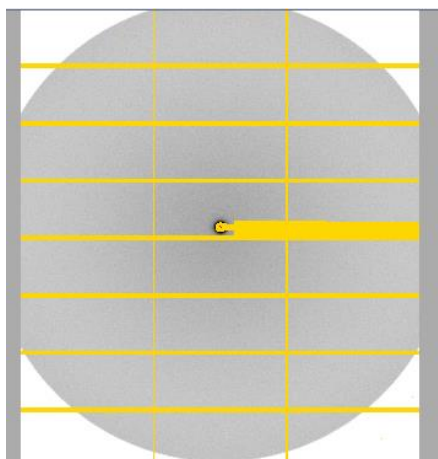
- (6) 一方で、一度作成したマスク領域を消去する際に、消したくないマスク領域も一緒に消してしまうことがあります。例えば、上の図では、格子状に設定された GAP のマスク領域とビームストッパーのマスク領域が重なっているため、ビームストッパーの部分だけ消すのはかなり難しい作業となります。現在、この Mask Drawer では、Layer を 1 層追加することができます



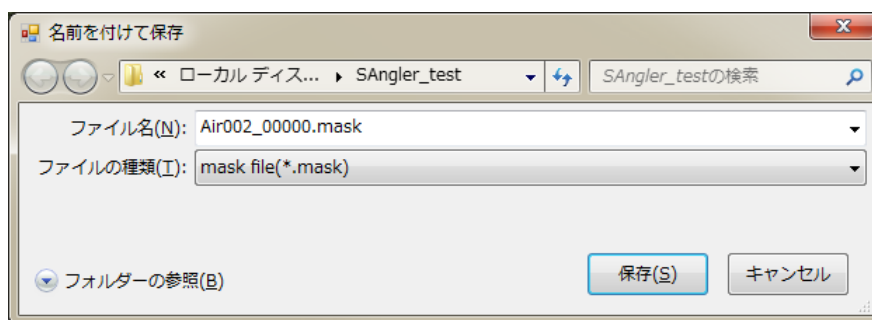
ので、それまでの作業状態を変えないように、次に追加するマスク領域を別レイヤーで設定することができます。レイヤーの追加は、[New Layer 追加ボタン]をクリックします。[New Mask]が追加されますので、そこに新たにマスク領域を作成することができます。また、チェックを外すと、新たに作成したマスク領域を適用除外することもできます。

(7) 全ての作業が完了したら、[Regist]をクリックします。Registすると、先程作成したLayer層も全て一体化されます。

ix. 設定が終わったら[Set]をクリックするとイメージ上に適用され、黄色で表示されます



x. 設定が完了したら、[Save]をクリックしてMaskファイルを保存します。ファイルの拡張子は自動的に「mask」となります。保存すると表示が黄色から緑色に変更され、保存したMaskファイルは今後の処理で自動的に適用されます。ソフトをいったん終了させたり、別のPCで処理したりする場合でも、以前に保存したMaskファイルを読み込めば、同じ条件で処理することが出来ます。



⑤ Uniformity 機能

※(注意)この機能を利用するためには、先に【Calibration】タブでカメラ長やビームセンター位置を校正し、「Cal ファイル」を保存しておくことを推奨します。従って、「④ Mask ファイルの作成」の作業で基本の Mask ファイルを保存し、先に「⑥ ビームセンターとカメラ長の校正(Calibration)」を実行して cal ファイルを作成してから、再度【Mask】タブに戻って実行するようにして下さい。

Dead Pixel や Hot Pixel は値の大小が明確なため、処理から除外するようにマスクするのは比較的容易ですが、「周りよりも常に少し大きい／小さい値を出力している」といったような異常な Pixel を発見するのは容易ではありません。この機能では、円周平均時にその様な Pixel を発見してマスクに追加することができます。円周平均では、ビームセンターから等距離にある多数の Pixel の値から平均値を求めますが、本来その値はいわゆる一定のノイズレベルの範囲に収まっているはずですが、仮に異常なピクセルがあった場合は、そのノイズレベルを超えて値が変動していると想定されます。そこで、平均値に対する Threshold(閾値)を設定し、変動が大きいピクセルを発見してマスクに追加します。その結果、円周平均時の値の変動を抑える(誤差を抑制する)効果があります。



※Pixel の正常 or 異常の判定は、同じ円周上の点の平均値を計算し、平均値と各点の差(偏差)を平均値で割った値 A に対して設定した Threshold を基準に、以下の関係式で判断します。

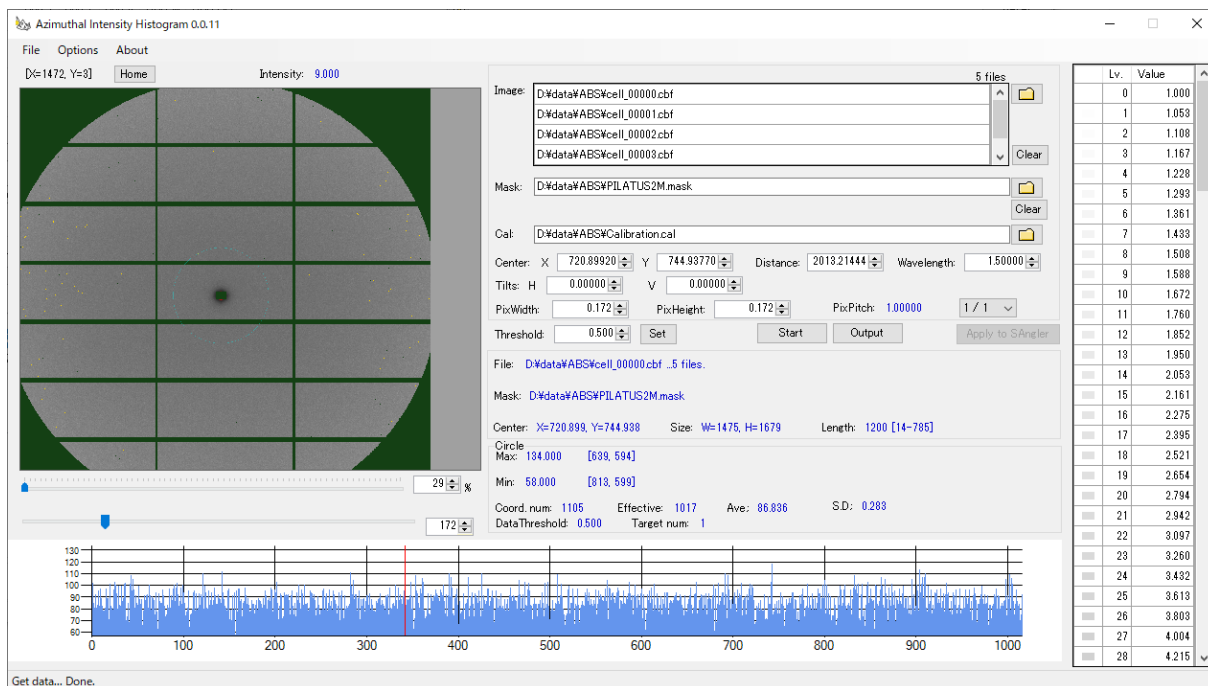
$$A = \{(\text{Pixel 値}) - (\text{平均値})\} / \text{平均値}$$

$$A \leq \text{Threshold} : \text{正常}$$

$$A > \text{Threshold} : \text{異常}$$

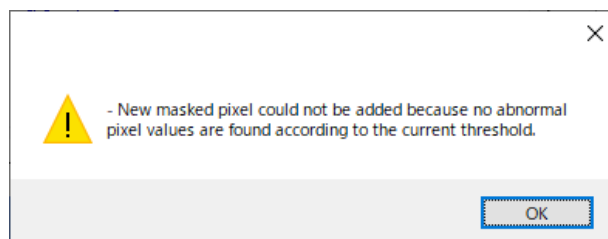
- i. 空気散乱や Glassy Carbon 等の標準的な試料が読み込まれた状態で[Uniformity]ボタンをクリックすると、別プログラム「Azimuthal Intensity Histogram.exe」が起動します。
※起動時に設定ファイル「az_config.xml」を読み込みます。読み込みに失敗すると起動しません。
- ii. SAnghler でマスクファイルが指定されていた場合、[Mask:]初期値として自動入力されます。
- iii. [Image:]に画像データ(Glassy Carbon や空気散乱のデータ等)を指定します。同一条件で計測した同一試料(状態)の複数のファイルを一度に指定できます。複数のファイルを指定した場合は積分データでの解析となります(合算データの方が異常判定が明確なため、同一条件での複数ファイルの読み込みを推奨します)。

- iv. [cal:]には Calibration ファイル(cal ファイル)を指定すると、解析条件(円周平均の条件)が自動で設定されます。cal ファイルがない場合は手動で入力してください。
- v. [Threshold]を入力し、[Start]ボタンをクリックします(初期値では 0.5 になっています。[Options] - [Setting]より変更できます)。計算が終了すると、結果が表示されます。Threshold は、0.5 より小さくすると条件が厳しくなり異常判定される Pixel が増えます。
- vi. Threshold のみ変更する場合は、値を編集して[Set]ボタンをクリックします。
 ※[Start]と[Set]の違い
 [Start]ボタンは入力された解析条件をもとに円周上の座標を計算し、その後ヒストグラムデータを作成、正常/異常の判断を行うため時間がかかります。
 ⇒使用する画像ファイルや解析条件、マスクファイルを変更して解析をやり直す場合は、[Start]をクリック。
 [Set]ボタンは円周上の座標データ、ヒストグラムデータは直前に実行した結果を使用し、正常/異常の判断のみを行います。
 ⇒Threshold 値だけを変更して正常/異常の判定だけをやり直す場合は、[Set]をクリック。
- vii. ウィンドウ左側には読み込まれた画像データ(複数ファイルの場合は積分後のデータ)が表示されています。濃い緑色 ■ の領域は、事前に読み込まれた Mask 領域が表示されています。画像データの拡大縮小は、マウスのスクロールか画像下のスライダー(%表示)で変更できます(最大 7000%、最小はシステムにより変動、全体が表示されるよう調整されています)。また、左ドラッグして画像を移動させることもできます。ビームセンターは赤十字で示されていますが、それに対して薄い緑色 ■ の円は、ビームセンターから等距離にある円周を示しています。円周の位置は、下段側のスライダーで変更することができます。右側に示されている数値は、要は何点目のデータであるかを表わしています。画像データ内に見える黄色 ■ の Pixel が、Threshold を基に異常と判定された Pixel です。
- viii. ウィンドウ下部のグラフは、各円周上にあるデータを 1 次元プロットとして表示したものです。円周を構成する点数の違いで、X 軸の点数は変動します。各 Pixel の値が棒グラフで表わされていますが、下図のように赤色で表示されているのが Threshold を超えた点で、左上の画像データ上では黄色で示された Pixel です。棒グラフの上の【Circle】欄には、この円周上のデータのまとめが表示されています。その中で、[Target num]は Threshold を超えた Pixel 数を表わしています。
- ix. vii、viii. で示されるデータの状況を確認しながら、Threshold を変更して、Mask すべき領域を検討します。



Circle	円周上の情報。円周上の点の最大値・最小値、平均値、標準偏差値、Threshold 値、円周上の実際の点数、有効点数、しきい値にヒットした点数。
画面	右のカラーテーブルに則って色付けされている。しきい値にヒットした点は黄色で表示される。
上トラックバー	画像スケール
下トラックバー	円周
ヒストグラム	円周上のゼロ度に当たる点から反時計回りに強度をグラフ化。しきい値にヒットした場所は赤で表示。

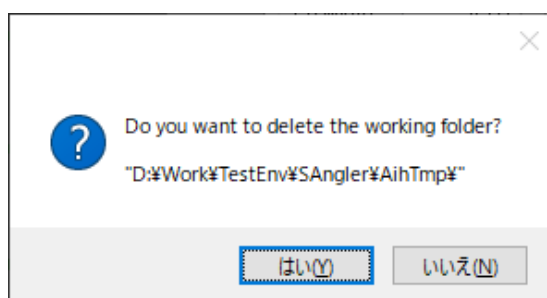
- x. 設定した Threshold によって正常/異常の判定が有効に実施できた場合は、異常ピクセルを新たにマスクデータとして出力することが出来ます。[Output]ボタンをクリックすると「Save mask data?」と聞かれるので、「はい」を選択します。新たにマスクされた座標が一点もない場合は警告文が表示されます。



- xi. 今までのマスクファイルに上書きする場合は、ファイル名を変更せずに[保存]をクリック。新たにマ

スクファイルを作成する場合は、新規にファイル名を入力して保存する。



- xii. 保存が完了すると、「Do you want to update to the latest Information?」とマスクを最新データにするか確認メッセージボックスが表示されます。更新する場合は[はい]を、そのまま処理を継続する場合は[いいえ]を選択してください。更新には多少時間が掛かります。
- xiii. マスクファイルを更新(上書き)や新規作成すると、[Start]ボタン横の[Apply to SAngler]ボタンが有効になります。最新のマスクファイルを SAngler にも読み込ませる場合は、[Apply to SAngler]ボタンをクリックしてください。確認のダイアログが出ますので、[はい]をクリックします。
- xiv. これで処理は完了です。終了させるには、[File] - [Close]もしくは Window 右上の[x]をクリックして下さい。なお、新しい Mask 情報を保存せずに終了させようとした場合は、SAngler に最新のマスク情報を反映させるかどうか確認のメッセージが表示されます。[はい]を選択すると保存画面に映ります。続いて、「Do you want to delete the working folder?」と作業用フォルダを消すかどうか確認されます。基本的には削除して構いませんが、処理でエラーが出た場合等は残しておいて頂き、ソフトウェア開発者に連絡頂ければと思います。Window が閉じると、SAngler に最新のマスクファイルが読み込まれています。

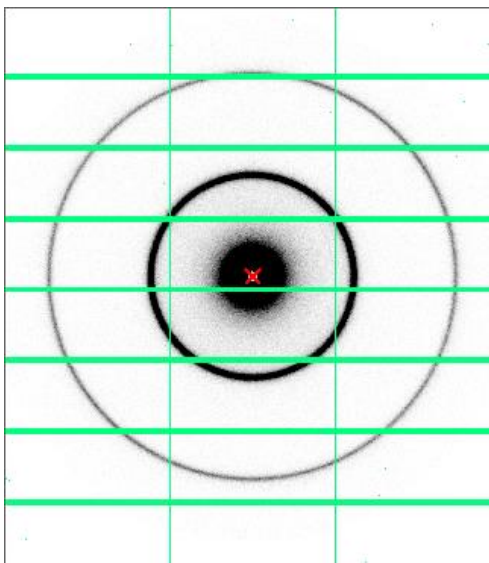



- xv. 更新したマスクファイルを SAngler に適用しない場合は、[Apply to SAngler]を押さずに、Window を終了させて下さい。更新するかどうかダイアログが表示されますが、[いいえ]を選択して下さい。

⑥ ビームセンターとカメラ長の校正 (Calibration)

ベヘン酸銀の粉末回折データなどを使用してビームセンターとカメラ長の校正を行ないます。

- i. [Setting]欄では、[Mask file:]に先程作成したファイルが設定されているか確認します。(以前に保存しておいたファイルを設定する場合は、をクリックして読み込みます。直接 Drag&Drop で指定することもできます。)
- ii. [Image file:]に Calibration に使用するイメージファイルを  から選択します。

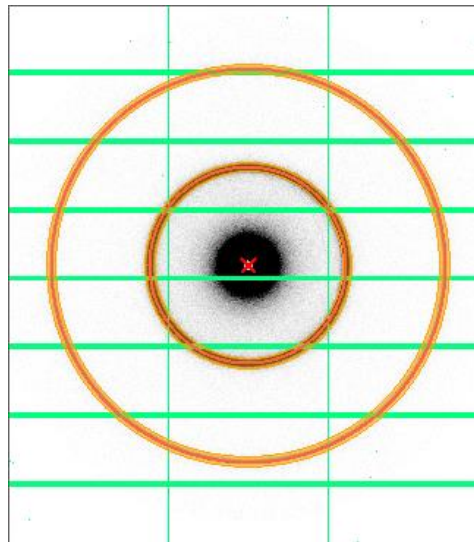


- iii. 選択したら[Draw]をクリックして、そのファイルを表示させます。
- iv. 表示が薄くて見えない場合は  マークをクリックして、[AVE]を 500、[Bright]を 200 のように設定してリングパターンが見える様にします。
- v. [Refine BeamCenter]にチェックを入れて、おおよそのセンターの座標を入力します。イメージ上には赤の × で記されています。全くあさっての場所になっている場合は、マウスカーソルをビームセンター付近に持っていくと、イメージ左上にその座標が表示されますので、その値を入力しておきます。
使用する回折データが広角で画像内にビームセンターがない場合、画像外にビームセンターを設定することができます。(ただし、マージンは幅・高さとも 500px までとなります。)
- vi. [Refine Wavelength or Camera distance]にチェックを入れます。測定波長とカメラ長の校正は排他的に行ないますので、どちらか一方にチェックを入れて、おおよその値を入力します。

vii. [Refine Tilts]では、ビーム光軸に対する検出器の傾きを補正します。H は水平面内の角度(検出

History Num sectors 60 Match: ---% Start

器が左右に首を振っている)、Vは垂直面内の角度(検出器が仰け反っていたりアゴを引いていた)を示しています。なお、通常の小角散乱では影響しないレベルでセッティングされていますので、校正しなくても問題ありません。校正する場合は、チェックを入れておきます。



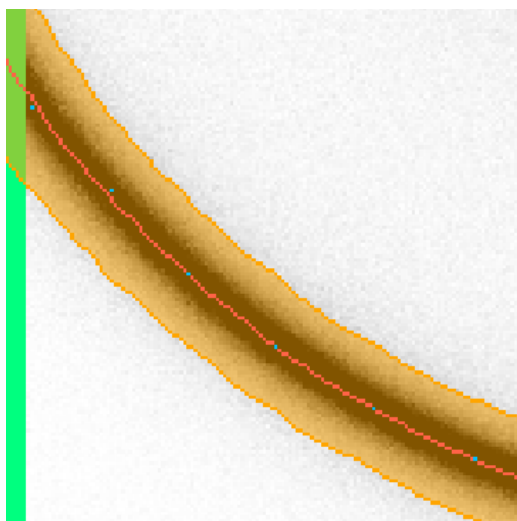
[Calibrant]の欄にてプルダウンから使用するパラメータを選択します。[Ag behenate (n1-5)]には、5次までのパラメータが入力されています。ここでは、読み込んだイメージに2次のリングまでしか写っていないので、d3~d5を消して、d1とd2のみにします。一方で、初期登録されている校正用標準試料の設定を[Option] - [ConfigCustom]から別途行った場合は、[Load]をクリックすると、プルダウンメニューの情報が更新されます。

viii. [Display]にチェックを入れると、初期値を元にした Prediction が表示されます。Prediction リングと実際のリングが合うように、初期値を編集します。[Redraw]ボタンを押すと、Prediction が再計算されます。

- ix. [Num sectors]では、Calibration を実行する際にリングパターン全周 360 度分を何分割して処理するか指定します。初期設定は 60 になっています（つまり 6 度毎に処理します）。上のイメージのように、リングの全周が写っている場合は 60 で問題ありませんが、例えば、検出器をオフセットして設置している場合や PILATUS 100K 等ではリングの全周が写らないため、全周を 60 分割したのでは解析点が不足している場合があります。その場合は、60→240 等、数を増やして Calibration を実行します。
- x. 準備が出来たら、[Start]をクリックします。ダイアログが表示されますので実行する場合は[はい]をクリックして下さい。計算は直ぐに終了し、校正された値が赤字で表示されます。

<input checked="" type="checkbox"/>	Refine BeamCenter	
X	<input type="text" value="738.62070"/>	
Y	<input type="text" value="751.01510"/>	
	[px]	
<input checked="" type="checkbox"/>	Refine Wavelength or Camera distance	
	* Choose the value you want to refine.	
<input type="radio"/>	Wavelength [Å]	<input type="text" value="1.50000"/>
<input checked="" type="radio"/>	Camera distance [mm]	<input type="text" value="2008.44990"/>

- xi. 計算結果の履歴が表として記録されます。また、計測された各次数のリングとキャリブレーションの結果得られた Prediction リングの一致度を[Match]で表しています。具体的には、各リングを [Num sectors]で指定した数に分割して、その位置での一致度を表しています。例えば、[Num sectors]を 60 とした場合は、6 度間隔でリングの位置を比較しています。実測したリング上の位置をデータ上で確認したい場合は[Survey Point]にチェックを入れると、画像データ上に以下の様にピクセルが水色で表示されます（多少描画に時間が掛かります）。



History Num sectors 60 Match: 77.2% Start

No	CenterX	CenterY	Wavelength	Distance	Horizontal	Vertical	Match
01	738.62070	751.01510	1.50000	2008.44990	0.00000	0.00000	77.2

Clear Set

- xii. Match は、80%以上一致すると緑色 ■ に、50～79%では黄色 ■ に、50%未満では赤色 ■ になります。基本的には緑色に表示されるまで計算を繰り返し実施します。最終的に値があまり変動しなくなったところで完了です。一方で、計算を繰り返していくと逆に悪くなっていく場合もあります。その場合は、履歴の表の所で、戻したい値(行)を選択して[Set]をクリックするか、その行をマウスの左でダブルクリックすることで、その時の値に戻せます。[Clear]をクリックすると、履歴を全て削除できます。一方、何度やっても 80%を超えない場合等もあると思いますが、その原因は単純にリングパターンの S/N が悪いことがほとんどです。つまり、「露光時間が不足している」ことが原因です。うまく行かない場合は、再度露光時間を延ばして再測定してみてください。

History

No	CenterX	CenterY	Wavelength	Distance	Horizontal	Vertical	Match
01	738.62070	751.01510	1.50000	2008.44990	0.00000	0.00000	77.2
02	738.67240	751.01640	1.50000	2007.86375	0.00000	0.00000	74.6
03	738.62070	751.01700	1.50000	2007.54896	0.00000	0.00000	76.3


Clear Set

- xiii. Calibration が終了したら、[Save]をクリックして結果を保存します。ファイルの拡張子は自動的に「cal」となります。ソフトをいったん終了させたり、別の PC で処理したりする場合でも、以前に保存した cal ファイルを読み込めば、同じ条件で処理することが出来ます。
- xi. これで Calibration の処理は終了です。【Ave】タブに移動します。


⑦ 円周平均(Average)

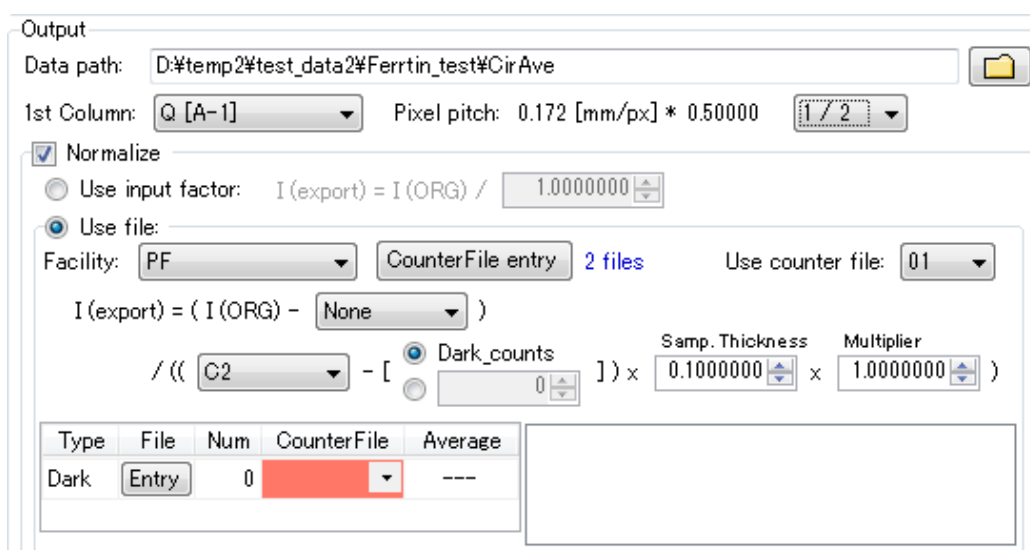
キャリブレーションの結果に基づいて、円周平均を実施します。円周平均では、基本的に 2 つのモードがあります。

(1) 測定したデータを順番に指定して処理する場合


- i. [Input]の箇所では[Data path]に、をクリックして画像データが保存されているディレクトリを指定します。この欄は、直接編集することも可能です。




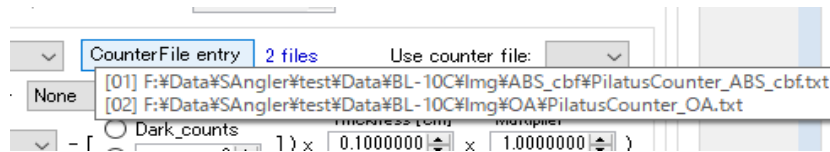
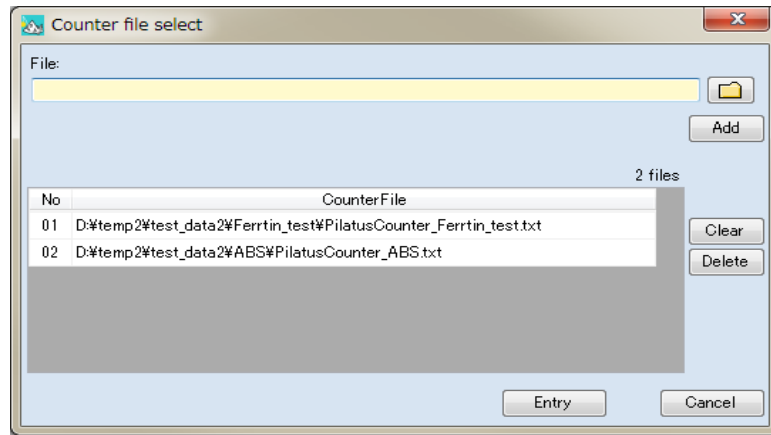
- ii. PILATUS のデータの場合は、[Use Mask data]にチェックが入っており、先程作成した MASK ファイルが選択されているのを確認する。以前に処理した MASK ファイルを読み込む場合は、をクリックして指定します。直接編集や対象ファイルを Drag&Drop することも可能です。



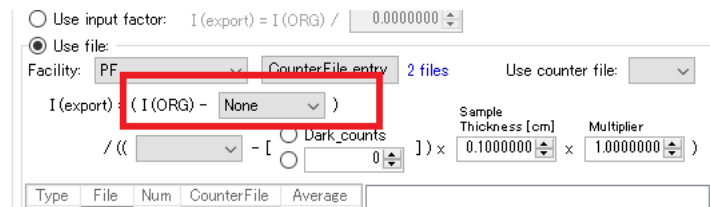
Type	File	Num	CounterFile	Average
Dark	Entry	0		---

- iii. 次に[Output]の項目を設定します。[Data Path:]に円周平均したファイルを出力するディレクトリを指定します。[Input]と同様に  を押すか、直接編集、または Drag&Drop で設定して下さい。
- iv. データの横軸(1st Column)をどの単位で出力するか指定します。
Q (=4πsinθ/λ) [Å⁻¹]、Q [nm⁻¹]、S (=2sinθ/λ) [Å⁻¹]、S [nm⁻¹]、d [Å]、d [nm]、2θ [degree]、r [mm] (ビームセンターからの距離)

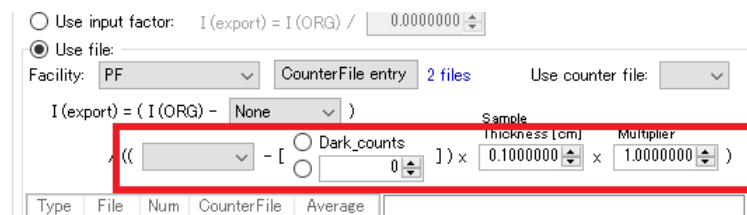
- v. [Pixel pitch]では、横軸データの間隔を変更できます。基本は、PILATUS であればピクセルサイズは 0.172×0.172 mm のため、データは 0.172 mm 間隔(R-AXIS では 0.1 mm)で出力されます。ここではピクセルサイズを基準に分割し、もっと細かい間隔のデータを出力するように設定できます。「1/1」はデフォルトのまま、「1/2」、「1/4」、「1/5」を選択すれば、そのピッチでデータが出力されます。結果として測定点を増やすことができますが、細かくしすぎると S/N が悪化する可能性はあります。出力されたデータを確認して、適切な分割数を選択して下さい。
- vi. 散乱強度を入射 X 線強度等で規格化する場合は、[Normalize]にチェックを入れます。散乱強度を特定の値で規格化する場合は、[Use input factor]に値を入力します。
- vii. 入射 X 線の(積分)強度等の値を使って規格化する場合は、画像データとは別に強度の値が出力されているカウンタ値のログファイルを指定して読み込みます。まず、[Facility]を選択します。PF と SPring-8 の BL38B1、BL45XU(2018 年 12 月で SAXS 終了)、40B2 のカウンタファイルの形式に対応しています。
- viii. 次に、[Counter File entry]で、使用するカウンタファイルを設定します。クリックすると[Counter file select]ダイアログが開きます。をクリックしてカウンタファイルを選択し、その後[Add]ボタンを押すと、ダイアログ下側のリスト欄に移ります。これで選択完了です。この欄にファイルを Drag&Drop する事も可能で、その場合は直ぐに選択完了になります。一方で、1 次元化を行ないたいデータに対応するカウンタファイルが複数存在する場合は、複数個のカウンタファイルを指定することができます。例えば、実際の処理をしたいデータに対応したカウンタファイルと、(xiv)で説明する実験前に計測しておいたダークレベルに対応するカウンタファイルが異なる場合は、そのファイルをそれぞれ読み込んでおくことになります。カウンタファイルは読み込んだ順番に番号が設定されますので、後の設定ではこの番号で指定します。このマニュアルでは「01」が実際のデータに対応するカウンタファイルで、「02」がダークレベルを計測した際のカウンタファイルになっています。なお、[Counter File entry]ボタンにマウスカーソルを合わせると、登録されているカウンタファイルの情報が 30 秒間ポップアップされます。設定が完了したら[Entry]をクリックして閉じます。



- ix. [Use counter file:]にて、1次元化を行なうデータに対応したカウンタファイルを選択します。(viii)では複数のカウンタファイルを設定することが可能ですが、その中の何番なのか指定します。このマニュアルでは「01」が実際のデータに対応したカウンタファイルなので、プルダウンから「01」を選択します。






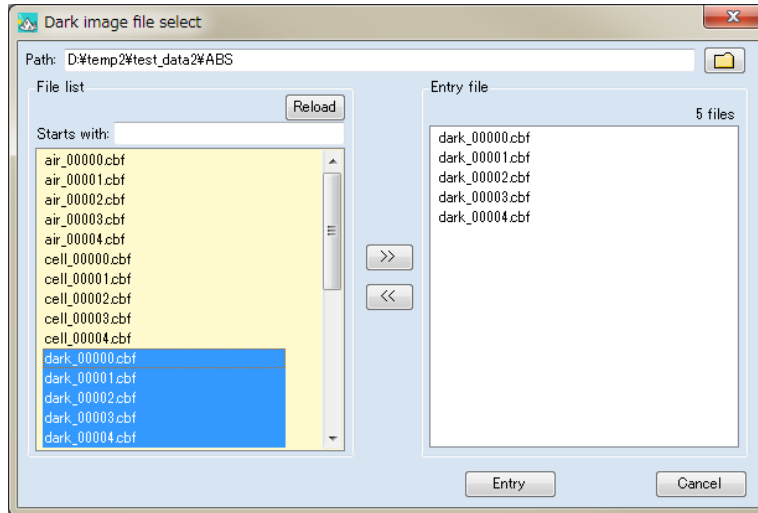
- x. 続いては実際に規格化しながら円周平均を行なうための式が記されています。その式の各欄を選択しながら入力していきます。まず式の上側(いわゆる分子側)は、散乱強度を円周平均する際に検出器のダークレベルを引くかどうかを設定します。PILATUS はダークレベルが無いため引く必要がありません。従って、[None]のままです。一方で、R-AXIS の場合はダークレベルがあるため、ダークイメージを事前に計測して引く場合は、[(Dark)]を選択します。なお、R-AXIS のダークイメージを計測する場合は、実際のデータの露光時間と同じ時間を計測されることをお勧めします(必ずしもその必要は無いのですが、SAngler での処理は、その方が楽になります)。一方、実際にダークレベルを計測したイメージファイルは、(xiii)で設定します。



- xi. 次に式の下側(いわゆる分母側)を設定します。まず、カウンタファイルに記録されているどのチャンネルの値で規格化するか選択します。PF の場合は、C2 が試料前のマイクロイオンチャンバで計測した値、C3 が試料後にもマイクロイオンチャンバを設置して計測した値、C4 がダイレクトビームストッパに埋め込まれている Si PIN フォトダイオードの値です。SPring-8 の BL38B1 では、C2 が試料前のマイクロイオンチャンバ、C3 が試料後のフォトダイオード(ビームストッパー埋め込み)となっています。BL45XU(2018 年 12 月まで)では、MIC up が試料前、MIC down が試料後、40B2 では、C3 が試料前、C4 が試料後となっています(念のため担当者に確認して下さい)。
- xii. PF と BL38B1 の場合は、このカウンタの値にダークレベル(ダークカウント)が存在します。つまり、X 線が無い状態でも計測すれば値はゼロではありません。これは低いカウント領域でもデータの直線性を担保するために、計測機器をそのように設定して使用しているためです(各施設、各ビームラインの状況は担当者に確認して下さい)。そのため(xi)で指定したチャンネルの値で規格化するためには、そのチャンネルのダークカウントを引く必要があります。そこで、「ビームラインのシャッターを閉じた状態で、実際のデータと同じ露光時間でダークイメージを計測し、その際のダークカウントの値を計算に使用する」ように設定します。そのためには[Dark_counts]を選択します。もし、特定の値をダークカウントとして引く場合は、ラジオボタンを切替えて、そこに値を入力します。

$$I(\text{export}) = (I(\text{ORG}) - \text{None}) / ((\text{C2} - [\text{Dark_counts}]) \times \text{Sample Thickness [cm]} \times \text{Multiplier})$$

- xiii. [Dark_counts]を設定した場合は、その下の表で実際のダークイメージと、それに対応するカウンタファイルの番号を指定します。[Entry]をクリックすると、計測したダークイメージを選択するダイアログが開きます。[Path:]にダークイメージのあるディレクトリを指定するために、を押すか直接編集します。パス欄にディレクトリを入力した状態にして[Reload]をクリックすると、左側にそのディレクトリ内のイメージデータが全て表示されますので、ダークイメージを複数枚同時に選択します(1枚でも可)。例えば、[ctrl]キーを押しながら複数枚クリックして選択も出来ますし、単にマウスでクリックしながらドラッグすれば複数枚選択できます。[Starts with:]はフィルターの機能で、ファイル名の頭から他のファイルを排除できる文字列を入力すると、特定のデータセットだけを表示させる事ができます。その状態で[ctrl + A]を押せば全選択できます。をクリックするとファイルが右側に移り確定します。なお、[Entry file]側のリストを選択し、[Enter]キーまたは[Delete]キーを押すか、ボタンを押せば Entry 側から削除することができます。作業を完了したら、[Entry]をクリックしてダイアログを閉じます。



- xiv. このダークイメージに対応するカウンタファイルを指定します。(viii)ですすでに設定しているので、ここではプルダウンから「02」を選択します(未選択の状態ですとこの欄は「赤色」で表示されています。)。表の Average の欄には、設定したダークイメージに対応したダークカウントの平均値が表示され、表の右側には選択したダークイメージのリストが表示されます。なお、ダークカウントも積分値のため、露光時間に比例して変わります。従って、実際の測定データと同じ露光時間で計測しておくのが無難です。また、検出器が PILATUS の場合は、短時間露光を繰り返して後で積分する(平均する)ような測定を実施することも多いと思いますので、試料の測定と同様に複数枚計測してその平均値を使う方が良いでしょう。

Type	File	Num	CounterFile	Average
Dark	Entry	5	02	22913

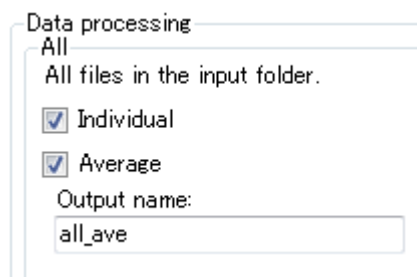
D:\temp2\test_data2\ABS\dark_00000.cbf
D:\temp2\test_data2\ABS\dark_00001.cbf
D:\temp2\test_data2\ABS\dark_00002.cbf
D:\temp2\test_data2\ABS\dark_00003.cbf
D:\temp2\test_data2\ABS\dark_00004.cbf

- xv. 最後に、試料の厚み[Sample Thickness(cm)]を入力します。単位は cm で、デフォルトは 0.1 cm (1 mm)としています。PF で標準的に利用されている(株)ユニソク社製の溶液セルでは、厚みが 1.25 mm(0.125 cm)のタイプもありますので、ご注意ください。また、散乱強度を特定の値で割りたい場合は、[Multiplier]に値を入力します。必要なければ「1」のままで問題ありません。これで規格化のための条件設定が完了しました。
- xvi. 続いて、[Data processing]の箇所、処理するファイルの範囲を選択します。SAnGLer では複数のファイルを一度に処理することが可能ですが、その指定の仕方として、大きく分けて2種類【All】と【Range selection】という分け方があります。

(1) 【All】の場合

先に指定した[Input Data Path]ディレクトリ内にある全ての画像データを一度に処理します。

[Individual]は、フォルダ内にある全ての画像データを、1枚ずつ個別に円周平均します。出力ファイル名は、画像ファイル名と同じで拡張子だけ「dat」になります。[Average]は、このフ

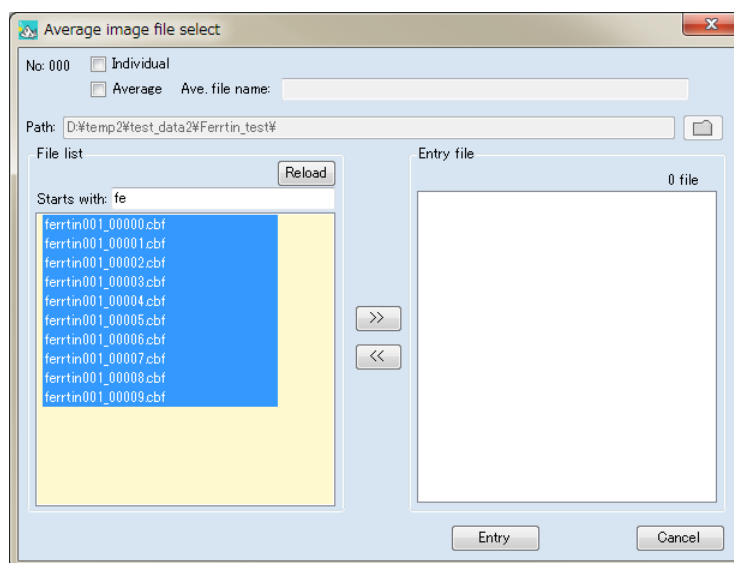



ォルダ内にある全ての画像を平均化するため、ファイル名を指定します(拡張子の dat は自動でつきます)。Individual と Average を両方、もしくは選択した方だけ実行できます。

(2) 【Range selection】の場合

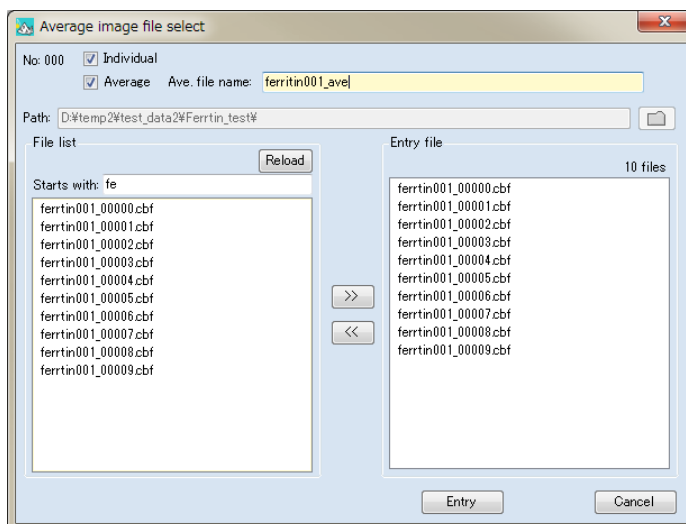
[Input Data Path]ディレクトリ内にあるデータに対して、処理する範囲を指定します。例えば、バックグラウンドのデータ、サンプルのデータの範囲をそれぞれ指定して個別に処理します。

- A) [Add]をクリックします。別ウィンドウが開きます。[File list]には、現在のディレクトリとディレクトリ内のファイルが表示されています。
- B) 読み込みたいファイルを複数枚同時に選択します(1枚でも可)。OSの機能が使えますので、例えば[ctrl]キーを押しながら複数枚クリックして選択も出来ますし、単にマウスでクリックしながらドラッグすれば複数枚選択できます。[Starts with:]はフィルターの機能で、ファイル名の頭から他のファイルを排除できる文字列を入力すると、特定のデータセットだけを表示させる事ができます。その状態で[ctrl + A]を押せば全選択できます。



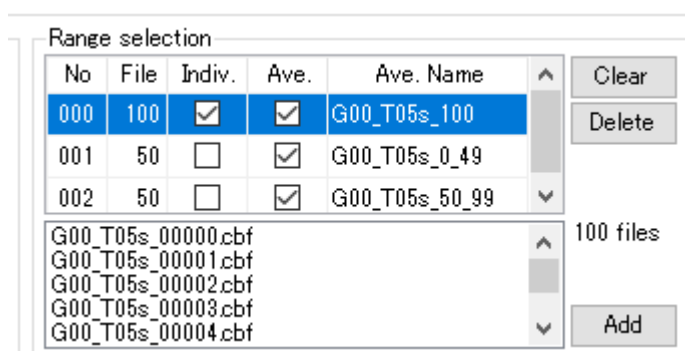
- C)  をクリックして選択したデータを確定します。そうすると右側にファイルが移ります。他のファイルも必要なら同じ操作を繰り返します。選択したファイルに対して、それぞれ

個別に円周平均する (Individual) か、まとめて平均化する (Average) か、その両方を実行するのか選択します。[Individual] の方は、ファイル名はそのまま拡張子が dat のファイルを出力します。[Average] の方は、平均化後のファイル名を入力します (拡張子 dat は自動で追加されます)。完了したら [Entry] をクリックしてウィンドウを閉じます。



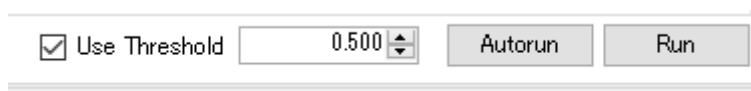
D) [Range selection] には、今設定した Job が入力されています。クリックすると、処理するファイル一覧が表示されます。他のデータセットも同時に処理したい場合は、(A) ~ (C) を繰り返します。各 Job は、それぞれ独立の処理を行いますので、同じイメージデータに対して異なる Job で異なる処理を指定すれば、干渉せずに命令を実行します。

(例) G00_T05s_00000.cbf ~ G00_T05s_00099.cbf という 100 枚のデータセットに対して

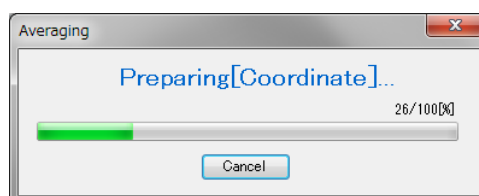


(Job1) 100 枚を Individual と Average で円周平均する。
 (Job2) 00000 ~ 00049 の前半の 50 枚に対して Average だけ実行する
 (Job3) 00050 ~ 00099 の後半の 50 枚に対して Average だけ実行する
 3 つの Job を実行しますので、dat ファイルは 103 個出力されます。

- xvii. 【Mask】タブには、円周平均時に見つけた異常なピクセルを事前にマスクするための機能「Uniformity」があります。しかし、この機能では、Zinger（計測中に宇宙線の検出等によって生じるスパイク状のピーク）が観測された場合等には対応出来ません。この【Ave】タブには Uniformity 機能と同様に、実際のデータを円周平均する際に、Threshold 値（閾値）に基づいて円周平均から除外するピクセル値を判定する機能があります。[Use Threshold]のチェックボックスにチェックして Threshold 値を設定すると、解析時に異常判定が随時行なわれ、それを反映した結果が出力されます。例えば、宇宙線などが検出されたピクセル（Zinger）など、突発的に発生した異常値を除外することが可能です。[Mask]の Uniformity 機能を使った場合は、その時に設定した Threshold 値が自動で入っていますが、別の値に変更することも可能です。一方で、イメージデータごとに一度平均値データを作成してから異常判定処理を行なうため、円周平均に掛かる時間が長くなります。そのため、Ver. 2.1.34 以降は、円周平均時にマルチスレッド環境を活用した平行処理が実行できるようになっています。



- xviii. 入力が完了したら、[Run]ボタンをクリックして実行します。SAnGLer を起動して初めて行う場合のみ、最初に「Preparing [Coordinate]...」のダイアログが表示されます。これは円周平均処理を高速化するために行う処理で、2 回目以降は表示されません。ただし、Calibration をやり直した場合は、再度実行されます。

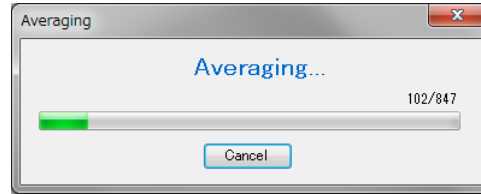


- xix. 「Preparering...」が完了すると円周平均を開始します（2 回目からは、すぐに円周平均が開始します）。PILATUS3 2M でマルチスレッド処理 OFF の場合は、Pixel pitch がデフォルトのままなら 1 枚 1 秒程度です（細くなれば、より時間が掛かります。）。複数枚を平均する場合は、枚数により変化します。マルチスレッド環境を適用している場合は（3. ②Config Setting の設定）、処理スピードは環境に応じて変化します。また、入力した複数の Job に対して、「Individual 処理」が優先的に行なわれ、その後に「Average 処理」が進行します。例えば、(xvi.) (2)D の図で表示されている 000、001、002 の 3 つの Job に対しては、まず最初に全ての Individual 処理が実行され、終了後に続いて各 Job の Average 処理が行なわれます。

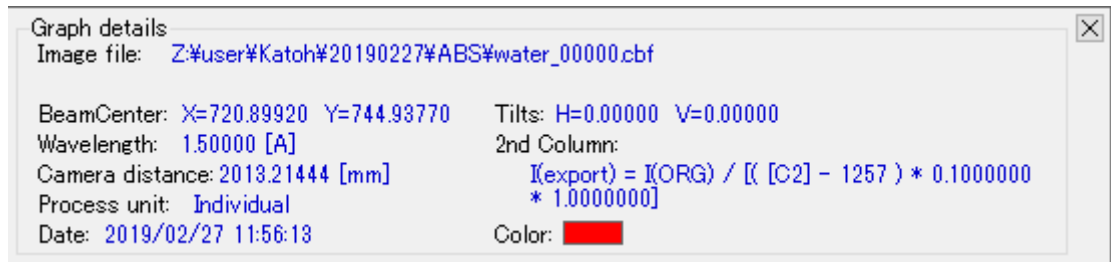
（例） (xvi.) (2)D の図の場合、以下の順で処理されます。

1. 00000～00099 の Individual
2. 00000～00099 の Average

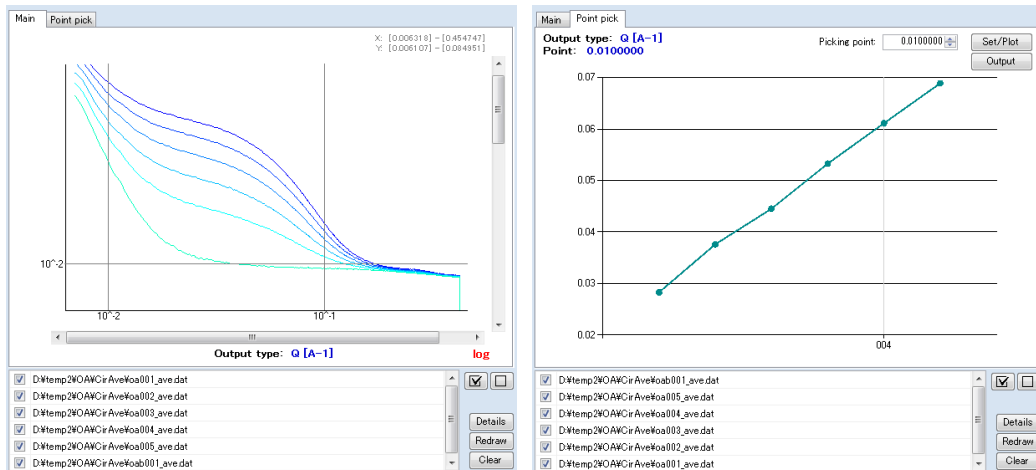
3. 00000~00049 の Average
4. 00050~00099 の Average



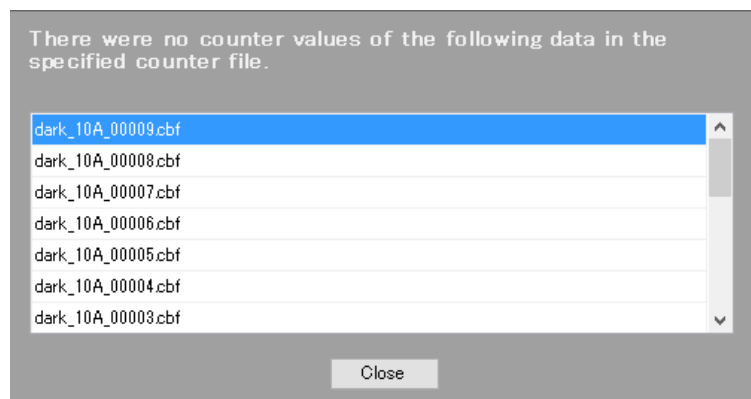
- xx. 全ての処理が完了すると、グラフが両対数プロットで表示されます。グラフは、マウスのスクロールで拡大縮小するか、左クリックで拡大したい範囲をドラッグして指定すれば拡大します。下のチェック BOX で、チェックを入れたり外したりし、[Redraw]をクリックすれば表示するグラフを選択できます。[Clear]で全消去します。この表の欄に dat ファイルを Drag&Drop してもグラフを表示できます。[Details]をクリックすると SAngler ウィンドウ上部にデータのヘッダー情報が示されます。



- xxi. グラフウィンドウには 2 つの表示があります。一つは【Main】タブで散乱曲線全体を表示しています。もう一つの【Point pick】タブでは、読み込まれているデータの特定の横軸の値に対する縦軸の値(散乱強度)をプロットすることが可能です。例えば、Q [Å⁻¹]=0.01 に対する散乱強度のプロットを表示したい場合は、[Picking point:]に 0.01 と入力し、[Set/Plot]をクリックします。小角付近の散乱強度変化をプロットすることで、放射線損傷による効果の有無を確認することができます。なお、このプロットのデータを出力することも可能です。[Output]をクリックすると、テキストデータとしてデータを保存できます。



- xxii. 散乱強度の規格化を行うために指定したカウンタファイルが間違っている場合は、円周平均処理がすぐに終わることがあります。具体的には、viii, ix で指定したカウンタファイルの番号が間違っている、そもそも処理する画像データのカウンタ値がそのファイル内に存在しない、データを保存しているディレクトリを変更した際にカウンタファイルを変更し忘れた場合等にそのようになります。その場合は、正しいファイルや番号を指定し直して下さい。



※標準誤差の導出

- I. ビームセンターから距離 r にある N 個のピクセルのデータを円周平均する。
- II. N 個のデータ x_1, x_2, \dots, x_N の平均値 x_m は、以下の様になる。

$$x_m = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N x_i$$

- III. 平均値 x_m に対する分散 V は、以下の様になる。

$$V = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (x_i - x_m)^2$$

- IV. 分散 V の平方根が標準偏差 SD (Standard Deviation) なので、

$$SD = \sqrt{V}$$

- V. 標準誤差 SE (Standard Error) は誤差伝搬則により、以下の関係式となる。
この値を出力している。

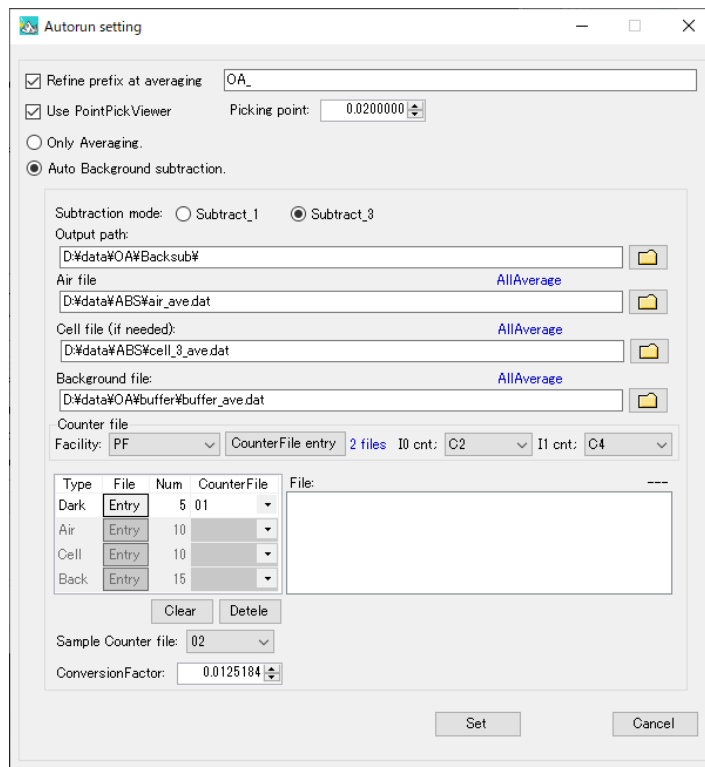
$$SE = \frac{SD}{\sqrt{N}}$$





※なお、複数枚を平均化して円周平均を行なう場合、まず、平均化するイメージを全て積分してから、円周平均処理を行なっています。

(2) 指定したフォルダを監視し、更新されたイメージデータを自動で円周平均する場合 (Autorun) (同時にバックグラウンドの引き算も自動実行することもできる)

イメージデータが作成されるフォルダを監視し、円周平均[Average]やバックグラウンドの引き算 [Sub_1 or 3]処理を自動で行うことができます。また、その結果を 3 次元的行列データとしてプロットしたり、指定した X 座標の値の変化を 1 次元プロットとして表示・作成したりできます (PointPickViewer.exe)。

- i. まずは事前準備として、(1)の(i)～(xv)までの手順を行い、設定します。
- ii. Autorun 処理は、基本的に個別のファイル単位の処理になります。[Data processing] - [All]の箇所、[Individual]にチェックを入れて、[Autorun]をクリックします。Autorun setting の Window が開きます。



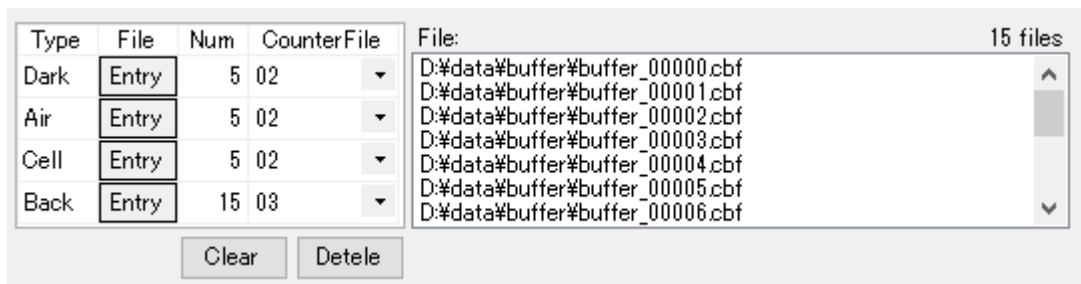
- iii. (i)で、監視するデータ保存フォルダを指定していますが、フォルダ内に複数のデータセットがある際に、ファイル名に特定の文字列を含むファイルだけを解析する場合は、[Refine prefix at averaging]にチェックを入れ、対象の文字列を入力します。
- iv. Autorun 中に処理結果を自動表示したい場合は、[Use Point Pick Viewer]にチェックします。また、特定の X 座標の値をピックアップしたい場合は、Picking Point にその X 座標の値を入力する。例えば、Q(Å⁻¹)であれば、通常は 0.02 等の値を入れる。
- v. 処理方法を選択します。
 - 円周平均のみ実行 … [Only Averaging]を選択する。
 - 円周平均後に Background の引き算も自動実行する場合は、[Auto Background subtraction]を選択する。
- vi. Auto Background subtraction にチェックした場合は、Subtraction mode を選択する。
 - 円周平均後に Sub_1 処理を実行 … [Subtract_1]を選択。
 - 円周平均後に Sub_3 処理を実行 … [Subtract_3]を選択。
 - ※ Subtraction mode の詳細は、後段の⑩～⑫(Background の差し引き 1～3)を参照のこと。
- vii. [Subtract_1]を選択した場合。
 - A. [Output path]に、Background を引いた後のデータを出力するディレクトリを指定する。をクリックして指定するか、ブランク Box 内を直接編集します。
 - B. 使用する Background ファイル(dat ファイル)を指定します。をクリックしてファイルを指定するか、ブランク Box 内を直接編集する、さらには dat ファイルをブランク Box にドラッグアンドドロップしても指定できます。Background ファイルは事前に円周平均して 1 次元化しておく必要があります。
- viii. [Subtract_3]を選択した場合。
 - A. [Output path]に、Background を引いた後のデータを出力するディレクトリを指定する。をクリックして指定するか、ブランク Box 内を直接編集します。
 - B. 事前に、⑬ABS_W や⑭ABS_GC で説明している水や Glassy Carbon を使用した「散乱強度 (counts) の絶対散乱強度 (cm⁻¹) 化」を実行している場合は、[Air file:]、[Cell file (if needed):]にその処理中に指定したファイルが入力されています。実施していない場合は、空気散乱のデータ(Air file)と試料セルのデータ(試料無し of セルのみのデータ、Cell file)を指定します(ともに dat ファイル)。をクリックしてファイルを指定するか、ブランク Box 内

を直接編修する、さらには dat ファイルをブランク Box にドラッグアンドドロップしても指定できます。dat ファイルなので、事前に円周平均して 1 次元化しておく必要があります。

- C. 使用する Background ファイル(dat ファイル)を指定します。📁 をクリックしてファイルを設定するか、ブランク Box 内を直接編修する、さらには dat ファイルをブランク Box にドラッグアンドドロップしても指定できます。Background ファイルは事前に円周平均して 1 次元化しておく必要があります。
- ix. [Counter file]には、先に【Ave】タブで設定したカウンタファイルの情報が読み込まれています。I0 cnt は試料前のビームの積分強度のチャンネル、I1 cnt は試料を透過後のビームの積分強度のチャンネルを指定します。PF の場合は、C2 が試料前のマイクロイオンチャンバで計測した値、C3 が試料後にもマイクロイオンチャンバを設置して計測した値、C4 がダイレクトビームストップに埋め込まれている Si PIN フォトダイオードの値です。SPring-8 の BL38B1 では、C2 が試料前のマイクロイオンチャンバ、C3 が試料後のフォトダイオード(ビームストッパー埋め込み)、BL45XU (2018 年 12 月まで)では、MIC up が試料前、MIC down が試料後、40B2 では、C3 が試料前、C4 が試料後となっています。
- x. 各 Air、Cell、Background のファイルに関して、そのファイルが Individual 処理されている場合は、欄上に「Individual」と表示され、複数枚のデータを平均化したファイルの場合は、「All Average」と表示されます。一方で、Ver. 2.0.7 以前のバージョンで処理された場合は、ファイルのヘッダーに露光中のビームの積分強度(カウンタ値)が記録されていないため、dat ファイルとは別に使用するカウンタファイルを読み込み、また Air、Cell、Background に対応するデータを指定する必要があります。⑦円周平均(Average)(1)測定したデータを順番に指定して処理する場合の(xiii.)の項目で説明しているDarkファイルの指定方法を参考にして、Air、Cell、Background の該当ファイルとカウンタファイルを設定します。

Type	File	Num	CounterFile
Dark	Entry	5	02
Air	Entry	5	
Cell	Entry	5	
Back	Entry	15	

●Ver. 2.1.0 以降で処理されたファイルを使用する場合は、円周平均処理で使用したカウンタ値の情報が dat ファイルのヘッダーに記録されているため、Air、Cell、Background の dat ファイルを読み込むと、カウンタ情報の表は灰色に網掛け入力不要となる。



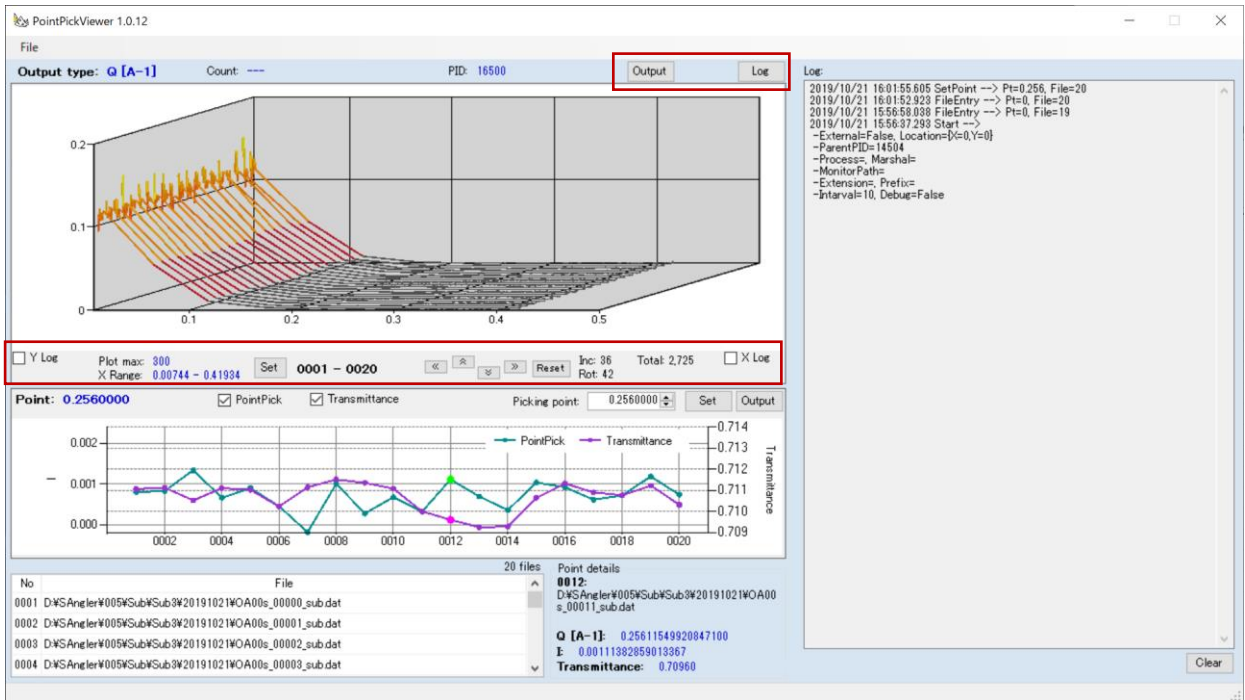
●Ver. 2.0.7 以前のファイルを使用する場合は、Dark 同様に使用するカウンタ値の情報をそれぞれあらためて指定する必要がある。

- xi. [Sample Counter file]には、[Counter File entry]で指定したサンプルのカウンタファイルの番号を設定します。
- xii. [Conversion Factor(絶対散乱強度へ規格化するための変換値)]に関しては、⑬**ABS_W** と⑭**ABS_GC** で説明しています。先に実行しておく、ここに値が自動で読み込まれているはずですが、読み込まれていない場合は、値を確認して手動で入力するか、設定不要であればそのまま1.0000000 とします。
- xiii. [Set]をクリックすると、条件確認のためのダイアログが表示されますので、問題無ければ「はい」をクリックし、処理をスタートさせます。

[Use Point Pick Viewer]にチェックした場合は、Point Pick Viewer が起動し、②**Config Setting** の設定の(vii.)で設定した時間間隔で、自動処理が進みます。

⑧ PointPickViewer


連続した散乱曲線データ(dat)セットを読み込んで、散乱曲線を 3D でプロットしたり、また指定した X 座標での散乱強度変化をプロットしたりできます。また、この 1 次元プロットでは、試料による X 線の透過率の変化も同時にプロットすることもできます。



【3D プロット】

[X Log][Y Log]チェックボックス: X 軸、Y 軸を対数表示したい場合はチェックします。

[Set]: 1 ページに表示するデータの最大数、X 軸の表示範囲を設定します。Y 軸は自動調整されます。

 : 3D プロットを水平、及び垂直方向に回転させることができます。初期値は Inc=8、Rot=9 です。[Reset]で初期値の角度に戻ります。

※ Inc: 水平軸を中心する回転(-90~90)、Rot: 垂直軸を中心とする回転(-180~180)。

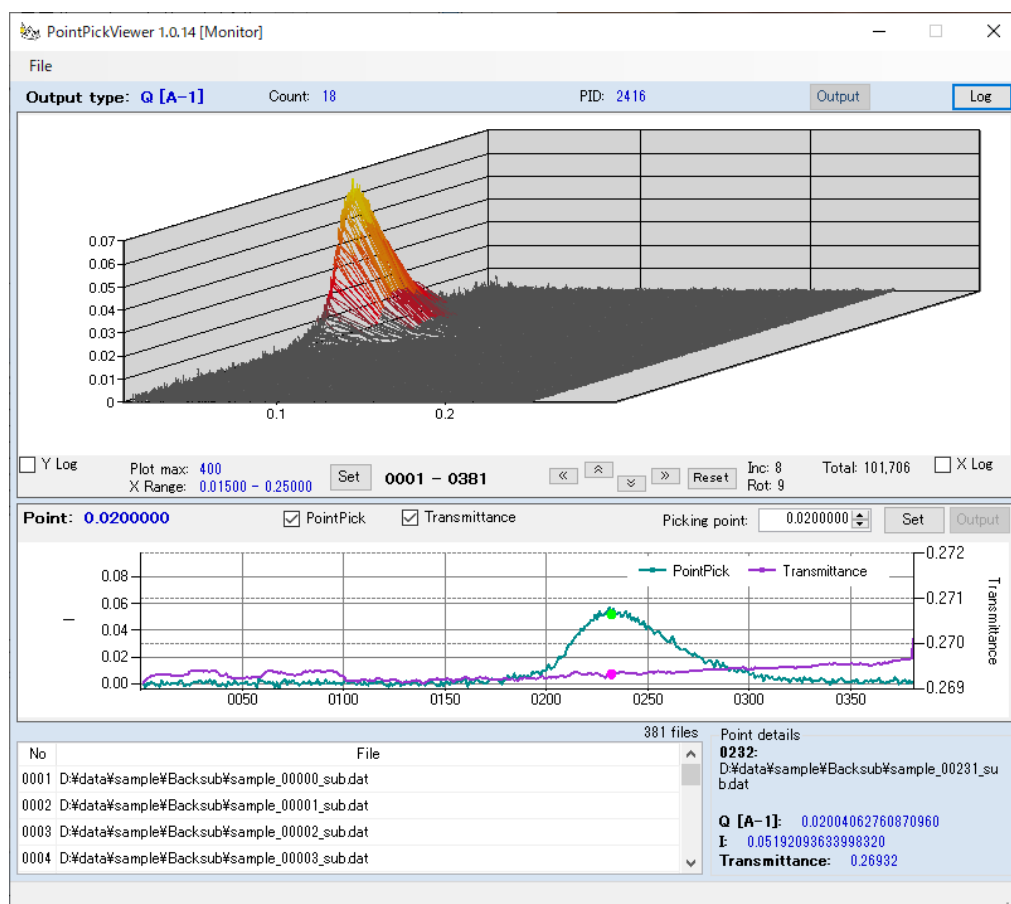
[Output] ボタン: (ウィンドウ上部)グラフを画像として、または XY の 2 次元表形式(dat ファイル)で出力します。

[Log] ボタン: 右側に表示されているログ欄を表示/非表示にします。

【Point Pick プロット】

Viewer 起動時には、[Point Pick]と[Transmittance]にチェックが入っています。チェックを外すとグラフの表示が消えます。青字で示された[Point:]には、設定した X 座標示されていますが、これを変更する場合は[Picking Point:]に値を入力して[Set]を押します。

- ・プロット中の各点をクリックすると、その点を選択できます。プロット右下の[Point details:]に選択した点の詳細情報が表示されます。
- ・[Output]ボタン: Point Pick プロットのデータをテキストデータ(dat)で出力できます。



※下段側の 1 次元プロットにおいて、Y 軸の左側 (散乱強度: I) と右側 (試料による X 線透過率 (Transmittance)) ではスケールが異なることに注意して下さい。

●Point Pick Viewer は、SAnGLer とは別に単独起動もできます。

【通常起動時】

- SAnGLer のメニュー[Tools] - [PointPickViewer]を選択して起動する。
- 表示したい dat ファイルを、ウィンドウ左下の表の部分に Drag&Drop すると、dat データが読み込まれてグラフが表示されます。

- iii. X軸をLogで表示したい場合は[X Log]をチェックオンに、Y軸をLogで表示したい場合は[Y Log]をチェックオンにします。
- iv. 3Dプロットの表示範囲を変更する場合は、3Dプロットしたの[Set]ボタンをクリックして設定します。
- v. [Picking Point]に表示したい X 座標の値を入力して[Set]ボタンをクリックすると、下にグラフが表示されます。複数の AverageDat ファイルの場合は PointPick のみ、SubtractDat ファイルの場合は PointPick と Transmittance のグラフが表示されます。(切り替えも可能です。)
- vi. 終了時出力確認メッセージが表示されます。以前に出力した場合はそのファイル名を一緒に表示されます。

【フォルダ監視時】

- i. 【Ave】タブ内[Autorun]処理で「PickingPoint」を指定し Autorun 処理を開始すると、フォルダ監視モードで PointPickViewer が起動します。
- ii. 指定時間経過すると自動でフォルダ内の dat ファイルを解析し、結果を表示します。(指定時間は SAngler の[Option] - [ConfigSetting]で設定することができます。初期値は 15 秒です。)
- iii. dat ファイル読み込み時は他の操作を行うことができません。
- iv. 読み込み時以外では[PickingPoint]のみ変更することができます。
- v. SAngler で監視モードが終了すると PointPickViewer でも監視が終了します。SAngler で再度監視が開始されれば PointPickViewer も監視を再開します。
※ 一度 SAngler との連動が切断された場合は通常起動と同じ動作をします。もう一度 SAngler と連動させる場合は、一度 PointPickViewer を終了し、SAngler から起動してください。

※出力ファイル(円周平均のみ)のヘッダー

(1)Individual 処理の場合

```
# Date: 2020/05/20 15:21:41
# SAngler Version: 2.1.36
# Type: ImgAverage
# BeamCenter X: 720.89920/ Y: 744.93770
# Wavelength: 1.50000
# Camera distance: 2013.21444
# PixPitch: 0.172 * 0.50000
# Tilts H: 0.00000/ V: 0.00000
# Image: D:¥data¥sample¥sample_00000.cbf
```

```

# Unit: Individual
# Counter file: D:\data\sample\PilatusCounter_sample.txt
# Ch: [C1]6548045.000 [C2]271137.000 [C3]0.000 [C4]326187.000 [C5]0.000
      [C6]0.000 [C7]0.000 [C8]0.000
##
# 1st. Column: Q [A-1]
# 2nd. Column: I(export) = I(ORG) / [( [C2] - 1257 ) * 0.1000000 * 1.0000000]
# 3rd. Column: SE I(export) = SE I(ORG) / [( [C2] - 1257 ) * 0.1000000 * 1.0000000]
# SE = Standard error.
# Dark File: 5 files
# - D:\data\ABS\dark_00000.cbf
# - D:\data\ABS\dark_00001.cbf
# - D:\data\ABS\dark_00002.cbf
# - D:\data\ABS\dark_00003.cbf
# - D:\data\ABS\dark_00004.cbf
# DarkCh: [C1]7711436.000 [C2]1257.000 [C3]0.000 [C4]1056.800
          [C5]0.000 [C6]0.000 [C7]0.000 [C8]0.000
# DarkCounts(Average): 1257.000
# SampleThickness[cm]: 0.1000000
# Multiplier: 1.0000000
# Threshold: None.
##
## Version: VERSION 1.5, CBFlib v0.7.8 - PILATUS detectors
## Detector: PILATUS3 2M, S/N 24-0116
## Measurement Date: 2019-02-27T22:38:38.005
## PixelSize: 172e-6 m x 172e-6 m
## Silicon sensor, thickness 0.000320 m
## Exposure Time: 20.0000000 s
## Exposure Period: 20.0100000 s
## Tau: 0 s
## Count CutOff: 1061219
## Threshold Setting: 4132 eV
## Gain Setting: autog (vrf = 1.000)
## N Excluded Pixels: 207
## Excluded Pixels: badpix_mask.tif
## Flat Field: FF_p24-0116_E8265_T4132_vrf_m0p100.tif
## Trim File: p24-0116_E8265_T4132.bin
## Ratecorr Lut Directory: ContinuousStandard_v1.1

```

```
##
# Number of DATA: 1545
0.00483126178742133    0.00471187718391302    5.81627082733806E-05
0.00501019722061095    0.00436550658493805    0.000123891946896222
0.00518913263322968    0.00398326188821211    0.000125698913737578
      :                      :                      :
```

(2)Average 処理(複数ファイルの平均処理)の場合

```
# Date: 2020/05/20 16:49:32
# SAngler Version: 2.1.36
# Type: ImgAverage
# BeamCenter X: 720.89920/ Y: 744.93770
# Wavelength: 1.50000
# Camera distance: 2013.21444
# PixPitch: 0.172 * 0.50000
# Tilts H: 0.00000/ V: 0.00000
# Image: D:¥data¥sample¥sample_00000.cbf
# Image: D:¥data¥sample¥sample_00001.cbf
# Image: D:¥data¥sample¥sample_00002.cbf
# Image: D:¥data¥sample¥sample_00003.cbf
# Image: D:¥data¥sample¥sample_00004.cbf
# Image: D:¥data¥sample¥sample_00005.cbf
# Image: D:¥data¥sample¥sample_00006.cbf
# Image: D:¥data¥sample¥sample_00007.cbf
# Image: D:¥data¥sample¥sample_00008.cbf
# Image: D:¥data¥sample¥sample_00009.cbf
# Unit: AllAverage
# Counter file: D:¥data¥sample¥PilatusCounter_sample.txt
# Ch: [C1]6541457.500    [C2]270717.900    [C3]0.000    [C4]325850.600    [C5]0.000
      [C6]0.000    [C7]0.000    [C8]0.000
```

```
##
# 1st. Column: Q [A-1]
# 2nd. Column: I(export) = I(ORG) / [( [C2] - 1257 ) * 0.1000000 * 1.0000000]
# 3rd. Column: SE I(export) = SE I(ORG) / [( [C2] - 1257 ) * 0.1000000 * 1.0000000]
# SE = Standard error.
# Dark File: 5 files
# - D:¥data¥ABS¥dark_00000.cbf
# - D:¥data¥ABS¥dark_00001.cbf
```

```

# - D:¥data¥ABS¥dark_00002.cbf
# - D:¥data¥ABS¥dark_00003.cbf
# - D:¥data¥ABS¥dark_00004.cbf
# DarkCh: [C1]7711436.000      [C2]1257.000      [C3]0.000      [C4]1056.800
          [C5]0.000      [C6]0.000      [C7]0.000      [C8]0.000
# DarkCounts(Average): 1257.000
# SampleThickness[cm]: 0.1000000
# Multiplier: 1.0000000
# Threshold: 0.400
##
## Version: VERSION 1.5, CBFlib v0.7.8 - PILATUS detectors
## Detector: PILATUS3 2M, S/N 24-0116
## Measurement Date: 2019-02-27T22:38:38.005
## PixelSize: 172e-6 m x 172e-6 m
## Silicon sensor, thickness 0.000320 m
## Exposure Time: 20.0000000 s
## Exposure Period: 20.0100000 s
## Tau: 0 s
## Count CutOff: 1061219
## Threshold Setting: 4132 eV
## Gain Setting: autog (vrf = 1.000)
## N Excluded Pixels: 207
## Excluded Pixels: badpix_mask.tif
## Flat Field: FF_p24-0116_E8265_T4132_vrf_m0p100.tif
## Trim File: p24-0116_E8265_T4132.bin
## Ratecorr Lut Directory: ContinuousStandard_v1.1
##
# Number of DATA: 1545
0.00735588299689442      0.0192514741809156      0.00209853198579806
0.00776454270765224      0.0180931033805649      0.000952245234077713
0.00817320234450698      0.0138984048003198      0.000594581681742784
:                          :                          :

```

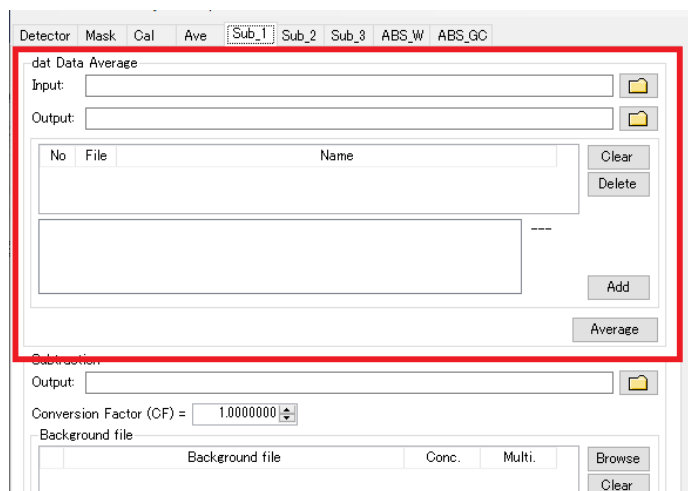
Date	データ出力日時
SAngrer Version	SAngrer バージョン
Type	出力データタイプ
BeamCenter	ビームセンター
Wavelength	波長



Camera distance	カメラ長
PixPitch	ピクセルピッチ
Tilts H: / V:	傾き
Image	イメージファイル
Unit	単体解析/合算解析
Counter file	カウンタファイル
Ch	カウンタ値[Ch 別](個別:単体値/ 合算:平均値)
1st. Column	1 列目データ
2nd. Column	2 列目データ
3rd. Column	3列目データ
Dark File	ダークファイル
DarcCh	ダークカウンタ平均値[Ch 別]
DarkCounts(Average)	ダークカウンタ平均値
SampleThickness	サンプルの厚さ
Multiplier	乗数
Threshold	しきい値
##	イメージデータのヘッダーデータ
Number of Data	データの行数

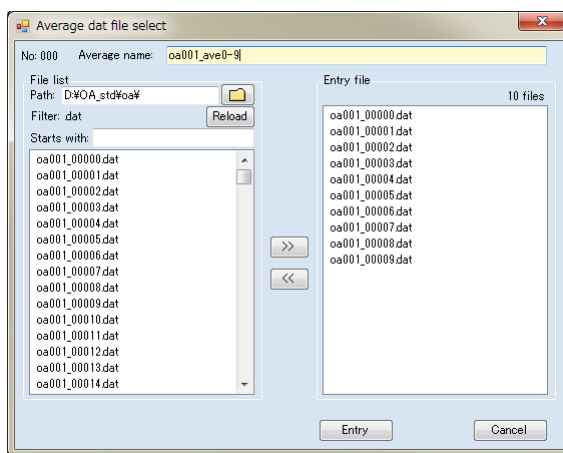
出力データには、3 つのデータ列が出力されており、1 列目は指定した横軸($Q(\text{\AA}^{-1})$ 等)、2 列目は散乱強度 I、3 列目は散乱強度の標準誤差 σ が出力されています。散乱強度の規格化を指定した場合は、2、3 列目の値は規格化後の値になっています。

⑨ 円周平均後の dat ファイルの平均 (DatAverage)

【Sub_1】のタブには、上段に「円周平均後の dat ファイルを平均化するツール」と下段に「バックグラウンドを差引くためのツール」が用意されています。まずは、dat ファイルの平均化に関して説明します。



- i. [Input:]には、Averaging で指定した[Output]ディレクトリが自動的に入力されている。ここから始めた場合は、をクリックして dat ファイルが保存されているディレクトリを指定します。この欄は、直接編集することも可能です。
- ii. [Output:]には、平均したファイルを出力するディレクトリを指定します。を押すか、直接編集しま



す (Input と同じなら、コピーペーストする)。

- iii. [Add]をクリックして、先程の Averaging 同様に平均化する dat ファイルを指定します。出力する平均化後のファイル名を入力したら[Entry]をクリックして閉じます。

- iv. さらに別のデータセットを平均化したい場合は、[Add]をクリックして追加していきます。
- v. 入力が完了したら、[Average]をクリックします。平均化したファイルが出力され、グラフが表示されます。出力ファイル内には、どのファイルを使って平均化したのかヘッダーに明示され、Q などの横軸の値、散乱強度 I、散乱強度の標準誤差 σ_I が出力されます。標準誤差は誤差の伝播則に従って再計算されています。

※dat ファイル平均化後の誤差

誤差 σ を持つ N 個のデータ $x_1 \pm \sigma_1, x_2 \pm \sigma_2 \dots, x_N \pm \sigma_N$ の平均値 $x_m \pm \sigma_m$ は、誤差伝搬則に従い、以下の式で求められる。

$$x_m \pm \sigma_m = \frac{\sum_{i=1}^N x_N}{N} \pm \frac{\sqrt{\sum_{i=1}^N \sigma_N^2}}{N}$$

※【Ave】のタブでイメージを平均化する場合は、まず全てのイメージを足し合せてから処理しています。従って、個別のイメージを円周平均してから平均化する方法とは、計算方法が異なるため出力結果が異なります。

⑩ Background の差引き 1 (Sub_1)

Sample のデータから Background のデータを差引く (Subtraction) 処理を行いません。Ver. 2.0.0 から【Sub_2】タブが Ver. 2.0.7 から【Sub_3】が追加されました。【Sub_1】タブでは、単純に Sample の散乱強度から Background の散乱強度を引く機能になっています。【Sub_2】タブでは、散乱体の X 線透過率を基に、Sample から Background の散乱強度を空の試料セルの散乱強度を除いてから差引き、さらには試料濃度の排除体積効果も考慮した計算を行なうことができます。【Sub_3】タブでは、【Sub_2】に対して排除体積効果の項中を 1 とした場合の計算を、多数のデータに対して一度に実施することが可能です (透過率のみを考慮して Background の差引きを実行する)。まずは、【Sub_1】の機能について説明します。

- i. 【Sub_1】タブ下段側の [Output:] に計算結果を出力するディレクトリを指定します。📁 をクリックして選択するか、直接編集します。

[Conversion Factor (CF)] は、散乱強度を絶対散乱強度の単位に変換するための Factor になります。CF 値を求める方法は、「⑬ ABS_W」、「⑭ ABS_BC」にて説明します。

- ii. [Background file] に、Background とするファイルを指定します。[Browse] をクリックしてファイルを指定することもできますし、この欄にファイルを Drag&Drop する事も可能です。入力する Background ファイルは 1 つです。
- iii. [Sample file] に Background を引きたいファイルを指定します。何個でも一度に入力できます (基本的に制限はありません)。[Browse] をクリックしてファイルを指定しますが、複数個指定する場合は、ctrl キーや shift キーを押しながらクリックして選択して下さい。この欄にファイルを Drag&Drop する事も可能です。一度に複数のファイルを選択して Drop して下さい。[Option] - [ConfigSetting] にお

いて、一度に処理できるファイル数が、デフォルトで 300 個に設定されています(変更できます)。

- iv. Background、Sample ともに[Multi.]欄に値を入力すると、散乱強度にその値を掛けることができます。通常は 1.000 となっています。また、Sample の方では、「Conc.(試料の濃度)」を入力する事もできます。濃度の値は出力ファイルのヘッダーに記録され、後の解析時に自動的に読み込まれます。

Subtraction

Output: D:\temp2\OA\Backsub

Conversion Factor (CF) = 0.0123840

Background file

Background file	Conc.	Multi.
D:\temp2\OA\Cir Ave\oa001_ave.dat	---	1.000

Sample file

Sample file	Conc.	Multi.
D:\temp2\OA\Cir Ave\oa001_ave.dat	5.000	1.000
D:\temp2\OA\Cir Ave\oa002_ave.dat	4.000	1.000
D:\temp2\OA\Cir Ave\oa003_ave.dat	3.000	1.000
D:\temp2\OA\Cir Ave\oa004_ave.dat	2.000	1.000
D:\temp2\OA\Cir Ave\oa005_ave.dat	1.000	1.000

Subtract

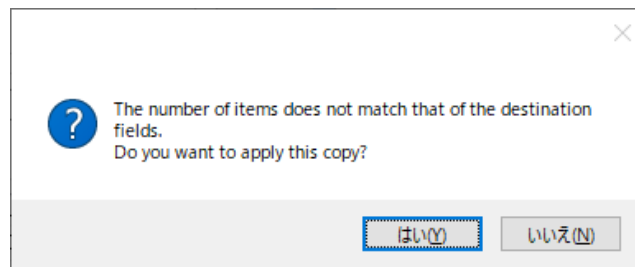
- v. 上図の様に複数のデータを読み込んでいる場合は、濃度の値を 1 行ずつ設定することもできますが、Excel 等から表データとしてコピーして、この欄にペーストすることもできます。

The diagram illustrates the process of pasting data from Excel into the software interface. On the left, the 'Sample file' table shows a list of files with their respective concentrations and multipliers. A blue arrow points from the 'Conc.' column of the table to an Excel spreadsheet on the right. The Excel spreadsheet shows a column labeled 'conc' with values 10, 9, 8, 7, 6, 5, 4, 3, 2, 1. A black arrow points from the Excel spreadsheet back to the 'Sample file' table, indicating the data transfer. The resulting table shows the 'Conc.' column updated with the values from the Excel spreadsheet.

Sample file	Conc.	Multi.
D:\data\sample\sample_00000.cbf	10.000	1.000
D:\data\sample\sample_00001.cbf	9.000	1.000
D:\data\sample\sample_00002.cbf	8.000	1.000
D:\data\sample\sample_00003.cbf	7.000	1.000
D:\data\sample\sample_00004.cbf	6.000	1.000

(例) 10 個のファイルを読み込んで各濃度を入力したい場合、Excel で濃度が 1 列に並んでいるデータを用意し、表データとして SAngler の[Conc.]列にコピーペーストできます。ただし、1 列ずつしか

コピーできません。コピーするデータの個数が一覧で表示されているデータ数より多い場合は確認メッセージが表示されます。

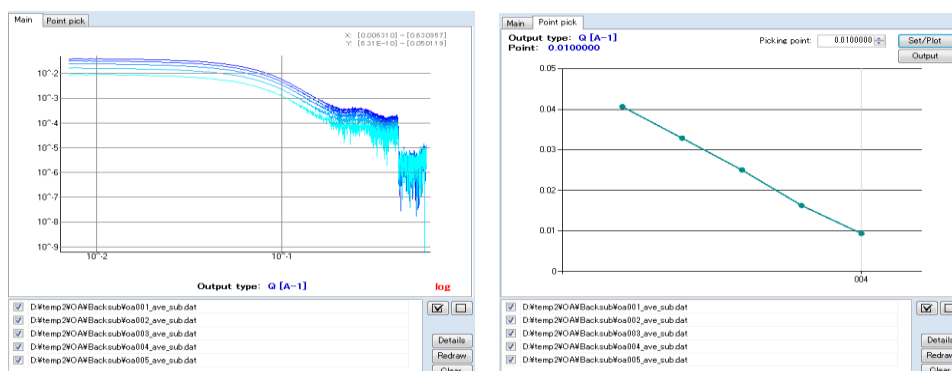


vi. なお、Sub_1 で使用する計算式がウィンドウの右上に明示されています。

```
Subtract_1
I(export) = (1/CF) * [ I(Sample) * Multi ] - [ I(Background) * Multi ]
```

vii. 準備ができたなら、[Subtract]をクリックします。ファイルが出力されグラフが両対数プロットで表示されます。グラフは、マウスのスクロールで拡大縮小したり、左クリックで拡大したい範囲をドラッグして指定したりすれば拡大します。下のチェック BOX で、チェックを入れたり外したりし、[Redraw]をクリックすれば表示するグラフを選択できます。[Clear]で全消去します。[Details]をクリックすると SAngher ウィンドウ上部にデータのヘッダー情報が示されます。この欄に dat ファイルを Drag&Drop してもグラフを表示できます。

viii. グラフウィンドウには2つの表示があります。一つは【Main】タブで散乱曲線全体を表示しています。もう一つの【Point pick】タブでは、読み込まれているデータの特定の横軸の値に対する縦軸の値（散乱強度）をプロットすることが可能です。例えば、 $Q[A^{-1}] = 0.01$ に対する散乱強度のプロットを表示したい場合は、[Picking point:]に 0.01 と入力し、[Set/Plot]をクリックします。小角付近の散乱強度変化をプロットすることで、放射線損傷による効果の有無を確認することができます。なお、このプロットのデータを出力することも可能です。[Output]をクリックすると、テキストデータとしてデータを保存できます。



※Sub 1での誤差の導出

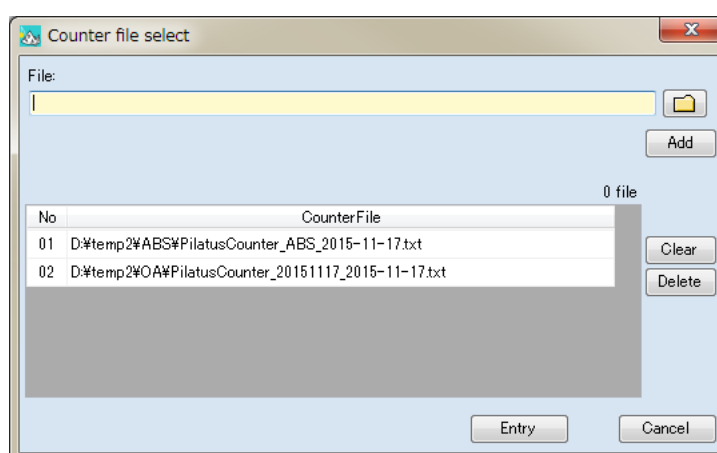
Sample 側の誤差を σ_A 、Background 側の誤差を σ_B とすると、Sub_1 式に従って引いた場合の誤差 σ_m は、誤差伝搬則に従い、以下の式で求められる。

$$\sigma_m = \sqrt{(\sigma_A \times multi.sample)^2 + (\sigma_B \times multi.Background)^2}$$

⑪ Background の差引き 2(Sub_2)

【Sub_2】タブでは、空の試料セルの散乱強度、空のセル – Background - Sample 測定での X 線透過率、さらには試料濃度に依存する排除体積効果も考慮した計算を行なうことができます。

- i. [Output:]に計算結果を出力するディレクトリを指定します。📁をクリックして選択するか、直接編集します。
- ii. 続いて、透過率の計算のために必要なカウンタファイルを設定するために、カウンタファイルの仕様を指定する「Facility」を選択します（基本的には【Ave】タブでの設定をそのまま引継いでいるので、同じ設定で処理を進める場合は変更する必要はありません）。PF と SPring-8 BL38B1、BL45XU(2018 年 12 月まで)、40B2 のカウンタファイルの形式に対応しています。
- iii. 次に、[CounterFile entry]で、使用するカウンタファイルを設定します（基本的には【Ave】タブでの設定をそのまま引継いでいるので、同じ設定で処理を進める場合は変更する必要はありません）。クリックすると[Counter file select]ダイアログが開きます。📁をクリックしてカウンタファイルを選択し、その後[Add]ボタンを押すと、ダイアログ下側のリスト欄に移ります。これで選択完了です。この欄にファイルを Drag&Drop する事も可能で、その場合は直ぐに選択完了になります。一方で、使用するカウンタファイルが複数存在する場合は、複数個のカウンタファイルを指定することができます。例えば、Dark、Air、Cell に対応したカウンタファイルと、Background、Sample に対応するカウンタファイルが異なる場合は、そのファイルをそれぞれ読み込んでおくこととなります。カウンタファイルは読み込んだ順番に番号が設定されますので、(ix)の設定ではこの番号をそれぞれ指定します。設定が完了したら[Entry]をクリックして閉じます。



- iv. [I0 cnt:]に試料前の入射 X 線強度のチャンネル、[I1 cnt:]に試料後の透過 X 線強度のチャンネルを指定します。PF では、入射 X 線強度は C2、透過 X 線強度は C4(ビームストッパーに仕込まれたフォトダイオード)になっているのが一般的です。SPring-8 の BL38B1 では、C2 が試料前のマイクロ

イオンチャンバ、C3 が試料後のフォトダイオード(ビームストッパー埋め込み)となっています。BL45XU(2018年12月まで)では、MIC up が試料前、MIC down が試料後、40B2 では、C3 が試料前、C4 が試料後となっています(念のため担当者に確認して下さい)。

Facility: PF CounterFile entry 2 files I0 cnt: C2 I1 cnt: C4

v. 次に、処理に使用する Dark、Air、Cell、Background、Sample の計測データと、透過率の計算に必要なカウンタファイルを設定しますが、Ver. 2.0.7 以前と 2.1.0 以降で処理の手順が異なります。

● Ver 2.1.0 以降に処理されたファイルを使用する場合

- A. 表の部分では、Dark のみ【Ave】タブで設定した内容が反映されています。Air 以下は使用しません。その下の Air、Cell、Background、Sample のデータを指定する欄に移ります。事前に、⑬ABS_W や⑭ABS_GC で説明している水や Glassy Carbon を使用した「散乱強度 (counts)の絶対散乱強度 (cm⁻¹)化」を実行している場合は、[Air file]、[Cell file]にその処理中に指定したファイルが入力されています。実施していない場合や使用するファイルを変更する場合は、空気散乱のデータ(Air file)と試料セルのデータ(試料無しのセルのみのデータ、Cell file)を指定します(ともに dat ファイル)。**[Browse]**をクリックしてファイルを指定するか、dat ファイルを空白 Box に Drag&Drop します。dat ファイルなので、事前に円周平均して 1次元化しておく必要があります。

Type	File	Num	CounterFile	I0	I1	I1/I0	Transmittance
Dark	Entry	5	02	1257	1057	---	---
Air	Entry	5		---	---	---	---
Cell	Entry	5		---	---	---	---
Back	Entry	0		---	---	---	---
Samp	Entry	0		---	---	---	---

File:

	Air file	Conc.	Multi.	
<input checked="" type="checkbox"/>	D:\data\ABS\air_ave.dat	---	1.000	<input type="button" value="Browse"/> <input type="button" value="Clear"/>
<input checked="" type="checkbox"/>	D:\data\ABS\cell5_ave.dat	---	1.000	<input type="button" value="Browse"/> <input type="button" value="Clear"/>
<input type="checkbox"/>	Background file	Conc.	Multi.	<input type="button" value="Browse"/> <input type="button" value="Clear"/>
<input type="checkbox"/>	Sample file	Conc.	Multi.	<input type="button" value="Browse"/> <input type="button" value="Clear"/>

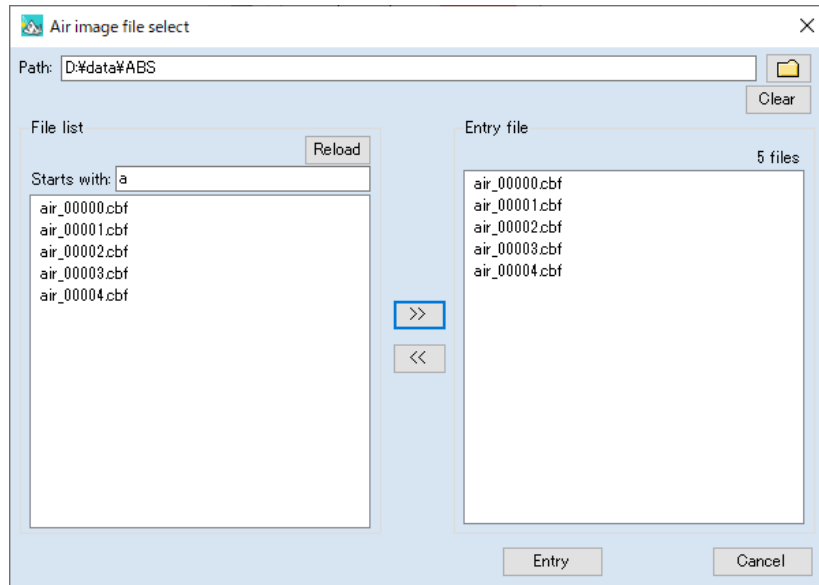
Conversion Factor (CF) = ■ Individual ■ AllAverage

- B. 使用する Background と Sample のファイル (dat ファイル) を指定します。[Browse] をクリックしてファイルを指定するか、dat ファイルを空白 Box に Drag&Drop します。どちらも、事前に円周平均して 1 次元化した dat ファイルを一つ指定します。Background、Sample ともに「Multi.」欄に値を入力すると、散乱強度にその値を掛けることができます。通常は 1.000 となっています。また、Sample の方では、[Conc. (試料の濃度)] を入力する事もできます。濃度の値は出力ファイルのヘッダーに記録され、後の解析時に自動的に読み込まれます。4 つのファイルが適切に読み込まれると、上の表で Air から Samp までの部分は無効を示す灰色の表示になります。また、この欄では、これらの dat ファイルが 1 枚の画像データを個別処理したファイルなのか (Individual: 黄色)、複数の画像データを平均化したファイルなのか (All Average: 緑色) なのかを判別しています。

Air file		Conc.	Multi.	Browse
<input checked="" type="checkbox"/>	D:\data\ABS\air_ave.dat	---	1.000	Clear
Cell file		Conc.	Multi.	Browse
<input checked="" type="checkbox"/>	D:\data\ABS\cell5_ave.dat	---	1.000	Clear
Background file		Conc.	Multi.	Browse
<input checked="" type="checkbox"/>	D:\data\buffer\CirAve\buffer_ave.dat	---	1.000	Clear
Sample file		Conc.	Multi.	Browse
<input checked="" type="checkbox"/>	D:\data\sample\CirAve\sample_00000.dat	1.000	1.000	Clear

Conversion Factor (CF) = Individual AllAverage

- C. vi に移ります。
- Ver 2.0.7 以前に円周平均処理したファイルを使用する場合
 - A. 透過率の計算を行なうために、次の表に Dark、Air、Cell、Background、Sample を計測したそれぞれのデータを指定してきます。Dark は、【Ave】タブで設定した内容になっていますが、変更する場合は、以下と同様に編修します。各項目で [Entry] をクリックすると、イメージデータのファイルを選択するダイアログが開きます。[Path:] にデータのあるディレクトリを指定します。📁 を押すか、直接編集 (コピーペーストも可) します。Reload をクリックすると、ディレクトリ内のイメージデータが一覧で表示されますので、該当するファイルを複数枚同時に選択します (1 枚でも可)。OS の機能が使えますので、例えば [ctrl] キーを押しながら複数枚クリックして選択も出来ますし、単にマウスでクリックしながらドラッグすれば複数枚選択できます。[Starts with:] はフィルター機能で、ファイル名の頭から他のファイルを排除できる文字列を入力すると、特定のデータセットだけを表示させる事ができます。その状態で [ctrl + A] を押せば全選択できます。>> をクリックするとファイルが右側に移り確定します。完了したら [Entry] をクリックしてダイアログを閉じます。この操作をそれぞれ繰り返していきます。



- B. イメージデータの選択が完了したら、[CounterFile]の欄で、(iii)で設定したカウンタファイルの中から、それぞれ何番のファイルを使用するのか選択します。[CounterFile entry]のボタンにマウスカーソルを合わせると、登録されているカウンタファイルがポップアップで表示されます。この欄は設定前では赤色に表示されていますが、番号を選択すると白色に戻ります。各項目で複数のイメージデータを設定していれば、カウンタの値も平均値が示されますが、Darkとその他では計算内容が異なります。Darkに関しては、単純に[I0]と[I1]のダークカウンタの平均値が示されます。一方で、Air~Sample に関しては、[I1/I0]の平均値のみ示されます。式の詳細は、この項目 (⑩ **Background の差引き 2(Sub_2)**)の最後の項で確認して下さい。[Clear]ボタンをクリックすると、この表の全ての設定をクリアできます。

Type	File	Num	CounterFile	I0	I1	I1/I0	Transmittance
Dark	Entry	5 02	▼	1257	1057	---	---
Air	Entry	5 02	▼	---	---	---	---
Cell	Entry	5 02	▼	---	---	---	---
Back	Entry	15 03	▼	---	---	---	---
Samp	Entry	1 01	▼	---	---	---	---

5 files

File: D:\data\ABS\air_00000.cbf
D:\data\ABS\air_00001.cbf
D:\data\ABS\air_00002.cbf
D:\data\ABS\air_00003.cbf
D:\data\ABS\air_00004.cbf

- C. 使用する Air、Cell、Background、Sample のファイル(dat ファイル)を指定します。[Browse]をクリックしてファイルを指定するか、dat ファイルを空白 Box に Drag&Drop します。いずれのファイルも、事前に円周平均して 1 次元化した dat ファイルを一つ指定します。複数のファイルを平均化して得られた dat ファイルの場合は、B の表において、その平均化に使用した複数のデータを指定すれば、透過率はその平均値が使用されます。[Multi.]欄に値を入力

すると、それぞれの散乱強度にその値を掛けることができます。通常は 1.000 となっています。また、Sample の方では、[Conc.(試料の濃度)]を入力する事もできます。濃度の値は出力ファイルのヘッダーに記録され、後の解析時に自動的に読み込まれます。Ver. 2.0.7 以前に処理されたファイルを使用する場合は、Individual、All Average の判定は行なわれません。

D. vi に移ります。

vi. [Conversion Factor(絶対散乱強度へ規格化するための変換値)]に関しては、⑬ABS_W と⑭ABS_GC で説明しています。先に実行しておく、ここに値が自動で読み込まれているはずですが、読み込まれていない場合は、値を確認して手動で入力するか、設定不要であればそのまま 1.0000000 とします。

vii. 排除体積効果を考慮するための[Factor](ここでは Φ としています)を設定します。偏比容 (PSV=Partial Specific Volume)の値を入力すれば、[Sample file]欄で設定した Conc.(濃度)の値を使用して式に従い Φ 値が計算されます。PSV 値は、タンパク質溶液試料の解析でよく使用される 0.734 という値をデフォルトとしていますが、自由に変更可能です。また、1.000 で良い場合や、別途求めた値を使用する場合は、ラジオボタンを[Use Factor]に切り替えて、値を入力して下さい。

Φ : Use PSV $1 - (\text{Conc.} * \text{PSV} / 1000)$ Conc: 2.400 PSV: 0.99824
 Use Factor

viii. なお、Sub_2 で使用する計算式がウィンドウの右上に明示されています。

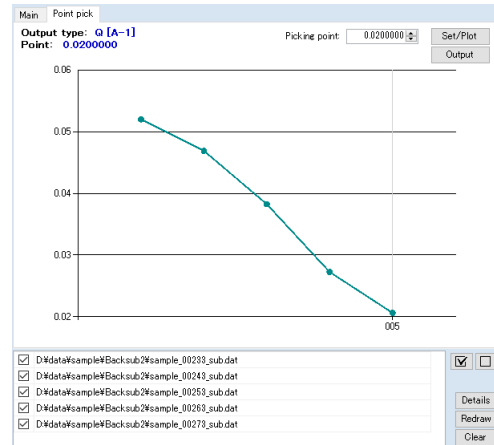
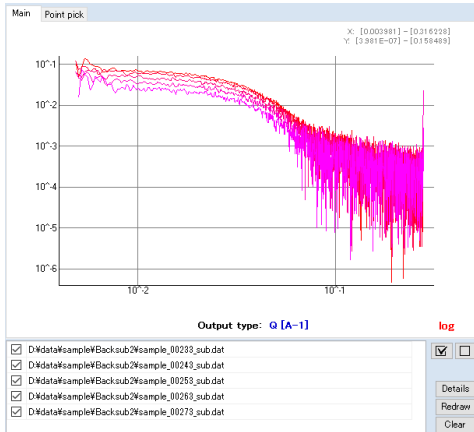
Subtract 2

$$\Delta I = \frac{1}{CF} \left[\left\{ \left(\frac{I_{\text{Samp\&Cell}}}{T_{\text{Samp\&Cell}}} \right) - \left(\frac{I_{\text{Cell}}}{T_{\text{Cell}}} \right) \right\} - \Phi \left\{ \left(\frac{I_{\text{Back\&Cell}}}{T_{\text{Back\&Cell}}} \right) - \left(\frac{I_{\text{Cell}}}{T_{\text{Cell}}} \right) \right\} \right] \quad *T=\text{Transmittance}$$

ix. 全ての準備ができたなら、[Subtract]をクリックします。ファイルが出力されグラフが両対数プロットで表示されます。グラフは、マウスのスクロールで拡大縮小したり、左クリックで拡大したい範囲をドラッグして指定したりすれば拡大します。下のチェック BOX で、チェックを入れたり外したりし、[Redraw]をクリックすれば表示するグラフを選択できます。[Clear]で全消去します。[Details]をクリックすると SAngler ウィンドウ上部にデータのヘッダー情報が示されます。この欄に dat ファイルを Drag&Drop してもグラフを表示できます。

x. グラフウィンドウには 2 つの表示があります。一つは【Main】タブで散乱曲線全体を表示しています。もう一つの【Point pick】タブでは、読み込まれているデータの特定の横軸の値に対する縦軸の値(散乱強度)をプロットすることが可能です。例えば、 $Q[A^{-1}]=0.01$ に対する散乱強度のプロットを表示したい場合は、[Picking point:]に 0.01 と入力し、[Set/Plot]をクリックします。小角付近の散乱強度変化をプロットすることで、放射線損傷による効果の有無を確認することができます。なお、このプロットのデータを出力することも可能です。[Output]をクリックすると、テキストデータとしてデータを保

存できます。



※X線透過率の計算方法(Sub 2, Sub 3 共通)

	測定枚数	
<i>Dark</i>	<i>j</i>	$I_{0_Darkave} = \frac{\sum_{i=1}^j (I_{0_Dark})_j}{j}, I_{1_Darkave} = \frac{\sum_{i=1}^j (I_{1_Dark})_j}{j}$
<i>Air</i>	<i>k</i>	
<i>Cell</i>	<i>l</i>	
<i>Back</i>	<i>m</i>	
<i>Samp</i>	<i>n</i>	

$$T_{Samp\&Cell} = \frac{\left\{ \frac{\sum_{i=1}^n \left[\frac{(I_{1_Samp} - I_{1_Darkave})}{(I_{0_Samp} - I_{0_Darkave})} \right]_n}{n} \right\}}{\left\{ \frac{\sum_{i=1}^k \left[\frac{(I_{1_Air} - I_{1_Darkave})}{(I_{0_Air} - I_{0_Darkave})} \right]_k}{k} \right\}}$$

$$T_{Cell} = \frac{\left\{ \frac{\sum_{i=1}^l \left[\frac{(I_{1_Cell} - I_{1_Darkave})}{(I_{0_Cell} - I_{0_Darkave})} \right]_l}{l} \right\}}{\left\{ \frac{\sum_{i=1}^k \left[\frac{(I_{1_Air} - I_{1_Darkave})}{(I_{0_Air} - I_{0_Darkave})} \right]_k}{k} \right\}}$$

$$T_{Back\&Cell} = \frac{\left\{ \frac{\sum_{i=1}^m \left[\frac{(I_{1_Back} - I_{1_Darkave})}{(I_{0_Back} - I_{0_Darkave})} \right]_m}{m} \right\}}{\left\{ \frac{\sum_{i=1}^k \left[\frac{(I_{1_Air} - I_{1_Darkave})}{(I_{0_Air} - I_{0_Darkave})} \right]_k}{k} \right\}}$$

各チャンネルにはダークカウントが存在するので、ダークの値を引きながら、データ1枚ずつ入射強度と透過強度の比を求めて平均化し、最終的にセル(試料)が何も無い状態(Air)に対する透過率を計算している。なお、セルが無い、つまりX線が裸の試料に当たるような場合は、Air=Cell、もしくはAir=Cell=Backgroundとして計算することも可能。

※Sub 2 での誤差の計算

* Multi=M としている

$$\Delta I = \underbrace{\left[\left(\frac{I_{Samp} \times M_{Samp}}{T_{Samp}} \right) - \left(\frac{I_{Cell} \times M_{Cell}}{T_{Cell}} \right) \right]}_A - \phi \underbrace{\left[\left(\frac{I_{Back} \times M_{Back}}{T_{Back}} \right) - \left(\frac{I_{Cell} \times M_{Cell}}{T_{Cell}} \right) \right]}_B = A - \phi B$$

に対して、A, B の2つの項は、それぞれ Sub_1 の誤差計算と同様に、

$$\sigma_A = \sqrt{\left(\frac{\sigma I_{Samp} \times M_{Samp}}{T_{Samp}} \right)^2 + \left(\frac{\sigma I_{Cell} \times M_{Cell}}{T_{Cell}} \right)^2} \quad \sigma_B = \sqrt{\left(\frac{\sigma I_{Back} \times M_{Back}}{T_{Back}} \right)^2 + \left(\frac{\sigma I_{Cell} \times M_{Cell}}{T_{Cell}} \right)^2}$$

と考えられる。従って、最終的に計算される誤差 σ_m は、

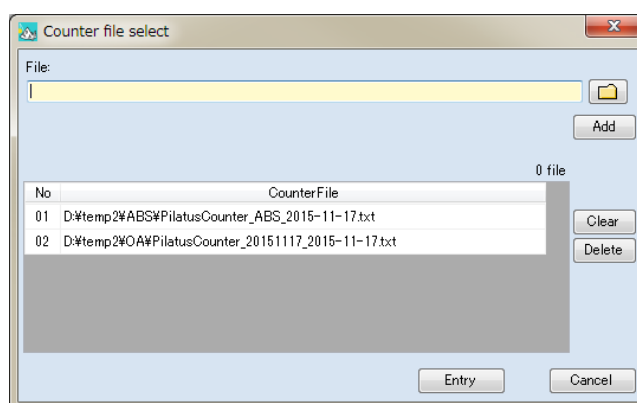
$$\begin{aligned} \Delta \sigma I &= \sqrt{(\sigma_A)^2 + (\phi \sigma_B)^2} \\ &= \sqrt{\left\{ \left[\left(\frac{\sigma I_{Samp} \times M_{Samp}}{T_{Samp}} \right)^2 + \left(\frac{\sigma I_{Cell} \times M_{Cell}}{T_{Cell}} \right)^2 \right]^{1/2} \right\}^2 + \left\{ \phi \times \left[\left(\frac{\sigma I_{Back} \times M_{Back}}{T_{Back}} \right)^2 + \left(\frac{\sigma I_{Cell} \times M_{Cell}}{T_{Cell}} \right)^2 \right]^{1/2} \right\}^2} \\ &= \sqrt{\left(\frac{\sigma I_{Samp} \times M_{Samp}}{T_{Samp}} \right)^2 + \left(\frac{\sigma I_{Cell} \times M_{Cell}}{T_{Cell}} \right)^2 + \phi^2 \times \left[\left(\frac{\sigma I_{Back} \times M_{Back}}{T_{Back}} \right)^2 + \left(\frac{\sigma I_{Cell} \times M_{Cell}}{T_{Cell}} \right)^2 \right]} \\ &= \left[\left(\frac{\sigma I_{Samp} \times M_{Samp}}{T_{Samp}} \right)^2 + \phi^2 \left(\frac{\sigma I_{Back} \times M_{Back}}{T_{Back}} \right)^2 + (1 + \phi^2) \left(\frac{\sigma I_{Cell} \times M_{Cell}}{T_{Cell}} \right)^2 \right]^{1/2} \end{aligned}$$

⑫ Background の差引き 3(Sub_3)

Sub_3 では、空の試料セルの散乱強度を引きながら、空のセル・Background・Sample 測定での X 線透過率を考慮した計算を、多数のファイルに対して行うことができます (Sub_2 で試料濃度の排除体積効果を 1 とした計算になります。)

※ 基本的な設定方法は Sub_2 と同じですが、排除体積効果の項中の設定が無く、また多数の Sample データを一度に読み込める点が異なります。

- i. [Output:]に計算結果を出力するディレクトリを指定します。📁をクリックして選択するか、直接編集します。
- ii. 続いて、透過率の計算のために必要なカウンタファイルを設定するために、カウンタファイルの仕様を指定する「Facility」を選択します (基本的には【Ave】タブでの設定をそのまま引継いでいるので、同じ設定で処理を進める場合は変更する必要はありません)。PF と SPring-8 BL38B1、BL45XU(2018 年 12 月まで)、40B2 のカウンタファイルの形式に対応しています。
- iii. 次に、[CounterFile entry]で、使用するカウンタファイルを設定します (基本的には【Ave】タブでの設定をそのまま引継いでいるので、同じ設定で処理を進める場合は変更する必要はありません)。クリックすると[Counter file select]ダイアログが開きます。📁をクリックしてカウンタファイルを選択し、その後[Add]ボタンを押すと、ダイアログ下側のリスト欄に移ります。これで選択完了です。この欄にファイルを Drag&Drop する事も可能で、その場合は直ぐに選択完了になります。一方で、使用するカウンタファイルが複数存在する場合は、複数個のカウンタファイルを指定することができます。例えば、Dark、Air、Cell に対応したカウンタファイルと、Background、Sample に対応するカウンタファイルが異なる場合は、そのファイルをそれぞれ読み込んでおくことになります。カウンタファイルは読み込んだ順番に番号が設定されますので、(ix)の設定ではこの番号をそれぞれ指定します。設定が完了したら[Entry]をクリックして閉じます。



- iv. [I0 cnt:]に試料前の入射 X 線強度のチャンネル、[I1 cnt:]に試料後の透過 X 線強度のチャンネルを指定します。PF では、入射 X 線強度は C2、透過 X 線強度は C4(ビームストッパーに仕込まれたフォトダイオード)になっているのが一般的です。SPring-8 の BL38B1 では、C2 が試料前のマイクロ

イオンチャンバ、C3 が試料後のフォトダイオード(ビームストッパー埋め込み)となっています。BL45XU(2018年12月まで)では、MIC up が試料前、MIC down が試料後、40B2 では、C3 が試料前、C4 が試料後となっています(念のため担当者に確認して下さい)。

Facility: PF CounterFile entry 2 files I0 cnt: C2 I1 cnt: C4

v. 次に、処理に使用する Dark、Air、Cell、Background、Sample の計測データと、透過率の計算に必要なカウンタファイルを設定しますが、Ver. 2.0.7 以前と 2.1.0 以降で処理の手順が異なります。

● Ver 2.1.0 以降に処理されたファイルを使用する場合

A. 表の部分では、Dark のみ【Ave】タブで設定した内容が反映されています。Air 以下は使用しません。その下の Air、Cell、Background、Sample のデータを指定する欄に移ります。事前に、「⑬ ABS_W」や「⑭ ABS_GC」で説明している水や Glassy Carbon を使用した「散乱強度(counts)の絶対散乱強度(cm^{-1})化」を実行している場合は、[Air file]、[Cell file]にその処理中に指定したファイルが入力されています。実施していない場合や使用するファイルを変更する場合は、空気散乱のデータ(Air file)と試料セルのデータ(試料無し of セルのみのデータ、Cell file)を指定します(ともに dat ファイル)。**[Browse]**をクリックしてファイルを指定するか、dat ファイルを空白 Box に Drag&Drop します。dat ファイルなので、事前に円周平均して 1 次元化しておく必要があります。

Type	File	Num	CounterFile	I0	I1	I1/I0	Transmittance
Dark	Entry	5	02	1257	1057	---	---
Air	Entry	5		---	---	---	---
Cell	Entry	5		---	---	---	---
Back	Entry	15		---	---	---	---

Clear

Air file		Conc.	Multi.	
<input checked="" type="checkbox"/>	D:\data\ABS#air_ave.dat	---	1.000	Browse Clear
Cell file		Conc.	Multi.	
<input checked="" type="checkbox"/>	D:\data\ABS#cell5_ave.dat	---	1.000	Browse Clear
Background file		Conc.	Multi.	
				Browse Clear

B. 使用する Background のファイル(dat ファイル)を指定します。**[Browse]**をクリックしてファイル指定するか、dat ファイルを空白 Box に Drag&Drop します。事前に円周平均して 1 次元化した dat ファイルを一つ指定します。**[Multi.]**欄に値を入力すると、散乱強度にその値を掛けることができます。通常は 1.000 となっています。

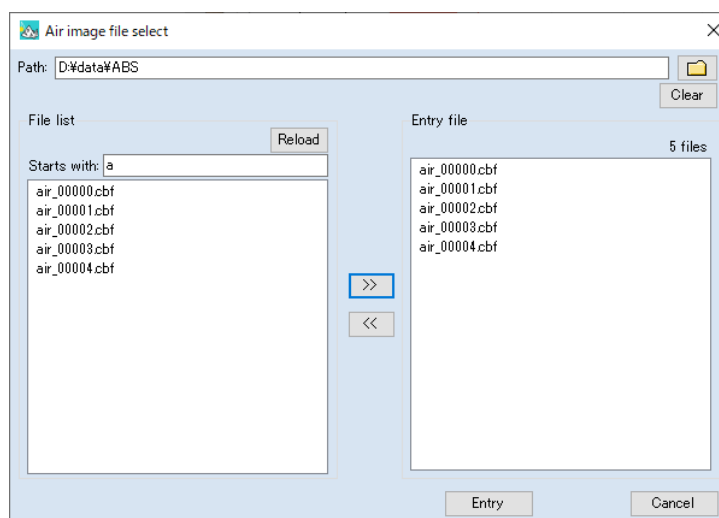
Type	File	Num	CounterFile	I0	I1	I1/I0	Transmittance
Dark	Entry	5	02	1257	1057	---	---
Air	Entry	5		---	---	---	---
Cell	Entry	5		---	---	---	---
Back	Entry	15		---	---	---	---

	Air file	Conc.	Multi.	Browse
<input checked="" type="checkbox"/>	D:\data\ABS\air_ave.dat	---	1.000	Clear
	Cell file	Conc.	Multi.	Browse
<input checked="" type="checkbox"/>	D:\data\ABS\cell5_ave.dat	---	1.000	Clear
	Background file	Conc.	Multi.	Browse
<input checked="" type="checkbox"/>	D:\data\buffer\CirAve\buffer_ave.dat	---	1.000	Clear

Individual AllAverage

- C. 4つのファイルが適切に読み込まれると、上の表で Air から Back までの部分は無効を示す灰色の表示になります。また、この欄では、これらの dat ファイルが 1 枚の画像データを個別処理したファイルなのか (Individual: 黄色)、複数の画像データを平均化したファイルなのか (All Average: 緑色)なのかを判別しています。
- D. vi に移ります。
- Ver 2.0.7 以前に円周平均処理したファイルを使用する場合

- A. 透過率の計算を行なうために、次の表に Dark、Air、Cell、Background を計測したそれぞれのデータを指定してきます。Dark は、【Ave】タブで設定した内容になっていますが、変更する場合は、以下と同様に編修します。各項目で [Entry] をクリックすると、イメージデータのファイルを選択するダイアログが開きます。[Path:] にデータのあるディレクトリを指定します。📁 を押すか、直接編集 (コピーペーストも可) します。Reload をクリックすると、ディレクトリ内のイメージデータが一覧で表示されますので、該当するファイルを複数枚同時に選択します (1 枚でも可)。OS の機能が使えますので、例えば [ctrl] キーを押しながら複数枚クリックして選択も出来ますし、単にマウスでクリックしながらドラッグすれば複数枚選択できます。[Starts with:] はフィルターの機能で、ファイル名の頭から他のファイルを排除できる文字列を入力すると、特定のデータセットだけを表示させる事ができます。その状態で [ctrl + A] を押せば全選択できます。>> をクリックするとファイルが右側に移り確定します。完了したら [Entry] をクリックしてダイアログを閉じます。この操作をそれぞれ繰り返していきます。



- B. イメージデータの選択が完了したら、[CounterFile]の欄で、(iii)で設定したカウンタファイルの中から、それぞれ何番のファイルを使用するのか選択します。[CounterFile entry]のボタンにマウスカーソルを合わせると、登録されているカウンタファイルがポップアップで表示されます。この欄は設定前では赤色に表示されていますが、番号を選択すると白色に戻ります。各項目で複数のイメージデータを設定していれば、カウンタの値も平均値が示されますが、Darkとその他では計算内容が異なります。Darkに関しては、単純に[I0]と[I1]のダークカウンタの平均値が示されます。一方で、Air~Sample に関しては、[I1/I0]の平均値のみ示されます。式の詳細は、この項目(⑫ Background の差引き 3(Sub_3))の最後の項で確認して下さい。[Clear]ボタンをクリックすると、この表の全ての設定をクリアできます。

Type	File	Num	CounterFile	I0	I1	I1/I0	Transmittance
Dark	Entry	5 02	▼	1257	1057	---	---
Air	Entry	5 02	▼	---	---	---	---
Cell	Entry	5 02	▼	---	---	---	---
Back	Entry	15 03	▼	---	---	---	---

Clear

File: D:\data#buffer#buffer_00000.cbf
D:\data#buffer#buffer_00001.cbf
D:\data#buffer#buffer_00002.cbf
D:\data#buffer#buffer_00003.cbf
D:\data#buffer#buffer_00004.cbf

15 files

- C. 使用する Air、Cell、Background のファイル(dat ファイル)を指定します。[Browse]をクリックしてファイルを指定するか、dat ファイルを空白 Box に Drag&Drop します。いずれのファイルも、事前に円周平均して 1 次元化した dat ファイルを一つ指定します。複数のファイルを平均化して得られた dat ファイルの場合は、B の表において、その平均化に使用した複数のデータを指定すれば、透過率はその平均値が使用されます。[Multi.]欄に値を入力すると、それぞれの散乱強度にその値を掛けることができます。通常は 1.000 となっています。Ver. 2.0.7 以前に処理されたファイルを使用する場合は、Individual、All Average の判定は行われません。
- D. vi に移ります。
- vi. 続いて、Sample のファイルを読み込みます。[Sample file]欄に、何個でも一度に入力できます(基本的に制限はありません)。[Browse]をクリックしてファイルを指定しますが、複数個指定する場合は、ctrl キーや shift キーを押しながらクリックして選択して下さい。この欄にファイルを Drag&Drop することも可能です。一度に複数のファイルを選択して Drop して下さい。また、iii の [CounterFile entry]で設定したカウンタファイルの内、Sample の値を記録しているファイルの番号を[Counter file]で設定します。
- vii. [Multi.]欄に値を入力すると、散乱強度にその値を掛けることができます。通常は 1.000 となっています。また、Sample の方では、[Conc.(試料の濃度)]を入力する事もできます。濃度の値は出力ファ

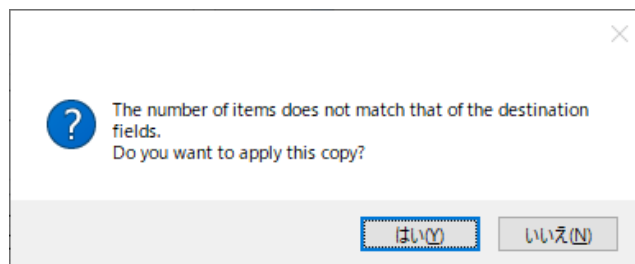
イルのヘッダーに記録され、後の解析時に自動的に読み込まれます。[Multi.]や[Conc.]の値は 1 行ずつ設定することもできますが、複数のデータを読み込んでいる場合は、Excel 等から表データとしてコピーして、この欄にペーストすることもできます。

The diagram illustrates the data import process. On the left, the software's data entry window shows a table with columns: Sample file, Conc., Multi., I1/I0, and Transmittance. The 'Conc.' and 'Multi.' columns contain values of 1.000 and 1.000 respectively for three sample files. On the right, an Excel spreadsheet shows a table with columns 'conc' and 'multi'. The 'conc' column contains values from 10 down to 1, and the 'multi' column contains values of 0.1. A blue arrow indicates the data being copied from the Excel spreadsheet to the software's table. A black arrow indicates the software's table being updated with the new data.

Sample file	Conc.	Multi.	I1/I0	Transmittance
D:\data\sample\Cir Ave\...	1.000	1.000	---	---
D:\data\sample\Cir Ave\...	1.000	1.000	---	---
D:\data\sample\Cir Ave\...	1.000	1.000	---	---

Sample file	Conc.	Multi.	I1/I0	Transmittance
D:\data\sample\Cir Ave\...	10.000	0.100	---	---
D:\data\sample\Cir Ave\...	9.000	0.100	---	---
D:\data\sample\Cir Ave\...	8.000	0.100	---	---

(例) 10 個のファイルを読み込んで、Conc や Multi を入力したい場合、Excel で Conc や Multi が 1 列に並んでいるデータを用意し、表データとして SAngler の Conc や Multi 列にコピーペーストできます。ただし、1 列ずつしかコピーできません。コピーするデータの個数が一覧で表示されているデータ数より多い場合は確認メッセージが表示されます。

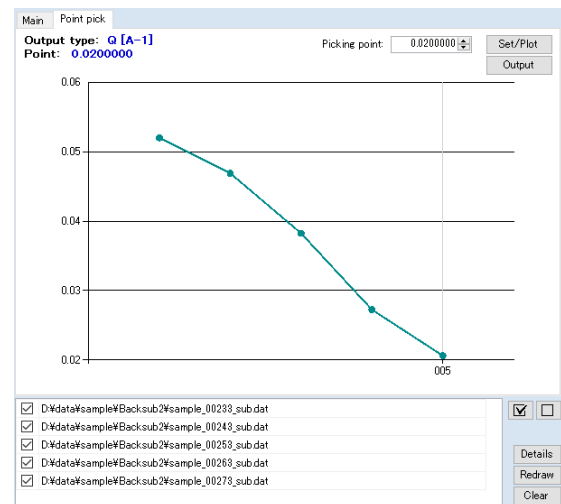
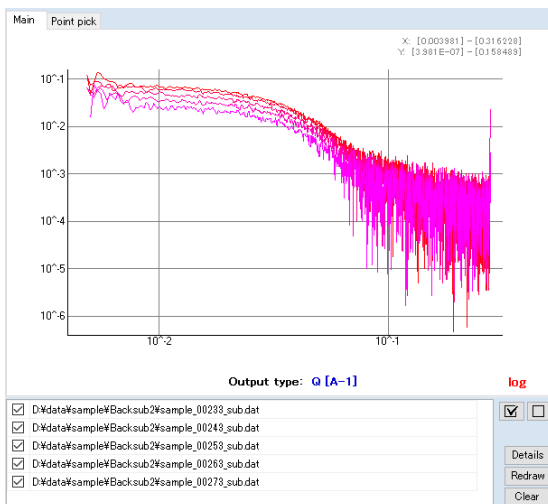


- viii. [Conversion Factor (絶対散乱強度へ規格化するための変換値)]に関しては、⑬ABS_W と⑭ABS_GC で説明しています。先に実行しておく、ここに値が自動で読み込まれているはず。読み込まれていない場合は、値を確認して手動で入力するか、設定不要であればそのまま 1.0000000 とします。
- ix. Sub_3 で使用する計算式がウィンドウの右上に明示されています。

Subtract_3

$$\Delta I = \frac{1}{CF} \left[\left\{ \left(\frac{I_{Samp\&Cell} * Multi}{T_{Samp\&Cell}} \right) - \left(\frac{I_{Cell} * Multi}{T_{Cell}} \right) \right\} - \left\{ \left(\frac{I_{Back\&Cell} * Multi}{T_{Back\&Cell}} \right) - \left(\frac{I_{Cell} * Multi}{T_{Cell}} \right) \right\} \right] \quad *T=\text{Transmittance}$$

- x. 全ての準備ができたなら、[Subtract]をクリックします。ファイルが出力されグラフが両対数プロットで表示されます。グラフは、マウスのスクロールで拡大縮小したり、左クリックで拡大したい範囲をドラッグして指定したりすれば拡大します。下のチェック BOX で、チェックを入れたり外したりし、[Redraw]をクリックすれば表示するグラフを選択できます。[Clear]で全消去します。[Details]をクリックすると SAngler ウィンドウ上部にデータのヘッダー情報が示されます。この欄に dat ファイルを Drag&Drop してもグラフを表示できます。
- xi. グラフウィンドウには2つの表示があります。一つは【Main】タブで散乱曲線全体を表示しています。もう一つの【Point pick】タブでは、読み込まれているデータの特定の横軸の値に対する縦軸の値（散乱強度）をプロットすることが可能です。例えば、 $Q[\text{\AA}^{-1}] = 0.01$ に対する散乱強度のプロットを表示したい場合は、[Picking point:]に 0.01 と入力し、[Set/Plot]をクリックします。小角付近の散乱強度変化をプロットすることで、放射線損傷による効果の有無を確認することができます。なお、このプロットのデータを出力することも可能です。[Output]をクリックすると、テキストデータとしてデータを保存できます。



※X線透過率の計算方法(Sub 2, Sub 3 共通)

<i>Dark</i>	<i>j</i>	$I_{0_Darkave} = \frac{\sum_{i=1}^j (I_{0_Dark})_j}{j}, \quad I_{1_Darkave} = \frac{\sum_{i=1}^j (I_{1_Dark})_j}{j}$
<i>Air</i>	<i>k</i>	
<i>Cell</i>	<i>l</i>	$T_{Samp\&Cell} = \frac{\left\{ \frac{\sum_{i=1}^n \left[\frac{(I_{1_Samp} - I_{1_Darkave})}{(I_{0_Samp} - I_{0_Darkave})} \right]_n}{n} \right\}}{\left\{ \frac{\sum_{i=1}^k \left[\frac{(I_{1_Air} - I_{1_Darkave})}{(I_{0_Air} - I_{0_Darkave})} \right]_k}{k} \right\}}$
<i>Back</i>	<i>m</i>	
<i>Samp</i>	<i>n</i>	
		$T_{Cell} = \frac{\left\{ \frac{\sum_{i=1}^l \left[\frac{(I_{1_Cell} - I_{1_Darkave})}{(I_{0_Cell} - I_{0_Darkave})} \right]_l}{l} \right\}}{\left\{ \frac{\sum_{i=1}^k \left[\frac{(I_{1_Air} - I_{1_Darkave})}{(I_{0_Air} - I_{0_Darkave})} \right]_k}{k} \right\}}$
		$T_{Back\&Cell} = \frac{\left\{ \frac{\sum_{i=1}^m \left[\frac{(I_{1_Back} - I_{1_Darkave})}{(I_{0_Back} - I_{0_Darkave})} \right]_m}{m} \right\}}{\left\{ \frac{\sum_{i=1}^k \left[\frac{(I_{1_Air} - I_{1_Darkave})}{(I_{0_Air} - I_{0_Darkave})} \right]_k}{k} \right\}}$

各チャンネルにはダークカウントが存在するので、ダークの値を引きながら、データ1枚ずつ入射強度と透過強度の比を求めて平均化し、最終的にセル(試料)が何も無い状態(Air)に対する透過率を計算している。なお、セルが無い、つまりX線が裸の試料に当たるような場合は、Air=Cell、もしくは Air=Cell=Backgroundとして計算することも可能。

※Sub_3での誤差の計算(Sub_2でΦ=1と考える)

* Multi=Mとしている。

$$\Delta I = \underbrace{\left[\left(\frac{I_{Samp} \times M_{Samp}}{T_{Samp}} \right) - \left(\frac{I_{Cell} \times M_{Cell}}{T_{Cell}} \right) \right]}_A - \underbrace{\left[\left(\frac{I_{Back} \times M_{Back}}{T_{Back}} \right) - \left(\frac{I_{Cell} \times M_{Cell}}{T_{Cell}} \right) \right]}_B = A - B$$

に対して、A, Bの2つの項は、それぞれSub_1の誤差計算と同様に、


$$\sigma_A = \sqrt{\left(\frac{\sigma I_{Samp} \times M_{Samp}}{T_{Samp}} \right)^2 + \left(\frac{\sigma I_{Cell} \times M_{Cell}}{T_{Cell}} \right)^2} \quad \sigma_B = \sqrt{\left(\frac{\sigma I_{Back} \times M_{Back}}{T_{Back}} \right)^2 + \left(\frac{\sigma I_{Cell} \times M_{Cell}}{T_{Cell}} \right)^2}$$

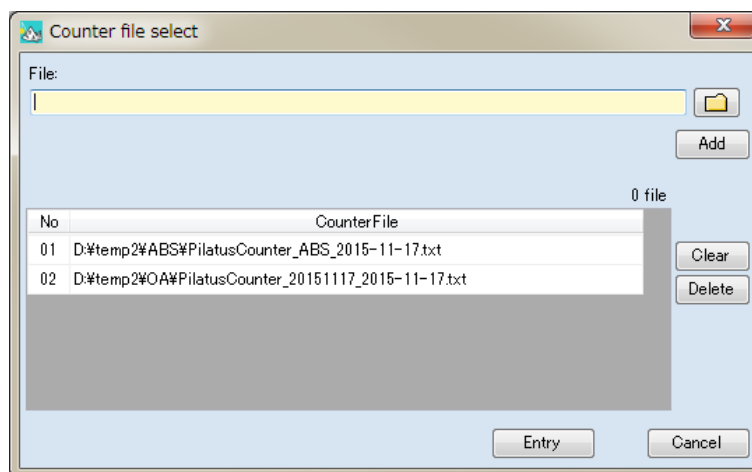
と考えられる。従って、最終的に計算される誤差σ_mは、

$$\begin{aligned} \sigma_m &= \sqrt{(\sigma_A)^2 + (\sigma_B)^2} \\ &= \sqrt{\left\{ \left[\left(\frac{\sigma I_{Samp} \times M_{Samp}}{T_{Samp}} \right)^2 + \left(\frac{\sigma I_{Cell} \times M_{Cell}}{T_{Cell}} \right)^2 \right]^{1/2} \right\}^2 + \left\{ \left[\left(\frac{\sigma I_{Back} \times M_{Back}}{T_{Back}} \right)^2 + \left(\frac{\sigma I_{Cell} \times M_{Cell}}{T_{Cell}} \right)^2 \right]^{1/2} \right\}^2} \\ &= \sqrt{\left(\frac{\sigma I_{Samp} \times M_{Samp}}{T_{Samp}} \right)^2 + \left(\frac{\sigma I_{Cell} \times M_{Cell}}{T_{Cell}} \right)^2 + \left(\frac{\sigma I_{Back} \times M_{Back}}{T_{Back}} \right)^2 + \left(\frac{\sigma I_{Cell} \times M_{Cell}}{T_{Cell}} \right)^2} \\ &= \left[\left(\frac{\sigma I_{Samp} \times M_{Samp}}{T_{Samp}} \right)^2 + \left(\frac{\sigma I_{Back} \times M_{Back}}{T_{Back}} \right)^2 + 2 \left(\frac{\sigma I_{Cell} \times M_{Cell}}{T_{Cell}} \right)^2 \right]^{1/2} \end{aligned}$$

⑬ 水を使用して散乱強度の単位を絶対散乱強度へ変換する(ABS_W)

【ABS_W】タブでは、水の散乱強度(counts)を用いて試料の散乱強度の単位を絶対散乱強度(cm^{-1})へ変換するために必要な変換係数 Conversion Factor(CF)を求めるための解析を行なえます。

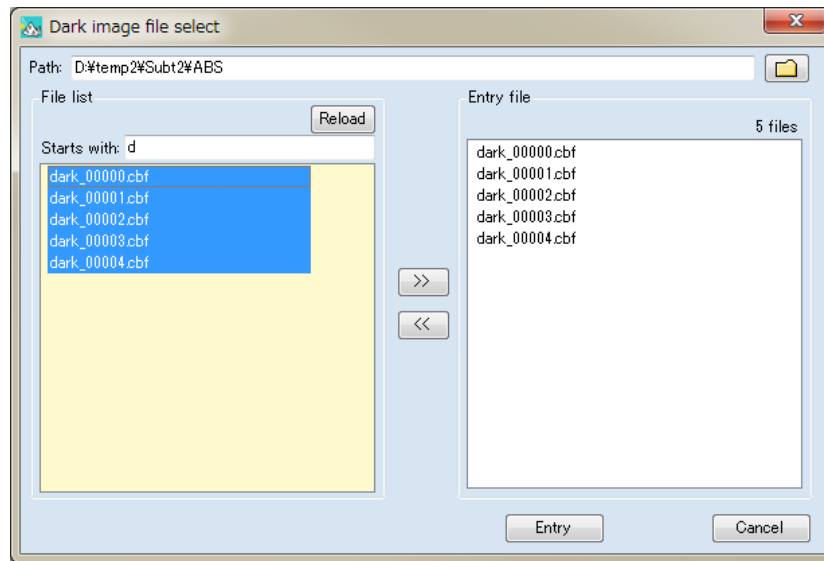
- i. このタブでの計算の前に、空のセル(Cell)や水(Water)を計測した散乱強度データを 1 次元化します。複数枚計測した結果を平均化すると良いでしょう。このファイルを(viii)で指定します。
- ii. 透過率の計算のために、Dark、Air、Cell、Water をそれぞれ計測した際のカウント値等を設定していきます。まず、Facility を選択します。PF と SPring-8 BL45XU、40B2 のカウンタファイルの形式に対応しています。
- iii. 次に、[CounterFile entry]で、使用するカウンタファイルを設定します。クリックすると[Counter file select]ダイアログが開きます。をクリックしてカウンタファイルを選択し、その後[Add]ボタンを押すと、ダイアログ下側のリスト欄に移ります。これで選択完了です。この欄にファイルを Drag&Drop する事も可能で、その場合は直ぐに選択完了になります。一方で、使用するカウンタファイルが複数存在する場合は、複数個のカウンタファイルを指定することができます。例えば、Dark・Air・Cell に対応したカウンタファイルと、Water に対応するカウンタファイルが異なる場合は、そのファイルをそれぞれ読み込んでおくことになります。カウンタファイルは読み込んだ順番に番号が設定されますので、(vi)の設定ではこの番号をそれぞれ指定します。設定が完了したら[Entry]をクリックして閉じます。



- iv. [I0 cnt:]に試料前の入射 X 線強度のチャンネル、[I1 cnt:]に試料後の透過 X 線強度のチャンネルを指定します。PF では、入射 X 線強度は C2、透過 X 線強度は C4(ビームストッパーに仕込まれたフォトダイオード)になっているのが一般的です。

Facility: PF CounterFile entry 2 files I0 cnt: C2 I1 cnt: C4

- v. 次の表に、Dark、Air、Cell、Water を計測したそれぞれのデータを指定します。各項目で[Entry]をクリックすると、イメージデータのファイルを選択するダイアログが開きます。[Path:]にデータのあるディレクトリを指定します。📁を押すか、直接編集(コピーペーストも可)します。Reloadをクリックすると、ディレクトリ内のイメージデータが一覧で表示されますので、該当するファイルを複数枚同時に選択します(1枚でも可)。OSの機能が使えますので、例えば[ctrl]キーを押しながら複数枚クリックして選択も出来ますし、単にマウスでクリックしながらドラッグすれば複数枚選択できます。[Starts with:]はフィルターの機能で、ファイル名の頭から他のファイルを排除できる文字列を入力すると、特定のデータセットだけを表示させる事ができます。その状態で[ctrl + A]を押せば全選択できます。>>をクリックするとファイルが右側に移り確定します。完了したら[Entry]をクリックしてダイアログを閉じます。この操作をそれぞれ繰り返していきます。



イメージデータの選択が完了したら、[CounterFile]の欄で、(ii)で設定したカウンタファイルの中から、それぞれ何番のファイルを使用するのか選択します。[CounterFile entry]のボタンにマウスカーソルを合わせると、登録されているカウンタファイルがポップアップで表示されます。この欄は設定前では赤色に表示されていますが、番号を選択すると白色に戻ります。最終計算後、各項目で複数のイメージデータを設定していれば、ここにはカウンタの値の平均値が表示されますが、Dark とその他では計算内容が異なります。Dark に関しては、単純に[I0]と[I1]のダークカウントの平均値が表示されます。一方で、Air~Water に関しては、[I1/I0]の平均値のみ示されます。透過率の計算方法は基本的に「⑪ Background の差引き 2(Sub_2)」と同様ですので、式の詳細は「⑪ Background の差引き 2(Sub_2)」の最後を参照して下さい。

Type	File	Num	CounterFile	I0	I1	I1/I0	Transmittance
Dark	Entry	5 01	▼	1275	3539	---	---
Air	Entry	5 01	▼	---	---	1.161	1.00000
Cell	Entry	5 01	▼	---	---	1.028	0.88497
Water	Entry	5 01	▼	---	---	0.597	0.51361

File: cell_00000.cbf
cell_00001.cbf
cell_00002.cbf
cell_00003.cbf
cell_00004.cbf

5 files

Clear
Delete

- vi. 水の散乱強度を求めるための計算式が[ABS Calibration]に示されています。

ABS Calibration

$$I(\text{export}) = (I_{\text{water}} / T_{\text{water}}) - (I_{\text{cell}} / T_{\text{cell}}) \quad * T = \text{Transmittance}$$

- vii. 事前に 1 次元化した Cell と Water のデータを[Cell file [dat:].], [Water file [dat:].]で指定します。📁
をクリックしてファイルをそれぞれ指定します。

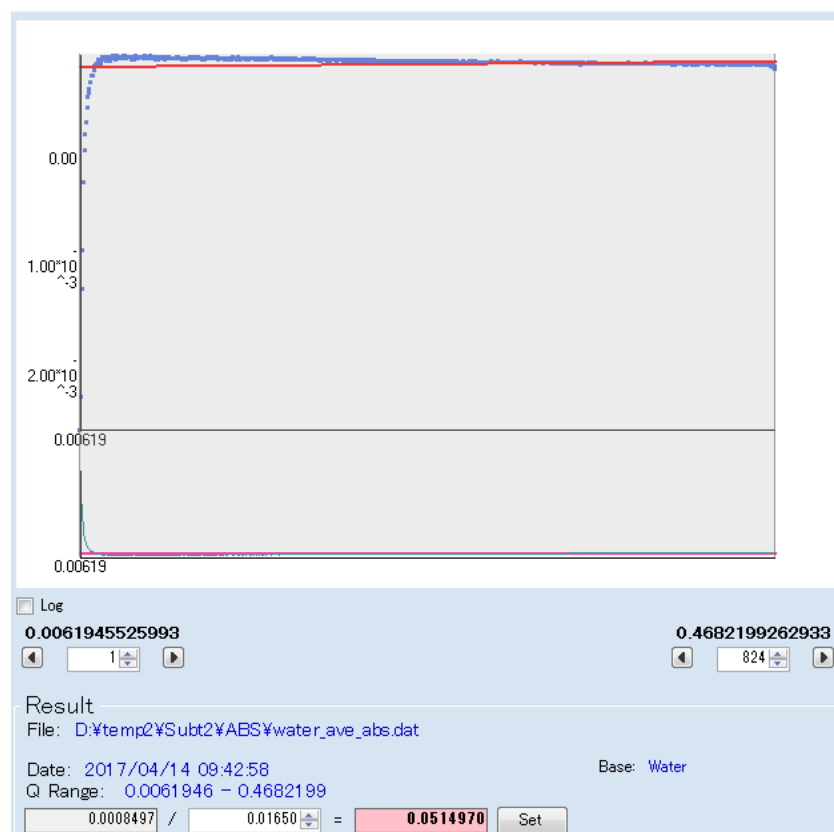
Cell file[dat]:
D:\temp2\Subt2\ABS\cell_ave.dat 📁

Water file[dat]:
D:\temp2\Subt2\ABS\water_ave.dat 📁

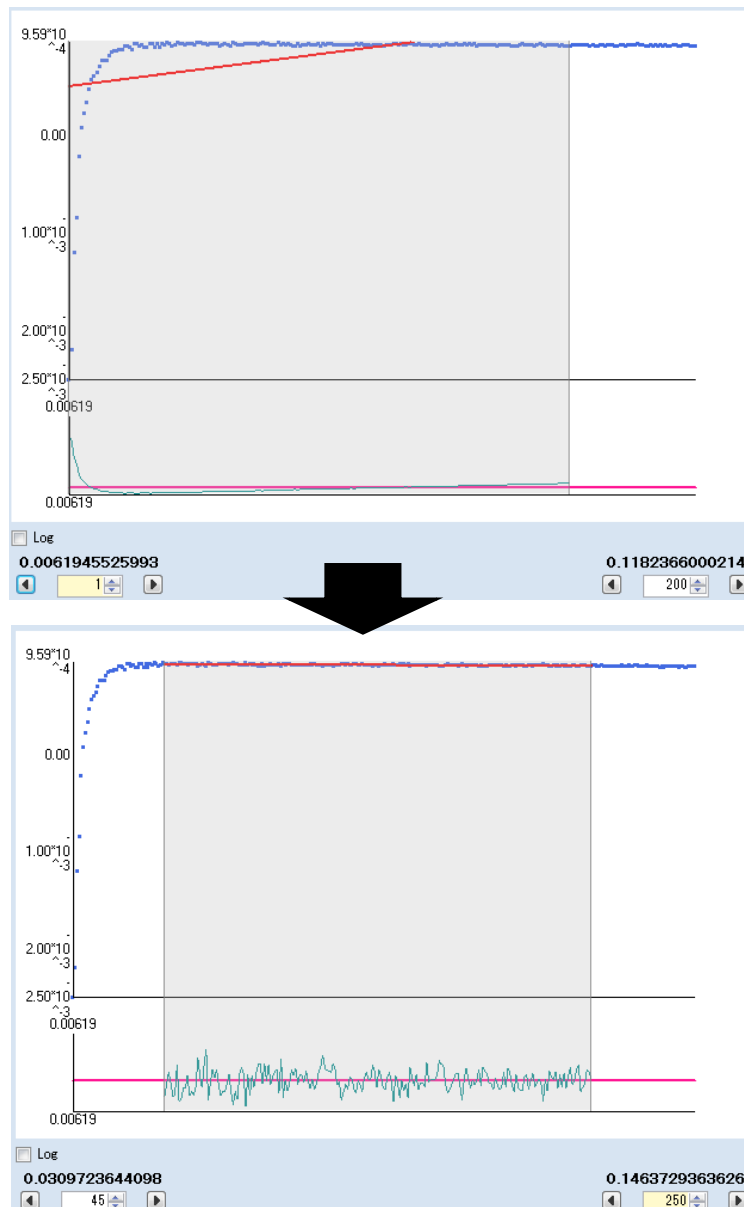
Output path:
D:\temp2\Subt2\ABS\

Run

- viii. 全ての準備ができたなら、[Run]をクリックします。ファイルが出力されウィンドウ右側に青色の点でプロットされます。ファイルは Water のデータを読み込んだのと同じディレクトリ[Output path:]に出力され、読み込んだ dat ファイル名に「_abs」が追加された名前になっています(上記の例であれば、「water_ave_abs.dat」)。グラフの横軸は Averaging で指定した単位系、縦軸は散乱強度です。このデータの小角領域を直線近似しますが、その近似直線は赤線で示されています。下側のプロットは、近似直線からの差分を表しています。この差分のプロットを見ながらマニュアルで直線近似を行います。

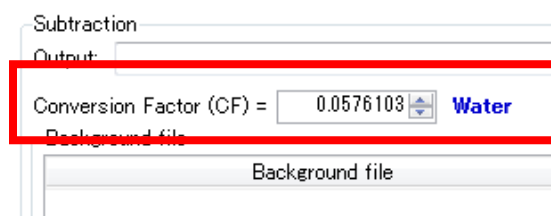
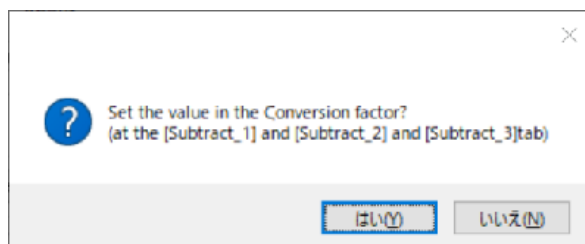
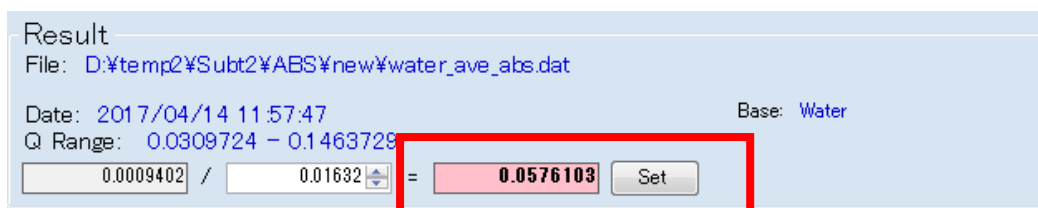


- ix. グラフには最初全領域が表示されています。グラフの右下、左下に直線近似に使用している実際の横軸の値とデータ範囲が表示されていますので、← →キーを操作して直線近似範囲を変更します（グラフの表示範囲も自動的に連動します）。直線近似では、高角側は $Q(\text{\AA}^{-1})$ の単位系で 0.1～0.2 付近までを使用します。逆に低角側は上図のように落ち込んでいる等の変化が見られますので、この領域を差分のプロットを見ながら除外できるように合せていきます。縦軸を Log で表示することもできます。



- x. 上図の様に差分のプロットが基準となるゼロの線(ピンク色)に対して上下均等になれば、直線近似は完了です。この近似直線の Y 切片の値が実測した水の散乱強度 (counts) になります。20°C (293K)における水の絶対散乱強度は 0.01632 cm^{-1} となります(本項の最後に参考文献を示します)。従って、20°Cで計測した場合の変換係数 CF は、実測した水の散乱強度を 0.01632 で割ることで求める事ができます。
- xi. [Result]欄では、自動的に計算された結果が表示されています。Y 切片の値は直線近似から求めた値が自動的に読み込まれ、デフォルトで 0.01632 cm^{-1} の値が示されています(変更可能です)。この値を CF として使用する場合は、[Set]をクリックします。確認のダイアログが表示されますので[は

い]を押せば、この値が Water から求められた値と示しつつ Subtract_1、Subtract_2、Subtract_3 の CF 欄に値がコピーされます。これで完了です。



xii. なお、試料濃度が正確であれば絶対散乱強度に対して分子量は以下の式で表すことができます。

$$MW(\text{kDa}) = 1500 \times I(0) [\text{cm}^{-1}] / c [\text{mg/ml}]$$

(実例) 濃度 9.4 mg/ml で分子量 36kDa のタンパク質を計測し、SAngher で水から求めた絶対散乱強度への CF 値を使って解析した。

$$\text{ギニエ解析の結果: } R_g = 33.3 [\text{\AA}], I(0)/c = 0.02267 [\text{cm}^{-1} \cdot \text{ml/mg}]$$

$$MW(\text{kDa}) = 1500 \times 0.02267 = 34 \text{ kDa}$$

xiii. 参考文献を以下に示します。

Orthaber, D., Bergmann, A. and Glatter, O. SAXS experiments on absolute scale with Kratky systems using water as a secondary standard. *J. Appl. Cryst.* **33**, 218–225 (2000).

なお、以下の資料も参考になります。

Fan, L., Degen, M., Bendle, S., Grupido, N. and Ilavsky, J. The Absolute Calibration of a Small-Angle Scattering Instrument with a Laboratory X-ray Source. *J. Phys.: Conf. Ser.* **247**, 012005 (2010).

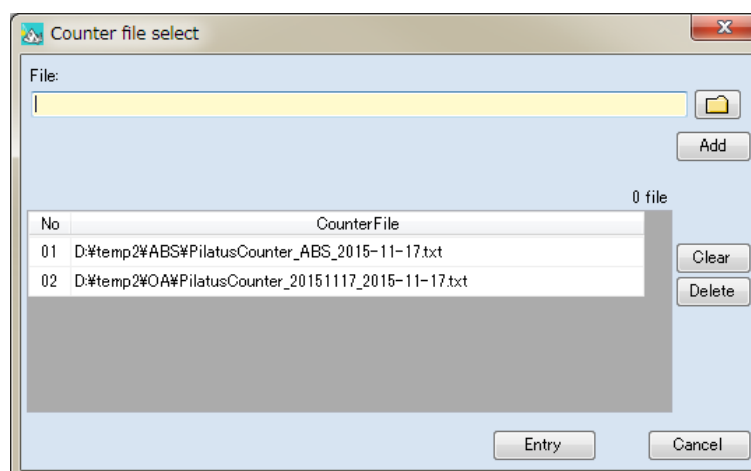
⑭ Glassy Carbon を使用して散乱強度の単位を絶対散乱強度へ変換する(ABS_GC)

【ABS_GC】タブでは、Glassy Carbon の散乱強度 (counts) を用いて、試料の散乱強度の単位を絶対散乱強度 (cm^{-1}) へ変換するために必要な変換係数 Conversion Factor (CF) を求めることができます。なお、NIST から絶対強度変換用の校正試料として販売されている SRM3600 を使用します。

https://www-s.nist.gov/srmors/view_detail.cfm?srm=3600

以下の手順は、上記 Web サイトの「Certificate」に記されている手順に従っています。基準データは、「Data and Information Files」からダウンロードできますが、SAnGLer ではこの基準データを内包しています。

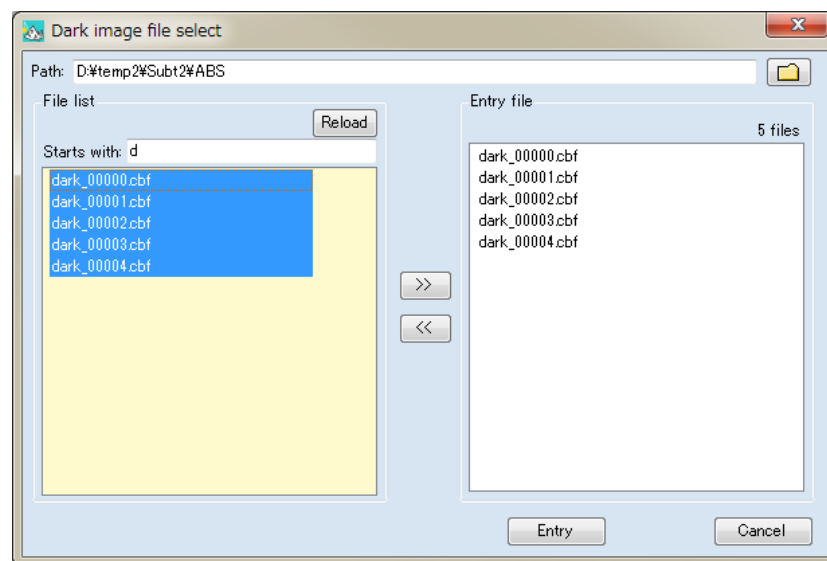
- i. このタブでの計算の前に、空気 (Air) や Glassy Carbon (GC) を計測した散乱強度データを 1 次元化します。複数枚計測した結果を平均化すると良いでしょう。このファイルを (viii) で指定します。
- ii. 透過率の計算のために、Dark、Air、GC をそれぞれ計測した際のカウント値等を設定していきます。まず、Facility を選択します。PF と SPring-8 BL45XU、40B2 のカウンタファイルの形式に対応しています。
- iii. 次に、[CounterFile entry] で、使用するカウンタファイルを設定します。クリックすると [Counter file select] ダイアログが開きます。📁 をクリックしてカウンタファイルを選択し、その後 [Add] ボタンを押すと、ダイアログ下側のリスト欄に移ります。これで選択完了です。この欄にファイルを Drag&Drop する事も可能で、その場合は直ぐに選択完了になります。一方で、使用するカウンタファイルが複数存在する場合は、複数個のカウンタファイルを指定することができます。例えば、Dark に対応したカウンタファイルと、Air・GC に対応するカウンタファイルが異なる場合は、そのファイルをそれぞれ読み込んでおくこととなります。カウンタファイルは読み込んだ順番に番号が設定されますので、(vi) の設定ではこの番号をそれぞれ指定します。設定が完了したら [Entry] をクリックして閉じます。



- iv. [I0 cnt:]に試料前の入射 X 線強度のチャンネル、[I1 cnt:]に試料後の透過 X 線強度のチャンネルを指定します。PF では、入射 X 線強度は C2、透過 X 線強度は C4(ビームストッパーに仕込まれたフォトダイオード)になっているのが一般的です。

Facility: PF CounterFile entry 2 files I0 cnt: C2 I1 cnt: C4

- v. 次の表に、Dark、Air、GC を計測したそれぞれのデータを指定します。各項目で[Entry]をクリックすると、イメージデータのファイルを選択するダイアログが開きます。[Path:]にデータのあるディレクトリを指定します。📁を押すか、直接編集(コピーペーストも可)します。Reload をクリックすると、ディレクトリ内のイメージデータが一覧で表示されますので、該当するファイルを複数枚同時に選択します(1枚でも可)。OS の機能が使えますので、例えば[ctrl]キーを押しながら複数枚クリックして選択も出来ますし、単にマウスでクリックしながらドラッグすれば複数枚選択できます。[Starts with:]はフィルターの機能で、ファイル名の頭から他のファイルを排除できる文字列を入力すると、特定のデータセットだけを表示させる事ができます。その状態で[ctrl + A]を押せば全選択できます。>> をクリックするとファイルが右側に移り確定します。完了したら[Entry]をクリックしてダイアログを閉じます。この操作をそれぞれ繰り返していきます。



- vi. イメージデータの選択が完了したら、[CounterFile]の欄で、(ii)で設定したカウンタファイルの中から、それぞれ何番のファイルを使用するのか選択します。[CounterFile entry]のボタンにマウスカーソルを合わせると、登録されているカウンタファイルがポップアップで表示されます。この欄は設定前では赤色に表示されていますが、番号を選択すると白色に戻ります。最終計算後、各項目で複数のイメージデータを設定していれば、ここにはカウンタの値の平均値が示されますが、Dark とその他では計算内容が異なります。Darkに関しては、単純に[I0]と[I1]のダークカウントの平均値が示されます。

一方で、AirとGCに関しては、[I1/I0]の平均値のみ示されます。透過率の計算方法は基本的に⑧と同様ですので、式の詳細は⑧の最後を参照して下さい。

Type	File	Num	CounterFile	I0	I1	I1/I0	Transmittance
Dark	<input type="button" value="Entry"/>	5	01	---	---	---	---
Air	<input type="button" value="Entry"/>	5	01	---	---	---	---
GC	<input type="button" value="Entry"/>	1	01	---	---	---	---

File: 5 files


dark_00000.cbf
dark_00001.cbf
dark_00002.cbf
dark_00003.cbf
dark_00004.cbf

- vii. Glassy Carbon の散乱強度を求めるための計算式が[ABS Calibration]に示されています。最終的に、SRM3600 の Web サイトで提供されている基準データに対して実験で得られた散乱強度をスケールリングするためのファクターCF を求めることになります。

ABS Calibration

$$I_{exp}(q) = (I_{gc} / T_{gc}) - (I_{air} / T_{air}) \quad * T = \text{Transmittance}$$

$$CF = I_{exp}(q) / I_{nist}(q)$$

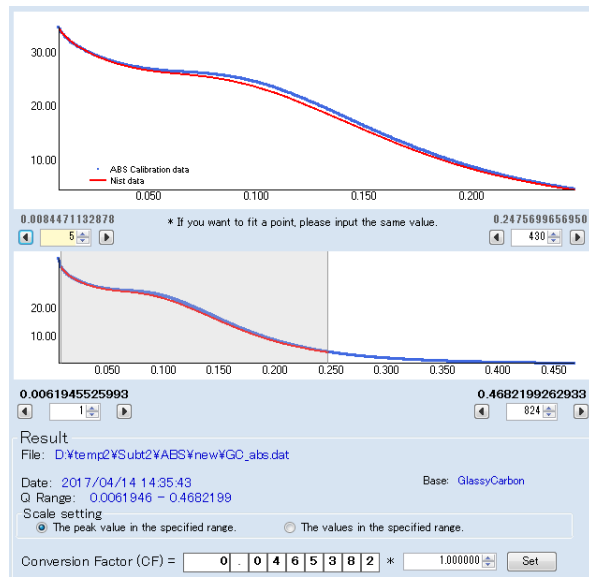
- viii. 事前に 1 次元化しておいた Air と GC のデータを[Air file [dat]:]、[GC file [dat]:]で指定します。  をクリックしてファイルをそれぞれ指定します。

Air file[dat]:
 

STD file[dat]:
 

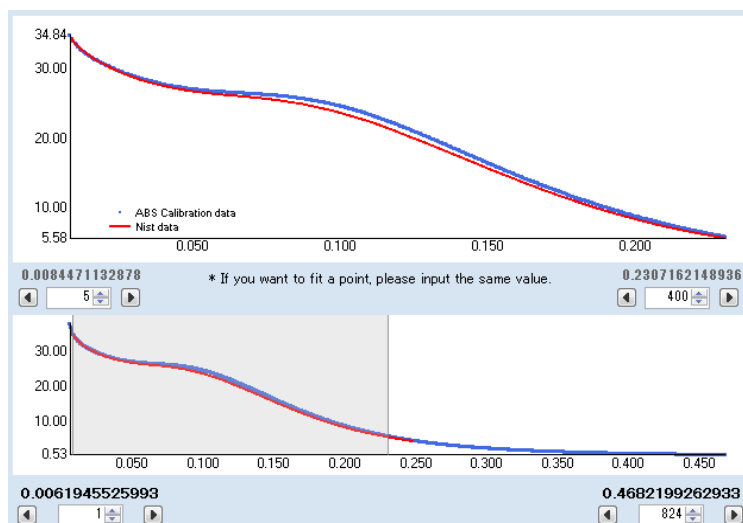
Output path:

- ix. 全ての準備ができれば、[Run]をクリックします。ファイルが出力されウィンドウ右側に青色の点でプロットされます。ファイルは GC のデータを読み込んだのと同じディレクトリ[Output path:]に出力され、読み込んだ dat ファイル名に「_abs」が追加された名前になっています（上記の例であれば、「GC_abs.dat」）。グラフの横軸は Averaging で指定した単位系、縦軸は散乱強度、そして基準データは赤点で示されています。上側のプロットはスケールリングに使用する領域を表示しており、下側のプロットはデータ全体を表示しています。

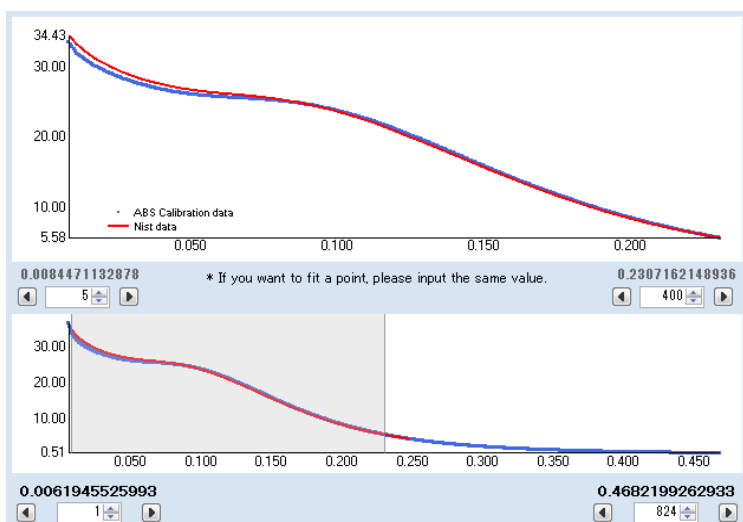


- x. 上側のグラフを元に自動スケールを実行します。グラフの右下、左下にスケールに使用している実際の横軸の値とデータ範囲が表示されていますので、←→キーを操作してスケール範囲を変更します。スケールする方法として、「領域のピーク値でスケール(The peak value in the specified range.)」、もしくは「領域内のデータの重なりが平均的にスケール(The value in the specified range.)」の2パターン用意されています。プロットの重なり具合を確認し、どちらを使うか選択します。自動スケールの結果得られたCF値が、Result欄に表示されています。

Scale setting
 The peak value in the specified range. The values in the specified range.



Scale setting
 The peak value in the specified range. The values in the specified range.



- xii. 自動スケーリングの結果を基に微調整することもできます。CF 値の各桁の数字上で左クリックすると、各桁の数値を矢印キーで変更できるようになりますので、グラフを見ながら調整します。上側のグラフの自動スケーリング範囲を変更すれば、自動スケーリング値に戻せます。

Conversion Factor (CF) = *

- xii. SRM3600 を実測した場合は、これで CF 値が確定します。一方で、SRM3600 では無く別に購入した Glassy Carbon を用いて変換係数を求める場合は、SRM3600 とその別の Glassy Carbon との間を補正するファクターを事前に求めておけば利用できます。それぞれの Glassy Carbon を実測し

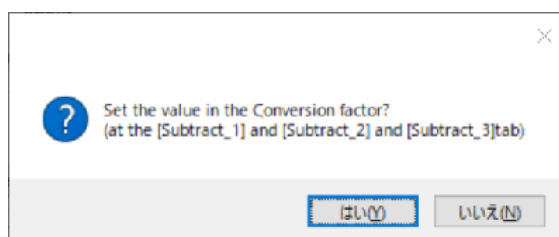
て、SRM3600 に対する散乱強度比を求めておきます。その値を乗することで SRM3600 に換算した CF を求める事ができます。

Conversion Factor (CF) = 0 . 0 4 7 6 6 5 4 * 1.101421 [Set]

※1)PF では BAS 社製の Glassy Carbon をケースに入れて各ビームラインに置いております (<http://www.bas.co.jp/1508.html#defaultTab14>)。それぞれのケースには、CF 値を計算するために必要なファクター値を記載していますので、上記の様にその値を入力して下さい。

※2)PF では SRM3600 も用意しておりますが、やや高額のためビームラインには出しておりません。ご自身がお持ちの Glassy Carbon で規格化したい場合は、この強度比を求めるために SRM3600 をお貸し致しますので、スタッフにお尋ね下さい。

- xiii. 最終的に、この値を CF として使用する場合は、[Set]をクリックします。確認のダイアログが表示されますので[はい]を押せば、この値が Glassy Carbon から求められた値と示しつつ Subtract_1、Subtract_2、Subtract_3 の CF 欄に値がコピーされます。これで完了です。



Output: D:\temp2\Subt2\ABS
 Conversion Factor (CF) = 0.0524997 GlassyCarbon
 Cell file

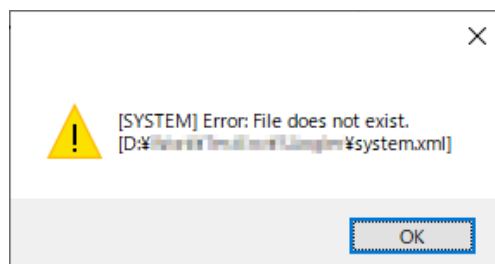
- xiv. 参考文献を以下に示します。
 Zhang, F., Ilavsky, J., Long, G. G., Quintana, J. P. G., Allen, A. J. and Jemian, P. R. Glassy Carbon as an Absolute Intensity Calibration Standard for Small-Angle Scattering. *Metall. Mater. Trans. A* **41**, 1151–1158 (2009).

⑮ 解析(Analysis)

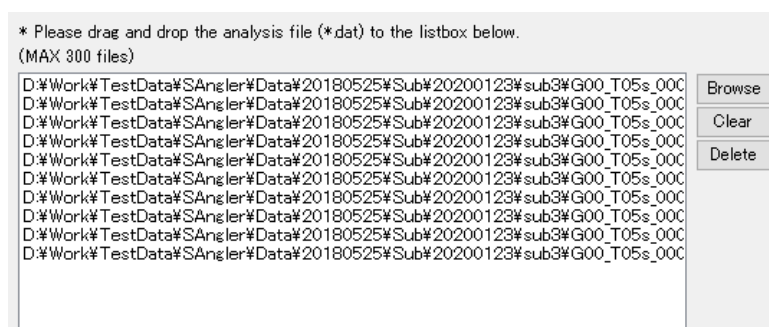
Average 処理、Subtract 処理で得られたデータからグラフを作成して解析を行います。

メニュー[Analysis] - [SAngherAnalysis]を選択すると SAngherAnalysis.exe が起動します。

※起動時に SAngher の設定ファイル「system.xml」を読み込んでいます。設定ファイルが読み込めなかった場合、エラーメッセージが表示されます。表示数や初期値等、カスタマイズしている場合は反映されませんが、動作に問題はありません。



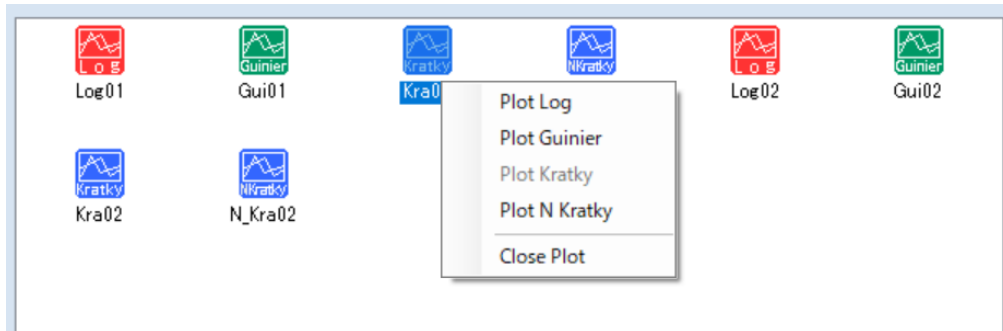
- i. まず、データを読み込みます。[Browse]をクリックするとファイルを選択するダイアログが表示されます。読み込みたいファイルを選択してください。複数個指定する場合は、[ctrl]キーや[shift]キーを使って選択して下さい。この欄に直接ファイルを Drag&Drop する事でも設定することができます。複数ファイル設定する場合は複数のファイルを選択して Drop して下さい(最大 300 個、SAngher の ConfigSetting で変更可)。



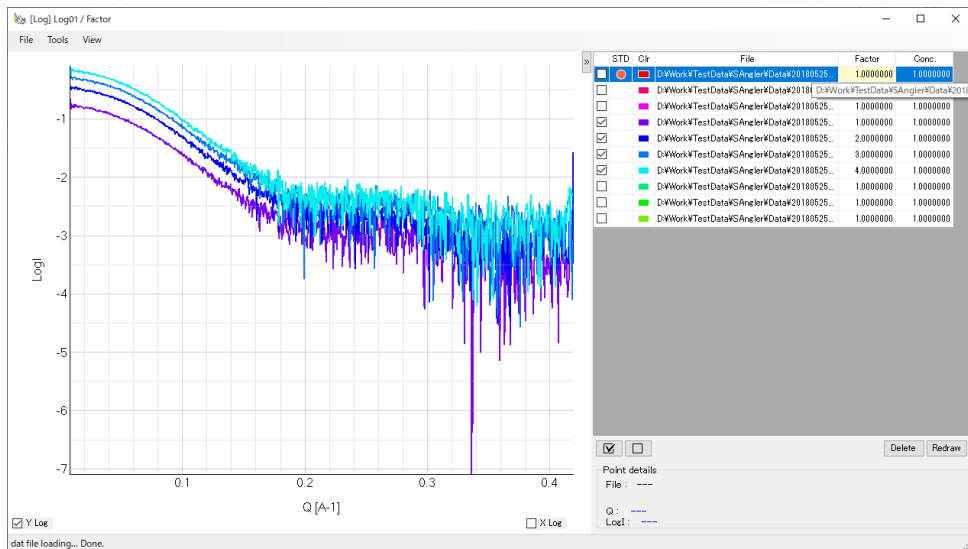
現在、SAngherAnalysis では、Y 軸となる散乱強度 I を常用対数表示した「Log プロット(LogY)」、X 軸が 2 乗で Y 軸の散乱強度 I を自然対数表示した「ギニエプロット(Guinier)」、Y 軸の散乱強度 I に X 軸の 2 乗の値を掛けた「クラツキープロット(Kratky)」、ギニエ解析の結果を基に、横軸 R_g 、縦軸 I_0 で規格化したクラツキープロットの「N クラツキープロット(N Kratky)」の 4 つのプロットを作成することが可能です。それぞれのボタンをクリックすることで、別ウィンドウにグラフが表示されます。リストを変更する場合は、[Clear]を押してリストを消去し、新しいファイルを読み込んで下さい。

- ii. グラフが表示されると、メインウィンドウ右側にグラフがアイコンで表示されます。このアイコンを右クリックすると、そのグラフを閉じたり、別の形式のグラフを作成したりすることも可能です。このように

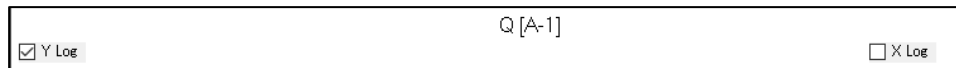
グラフは何個も作成することができます。続いて、順番に各 Plot ウィンドウでの機能を説明します。



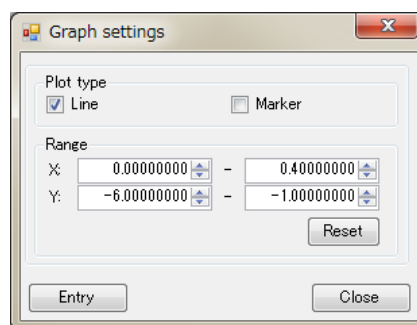
(1) LogY プロット



A) 新たに開いたグラフウィンドウの左側にはグラフが、右側にファイルリストが表示されています。リストの一番左のチェックボックスでグラフを表示／非表示にすることができます。リスト内の[Conc.]には Subtraction 時に入力した濃度の値が読み込まれています。[Factor]に値を入力すると、Y 軸の値に掛けることができます。また、後で説明する規格化を行なった際には、自動的に規格化の Factor が表示されます。グラフでは、マウスのスクロールで拡大縮小します。また左クリックで表示範囲を Drag して指定すれば、その範囲を拡大します。右クリックすると、元に戻ります。グラフにデータを追加したい場合は、ファイルメニューの[File] - [Input]から読み込むか、ウィンドウ右側のファイルリストの欄にデータを Drag&Drop すれば追加できます。

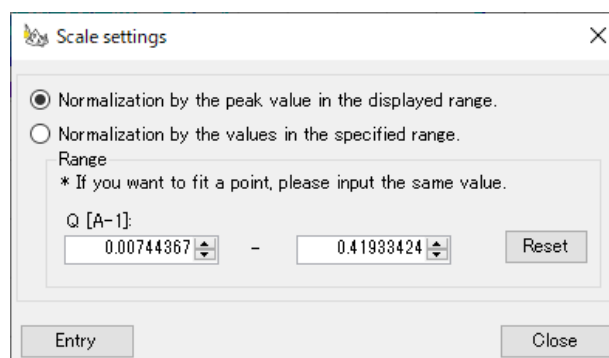


- B) 軸下部に Log 表示切替用のチェックボックスがあります。必要に応じてチェックを入れてください。
- C) ファイルメニューの[View] - [Graph settings]では、グラフのプロットスタイルや X 軸、Y 軸の表示範囲等を設定します。範囲を指定したら、[Entry]をクリックします。



- D) [Tools] - [Normalization]では、Y 軸の値を規格化することができます。[Scale]では、指定した X 軸範囲の Y 軸のデータを使って規格化します。[Concentration]では、[Conc.]の値を使って規格化します。**規格化は、ファイルリストで「STD」に●が付いたデータを基準として実施されます。**

	STD	Clr	
<input type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	D:\#\W
<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	D:\#\W
<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	D:\#\W
<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	D:\#\W
<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	D:\#\W



- E) [Scale]を選択するとダイアログが表示されます。[Normalization by the peak value in the displayed range]を選択すると、グラフの表示範囲のピークの値で規格化します。[Normalization by the values in the specified range]を選択すると、規格化する X 軸の領域を指定して、その領域を合せるように規格化します。特定の X 軸のポイントで規

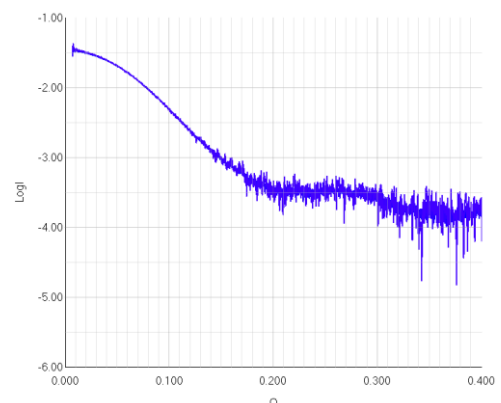
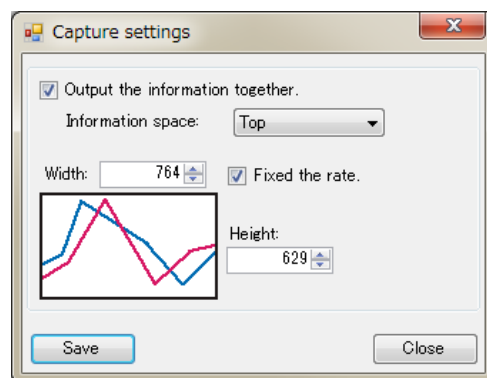
格化したい場合は、2つの空白に同じ値を入力して下さい。[Entry]をクリックすると実行されます。[Concentration]も同様です。[Reset]を実行すると元に戻ります。

- F) 表示したグラフのデータを出力することができます。[File] - [Output] - [Output data file] を実行します。出力ディレクトリを設定し、それぞれのデータを個別に出力する [Individual]か、データを1個のファイルにまとめる [One file]、もしくは両方にチェックを入れます。[One file]の場合は、保存するファイル名を入力します。[Save]クリックでデータが出力されます。ファイル内には、X軸の値、散乱強度 I 、散乱強度の標準誤差 σI 、グラフのX軸の値、散乱強度の常用対数 $\text{Log } I$ 、 $\text{Log } I$ の標準誤差 $\sigma \text{Log } I$ が順番に記録されています。さらに、規格化を行なった場合は、規格化後の値も $\text{Log } I_{\text{norm}}$ 、 $\sigma \text{Log } I_{\text{norm}}$ として出力されています。

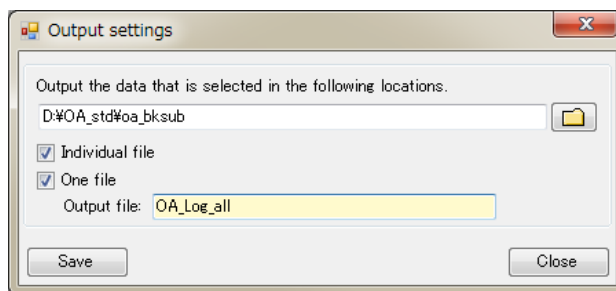
※LogY プロットで Y 軸 Log 表示切替チェックボックスの状態により出力項目が変化します。

Log 表示: X 、 I 、 $\text{Sig } I$ 、 $X1(X)$ 、 $\text{Log } I$ 、 $\text{Log } I_{\text{Sig}}$

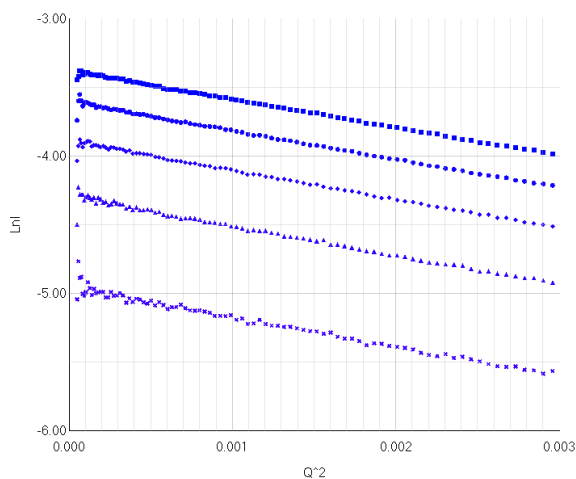
リニア表示: X 、 I 、 $\text{Sig } I$



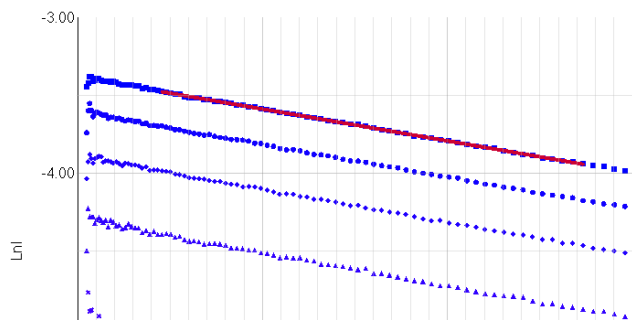
- G) 表示しているグラフを画像 (jpg、png、bmp) として出力することも可能です。[File] - [Output] - [Capture image] を実行します。ダイアログでは、ファイルリストも一緒に画像として保存する場合は、[Output the information together] にチェックを入れます。画像の縦横比は保存するように、初期設定では [Fixed the rate] にチェックが入っています。画像サイズを大きくして保存する場合は、Width や Height (ピクセル数) を変更して下さい。設定が完了したら [Save] をクリックします。保存する場所を続けて指定すると、画像ファイルが出力されます。



(2) Guinier プロット



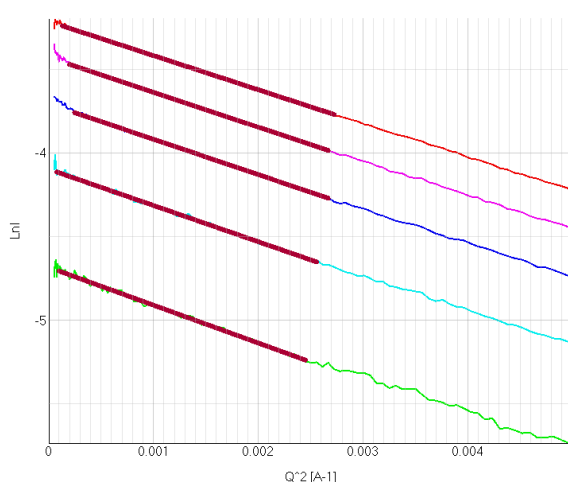
- A) 基本的な機能は Log plot と同じですが、Guinier には、ギニエ解析(直線近似)のための機能が実装されています。まず、表示範囲を設定して小角領域を拡大します。また、直線近似を行なうので、表示スタイルは「Marker」の方が良いかもしれません。
- B) ギニエ解析を行います。[Tools] - [Guinier Analysis]を選択すると、[Manual]、[Auto (autorg)]、[All auto (autorg)]、[Auto (autorg_kek)]、[All auto (autorg_kek)]の5つのメニューが表示されます。またファイルリストの欄で、データを選択して右クリックすると同じメニューが表示されます。[Manual]を選択すると、マニュアルで直線近似を行なうための別ウィンドウが表示されます。直線近似の始点と終点のカーソルを動かして調整していきます。ウィンドウ右側には、 $Q \times R_g$ (QR_g リミット)の値も表示されており、また、グラフの下部には直線と各データ点の差分の値がプロットされていますので参考にして下さい。完了したら[Apply]をクリックして閉じると、元のグラフウィンドウには直線が引かれ、結果の値も表示されます。



File	Q ² Range	R _g	I(0)/C	Quality
D:\OA_std\oa_bksub\oa001_ave_sub.dat	0.00045476 to 0.00272958 (40 to 98 pt)	24.78 (4.00E-2)	0.00763 (8.59E-6)	---
D:\OA_std\oa_bksub\oa002_ave_sub.dat	0.02132512 to 0.05224542	---	---	---
D:\OA_std\oa_bksub\oa003_ave_sub.dat	---	---	---	---
D:\OA_std\oa_bksub\oa004_ave_sub.dat	---	---	---	---
D:\OA_std\oa_bksub\oa005_ave_sub.dat	---	---	---	---

C) ATSAS をインストールしている環境では、ATSAS の `aurorg` を利用して解析する事が可能です。[Auto(`aurorg`)]を実行すると、ATSAS の `aurorg` が実行され、その結果が先程のマニュアル解析同様に別ウィンドウに表示されます。これで問題なければ[Apply]をクリックして確定させます。修正する場合は、[Manual]と同様に操作します。なお、`aurorg` を実行すると、データと同じディレクトリに「`aurorg_csv`」というフォルダが作成され、`aurorg` の出力結果(csv ファイル)が自動的に保存されています。csv ファイル内には、使用したファイル、 R_g 、 R_g の誤差、 $I(0)$ 、 $I(0)$ の誤差、直線近似の始点、終点のデータポイント、Quality、Aggregation score といった結果が出力されています。SAngher では、この出力結果を基に $I(0)$ と濃度から $I(0)/C$ 、直線近似の始点と終点のポイントから Q^2 、 Q 、 $Q \times R_g$ の範囲を計算し SAngher 上に出力しています。

D) `aurorg` を全てのデータに適用することもできます。[All auto(`aurorg`)]を実行すると、ファイルリストにある全てのデータで `aurorg` を実行し、その結果が表示されます。



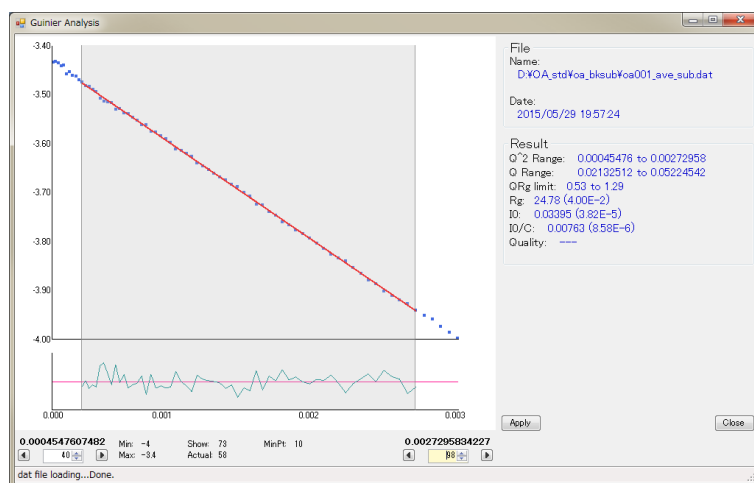
File	Q ² Range	R _g	I(0)/C	Quality	Aggr score
D:\temp2\OAWBacksub\oa001_ave_sub.dat	0.01129117 to 0.05215315	24.78 (1.79E-1)	0.04030 (3.99E-5)	80%	0.00121 [Autorg 3.0]
D:\temp2\OAWBacksub\oa002_ave_sub.dat	0.00019543 to 0.00266416 (14 to 84 pt)	25.01 (4.23E-1)	0.03250 (3.90E-5)	71%	0.00510 [Autorg 3.0]
D:\temp2\OAWBacksub\oa003_ave_sub.dat	0.01559255 to 0.05161552	25.19 (1.29E-1)	0.02462 (3.34E-5)	73%	0.00952 [Autorg 3.0]

E) ATSAS の `aurorg` と同様に PF で開発したアルゴリズム[`aurorg_kek`]でギニエ解析を実行することもできます。お好みで選択して下さい。なお、結果欄に解析に使用したプログラムが表示されます。

F) 解析が完了したら、LogY プロット同様にデータやグラフの画像を出力することができます。直線近似を行なった場合、出力データにはグラフの X 軸の値、散乱強度 I、散乱強度の標準誤差 σI 、X 軸の 2 乗の値、散乱強度の自然対数 $\ln I$ 、 $\ln I$ の標準誤差 $\sigma \ln I$ と共に、近似した直線の始点と終点の X, Y 座標が出力されています。従って、例えば Excel などのグラフソフト上で X の 2 乗と $\ln I$ による Guinier プロットを作成し、この直線の始点と終点のデータも追加して 2 点間を直線で結べば、SAnGLer 内同様に実験データに近似直線を重ねることが可能です。また、Guinier の場合は、ギニエ解析の結果を Table として出力することも可能です。[File] - [Output] - [Output result data]で、 R_g 、 $I(0)$ 、 $I(0)/c$ の各値や、直線近似した領域 (Q 、 Q^2 、 QR_g の範囲) の情報が出力されます。

# No.	Q ² Start	Q ² Last	QStart	QLast	QRgLimitM	QRgLimitM-Conc	Rg	dRg	I0	dI0	I0/Conc	dI0/Conc	Quality	Aggregated	
1	0.000711	0.002619	0.026656	0.051179	0.66	1.27	4.45	24.84	3.39E-01	0.03401	3.33E-05	0.00764	7.47E-06	0.53	0
2	0.00041	0.002565	0.020259	0.050646	0.51	1.27	3.56	25.02	4.60E-01	0.02712	2.87E-05	0.00782	8.06E-06	0.6	0
3	0.000526	0.002619	0.022924	0.051179	0.58	1.29	2.67	25.11	4.61E-01	0.02035	2.87E-05	0.00782	1.07E-05	0.58	0
4	0.000526	0.002674	0.022924	0.051712	0.58	1.3	1.78	25.23	8.74E-01	0.0136	3.00E-05	0.00764	1.68E-05	0.52	0
5	0.000368	0.002619	0.019193	0.051179	0.49	1.3	0.89	25.39	9.72E-01	0.00702	2.31E-05	0.00788	2.60E-05	0.55	0

※1) 近似直線の始点と終点の座標は、出力データ上で LineX、LineY というデータ列になっています。それぞれ頭 2 点に値が入っていて、これが始点と終点にな

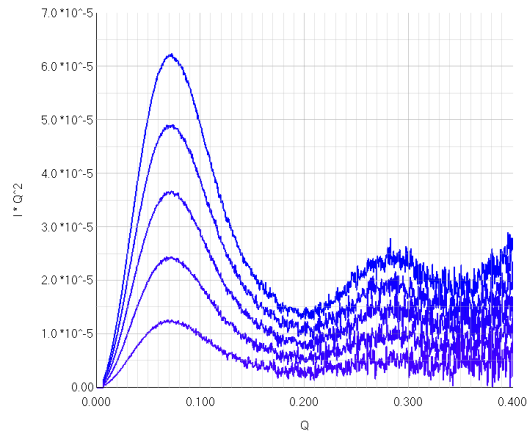


ります。一方、3 点目からはどちらも「0 (ゼロ)」となっています。これは Igor pro 等のソフトウェアに他のデータ列と同時にデータをスムーズに読み込むための処置で、ゼロに何ら意味はありません。読み込んだ後で消去して下さい。

※2) データの状態によっては「autorg」の解析が失敗し、何もデータが出力されない場合があります。「なぜ、こちらはできて、そっちはダメなのか...」と悩むよ

うな微妙な結果もありますが、その場合は manual で解析して下さい。

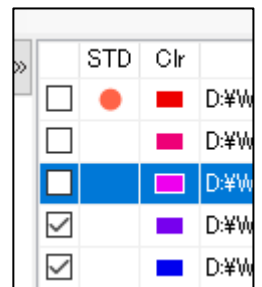
(3) Kratky プロット



A) クラツキープロットに関しても、LogY プロットと基本的に同じ機能です。左側にはグラフが、右側にファイルリストが表示されています。リストの一番左のチェックボックスでグラフを表示／非表示にすることができます。リスト内の[Conc.]には Subtraction 時に入力した濃度の値が読み込まれています。[Factor]に値を入力すると、Y 軸の値に掛けることができます。規格化を行なった際には、自動的に規格化の Factor が表示されます。グラフでは、マウスのスクロールで拡大縮小します。また左クリックで表示範囲を Drag して指定すれば、その範囲を拡大して表示します。右クリックで元に戻ります。グラフにデータを追加したい場合は、ファイルメニューの[File] - [Input]から読み込むか、ウィンドウ右側のファイルリストの欄にデータを Drag&Drop すれば追加できます。

B) ファイルメニューの[View] - [Graph settings]では、グラフのプロットスタイルや X 軸、Y 軸の表示範囲等を設定します。範囲を指定したら、[Entry]をクリックします。

C) [Tools] - [Normalization]では、Y 軸の値を規格化することができます。[Scale]では、指定した X 軸範囲の Y 軸のデータを使って規格化します。[Concentration]では、[Conc.]の値を使って規格化します。**規格化は、ファイルリストで「STD」に●が付いたデータを基準として実施されます。**



D) [Scale]を選択するとダイアログが表示されます。[Normalization by the peak value in

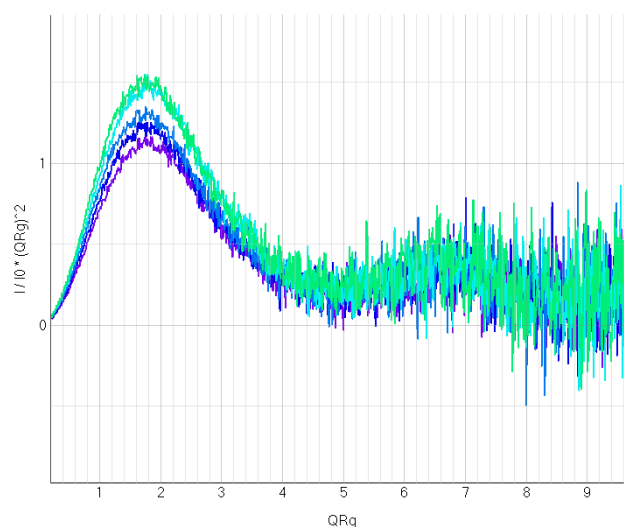
the displayed range]を選択すると、グラフの表示範囲のピークの値で規格化します。
 [Normalization by the values in the specified range]を選択すると、規格化する X 軸
 の領域を指定して、その領域を合せるように規格化します。特定の X 軸のポイントで規
 格化したい場合は、2つのブランクに同じ値を入力して下さい。[Entry]をクリックすると実
 行されます。[Concentration]も同様です。[Reset]を実行すると元に戻ります。

E) 表示したグラフのデータを出力することができます。[File] - [Output] - [Output data file]
 を実行します。出力ディレクトリを設定し、それぞれのデータを個別に出力する
 [Individual]か、データを 1 個のファイルにまとめる[One file]、もしくは両方にチェックを
 入れます。[One file]の場合は、保存するファイル名を入力します。[Save]クリックでデー
 タが出力されます。ファイル内には、X 軸の値、散乱強度 I、散乱強度の標準誤差 σ 、グ
 ラフの X 軸の値、散乱強度 I と X 軸の値を二乗した値をかけた $I \times Q^2$ 、 $I \times Q^2$ の標準誤
 差 $\sigma \times Q^2$ が順番に記録されています。さらに、規格化を行なった場合は、規格化後の
 値も $I \times Q^2_norm$ 、 $\sigma \times Q^2_norm$ として出力されています。

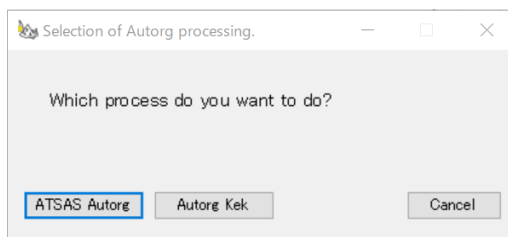
F) 表示しているグラフを画像 (jpg、png、bmp) として出力することも可能です。[File] -
 [Output] - [Capture image]を実行します。ダイアログでは、ファイルリストも一緒に画像
 として保存する場合は、[Output the information together]にチェックを入れます。画像
 の縦横比は保存するように、初期設定では[Fixed the rate]にチェックが入っています。
 画像サイズを大きくして保存する場合は、Width や Height (ピクセル数) を変更して下さ
 い。設定が完了したら[Save]をクリックします。保存する場所を続けて指定すると、画像
 ファイルが出力されます。

(4) N Kratky (Normalized Kratky) プロット

Kratky プロットに対して、X 軸に R_g 、Y 軸にも R_g^2 を掛けることで無次元化し、さらに $I(q)$
 を $I(0)$ で割ることで規格化します。



- A) 最初にデータを読み込みます。読み込みたいファイルを Drag&Drop(または[Browse]ボタンからファイルを選択)し、[N Kratky]をクリックします。
- B) 読み込みが完了すると上のようなメッセージボックスが表示されます。R_g を解析するツールを選択します。
- ※ ATASAS がインストールされていない場合は「Autorg_kek」を選択してください。



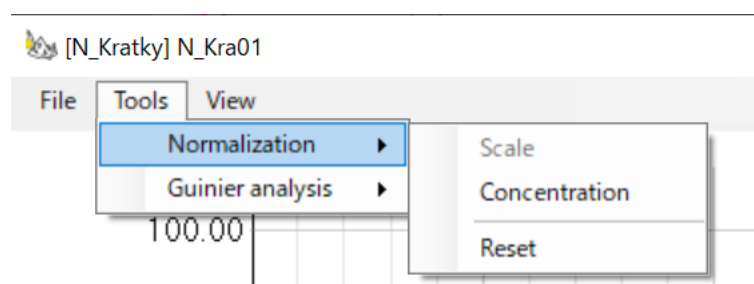
- C) 基本的な操作は「Guinier プロット」と同じになります。ギニエ解析を行う際は直線近似を行なうので、表示スタイルは「Marker」の方が良いかもしれません。
- [Tools] - [Guinier Analysis]を選択すると、[Manual]、[Auto (autorg)]、[All auto (autorg)]、[Auto (autorg_kek)]、[All auto (autorg_kek)]の 5 つのメニューが表示されます。またファイルリストの欄で、データを選択して右クリックすると同じメニューが表示されます。[Manual]を選択すると、マニュアルで直線近似を行なうための別ウィンドウが表示されます。直線近似の始点と終点のカーソルを動かして調整していきます。ウィンドウ右側には、 $Q \times R_g$ (QR_g リミット) の値も表示されており、また、グラフの下部には直線と各データ点の差分の値がプロットされていますので参考にして下さい。完了したら [Apply] をクリックして閉じると、元のグラフウィンドウには直線が引かれ、結果の値も表示されます。
- D) ATASAS をインストールしている環境では、ATASAS の autorg を利用して解析することが可能です。[Auto (autorg)]を実行すると、ATASAS の autorg が実行され、その結果が先程のマニュアル解析同様に別ウィンドウに表示されます。これで問題なければ [Apply] をクリックして確定させます。修正する場合は、[Manual]と同様に操作します。なお、autorg を実行すると、データと同じディレクトリに「autorg_csv」というフォルダが作成され、autorg の出力結果 (csv ファイル) が自動的に保存されています。csv ファイル内には、使用したファイル、R_g、R_g の誤差、I(0)、I(0)の誤差、直線近似の始点、終点のデータポイント、Quality、Aggregation score といった結果が出力されています。SAnghler では、この出力結果を基に I(0)と濃度から I(0)/C、直線近似の始点と終点のポイントから Q²、Q、 $Q \times R_g$ の範囲を計算し SAnghler 上に出力しています。

- E) autorg を全てのデータに適用することもできます。[All auto (autorg)]を実行すると、ファイルリストにある全てのデータで autorg を実行し、その結果が表示されます。
- F) ATSAS の autorg と同様に PF で開発したアルゴリズム[autorg_kek]でギニエ解析を実行することもできます。お好みで選択して下さい。なお、結果欄に解析に使用したプログラムが表示されます。
- G) 解析が完了したら、Log プロット同様にデータやグラフの画像を出力することができます。直線近似を行なった場合、出力データにはグラフの X 軸の値、散乱強度 I、散乱強度の標準誤差 σ 、X 軸の値と R_g をかけた QR_g 、 $I/I(0) \times (QR_g)^2$ 、その標準誤差 $\sigma/I(0) \times (QR_g)^2$ です。また、ギニエ解析の結果を Table として出力することも可能です。[File] - [Output] - [Output result data]で、 R_g 、 $I(0)$ 、 $I(0)/C$ の各値や、直線近似した領域 (Q 、 Q^2 、 QR_g の範囲) の情報が出力されます。

※1) 近似直線の始点と終点の座標は、出力データ上で LineX、LineY というデータ列になっています。それぞれ頭 2 点に値が入っていて、これが始点と終点になります。一方、3 点目からはどちらも「0 (ゼロ)」となっています。これは Igor pro 等のソフトウェアに他のデータ列と同時にデータをスムーズに読み込むための処置で、ゼロに何ら意味はありません。読み込んだ後で消去して下さい。

※2) データの状態によっては「autorg」の解析が失敗し、何もデータが出力されない場合があります。「なぜ、こちらはできて、そっちはダメなのか...」と悩むような微妙な結果もありますが、その場合は manual で解析して下さい。

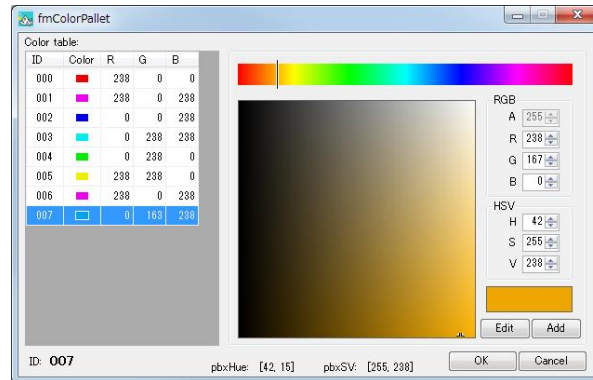
※ N Kratky プロットはグラフ毎に R_g 値が違うため、Scale での規格化はできません。



※グラフの色を変更するには

グラフの色は、ソフトが自動的に割り振るようになっていますが、以下の手順によってマニュアルで変更する事も可能です。

- (6) 各グラフ Window 右側のファイルリストで、変更したいデータの[Clr]、すなわち Color の欄をクリックすると[ColorPallet]という別 Window が開きます。



- (7) 左側に現在のグラフで使用している Color table が表示されています。このテーブルにある色と入れ替えたい場合は、その色 (ID) をクリックして、[OK]を押します。
- (8) 別の色を新たに加えたい場合は、右側のパレットにて色を調整して[Add]をクリックします。すると、左側の table にその色が追加されますので、(2)同様に選択して[OK]を押します。
- (9) [OK]をクリックすると「Regist Color table data?」と聞かれるので、[はい]をクリックします。
- (10) これで色が変わります。

iii. 直線近似と誤差に関する情報

ギニエ解析での直線近似の計算と、各値の誤差の計算に関して補足します。いずれの値も、誤差伝播法則に従って求めている。なお、出力結果が PRIMUS と同じになる事も確認している。

(1) 直線近似に関して

データ点 (x_i, y_i) において、 y_i が誤差 σ_i を持つ場合に 1 次回帰直線 $y=A+Bx$ で回帰分析を行なう。誤差に応じたデータ各点の重み ω_i を考慮する。

$$\omega_i = \frac{1}{\sigma_i^2}$$

$$\Delta = \sum \omega_i \sum \omega_i x_i^2 - \left(\sum \omega_i x_i \right)^2$$

と定義すると、A、B 値はそれぞれ、以下の式で求める事が可能です。

$$A = \frac{1}{\Delta} \left(\sum \omega_i x_i^2 \sum \omega_i y_i - \sum \omega_i x_i \sum \omega_i x_i y_i \right)$$

$$B = \frac{1}{\Delta} \left(\sum \omega_i \sum \omega_i x_i y_i - \sum \omega_i x_i \sum \omega_i y_i \right)$$

また、その時、A、B 値のそれぞれの誤差 σ_A 、 σ_B は、以下の様に表される。

$$\sigma_A = \sqrt{\frac{\sum \omega_i x_i^2}{\Delta}}$$

$$\sigma_B = \sqrt{\frac{\sum \omega_i}{\Delta}}$$

ギニエ解析では、ギニエ近似の式

$$\ln I(q) = \ln I(0) - \frac{R_g^2}{3} q^2$$

より、Y 切片 $A = \ln I(0)$ から $I(0)$ 、傾き $B = -R_g^2/3$ から R_g の値を求めている。

$$I(0) = e^A$$

$$R_g = \sqrt{3 \times |B|}$$

それぞれの誤差は、

$$\sigma I(0) = e^A \times \sigma_A$$

$$\sigma R_g = \frac{1}{2} (3 \times |B|)^{-\frac{1}{2}} (3 \times \sigma_B)$$

と表すことができる。

(2) 散乱強度 I の常用対数、自然対数での誤差

$\text{Log}I$ 、 $\text{Ln}I$ の誤差は、誤差伝播則より以下のように記述できる。

$$\sigma \ln I = \frac{\sigma I}{I}$$

$$\sigma \log I = \frac{\sigma I}{(I \times \ln 10)}$$

(3) 参考文献、参考サイト

以下の教科書、サイトを参考にしています。

- ・計測における誤差解析入門、John R. Taylor、林茂雄・馬場涼 訳、東京化学同人
- ・(例解)微分積分学演習、鈴木義也 他編著、共立出版株式会社
- ・産業技術総合研究所 計測標準部門 計量標準システム科 主任研究員 井原俊英様と
先端材料科 材料評価研究室 テクニカルスタッフ 新 重光様が開設されている
「化学標準物質の不確かさ」に関するページ

<https://staff.aist.go.jp/t.ihara/>

※大変参考になりました。深く感謝致します。

4. Reference

- ① Shimizu, N., Yatabe, K., Nagatani, Y., Saijyo, S., Kosuge, T. and Igarashi, N.
Software Development for Analysis of Small-angle X-ray Scattering Data.
AIP Conf. Proc., 1741, 050017 (2016).
- ② ギニエ解析にて、ATSAS の autorg を利用した場合は、必ず ATSAS も Reference して下さい。「データの 1 次元化とバックグラウンドの差引きは SAngler で、ギニエ解析は ATSAS の autorg で実施した」と記述して下さい。
Petoukhov, M.V., Franke, D., Shkumatov, A.V., Tria, G., Kikhney, A.G., Gajda, M., Gorba, C., Mertens, H.D.T., Konarev, P.V. and Svergun, D.I. (2012)
New developments in the ATSAS program package for small-angle scattering data analysis
J. Appl. Cryst. **45**, 342-350.



※ATSAS と Link 設定を行なうと、左記のメッセージが表示されるようになります。

5. 補足

- ① 各段階での処理結果は、Igor、Excel 等を利用して SAngler 外で処理した結果と突き合わせ、仕様通りの計算が行なわれているか確認をしています。また、PETRAIII、EMBL の D. I. Svergun 博士らのグループが開発した ATSAS (主に PRIMUS、autorg)、APS の Jan Ilavsky 博士が開発した Igor pro のマクロ Nika を参考にし、それぞれの出力結果と整合性が取れているように確認しています。

「ATSAS software」

<http://www.embl-hamburg.de/biosaxs/software.html>

["Nika" package of 2D -> 1D SAS data reduction macros for Igor Pro]

<http://usaxs.xray.aps.anl.gov/staff/ilavsky/nika.html>