

MIBEMOL

Visualisation, traitement des données expérimentales

Contenu

- Mise en œuvre des logiciels de traitement
- Liste des programmes disponibles
- Utilisation des programmes
- Descriptif détaillé
- Signification des notations
- Intensités intégrées

Rappel : Récupération et mise en place des logiciels

(site « <http://www-llb.cea.fr/Phocea/Page/index.php?id=21> »)

- Après téléchargement de « Fitmib data treatment suite.zip »
- Placer le contenu du zip, c'est à dire le dossier « \mibemol_dat » avec tout ce qu'il contient directement sous une racine .

Ex : « C:\mibemol_dat ».

- Mettre dans le dossier « \mibemol_dat\tdvmib\data » tous les fichiers résultats des runs dont vous aurez besoin.

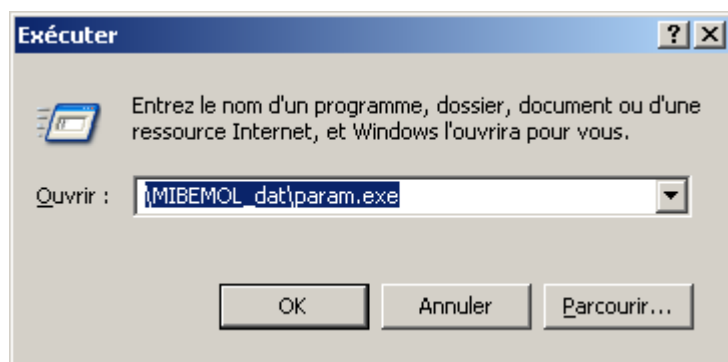
Ex : « C:\mibemol_dat\tdvmib\data\d21758.nxs
 \d21759.nxs
 \ »

Remarque : Si besoin, les fichiers 'runs intermédiaires' tels que « d21758.nxs1, d21758.nxs2, » doivent être placés dans le dossier « \mibemol_dat\tdvmib\dpro » . Ils sont utilisés par 'visnex' et 'evolux'

Mise en œuvre des logiciels de traitement

Les différents programmes se trouvent dans le dossier « \mibemol_dat » sous forme d'exécutables (.exe). Ils sont mis en œuvre

- Soit par double click sur leur icône
- Soit 'exécuter' dans le menu 'démarrer'



Utilisation des programmes

Liste des programmes disponibles

<i>NOM</i>	<i>OBJECTIF</i>
param	Lecture des paramètres d'un spectre enregistré (<i>user table</i>)
grpnrj	Réduction des datas, groupement et écriture de fichiers $I(\theta, \omega)$
evolux	Evolution d'un comptage avec le temps : comparaison des « partiels »
teknex	Visualisation d'un spectre (une seule courbe)
visnex	Visualisation simultanée de runs ou de "partiels" (dyyyyy.nxsj)
window	Variation $I(\theta)$ de l'intensité intégrée sur la fenêtre en énergie (ω_1, ω_2)
elscat	Analyse d'un « scan élastique »
densix	Extraction de la densité d'état $g(\omega)$
fitrun_theta	Ajustement de l'intensité à θ constant (<i>fit</i>) à une forme analytique
fitrun_q*	Extraction de l'intensité à Q constant ; fit à une forme analytique

* non encore disponible

Ces différents programmes permettent soit :

- De visualiser, avec différents niveaux de « zoom » et après normalisation, corrections et traitements, les spectres expérimentaux obtenus.
- D'extraire, par différentes méthodes, une valeur numérique pour les paramètres physiques supposés être déterminants dans la construction de la fonction de diffusion (scattering function) $S(Q, \omega)$.

Ils sont tous interactifs c'est à dire demandent que l'expérimentateur réponde à des questions.

Introduction et généralités

Les numéros de run demandés sont les datas mesurés par le spectromètre « Mibemol » et stockés dans le dossier « \mibemol_dat\tdvmib\data » (run complet) ou « \mibemol_dat\tdvmib\dpro » (runs partiels) en format de fichier **NEXUS**.

Ex : \mibemol_dat\tdvmib\data\ dxxxxx.nxs où xxxxx est le numéro du run (5 chiffres)
Les sorties graphiques utilisent la bibliothèque **PGPLOT**.

« save » des résultats numériques → fichier .txt (texte);
« save » des résultats graphiques → fichier .ps (postscript).

Tous les programmes débutent par une phase de « réduction des données brutes » (data reduction). Une première série de questions demande le(s) numéro(s) du (des) run(s) à traiter, le regroupement de détecteurs souhaité et indique les options possibles :

Nota bene : *sauf cas particulier alors signalé, tous les programmes utilisent la même logique d'entrée des numéros :*

« **Run** » :

*si le résultat final est constitué d'un seul run, rentrer son numéro (5 chiffres) ;
s'il résulte d'une somme de runs, rentrer **chaque numéro** en les séparant par une virgule.*

Exemple : 12220,12221,12225 (somme de 3 runs)

« **Regroupement** » :

pour additionner entre eux les résultats acquis dans un ensemble ou « bloc » de détecteurs, donner le numéro de la première et de la dernière colonne(séparateur virgule) ; si on veut faire un regroupement qui contient des « blocs » non contigus (par exemple on veut éliminer des colonnes pour cause de pic de Bragg) on donnera le numéro de la première et de la dernière colonne du premier bloc, le numéro de la première et de la dernière colonne du deuxième bloc,(séparateurs virgule).

Exemple :

- 25,42 (on somme le contenu de toutes les colonnes 25 à 42, bornes incluses)
- 25, 31,34,42 (somme de 25 à 31 et de 34 à 42, toujours bornes incluses)

Les numéros de « run » demandés sont respectivement :

- Le spectre 'échantillon' qui contient la physique cherchée.
- On peut, si la mesure a été faite, lui soustraire un 'container vide'. Si ce dernier n'a pas été mesuré à la même température que l'échantillon, le programme propose une correction de température (hypothèse d'un solide de Debye).
- Enfin, il est proposé de soustraire au spectre principal, un 'tampon' ; il s'agit du spectre d'un autre échantillon choisi pour permettre de soustraire tout ce qui n'intéresse pas (ex : contribution des phonons dans une mesure de dynamique de moment magnétique ; contribution du solvant ;).

Attention : *compte tenu des corrections de « self-shielding » (voir plus loin), les résultats [(échantillon – container) – (tampon – container)] et [échantillon – tampon] ne sont pas équivalents.*

- Les spectres sont tous normalisés à un même comptage au moniteur (10^6 neutrons). Dans un même « run », les groupements de détecteurs (1 détecteur = 1 colonne à l'angle θ) seront normalisés entre eux si un spectre du Vanadium a été mesuré (efficacité « élastique » et surface de détection). Sauf dans certains programmes où le résultat en serait faussé, cette normalisation est optionnelle. Lorsqu'elle n'est pas mise en œuvre, les intensités sont ramenées à surface de détection constante (1 colonne).

Méthode : *on calcule l'intensité intégrée (J_k) sous le pic élastique du vanadium regroupé à l'identique de l'échantillon.*

$$J_{\text{elast}}(k) = \sum_{\pm\sigma} I_k(n) ; \quad \sigma = \text{résolution calculée}$$

La référence est prise sur le groupement k_0 présentant l'intensité maximale $J_{max} = J(k_0)$.
Chaque groupement (k) sera normé aux autres en multipliant toutes les intensités par ($J_{max} / J(k)$).

- Tenant compte des caractéristiques des détecteurs du spectromètre, les « datas » mesurés (intensité en fonction du 'Temps de Vol') sont **toujours** corrigés de la variation de la probabilité de détection, compte tenu de son énergie, du neutron diffusé

$$\sigma_{abs} \# 1/\sqrt{E}$$

- Une correction « d'écrantage » est proposée ; en géométrie plane (container parallélépipède rectangle) la correction est 'exacte' : « self-shielding » du contenu et « shielding » du container ; en géométrie cylindrique, l'écrantage par les parois du container n'est pas prise en compte.

Si ces corrections ont été demandées, une série de questions sur les caractéristiques géométriques et neutronique (absorption, diffusion) de l'échantillon et du témoin est posée.

Attention : l'absorption et la diffusion sont demandées sous forme de « libre parcours moyen » c'est à dire en cm^{-1} .

$$l_{abs} = \sum_i [n_i \times (\sigma_{abs})_i]$$

$$l_{diff} = \sum_i [n_i \times (\sigma_{diff})_i]$$

n_i = nombre de noyaux de type i par unité de volume (cm^{-3})

$(\sigma_{abs})_i$ = section efficace d'absorption (cm^2) du noyau i (pour neutrons de $V = 2200m/s$)

$(\sigma_{diff})_i$ = section totale de diffusion (cm^2) du noyau i [$(\sigma_{diff})_i = (\sigma_{coh})_i + (\sigma_{incoh})_i$]

Quelques remarques finales

- à toute question où l'une des options à choisir est non (0) on peut faire simplement
<return>
- la plupart des programmes proposent en fin de traitement de « cycler » sur un autre spectre ; cela permet de ne pas poser certaines questions, l'hypothèse étant alors que ce paramètre n'a pas changé (par exemple, même numéro de spectre « vanadium »). Pour un autre choix, il faut aller au bout du programme et recommencer.

Descriptif détaillé

param

Lecture des paramètres d'un spectre enregistré (user_table)

Lecture du contenu d'un fichier détecteur (ou d'un groupement)

Ce programme permet d'afficher à l'écran les paramètres (neutrons, environnement échantillon, temps, moniteur, ...) avec lesquels a été enregistré un run. En effet, les fichiers nexus ne sont pas en ASCII et ne peuvent être lus directement. On peut aussi s'en servir pour afficher à l'écran le nombre de neutrons compté dans chaque canal d'un (ou d'un groupement de) détecteur(s).

Mode d'emploi :

langue, language: francais (fr) ou english (en)?

USER table (rep=1) ou data file (rep = 2) ? 1

numero du run ? 17352

User table for run 17352

sample name ==> blg (h/D) 0.46 D20 T =270K

user name ==> Zanotti

container ==>

monitor (1.e6 neutrons) : 0.4415

time counting (second) : 21599

Asked temperature (K) : 267.90

TOF delay (musec) : 1801

TOF channel width (musec) : 17.4

wavelength (Angstrom) : 5.20

sample angle (d°) : 135.00

frequency chopper 1 (rpm): 9999

frequency chopper 2 (rpm): 3333

frequency chopper 4 (rpm): 3333

number of used detectors : 84

Position of detectors :

0.00 23.50 24.80 26.10 27.50 36.50 37.59 38.69 40.16 41.27

42.38 43.87 44.99 46.11 47.62 48.76 52.20 53.36 54.53 56.09

57.27 58.45 60.04 61.25 62.46 63.67 64.90 67.79 69.05 69.89

71.59 72.44 73.88 75.47 76.35 77.68 79.01 79.92 84.04 85.44

86.39 87.82 89.27 90.25 91.73 92.73 94.24 95.26 96.81 98.92

99.99 101.62 102.72 103.84 104.96 106.11 107.85 108.44 110.24 110.85

112.69 115.24 116.54 117.87 119.22 120.60 121.30 122.73 124.19 125.69

126.45 128.01 131.26 132.11 132.97 134.73 135.64 136.57 138.48 139.46

141.48 141.51 143.67 147.16 0.00 0.00 0.00 0.00 0.00

autre fichier (oui=numero, non=0) ? 0

retour à : [Liste des programmes disponibles](#)

grpnrj

Après une phase de regroupement, soustraction et corrections des données expérimentales, ce programme transforme les résultats acquis en « temps de vol » en ***intensité de neutrons diffusés en fonction de leur énergie finale*** ou, ce qui revient au même, en fonction du changement d'énergie qu'ils ont subi lors de leur interaction avec l'échantillon.

Principe

Le nombre présent dans le canal n représente le nombre $[I(Q, t_n)]$ de neutrons qui sont arrivés dans le détecteur durant un intervalle de temps δt autour du temps $t_n = n\Delta$ (le « pulse » de neutrons quitte l'échantillon au temps 0 ; Δ est la largeur en temps d'un canal de l'enregistreur). Il s'agit donc des neutrons dont le « temps de vol », c'est à dire le temps mis pour parcourir la distance L qui sépare l'échantillon du détecteur est passé de t_{n_0} (n_0 = numéro du canal élastique) à t_n au cours de leur passage dans l'échantillon.

En se servant des relations qui lient l'énergie E_n et la vitesse v_n de ces neutrons :

$$E_n = \frac{1}{2}mv_n^2 = \frac{1}{2}m\frac{L^2}{t_n^2} \rightarrow \delta E_n = \left(\frac{dE}{dt}\right)_{t_n} \delta t = -mL^2 \frac{\delta t}{t_n^3}$$

associé à :

$$I(Q, t_n) = \frac{k_n}{k_0} \left(\frac{d^2 \sigma}{d\Omega dt} \right) = \left(\frac{t_0}{t_n} \right) \left(\frac{t_0}{t_n} \right)^3 \left(\frac{d^2 \sigma}{d\Omega d\omega} \right)_n$$

Il vient, dans un modèle classique si T est la température de l'échantillon :

$$\begin{aligned} \tilde{S}(Q, \omega_n) &= \left(\frac{t_n}{t_0} \right)^4 I(Q, t) \\ S(Q, \omega_n, T) &= \exp \left[-\frac{1}{2} \left(\frac{\hbar \omega_n}{kT} \right) \right] \tilde{S}(Q, \omega_n) \end{aligned}$$

Résultats

Le résultat de ce traitement pour chaque groupement de détecteur est stocké dans un fichier texte dont le chemin d'accès est de la forme : `\mibemol_dat\tdvmib\grpnrj\dxxxxx\kyyy` où xxxxx est le numéro du run échantillon et yyy un numéro d'ordre du fichier.

Chaque fichier est constitué d'un tableau à 6 colonnes et 512 lignes

numéro canal	Transfert d'énergie	$\tilde{S}(Q, \omega)$	$\Delta \tilde{S}(Q, \omega)$	$S(Q, \omega, T)$	$\Delta S(Q, \omega, T)$
.....					
j	ω_j	$\tilde{S}(Q, \omega_j)$	$\Delta \tilde{S}(Q, \omega_j)$	$S(Q, \omega_j, T)$	$\Delta S(Q, \omega_j, T)$
.....					

Mode d'emploi :

langue, language: francais (fr) ou english (en)? **fr**

Regroupements et/ou soustraction de spectres

traitement: groupement detecteurs 'standart(0), personnel(1) ou un par un (2)? **0**

Echantillon

numero(s) du spectre(s)? **17352**

une boite vide a soustraire

(oui=numero(s) run, interpolation=-1, non=return)? **17347**

desirez vous une correction d"auto-ecrantage (oui=1, non=0)?

voulez-vous soustraire un spectre (oui=numero(s) sp, non=return)? **0**

voulez vous normer au vanadium(oui=1,non=0)? **1**

numero(s) du spectre(s)? **17343**

meme boite vide a soustraire (oui=1, non=return) ? **1**

enregistre dans \mibemol_dat\tdvmib\grpnrj\d17352\k001

enregistre dans \mibemol_dat\tdvmib\grpnrj\d17352\k002

enregistre dans \mibemol_dat\tdvmib\grpnrj\d17352\k003

enregistre dans \mibemol_dat\tdvmib\grpnrj\d17352\k004

enregistre dans \mibemol_dat\tdvmib\grpnrj\d17352\k005

enregistre dans \mibemol_dat\tdvmib\grpnrj\d17352\k006

enregistre dans \mibemol_dat\tdvmib\grpnrj\d17352\k007

enregistre dans \mibemol_dat\tdvmib\grpnrj\d17352\k008

enregistre dans \mibemol_dat\tdvmib\grpnrj\d17352\k009

enregistre dans \mibemol_dat\tdvmib\grpnrj\d17352\k010

enregistre dans \mibemol_dat\tdvmib\grpnrj\d17352\k011

enregistre dans \mibemol_dat\tdvmib\grpnrj\d17352\k012

d autres cas a traiter(oui=1,non=return) **0**

Retour à [Liste des programmes disponibles](#)

evolux

Evolution d'un comptage avec le temps

Regard sur les « partiels » : visualisation des intensités intégrées

Ce programme permet de **détecter une anomalie de comptage** provoquée par un événement (non souhaité) qui serait advenu durant le temps d'acquisition. En effet le mode de gestion de l'appareil autorise un découpage en « tranches » du temps total (en général tranches de 1 heure) ; au terme de chacune, le résultat partiel est, d'une part enregistré, d'autre part additionné au total déjà obtenu. C'est en **comparant le nombre total de neutrons détecté par un (ou un groupe de) détecteur(s) pour chacun de ces « partiels »** que l'on pourra voir si une variation s'est produite durant la mesure.

Mode d'emploi

Les runs « partiels » portent tous le numéro du run principal (5 chiffres) mais avec une extension 1, 2, 3, ..., j, (c.a.d. fichiers \dxxxxx.nxsj) selon leur ordre de mesure (dans le temps).

- La comparaison peut porter sur l'ensemble des runs partiels (réponse [0,0]) ou sur partie d'entre eux (en réponse, donner les numéros [j,j'] du premier et du dernier des partiels à comparer).
- Bien sur, la comparaison n'a de sens que si chaque partiel est normé à son moniteur (fluctuation de la puissance du réacteur, de l'efficacité des sources froides, du nombre « d'interruptions »,) ; cependant, si le nombre de coups au moniteur est trop faible (inférieur à 100) son incertitude statistique (fluctuation propre) devient alors égale ou supérieure aux autres termes pertinents. Pour éviter de faire croire à une anomalie qui dans les faits n'existe pas, il n'y a pas de normalisation au moniteur dans ce cas.

langue, language: francais (fr) ou english (en)? **fr**
evolution avec le temps, numero du spectre ? **21721**

Quel est votre groupement de detecteurs
(des details? faites <return>)? **2,84**

\MIBEMOL_dat\tdvmib\dpro\d21721.nxs1

\MIBEMOL_dat\tdvmib\dpro\d21721.nxs2

.....
\MIBEMOL_dat\tdvmib\dpro\d21721.nxs16

il y a 16 runs partiels, lesquels vous interessent ?
donnez le premier et le dernier (0,0 = tous) **0**

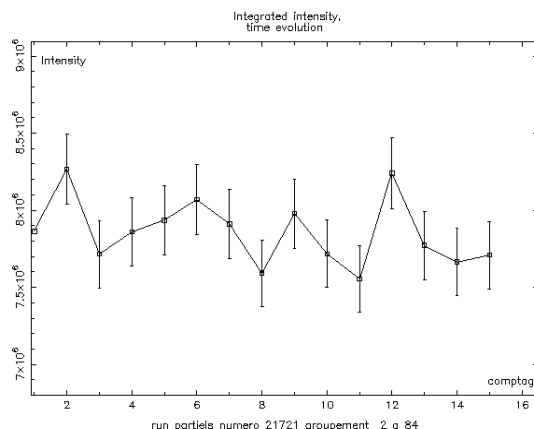
Run partiel N° 1 Monit= 0.00048

Run partiel N° 2 Monit= 0.00046

.....
Run partiel N° 15 Monit= 0.00047

partial N°16 CAUTION: monitor to low, no
normalization

autre echelle (oui=1, non=0)? **0**



N.B. Ce logiciel, destiné à détecter des anomalies de comptage, donne l'évolution de l'intensité intégrée totale (Σ sur tous les canaux). Si nécessaire, il sera très facilement modifiable au cas où l'on souhaite étudier l'évolution au cours du temps (manip dynamique) d'une partie seulement de la fonction de diffusion $S(Q, \omega)$.

Retour à : [Liste des programmes disponibles](#)

teknex

Visualisation du contenu d'un ou d'un groupement de détecteur(s)

Ce programme de **tracé graphique d'un fichier unique** (une seule courbe) permet de visualiser aisément l'effet de divers traitements (regroupement, soustraction, correction,) sur le résultat acquis dans un, ou un groupe de, détecteur. Il permet aussi de « voir » des détails plus difficiles à repérer avec d'autres programmes de visualisation. Il est recommandé de l'utiliser, au moins sur un run caractéristique, préalablement à tout ajustement (choix du meilleur regroupement, optimisation de la zone à ajuster, choix de la représentation analytique, ...).

Enfin c'est le moyen commode et rapide de visualiser l'état d'avancement du spectre en cours.

Mode d'emploi :

langue, language: francais (fr) ou english (en)?

Visualisation d'un run

s/sp = resultats acquis dans un (groupe de) compteurs ;

sp=ensemble des s/sp

Echantillon

numero(s) du spectre(s)? **17352**

une boîte vide a soustraire

(oui=numero(s) run, interpolation=-1, non=return)? **17347**

desirez vous une correction d"auto-ecrantage (oui=1, non=0)? **0**

voulez-vous soustraire un spectre (oui=numero(s) sp, non=return)? **0**

Quel est votre groupement de detecteurs

(des details? faites <return>)? **60,84**

voulez-vous soustraire une constante (valeur ou non=0)? **0**

Lambda= 5.2 Å; Theta=128.7deg; Q0=2.178Å-1; T= 267.9 K

Echelle en canaux (0), ou en energie(1)? **0**

echelle automatique(rep=0),imposee(rep=1)?

autre echelle (oui=1,non=0)? **1**

Echelle en canaux (0), ou en energie(1)? **1**

corrige du facteur de Bose (oui=1,non=0)? **0**

echelle automatique(rep=0),imposee(rep=1)? **1**

minimum de x= -20.00 maximum de x= 2.19

minimum de y= 0.21556E-08 maximum de y= 0.18155E+05

xmin, xmax ? **-1.5,1.5**

ymin, ymax ? **0,3000**

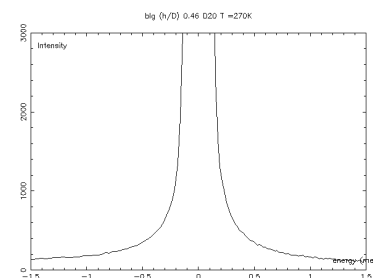
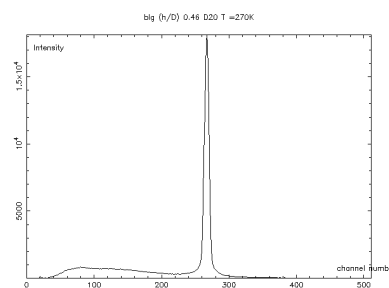
autre echelle (oui=1,non=0)? **0**

paper output (yes = 1 ; no = 0) ? **1**

enregistre dans le fichier

\MIBEMOL_dat\tdvmib\teknex\d17352\graph.ps/PS

d autres cas a traiter(oui=1,non=return) **0**



Retour à : [Liste des programmes disponibles](#)

visnex

Comparaison de résultats (regroupé ou non)

Evolution temporelle (visualisation des partiels xxxxx.nexk)

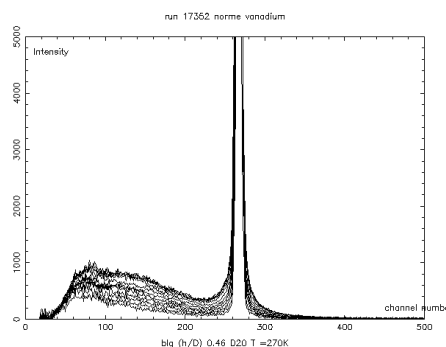
Ce programme permet de **comparer entre eux, sous forme d'une superposition graphique, divers résultats de comptage**. Cela peut-être des comptages acquis par divers groupes de détecteurs dans un même « run », des comptages acquis par un groupe de détecteurs dans des « runs » différents ou enfin, dans un « run » donné, les comptages partiels, acquis par un groupe de détecteur et enregistrés à intervalle régulier au cours de l'expérience. Dans tous les cas où ce ne sont pas les « runs partiels » qui sont comparés, divers traitements (regroupement, soustraction, correction,) sont proposés. Le traitement choisi pour le premier « run » s'appliquera évidemment de façon identique à tous les autres : en particulier, si l'on a choisi d'appliquer une correction « auto-écrantage » pour comparer des runs différents, la correction sera appliquée à tous avec les mêmes paramètres (géométrie, longueurs de diffusion et d'absorption).

Remarque.

- Une « normalisation » intervient toujours lorsque l'on compare des groupements d'un même run : soit par l'intermédiaire du run « vanadium », soit, si l'on a choisi sans norme « vana » on ramène les comptages de chaque groupe à nombre de colonnes constant (coefficient 1 pour le plus petit groupe).
- L'option « groupement automatique » génère 12 groupements qui sont ensuite visualisés :
2,5 ; 6,10 ; 11,15 ; 16,20 ; 21,25 ; 26,35 ; 36,45 ; 46,55 ; 56,64 ; 65,72 ; 73,78 ; 79,84

Mode d'emploi :

langue, language: francais (fr) ou english (en)? **fr**
Programme de visu avec superposition de spectres
comparer entre eux des groupements (0) ou des runs (1) ? **0**
Echantillon
numero(s) du spectre(s)? **17352**
une boîte vide à soustraire
(oui=numero(s) run, interpolation=-1, non=return)? **17347**
desirez vous une correction d"auto-ecrantage (oui=1, non=0)?
voulez-vous soustraire un spectre
(oui=numero(s) sp, non=return)? **0**
grpment standart(0), perso(1)? **0**
Vanadium pour norme angulaire: numero(s) du spectre(s)?
17343
boîte vanadium à soustraire (oui=numero, non=return) ?
Echelle en canaux (0), ou en energie(1)? **0**
echelle automatique(rep=0),imposee(rep=1)? **1**
minimum de x= 0.00 maximum de x= 511.00
minimum de y=-0.16865E+03 maximum de y= 0.21675E+05
xmin, xmax ? **0,500**
ymin, ymax ? **0,5000**
autre echelle (oui=1,non=0)?



Retour à : [Liste des programmes disponibles](#)

window

Intensité intégrée dans l'intervalle $[\omega_1, \omega_2]$

$$\underline{I(\vartheta_j, [\omega_1, \omega_2]) \Leftrightarrow I(\vartheta_j, [n_1, n_2])}$$

(ω = transfert d'énergie subit par le neutron, n = numéro du canal correspondant)

Ce programme calcule le **nombre total de neutrons ayant échangé une quantité d'énergie comprise entre ω_1 et ω_2** (\pm selon que le neutron a gagné ou perdu de l'énergie) et diffusés dans une, ou un groupement de, colonne(s) de détecteur(s), c'est à dire **en fonction de l'angle de diffusion ϑ** . Le transfert d'énergie peut être donné directement en unité d'énergie (meV) ou par le numéro du canal correspondant aux énergies finales (dans ce cas on obtient l'intensité intégrée entre les canaux $[n_1, n_2]$). Dans tous les cas, on calcule

$$I(\vartheta_j, [n_1, n_2]) = \sum_{i=n_1}^{n_2} I(\vartheta_j, n_i)$$

n_1, n_2 , canaux correspondants respectivement aux transferts d'énergie ω_1 et ω_2 ;

ϑ_j angle de diffusion correspondant au détecteur ou groupement de détecteurs (j)

Le calcul est effectué après soustraction optionnelle d'un container et/ou d'un « tampon », normalisation angulaire (vanadium) et correction.

En sortie, le résultat est visualisé graphiquement ; les valeurs numériques peuvent être imprimés sur papier.

Remarques

- Les opérations de traitement du run (soustraction, correction, normalisation, ...) sont faites sur le fichier brut ; la sommation sur l'intervalle demandé n'intervient qu'après.
- La normalisation par un vanadium n'est pas obligatoire (réponse **0** à *numéro spectre*) ; dans ce cas on normalisera à nombre de colonnes regroupées constant (coefficient 1 pour le groupe ayant le plus grand nombre de colonnes)
- Pour obtenir la variation angulaire de la composante « élastique » de la diffusion, choisir l'option « *fenêtre en énergie* » (réponse **1**) et à la question « *transfert d'énergie min, max* » répondre **0** (attention : ce zéro tout seul n'est, dans ce cas, pas équivalent à un « return »). Le programme calcule alors $\sum E_0 - \delta, E_0 + \delta$ où E_0 = énergie des neutrons incidents, $\delta = 3 \sigma$ (σ^2 écart quadratique calculé de la résolution élastique).
- Pour obtenir la variation angulaire de l'intensité « intégrée », choisir l'option « *fenêtre en canaux* » (réponse **0**) et à la question « *canal inf, canal sup ?* » demander l'intervalle total (réponse **1,512**)

Mode d'emploi

langue, language: francais (fr) ou english (en)? **fr**

$I=f(\theta)$ pour $\omega=\pm \Delta(\omega)$

traitement : 'groupement standart(0) ou personnel(1)? **0**

Echantillon

numero(s) du spectre(s)? **17352**

une boite vide a soustraire

(oui=numero(s) run, interpolation=-1, non=return)? **17347**

desirez vous une correction d"auto-ecrantage (oui=1, non=0)?

voulez-vous soustraire un spectre

(oui=numero(s) sp, non=return)?

Vanadium pour norme angulaire: **17343**

boite vanadium a soustraire (oui=numero, non=return) ? **0**

fenetre en canaux(rep=0) ou en energie(rep=1)? **1**

transfert d"energie min, max

(energie neutron: +=perte; -=gain) ? **-2.5,2.5**

attention ($\omega+hwhm$) en dehors de la table

spectre17352 (norme moniteur)

monit data= 0.44147E+06 monit "tampon"= 0.00000E+00

somme sur energie de -2.50, 2.50 mev ; canaux 203 a 511 ;

ω -2.50, 2.

2	3	4	5	6	7	8
146789	90990	154277	167407	188459	194152	197874
9	10	11	12	13		
203042	209608	226466	220367	215603		

abscisse:

colonne(rep=0), angle(rep=1) $Q(rep=2)$, $Q^*2(rep=3)$? **3**

autre representation(oui=1,non=0)? **0**

changer la fenetre de sommation(oui=1, non=0)? **1**

fenetre en canaux(rep=0) ou en energie(rep=1)? **1**

transfert d"energie min, max

(energie neutron: +=perte; -=gain) ? **-1,1**

spectre17352 (norme moniteur)

monit data= 0.44147E+06 monit "tampon"= 0.00000E+00

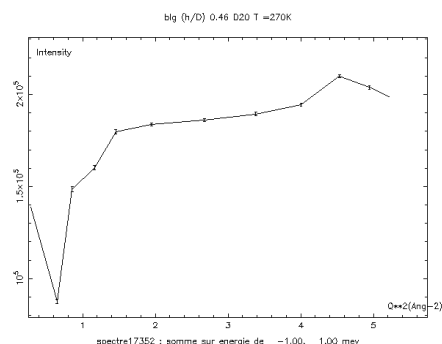
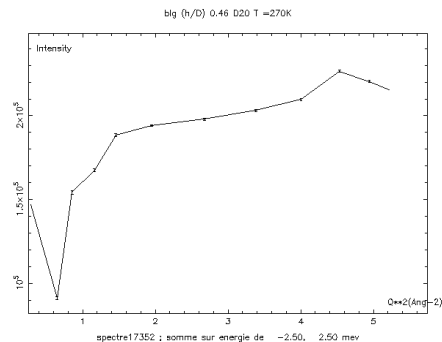
somme sur energie de -1.00, 1.00 mev ; canaux 237 a 333 ;

ω -1.00, 1.

2	3	4	5	6	7	8
138761	87622	148579	160187	179661	183809	186217
9	10	11	12	13		
189448	194286	210011	203788	198897		

abscisse:

colonne(rep=0), angle(rep=1) $Q(rep=2)$, $Q^*2(rep=3)$? **3**



Retour à : [Liste des programmes disponibles](#)

elscat

Analyse d'un « scan élastique »

Ce programme permet le traitement des N spectres enregistrés lors d'un « scan » au cours duquel on a fait varier pas à pas un paramètre extérieur T (en général la température). La donnée expérimentale cherchée est la variation, avec le paramètre T et/ou l'angle de diffusion ϑ , de *l'intensité intégrée élastique* diffusée par l'échantillon.

Remarques :

En entrée

Obligatoire :

- numéros du premier et du dernier run du « scan » ;
- numéro du run « Vanadium » (pour normalisation efficacité et surface détecteur)

Optionnel :

- Soustraction d'un autre « scan » (tampon) : il doit nécessairement comporter le même nombre de runs (N).
- Soustraction d'un 'container' (échantillon et tampon s'il existe). Soit cette mesure est un « scan » qui doit alors aussi comporter (N) runs. Soit la mesure n'a été faite qu'à une seule température ; le programme propose alors une correction en fonction de la température (solide de Debye).
- Corrections d'auto-écrantage et/ou d'écrantage par le container.

Le domaine d'intégration (pic élastique) est fixé dans le programme à $\pm 3 \sigma_{el}$ (σ_{el}^2 écart quadratique de la résolution élastique calculée).

- L'intensité élastique est calculée pour chaque angle de diffusion (colonne par colonne ou choix d'un groupement de colonnes) et chaque valeur du paramètre T.
- Pour chaque T, on ajuste par moindres carrés $Y = \text{Log} [I_{el}(Q)]$ à une droite $Y = \langle u^2 \rangle Q^2 + C$ (détermination du meilleur couple $\langle u^2 \rangle$ et C)

En sortie, au choix :

- visualisation de l'intensité élastique en fonction de Q pour chaque valeur de T.
- visualisation de $\langle u^2 \rangle$ en fonction de T.

Mode d'emploi (sans container ni « témoin », runs non groupés, regroupement angulaire « standard ») :

langue, language: francais (fr) ou english (en)? **fr**

echantillon:

numeros du premier et dernier run de chaque serie =>

14218,14317

"Temoin(s)" a soustraire non (0),:

numeros du premier et dernier run de chaque serie =>**0**

Vanadium pour norme angulaire : **14436**

boite vanadium a soustraire (oui=numero, non=return) ? **0**

echelle automatique(rep=0),imposee(rep=1)?**0**

Containter vide return ou numero du spectre ?

traitement : 'groupement standart(0) ou personnel(1)? **0**

voulez-vous regrouper les runs par

paquets de "n" non(0), oui("n") ? **0**

1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15, 16, 17, 18, 19,
20, 21, 22, 23, 24, 25, 26, 27, 28, 29, 30, 31, 32, 33, 34, 35, 36, 37,
38, 39, 40, 41, 42, 43, 44, 45, 46, 14264 ce spectre n'existe pas
48, 49, 50, 51, 52, 53, 54, 55, 56, 57, 58, 59, 60, 61, 62, 63, 64, 65,
66, 67, 68, 69, 70, 71, 72, 73, 74, 75, 76, 77, 78, 79, 80, 81, 82, 83,
84, 85, 86, 87, 88, 89, 90, 91, 92, 93, 94, 95, 96, 97, 98, 99, 100,

graph ? <u2>=f(T) => rep=1 ; (Ielast)=f(T,Q) => rep=2 :**1**

voulez-vous des barres d'erreur (oui=1, non=0)**1**

papier output (yes = 1 ; no = 0) ? **1**

enregistre dans le fichier

MIBEMOL_dat\tdvmib\elscat\d14218\result.ps/PS

graph (Ielast)=f(T,Q) yes=2, no=0 ?**2**

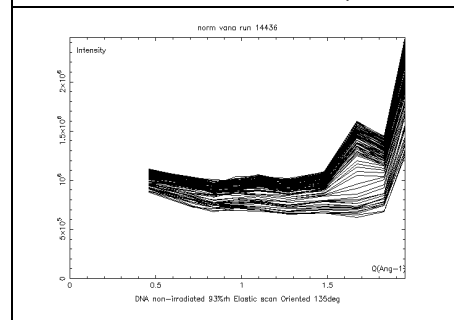
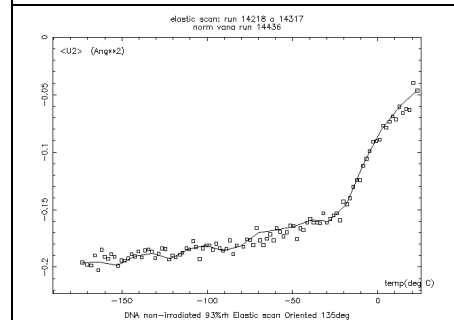
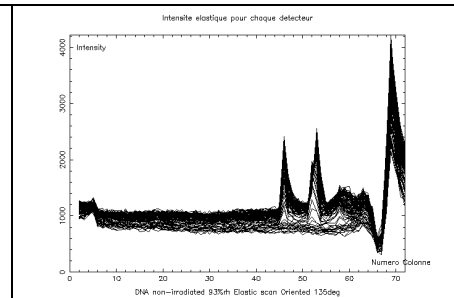
abscisse: angle(rep=1), Q(rep=2), Q**2(rep=3)**2**

echelle automatique(rep=0),imposee(rep=1)?

autre echelle (oui=1,non=0)?**0**

Changer les groupements (oui=1,non=0)? **0**

Autre cas a traiter(oui=1,non=0)?**0**



Retour à : [Liste des programmes disponibles](#)

densix

Extraction d'une densité d'état de phonon $G(\omega)$

Ce programme a pour bût d'extraire, à partir de la variation angulaire de la composante inélastique de la diffusion (scattering), la **densité des états « d'excitation vibrationnelle »** $G(\omega)$ (phonons), du solide diffuseur.

Méthode.

La partie « inélastique et incohérente » de la fonction de diffusion des neutrons thermiques par un solide « harmonique » monoatomique s'écrit :

$$S_{inc}(Q, \omega) = \alpha Q^2 \left[\exp - (Q^2 \langle u^2(T) \rangle) \right] \left[1 + n(\omega) \right] \left[\frac{G(\omega)}{\omega} \right]$$

α = facteur qui inclut la section efficace incohérente, la masse du noyau, ;

$|Q|$ = module du transfert de moment pour l'angle θ et l'échange d'énergie ω :

$$\left(Q^2(E_0, E_f) = \left(\frac{2\pi}{\lambda} \right)^2 \left\{ 1 + \frac{E_f}{E_0} - 2 \cos(\vartheta) \sqrt{\frac{E_f}{E_0}} \right\} \right) \quad (1)$$

$\omega = (E_f - E_0) \Rightarrow$ changement d'énergie du neutron au cours de la diffusion.

Par convention nous prenons ω positif lorsque le neutron **gagne de l'énergie**

(att : convention inverse du livre « Marshall – Lovesey »).

$\langle u^2(T) \rangle$ = déplacement quadratique moyen des noyaux (à la température T) ;

$n(\omega)$ = population du niveau d'énergie ω (au dessus du fondamental, statistique de Bose) ;

$$1 + n(\omega) = \frac{1}{\exp\left(\frac{\omega}{kT}\right) - 1}$$

Enfin, si N est le numéro du canal qui recueille les neutrons ayant une énergie finale E_N (changement d'énergie $\omega_N = (E_N - E_0)$), le nombre de neutrons $I(Q, N)$ collecté par ce canal est le résultat de la convolution entre la fonction de diffusion de l'échantillon $S(Q, \omega_N)$ et la fonction de résolution attachée à ce canal $R[(\omega_N - \omega), N]$.

$$I(Q, N) = \int S(Q, \omega) R(\omega_N - \omega, N) d\omega \cong \alpha E_N^2 S(Q, \omega_N)$$

Il en résulte que

$$\left[\exp - (Q^2 \langle u^2(T) \rangle) \right] G(\omega) = \left\{ \left[\frac{\omega}{1 + n(\omega)} \right] \left[\frac{S_{inc}(Q, \omega)}{Q^2} \right] \right\} \quad (2)$$

$$G(\omega_N) = \lim_{Q \rightarrow 0} \left\{ \left[\frac{\omega_N \left(\exp\left(\frac{\omega_N}{kT}\right) - 1 \right)}{E_N^2} \right] \times \left[\frac{I_{inc}(Q, N)}{Q^2} \right] \right\} \quad (3)$$

Remarque :

- L'unité d'énergie est le milli-eV (meV)

Conséquence de la faible énergie incidente (comparée à celle d'un phonon caractéristique) des neutrons (neutrons froids) on utilise uniquement la partie du spectre qui correspond aux neutrons ayant gagné de l'énergie.

- La normalisation des détecteurs entre eux est ici indispensable pour que l'opération « passage à la limite » ait un sens : **vanadium obligatoire.**
- Rappel : les traitements qui découlent de « soustraction d'un container » et « soustraction d'un autre spectre » sont différents.
- La géométrie de l'échantillon, ou le dysfonctionnement d'un détecteur, peut entraîner un comptage « anormalement » bas dans une (un groupement de) colonne(s), donc

un coefficient de norme très élevé et une incertitude associée « gigantesque ». Nous préférons donc éliminer les angles tels que : **[norme vana(angle)] > 10**.

- Partant de l'équation (2) deux approximations sont proposées pour calculer $G(\omega)$:

1) **Chercher la limite pour $Q \rightarrow 0$** du membre de droite de l'égalité **pour chacune des valeurs ω_N** . En effet, à chaque détecteur (ou groupe de) correspond un Q calculé (cf (1)) et une intensité mesurée $I(Q,N)$. La Limite($Q \rightarrow 0$) s'obtient comme l'ordonnée à l'origine de la droite ajustée par moindres carres de

$$y = \log \left\{ \left[\frac{\omega_N \left(\exp \left(\frac{\omega_N}{kT} \right) - 1 \right)}{E_N^2} \right] \times \left[\frac{I_{inc}(Q,N)}{Q^2} \right] \right\} = f(Q^2).$$

Pour chaque énergie ω , le programme d'ajustement calcule un facteur de qualité $K(\chi^2)$; lorsqu'il est très faible ($< 5 \cdot 10^{-3}$, valeur préconisée par les « Numerical Recipies » dont est extrait la méthode) un « warning » est affiché. Si, par visualisation graphique, on constate que ces mauvais ajustements sont dus essentiellement à certains angles (ou groupements), on peut alors les « éliminer » et refaire un ajustement sur les valeurs restantes.

2) **Approximation de « Bredov »** [*M.M Bredov et al, Sov.Phys.Solid State, 9, 214,(1967)*] :

Pour chaque valeur de ω_N , on somme sur tous les angles :

$$G(\omega_N) = \sum_Q \left\{ \left[\frac{\omega_N \left(\exp \left(\frac{\omega_N}{kT} \right) - 1 \right)}{E_N^2} \right] \times \left[\frac{I_{inc}(Q,N)}{Q^2} \right] \right\}$$

Cette dernière méthode est à préférer :

- chaque fois que le signal est petit, donc entaché d'une erreur statistique importante qui rend peu fiable le passage à la limite dans le premier traitement.
- lorsque les atomes constituant la maille élémentaire sont tels que au total $\sigma_{coh} \approx \sigma_{inc}$ et que la nature de l'ordre (ordre à grande distance) entraînent que dans la fonction de diffusion $S(Q,\omega)$ les termes de « corrélation distincte » ne sont pas négligeables

devant les termes « d'auto corrélation ». La $\left(\sum_Q \right)$ minimise, par effet de moyenne,

l'influence de l'intensité « cohérente ».

Après tracé graphique du résultat, le programme propose un ajustement de tout ou partie du résultat à une forme analytique $G(\omega_N) = \delta \times (\omega_N)^\alpha$ (on ajuste par une méthode de moindre carre sur la droite $\text{Log}[G(\omega_N)] = \alpha \text{Log}(\omega) + C^{te}$).

Enfin, le résultat est écrit dans un fichier .txt (texte) ;

\MIBEMOL_dat\tdvmib\densix\d17361\result.txt

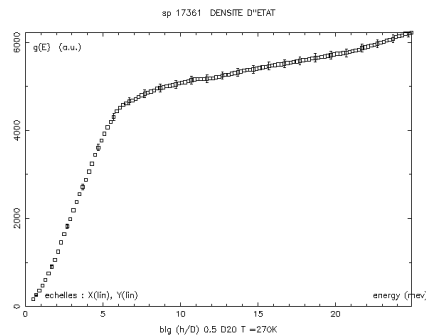
sur la ligne (l) on trouve : le transfert d'énergie ω_l (en meV), la densité d'état (U.A.) et l'incertitude correspondante

Le dernier graphique est stocké dans le fichier

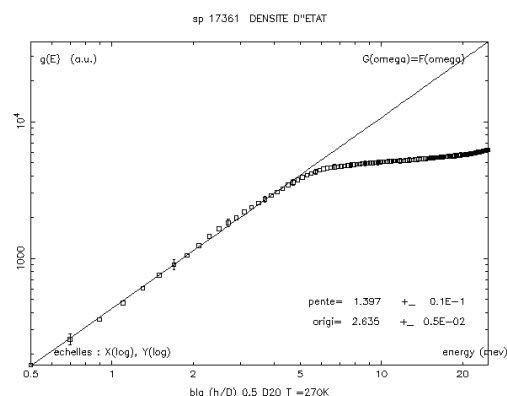
\MIBEMOL_dat\tdvmib\densix\dxxxxx\graph.ps

Mode d'emploi (soustraction d'un container, groupement standard, méthode de Bredov)

langue, language: francais (fr) ou english (en)? **fr**
 Extraction d'une densite d'etat $G(\omega)$ comme $\lim (q \rightarrow 0)$
 on considere un ensemble de s/sp pour differents angles
 numero(s) du spectre(s)? **17361**
 Un spectre a soustraire
 (oui=numero(s) sp, non ou container vide=0)? **0**
 traitement : 'groupement standard(0) ou personnel(1)? **0**
 une boite vide a soustraire
 (oui=numero(s) sp, non=return)? **17347**
 calibration detecteurs, spectre vanadium:
 numero(s) du spectre(s)? **17343**
 desirez vous une correction d'auto-ecrantage (oui=1, non=0)?
 $g(\omega)$:intervalle en energie et increment
 (en meV) : min, max, delta ?**0.5,25,.2**
 Temperature affichee= **268.0 K**
 voulez-vous la modifier , (oui=valeur, non=0)? **0**
 passage a la limite $Q \rightarrow 0$ (rep=1)
 ou approx de BREDOV(rep=2)? **2**
 RESULTATS ; traces et ajustement de $G(\omega)$
 axe des x lineaire(rep=1) ou log(rep=2)? **1**
 axe des y lineaire(rep=1) ou log(rep=2)? **1**
 echelle automatique(rep=0),imposee(rep=1)? **0**
 voulez-vous des barres d'erreur (oui=1, non=0)**1**
 Voulez-vous un ajustement(oui=1,non=0)? **0**
 Autre coordonnees : non (0), oui (1) ? **1**
 axe des x lineaire(rep=1) ou log(rep=2)? **2**
 axe des y lineaire(rep=1) ou log(rep=2)? **2**
 echelle automatique(rep=0),imposee(rep=1)? **0**
 voulez-vous des barres d'erreur (oui=1, non=0)
 Voulez-vous un ajustement(oui=1,non=0)? **1**
 Omega mini et maxi ou <return> si intervalle total ? **0.5,5**
 voulez-vous des barres d'erreur (oui=1, non=0)**1**
 Autre coordonnees : non (0), oui (1) ? **0**
 paper output (yes = 1 ; no = 0) ? **1**
 enregistre dans le fichier
 \MIBEMOL_dat\tdvmib\densix\d17361\graph.ps/PS
 chaleur spécifique de reseau(oui=1,non=0)? **1**
 nombre d'atomes dans une molecule ? **5**
 poids moleculaire (grammes) ? **79**
 PHONON HEAT CAPACITY = **0.50 J/(g.K)**
 resultats dans le fichier: \MIBEMOL_dat\tdvmib\densix\
 Autre cas a traiter(oui=1,non=0)?**0**



échelle linéaire-linéaire



échelle log-log

Retour à : [Liste des programmes disponibles](#)

fitrun theta

Ce programme ajuste les résultats d'une expérience à une forme analytique choisie. Ce choix, fait par l'expérimentateur, reflète l'expression de la fonction de diffusion des neutrons $S(Q, \omega)$ par l'échantillon. L'ajustement est fait sur les données expérimentales non transformées, c'est à dire en fonction du temps de vol des neutrons diffusés.

$$I_{calc}(Q, n) = Fd(n) + \int_{-e_0}^{\infty} S(Q, \omega) R(n, \omega) d\omega + Bf(n)$$

Fd = pic élastique ; R = fonction de résolution ; Bf = bruit de fond

L'ajustement se fait par la recherche de l'ensemble des paramètres $\{a_j\}; j \in [1, k]\}$ qui minimisent la fonction

$$\chi^2(a_1, a_2, \dots, a_k) = \sum_n \left\langle \left\{ \frac{[I_{calc}(Q, n, a_1, a_2, \dots, a_k) - I_{mes}(Q, n)]}{\sigma_1} \right\}^2 \right\rangle$$

La qualité de l'ajustement sur les « npoints » de la zone à ajuster est donnée par le paramètre $P = \left[\frac{\chi^2}{(npoints - nvar)} \right]$ où nvar désigne le nombre de paramètres dans la fonction.

Le programme se déroule en plusieurs phases successives :

Phase de « construction » du spectre que l'on veut ajuster :

- lecture du run échantillon
- soustraction facultative d'un container
- correction d'auto-absorption
- soustraction facultative d'un échantillon « témoin » (avec ou sans container)
- normalisation facultative des détecteurs entre eux (run vanadium)
- regroupement de plusieurs colonnes de détecteur (amélioration de la statistique)

Phase de préparation de l'ajustement :

- détermination de la « 1/2 largeur élastique » (σ_e) par ajustement à une gaussienne du résultat d'une diffusion purement élastique : dans la mesure où la composante élastique est souvent la partie dominante du spectre de diffusion des neutrons, on commence par rechercher sa largeur sur un spectre de référence, pris dans les mêmes conditions géométriques et neutroniques que l'échantillon, ne contenant pas de composante quasi-élastique (en général un « vanadium »).
- choix de la forme analytique à laquelle on veut ajuster le spectre expérimental. Ce choix se fait sous la forme d'un numéro. La correspondance entre ce numéro et les diverses formes analytiques possibles se trouve dans une «[Liste_options_fitrun](#)» annexée à ce document.
- choix de la zone du spectre que l'on va ajuster. Ce choix est indiqué en donnant le premier et le dernier numéro de canal de la zone. On peut vouloir exclure certaines parties du spectre à l'intérieur de la zone d'ajustement. Il faut alors donner le premier et le dernier canal de chaque zone à ajuster

Exemple : 150,210,230,340,350,450

L'ajustement se fera entre les canaux 150 et 450 en ne prenant pas en compte les canaux 211 229 ni ceux 341 349.

- choix d'un ensemble de valeur de départ des paramètres à ajuster. Pour chaque forme analytique choisie auparavant la «[Liste_options_fitrun](#)» indique le nombre de paramètres ajustables et leur signification.

Remarque : si , avec la même option, on a déjà ajusté d'autres groupements de détecteurs (ou le même) on peut prendre comme valeurs initiales de l'ajustement les valeurs finales trouvées alors. C'est automatiquement le groupement angulaire le plus proche qui est choisi.

- une visualisation sur un même graphique des datas expérimentaux, des intensités calculées pour les composantes* et de l'intensité totale calculée I_{calc} permet de modifier le choix de certaines valeurs de départ. Il est en effet important au début de l'ajustement, que l'accord entre valeurs calculées et valeurs expérimentales ne soit pas trop mauvais (sans que l'on puisse préciser ce que veut dire « pas trop mauvais ») ; de cet écart dépend la probabilité que le minimum trouvé ne soit pas un minimum local.

Phase de détermination du meilleur ensemble de paramètres par minimisation de χ^2

- avant le début du processus de minimisation on peut bloquer un ou plusieurs paramètres à leurs valeurs de départ. Pour cela le programme demande le(s) numéro(s) d'ordre du ou des paramètres que l'on veut garder fixe(s).

Cela peut s'avérer utile lorsque plusieurs composantes se mélangent dans une même zone (on procèdera alors par approximations successives) ou lorsque on a éliminé, ce qui est parfois nécessaire, le « pic élastique » de la zone d'ajustement. Dans ce cas, il faut nécessairement fixer le numéro du canal élastique.

- durant la minimisation : le programme en visualise l'avancement sous la forme d'un graphique $\chi^2 = f(\text{nombre de cycles})$. Le processus s'arrête lorsque entre 2 cycles successifs, $\delta(\chi^2) < 10^{-5}$
- les valeurs finales des paramètres sont, d'une part affichées à l'écran et d'autre part inscrites dans un fichier réservé à cet effet :

C:\mibemol_dat\tdvmib\fitrun_theta\par_ini\dxxxxx\kwww.yyyy

xxxxx → numéro du run échantillon ;

www → angle moyen correspondant au regroupement de détecteurs (en degrés).

yyyy → numéro de l'option

C'est dans ce fichier que lors d'une exécution suivante de ce programme, on viendra lire la valeur initiale du jeu de paramètres.

Phase de visualisation et d'archivage des résultats

- une comparaison graphique entre datas expérimentaux et calculés est proposée. Les diverses composantes* du résultat calculé sont montrées. Le tracé peut-être fait au choix en portant en abscisse le numéro du canal (échelle temps de vol) ou le transfert d'énergie qu'a subi le neutron compté dans ce canal (échelle énergie).
- La « courbe des écarts » $\Delta(I) = [I_{mes} - I_{calc}]$ permet de détecter des zones où, bien que le paramètre de fit soit inférieur à 1, l'ajustement n'est pas satisfaisant (par exemple, points calculés systématiquement au dessus (en dessous) des points expérimentaux).
- Le résultat de la minimisation (paramètre de fit, valeur finale des paramètres, incertitude) est stocké (automatiquement) dans un fichier « texte » :

C:\MIBEMOL_dat\tdvmib\fitrun_theta\resultat\dxxxxx\kzz_yy.txt

xxxxx → numéro du run échantillon ;

yy_zz → numéros de la première et de la dernière colonne du regroupement de détecteurs.

La comparaison graphique entre datas expérimentaux et calculés est stockée (sur demande) dans un fichier postscript :

C:\MIBEMOL_dat\tdvmib\fitrun_theta\resultat\dxxxxx\kzz_yy_aa.ps

aa → **tv** ou **en** selon que le tracé est en échelle TdV ou énergie

* Pour la lisibilité du graphique, on est contraint de limiter à 3 le nombre de composantes représentées (+ l'intensité totale, somme des composantes calculées).

Pour toutes les options on trouvera :

Points (●) → datas expérimentaux (I_{mes})

Trait continu noir (—) → intensité totale calculée (I_{calc})

Trait discontinu vert (-.-.-) → intensité élastique + BdF + phonon

Trait discontinu rouge (-.-.-) → première composante (quasi-élastique ou inélastique)

Trait discontinu bleu (-.-.-) → deuxième composante (quasi-élastique ou inélastique)

Mode d'emploi (ici : option 102 = Elastique + Lorentzienne + BdF + Phonon Debye)

langue, language: francais (fr) ou english (en)? **fr**

Programme d'ajustement;

il faut repondre aux questions puis faire <return>

ATTENTION: le separateur entre deux valeurs est TOUJOURS " , "

Echantillon

numero(s) du spectre(s)? **17352**

une boite vide a soustraire

(oui=numero(s) run, interpolation=-1, non=return)? **17347**

desirez vous une correction d'auto-ecrantage (oui=1, non=0)? **0**

voulez-vous soustraire un spectre (oui=numero(s) sp, non=return)? **0**

voulez-vous normer au vanadium(oui=1,non=0)? **1**

numero(s) du spectre(s)? **17343**

meme boite vide a soustraire (oui=1, non=return) ? **1**

Quel est votre groupement de detecteurs (des details? faites <return>)? **65,78**

spectre de reference pour forme du pic elastique)

numero(s) du spectre(s)? **17343**

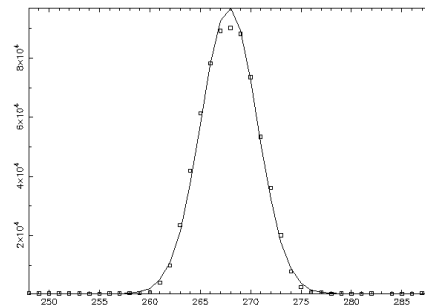
meme boite vide a soustraire (oui=1, non=return) ? **1**

54 iterations, parametres gaussienne

0.96738E+05 0.26786E+03 0.27874E+01

0.26407E+03 0.12018E+03

see elastic peak and fit (yes=1) ? **1**



Quel numero d'option voulez vous? **102**

On va vous demander la zone a ajuster

Voulez vous une visualisation prealable (oui=1,non=0)? **1**

echelle automatique(rep=0),imposee(rep=1)?

encore un graphique (non=0,oui=1)? **0**

Premier canal, dernier canal,.. (plusieurs zones possibles)?

150,450

Debye-factor <U2> (angstr**2)= **0**

valeurs de depart deja dans un fichier (oui=1,non=0)? **0**

Rentrez les 8 valeurs de depart des parametres:

une ligne, separateur " , "

7000,268,3500,0.15,1,1.80,0.01

resolution caculee = **0.07326meV**

resolution mesuree = **0.07328meV**

echelle automatique(0) ou imposee(1)? **0**

voulez-vous des barres d'erreur (oui=1, non=0)

autre graph(non=0, oui=1)? **1**

echelle automatique(0) ou imposee(1)? **1**

x minimum= 150 x maximum= 450

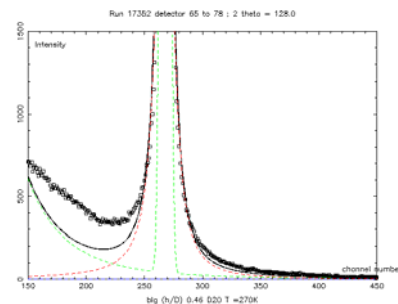
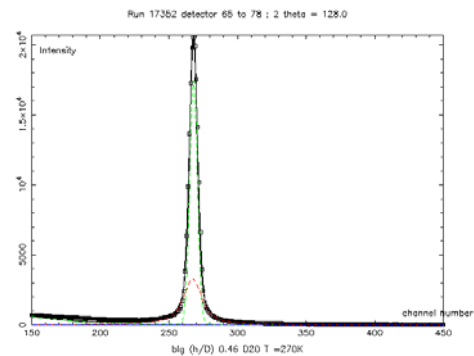
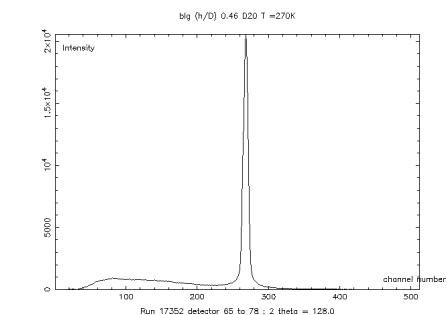
y minimum= 0.0 y maximum= 20728.1

xmin, xmax ? **150,450**

ymin, ymax ? **0,1500**

voulez-vous des barres d'erreur (oui=1, non=0)

autre graph(non=0, oui=1)? **0**



voulez vous changer un parametre (non=0,oui=1)? **1**
valeurs actuelles:

zc(1)= 0.70000E+04
zc(2)= 0.26800E+03
zc(3)= 0.35000E+04
zc(4)= 0.15000E+00
zc(5)= 0.10000E+01
zc(6)= 0.10000E+01
zc(7)= 0.80000E+02
zc(8)= 0.10000E-01

pour modifier un parametre donnez son numero et sa nouvelle valeur

pour terminer faire return

n , zc(n)? **7,150**

n , zc(n)? **8,.03**

n , zc(n)?

echelle automatique(0) ou imposee(1)? **1**

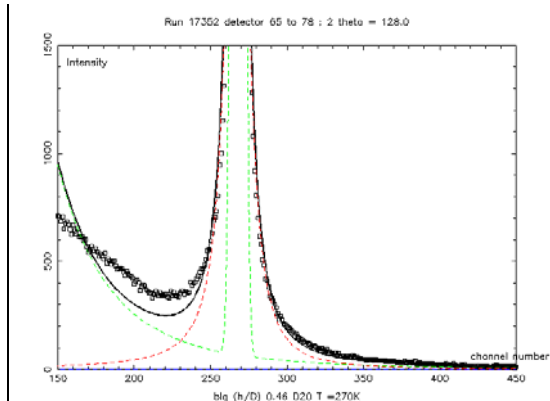
memes limites que trace precedent (oui=1, non=0)? **1**

voulez-vous des barres d"erreur (oui=1, non=0)

autre graph(non=0, oui=1)? **0**

voulez vous changer un parametre (non=0,oui=1)? **0**

voulez garder les valeurs modifiees (oui=1,non=0)? **1**



valeurs initiales parametres:

c(1) = 7000.0
c(2) = 268.00
c(3) = 3500.0
c(4) = 0.15000
c(5) = 1.0000
c(6) = 1.0000
c(7) = 150.00
c(8) = 0.30000E-01
bloquer certaines ?

numeros separes par virgule; <return>=tout libre :

debut ajustement khi2 = 0.34819E+03

RESULT

blg (h/D) 0.46 D20 T=270K

Run N° 17352 Run 17352 detector 65 to 78 ; 2 theta = 128.0

Option 102 Elast => gauss; T= 267.9 K

Ajust entre 150 et 450 sur 301 canaux

lambda = 5.2 Å; angle = 128.0 deg; q0 = 2.17 Å⁻¹

resolution mesuree = 73. ; calculee = 73. micro-eV

parametre de fit 0.21

	stat 90%	gradient
-c(1)= 0.74309E+04 plus ou moins	0.290E+03	0.107E-09
-c(2)= 0.26810E+03 plus ou moins	0.255E-01	-0.824E-07
-c(3)= 0.29313E+04 plus ou moins	0.259E+02	-0.207E-09
-c(4)= 0.12403E+00 plus ou moins	0.322E-02	-0.420E-05
-c(5)= -0.18370E+02 plus ou moins	0.139E+00	-0.594E-08
-c(6)= -0.39646E+02 plus ou moins	0.300E+00	-0.180E-08
-c(7)= 0.16739E+04 plus ou moins	0.177E+02	-0.123E-09
-c(8)= 0.31880E+00 plus ou moins	0.171E-02	-0.582E-06

Trace en echelle TdV (1) ou energie (2) ? **1**

echelle automatique(0) ou imposee(1)? **0**

voulez-vous des barres d"erreur (oui=1, non=0)

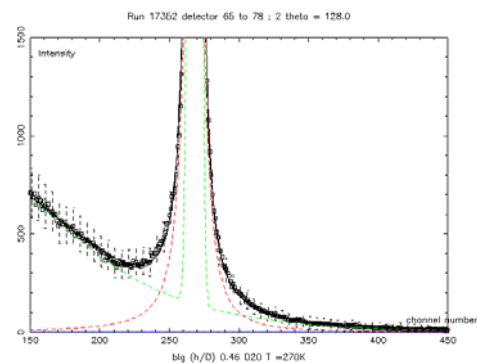
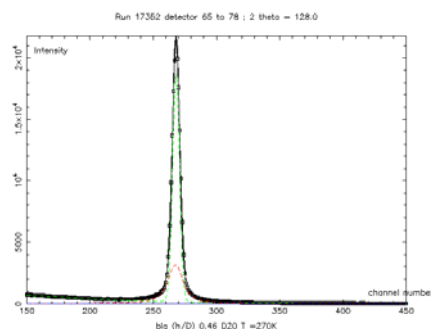
autre graph(non=0, oui=1)? **1**

echelle automatique(0) ou imposee(1)? **1**

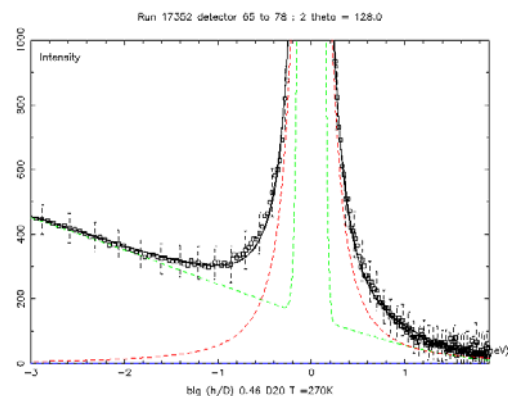
memes limites que trace precedent (oui=1, non=0)? **1**

voulez-vous des barres d"erreur (oui=1, non=0)? **1**

autre graph(non=0, oui=1)? **0**



changer TdV <=> energie (non(0), TdV(1), energie(2))? **2**
 echelle automatique(0) ou imposee(1)? **1**
 x minimum= -6.48 x maximum= 1.95
 y minimum= -14.5 y maximum= 21801.5
 xmin, xmax ? **-3,1.9**
 ymin, ymax ? **0,1000**
 voulez-vous des barres d'erreur (oui=1, non=0)**1**
 autre graph(non=0, oui=1)?
 changer TdV <=> energie (non(0), TdV(1), energie(2))?
 cbe des ecarts (TdV)(non=0, oui=1)?**0**
 Modifier un parametre, puis nouvel ajustement (oui=1,non=0)?
 garder un fichier graphique(non=(0), TdV (1), energie(2)) ? **2**
 enregistre dans le fichier
 \MIBEMOL_dat\tdvmib\fitrun_theta\resultat\d17352\k65_78_en.ps/PS
 fin (0), autre groupe et meme run (1), autre run et meme groupe (2))?



Retour à : [Liste des programmes disponibles](#)

fitrun q

Fonction de diffusion $S(Q, \omega)$ à $|Q|$ constant :

Interpolation des données et ajustement.

A partir des données d'un « run T. d. V. », c'est à dire enregistrée en fonction du Temps de Vol (t_v) à « angle de diffusion » ϑ_d constant [$S(\vartheta_d, t_v)$] ce programme « recalcule » le résultat [$S(|Q|, \omega)$] de la même mesure faite à $|Q|$ constant. Le « run à $|Q|$ constant » obtenu est écrit dans une série de fichiers ASCII ; un ajustement à une forme analytique est proposé.

Méthode.

Le « run » expérimental est soustrait du container (s'il y a lieu) et/ou d'un « tampon » (s'il y a lieu) ; les intensités dans les différents détecteurs (ou groupes de détecteurs) sont normalisées entre elles par le « run » vanadium et corrigées de la variation d'efficacité avec l'énergie du neutron détecté ; enfin, une correction « auto écrantage » est proposée.

Puis pour chaque valeur de ($|Q|, \omega$) on calcule le couple ($\vartheta_d ; t_v$) correspondant. On procède alors à une double interpolation sur les données expérimentales précédentes :

- D'abord pour chaque détecteur (ou groupe de détecteurs) le nombre de neutrons arrivé au temps $t_v \pm \Delta/2$ (Δ = largeur d'un canal) est calculé par une méthode d'interpolation sur 6 points (± 3 autour du canal le plus proche de t_v , formule de « Everett »).
- Puis dans la table $I(\vartheta_i, t_v)$ (ϑ_i position angulaire du détecteur i , $i \in [1, N]$, N = nombre de détecteurs (ou de groupements)), après élimination des points « aberrants » et/ou des pics de bragg (s'il y a lieu), on calcule, à nouveau par une interpolation sur 6 points (méthode de Aitkins !) le nombre d'impulsions qui aurait été mesurée dans le canal t_v d'un détecteur « virtuel » situé à l'angle ϑ_d .

Remarques.

- Afin de guider l'expérimentateur, le programme indique une plage en $|Q|, \omega$ « conseillée ». Ces valeurs extrêmes ($|Q_1|, |Q_2| ; \omega_1, \omega_2$) correspondent aux limites inférieures et supérieures pour lesquels, compte tenu des paramètres instrumentaux (position angulaire des détecteurs, longueur d'onde incidente, retard, ...), les données expérimentales sont complètes.
Autrement dit, pour toute valeur de $|Q| \in [|Q_1|, |Q_2|]$, toutes les intensités $I(|Q|, \omega)$ pourront être calculées par interpolation si $\omega \in [\omega_1 ; \omega_2]$; à l'extérieur de ces limites, une ou plusieurs « extrapolation » seront nécessaires.
- La soustraction d'un container peut se faire :
 - 1) soit à partir du run container mesuré ;
 - 2) soit en appliquant une correction de température (solide de Debye) à partir d'un run container mesuré à une autre température ;
 - 3) soit enfin en « reconstruisant » le résultat à la température T par interpolation linéaire entre des mesures faites aux températures T_1 et T_2 ($T_1 < T < T_2$).

Retour à : [Liste des programmes disponibles](#)

Liste options fitrun

N.B. : Dans le tableau ci dessous, lorsque le chiffre des unités d'une option est suivi d'un « astérisque (*) », les options ayant un chiffre des unités 1 et 2 et 3 existent aussi avec la même signification que pour les options 100, 101, 102, 103.

OPTION			CONTENU	Nbe Coeff
C	D	U		
1	0	0	$Fd + L_{3D}(\Delta) + (BF_{incl})$	2+2+(2)
		1	$Fd + L_{3D}(\Delta) + (BF_{incl} + P_h \text{ approx})$	2+2+(2+1)
		2	$Fd + L_{3D}(\Delta) + (BF_{incl} + P_h \text{ Debye})$	2+2+(2+2)
		3	$Fd + L_{3D}(\Delta) + (BF_{incl} + Osc_amorti)$	2+2+(2+3)
	1	0	$Fd + L_{3D}(\Delta) + (BF_{incl}) + Gauss(inel)$	2+2+(2)+3
	2	0*	$Fd + F_{MAG}(Q)*L_{3D}(\Delta) + (BF_{incl})$	2+3+(2+x)
	8	0	$Fd + a/\omega^b + (BF_{incl})$	2+2+(2)
2	0	0*	$Fd + L_{3D}(\Delta_1) + (BF_{incl}) + L_{3D}(\Delta_2)$	2+2+(2)+2+(x)
	1	0	$Fd + L_{3D}(\Delta_1) + (BF_{incl}) + L_{3D}(\Delta_2) + Gauss(inel)$	2+2+(2)+2+3
	2	0*	$Fd + F_{1MAG}(Q)*L_{3D}(\Delta_1) + (BF_{incl}) + F_{2MAG}(Q)*L_{3D}(\Delta_2)$	2+2+(2)+2+(x)
3	0	0*	$Fd + L_{3D}(DQ^2) + (BF_{incl})$	2+2+(2+x)
	1	0	$Fd + L_{1D}(DQ^2) \text{ (avec moyenne de poudre)} + (BF_{incl})$	2+2+(2)
4	0	0*	$Fd + L_{3D}(D_1Q^2) + (BF_{incl}) + L_{3D}(D_2Q^2)$	2+2+(2)+2+(x)
5	0	0*	$Fd + L_{3D}(DQ^2) + (BF_{incl}) + L_{3D}(\Delta)$	2+2+(2)+2+(x)
	1	0*	$Fd + L_{1D}(DQ^2) + (BF_{incl}) + L_{3D}(\Delta)$	2+2+(2)+2+(x)
6	0	0*	$Fd + L_{3D}(A_1, DQ^2) + (BF_{incl}) + L_{3D}[A_2, (DQ^2 + \Delta)]$	2+2+(2)+2+(x)
7	0	0*	$Fd + L_{3D}(kA_1, DQ^2) + (BF_{incl}) + L_{3D}[k(1-A_1), (DQ^2 + \Delta)]$	2+2+(2)+2+(x)
8	0	0*	$Fd + TF(exp_étirée) + (BF_{incl})$	2+3+(2+x)
	1	0	$Fd + TF(exp_étirée) + (BF_{incl}) + L_{3D}(\Delta)$	2+3+(2)+2
9	0	0	$Fd + L_{3D}(\Delta_1) + (BF_{incl}) + L_{3D}(\Delta_2) + L_{3D}(\Delta_3)$	2+2+(2)+2+2
	1	0	$Fd + Distrib(lorentz) + (BF_{incl})$	2 + 3 + (2)

OPTION			<i>CONTENU</i>	Nbe Coeff
C	D	U		
0	1	0	$Fd + \text{Gauss}(\text{inel} + \text{et } -) + (BF_{\text{incl}})$	2+3+(2)
		1	$Fd + \text{Gauss}(\text{inel} +) + (BF_{\text{incl}})$	2+3+(2)
	2	0	$Fd + \text{Gauss}_1(+/-) + (BF_{\text{incl}}) + \text{Gauss}_2(+/-)$	2+3+(2)+3
	3	0	$Fd + \text{Gauss}_1 + (BF_{\text{incl}}) + \text{Gauss}_2 + \text{Gauss}_3$	2+3+(2)+3+3
	5	0	$Fd + \text{Osc_amorti} + (BF_{\text{incl}})$	2+3+(2)
	6	0	$Fd + \text{Osc_amorti}_1 + (BF_{\text{incl}}) + \text{Osc_amorti}_2$	2+3+(2)+3

Attention : L'ordre, et le nombre des coefficients sont donnés dans la colonne de droite.
Pour les options 'astérisquées', les nombres entre parenthèses représentent le « BF_{incl} » (2 coeff) et les « **Ph approx** » ($x = 1, 2$ ou 3 coeff) à leurs places respectives.

Notation :

$Fd \rightarrow$ Pic élastique

$BF_{\text{incl}} \rightarrow$ Bruit de fond (ou ligne de base) « incliné »

$L3D(\square) \rightarrow$ Lorentzienne 3D de largeur constante

$L3D(DQ2) \rightarrow$ Lorentzienne 3D de largeur DQ2

$L3D(DQ2 + \Delta) \rightarrow$ Convolution de 2 Lorentziennes précédentes

$\text{Distrib}(\text{lorentz}) \rightarrow$ Somme d'une distribution continue et uniforme de Lorentziennes

$L1D(DQ2) \rightarrow$ Lorentzienne 1D de largeur DQ2 avec moyenne de poudre

$\text{Gauss}(\text{inel}) \rightarrow$ Pic inélastique gaussien ; maximum en ω_1 ; écart type σ_1

$\text{Osc_amorti} \rightarrow$ Oscillateur à la fréquence ω_1 coefficient d'amortissement Γ_1

$TF(\text{exp_étirée}) \rightarrow$ Relaxation « lente »

$\text{Ph approx} \rightarrow$ Approximation des phonons à faible énergie (\ll énergie de Debye)

$\text{Ph Debye} \rightarrow$ Spectre des phonons dans un solide de Debye

Signification des notations

Nombre de paramètres ajustés

Dans les deux fonctions qui suivent, il n'y a pas d'échange d'énergie explicite entre le neutron et l'échantillon. Soit parce-qu'il s'agit de diffusion strictement « élastique » ou inélastique non résolue par l'appareil (**Fd**), soit parce qu'il s'agit de la prise en compte de manière totalement phénoménologique de l'ensemble des composantes très inélastiques (hors de la fenêtre d'observation) et d'un bruit de fond « non corrélé » (**BF_{incl}**). Il n'y a donc pas intégration de la fonction de diffusion sur tout l'intervalle de la résolution. La fonction ajustée ne fait alors intervenir que le numéro **n** du canal de temps de vol

Fd → Pic élastique

2 paramètres ajustables **A**, **n₀**

$$Fd = \left(A / \Delta \sqrt{2\pi} \right) \exp \left[- \left(\frac{n - n_0}{\Delta \sqrt{2}} \right)^2 \right]$$

Le paramètre Δ a été ajusté auparavant sur un spectre «référence» (en général un vanadium)

Retour à : [Liste_options_fitrun](#)

BF_{incl} → Bruit de fond (ou ligne de base) « incliné »

La ligne de base est une droite qui joint les deux extrémités de l'intervalle donné.

2 paramètres ajustables γ et α

$$BF_{incl} = \left(\frac{1}{N_{sup} - N_{inf}} \right) [\gamma (N_{sup} - n) + \alpha]$$

α = ordonnée de la droite pour le canal supérieur N_{sup}

γ = différence des ordonnées entre canal inférieur N_{inf} et supérieur N_{sup} (opposé de la pente)

Retour à : [Liste_options_fitrun](#)

Lorsqu'on mesure un changement d'énergie du neutron, l'intensité **I(Q, n)** recueillie dans le canal de temps de vol **n** est une « convolution » entre la fonction de diffusion **S(Q, ω)** et la résolution en énergie de ce canal **R(n, ω)**

$$I(Q, n) = \int_{-e_0}^{\infty} S(Q, \omega) R(n, \omega) d\omega$$

La fonction de diffusion (« Scattering function ») d'un neutron lent,

$$S(Q, \omega) = P(T, \omega) \times J(Q, \omega)$$

est le produit d'un terme qui ne dépend que de la température et de la statistique,

$$P(T, \omega) = kT \frac{\beta \hbar \omega}{\exp(\beta \hbar \omega) - 1} \quad ; \quad \beta = 1/kT$$

et d'une « Intensité de diffusion »

$$J(Q, \omega)$$

qui ne dépend que de l'interaction entre le neutron et son diffuseur. Les expressions qui suivent sont les différentes formes analytiques, selon la physique en jeu, que prend ce terme.

L_{3D}(Δ) → Lorentzienne 3D de largeur constante

2 paramètres ajustables **A, Δ**

$$L_{3D}(\Delta) = \left(\frac{A}{\pi} \right) \left[\frac{\Delta}{(\Delta^2 + \omega^2)} \right]$$

Retour à : [Liste_options_fitrun](#)

L_{3D}(DQ²) → Lorentzienne 3D de largeur DQ²

2 paramètres ajustables **A, D**

$$L_{3D}(DQ^2) = \left(\frac{A}{\pi} \right) \left[\frac{DQ^2}{((DQ^2)^2 + \omega^2)} \right]$$

Retour à : [Liste_options_fitrun](#)

L_{3D}(DQ² + Δ) → Convolution de 2 Lorentziennes précédentes

3 paramètres ajustables **A, D, Δ**

$$L_{3D}(DQ^2 + \Delta) = \left(\frac{A}{\pi} \right) \left[\frac{DQ^2 + \Delta}{((DQ^2 + \Delta)^2 + \omega^2)} \right]$$

Retour à : [Liste_options_fitrun](#)

L_{1D}(DQ²) → Lorentzienne 1D de largeur DQ² avec moyenne de poudre

2 paramètres ajustables **A, D**

$$L_{1D}(DQ^2) = \left(\frac{A}{\pi} \right) \int_0^\pi \sin(\theta) \left[\frac{DQ^2 \cos^2(\theta)}{((DQ^2 \cos^2(\theta))^2 + \omega^2)} \right] d\theta$$

Retour à : [Liste_options_fitrun](#)

Gauss(inel) → Pic inélastique gaussien ; maximum en ω_1 ; écart type σ_1

3 paramètres ajustables **A, ω_1 , σ_1**

$$\text{Gauss}(\pm) = A \left\{ \exp \left[-\frac{(\omega - \omega_1)^2}{2\sigma_1^2} \right] + \exp \left[-\frac{(\omega + \omega_1)^2}{2\sigma_1^2} \right] \right\}$$

Retour à : [Liste_options_fitrun](#)

Osc_amorti → Oscillateur à la fréquence ω_1 coefficient d'amortissement Γ_1

3 paramètres ajustables **A, ω_1 , Γ_1**

$$\text{OSC_amorti} = A \left\{ \frac{\Gamma_1 \omega_1^2}{[(\omega^2 - \omega_1^2)^2 + (\Gamma_1 \omega_1)^2]} \right\}$$

Retour à : [Liste_options_fitrun](#)

Distrib(lorentz) → Somme d'une distribution continue et uniforme de Lorentziennes

dont les largeurs (hwhm) vont de Δ_1 à Δ_2 .

3 paramètres ajustables **A, Δ_1 , Δ_2**

$$\text{Distrib(lorentz)} = \frac{A}{(\Delta_2 - \Delta_1)} \int_{\Delta_1}^{\Delta_2} \left(\frac{\delta}{\delta^2 + \omega^2} \right) d(\delta)$$

Retour à : [Liste_options_fitrun](#)

TF(exp étirée) → Relaxation « lente »

3 paramètres ajustables A , $\Lambda=1/\tau$,

$$J(\omega) = A \int_0^{\infty} e^{-i\omega t} \exp\left[-\left(\frac{t}{\tau}\right)^B\right] dt \approx \frac{1}{\omega} \operatorname{Im}\left[\frac{A}{1+i(\omega/\Lambda)}\right]^B = \frac{A}{\omega} \frac{\sin[B \times \arctan(\omega/\Lambda)]}{[1+(\omega/\Lambda)^2]^{B/2}}$$

Retour à : [Liste_options_fitrun](#)

Ph approx → Approximation des phonons à faible énergie (<< énergie de Debye)

1 paramètre ajustable A

$$\text{Ph_approx} = A(kT)$$

Retour à : [Liste_options_fitrun](#)

Ph Debye → Spectre des phonons dans un solide de Debye

2 paramètres ajustables A , U^2

$$\text{Ph_debye} = \left(\frac{A}{\beta}\right) \left(\frac{Q}{Q_0}\right)^2 \left[\exp(-Q^2 U^2)\right] \left[\frac{\beta \hbar \omega}{\exp(\beta \hbar \omega) - 1}\right]; \quad \beta = \frac{1}{kT}$$

Retour à : [Liste_options_fitrun__](#)

Intensités intégrées

Le programme calcule les coefficients du meilleur ajustement de la forme analytique choisie au spectre expérimental. Les valeurs finales permettent de calculer indépendamment chacune des aires partielles I_P . Compte tenu des coefficients introduits par le calcul, on a :

- Intensité intégrée sous le pic élastique :

$$I_{el} = A_{el} \times (\text{channel width in } \mu\text{s}) \quad (1)$$

- Intensité intégrée sous une Lorentzienne quasi-élastique :

$$I_{QE} = A_{QE} \times (kT)_{\text{meV}} \quad (2)$$

D'autre part, l'intensité expérimentale intégrée sur la zone d'ajustement

$$J = \sum_{n \min}^{n \max} j(n) \quad (3)$$

est calculée pour chaque composante.

En général, $J_{el} \approx I_{el}$ car le pic élastique est tout entier dans l'intervalle ;

$J_{QE} < I_{QE}$, la forme analytique s'étendant jusqu'à l'infini.