

GIWAXS-Viewer使用说明

By 黄剑耀

更新地址:

百度网盘: <https://pan.baidu.com/s/1TIP4NTIn2Tf3MxHLwq9MNA?pwd=0000>

阿里云: <https://www.aliyundrive.com/s/Gw2CmNNK6vw>

使用请引用作者相关文献或者代码网址:

Jianyao Huang, GIWAXS-Viewer, <https://gitee.com/swordshinehjy/giwaxs-script>

目录

- [简介](#)

- [校准参数](#)

- [作图参数](#)

[例6：批量处理](#)

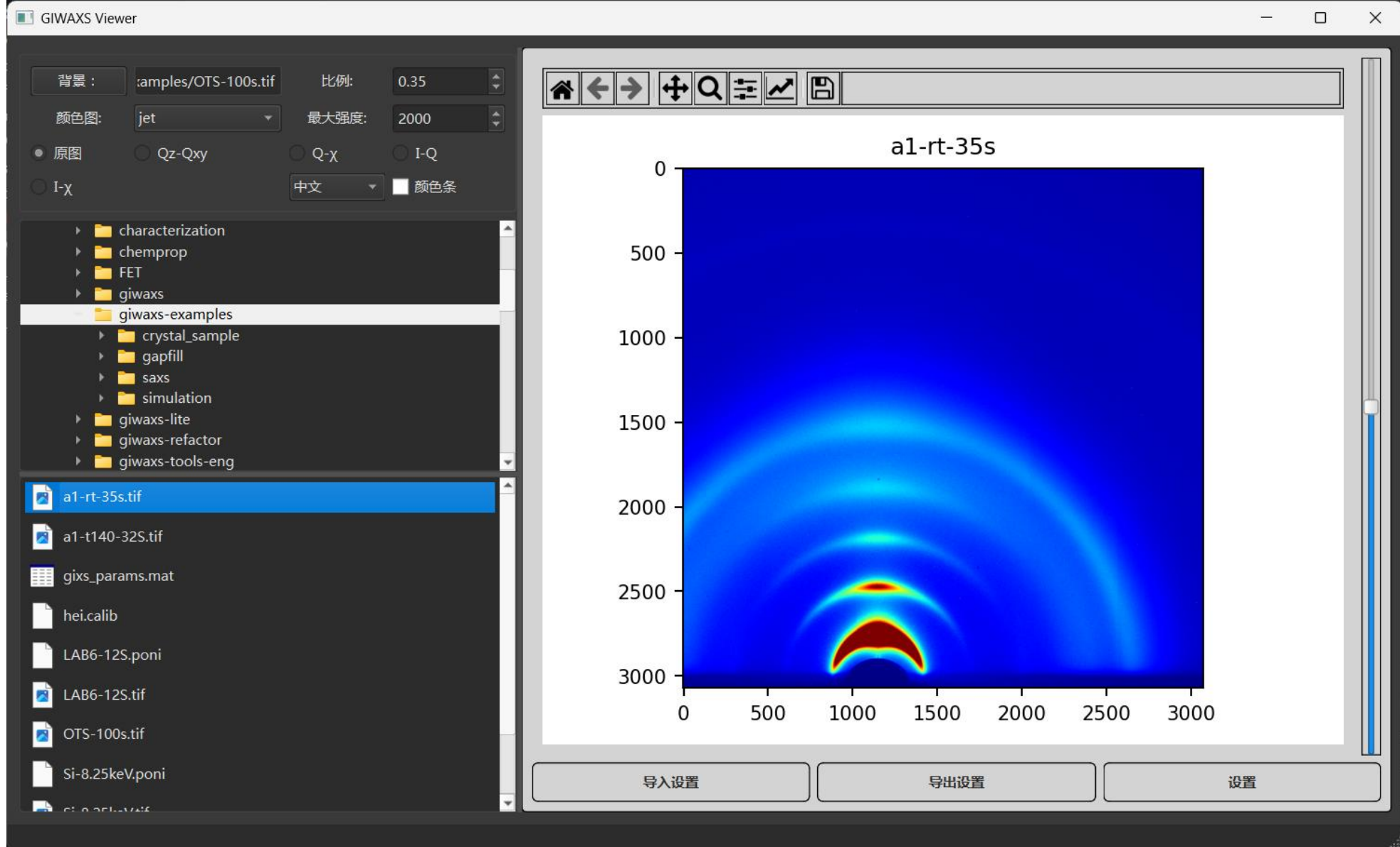
[例7：一维积分和极图](#)

[例8：临界角等参数估算](#)

[例9：模拟GIWAXS](#)

[例10：模拟调整参数后的检测范围](#)

[例11：拼合图像消除检测器间隙](#)



- GIWAXS-Viewer是用Python3写的软件，用于GIWAXS图片的快速预览，可与GIWAXS-Tools配合使用
- 可以用过标样校准参数
- 所用的Python包为：fabio, matplotlib, numpy, scipy, PySide6
- 简化了参数，删去了部分校正方法，如立体角、偏正校正等，**主要仅用于预览**

- 使用简介:

- 设置参数后，点击对应的GIWAXS原始数据，即可快速预览结果

- 可以设置背景

- 可以设置颜色图和显示高度坐标的颜色条

- 有五种预览模式：原图、 Q_z - Q_{xy} (最常见的二维图)、 Q - χ (用于积分成一维图的原始二维图)、 I - Q (最常见的积分一维图)、 I - χ (另一种积分，用于查看取向)

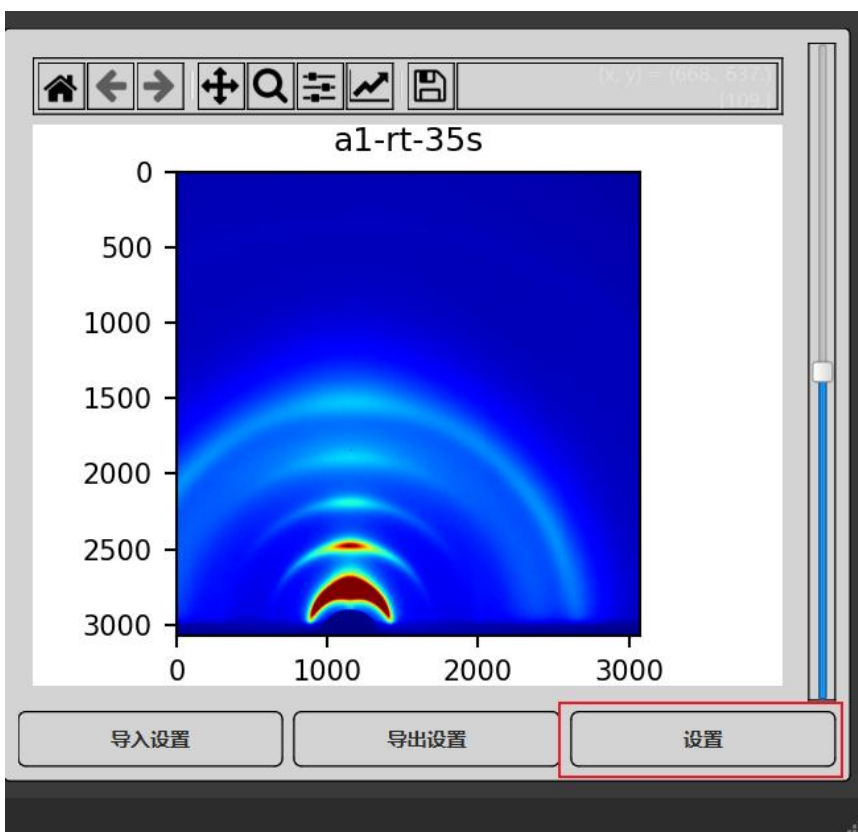
- 可以使用标样对实验参数进行校准，方法和GIWAXS-Tools相同

- Windows用户如果无法打开，请重装一下 **Microsoft Visual C++ Redistributable**

- <https://learn.microsoft.com/en-us/cpp/windows/latest-supported-vc-redist?view=msvc-170#latest-microsoft-visual-c-redistributable-version>

校准参数

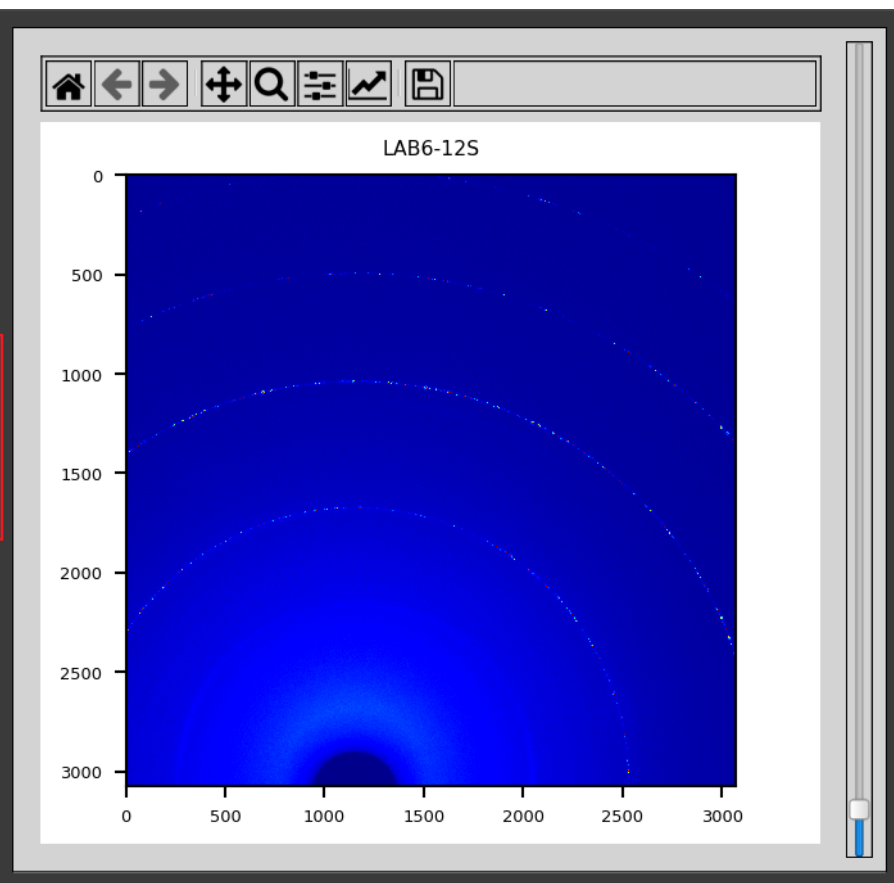
- 点击右下角“设置”按钮，包括作图参数和实验参数，可以通过标样来校准实验参数
- 方法和GIWAXS-Tools完全一致，可以参考GIWAXS-Tools的相关手册



incidence (°)	0.2	rotation (°)	0.0
q_res (Å ⁻¹)	0.0025	χ_res (°)	0.1
qxy_min (Å ⁻¹)	-0.5	qxy_max (Å ⁻¹)	2.0
qz_min (Å ⁻¹)	0.0	qz_max (Å ⁻¹)	2.0
q_min (Å ⁻¹)	0.2	q_max (Å ⁻¹)	2.0
χ_min (°)	-90.0	χ_max (°)	90.0
bcx	1149.81433152390	bcy	3040.90323259720
pixel (mm)	0.0732421875	dist (mm)	325.848532375474
hTilt (°)	-0.3525756934668	vTilt (°)	0.66285028402056
energy (keV)	10.0	最大强度	801

标样:	D:/code/giwxaxs-e/	LaB6	4.15682600;2.9393
衍射环:	4	阈值:	150
<input type="checkbox"/> 遮罩高点:	10000	显示2θ:	0.00600
<input type="checkbox"/> 无倾斜	自动校准	手动校准	取点校准

OK Cancel



bcx	1149.81433152390	bcy	3040.90323259720
pixel (mm)	0.0732421875	dist (mm)	325.848532375474
hTilt (°)	-0.3525756934668	vTilt (°)	0.66285028402056
energy (keV)	10.0	最大强度	801

标样:	D:/code/giwxaxs-e>	LaB6	4.15682600;2.9393
衍射环:	4	阈值:	150
<input type="checkbox"/> 遮罩高点:	10000	显示2θ:	0.00600
<input type="checkbox"/> 无倾斜	自动校准	手动校准	取点校准

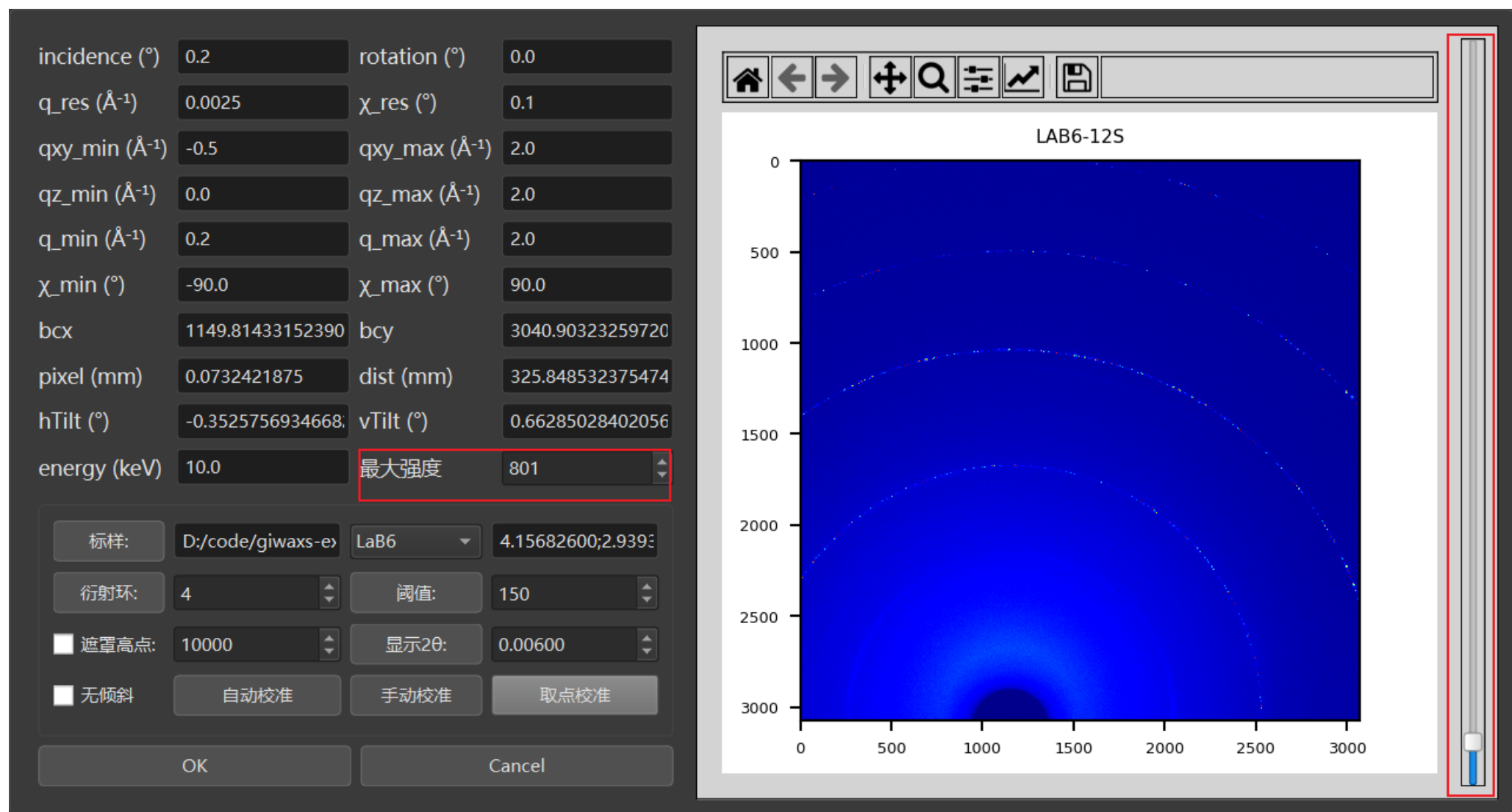
- **红框为必须手动填写的项**

- pixel为像素大小，以mm为单位；常见的检测器Mar225为0.0732422 mm，Pilatus为0.172 mm，Eiger为0.075 mm
- Energy为X光能量，以keV为单位，同步辐射硬X射线一般为几keV到几十keV，请自行问清数值后填写
- 如果只知道波长，可以自行换算 $\text{energy} = 12.3984198433 / \text{wavelength}$

- **文本框设置了数字格式，请将输入法切换成英文标点，中文标点无法打出小数点，会造成输入无响应**
- **绿色框的hTilt和vTilt是检测器倾斜角，如果是无倾斜的，请改成0，并且在校准标样的时候勾选“无倾斜”模式**

标样:	D:/code/giwxaxs-e>	LaB6	4.15682600;2.9393
衍射环:	4	阈值:	150
<input type="checkbox"/> 遮罩高点:	10000	显示2θ:	0.00600
<input type="checkbox"/> 无倾斜	自动校准	手动校准	取点校准
OK		Cancel	

- 如果没有现成的实验参数，则必须手动导入标样校准
- 点击蓝框的“标样”，选择标样文件
- 选择对应的标样种类，右侧为衍射环的d-spacing，单位为埃，如果是罕见自用标样，可以选择Custom，并手动填写d-spacing数值（格式和其他的要一致，用分号隔开，至少要填两个环的数值）



- 最大强度的数值和右侧滑动条都可以用来调整颜色标尺最大值，可以略微调低此数值或往下拉滑动条，使得衍射环更清晰

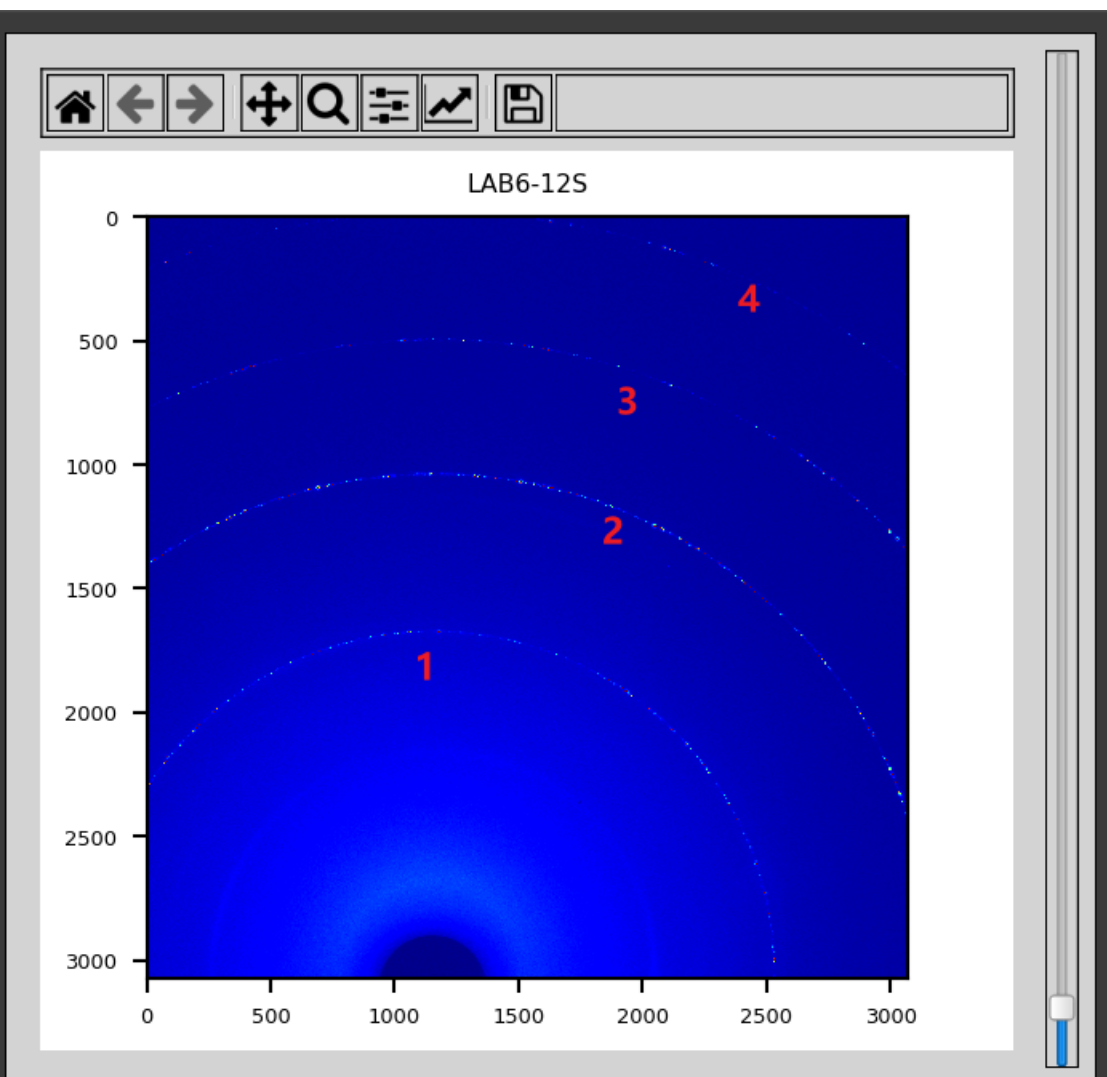
- 自动校准

- 除了前几页的必填项，自动校准需要设置比较准确的衍射环数量，其他都不用改，自动拟合无需其他参数
- 自动校准的精度不可控，有随机因素，请检查校准后的理论衍射环位置是否和实验值对上

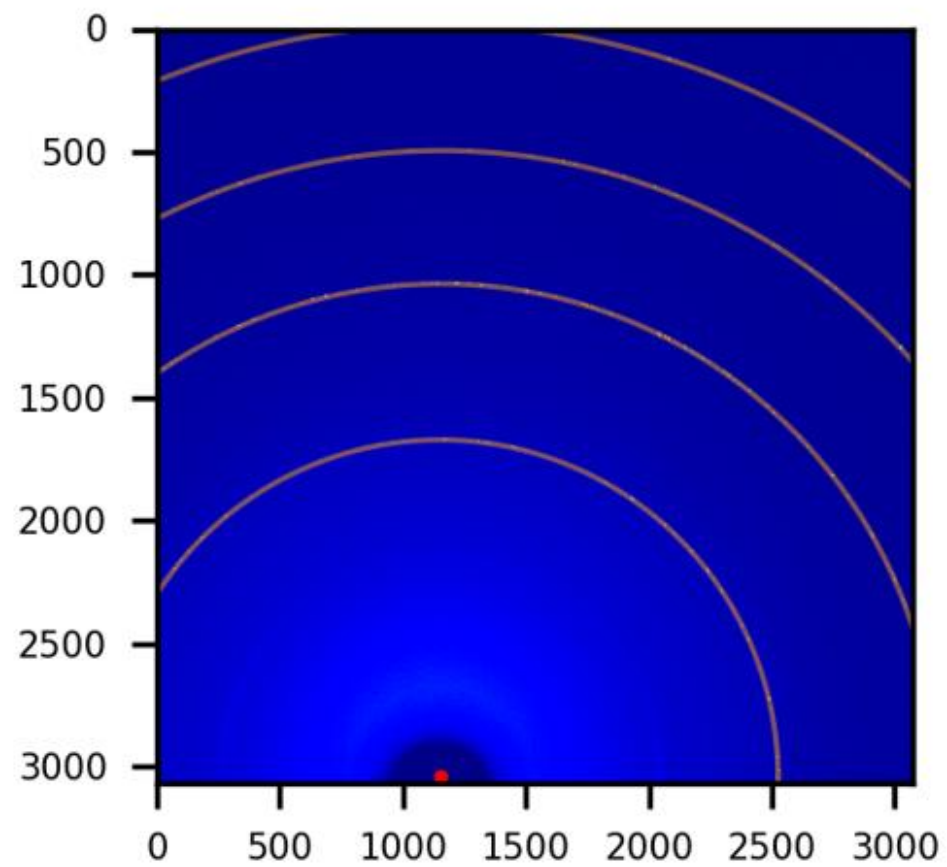
incidence (°)	0.2	rotation (°)	0.0
q_res (Å ⁻¹)	0.0025	χ_res (°)	0.1
qxy_min (Å ⁻¹)	-0.5	qxy_max (Å ⁻¹)	2.0
qz_min (Å ⁻¹)	0.0	qz_max (Å ⁻¹)	2.0
q_min (Å ⁻¹)	0.2	q_max (Å ⁻¹)	2.0
χ_min (°)	-90.0	χ_max (°)	90.0
bcx	1149.81433152390	bcy	3040.90323259720
pixel (mm)	0.0732421875	dist (mm)	325.848532375474
hTilt (°)	-0.3525756934668	vTilt (°)	0.66285028402056
energy (keV)	10.0	最大强度	801

标样:	D:/code/giwxaxs-e>	LaB6	4.15682600;2.9393
衍射环:	4	阈值:	150
<input type="checkbox"/> 遮罩高点:	10000	显示2θ:	0.00600
<input type="checkbox"/> 无倾斜	自动校准	手动校准	取点校准

OK	Cancel
----	--------

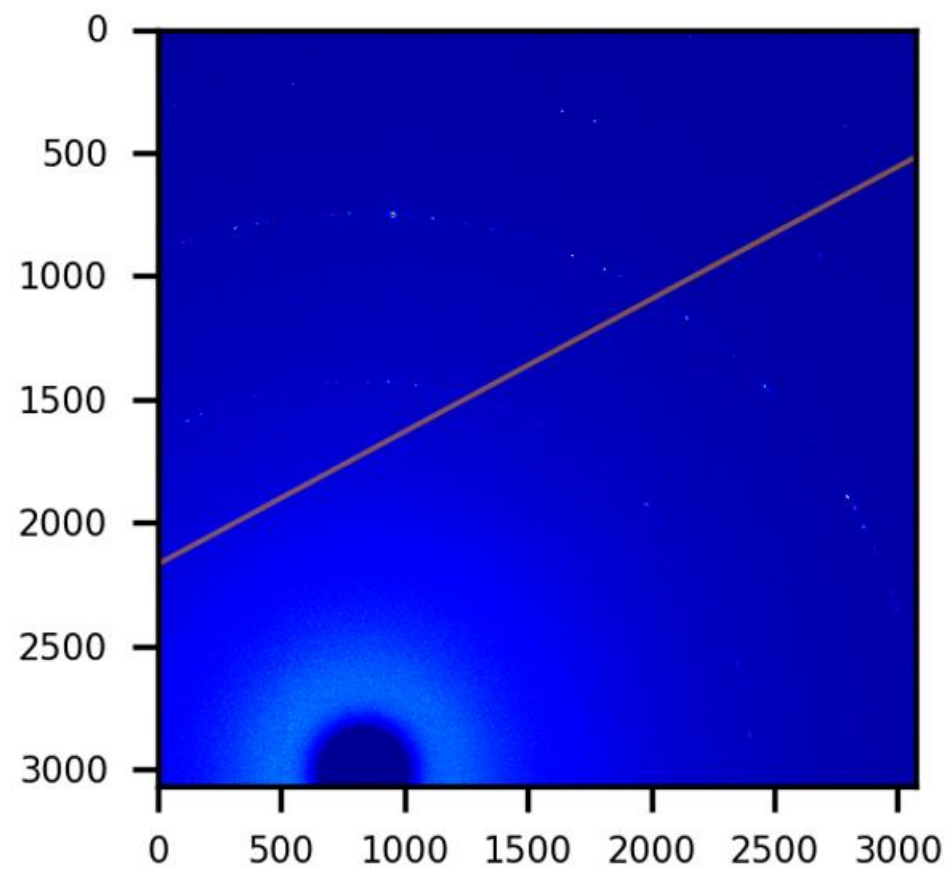


LAB6-12S



成功

LAB-10S



失败

• 手动校准

- 手动校准最复杂，但最准确，重要的参数设置为阈值和2theta范围，点击对应按钮可以查看当前的效果
- 选择手动校准可以考虑先校准前1-2个环，在逐步提高衍射环数量

incidence (°)	0.2	rotation (°)	0.0
q _{res} (Å ⁻¹)	0.0025	χ _{res} (°)	0.1
qxy _{min} (Å ⁻¹)	-0.5	qxy _{max} (Å ⁻¹)	2.0
qz _{min} (Å ⁻¹)	0.0	qz _{max} (Å ⁻¹)	2.0
q _{min} (Å ⁻¹)	0.2	q _{max} (Å ⁻¹)	2.0
χ _{min} (°)	-90.0	χ _{max} (°)	90.0
bcx	1149.81433152390	bcy	3040.90323259720
pixel (mm)	0.0732421875	dist (mm)	325.848532375474
hTilt (°)	-0.3525756934668	vTilt (°)	0.66285028402056
energy (keV)	10.0	最大强度	801

标样: D:/code/giwxas-e) LaB6 4.15682600;2.9393

衍射环: 4

阈值: 150

☐ 遮罩高点: 10000

显示2θ: 0.00600

☐ 无倾斜









自动校准

手动校准

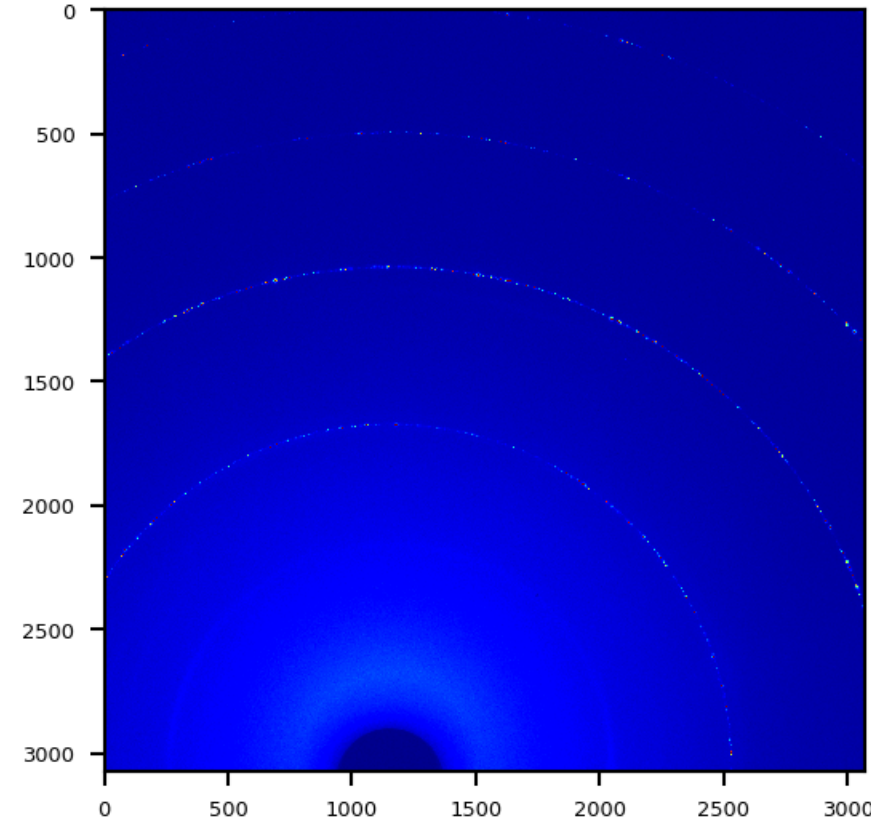
取点校准

OK

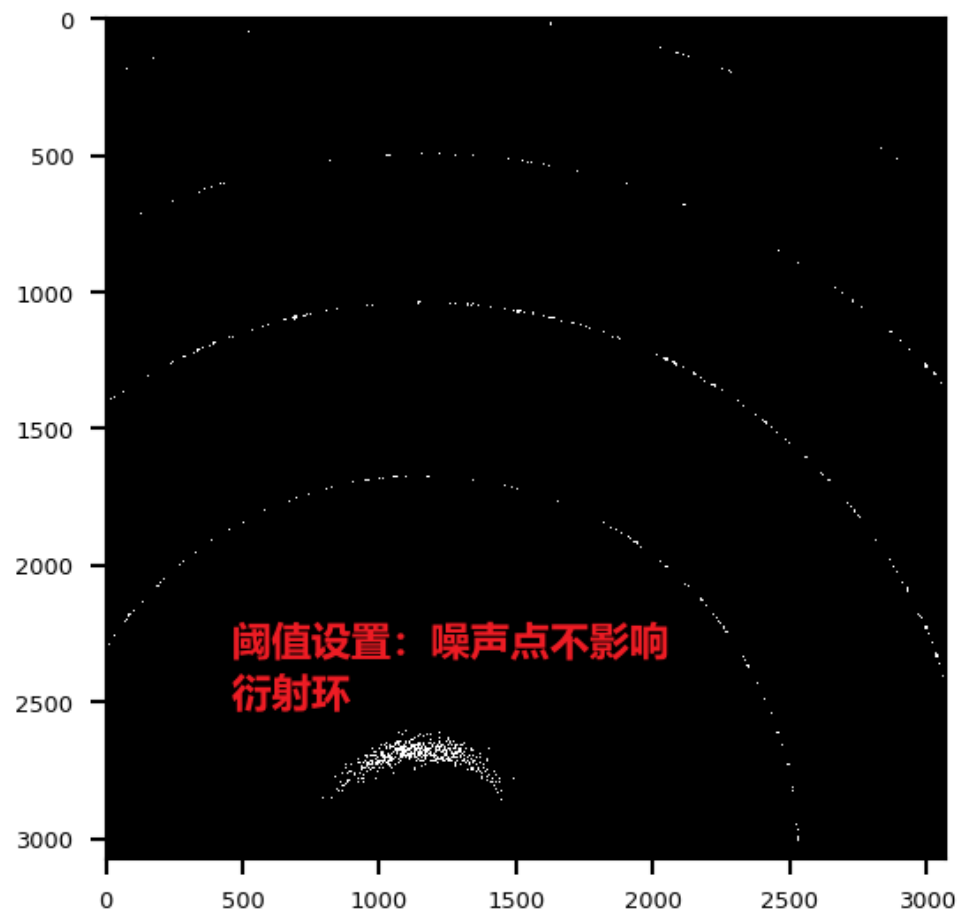
Cancel



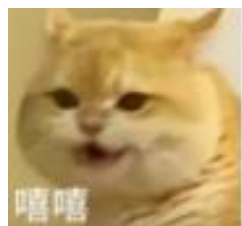
LAB6-12S



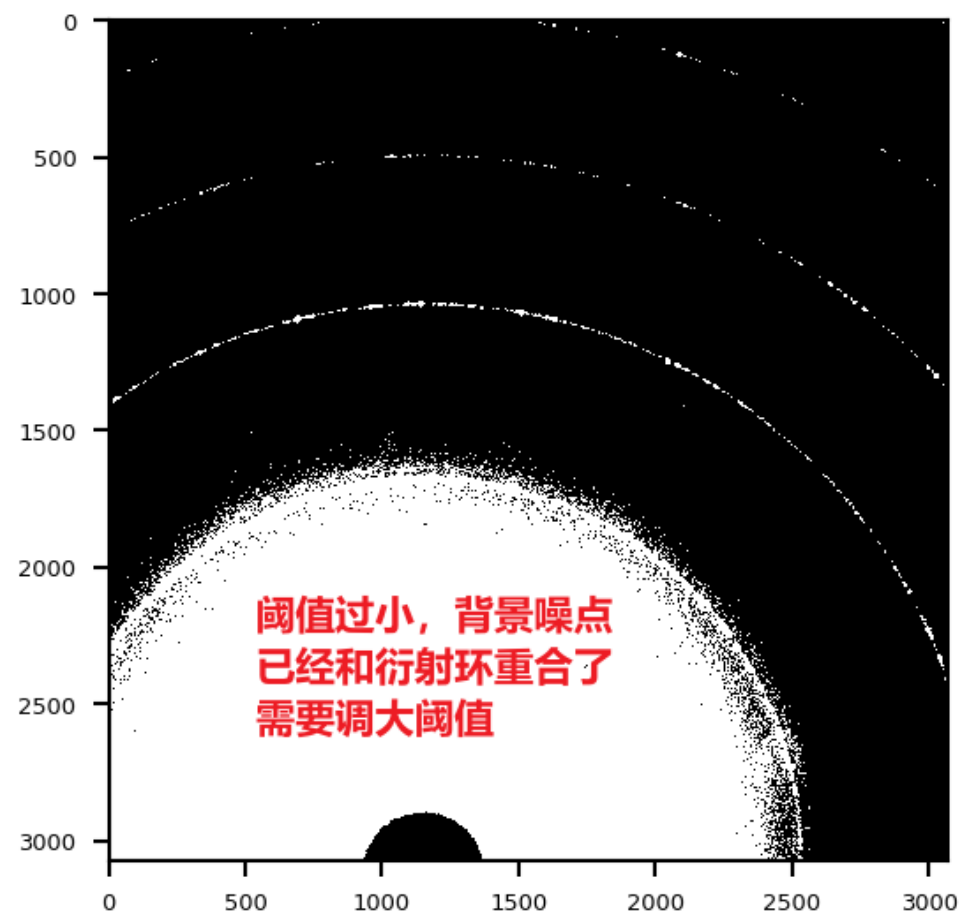
LAB6-12S



阈值：150，OK

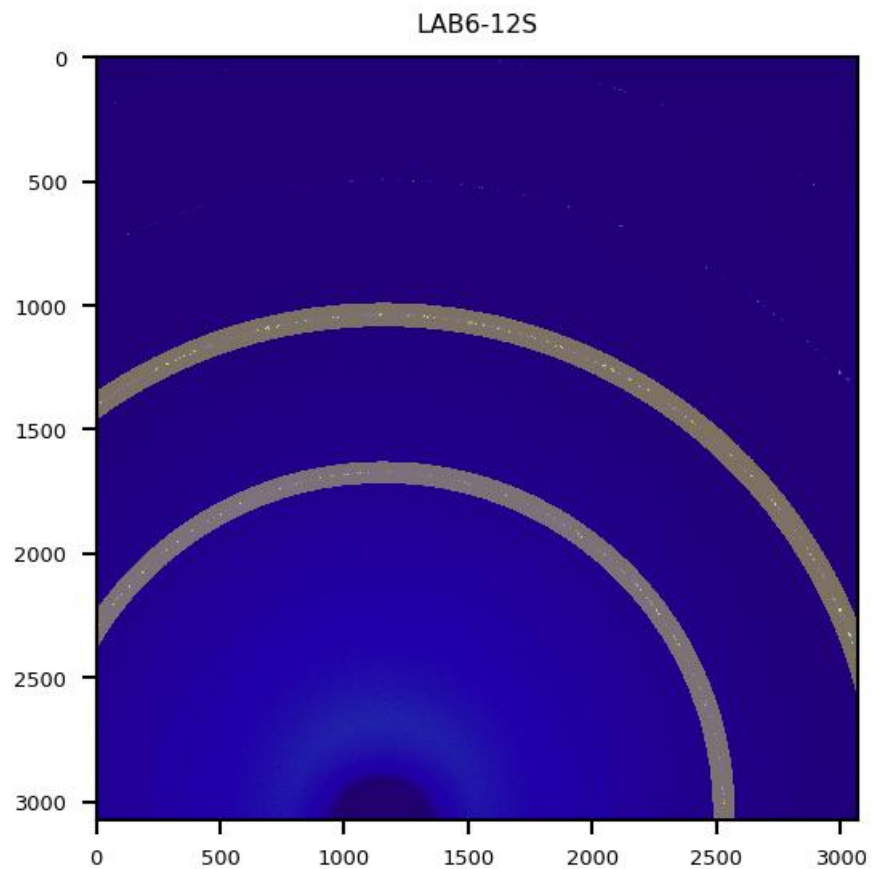


LAB6-12S

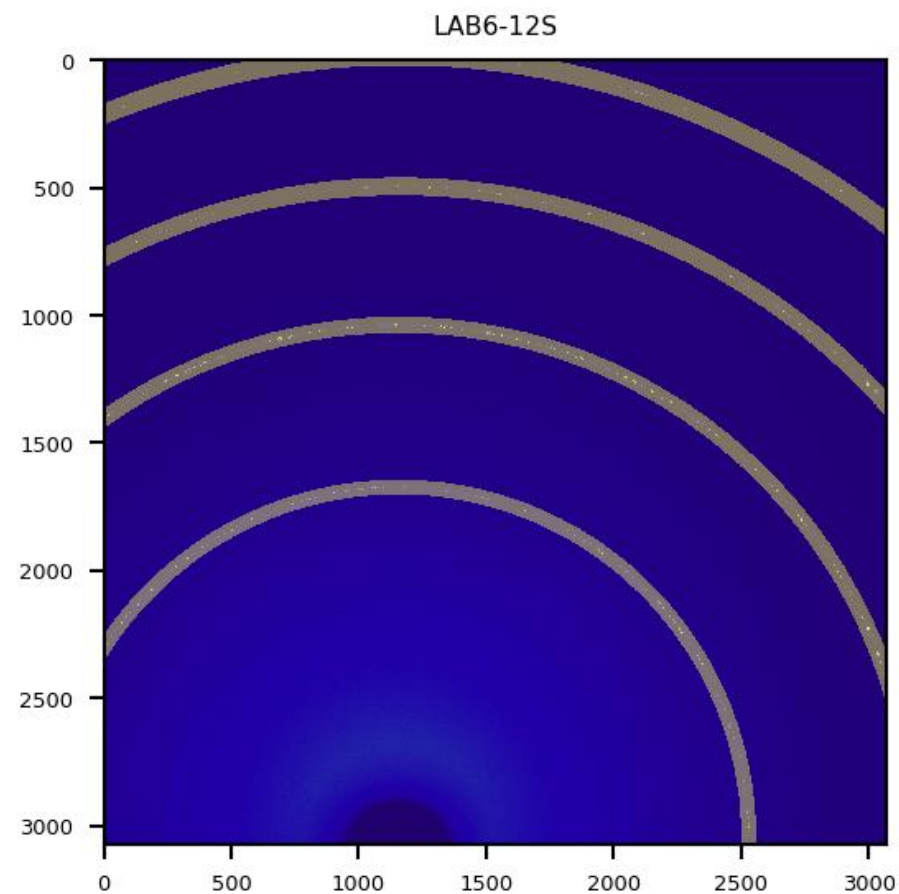


阈值：50





开始时可以适当调大 2θ 范围，使大部分衍射环的点落在黄圈的 2θ 范围里



初步校准后，可以调小 2θ 范围，进行二次手动校准

• 取点校准

- 需要设置**衍射环数量和阈值**，点击“取点拟合”
- 选择三个以上第一衍射环的点（**粗略点击即可，千万别用放大键**），再点击“完成”

incidence (°)	0.2	rotation (°)	0.0
q_res (Å ⁻¹)	0.0025	χ_res (°)	0.1
qxy_min (Å ⁻¹)	-0.5	qxy_max (Å ⁻¹)	2.0
qz_min (Å ⁻¹)	0.0	qz_max (Å ⁻¹)	2.0
q_min (Å ⁻¹)	0.2	q_max (Å ⁻¹)	2.0
χ_min (°)	-90.0	χ_max (°)	90.0
bcx	8580407038.30236	bcy	-45574907404.173
pixel (mm)	0.0732421875	dist (mm)	11004478028.6364
hTilt (°)	0.00057295779513	vTilt (°)	0.00057295779513
energy (keV)	10.0	最大强度	801

标样: D:/code/giwxas-e/ LaB6 4.15682600;2.9393

衍射环: 4

阈值: 150

☐ 遮罩高点: 10000

☐ 无倾斜

显示2θ: 0.00600

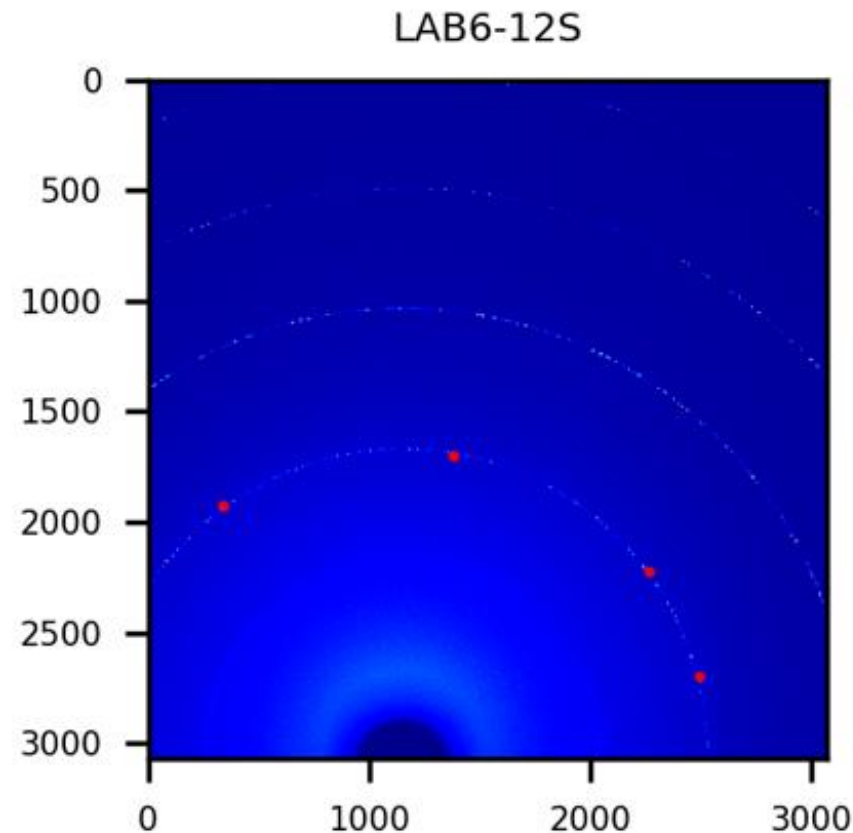
自动校准

手动校准

取点校准

OK Cancel

LAB6-12S



设置作图参数

incidence (°)	0.2	rotation (°)	0.0
q_res (Å ⁻¹)	0.0025	χ_res (°)	0.1
qxy_min (Å ⁻¹)	-0.5	qxy_max (Å ⁻¹)	2.0
qz_min (Å ⁻¹)	0.0	qz_max (Å ⁻¹)	2.0
q_min (Å ⁻¹)	0.2	q_max (Å ⁻¹)	2.0
χ_min (°)	-90.0	χ_max (°)	90.0

- 均为字面意思
- 掠入角是实验设定的
- Rotation是图片如果有旋转时需要设置的，正常调试好的仪器应该是0
- q_res是每个像素对应的q值，也是积分后的q值坐标间隔
- X_res是极角(χ)的分辨率，即间隔值，用默认的0.1即可
- qxy和qz的最大最小值是qxy-qz图的范围
- q和χ的最大最小值是积分得到一维图的坐标范围

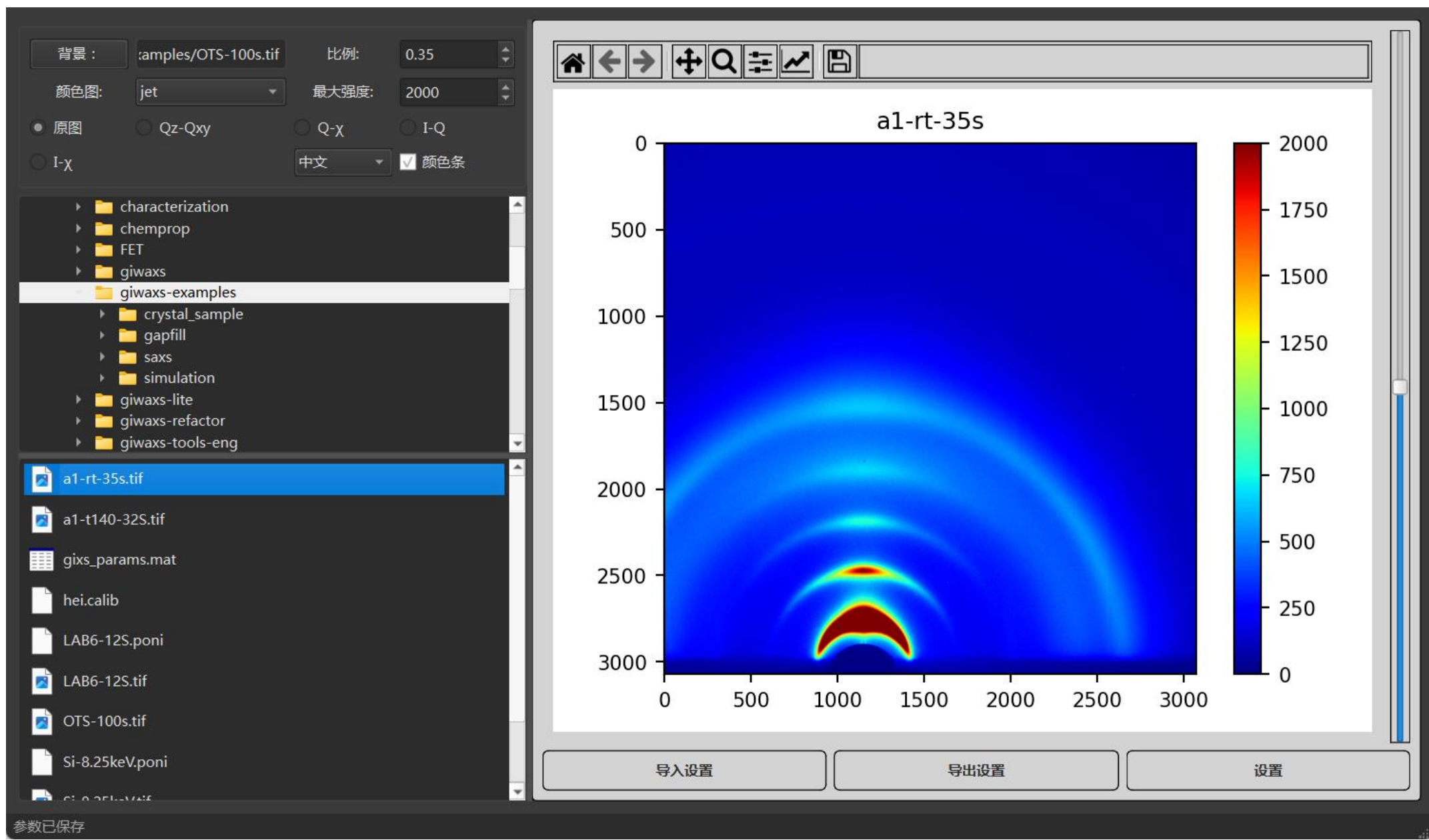
incidence (°)	0.2	rotation (°)	0.0
q_res (Å ⁻¹)	0.0025	χ_res (°)	0.1
qxy_min (Å ⁻¹)	-0.5	qxy_max (Å ⁻¹)	2.0
qz_min (Å ⁻¹)	0.0	qz_max (Å ⁻¹)	2.0
q_min (Å ⁻¹)	0.2	q_max (Å ⁻¹)	2.0
χ_min (°)	-90.0	χ_max (°)	90.0
bcx	8580407038.30236	bcy	-45574907404.173
pixel (mm)	0.0732421875	dist (mm)	11004478028.6364
hTilt (°)	0.00057295779513	vTilt (°)	0.00057295779513
energy (keV)	10.0	最大强度	2000

标样:	LaB6	4.15682600;2.9393	
衍射环:	4	阈值: 150	
<input type="checkbox"/> 遮罩高点:	10000	显示2θ: 0.00600	
<input type="checkbox"/> 无倾斜	自动校准	手动校准	取点校准

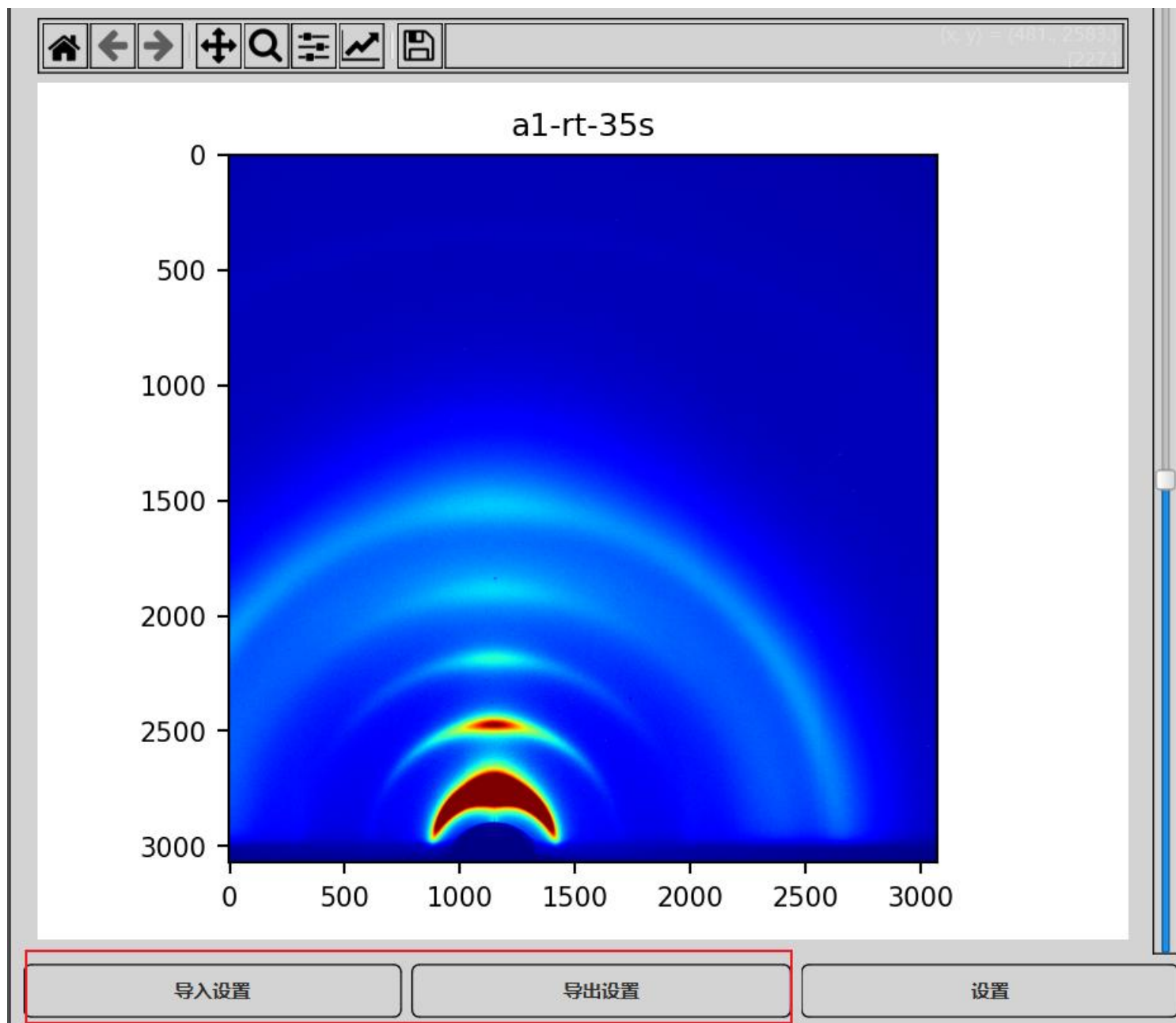
OK

Cancel

- 点击OK保存当前参数



- 双击新目录会更新目录下的文件，点击或按上下方向键选择新文件（单击已选中的高亮数据不会更新）或者双击文件（双击已选中的数据也会更新）会更新预览图片



- 可以导入设置的参数或导出当前的参数
- 软件当前目录下如果有一个名为“default.json”的参数配置文件，软件在首次打开的时候会默认导入此设置