

XafsM2

Introduction to
XAFS measurement program Ver. 2
Manual version 1.1

名古屋大学シンクロトロン光研究センター
田渕雅夫

2013/1/14

目次

1	はじめに	1
2	XafsM2 の概要	2
3	共通表示部	3
3.1	元素選択	3
3.2	分光器の状態表示	5
3.3	メッセージ表示エリア	5
4	機能選択部	6
4.1	XAFS 測定 (ノーマル/ステップスキャンモード)	6
4.1.1	測定ブロック設定	6
4.1.2	検出器設定	7
4.1.3	イオンチャンバのガス選択	8
4.1.4	バックグラウンド	9
4.1.5	データファイル名入力	10
4.1.6	条件確認/測定時間	10
4.1.7	測定開始	10
4.1.8	測定結果の表示と選択	11
4.2	XAFS 測定 (QXAFS モード)	11
4.2.1	QXAFS モードでのブロック設定	11
4.2.2	QXAFS モードでの「計測時間」	12
4.2.3	QXAFS モード固有の設定と表示	12
4.3	条件設定	13
4.3.1	分光器回転	14
4.3.2	レンジ選択	14
4.3.3	バックグラウンド確認/設定	16
4.3.4	移動/スキャン	16
4.3.5	検出器モニタ	18
4.4	SSD 設定	18
4.4.1	SSD 選択 (MCA スペクトル)	18
4.4.2	SSD 選択 (加算/本測定対象)	19
4.4.3	SSD の各チャンネルの設定	19
4.4.4	MCA スペクトルの表示	20
4.5	データ読み込み	21
4.5.1	ファイル選択	21
4.5.2	データファイルの形式	22
4.5.3	View を閉じる	22

4.6	ログ/記録	23
4.7	状態/設定	23
4.7.1	Stars サーバとの接続	23
4.7.2	Stars 経由でのデバイスとの接続	24
4.7.3	分光結晶設定	25
5	グラフ表示部	26
5.1	XAFS 測定、スキャン、モニタデータ表示	26
5.1.1	表示色	26
5.1.2	スケール変更 (移動・拡大・縮小)	27
5.2	MCA 測定データ表示	27
5.2.1	画面中の情報	28
5.2.2	ROI の設定	28
6	標準的な測定操作	28
7	起動方法・設定	29
7.1	起動方法	29
7.1.1	起動に関連したファイルとその置き場所	29
7.1.2	起動オプション (設定ファイル、動作言語の指定)	29
7.2	定義ファイル	30
7.2.1	XafsM2 の動作を指定するパラメータ	30
7.2.2	駆動軸 (モータ類) の定義	31
7.2.3	検出器 (カウンタ、電流計...) の定義	32
7.3	BL5S1 の構成	33
7.4	BL5S1 でのイオンチャンバの接続	33
8	変更履歴	34
9	あとがき	34

1 はじめに

あいちシンクロトロン光センタの硬 X 線 XAFS 測定ライン BL5S1 で、ユーザーがビームラインやハッチ内の機器を操作し、測定条件を整えたり、実際の XAFS 測定を行ったりする際の統合的なマン・マシンインターフェイスとして XafsM2 を準備しました。

このマニュアルでは XafsM2 の機能と操作法を説明しますが、あとがきでも触れた様に、XafsM2 そのものが、まだ最終版というわけではないためマニュアルとのズレが出てくる可能性もあります。それでもビームラインの運用開始にあたってマニュアルの役目をする文章が無くては困るという事から、プログラムの変更にあたっては極力文章のアップデートを図ることとし、暫定版を作成することにしました。

本マニュアルと実際のプログラムが違う場合には上記の様な理由です。違いが大きすぎて分かりにくい、問題があるという場合や、本マニュアルに無い新規の機能があって使い方がわからない、という場合には作者にご連絡下さい。できるだけ早急に対応したいと思います。

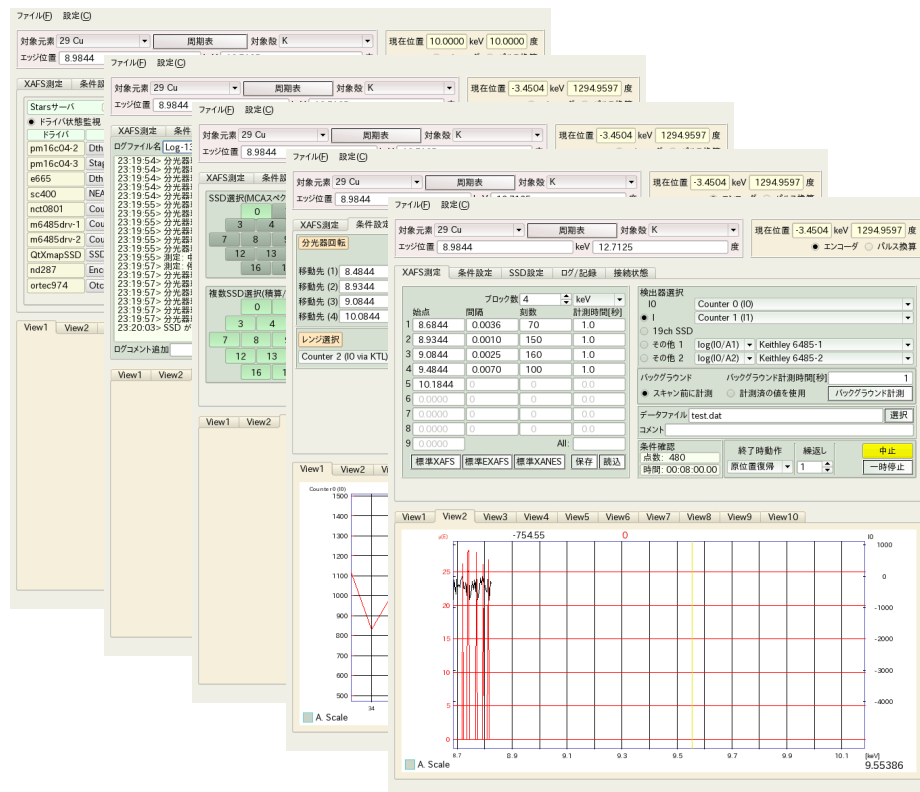


図 1: XafsM2 の全景

2 XafsM2 の概要

図 2 に XafsM2 起動時の概観を示します。

XafsM2 では、「XAFS 測定を行う」という事以外に、測定に関わる事柄をできるだけ統一的に行えるようにすることを目指しています。そのため、「測定条件を決める」、「検出器の調整を行う」、「プログラムや制御対象の状態を把握する」など多くの機能を持たせました。この様な多くの機能をできるだけ簡便に利用できるようにするため、それぞれの機能を目的ごとにグループ分け、ブロック化して提示するようになっています。

図 2 に示す様に、XafsM2 の GUI の画面は、概観するとメニューバーの下に 3 段のブロックをなす構造になっています。1 段目、画面上部にまとめられているのは、XAFS の測定で最も重要になる測定対象元素・吸収端の選択と現在の入射 X 線エネルギー表示、シンクトロンのリング電流値で、これらは常に表示されます。右端の「隠」ボタンは次に説明する 2 段目のタブ表示部分を隠し、グラフ表示部分を大きく表示するボタンです。

2 段目は、色々な操作がグループ分けされ、機能ごとにまとまったタブになっていて、その時々に必要なタブを選択することになります。

最下段は、データやグラフの表示エリアで、ここもタブになっていて複数面 (現状最大 10 面) の



図 2: XafsM2 の概観



図 3: 測定対象の元素選択部分

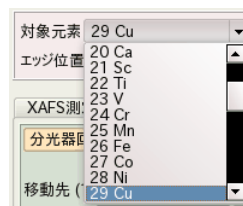


図 4: 測定元素選択ボックスと元素一覧表

データやグラフを切り替えて表示することができます。

3 共通表示部

XafsM2 の GUI の最上段では、元素選択を行います。また、分光器で選択されている角度・エネルギーの表示、シンクロトロンのリング電流の値を表示します。また、右端の「隠」ボタンは次に説明する 2 段目のタブ表示部分を隠し、グラフ表示部分を大きく表示するボタンです。これらは、常に表示されています。

また、GUI の一番下、普段空白になっている部分はメッセージ表示エリアで、ここも常に表示され XafsM2 からの様々なメッセージが表示されます。その多くは、エラーの種類や原因についての表示ですので意図した操作ができない場合などに注意してみてください。

3.1 元素選択

図 3 に示すのが測定対象元素の選択部分です。実際に元素を選択する方法は 2 つあります。一つは図 3 で「29 Cu」と表示されている元素選択ボックスをクリックし、現れる図 4 の様な一覧の中から選択する方法です。もうひとつは同じく図 3 で「周期表」と表示されているボタンをクリックし、現れる周期表(図 5)の中から元素を選択する方法です。

元素を選択すると、「エッジ位置」の表示の右に選択した元素の吸収端のエネルギーとそのエネルギーに対応する分光器の角度が表示されます。また「対象殻」のボックスで吸収端の種類(K, L_I , L_{II} , L_{III})を選択すると、対応するエッジのエネルギーと角度の表示になります。

この部分で元素を選択し、表示された値は実際には XafsM2 の中では参考情報のような扱いで、

- 対象元素のエッジがどこにあるかを人間に教える
- 後で述べる「XAFS 測定」のタブの中で標準の測定条件の自動生成の際の基準に使われる
- 同じく後に述べる「条件設定」のタブの中で、標準的な分光器移動位置を決める

という 3 つの目的にだけ使われます。

「エッジ位置」のエネルギーまたは角度は対象元素を指定して自動表示させるだけでなく手動で任意の値を入力することができます。手動で値を入力すると、「XAFS 測定」のタブの中での標準の測定条件の自動生成は指定したエネルギー (または角度) を基準に行なわれます。

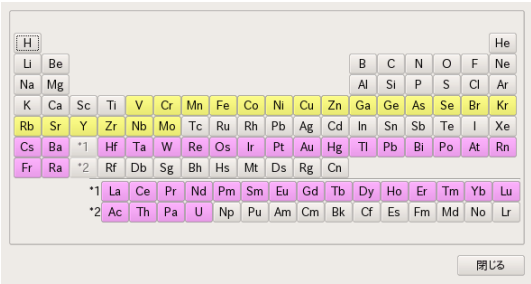


図 5: 周期表を使った元素選択。黄色に表示されているのは K 端がラインのエネルギー範囲に適した元素。桃色に表示されているのは L 端がラインのエネルギー範囲に適した元素。

3.2 分光器の状態表示

図 6 に示すのは、分光器の角度と分光される光のエネルギーを示す部分です。¹

図の中にあるチェックボタンで「エンコーダ」を選択すると、表示される角度は分光器の角度をエンコーダで読み取った結果になり、エネルギーもその角度から計算されたエネルギーになります。一方、チェックボックスで「パルス換算」を選択すると、分光器を回転させているパルスモータのパルス値から 1 パルス = 0.000027deg という関係で計算した角度とエネルギーです。²

このチェックボタンは通常「エンコーダ」を選択することをお勧めします。分光器を回転しているとパルスモータのパルス値と角度の関係を決める際の原点位置はズレが生じる可能性があります。その様な場合でも、エンコーダは(正しく較正されていれば)正しい角度を示すはずですが、もしズレがあった場合、パルスモータの原点を再定義して正しい表示に戻すのは多少面倒ですが、エンコーダの表示は簡単な操作で修正できます。

エンコーダが正しく較正されているかどうかは、標準的なフォイルのスペクトルを測定することなどで確認できますが、具体的な方法は「プログラムの使い方」の範疇を多少超えますので、「ビームラインの操作法」として別途文書化される予定です。

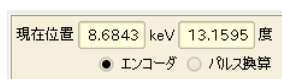


図 6: 分光器の角度と分光エネルギーの表示

XAFS 測定結果のファイルに角度として記録される値は、デフォルトではエンコーダの読値ですが、後述する「状態/設定」タブで変更可能です。

3.3 メッセージ表示エリア

画面下端の普段は何も表示されていない部分は「メッセージ表示エリア」です。何かのエラーや、状態変更があった時、図 7 に示すように、メッセージが表示されることがあります。このメッセージは通常は数秒で消えます。



図 7: XafsM2 の下端のメッセージ表示エリアに現れるメッセージ

XAFS 測定を開始しようとして「XAFS 測定」タブの中で「開始」ボタンを押しても測定が始まらない場合など、意図した操作ができない時、たいてい原因がここに表示されますので、注意してみてください。

¹BL5S1 の分光結晶は対称 Si (111) で、プログラム内ではその面間隔は 3.13553 Åとしています。分光結晶は「状態/設定」タブで変更することができますが、BL5S1 ではこれが必要になることはおそらく無いと思われます。

²0.000027deg = 0.1arcsec(0.1 秒) = 0.1/3600 deg

4 機能選択部

XafsM2 の GUI の中段部分は、XafsM2 の機能が幾つかのグループに分類されてまとまったタブになっています。現在このタブ(機能のグループ)としては、「XAFS 測定」、「条件設定」、「SSD 設定」、「データ読込」、「状態/設定」、「ログ/記録」があります。

以下、各タブにまとめられた機能について説明します。

4.1 XAFS 測定(ノーマル/ステップスキャンモード)

図 8 に示す「XAFS 測定」タブには、実際に XAFS 測定を行う際に使用する機能がまとめられています。

「測定開始」の項にもありますが、XAFS 測定のタブで入力したほとんどの全ての項目は、測定開始後に変更しても始まってしまった測定には影響を与えません。「スキャン回数」は例外で測定開始後も変更可能です³。

図 8: XAFS 測定タブの全体

4.1.1 測定ブロック設定

タブの左半分の大半を占める「測定ブロック設定」では、XAFS 測定の際、どのようなエネルギー範囲を、どのような刻みで、各点にどれだけの時間をかけて測定を行うかを設定します。以下、図 9 に赤字で記入した番号の要素について説明します。

1. ブロック数指定: 測定するエネルギー範囲を幾つのブロックに分けるかを指定します。現在指定可能な最大ブロック数は 8 です。

³ 複数回スキャンを途中で終了する際、「中止」を押して終了すると最後に実行していた測定データは中途半端な形になってしまいます。これを避けたい場合、「スキャン回数」を現在実行中の回数よりも小さくすると、その時進行中の測定が最後まで終了してから、複数回スキャンが終了します。

図 9: 測定時のブロック設定を行う部分

2. 単位指定: ブロックの始点、終点や間隔をどのような単位で入力するかを指定します。
ここで、単位を変更すると、入力済みの数値に関しては自動的に単位換算が行われます。
3. ブロック始点: ブロックの始点を指定します。始点は同時に前のブロックの終点になります。
前後のブロックの「間隔」が入力済みの場合(0でない場合)、 $(\text{ブロック始点} - \text{ブロック終点}) / \text{間隔} = \text{刻数}$ となるよう自動的に「刻数」が変更されます。
4. 間隔: ブロック内で測定の間隔を指定します。
間隔を入力すると $(\text{ブロック始点} - \text{ブロック終点}) / \text{間隔} = \text{刻数}$ となるよう自動的に「刻数」が変更されます。間隔は、始点、終点の大小関係によらず「絶対値」で入力して構いません(終点のほうが小さい時でも負の数にしないで良い)。
5. 刻数: ブロック内に何点の測定点をとるか指定します。
刻数を入力すると $(\text{ブロック始点} - \text{ブロック終点}) / \text{刻数} = \text{間隔}$ となるよう自動的に「間隔」が変更されます。
6. 計測時間: 各点をどれだけの時間で測定するかを指定します。単位は「秒」です。
7. ブロック終点: 最後のブロックの次の始点は、最後のブロックの終点の指定です。
8. All: 全ブロックの計測時間を一括で指定します。
9. 標準ボタン: XafsM2 の上部で指定された測定対象元素(厳密には「エッジ位置」)を中心に、標準的な測定ブロックの指定を生成します。
「標準 EXAFS」は EXAFS 領域まで広がったエネルギー範囲を測定範囲とします。「標準 XANES」は XANES 領域を測定対象にします。「標準 XAFS」は EXAFS と同じエネルギー範囲を測定対象にし、XANES エリアは XANES 測定と同じ細かな測定ステップを指定します。
10. 保存・読み込み: 設定したブロック指定を保存したり、保存したブロック指定を読み込んだりすることができます。

4.1.2 検出器設定

タブの右上部では測定に使う検出器を指定します。

左端の、チェックボタンで選択された検出器が測定に使用される検出器です。「I0」は常に選択され、非使用にすることはできません。残りの「I₁」「19ch SSD₁」「その他 1₁」「その他 2₁」は複

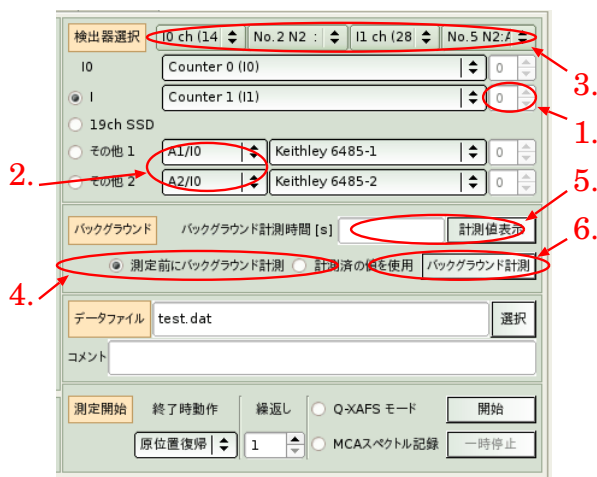


図 10: XAFS 測定タブの右半分

数選択可能ですが最低 1 つは選択していないと測定が始まりません。右端の入力欄 (10-1.) では、検出器のレンジ設定を行います。レンジ設定がひつような検出器を選択した時有効になります。

図 10-2. は、検出器として「その他 1」、「その他 2」を選んだ場合の測定のタイプを選択するボックスです。透過型の測定なら $\log(I_0/A_1)$ (または、 $\log(I_0/A_2)$) を、蛍光型の測定なら A_1/I_0 (または A_2/I_0) を選んで下さい。

現在 XafsM2 では、測定結果を記録するファイルのフォーマットは、Photon Factory や SPring-8 で採用されている「9809」型のファイルです。このファイルには、ファイル全体に対して一つ、測定のタイプを記録するフィールドがありますが、XafsM2 では、「選択した検出器が一つだけ」の場合、

- I を選択: 透過型の測定と記録
- 19ch SSD を選択: 蛍光型の測定と記録
- その他 1 または 2 を選択: $\log(I_0/A)$ を選んでいれば透過型の測定と記録、 A/I_0 の場合には蛍光型の測定と記録

という規則でファイルに記録します。複数の検出器を指定した場合には全て EXTRA 型の測定と記録します⁴。ここでの「測定の型」の選択は、測定中の測定結果の表示にも影響します。

検出器選択ボックスにどのような検出器が現れるかは、XafsM2 に固定に組み込まれているわけではなく、ビームラインの状況に合わせて設定ファイルで設定するものです。従って、この内容を説明することはプログラムのマニュアルの範疇を超えているのですが、全く説明がないのも不便なので 7.4 節に 2013 年 1 月現在の BL5S1 の設定を例にとった説明をしました。

4.1.3 イオンチャンバのガス選択

XAFS 測定で検出器としてイオンチャンバを使用する場合には、イオンチャンバに流す (充填する) ガスの種類を適切に選択する必要があります。検出器設定ブロックの最上段にある図 10-3. の

⁴複数の検出器を選択してもそのタイプが全て一致していれば (全部透過型とか蛍光型に)、測定ファイルには「そのタイプの測定」と記録しても良いのですが、現在そうなっていません。ファイル全体に一つの記録モード指定以外にも、検出器ごとに測定モードを記録できるフィールドがあるので問題にならないはずで

入力/表示欄はイオンチャンバのガス選択を補助します。ここの1番目及び3番目の入力欄で、イオンチャンバの種類(長さ)を選択すると2番目と4番目の表示欄(ボタンのように押すと一覧表が出ます)には、そのイオンチャンバに、ビームラインに準備されている各種のガス⁵を流した時の「透過率」が表示されます。その際、2番目の欄にはI₀チャンバに使用する場合を想定して、透過率になるべく90%に近くなるガスが、4番目の欄にはIチャンバに使用する場合を想定して、透過率になるべく10%に近くなるガスがデフォルトで表示されます。従って、通常の透過法での測定では、ここに表示されたNo.のガスをそれぞれのチャンバに流せば問題ないはずです。

【注意】この欄はお勧めガスを「表示」するだけです。ガスは自動では切り替わりません。必ず手動で切り替えて下さい。

4.1.4 バックグラウンド

XAFS測定タブの右中段には、バックグラウンドを扱う部分があります。XafsM2では、バックグラウンドをいつ測定するかに関して、

- XAFS測定(スキャン)の直前に測定する
- バックグラウンドの値を事前に測定しておく
- バックグラウンドの値を手入力する

という3つの選択肢があります。

測定の直前に測定する場合には、図10の4.で「スキャン前に計測」を選択して下さい。「計測済みの値を使用」を選択すると、事前に計測するか手入力した値を使用することになります。

「計測済みの値を使用」を選択した場合、XAFS測定開始前にバックグラウンドの値を測定するか、手入力しておく必要があります。バックグラウンドを計測するには次の様にして下さい。

1. 図10の5.に、計測時間を入力する。
2. 図10の6.の「バックグラウンド計測」ボタンを押す。
3. ボタンの色が図11の様に赤く変化し、表示も「シャッターCLOSE確認」に変わる。
4. シャッターが閉まっていることを確認して、このボタンを押す。
5. ボタンの色が今度は黄色に変化し、表示は「BG計測中」に変わる。
6. 計測後、ボタンの色が再び赤くなり、表示が「シャッターOPEN確認」に変わる。
7. 必要ならばシャッターを開け(バックグラウンド測定の場合は開けなくても構わない)もう一度このボタンを押す。
8. ボタンの表示が元に戻り、計測プロセス終了。

バックグラウンドの値は、内部的には「1秒あたり」の数字として記憶されますので測定の際の各点の計測時間とバックグラウンドの計測時間が一致する必要はありません。

バックグラウンドの値を手入力する場合は後で説明する「条件設定」タブの中で行います。

⁵現在BL5S1に準備されているのは、「He:N₂=70:30」_{JK}、「N₂」_{JK}、「N₂:Ar=85:15」_{JK}、「N₂:Ar=50:50」_{JK}、「Ar」の6種類の固定比率ガスです。

「スキャン前に計測」を選択した場合、計測(スキャン)開始のボタンを押した後、「バックグラウンド計測」ボタンの色と表示が上記の説明と同様に変わりますので指示に従ってシャッターの開閉を行なって下さい⁶。



図 11: 「バックグラウンド計測」ボタンの変化

4.1.5 データファイル名入力

XAFS 測定タブの右三段目の「データファイル」の項では、測定結果を記録するデータファイル名の選択と、データファイルにコメントとして書き込む文字列の入力を行います。

複数回スキャンを行う場合、データファイル名の拡張子(通常は「.dat」)は、自動的に変更され1回目もとの拡張子、2回目「.001」, 3回目「.002」, ... の様に設定されます(後述する QXAFS の場合、拡張子は4桁になり「.0001」, 「.002」...)。

この、拡張子が変わったファイル名に関してはすでに存在しているファイルかどうか、上書きのチェックは行なっていません。

4.1.6 条件確認/測定時間

XAFS 測定タブの下段左側には、測定にかかる時間などが表示されます。

「開始時間」「現在時間」「終了時間」等は測定中に有効で測定を始めた時間と現在の時間、終了予想時刻が表示されます。「現在位置」の表示も測定中に有効で、「回数」は何回目のスキャンを実行中かを示し、「点目」は現在何点目を測定中かを示します。

「条件確認」の欄には、測定前、ブロック設定の入力を行った段階で総測定点数や予想測定時間が表示されますので、測定にかかる時間などが意図したものになっているかどうかを確認して下さい。

但し、「条件確認」の測定時間や「終了時間」の表示はあくまで予想で、実際には表示より多少長くなる場合があります。

4.1.7 測定開始

XAFS 測定タブの右最下段の「測定開始」の項では、測定終了時に分光器の角度をどこに移動するかと、スキャンを何回繰り返すかを指定できます。

XAFS 測定のタブで入力した他の項目は、測定を開始した後に変更しても、始まってしまった測定には影響を与えませんが、「スキャン回数」だけは測定開始後も変更可能です。

また、「Q-XAFS モード」を選択すると??節で説明する Quick モードで XAFS 測定を行うモードになり、「XAFS 測定」タブ全体、特に「測定ブロック設定」部分が大きく変わります。

⁶将来シャッターの開閉を自動で行なうようにしたいと思っています。その場合には「表示に従ったボタン操作」は不要になるかもしれません。

「MCA スペクトル記録」は 19ch SSD を使ったノーマル(ステップ)XAFS 測定の場合に有効で、測定の各ステップで、SSD の全チャンネルの MCA スペクトルをフィアルに記録します。その際には「データファイル」で指定したファイル名から拡張子(.dat 等)を除いた名前(これをベースファイル名と呼ぶ)のフォルダ(ディレクトリ)が自動的に作成され、このフォルダの中に MCA のスペクトルを記録したファイルが作成されます。その際のファイル名は「ベースファイル名-繰り返し回-測定点番号.dat」になります。

4.1.8 測定結果の表示と選択

測定結果はグラフとして XafsM2 の最下段の View タブに表示されます。XAFS 測定中に表示されるグラフと、そのグラフに対して可能な操作に関しては 5.1 節を参照して下さい。

XAFS 測定を行ったグラフに対しては、View タブの上に並んだ「グラフ表示選択ボタン」で表示する線を選べます(図 12)。



図 12: 「グラフ表示選択ボタン」。上は I_0 と I を使った透過の測定を行う場合のボタンの状態。 I_0 、 I 、 $\mu(E)$ の 3 本の線の表示非表示を選択できる。下は、蛍光の測定を行う場合のボタン表示。 I_0 と全素子の信号の合計から得られる $\mu(E)$ 以外に、各素子個別の出力も選択して見ることができる。

4.2 XAFS 測定(QXAFS モード)

4.1.7 節で述べたように「XAFS 測定」タブの右下には「Q-XAFS モード」を選択するチェックボックスがあります。これをチェックすると QXAFS モードでの測定が行えるようになります。この時、「測定ブロック設定」の部分が大きく変化し、図 14 の様になります。

QXAFS モードでは、最大 9,990 回までの「繰り返し」を指定できます。また、測定の際に作られるファイルは、例えば「データファイル」で「test.dat」を指定した場合、「ベースファイル名(test)」+「.dat」として「始点」「終点」など主に「測定ブロック設定」の内容を収めたファイルができます。実際の測定結果は往路の測定に対して「ベースファイル名」+「-f」+「. スキャン回数(0001, 0002, ...)」というファイルに書き出されます。復路も測定を行う場合には、さらに「ベースファイル名」+「-b」+「. スキャン回数(0001, 0002, ...)」というファイルができます。ファイルフォーマットはノーマル XAFS 同様の 9809 フォーマットです。

4.2.1 QXAFS モードでのブロック設定

QXAFS モードでは、測定ブロックは 1 ブロックに固定されます。「間隔」と「刻数」は相補的で、どちらかを入力すると、

$$\frac{\text{「終点」}-\text{「始点」}}{\text{「間隔」}} = \text{「刻数」}$$

図 13: QXAFS モードの時の「測定ブロック設定」部分。QXAFS モードにすると、この部分にブロック設定の入力以外に、QXAFS モード固有の表示や設定ボタンが現れる。

もしくは

$$\frac{\text{「終点」} - \text{「始点」}}{\text{「刻数」}} = \text{「間隔」}$$

の様に計算してもう一方が表示されます。しかし、実際には (特に入力単位がエネルギーの時の) 「間隔」は目安としての意味しかありません。測定の際には、(どの単位で入力しても) 「始点」「終点」は角度に直され、その間に「刻数」で指定した点が角度で (おおよそ) 等間隔になるように測定されます。

また、この時の角度単位での間隔が、分光結晶を回すパルスモータの 1 パルス分の角度よりも小さくなる場合には、最低限 1 パルス分の角度 (0.1 秒) になるように「刻数」が直されます。

4.2.2 QXAFS モードでの「計測時間」

QXAFS モードでは、「計測時間」の入力は、指定した範囲 (始点と終点の間) をスキャンする時間の指定になります。ただし、分光器の最大の回転速度は 15,000pps (= 1,500 秒) ですので、これを越えてしまうような数値を入力した場合には、自動的に許される最大の数値に修正されます。

4.2.3 QXAFS モード固有の設定と表示

図 14 に示したように、QXAFS モードにすると、「測定ブロック設定」の下に QXAFS モードに固有の設定と表示が現れます。これらは、次のような働きと意味を持ちます。

- 「最大速度」「最短時間」選択
「最大速度」を選ぶと、最大のスキャンスPEED (15,000pps) になる設定が許されます。しかし、スキャンスPEEDを最大すると、最大のスキャンスPEEDに到達するために、測定範囲のより遠くから分光器を回転し始める必要があり、分光器の回転を止めるときにもより遠くまで分光器を回す必要があるため、図??に示す様に、測定全体にかかる時間はかえって長くなってしまいます。
「最短時間」を選択すると、「計測時間」が短すぎて、測定全体にかかる時間がかえって長くなる場合には「計測時間」を修正し測定全体にかかる時間が最短になるように調整します。
- 「戻りでも測定を行う」を選択すると、「始点」「終点」の間を往復両方測定します。

- 「表示制限」。QXAFS モードでは、多数回のスキャンを行う可能性があります、「表示制限」では、その際のグラフ表示の仕方を選択します。
 1. 「表示制限」を選択しない場合
 100 スキャンまでのグラフは全て表示されます。
 スキャンが 100 を超えた時点で、直近 10 スキャン分のグラフが表示され、それより古いものは 10 スキャンおきに表示されます。
 スキャン回数が 1,000 を超えた時点で、直近 100 スキャン分のグラフが表示され、それより古いものは 100 スキャンおきに表示されるようになります。
 2. 「表示制限」を選択した場合
 「直近」入力欄に入力した数だけ (但し 100 以下) 直近の測定結果が表示され、それより古いものは表示されません。
- 「スキャンスピード (pps)」表示。指定した計測範囲 (「始点」「終点」) と「計測時間」で決まるスキャンスピードを表示します。
 参考値として、通常設定時の「H」スピードは 6,000pps、設定できる最大のスキャンスピードは 15,000pps です。

QXAFS 測定時には「計測ブロック設定」の部分以外に、「条件確認」表示周辺も少し変わります。「条件確認」の表示は総「点数」と予想「時間」の表示から「一周期」の時間と予想「総時間」の表示になります。また、「現在位置」の表示も何「回目」と何「点目」の表示から、何「周期目」と「往路」または「復路」の表示になります。

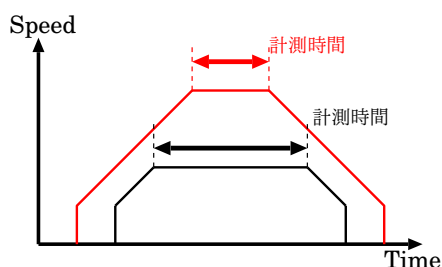


図 14: QXAFS モードでは、「計測時間」を短くして「スキャンスピード」を上げると加減速にかかる時間が伸びるため、合計の測定時間がかえって長くなる場合がある。図の赤線で示した例では、トップスピードが黒線の場合の 2 倍になっているので「計測時間」は半分になっているが、その前後の加減速にかかる時間があるため、黒線で示したトップスピードが遅い例のほうが測定全体にかかる時間は短くなる。

4.3 条件設定

図 15 に示す「条件設定」タブには、XAFS 測定を開始する前に、試料や測定系の状態を確認したり、測定条件を決めるための機能がまとまっています。

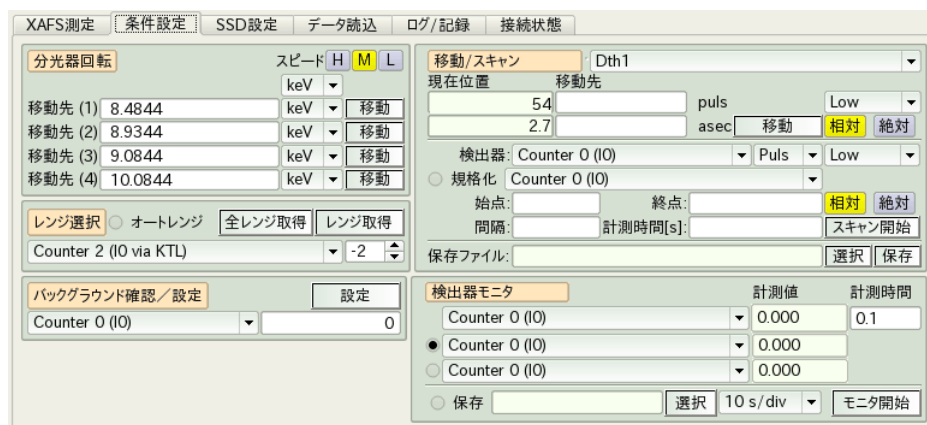


図 15: 条件設定タブの全体

4.3.1 分光器回転

条件設定タブの左上部「分光器回転」では分光器を希望のエネルギー、角度に移動させることができます (図 16)。

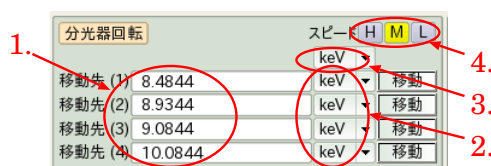


図 16: 分光器を希望のエネルギー、角度に移動させる

図 16 の 1. に示すように移動先は 4 つまで入力できるので決まった何点かを交互に移動しながら測定条件を決めるようなことに利用できます。「元素選択」で元素と吸収端を選ぶと、それに合わせてデフォルトの移動先が設定されます。デフォルトは吸収端のエネルギーを基準にして -0.5keV, -0.1keV, +0.1keV, +1.0keV の 4 点です。

移動先を設定する際の単位は、それぞれの入力欄の右の選択ボックス (図 16 の 2.) で変えられます。選択できる単位は keV, eV, deg, Å の 4 種類です。単位を変えると、入力されている数字は自動的に選択した単位に変換されるので、あるエネルギーに対応する角度を調べる、というような用途にも使えます。

図 16 の 3. のエネルギー選択ボックスで単位を変えると、4 つの単位入力を一斉に変更することができます。

図 16 の 4. の「H, M, L」のボタンを押すことで、移動する際のパルスモータの速度を選ぶことができます。どの速度を選んで構いませんが、「L」で大きな角度移動をすると時間がかかり、「H」では、到達する角度が指定した角度と多少ずれる可能性がある、ということを考慮して適宜選択して下さい。

4.3.2 レンジ選択

XafsM2 で、どのような計測器を接続して測定ができるようにするかは、後述する定義ファイル等に依存しますが、その中に、レンジ選択が必要な検出器・検出系がある可能性があります。1 つ

の例として、このマニュアルを書いている 2013 年 1 月の段階の BL5S1 では、「電流/電圧アンプとして Keithley 6485 を使い、その出力を V/F コンバーターに通してカウンタ (nct08) につなぐ」という検出系があります (7.4 節参照)。この場合には Keithley をオートレンジで使用してレンジが変わってしまうと見かけのカウント数が 10 倍/0.1 倍変化してしまうことになるので、レンジを固定し、適切なレンジを指定して測定を行う必要があります。

条件設定タブ左の 2 段目「レンジ選択」(図 17) では、このレンジ設定を行います。



図 17: 測定器のレンジ選択

図の番号に従って機能を説明すると、以下のようになります。

1. 検出器選択: レンジ選択が可能な検出器・系だけが一覧表示されます。レンジ設定を行う検出器を選択します。
2. レンジ設定: 選択した検出器のレンジを設定します。
3. レンジ取得: 現在検出器に実際に設定されているレンジを読み取り、2. の欄に表示します。
4. 全レンジ取得: 選択していない検出器も含めて、全てのレンジ選択可能な検出器に実際に設定されているレンジを読み取ります。
5. オートレンジ指定 (各検出器に個別に設定できます。): オートレンジが使用可能な検出器の場合、このチェックボタンが有効になります。ここにチェックを入れると、オートレンジが有効になり、2. のレンジ設定が無効になります。

レンジの設定を行う際、具体的にどのレンジにすれば良いかを判断するには、例えば次のような方法があります。

- 完全に手動で判断する場合

1. 自分が行おうとする測定の中で最大強度の信号が来ると思われる条件を作る。
2. その条件下で対象の検出器を動作させる。
3. 固定レンジで使用している場合には、検出器が飽和しない最小レンジを探す。
4. オートレンジで使用している場合には、検出器が選択したレンジを読み取る。
5. この「レンジ選択部」で決定したレンジに設定する。

- 検出器等を XafsM2 経由で操作しながら判断する場合 (オートレンジ利用可能な場合)

1. この「レンジ選択」部で「オートレンジ」ボタンを押してチェックされた状態にし対象の検出器をオートレンジにする。
2. XAFS 測定タブに移動し、オートレンジを選択した検出器を使って XAFS 測定を行う。(実際には XAFS 測定ではなく、後述する「ピークスキャン」や「モニタ」のモードで、入力信号が最大になる条件を探すのでも構いません。)
3. 吸収端直後など、検出器への入力が増大する点で測定を止める。

4. この「レンジ選択」に戻り、「オートレンジ」を外して「レンジ取得」する。

• 検出器等を XafsM2 経由で操作しながら判断する場合 (オートレンジ利用不能の場合)

1. この「レンジ選択」部で仮にレンジを選ぶ。
2. XAFS 測定タブに移動し、オートレンジを選択した検出器を使って XAFS 測定を行う。
3. 吸収端直後など、検出器への入力が増大になる点で測定を止める。
4. 測定が飽和しているようなら「レンジ選択」に戻ってレンジを上げ、飽和していなければレンジを下げる。
5. これを何度か繰り返す。

どれも当たり前の方法ではありますが、XafsM2 を使ってどう行うのかの参考になると思います。

4.3.3 バックグラウンド確認/設定

条件設定タブ左の3段目「バックグラウンド確認/設定」(図 18)では各検出器のバックグラウンドとしてどのような数値が設定されているかを表示し、必要に応じて手入力で変更を行うことができます。

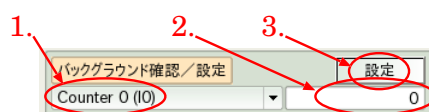


図 18: バックグラウンドの設定

1. 検出器選択: バックグラウンドを表示・入力する検出器を選択します。
2. バックグラウンド表示・入力: 選択された検出器のバックグラウンドが表示されます。また、入力欄として使用し、設定する値を入力します。
3. バックグラウンド設定: バックグラウンドを入力した値に設定します。

「XAFS 測定」タブで XAFS 測定を行う際、「計測済みの値を使用」を選択している時にはバックグラウンドの値を事前に決めておく必要があります。その方法の一つは「XAFS 測定」タブで「バックグラウンド計測」ボタンを押すことですが、もうひとつの方法は、ここで値を手入力することです。

4.3.4 移動/スキャン

条件設定タブ右上段は「移動/スキャン」となっています(図 19)。ここでは、分光器を含めた様々な駆動軸を移動させると、移動させながら検出器の値を表示し、その変化を見たりピークを探したりすることができます。

図中に赤色の数字で示した部分は、駆動軸を移動する動作に関わっていて次のような機能を持ちます。

1. 駆動軸: どの駆動軸を動かすかを選択します。
2. 現在位置/移動先: 選択した駆動軸の現在位置の表示欄と、移動先の入力欄です。上段は pulse(パルスモータの場合) 単位で見た位置、下段は物理的な単位に直した位置です。
3. 相対/絶対: 「移動先」の指定が現在位置に対する相対的な指定か絶対位置の指定かを選択します。
4. 速度指定: 移動時の速度を指定します。分光器の場合同様、遅いと移動に時間がかかりますが、早いと精度が落ちる時があります。
5. 移動: 上記の条件を設定した上で実際に駆動軸の位置を移動します。

図中に青色の数字で示した部分は、軸を移動しながら計測を行う、いわゆるスキンの動作に関わっていて次のような機能を持ちます。

1. 検出器設定: スキャンに使う検出器を決めます。
上で選択するのがその検出値をグラフの描画等に使う検出器です。下で選択するのは、例えば I0 等、測定対象の強度に何らかの影響を与えると考えられる別の量を測っている検出器です。グラフには両方の計測結果がプロットされます。
2. 規格化指定: このボタンをチェックすると、先の検出器設定の上段で選んだ検出器の計測値を、下段の検出器の計測値で規格化してプロットします。ファイルに出力するのも規格化後の値です。規格化の分母になる値が 0 になる場合、規格化せずそのままの数字になります。
3. スキャン条件: スキャンする条件の指定です。始点、終点、スキャンする点の間隔、各点で何秒間測定を行うかを指定します。
4. 単位指定: スキャン条件 (始点、終点、間隔) を指定するときの単位を指定します。
5. 相対/絶対: 始点、終点の指定が現在位置に対する相対移動なのか、絶対値なのかを決めます。
6. スキャンスピード: 一つの点から次の点へ移動速度する際の速度指定です。
7. スキャン開始: ここまで決めた条件でスキャンを行います。
8. 選択・保存: スキャン結果を保存するファイルを指定し、保存を行います。「保存」はスキャン後に押して下さい。スキャン前にファイル名が選択されていても自動的に保存されません。

スキャンの結果はグラフとして XafsM2 最下段の View タブに表示されます。スキャンで表示されるグラフと、そのグラフに対して可能な操作に関しては 5.1 節を参照して下さい。

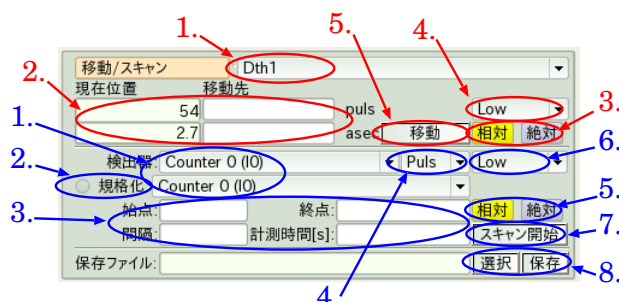


図 19: 駆動軸の移動や、移動に伴う検出値の変化を見る

4.3.5 検出器モニタ

条件設定タブ右下段は「検出器モニター」(図 20)となっていて横軸を時間によって検出器の計測値をモニターすることができます。

検出器	計測値	計測時間
Counter 0 (I0)	0.000	0.1
Counter 0 (I0)	0.000	
Counter 0 (I0)	0.000	

保存 選択 10 s/div モニタ開始

図 20: 横軸を時間によって検出器の計測値をモニターする。

検出器モニタでは最大3つの計測器までを同時に計測し、グラフ化することができます。操作法には特に解説しないといけないようなことはほとんどありませんが、計測値の記録ファイルの扱いについては少し注意が必要です。

計測値をファイルに記録するかどうかと、記録するファイル名の選択はモニタ開始前に行います。現時点では、モニタが終わった後、得られたグラフを記録することはできません。

また、モニタを行うファイルとしてすでに存在するファイルを選択した場合、他のケースでは、既存のファイルの中身を消してしまっ新たに記録します。しかし、モニタで既存のファイルの中身は消されず、代わりに、すでにあるデータの後ろに追記される形で記録されます。これは、一時中断しながら、断続的にモニターを行うような場合にその結果を一つのファイルに残せるという意味で便利です。一方で、ファイル名の選択を間違えると、違うファイルの後ろにデータを追記してしまうことになるので注意が必要です。(但し、その様な場合でも、追記するデータの先頭に(前のデータとの隙間に)、測定開始時間などの情報を含んだヘッダが入りますので、テキストエディタ等で見れば分離するのは簡単はずです。)

モニターの様子はグラフとして XafsM2 最下段の View タブに表示されます。モニターで表示されるグラフと、そのグラフに対して可能な操作に関しては 5.1 節を参照して下さい。

4.4 SSD 設定

図 21 に示すのは「SSD 設定」タブです。左側に、19ch SSD のチャンネルを選択する部分が2箇所あり、右側では各チャンネルのパラメータの確認と、ROI 設定ができるようになっています。

4.4.1 SSD 選択 (MCA スペクトル)

チャンネル選択は2箇所で行えますが、左上での選択(図 22)は排他的で、一度に1つのチャンネルだけが選べます。ここで選んだチャンネルは画面右の「SSD の各チャンネルの設定」の対象のチャンネルになります。

図 21: SSD 設定タブの全体

図 22: SSD のチャンネル選択 1。ここで選択したチャンネルに対して、画面右側でパラメータの確認を行ったり ROI の設定を行えます。

図 23: SSD のチャンネル選択 2。検出器として SSD-All を選択した測定では、ここで選択したチャンネルのカウントの合計が検出器の出力になります。

4.4.2 SSD 選択 (加算/本測定対象)

一方、左下での選択 (図 23) では、複数のチャンネルを選択することができます。これは、SSD を使用した測定を行う際に加算するチャンネルを指定するためのものです。XAFS 測定や、スキャン、モニターを行う際の検出器として「SSD(19ch All)」を選択すると、画面に描かれるグラフはここで選択したチャンネルだけのデータを加算したものです。ただし、XAFS 測定での測定結果のファイルには、ここでの選択にかかわらず全チャンネルのデータが記録されます。一方、スキャンやモニタの記録ファイルに記録されるのは、画面に描画されているのと同じ選択したチャンネルのだけを加算したデータです。

4.4.3 SSD の各チャンネルの設定

図 24 の 1、「SSD チャンネル」が先に述べた図 22 のチャンネル設定部分でチャンネルを選択すると、選択されたチャンネルに設定されたパラメータが表示されます。

現時点では、SSD の各チャンネルのパラメータの大半 (ピーキング時間、閾値、校正エネルギー、ダイナミックレンジ、ゲイン) は設定値を表示するだけで入力できません。ここで、できるのは、SSD の各チャンネルに対して MCA スペクトルを取得することと ROI を設定することです。以下、図中の番号に対応した説明を行います。

1. SSD チャンネル: 対象となる SSD のチャンネルを選択します。
2. 開始: MCA スペクトルの取得 (計測) を開始します。
「開始」を押すと、全チャンネルに対する計測が同時に始まります。スペクトルを測定しながら 1. でチャンネルを変更すれば、選択したチャンネルの MCA スペクトルが現れます。
「開始」後は表示が「終了」に変わり、これを押すと計測が終了します。
3. クリア: 計測した (全チャンネルの) MCA スペクトルをゼロクリアします。
計測中 (「開始」を押した後) でも、計測停止中でもどちらでも有効です。
4. Log: このボタンをチェックすると、MCA スペクトル表示の縦軸が Log スケールになります。
5. リアル・ライブ: このボタンをチェックすると「リアルタイム」(普通に時計で測った時間) または「ライブタイム」(リアルタイムの中でデッドタイムを除き有効に測定ができていた時間) を選択して、設定した時間で MCA スペクトルの計測を止めることができます (どちらにもチェックを入れなければ計測はいつまでも止まりません)⁷。
6. 時間設定: 計測を止める設定時間の入力です。
7. ROI 始点・終点: ROI の始点、終点の設定値の表示と入力を行います。始点・終点の設定はグラフの上でマウスカーソルを用いて行うこともできます。
8. 積分値: ROI 設定範囲内の積分値を表示します。
9. カーソル点: グラフ表示上でマウスカーソルがある点の計測値を表示します。
10. 選択・保存: MCA スペクトルを保存するファイルを選択し、保存を行います。

4.4.4 MCA スペクトルの表示

MCA スペクトルはグラフとして XafsM2 最下段の View タブに表示されます。MCA スペクトルの表示と、そのスペクトルに対して可能な操作に関しては 5.2 節を参照して下さい。

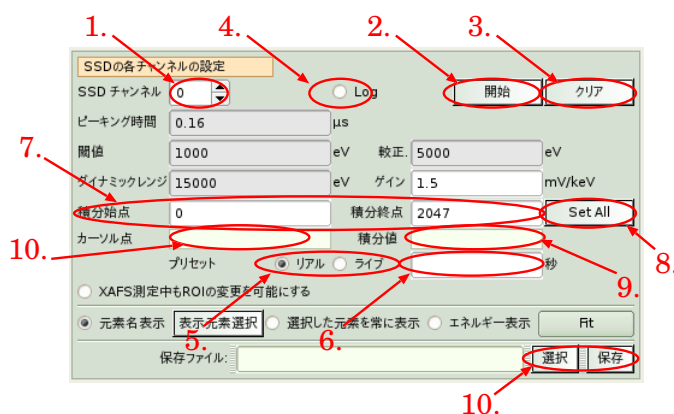


図 24: 選択した SSD のチャンネルの設定部分

⁷現在、「ライブタイム」設定を使おうとすると、以下のような (小さな) 不具合があります。設定できる時間は全チャンネルに対して一つですが、一般に「ライブタイム」はチャンネルごとに異なり得ます。このプログラムで「ライブタイム」設定をしている時、MCA スペクトルの計測が止まるのは、その時に表示されているチャンネルの「ライブタイム」が設定値を超えた時です。

ほとんど問題にならない不具合だと思いますが、チャンネルを頻繁に切り替えて見ているような場合、少し問題になるかもしれません。

4.5 データ読み込み

4.5.1 ファイル選択

図 25 に示す「データ読込」タブでは、XAFS 測定、スキャン、モニタ、MCA スペクトルのデータを読み込んで表示することができます。どのタイプのデータかは自動的に判定され「タイプ」欄に表示されます。

表示はファイルの「選択」を行った時と、その後の「表示」を押した時のどちらでも行われます。

グラフは、XafsM2 の下段の View 選択タブで、その時に選ばれていた View がまだ未使用でもグラフが表示されていない場合、そこに表示されます。既にグラフが表示されていて、グラフのタイプが「XAFS 測定」「スキャン」データの場合には表示しようとするグラフも同じタイプだと、「データ読込」で選択したデータが重ねて表示されます。ただし、横軸が違う場合 (XAFS のデータで、測定エネルギー範囲が違う、SCAN のデータで駆動した軸が違う、駆動範囲が違う等の場合) でも、特に判断せずそのまま表示されます。

グラフのタイプが「モニタ」「MCA スペクトル」の場合、表示されているデータタイプと表示しようとするデータタイプが異なる場合、自動的に未使用の View が選択され、そこに表示が行われます。

整理すると、

- 選択中の View が未使用: 読み込んだデータはそこに表示される
- 「XAFS 測定」「スキャン」のデータが表示中で、表示しようとするデータとタイプが一致: 読み込んだデータはそこに重ねて表示される
- それ以外: 未使用の View が選択されてそこに表示される

となります。

図 26 に示すように、データ読込タブのファイル選択を行う一つの行の右端に並んだ小さなボタンの列があります。ここには、データをグラフ上に表示した時、どの様な色で描画したかを表示すると共に、このボタンを押すと線の色を変更することができます (色の変更は「XAFS 測定」と「スキャン」のデータにのみ有効)。



図 25: データ読込タブでは、XAFS 測定、スキャン、モニタ、MCA スペクトルのデータを表示可能。



図 26: データ読取タブの一つのライン。右端に並んだ小さなボタンの列は、グラフの線の色の表示と選択に使用される。

4.5.2 データファイルの形式

データタイプ: データタイプの判定は、実際にはグラフの先頭の一行を見て行われています。

XAFS 測定データとして、現在 XafsM2 は 9809 フォーマットに準拠しようとしており、読込もこのタイプのデータに対応しています。データファイルは先頭の一行が「(スペース)(スペース)9809」で始まっている時、XafsM2 はそのファイルが 9809 フォーマットの XAFS 測定データだと判定します。

スキャン、モニタ、MCA スペクトルに関してはデータの先頭に XafsM2 を示す次のような文字列が有った時、それぞれのタイプのデータだと判断します。

- スキャン: 「# XafsM2 Scan Data」
- モニタ: 「# XafsM2 Monitor Data」
- MCA スペクトル: 「# XafsM2 MCA Data」

現在、XafsM2 は上記以外のデータを読み込みません。

データの中身: 前述したように、「XAFS 測定データ」のフォーマットは「9809」フォーマットです。その他のタイプのデータでは、先頭に数行「#」から始まるコメント行があり、その後にデータ本体が続く形式になっています。

コメント行には、計測開始日時、データを測定した検出器、駆動軸、等の情報が適宜書き込まれています。実際に何が書かれるかは変更される可能性があるのですがここでは明記しませんが、テキストエディタ等でファイルを開いてみるとその意味が明確に分かる形式で記録します。

データ本体は、タブ/スペース区切りのデータ列が行をなして並んでいます。各行の先頭は横軸に相当する数字、駆動軸や時間、MCA のチャンネルで、2 番目以降の数字がデータです。

4.5.3 View を閉じる

図 25 に示すデータ読込タブの一番下には、「View を閉じる」ボタンがあります。このボタンを押すと、その時に選択されて表に表示されている View が閉じられます。但し、XAFS 測定中で、そのデータを表示している View など、使用中の View は例外で閉じようとしても閉じないはずです。

4.6 ログ/記録

図 27 に示す「ログ/記録」タブには、操作やビームラインの状態に関するログが残るようになる予定です。現状ではここに残す必要がある情報と不要な情報の整理があまりついていません。このため、記録が有用に働くかどうかは不明ですが、少なくとも分光器の移動の情報だけは記録さ



図 27: ログ/記録タブには、(現在はまだ整理できていないが将来は) Xafsm2 に対して行った操作やビームラインの状態に関する情報が表示され記録される。

れます。近い将来には情報を整理し、軸の移動の記録とシャッターの開閉、リングのカレント等の情報が残せれば良いと思っています。

「ログ/記録」タブの上部では、ログファイルを変更できるようになっています。デフォルトでは、Xafsm2 を起動した日付のファイル名が選択され記録されています。

ログ/記録タブの上部には、コメント入力欄があります。ここで入力したコメントは、ログの一部として記録されます。

4.7 状態/設定

【注意】 通常、ユーザにこのタブの内容は必要ありません。

図 28 に示す「状態/設定」タブには Xafsm2 プログラムの内部の状態を表示したり、Xafsm2 の動作にとって重要な設定 (重要なので簡単に変更してほしくない設定)、通常あまり変更しないような設定が集まっています。

4.7.1 Stars サーバとの接続

Xafsm2 はほとんどの場合、モータや検出器などの外部の機器を、「Stars」と呼ばれるメッセージ交換サーバを通じて制御し、値を得ています。図 30 に示すように、「状態/設定」タブの先頭にあるのは、Stars サーバとの接続の設定とその状態表示です。

「Stars サーバ設定」では、この Stars サーバのアドレスと通信に使用するポートを指定します。これは非常に影響の大きい設定ですので、通常は変更しないで下さい⁸。

【注意】 BL5S1 では アドレス 192.168.51.204、ポート番号 6057 です

⁸サーバ機で Xafsm2 を動かしている場合、Stars サーバの設定が「localhost」(自分自身) になっている可能性があります。これは正しい状態です



図 28: 「状態/設定」タブ。通常ユーザーは気にするひつようがない部分です。重要な設定、稀にだけ使う設定トラブル対策のための情報表示があります。

「接続」の欄が緑色に表示されていれば正常ですが、赤色の時には接続できていません。接続できていない場合、理由は幾つも考えられますが、試すべき最初の対処法は「再接続」を押してみることです。

4.7.2 Stars 経由でのデバイスとの接続

XafsM2 は Stars との接続や、Stars を経由した他の機器との接続をダイナミックに扱っていて (最初に定義ファイルに書かれていないものには繋がりませんが)、Stars サーバとの通信ができた/できない、自身が使おうとするデバイスが Stars サーバにつながって ready 状態になっている/いない、ということを把握しています。「状態/設定」タブの二番目のブロックではその接続状況や、通信に関する内部変数の状況が表示されています。

ドライバ状態監視ボタン 二番目のブロックの先頭には「ドライバ状態監視」ボタンがあります。このブロックでの Stars ドライバとの「接続状態」の表示は、プログラムの内部状態を直接反映して表示内容が刻々変化します。測定によっては、頻繁に通信が起こるような制御を行なう可能性があり、その時 CPU パワーが足りないと、この表示が動作の妨げになる可能性があります (可能性だけで実際に妨げになっているのを確認したことはありません)。その場合には、この「ドライバ状態監視」ボタンのチェックを外せば、ドライバの状態監視が止まり、表示も行われなくなります。

ドライバ状態表示 二番目のブロックの残りの部分は、XafsM2 が Stars に要求するドライバの種類とその状態を示しています。

各行を先頭から見ると、

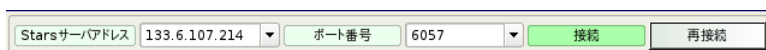


図 29: Stars サーバとの接続設定と状態表示。

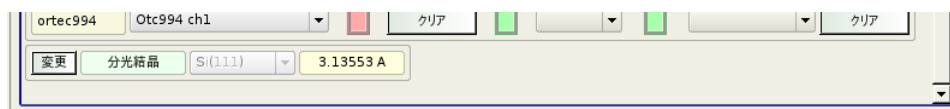


図 30: 選択されている分光結晶の表示と設定。

1. ドライバ: XafsM2 が Stars に要求しているドライバの名前、
2. デバイス: そのドライバ経由で接続しているデバイス名 (チャンネル名) の一覧、
3. Enable: そのドライバが有効かどうか
4. Clr. Enable: 強制的に (接続されていなくても) Enable 状態に変更するボタン
5. IsBusy: そのドライバから、Busy 状態を告げる信号が来ているかどうか (Busy であれば赤)。
6. Busy Units: Busy になっているデバイス名のリスト。
7. IsBusy2: XafsM2 の内部的に、そのドライバと通信中で Busy 状態になっているかどうか (Busy であれば赤)。
8. Busy2 Units: Busy になっているドライバ名のリスト。
9. Clr. Busy: XafsM2 内部の Busy フラグをクリアし、ロックしている処理を強制的に進める。

というような意味と機能を持ちます。

ここに書いたように、「Clr.Enable」、「Clr.Busy」ボタンを使うと、デバイス異常の状態から逃げることができます。XafsM2 では、かなり気を使ってデバイスの状態監視を行なっているので正常動作していないデバイスを使用しようとしてロックされ、操作が立ち行かなくなる、という事はめったに起こらないと期待しています。しかし、かなり稀にですがその様なことが起こることがあり得ます。例えば、ある検出器がダウンしているのに、そのステータスが Stars 経由でうまく伝わらなかった場合、不調の検出器を指定して XAFS 測定をスタートしてしまうと、検出器からの返答がないので、測定が進まなくなることがありえます。その場合でも、赤表示の横の、「Clear Busy」ボタンを表示が緑になるまで何回か叩くと問題のあるデバイスを使おうとしたことによるロック状態からは逃げるすることができます。この方法では、不調デバイスの調子が直るわけではありませんが、少なくとも、不調デバイスを使わない測定を改めて進めることができます。

4.7.3 分光結晶設定

【注意】 BL5S1 ではここでの設定は不要。「Si(111)」が正しい設定です。

「状態/設定」タブの三番目のブロックでは分光器の結晶の種類と面方位 (格子定数) を選択できます。ここで設定した値は、分光器の角度から分光された光の波長やエネルギーを計算するのに使われます。分光結晶が選択できるビームラインでは、使用している結晶に合わせて選択する必要があります。非常に影響の大きなパラメータですので選択する際には注意を払って下さい。

5 グラフ表示部

XafsM2 の画面下部半分ほどを占めているのは、グラフ表示部です。表示部は、View1, View2, ..., View10 と全部で 10 面あり、適宜切り替えて表示できます。

XafsM2 を操作することでグラフが描かれる場合、基本的にはその時に選択・表示されていた View に対して描画が行われます。一旦、描画が始まると、他の View に切り替えても、元の View に対して描画が続きます。従って「一つ前の測定結果のグラフを残したまま、次の測定を始めて結果を見比べる」、「スキャンを行なってその結果を残したまま XAFS 測定を行う」というようなことが簡単にできます。

逆に、既に何かが描画されている View を表示している状態で、View に描画されるような操作 (XAFS 測定やスキャンなど) を行くと、通常は前の表示は消されてしまって新たに描画が始まることとなります。ただし、「データ読込」を行おうとし、データのタイプが「XAFS 測定」「スキャン」の場合で、表示されているのも同タイプのデータの場合、古い画面は消えず、読み込まれたデータが重ねて表示されることとなります。

5.1 XAFS 測定、スキャン、モニタデータ表示

「XAFS 測定」タブで XAFS 測定を行う際、「条件設定」タブからスキャンまたはモニタを行う際には、ほぼ同じ形式のグラフ表示 (図 31) になります。

横軸は、エネルギーや時間、モータの回転量で、縦軸が計測値です。 I_0 が測定されていれば、 I_0 も同時に表示されます。この時、左の軸には、測定対象の計測値のスケールが、右の軸には I_0 のスケールが表示されます。

5.1.1 表示色

複数のグラフが描かれる場合、グラフの各線は色分けして表示され、軸のメモリや数字、マウスカーソル位置の値の表示など、各線に対応した表示は線と同じ色になります。

「データ読込」タブでデータを重ね書きした場合、線の色は「データ読込」タブで変えられます。

例えば、通常の XAFS 測定中は I_0 が黒色で、 $\mu(E)t$ が赤色で描画されます。その際、 I_0 のスケールは、右の縦軸に表示され、 $\mu(E)t$ のスケールは左の縦軸に、区別して表示されます。「データ読込」で複数のグラフを重ねると、左右の縦軸に対応する線が複数出てきますが、その場合には、マウスカーソルをどれかの線に近づけると、その線のスケールが表示されるようになります。どの線のスケールが表示されているかは色で判断できます。

縦軸を 1 つだけ (2 つだけ) にする指定 (今は、複数のグラフを表示した時、縦方向には各グラフを独立にスケールリングしていますが、これをやめて、全部を同じスケールにする) も将来はできるようにする予定です。

5.1.2 スケール変更 (移動・拡大・縮小)

グラフは通常、横軸は決められた測定範囲が目一杯、縦軸はその時点までの測定値の振れ幅目一杯が入るように自動的に縦軸、横軸の範囲が決められスケールが調整されます。

そうではなく、自分で表示される範囲や拡大率を変えたい場合、オートスケールをやめることで操作ができます。

1. グラフの左下隅に「A. Scale」と表示されている横の緑の四角をクリックして下さい。四角が暗い緑になると、オートスケールされなくなり、自分でスケールを決められるようになります。
2. 移動: グラフ上の適当な場所でマウスの左ボタンを押し、そのまま動かして下さい。ちょうど、グラフ上のその場所を掴んだような感覚でグラフを平行移動できます。
3. 拡大・縮小: マウスポインタをグラフ上の適当な場所に置いて、マウスのホイールを回して下さい。その点を中心にグラフが等方的に拡大・縮小されます。
4. 範囲指定: シフトボタンを押しながら、マウスの左ボタンでグラフ上の適当なエリアを指定すると、その範囲がグラフの全面になるように拡大されます。

オートスケールボタンを押してオートスケールに戻すと移動や拡大縮小はリセットされて元の状態に戻ります。

注意: 範囲指定や拡大縮小の操作に使うシフトボタン等は変更される可能性があります。

5.2 MCA 測定データ表示

SSD の出力を MCA 表示するグラフは図 32 の様になります。横軸は MCA のチャンネル(エネルギーに対応)で、縦軸はカウント数です。

5.2.1 画面中の情報

画面内の左端には、表示中の SSD のチャンネル番号、マウスカーソルが置かれた位置(エネルギーに相当)、カウント数等の情報が表示されます。この中で「実時間」は計測を行った時間、「ライブ時間」ディテクタが有効に働いていた時間の積算を示します。デッドタイムは、

$$\frac{\text{実時間} - \text{ライブ時間}}{\text{実時間}} \times 100$$

で、ディテクタが有効に働いていなかった時間を%表示したものです。

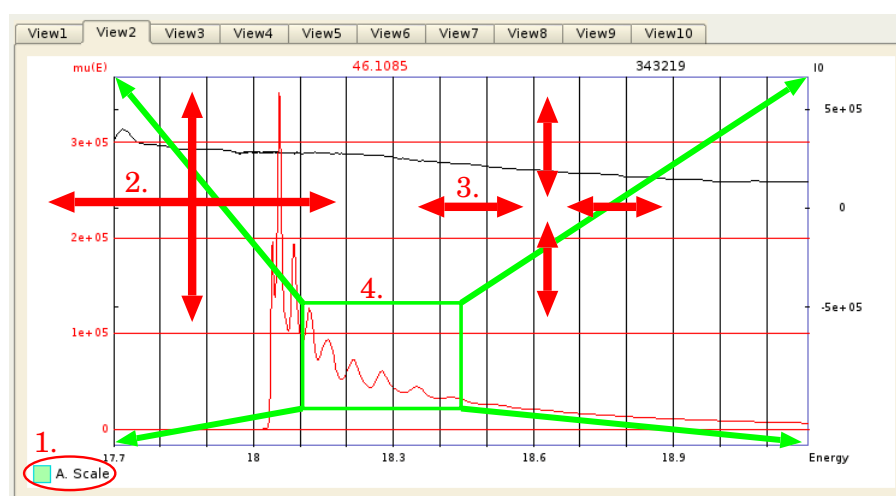


図 31: 「XAFS 測定」や「スキャン」の際に表示されるグラフの形式と操作

5.2.2 ROI の設定

画面中でマウスの左ボタンを押してドラッグすることで ROI を設定できます。画面中では ROI の範囲は緑色に、範囲外は青色に表示されます。

すでに設定した ROI を修正したい場合、ROI のどちらかの端点にマウスカーソルを近づけると、端点にオレンジ色の線が表示されます。その状態で、マウスの左ボタンを押してドラッグすると、選んだ方の端が修正されます。

オレンジ色の線が表示されていない状態で、左ボタンを押すと ROI の範囲を新規に再設定することになります。

6 標準的な測定操作

XafsM2 を使った「標準的な測定操作」は、ビームライン全体の操作手順とも関係しますので、その解説は他の文章に譲ります。そこでは、

- 標準的な XAFS 測定
- 標準的なエネルギー較正
- 何かの値をモニタしながらのスキャン操作
- 分光器の $\Delta\theta_1$ の調整

などの項目について解説する予定です。

7 起動方法・設定

この章の内容はユーザには不要です。各ラインに合わせて XafsM2 の設定をするひつようがある管理者のための項目です。

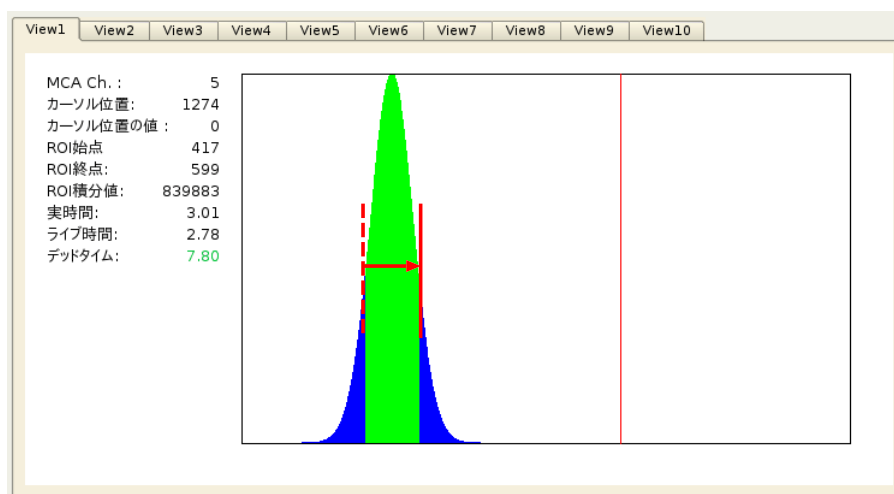


図 32: 「MCA 測定」の際に表示されるグラフの形式と操作

7.1 起動方法

7.1.1 起動に関連したファイルとその置き場所

XafsM2 とその設定ファイル (通常は「XAFSM.dat」) を同じフォルダ/ディレクトリに置いて実行するのが最も基本的な起動方法です。

XafsM2 は Stars との通信に使う key ファイル (XafsM2.key) 中身をプログラム自身の内部に持っていますので、通常 key ファイルを準備することは不要ですが別のファイルを使う場合は、それと同じフォルダ/ディレクトリに置いて下さい。

Windows だけの設定 XafsM2 を Windows 上で動かす場合には、Qt4 と gcc (XafsM2 の開発環境) が要求する幾つかの DLL が必要になります。これも同じディレクトリに置くか実行パスが通ったどこかのフォルダに置いて下さい。Qt4 を使って開発している他のプログラム (例えば BLC2 や cMos) にも同じ DLL が必要になります。

7.1.2 起動オプション (設定ファイル、動作言語の指定)

XafsM2 を起動する際以下のオプションが指定可能です。

- '-j' : XafsM2 を日本語モードで起動します。(default)
XafsM2 の画面内の表示やメッセージが日本語になります。
- '-e' : XafsM2 を英語モードで起動します。
XafsM2 の画面内の表示やメッセージが英語になります。
- '-d file-name' : XafsM2 の設定ファイルを指定します。
指定しなければ設定ファイルは XAFSM.def です。このオプションを使うことで、XAFSM.def を XafsM2.exe と別のフォルダーに置くこともできます。

7.2 定義ファイル

定義ファイル(デフォルトは XAFSM.def、-d オプションで変更可能)に書かれる内容は大きく分けて 3 種類あります。1 つは、XafsM2 の動作を指定するパラメータ。残り 2 つは、XafsM2 が制御する駆動軸 (モータ類) の定義と XafsM2 が使用する検出器 (カウンタ、電流計、電圧計...) の定義です。

定義ファイルの内容は、1 行が一つの指定になっています。# で始まる行はコメントです。行の途中に # が出てきた場合、# 以降はコメントです。

行の先頭の単語がその行で何を指定するかを決定します。各行の中では項目は「空白」(スペースまたはタブ) で区切って並べます。連続したスペースやタブが幾つあっても一つの空白扱いになります。

定義ファイルの内容を XafsM2 が読む際には、一旦は「文字列」として読み込みます。定義ファイルの中で「"」(ダブルクオート) を使用している時がありますが、実際にはこれはあってもなく

でも同じ動作になります。例外は、スペースを含む項目名を指定する場合で、その際にはダブルクォートで括ることが必須になります。

7.2.1 XafsM2 の動作を指定するパラメータ

- XAFSName** [名前]: XafsM2 が Stars サーバに提示する自身の名前
 Stars サーバは、同じ名前のクライアントを同時には一つしか受け付けてくれないので何かの事情で複数の XafsM2 を同時に動かしたい場合 (例えば複数台の PC 上で XafsM2 を動かしたい時)、Stars サーバに提示する名前を変更することが必要です。その際、Stars サーバ側には変更された名前に対応する key ファイルが必要になることに注意して下さい (XafsM2 側では、その内容を変更するつもりでない限り key ファイルの準備は不要です)。
 複数指定した場合、最後の一つが有効です。
- XAFSKey** [名前]: XafsM2 が手元で読む key ファイルの名前 (拡張子不要)
 XafsM2 は Stars との通信に使う key ファイルを自身の内部に持っているので、通常 key ファイルは不要ですが、何かの事情でこれを指定したい場合にはこの指定を使用します。
 複数指定した場合、最後の一つが有効です。
- XAFSTitle** [名前]: 起動した XafsM2 のウインドウのタイトルヘッドに表示される名前
 複数指定した場合、最後の一つが有効です。
- CRYSTAL** [結晶名 (表示用)] [格子定数]: XafsM2 で選択可能な分光結晶の指定
 複数指定した場合は最初の一つがデフォルトで使用され、残りは「状態/設定」タブでから選択可能です (4.7.3 節)。
- AGROUP** [グループ番号] [開始元素名] [終了元素名] [色指定]: 元素選択用の周期表に表示される元素の色指定
 元素選択用の周期表上で、[開始元素] と [終了元素] の間に入る元素のグループの色を指定します。現在グループ番号はどんな数字でも特に意味がありません。色は '#' 記号に続く 16 進数 (0,1,2,...,9,a,b,c,d,e) 6 桁か、“rgb(数字, 数字, 数字)” という表記で指定します。16 進数 6 桁の場合には、前から 2 桁ずつとって 赤、緑、青 の明るさを指定します (#ffff: 白、#000000: 黒、#ff0000: 最も明るい純赤...)。rgb() 表記では、3 つの数字が前から順番に、赤、緑、青の明るさ指定です。「数字」は 0 ~ 255 の範囲の値になります。

7.2.2 駆動軸 (モータ類) の定義

モータの定義をおこなう行は **MOTOR** というキーワードで始まり、例えば次の行のようになります。

```
MOTOR PM "M001" "DTH1" "Dth1" "pm16c04-1" "ch2" "asec" 0.05 INT 0
```

MOTOR 以下に並んでいるパラメータは前から順番に、[モータ種別]、[モータ ID]、[特殊指定]、[表示名]、[ドライバ名]、[ノード/チャンネル名]、[単位名]、[単位/単位移動量]、[実数/整数]、以下各モータ種別に固有の指定、となっています。

- モータ種別 (固定記号): 最初のキーワード **PM** は、モータの制御の仕方で区別されるモータの種類です。**PM** は **PM16C** で制御されるパルスモータであることを示します。現在他に **SC(SC200/400)**、**PZ(ピエゾ)** が指定可能です。
- モータ ID (任意文字列): モータを区別する固有の ID 名です。全モータに違う ID 名を付けて下さい。
- 特殊指定 (固定記号): **XafsM2** に制御されるモータの中で特定の意味を持ったモータであることの指定です。「**DTH1**」は、第 1 分光結晶の角度補正であることを示します。ここでの指定としては、「**THETA**」分光結晶の角度は特に重要で、これが無いと **XafsM2** は正常に動作しません。追加で入れる駆動軸は特定の重要な意味を持たないと思いますので「**GENERAL**」としておいて構いません。
- 表示名 (任意文字列): **XafsM2** 上で、モータの一覧を提示する時などに用いる名前です。
- ドライバ名 (Stars ドライバ名): そのモータを駆動する Stars のドライバ名です。同じ種類のモータであっても、それを担当しているドライバが異なれば違う名前になります。
- ノード/チャンネル名 (Stars ノード名): そのモータを駆動する Stars のノード名です。
- 単位名: 次の「単位/単位移動量」を使って計算される値の単位です。プログラム内では意味がありませんが、表示の際に使用されます。
- 単位/単位移動量: 一つ前の「単位名」と合わせて、モータを駆動する際の単位移動量が実際にどれだけの移動の大きさになるかを示します。表示の際に用いられます。上の例では、**PM** はステップモータですので「単位移動量」は 1 ステップですが、「単位名」= arcsec、「単位/単位移動量」= 0.05 ですので、1 ステップ = $1 \times 0.05 = 0.05 \text{ arcsec}$ だということになります。
- 実数/整数単位移動量が整数か実数かを指定します。パルスモータの場合には整数 (INT)、ピエゾの場合には実数 (REAL) になります。この項目は現在まだ余り意味を持ちません。
- モータ種別に固有の指定: 以下、モータの種類に応じた固有の設定がある場合にはその設定が続きます。詳しくは **XAFSM.def** 内のコメントを参照して下さい。

7.2.3 検出器 (カウンタ、電流計...) の定義

MOTOR 指定に関しては主要なモータがほぼすべて **PM16C** で制御されるため、あまりバリエーションがありませんでしたが、現在 **XafsM2** がサポートしている検出器はかなり種類があります。またこれらは今後も増えていくものと思われます。以下にその記述例を示します。

```

SENSOR CNT "S000" "I0" "Counter 0 (I0)" "nct0801" "ch0" "count" YES "S000"
SENSOR CNT2 "S002" "GENERAL" "I0 via KTL" "nct0801" "ch2" "count" YES "S000"
                                                    "S004" -2 -9
SENSOR OTC "S027" "GENERAL" "Otc974 ch1" "ortec974" "ch01" "count" YES "S027"
SENSOR OTC2 "S031" "GENERAL" "Otc974 ch2" "ortec974" "ch02" "count" YES "S027"
                                                    "S004" -2 -9
SENSOR OTC "S033" "GENERAL" "Otc994 ch1" "ortec994" "ch0" "count" YES "S033"
SENSOR PAM "S004" "Aux1" "Keithley 6485-1" "m6485drv-1" "" "mA" NO ""
SENSOR ENC "S026" "ENCTH" "Encoder Th" "nd287" "" "deg" NO ""
SENSOR SSD "S006" "TotalF" "SSD (19ch all)" "QtXmapSSD" "" "count" YES "S006"
SENSOR SSDP "S007" "SingleF" "SSD-ch00" "QtXmapSSD" "0" "count" YES "S006"

```

SENSOR 以下に並んでいるパラメータは前から順番に、[検出器種別]、[検出器 ID]、[特殊指定]、[表示名]、[ドライバ名]、[ノード/チャンネル名]、[単位名]、[親検出器の有無]、[親検出器]、各検出器種別に固有の指定、となっています。

- 検出器種別 (固定記号): 検出器の制御の仕方で区別される検出器種別です。
 1. CNT : nct08 型のカウンタです。
 2. CNT2 : nct08 型のカウンタですが、計数対象が keithley m6485 の出力なので使用する際には keithley m6485 も含めて制御します。
 3. OTC : ortec974, ortec994 型のカウンタです。ortec974 の場合には KEK で公開されている ortec974 ドライバを使います。ortec994 に関しては、ortec974 ドライバとインターフェイスを揃えた ortec994 専用ドライバ (ortec994 という名前) を使います。
 4. OTC2 : ortec974/994 型のカウンタですが、計数対象が keithley m6485 の出力なので使用する際には keithley m6485 も含めて制御します。
 5. PAM : keithley m6485 型のピコアンメータです。
 6. ENC : エンコーダ。
 7. SSD : Xmap を通して制御される 19ch SSD の全チャンネルを代表したデバイス。
 8. SSDP : Xmap を通して制御される 19ch SSD の個別チャンネル。
- 検出器 ID (任意文字列): 検出器を区別する固有の ID 名です。全検出器に違う ID 名を付けて下さい。
- 特殊指定 (固定記号): XafsM2 に制御される検出器の中で特定の意味を持った検出器であることの指定です。「I0」、「I1」は、通常の測定で I0, I1 に使われるデフォルトの検出器になります。実際には他の検出器でも使用可能なのでそれほど厳密に考えなくても大丈夫です。「TotalF」はかなり特殊な指定で、事実上 Xmap 経由で接続された 19ch SSD 以外に使用できません。また、これが無いと蛍光 X 線関係の動作 (XAFS 測定や MCA) はできなくなります。追加で入れるような検出器は「GENERAL」としておいて構いません。
- 表示名 (任意文字列): XafsM2 上で、検出器の一覧を提示する時などに用いる名前です。
- ドライバ名 (Stars ドライバ名): その検出器に対応する Stars のドライバ名です。同じ種類の検出器であっても、それを担当しているドライバが異なれば違う名前になります。
- ノード/チャンネル名 (Stars ノード名): その検出器に対応する Stars のノード名です。
- 単位名 : 検出器で測定される量の単位名です。プログラム内では意味がありませんが、表示の際に使用されます。
- 親検出器の有無 (YES/NO) : SSD や多チャンネルのカウンタなどは、各チャンネルに対して個別に行う操作と、装置全体として一括で行う操作があります。例えば、カウンタの場合カウンタの開始/停止は個別のチャンネルに対して独立に行うことはできません。この様な一括で行うべき操作を代表して受ける検出器を親検出器とし、そのような検出器がある場合は YES にします。具体的には、CNT, CNT2, OTC, OTC2, SSD, SSDP にはこれが必要です。
- 親検出器の ID (検出器 ID で定義した文字列): 親検出器がある場合、その ID を指定します。

以上の全ての検出器に共通の項目の後に、検出器に固有の項目が並びます。現在、実際にこれがあるのは CNT2 と OTC2 だけで、両者の追加項目は同じです。

- 2nd ドライバの指定 (検出器 ID で定義した文字列) : CNT2, OCT2 はそれぞれ、カウンタ (nct08, ortec974, ortec994) に keithley m6485 の出力がつながっているという特別の状況を表しています。このため、カウンタのドライバ (とその親ドライバ) 以外に、その先に繋がる keithley m6485 のドライバをここで指定します。指定は、ドライバ名ではなく同じドライバを使っている検出器の定義の ID で行ないます。
- レンジ上限 (数値) : keithley m6485 で設定できるレンジの上限を指定します。(通常は -2)
- レンジ下限 (数値) : keithley m6485 で設定できるレンジの下限を指定します。(通常は -9)

7.3 BL5S1 の構成

ここまでで、XAFSM.def ファイルの記述の仕方を述べてきましたが、そこでは BL5S1 がどのような構成をとっていて、どのような使い方を標準にしようとしているかが暗黙に仮定されています。

他のライン用に XAFSM.def を書きなおそうとする場合、今の XAFSM.def に書かれている各定義について、なぜそう書かれていて、他のライン用にする場合には修正する必要があるのかどうかを判断する手助けとして、今の BL5S1 でイオンチャンバがどのように扱われているかを例として示します。

7.4 BL5S1 でのイオンチャンバの接続

BL5S1 で使用可能な検出器は複数ありますが、最も基本となるのはイオンチャンバです。BL5S1 には 3 台のイオンチャンバがあり、そのうち 2 台は I_0 , I 測定のために常時使用可能になっていますが、XafsM2 との接続には 3 つの異なる経路が可能です。

1. イオンチャンバ \Rightarrow 応用光研プリアンプ・V/F コンバータ \Rightarrow nct08 カウンタ \Rightarrow XafsM2
2. イオンチャンバ \Rightarrow Keithley 6485(A/D コンバータとして使用) \Rightarrow XafsM2
3. イオンチャンバ \Rightarrow Keithley 6485(電流アンプとして使用) \Rightarrow V/F コンバータ \Rightarrow nct08 カウンタ \Rightarrow XafsM2

XafsM2 では、1. の接続をした I_0 , I チャンバは選択ボックスに、「Counter 0 (I0)」、「Counter 1 (I)」という名前で現れます。 I_0 , I に繋がった応用光研 V/F コンバータの出力を nct08 の 0, 1 チャンネルにつないでいるからです。

2. の接続は「Keithley 6485-1」、「Keithley 6485-2」という名前で現れます。 I_0 , I の記述がないのは、Keithley には他にも色々なものを接続可能で I_0 , I 以外がつながっている時も多いからです。

3. の接続は、「Counter 2 (I0 via KTL)」、「Counter 3 (I via KTL)」という名前で現れます。 I_0 , I を Keithley 経由で接続していて、V/F コンバータの出力を nct08 の 2, 3 チャンネルに繋いでいるからです。

この 3 種類の接続は、他にも応用可能で、まず第一に、検出器として I_0 , I チャンバ以外のものをつなぐ (例えば Lytle 検出器) ことは常に可能です。その場合は、ユーザーがそれを承知した上で、上述の「Counter 1 (I)」、「Keithley 6485-2」、「Counter 3 (I via KTL)」等を別の用途に転用することになります。

別のケースとして、カウンタとして nct08 ではなく例えば Ortec974 を使うことが可能です。Ortec974 を使う接続は、「Ortec974 ch2」、「Ortec974 ch2 (via KTL)」などという名前で現れます。BL5S1 としては標準の接続ではないため、検出器に何が接続されるかを特定していません。他のビームラインではこの接続が標準になるかもしれません。

いずれにしても、このような様々な検出器とその接続経路を XafsM2 上で何という名前で選択ボックスに提示するかは設定ファイルで決まりますので、つねにこのマニュアルの記述と同じとは限りません。

8 変更履歴

1. 2013/2/18 : 暫定版として一部の人に配布
2. 2013/2/19 : Stars サーバ設定、分光器結晶設定がメニューバーから、「接続状態」タブに移動した事を反映。同時に「接続状態」タブは「状態/設定」タブに。

9 あとがき

中部シンクロトロンでの実際のビームライン建設が始まる前に硬 X 線 XAFS ラインで測定を行う際の、メインの測定プログラムの具体的な雛形として、周辺機器との通信部分を仮想的に扱った XafsM を作成しました。その後 2012 年にビームラインの建設が進み、ビームラインの光学素子からエンドステーションの測定系までの整備が行われた時点で再び測定制御プログラムの作成を再開しました。その際、約 2 年プログラムを放置したこと、その間に行ったビームラインコントローラ BLC2 の開発を通じて、制御対象との通信方法などで XafsM で想定していた手続きよりももっと良いやり方があることが分かってきたことなどから、内部構造の大改定を行い、プログラムの呼称も XafsM2 に改めることとしました。とはいえ、かなりの部分まで作った XafsM を完全には捨てられず、古いコードに自分でも苛立ちを感じつつ、半分以上の部分は XafsM のコードを再利用したため、全体的にあまり綺麗でない読みにくいコードになってしまいました。この点を反省して、将来 XafsM3 がありえるかもしれませんが、当面は XafsM2 をより利用しやすくするための改良に専念するつもりです。

この様に、今の時点の XafsM2 を完成とは思っておらず、現時点でも改良すべきと感じている点はメモ書きで 20 点を超えますので、本当ならば、今の時点でドキュメントを作成するべきで無いかもしれません。しかし、2013 年の春を迎え、ビームラインの供用開始が迫っているため、仮の版になりますがマニュアルを作成しておくことにしました。