

XafsM2

Introduction to
XAFS measurement program Ver. 2
Manual version 0.0

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	2
3.1	元素選択	2
3.2	分光器の状態表示	3
4	機能選択部	4
4.1	XAFS 測定	4
4.1.1	測定ブロック設定	5
4.1.2	検出器設定	6
4.1.3	バックグラウンド	7
4.1.4	データファイル	8
4.1.5	条件確認	8
4.1.6	測定開始	8
4.1.7	測定結果の表示	8
4.2	条件設定	8
4.2.1	分光器回転	8
4.2.2	レンジ選択	9
4.2.3	バックグラウンド確認/設定	11
4.2.4	移動/スキャン	11
4.2.5	検出器モニタ	12
4.3	SSD 設定	13
4.3.1	SSD 選択 (MCA スペクトル)	13
4.3.2	SSD 選択 (積算/本測定対象)	14
4.3.3	SSD の各チャンネルの設定	14
4.3.4	MCA スペクトルの表示	15
4.4	データ読み込み	15
4.4.1	ファイル選択	15
4.4.2	データファイルの形式	16
4.4.3	View を閉じる	17
4.5	ログ/記録	18
4.6	状態表示	18
4.6.1	スターズサーバ状態表示	18
4.6.2	ドライバ状態監視ボタン	19
4.6.3	ドライバ状態表示	19

5	グラフ表示部	20
5.1	XAFS 測定、スキャン、モニタデータ表示	20
5.1.1	表示色	20
5.1.2	スケール変更 (移動・拡大・縮小)	21
5.2	MCA 測定データ表示	22
6	その他の機能	22
6.1	Stars サーバ選択	22
6.2	メッセージ表示エリア	22
7	標準的な測定操作	22
7.1	標準的な XAFS 測定	22
7.2	標準的なエネルギー較正	22
7.3	スキャン	22
7.4	分光器の $\Delta\theta_1$ の較正	22
8	起動方法・設定	22
9	定義ファイル	22
10	XafsM2 で使用可能なデバイス	22
10.0.1	検出器選択設定に現れる検出器の種類	22
11	BL5S1 の構成	23
12	あとがき	23

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。

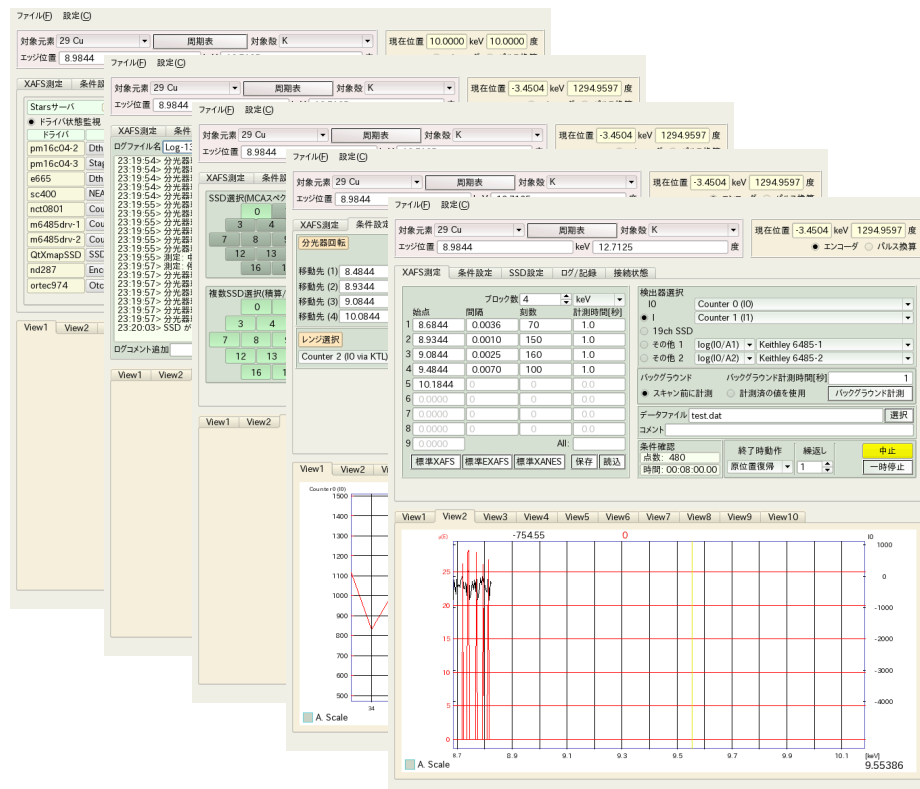


図 1: XafsM2 の全景

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 線エネルギー表示で、常に表示されます。(近くここにリングカレントの表示が追加される予定)

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 の最上段は、元素選択を行うことと、分光器の状態を表示する部分で他の部分でタブ選択を行なって表示を切り替えても常に表示されています。

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



図 2: XafsM2 の概観



図 3: 測定対象の元素選択部分

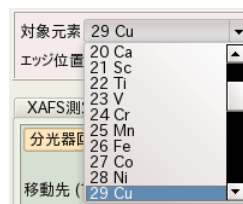


図 4: 測定元素選択ボックスと元素一覧表

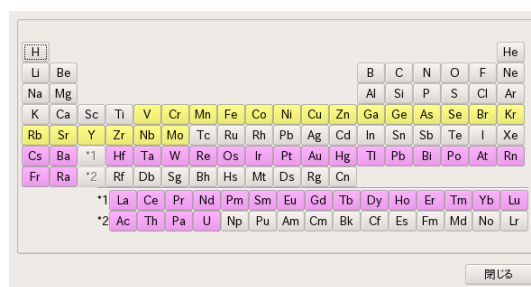


図 5: 周期表を使った元素選択。黄色に表示されているのは K 端がラインのエネルギー範囲に適した元素。桃色に表示されているのは L 端がラインのエネルギー範囲に適した元素。

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) を基準にして行なわれます。

3.2 分光器の状態表示

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

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。メニューバーの「設定」から「結晶・格子定数設定」を選ぶことで、分光結晶を選択するダイアログが現れますが、これは XafsM2 を他の n ビームラインで使用する時の為のもので、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。



図 6: 分光器の角度と分光エネルギーの表示

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。

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定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。そのよう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、また、エンコーダの較正が正しいかどうかは、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、ズレがあった場合でも簡単な操作で修正できます。具体的な方法は 7.2 節を参照して下さい。

【注意】測定結果のファイルに記録される「角度」もしくは「エネルギー」として書き込まれる値も、このチェックボタンの選択で決まります。

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」、「ログ/記録」、「接続状態」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

図 7 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。

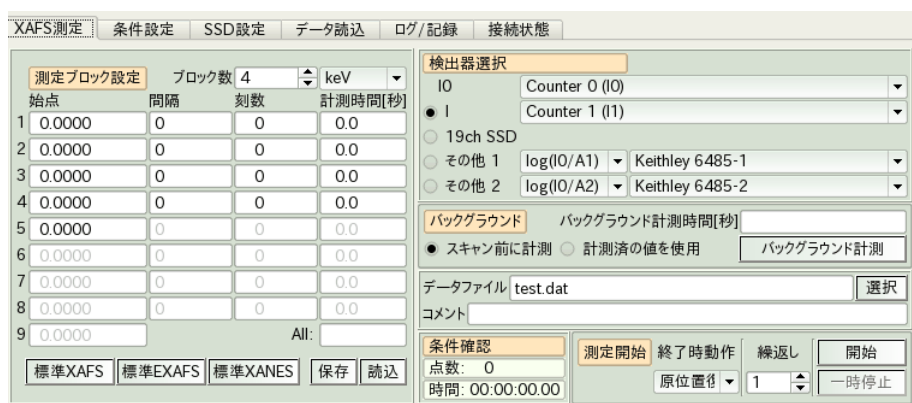


図 7: XAFS 測定タブの全体

図 8: 測定時のブロック設定を行う部分

「測定開始」の項にもありますが、XAFS 測定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。

4.1.1 測定ブロック設定

タブの左半分を占める「測定ブロック設定」部分では、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 8 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。
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を指定します。
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・読込: 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「I」、「19ch SSD」、「その他 1」、「その他 2」は複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。

図 9 に示した 1. 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、いわゆる「9808」型のファイルです。このファイルには、全体で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²。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。

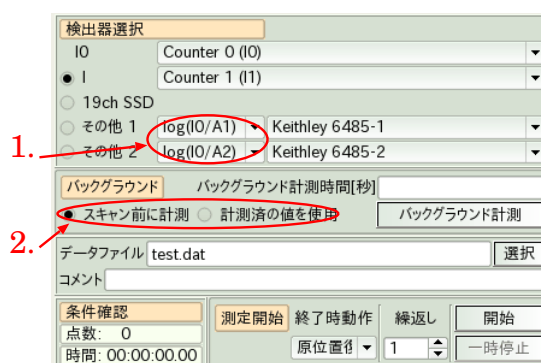


図 9: XAFS 測定タブの右半分

²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すが。

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 10.0.1 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 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 9 の 2. 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 9 の 3. に、計測時間を入力する。
2. 図 9 の 4. 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 10 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(不要ならば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。

「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³。



図 10: 「バックグラウンド計測」ボタンの変化

³近い将来シャッターの開閉を自動でお行なうようにする予定ですので、「表示に従ったボタン操作」は不要に和るかもしれません。

4.1.4 データファイル

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。

この、拡張子を変更され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。

4.1.5 条件確認

XAFS 測定タブの右最下段の「条件確認」の項には、総測定点数と予想測定時間が表示されます。この項目はどちらも表示だけです。予想測定時間は測定点数に確定点の測定時間をかけて加えたただけのもので実際の測定時間はこの 1.5 倍程度になることがあります。

4.1.6 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。

4.1.7 測定結果の表示

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??節を参照して下さい。

4.2 条件設定

図 11 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。

4.2.1 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 12)。

図 12 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。

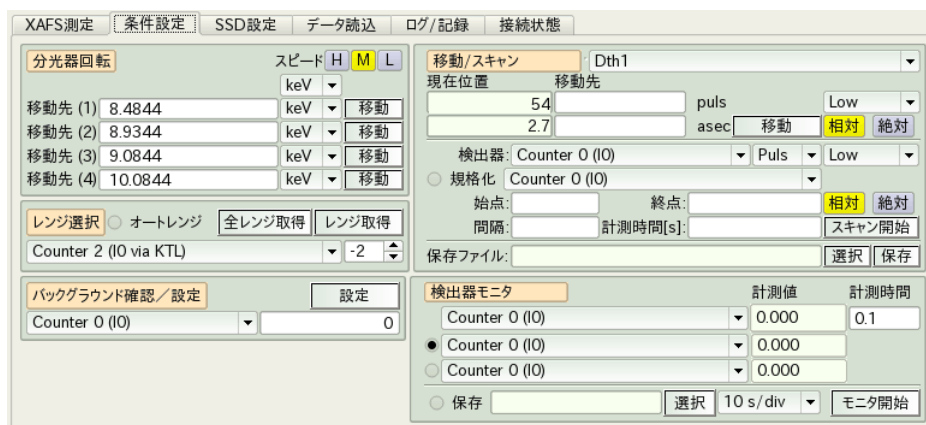


図 11: 条件設定タブの全体

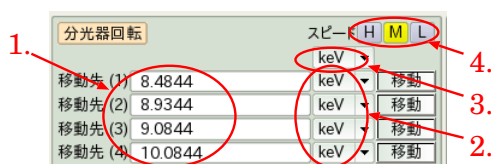


図 12: 分光器を希望のエネルギー、角度に移動させる

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 12 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 12 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 12 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。どの速度を選んでも構いませんが、「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。

4.2.2 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



図 13: 測定器のレンジ選択

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 (10.0.1 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 13) では、このレンジ設定を行います。

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: 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. 対象の検出器を手動でオートレンジにする。
2. 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。
3. その条件下で対象の検出器を動作させる。
4. 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。
5. 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。

- 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「Auto Range」を選び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、Auto Range 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す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。

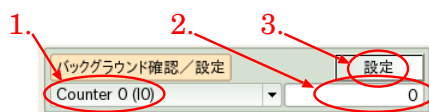


図 14: バックグラウンドの設定

どれも当たり前の方法ではありますが、この通常の手順を XafsM2 をどう使って行うかの参考にして下さい。

4.2.3 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 14)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。

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。

4.2.4 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 15)。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。

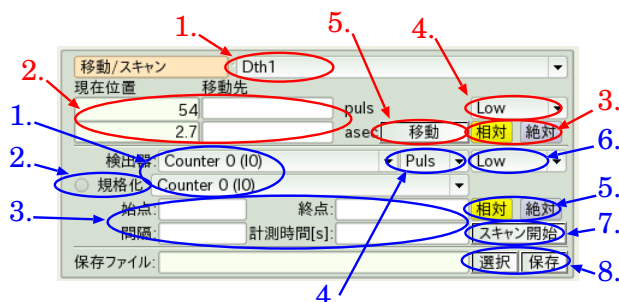


図 15: 駆動軸の移動や、移動に伴う検出値の変化を見る

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 puls(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可を選択します。
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??節を参照して下さい。

4.2.5 検出器モニタ

条件設定タブ右下段は「検出器モニター」(図 16) 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 16: 横軸を時間によって検出器の計測値をモニターする。

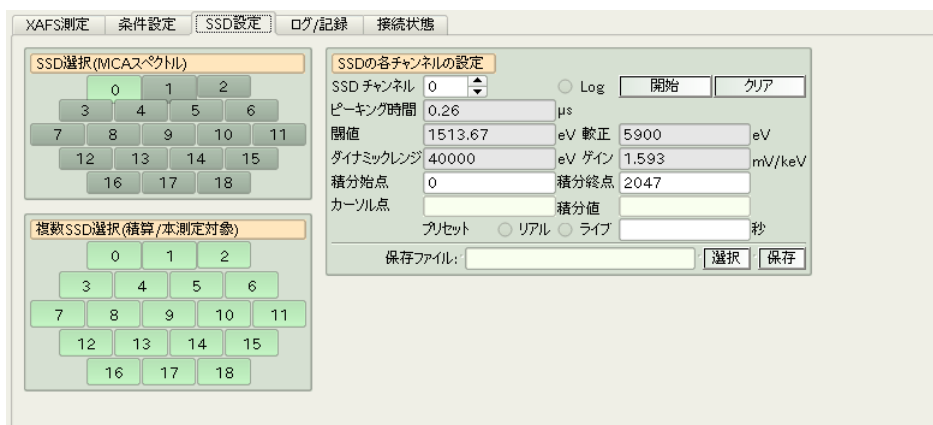


図 17: SSD 設定タブの全体

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??節を参照して下さい。

4.3 SSD 設定

図 17 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。

4.3.1 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 18)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 18: 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 19: 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ターの合計が検出器の出力になります。

4.3.2 SSD 選択 (積算/本測定対象)

一方、左下での選択 (図 19) 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積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積算したものです。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の積算データです。

4.3.3 SSD の各チャンネルの設定

図 20 の 1、「SSD チャンネル」が先に述べた図 18 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。

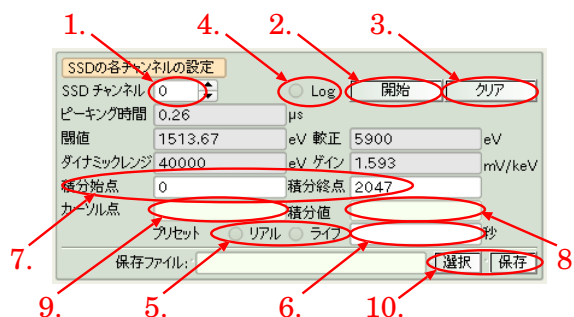


図 20: 選択した SSD のチャンネルの設定部分

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)⁴。
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。

4.3.4 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。

4.4 データ読み込み

4.4.1 ファイル選択

図 21 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 がまだ未使用で何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

⁴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。



図 21: 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。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 22 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 22: 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、グラフの線の色を表示と選択に使用される。

4.4.2 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。実際に何が書かれているかは、テキストエディタ等でファイルを開いてみると一目瞭然だと思います。

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。

4.4.3 View を閉じる

図 21 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、データ表示している 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。



図 23: 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 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。

4.5 ログ/記録

図 23 に示すタブには、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ひつようがある情報と不要な情報の整理がついていません。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。

4.6 状態表示

*** 通常のユーザが、このタブの部分に気にするひつようはありません。 ***

XafsM2 は、周辺の装置・機器類と接続する上で、基本的には Stars を経由して通信しています。図 24 に示すタブには、XafsM2 の定義ファイルで接続を支持されたデバイスとの接続状況や、通信に関する内部変数の状況が表示されています。

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。「状態表示」タブにはその内容が表示されています。

4.6.1 スターズサーバ状態表示

タブの上部は、Stars サーバとの接続状態を示します。「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

ドライバ	デバイス	Enable	Clear Enable	IsBusy	Busy Units	IsBusy2	Busy2 Units	Clear Busys
simmotor	Dth1	緑	クリア	緑		緑		クリア
QtXmapSSD	SSD (19ch all)	赤	クリア	緑		赤	SSD (19ch all)	クリア

図 24: 「状態表示」タブ。通常は気にするひつようがない部分です。何かトラブルがあった時、原因究明の一助になると期待しています。

ますが、試すべき最初の対処法はメニューバーの「設定」から「Stars サーバ設定」を選びその中で「再接続」を押してみる. ことです。

Stars サーバのアドレス、ポートは BL5S1 の場合、192.168.51.204、6057 が正解です。使うコンピュータによっては(自分自身が 192.168.51.204 の場合)、アドレスが「localhost」になっていても構いません。

4.6.2 ドライバ状態監視ボタン

次の、状態表示の項目で述べるように、「接続状態」タブ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。

4.6.3 ドライバ状態表示

「ドライバ状態監視」ボタンに続く行は、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。ここでも前節同様、正常に動いていないデバイスには何かしらの赤の表示が出ます。通信中に一時的に赤色表示になる(チラチラ赤になったり緑になったりする)のは正常ですが、赤のままで変化しない表示が出あったら、そのデバイスが正常に動いていないことを意味します。

各行を先頭から見ると、

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. Clear 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. Clear 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、「状態表示」タブの「Clear」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。

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) を行うと、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になります。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になります。

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になります。

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 I0 が黒色で、 $\mu(E)t$ が赤色で描画されます。その際、I0 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、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。

オートスケールされていない状態では、以下のような操作でスケールを決められます。

1. 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。
2. 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。
3. 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。
4. リセット: 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

6 その他の機能

6.1 Stars サーバ選択

6.2 メッセージ表示エリア

7 標準的な測定操作

7.1 標準的な XAFS 測定

7.2 標準的なエネルギー較正

7.3 スキャン

7.4 分光器の $\Delta\theta_1$ の較正

8 起動方法・設定

9 定義ファイル

10 XafsM2 で使用可能なデバイス

10.0.1 検出器選択設定に現れる検出器の種類

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、2013 年 1 月現在の BL5S1 の設定を例にとって説明します。

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 との接続にはつの異なる経路が可能です。

1. イオンチャンバ \Rightarrow 応研プリアンプ・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 4685(A/D コンバータとして使用) \Rightarrow XafsM2
3. イオンチャンバ \Rightarrow Keithley 4685(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。I0, 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 I0, 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。I0, 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 I0, I チャンネル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。

11 BL5S1 の構成

12 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。