

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	3
5	グラフ表示部	4
6	その他の機能	4
7	標準的な測定操作	4
8	起動方法・設定	4
9	定義ファイル	4

1 はじめに

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知れません。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、仮の版であったとしてもマニュアルを作成しておくことにしました。

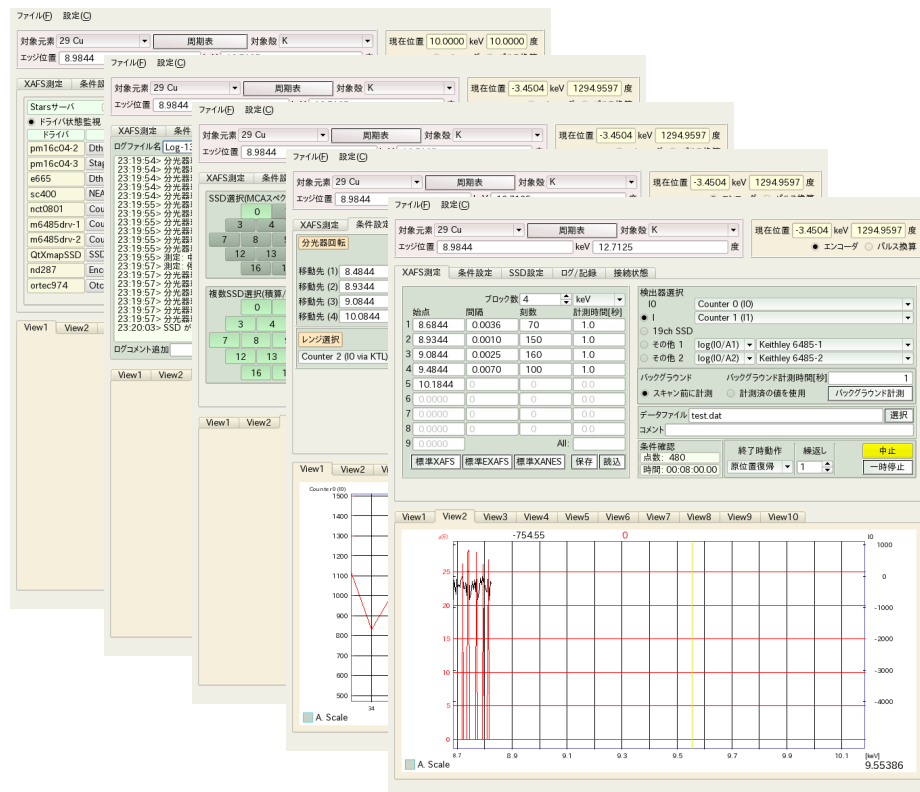


図 1: XafsM2 の全景

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し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、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。

2 段目は、グループ分けされた操作がまとまったタブになっていて、その時時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の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

対象元素	29 Cu	周期表	対象殻	K
エッジ位置	8.9844	keV	12.7125	度

図 3: 測定対象の元素選択部分

対象元素	29 Cu
エッジ位置	20 Ca 21 Sc 22 Ti 23 V 24 Cr 25 Mn 26 Fe 27 Co 28 Ni 29 Cu
XAFS測	
分光器	
移動先	

図 4: 測定元素選択ボックスと元素一覧表

The periodic table shows elements highlighted in yellow and pink. Yellow highlights elements whose K-edge is within the energy range of the target element's K-edge. Pink highlights elements whose L-edge is within the energy range of the target element's K-edge.

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。

ここで元素を選択し、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を基準にして行なわれます。

3.2 分光器の状態表示

4 機能選択部

XAFS 測定条件設定 SSD 設定ログ / 記録状態表示

5 グラフ表示部

XYView TYView MCAView

6 その他の機能

Stars サーバ選択メッセージ表示エリア

7 標準的な測定操作

8 起動方法・設定

9 定義ファイル