

USER GUIDE

User Guide für die Laue-Camera Application

SOFTWARE-VERSION: 1.1.2
DATUM: 19.01.2022
AUTOR: JULIAN KAISER

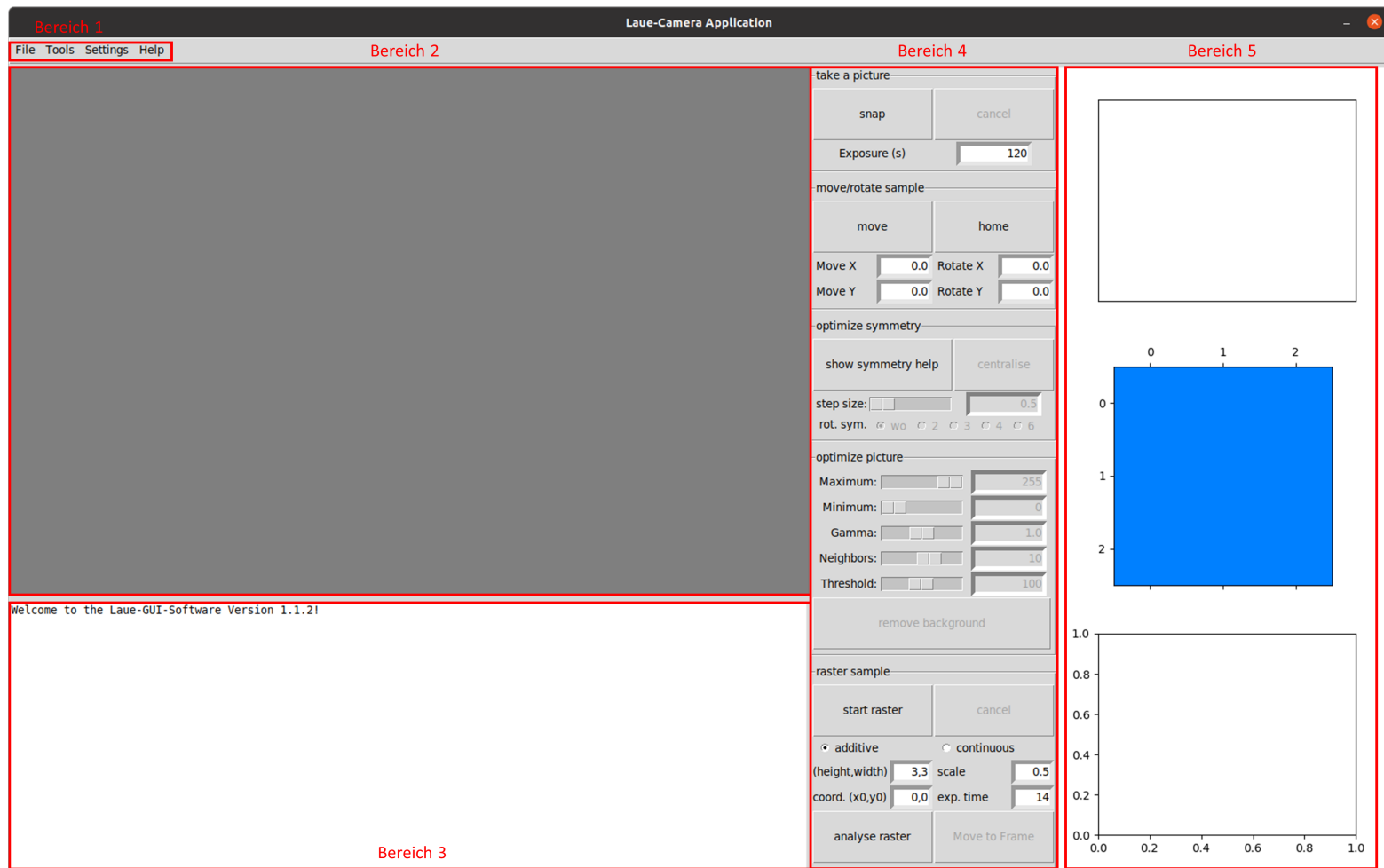


Abb. 0.1: Laue-Camera Application nach dem Start

Inhaltsverzeichnis

Anforderungen	4
Changelog	5
1.1.1	5
1.1.2	5
Bereich 1 - Menü	6
File	6
Tools	7
Settings	16
Bereich 2 - Bildbetrachter	21
Bereich 3 - Konsole	21
Bereich 4 - Arbeitsbereich	23
Sektion 1 - Bildaufnahme	23
Sektion 2 - Translation und Rotation der Probe	23
Sektion 3 - Symmetrisierung	24
Sektion 4 - Bildoptimierung	26
Sektion 5 - Raster über Probe	32
Bereich 5 - Diagrammanzeigen	34
Diagramm 1 - Maximumanzeiger	34
Diagramm 2 - Konturdiagramm	34
Diagramm 3 - Hintergrundfit	35
Outsourced Code	36
Ausblick	38

Anforderungen

Diese Programm wurde auf Python Version 3.8.10 für den PSLViewer Version 3I-CFL von Photonic Science geschrieben. Es ist dazu gedacht, die Bedienung der Laue-Anlage des Lehrstuhls für Experimentalphysik 6 mit einem motorisierten Goniometer sowie die anschließende Bildbearbeitung zu vereinfachen und zu optimieren. Die grundlegenden Funktionen zur Kommunikation mit dem Server und dem Goniometer wurden von Marvin Klinger übernommen und noch weiter ausgebaut.

Da das Programm nur für die Betriebswerte von 20 kV und 30 mA getestet und geschrieben wurde, wird auch empfohlen, diese Werte zu übernehmen. Zudem ist das Programm auf die Darstellung von Na_2IrO_3 -Kristallen optimiert, welche eher schlechte Laue-Aufnahmen generieren. Wird eine andere Verbindung untersucht, sind vermutlich nicht alle Bildanpassungen nötig und manchmal auch andere Einstellungen als die Standardeinstellungen erforderlich. Deshalb wurde versucht, möglichst viele Werte variabel einstellbar zu gestalten. Falls ein Wert veränderbar sein müsste, es aber nicht ist, bitte an den Autor wenden.

Es ist zudem jetzt über dieses Programm sowohl das Goniometer als auch der PSLViewer auf dem nebenstehenden Windows-7 Rechner ansteuerbar, weshalb nun auch über Remotezugriff auf den Linuxrechner eine fast vollständige Kontrolle möglich ist. Damit vor allem der Neustart vom PSLViewer möglich ist, falls dieser einmal abstürzt, müssen zwei Dinge vorab am Windows-7 Rechner eingestellt werden, die so nicht ersichtlich sind:

- Das Programm „cports.exe“ muss im gleichnamigen Ordner auf „Local Disk (C:)“ abgelegt sein. Falls nicht mehr vorhanden, steht es [hier](#) zum Download bereit.
- In der „Task Scheduler Library“ muss der Task „restart_PSL_Viewer_2“ vorhanden sein. Falls dieser nicht mehr vorhanden ist, muss [dieses](#) Tutorial befolgt werden (ohne Iconänderung). Das auszuwählende Programm ist „restart_PSL_Viewer_2.bat“ im Ordner „PSLViewer-3I“ und die erstellte Verknüpfung muss so abgelegt werden, dass das Programm „restart_PSL_Viewer.bat“ im Ordner „PSLViewer-3I“ diese aufrufen kann.

Changelog

1.1.1

- Konvertieren von einem .tif- zu einem .bmp-Raster
- Detektion von Bereichen mit großem Abstand in der Ausrichtung durch die Detektion des Mittelpunktes und der Orientierung des Beugungsbildes
- Unterschiedliche Darstellungsoptionen im Konturdiagramm für Raster mit Mittelpunktsdetektion
- Neue Bewertung eines bereits aufgenommenen Rasters für lange Belichtungszeiten
- Speichern eines an der horizontalen oder vertikalen Bildmitte gespiegelten Bildes

1.1.2

- Bug-fixes für die center-detection Option in einer Rasteraufnahme
- Detektion von kleinen sowie großen Übergängen zwischen unterschiedlichen Kristallorientierungen durch die Methode „advanced raster analysis“

Bereich 1 - Menü

In der Menüleiste ist es im Menüpunkt **File** möglich das in **Bereich 2** angezeigte Bild abzuspeichern sowie ein bereits aufgenommenes Bild oder Raster anzuzeigen. Unter dem Punkt **Tools** stehen einige Werkzeuge zur Verfügung. Im Punkt **Settings** können die veränderbaren Werte angepasst werden und unter dem Menüpunkt **Help** wird dieses PDF-Dokument angezeigt.

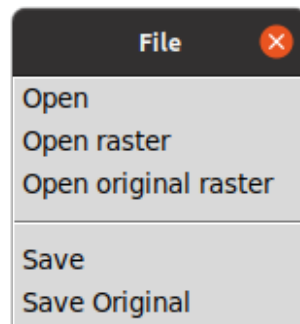


Abb. 1.1: File-Menü mit den verfügbaren Funktionen

File

- **Open:** Öffnet ein Dialog zum Auswählen eines Graubildes mit den Maßen 975x643 Pixel, entweder mit 8-bit („.bmp“) oder höheren Datenformaten („.tif“). Dieser Befehl ist auch über die Tastenkombination „STRG + o“ zu erreichen.
- **Open raster:** Öffnet einen Dialog zum Auswählen eines bereits aufgenommenen Rasters, das in 8-bit und 4-Zonenbildern abgespeichert wurde. Der Dialog zeigt nur Verzeichnisse an, weswegen auch nur der entsprechende Ordner auszuwählen ist (Dialog muss sich im jeweiligen Ordner befinden). Wichtig für die richtige Darstellung in **Bereich 5** ist, dass die entsprechenden Rasterbilder nach Namen sortiert so aufgelistet sind wie sie aufgenommen worden sind. Dieser Befehl ist auch über die Tastenkombination „STRG + r“ zu erreichen.
- **Open original raster:** Öffnet einen Dialog analog zu „Open raster“ und es gelten die gleichen Bedingungen an die Speicherreihenfolge, geladen werden aber „.tif“ Bilder. Dieser Befehl ist auch über die Tastenkombination „STRG + SHIFT + R“ zu erreichen.
- **Save:** Öffnet einen Dialog zum Speichern des angezeigten 8-bit Bildes in **Bereich 2** als „.bmp“ Datei. Dieser Befehl ist auch über die Tastenkombination „STRG +

ALT + s“ zu erreichen. Zusätzlich besteht noch die Möglichkeit einer Schnellspeicherfunktion, die mit „STRG + s“ zu erreichen ist. Diese speichert das aktuelle 8-bit Bild im gewählten Speicherverzeichnis ab und bildet den Dateinamen aus Probenname/nummer, angelegter Spannung und Stromstärke, Abstand zum Detektor, Belichtungszeit, Kommentar und einer aufsteigenden Nummer beginnend mit „000“ immer getrennt durch „-“ (näheres zu den Variablen im Abschnitt [save settings](#)).

- **Save Original:** Öffnet analog zu „Save“ einen Dialog zum Abspeichern des originalen Bildes (größer als 8-bit). Dieser Befehl ist auch über die Tastenkombination „STRG + ALT + SHIFT + S“ zu erreichen. Analog ist auch hier eine Schnellspeicherfunktion vorgesehen die im Dateinamen den Zusatz „original“ trägt und über „STRG + SHIFT + S“ erreichbar ist

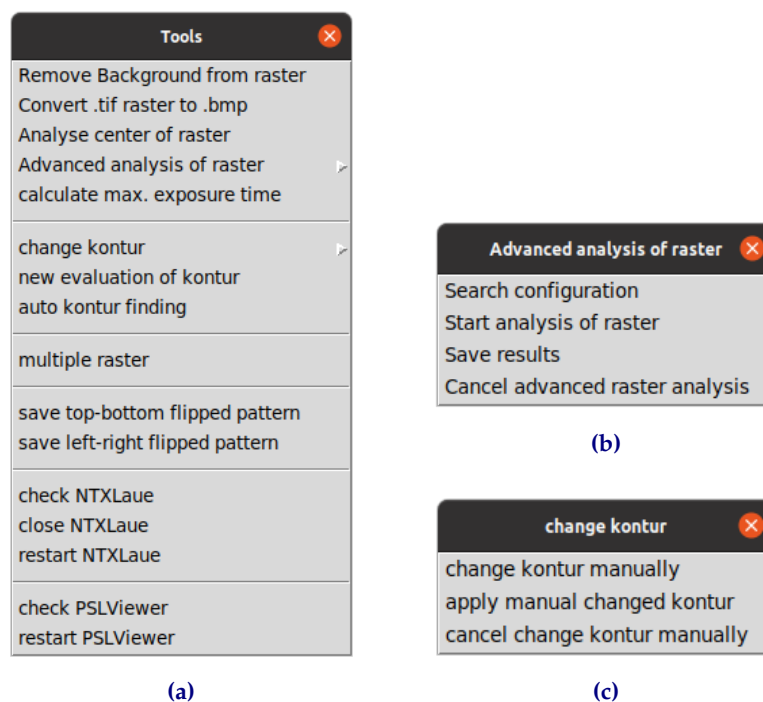


Abb. 1.2: Tools-Menü mit den verfügbaren Funktionen

Tools

- **Remove Background from raster:** Öffnet einen Dialog analog zu „Open raster“ um ein Raster mit Originalbilder auszuwählen, um von jedem aufgenommenen Teilbild den Hintergrund zu entfernen. Wichtig ist, dass keine 4-Zonenbilder ausgewählt werden. Nach der Auswahl öffnet sich erneut ein Dialog, in dem der Speicherordner für die Originalbilder ohne Hintergrund festzulegen ist, in

dem dann ein neuer Ordner erstellt und die Bilder abgespeichert werden. Der Hintergrund wird vom ganzen Originalbild mit den in [Settings](#) festgelegten Optionen abgezogen.

- **convert .tif to .bmp raster**: Konvertiert ein Raster mit Originalbilder (.tif-Dateien) in ein Raster mit 8-bit Bilder (.bmp-Dateien). Dazu wird ein Mittelwert ausgewählt, worauf der maximale Grauwert so angepasst wird, dass das resultierende 8-bit Bild einen möglichst gleichen Mittelwert aufweist. Der festzulegende Mittelwert ist im Bereich zwischen 255 (Maximum) und dem Mittelwert des Originalbildes (Minimum) zu wählen.

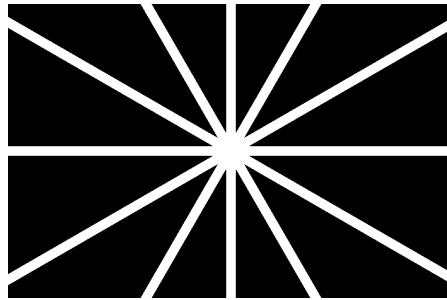


Abb. 1.3: Beispiel für eine Maske mit sechs Linien und einer Linienbreite von 21 Pixeln

- **Analyse center of raster**: Öffnet einen Dialog um das zu analysierende Raster auszuwählen und danach einen Dialog, um den Speicherort der Methode auszuwählen. Die Methode versucht von einem symmetrisierten Beugungsbild den Mittelpunkt und den kleinsten Rotationswinkel im Uhrzeigersinn einer „Linie“ im Beugungsbild von der vertikalen Mittellinie des Bildes zu finden. Dazu wird, je nach den gewählten Einstellungen in [Settings](#), zuerst eine Maske erstellt (siehe Abb. 1.3), die etwas größer als das Bild ist. Der Mittelpunkt dieser Maske wird dann auf jeden Pixel im Suchbereich gelegt und danach der Mittelwert von allen Pixeln berechnet, die nicht von der Maske abgedeckt werden. Um den Rotationswinkel zu bestimmen, wird zudem die Maske an jedem Punkt noch in 1° Schritten gedreht und der Mittelwert der verbleibenden Pixel gebildet, was solange wiederholt wird, bis die gedrehte Maske sich wieder mit der Originalen deckungsgleich überlappt. Die Idee dahinter ist, dass wenn die Maske deckungsgleich mit dem originalen Beugungsbild ist, ist auch der Mittelwert der nicht bedeckten Pixel minimal. Dies lässt sich durch die Auswertung der resultierenden Mittelwerte berechnen, indem zuerst für jeden Drehwinkel der Mittelwert von allen Mittelwerten im Suchbereich berechnet wird. Danach wird der kleinste dieser Mittelwerte als beste Orientierung interpretiert und der Mittelpunkt des Beugungsbildes wird durch den Schwerpunkt aller Minima der Mittelwerte im Suchbereich für die entsprechende Orientierung festgelegt. Die Ergebnisse werden zudem noch in dem logfile des ausgewählten Rasters gespeichert, wobei die Daten durch den Präfix „\$\$\$beginCenterData\$\$\$“ und dem Suffix „\$\$\$endCenterData\$\$\$“ von den anderen Daten getrennt sind. Ist ein Raster mit einem logfile geladen, dass auch die Ergebnisse von einer Mittelpunktbestimmung enthält, so können diese

Ergebnisse auch in [Bereich 5](#) dargestellt werden. Mit einem Rechtsklick auf die Kontur, kann zwischen der normalen Kontur des Rasters, der Darstellung der verschiedenen Drehwinkel (jede Farbe steht für einen Drehwinkel vom minimalen (dunkelblau) bis zum maximalen (dunkelrot) Winkel), der Darstellung der gemittelten Abstände von einem Mittelpunkt zu den umliegenden Mittelpunkten oder der Darstellung von den Drehwinkeln und den Abständen addiert.

- **Advanced analysis of raster:** Ermöglicht eine tiefere Analyse eines aufgenommenen Rasters als **Analyse center of raster**, um selbst kleine Übergänge zwischen zwei nicht gleich orientierten Kristallbereichen zu detektieren. **Achtung!** Im Moment wird nur die Analyse von bis zu zwei unterschiedliche Bereiche unterstützt.
 - **Search configuration:** Schaltet um auf die Benutzeroberfläche für die bessere Analyse. Dazu werden alle Buttons in [Bereich 4](#) deaktiviert und der „remove background“ Button durch die zwei Button „add rect“ und „sub rect“. Mit ersterem kann ein weiteres Rechteck in [Bereich 2](#) hinzugefügt und mit zweiterem kann das aktuell ausgewählte Rechteck wieder entfernt werden. Durch einen Linksklick wird ein Quadrat mit 10 Pixel Kantenlänge am Punkt des Klicks gezeichnet, wird die linke Maustaste gedrückt gehalten und über den Bildschirm bewegt, so kann ein beliebiges Rechteck gezeichnet werden. Es ist zudem möglich zwischen den Rechtecken durch einen Rechtsklick in das entsprechende Rechteck zu wechseln, welches dann blau umrandet ist und das inaktive orange. Die Rechtecke definieren die in der Funktion **Start analysis of raster** verwendeten Datenbereiche. Die Koordinaten der linken oberen und der rechten unteren Ecke eines jeden Rechtecks sind mit einem Doppelklicken der rechten Maustaste in das entsprechende Rechteck veränderbar. Zusätzlich sind nun auch die beiden Schieberegler für „neighborhood“ und „threshold“ bedienbar. Diese sind für jeden einzelnen Datenbereich separat einstellbar. Im Diagramm 1 von [Bereich 5](#) wird nun das Ergebnis der Funktion von **Start analysis of raster** angewandt auf den ausgewählten Bereich plus dem in [Settings](#) definierten Zusatz dargestellt, wobei alle detektierten Punkte dargestellt werden, die echten Maxima in Grün und die Falschen in Rot (siehe Abb. 1.4). Zusätzlich wird auch noch die Navigation auf dem Raster aktiviert, sodass vorab die Wirkung der eingestellten Parameter abgeschätzt werden kann.
 - **Start analysis of raster:** In dieser Funktion wird für jeden Bereich versucht eine Fallunterscheidung zwischen keinem, einem Reflex oder zwei Reflexen durchzuführen. Dazu wird zuerst in jedem Bereich mit einer Maximumdetektion versucht alle möglichen Maxima zu detektieren, wobei die Schieberegler „neighborhood“ und „threshold“ in dieser Funktion berücksichtigt werden. Dazu wird zuerst ein Maximum- und ein Minimumfilter (mit dem entsprechenden „neighborhood“) angewandt und aus der Differenz der beiden Resultate eine Wahrheitsmaske erstellt, die für Werte über „threshold“ wahr und für alle anderen falsch anzeigt. Für jeden daraus resultierenden Bereich für Maxima wird dessen Mittelpunkt berechnet und als detektierten

Punkt zurückgegeben. Danach wird an jedem detektierten Maximum eine Gausfunktion der Art

$$f(x,y) = A \cdot \exp \left(\frac{(x - x_0)^2}{\sigma_1^2} + \frac{(y - y_0)^2}{\sigma_2^2} \right) \quad (1.1)$$

zur Überprüfung gefittet. Als Datenbereich wird ein quadratischer Bereich um den jeweiligen Punkt mit der in [Settings](#) festgelegten Breite herangezogen. Die Konstanten x_0 und y_0 sind die Koordinaten des zuvor detektierten Maximums in Pixel und die Variablen A, σ_1 und σ_2 werden versucht über ein „least-square“-Verfahren festzulegen. Ist dies nicht möglich, so liegt auch kein „echtes“ Maximum vor sondern nur eine Misinterpretation des Rauschen durch die vorangegangene Funktion. Es hat sich zudem gezeigt, dass für σ_1 und σ_2 bei falschen Maxima sehr große Werte resultieren, bei echten Maxima hingegen entweder nur ein Wert sehr groß oder beide eher im Bereich der Quadratgröße liegen. Deswegen wird auch nur von einem echten Maxima ausgegangen, wenn mindestens ein Wert von σ_1 und σ_2 unter dem in [Settings](#) festgelegten Maximalwert liegt. Für die Fallunterscheidung werden zudem die noch übrig bleibenden Punkte noch einmal überprüft. Da für die Unterscheidung nur die Anzahl der Punkte entscheidend sein wird, muss von der Gesamtpunktzahl nur die Anzahl der Punkte abgezogen werden, die nicht den Kriterien entsprechen um die korrekte Anzahl zu erhalten. Generell wird nun die Entfernung der Punkte in einem Bereich zueinander untersucht. Dabei darf die Entfernung in Pixel nicht unter (ein Maxima wird doppelt erkannt) und nicht über (Rauschen weit weg vom Maxima oder anderer Punkt wird erkannt) den jeweiligen Werten in [Settings](#) liegen. Liegt nun kein Punkt vor, so kann hier kein Beugungsreflex detektiert werden (Codiert als 0). Bei einem Punkt handelt es sich um einen einkristallinen Bereich (Codiert als 1) und bei zwei Punkte um einen Punkt auf dem Kristall, wo der Röntgenstrahl aufgrund von seiner Ausdehnung zwei Bereiche mit leicht unterschiedlichen Ausrichtungen erfasst (Codiert als 2). Sind zudem mehr als zwei Bereiche ausgewählt, so resultieren noch die Fälle von einem Punkt in jedem Bereich für zwei Bereiche mit großem Orientierungsunterschied (Codiert als 3) und mehr oder einem Punkt pro Bereich, was zudem noch einen kleinen Unterschied beinhaltet (Codiert als 4). Das Resultat der Beurteilung wird im Diagramm 2 in [Bereich 5](#) angezeigt, wobei die Farbcodierung von Blau (0) bis ins rötliche (4 oder aktuelle Position) auch die „Qualität“ der Detektionsfläche auf dem Kristall beschreibt (Blau für gut und rötlich für schlecht).

- **Save results:** Speichert das aktuelle Ergebnis (Kontur in [Bereich 5](#)) einer Analyse in dem im Dialog ausgewählten logfile. Die Daten werden mit dem Präfix „\$\$\$beginAdvancedData\$\$\$“ und dem Suffix „\$\$\$endAdvancedData\$\$\$“ von den anderen Daten getrennt abgespeichert.
- **Cancel advanced raster analysis:** Beendet die aktuelle Analyse von dem Raster und stellt die normale Benutzeroberfläche wieder her.

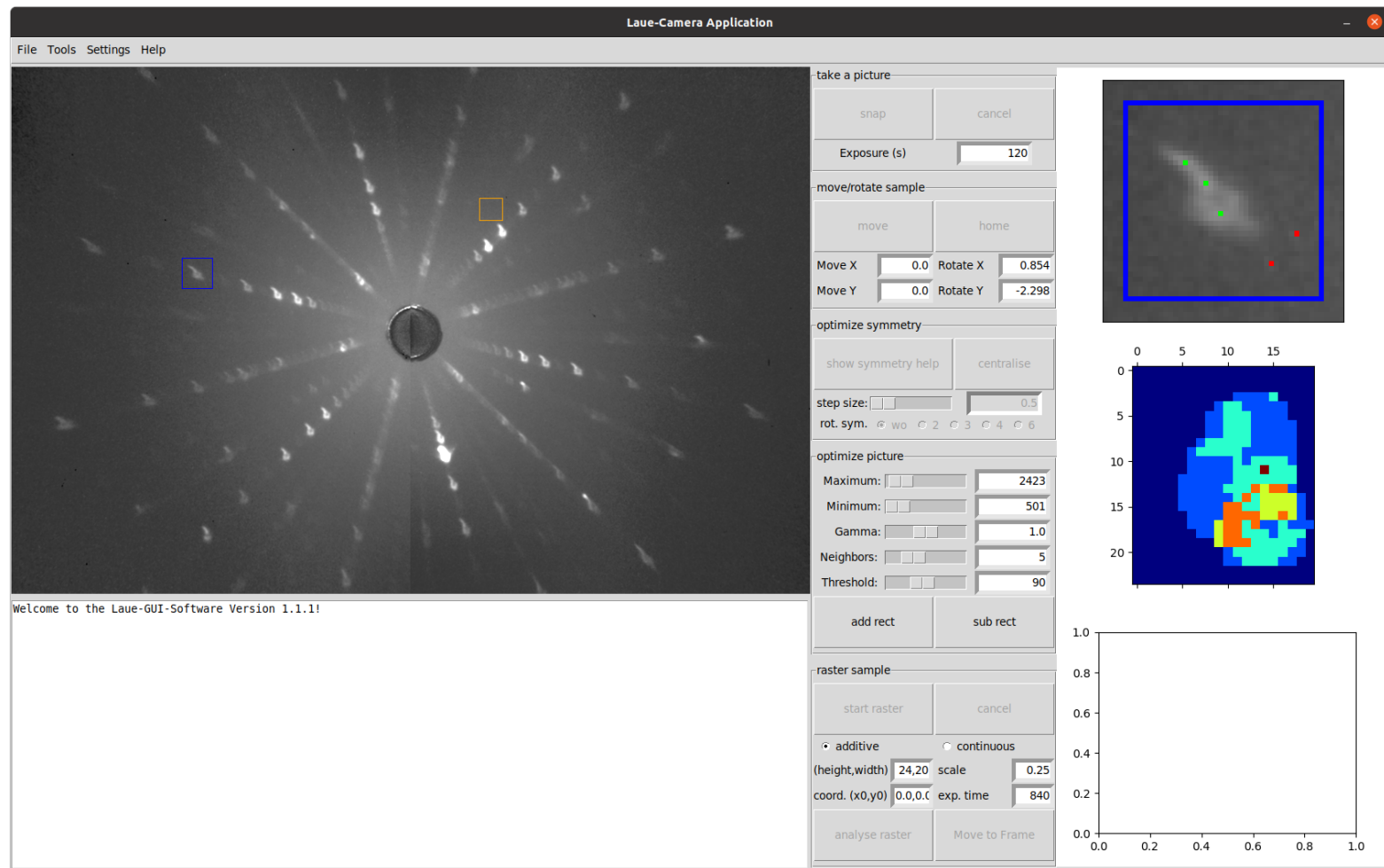


Abb. 1.4: Oberfläche für die erweiterte Analyse. Im Bildbetrachter werden die verschiedenen Analysebereiche angezeigt, blau für den aktuellen Bereich und orange für die anderen. Im oberen Diagramm sind die detektierten Punkte in grün angezeigt für den aktuellen Bereich und in rot die falschen Maxima. Das mittlere Diagramm visualisiert das Ergebnis eines Analysedurchlaufs und der „remove background“-Button wurde durch die zwei Buttons „add rect“ und „sub rect“ ersetzt.

- **calculate max. exposure time**: Berechnet die maximale Belichtungszeit neu. Für nähere Information siehe [Sektion 1](#) in [Bereich 4](#)
- **change kontur**: In diesem Untermenü kann eine Kontur von einem Raster verändert werden, falls der Algorithmus ein oder mehrere Einzelbilder in einem Raster nicht korrekt bewertet. Dazu wird die angezeigte Kontur in [Bereich 5](#) durch „**change kontur manually**“ veränderbar. Mit den Pfeiltasten kann im Raster navigiert und der jeweilige Wert der Kontur an der aktuellen Stelle durch die Zahlen 0 bis 3 verändert werden. Mit „**apply manual changed kontur**“ wird dann eine gespeicherte Kontur ausgewählt, die mit der aktuellen Kontur überschrieben wird. Durch „**cancel change kontur manually**“ wird die Konturbearbeitung beendet.
- **new evaluation of kontur**: Öffnet eine Dialog, um ein .tif-Raster auszuwählen, von welchem die Kontur neu bewertet wird. Dies ist vor allem bei längeren Belichtungszeiten nötig, da dabei eine Entfernung des Hintergrundes nötig ist. Der Hintergrund wird mit der gewählten Methode in [Settings](#) entfernt, das Bild auf 8-bit skaliert und dann gleich wie bei einer Rasteraufnahme bewertet und die resultierende Kontur im logfile des ausgewählten Rasters gespeichert.

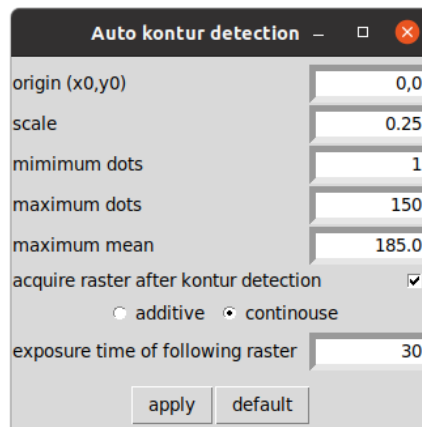


Abb. 1.5: „auto kontur finding“ Dialog mit den zugehörigen Einstellmöglichkeiten

- **auto kontur finding**: Öffnet einen Dialog um die Suchbedingungen zu konfigurieren:
 - **origin (x_0, y_0)**: Nullpunkt der Kontursuche; $x_0, y_0 \in \mathbb{R}$
 - **scale**: Schrittweite; $scale \in \mathbb{R}^+$
 - **minimum dots**: Minimale Anzahl von detektierten Punkte die ein Bild aufweisen muss, um es als Treffer zu markieren; $\min_{\text{dots}} \in \mathbb{N}$
 - **maximum dots**: Maximale Anzahl von detektierten Punkte die ein Bild aufweisen darf, um es als Treffer zu markieren; $\max_{\text{dots}} \in \mathbb{N}$
 - **maximum mean**: Maximaler Mittelwert, bis zu welchem das Bild als Treffer markiert wird; $\max_{\text{mean}} \in \mathbb{R}^+$

- **acquire raster after kontur detection**: Ermöglicht nach der Konturdetektion anschließend ein Raster mit den ermittelten Parametern durchzuführen;
- **additive/continuous**: Auswahl zwischen einer additiven (max. 16 s Belichtung) oder kontinuierlichen (maximale Belichtung) Bildaufnahme (siehe [Sektion 1](#) in [Bereich 4](#))
- **exposure time of following raster**: Belichtungszeit von einem Teilbild im nachfolgenden Raster, $\text{exposure} \in \mathbb{N}$

Die Methode versucht die Kontur der Probe zu erfassen, indem beim festgelegten Nullpunkt begonnen wird in jede Richtung solange mit der Schrittweite zu fahren, bis keine Beugungsreflexe mehr zu erkennen sind (Anzahl der detektierten Reflexe nicht mehr im festgelegten Intervall oder Mittelwert zu hoch). Anschließend werden die Ränder abgefahren, um sicher zu gehen, dass die gesamte Probe mit der Kontur erfasst wurde. Die Belichtungszeit beträgt 31 s.

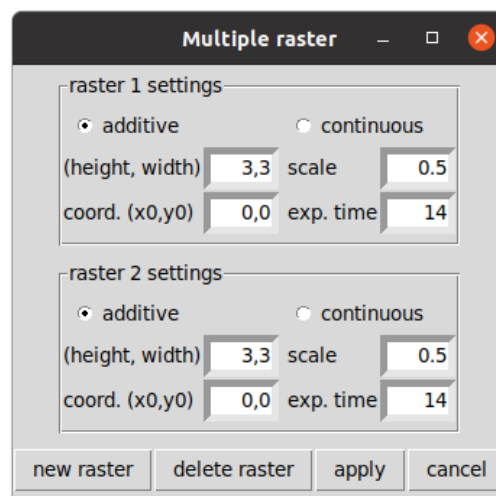


Abb. 1.6: „multiple raster“ Dialog mit den zugehörigen Einstellmöglichkeiten

- **multiple raster**: Wenn hintereinander von der gleichen Probe verschiedene Raster aufgenommen werden sollen, kann dies hiermit eingestellt werden. Dazu öffnet sich ein Dialog, bei dem neue Raster hinzufügbare sind, worauf dann die gleichen Einstellmöglichkeiten erscheinen wie in [Sektion 5](#). Über den Button „apply“ werden dann die voreingestellten Raster nacheinander aufgenommen.
- **save top-bottom flipped pattern**: Speichert das Bild des Beugungsmusters an der Horizontalen gespiegelt. Ist aus dem analogen Grund von **save left-right flipped pattern** manchmal wichtig, denn wird durch eine Drehung der Probe um 180° links und rechts passend ausgerichtet, so ist aber oben und unten vertauscht, wodurch je nach Einbau der Probe eine andere Spiegelung notwendig ist.
- **save left-right flipped pattern**: Speichert das Bild des Beugungsmusters an der Vertikalen gespiegelt. Dies ist hilfreich bei dem Problem für eine korrekte Richtungsbestimmung auf der zugehörigen Probe, was aus der unterschiedlichen

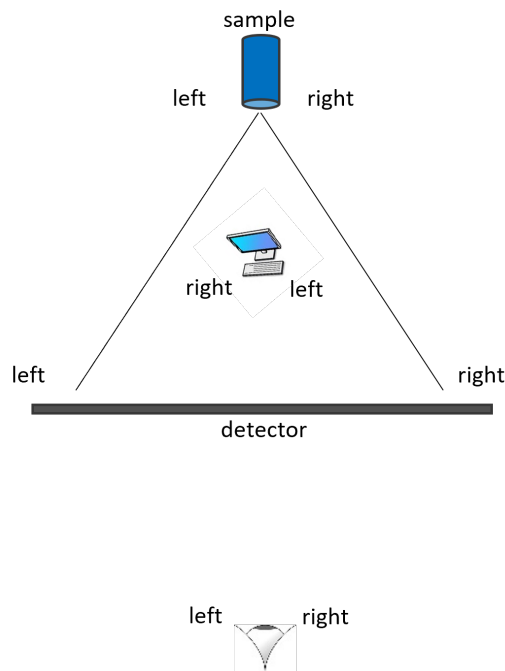


Abb. 1.7: Visualisierung für die Notwendigkeit des Spiegeln des Beugungsbildes oder der Aufnahme der Probe für eine korrekte Richtungsbestimmung auf die Probe (sample). Wird durch Rotation der Probe links und rechts in Einklang gebracht, so tauschen sich dafür oben und unten.

Blickrichtungen bei den beiden Aufnahmen resultiert. Die Blickrichtung (Auge) durch das Mikroskop auf die Probe und damit auch die Orientierung von links und rechts ist genau vertauscht mit der „Blickrichtung“ des Computers auf den Detektor (siehe Abb. 1.7). Dementsprechend muss ein Bild an der horizontalen gespiegelt werden für diese Art des Einbaus der Probe.

- **check NTXLaue:** Überprüft den aktuellen Status (Programm auf anderem PC geöffnet oder nicht) der Kamera und gibt diesen im [Bereich 3](#) aus.
- **close NTXLaue:** Schließt die Kamera und gibt in [Bereich 3](#) den Status aus.
- **restart NTXLaue:** Schließt und öffnet die Kamera und gibt in [Bereich 3](#) den Status aus. Ist die Kamera schon geschlossen, so wird diese wieder geöffnet.
- **check PSLViewer:** Überprüft, ob das Programm „PSLViewer“ und die Datenverbindung zu „server control“ geöffnet und verbundene ist.
- **restart PSLViewer:** Schließt und öffnet das Programm „PSLViewer“ mit „server control“ auf dem anderen Windows-PC über ein Batch-File. Nützlich, falls das Programm nicht mehr reagiert oder abgestürzt ist. Die Datenverbindung muss aber noch offen sein, da ansonsten der Befehl nicht an den anderen PC geschickt werden kann. Durch diese Funktionen ist somit auch eine fast komplette remote-Steuerung vom dem Linux-Rechner aus möglich und damit auch von anderen Orten über TeamViewer.

Settings

max values

gamma2.0
symmetry step size10.0
neighborhood15
threshold200
record 12-Bit images only (Raster and Snap)☐

scroll settings

scroll faktor1.0
scroll step size for int1
scroll step size for float0.01

symmetry center

center position x (px)487.5
center position y (px)321.5

save settings

change save directory

sample name/numberSample_1
voltage (kV)20
current (mA)30
distance (mm)40.0
commentcomment

background remove settings

normal (entire screen)☐
partial (each detector separately)☒
remove dark-current background with polynomial fit☒
auto delta for polynomial fit40
auto increment for polynomial fit40

raster settings

auto background remove during raster☐
calculate max. exposure time during raster☒
enable raster on kontur☐
threshold (time for kontur to time for raster in %)

5.0

center detection settings

enable center detection during raster☐
search width

41

search height

41

search x-offset

0

search y-offset

0

search linewidth

10

starting angle

0

number of lines

6

save info image during center detection☐

advanced raster analysis settings

display offset

5

minimum distance

2

maximum distance

20

maximum sigma

15

size of gaus-check

11

apply

default

Abb. 1.8: „Settings“ Dialog mit den zugehörigen Einstellmöglichkeiten

Settings

max values:

- **gamma**: Maximaler Gammafaktor (Minimum ist 0); $\max_{\text{gamma}} \in \mathbb{R}^+$
- **symmetry step size**: Maximaler Drehwinkel der Symmetriehilfslinien (Minimum ist 0.5); $\max_{\text{sym}} \in \mathbb{R}^+$
- **neighborhood**: Maximale Größe des Bereichs der eingestellt werden kann (Minimum ist 1); $\max_{\text{neigh}} \in \mathbb{N}$
- **threshold**: Maximaler einstellbarer Wert für die untere Grenze in der Maximabestimmung (Minimum ist 1); $\max_{\text{thres}} \in \mathbb{N}$
- **record 12-Bit images only (Raster and Snap)**: Definiert ob nur 12-bit Bilder (Grauwerte nur bis 4095) oder detaillierte Bilder (Grauwerte über 4095 möglich) aufgenommen werden sollen.

scroll settings:

- **scroll faktor**: Faktor mit dem die Schrittweite der Skalen in [Bereich 4](#) gewichtet wird; $\text{faktor} \in \mathbb{R}^+$
- **scroll step size for int**: Schrittweite der Skalen in [Bereich 4](#) mit Ganzzahlen; $\text{stepsize}_{\text{int}} \in \mathbb{N}$
- **scroll step size for float**: Schrittweite der Skalen in [Bereich 4](#) mit Gleitkommazahlen; $\text{stepsize}_{\text{float}} \in \mathbb{R}^+$

symmetry center:

- **center position x (px)**: X-Koordinate des Punktes, auf die im [Bereich 4](#) in [Sektion 3](#) symmetrisiert wird. Zu beachten ist, dass je nach Entfernung zum Mittelpunkt nicht auf alle Punkte symmetrisiert werden kann aufgrund der Limitierung durch das Goniometer. Wird in Pixel zwischen 0 und 975 angegeben. $\text{center}_x \in \mathbb{R}^+$
- **center position y (px)**: y-Koordinate des Punktes, auf die im [Bereich 4](#) in [Sektion 3](#) symmetrisiert wird. Zu beachten ist, dass je nach Entfernung zum Mittelpunkt nicht auf alle Punkte symmetrisiert werden kann aufgrund der Limitierung durch das Goniometer. Wird in Pixel zwischen 0 und 643 angegeben. $\text{center}_y \in \mathbb{R}^+$

save settings:

- **change save directory**: Öffnet einen Dialog, in dem ein Verzeichnis gewählt werden kann, das bei den Dialogen für speichern und laden anderer Dateien als Ursprungsverzeichnis dient oder als Speicherpfad für die Schnellspeicherfunktionen.

- **sample name/number**: Definiert den Namen oder Nummer der Probe, der dann bei den Schnellspeicherfunktionen verwendet wird. Sollte nicht das Zeichen „/“ enthalten, da ansonsten Fehler beim Speichern auftreten.
- **voltage (kV)**: Definiert die angelegte Spannung an der Röntgenröhre in kV. Vorsicht: andere Werte als der Standardwert können zu schlechten oder verfälschten Ergebnissen beim Hintergrundabzug führen! $U \in \mathbb{N}$.
- **current (mA)**: Definiert die Stromstärke durch die Röntgenröhre in mA. Vorsicht: andere Werte als der Standardwert können zu schlechten oder verfälschten Ergebnissen beim Hintergrundabzug führen! $I \in \mathbb{N}$.
- **distance (mm)**: Definiert den gewählten Abstand von Probe zu Detektor. Wert wird auch in [Bereich 4](#) in [Sektion 3](#) für die Symmetrisierungsberechnungen verwendet. $d \in \mathbb{R}^+$
- **comment**: Ermöglicht das automatische Hinzufügen eines Kommentars zu den Speicherfunktionen. Sollte nicht das Zeichen „/“ enthalten, da ansonsten Fehler beim Speichern auftreten.

background remove settings:

- **normal (entire screen)**: Fitfunktion für Hintergrundabzug wird über den gesamten Bildschirm berechnet (siehe Funktion [remove background](#)).
- **partial (each detector separately)**: Fitfunktion für Hintergrundabzug wird für jede Detektorhälfte separat berechnet und von der jeweiligen Hälfte abgezogen (siehe Funktion [remove background](#)).
- **remove dark-current background with polynomial fit**: Entfernt zusätzlich noch den Dunkelstrom-Hintergrund mittels Abzug einer Polynomfunktion (siehe Funktion [remove background](#)).
- **auto delta for polynomial fit**: Legt den Parameter δ für die automatische Berechnung des maximalen Pixelwertes für den Dunkelstrom-Hintergrundabzug fest (siehe Funktion [remove background](#)). $\delta \in \mathbb{N}^+$
- **auto increment for polynomial fit**: Legt den Parameter Inkrement für die automatische Berechnung des maximalen Pixelwertes für den Dunkelstrom-Hintergrundabzug fest (siehe Funktion [remove background](#)). Inkrement $\in \mathbb{N}^+$

raster settings:

- **auto background remove during raster**: Falls ausgewählt, wird während eines Rasters mit einer Belichtungszeit größer als 60s von jedem Bild automatisch der Hintergrund abgezogen und in einem separaten Ordner gespeichert.

- **calculate max. exposure time during raster**: Falls ausgewählt, wird bei einem Raster für jeden Frame einzeln die maximale Belichtungszeit neu berechnet.
- **enable raster on kontur**: Falls ausgewählt, wird vor einem Raster eine „Kontur“ mit den gleichen Parametern und 31 s Belichtungszeit aufgenommen. Danach werden nur die Teilbilder des ursprünglichen Rasters aufgenommen, bei denen in der Kontur ein Treffer detektiert wurde.
- **threshold (time for kontur to time for raster)**: Falls „**enable raster on kontur**“ ausgewählt ist, ist dieses Feld bearbeitbar. Ist das Verhältnis von der Zeitspanne für die Aufnahme der Kontur zu der Zeitspanne für die Aufnahme des ursprünglichen Rasters kleiner als dieser Grenzwert, so wird die Kontur aufgenommen, ansonsten nicht.

center detection settings:

- **enable center detection during raster**: Ermöglicht die Mittelpunktbestimmung von **Tools** während der Aufnahme des Rasters, wodurch die erhobenen Daten dann gleich nach dem Abschluss des Rasters vorhanden sind. Um dies zu garantieren, sollte die Belichtungszeit nicht die Bearbeitungszeit für ein Bild unterschreiten.
- **search width**: Definiert die Breite in Pixel des abzusuchenden Bereichs. Muss ungerade sein um eine symmetrische Aufteilung gegenüber dem Mittelpunkt des Suchfeldes zu garantieren. $\text{width} \in \{1, 975\} \subset \mathbb{N}$
- **search height**: Definiert die Höhe in Pixel des abzusuchenden Bereichs. Muss ungerade sein um eine symmetrische Aufteilung gegenüber dem Mittelpunkt des Suchfeldes zu garantieren. $\text{height} \in \{1, 643\} \subset \mathbb{N}$
- **search x-offset**: Definiert den Offset in x-Richtung (kartesisch) in Pixel vom Bildmittelpunkt, dessen Punkt dann den Mittelpunkt des Suchbereichs darstellt. $\text{x-offset} \in \{1, 487\} \subset \mathbb{N}$
- **search y-offset**: Definiert den Offset in y-Richtung (kartesisch) in Pixel vom Bildmittelpunkt, dessen Punkt dann den Mittelpunkt des Suchbereichs darstellt. $\text{y-offset} \in \{1, 321\} \subset \mathbb{N}$
- **search linewidth**: Definiert die halbe Linienbreite einer jeden Linie in der Maske in Pixel. Werte über 100 sind nicht zu empfehlen, da ansonsten der freie Bereich zu klein wird für eine aussagekräftige Analyse. $\text{linewidth} \in \mathbb{N}$
- **starting angle**: Definiert den Winkel um den die erste Maske gedreht wird, bevor die anderen Masken entsprechend der definierten Anzahl der Linien

erstellt werden. Ist wichtig, wenn eine zu detektierende Linie im symmetrierten Beugungsbild senkrecht steht, da ansonsten eine gute Abgrenzung zwischen Probe und Bereiche neben der Probe in der Winkeldarstellung des Rasters nicht mehr möglich ist. $\text{angle} \in \{0,360\} \subset \mathbb{N}$

- **number of lines**: Definiert die Anzahl der erstellten Linien in einer Maske. Die Linien sind um äquidistante Winkel zueinander gedreht, weswegen auch nur Linienanzahlen bis 10 unterstützt werden. $\in \{1,10\} \subset \mathbb{N}$
- **save info image during center detection**: Legt fest, ob zusätzlich zu den erhobenen Daten noch eine Visualisierung des Suchfeldes und des detektierten Mittelpunktes sowie dessen Koordinaten und Drehwinkel auf dem Bild in einem separaten Infobild gespeichert werden.

advanced raster analysis settings:

- **display offset**: Legt die zusätzliche Pixelanzahl fest, die im ersten Diagramm von **Bereich 5** an jeder Seite zusätzlich zum definierten Bereich angezeigt wird. $\text{offset} \in \{1,300\} \subset \mathbb{N}$
- **minimum distance**: Definiert die minimale Distanz zwischen zwei Punkten, um sie als zwei verschiedene Punkte zu interpretieren. $\text{min}_{\text{dist}} \in \{2, \text{max}_{\text{dist}}\} \subset \mathbb{N}$
- **maximum distance**: Definiert die Distanz zwischen zwei Punkten, ab der die Punkte zu weit auseinander liegen um die gleiche Richtung zu symbolisieren. $\text{max}_{\text{dist}} \in \{\text{min}_{\text{dist}}, 300\} \subset \mathbb{N}$
- **maximum sigma**: Definiert den maximalen Wert für ein Sigma der Fitfunktion im Gaus-Check, um den Reflex als solchen einzuordnen. $\text{max}_{\text{sigma}} \in \{2, \infty\} \subset \mathbb{N}$
- **size of gaus-check**: Definiert die Breite des Quadrats um einen zu überprüfenden detektierten Punkt, aus dem die Daten für den Fit der Gausfunktion herangezogen werden. Muss ungerade für eine symmetrische Aufteilung gegenüber des Mittelpunkts sein. $\text{size} \in \mathbb{N}$

apply:

Speichert die Änderungen und überprüft die Eingaben auf ihre Richtigkeit. Falls Format- oder Wertefehler auftreten, wird der Dialog nicht geschlossen und die Art des Fehlers im **Bereich 3** ausgegeben.

default:

Setzt alle Einträge auf ihre Standardwerte zurück. Damit die Standardwerte auch verändert werden können, existiert eine Textdatei (siehe Abb. 1.9) im Programmordner, in welcher die Standardwerte abgespeichert sind. Das Format ist so festgelegt, dass die Reihenfolge von oben nach unten gleich

wie im Einstellungsfenster ist. Zudem müssen Name und Wert durch „:“ getrennt werden (ohne Leerzeichen), wobei der Wert den gleichen Formatbedingungen genügen muss wie die Eingabetexte im Einstellungsfenster und die Werte der Checkboxes werden mit 0 für nicht ausgewählt und 1 für ausgewählt angegeben.

```
1 gamma max:2.0
2 step size max:10.0
3 neighborhood max:15
4 threshold max:200
5 record 12-Bit images:0
6 scroll faktor:1.0
7 scroll step size int:1
8 scroll step size float:0.01
9 symmetry center x:487.5
10 symmetry center y:321.5
11 sample name:Sample_1
12 voltage:20
13 current:30
14 distance:40.0
15 comment:comment
16 normal bg-remove:0
17 remove dark-current:1
18 auto delta for polyfit:40
19 auto increment for polyfit:40
20 auto bg-remove during raster:0
21 calculate max exposure during raster:1
22 enable raster on kontur:0
23 threshold for kontur-raster:5.0
24 center detection during raster:0
25 search width for center detection:41
26 search height for center detection:41
27 search x offset for center detection:0
28 search y offset for center detection:0
29 linewidth for center detection:10
30 starting angle for center detection:0
31 number of lines:6
32 save info images during center detection:0
33 display offset:5
34 minimum distance:2
35 maximum distance:20
36 maximum sigma:15
37 size gaus-check:11
```

Abb. 1.9: Standardeinstellung der Standardeinstellungen in der Textdatei.

Bereich 2 - Bildbetrachter

Bereich 2 stellt einen Bildbetrachter dar, der 8-bit Graubilder der Größe 975x643 Pixel anzeigen kann. Alle Auswirkungen der Operationen aus [Sektion 4](#) die auf das Bild angewendet werden, sind sofort in diesem Bereich zu sehen.

Bereich 3 - Konsole

Bereich 3 ist die Konsole, die für den Benutzer wichtige Ausgaben visualisiert. In diese kann nicht geschrieben werden, sie dient nur der reinen Information für den Nutzer. Falls einmal nichts mehr angezeigt wird, genügend ein Klick auf die Konsole oder die Betätigung des Mausekneters, wenn die Maus über der Konsole ist.

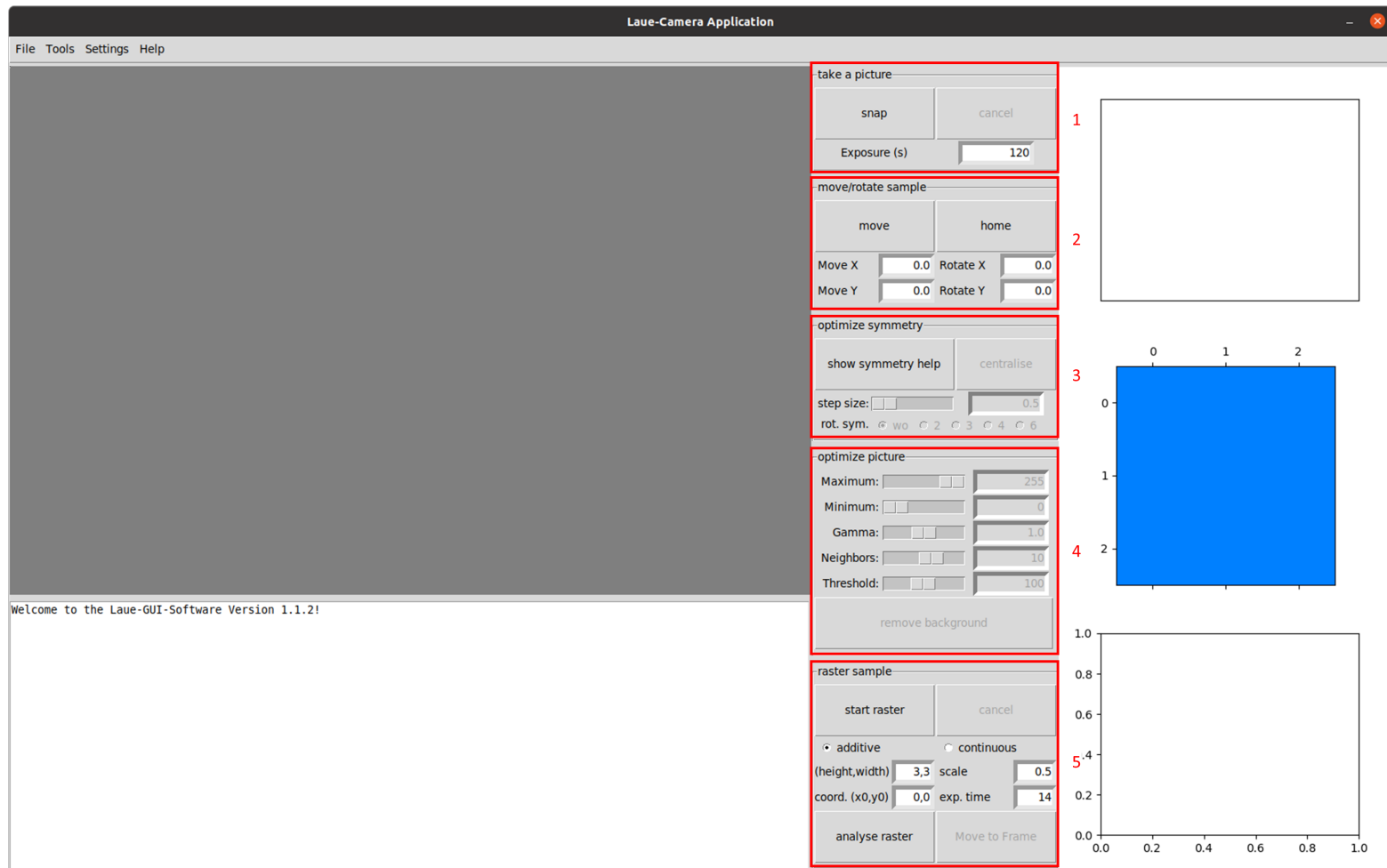


Abb. 4.1: Bereich 4 aufgeteilt in verschiedene Sektionen

Bereich 4 - Arbeitsbereich

Sektion 1 - Bildaufnahme

snap:

Es wird ein Bild mit der eingestellten Belichtungszeit aufgenommen und in [Bereich 2](#) angezeigt sowie die Werte in [Sektion 4](#) aktualisiert. Da das Auslesegerät am Detektorschirm durch ein 12-bit Grauwertwandler auf dessen Auflösung (0-4095) limiert ist, muss die maximale Belichtungszeit vor jeder Aufnahme die länger als 90 s andauert neu berechnet werden (empirischer Wert, darunter kein Überlauf). Dies ist durch eine separate Aufnahme mit 30 s Belichtung realisiert. Da der maximale Grauwert so gut wie linear mit der Zeit anwächst und bei ca. 100 beginnt (durchschnittliches Rauschen), kann die maximale Belichtungszeit t_{\max} in Abhängigkeit des gewünschten maximalen Grauwerts g_{\max} und dem maximalen Grauwert nach 30 s g_{30s} über

$$t_{\max} = \frac{g_{\max} - 100}{g_{30s} - 100} \cdot 30 \text{ s.} \quad (4.1)$$

abgeschätzt werden. Als maximaler Grauwert wird 3900 gewählt, da diese Näherung immer Schwankungen unterliegt und mit diesem größeren Abstand von der Wertegrenze wird ein dauerhaft korrektes Intensitätsverhältnis erreicht. Ist die maximale Belichtungszeit berechnet, wird die eingestellte Zeit in Blöcke von dieser zerlegt, einzeln aufgenommen und am Ende zusammenaddiert.

cancel:

Beendet die aktuelle Aufnahme und setzt das angezeigte Bild in [Bereich 2](#) wieder auf das Anfangsbild zurück.

Exposure (s):

Legt die aktuelle Belichtungszeit fest. $\text{exp} \in \mathbb{N}$

Sektion 2 - Translation und Rotation der Probe

move:

Das Goniometer wird auf die eingestellten absoluten Werte gefahren bzw. rotiert. Um nicht in die kritischen Bereiche des Goniometer zu fahren, ist eine Translation nur zwischen $\pm 15 \text{ mm}$ und eine Rotation bis $\pm 19^\circ$ möglich. Um

auf keinen Fall aus dem Bewegungsfeld des Goniometers herauszufahren wird empfohlen, dass eine manuelle Einstellung bei jeder neuen Benutzung der Anlage erfolgen sollte. Das heißt zu Beginn den **home**-Button betätigen und dann von Hand am Goniometer jedes Schneckengetriebe von den Rotoren in seine Nullposition zu fahren und die Getriebe der Translatoren so auszurichten, dass der Röntgenstrahl mittig auf die Probe trifft. Zu beachten ist auch, dass das Koordinatensystem des Goniometers anders als das „normale“ kartesische Koordinatensystem verläuft (siehe dazu 4.1).

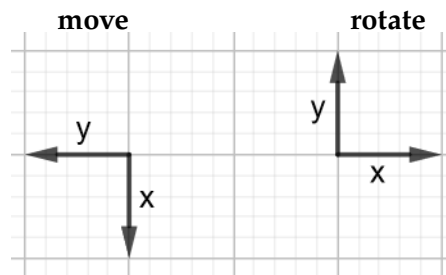


Abb. 4.1: Koordinatensystem des Goniometers.

home:

Setzt alle Werte auf 0 und fährt das Goniometer in die Grundstellung zurück.

Move X:

Bewegt die Probe in x-Richtung des Goniometerkoordinatensystems bis zum angegebenen Wert, wird in mm angegeben. $\text{move}_x \in (-15.0, 15.0)$

Move Y:

Bewegt die Probe in y-Richtung des Goniometerkoordinatensystems bis zum angegebenen Wert, wird in mm angegeben. $\text{move}_y \in (-15.0, 15.0)$

Rotate X:

Rotiert die Probe in x-Richtung des Goniometerkoordinatensystems bis zum angegebenen Wert, wird in ° angegeben. $\text{rotate}_x \in (-19.0, 19.0)$

Rotate Y:

Rotiert die Probe in y-Richtung des Goniometerkoordinatensystems bis zum angegebenen Wert, wird in ° angegeben. $\text{rotate}_y \in (-19.0, 19.0)$

Sektion 3 - Symmetrisierung

show symmetry help:

Lässt einen roten Punkt in Bereich 2 auf den in Settings festgelegten Symmetriekoordinaten erscheinen. Ist außerdem bei „rot. sym.“ eine Symmetrie ausgewählt, so wird zudem eine Linie vom Punkt in Richtung oberer Rand

und die anderen Linien entsprechend der Symmetrie gezeichnet. Der Punkt ist durch die Pfeiltasten jeweils um „**step size**“-Pixel verschiebbar und wenn mit der linken Maustaste in **Bereich 2** geklickt wird, erscheint dort der Punkt. Durch die Betätigung des Musrades (falls der Mauszeiger sich in **Bereich 2** befindet) können zudem die Hilfslinien um den Punkt rotiert werden, jeweils wieder um „**step size**“-Grad.

Diese Funktion ermöglicht zum einen Winkel zwischen zwei Beugungsreflexen im Bezug auf einen Punkt auszumessen sowie zum anderen ein bestimmten Reflex auf die Symmetriekoordinaten zu zentralisieren (siehe „**centralise**“).

Sind die Symmetriehilfen aktiv, so können diese durch die erneute Betätigung des Buttons wieder deaktiviert werden.

centralise:

Diese Funktion ermöglicht es, den mit „**show symmetry help**“ festgelegten Punkt auf die Symmetriekoordinaten zu rotieren. Hauptsächlich ist die Intention, einen Reflex mit hoher Intensität im toten Bereich des Detektors zu verschieben, dass die anderen Reflexe besser sichtbar sind. Liegt dieser schon im toten Bereich, so kann dieser mithilfe der Hilfslinien und entsprechenden Symmetrie einfach gefunden werden.

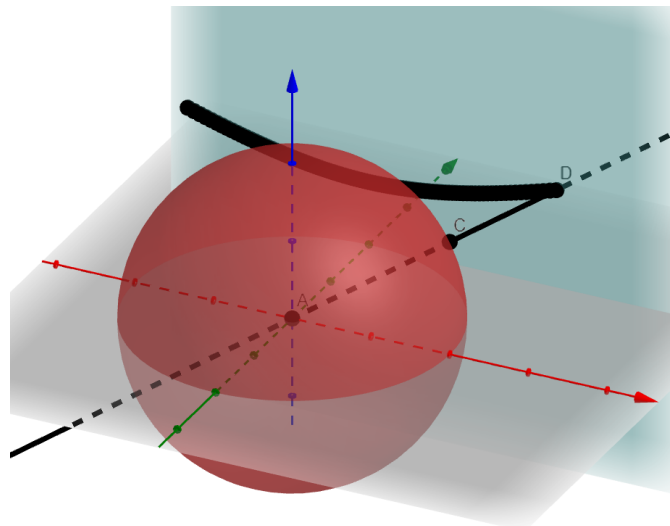


Abb. 4.2: Modell zur Berechnung der nötigen Rotationswinkel für die Zentralisierung eines Reflexes auf einen Punkt am Detektor. Zusätzlich ist noch die Variation des ϕ -Winkels dargestellt, wodurch ersichtlich wird, dass für die Zentrierung θ von ϕ abhängig ist.

Als Modell in Abb. 4.2 für die Berechnung wird das Streuzentrum in den Ursprung gelegt und der Detektor befindet sich im Abstand d dazu (hier parallel zur xz -Ebene). Über Kugelkoordinaten kann aus dem auf dem Schirm ausgewählten Schnittpunkt D der Gerade AC mit der Ebene die Winkel θ und ϕ bestimmt werden:

$$\phi = \arctan\left(\frac{d}{x}\right) \quad (4.2)$$

$$\theta = \arctan\left(\frac{d}{y \cdot \sin(\phi)}\right) \quad (4.3)$$

Sind nun die beiden Winkel bestimmt, muss das Goniometer nur noch um den negativen Wert von diesen gedreht werden, damit der gewünschte Punkt im Zentrum liegt. Angepasst auf das Koordinatensystem des Goniometers gilt damit abhängig von den aktuellen Rotationseinstellungen r_x und r_y für die neuen Einstellungen:

$$\text{rotate}_x = r_x - \frac{(90^\circ - \phi)}{2} \quad (4.4)$$

$$\text{rotate}_y = r_y - \frac{\theta - (90^\circ)}{2} \quad (4.5)$$

step size:

Legt die Schrittweite für die Translation des Punktes von „show symmetry help“ in Pixeln fest und um wie viel Grad die Hilfslinien mit dem Mausekranz auf einmal gedreht werden. Wird immer auf die nächste Zahl, die durch 0.5 teilbar ist, gerundet. $\text{stepsize} \in \mathbb{R}^+$

rot. sym.:

Legt die Symmetrie der Hilfslinien fest. Auswählbar ist entweder keine (wo) oder von 2 bis 6.

Sektion 4 - Bildoptimierung

Maximum:

Legt den maximalen Grauwert des Bildes fest, was in Bereich 2 angezeigt wird. Alle Grauwerte über diesem Wert werden auf das Maximum gesetzt. Zwischen dem gewählten Intervall von Minimum zu Maximum wird linear auf 8-bit umgewandelt, damit das Bild in Bereich 2 dargestellt werden kann (siehe Abb. 4.3). Auswahlbereich liegt zwischen dem gewählten Minimum und dem maximalen Grauwert. $\text{max} \in \mathbb{N}$

Minimum:

Legt den minimalen Grauwert des Bildes fest, was in Bereich 2 angezeigt wird. Alle Grauwerte unter diesem Wert werden auf das Minimum gesetzt. Zwischen dem gewählten Intervall von Minimum zu Maximum wird linear auf 8-bit umgewandelt, damit das Bild in Bereich 2 dargestellt werden kann (siehe

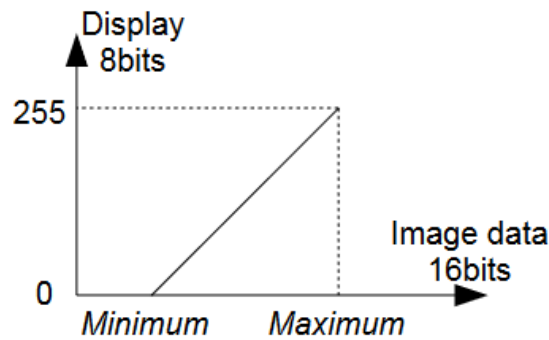


Abb. 4.3: Umwandlung des ausgewählten Bereich zwischen Minimum und Maximum am Beispiel von 16-bit zu 8-bit.

Abb. 4.3). Auswahlbereich liegt zwischen dem kleinsten Grauwert und dem gewählten Maximum. $\min \in \mathbb{N}$

Gamma:

Legt den Gammafaktor fest, falls eine nichtlineare Kontrastoptimierung gewünscht ist. Dieser wird auf das Bild *A* nach der Festlegung auf Minimum und Maximum angewandt und danach wird dieses wieder auf ein 8-bit Bild *B* konvertiert, das dann in [Bereich 2](#) angezeigt wird, was über

$$B = A^\gamma \cdot 255^{1-\gamma} \quad (4.6)$$

beschrieben werden kann.

Neighbors:

Legt die Größe des Datenbereichs um jeden Pixel in der Maximabestimmung fest, der für die Filterfunktionen als Eingabeparameter fungiert. Beide Filter (Maximum- und Minimumfilter) berechnen für jeden Pixel dessen Wert neu, indem sie ihn auf den maximalen oder minimalen Wert des Eingabefeldes setzen.

Threshold:

Legt den Schwellenwert fest, über dem ein Maximum detektiert werden kann. Für die Darstellung der Ergebnisse der Maximabestimmung im Diagramm 2 in [Bereich 5](#) werden nicht die Daten des angezeigten Bildes verwendet, sondern die Rohdaten des Originalbildes, weswegen eine Änderung der Schieberegler für die Bildbearbeitung keine Änderung in den detektierten Punkten verursacht.

remove background:

Entfernt den Hintergrund des Bildes. Hierzu wird eine mittig gelegene Pixelzeile aus dem Originalbild ausgewählt, an welcher dann die Funktion

$$I = I_0 \cdot \left[\arctan \left(\frac{d - a \cdot (x - 487.5)}{g} \right) - \arctan \left(\frac{-d - a \cdot (x - 487.5)}{g} \right) \right] + c \quad (4.7)$$

für den Verlauf der Pixelwerte (I) in Abhängigkeit des Abstandes in Pixel vom linken Bildrand (x) gefittet wird. Die Funktion wird über ein Modell hergeleitet, bei dem von einem Emitter mit Ausdehnung im Abstand g zum Detektor ausgegangen wird, der in Abhängigkeit der Blendengröße eine Ausdehnung von $2d$ aufweist. Der Parameter a steht für den Zusammenhang zwischen Distanz und Pixeldichte, also die horizontale Ausdehnung eines Pixels. Für den Parameter d wird fest der Wert $d = 40.2$ eingestellt, da bei einem freien Parameter die Fitfunktion nicht immer konvergiert und ansonsten auch keine nennenswerten Unterschiede auftreten. Deswegen wird auch empfohlen, den Probenabstand zum Detektor mit ca. 40 mm zu wählen. Andere Modelle mit verkipptem Bildschirm zum Strahlengang oder ein runder Flächenstrahler wurden auch in Betracht gezogen, diese Fitfunktionen konvergieren aber nur sehr selten und bringen dann auch keine großen Verbesserungen in der Bildqualität mit sich. Anders hingegen kann die Asymmetrie der beiden Detektorhälften einfach korrigiert werden. Dazu wird die Pixelzeile mittig geteilt und beide Bereiche werden separat voneinander gefittet und die jeweiligen Fitwerte abgezogen. Das dies einen Unterschied ausmachen kann, ist in Abb. 4.4 zu sehen.

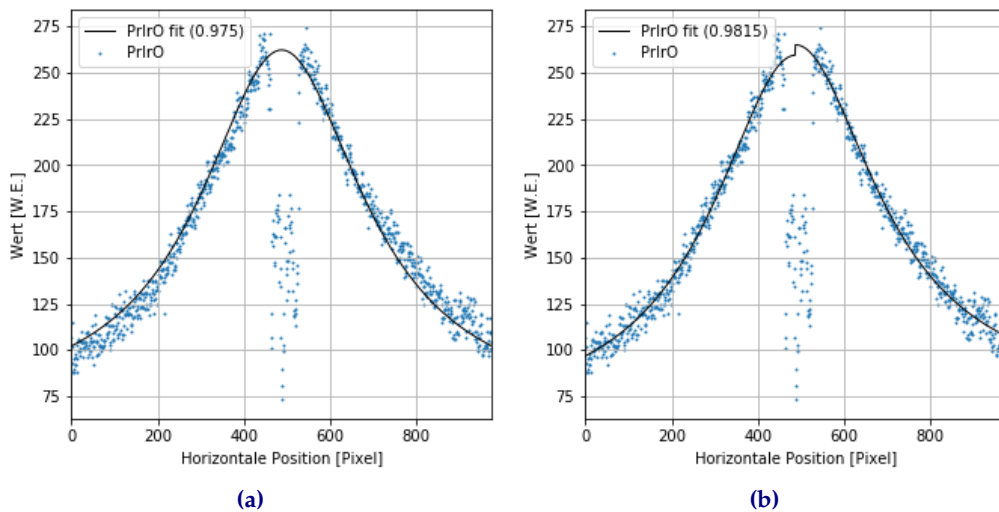


Abb. 4.4: Unterschiedliche Resultate der Fitmodi. In (a) ist ein normaler Fit über die ganze Zeile zu sehen und in (b) ein Fit für jede Detektorhälfte separat.

Das Bild, was an die Funktion übergeben wird, ist das Originalbild nach der Anwendung von Maximum, Minimum und dem Gammafaktor, aber noch vor der Umwandlung zu einem 8-bit Graustufenbild. Die Funktion gibt demen-

sprechend auch ein Graustufenbild zurück, dessen Werte größer als 8-bit sind. Dieses lässt sich dann auch entsprechend über die Funktion **Save Original** ganzheitlich speichern.

Trotz Hintergrundabzug tritt nach erneuter Kontrastoptimierung immer noch ein Hintergrund auf (siehe Abb. 4.6c) der auf einen Dunkelstrom im Detektor zurückzuführen ist. Um diesen Hintergrund zu minimieren, wird ein anderes Verfahren als zuvor gewählt, was wieder auf das ganze Bild angewendet wird, falls die entsprechende Methode in **Settings** ausgewählt ist. Zuerst werden alle Pixelwerte über einem maximalen Wert aussortiert, sodass nur noch der Untergrund und keine Reflexe mehr im Bildprofil liegen. Dieser Wert wird entweder automatisch oder manuell über den Button **bg fine-tuning** bestimmt. Die automatische Festlegung erfolgt über eine Aufteilung des Bildes auf die zwei Detektorhälften und zeilenweise Bildung des Mittelwertes, wobei an beiden Seiten der Bereiche jeweils δ -Pixel nicht berücksichtigt werden, damit der Strahlendurchgang und der Rand nicht ins Gewicht fallen. Als maximaler Wert wird dann der größte Mittelwert plus einem Inkrement definiert. Beide Parameter, δ und das Inkrement, sind im Bereich **Settings** anpassbar. Beispielfhaft ist ein resultierendes Linienprofil in Abb. 4.5a zu sehen. Da dieses noch für einen Fit zu sehr schwankt, wird auf das Bild ein 3x3-Medianfilter angewendet, woraus dann in Abb. 4.5b die orangen Punkte resultieren. Je Zeile und Detektorbereich wird dann durch die Punkte ein Polynom 10ten Grades (blaue Linie) als Fitfunktion gelegt und von den Originaldaten abgezogen (negative Werte werden wieder auf 0 gesetzt). Letztendlich ist in Abb. 4.6d die Auswirkungen der Korrektur sichtbar.

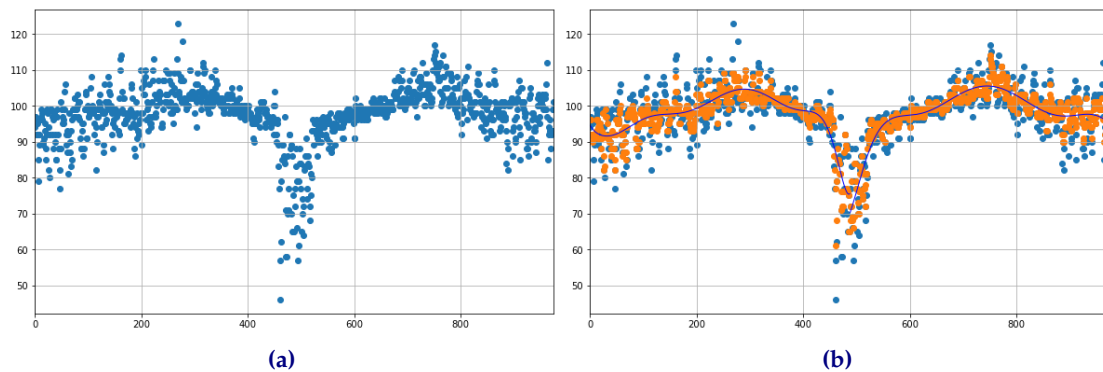
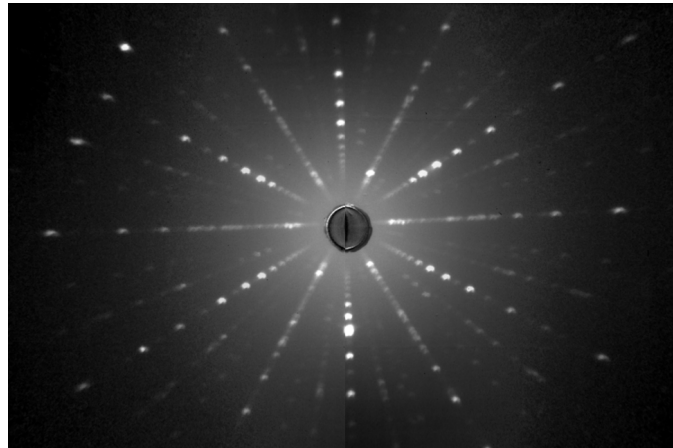


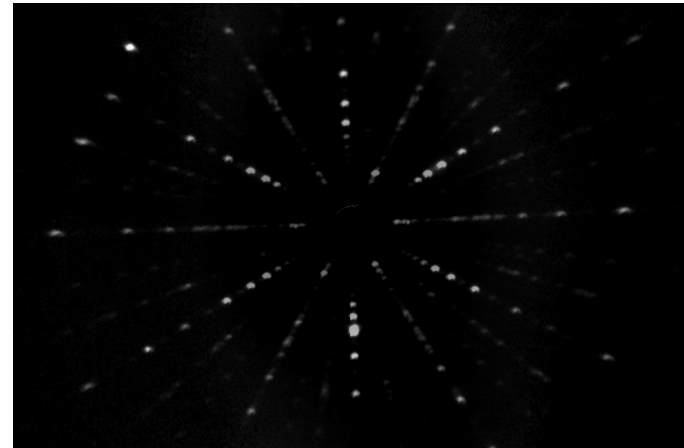
Abb. 4.5: In (a) ist das beispielhafte Linienprofil des Hintergrundes zu sehen, der vom Dunkelstrom verursacht wird. In (b) hingegen ist zusätzlich auf das Bild noch ein 3x3-Medianfilter und danach auf die linke und rechte Seite jeder Linie des Bildes eine Fitfunktion als Polynom 10ten Grades angewandt worden. Zu sehen ist, dass die Fitfunktion das Linienprofil relativ gut beschreibt und trotzdem noch genügend Punkte über ihr liegen, sodass auch schwache Reflexe im Rauschen nicht sofort rausgefiltert werden.

bg fine-tuning:

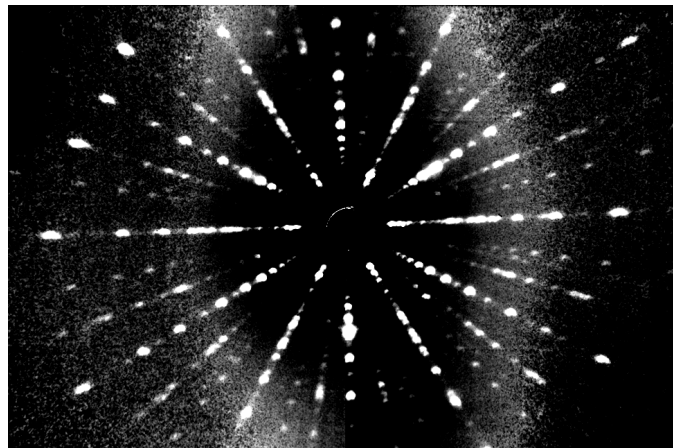
Da die automatische Bestimmung des maximalen Pixelwertes zwar gut aber nicht immer perfekt ist, gibt es hier die Möglichkeit, diesen Wert manuell genauer einzustellen. Im sich öffnenden Fenster ist das aktuelle Bild ohne Hintergrund dargestellt, in dem aber alle Pixel mit Werten über dem ausgewählten Pixelwert nicht angezeigt werden. Nun ist es mit dem Schieberegler möglich, den maximalen Pixelwert zu verschieben und das entsprechende Bild zu sehen. Allgemein sollten nur die Intensitäten der Reflexe ausgeschlossen werden und das entsprechende Dunkelstromrauschen noch vorhanden sein. Mit dem Button **apply** wird der ausgewählte Wert als neuer maximaler Pixelwert definiert und das angezeigte Bild im Hauptfenster aktualisiert. Mit dem Button **default** wird der Schieberegler für den maximalen Pixelwert auf den automatisch berechneten Wert zurückgesetzt.



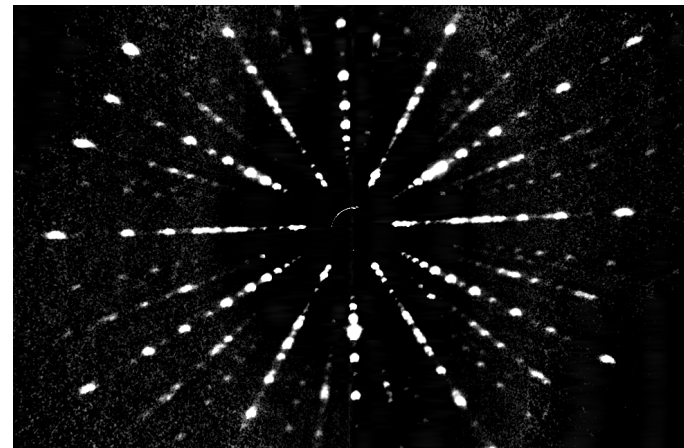
(a) Originalbild



(b) Bild ohne Hintergrund



(c) Bild ohne Hintergrund und mit Kontrastoptimierung



(d) Bild ohne Hintergrund, mit Kontrastoptimierung sowie Polynomabzug und damit ohne Dunkelstrom-Hintergrund

Abb. 4.6: Beispieldemonstration der möglichen Bildbearbeitungsschritte für eine originale Laue-Aufnahme

Sektion 5 - Raster über Probe

start raster:

Startet ein Raster mit den angegebenen Werten sowie mit den zugehörigen Einstellungen von **Settings**. Zudem wird für jedes aufgenommene Bild eine Einstufung vorgenommen, wie gut das Beugungsbild zu sehen ist (von 0 (nicht) bis 2 (gut)). Im Konturdiagramm in **Bereich 5** wird der aktuelle Fortschritt und in **Bereich 2** das zuletzt aufgenommene Bild angezeigt. Auf diesem Bild sind auch wieder die Operationen von **Sektion 4** anwendbar. Zu Beginn des Rasters wird ein Ordner im Speicherverzeichnis angelegt mit dem Namen „Name der Probe“ - „Spannung“ - „Stromstärke“ - „Abstand zum Detektor in mm“ - „RASTER“ - „Belichtungszeit“ - „Höhe x Breite“ - „Schrittweite in mm“ - „additive oder continuous“.

Zudem wird am Ende des Rasters auch immer ein „logfile.txt“ erstellt, das die Informationen über die Rastereinstellungen und die aufgenommene Kontur enthält (für Format siehe entsprechendes logfile.txt). Dadurch können zudem ältere Raster geladen werden, die nicht mit diesem Programm aufgenommen wurden. Hierbei muss lediglich das logfile.txt erstellt werden und danach ist auch mit „**change kontur manually**“ die Kontur anpassbar.

cancel:

Unterbricht das aktuelle Raster.

additive, continuous:

Legt fest, ob mit maximal 16 s Belichtungszeit am Stück (additive) oder mit der maximalen Belichtungszeit vor einem Werteüberlauf am Stück (continuous) aufgenommen wird. Vorteil von der additiven Variante ist, dass die Konturdetektion vom Algorithmus besser bewältigt wird, hingegen bei der continuous Variante aber durch die größere Belichtungszeit bessere Resultate bei Nebenmaxima erzielt werden können.

height, width:

Legt die Höhe und die Breite des Rasters fest, also wie viele Einzelbilder pro Spalte und pro Zeile aufgenommen werden. $h, w \in \mathbb{N}^+, \mathbb{N}^+$

scale:

Legt die Schrittweite in mm zwischen zwei Einzelbilder fest. $scale \in \mathbb{R}^+$

coord. (x_0, y_0) :

Legt den Mittelpunkt des Rasters fest, von dem aus dann das Raster gestartet wird. $x_0, y_0 \in \mathbb{R}^+, \mathbb{R}^+$

exp. time:

Legt die gesamte Belichtungszeit in Sekunden pro Einzelbild fest. $exposure \in \mathbb{R}^+$

analyse raster:

Durch diese Funktion kann sich im Konturdiagramm vom aktuellen Raster in [Bereich 5](#) bewegt werden, wobei die aktuelle Position als braunes Kästchen angezeigt wird. Die Navigation erfolgt wieder über die Pfeiltasten. Zudem wird das Einzelbild von der aktuellen Position in [Bereich 2](#) angezeigt und ist mit den Funktionen aus [Sektion 4](#) bearbeitbar. Direkt nach einer Rasteraufnahme ist die aufgenommene Kontur hinterlegt, welche aber auch durch das Öffnen eines Rasters verändert werden kann.

Ist die Konturnavigation aktiv, so kann durch eine erneute Betätigung diese wieder abgebrochen werden.

move to frame:

Ist das dargestellte Raster und dessen Koordinatensystem noch das gleiche wie das des Goniometers, so kann die Position der Probe auf eine interessante Stelle des Rasters gefahren werden.

Bereich 5 - Diagrammanzeigen

Diagramm 1 - Maximumanzeiger

In diesem Diagramm wird bei einem Raster für die aktuelle Position das Bild eines 4-Sektionenbildes eingeblendet, was die Position der detektierten Maxima anzeigt. Daraus lässt sich schließen, ob die detektierten Maxima auch solche sind oder das Rauschen misinterpretiert wurde.

Ist ein Originalraster ausgewählt, so wird nachträglich für jede Aufnahme die Maximabestimmung durchgeführt und dargestellt.

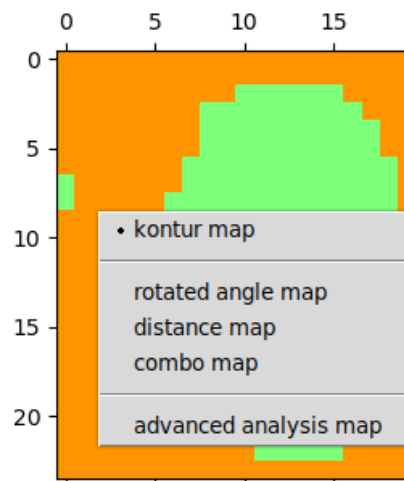


Abb. 5.1: Alle Möglichkeiten für die Darstellung einer Kontur, falls Daten einer Mittelpunktsbestimmung und einer tieferen Rasteranalyse vorliegen.

Diagramm 2 - Konturdiagramm

In diesem Diagramm wird bei einem Raster die aktuelle Kontur angezeigt, was bei einer Rasteraufnahme dem aktuellen Fortschritt und für ein bereits aufgenommenes Raster die gesamte Kontur entspricht. Ist die Navigation durch die Kontur aktiviert, so wird die aktuelle Position von einem braunen Kästchen gekennzeichnet. Ist ein Raster geladen, dass auch Daten von einer Mittelpunktsbestimmung oder einer tiefergehenden Analyse enthält, so können durch ein

Rechtsklick auf die Kontur auch diese Daten visualisiert werden (siehe Abb. 5.2).

Für die Methode „**auto find kontur**“ entwickelt sich die Kontur erst, je nach Kontur unterschiedlich, sodass die Konturdetektion visuell nachvollziehbar wird.

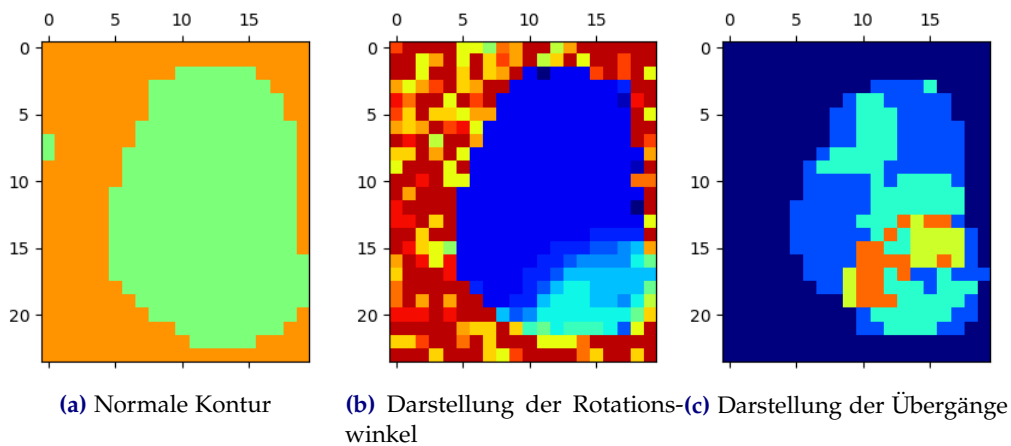


Abb. 5.2: Unterschiedliche Darstellungsmöglichkeiten der Kontur von einem Raster mit Daten zu einer Mittelpunktbestimmung und einer tieferen Rasteranalyse.

Diagramm 3 - Hintergrundfit

Wird von einem Bild der Hintergrund abgezogen, so wird in diesem Diagramm der Fit mit den Bilddaten (blauen Punkte) und der Fitfunktion (schwarze Linie) angezeigt. Die linke Achse zeigt die Werte der Bildpunkte und die untere Achse die horizontale Pixelanzahl vom linken Bildrand her.

Outsourced Code

Hier werden Methoden aufgelistet, die nicht mehr im Programm vorhanden sind, weil sie durch andere Methoden ersetzt wurden. Sie werden trotzdem noch hier aufgeführt, falls es für andere Kristallsysteme sinnvoll werden kann diese zu nutzen.

angle corr.:

Diese Optimierung ist erst nach dem Hintergrundabzug verfügbar, denn nach diesem verbleibt ein anderer charakteristischer Hintergrund der mit dieser Methode minimiert werden kann. Für diese Version muss aber gesagt werden, dass es sich noch um eine experimentelle Funktion handelt, die direkt in den Datensatz eingreift und somit dessen Verwendung gekennzeichnet werden muss bzw. dessen Einsatz nur für visuelle Optimierung und nicht Intensitätsvergleiche genutzt werden kann.

Da der Hintergrund nur in den Randbereichen auftritt, wird sich auch nur auf ihn beschränkt. Die zugrundeliegende Idee ist, dass die Reflexe immer an der gleichen Stelle erscheinen, das Rauschen außen herum aber zufällig auftritt. Wird nun das Beugungsbild um den Mittelpunkt um kleine Winkel gedreht und vom ursprünglichen Bild abgezogen, so wird sich das Rauschen teilweise herausmitteln, wohingegen der Abzug des zufälligen Rauschens vom Beugungsmaxima nicht zu sehr ins Gewicht fällt. Zudem ergeben sich etliche negativen Werte im Bereich des Rauschens, die deshalb einfach auf 0 gesetzt werden können. Damit keine Artefakte entstehen wenn nur in eine Richtung gedreht wird, wird das Beugungsbild jeweils mit und gegen den Uhrzeigersinn rotiert und die beiden entstehenden Bilder addiert und mit 0.5 gewichtet. Konkret wird auch diese Korrektur erst auf das Bild angewendet, wenn nach dem Hintergrundabzug die Parameter Minimum, Maximum und Gamma auf das Bild angewendet wurden und dieses als 8-bit Variante vorliegt. Zur besseren Darstellung wird zudem noch nach dem Abzug der gedrehten Bilder der Mittelwert abgezogen, alle negativen Werte wieder auf 0 gesetzt und das gesamte Bild auf den gesamten Wertebereich eines 8-bit Bildes gestreckt.

Auswählbar sind Drehwinkel zwischen 0 und dem Maximalwert, der in [Settings](#) definiert ist.

radius corr.:

Da die Methode [angle corr.](#) nur für Bereiche die am Rand liegen Sinn macht und im Zentrum falsche Maxima zu sehen sind, kann mit dieser Funktion der Radius eines Kreises um das Zentrum in Pixel eingestellt werden, in welchem das

ursprüngliche Bild angezeigt wird. Dadurch wird ein besseres Bild produziert, es ist aber am Rand des Kreises meistens ein Übergang zu sehen. Auswählbar sind Radian zwischen 0 und 321 (halbe Höhe des Bildes). radius corr. $\in \mathbb{N}^+$

Ausblick

geplante Ergänzungen:

- Andere Darstellung für die Rasterkonturen (soll berücksichtigen, dass die untersuchten Flächen nicht rechteckig sondern rund sind und dass sich bei einer kleinen Schrittweite benachbarte Flächen überlappen).
- Vorzeitiges Beenden eines Rasters, falls die Probe schon komplett abgerastert wurde, sodass die restlichen Bilder mit Standardbildern aufgefüllt werden und trotzdem eine Analyse im Program möglich ist
- Automatisierung der centralise-Funktion bei guten Bilder
- Einführen einer anderen, nicht linearen Kontrastoptimizerungsfunktion neben dem Gammafaktor um Nebenmaxima besser darstellen zu können.

Falls unbekannte Fehler oder Fragen auftauchen oder weitere Ergänzungen sinnvoll wären, bitte an den Autor wenden!