

1. SmartLabConverter

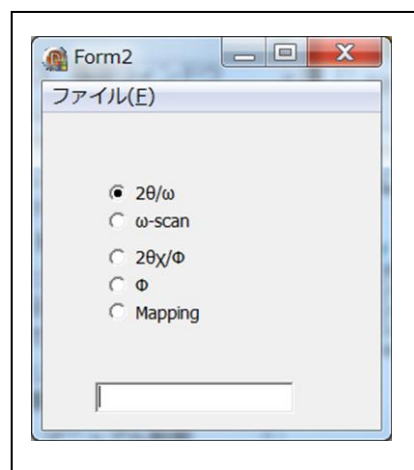
ファイルフォーマットについて

データは***.ras* という拡張子でテキストファイルとして出力される。ファイルには軸、線源などの情報が書き込まれたヘッダに続いて「スキャン軸の角度」、「カウンタの読み取り値」、「アッテネータ値」が書き込まれる。またそのため「カウント値」＝「カウンタの読み取り値」×「アッテネータ値」と求められる。また「カウント(cps)」を求めるには「カウンタの読み取り値」×「スキャン速度」/「スキャンステップ」を計算する。汎用測定、逆格子マッピング等で独立した複数のスキャンを連続して行った場合は、ヘッダ+データを1セットとして、これがスキャンの数だけ繰り返して書き込まれる。フォーマットの変換は「薄膜データ処理」で行える。逆格子マッピングについては「3D Explore」が使用できる。

それ以外に、ファイルフォーマットの変換を行うための簡単なアプリケーション「SmartLabConverter」を開発したので使い方を紹介する。利用、再配布、ソースの改変は自由、ただし自己責任で。開発は Boland Turbo Delphi 2006 を用いて Delphi 言語 (Object Pascal) で行った。コンパイルは Delphi XE2 (<http://www.embarcadero.com/jp/products/delphi>) や Lazarus (<http://www.lazarus.freepascal.org/>) あたりを使ってもらふん(ちょっとした手直しで)出来る、と思う。「SmartLabConverter」は win-32bit 用のアプリケーションなので使用には windows-32bit か 64bit 環境を用意して下さい。mac 環境で動かしたい方はご自身でコンパイルを行ってみて下さい。

使い方

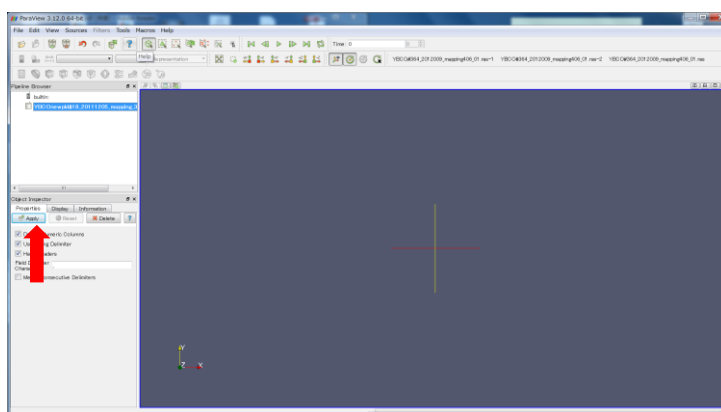
- ・ SmartLabConverter.exe を実行する。
- ・ 変換したいファイルのスキャン条件を選ぶ。
- ・ 「ファイル」 → 「開く」 で変換したいファイルを選ぶ。ショートカット **Ctrl+O** でも同様。
- ・ 変換結果の保存先とファイル名を指定する。ファイルはテキスト形式で***.pat* という拡張子で保存される。ファイルには X_Yunit(スキャン角度), cps(cps 単位のカウント強度)+IgorPro 用マクロが記述される。IgorPro は WaveMetrics 社の商用グラフ作成/データ解析ソフト。本家 (<http://www.wavemetrics.com/>)、日本語版 (<http://www.hulinks.co.jp/software/igor/>)。**.pat を D&D すると(埋め込まれたマクロ



を使って)自動でグラフを描画する.

・逆格子マッピングの場合は `mapping` を選択する. この場合は`**pat`に加えて`**csv`, `**py` ファイルを作成する. `**csv` はカンマ区切りテキストで, 2θ , ω , 検出強度 `int(cps)`とその対数 `ln(int)`, 逆格子ベクトル `Q100`, `Q010`, `Q001` が書き込まれる. 3次元可視化ソフトに`**csv`を読み込ませて3D表示させるとマッピングの結果がわかりやすい. ここではフリーの可視化ソフト ParaView(<http://www.paraview.org/>)の使用方法を紹介する.

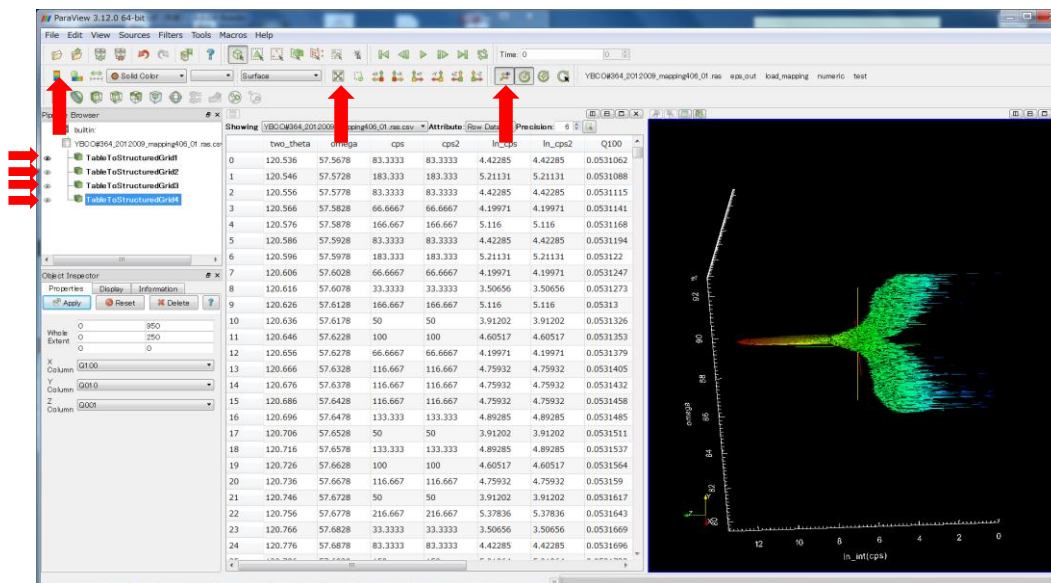
・「File」→「Open」で描画したい`**csv`を開く. ParaViewは日本語に対応していないのでファイルパスに全角文字が含まれるとエラーになる. 「Apply」ボタンをクリック.



データが読み込まれてテーブルが開く.

	two_theta	omega	cps	ln_cps	Q100	Q010	Q001	R
0	104.5	53.05	375	5.92693	0.0143327	0.771491	0.677032	0
1	104.505	53.0526	362.179	5.89214	0.0143332	0.771518	0.677056	1
2	104.51	53.0552	397.436	5.98503	0.0143337	0.771545	0.67708	2
3	104.516	53.0578	342.949	5.83758	0.0143342	0.771572	0.677104	3
4	104.521	53.0604	407.051	6.00894	0.0143347	0.7716	0.677127	4
5	104.526	53.063	461.538	6.13457	0.0143352	0.771627	0.677151	5
6	104.531	53.0656	381.41	5.94388	0.0143357	0.771654	0.677175	6
7	104.536	53.0682	400.641	5.99307	0.0143362	0.771681	0.677199	7
8	104.542	53.0708	480.769	6.17539	0.0143367	0.771708	0.677223	8
9	104.547	53.0734	416.667	6.03229	0.0143372	0.771735	0.677246	9
10	104.552	53.076	426.282	6.0551	0.0143377	0.771762	0.67727	10
11	104.557	53.0786	467.949	6.14836	0.0143382	0.771789	0.677294	11
12	104.562	53.0812	416.667	6.03229	0.0143387	0.771816	0.677318	12
13	104.568	53.0838	384.615	5.95224	0.0143392	0.771843	0.677341	13
14	104.573	53.0864	426.282	6.0551	0.0143397	0.77187	0.677365	14
15	104.578	53.089	410.256	6.01678	0.0143402	0.771898	0.677389	15
16	104.583	53.0916	407.051	6.00894	0.0143407	0.771925	0.677413	16
17	104.588	53.0942	391.026	5.96877	0.0143412	0.771952	0.677436	17

・「Macros」→「Add new macro」で`**py`を開く. ファイルパスに全角文字が含まれていないこと. `**py`はParaViewのマクロでPython言語により記述されている. 読み込みが成功すると「Macros」の中に読み込ませたマクロが表示されるので実行する. マクロの実行に成功するとマッピングの結果が3D表示される.



左上「Pipeline Browser」の目玉のアイコンをクリックするとオブジェクトの可視/不可視が切り替わる。オブジェクトは4つ生成され、上から $2\theta - \omega$, Q100-Q010, Q100-Q001 平面に対する $\ln(\text{int})$ のプロットと, Q100-Q010-Q001 空間におけるスキャン平面と $\ln(\text{int})$ のカラーマップである。

カラースケールの凡例, 軸の凡例の表示/非表示, Auto Scale などの基本的な機能はアイコンから呼び出せる。必要なければデータのテーブルは閉じることが出来る。

- ・「File」→「Save Screenshot」で描画した画像を jpg 形式などで保存できる。ベクター形式で打ち出すことはできない。

ベクター形式のデータで打ち出したい場合は他のソフトを仲介して出力する。ここでは MayaVi (<http://mayavi.sourceforge.net/>) を例にとって説明する。

- ・「File」→「Save Data」で「Legacy VTK」形式 (拡張子.vtk) を選び, 保存する。このときファイルタイプを聞いてくるので ascii を選ぶ。vtk とはオープンソースの可視化専用の C++ クラスライブラリで, **.vtk ファイルは vtk フォーマットに則り 3次元可視化データを記述する。

- ・MayaVi を起動し「File」→「Open」→「vtk file」で **.vtk を開く。
- ・「Visualize」→「Modules」→「SurfaceMap」で描画される。
- ・「File」→「Save Screen to」→「vector」で eps, ps, pdf のいずれかで保存できる。

ParaView の詳しい使い方は http://paraview.org/Wiki/SC08_ParaView_Tutorial などを参照のこと。