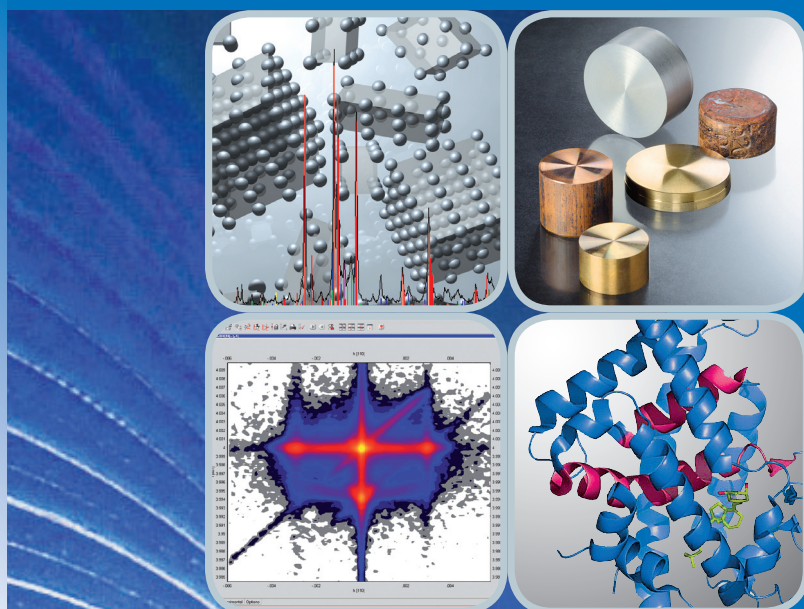




Пакет программного обеспечения **DIFFRAC^{plus} BASIC**

- Руководство пользователя
программы XRD Commander 2.6
Release 2007

The reproduction, transmission or use of this document or its contents is not permitted without express written authority. Offenders will be liable for damages. All rights reserved.

We have checked the contents of this manual for agreement with the hardware and software described. Since deviations cannot be precluded entirely, we cannot guarantee full agreement. However, the data in this manual are reviewed regularly and any necessary corrections are included in subsequent editions. Suggestions for improvement are welcome.

All configurations and specifications are subject to change without notice.

Order no. DOC-M88-EXX060 V2.6. Software version 2.6, Release 2007. Updated: November 8, 2007.

© 2003 - 2007 Bruker AXS GmbH, Karlsruhe, Germany.

All trademarks and registered trademarks are the sole property of their respective owners.

Printed in the Federal Republic of Germany.

Bruker AXS GmbH
Östliche Rheinbrückenstr. 49
76187 Karlsruhe, Germany
Tel. +49 (7 21) 5 95-28 88
Fax +49 (7 21) 5 95-45 87
info@bruker-axs.de
www.bruker-axs.com

DIFFRAC_{plus} BASIC XRD Commander

Содержание

1 Введение	1-1
Параметры командной строки	1-2
Главный вид и работа с программой	1-3
Adjust page (страница регулировки)	1-3
Управление устройством смены проб	1-4
Управление приводами	1-4
Управление компонентами дифрактометра	1-5
Управление сканированием	1-6
Окно графика	1-7
Jobs Page (страница параметров пакетного измерения)	1-8
Geometry Page (страница геометрии системы)	1-9
Details Page (страница подробной информации)	1-10
Camera Page (страница видеокамеры)	1-11
Menubar (строка меню)	1-12
File Menu (меню Файл)	1-12
Select Diffractometer (выбор дифрактометра)	1-12
Save As (сохранить)	1-12
Save as Default (сохранить в качестве значений по умолчанию)	1-12
Print Preview (просмотр печати)	1-12
Print Chart (печать графика)	1-12
Transmit Drive Positions (отправить положение приводов)	1-12
Options (настройки)	1-13
Exit (выход)	1-15
Diffractometer Menu (меню дифрактометр)	1-15
Direct Mode (прямой режим управления)	1-15
Move Drives (перемещение приводов)	1-16
Init Drives (инициализация приводов)	1-16
Determine ZI-Value (определение значения ZL)	1-16
Unload Sample (выгрузить пробу)	1-17
Autorepeat (автоповтор)	1-17
Ratemeter	1-17
Vacuum On/Off (вакуум вкл/выкл)	1-17
Load/Unload Carrier Port 1/2 (загрузить/выгрузить каретку порт 1/2)	1-18
Jobs Menu (меню конфигурации пакетных измерений)	1-18
Create/Edit Jobs (создать/редактировать серию измерений)	1-18
Start Selected (запустить выбранное)	1-19
Halt Active Job/Halt All Jobs (остановить текущее измерение/серию измерений)	1-19
Delete Selected Jobs (удалить выбранные серии измерений)	1-20
Column Editor (редактор столбцов)	1-20
View menu (меню настройки вида)	1-22

Help Menu(меню Справка)	1-22
Contents (содержание)	1-22
Scripting Help (помощь по использованию скриптов)	1-22
About (о программе)	1-22
Панель инструментов	1-23
Save Position (сохранить положение)	1-24
Get Position (узнать положение)	1-24
Primary Optic (первичная оптика)	1-24
Secondary Optic (вторичная оптика)	1-24
Statusbar (строка состояния)	1-24
2 Настройка измерительного сервера	2-1
Обзор	2-1
Security Dialog (диалог настроек безопасности)	2-3
About Dialog ("о программе")	2-4
Password Dialog (пароль)	2-4
3 Командный язык программы DIFFRACplus	3-1
Руководство	3-1
Обзор	3-1
Процедура измерения	3-1
Запуск набора команд пользователя	3-2
Запуск измерения	3-2
Reference	3-4
Объекты, используемые модулем MeasHost.dll	3-4
Объект Diffractometer	3-4
Объект Measurement	3-9
Объект Jobs	3-14
Объект Job	3-16
Объект Drives	3-18
Объект Drive	3-19
Объект Detectors	3-21
Объект Detector	3-22
Объект Generator	3-24
Объект TubeWindow	3-25
Объект DetectorSlit	3-25
Объект Absorber	3-26
Объект Rotation	3-26
Объект Samplechanger	3-27
Объект PSD	3-28
Объект TemperatureStage	3-29
Объект Camera	3-29
Объект Optics	3-30
Объект Optic	3-30
Объекты, которые используются библиотекой RawFile.dll	3-31
Объект RawFile	3-32
Объект Range	3-34

Объект Headers	3-36
Объект Header	3-37
Автоматическая регулировка	3-38
Функция RelativeScan(strScanType, dblScanWidth, lngSteps, dblTimePerStep, ARange)	3-38
Функция MaximizedScan(strScanType, dblScanWidth, lngSteps, dblTimePerStep, dblMaxPos, dblMaxInt)	3-38
Функция Maximize(strScanType, dblScanWidth, lngSteps, dblTimePerStep, dblMaxPos, dblMaxInt, lngIter, dblEnlargeFac, dblShrinkFac)	3-39
Функция CenteredScan(strScanType, dblScanWidth, lngSteps, dblTimePerStep, dblCenPos, dblCenInt)	3-39
Функция Center(strScanType, dblScanWidth, lngSteps, dblSamplingTime, dblCenPos, dblCenInt, lngIter, dblEnlargeFac, dblShrinkFac)	3-40
Функция OptimizedScan(strOptDrive, dblOptWidth, lngOptSteps, dblThreshold, lngFitProc, lngIterations, strScanType, dblScanWidth, lngSteps, dblTimePerStep)	3-40
Функция HalfedScan(strScanType, dblScanWidth, lngSteps, dblTimePerStep, dblMaxPos, dblMaxInt, dblHMPos, dblHMInt, IDirection, dblAcceptLimit)	3-41
Функция Half(strScanType, dblScanWidth, lngSteps, dblTimePerStep, dblMaxPos, dblMaxInt, dblHMPos, dblHMInt, IDirection, dblAcceptLimit, lngIter, dblEnlargeFac, dblShrinkFac)	3-41
Функция PositionAllDrives()	3-42
Функция PositionDrive(strDrive, dblDrivePos)	3-42
Функция PrintAllAlignPos()	3-42
Функция PrintAllCurPos()	3-43
Функция GetAlignPosFromRange(ARange)	3-43
Функция SetAlignPosToRange(ARange)	3-43
Функция AdjustDQLFile(RFile, strFileName)	3-43
Функция ParabolaFitData(dblPosition, dblIntensity, bBackground, dblThreshold, dblMaxPosition, dblMaxIntensity)	3-44
Функция ParabolaFit(ARange)	3-44
Функция CenterOfGravity(ARange, dblCOGPos)	3-44

1 Введение

XRD Commander является основной программой пакета DIFFRACplus. Программу можно использовать для проведения "быстрого" измерения для получения основных характеристик пробы, а также настройки дифрактометра и проведения потоковых измерений.

Параметры командной строки

По умолчанию основной функцией программы XRD Commander, если она запущена безпараметров является подключение установленного по умолчанию дифрактометра к локальному компьютеру. При использовании параметра /d: и адреса конкретного дифрактометра, подключение осуществляется к данному дифрактометру. Например запуск программы с командой "xrdcmd.exe /d:diff1!lab" приведет к подключению к дифрактометру "diff1", подсоединенному к компьютеру с названием "lab".

Если подключение к компьютеру, заданному параметром /d: осуществляется только через прокси-сервер, следует также указать параметр /проху и определить его конфигурацию в диалоге *Select Diffractometer* (стр. 12).

Можно также определить отличный от заданного по умолчанию файла-таблицы column file параметром /с:. Наберите полный путь файла после параметра /с:. См. *Column Editor* (стр. 20) для описания столбцов.

Главный вид и работа с программой

Окно **XRD Commander** разделено на пять страниц. Переключение между страницами осуществляется путем выбора соответствующих вкладок снизу.

Adjust page (страница регулировки)

Предназначена для управления "быстрым" измерением и просмотра состояния пакетных измерений.

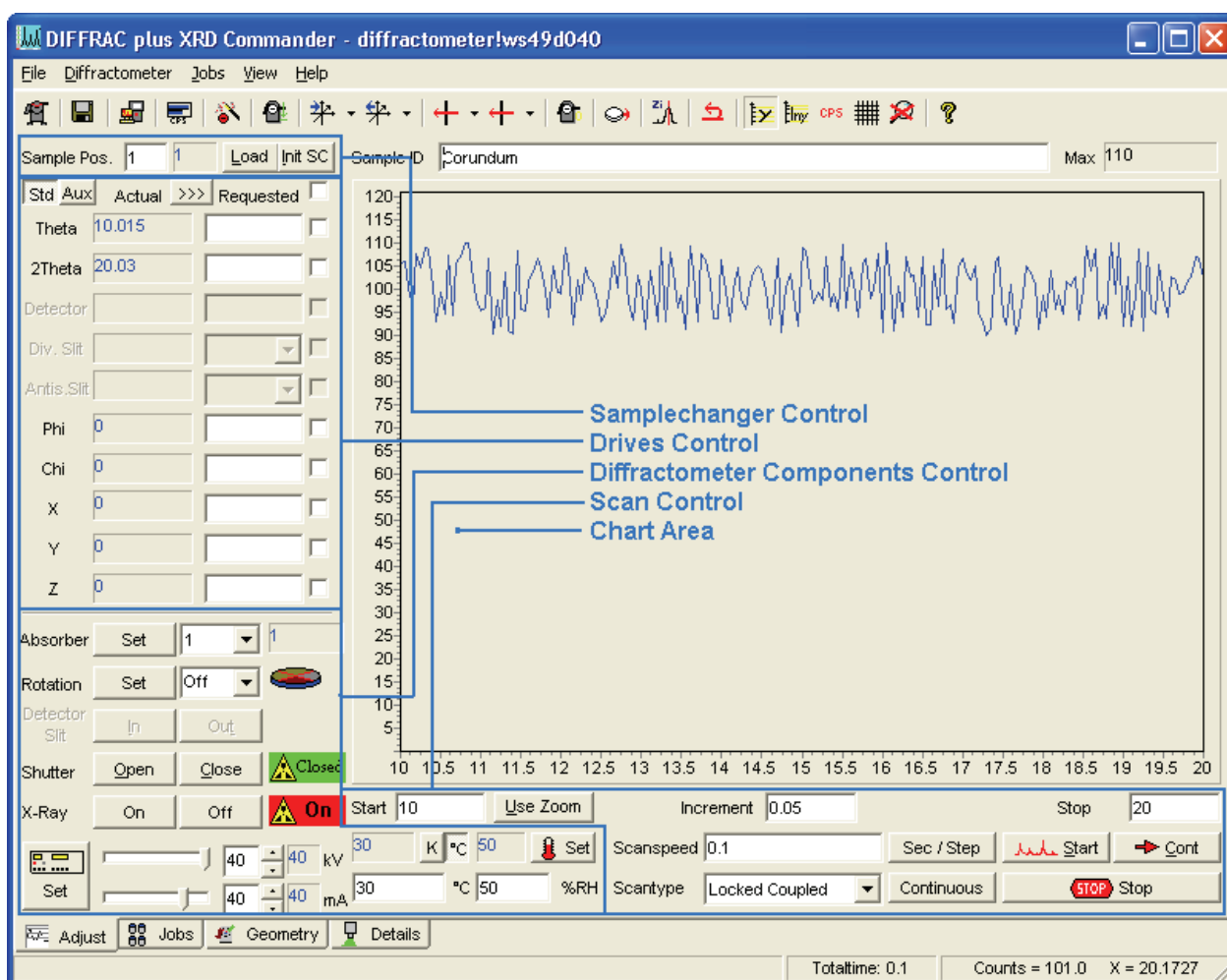


Рис. 1: XRD Commander: Adjust page

Управление устройством смены проб

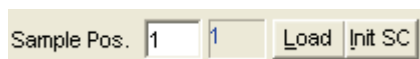
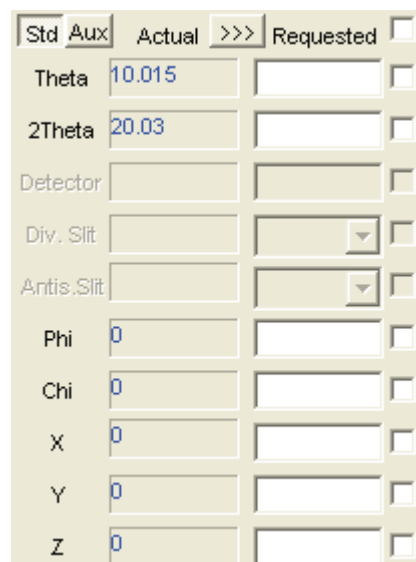


Рис. 2: Поле управления устройством смены проб

Данное поле используется для установки пробы в положение измерения. Для загрузки нужной пробы, введите ее позицию и нажмите кнопку *Load*. Позиция пробы представляет собой номер для 9-позиционного и 40 позиционного, а также Y-образного устройства смены проб. Для XY-образного устройства, системы Autochanger и устройства D4 положение пробы является комбинацией буквы и номера, например C10. Кроме того, устройство смены проб D4 поддерживает задание рабочих областей в таком случае позиция пробы будет выглядеть как 2B3 - проба находится в столбце B, ряду 3, в рабочей области 2. Если область не определена - активной областью считается.

Для инициализации прободержателя нажмите *Init SC*. Неактивные поля с текстом голубого цвета показывают текущее положение пробы. Символ "---" красного цвета говорит о том, что устройство пробозагрузки не инициализировано.

Управление приводами



	Actual	>>>	Requested	
Theta	10.015			☐
2Theta	20.03			☐
Detector				☐
Div. Slit				☐
Antis. Slit				☐
Phi	0			☐
Chi	0			☐
X	0			☐
Y	0			☐
Z	0			☐

Рис. 3: Параметры привода устройства пробозагрузки

На рисунке показаны все сконфигурированные приводы дифрактометра. Текущее положение каждого привода указано текстом голубого цвета. Если привод не инициализирован, то указывается грубое положение привода ярко-красным текстом, например "23.---". Если не выполнена процедура референсного движения привода - он отображается темно-красным текстом: "---.---". Для выполнения референсной процедуры используйте D8Tools или D4Tools. Флаг рядом с полем управления каждого привода контролирует выполнение команд *Move Drives* и *Init Drives*. Этими командами управляются только приводы, прошедшие процедуру проверки, что позволяет инициализировать и управлять только конкретными приводами. Для управления всеми приводами следует отметить флаг, расположенный наверху формы - остальные флаги всех приводов будут отмечены автоматически. Флаги приводов используются для ввода заданного положения для команды *Move Drives* или задания начального положения при сканировании.

Флаг автоматически отмечается при выборе соответствующего поля ввода. Переключаться между двумя системами приводов можно при помощи кнопок "Std" и "Aux". "Std" включает системы Phi, Chi, X, Y и Z. "Aux" характеризует вращающийся абсорбер и любой сконфигурированную вспомогательный привод. Кнопка ">>>" копирует текущие положения всех приводов в заданные поля.

Управление компонентами дифрактометра

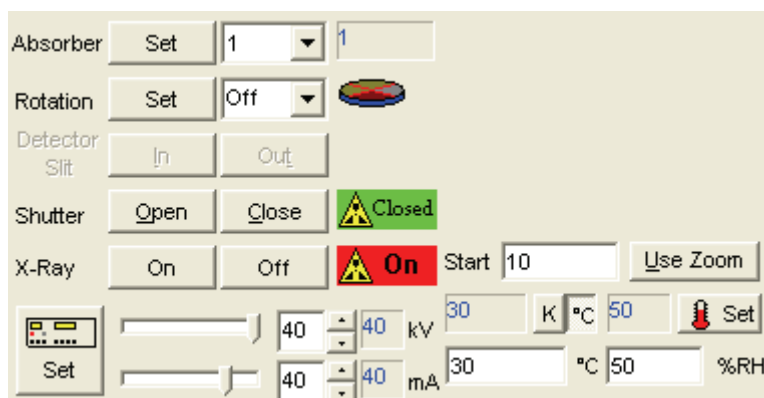


Рис 4: Форма управления компонентами дифрактометра

Данная форма расположена в нижней левой области главного окна и используется для управления компонентами дифрактометра.

Absorber (абсорбер)

Позиционирование автоматического абсорбера осуществляется кнопкой "Set" сверху. Используйте выпадающий список для выбора доступного коэффициента поглощения (в зависимости от типа абсорбера можно выбрать два или четыре значения). Коэффициент поглощения "1" соответствует отсутствию поглощения. Для включения автоматического абсорбера в процессе сканирования используется параметр. В этом случае параметр абсорбера контролируется за счет измеренной интенсивности.

Rotation (вращение)

Вращение пробы задается кнопкой "Set". Скорость вращения определяется выбором допустимого значения (в RPM) или параметра "Off" в выпадающем списке и последующим нажатием кнопки "Set". Если скорость изменить нельзя - доступны только два пункта "On" и "Off".

Detector Slit (щель детектора)

Автоматическую щель детектора можно установить в положение "In" или "Out" нажатием соответствующих кнопок. Текущее положение щели характеризуется индикатором справа.

Shutter (заслонка)

Кнопки "Open" и "Close" используются для того, чтобы открыть/закрыть заслонку рентгеновской трубки дифрактометра. Текущее положение заслонки характеризуется индикатором справа. Заслонка открывается автоматически перед началом измерения.

X-Ray (рентгеновское излучение)

Нажмите "On"/"Off" для включения/отключения рентгеновского генератора. Состояние генератора показывает значок справа.

Generator (генератор)

Мощность рентгеновского генератора устанавливается при помощи ползунков регулировки тока и напряжения. После установки нужных значений или ввода их вручную, нажмите кнопку "Set".

Temperature Stage (температурная камера)

Введите требуемую температуру и скорость изменения температуры в соответствующие поля и нажмите кнопку "Set". Значение температуры можно ввести в градусах Цельсия или Кельвина, в зависимости от положения кнопок "°C" и "K". Если настроена камера с изменяющейся влажностью, то скорость изменения температуры изменяется на относительную влажность. В этом случае скорость изменения температуры изменить нельзя - вместо этого следует указать требуемое значение температуры и относительную влажность в %. Если вы планируете проводить измерения в сухой атмосфере (воспользоваться только температурными параметрами камеры), в качестве значения влажности следует задать 0.

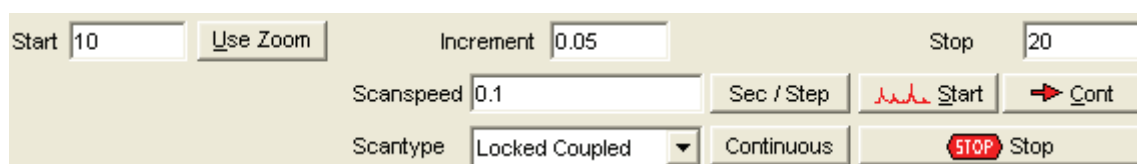


Рис 5: Форма управления сканированием

Данная форма служит для установки параметров "быстрого" измерения. Значение полей характеризуют текущие значения измерения в пакетном режиме.

Scantype (режим сканирования)

Служит для выбора режима сканирования из выпадающего списка. Вы можете настроить список режимов в диалоге Options.

Start, Stop и Increment (начало, конечное значение и размер шага)

Служит для ввода начального, конечного значения и размера шага для выбранного сканирования.

Scanspeed

Служит для выбора скорости сканирования. Кнопка справа от поля предназначена для переключения между сек/шаг и град/мин.

Continuous/Stepscan

Кнопка служит для переключения между режимами дискретного и непрерывного сканирования. Текущий режим отображается на кнопке.

Start, Stop, Cont

Кнопки используются для начала или завершения процедуры "быстрого" измерения. Нажатие кнопки "Cont" возобновит приостановленное сканирование.

Окно графика

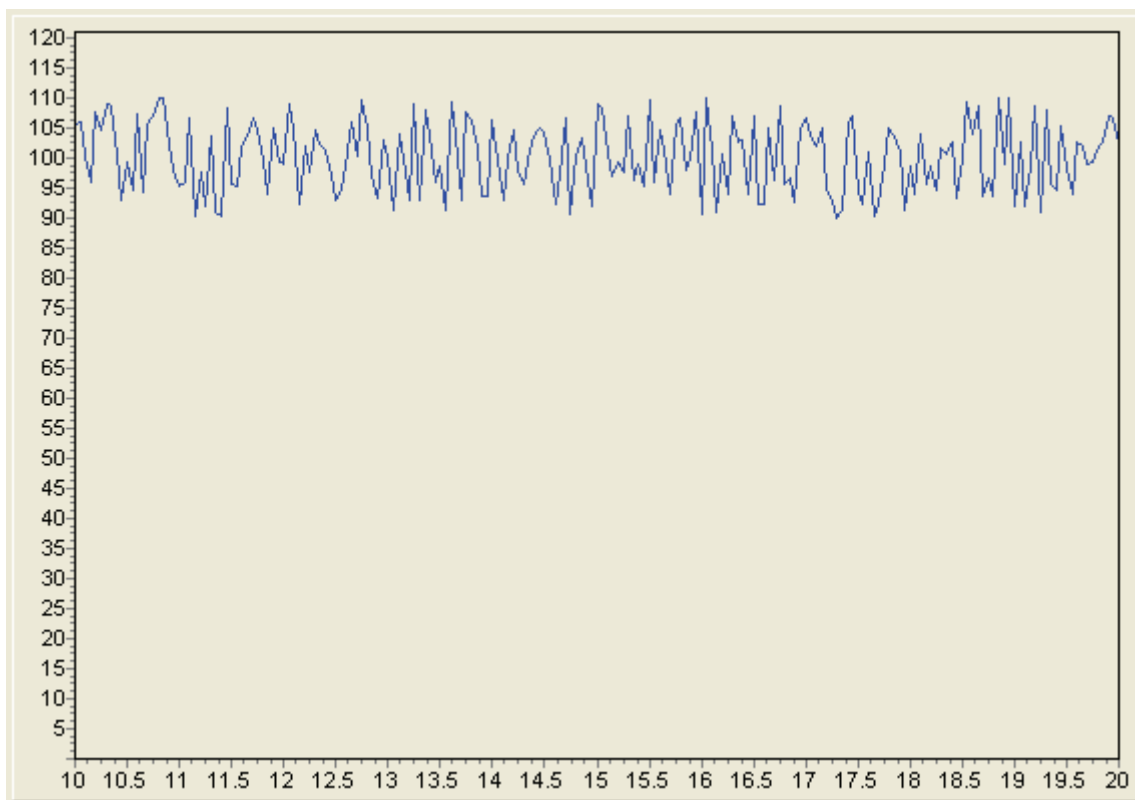


Рис 6: Окно графика

В окне графика отображаются данные текущего сканирования. Если навести курсор в эту область, его пиктограмма изменится на перекрестие. При нажатии правой кнопки мыши появится всплывающее меню, которое содержит следующие пункты:

- Chart line color (цвет графика)
- Chart background color (цвет фона)
- Zoom Reset (отменить масштабирование)
- Grid (показать сетку)
- Linear (линейный масштаб отображения данных)
- Logarithmic (логарифмический масштаб отображения данных)
- X Labels (показать подпись оси x)
- Y Labels (показать подпись оси y)
- Apply Ident. (applies the sample identification on the top axis)
- Print Chart (печать графика на принтере, установленном по умолчанию)
- Remove Peakstick (убрать линию-характеристику пика)

- Dots (показывать график в виде точек вместо линий)
- Advanced (расширенные настройки окна графика)

Unzoom graphical display (отменить масштабирование графика)

Масштабирование производится посредством прямоугольника выделения - для этого нужно нажать кнопку мыши (верхний левый угол прямоугольника) и растянуть область для захвата интересующего фрагмента, затем отпустить кнопку мыши. Если нажать кнопку "Unzoom", график вернется в первоначальному виду.

Jobs Page (страница параметров пакетного измерения)

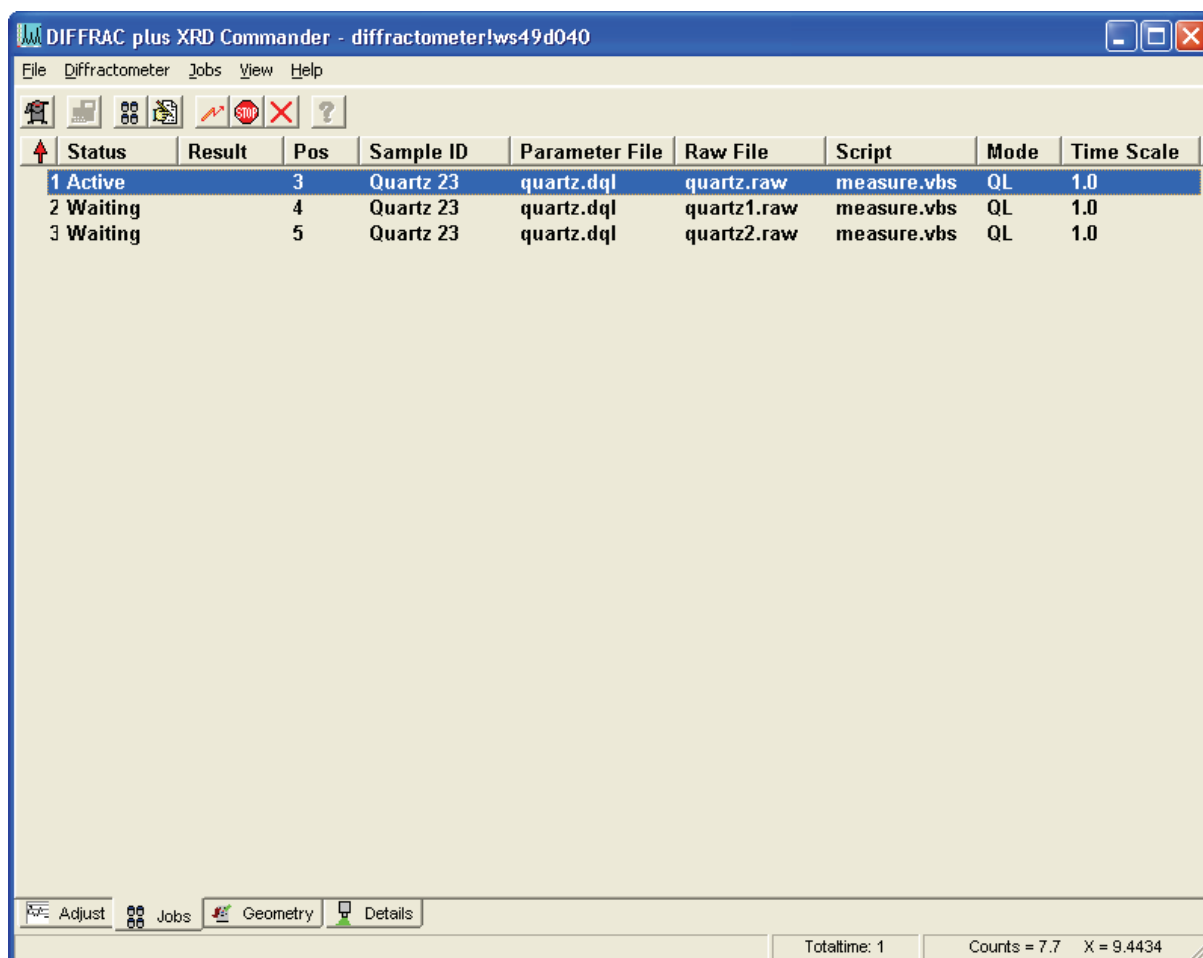


Рис. 7: XRD Commander: Jobs page

Данная страница служит для задания параметров измерения одной или более проб в пакетном режиме (функция особенно полезна, если система оснащена автоматическим устройством смены проб).

Also important is the setup of the "Options" from the menu item "File".

Если уже выполненное измерение требуется повторить следует отметить нужную строку или строки. Выбор пункта меню "Start Jobs" запустит измерение проб в соответствии с выделенными строками.

См. также описание соответствующих команд в меню Jobs:

- *Create Jobs* (создать список измерений)
- *Start Selected* (запустить выбранные измерения)
- *Halt Active Job* (остановить активное измерение)
- *Halt All Jobs* (остановить все измерения)
- *Delete Selected Jobs* (удалить выбранные измерения)

Geometry Page (страница геометрии системы)

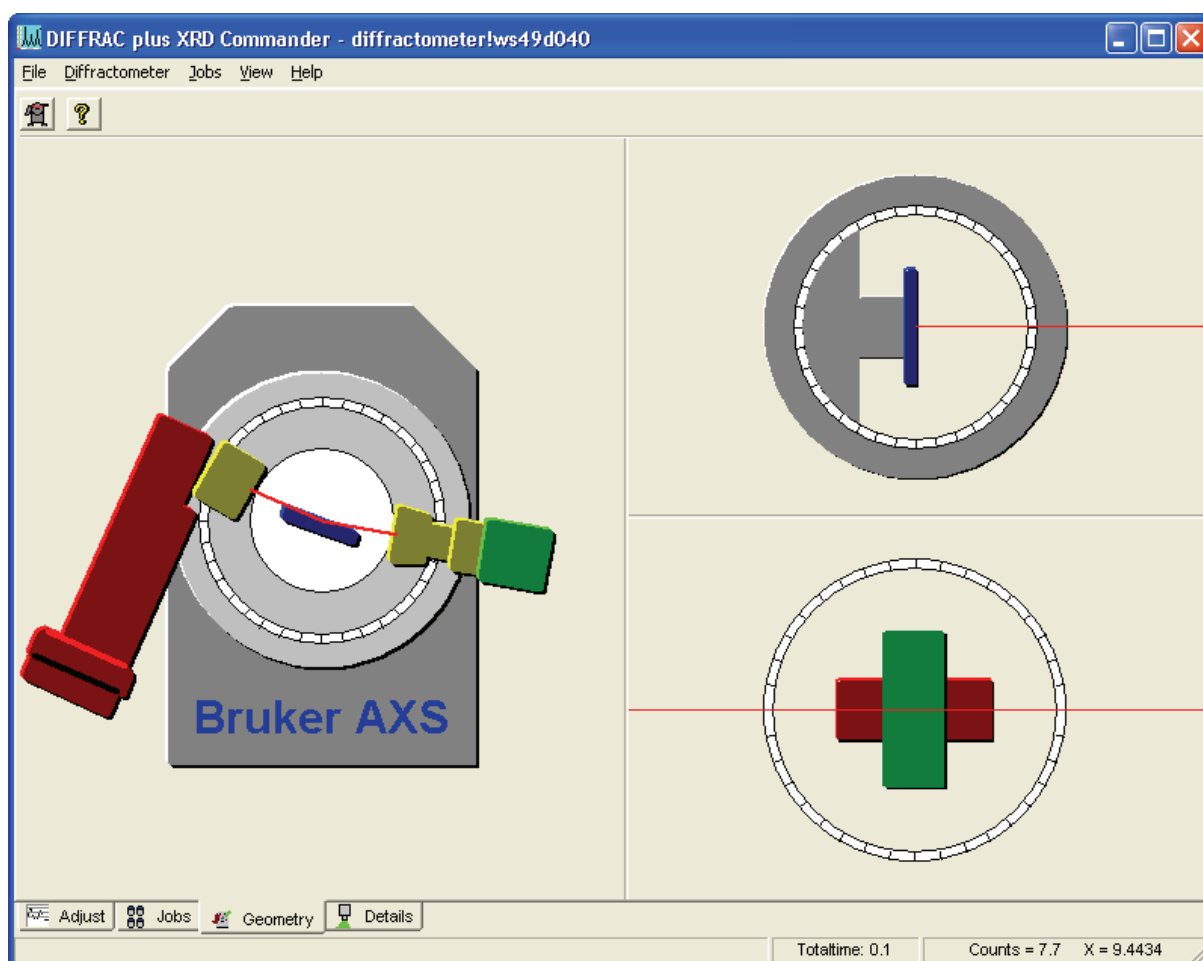


Рис. 8: XRD Commander: Geometry page

Данная страница иллюстрирует схему прибора. Программа запрашивает текущее значение углов и строит анимированное графическое изображение.

Details Page (страница подробной информации)

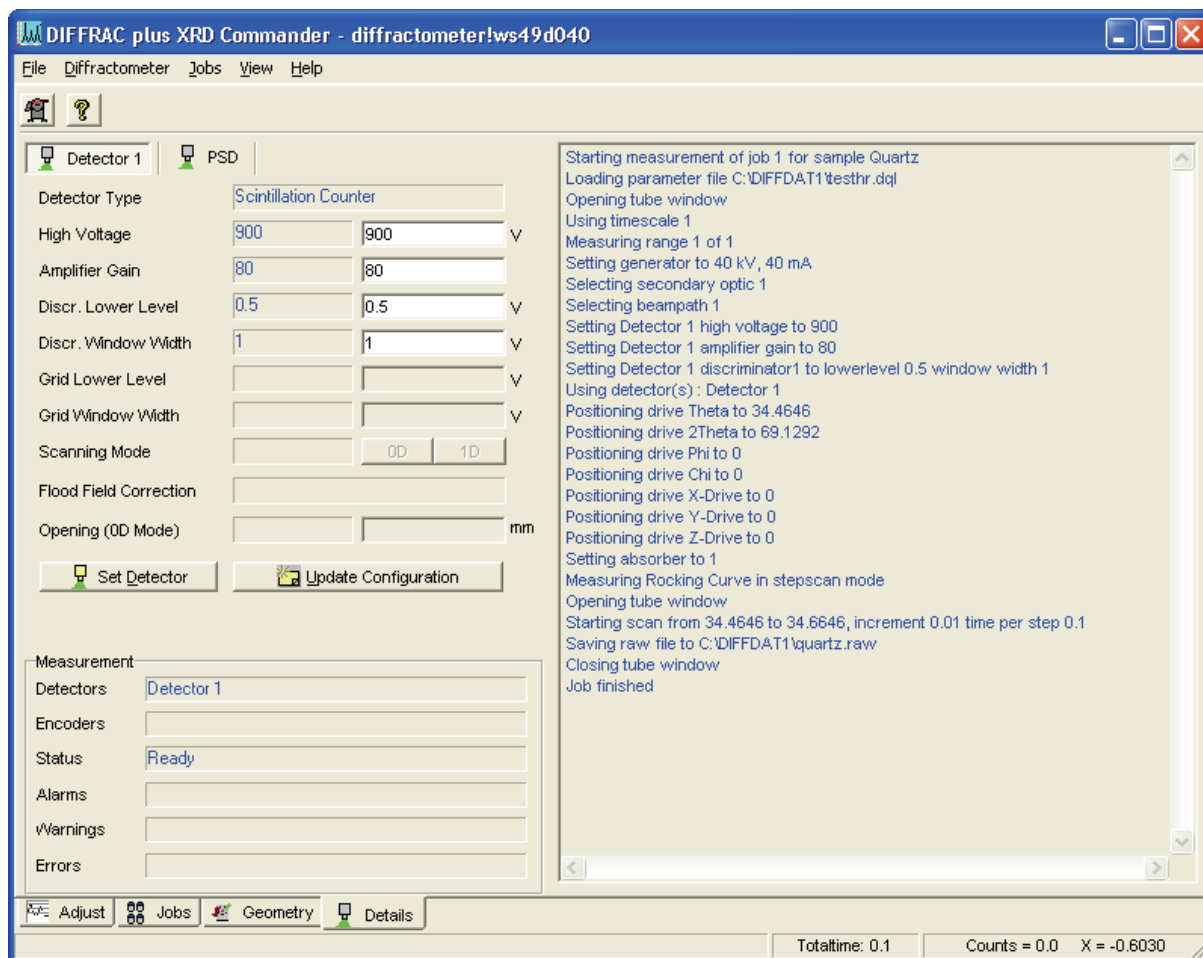


Рис 9: XRD Commander: Details page

Страница содержит подробную информацию о текущем измерении, например - аварийные состояния и предупреждения, информацию о детекторе и т.д.

Для выбора детектора для "быстрого" измерения используйте вкладки сверху.

Каждый детектор имеет свои параметры:

- High Voltage - Высокое напряжение (все детекторы)
- Amplifier Gain - Коэффициент усиления (сцинтилляционный и пропорциональный счетчики)
- Discr. Lower Level - Нижний порог дискриминатора (все детекторы)
- Discr. Window Width - Ширина окна дискриминатора (все детекторы)
- Grid Lower Level - Нижний порог сетчатого дискриминатора (только VANTEC-1)
- Grid Window Width - Ширина окна сетчатого дискриминатора (только VANTEC-1)
- Режим сканирования - Для детекторов LynxEye и VANTEC-1, 0D (интегрировать все каналы) или 1D
- Flood Field Correction - The status of the flood field correction (только VANTEC-1 и LynxEye)

- Opening (0D Mode) - Используемая апертура в 0D режиме сканирования (только VANTEC-1 и LynxEye)

Значения можно изменить и сохранить для детектора кнопкой "Set Detector". Перед началом измерения данные значения автоматически посылаются электронике детектора.

Можно также ввести новые параметры детектора (HV, AG, LL, WW) и сохранить их в файле конфигурации кнопкой "Update Configuration".

Camera Page (страница видеокамеры)

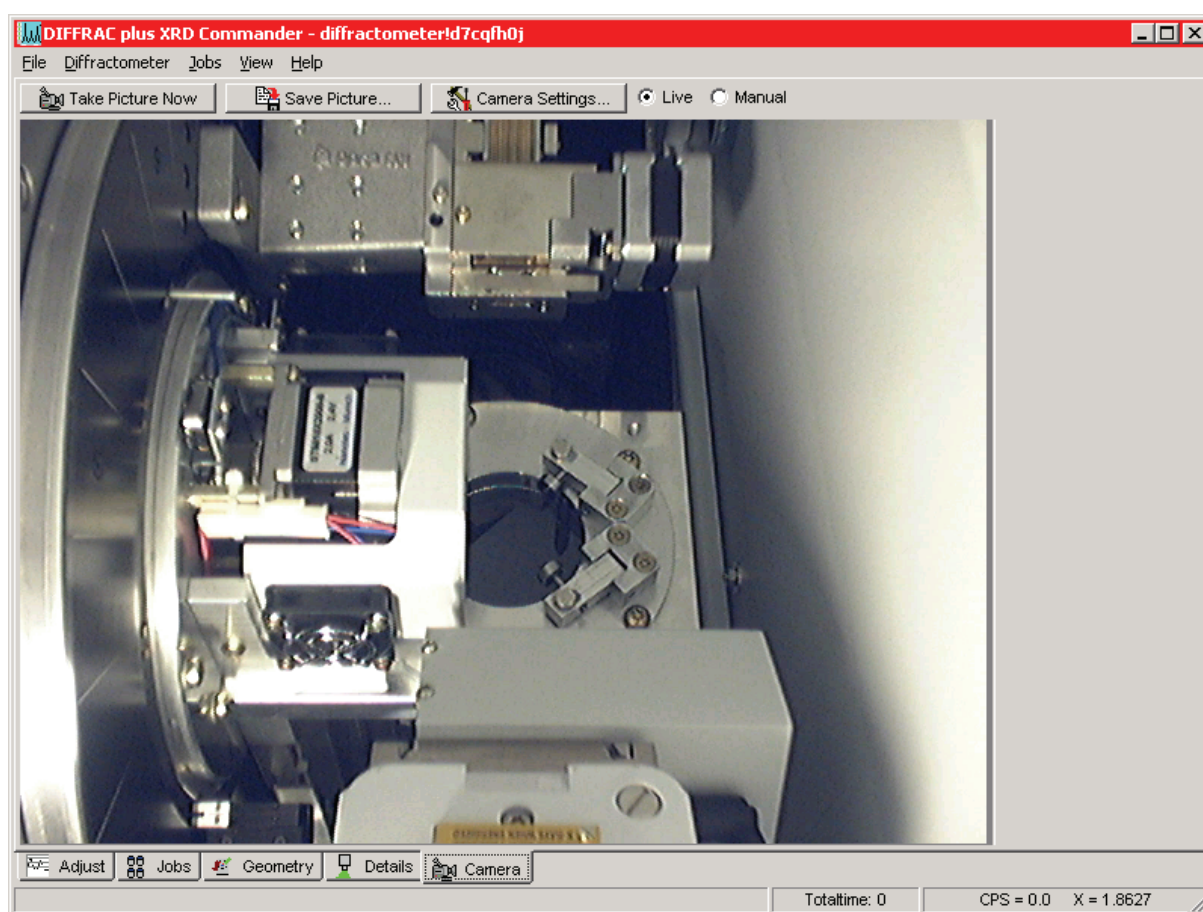


Рис 10: XRD Commander: Camera page

Если дифрактометр оборудован видеокамерой, на данной странице представлено изображение камеры. Камера может работать в режимах "Live" или "Manual" (кнопки-переключатели в правом верхнем углу). В режиме "Live" камера работает как обычная видеокамера. Данный режим возможен только если **XRD Commander** работает на том же ПК, к которому подключена камера. В режиме "Manual" кнопка **Take Picture Now** служи для создания мгновенного снимка. Данная функция работает и в случае, если дифрактометр управляется с удаленного ПК.

Save Picture позволяет сохранить изображение на диск.

Camera Settings используется для настройки параметров камеры.

The Menubar (строка меню)

File Menu (меню Файл)

Select Diffractometer (выбор дифрактометра)

Эту команду также можно запустить кнопкой  , расположенной на панели инструментов.

С помощью этой команды выбирается дифрактометр для работы с программой XRD Commander. Окно отображает все дифрактометры, подсоединенные к компьютерам в локальной сети. Выберите вручную один из них и название компьютера. Отметьте флаг *Use as Default* (использовать по умолчанию) - в этом случае при каждом запуске XRD Commander будет использоваться данный дифрактометр.

Save As (сохранить)

Эту команду также можно запустить кнопкой  , расположенной на панели инструментов.

С помощью этой команды можно сохранить измеренные данные в файл данных RAW, и затем работать с ним в программе EVA. При выполнении команды появится диалоговое окно, которое предложит ввести название и формат файла RAW .

Save as Default (сохранить в качестве значений по умолчанию)

Все введенные значения можно сохранить в качестве значений по умолчанию. Для любого типа сканирования (напр. сопряженного, HV-сканирования, и т.д.) можно сохранить поля Start, Stop, Increment. Если вы изменяете тип сканирования, значпо умолчанию загружаются из файла значений и отображаются на дисплее.

Данные значения будут использоваться в качестве значений по умолчанию при следующем запуске программы XRD Commander.

Print Preview (просмотр печати)

Выберите данную опцию для предварительного просмотра при печати графика.

Print Chart (печать графика)

При выборе данного пункта производится печать текущего графика на принтере, установленном по умолчанию.

Transmit Drive Positions (отправить положение приводов)

Эту команду также можно запустить кнопкой  , расположенной на панели инструментов.

Команда передает значения текущих положений приводов в программу XRD Wizard, где их можно использовать для установки значений для измерений с высоким разрешением.

Options (настройки)

Команда вызывает общее диалоговое окно настроек программы XRD Commander, которое состоит из трех страниц:

General Page (главная страница)

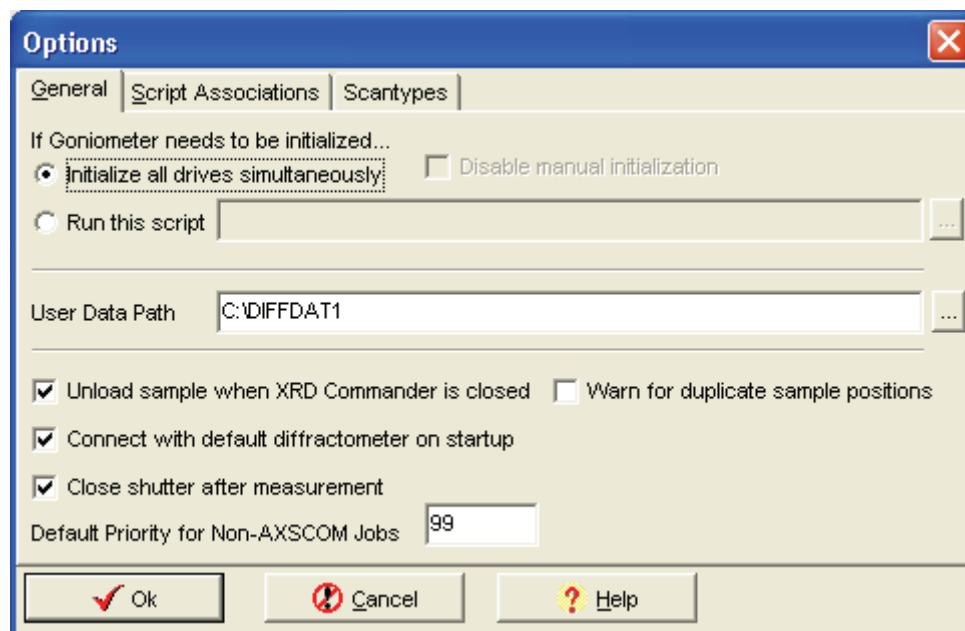


Рис. 11: Options dialog: General page

If Goniometer needs to be initialized... (если нужно инициализировать гониометр)

Перед началом измерений следует инициализировать гониометр. Выберите "Initialize all drives simultaneously" для инициализации всех приводов или введите название командного (скриптового) файла для инициализации гониометра.

User Data Path (путь к файлам данных пользователя)

Здесь можно изменить путь к файлу параметров измерения и файлам данных. Введите путь или нажмите кнопку "..." для выбора каталога.

Unload sample when XRD Commander is closed (извлечь пробу, если программа XRD Commander закрыта)

Если этот флаг отмечен, загруженная проба будет выгружена при выходе из программы XRD Commander.

Connect with default diffractometer at startup (подключиться к дифрактометру при запуске)

Если этот флаг отмечен, программа XRD Commander при запуске будет подключаться к дифрактометру, установленному по умолчанию.

Close shutter after measurement (закрыть заслонку трубки после измерения)

Если этот флаг отмечен, заслонка рентгеновской трубки будет закрыта сразу же после завершения измерения

Warn for duplicate sample positions (предупреждать о повторяющихся позициях проб)

Если флаг отмечен, программа **XRD Commander** предупредит, что одна и та же позиция пробы используется более чем в одном измерении в рамках пакета измерений.

Default priority for non-AXSCOM jobs (приоритет пакетов измерений, не относящихся к AXSCOM)

Введите приоритет в диапазоне 99 (самый низкий) ☐ до 0 (самый высокий)

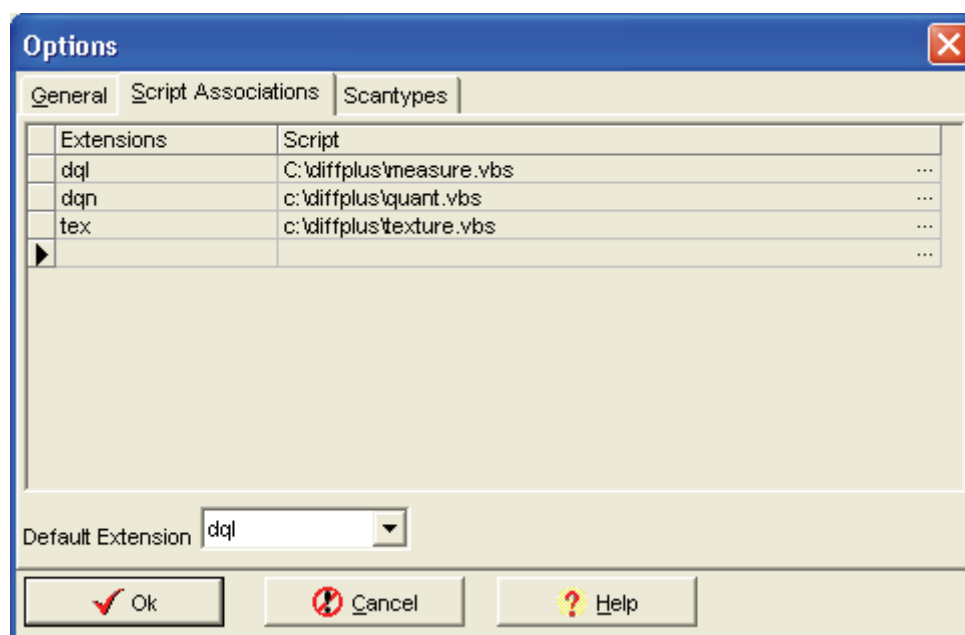
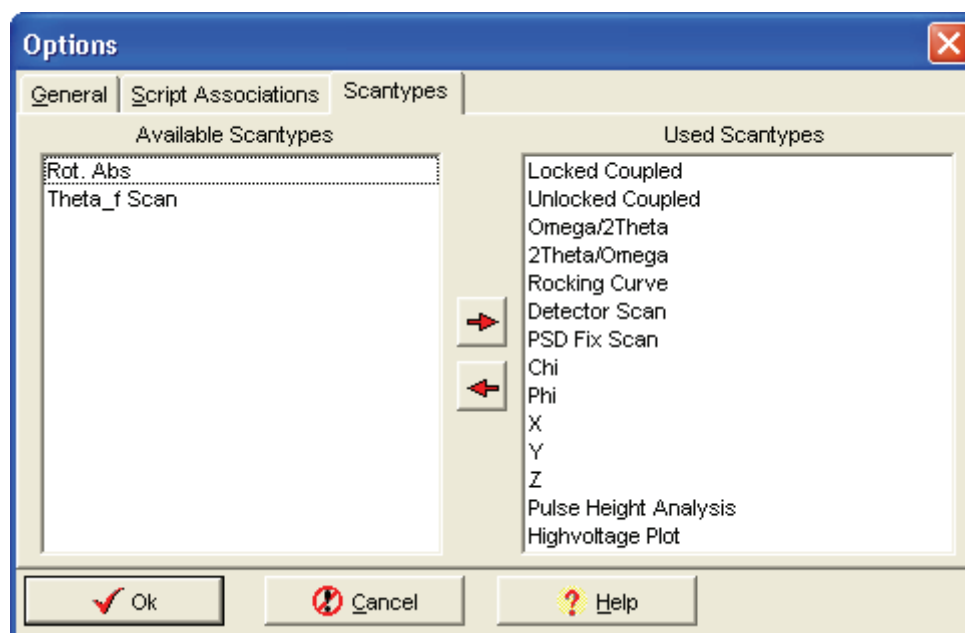
Script Associations Page (страница определения скриптов)

Рис. 12: Options dialog: Script Associations page

Процедура пакетных измерений запускается за счет скриптов (наборов команд). Компания Bruker AXS подготовила несколько скриптов для выполнения качественного и количественного анализа. Параметры измерения для качественного анализа хранятся в файлах ".DQL", количественного — в файлах ".DQN". Связь данных групп файлов и соответствующих им скриптов осуществляется при помощи данной страницы. Вы можете написать специальный скрипт для выполнения определенных задач (напр. "MyMeasureScript.vbs") и поставить его в соответствие файлам ".DQL" для последующего использования при измерениях. Поля определяют скрипты, используемые по умолчанию, если специальные скрипты не используются.

Одно из расширений можно использовать в качестве значения по умолчанию для использования, когда ни одно расширение не указано. Например, если вы определите ".dql" в качестве расширения по умолчанию и введете "quartz" в качестве названия файла, полное название файла будет "quartz.dql".

Scantypes page (страница настройки типов сканирования)**Рис. 13: Options: Scantypes page**

Здесь можно определить список доступных типов сканирования в режиме "быстрого" измерения. Левый список характеризует доступные типы сканирования, правый - используемые. Для перемещения типов из одного списка в другой используются кнопки со стрелками. Для выбора нескольких типов зажмите кнопку "Ctrl".

Exit (выход)

Выход из программы XRD Commander.

Программа сохранит параметры сканирования для последующего использования. Не забудьте сохранять данные в RAW - файл перед выходом из программы.

Diffraction Menu (меню дифрактометр)**Direct Mode (прямой режим управления)**

Команду также можно выполнить нажатием кнопки  на панели инструментов. Этот режим используется для отправки т.н. "прямых команд" определенному устройству дифрактометра.

Таким устройством может быть:

- Контроллер дифрактометра
- FDC (быстрый дифракционный контроллер управления позиционно чувствительным детектором)
- TC (контроллер температуры в температурной камере)

- Измерительный сервер
- Контроллер позиционно-чувствительного детектора
- Контроллер управления роботом для загрузки дисков
- Отсек загрузки дисков 1
- Отсек загрузки дисков 2

Информацию по данным командам можно получить обратившись к специализированному руководству.

Пример: Запрос состояния дифрактометра.

В окне ввода прямых команд нажмите кнопку "Diffractometer" и введите в командную строку следующую команду:

ST

В строке "Answer" (отклик) вы получите информацию от дифрактометра. Если в процессе выполнения команды не возникло никаких ошибок, команда сохранится в выпадающем списке командной строки для удобства ее последующего вызова.

Move Drives (перемещение приводов)

Команду также можно вызвать кнопкой  .

Пока данная кнопка остается в нажатом положении, все выбранные приводы будут перемещены в заданное положение. Для выбора всех приводов следует отметить флаг наверху под текстом "Requested".

Init Drives (инициализация приводов)

Команду также можно вызвать кнопкой  .

Пока данная кнопка остается в нажатом положении, все выбранные приводы будут инициализированы. Для выбора всех приводов следует отметить флаг наверху под текстом "Requested".

Determine ZI-Value (определение значения ZL)

Команду также можно вызвать кнопкой  .

В зависимости от выбранного типа сканирования (кривая шатания, сканирование детектором и т.д.), значение ZI соответствующей окружности можно вычислить при помощи данной функции. Рассчитанное положение пика будет показано автоматически после поиска пика. В зависимости от других параметров формы, новое значение ZI-Value сохраняется и отправляется на дифрактометр после нажатия кнопки "Save and Send new ZI"-button.

Убедитесь, что накопленная статистика является достаточной для определения положения пика.

Unload Sample (выгрузить пробу)

Команду также можно вызвать кнопкой .

Если дифрактометр оборудован устройством смены проб, при помощи функции "Unload Sample" можно автоматически выгрузить пробу из положения измерения в устройство смены проб.

Autorepeat (автоповтор)

Команду также можно вызвать кнопкой .

Отметьте данную опцию, если хотите, чтобы XRD Commander перезапускал измерения в режиме настройки автоматически. Если опция включена, текущее сканирование будет повторяться для улучшения статистики.

Ratemeter

Команду также можно вызвать кнопкой .

Эта команда вызывает окно "Ratemeter" (интенсиметр)

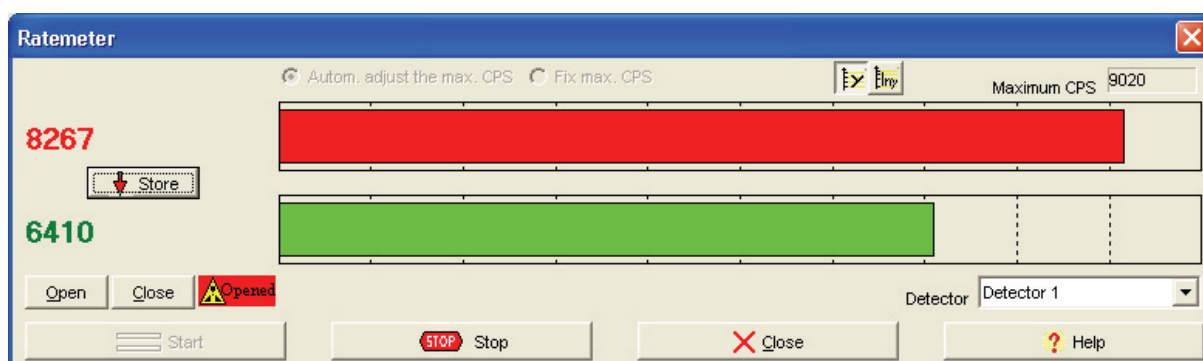


Рис 14: The Ratemeter (интенсиметр)

Интенсиметр используется в основном для регулировки системы. Как только будет нажата кнопка "Start", в окне интенсиметра появится значение скорости счета дифрактометра. Графически скорость счета представлена прямоугольным индикатором "Actual CPS". В любое время значение "Actual CPS" (текущее количество имп/с) можно сохранить в нижнем индикаторе "Reference CPS" (референс) нажатием кнопки "Store". Эта функция предусмотрена для сравнения текущей скорости счета с референсной для облегчения регулировки.

Если нажата кнопка "autom. adjust the max. CPS", максимум шкалы "Actual CPS" регулируется автоматически. В противном случае в качестве максимума шкалы используется значение в поле "Max. CPS"-field. Скорость счета является характеристикой детектора, который можно выбрать из выпадающего списка "Detector".

Vacuum On/Off (вакуум вкл/выкл)

Используется для включения или выключения вакуумного захвата для дисков.

Load/Unload Carrier Port 1/2 (загрузить/выгрузить каретку порт 1/2)

Команда используется для загрузки/выгрузки системы FOUN в соответствующий порт-приемник.

Jobs Menu (меню конфигурации пакетных измерений)

Create/Edit Jobs (создать/редактировать серию измерений)

Команду также можно вызвать кнопкой .

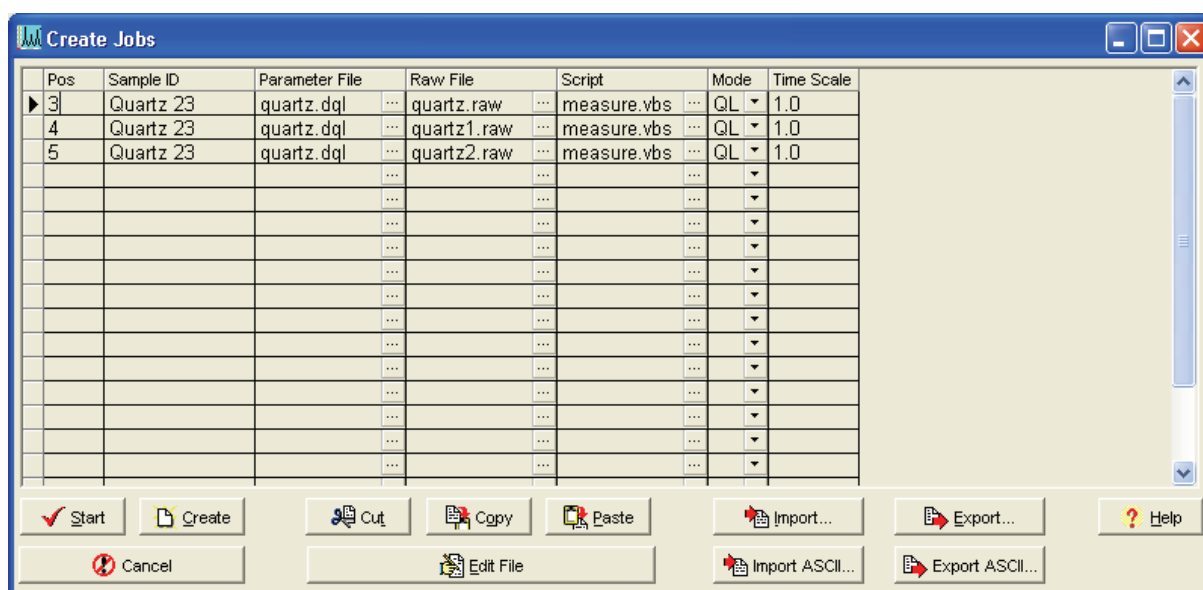


Рис 15: Create jobs

Для добавления новой строки нажмите *Create Jobs*. Для редактирования следует выбрать интересующие строки и нажать *Edit Jobs* (для выбора нескольких строк используются клавиши Shift/Ctrl), после чего появится многостраничное окно в каждой строке соответствует измерению, столбец - его параметрам. Для каждого измерения следует ввести: положение пробы внутри устройства пробозагрузки, метод идентификации, файл параметров (DQL, TEX....), название файла raw, скрипт, используемый для измерения, режим и масштаб времени. Если поле script не заполнено, нужный набор команд выбирается автоматически в соответствии с расширением файла параметров (см. Options dialog:Script Associations).

Расположение файла параметров, файла raw и скрипта можно уточнить нажатием кнопки с троеточием (...), справа от полей ввода - появится стандартный диалог выбора директорий.

Масштаб времени используется в качестве коэффициента для времени измерения, который сохраняется в файле параметров.

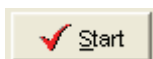
Напр. значение 2 увеличивает время измерения в 2 раза.

Режим используется для определения типа измерения:

- QL - качественный
- RE - Референсный образец для количественного анализа

- ST - Стандартный образец для количественного анализа
- UN - Неизвестный образец для количественного анализа
- TT - Анализ текстуры в режиме пропускания
- TR - Анализ текстуры в режиме отражения
- RI - Внутренний референс

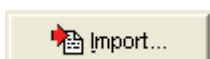
После определения серии измерений, можно их запустить кнопкой "Start"



или сохранить серию в ".JOB" - файл перед выполнением кнопкой "Export".



Сохраненный файл можно загрузить кнопкой "Import...".

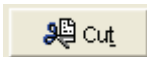


Строки выбираются щелчком в первом столбце. Выбранные строки можно

скопировать

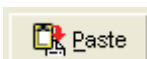


или вырезать

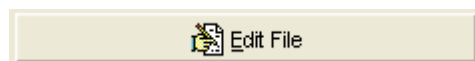


(копирование в буффер обмена).

Вставка строк осуществляется кнопкой



Нажатием кнопки

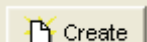


можно запустить

установленный по умолчанию редактор файла параметров, например для файлов *.dgl запускается программа XRD Wizard.

После нажатия кнопки "Start" окно автоматически закрывается, после чего контроль за процессом измерения осуществляется при помощи вкладок "Geometry" и "Details".

Вы можете также создавать серии измерения без их запуска при помощи

кнопки . В этом случае измерения создаются в режиме "Suspended".

Для их запуска используйте кнопку "Start Selected".

Start Selected (запустить выбранное)

Команду также можно вызвать кнопкой . Если вы уже создали измерения и приостановили или отменили их выполнение и они отображаются в окне "Job", вы можете выбрать одну или более проб при помощи клавиатуры или мыши. Измерение можно возобновить при помощи кнопки "Start Selected".

Halt Active Job/Halt All Jobs (остановить текущее измерение/серию измерений)

Команду также можно вызвать кнопкой .

"Halt Active Job" останавливает текущую серию измерений, "Halt All Jobs" - все запущенные.

Delete Selected Jobs (удалить выбранные серии измерений)

Команду также можно вызвать кнопкой .

При помощи данной функции можно удалить все выделенные строки, соответствующие сериям измерений. Активную серию удалить можно только после ее остановки.

Column Editor (редактор столбцов)

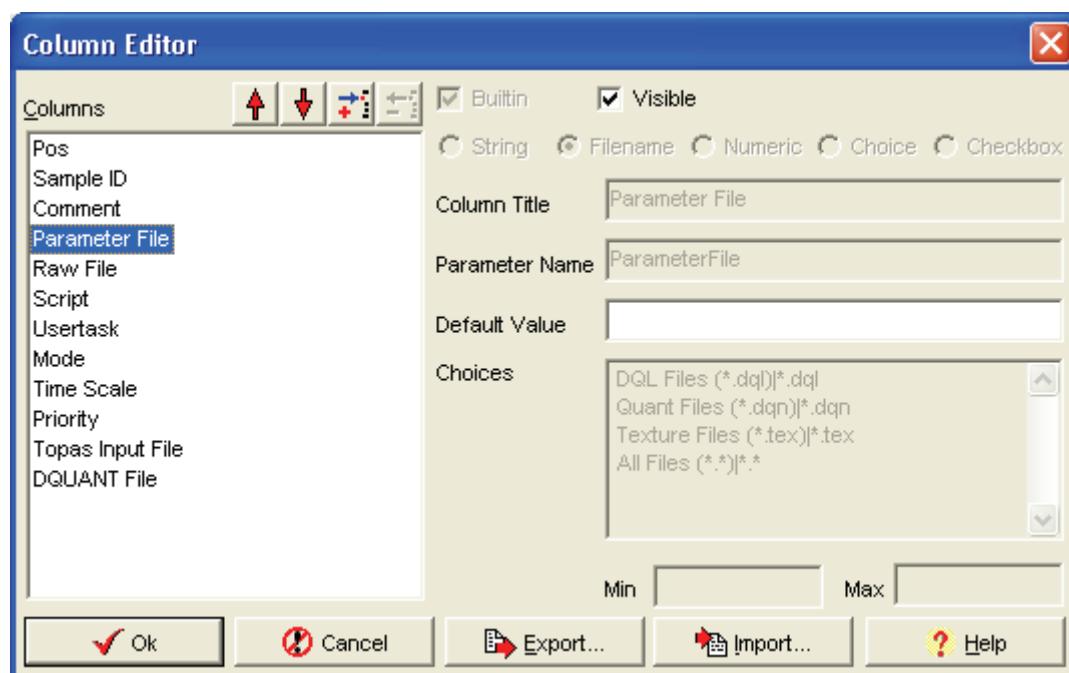


Рис. 16: The Column Editor

Эта команда позволяет вызвать редактор столбцов, который используется для настройки параметров, которые вводит пользователь. Каждый параметр характеризует определенный столбец на странице Jobs и в таблице *Create Jobs* (см. стр. 18). Список слева определяет уже выбранные столбцы. Справа находятся параметры выбранного столбца. Кнопки со стрелками над списком используются для управления порядком отображения столбцов.

Кнопка  сдвинет выбранный столбец влево.

Кнопка  сдвинет выбранный столбец вправо.

 служит для вставки нового столбца перед выбранным. Не забывайте указать его параметры справа.

 удаляет выбранный столбец. Столбцы с флагом Builtin удалить нельзя.

Builtin

Столбцы с установленным флагом "Builtin" удалить нельзя.

Visible (видимый)

Снимите этот флаг, чтобы столбец не отображался в таблице. Обратите внимание - значение данного столбца в этом случае будет использоваться.

Выберите одну из радиокнопок для задания типа столбца:

String (строка): Пользователь может ввести любую строку в данный столбец.

Filename (название файла): Столбец для ввода названия файла. Рядом со строкой ввод будет отображаться кнопка для запуска стандартного диалога перемещения по каталогам. Для настройки файловой маски используйте поле "Choices".

Например записи

Text files (*.txt)|*.txt

All Files (*.*)|*.*

представляют две маски для выбора текстовых (*.txt) файлов и выбора любых файлов.

Numeric (числовой параметр): Позволяет пользователю ввести любое действительное значение. Диапазон ввода ограничен значениями "Min" и "Max".

Choice (выбор): Выводит выпадающий список с пунктами, определенными параметром "Choices".

Checkbox (флаг): Создает флаг. Два доступных выбора определяются параметром "Choices".

Column Title (заголовок столбца)

Определяют заголовок данного столбца.

Parameter Name (Название параметра)

Устанавливает название параметра измерения для данного столбца. Например задание значения данного параметра как "Foo" позволяет набору измерительных команд запросить параметр ActiveJob.Parameter("Foo").

Default Value (значение по умолчанию)

Если данное поле содержит какое-либо значение, оно будет использовано по умолчанию, если пользователь не укажет данное значение.

Choices (выбор)

Поле принимает различные значения в зависимости от типа столбца.

Min, Max

Определяют диапазон доступных значений числовых столбцов (см. выше).

Ok

Нажмите "Ok" для того, чтобы сохранить изменения и закрыть диалог. Настройки столбцов сохраняются в отдельный файл.

Cancel (отменить)

Закрывает диалог не сохраняя сделанных изменений.

Import, Export (импорт, экспорт)

Импорт файла с другого дифрактометра или экспорт настроек в файл.

View menu (меню настройки вида)

Данные, полученные в результате сканирования, которые отображаются в области графика. Данные могут отображаться в линейном () или логарифмическом () масштабе.

Если отмечен пункт "grid" (), в области графика будет отображаться сетка.

В графической области можно масштабировать изображение при помощи левой кнопки мыши. При нажатии кнопки () масштабирование будет отменено.

Кнопка "CPS"-button () переключает размерность дисплея между импульсами в секунду и импульсами.

Help Menu(меню Справка)**Contents (содержание)**

Открывает содержание справки. Из открывшейся страницы вы можете получить инструкции по использованию программы XRD Commander и различную вспомогательную информацию.

Вы можете нажать кнопку Contents в любом месте файла справки для возврата к содержанию.

Scripting Help (помощь по использованию скриптов)

Включает информацию по встроенному скриптовому языку.

About (о программе)

Кнопка "About" отображает информацию об авторском праве и версии программы XRD Commander.

Панель инструментов

Наиболее важные процедуры можно выполнить нажав одну из кнопок на панели инструментов. Более подробную информацию можно получить из описания конкретных пунктов меню.

-  *Select Diffractometer* (стр. 12)
-  *Save As* (стр. 12)
-  *Direct Mode* (стр. 15)
-  *Ratemeter* (стр. 17)
-  *Transmit Drive Positions* (стр. 12)
-  *Move Drives* (стр. 16)
-  *Save Position* (стр. 24)
-  *Get Position* (стр. 24)
-  *Primary Optic* (стр. 24)
-  *Secondary Optic* (стр. 24)
-  *Init Drives* (стр. 16)
-  *Unload Sample* (стр. 17)
-  *Determine ZI-Value* (стр. 16)
-  *Autorepeat* (стр. 17)
-  *Linear display of the measured data* (стр. 22)
-  *Logarithmic display of the measured data* (стр. 22)
-  *Toggle CPS display* (стр. 22)
-  *Toggle grid* (п. 22)
-  *Zoom Reset* (стр. 22)
-  *Create Jobs* (стр. 18)
-  *Edit Jobs* (стр. 18)

-  *Start Selected* (стр. 19)
-  *Halt All Jobs* (стр. 19)
-  *Delete Selected Jobs* (стр. 20)
-  *About XRD Commander* (стр. 22)

Какие кнопки находятся в активном положении зависит от выбора вкладки.

При наведении курсора мыши на кнопку в строке состояния появится краткая информация о данной функции.

Некоторые кнопки панели инструментов в меню не представлены:

Save Position (сохранить положение)

Команда позволяет сохранить положения всех приводов после истечения заданного пользователем времени. После нажатия на стрелку рядом с кнопкой появится список ячеек для сохранения, после чего следует ввести название ячейки. После этого ячейка станет активной и будет автоматически отмечена в списке. После этого новое положение можно сохранить в ячейку одним нажатием кнопки.

Get Position (узнать положение)

Команда используется для загрузки положений, сохраненных командой "Save Position".

Primary Optic (первичная оптика)

Используется для выбора первичной оптики. Смещения Theta и 2Theta, сохраненные программой конфигурации будут учтены автоматически.

Secondary Optic (вторичная оптика)

Используется для выбора первичной оптики. Смещения Theta и 2Theta, сохраненные программой конфигурации будут учтены автоматически. В списке представлена вся сконфигурированная оптика и геометрии.

The Statusbar (строка состояния)

В строке состояния всегда отображается дата и время. При запущенном измерении, строка также отображает информацию о его состоянии. Если курсор находится в области графика, в строке состояния появятся данные о текущем количестве импульсов в секунду, а также координаты X и Y перекрестия курсора.

2 Настройка измерительного сервера

Обзор

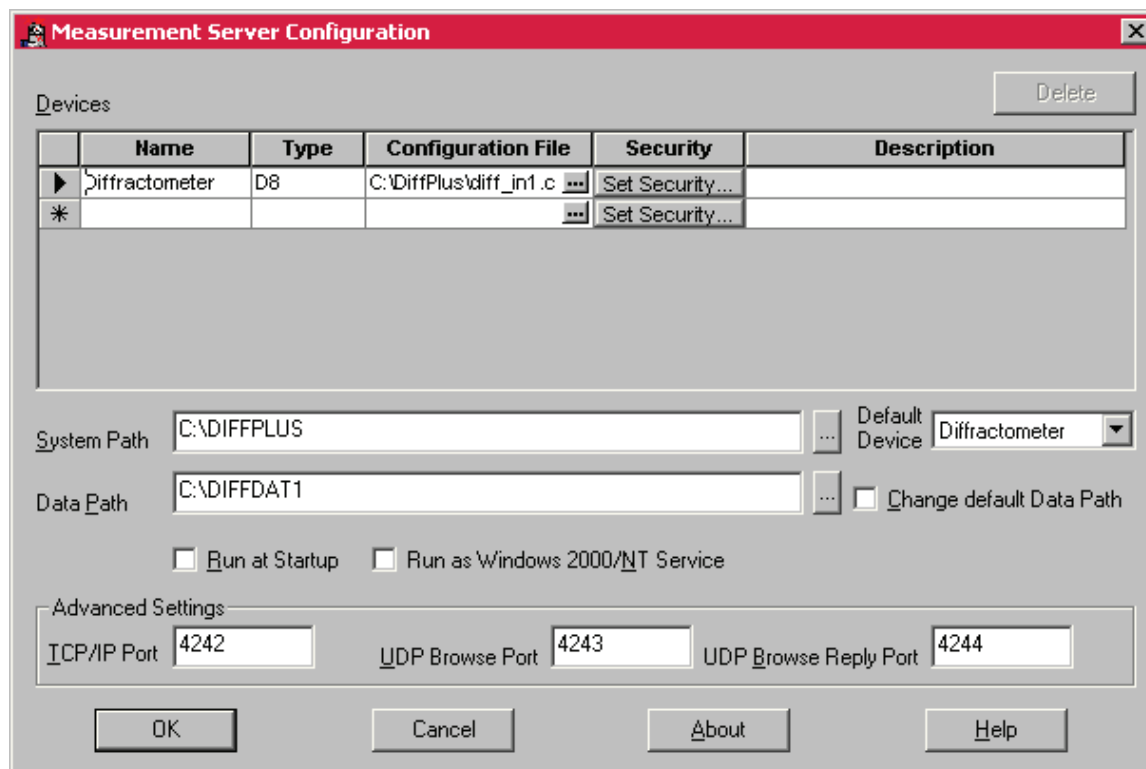


Рис. 1: Главное окно

Программа Measurement Server Configuration используется для изменения настроек DIFFRACplus Measurement Server (MeasSvr.exe). Измерительный сервер управляет рентгеновским дифрактометром и предоставляет системе доступ к сетевому протоколу TCP/IP. Сервер может управлять несколькими дифрактометрами, подключенными к одному компьютеру и представлять их в виде таблицы. Строка, начинающаяся со звездочки является строкой-расширением (*Append Row*). Вы можете добавлять новые строки (новые дифрактометры) вводом информации в данную строку. Количество строк в этом случае автоматически увеличивается.

Чтобы добавить новый дифрактометр следует заполнить столбцы таблицы:

Name (название)

Введите название дифрактометра. Пробелы и управляющие символы не допускаются.

Type (тип)

Столбец заполняется информацией файла конфигурации и описывает тип дифрактометра.

Configuration File (файл конфигурации)

Строка предназначена для ввода названия файла конфигурации. Для вызова стандартного диалога выбора файла нажмите [...]. Обычно файл конфигурации расположен в системном каталоге и называется diff_in1.cnf.

Security (безопасность)

Выбор процедуры доступа к дифрактометру. См. *Security Dialog* (стр. 3)

Description (описание)

Любая информация, касающаяся дифрактометра.

Для удаления дифрактометра из списка вделите строку или строки, нажмите на серую ячейку, которая является первым столбцом таблицы для выбора строки и нажмите кнопку **Delete** (удалить).

System Path (путь к системным файлам)

Данный каталог используется для хранения всех исполняемых файлов и файлов скриптов программы DIFFRACplus. По умолчанию отображается каталог из которого запускается программа Measurement Server Configuration. Для навигации по каталогам воспользуйтесь кнопкой [...].

Default Device (устройство по умолчанию)

Выберите название прибора, который используется по умолчанию.

Data Path (путь к файлам данных)

Каталог, указанный в данном пункте используется по умолчанию для поиска файлов параметров и файлов raw. Отметка флага **Change default Data Path** затронет всех пользователей программы. Для навигации по каталогам воспользуйтесь кнопкой [...].

Run at Startup (запуск при загрузке)

Опция отвечает за автоматическую загрузку программы при запуске компьютера.

Run as Windows 2000/NT Service (запустить в режиме клиента Windows 2000/NT)

Запускает программу Measurement Server в качестве службы Windows, а не обычного приложения.

Advanced Settings (расширенные настройки)

Данные настройки следует изменять только при наличии конфликта с другими сетевыми приложениями. Настройки должны совпадать на всех компьютерах, подключенных к компьютеру под управлением Measurement Server.

TCP/IP Port (порт TCP/IP)

Десятичное значение порта, по умолчанию используется 4242.

UDP Browse Port (порт управления дифрактометрами UDP)

Десятичное значение порта, по умолчанию используется 4243.

UDP Browse Reply Port (порт приема отклика дифрактометра UDP)

Десятичное значение порта, по умолчанию используется 4244.

Ok

Выход из программы с сохранением установок в реестр.

Cancel

Выход без сохранения.

About

Просмотр информации о программе. См. *About dialog* (стр. 4).

Security Dialog (диалог настроек безопасности)

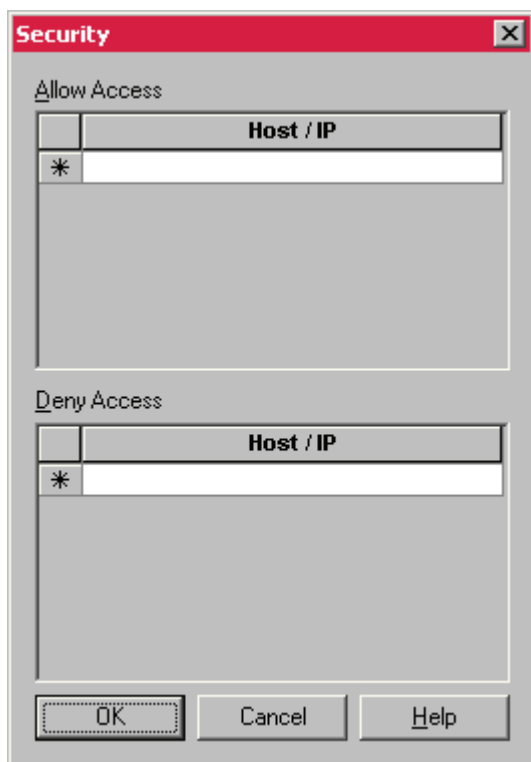


Рис 2: Security Dialog

Имеется возможность разрешить или запретить доступ к любому клиентскому компьютеру. Настройки доступа осуществляются при помощи двух выпадающих списков с названием компьютера или IP-адреса. Значения по умолчанию разрешают доступ всех компьютеров к измерительному серверу. Список разрешенных компьютеров определяется списком Allow Access, запрещенных - Deny Access. Если списки пусты, то используются значения по умолчанию.

Записи списков доступа имеют следующий вид:

Запись	Значение
ALL	Все компьютеры
marvin.somewhere.com	Только хост marvin.somewhere.com
.somewhere.com	Любой хост домена somewhere.com
.com	Любой хост домена .com domain
192.168.0.1	Хост с данным IP number
192.168.0.1/255.255.0.0	Любой хост, IP которого начинается с 192.168 ("/" соответствует логическому оператору AND)

В качестве примера можно добавить хост marvin в список Allow и указать значение ALL в списке Deny.

About Dialog ("о программе")

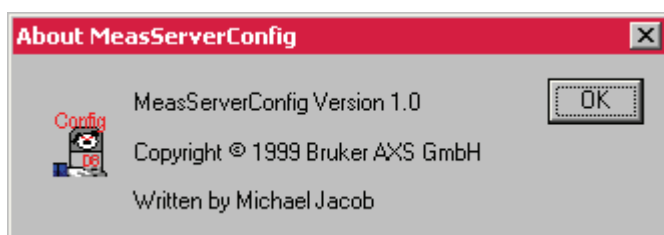


Рис. 3: Measurement Server: Configuration: About Box

Диалог показывает информацию о версии и авторском праве программы Measurement Server Configuration.

Password Dialog (пароль)



Рис. 4: Password

Программа Measurement Server Configuration изменяет настройки программы DIFFRACplus, поэтому перед использованием программы следует ввести пароль. Пароль можно изменить в программе конфигурации DIFFRACplus.

3 Командный язык программы DIFFRAC^{plus}

Руководство

Обзор

Измерительным модулем DIFFRAC^{plus} можно управлять другими программами. Кроме того процессом измерения может контролироваться т.н. скриптами - небольшими программами, написанными на скриптовом языке. Встроенный в DIFFRAC^{plus} язык использует протокол OLE Automation, и небольшие программы, написанные на языке, совместимом с скриптовым языком ActiveX. Все программы, совместимые с протоколом имеют доступ к соответствующим объектам, методам и их свойствам. В данный момент список программ включает Microsoft Office, Visual Basic, Delphi и др.

Скриптовый язык ActiveX-Scripting является стандартным пакетом Microsoft, реализующим интерфейс расширенного доступа к программам (OLE-Automation servers). В данный момент, на рынке представлено несколько языков, поддерживающих протокол ActiveX:

- Microsoft Visual Basic Scripting Edition. This is the language used in the examples
- Microsoft JScript
- ActivePython (<http://www.activestate.com/Products/ActivePython>)
- ActivePerl (<http://www.activestate.com/Products/ActivePerl>)
- а также другие совместимые языки написания скриптов

DIFFRAC^{plus} использует два сервера технологии OLE-Automation: MeasHost.dll и RawFile.dll. MeasHost.dll содержит информацию для управления прибором и выполнения измерений. RawFile.dll предоставляет объекты для чтения, записи и управления файлами DIFFRAC^{plus} RAW и DQL.

Процедура измерения

Измерения могут выполняться двумя способами:

- Пакетные измерения
- "Быстрые" измерения

Пакетный режим измерений использует очередь измерений сервера с учетом определенного приоритета. В пакетном режиме задаются все параметры необходимые для проведения измерения: Ш название файла параметров, raw - файла и т.д. Если пакету измерений поставлен в соответствие определенный скрипт (набор команд), он будет выполняться сразу же после запуска измерений. После завершения выполнения скрипта, измерение считается завершенным и система запускает к следующий пакет измерений.

"Быстрые" измерения выполняются независимо от пакетных. Для этого предусмотрен специальный объект "Immediate Job", который указывает серверу на выполнение быстрого измерения и необходимость остановить остальные измерения.

После запуска процедуры измерения измерительный сервер считывает параметры объекта "Script" и использует его значение в качестве названия файла для загрузки программы написанной на языке совместимом с технологией ActiveX-Scripting. При загрузке набора команд система инициализирует два основных объекта:

Diffractionmeter - определяет дифрактометр, на котором выполняются измерения. Объект является используемым по умолчанию, поэтому при обращении к нему название можно опустить, т.е. использовать сокращенную форму записи Measurement.Measure вместо Diffractionmeter.Measurement.Measure.

ActiveJob характеризует параметры пакета измерений.

Запуск набора команд пользователя

В качестве примера приводится программа, которая выводит короткое сообщения и закрывается.

Пример:

```
MsgBox "Hello DIFFRAC plus World!"
```

При помощи текстового редактора (напр. Notepad) создайте текстовый файл "test.vbs", который содержит приведенную выше строку. Затем при помощи XRD Commander создайте пакет измерений, использующий скрипт test.vbs. После запуска пакета на экране появится диалоговое окно с надписью "Hello DIFFRAC plus World!", после чего выполнение будет завершено.

Запуск измерения

Второй пример описывает быстрое сканирование, поиск максимума сканирования и выводит значение максимума на экран.

Пример:

```
' Release the current range (of a prior measurement)
Measurement.ActiveRange = Nothing
' Wait until the measurement is ready
Measurement.Wait = True
' Count data overwrite the existing data
Measurement.Mode = mhOverwrite
' Use detector 1 with its current settings Measurement.UsedDetectors =
"Detector 1"
' Perform a locked coupled stepscan from 26 to 27 deg Measurement.Measure
"Locked Coupled", True, 26, 27, 0.01, 0.2 MaxCounts =
Measurement.ActiveRange.Maximum()
MaxStep = Measurement.ActiveRange.MaximumStep()
MaxAngle = Measurement.ActiveRange.Position(MaxStep)
MsgBox "The maximum of " & MaxCounts & " counts is at " & MaxAngle
```

При помощи текстового редактора создайте файл test2.vbs с текстом примера. Используйте XRD Commander для запуска скрипта. Измерение будет проводиться с текущими установками дифрактометра. Результатом выполнения будет поиск максимума сканирования и вывод данного значения в программе Microsoft Excel

Пример:

```
' Release the current range (of a prior measurement)
Measurement.ActiveRange = Nothing
' Wait until the measurement is ready
Measurement.Wait = True
' Use detector 1 with its current settings Measurement.UsedDetectors =
"Detector 1"
' Perform a locked coupled stepscan from 26 to 27 deg Measurement.Measure
"Locked Coupled", True, 26, 27, 0.01, 0.1 ' Connect to Microsoft Excel
```

```
Set Excel = CreateObject("Excel.Application")
' Create a new workbook
Set Workbook = Excel.Workbooks.Add
' Get the active sheet
Set Sheet = Workbook.ActiveSheet
' Get all measured counts
Counts = Measurement.ActiveRange.Counts
' Write the counts into the sheet
For i = LBound(Counts) To UBound(Counts)
    Sheet.Cells(i - LBound(Counts) + 1, 1) =
Measurement.ActiveRange.Position(i - LBound(Counts))
    Sheet.Cells(i - LBound(Counts) + 1, 2) = Counts(i)
Next
' Create a new chart
Set Chart = Workbook.Charts.Add
Chart.ChartType = 75 ' = xlXYScatterLinesNoMarkers
Chart.SetSourceData Sheet.Range("A1:B101"), 2 ' = xlColumns
' Save the workbook to the disk
Workbook.SaveAs "c:\temp\test3.xls"
' Free objects
Set Sheet = Nothing
Workbook.Close
Set Workbook = Nothing
Set Excel = Nothing
```

Сохраните пример в файле test3.vbs и запустите его как показано выше. Создайте книгу в программе Excel и установите значения счетчиков в столбце таблицы. Будет создана диаграмма, книга сохранится в файле c:\temp\test3.xls. После работы скрипта можно открыть файл и просмотреть результат.

Reference

Объекты, используемые модулем MeasHost.dll

MeasHost.dll является внутренним процессом сервера ActiveX (как динамически подключаемая библиотека, которая содержит объекты COM). MeasHost содержит один объект, который может создаваться вне модуля: Diffractometer. Для его создания используйте строку - программный идентификатор (ProgID) "MeasHost.Diffractometer". Данный объект характеризует дифрактометр, управляемый локальным или удаленным компьютером.

Объект Diffractometer

Объект diffractometer является главным в объектной иерархии программы DIFFRAC^{plus}. Он содержит ссылки на все остальные объекты, как Drives (приводы), Generator (генератор) и т.д. Изначально объект не подключен к измерительному серверу - для подключения используется метод connect.

Если объект diffractometer больше не используется, его следует закрыть методом Close для освобождения памяти. Если объект создается внутри измерительного скрипта в программе XRD Commander, объект diffractometer автоматически подключается к физическому дифрактометру и его название можно опустить.

Метод Connect(Address As String, Optional UseProxy)

Метод осуществляет подключение к измерительному серверу посредством протокола TCP/IP. Параметр Address определяет адрес дифрактометра в форме <diffractometer name>!<computer name>. Для дифрактометра, использующегося по умолчанию название системы можно опустить. Пустая строка определяет дифрактометр по умолчанию, подключенный к локальному компьютеру.

Параметр UseProxy принимает значения true/false. При использовании прокси-сервера, установите его в true .

Функция Execute(Command As String) As String

Посылает командную строку измерительному серверу и принимает значение отклика.

Функция DirectCommand(Command As String, Optional Target) As String

Посылает командную строку напрямую на контроллер дифрактометра, FDC или TC и принимает значение отклика. Возможные значения параметра Target:

- mhDiffractometer = 0
- mhFDC = 1
- mhTC = 2
- mhGenmark = 3

Значением по умолчанию является is mhDiffractometer. За подробным списком используемых команд обратитесь к соответствующему разделу руководства пользователя(D8, D5005 manual и т.д.).

Пример:

```
AV = DirectCommand("AV", mhDiffractometer)
```

Метод Close

Разрывает подключение к дифрактометру.

Функция Run(CommandLine As String, Optional Wait) As Long

Запускает выполнение внешней программы/команды из командной строки. Поиск программы производится в каталоге DIFFRAC^{plus} и в соответствии со значением переменной PATH. Если параметр Wait = true, скрипт подождет окончания выполнения программы (значение по умолчанию). В качестве значения возвращается код завершения программы. Командная строка должна содержать завершенную строку (закljučается в кавычки).

Пример:

```
ExitCode = d.Run("notepad c:\config.sys", false)
```

Метод Sleep(Milliseconds As Long)

Задержка выполнения скрипта на заданное количество миллисекунд.

Метод Refresh()

Метод нельзя вызвать внутри измерительного скрипта, работающего в XRD Commander. Он используется для обновления состояния измерительного сервера. События сервера изменятся, если через сетевое соединение поступит новая информация. Если объекты используются автономно, метод следует вызывать каждые несколько секунд.

Параметр Name As String

Параметр возвращает название дифрактометра, определенное программой конфигурации Measurement Server Configuration program.

Параметр Host As String

Возвращает название хоста компьютера на котором запущен измерительный сервер подключенного дифрактометра.

Параметр Connected As Boolean

Возвращает значение true, если объект подключен к измерительному серверу.

DataPath As String

Возвращает пути файла параметров и RAW-файла, определенных в Measurement Server Configuration. Строка не содержит завершающей обратной косой черты: "c:\diffdat1".

Параметр SystemPath As String

Параметр хранит путь программы DIFFRAC^{plus}, где хранятся все исполняемые файлы в соответствии с параметрами Measurement Server Configuration. Строка не содержит завершающей обратной косой черты: "c:\diffplus".

Параметр Configuration(Section As String, Value As String) As String

Используется для доступа к файлу конфигурации дифрактометра. Параметры Section и Value определяют, соответственно, раздел и его значение. Значения можно как прочитать, так и переписать. Для получения более подробной информации см. раздел, описывающий формат файла конфигурации.

Параметр Jobs As Jobs

Только для чтения. Возвращает ссылку на объект Jobs.

Параметр Measurement As Measurement

Только для чтения. Возвращает ссылку на объект Measurement

Параметры HasXXX

Используются для получения информации о наличии различных компонентов дифрактометра.

Пример:

HasGenerator = true, если дифрактометр оборудован соответствующим устройством с функцией удаленного управления. Если значение = false, доступ к компоненту запрещен.

XXX соответствует названию компонента:

HasGenerator	Генератор
HasTubeWindow	Окно трубки
HasDetectorSlit	Щель детектора
HasRotation	Устройство вращения пробы
HasDrives	Приводы
HasDetectors	Детекторы
HasSampleChanger	Устройство смены проб
HasTemperatureStage	Температурная камера
HasPSD	Позиционно-чувствительный детектор
HasAbsorber	Абсорбер

Параметры XXX

Данные параметры возвращают ссылки на определенные компоненты дифрактометра. Например, параметр Generator возвращает ссылку на объект Generator дифрактометра. См. описание параметров HasXXX .

Событие CountsChanged(Counter As Long, Counts As Variant)

Данное событие характеризует получение нового значения в процессе измерения. Параметр counter определяет, какой детектор получил новое значение:

rawDetector1Discriminator1 = 0	Значения для детектора 1, дискриминатора 1
rawDetector1Discriminator2 = 1	
rawDetector1Digital = 2	Значения с цифрового входа детектора 1
rawDetector2Discriminator1 = 3	
rawDetector2Discriminator2 = 4	
rawDetector2Digital = 5	
rawDetector3Discriminator1 = 6	
rawDetector3Discriminator2 = 7	
rawDetector3Digital = 8	
rawDetector4Discriminator1 = 9	
rawDetector4Discriminator2 = 10	
rawDetector4Digital = 11	
rawPSD = 12	Значения позиционно-чувствительного детектора

Параметр Counts представляет собой массив чисел с плавающей точкой, характеризующих новые значения. Нижний предел массива указывает, какие значения лежат в определенном диапазоне - т.е. нижняя границ массива является смещением для полученных значений.

Событие MeasurementChanged(ScantypeChanged As Bool)

Событие характеризует изменение значения объекта measurement . Если ScantypeChanged = true, следовательно запущено новое измерение.

Событие DriveChanged(Drive As String, Position As Double, Status As Long)

Событие характеризует изменение положения или состояния привода. Position и Status определяют новые значения привода. См. описание приводов.

Событие DetectorChanged(Name As String)

Событие характеризует изменение настроек детектора с названием Name.

Событие DetectorSlitChanged

Появляется при открытии или закрытии щели или изменении состояния абсорбера.

Событие GeneratorChanged

Появляется при изменении напряжения или тока рентгеновского генератора.

Событие JobChanged(ID As Long, Status As Long)

Появляется при изменении параметров пакета измерений, а также создании или удалении пакета.

Событие TubeWindowChanged

Появляется при открытии и закрытии окна трубки.

Событие EncoderChanged(Drive As String, EncoderPos As Variant)

Появляется при приеме новых данных кодирующего устройства привода Drive в процессе измерения. EncoderPos содержит массив дробных значений новых положений кодирующего устройства. Нижняя граница массива соответствует смещению значений положений.

Событие MeasurementStatusChanged(Status As Long)

Появляется при изменении состояния измерения, см. MeasurementStatus в описании объекта Measurement для информации по параметру Status.

Событие RotationChanged

Характеризует изменение скорости вращения.

Событие TemperatureStageChanged

Появляется при изменении температуры в температурной камере.

Событие SamplechangerChanged

Появляется при изменении состояния устройства пробозагрузки.

Событие LogChanged(Log As String, Message As String)

Характеризует появление нового сообщения, добавленного в журнал событий.

Событие LogCleared(Log As String)

Появляется при очистке журнала событий.

Событие AbsorberChanged

Появляется при изменении состояния абсорбера.

Событие OpticChanged

Появляется при изменении состояния в каком-либо оптическом компоненте.

Событие ActiveJobChanged

Появляется при изменении параметра ActiveJob объекта Jobs .

Объект Measurement

Объект используется для управления измерением и другими параметрами дифрактометра.

Метод WaitReady

Метод следует вызвать для того, чтобы дождаться, пока параметры дифрактометра не достигнут нужного значения. Если Measurement.Wait = true, метод WaitReady блокируется, пока дифрактометр не достигнет состояния готовности или до появления ошибки. Максимальное время ожидания задается параметром Measurement.TimeOut. Если If Measurement.Wait = false, метод немедленно вызывается, а окончание его работы характеризуется событием (MeasurementStatusChanged). Метод можно также вызвать проверкой состояния параметра Measurement.MeasurementStatus, однако в данном случае присутствует задержка (напр. 250 мс) во избежание перегрузки сервера.

Пример:

```
Generator.Voltage = 40 ' Set generator voltage
Generator.Current = 30 ' Set generator current
Drives("2Theta").Position = 20 ' Move 2Theta
Measurement.Wait = True ' Wait synchronously
Measurement.WaitReady ' Wait for device ready
```

Метод RaiseTaskError

Если измерение или задача waitready работают в асинхронном режиме (т. е. Measurement.Wait = false), ошибка выполнения хранится внутри системы. При помощи данного метода можно представить ошибку в формате OLE error. Информация об ошибке задается как если бы Measurement.Measure или Measurement.WaitReady запускались с параметром Measurement.Wait = true.

Метод Measure(ScanType As String, StepScan As Bool, Start As Double, Stop As Double, Increment As Double, Time As Double)

Метод служит для запуска измерения. StepScan определяет режим сканирования. StepScan = true означает, что измерение проводится с остановленными приводами, false - с активными приводами. Обратите внимание, что некоторые типы сканирования не поддерживают непрерывный режим: PSD Fix Scan, Discriminator Scan, Highvoltage Scan и General Scan. Тип сканирования задается одной из следующих строк:

- Любое название привода, как Chi, Phi, .. кроме переменных щелей
- Locked Coupled (Theta = 2Theta / 2)
- Unlocked Coupled (Theta = 2Theta / 2, scanaxis is 2Theta)
- Unlocked Coupled HRXRD (Theta = 2Theta / 2, scanaxis is Theta)
- Rocking Curve (Theta only)
- PSD Fix Scan
- Detector Scan (2Theta only)
- Discriminator Scan
- Highvoltage Scan
- General Scan

Start и Stop определяет диапазон сканирования для оси сканирования. Increment определяет шаг сканирования. Длительность измерения за шаг определяется параметром Time. Measurement.Wait задает синхронный или асинхронный режим измерения (см. описание WaitReady). Значения, полученные в результате измерения сохраняются в Measurement.ActiveRange.

Метод Halt

Останавливает текущее измерение.

Метод LogMsg(Log As String, Message As String)

Добавляет сообщение в журнал, который должен быть создан до вызова данного метода. Журналы подразделяются на три основных типа:

"Trace"	Сообщения, которые добавляются в этот журнал отображаются в окне программы XRD Commander и используются в качестве диагностических для контроля работы скрипта.
"Error"	Сообщения, которые появляются в результате остановки измерения из-за какой-либо ошибки.
"Service"	Сообщения, описывающие важные сервисные изменения.

Пример:

```
Measurement.LogMsg "Trace", "Measurement position reached"
```

Метод ClearLog(Log As String)

Метод удаляет все записи журнала.

Метод ClearValuesAndPositions()

Очищает измеренные значения и положения кодирующего устройства. Метод следует вызывать всегда перед началом нового измерения. Новые данные измерения обычно добавляются к уже существующим.

Параметр Diffractometer As Diffractometer

Содержит обратную ссылку на родительский объект diffractometer .

Параметр ScanType As String

(Только для чтения) Режим сканирования текущего измерения, например "Locked Coupled"

Параметр Start As Double

(Только для чтения) Начальное значение сканирования.

Параметр Stop As Double

(Только для чтения) Конечное значение процедуры сканирования.

Параметр Increment As Double

(Только для чтения) Шаг сканирования.

Параметр Steps As Long

(Только для чтения) Количество шагов текущего сканирования.

Параметр StepScan As Bool

(Только для чтения) = true, если текущее измерение является дискретным сканированием.

Параметр Start2 As Double

(Только для чтения) Начальное значение для сопряженной оси текущего сканирования.

Параметр Time As Double

(Только для чтения) Значение длительности измерения на один шаг.

Параметр CoupleRatio As Double

Коэффициент сопряжения между сканирующей и сопряженной осью.

Параметр UsedDetectors As String

Определяет детекторы, которые используются для измерения. Строка содержит список детекторов, разделенных запятыми.

Пример:

```
Measurement.UsedDetectors = "Detector 1,Detector 2"
```

Параметр UsedEncoders As String

Определяет для каких приводов сохраняются параметры кодирующего устройства. Строка содержит список приводов, разделенных запятыми.

Параметр HasScanType(ScanType As String) As Bool

Предназначен для проверки наличия конкретного режима сканирования.

Пример:

```
If Not Measurement.HasScanType("phi") Then MsgBox("Phi scan not possible!")
```

Параметр ScanTypes As String

Возвращает список всех разделенных запятыми типов сканирования доступных для подключенного дифрактометра.

Параметр ActiveRange As Range

Все данные и настройки текущего измерения сохраняются в объекте-контейнере, доступ к которому можно получить при помощи параметра ActiveRange. Range соответствует объекту-контейнеру, который можно заполнить и обновить, или создать новый.

Параметр GeneralScanDrives As String

Параметр используется для чтения/записи параметров приводов, используемых для основного режима сканирования и содержит список приводов, разделенных запятыми. Значения положений всех приводов, перечисленных в списке берутся из параметра ScanPositions, гониометр позиционируется в соответствии с этими значениями.

Пример:

```
Measurement.GeneralScanDrives = "Theta, 2Theta"
```

Параметр Wait As Bool

Управляет поведением методов WaitReady и Measure. Если Wait = true, WaitReady и Measure блокируются до завершения задачи или появления ошибки. Если Wait = false, методы запускаются немедленно и для использования какого-либо метода следует дожидаться завершения задачи.

Параметр ScanDriveAs String

Только для чтения. Содержит название первичного сканирующего привода (на диаграмме соответствует оси x).

Параметр ScanDrive2 As String

Только для чтения. Содержит название вторичного (сопряженного) сканирующего привода. Если втоичный привод не используется, ScanDrive2 будет пустым.

Параметр TimeOut As Long

TimeOut управляет временем ожидания до достижения параметров дифрактометра заданных значений. После <TimeOut> секунд, текущее измерение или метод waitready будут остановлены, если гониометр не достигнет нужных параметров.

Параметр MeasurementStatus As Long

Только для чтения. Содержит текущее состояние методов waitready или measurement:

mhMeasurementReady = 0	Задача завершена или не запущена
mhMeasurementActive = 1	Задача активна
mhMeasurementError = 2	Задача остановлена из-за аппаратной ошибки
mhMeasurementAborted = 3	Задача остановлена методом Halt

Параметр Alarms As String

(Только для чтения) Список ожидаемых аварийных состояний, разделенных запятыми.

Параметр Warnings As String

(Только для чтения) Список предупреждений, разделенных запятыми .

Параметр Errors As String

(Только для чтения) Список ошибок, разделенных запятыми.

LogCount(Log As String) As Long

LogCount возвращает количество записей, сохраненных в файл журнала Log.

Параметр LogEntry(Log As String, Index As Long) As String

LogEntry возвращает строку с номером Index файла Log. Отсчет начинается с 0.

Параметр Logs As String

Возвращает список, разделенный запятыми всех активных log-файлов.

Параметр ScanDrivePosition(Position As Double) As Double

Возвращает положение сканирующего привода, когда сканирование находится в положении Position.

Параметр CoupledDrivePosition(Position As Double) As Double

Возвращает положение сопряженного привода, когда сканирование находится в положении Position.

Параметр ScanDrivePositionByStep(Step As Long) As Double

Возвращает положение сканирующего привода для шага под номером Step.

Параметр CoupledDrivePositionByStep(Step As Long) As Double

Возвращает положение сопряженного привода для шага под номером Step.

Параметр AutoSave As Long

Определяет количество после которого текущее измерение будет автоматически сохранено, если название файла поставлено в соответствие файлу gaw активной области. Если параметр установлен в 0, автосохранение выключено.

Параметр CompletedSteps As Long

Только для чтения. Определяет количество выполненных шагов текущего измерения.

Параметр Объект Jobs

Содержит список пакетных измерений, сохраненных на измерительном сервере. Каждому пакету присваивается уникальный идентификатор, начиная с 1. Список содержит все пакеты сервера, запущенные пакеты и пакеты, запущенные на удаленных компьютерах. Пакет с идентификатором существует всегда и соответствует "быстрому" измерению. Доступ к данному пакету осуществляется при помощи параметра с таким же названием. Его назначением является выполнение измерения без создания и настройки пакета измерений - например для регулировки системы.

Функция CreateJob() As Long

Создает новый объект job и возвращает присвоенный ему идентификатор. Новый пакет не активен и находится в режиме ожидания.

Функция CreateJobs(Count As Long) As Variant

Создает заданное количество новых объектов job и возвращает целочисленный массив идентификаторов. Новые пакеты не активны и находятся в режиме ожидания.

Метод RemoveJob(ID As Long)

Удаляет пакет с заданным идентификатором ID. Активный пакет удалить нельзя.

RemoveJobs(IDs As Variant)

Удаляет пакет с заданным идентификатором id. IDs - целочисленный массив идентификаторов.

Метод ScheduleJob(ID As Long)

Помещает пакет с заданным id в режим ожидания. Пакет становится активным, как только оказывается наверху очереди.

Метод ScheduleJobs(IDs As Variant)

Подготавливает к измерению все пакеты с заданными идентификаторами. IDs - целочисленный массив идентификаторов.

Метод SuspendJob(ID As Long)

Приостанавливает выполнение пакета с идентификатором id.

Метод SuspendJobs(IDs As Variant)

Приостанавливает выполнение пакетов в соответствии с массивом идентификаторов IDs .

Параметр Diffractometer As Diffractometer

Содержит обратную ссылку на родительский объект diffractometer.

Параметр Count As Long

Возвращает количество пакетов, сохраненных на измерительном сервере.

Параметр Item(ID As Long) As Job

Только для чтения. Предоставляет доступ к пакету с заданным ID.

Параметр IDs As Variant

IDs возвращает целочисленный массив идентификаторов всех сохраненных пакетов.

Параметр HasJob(ID As Long) As Bool

Проверяет наличие объекта job с заданным идентификатором.

Параметр HasActiveJob As Bool

Принимает значение true, если пакет запущен. Если параметр = false, ActiveJob = 0.

Параметр ActiveJob As Job

Возвращает текущий запущенный пакет (объект типа job) или 0, если ни один пакет не запущен.

Параметр ImmediateJob As Job

Предоставляет доступ к объекту immediate job ("быстрое измерение").

Объект Job

Предоставляет доступ к определенному пакету в очереди измерений.

Метод Activate

Применение метода разрешено только к "быстрому" измерению (id = 0). Позволяет запустить "быстрое" измерение, если ни один пакет не запущен.

Метод Stop

Останавливает выполнение пакета. Если в очереди измерений есть пакеты в режиме ожидания, будет запущен следующий пакет.

Метод SetParameters(Names As Variant, Values As Variant)

Используется для определения нескольких параметров одновременно. Names и Values представляют строковые массивы, содержащие названия и значения требуемых параметров. Количество строковых переменных должно совпадать.

Параметр Diffractometer As Diffractometer

Содержит обратную ссылку на родительский объект diffractometer.

ID As Long

Только для чтения. Возвращает идентификатор id пакета. "быстрому" измерению всегда присваивается идентификатор id=0.

Параметр Status As Long

Только для чтения. Параметр характеризует текущее состояние пакета:

mhJobDeleted = 0	Пакет удален, ссылка на пакет существует
mhJobFinished = 1	Активный пакет завершен или отстановлен
mhJobSuspended = 2	Измерение пакета отменено
mhJobWaiting = 3	Пакет находится в режиме ожидания
mhJobTransferring = 4	Проба перемещается с внешней конвейерной ленты

mhJobPreloading = 5	Проба подготавливается для измерения
mhJobPreloaded = 6	Проба подготовлена для измерения
mhJobUnloading = 7	Проба выгружена из гониометра
mhJobLoading = 8	Проба загружена в гониометр
mhJobActive = 9	Пакет активен. Только один пакет имеет данное состояние

Параметр **Parameter(Name As String) As String**

При помощи данного параметра определяются свойства пакета. Все значения имеют название и строковое значение. Параметры, которые еще не созданы не имеют конкретного значения (пустая строка). Параметр можно удалить присвоив ему пустую строку.

Точно также параметр можно создать, присвоив ему определенное значение. Некоторые параметры имеют специализированные значения, которые нельзя использовать для других целей:

"Script"	Полный путь к скрипту, который следует запустить с пакетом
"RawFile"	Полный путь к raw - файлу
"ParameterFile"	Полный путь к файлу параметров
"SampleID"	Идентификатор пробы конкретного пакета
"TimeScale"	Коэффициент масштабирования времени всех измерений пакета
"Mode"	Режим измерения
"UTF"	Полный путь к файлу Usertask
"Priority"	Приоритет пакета - номер от 0 до 99. Пакеты с низким приоритетом измеряются после пакетов с высоким. Приоритет пакета по умолчанию = 99
"SCPos"	Положение устройства пробозагрузки для пакета. Если параметр имеет какое-либо значение, а дифрактометр оборудован пробозагрузчиком, проба будет загружена до начала выполнения пакета. В режиме "быстрого" измерения проба автоматически не загружается, для загрузки воспользуйтесь параметрами объекта sample changer
"TransferPos"	Положение конвейера для пакета, например "Z1", используется только для пакетов AXSCOM
"ErrorMessage"	Содержит сообщение об ошибке, если пакет не был завершен в рабочем режиме

Параметр **ParameterNames As String**

Возвращает массив всех названий параметров, назначенных пакету.

Параметр **ParameterValues As String**

Возвращает массив всех значений параметров, назначенных пакету в порядке, определенном параметром ParameterNames.

Параметр **Task As Long**

Определяет назначение пакета измерений:

mhJobMagazineSample = 0	Нормальное измерение
mhJobTransferToMagazine = 1	Перемещение пробы с конвейера в магазин проб

mhJobTransferToMagazineAndMeasure = 2	Transfer the sample from the conveyor, then measure it
mhJobTransferToConveyor = 3	Transfer the sample from the magazine to the conveyor

Параметр Result As Long

Только для чтения. Содержит код завершения пакета после его окончания.

Значения параметра:

mhJobOk = 0	Пакет завершен в нормальном режиме
mhJobAbortedByUser = 1	Пакет отменен пользователем
mhJobAbortedByHost = 2	Пакет отменен хостом AXSCOM
mhJobNoSample = 3	Пакет отменен т.к. проба не найдена
mhJobError = 4	Пакет отменен из-за другой ошибки

Параметр AXSCOMID As String

Только для чтения. Характеризует идентификатор AXSCOM, который используется для обмена данными с хостом AXSCOM.

Объект Drives

Содержит параметры приводов дифрактометра. Доступ к конкретному приводу осуществляется посредством его названия и параметра Item property. Можно также перемещаться между приводами посредством цикла For..Each.

Пример:

```
For Each Drive In Drives
  MsgBox Drive.Name Next
```

Метод Halt

Немедленно останавливает перемещение всех приводов.

Метод Initialize

Используется для одновременного перемещения всех приводов в референсные положения.

Объект Diffractometer As Diffractometer

Содержит обратную ссылку на родительский объект diffractometer.

Параметр Count As Long

Только для чтения. Содержит количество приводов дифрактометра

Параметр Item(Name As String) As Drive

Используется для доступа к приводу с названием Name. Название может быть опущено.

Пример:

```
MsgBox Drives.Item("2Theta").Position MsgBox Drives("Theta").Position
```

Параметр HasDrive(Name As String) As Bool

Используется для определения, оборудован ли дифрактометр указанным приводом.

Объект Drive

Характеризует конкретный привод дифрактометра.

Метод Halt

Останавливает перемещение привода.

Метод Initialize

Выполняет перемещение привода в референсное положение.

Метод FollowUp(SampleLength As Double)

Устанавливает привод в режим переменной щели, который позволяет засвечивать определенную область пробы. Используется только с приводами расходящейся и противорассеивающей щели. Щели будут перемещаться вместе с theta относительно 2theta.

Метод Oscillate(Amplitude As Double, Speed As Double)

Используется для включения колебаний привода относительно текущего положения с заданной амплитудой в градусах или миллиметрах и заданной скоростью в градусах или миллиметрах в секунду.

Параметр Diffractometer As Diffractometer

Содержит обратную ссылку на родительский объект diffractometer.

Параметр Configuration(Value As String) As String

Предоставляет доступ к секции настроек компонентов дифрактометра. Параметр configuration объекта diffractometer используется для чтения/записи любого значения файла конфигурации.

Параметр Position As Double

Определяет текущее положение привода. При присвоении нового значения, привод переместится в заданное положение.

Параметр Status As Long

Только для чтения. Характеризует текущее значение привода. Возвращает битовую маску, равную сумме следующих значений:

mhRunning = 1	Бит установлен, если привод перемещается
mhCoarsePositionKnown = 2	Всегда установлен, если известно приблизительное положение привода
mhInitialized = 4	Установлен, если привод инициализирован
mhCoupled = 8	Установлен, если привод сопряжен с другим приводом
mhPresetted = 16	Установлен, если задано начальное положение привода
mhLimitSwitch = 32	Установлен, если сработал один из ограничительных переключателей
mhReady = 64	Установлен, если предыдущая операция завершена
mhError = 128	Устанавливается при ошибке
mhLowerLimit = 256	Сработал верхний или нижний ограничительный переключатель
mhUpperLimit = 512	

Параметр Name As String

Только для чтения. Возвращает название привода.

Параметр IsInitialized As Bool

Только для чтения. Принимает значение true, если привод инициализирован.

Параметр ReferencePosition As Double

Используется для получения/задания референсного положения привода. При установке нового референсного положения, оно также записывается в файл конфигурации. После установки привод следует инициализировать.

Параметр DrivePositions As Variant

Только для записи. Используется для установки положений сканирования при использовании основного сканирования. Представляет собой массив дробных чисел.

Пример:

```
Dim d(3)
d(0) = 10
d(1) = 12
d(2) = 13 Drives("2Theta").DrivePositions = d
```

Параметр Offset As Double

Используется для получения/задания смещения, используемого для всех операций с использованием drivepositions.

Параметр AlignedPosition As Double

AlignedPosition используется для сохранения положений приводов для дальнейшего использования. Значения доступны во время работы измерительного сервера.

Параметр LowerLimit As Double

Параметр UpperLimit As Double

Только для чтения. Параметры определяют верхний и нижний пределы привода в единицах привода.

Объект Detectors

Содержит все детекторы дифрактометра.

Параметр Diffractometer As Diffractometer

Содержит обратную ссылку на родительский объект diffractometer

Параметр Count As Long

Только для чтения. Характеризует номер детектора в списке (1-4)

Параметр Item(Name As String) As Detector

Используется для доступа к детектору с названием Name. Название детектора можно опустить.

Пример:

```
MsgBox Detectors.Item("Detector 1").HighVoltage MsgBox Detectors("Detector 2").HighVoltage
```

Параметр HasDetector(Name As String) As Bool

Используется для определения, оборудован ли дифрактометр данным детектором.

Объект Detector

Характеризует сцинтилляционный или пропорциональный счетчик, установленный на дифрактометр.

Метод SetDiscriminator1(LowerLevel As Double, WindowWidth As Double)

Устанавливает окно первого дискриминатора.

Метод GetDiscriminator1(LowerLevel As Double, WindowWidth As Double)

Служит для получения окна первого дискриминатора.

Метод SetDiscriminator2(LowerLevel As Double, WindowWidth As Double)

Устанавливает окно второго дискриминатора. Параметр актуален только для D8 и D4.

Метод GetDiscriminator2(LowerLevel As Double, WindowWidth As Double)

Служит для получения второго окна дискриминатора. Параметр актуален только для D8 и D4.

Diffractionmeter As Diffractionmeter

Содержит обратную ссылку на родительский объект diffractionmeter.

Параметр Configuration(Value As String) As String

Предоставляет доступ к секции настроек компонентов дифрактометра. Параметр configuration объекта diffractometer используется для чтения/записи любого значения файла конфигурации.

Название Name As String

Только для чтения. Возвращает название детектора.

Параметр HighVoltage As Double

Используется для управления высоким напряжением.

Параметр AmplifierGain As Double

Управляет значением коэффициентом усиления.

Параметр LineShiftCorrection As Long

Используется для управления коррекцией дрейфа. Возможные значения:

- mhLineshiftOff = 0
- mhLineshiftWeak = 1
- mhLineshiftStrong = 2

Параметр TopLevelDiscriminator As Bool

Определяет, идет ли накопление импульсов вне окна дискриминатора.

Параметр DeadTime As Double

Используется для корректировки мертвого времени.

Параметр PileUpTime As Double

Используется для корректировки времени накопления импульсов.

Параметр IntegratorTimeConstant As Double

Определяет время накопления для интегратора. Время накопления будет поделено на 10 равных промежутков, для которых накапливаются импульсы. Скорость счета определяется приблизительно как скользящее среднее 10 значений.

Параметр Rate(Counter As Long) As Double

Только для чтения. Используется для получения текущей скорости счета детектора. Параметр IntegrationTime определяет временной интервал, используемый для накопления импульсов.

Параметр UsedCounters As Long

Является битовой маской, которая управляет сохранением значений счетчика. Значение представляет собой сумму трех битов:

mhDiscriminator1 = 1 Сохраняются импульсы дискриминатора 1

mhDiscriminator2 = 2 Сохраняются импульсы дискриминатора 2

mhDigital = 4 Сохраняются импульсы входа TTL, верхнего уровня или импульсы накопления

Параметр AnalogType As String

Возвращает тип установленного аналогового детектора. К каждой интерфейсной плате детектора (DIB), можно прикрепить один аналоговый (сцинтилляционный или пропорциональный счетчик) и один цифровой (Kevex или Sol-X) детектор. Если ни один детектор не установлен, параметр вернет значение "None".

Параметр DigitalType As String

Возвращает тип установленного цифрового детектора. К каждой интерфейсной плате детектора (DIB), можно прикрепить один аналоговый (сцинтилляционный или пропорциональный счетчик) и один цифровой (Kevex или Sol-X) детектор. Если ни один детектор не установлен, параметр вернет значение "None".

Объект Generator

Характеризует рентгеновский генератор дифрактометра. Объект актуален, если дифрактометр оборудован генератором с функцией удаленного управления.

Объект Diffractometer As Diffractometer

Содержит обратную ссылку на родительский объект diffractometer.

Configuration(Value As String) As String

Предоставляет доступ к секции настроек компонентов дифрактометра. Параметр configuration объекта diffractometer используется для чтения/записи любого значения файла конфигурации.

Параметр Voltage As Double

Параметр используется для чтения/записи высокого напряжения генератора в kV.

Параметр Current As Double

Используется для чтения/записи тока генератора в mA.

Объект TubeWindow

Служит для управления окном трубки дифрактометра. Не все дифрактометры оборудованы окном с программным управлением.

Diffractometer As Diffractometer

Содержит обратную ссылку на родительский объект diffractometer.

Configuration(Value As String) As String

Предоставляет доступ к секции настроек компонентов дифрактометра. Параметр configuration объекта diffractometer используется для чтения/записи любого значения файла конфигурации.

Параметр Open As Bool

Управляет состоянием заслонки окна трубки - true - открыта, false-закрыта.

Объект DetectorSlit Object

Используется для управления устройством смены щели дифрактометра, если данное устройство установлено.

Параметр Diffractometer As Diffractometer

Содержит обратную ссылку на родительский объект diffractometer .

Параметр Configuration(Value As String) As String

Предоставляет доступ к секции настроек компонентов дифрактометра. Параметр configuration объекта diffractometer используется для чтения/записи любого значения файла конфигурации.

Параметр In As Bool

Управляет состоянием устройством смены щели. Если имеет значение true - щель находится на пути рентгеновского пучка.

Объект Absorber

Управляет моторизированными абсорберами двух типов:

- Двухпозиционный магнитный абсорбер
- Вращающийся четырехпозиционный абсорбер с шаговым двигателем

Типы определяются параметром NumPositions .

Параметр Diffractometer As Diffractometer

Содержит обратную ссылку на родительский объект diffractometer .

Параметр Configuration (Value As String) As String

Предоставляет доступ к секции настроек компонентов дифрактометра. Параметр configuration объекта diffractometer используется для чтения/записи любого значения файла конфигурации.

Параметр Position As Long

Используется для чтения/Записи текущего положения абсорбера use this property to set or get the current absorber position. The position is a whole number between zero and NumPositions - 1.

Параметр AutoAbsorber As Boolean

Управляет автоматическим режимом абсорбера (абсорбер открывается и закрывается в соответствии с измеренной интенсивностью).

Параметр NumPositions As Long

Только для чтения. Выводит количество положений абсорбера.

Параметр AbsorberFactor (Pos As Long) As Double

Только для чтения. Возвращает коэффициент поглощения для заданного положения абсорбера (см. описание устройства).

Объект Rotation

Характеризует устройство вращения пробы.

Параметр Diffractometer As Diffractometer

Содержит обратную ссылку на родительский объект diffractometer.

Параметр Speed As Double

Используется для управления скоростью вращения пробы. Для устройства вращения с синхронным двигателем любое значение больше 0 включает вращение, 0 - выключает. Для других устройств скорость задается в количестве оборотов в минуту (RPM).

Объект Samplechanger Object

Характеризует устройство смены проб дифрактометра, если установлено. Устройство смены проб также используется планировщиком пакетов измерения.

Метод Sub Halt

Немедленно останавливает устройство смены проб (пробозагрузчик).

Метод Sub Initialize

Используется для инициализации устройства.

Метод LoadSample(Position As String)

Загружает пробу из указанной позиции в дифрактометр.

Метод MoveSample(Position1 As String, Position2 As String)

Перемещает пробу из положения Position1 в положение Position2.

Функция GetNextPosition(Position As String) As String

Используется для получения следующего положения пробозагрузчика. Для двухкоординатного пробозагрузчика увеличивается значение первого столбца, затем строки: A8 -> A9 -> B1 -> B2.

Параметр Diffractometer As Diffractometer

Содержит обратную ссылку на родительский объект diffractometer.

Параметр Configuration(Value As String) As String

Предоставляет доступ к секции настроек компонентов дифрактометра. Параметр configuration объекта diffractometer используется для чтения/записи любого значения файла конфигурации.

Параметр Position As String

Определяет пробу, подготовленную для измерения. Если ни одна проба не находится в положении измерения, параметр = пустой строке. Задание параметру определенного значения загружает пробу в положение измерения.

Параметр IsInitialized As Bool

Пробозагрузчик инициализирован, если данный параметр = true.

Параметр Status As Long

Только для чтения. Возвращает битовую маску, равную сумме следующих значений:

mhSCRunning = 1	Прободержатель перемещается
mhSCSampleChangerEmpty = 2	В положение измерения проба не загружена
mhSCInitialized = 4	Пробозагрузчик инициализирован
mhSCNoSample = 8	В заданном положении проба не найдена
mhSCSampleLockOccupied = 16	Проба задевает переключатель
mhSCNoCupInSampleLock = 32	Прободержатель в устройстве загрузки не найден
mhSCSampleInMeasurementPosition = 64	Проба находится в положении измерения
mhSCError = 128	Ошибка

Параметр IsValidPosition(Position As String)**Параметр IsReservedPosition(Position As String)**

Возвращают значение true, когда заданное положение допустимо и зарезервировано для использования программным обеспечением.

Объект PSD

Характеризует позиционно-чувствительный детектор дифрактометра.

Параметр Diffractometer As Diffractometer

Содержит обратную ссылку на родительский объект diffractometer.

Параметр FirstUsedChannel As Long

Служит для управления первым каналом, который используется для фиксированного измерения детектором. В основном используется программой калибровки детектора.

Параметр TemperatureStage

Используется для управления температурной камерой дифрактометра.

Метод SetTemperature(Temperature As Double, SlewRate As Double)

Устанавливает новую температуру камеры в градусах Кельвина. SlewRate определяет температурный градиент в К/сек.

Метод RampTemperature(Temperature As Double, SlewRate As Double)

Устанавливает новую температуру камеры в градусах Кельвина. SlewRate определяет температурный градиент в К/сек.

Объект Diffractometer As Diffractometer

Содержит обратную ссылку на родительский объект diffractometer.

Объект Temperature As Double

Только для чтения. Характеризует текущую температуру температурной камеры.

Параметр SlewRate As Double

Только для чтения. Характеризует температурный градиент, который наиболее часто используется в процессе измерений.

Объект Camera

Характеризует Web-камеру, подключенную к шине USB управляющего дифрактометром компьютера. В случае D4, камера находится внутри дифрактометра и направлена на пробу в положении измерения.

Параметр Diffractometer As Diffractometer

Содержит обратную ссылку на родительский объект diffractometer.

Параметр ActiveCamera As Long

Используется для выбора активной камеры.

Параметр JPEGPicture As Variant

При обращении к данному параметру возвращает изображение в формате JPEG. Файл представлен в виде битового массива.

Параметр CamerasCount As Long

Только для чтения. Возвращает количество подключенных камер.

Объект Optics

Содержит список всех компонентов первичной и вторичной оптики дифрактометра.

Объект Diffractometer As Diffractometer

Содержит обратную ссылку на родительский объект diffractometer.

Параметр Count As Long

Только для чтения. Содержит количество оптических компонентов в списке.

Параметр Item(Name As Variant) As Optic

Используется для доступа к компоненту с названием Name (может быть номером). Название можно опустить.

Параметр HasOptic(Name As String) As Bool

Используется для определения, оборудован ли дифрактометр оптикой с названием Name.

Параметр PrimaryOptic As Boolean

Только для чтения. Возвращает true, если объект обращается к первичной оптике и false - ко вторичной.

Параметр SelectedOptic As Variant

Используется для перемещения оптики на путь рентгеновского пучка. Оптика может характеризоваться названием, либо номером.

Объект Optic

Характеризует конкретный компонент первичной или вторичной оптики.

Объект Diffractometer As Diffractometer

Содержит обратную ссылку на родительский объект diffractometer.

Параметр Configuration(Value As String) As String

Предоставляет доступ к секции настроек компонентов дифрактометра. Параметр configuration объекта diffractometer используется для чтения/записи любого значения файла конфигурации.

Параметр Name As String

Только для чтения. Возвращает название компонента.

Параметр BeamPath As Long

Используется для чтения/установки состояния компонента относительно пути рентгеновского пучка.

Параметр BeamPathCount As Long

Только для чтения. Возвращает количество ветвей оптического модуля.

Параметр BeamPathName(Index As Long) As String

Только для чтения. Возвращает название ветви с заданным номером.

Параметр PrimaryOptic As Boolean

Только для чтения. Возвращает true для первичной и false для вторичной оптики.

Параметр Selected As Boolean

Только для чтения. Возвращает true, если оптика находится на пути пучка.

Параметр OffsetDrive As String

Только для чтения. Возвращает название привода, смещенного, относительно различных ветвей оптического модуля.

Объекты, которые используются библиотекой RawFile.dll

Предназначены для управления RAW - и DQL - файлами DIFFRAC^{plus}. Только объект RawFile можно создать непосредственно.

Пример:

```
Set RFile = CreateObject("RawFile.RawFile") RFile.Open("c:  
\diffdat1\test.raw")
```

Объект RawFile

Характеризует структуру иерархии объектов библиотеки DLL. Соответствующий объект на диске является файлом DIFFRAC^{plus} в формате raw или dqi. raw-файл содержит 0 или более записей, каждая из которых характеризуется объектом Range.

Метод Open(Filename As String)

Используется для чтения файла с диска в объект. Данные объекта перед чтением уничтожаются.

Метод Save

Сохраняет файл с названием, хранящимся в параметре Filename.

Метод SaveAs(Filename As string)

Сохраняет новый файл с названием, заданным параметром Filename.

Функция Add As Range

Добавляет в файл новую запись и возвращает объект Range.

Метод Remove(RangeNo As Long)

Удаляет из файла заданную запись.

Метод Clear

Удаляет все записи из файла.

Метод Close

Закрывает файл. После закрытия к файлу обращаться нельзя.

Метод Recover(Filename As String)

Вставляет файл raw с названием `Filename` в текущий файл, если raw файл

- Существует и имеет соответствующий формат
- Его параметр `MeasurementStatus = Finished`, т.е. измерение закончено

Записи файла вставляются в объект `RawFile`. Импульсы и данные кодирующего устройства будут скопированы из файла. После этого измерение можно продолжить с места остановки.

Параметр Filename As string

`Filename` содержит название файла, используемое методом `Save`. Значение параметра устанавливается методом `Open`.

Параметр FileFormat As Long

Служит для установки требуемого формата файла для сохранения методами `Save` и `SaveAs`.

<code>rawFileFormatATV1 = 1</code>	Diffraction AT Version 1
<code>rawFileFormatAT = 2</code>	Diffraction AT Version 2
<code>rawFileFormatV3 = 3</code>	DIFFRAC ^{plus} V3.x RAW
<code>rawFileFormatV4 = 4</code>	DIFFRAC ^{plus} V4 или более поздняя, RAW и DQL файл, двоичный
<code>rawFileFormatV4Text = 5</code>	DIFFRAC ^{plus} V4 или более поздняя, RAW и DQL файл, текстовый
<code>rawFileFormatDQLFileV3 = 6</code>	DIFFRAC ^{plus} V3.x DQL
<code>rawFileFormatHRDFileV3 = 7</code>	DIFFRAC ^{plus} V3.x HRD
<code>rawFileFormatDIFFFileV3 = 8</code>	DIFFRAC ^{plus} V3.x DIF

Параметр Count As Long

Только для чтения. Содержит текущее количество записей в объекте.

Параметр Item(RangeNo As Long) As Range

Используется для доступа к записи с заданным номером. Данный параметр является значением по умолчанию для объекта `RawFile`, и может быть опущен. Нумерация начинается с единицы.

Параметр Headers As Headers

Только для чтения. Возвращает объект, который содержит все заголовки объекта `RawFile` кроме заголовка файла и заголовков переменной длины - они хранятся в `VarInfos`.

Параметр FileHeader As Header

Только для чтения. Возвращает объект заголовка файла raw.

Параметр VarInfos As Headers

Только для чтения. Возвращает объект Headers со всеми заголовками переменной длины объекта RawFile.

Объект Range

Определяет запись, соответствующую одному измерению в файле. Запись содержит импульсы и данные кодирующего устройства сканирующего измерения. Также сохраняются положения главного сканирования. Параметр Counter некоторых методов и функций может быть:

rawDefaultCounter = -1	Используется информация первого счетчика
rawDetector1Discriminator1 = 0	Информация дискриминатора 1 детектора 1
rawDetector1Discriminator2 = 1	
rawDetector1Digital = 2	Информация с TTL - входа детектора 1
rawDetector2Discriminator1 = 3	
rawDetector2Discriminator2 = 4	
rawDetector2Digital = 5	
rawDetector3Discriminator1 = 6	
rawDetector3Discriminator2 = 7	
rawDetector3Digital = 8	
rawDetector4Discriminator1 = 9	
rawDetector4Discriminator2 = 10	
rawDetector4Digital = 11	
rawPSD = 12	Информация позиционно-чувствительного детектора
rawAreaDetector = 13	Информация двумерного детектора

Массивы информации счетчика, положений кодирующего устройства и приводов всегда одинаковые. Для чтения/записи количества информации, хранящейся в записи используется параметр Steps .

Метод ClearCounts(Optional Counter)

Служит для очистки массива счетчика путем присваивания всем значениям 0.

Функция Position(Step As Long) As Double

Возвращает положение сканирования для заданного шага: $\text{Position} = \text{Start} + \text{Step} * \text{Increment}$.

Функция Maximum(Optional Counter) As Double

Возвращает максимальное значение счетчика в записи.

Функция MaximumStep(Optional Counter) As Long

Возвращает номер шага с максимальным значением счетчика в записи.

Function Sum(Optional YExponent, Optional XExponent, Optional Counter) As Double

Рассчитывает сумму всех значений счетчика в записи, которых достигли заданные переменные. Значениями переменных по умолчанию: YExponent = 1, XExponent = 0

Параметр RawFile As RawFile

Только для чтения. Возвращает обратную ссылку на объект RawFile, в котором хранится запись.

Параметр Headers As Headers

Только для чтения. Возвращает объект Headers, который содержит все заголовки записи, которые не совпадают с другими параметрами, такими как Drives, Detectors, ...

Параметр Drives As Headers

Только для чтения. Возвращает объект Headers, который содержит все заголовки приводов в записи.

Параметр Detectors As Headers

Только для чтения. Возвращает объект Headers, который содержит все заголовки детекторов в записи.

RangeHeader As Header

Только для чтения. Возвращает объект Headers, который предоставляет доступ к заголовку записи.

VarInfos As Headers

Возвращает объект Headers, который содержит все заголовки переменной длины в записи.

Параметр Counts(Optional Counter, Optional First, Optional Length) As Variant

Используется для доступа к массиву значений счетчика в записи. Первоначальное значение = 0, т.е. начало массива. Длина Length по умолчанию = -1, указывает на получение всей информации записи. Информация возвращается в виде массива чисел с плавающей запятой. При помощи параметров First и Length можно получить доступ к части массива.

EncoderPositions(Drive As String, Optional First, Optional Length) As Variant

Используется для доступа к массиву значений кодирующего устройства в записи. Первоначальное значение = 0, т.е. начало массива. Длина Length по умолчанию = -1, указывает на получение всей информации записи. Информация возвращается в виде массива чисел с плавающей запятой. При помощи параметров First и Length можно получить доступ к части массива.

DrivePositions(Drive As String, Optional First, Optional Length) As Variant

Используется для доступа к массиву положений привода в записи. Первоначальное значение = 0, т.е. начало массива. Длина Length по умолчанию = -1, указывает на получение всей информации записи. Информация возвращается в виде массива чисел с плавающей запятой. При помощи параметров First и Length можно получить доступ к части массива.

Параметр ExtraParameters(Parameter As Long, Optional First, Optional Length) As Variant

Используется для доступа к массиву специальных параметров и предназначен для модернизации управляющего программного обеспечения. Первоначальное значение = 0, т.е. начало массива. Длина Length по умолчанию = -1, указывает на получение всей информации записи. Информация возвращается в виде массива чисел с плавающей запятой. При помощи параметров First и Length можно получить доступ к части массива.

Параметр Steps As Long

Управляет количеством информации, сохраненной в массивах Counts, EcnoderPositions и Drive-Positions. Если появляется новая информация в результате изменения параметра, параметр будет заполнен нулями.

Объект Headers

Информация в файлах raw структурирована посредством заголовков (headers). Объект Headers содержит все заголовки определенного типа.

Функция CreateHeader(Name As String) As Header

Создает новый объект header с заданным названием.

Метод Remove(Name As String)

Удаляет заданный заголовок.

Параметр Count As Long

Только для чтения. Возвращает полное количество заголовков в списке.

Параметр Item(Name As String) As Header

Только для чтения. Используется для доступа к заголовку с заданным названием.

Параметр Parent As Object

Только для чтения. Возвращает обратную ссылку на объект, в котором хранится заголовок (Range или RawFile).

Параметр HasHeader(Name As String) As Bool

Служит для проверки, существует ли указанный заголовок.

Объект Header

Используется для работы с конкретным заголовком файла. Информация сохраняется в полях, доступ к которым можно получить параметром Item.

Параметр Count As Long

Только для чтения. Возвращает полное количество полей массива.

Параметр Name As String

Только для чтения. Возвращает название заголовка.

Параметр IsBitMask(Name As String) As Bool

True, если указанное поле является битовой маской - т.е. суммой битовых значений.

Параметр Item(Name As String) As Variant

Используется для управления отдельными полями заголовка.

Параметр Flag(Name As String, Flag As String) As Bool

Служит для управления отдельными битами маски.

Параметр Type As String

Только для чтения. Возвращает тип заголовка - напр. запись привода или детектора.

Параметр Const(ConstName As String, Optional FieldName) As Long

Только для чтения. Используется для чтения предопределенных констант формата файлов DIFFRAC^{plus}.

Параметр Parent As Object

Только для чтения. Возвращает обратную ссылку на объект, в котором хранится заголовок (Range или RawFile).

Автоматическая регулировка

Файл `align_functions.vbs` содержит несколько дополнительных функций автоматической регулировки. Основной задачей этих функций является регулировка монокристаллических проб при дифракции с высоким разрешением, как это описано в `align.vbs`.

В качестве возвращаемого каждой из этих функций значения является состояние процедуры регулировки после измерения.

Возможные значения:

<code>AL_NoPoints</code>	Недостаточно точек
<code>AL_NoAxis</code>	Нет такой оси/привода
<code>AL_NoMaximum</code>	Не обнаружен максимум
<code>AL_NoRange</code>	Не задан диапазон
<code>AL_SmallRange</code>	Диапазон слишком маленький
<code>AL_LargeRange</code>	Диапазон слишком большой
<code>AL_LowerLimit</code>	Запрашиваемое положение привода ниже ограничителя
<code>AL_UpperLimit</code>	Запрашиваемое положение привода выше ограничителя
<code>AL_NoHalfMaximum</code>	Половина максимума не определена
<code>AL_NoGoodFit</code>	Параболическая подгонка неудачна
<code>AL_OK</code>	Процедура успешно завершена

Возвращаемое значение используется для оценки дальнейшей процедуры регулировки. Все регулировочные измерения выполняются относительно параметра `AlignedPosition` соответствующего привода. Дифрактометр в эти положения можно установить функцией `PositionAllDrives()`.

Функция `RelativeScan(strScanType, dblScanWidth, lngSteps, dblTimePerStep, ARange)`

Выполняет сканирование относительно положения `AlignedPosition`.

Параметр:

<code>strScanType</code>	Строковый идентификатор <code>ScanType</code> , используемый для регулировки
<code>dblScanWidth</code>	Ширина измеренного дифпазона
<code>lngSteps</code>	Количество измерительных шагов в одном диапазоне
<code>dblTimePerStep</code>	Длительность одного шага
<code>ARange</code>	измеренный диапазон

Возвращаемое значение:

<code>AL_NoAxis</code>	Дифрактометр не оборудован такой осью /приводом
<code>AL_NoRange</code>	<code>ScanWidth = 0</code>
<code>AL_OK</code>	Измерение выполнено успешно

Функция `MaximizedScan(strScanType, dblScanWidth, lngSteps, dblTimePerStep, dblMaxPos, dblMaxInt)`

Выполняет относительное сканирование `RelativeScan` на заданной позиции `AlignedPosition` и устанавливает привод `Drive` в положение `ParabolicFitPosition` (если возможно) диапазона `Range`.

Параметр:

<code>strScanType</code>	Строковый идентификатор <code>ScanType</code> , используемый для регулировки
--------------------------	--

dblScanWidth	Ширина измеренного диапазона
IngSteps	Количество измерительных шагов в диапазоне
dblTimePerStep	Длительность шага
dblMaxPos	Положение максимума
dblMaxInt	Максимальная интенсивность

Возвращаемое значение:

AL_NoPoints	Недостаточно точек для подгонки
AL_NoAxis	Дифрактометр не оборудован такой осью/приводом
AL_NoMaximum	Максимум не найден
AL_SmallRange	Пороговое значение слишком велико, пределы не принадлежат заданному диапазону
AL_LargeRange	Слишком мало точек в пороговом диапазоне, подгонка невозможна
AL_OK	Процедура успешно завершена

Функция Maximize(strScanType, dblScanWidth, IngSteps, dblTimePerStep, dblMaxPos, dblMaxInt, lngIter, dblEnlargeFac, dblShrinkFac)

Последовательно выполняет MaximizedScans в положении AlignedPosition и устанавливает привод Drive в положение ParabolicFitPosition (если возможно) диапазона Range.

Параметр:

strScanType	Строковый идентификатор ScanType, используемый для регулировки
dblScanWidth	Ширина измеренного диапазона Range
IngSteps	Количество измерительных шагов в диапазоне
dblTimePerStep	Длительность шага
dblMaxPos	Положение максимума
dblMaxInt	Максимальная интенсивность
lngIter	Максимальное количество итераций
dblEnlargeFac	Если ширина диапазона слишком мала в MaximizedScan, ScanWidth умножается на этот коэффициент (>1)
dblShrinkFac	Если ширина диапазона слишком велика в MaximizedScan, ScanWidth умножается на этот коэффициент (<1)

Возвращаемое значение:

AL_NoPoints	Недостаточно точек для подгонки
AL_NoAxis	Дифрактометр не оборудован такой осью/приводом
AL_NoMaximum	Максимум не найден
AL_SmallRange	Пороговое значение слишком велико, пределы не принадлежат заданному диапазону
AL_LargeRange	Слишком мало точек в пороговом диапазоне, подгонка невозможна
AL_OK	Процедура успешно завершена

Функция CenteredScan(strScanType, dblScanWidth, IngSteps, dblTimePerStep, dblCenPos, dblCenInt)

Выполняет центрированное сканирование в AlignedPosition и устанавливает Drive в CenterOfGravity сканирования Scan.

Параметр:

strScanType	Строковый идентификатор ScanType, используемый для регулировки
dblScanWidth	Ширина измеренного диапазона Range
IngSteps	Количество измерительных шагов в диапазоне

dblTimePerStep	Длительность шага
dblCenPos	Положение максимума
dblCenInt	

Возвращаемое значение:

AL_NoPoints	Недостаточно точек для подгонки
AL_NoAxis	Дифрактометр не оборудован такой осью/приводом
AL_NoMaximum	Максимум не найден
AL_SmallRange	Пороговое значение слишком велико, пределы не принадлежат заданному диапазону
AL_LargeRange	Слишком мало точек в пороговом диапазоне, подгонка невозможна
AL_OK	Процедура успешно завершена

Функция Center(strScanType, dblScanWidth, lngSteps, dblSamplingTime, dblCenPos, dblCenInt, lngIter, dblEnlargeFac, dblShrinkFac)

Последовательно выполняет CenteredScans на AlignedPosition и устанавливает Drive в CenterOfGravity сканирования Scan.

Parameter:

strScanType	Строковый идентификатор ScanType, используемый для регулировки
dblScanWidth	Ширина измеренного диапазона Range
lngSteps	Количество измерительных шагов в диапазоне
dblTimePerStep	Длительность шага
dblMaxPos	Положение максимума
dblMaxInt	Максимальная интенсивность
lngIter	Максимальное количество итераций
dblEnlargeFac	Если ширина диапазона слишком мала в MaximizedScan, ScanWidth умножается на этот коэффициент (>1)
dblShrinkFac	Если ширина диапазона слишком велика в MaximizedScan, ScanWidth умножается на этот коэффициент (<1)

Возвращаемое значение:

AL_NoPoints	Недостаточно точек для подгонки
AL_NoAxis	Дифрактометр не оборудован такой осью/приводом
AL_NoMaximum	Максимум не найден
AL_SmallRange	Пороговое значение слишком велико, пределы не принадлежат заданному диапазону
AL_LargeRange	Слишком мало точек в пороговом диапазоне, подгонка невозможна
AL_OK	Процедура успешно завершена

Функция OptimizedScan(strOptDrive, dblOptWidth, lngOptSteps, dblThreshold, lngFitProc, lngIterations, strScanType, dblScanWidth, lngSteps, dblTimePerStep)

Выполняет MaximizedScans на первой оси/приводе. Переключается на вторую ось и повторно выполняет MaximizedScan again. ОГРАНИЧЕНИЕ: вторая ось должна быть простой (не допускается комбинация двух осей как в Unlocked Coupled HRXRD).

Parameter:

strOptDrive	Привод для оптимизации
dblOptWidth	Диапазон различных значений для OptDrive
lngOptSteps	Количество MaximizedScans
dblThreshold	Приемлемый уровень

IngFitProc	Выбор между vbParabFit (параболическая подгонка) и vbCOGFit (центр масс)
IngIterations	Количество проходов (итераций)
strDrive	Привод используемый для MaximizedScan
dblScanWidth	Ширина измеренного MaximizedScan (регулируется MaximizedScan)
IngSteps	Количество шагов в одном MaximizedScan
dblTimePerStep	Длительность шага

Возвращаемое значение:

AL_NoPoints	Недостаточно точек для подгонки
AL_NoAxis	Дифрактометр не оборудован такой осью/приводом
AL_NoMaximum	Максимум не найден
AL_SmallRange	Пороговое значение слишком велико, пределы не принадлежат заданному диапазону
AL_LargeRange	Слишком мало точек в пороговом диапазоне, подгонка невозможна
AL_OK	Процедура успешно завершена

Функция HalfedScan(strScanType, dblScanWidth, IngSteps, dblTimePerStep, dblMaxPos, dblMaxInt, dblHMPos, dblHMInt, IDirection, dblAcceptLimit)

Выполняет относительное сканирование в положении AlignedPosition и устанавливает привод Drive в положение половины интенсивности (если возможно) диапазона Range

Параметр:

strScanType	Строковый идентификатор ScanType, используемый для регулировки
dblScanWidth	Ширина измеренного диапазона
IngSteps	Количество шагов
dblTimePerStep	Длительность шага
dblOptWidth	Диапазон значений для OptDrive
dblHMPos	Положение максимума
dblHMInt	Максимальная интенсивность
IDirection	Направление поиска половины интенсивности (+1 - положительное, -1 - отрицательное)
dblAcceptLimit	Точность поиска

Возвращаемое значение:

AL_NoPoints	Недостаточно точек для подгонки
AL_NoAxis	Дифрактометр не оборудован такой осью/приводом
AL_NoMaximum	Максимум не найден
AL_SmallRange	Пороговое значение слишком велико, пределы не принадлежат заданному диапазону
AL_LargeRange	Слишком мало точек в пороговом диапазоне, подгонка невозможна
AL_OK	Процедура успешно завершена

Функция Half(strScanType, dblScanWidth, IngSteps, dblTimePerStep, dblMaxPos, dblMaxInt, dblHMPos, dblHMInt, IDirection, dblAcceptLimit, IngIter, dblEnlargeFac, dblShrinkFac)

Последовательно выполняет HalfedScans в AlignedPosition и устанавливает Drive в Halfed Maximum Position (если возможно) диапазона Range

Parameter:

strScanType	Строковый идентификатор ScanType, используемый для регулировки
--------------------	--

dblScanWidth	Ширина диапазона
lngSteps	Количество шагов
dblTimePerStep	Длительность шага
dblMaxPos	Положение максимума
dblMaxInt	Максимальная интенсивность
dblHMPos	Положение половины максимума
dblHMInt	Положение половины интенсивности
IDirection	Направление поиска половины интенсивности (+1 - положительное, -1 - отрицательное)
dblAcceptLimit	Точность определения половины интенсивности
lngIter	Максимальное количество проходов
dblEnlargeFac	Если ширина диапазона слишком мала в MaximizedScan, ScanWidth умножается на этот коэффициент (>1)
dblShrinkFac	Если ширина диапазона слишком велика в MaximizedScan, ScanWidth умножается на этот коэффициент (>1)

Возвращаемое значение:

AL_NoPoints	Недостаточно точек для подгонки
AL_NoAxis	Дифрактометр не оборудован такой осью/приводом
AL_NoMaximum	Максимум не найден
AL_SmallRange	Пороговое значение слишком велико, пределы не принадлежат заданному диапазону
AL_LargeRange	Слишком мало точек в пороговом диапазоне, подгонка невозможна
AL_OK	Процедура успешно завершена

Функция PositionAllDrives()

Перемещает все приводы в заранее определенные положения

Возвращаемое значение:

AL_OK	Положения достигнуты
--------------	----------------------

Функция PositionDrive(strDrive, dblDrivePos)

Перемещает выбранный привод в заданное положение.

Параметр:

strDrive	Название привода
dblDrivePos	Заданное положение

Возвращаемое значение:

AL_NoAxis	Выбранный дифрактометр не оборудован таким приводом
AL_OK	Положение достигнуто

Функция PrintAllAlignPos()

Распечатывает AlignedPositions всех приводов Drives.

Функция PrintAllCurPos()

Распечатывает текущее положение всех приводов.

Функция GetAlignPosFromRange(ARange)

Служит для получения StartPositions всех приводов диапазона ARange и передает их в AlignedPositions. Если диапазон (запись) ARange содержит заголовок HRXRD, StartPositions будут переписаны значениями Middle Positions заголовка HRXRD .

Параметр:

ARange Диапазон для получения значений Positions

Функция SetAlignPosToRange(ARange)

Регулирует сканирование в диапазоне ARange за счет изменения заголовка HRXRD.

OmegaOffset: TauMiscut

2ThetaOffset: 2ThetaOffset

средние положения

DriveHeaders:

все начальные положения привода StartPositions

в зависимости от ScanType

Параметр:

ARange Диапазон для получения значений Positions

Функция AdjustDQLFile(RFile, strFileName)

Регулирует все диапазоны Ranges в файле raw.

Параметр:

RFile	Внутренний RawFile
strFileName	Название файла для сохранения объекта RawFile

Возвращаемое значение:

AL_OK	Сохранение успешно
--------------	--------------------

Функция ParabolaFitData(dbIPosition, dbIIntensity, bBackground, dbIThreshold, dbIMaxPosition, dbIMaxIntensity)

Описывает параболу по всем точкам выше порогового значения максимальной интенсивности.

Параметр:

bBackground = true	Фон аппроксимируется прямой, которая определяется левой и правой границами диапазона
dbIThreshold	Предел интенсивности точек данных, которые используются для параболической подгонки. 0.5 означает, что для подгонки используются все интенсивности которые лежат ниже половины максимальной интенсивности.
dbIMaxPosition	Центральное положение параболы
dbIMaxIntensity	Максимум интенсивности
Возвращаемое значение:	
AL_NoPoints	Недостаточно точек для подгонки
AL_NoAxis	Дифрактометр не оборудован такой осью/приводом
AL_NoMaximum	Максимум не найден
AL_SmallRange	Пороговое значение слишком велико, пределы не принадлежат заданному диапазону
AL_LargeRange	Слишком мало точек в пороговом диапазоне, подгонка невозможна
AL_OK	Процедура успешно завершена

Функция ParabolaFit(ARange)

Строит параболу по всем точкам выше 75% максимальной интенсивности.

Фон аппроксимируется прямой, которая определяется левой и правой границами диапазона.

Результатом является центр построенной параболы.

Параметр:

ARange	Диапазон построения
---------------	---------------------

Функция CenterOfGravity(ARange, dbICOGPos)

Рассчитывает центр масс интенсивности в заданном диапазоне.

Параметр:

ARange	Диапазон для расчета центра масс
dbICOGPos	Рассчитанное положение

Возвращаемое значение:

AL_NoMaximum	Центр масс рассчитать нельзя
AL_OK	Центр масс рассчитан

align.vbs : Пример скрипта регулировки с использованием align_functions.vbs

```

'*****
'VBScript V 2.2
' align.vbs
'Original Version by:
' Heiko Ress (04.2000)
'Changed by:
' V2.0 Heiko Ress (02.2001)
' V2.1 Heiko Ress (11.2001) requires XRDWizard 2.1 and XRDCommander 2.1
' V2.2 Heiko Ress (02.2002)
'*****

' Assume all variables are declared explicitly
' and report missing Dims as syntax errors
Option Explicit
' pull in common routines
!include Common.vbs
!include align_functions.vbs

' Debug Settings
Dim strLogDevice, bDisplay
strLogDevice = "Trace"
bDisplay      = False 'True '

Dim RFile, ARange
Dim T_Align, TT_Align, P_Align, C_Align, Z_Align
Dim dblThetaWidth, dbl2ThetaWidth
Dim dblZWidth, dblZStart, dblHMPos
Dim lngSteps, dblTimePerStep
Dim lDirection, dblAcceptLimit
Dim dblThreshold, lngOptSteps, lngIterations

' _____ Create a new RawFile object
Set RFile = CreateObject("RawFile.RawFile")
PrepareAlignment RFile,ARange
Set T_Align = RFile.DriveAlignments("Theta")
Set TT_Align = RFile.DriveAlignments("2Theta")
' _____ Alignment parameters

dblThetaWidth      = 2 * T_Align("Delta")
dbl2ThetaWidth     = 2 * TT_Align("Delta")
lngOptSteps = 7
dblThreshold       = 0.4
lngIterations      = 5
dblTimePerStep     = 0.1
lngSteps = 101

' _____ z-Position _____ alignment _____
If RFile.DriveAlignments.HasHeader("Z-Drive") Then
    Set Z_Align = RFile.DriveAlignments("Z-Drive")
    If Z_Align("AlignFlag") = vbAlignmentRequired Then
        dblZStart = Z_Align("TheoreticalPosition") - Z_Align("Offset")
        dblZWidth = 2 * Z_Align("Delta")
        ' use direct beam for z alignment
        SetStartAlign "Theta", 0, ARange
        SetStartAlign "2Theta", 0, ARange
        SetStartAlign "Z-Drive", dblZStart-2, ARange
        SetStartAlign "Antiscattering Slit", 0.5, ARange
        ' Setting diffractometer and accessories to default values
        PrepareMeasure(ARange)
    ' _____ find the direct beam
    If HighResBeamPath(SecondaryOptics.SelectedOptic) Then
        Maximize "Detector Scan", dbl2ThetaWidth, lngSteps, _
            dblTimePerStep, dblMaxPos, dblMaxInt, _
            lngIterations, 2, 0.3
        TT_Align("Offset") = TT_Align("Offset") - dblMaxPos
    Else
        Center "Detector Scan", dbl2ThetaWidth, lngSteps, _
            dblTimePerStep, dblCenPos, dblCenInt, _
            lngIterations, 2, 0.3
        TT_Align("Offset") = TT_Align("Offset") - dblCenPos
    End If
End If

```

```

' _____ sample in beam
SetStartAlign "Z-Drive", Z_Align("TheoreticalPosition") - _
  Z_Align("Offset"), ARange
' _____ find half intensity
lDirection = 1
dblAcceptLimit = 0.05
Half "Z-Drive", dblZWidth, 301, dblTimePerStep, _
  0,0,0,0,lDirection, dblAcceptLimit, _
  lngIterations, 2,0.3
' _____ find theta maximum
Maximize "Rocking Curve", dblThetaWidth, lngSteps, _
  dblTimePerStep, dblMaxPos, dblMaxInt, _
  lngIterations, 2,0.3
T_Align("Offset") = T_Align("Offset") - dblMaxPos
' _____ find half intensity
Half "Z-Drive", dblZWidth, 301, dblTimePerStep, _
  0,0,0,0,lDirection, dblAcceptLimit, _
  lngIterations, 2,0.3
Z_Align("TheoreticalPosition") = Drives("Z-Drive").AlignedPosition
Z_Align("AlignFlag") = vbAligned
SetStartAlign "Z-Drive", Z_Align("TheoreticalPosition"), ARange
' Change Drives to the reflection Positions
SetStartAlign "Theta", T_Align("TheoreticalPosition") - _
  T_Align("Offset"), ARange
SetStartAlign "2Theta", TT_Align("TheoreticalPosition") - _
  TT_Align("Offset"), ARange
End If
End If

' _____ Setting diffractometer and accessories to default values
SetLowResBeamPath ARange, bBPChanged
PrepareMeasure (ARange)
PositionAllDrives ()
' _____ reflection _____ alignment _____
' _____ alignment parameters
dblThetaWidth = 2*T_Align("Delta")
dbl2ThetaWidth = 2*TT_Align("Delta")
' _____ open detectorslit
PositionDrive "Antiscattering Slit", dbl2ThetaWidth
' _____ find theta maximum
If T_Align("AlignFlag") = vbAlignmentRequired Then
  Maximize "Rocking Curve", dblThetaWidth, lngSteps, _
    dblTimePerStep, dblMaxPos, dblMaxInt, _
    lngIterations, 2,0.3
  T_Align("AlignFlag") = vbAligned
End If
' _____ shrink detectorslit
If RFile.DriveAlignments.HasHeader("Antiscattering Slit") Then
  Set A_Align = RFile.DriveAlignments("Antiscattering Slit")
  SetStartAlign "Antiscattering Slit", A_Align("TheoreticalPosition"),
  ARange
  PositionDrive "Antiscattering Slit", A_Align("TheoreticalPosition")
End If
' _____ find 2theta center
If TT_Align("AlignFlag") = vbAlignmentRequired Then
  Center "Detector Scan", dbl2ThetaWidth, lngSteps, _
    dblTimePerStep, dblCenPos, dblCenInt, _
    lngIterations, 2,0.3
  TT_Align("AlignFlag") = vbAligned
End If
' _____ find the substrate maximum
Maximize "Unlocked Coupled HRXRD", dblThetaWidth, lngSteps, _
  dblTimePerStep, dblMaxPos, dblMaxInt, _
  lngIterations, 2,0.3
' _____ optimize chi
If RFile.DriveAlignments.HasHeader("Chi") Then
  Set C_Align = RFile.DriveAlignments("Chi")
  If C_Align("AlignFlag") = vbAlignmentRequired Then
    OptimizedScan "Chi", 2*C_Align("Delta"), lngOptSteps, _
      dblThreshold, vbCOGFit, lngIterations, _
      "Rocking Curve", dblThetaWidth, lngSteps, dblTimePerStep
  End If
End If

```

```

    C_Align("AlignFlag") = vbAligned
End If
End If '_____ optimize phi
If RFile.DriveAlignments.HasHeader("Phi") Then
    Set P_Align = RFile.DriveAlignments("Phi")
    If P_Align("AlignFlag") = vbAlignmentRequired Then
        OptimizedScan "Phi", 2*P_Align("Delta"), lngOptSteps, _
            dblThreshold, vbCOGFit, lngIterations, _
            "Rocking Curve", dblThetaWidth, lngSteps, dblTimePerStep
        P_Align("AlignFlag") = vbAligned
    End If
End If

If bBPChanged = true Then
    If SetHighResBeamPath(ARange,bBPChanged) = AL_OK Then
        SecondaryOptics.SelectedOptic = _
            ARange.Headers("HRXRD")("AnalyzerOptic") + 1
        SecondaryOptics(ARange.Headers("HRXRD")("AnalyzerOptic") + 1). _
            BeamPath = ARange.Headers("HRXRD")("AnalyzerBeamPath") + 1
        Maximize "Detector Scan", dbl2ThetaWidth, lngSteps, _
            dblTimePerStep, dblMaxPos, dblMaxInt, _
            lngIterations, 2,0.3
        TT_Align("AlignFlag") = vbAligned
    End If
End If

'_____
'RelativeScan "Unlocked Coupled HRXRD", 2, 1001, 0.1, ARange
'PositionAllDrives()
'_____
AdjustDQLFile RFile, RFile.Filename
PrintAllAlignPos()

```

Для регулировки пробы с использованием скрипта следует создать пакет в редакторе пакетных измерений. При работе скрипта требуется файл параметров, которым может быть обычный файл *.dql, созданный программой XRD Wizard. Параметры Start Positions на вкладке Scan Parameter первой записи Range в файле.dql будет использоваться в качестве первого положения для регулировки.

1. Начальные значения регулировки считываются из файла параметров.dql вызовом функции GetAlignPos-FromRange(ARange).
2. Дифрактометр устанавливается в положения AlignedPositions методом PositionAllDrives(). (Выше было указано, что в конце регулировочного сканирования приводы дифрактометра автоматически устанавливаются в положения AlignedPositions.)
3. Список регулировочных параметров должен быть настроен на тип и качество регулируемой .
4. Противорассеивающая щель перед регулировкой открывается (PositionDrive "Antiscattering Slit", dbl2ThetaWidth).
5. Первым шагом регулировки является нахождения максимума пика путем последовательного выполнения измерений кривой качания (Rocking Curve Measurements) в режиме Maximize.
6. Если максимум определен, щель детектора закрывается (PositionDrive "Antiscattering Slit", 0.5).
7. Выполняется функция Centre детектора (Detector Scan) для регулировки детектора по отношению центру дифрагированного пучка.
8. После этого выполняется сканирование (Unlocked Coupled HRXRD) в широком диапазоне для поиска максимума дифрактограммы . (Данный шаг выполняется также при работе в режиме отражения.)

9. Ось Chi оптимизируется за счет выполнения OptimizedScan: выполняется серия измерений (Unlocked Coupled HRXRD - в данном примере 11) с поиском максимума в каждом измерении и определении положения максимума Chi параболической подгонкой .

10. На последнем этапе AlignedPositions записываются в файл параметров .dql, регулируются все записи Ranges, содержащие кривые качания, сканирования детектором и сканирования Unlocked Coupled HRXRD (AdjustDQLFile).

Поведения скрипта align.vbs регулируется двумя переменными:

1. strLogDevice определяет путь системных сообщений (log).
2. Дополнительные окна сообщений MsgBoxes, которые описывают процесс регулировки, включаются установкой параметра bDisplay в True.