Παράρτημα Δ

Εγχειρίδιο λογισμικού συλλογής και ανάλυσης των πειραματικών μετρήσεων

Το λογισμικό "X-Ray Apparatus" σας επιτρέπει τη συλλογή των πειραματικών μετρήσεων, μέσω της σειριακής σύνδεσης RS-232 με τη συσκευή των ακτίνων-Χ. Σας παρέχεται η δυνατότητα για τη γραφική απεικόνιση τόσο των πειραματικών μετρήσεων όσο και των παραμέτρων λειτουργίας της συσκευής των ακτίνων-Χ, καθώς και η δυνατότητα ανάλυσης των πειραματικών σας μετρήσεων.

Το πρόγραμμα ενεργοποιείται, κάτω από το περιβάλλον Windows, είτε επιλέγοντας το εικονίδιο "X-Ray Apparatus" είτε "Έναρζη/Προγράμματα/X-Ray/X-Ray Apparatus". Στην οθόνη σας θα εμφανιστεί



Bragg Planck Transmission Moseley

Το λογισμικό συλλέγει τα πειραματικά δεδομένα από τη συσκευή των ακτίνων Χ, τα οποία μεταδίδονται στον Η/Υ μέσω της σειριακής σύνδεσης. Οι μετρήσεις απεικονίζονται τόσο υπό μορφή πίνακα όσο και υπό μορφή διαγράμματος επιλέγοντας το μενού "Bragg". Για εναλλακτικές παρουσιάσεις των αποτελεσμάτων, καθώς και μεθόδων ανάλυσης είναι διαθέσιμα οι επιλογές "Plank", "Transmission" και "Moseley". Μπορείτε να ενεργοποιήσετε κάποια από αυτές οποιαδήποτε στιγμή απλά επιλέγοντας με το ποντίκι το κατάλληλο μενού. Οι διαστάσεις του πίνακα και του διαγράμματος μπορούν να μεγαλώσουν ή να μικρύνουν, το ένα έναντι του άλλου, μετακινώντας το μεταξύ τους όριο με το ποντίκι.

Μπορείτε να επιλέξετε τις υπολογιστικές λειτουργίες, που διαθέτει το λογισμικό, χρησιμοποιώντας το δεξί πλήκτρο του ποντικιού.

Τα εικονίδια (ή τα αντιστοιχούντα πλήκτρα λειτουργίας) σας επιτρέπουν να έχετε άμεση πρόσβαση σε βασικές λειτουργίες του λογισμικού, καθιστώντας το φιλικό στη χρήση. Η λειτουργία που επιτελεί κάθε εικονίδιο περιγράφεται ακολούθως :



Διαγράφει είτε τη τρέχουσα μέτρηση διατηρώντας ταυτόχρονα τις **ρυθμίσεις κρυστάλλου** ή όταν δεν απεικονίζεται κάποια μέτρηση διαγράφει τις τρέχουσες **ρυθμίσεις κρυστάλλου**. Πιέζοντας το πλήκτρο δύο φορές διαγράφονται ταυτόχρονα τόσο η τρέχουσα μέτρηση όσο και οι ρυθμίσεις κρυστάλλου.



Ανοίγει αρχεία μετρήσεων, μαζί με τους υπολογισμούς που έχουν αποθηκευτεί επί αυτών.



Αποθηκεύει τη τρέχουσα σειρά μετρήσεων, καθώς και τους υπολογισμούς, που έχουν γίνει.



Εκτυπώνει το τρέχον διάγραμμα.



Αλλάζει τις τρέχουσες ρυθμίσεις (κρυστάλλου και σειριακής σύνδεσης)



Τα αποτελέσματα των υπολογισμών εμφανίζονται πάντα στη γραμμή πληροφοριών στο κάτω μέρος του βασικού παραθύρου. Μπορείτε να προβάλλετε ή όχι αυτή την πληροφορία σε ένα μεγαλύτερο παράθυρο πιέζοντας το παραπάνω εικονίδιο ή το πλήκτρο F6. Ενεργοποιεί ή μη το παράθυρο της γραμμής πληροφοριών (status line).



Απεικονίζει τη γεωμετρία της συσκευής ακτίνων-X χρησιμοποιώντας μια διανυσματική αναπαράσταση.



Ανοίγει το αρχείο βοήθειας του λογισμικού.



Υποδεικνύει την έκδοση του λογισμικού.

<u>Μενού "Bragg"</u>

Οι μετρήσεις παρουσιάζονται υπό μορφή πίνακα. Στην πρώτη στήλη (β /°) καταχωρούνται οι γωνιακές θέσεις του στόχου (σε μοίρες), ενώ στη δεύτερη στήλη (R0/1/s) καταχωρούνται οι εντάσεις (αριθμός φωτονίων/sec). Για κάθε νέα μέτρηση προστίθεται μια νέα στήλη (R1, R2, ...) στο πίνακα, έτσι ώστε να είναι δυνατή η άμεση σύγκριση των φασμάτων, εάν αυτή είναι αναγκαία.

<u>Mevoú "Transmission"</u>

Επιτρέπει τον άμεσο υπολογισμό, καθώς και τη γραφική απεικόνιση, των λόγων $T_1=R_1/R_0$, $T_2=R_2/R_0$, $T_3=R_3/R_0$,...όπου R_0 , R_1 , R_2 , R_3 , ... αποτελούν μετρήσεις εντάσεων.

Η παραπάνω επιλογή έχει εφαρμογή στη μελέτη της απορρόφησης των ακτίνων-Χ. Μετρώντας το φάσμα R_0 , αρχικά χωρίς τη χρήση απορροφητή, και εν συνεχεία τα φάσματα R_1 , R_2 , R_3 , ... με διαφορετικά απορροφητικά υλικά, οι λόγοι $T_1=R_1/R_0$, $T_2=R_2/R_0$, $T_3=R_3/R_0$,... προσδιορίζουν τα φάσματα απορρόφησης των υλικών που χρησιμοποιούνται. Οι θέσεις των αιχμών απορρόφησης είναι άμεσα αναγνωρίσιμες επί των φασμάτων απορρόφησης.

Όταν τα φάσματα απορρόφησης αποδοθούν γραφικά συναρτήσει του μήκους κύματος (αν είναι απαραίτητο μετά το καθορισμό του κρυστάλλου), τότε το λογισμικό σχεδιάζει τις Κ αιχμές και μεταφέρει τις αριθμητικές τους τιμές στο "μενού Moseley".

Υπολογιστικές λειτουργίες

Το λογισμικό παρέχει ένα σημαντικό αριθμό υπολογιστικών λειτουργιών, στις οποίες έχετε πρόσβαση πατώντας το δεξιό πλήκτρο του ποντικιού :

Properties (Παράμετροι μέτρησης)

Οι παράμετροι της συσκευής των ακτίνων-Χ κατά τη μέτρηση (υψηλή τάση, ένταση ρεύματος, χρόνος Ασκηση 8

μέτρησης ανά γωνιακή θέση, γωνιακό βήμα σάρωσης) καταγράφονται σε κάθε στήλη R_i (i=0,1,2, ...) του πίνακα. Επιλέγοντας τη στήλη R_i με το ποντίκι (δεξί πλήκτρο) έχετε τη δυνατότητα ανάγνωσης των παραπάνω παραμέτρων.

Delete Column (Διαγραφή στήλης)

Μπορείτε να διαγράψετε τη στήλη ενός πίνακα οποιαδήποτε στιγμή.

Display Coordinates (Εμφάνιση συντεταγμένων)

Όταν ενεργοποιείτε αυτή τη λειτουργία, η γραμμή πληροφοριών εμφανίζει τις συντεταγμένες στις οποίες βρίσκεται ο δείκτης προβολή των συντεταγμένων παραμένει ενεργή, μέχρι να την απενεργοποιήσετε επιλέγοντας και πάλι Display Coordinates, ή έως ότου εκτελέσετε κάποιες από τις λειτουργίες Set Marker, Calculate Peak Center, Draw K-edge, Calculate Best-fit Straight Line, Calculate Straight Line through Origin ή τον Calculate Integral, οπότε και εμφανίζεται το αποτέλεσμα του υπολογισμού στη γραμμή πληροφοριών.

Select Line Width (Επιλογή Πλάτους Γραμμής)

Μπορείτε να τροποποιήσετε το εύρος της γραμμής που προβάλλεται πάνω στο διάγραμμα. Μπορείτε να διαλέξετε ανάμεσα τρία διαφορετικά πλάτη γραμμών. Μπορείτε να αποθηκεύσετε τη τρέχουσα ρύθμιση σαν προεπιλεγμένη για τη χρήση της σε κάποιο επόμενο πρόγραμμα από την επιλογή General.

Show Values (Απεικόνιση τιμών)

Επιτρέπει την απεικόνιση των συντεταγμένων μέτρησης με τη χρήση γεωμετρικών συμβόλων. Μπορείτε να αποθηκεύσετε την τρέχουσα ρύθμιση σαν προεπιλεγμένη για τη χρήση της σε κάποιο επόμενο πρόγραμμα από την επιλογή General.

Show Connecting Lines (Εμφάνιση συνδετικών γραμμών)

Χρησιμοποιήστε αυτή τη λειτουργία για να εμφανίσετε ή να αποκρύψετε τις γραμμές που συνδέουν τα σημεία μέτρησης μεταξύ τους. Μπορείτε να αποθηκεύσετε την τρέχουσα ρύθμιση σαν προεπιλεγμένη για τη χρήση της σε κάποιο επόμενο πρόγραμμα από την επιλογή General.

Select Rulers (Επιλογή Αξόνων)

Αυτή η λειτουργία επιτρέπει τη προβολή αξόνων στο πάνω και αριστερό τμήμα του φάσματος, ή κάτω και αριστερά ή την απόκρυψη αυτών. Μπορείτε να αποθηκεύσετε τη τρέχουσα ρύθμιση σαν προεπιλεγμένη για τη χρήση της σε κάποιο επόμενο πρόγραμμα από την επιλογή General.

Show Grid (Εμφάνιση πλέγματος)

Σας επιτρέπει να εισάγετε ή να αποκρύπτετε ένα πλέγμα γραμμών επί του φάσματος. Μπορείτε να αποθηκεύσετε την τρέχουσα ρύθμιση σαν προεπιλεγμένη για τη χρήση της σε κάποιο επόμενο πρόγραμμα από την επιλογή General.

Logarithmic Representation (Λογαριθμική απεικόνιση)

Μπορείτε να προβάλετε τις μετρήσεις σας σε Αυτή ημιλογαριθμική μορφή. λειτουογία n απεικόνισης επιτρέπει την ευκρινέστερη μελέτη δομών του φάσματος μικρής έντασης. Η λειτουργία ενεργοποιείται μόνο στο μενού "Bragg". Μπορείτε να αποθηκεύσετε την τρέχουσα ρύθμιση σαν προεπιλεγμένη για τη χρήση της σε κάποιο επόμενο πρόγραμμα από την επιλογή General.

Zoom (Μεγέθυνση)

Μετά την ενεργοποίηση αυτής της επιλογής μπορείτε να καθορίσετε τη περιοχή που θέλετε να μεγεθύνετε, καθορίζοντας την με το ποντίκι (αριστερό πλήκτρο). Μια περιοχή του φάσματος που έχει ήδη μεγεθυνθεί, μπορεί να μεγεθυνθεί περαιτέρω. Για να την επαναφέρετε στο αρχικό της μέγεθος, επιλέξτε Zoom Off.

Zoom Off (ακύρωση μεγέθυνσης)

Επαναφέρει το πρόσφατα επιλεγμένο τμήμα του διαγράμματος στο πραγματικό του μέγεθος.

Set Marker (Τοποθέτηση δείκτη)

Το λογισμικό παρέχει τέσσερις διαφορετικές λειτουργίες τοποθέτηση δεικτών επί του διαγράμματος. Μπορείτε να επεξεργαστείτε τους δείκτες, να τους μετακινήσετε ή να τους διαγράψετε από το διάγραμμα επιλέγοντας τους δύο φορές με το ποντίκι (αριστερό πλήκτρο).

Alt+T: Text (Kείμενο)

Η λειτουργία προσθήκης κειμένου σας επιτρέπει να εισάγετε κείμενο σε οποιοδήποτε μέρος του διαγράμματος. Μόλις εισάγετε το κείμενο σας απλά μετακινήστε το πλαίσιο στην επιθυμητή θέση του διαγράμματος και "εγκαταστήστε" το πατώντας το αριστερό πλήκτρο του ποντικιού.

Μετά την εκτέλεση υπολογισμών που επιστρέφουν αριθμητική τιμή στη γραμμή πληροφοριών, αυτές οι αριθμητικές τιμές μπορούν να εισαχθούν σαν κείμενο, το οποίο μπορείτε να αποδεχθείτε, επεξεργαστείτε ή απορρίψετε.

Alt+V: Vertical Line (Κάθετη γραμμή)

Η λειτουργία σας επιτρέπει να σχεδιάσετε κάθετες γραμμές σε οποιαδήποτε θέση του διαγράμματος. Η συντεταγμένη της γραμμής δίδεται στη γραμμή πληροφοριών. Προηγούμενες τιμές συντεταγμένων στη γραμμή πληροφοριών σβήνονται.

Alt+H: Horizontal line Line (Οριζόντια γραμμή)

Αυτή η λειτουργία σας επιτρέπει να σχεδιάσετε οριζόντιες γραμμές σε οποιαδήποτε θέση του διαγράμματος. Η συντεταγμένη της γραμμής δίδεται στη γραμμή πληροφοριών. Προηγούμενες τιμές συντεταγμένων στη γραμμή πληροφοριών σβήνονται.

Alt+D: Measure Difference (Μέτρηση Διαφοράς)

Αφού επιλέξετε κάποιο σημείο αναφοράς, μπορείτε να σχεδιάσετε μια γραμμή από το σημείο αυτό μέχρι οποιοδήποτε άλλο σημείο μέσα στο διάγραμμα. Η διαφορά συντεταγμένων μεταξύ του αρχικού και του τελικού σημείου της ευθείας δίδονται στη γραμμή πληροφοριών. Προηγούμενες τιμές συντεταγμένων στη γραμμή πληροφοριών σβήνονται.

Calculate Peak Center (Υπολογισμός κέντρου κορυφής)

Επιλέξτε το τμήμα του φάσματος, για το οποίο επιθυμείτε να βρείτε τη μέση τιμή, χρησιμοποιώντας το αριστερό πλήκτρο του ποντικιού. Η τιμή που προκύπτει εμφανίζεται στη γραμμή πληροφοριών. Προηγούμενες τιμές συντεταγμένων στη γραμμή πληροφοριών σβήνονται. Επίσης μπορείτε να εισάγετε στο διάγραμμα τη τρέχουσα τιμή με την επιλογή Text. Η γραμμή μπορεί να διαγραφεί από το διάγραμμα επιλέγοντας την δύο φορές με το ποντίκι (αριστερό πλήκτρο).

Draw K-edge (Προσδιορισμός Κ αιχμής)

Όταν τα φάσματα απορρόφησης παριστάνονται γραφικά σαν συνάρτηση του μήκους κύματος, ο υπολογισμός της Κ αιχμής επιτρέπει την επαλήθευση του νόμου του Moseley. Απλά επιλέξτε το τμήμα του φάσματος στο οποίο η Κ αιχμή εντοπίζεται χρησιμοποιώντας το αριστερό κουμπί του ποντικιού. Η τιμή της Κ-ακμής εμφανίζεται στη γραμμή πληροφοριών και στο μενού "Moseley". Προηγούμενες τιμές συντεταγμένων στη γραμμή πληροφοριών σβήνονται. Επίσης μπορείτε να εισάγετε μέσα στο διάγραμμα τη τρέχουσα τιμή με την επιλογή Text. Η Κ αιχμή μπορεί να διαγραφεί από το διάγραμμα επιλέγοντας την δύο φορές με το ποντίκι (αριστερό πλήκτρο).

Calculate Best-fit Straight Line (Προσδιορισμός καλύτερης ευθείας)

Επιλέξτε το τμήμα του φάσματος, χρησιμοποιώντας το αριστερό πλήκτρο του ποντικιού, το οποίο θέλετε να περιγράψετε με την ευθεία y=Ax+B. Οι συντελεστές A, B εμφανίζονται στη γραμμή πληροφοριών. Προηγούμενες τιμές συντεταγμένων στη γραμμή πληροφοριών σβήνονται. Επίσης μπορείτε να εισάγετε μέσα στο διάγραμμα τη τρέχουσα τιμή με την επιλογή Text. Η "καλύτερη ευθεία" μπορεί να διαγραφεί από το διάγραμμα επιλέγοντας την δύο φορές με το ποντίκι (αριστερό πλήκτρο).

Calculate Straight Line through Origin (Προσδιορισμός καλύτερης ευθείας διερχόμενης από το σημείο (0,0))

Επιλέξτε το τμήμα του φάσματος, χρησιμοποιώντας το αριστερό πλήκτρο του ποντικιού, το οποίο θέλετε να περιγράψετε με την ευθεία y=Ax. Ο συντελεστής A εμφανίζεται στη γραμμή πληροφοριών. Προηγούμενες τιμές συντεταγμένων στη γραμμή πληροφοριών σβήνονται. Επίσης μπορείτε να εισάγετε μέσα στο διάγραμμα τη τρέχουσα τιμή με την επιλογή Text. Η "καλύτερη ευθεία" μπορεί να διαγραφεί από το διάγραμμα επιλέγοντας την δύο φορές με το ποντίκι (αριστερό πλήκτρο).

Calculate Integral (Υπολογισμός εμβαδού)

Η τιμή της ολοκλήρωσης καθορίζεται από τη περιοχή που περικλείεται από το τμήμα του φάσματος που επιλέξατε χρησιμοποιώντας το αριστερό πλήκτρο του ποντικιού. Η τιμή της ολοκλήρωσης εμφανίζεται στη γραμμή πληροφοριών. Προηγούμενες τιμές συντεταγμένων στη γραμμή πληροφοριών σβήνονται. Μπορείτε να εισάγετε τη τρέχουσα τιμή της ολοκλήρωσης μέσα στο διάγραμμα με την επιλογή Text.

Delete Last Evaluation (Διαγραφή τελευταίου υπολογισμού).

Αναιρεί τον πιο πρόσφατο υπολογισμό. Αυτό είναι δυνατό για τις παρακάτω υπολογιστικές λειτουργίες : Set Marker, Calculate Peak Center, Draw K-edge, Calculate Best-fit Straight Line, Calculate Straight Line through Origin.

Delete All Evaluations (Διαγραφή όλων των υπολογισμών).

Αναιρεί το σύνολο των υπολογισμών. Αυτό είναι δυνατό για τις παρακάτω υπολογιστικές λειτουργίες: Set Marker, Calculate Peak Center, Draw K-edge, Calculate Best-fit Straight Line, Calculate Straight Line through Origin.

Crystal Settings (Ρυθμίσεις Κρυστάλλου)

Η συσκευή ακτίνων-Χ μεταδίδει συνεχώς στον Η/Υ τις τιμές της γωνιακής θέσης του στόχου και της έντασης (φωτόνια/sec). Ανάλογα με το χρησιμοποιούμενο κρύσταλλο, οι γωνίες αντιστοιχούν σε ακτίνες-Χ διαφορετικού μήκους κύματος, λ. Καθορίζοντας τη σταθερά 2*d του κρυσταλλικού πλέγματος, το λογισμικό χρησιμοποιεί τη σχέση του Bragg $n \lambda = 2 d \sin \theta$, για να μετατρέψει τη γωνιακή θέση σε μήκος κύματος (*n* είναι η τάξη ανάκλασης). Επίσης το λογισμικό παρέχει τη δυνατότητα μετατροπής των μηκών κύματος στις αντίστοιχες ενέργειες των χρησιμοποιώντας φωτονίων, Ε, τη σχέση h=6.626x10⁻³⁴ $E = h v = h c / \lambda$, όπου Js και $c=2.998 \times 10^8$ m/s.

General Settings (Γενικές ρυθμίσεις)

Μπορείτε να αλλάξετε τη γλώσσα επικοινωνίας και τη σειριακή σύνδεση με την οποία επικοινωνεί η συσκευή ακτίνων-Χ με τον υπολογιστή. Η αλλαγή επιδρά άμεσα, δεν χρειάζεται να βγείτε από το πλαίσιο διαλόγου πατώντας **OK**. Αυτό σημαίνει ότι μπορείτε να ελέγξετε τις αλλαγές που κάνατε άμεσα.

Αν θέλετε να αποθηκεύσετε τις αλλαγές ώστε να αποτελούν τις προεπιλεγμένες ρυθμίσεις την επόμενη φορά που θα χρησιμοποιήσετε το λογισμικό, θα πρέπει επιπλέον να επιλέξετε **Save New Parameters**. Επίσης, κάνοντας αυτή την επιλογή αποθηκεύετε ταυτόχρονα και τις παρακάτω τρέχουσες ρυθμίσεις: Display Coordinates, Select Line Width, Show Values, Show Connecting Lines, Select Rulers, Show Grid, Logarithmic Representation.