

SPICE 簡易マニュアル Ver. 1.2

2007/4/6 M.Matsuura

- SPICE の暫定版簡易マニュアルです。
- コマンドのデリミタは半角スペースです。
- モーター角度は全て反時計方向を正としています。A1,C1,A3,C3 は散乱角度が増える方向は正ですが、A2,C2 は負になります。
- コマンドヒストリーをダブルクリックすると、コマンドラインにそのコマンドを移せます。
- SPICE の画面で ? マークをクリックするとヘルプ(英語版)を参照できます。
- SPICE では既存のコマンドを組み合わせることで複雑な動作をするエイリアス、マクロを簡単に作る事が出来ます。このマニュアルにもそのようなエイリアスが沢山出てきます。

実験開始

begin

- 実験をスタートさせる時に入力します。
- 90秒以上入力が無いと begin コマンドがキャンセルされます。
- コリメーションを入力するところに文字は入りません。Open の場合は適当な値を入れて下さい。
- local contact は物性研に共同研究者がいればその人の名前を、いなければ、K. Hirota か M. Matsuura と入力して下さい。
- 試料情報を入力して下さい。散乱面を張るベクトル2つと、格子パラメタ(a,b,c, α , β , γ)は最初の UB matrix を作るのに使われます。
- 1つの実験に対し Exp No.が1つ割り当てられ、D/5G_SPICE_user フォルダ以下に exp* (*は Exp No.) フォルダが作成されます。

角度移動

drive

- mv でも drive と同様な動作をします。
- 1 度に 2 個以上のモーターを指定する事も可能です。
 - drive a2 20 c2 10
- ei,ef,e,h,k,l,coldtip,tsample などの pseudo motor の値も drive で変更可能です。
 - drive ei 14.7
- A1 を含む複数のモーターを動かす場合、A1 のみを最初に動かす。A1 角度移動終了後、サンプルステージのエアを落とし、A1 以外のモーターを動かしています。
 - A1 を動かす時はバックラッシュを取る為に、目標角+0.2 の角度にまず行き、その後目標角度に行く様にしてあります。

Jog

- Drive/Scan/Count-tab > Drive-tab にて動かしたいモーターを選択して（複数選択可）JogStep を入力し、Jog+、Jog- ボタンを押せば JogStep 分角度移動します。
- このボタンは drive @モーター名+JogStep のエイリアスです。

driverel

- Drive の代わりに driverel を用いると現在角から指定した角度分移動します。
 - driverel c2 1
 - SPICE では現在角を@モーター名で表しています。上記の driverel コマンドは drive c2 @c2+1 という動作のエイリアスです。

br, calc

- br でブラッグ点に移動します。
 - br 1 0 0
 - このコマンドは drive h 1 k 0 10 のエイリアスです。
- 非弾性モードからエネルギートランスファーをゼロにして Bragg 点に行く時は bre と入力します。
 - bre 1 0 0
 - このコマンドは drive h 1 k 0 10 e 0 のエイリアスです。
- calc で角度を計算します。
 - calc h 1 k 0 10

カウント

count

- count preset カウントチャンネル カウント時間 repeat リpeat回数
 - カウントチャンネルは time、monitor もしくは mcu です。
 - カウント時間は Time は秒で monitor はモニター値で指定します。
 - preset 以下は省略するとデフォルト値、もしくは前回使用した値が使われます。
 - (例)
 - ◇ count preset time 1 repeat 3
 - ◇ count preset monitor 10000
 - ◇ count preset mcu 5
 - ◇ count

mcu

- mcu は monitor count unit の略で、カウントの単位を設定できます。
 - ◇ mcu 12000 : 12000 monitor をカウントユニットに設定
 - ◇ count preset mcu 1 で設定したカウントユニット分、測定します。

スキャン

scan

- scan モーター名 スタート角 終了角 ステップ角 preset カウントチャンネル 測定時間パラメタ
 - ステップ角は負でも正でも構いません。Spice の方で正しく処理します。
 - ◇ scan c2 -20 -22 0.2 も O.K.
 - モーター名は c2 や a2 などのモーター名の他に、ei や ef、e、h,k,l など指定する事が出来ます。
 - ◇ 一度に複数のモーター名を指定できますが、モーターが重複する場合はエラーメッセージが出ます。
 - 動かさないモーターはスタート角のみ入力して下さい。
 - ◇ scan h 1 k 1 10 e 2 10 1 preset monitor 1000

- 上記のスキューンは $Q=(1,1,0)$ での constant-Q スキューンです。
- ◇ scan h 0.2 0.8 0.05 k 0.2 0.8 0.05 l 0 e 14 preset monitor 1000
 - 上記のスキューンは E=14 での hh0 方向の constant-E スキューンです。
- モーターを指定しないと動きません。たとえば弾性散乱の場合 e の項を省略できます。
- ◇ scan h 0.95 1.05 0.005 k 0 l 0 preset time 1
- ◇ ただし上記のスキューンの前が非弾性散乱状態だと、その E_i 、 E_f のまま上記のスキューンを行うので注意してください。
- ◇ e 0 を入れると毎回、A1,C1（もしくは A3,C3）を弾性散乱条件に移動しようとして、一旦、設定角+0.2° に動かしてから設定角に移動させます。その為、もし弾性散乱の時に e 0 を入れておくと、毎回 A1 を+0.2° 移動、-0.2° 移動を行うのでスキューンが遅くなります。注意して下さい。
- preset 以降は count の項を参照してください。

scanrel

- scan モーター名 スタート相対角 終了相対角 ステップ角 preset 測定モード 測定時間パラメタ
- scan と違うのは現在角度に対してスタート相対角、終了相対角の範囲をスキューンするところです。
- scanrel c2 2 -2 0.2
 - 上記のコマンドは c2 の現在角+-2 度を 0.2 度ステップで測定します。
 - このコマンドは scan c2 @c2+2 @c2-2 0.2 のエイリアスです。

center

- center モーター名
 - 指定したモーターについて、現在の角度から±1°、0.1° 刻みで preset 値のスキューンを行い、スキューン後にピークの重心角度に移動します。
 - center c2
 - このコマンドは scan c2 @c2+1 @c2-1 0.1 のエイリアスです。

th2th

- th2th マイナス角度 プラス角度 ステップ角度
 - 現在の a2 角度から指定したマイナス角度 プラス角度の間を指定したステップ角度で θ -2 θ スキャンを行います。
 - 現在 a2=-20、c2=-10° にいる場合
 - th2th -1 1 0.1
 - a2:-21° →-19° step 0.1° 、 c2:-10.5° →-9.5° step 0.05° のスキャンを行う。
 - このコマンドは scan a2 @a2+引数 1 @a2-引数 1 引数 2 c2 @c2+(引数 1)/2 @a2-(引数 1)/2 (引数 2)/2 のエイリアスです。

軸立て

- Sample-tab>UB Matrix-tab にて UB matrix を設定します。
- 注意点
 - SPICE では4軸回折装置で用いられているような UB matrix の決定方法の様にピークを多数スキャンして結晶の晶系と関係なく最小二乗法で観測値に合うように UB matrix を決めるのではなく、自分で入力した格子パラメタは変えません。
 - 例えば $\alpha, \beta, \gamma=90^\circ$ の時、直交すべき a*軸、b*軸の間の角度が 90.3° と観測された場合、 α, β, γ を 90° のままにしておくと、b*軸の反射に br コマンド等で移動すると 0.3° ω がピーク位置からずれます。これは FILMAN の時と同様です。
 - もし、計算結果をピーク位置に合わせたい時には、 α, β, γ を適宜変えてください。

1つ目のピークによる UB matrix の決定

- 一番上にある UB matrix モードを選ぶところ(薄い水色の選択項目)で、Define scattering plane vectors and 1 reflection モードを選びます。
 - 1つめのピークの位置に持っていき、ピーク角度を optimize します。
- ピークの optimize
 - 例としてピークが c2=-10、a2=-20 にあるとします。プラスマイナス 1° 、

ステップ 0.1° の ω スキャンは以下のようになります。

- `scan c2 -11 -9 0.1`

➤ もし現在角を中心にプラスマイナス 1° 、ステップ 0.1° の ω スキャンを行いたい場合は以下のコマンドでも同じスキャンが行われます。

- `center c2`

- しかも `center` コマンドではスキャン後にピークの重心角度に自動的に移動してくれます。

➤ ω が `optimize` されたら、その `c2` で $\theta - 2\theta$ スキャンを行う時は

- `th2th -1 1 0.1`

と入力すると現在角を中心に `a2` をプラスマイナス 1° 、ステップ 0.1° 、`c2` をプラスマイナス 0.5° 、ステップ 0.05° のスキャンが行われます。`th2th` コマンドはスキャン後に自動でピーク位置に移動しないので `fitting` 等を行い、ピーク角度に `drive` もしくは `mv` で移動してください。

• 格子定数の再設定

➤ `FILMAN` では `na` と入力すれば格子定数パラメータが変更されましたが、`SPICE` では計算して自分で入力します。

➤ `Sample > Lattice Constant` タブで観測された `A2` から格子定数を求めます。

➤ `Lattice Constants` に格子パラメーターを入れ、`Set Lattice Parameters` ボタン（濃い水色のボタン）を押すと `UB matrix` タブの格子定数に反映されます。このボタンを押さなくても計算結果をメモし、自分で `UB matrix` タブにて格子定数を手入力しても構いません。

• `UB matrix` の計算

➤ `Add` ボタン（緑色のボタン）斜め下のピークの指数を入れ、その横の薄い水色の選択項目は、現在の角度を利用するなら `using hkl and current motor position` モード、角度を指定したい場合は `using hkl and motor positions specified below` モードを選択した後で、`Add` ボタンを押し、`hkl` と角度情報が正しく入力されている事を確認します。

➤ 画面中央少し上の `Calculate UB Matrix Update Orientation Information` ボタン（濃い水色のボタン）を押し、`UB matrix` を計算させます。

➤ 計算結果が表示されるので `calculated h,k,l` がそれ程ずれていない事を確認し、`Accept Configuration` ボタンを押します。ずれていれば、格子パラメータがずれている可能性があります。格子パラメータを見直し、もう

一度 UB matrix を計算させ、合ったら accept します。

2つ目のピークによる UB matrix の再決定

- 一番上にある UB matrix モードを選ぶところ(薄い水色の選択項目)で、Define 2 non-colinear reflections モードを選びます。
- 既に UB matrix が設定されたので br コマンド、drive コマンドなどで2つめのピークの位置に持っていく事が出来ます。2つ目のピークを optimize します。optimize したら、
 - hkl を入力し、Add ボタンの2つ右のボタンで Reflection2 を選び、Add ボタンを押してピーク2の情報を入れます。
 - ここで RY が0で無い場合、Reflection1 の RY も変えて下さい。
 - Calculate UB Matrix Update Orientation Information ボタン(濃い水色のボタン)を押し、UB matrix を計算させ、calculated h,k,l がそれ程ずれていなければ、UB-matrix の決定は終了です。
- α, β, γ の再設定
 - reflection1 と reflection2 の計算角 ω (c2) がピーク位置とあわない場合は、入力した α, β, γ をずらす事で合わせる事が出来ます。
 - 例えば cubic 結晶において、本来 a 軸 (reflection1) と b 軸 (reflection2) が 90° をなすべきなのが、観測されたピークの ω が 90.3° なしていた場合、 γ を 90.3° にずらさないと、reflection2 の計算位置が観測されたピーク位置からずれます。他の晶系、散乱面でも reflection2 のピーク位置 (ω) が計算結果とずれる場合、適宜、 α, β, γ を調整してください。
 - Sample>Angle Utilities タブにある Calculate angle between Q's with above motor positions を使うと2つのピークポジション間の角を計算できます。
- conf ファイル
 - Log に UB matrix の conf ファイルの名前が出力されています。画面中央の濃い青いボタン Restore previous orientation を押し、conf ファイルを選べば後でこの UB matrix の状態に戻ることが出来ます。

マクロ

- Over nigh scan 等の長いスキャンや複雑なスキャンをマクロとして組む事が出来ます。ここでは簡単な組み方のみ示します。詳しくは spice のヘルプ（画面上の？マークをクリック）を参照して下さい。
- Loop（実際に入力する時はコメント文は入れないで下さい。）
 - loop i=5,10,2 : i=の後は start 値、end 値、step 値です。
 - drive temp %i : %i と%をつければ i の値をコマンド中で使えます。
 - scan h 0.5 1 0.1 k 0 1 0 e 0 preset monitor 100 : 特に字下げする必要はありません。
 - endloop : ループの終わりは endloop です。
 - ネスト構造（2重以上の loop）も可能です。
- scantitle
 - スキャンタイトルを書いておくと後々、見やすいです。
 - scantitle “h-scan at %i (K)”
 - のようにコメントを “ ” で囲みます。コメントの中の%i も i の値により変わります。
- Expand ボタンで loop を展開できます。
- Write to file で自分のフォルダのマクロフォルダに保存できます。
- Execute Macro ボタンでマクロを実行できます。
- マクロを実行中、残りの実行予定コマンドは Macro/Stack>View Command Stack タブにて見る事が出来ます。
- 注意：マクロを止めるとき
 - ABORT CURRENT COMMAND は現在のコマンドのみ中止し、STOP コマンドは残りの実行予定コマンドも全て中止します。

TEMCON

- TEMCON は起動させれば自動的に接続する様になっています。もし、接続しない時は、TEMCON をいったん終了し、再起動してください。
- Default では DC、No Temperature Read モードになっています。モードを変える時には Setup タブ>Hardware タブ>Temcon タブにて、まず緑色の Monitoring...Click to allow changes ボタンを押し、mode やパラメタを変えた後で、濃い水色の Update Parameters ボタンを押して変更を確定します。
- 動作は FILMAN での動作と同じです。

- dlmon はカウントを dlmon 値に小分けして、小分けした中で温度の統計、平均をとり、最終的な温度はそれらの算術平均になります。
 - 例えば 10000k monitor カウントするスキャンもしくはカウントで、dlmon が 1000 なら、1000k monitor 毎に平均温度を TEMCON から取得し、最後にそれらの値の平均をそのカウントの温度として表示します。

その他

- リモートコントロール
 - 開放研 3F、宿舎から VNC を使って SPICE が動作している PC に接続できます。
 - Windows user には Real VNC がお勧めです。
 - Mac user には Chicken of the VNC がお勧めです。
 - ✧ どちらもフリーウェアです。リモートコントロールをしたい場合はインストールしておいてください。
 - 接続 IP、パスワードはセキュリティ上ここには書きませんが、装置の目に付くところに貼っておきます。
- グラフおよび解析
 - D:¥5G_SPICE_user の exp* (*は begin コマンド時に割り振られる番号) フォルダに保存されます。このフォルダは windows 共有をかけていますので、外部から見る事が出来ます。自分の実験番号のフォルダ内の Datafiles フォルダにデータがあります。
 - windows user は internet explorer のアドレスバーに ¥¥172.16.21.18¥¥5G_SPICE_user と入力するとデータフォルダを見る事が出来ます。5G_G5 (Mac)のデスクトップに 5G_SPICE_user フォルダへのリンクがあります。実験中プロットをしたい時は、5G_G5 を使用してください。
 - mac user は FINDER のメニューバーの”サーバーに接続”で smb を用いてこのフォルダを見る事が出来ます。smb://172.16.21.18 と入力し、workgroup 名は ISSP を入力して下さい。パスワードはセキュリティ上ここには書きませんが、5G のモニターディスプレイに貼っておきます。

- また、G5 (172.16.21.19) の/Users/5g/5G-USER/5G_SPICE_DATA_FOLDER に 10 分に 1 度、データをコピーしています。G5 は ftp サービスを起動していますので、上記のファイル共有が使えない時は ftp を試してみてください。
- qu
 - qu の後にモーター名（もしくは coldtip、tsample などの pseudo motor）を入力すると現在値情報を返します。
 - qu だけ入力すると、モーターの現在値情報をまとめて返します。
- se
 - 通常、散乱面を張る反射の定義は Sample-tab > UB Matrix-tab にて行いますが、se コマンドで現在の角度（オフセット）を定義し直す事が出来ます。
 - se モーター名 定義角
 - 例：se c2 0
- bsht, att
 - ビームシャッター(bsht)、アテニュエーター(att)を動かす時は以下の様に drive コマンドで open もしくは close を指定します。
 - ◇ drive bsht open もしくは drive bsht close
 - ◇ drive att open open 3 mm が前者、6mm が後者です。
- PG filter
 - PG filter を出し入れするコマンドも drive です。in/out で指定します。
 - drive pg in
 - drive pg out
- リミット
 - コマンドからは upperlimit, lowerlimit を使って個別にモーターのソフトウェアリミットを変更できます。
 - ◇ upperlimit c2 110
 - ◇ lowerlimit c2 -230
 - SPICE 起動時もしくは begin コマンド時にこれらの値はリセットされます。ユーザーは自分の実験の間、有効なソフトウェアリミットを自由に設定して構いません。