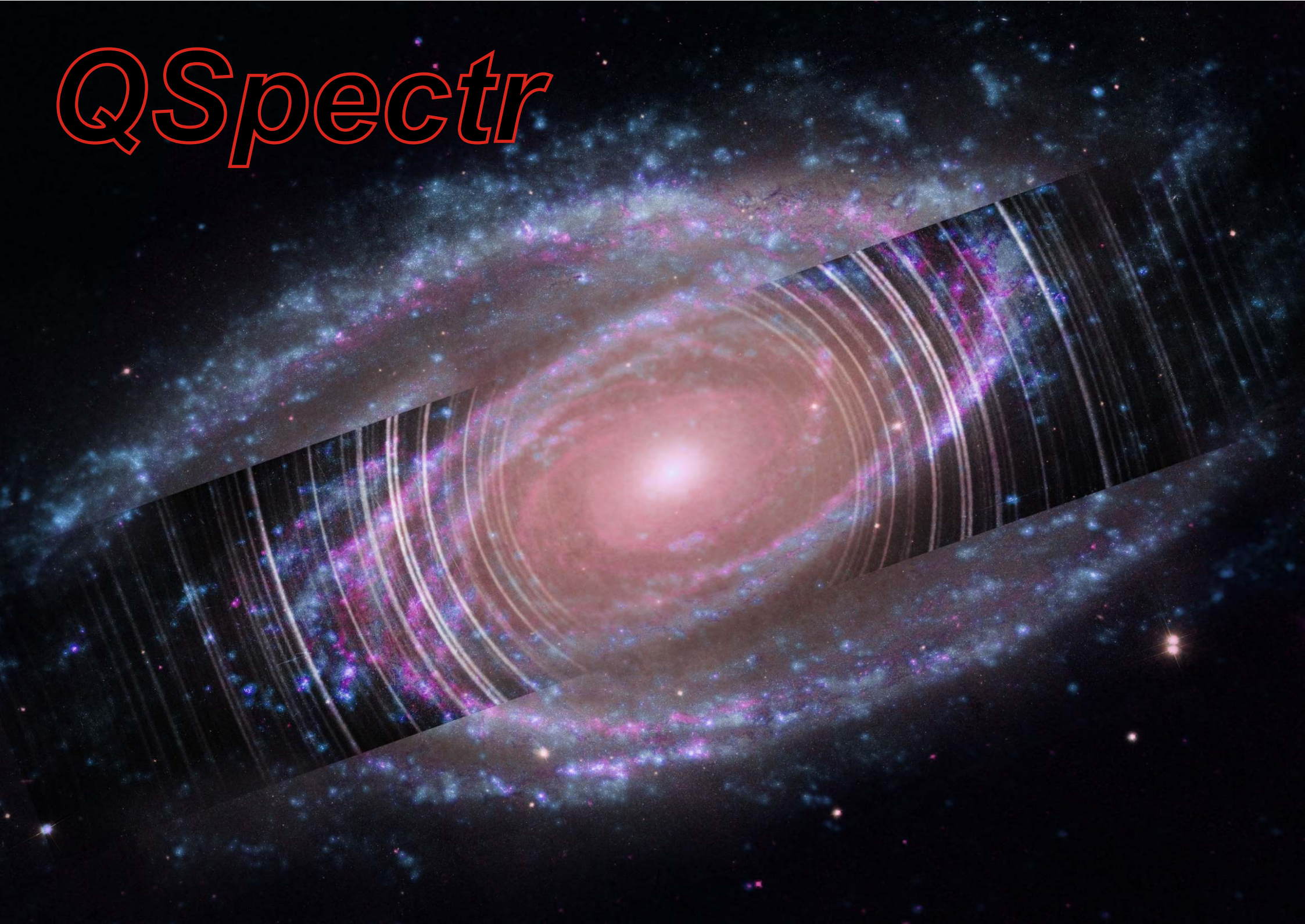


# QSpec



# QSpectr

## Руководство пользователя

Программа **QSpecr** предназначена для автоматической обработки рентгенограмм, снятых фотометодом в камере Дебая-Шеррера (дебаеграмм). Это эффективный, простой и удобный инструмент, значительно облегчающий и ускоряющий работу с дебаеграммами, в том числе невысокого качества, снятыми в камерах разного диаметра (57.3, 86 и 114.6 мм). Самой сложной операцией становится сканирование дебаеграммы. Программа самостоятельно устанавливает и центрирует изображение, строит профиль, вычитает фон, выделяет -линии, рассчитывает интенсивности пиков и межплоскостные расстояния, производит нормировку и записывает результат в виде текстового файла. Исследователь контролирует процесс и вносит необходимые коррективы, например, поправку на эксцентриситет образца или исправляет ошибочно выделенные -линии. Обработка одного спектра занимает несколько минут в зависимости от опыта исследователя и сложности спектра. Точность данных при съемке с эталоном мало уступает точности стандартного дифрактометра.

Программа является бесплатной (Freeware). Любое коммерческое использование программы **QSpecr** или ее продажа не разрешается. Программа поставляется на условиях "As is" (как есть). Разработчики не несут никакой ответственности за любой ущерб или убытки, связанные с использованием Программы, включая (но не ограничиваясь) потерю прибыли, прерывание деловой активности, выход из строя компьютера или любые другие коммерческие потери и убытки. Программа является законченным продуктом, никакие изменения (улучшения) в дальнейшем не предполагаются. Использование программы является согласием с данными условиями.

## Введение

1. Программа **QSpecr** предназначена для работы в среде Windows 98/2000/XP. Установка не требуется. Программа представляет собой исполняемый файл размером 495104 байт. Для работы скопируйте программу в удобную для Вас папку. В процессе работы **QSpecr** создает файлы конфигурации. Поэтому, программа не может работать непосредственно с носителя, который защищен от записи (например, CD-ROM).

Для комфортной работы желательно разрешение дисплея не менее 1024x768 точек. Программа работает в полноэкранном режиме.

2. Программа адаптирована для обработки дебаеграмм, снятых симметричным методом. Если Ваша дебаеграмма снята асимметричным методом (с двумя отверстиями), Вы можете обработать с помощью программы **QSpecr** ее симметричную область.

3. Скорость работы алгоритма **QSpecr** приблизительно пропорциональна тактовой частоте процессора. При частоте 3000 МГц время первичной обработки дебаеграммы, снятой в камере РКД-57.3 и отсканированной с разрешением 1200 dpi составляет 7 секунд. При частоте процессора 160 МГц время первичной обработки около 90 секунд.

4. Программа может обрабатывать файлы с любым разрешением сканирования. Оптимальным является разрешение 1200 dpi (dot per inch). При меньшем разрешении пропорционально уменьшается точность обработки. Более высокое разрешение не увеличивает точность, однако потребует значительно больших затрат времени на обработку. Программа распознает графические файлы Windows Bitmap Grayscale (\*.bmp) и JPEG (\*.jpg).

Перед тем, как воспользоваться программой **QSpectr**, Вы должны оцифровать (отсканировать) Вашу дебаеграмму. Советы по сканированию даны в конце инструкции (приложение 2). Вы можете ознакомиться с работой программы на уже отсканированных образцах дебаеграмм (Samples).

## Обработка дебаеграммы

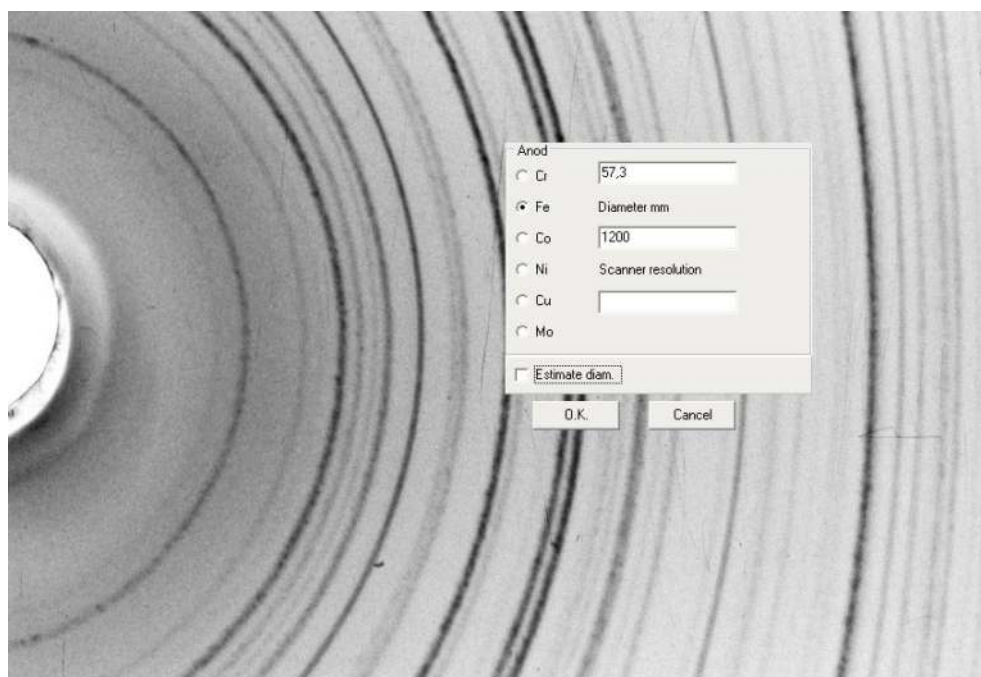
Обработка состоит из ряда последовательных этапов. На каждом этапе открывается новое окно:

- а) Диалог открытия файла
- б) Построение профиля рентгенограммы
- б) Выделение и сортировка пиков
- г) Диалог записи результатов

Управление процессом осуществляется командами меню и рядом операций при помощи мыши (см. приложение 1 - список операций).

**Внимание!** Поскольку алгоритм **QSpectr** основан на анализе формы линий на дебаеграмме, для нормальной работы программе требуется изображение, на котором присутствует хотя бы несколько хорошо заметных рентгеновских линий. Дебаеграммы совсем без линий или дебаеграммы с несколькими очень слабыми линиями программа обработать не сможет и выдаст сообщение об ошибке. Съемку таких веществ рекомендуется производить с добавлением эталона.

**1. Открытие файла.** Запустите программу двойным щелчком мыши или выделив иконку и нажав клавишу "Enter". Войдите в меню (**File - Open**). В стандартном диалоговом окне откройте нужный файл с расширением \*.bmp или \*.jpg. На экране появится отсканированное изображение дебаеграммы в масштабе 1:1 и диалоговое окно (рис. 1). Вы можете просмотреть растровое изображение, используя полосу прокрутки внизу экрана.



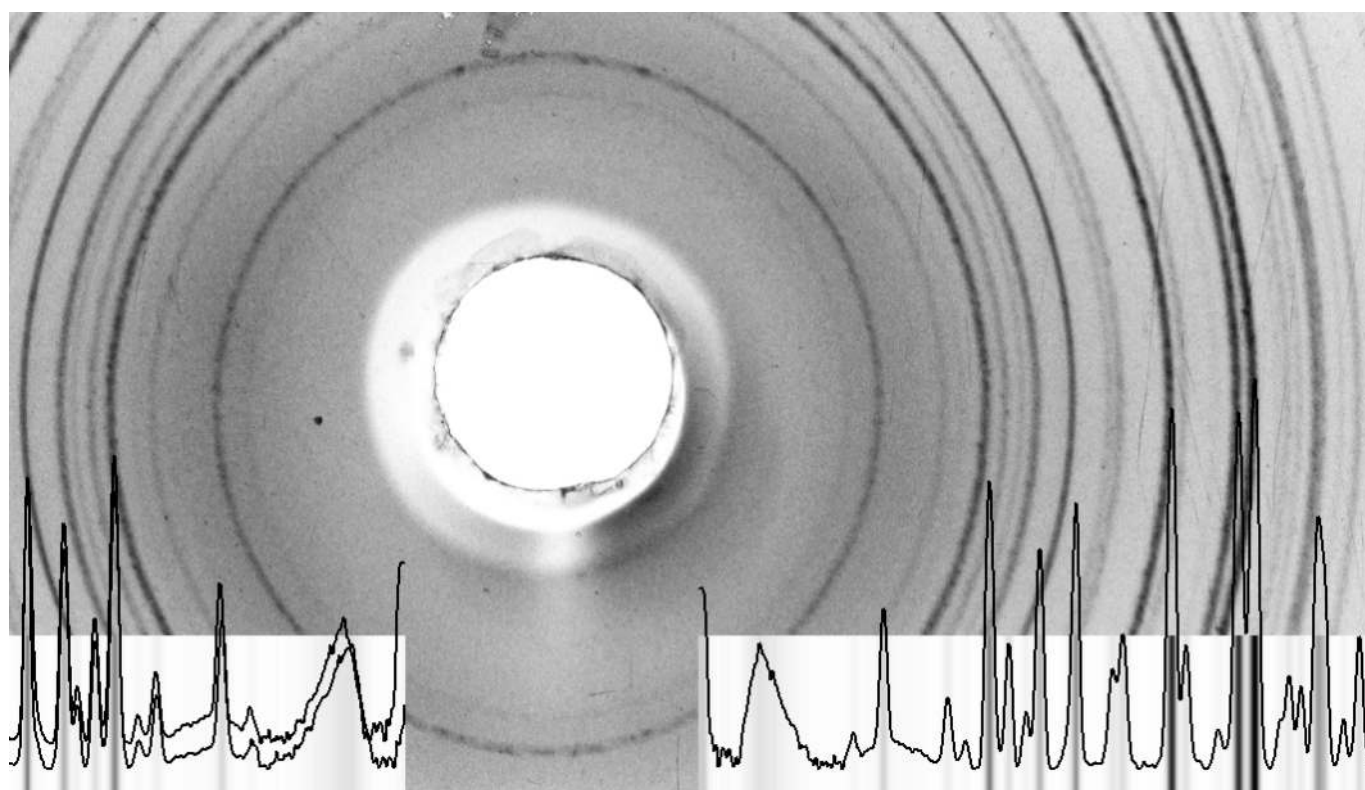
**Рис. 1.** Изображение дебаеграммы и диалоговое окно параметров обработки

Установите в соответствующих полях диалогового окна диаметр камеры, разрешение сканирования и материал анода. Эти параметры запоминаются и будут выведены при следующем запуске программы.

Диаметр камеры отличается от эффективного диаметра регистрации. Это вызвано, с одной стороны, конечной толщиной фотопленки, с другой - деформацией пленки при обработке. **QSpectr** может самостоятельно рассчитать эффективный диаметр регистрации, исходя из конфигурации рентгеновских линий. Точность расчета зависит от качества дебаеграммы. При большом количестве тонких и контрастных линий точность обработки с расчетным диаметром может превышать точность обработки с предустановленным диаметром. Для расчета диаметра установите флажок в поле "Estimate diam." При этом значение диаметра в поле "Diameter" будет игнорироваться.

Наивысшая точность достигается при съемке с эталоном и последующей коррекции (см. п. 4.1.)

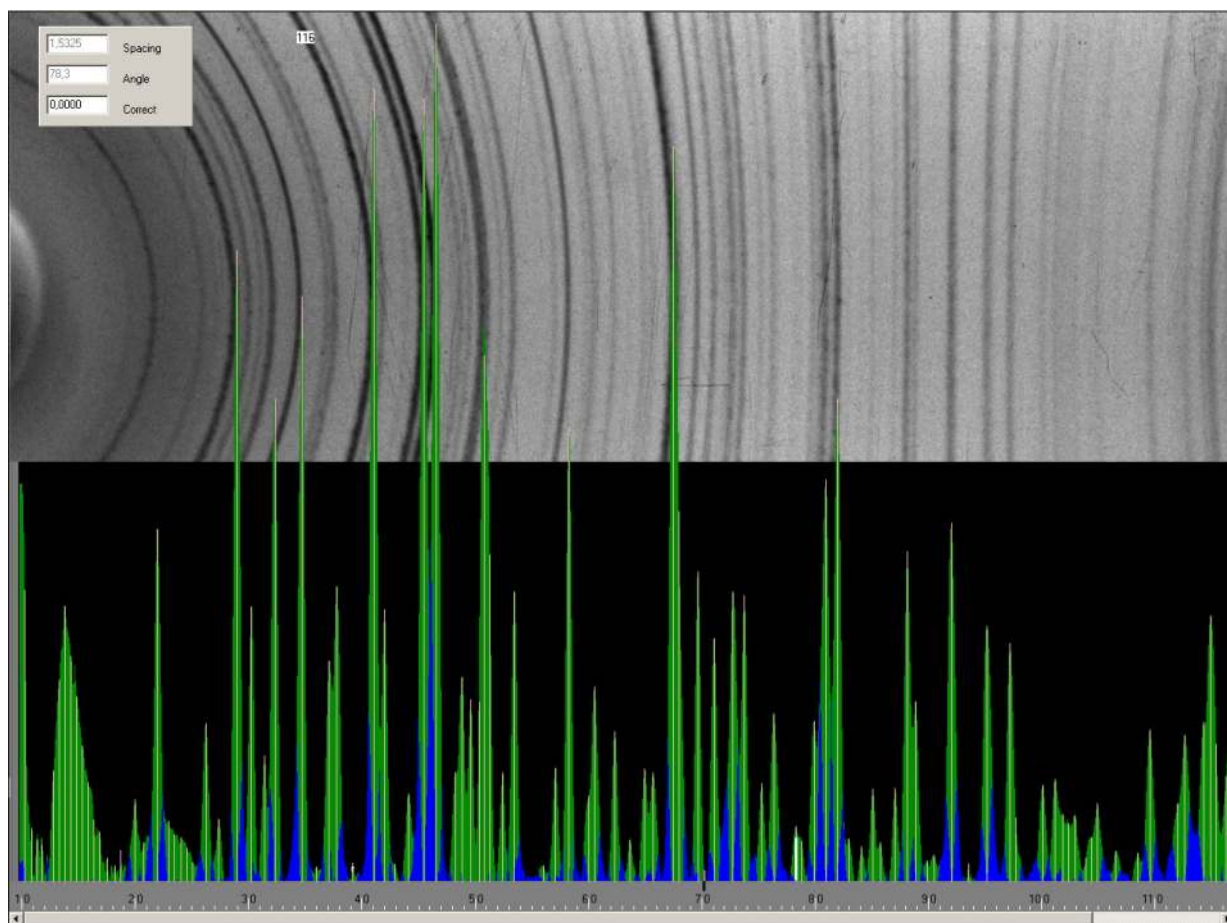
**2. Построение профиля.** Если параметры обработки установлены правильно, нажмите кнопку ОК. Программа строит профиль, который выводится на экран на фоне исходного растрового изображения (рис. 2).



**Рис. 2.** Изображение дебаеграммы и фрагменты профиля

В правой части экрана **QSpec**tr показывает профиль правой половины дебаеграммы. В левой части экрана выводится профиль левой половины дебаеграммы, и одновременно зеркальное изображение профиля правой половины. Это необходимо для оценки симметричности дебаеграммы. При отклонении от симметричности (например, при смещении образца от центра камеры в направлении поперек рентгеновского пучка) **QSpec**tr пытается наилучшим образом совместить левую и правую половины профиля. Как правило, это удастся сделать только для среднего диапазона углов, а в области больших углов будет наблюдаться расхождение. Используя полосу прокрутки, просмотрите все растровое изображение и выведенные профили дебаеграммы.

**3. Поиск пиков.** Войдите в меню (**Image** - команда **Right-Left-Both**) и выберите для дальнейшей обработки правую или левую половину дебаеграммы, или их сумму. Если Вы обрабатываете обе половины одновременно (команда **Both** в меню **Image**), точность определения места одиночного пика может оказаться выше, однако разрешение близко расположенных пиков будет хуже. Программа обрабатывает профиль и выделяет пики. Результаты обработки выводятся в новом окне (рис. 3).



**Рис. 3.** Окно поиска и сортировки пиков

В нижней половине экрана на черном фоне выводится зеленый профиль дебаеграммы. Все найденные пики отмечаются тонкими вертикальными линиями, которые подсвечиваются при приближении курсора. Синим цветом показан остаток профиля после вычитания найденных пиков.

Под профилем расположены линейка, градуированная в углах  $2\theta$ , и полоса прокрутки. Слева от стандартного курсора появляется вспомогательный курсор, который индицирует положение парной  $d$ -линии.

В верхней половине экрана выводится растровое изображение дебаеграммы. Это сделано для того, чтобы исследователь мог визуально сравнить линии на исходном изображении и результат его автоматической обработки. Как правило, алгоритм программы **QSpectr** находит многочисленные ложные пики, которые необходимо убирать вручную (**п. 6**).

**4. Ввод поправок.** Программа *QSpectr* производит автоматическую корректировку эксцентриситета образца в направлении поперек рентгеновского пучка. Эксцентриситет образца в направлении вдоль пучка можно скорректировать вручную лишь при наличии эталонных линий. Также можно ввести численное значение поправки, характерное для данной камеры Дебая-Шеррера.

Для ввода поправок предназначено небольшое диалоговое окно, расположенное в левой верхней части экрана (рис. 4). Поле Spacing отображает межплоскостные расстояния, а поле Angle - углы  $2\theta$ , соответствующие текущему положению главного курсора. Поправка вводится двумя способами.

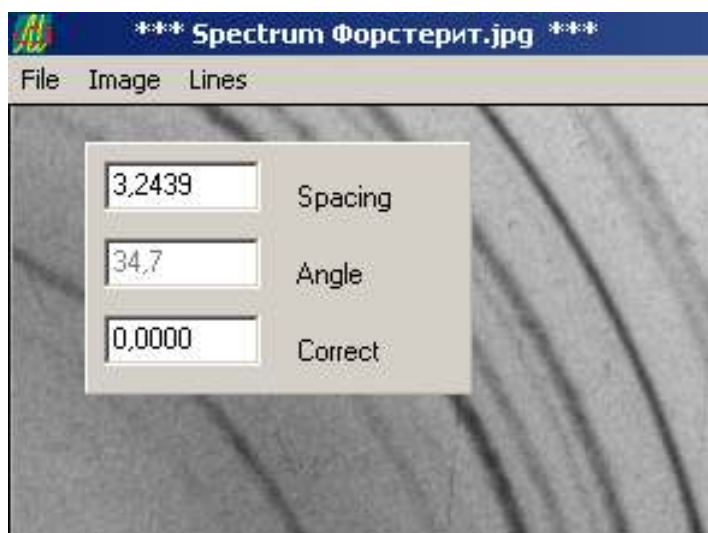


Рис. 4. Диалоговое окно “коррекция”

**4.1.** Поправка по известной линии эталона. Выделите курсором линию, для которой заведомо известно межплоскостное расстояние, и выполните двойной щелчок левой кнопкой мыши по линии. При этом число в поле Spacing зафиксируется. Введите в поле правильное значение межплоскостного расстояния и нажмите клавишу “Enter”.

**4.2.** Численная поправка в поле Correct. Как правило, для каждой конкретной камеры Дебая-Шеррера поправка имеет свое характерное усредненное значение, этим можно воспользоваться для коррекции при съемке без эталона. Обратите внимание, что численная поправка в поле Correct может принимать как положительные, так и отрицательные значения. Введите поправку и нажмите клавишу “Enter”. Этот метод обеспечивает меньшую точность, чем по эталонным линиям.

Программа *QSpectr* использует единое значение поправки на эксцентриситет для всего диапазона углов рентгенограммы. Это несколько снижает точность обработки, поскольку погрешность, вносимая поглощением образца, меняется в зависимости от угла  $2\theta$ . При съемке с эталоном рекомендуется вводить поправку по той линии эталона, которая расположена в наиболее значимой зоне рентгенограммы. Для увеличения точности следует производить съемку образца минимально возможного размера (порядка 0.1 мм). При этом роль поглощения также сводится к минимуму.

**5. Сортировка пиков.** Войдите в меню **Lines** и выполните команду **AlphaBeta**. Программа произведет автоматическую сортировку  $\alpha$ - и  $\beta$ -линий. Под профилем выводятся метки всех  $\alpha$ -линий, найденных автоматически. Эти линии подсвечиваются желтым при приближении курсора и не записываются в файл результатов обработки \*.DGM.

Программа опознает  $\beta$ -линию, если ее высота находится в пределах 0.2...0.5 от высоты парной  $\alpha$ -линии. Частота пика оказывается выше или ниже этих пределов,

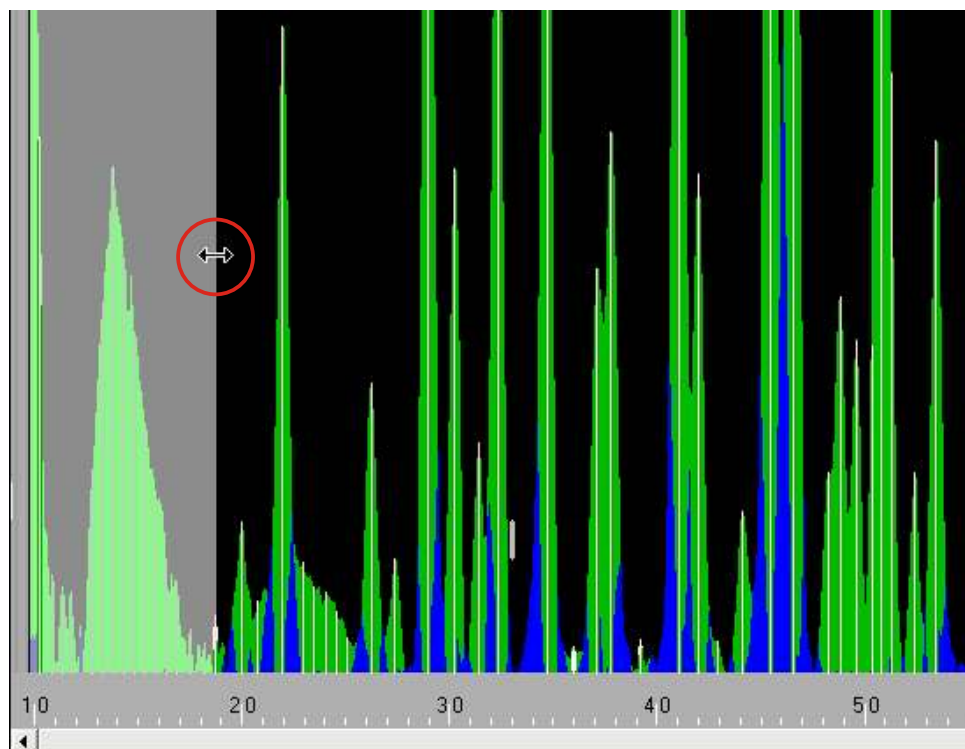
например, при наложении линий. Поэтому после автоматической сортировки необходимо внимательно просмотреть всю рентгенограмму и вручную исправить неточности автоматической обработки.

Вы можете добавить пропущенные пики, убрать ложные пики и выделить неопознанные -линии.

Если Вы считаете, что программа пропустила пик, установите курсор на место предполагаемого пика, и щелкните левой кнопкой мыши при нажатой клавише Ctrl. В месте щелчка появится новый пик. Это действие нельзя отменить, однако можно сделать вновь выделенный пик неактивным (желтым), щелкнув по нему правой кнопкой мыши.

**6. Удаление ложных пиков.** Как правило, программа «находит» большое количество ложных пиков в области засветки на малых углах, а также в конце дебаеграммы. Это объясняется алгоритмом поиска пиков. *QSpecr* сравнивает профиль с неким осредненным пиком. В области фоновой засветки или гало программа «считает», что это один широкий пик, и пытается представить его в виде суммы нескольких узких пиков. Также возможны ложные пики при наличии на фотопленке глубоких вертикальных царапин.

Особенно большое количество ложных пиков обычно появляется на краях рентгенограммы. Вы можете изменить (уменьшить) **рабочий угловой интервал**, из которого программа считывает данные в файл результатов. Подведите курсор к самому краю черного поля. Курсор превращается в двойную стрелку (рис. 5). Нажмите левую кнопку мыши и потяните стрелку мышью. Образуется полупрозрачная шторка, которая закрывает часть пиков. При записи результатов закрытые пики игнорируются.



**Рис. 5.** Выделение интервала углов для записи в файл

**Ложные пики** в середине рентгенограммы **удаляются при помощи мыши**. Наведите курсор на линию и щелкните мышью. При щелчке левой кнопкой подсветка линии становится белой, при щелчке правой кнопкой подсветка линии становится желтой. Все линии белого цвета записываются в выходной текстовый файл, желтые линии игнорируются. Перед записью результатов убедитесь, что все ложные пики и -линии подсвечиваются желтым цветом при приближении курсора.

7. **Запись результатов обработки.** Программа сохраняет полученные результаты в текстовый файл с расширением \*.dgm (команда **File-DGM**). Файл состоит из заголовка и массива информации (рис. 6).

<b>Заголовок</b>	Pasp,15.02.2008,11,PARM-dron-3,-,9.31,131.22,.05,FE;	
<b>Начальный угол</b>	— 11.9198	0
	■ <b>D</b>	— 6.5080 21 — <b>Нормированная</b>
		<b>интенсивность</b>
		5.8479 14
		4.7956 11
		.....
<b>Массив</b>		2.5130 67
<b>данных</b>		2.4866 100
		2.1849 32
		.....
		1.2752 6
		1.2625 11
		1.2465 13
<b>Конечный угол</b>	— 1.0624	0

**Рис. 6.** Структура файла результатов обработки (\*.dgm)

Первая колонка массива данных содержит межплоскостные расстояния, вторая колонка - нормированную интенсивность пиков. Пик максимальной интенсивности имеет интенсивность = 100. Первая и последняя строки (интенсивность = 0) отображают не линии, а начальный и конечный углы обработки.

Заголовок файла и структура массива данных предназначены для согласования дифракционных данных с форматом программы TR (Институт стекла, 1998 г.) для анализа дифракционных спектров. Если Вы работаете с другими программами анализа спектров, заголовки не используются.

Команда **File-SPC** предназначена для записи рентгеновского спектра в формате **SPC** программы TR (Институт стекла) для анализа дифракционных спектров. Если Вы работаете с другими программами, команда не используется.

## Приложения

### 1. Операции, используемые при обработке профиля:

- Наведение курсора на пик: выделенный пик подсвечивается
- Щелчок по пику левой кнопкой мыши: пик переводится в разряд активных (белая подсветка)
- Щелчок по пику правой кнопкой мыши: пик переводится в разряд неактивных (желтая подсветка)
- Двойной щелчок мыши по пику: межплоскостное расстояние данного пика фиксируется в поле Spacing. Для возвращения в режим просмотра пиков необходимо в поле Spacing ввести новое значение межплоскостного расстояния и нажать клавишу "Enter".
- Ctrl + щелчок левой кнопкой мыши: добавление пика.
- Ввод нового значения межплоскостного расстояния в поле Spacing + Enter
- Ввод поправки в поле Correct + Enter
- Установка рабочего интервала углов: манипуляция мышью.



## 2. Советы по сканированию дебаграмм.

**Отсканируйте** дебаграмму с разрешением **1200** точек на дюйм. Разрешение 1200 dpi оптимально для работы программы. При меньшем разрешении снижается точность обработки, при более высоком разрешении точность не увеличивается, а лишь возрастают размеры файла и время его обработки. Используйте сканер, работающий на просвет или приставку к сканеру для работы с прозрачными материалами. Желательно, чтобы сканер мог обрабатывать фотоматериалы с оптической плотностью не менее 2.5-3.0 D.

Сканирование производите в режиме **RGB** или **Grayscale 8 бит**. Имейте ввиду, что программа **QSpectr** обрабатывает файлы только форматов **Grayscale BMP, Grayscale JPEG и RGB JPEG**.

Используйте современные модели сканеров и режим профессионального сканирования. В этом режиме драйвер сканера предлагает определить уровень черного и уровень белого на гистограмме. Установите при помощи драйвера уровень черного немного ниже максимального почернения на фотопленке, а уровень белого приблизительно на 20% выше самых светлых участков дебаграммы (рис. 7). Значение **гамма** (среднее поле под гистограммой) установите равным **1.6-1.9**. Старайтесь расположить дебаграмму параллельно рамке сканера.

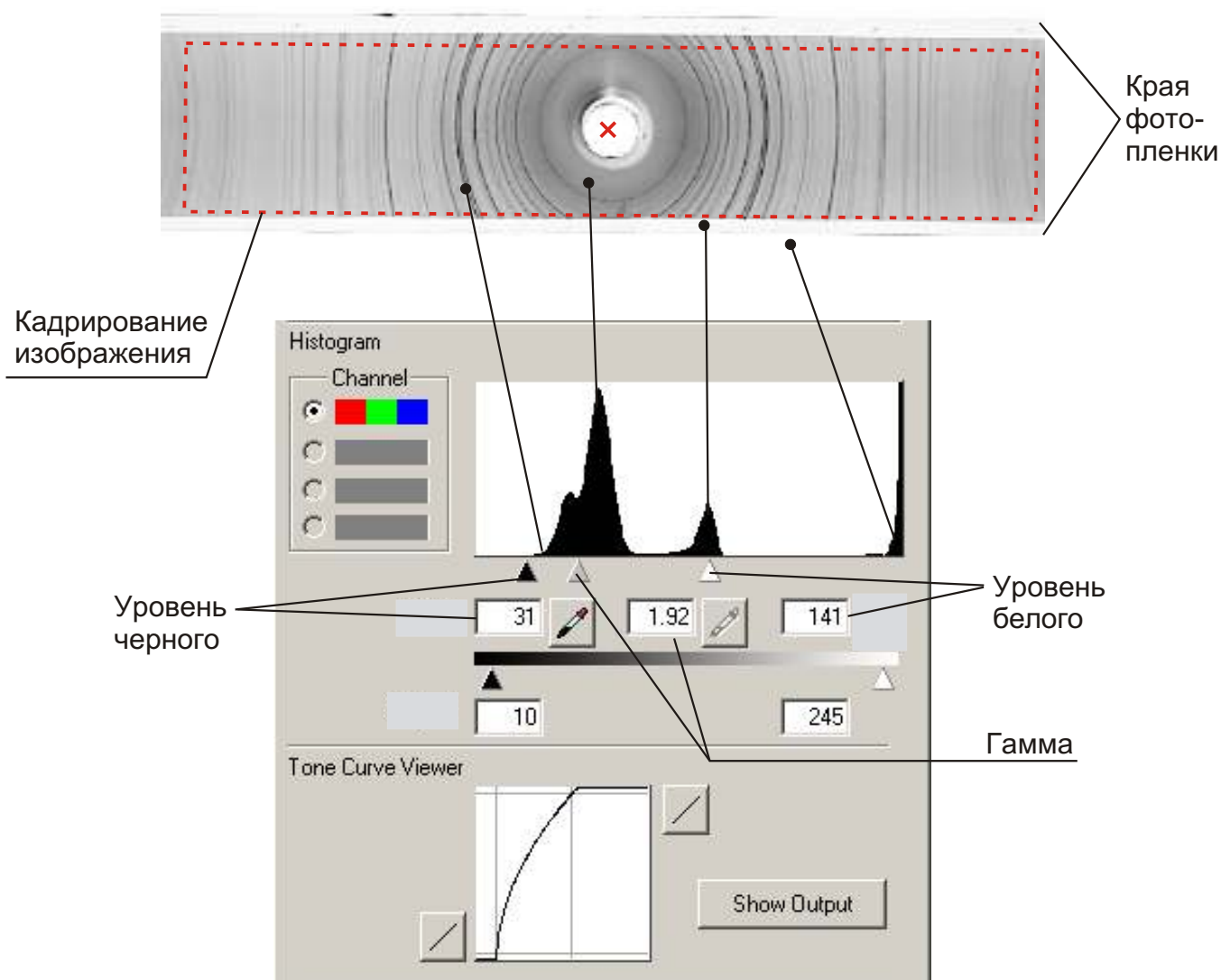


Рис. 7. Использование гистограммы при сканировании.

В любом графическом редакторе **скадрируйте изображение** таким образом (рис. 7), чтобы в кадр вошло только собственно изображение дебаеграммы (прямоугольник с рентгеновскими линиями и отверстием в центре). Незасвеченные края пленки необходимо обрезать. Геометрический центр изображения должен приблизительно совпадать с центром «колец» на дебаеграмме.

Не пытайтесь после сканирования «улучшить» контрастность или яркость изображения в графическом редакторе при помощи инструментов “Contrast”, “Brightness”, “Levels”, “Curves”, “Gamma” и тому подобных. **Помните: вся информация с дебаеграммы считывается непосредственно в момент сканирования. Никакие манипуляции с изображением после сканирования не увеличивают количество информации и не влияют на результаты обработки программой *QSpectr*.** Результат обработки малоконтрастной дебаеграммы будет одинаков, используете ли Вы исходное изображение или «улучшите» его при помощи графического редактора.

В редких случаях, если программа вообще отказывается обрабатывать малоконтрастное изображение, можно все же воспользоваться графическим редактором и увеличить контраст. Если Вы хорошо владеете программой «Photoshop», Вы можете попытаться аккуратно удалить **глубокие вертикальные царапины**, не затрагивая собственно дифракционных линий. Вертикальные царапины создают ложные пики (которые можно удалить и позднее на этапе сортировки пиков). Горизонтальные царапины, пятна, неравномерная засветка и другие подобные дефекты практически не влияют на работу алгоритма программы *QSpectr*.

Сохраните файл в несжатом виде (\*.bmp, Grayscale) или в сжатом виде (\*.jpg, Grayscale или RGB). Не используйте чрезмерную степень сжатия, если Вы планируете обрабатывать изображение с максимальной точностью. Дело в том, что алгоритм сжатия JPEG использует разбиение битовой карты на квадраты 8x8, при этом на изображении появляется грубозернистый шум с характерным периодом 8 пикселей. В этом случае лучше отказаться от сжатия и хранить файлы в формате BMP Grayscale.

Случается, что по неясным причинам программа не может обработать изображение дебаеграммы и выдает сообщение об ошибке. Попробуйте заново отсканировать дебаеграмму в иной тональности или по-другому ее скадрировать. Некоторые малоконтрастные изображения и дебаеграммы с интенсивной засветкой в центральной части программа обработать не сможет. Алгоритму *QSpectr* требуется для работы хотя бы несколько достаточно интенсивных линий, иначе он просто не сможет правильно отцентрировать изображение. Если у Вас такая дебаеграмма, попробуйте заново отсканировать образец с добавлением эталона.

**Успешной работы!**