

Lisa 1. Programmi AXES põhifunktsioonide kasutamishend

1. Programmi käivitamine. Tavaliselt käivitub programm automaatselt töö alustamisel. Uus käivitamine on vajalik vaid siis, kui tekkis viga programmi täitmisel ja programm lõpetas töö:
 - 1.1 mine kataloogi, kus asub fail AXES.EXE;
 - 1.2 käivita programm AXES sisestades klaviatuurilt AXES.

2. Difraktsiooniandmete lugemine failist:
 - 2.1 F3 Load või Measure →¹ Import pattern F3;
 - 2.2 vali õige formaat (enamasti ICDD.PD3 92) → OK;
 - 2.3 sisesta lahtrisse Name faili asukoha kataloog ja faili nimi või vali fail hiirega lahtrist Files;
 - 2.4 vali käsk Open.

3. Töödeldud difraktsiooniandmete salvestamine faili:
 - 3.1 F2 Save või Measure → Export pattern F2;
 - 3.2 edasi nagu 3.2 ...

4. Difraktogrammi kujutamine graafikul:
 - 4.1 F4 Graphics või Graphics → Graphics F4;
 - 4.2 olulised käsud:
 - DEL/INS: tähistuspunktide kustutamine (hiire vasakpoolne klahv) ja lisamine (hiire parempoolne klahv);
 - ZOOM IN: graafiku suurendamine, hiire vasak klahv märgib valitava ristkülikukujulise osa ühe nurga asukoha ja seejärel parem klahv märgib diagonaalis vastasnurga ning teostab suurenduse;
 - FULL SIZE: näitab graafikut algsuuruses;
 - DISTANCE: kahe punkti vahekauguse määramine, mõõdetud väärtused on graafiku all kahes parempoolses numberlahtris;
 - COMPRESS: graafiku kokkusurumine;
 - LABEL: märgitud punktide tähistuse (järjekorranumber → kriips-punkt e. sõrm (*finger*) → tasandite vahekaugus → joone indeksid) tsükliline muutmine;

¹ Nool (→) on vaid eraldusmärk tekstis kahe sammu vahel.

- SAVE: salvestab pildi programmi GRAPHER jaoks alamkataloogi /GRAPH/;
- OK: väljumine graafikult, märgitud punktid jäetakse meelde;
- CANCEL: väljumine graafikult, viimase graafilise töö raames tehtud märgistused ei jäeta meelde.

5. Erinevate difraktogrammide võrdlemine graafikul:

- 5.1 Graphics → Compare;
- 5.2 Import pattern loeb sisse võrdlusdifraktogrammi või Import peaks loeb sisse võrdlusjoonte asukohad;
- 5.3 Diff märgib ära difraktogrammid vahe leidmiseks;
- 5.4 Export Diff salvestab vahe difraktogrammi faili;
- 5.5 Sum märgib ära difraktogrammid summa leidmiseks;
- 5.6 Export Sum salvestab summaarse difraktogrammi faili;
- 5.7 Graphics näitab loetelus olevaid difraktogramme.

6. Difraktogrammi eeltöötlus:

- 6.1 Correct → Pattern pre-processing;
- 6.2 märgi hiirega vajalikud töötled ja sisestada õiged parameetrid;
- 6.3 Start → Graphics;
- 6.4 kui töötled tulemused rahuldavad, siis välju vajutades:
Accept all - jätab meelde nii töödeldud difraktogrammi andmed kui ka joonte asukohad;
Accept peaks - jätab meelde ainult leitud joonte asukohad.

7. Fooni joone märkimine käsitsi:

- 7.1 Correct → Background manual;
- 7.2 käsku Import Background saab kasutada varem salvestatud fooni sisse lugemiseks;
- 7.3 Graphics;
- 7.4 kasutades käsku DEL/INS märkida 8..15 foonile kuuluvat punkti → OK;
- 7.5 käsku Export Background saab kasutada leitud fooni salvestamiseks faili;
- 7.6 subtract BackGround.

8. Joonte koordinaatide numbriline toimetamine:

- 8.1 Peaks → Peak Editor → või Alt E;

- 8.2 mõned olulised parameetrid ja märgid:
2 θ max joone asukoht 2 θ skaalas;
I_{max} joone kõrgus impulssides või suhtelistes ühikutes;
S joone pindala;
(•) Meas. joon kuulub uuritavale objektile;
(•) Std. joon kuulub standardainele;
(•) None joon on deaktiveeritud;
- 8.3 Print salvestab/trükib jooned tabeli kujul faili PEAKS.LST.

9. Difraktsioonijoonte koordinaatide salvestamine faili:

- 9.1 Peaks → Export peaks;
9.2 valida õige formaat, milleks on enamasti AXES 1.9B ASCII;
9.3 edasi nagu 3.3 ...

10. Difraktsioonijoonte koordinaatide lugemine failist:

- 10.1 Peaks → Import peaks;
10.2 edasi nagu 10.2 ...

11. Difraktsioonijoonte asukohtade kalibreerimine. Eelnevalt peavad sisse olema loetud standardaine difraktogramm ja joonte asukohad:

- 11.1 Correct → 2-Theta correction;
11.2 sisesta joonte teoreetilised asukohad lahtrisse theor.val.;
11.3 salvesta need käsuga Standards → vali standardi tüüp (näit. SRM 676) → Save → Accept;
11.4 kui eelnevalt on märgitud standardi kõik eksperimentaalsed jooned (Peak Editor → (•) Std.), siis kasuta käsku 2-Theta ja lahtrisse observ.val. ilmuvad eksperimentaalsed väärtused;
11.5 kontrolli, kas lahtrites observ.val. ja theor.val. olevad arvupaarid langevad kokku veapiires $\pm 0.2^\circ$, 2 θ . Kui ei, siis deaktiveeri nad lahtris active;
11.6 Calibrate;
11.7 vali kalibreerimisfunktsioon, milleks on tavaliselt polynom of n-th deg;
11.8 calc → graph.delta ja kalibreerimiskõver ilmub graafikule;
11.9 kui kõver on õige, siis jäta meelde kõvera parameetrid (vastav dialoog avaneb käsuga Param);
11.10 OK → Accept → Accept ja satute tagasi põhimenuisse;

- 11.11 loe sisse uuritava aine difraktogramm ja jooned;
 - 11.12 2-theta correction → calibrate → corr peaks → graphics → kontrollida joonte asukohtade nihet → OK → Accept → Accept;
 - 11.13 salvestada joonte parandatud asukohad.
12. Joonte indekseerimine programmiga TREOR:
- 12.1 Lattice/Phase → Lattice → < > TREOR → Accept → Yes (Overwrite);
 - 12.2 Input data file : AXES.TRE;
 - 12.3 Output printer file.: DIFxx.TRE;
 - 12.4 vaata tulemusi failist DIFxx.TRE: File/Sys → <) > Text-editor Alt T → File → Open... → sisesta DIFxx.TRE → leia üles võretüüp ja võreparameetrid;
13. Võreparameetri täpsustamine programmiga LSUCRE:
- 13.1 Lattice/Phase → Lattice → lattice data Alt A;
 - 13.2 sisesta ligikaudsed võreparameetrid (saadakse failist DIFxx.TRE);
 - 13.3 dialoogis Crystal system vali õige kristallsüsteem;
 - 13.4 mine tagasi põhimenüüsse ja sealt alates → Lattice/Phase → Lattice → <) > LSUCRE → Yes (overwrite) (→ 2) → N;
 - 13.5 vaata tulemusi failist AXES.LST ja leia võreparameetrid ning nende standardhälbed.
14. Töö lõpetamine:
- 14.1 salvesta difraktogramm ja difraktsioonijoonte koordinaadid failidesse;
 - 14.2 File/Sys → Exit program Alt X → Accept → Esc;
 - 14.3 Kontrolli, et kõik viimati läbiviidud töö jooksul saadud/tekitatud andmefailid asuvad Sinu kodukataloogis.