

MySRIMwb に WS を追加する

ここでは、ご自分の用途に合わせて WS を追加・削除する作業を説明します。

主な手順は次の通りです。

1. SRIM-2013 で Stopping/Range Table を計算して
結果をテキスト形式で保存します（これを **SRIMout.txt** と呼ぶことにします）
2. **srOut2Ws.xlsm** で、SRIMout.txt を読み込み、SRIMfit 用の WS に変換
3. 変換された WS を、**MySRIMwb..xlsx** に追加。

尚、SRIM-2013の使い方については、『京大 Takaaki AOKI氏の SRIM Tutorial』

<http://sakura.nucleng.kyoto-u.ac.jp/~aoki/SRIM/index.html>

が参考になるとと思います。ここに インストール方法や SR.exe の使い方が詳しく解説されています。

(1) srOut2Ws.xlsm について

SRIM-2013 Stopping/Range Table の計算結果テキストファイル を読み込んで、SRIMfit 用の WS に変換するマクロです。

今まで手動にてコピーしていた作業を、マクロで自動化しました。

~/util¥srOut2Wsに入っている

srOut2Ws.xlsm

です。

_SRIM2013Output_sample

_SRIMout_sample

srOut2Ws.xlsm

SrOut2Ws.xlsm 変換例

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L	M	N	O	P	Q			
1	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17			
2	2	SRIMfit~data table										please fill in		fill	from SRIM output					
3	3	SRIM ver=	SRIM-2013.00	Gas?		== Target	Composition ==				please change in		change	for appropriate value/formula						
4	4	Ion Z=	92			Atom	Atom	Atomic	Mass		Multiply Stopping by: for Stopping Units									
5	5	Ion A=	238			Name	Num	[N]	[N]		unitID	Env. Factor		ThisWSname Uranium in Gold						
6	6	Target=		amu	short name	Au 79 100 100									Corded					
7	7	old													1	1.931E+02	eV / Angstrom			
8	8	TrgDens=	1.9311E+01	g/cm3											2	1.931E+03	keV / micron			
9	9		5.9040E+22	atoms/cm3											3	1.931E+03	MeV / mm			
10	10	BraggCrot=	0.00N												4	1.000E+00	keV / (ug/cm2)			
11	11									5	1.000E+00	MeV / (mg/cm2)								
12	12	Emin=	20	2.38	10eV/A															
13	13	Emax=	228	238000000	10eV/A										6	1.000E+03	keV / (mg/cm2)			
14	14	if Gas; Ptbl =		Pa											7	3.271E+02	eV / (1E15 atoms/cm2)			
15	15	if Gas; Ttbl =		degC											8	6.054E-02	L.S.S. reduced unit			
16	16														0	== 5 : MeV/(mg/cm2)				
17	17	SRIM Stopping Power Unit = [MeV/(mg/cm2)]																		
18	18	Ion			dE/dx Elec	dE/dx Nucl	dE/dx tot	Projected		Longitudinal			Lateral							
19	19	Energy			[MeV/u]	[MeV/(mg/cm2)]		Range	[um]	Straggling	[um]		Straggling	[um]						
20	20	2.5 keV	0.000011	5.286E-02	9.791E-01	1.032E+00	15 A	0.00150	11 A	0.00110	8 A	0.00080								
21	21	2.75 keV	0.000012	5.544E-02	1.031E+00	1.086E+00	16 A	0.00160	11 A	0.00110	8 A	0.00080								
VerLog 雛形ws Txt変換実行 Csv変換実行 Uranium in Gold																				

マクロの動作は単純です。

“Txt変換実行” シートから、変換したい SRIMout.txt を指定して実行すると、

“雛形ws” シートを雛形にして、

“Uranium in Gold” のような新規WSに変換してくれます。

(注)

- ・このマクロファイルは、SRIMfit.xlsm がインストールされていなくても動作します。適宜コピーして使ってください。
- ・このマクロファイルには、2つの機能 [Txt変換実行] と [Csv変換実行] があります。後者については(9)を参照。
- ・[雛形ws] は、削除やシート名変更をしないでください。これを編集しても構いませんが、セルの位置は変えないでください。
- ・マクロは、このファイルの 標準モジュール SrOut2Ws に記述してあります。プロテクトしてません。

(2) WS作成上の注意

先ず、SRIM データブック (MySRIMwv.xlsx) の決まり事 について、説明します。

- 追加するシートは、**srOut2Ws.xlsx** に入っている **雛形WSをコピーして生成します**。
そして、**セルの位置は絶対に変えないでください**。

セルの行・列番号が変わってしまうと、sr*() 関数が誤動作します。

WSの書式まで変更したい方は、SRIMfit.xlsm の VBAコード の初めの方に定義してある Work Sheet Structure 定数定義 の変更が必要となります。

- ご自分の使用目的に応じて、次のような枚数分だけ用意してください。

WS の枚数 = 照射するビーム核種数 × 照射される標的材質の種類数

枚数制限はありません。Excelブックの仕様では、使用可能メモリーに依存で制限無しだそうです。
AddIn読み込み時は、Openのみ行い、シート内容の読み込みはしません。

- シート名の命名規則 については、特に制限はありません。でも次の様にしておくと便利です。

WSの名前(例) = srin40Ar_Si ← Beam核種 + 標的材質名称

この様な規則にしておくと、後々アプリケーションを作る時に、参照すべきWS名文字列を

WSname = "srin" & Text(IonA,"0") & srElmNm(IonZ) & "_" & TargetName

のように関数式で記述できるので。

- ブック内での WSの順番 は、気にしないで結構です。

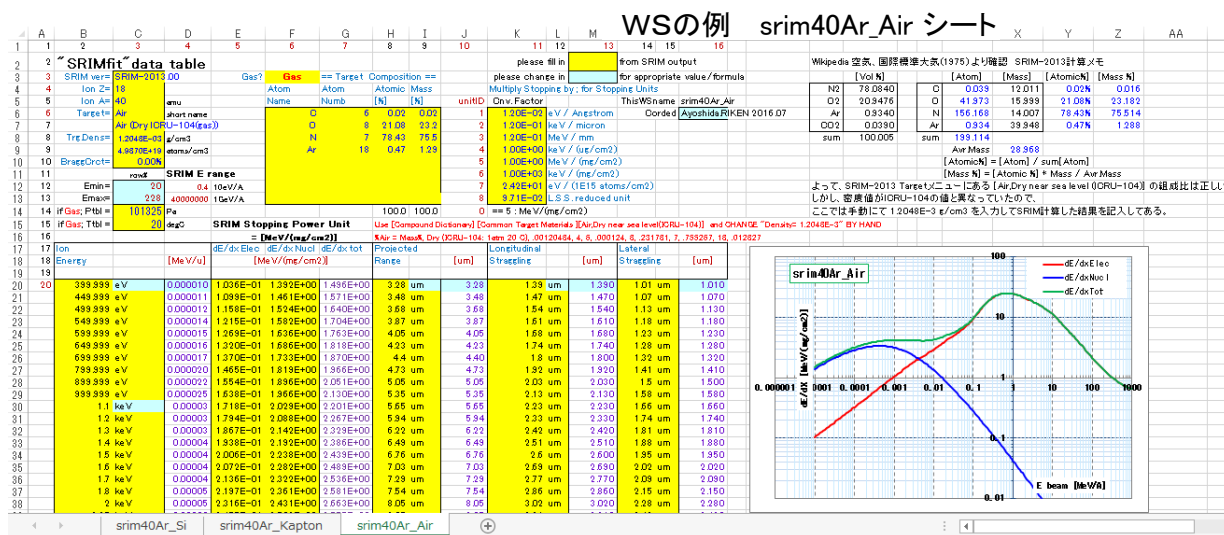
sr*() 関数は、「シート名で参照」 します。大文字小文字・全角半角にご注意下さい。

- そして、これら複数枚のWSを格納した ブックファイルについては、

ブックファイルの名前 = **MySRIMwv.xlsx**

の格納場所 = **SRIMfit.xlam をインストールしたフォルダー内**

と決めてあります。この仕様を変更したい方は、SRIMfit.xlsm の VBAコード の変更が必要です。



セル黄色 が SRIM-2013 が出力した数値のコピーです。
セル枠線有 には、数式が書いてある箇所があります。なるべく消さないでください。
これら以外のセルには、コメントなどを自由に記入して下さい結構です。

(3) SRIM-2013 で計算する

ご自分の用途に合った
 ビーム核種 vs 標的材質
 の組み合わせで
 Stopping/Range Table を計算して下さい。



SRIM-2013 を起動します。
 Stopping / Range Table を選択します。



Stopping / Range Table を計算して出力する画面です。

Ion : Mass [amu] の指定 整数値で指定します。(加速器で照射するので)

Ion Energy Range の指定 10eV/A ~ 1 GeV/A が良いでしょう。強制ではありません(注1)。
 入力数値の単位が [keV] です。例えば Ion Mass = 84 の場合は、
 Lowest : $10 \text{ eV} \times 84 = 0.84 \text{ [keV]}$
 Highest : $1 \text{ GeV} \times 84 = 84,000,000 \text{ [keV]}$ になります。

Target の指定 詳しくは、SRIMマニュアルで確認してください。
 Target Description が、計算結果が出力される **SRIMoutput.txt** ファイルの名前になります。
 必要なら適宜編集して下さい。
 Density [g/cm3] 密度は自動設定されます。が、ガスの場合は自分で要チェックです。
 Gas ガス標的の場合、チェックが入っていることを確認。

Stopping Power unit の指定 必ず **MeV/(mg/cm2)** を指定。SRIMfitではこの単位系を仮定しています。

SR Calculation: SRIM Outputs\Krypton in Kapton Polyimide Film (ICR)

Ion = Krypton [36], Mass = 84 amu

Target Density = 1.4200E+00 g/cm3 = 8.7227E+22 atoms/cm3

===== Target Composition =====

Atom Name	Atom Num	Atomic Mass	Percent
H	1	025.64	002.64
C	6	056.41	069.11
N	7	005.13	007.33
O	8	012.82	020.92

=====

Bragg Correction = -7.20%

Stopping Units = MeV / (mg/cm2)

See bottom of Table for other Stopping units

Ion Energy	dE/dx Elec.	dE/dx Nuclear	Projected Range	Longitudinal Straggling	Lateral Straggling
90.00 keV	1.928E+00	7.601E+00	759 A	136 A	117 A
100.00 keV	2.032E+00	7.556E+00	828 A	146 A	126 A
110.00 keV	2.124E+00	7.503E+00	897 A	156 A	136 A

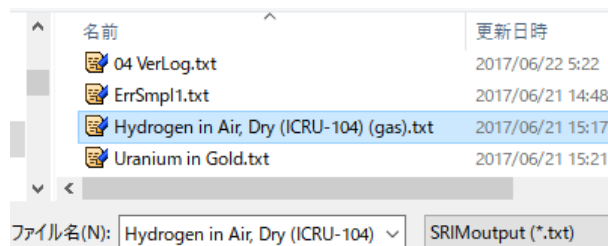
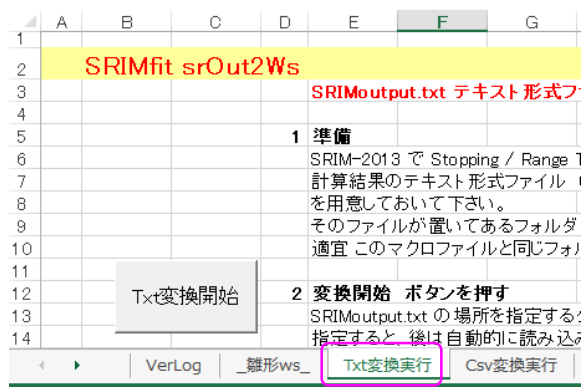
Print Close

計算結果 Output 表示

“Calculate Table” をクリックすると計算結果が表示され、Target Description で指定したファイル名.txt に出力されます。
 計算結果の保存先は、SRIM-2013がインストールされている場所の **¥SRIM Outputs フォルダ** です。
 例) c:\¥Program Files (x86)\¥SRIM-2013-Prof¥SRIM Outputs

(注1) この推奨値を代入すると、雛形WSフォーマットに合った行サイズの SRIM Output が出力されます。雛形では 300 行までのグラフ表示にしてあります。こんなに細かい必要は無い！とか、もっと細かいステップで必要なE領域のみが良いという方は、変更して頂いても構いません。但し、E 範囲は、なるべく低エネルギー側を省略しない事。ビーム停止領域の計算誤差が多くなります。

(4) srOut2Ws.xlsm で WSに変換 する

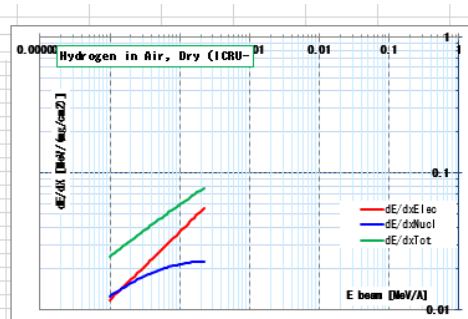


① srOut2Ws.xlsm を開き、
“Txt変換実行” シートを表示させます。

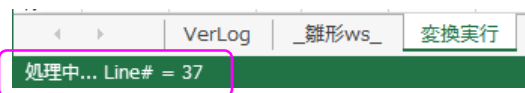
② SRIMMout.txt ファイルの指定
先ほど作成した
Target Descriptionで指定したファイル名.txt
を選択します。

指定すると、後は自動的に読み込みが始まります。しばらくお待ちください。
WSリストタブの最後に、読み込んだ SRIMfit 用の新しい WS があります。

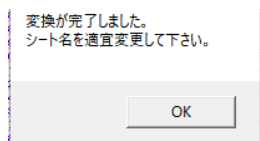
2. 数据表														
20	9.99999 eV	0.000010	1.175E-02	1.251E-02	2.427E-02	7980 A	0.79800	1.44	um	1.440	1.04	um	1.040	
21	10.9999 eV	0.000011	1.234E-02	1.293E-02	2.537E-02	8474 A	0.84740	1.52	um	1.520	1.1	um	1.100	
22	11.9999 eV	0.000012	1.288E-02	1.331E-02	2.619E-02	8956 A	0.89560	1.6	um	1.600	1.15	um	1.150	
23	12.9999 eV	0.000013	1.341E-02	1.387E-02	2.708E-02	9429 A	0.94290	1.67	um	1.670	1.21	um	1.210	
24	13.9999 eV	0.000014	1.392E-02	1.440E-02	2.792E-02	9894 A	0.98940	1.74	um	1.740	1.26	um	1.260	
25	14.9999 eV	0.000015	1.440E-02	1.431E-02	2.871E-02	1.04	um	1.040	1.81	um	1.810	1.31	um	1.310
26	15.9999 eV	0.000016	1.489E-02	1.480E-02	2.948E-02	1.08	um	1.080	1.87	um	1.870	1.35	um	1.350
27	16.9999 eV	0.000017	1.534E-02	1.489E-02	3.022E-02	1.12	um	1.120	1.94	um	1.940	1.41	um	1.410
28	17.9999 eV	0.000018	1.578E-02	1.513E-02	3.091E-02	1.17	um	1.170	2	um	2.000	1.45	um	1.450
29	19.9999 eV	0.000020	1.663E-02	1.561E-02	3.224E-02	1.25	um	1.250	2.13	um	2.130	1.55	um	1.550
30	22.9999 eV	0.000022	1.764E-02	1.613E-02	3.377E-02	1.35	um	1.350	2.28	um	2.280	1.66	um	1.660
31	24.9999 eV	0.000025	1.880E-02	1.680E-02	3.520E-02	1.45	um	1.450	2.43	um	2.430	1.76	um	1.760
32	27.9999 eV	0.000027	1.930E-02	1.702E-02	3.632E-02	1.55	um	1.550	2.57	um	2.570	1.87	um	1.870
33	29.9999 eV	0.000030	2.037E-02	1.739E-02	3.775E-02	1.65	um	1.650	2.7	um	2.700	1.97	um	1.970
34	32.4999 eV	0.000032	2.120E-02	1.773E-02	3.893E-02	1.75	um	1.750	2.84	um	2.840	2.07	um	2.070
35	34.9999 eV	0.000035	2.200E-02	1.804E-02	4.004E-02	1.85	um	1.850	2.97	um	2.970	2.16	um	2.160
36	37.4999 eV	0.000037	2.278E-02	1.833E-02	4.111E-02	1.95	um	1.950	3.09	um	3.090	2.25	um	2.250
37	39.9999 eV	0.000040	2.352E-02	1.859E-02	4.211E-02	2.05	um	2.050	3.22	um	3.220	2.35	um	2.350
38	44.9999 eV	0.000045	2.495E-02	1.905E-02	4.400E-02	2.24	um	2.240	3.48	um	3.480	2.52	um	2.520



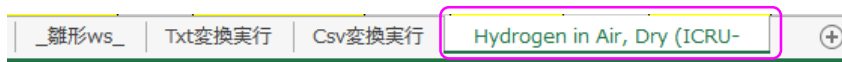
③ マクロが起動し変換が開始され、新しい WS に値が記入され、グラフが成長して行きます。
(動作が遅くなるので、現状は Application.ScreenUpdating = False にしてあります)
Rang や Straggling の単位 A, μ m, mm は、自動的に μ m に統一して変換してくれます。



変換には時間がかかります。(グラフ表示ONなので)
左下のステータスバーに、処理行番号が表示されます。



④ 変換が完了すると、左のメッセージが表示されます。
OKをクリックして、変換作業が終了します。



⑤ WS名を適宜変更して下さい。

自動生成された WS名は、Target Descriptionで指定したファイル名 の頭 29文字になっています。
前述の WS名の命名規則 に従って、WS名を変更しておくことをお勧めします。

(5) 変換後の 手動作業

2	"SRIMfit" data table	
3	SRIM ver= SRIM-2013.00	
4	Ion Z= 1	
5	Ion A= 1	amu
6	① Target=	short name
7		Ir, Dry (ICRU-104) (gas)
8	Trg.Dens=	1.2000E-03 g/cm3
9		4.9672E+19 atoms/cm3
10	BraggCrct=	0.00%
11		row# SRIM E range
12	② Emin=	20 0.01 10eV/A
13	Emax=	228 1000000 1GeV/A
14	If Gas; Ptbl=	Pa ③
15	If Gas; Ttbl=	degC

ThisWSName	Hydrogen in Air, Dry (ICRU-
Corded	Ayoshida RIKEN 2017.06

① Target 名セルの修正

Target の short name, long name を適宜修正してください。

② Emin Emax セルの確認

読込んだ E_LET_Range_Struggling 表の行数が正しいか確認。

17	17	Ion			dE/dx Elec	dE/dx Nucl	dE/dx tot	Projected
18	18	Energy		[MeV/u]		[MeV/(mg/cm2)]		Range
19	19							
20	20	9.99999 eV	0.000010	1.176E-02	1.251E-02	2.427E-02	7980 A	
21	21	10.9999 eV	0.000011	1.234E-02	1.293E-02	2.527E-02	8474 A	
227	227	900 MeV	900.0000	1.994E-03	3.111E-07	1.994E-03	2.66 km	
228	228	1 GeV	1000.000	1.949E-03	2.821E-07	1.949E-03	3.08 km	
229	229		#N/A			#N/A		

③ Gas標的の場合は、

SRIM-2013計算で指定したガス密度に相当する、
ガス圧力 Ptbl セル、ガス温度 Ttbl セル の値を入力。
詳しくは、後述の『(8) Gas標的の場合』を参照下さい。

④ Corded セル の記入

参考の為、このWSシート 作成者のメモ を記入して下さい。

繰り返し 変換作業をする場合

複数の SRIMoutput.txt を変換したい場合は、(4)と(5)の作業を繰り返して下さい。
Txt変換実行マクロは、新しいWSを、WSリストの最後に追加して行きます。

(6) WSの保存

変換して生成したWSを、お使いの MySRIMwb.xlsx ブックに追加 します。

WSのコピーは、通常のエクセル操作で行って下さい。

即ち、MySRIMwb.xlsx と srOut2Ws.xlsm の両方を開いて置き、手動操作にて
srOut2Ws 側の WS を、MySRIMwb 側へ、[シートの移動コピー] をします。

MySRIMwb.xlsx ブックの場所は、インストールガイドで説明したように、

管理者権限あり の場合：MS-OfficeシステムAddInフォルダー
においてあります。この場所から、自分のワークフォルダーにコピーしてから、
シートコピーを行って下さい。(システムフォルダー中だと SRIMfitが openしているので)
シートコピーが終わったら、元のシステムフォルダー中に、上書きコピーして下さい。

(7) WSの確認

A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K
1										
2			SRIMfit_eg1							
3										
4			マクロ情報関数の使い方							
5										
6			srMcVer()							
7			SRIMfit v.300							
8			srMcPath()							
9			C:\Program Files\Microsoft Office 15\Root\Office15\LIBRARY							
10			srMcWBname()							
11			MySRIMwb.xlsx							
12			srMcWScount()							
13			57							
14			srMcWSlist()							
15			srInfoWScored()							
16			注1							
17			Sheet No.	Sheet Name	Corded info					
18			1	VerLog						
19			2	srin40Ar_Si	Ayoshida RIKEN 2015.07					
20			3	srin40Ar_Ai	Ayoshida RIKEN 2015.07					
21			4	srin40Ar_Au	Ayoshida RIKEN 2015.06					
22							
23			56	srin197Au_Mylar	Ayoshida RIKEN 2015.05					
24			57	srin197Au_EJ212	Ayoshida RIKEN 2015.05					
25			58	#N/A	#VALUE!					
26			59	#N/A	#VALUE!					

.example¥動作確認用¥

sr_eg_AdIn.xlsx の
eg11マクロ情報 シート
を開いてみてください。

マクロ情報関数を用いて
AddInとして認識されている
SRIMfit.xlam と
MySRIMwb.xlsx
の情報が表示されます。

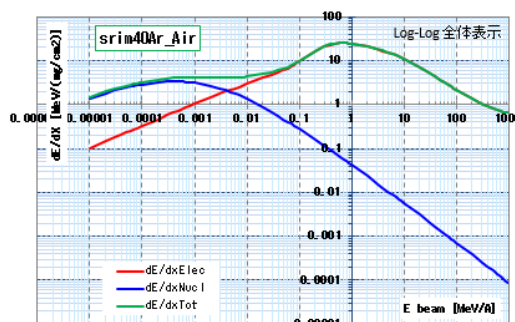
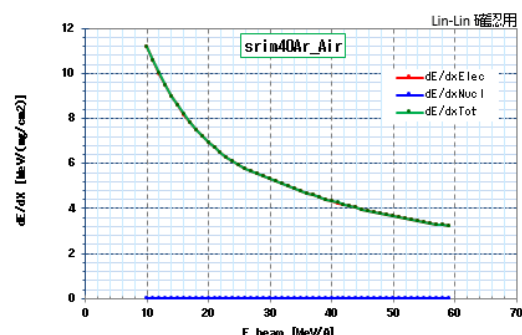
A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K
1										
2			SRIMfit_eg1							
3										
4			ご自分の MySRIMwb.xlsx の確認用							
5										
6			WS name =	srin40Ar_Air						
7										
8										
9			Corded	Ayoshida RIKEN 2015.07	Gas?	Gas	== Target Composition ==			
10			SRIM ver	SRIM-2013.00		Atom	Atom	Atomic	Mass	Multiple Stop
11			Ion Z	18	Ar	Name	Num	[N]	[N]	unitID
12			Ion A	40						Conv. Factor
13			Target	Air						
14				Air (Dry ICRU-104(gas))						
15			Tet.Dens	1.205E-03 g/cm3						
16				4.987E+19 atoms/cm3						
17			Brace.Dct.	0.00%						
18										
19			Table Range	Min	Max					
20			E [MeV/u]	1.00E-05	1.00E+03					
21			Rng[μm]	3.28E+00	3.65E+08					
22			Long.Stre[μm]	1.39E+00	1.27E+07					
23			Late.Stre[μm]	1.01E+00	1.12E+06					

同ファイルの

eg12MySRIMwb確認 シート
を開いて
自分のWS名を入力
してみてください。

WS情報関数を用いて
AddInとして認識されている
MySRIMwb.xlsx
の情報が表示されます。

LET, Range グラフの
Lin - Lin 表示
Log - Log 表示
で、直線補間の具合を
確認できます。



(8) Gas 標的 の場合

関数一覧の Gas用関数: $sr*Gas()$ の仕様をご覧になると分かるように、SRIMfit では、Gas関数の引数に、気温 [°C] と 気圧 [Pa] を明示的に指定し、その補正をするようにしてあります。

Gas標的の一例として、SRIM-2013 に組み込まれている「空気: Air Dry」について説明します。

Delete Element	Symbol	Name	Atomic Number	Weight (amu)	Stoich	Atom %	
X	PT	C	Carbon	6	12.011	0.015	00.02
X	PT	O	Oxygen	8	15.999	21.07	21.08
X	PT	N	Nitrogen	7	14.007	78.44	78.44
X	PT	Ar	Argon	18	39.948	0.467	00.47

[Compound Dictionary]
[Common Target Materials] で
Air, Dry near sea level (ICRU-104)
を選択すると、
空気の組成表 [注1] と 密度 [注2]
が自動入力され、
Gas Tgt にチェック
が入ります。

Common Compounds

Categorized		Alphabetic	
Common Name	Density (g/cm3)	Atomic Stoichiometry (Atoms/Molecule or Percent)	
COMMON TARGET MATERIALS			
Air, Dry near sea level (ICRU-104)	0.00120484	O-23.2, N-75.5, Ar-1.3	
★ Water (liquid)	1.00	H-2, O-1	

Target	is	a	GAS
=====	Target	Compositio	=====
Atom	Atom	Atomic	Mass
Name	Numb	Percent	Percent
C	6	0.02	0.02
O	8	21.08	23.18
N	7	78.43	75.51
Ar	18	0.47	1.29

そして、SRIM Output には、
「Target is a GAS」
と表記されます。この表記に従って、
WS中にも **Gas** と記入して下さい。

Gas?	Gas	== Target	Composition ==
	Atom	Atom	Atomic Mass

14	if Gas; Ptbl =	101325	Pa
15	if Gas; Ttbl =	20	degC

さて、この[Compound Dictionary]を用いた場合の、
気圧 Ptbl= ? [Pa] 気圧 Ttbl= ? [degC]
の数値ですが。。

私の場合は、検討の結果 [注3] Ptbl=101325Pa , Ttbl = 20 degC を記入する事にしました。

[注1] 空気の組成は、SRIMの値で良さそうです。

Wikipedia「空気」にある 国際標準大気(1975年) とほぼ同じ値のようです。

詳しくは YourSRIMwb.xlsx の srim40Ar_Air シートの右端にコメントで書いてあります。

(次ページへ続く)

[注2] 密度について（特に Air, Dry の場合）は…、

SRIM-2013の内部で、どの様な扱いをしているのか、少し疑問があります。

そもそも、上図の Density 表示は 0.00163 [g/cm³] というかなり高密度(マイナス～57℃相当)になっています。

念のため、[Compound Dictionary]のデータファイル:

C:\Program Files\SRIM-2013-Prof\Data\Compound.dat ← Text ファイルです。

を眺めてみると、

```
*Air, Dry near sea level (ICRU-104) 0.00120484 O-23.2, N-75.5, Ar-1.3
"%Air, Dry (ICRU-104)", .00120484, 4, 6, .000124, 8, .231781, 7, .755267, 18, .012827
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
$ corrected by H. Paul, Sept. 2004
```

つまり、 $\rho = 1.20484\text{E-}3$ [g/cm³] と書いてあり、(以降の組成比の数字は SRIM画面と同じ)

これは国際標準大気(0℃ 1atm で 1.293E-3g/cm³)に近い値です。でもこの値を使っていないようです。

一方で、SRIM Home Page をいろいろ探したのですが、古いマニュアルには

TRIM manual <http://www.srim.org/SRIM/SRIM%2008.pdf> の、

8-12 Stopping Powers for Ions in Gases に、

The stopping of ions in gases is very dependent on the gas pressure. ~

STP (0 C, 760 mm) ~ "TRIM always assumes a gas target is at STP."

と書いてありました。

[注3] さてでは、密度 と 気温、気圧 には実際にどの値を使おうか… と迷ったのですが、次のような方針にすることにしました。

‘密度 ρ ’ は、Compound.dat の値を尊重して 1.20484E-3 g/cm³ を使う。

‘気圧 P’ は、1 atm = 101325 Pa を使う。

‘気温 t’ は、0 °Cでは、上記の ‘密度’ と矛盾をきたすので、次の式で決める。

即ち、Wikipedia「空気」にある 空気密度の式

$$\rho [\text{g/cm}^3] = 1.293\text{E-}3 * P[\text{atm}] / (1 + t[^\circ\text{C}]/273.15)$$

に当てはめて、上記の ‘密度’ になる様な 気温を求める事にしました。(srim40Ar_Airシート参照)

その結果が Ptbl=101325 Pa , Ttbl = 20.0 °C でしたので、この値をシート中に記してあります。

コメント) 以上の様に、SRIM-2013 の Gas標的(特にAir)の扱いは、私もまだよく理解できておりません。

空気以外のGas標的の場合でも、ご自分でよくご検討の上、Compound Tableを使うべきか、

それとも組成・密度・気温・気圧を手動で指定すべきか をご判断する事をお勧めします。

