pySRIMfit ： 簡易マニアル

pySRIMfit は、Excel VBA 版の SRIMfit *1 を python版に焼き直したものです。

- python スクリプトで SRIMfit 計算が可能です。
- 関数名は、SRIMfit とほぼ同じにしてあります。
- 今までお使いの自分用 MySRIMwb.xlsx も、変換すればそのまま使えます。

Update Log :

2023.04/24 pySRIMfit ver 1.1 用　初版

*1 : Excel VBA 版の SRIMfit : https://ribf.riken.jp/sisetu-kyoyo/Tips/SRIMfit/ は、あの有名な SRIM-2013 : http://www.srim.org/ ではありません。
SR.exe の計算出力ファイル (E-Range-Straggling Table) を読み込んで、それを単に内挿fitting して使う VBAマクロ です。 お間違え無く。

pySRIMfit を使ってみる －(0)

Mainスクリプト

```
""" ====================================================
        Main
    ====================================================
if __name__ == '__main__':

    """ Test-CTRL Sw ---.---.---.---.---.---.---.---.---
①   SwTest01 = True      # very simple examples
    SwTest02 = False     # make sr.Rng() table
    SwTest03 = False     # E5A beam-line: min/max LET
    SwTest04 = False     # plot LET, Range, Straggling
    SwTest05 = False     # info srimWS, srimWB

②   import  pySRIMfit   as  srim
    sr= srim.mySRIM()    # load MySRIMwb.pickle
    sr.info()
```

出力結果

```
srimWB.WBpath= [C:¥Users¥～¥pySRIMfit¥./_MySRIMwb¥MySRIMwb.pickle]
     .nWS= [150] sheets included.
③    .curWSname= []
   Sym H H He  C Ne Ar Fe Kr Kr  Xe  Xe  Xe  Ta  Au   U
     A 1 2  4 12 20 40 56 84 86 129 132 136 181 197 238
   Air o o  o  o  o  o  o  o  o   o   o   o   o   o   o
    Al o o  o  o  o  o  o  o  o   o   o   o   o   o   o
    Au o o  o  o  o  o  o  o  o   o   o   o   o   o   o
     C o o  o  o  o  o  o  o  o   o   o   o   o   o   o
 EJ212 o o  o  o  o  o  o  o  o   o   o   o   o   o   o
 Epoxy o o  o  o  o  o  o  o  o   o   o   o   o   o   o
Kapton o o  o  o  o  o  o  o  o   o   o   o   o   o   o
 Mylar o o  o  o  o  o  o  o  o   o   o   o   o   o   o
    Si o o  o  o  o  o  o  o  o   o   o   o   o   o   o
 Water o o  o  o  o  o  o  o  o   o   o   o   o   o   o
```

③ *※3: sr.info() の出力*
現在 load された MySRIMwb.pickle に含まれている
Beam x Target の組合せリストが表示されます。
○印が、該当あり　×印が、該当なし　です。
データベースに過不足がある場合　は、
→ 巻末: 今まで使っていた Excel版 SRIMfit を、pySRIMfit で使いたい場合
を参照ください。

動作確認用スクリプト　t_pySRIMfit.py をエディターで見てください。

① テスト・スクリプトが 5種類 (SwTest01～05) 用意してあります。
必要に応じて、これらの SwTest＊= True にしてください。
勿論、全て = True でも OK です。

② 一番最初に、pySRIMfit モジュールをインポート　します。
次に、　　sr = srim.mySRIM()　　です。　　*※1*
その後は、　sr.関数名()　の様に使えるようになります。*※2*
sr.info() で、ワークシートの一覧が表示されます。　　*※3*

※1: sr.mySRIM()　で、
pySRIMfit 用のデータベース MySRIMwb.pickle
が自動的に load されます。
詳しくは、mySRIMbase.py : class mySRIM() 参照。

※2: sr.関数名()　のヘルプ　は、以下で表示できます。
> help(sr.info)
> dir(sr)
> help(sr)
関数名は、Excel版の SRIMfit に合わせてあります。

【注】pySRIMfit は、anaconda 3 spyder IDE 5.4.1 上で開発しました。
標準モジュールの他に、以下が必要かもしれません。
> conda install xlwings
> pip install python-pptx

pySRIMfit を使ってみる －(1) : SwTest01 = True の時

テスト・スクリプト

```
""" Test01 : HowToUse ; very simple examples
----.---.---.---.---.---.---.---.---.---.---.---.---"""
if(SwTest01):
    print('====== Test-01 ======')
    wsn = 'srim40Ar_Si'      # work sheet name
    print("sr.maxLETt('{}')= {:.2f} [{}] ; using sr.func()".format(
              wsn, sr.maxLETt(wsn), sr.LETunit(0) ) )
    srWs = sr.getWS(wsn)     # srimWS object
    print("ws.maxLETt()= {:.2f} ; using srimWS object".format(
        srWs.maxLETt ) )
```

① ②

出力結果

```
====== Test-01 ======
sr.maxLETt('srim40Ar_Si')= 18.67 [MeV/(mg/cm2)] ; using sr.func()
ws.maxLETt()= 18.67 ; using srimWS object
```

① class srimWB() を使った例 です。

最初に宣言した sr = srim.mySRIM() は、srimWB() クラスを返します。
ですので、その後は、
　sr.関数名('ワークシート名', パラメータ)
で、WBクラスの method が使用できます。
WBクラスの関数一覧は、
　> dir(sr)　で表示されます。

② class srimWS() を使った例 です。

> srWS = sr.getWS(wsn)
で、WBクラスから、シート1枚:WSクラス を抽出します。
その後は、
　srWS.関数名(パラメータ) ← 'ワークシート名' 不要
で、WSクラスの method が使用できます。
WSクラスの関数一覧は、
　> dir(srWS)　で表示されます。

Test01は、 一番簡単な例題 です。

pySRIMfit には、2つの class があります。
　class srimWS()
　　Excel版 SRIMfit のデータベースファイル
　　MySRIMwb.xlsx の シート1枚 に相当します。
　class srimWB() ※1
　　MySRIMwb.xlsx の ブック全体 に相当します。

※1: class srimWB() の attribution 定義 → see) srimWBbase.py

```
class srimWB( object ):
    """ class Attributes
    ----.---.---.---.---.---.---.---.---.---.---.---.---"""
    def _myclear(self):
        #print('@@srimWB:Home dir=',os.path.dirname(__file__))
        self.WBpath = os.path.join(os.path.dirname(__file__),'./_MySRIMwb')
        self.WBname     = 'MySRIMwb.pickle'     # defa. fname
        self.WSL        = []    # [srWS]
        self.nWS        = 0     # len([srWS])
        self.WSnameL    = []    # [srWS.wsName]
        self.WSnameLDB  = []    # [dict{'Bm':*,'Tg':*,..}]
        self.curWS      = None  # srWS
        self.curWSname  = ''    # srWS.wsName

    def __init__(self):
        """  Constructor
        ----.---.---.---.---.---.---.---.---.---.---.---.---"""
        self._myclear()

    def getWS(self, WSnm:str) -> object:
        """  Find srWS by WSname
        WSnm:   str     work-sheet name as 'srim'+Beam+'_'+Target
        <Ret>   srimWS  or None, if not found
        <Set>   .curWS, .curWSname
        ----.---.---.---.---.---.---.---.---.---.---.---.---"""
        if(WSnm == self.curWSname):
            return( self.curWS )
        if(WSnm not in self.WSnameL):
            msg=("#@ getWS: WSnm=[{}] not found"
                 ", then return value = float('NaN') or '' ").format(WSnm)
            _Err(1,msg)
            return(None)
        ix = self.WSnameL.index(WSnm)
        self.curWS = self.WSL[ix]
        self.curWSname = WSnm
        return( self.curWS )
```

load されている WS名を確認するには、
> sr.WSnameL　です。
srWB.getWS() は、WS名 で sr.WSnameL[] を検索し、
srWB.curWS : 現在参照中の WS を切り替えます。
この方式は、Excel版 と同じ手法です。

pySRIMfit を使ってみる －(2) : SwTest02 = True の時

テスト・スクリプト

```
""" Test02 : make sr.Rng() table
----.---.---.---.---.---.---.---.---.---.---.---.---"""
if(SwTest02):
    print('====== Test-02 ======')
①   wsnL=['srim12C_Si','srim20Ne_Si','srim40Ar_Si',
          'srim56Fe_Si','srim84Kr_Si']
    EL=[70,90,95,100,110,120,135,140,150,160]
    print('       Beam E =',end='')
    for E in EL:
        print('{:5.0f}'.format(E),end='')
    print(' [MeV/A]')
    for wsn in wsnL:
        print('{:<14}:'.format(wsn),end='')
        for E in EL:
②           print('{:5.1f}'.format(sr.Rng(wsn,E)/1000),end='')
        print(' [mm]')
```

出力結果

```
====== Test-02 ======
       Beam E =   70   90   95  100  110  120  135  140  150  160 [MeV/A]
srim12C_Si     :  7.6 11.8 13.0 14.2 16.8 19.6 24.1 25.7 28.9 32.4 [mm]
srim20Ne_Si    :  4.5  7.0  7.7  8.4 10.0 11.7 14.3 15.2 17.2 19.2 [mm]
srim40Ar_Si    :  2.8  4.3  4.7  5.1  6.0  7.0  8.6  9.1 10.2 11.5 [mm]
srim56Fe_Si    :  2.0  3.1  3.4  3.7  4.3  5.0  6.2  6.5  7.4  8.2 [mm]
srim84Kr_Si    :  1.6  2.5  2.7  3.0  3.5  4.0  4.9  5.2  5.8  6.5 [mm]
```

Test02は、 Rangeテーブル表示 です。

① で、表示したい WS名と、Beam Energy のリスト
を一括定義しておいて、

② で、sr.Rng() を用いて、Range値を表示します。 *※1*

※1: srimWB().Rng() → srimWS().Rng() calling sequence
WB関数 Rng(WSnm, E) は、.getWS() で WSnm を特定してから、
WS関数 Rng(E) を呼び出し、
WS 内の attribution ._E[] ._Rng[] ; Energy vs Range を参照し、
指定した E 値での Range値を、
numpy interp() 関数で、内挿補間 して 返しています。

```
class srimWB( object ):
    def Rng(self, WSnm:str, E:float) -> float:
        """ <Ret>  Rng(E) [um] Range """
        ws = self.getWS(WSnm)
        return( float('NaN') if(ws is None) else ws.Rng(E) )

class srimWS( object ):
    def Rng(self, E:float) -> float:
        """ <Ret>  Rng(E) [um] Range """
        return( self._intrpTbl('Rng',E, self._Rng) )

    def _intrpTbl(self, fncH, E, Vtbl) -> float:
        """  Vtbl[] --> E : interpolation
        ._E[]          [MeV/A]
        Vtbl[]         [um]
        <Ret> Vtbl[E]  [um]
        ----.---.---.---.---.---.---.---.---.---.---.---"""
        if(   E < self.minE):
            v, ok = self.minE, False
        elif( E > self.maxE):
            v, ok = self.maxE, False
        else:
            v, ok = np.interp(E, self._E, Vtbl), True
        if(not ok):
            msg = (self._msgH(fncH)+'Warn: E=[{:.2e}] out of range.'
            '(min,max)=({:.2e},{:.2e})').format(E,self.minE,self.maxE)
            _Err(1,msg)
        return( v )
```

pySRIMfit を使ってみる －(3) : SwTest03 = True の時

pyE5A: pySRIMfit

t_pySRIMfit.py

テスト・スクリプト

```
""" Test03 : E5A beam-line: min/max LET
----.---.---.---.---.---.---.---.---.---.---.---.---"""
if(SwTest03):
    print('====== Test-03 ======')
    Beam, BeamE = '84Kr', 69.59      # [MeV/A]
    Pa, degC =  1010.*100., 23.7     # [Pa],[C] Air press. & temp.
    #        Material  thick [um or mm]
    Matr=[  ['Au',      45.8 ],      # Beam Scattering foil
            ['Kapton',  51.2 ],      # Vacuum Foil
            ['Al',       0.60],      # IC1;Ion Chamber Alumi Foil
            ['Mylar',   14.54],      # IC1 Mylar Foil
            ['Mylar',   10.2 ],      # PL1;Plastic Scintilator Mylar Foil
            ['Al',       0.4 ],      # PL1 Alumi on Mylar
            ['EJ212',  100.0 ],      # PL1 Scinti (EJ-212)
            ['Air',    145.0 ],      # [mm] Air1 gap; Kapton ~ EdegOut
            ['Air',    200.0 ]       # [mm] Air2 gap; EdegOut ~ Sample
        ]
    #        Sample Mold [um]
    Smpl=[  ['Al',       0.0 ],      # mold#1
            ['Epoxy',  150.0 ],      # mold#2
            ['Si',       5.0 ],      # Device Layer#1
            ['Si',      10.0 ]       # Device Layer#2
        ]
    Targ = Matr + Smpl
    E, wsnSi = BeamE, 'srim'+Beam+'_Si'
    print(' #, Matr    ,  Thick,  Eaftr    LET, Range')
    print('            ,[um|mm],  [MeV/A],    , [um] ')
    print('    in Vacc ,         {:6.2f}, {:5.2f}, {:6.1f}'.format(
        E, sr.LETt(wsnSi,E), sr.Rng(wsnSi,E)))
    for i,trg in enumerate(Targ):
        wsn = 'srim'+Beam+'_'+trg[0]
        if(sr.Gas(wsn)):
            E = sr.EnewGas(wsn,E,trg[1],Pa,degC)
        else:
            E = sr.Enew(wsn,E,trg[1])
        LET = sr.LETt(wsnSi,E)
        Rng = sr.Rng(wsnSi,E)
        msg = '{:2d}, {:<8}, {:6.2f}, {:6.2f}, {:5.2f}, {:6.1f}'.format(
            i,trg[0],trg[1],E,LET,Rng)
        print(msg)
```

① に、技術報告書と同じパラメータを指定しておき、

② で、それぞれのビーム通過物を通過後の
E = sr.Enew() or sr.EnewGas() 気体の場合、
LET = sr.LETt(E)
Rng = sr.Rng(E) を計算してゆきます。

Test03は、 E5Aコース用の計算例 です。
例として、2301_Kr_技術報告書.pdf を計算してみます。

● Beam 通過物の厚さ

Beam	Kr用	
Mon系	μm	
Au	45.8	
Kapton	51.2	φ50
IC1.Al	0.60	
IC1.mylar	14.54	
PL.mylar	10.2	
PL.myAl	0.4	
PL.EJ212	100.0	
	mm	mm
Air1	145.0	Kap～Edeg出口
Air2	200.0	Edeg出口～試料
avr気温	23.7	℃
avr気圧	1011.0	hPa

ビームライン常設物	ref) params	厚さ	
Au	45.8	45.8	μm
Kapton	51.2	51.2	μm
IC1.Al	0.60	0.60	μm
IC1.mylar	14.54	14.54	μm
PL.EJ212	100.0	100.0	μm
PL.mylar	10.2	10.2	μm
PL.Al(mylar)	0.4	0.4	μm
Air1	145.0	145.0	mm
Air2	200.0	200.0	mm
AirT 気温	23.7	23.7	℃
AirP 気圧	1011.0	1011.0	hPa
ThkStd		0.9853	
Beam	84Kr	84Kr	A=84 Z=36
Ebm:加速器G実測値	69.590	69.59	ExpR:実測
δEbm補正 [%]	-0.660	0.000	% ／ExpR

EDeg出口まで	E MeV/u	LET in Si	Rin Si μm
in Vacc	69.59	9.51	1629
aft Au	63.296	10.16	1393
aft Kap	62.245	10.28	1356
aft IC1-Al	62.225	10.29	1355
aft IC1-Mylar	61.936	10.32	1345
aft PL-EJ212	60.370	10.50	1290
aft PL-Mylar	60.167	10.52	1283
aft PL-Al(Mylar)	60.154	10.52	1282
aft Air1	57.709	10.84	1202
照射物位置で			
aft Air2	54.259	11.30	1092

③ ④

出力結果

```
====== Test-03 ======
 #, Matr    ,  Thick,  Eaftr    LET, Range
           ,[um|mm],  [MeV/A],    , [um]
    in Vacc ,          69.59,  9.51, 1629.0
 0, Au      ,  45.80,  63.30, 10.16, 1393.1
 1, Kapton  ,  51.20,  62.24, 10.28, 1356.0
 2, Al      ,   0.60,  62.22, 10.29, 1355.3
 3, Mylar   ,  14.54,  61.94, 10.32, 1345.1
 4, Mylar   ,  10.20,  61.73, 10.34, 1338.0
 5, Al      ,   0.40,  61.72, 10.34, 1337.5
 6, EJ212   , 100.00,  60.15, 10.52, 1282.2
 7, Air     , 145.00,  57.71, 10.84, 1202.1
 8, Air     , 200.00,  54.26, 11.30, 1092.1
 9, Al      ,   0.00,  54.26, 11.30, 1092.1
10, Epoxy   , 150.00,  49.51, 12.05,  944.4
11, Si      ,   5.00,  49.34, 12.08,  939.4
12, Si      ,  10.00,  49.02, 12.13,  929.4
```

⑤

④ が、Excel版で計算した結果

⑤ が、python版で計算した結果

当然のことながら一致しています。

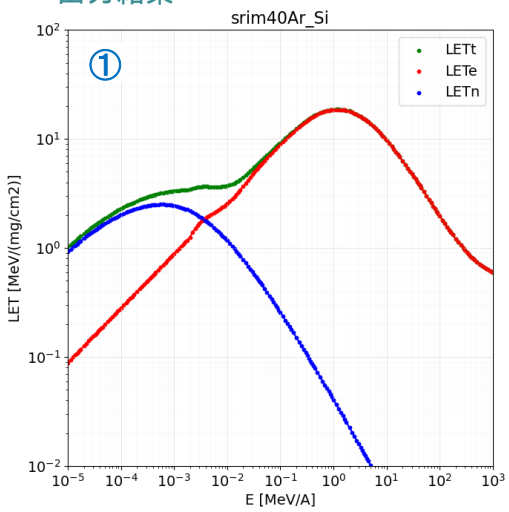
pySRIMfit を使ってみる －(4) : SwTest04 = True の時

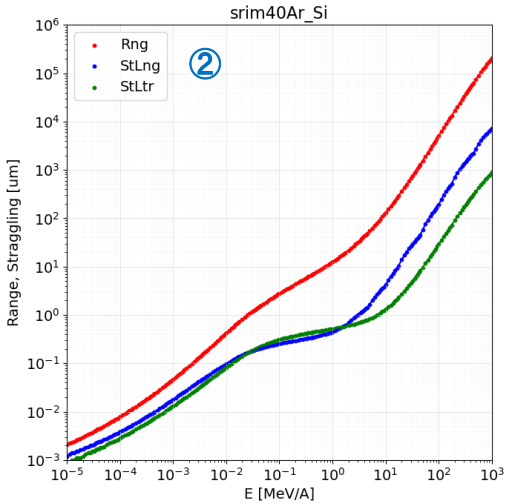
テスト・スクリプト

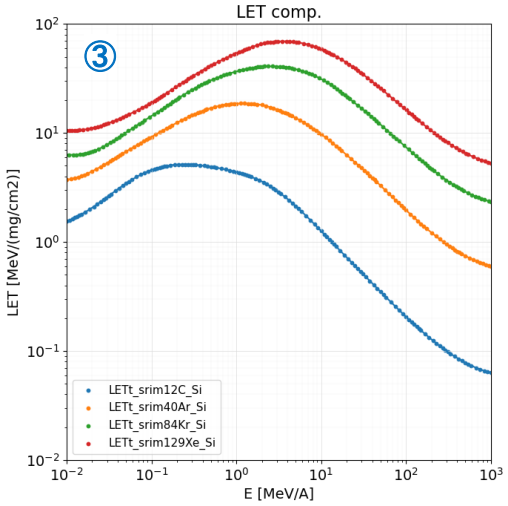
```
""" Test04 : plot LET, Range, Straggling
----.---.---.---.---.---.---.---.---.---.---.---"""
if(SwTest04):
    print('====== Test-04 ======')
    wsn = 'srim40Ar_Si'
①   sr.WSplot_LET(wsn,LETe=True,LETn=True,LETt=True,
        rngX=(1e-5,1e3), rngY=(1e-2,1e2))
②   sr.WSplot_RngSt(wsn,Rng=True,StLng=True,StLtr=True,
        rngX=(1e-5,1e3), rngY=(1e-3,1e6))
    wsnL = ['srim12C_Si','srim40Ar_Si','srim84Kr_Si','srim129Xe_Si']
③   sr.WSplot_LETcmp(wsnL,LETe=False,LETn=False,LETt=True,
        rngX=(1e-2,1e3), rngY=(1e-2,1e2))
④   sr.WSplot_RngStcmp(wsnL,Rng=True,StLng=False,StLtr=False,
        rngX=(1e-2,1e3), rngY=(1e-2,1e6))
```

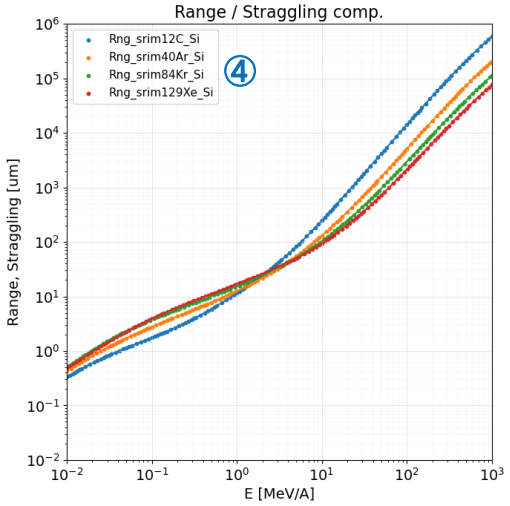
Test04は、ワークシート内テーブルのプロット表示　です。

出力結果









① sr.WSplot_LET() は、
　指定WSの LETテーブルをプロットします。
Optin param の指定で、
　LETnuclear, LETelectric, LETtotal の表示ON/OFF や
　X軸 range, Y軸 range の調整が可能です。

② sr.WSplot_RngSt() は、
　指定WSの Range, StLtr, StLng テーブルをプロットします。

③ sr.WSplot_LETcmp()　と、
④ sr.WSplot_RngStcmp() は、
　複数WSの テーブルを 比較プロット します。

WSテーブルの参照は、
Excel版では、いちいち MySRIMwb.xlsx を開いて見る
必要がありましたが、
Python 版では、object なので、表示が楽です。

pySRIMfit を使ってみる －(5) : SwTest05 = True の時

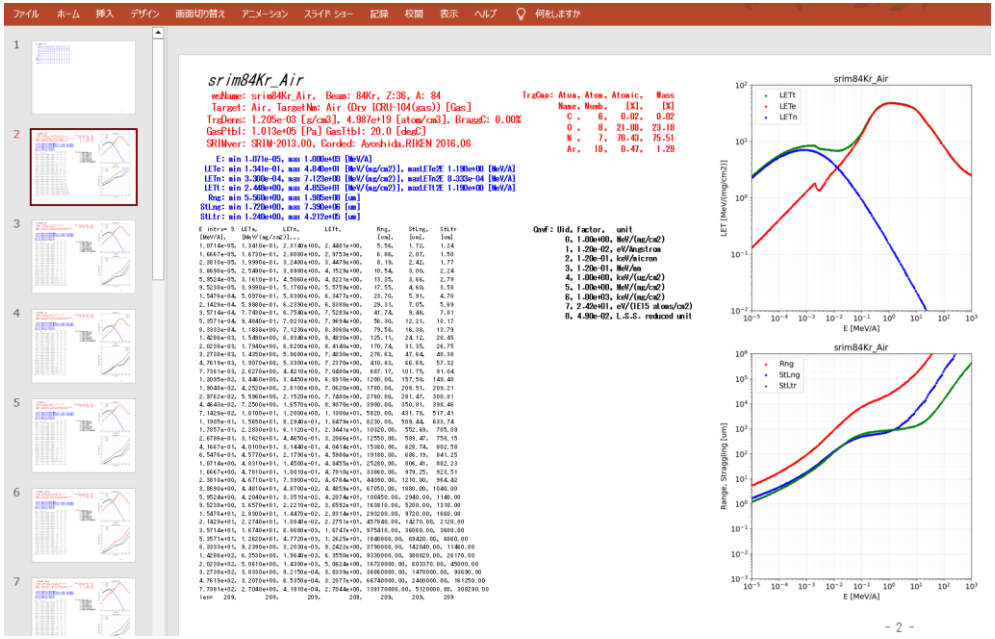
テスト・スクリプト

```
""" Test05 : info srimWS, srimWB
----.---.---.---.---.---.---.---.---.---.---.---.---"""
if(SwTest05):
    print('====== Test-05 ======')
    sr.info(mod=0)       # srimWB simple info.
    sr.WBinfo()          # srimWB info(Beam x Trg table)
①   sr.WSinfo('srim84Kr_Si',modL=[-1])      # srimWS all info.
    wsnmL = sr.getWSnmL(Beam='Kr',swSort=1) # get WSnames
②   sr.WBdump(wsnmL)     # dump srWB selected wsnmL
    #sr.WBdump()          # dump srWB all srWS to Power-Point file
```

Test05は、srimWS や srimWB の情報表示　です。

いろいろな情報を表示できます。
詳しくは、各関数の help() を見てください。

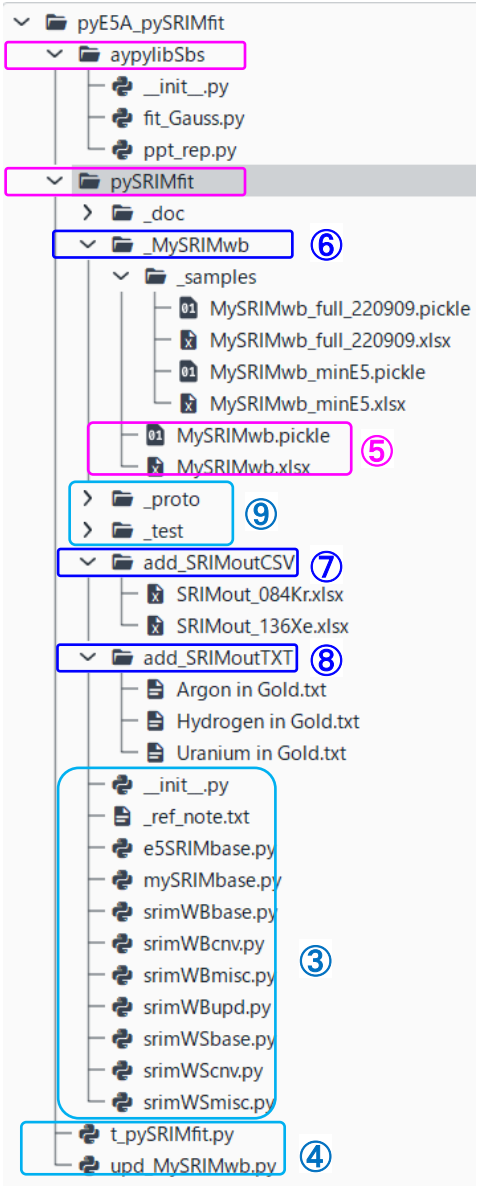
② sr.WBdump() の 出力結果　パワポ・ファイルに出力されます。
sr.WSinfo() と sr.WSplot() を用いて　dump しています。



① sr.WSinfo() の使い方
この method　で、WSの全ての dump が確認できます。

```
class srimWS( object ):
    def info(self, modL:list=[0], *,
             intrvE:int=1, show:bool=True ) -> list:
        """ Info. of this srimWS
        <optional>  see) srimWSdump()
        modL:    [int,..]    dump mode list
            0: simple info. ; wsName,Beam,Target
            1: other  info. ; TrgDens, BraggC, SRIMver, Corded
            2: target compo.; TrgCmp table
            3: conv. factor ; LET unit conversion table
            4: table size   ; {min|max} of E, LETe,n,t, Rng, StLng, StLtr
            5: table contens; E, LET{e|n|t}, Rng, StLng, StLtr
            6: table size   ; LET{e|n|t}{L|H}
           -1: all of above
        <optional: kwd args>
        intrvE: int          when mod=5, skip E interval
        show:   bool         show dump result as print()
        <Ret>
        nothing              if show=True
        txL:    [str,..]     else dump result as list of text
        ----.---.---.---.---.---.---.---.---.---.---.---.---"""
```

pySRIMfit ファイル一覧



①、② の2つが import に必要なフォルダーです。

③ が、pySRIMfit module のスクリプト

④ は、pySRIMfit を用いた サンプルプログラム(前述) と ユーティリティー(後述)

⑤ が、自動 load される データベース MySRIMwb.pickle です。

Excel版 MySRIMwb.xlsx は、.pickle 版を生成する時に読み込んだ元ファイルです。

同フォルダー内の ¥_samples フォルダーにあるのは、
MySRIMwb_full_220909 : 現行 SRIMfit HP から down load できる最新版(でもゴミ多い)
(*) MySRIMwb_minE5 : E5Aコースで必要な最小セット(お掃除済版) です。
Default で ⑤に置いてあるのは、(*) です。必要に応じてファイル名を変更してお使いください。

名前	サイズ
MySRIMwb_full_220909.pickle	7,133 KB
MySRIMwb_full_220909.xlsx	18,743 KB
MySRIMwb_minE5.pickle	4,075 KB
MySRIMwb_minE5.xlsx	10,979 KB

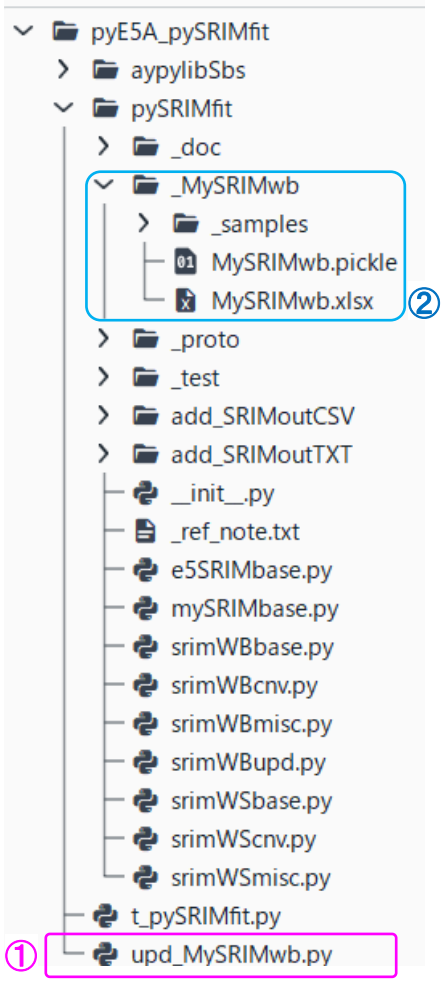
```
def saveWS(self, path:str=None, fnm:str=None):
    """   save srWB as .pickle     ->r#101)
    <optional>
    path:    str      load path (defa. self.WBpath)
    fnm:     str      file name (defa. self.WBname)
    ----.---.---.---.---.---.---.---.---.---.---.---"""
    _path = path if(path is not None) else self.WBpath
    _fnm  = fnm  if(fnm  is not None) else self.WBname
    fn = os.path.join(_path,_fnm)
    with open(fn,'wb') as f:
        #pickle.dump(self.WSL,f,pickle.HIGHEST_PROTOCOL)
        pickle.dump(self.WSL,f,protocol=None)
```

.pickle は、sr.WSL[] に登録された class srimWS() object を sr.saveWS() method で
シリアライズ して保存したものです。pickle.dump(protocol=None) を使用しています。
そのファイルサイズは .xlsx に比べ約半分以下になります。
※ 但し、class srimWS() の構造を「将来変更する」と、.pickle の互換性が無くなります。
よって、元ファイル .xlsx も一緒に残しておいてください。

⑥、⑦、⑧ は、後述の ユーティリティー (upd_MySRIMwb.py) で使用します。

⑨ は、module 開発・デバッグ用のファイルです。

今まで使っていた Excel版 SRIMfit を、pySRIMfit で使いたい場合



① upd_MySRIMwb.py を使います。

1: 元：MySRIMwb.xlsx を、予め
② ~¥pySRIMfit¥_MySRIMwb に 上書きコピー しておく
同時に ~¥pySRIMfit¥_MySRIMwb¥MySRIMwb.pickle を 削除 しておく

2: upd_MySRIMwb.py を実行する

3: Menu= 5) Save Book を選択

4: 2) Save ~tmp.xlsx as ~new.pickle & ~new.xlsx を選択。変換が始まります。

5: Menu= 9) exit で終了してから、

6: 変換出力された ファイルの名前変更：.pickleファイルのみでOKです
MySRIMwb_new.pickle --> MySRIMwb.pickle

7: 名前変更した .pickle ファイルを、~¥pySRIMfit¥_MySRIMwb に保存
以上で、元：MySRIMwb.xlsx と MySRIMwb.pickle が同期されます。

① upd_MySRIMwb.py の 他メニュー を使うと、
- 内容表示：シート名一覧
- SRIM-2013 で計算したファイルの追加
- シートの削除、追加、並べ替え
- 編集結果の保存

等の編集作業もできます。
詳しくは → upd_MySRIMwb.py のコメント文を参照。

取敢えず、ここまで。 今後の展望

現状の pySRIMfit には、Excel版の様な 主だったアプリ は、まだ用意されていませんが、
Pythonist の皆さんなら、このベースモジュールで、様々な応用が考えられると思います。
何か良いアプリができたら、あ吉田にも紹介してください。

開発の本来の目的は、ビーム調整時に取得した SSDテレスコープの ⊿E-E スペクトルの
解析用なのですが（これは鋭意やってみます）、
折角ここまで出来たので、他にも使い道がいろいろありそうですね。

（あ吉田の開発予定）

- 当チーム HP に、html から python を呼び（pyscript かなぁ～）Web上 で SRIM 計算ができるようにしたい。
  いちいち Excel や python を起動するのが面倒なので。
  例えば、Test02 や Test03 などが、Web上で計算できると便利ですよね。

- srimWB() の method を全面的に改造して、argument と return に多態性を持たせたい。
  例）.Enew(wsnm:str, E:float, T:thick) -> float :　→ .Enew(wsnm:str, E:float or list, T:thick) -> float or list :

- そうしてから、現状の Excel版アプリ を、VBAマクロ でなく xlwings 経由の pySRIMfit 呼び出しに改造してみる。
  list 対応にしないと、xlwings 経由の overhead が重くて、Excel版より遅いため。
  MS-Excelも、早く native で python対応 になってくれるとありがたいのですが…。

- TRIM の python版 pyTRIMfit も作れるかなぁ～。
  誰か欲しいですか？ せめてグラフィック程度は、matplotlib で綺麗になりそう。

などなど。暇を見て作っておきます。
では、今後ともよろしくお願い申し上げます。

SRIM-2013 関連情報

◎ pysrim というものがあるそうです。 名前がダブらなくてよかったぁ～。

pysrim 0.5.10 https://pypi.org/project/pysrim/ 2018.11

- Linuxユーザーが、Windows用にしか開発されていない SRIM-2013 を使うための Utility らしいです。
- Debian Wine : Windowsエミュレータ? か、Windows Docker 上に、本家SRIM-2013: Windows executable 動作させておいて、※1 pysrim は、その wrapper methods として働いているようです。
- 本家SRIM.org が、ソースを公開していないので、世の中の材料照射屋は、いろいろと工夫してるんですね。
- 一方で、SRIMfit のアプローチ方法は「志低く」、SRIMの計算出力ファイル(E-Range-Struggling Table)を読み込んで、それを単に内挿補間して使っているだけ。物理は何も入っていません。
  でも、TRIM モンテカルロまでは必要がない、我々・宇宙利用半導体照射試験業界には、SRIMfit レベルの単純計算でかなり満足していますよね。

※1 Linux上で SRIM-2013 という人もいるそうです。 不勉強なので、知りませんでした。

Ziegler‘s SRIM & TRIM on Debian GNU/Linux with wine ; by Ricardo Yanez 2013.07
https://www.calel.org/srim.html

Debian Wine https://wiki.debian.org/Wine Wine ― (originally an acronym for “Wine Is Not an Emulator”) 前述エミュは撤回。失敬。
is a compatibility layer capable of running Windows applications on several POSIX-compliant operating systems,
such as Linux, Mac OSX, & BSD. Instead of simulating internal Windows logic like a virtual machine or emulator,
Wine translates Windows API calls into POSIX calls on-the-fly, eliminating the performance and memory penalties
of other methods and allowing you to cleanly integrate Windows applications into your desktop. だそうです。