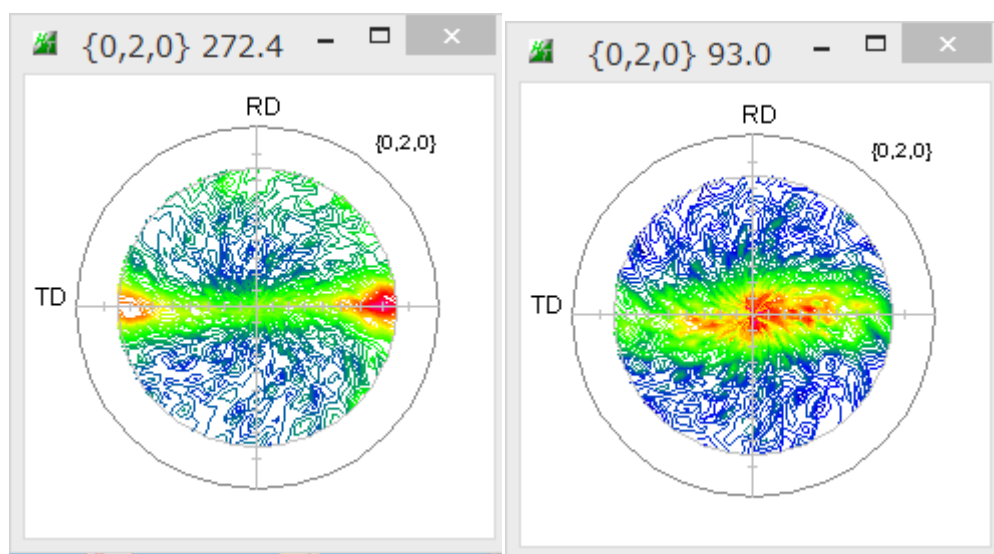


AbsCoefSearchソフトウェア



このような極点図を扱う。

このような極点図は扱えません。

軸配向では吸収の影響で、極点図の中心より外側に向かって徐々に強度が強くなります。

2019年12月02日

HelperTex Office

概要

1 軸配向極点図の吸収補正は非常に微妙な補正である。

本ソフトウェアでは、軸配向極点図の T X T 2 データから最適な軸配向として分散が最小となる試料の厚さを極点図と吸収係数から計算するソフトウェアである。

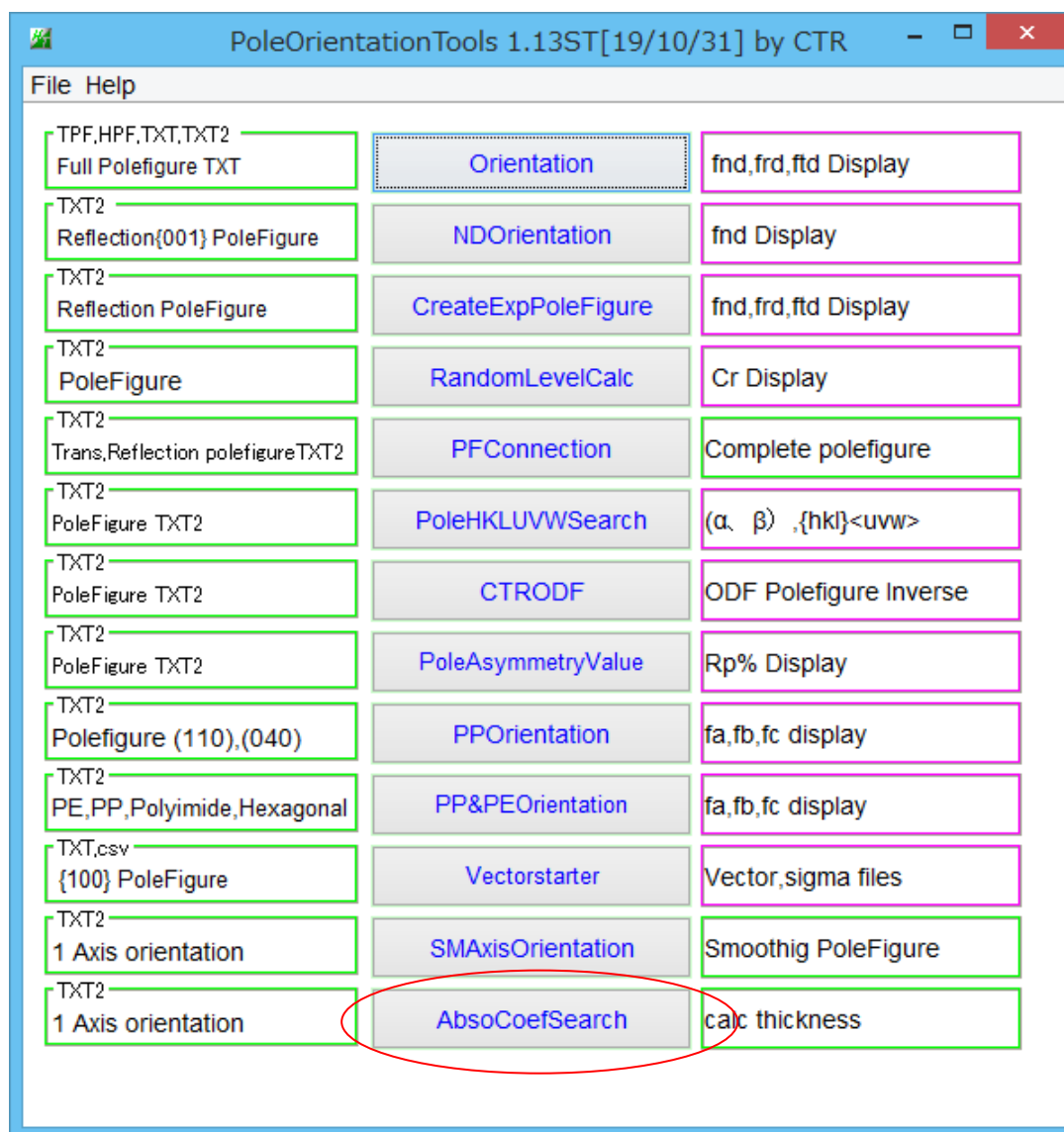
化合物の吸収係数を計算で求めています。バックグラウンド削除は必要ありません。

質量吸収係数などは、International Tables for X-ray Crystallography を参考にしているリガク X線回折ハンドブックを参考にしています。

ソフトウェアの起動

C:\¥CTR¥bin¥AbsoCoefSearch.jar を直接起動

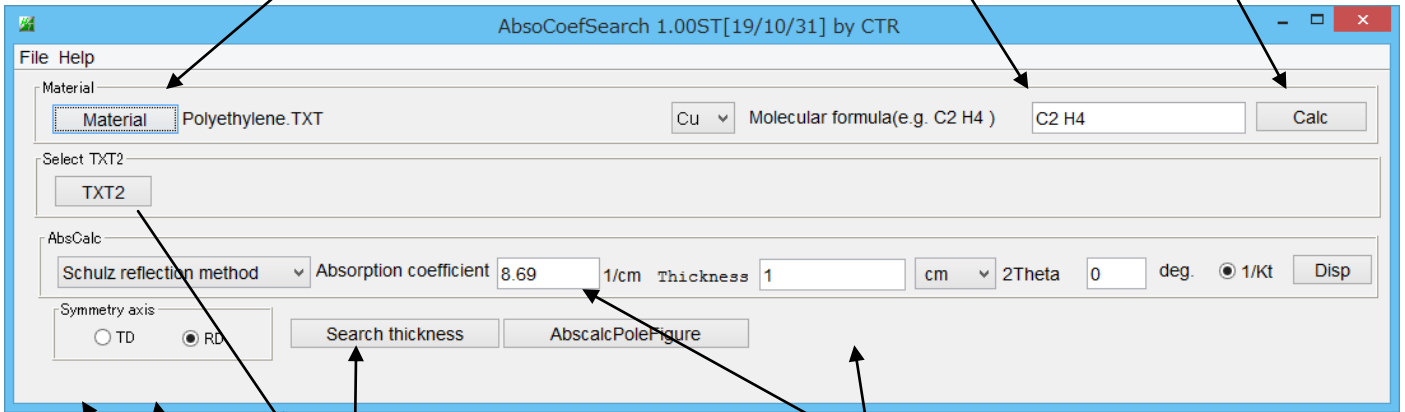
ODFPoleFigure1.5(2)の ToolKit->PoleOrientationToos



ソフトウェアの使い方

1. 材料の選択

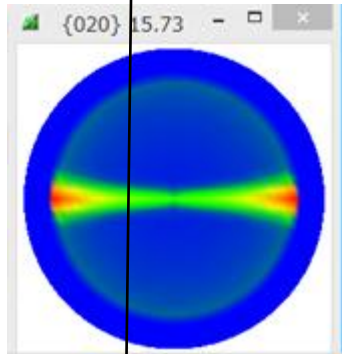
化学式の入力 化合物の吸収係数計算



2. ODFPoleFigure1.5(2)で作成した TXT2 ファイルを選択

材料の線吸収係数が表示される。表示されない場合は手入力
あるいは、1. 0を入力し、吸収係数*厚さを計算する。

3. 対称軸の選択 (吸収計算のため、対称軸に対し平均化を行う)

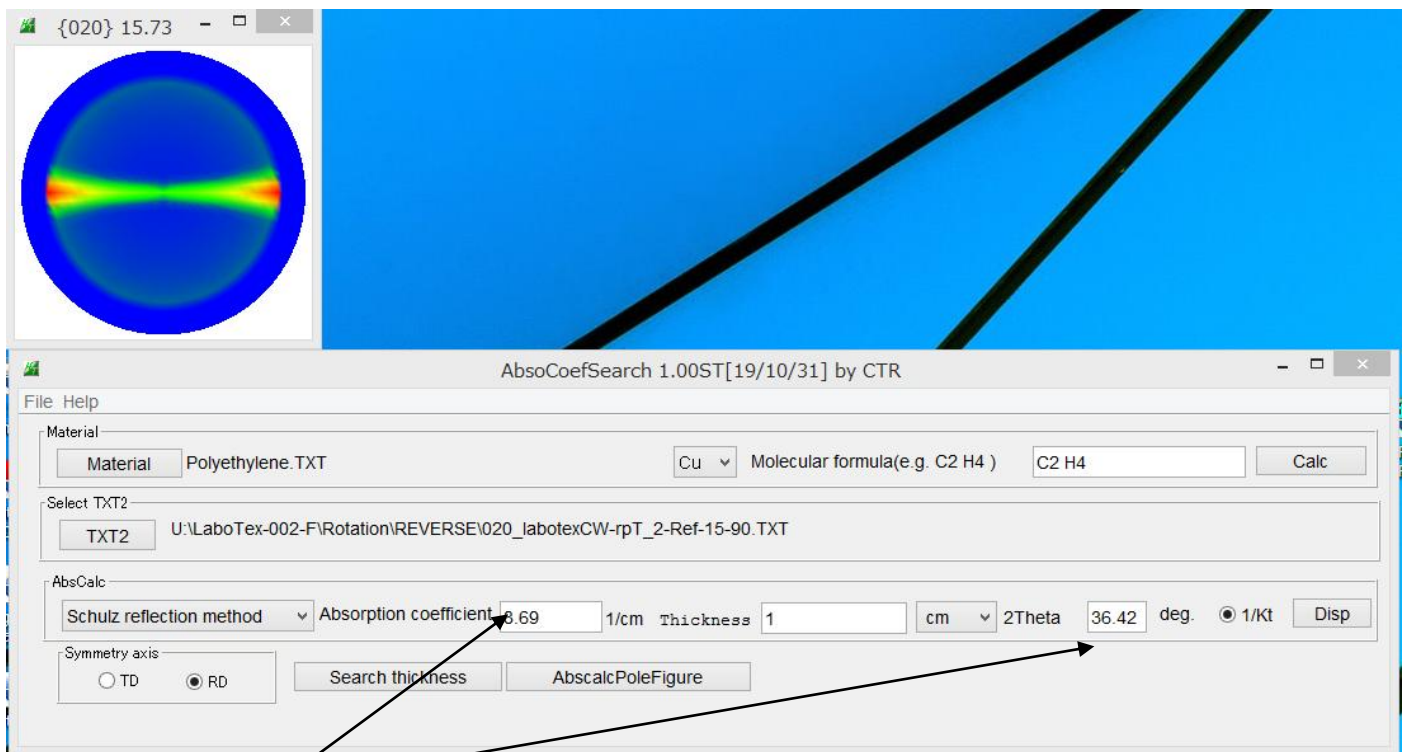


の場合、対称軸はRD

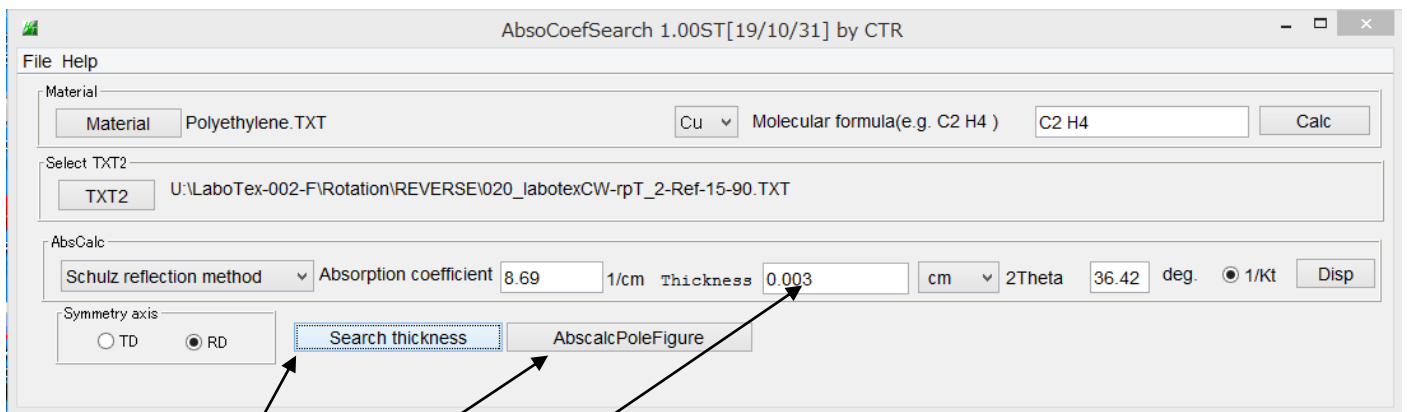
4. 材料の厚さを計算 (軸配向として分散が最小の厚さを計算) し表示

5. 吸収補正の TXT2 を計算

解析例

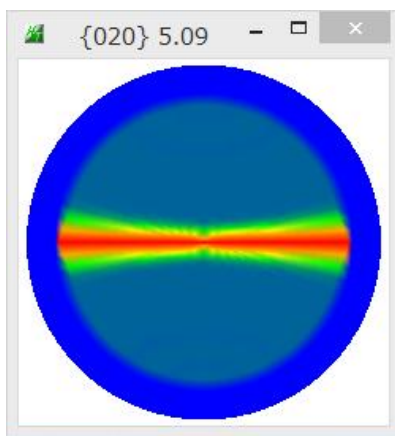


C2H4 の吸収係数と 2θ 角度が表示される



SearchThickness で試料の厚さが計算される。

AbscalcPoleFigure で計算された TXT2 ファイルの作成と極点図表示



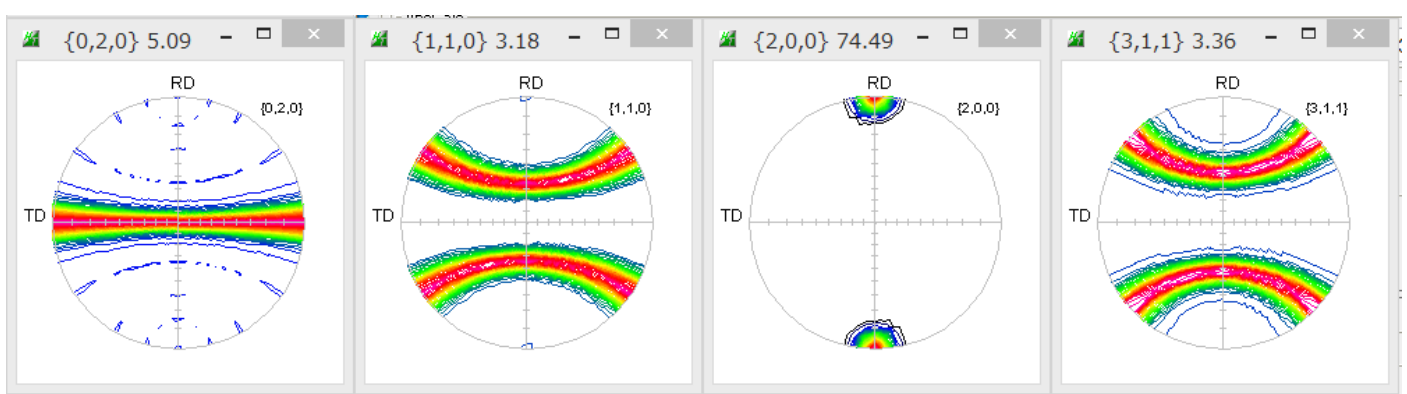
計算されたデータは ABSCALC ホルダに作成

ODF 解析などの複数解析では、計算された試料厚を入力し計算する。

Absorption coefficient 1/cm Thickness cm

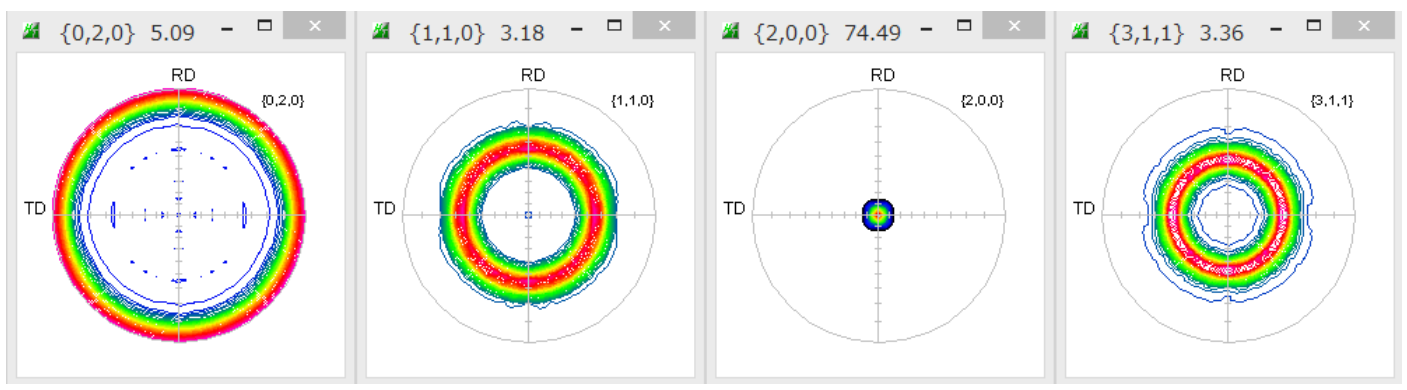
The screenshot shows the ODF software interface. At the top, there are input fields for 'Absorption coefficient' (8.7) and 'Thickness' (0.003). Below this, there are seven circular pole figure plots for different Miller indices: {0,2,0}, {0,2,0}, {1,1,0}, {1,1,0}, {2,0,0}, {2,0,0}, and {3,1,1}. The central panel is titled 'ODFPoleFigure2 3.90T[19/10/31] by CTR'. It contains various settings for calculation conditions, background deletion, peak slits, and defocus functions. The 'AbsCalc' section is active, showing 'Absorption coefficient: 8.7', 'Thickness: 0.003', and '2Theta: 36.418'. The 'Defocus' section has 'LINE-BB-185mm' selected. The 'Smoothing for ADC' section has 'Cycles: 5' and 'Weight: 8'. The 'Normalization' section has 'CTR' selected. The 'OutFiles' section has 'TXT2' selected. The bottom right corner shows 'Select crystal: Monoclinic' and '19/09/16'.

Calc->Connect で



軸配向完全極点図に補正されます。

PFRotation で TD 軸に 90 度回転で



ODF で解析する場合、PFtoODF3 経由でどちらでも入力できます。