AbsoCoefSearchソフトウエア



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*  1 軸配向極点図の吸収補正は非常に微妙な補正である。

本ソフトウエアでは、軸配向極点図のTXT2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エアである。

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。

## ソフトウエアの起動

C:\CTR\Sin\AbsoCoefSearch.jar を直接起動

ODFPoleFigure1.5(2) ToolKit->PoleOrientationToos

PoleOrientationTools 1.13ST[19/10/31] by CTR -				
File Help				
TPF,HPF,TXT,TXT2 Full Polefigure TXT	Orientation	fnd,frd,ftd Display		
TXT2 Reflection{001} PoleFigure	NDOrientation	fnd Display		
Reflection PoleFigure	CreateExpPoleFigure	fnd,frd,ftd Display		
PoleFigure	RandomLevelCalc	Cr Display		
TXT2 Trans,Reflection polefigureTXT2	PFConnection	Complete polefigure		
- TXT2 PoleFigure TXT2	PoleHKLUVWSearch	(α, β) ,{hkl} <uvw></uvw>		
- TXT2 PoleFigure TXT2	CTRODF	ODF Polefigure Inverse		
- TXT2 PoleFigure TXT2	PoleAsymmetryValue	Rp% Display		
Polefigure (110),(040)	PPOrientation	fa,fb,fc display		
- TXT2 PE,PP,Polyimide,Hexagonal	PP&PEOrientation	fa,fb,fc display		
- TXT,csv {100} PoleFigure	Vectorstarter	Vector,sigma files		
1 Axis orientation	SMAxisOrientation	Smoothig PoleFigure		
1 Axis orientation	AbsoCoefSearch	calc thickness		

ソフトウエアの使い方



5. 吸収補正のTXT2を計算

解析例

AbsoCoefSearch 1.00ST[19/10/31] by CTR - AbsoCoefSearch 1.00ST[19/10/31] by CTR - He Help Material Material Polyethylene.TXT Cu v Molecular formula(e.g. C2 H4) C2 H4 Calc Select TxT2 TXT2 U:LaboTex-002-FiRotation/REVERSE:020_labotexCW-rpT_2-Ref-15-90.TXT AbsoCalc Schulz reflection method v Absorption coefficient 8.69 1/cm Thickness 1 cm v 2Theta 36.42 deg. • 1/kt Disp Symmetry axis O TD • RD Search thickness AbscalcPoleFigure	{020} 15.73 - 🗆 🗡		
A AbsoCoefSearch 1.00ST[19/10/31] by CTR - C Material Material Material Polyethylene.TXT Cu v Molecular formula(e.g. C2 H4) C2 H4 Calc Select TXT2 TXT2 U:\LaboTex-002-F\Rotation\REVERSE\020_labotexCW-rpT_2-Ref-15-90.TXT AbsCalc Schulz reflection method v Absorption coefficient 8.69 1/cm Thickness 1 cm v 2Theta 36.42 deg. 1/kt Disp Symmetry axis TD O RD Search thickness AbscalcPoleFigure			
Material       Material       Polyethylene.TXT       Cu v       Molecular formula(e.g. C2 H4 )       C2 H4       Calc         Select TXT2       TXT2       U:\LaboTex-002-F\Rotation\REVERSE\020_labotexCW-rpT_2-Ref-15-90.TXT       AbsCalc       Schulz reflection method v       Absorption coefficient 8.69       1/cm Thickness       1       cm v 2Theta       36.42       deg. • 1/kt       Disp         Symmetry axis       O TD • RD       Search thickness       AbscalcPoleFigure       1       cm v 2Theta       36.42       deg. • 1/kt       Disp	a File Help	AbsoCoefSearch 1.00ST[19/10/31] by CTR	- □ ×
Select TXT2       U:\LaboTex-002-F\Rotation\REVERSE\020_labotexCW-rpT_2-Ref-15-90.TXT         AbsCalc       Schulz reflection method v       Absorption coefficient 8.69       1/cm Thickness       1       cm v       2Theta       36.42       deg. I/kt       Disp         Symmetry axis       O TD I RD       Search thickness       AbscalcPoleFigure       AbscalcPoleFigure	Material Polyethylene.TXT	Cu v Molecular formula(e.g. C2 H4 ) C2 H4	Calc
AbsCalc         Schulz reflection method <ul> <li>Absorption coefficient</li> <li>B.69</li> <li>1/cm Thickness</li> <li>1</li> <li>cm              <li>2Theta</li> <li>36.42 deg.              <li>1/Kt Disp</li> </li></li></ul> Symmetry axis           O TD         RD    Search thickness AbscalcPoleFigure	Select TXT2 TXT2 U:\LaboTex-002-F\Ro	tation\REVERSE\020_labotexCW-rpT_2-Ref-15-90.TXT	
Symmetry axis O TD    RD   Search thickness   AbscalcPoleFigure	AbsCalc Schulz reflection method v Abs	sorption coefficient 8.69 1/cm Thickness 1 cm v 2Theta 36.42 deg	g. <ul> <li>1/Kt</li> </ul>
	Symmetry axis	earch thickness AbscalcPoleFigure	

## C2H4 の吸収係数と2 θ 角度が表示される

AbsoCoefSearch 1.00ST[19/10/31] by CTR – – ×
File Help
Material
Material     Polyethylene.TXT     Cu      Molecular formula(e.g. C2 H4 )     C2 H4     Calc
Select TXT2
TXT2 U:\LaboTex-002-F\Rotation\REVERSE\020_labotexCW-rpT_2-Ref-15-90.TXT
AbsCalc
Schulz reflection method v Absorption coefficient 8.69 1/cm Thickness 0.003 cm v 2Theta 36.42 deg. (1/Kt Disp
Symmetry axis
O TD O RD Search thickness AbscalcPoleFigure
SearchThickness C詞科の厚され計算される。
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 ホルガに作成
ーーーーーーーーーーーーーーーーーーーーーーーーーーーーーーーーーーーー

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。



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。