

ルーチンワーク用極点データ処理

A s c P o l e F i l e C h a n g e r

毎日、大量の極点処理を行うために作成された極点データ処理

入力データは、R I N T A S C I I テキストデータ

出力は、処理結果のR I N T A S C I I テキストデータ、P F t o O D F 向けテキストデータ

処理をサポートするデータ

バックグラウンド位置を指定する S L I T - T A B L E

D e f o c u s 曲線を指定する D e f o c u s - T A B L E

処理内容

R D 補正 (自動計算も可能)

スムージング

バックグラウンド計算

吸収補正

D e f c o u s 補正

強度の内部規格化

予め決めること

ODF解析する場合、複数の極点図が必要です。

この測定条件を材料別に決定します。

例えばCuターゲットを用いてAl試料の測定

	BG1-Slit	BG1-2θ	ピーク-slit	ピーク-2θ	BG2-Slit	BG2-2θ
{111}	2mm	35.0度	7mm	実測	2mm	41.0度
{200}	2mm	43.0度	7mm	実測	2mm	47.0度
{220}	2mm	60.0度	7mm	実測	2mm	70.0度
{311}	2mm	75.0度	7mm	実測	2mm	80.5度

Al-Slit-TABLE は

```
111,2.0,35.0,2.0,41.0↓  
200,2.0,43.0,2.0,47.0↓  
220,2.0,60.0,2.0,70.0↓  
311,2.0,75.0,2.0,80.5↓
```

ファイル名 Al-Slit-TABLE.txt として作成。これがバックグラウンド位置指定ファイルです。

あるいは CuターゲットでCu試料の測定

	BG1-Slit	BG1-2θ	ピーク-slit	ピーク-2θ	BG2-Slit	BG2-2θ
{111}	2mm	41.0度	7mm	実測	2mm	45.5度
{200}	2mm	48.5度	7mm	実測	2mm	52.5度
{220}	2mm	70.5度	7mm	実測	2mm	77.0度
{311}	2mm	87.5度	7mm	実測	2mm	92.5度

Cu-Slit-TABLE は

```
111,2.0,41.0,2.0,45.5  
200,2.0,48.5,2.0,52.5  
220,2.0,70.5,2.0,77.0  
311,2.0,87.5,2.0,92.5
```

ファイル名 Cu-Slit-TABLE.txt として作成。

作成理由

ルーチンでODF解析する場合、バックグラウンド位置とスリットの幅を変更する理由がありません。

又、RINT-ASCIIテキストファイルにはバックグラウンド情報がありません。

AscPoleFileChanger ソフトウェアで解析する場合、このファイル作成は必須です。

最初に測定する試料

X線による極点解析で重要な事は、光学系の補正を行う為の Defocus 曲線の作成です。
この Defocus 曲線は、無配向試料の測定で得られます。

例えば、A1のODF解析を行うのであれば、A1の無配向試料が必要です。
もし手持ちがない場合、A1の粉末で代用します。

測定条件は、Al-Slit-TABLE 条件で測定します。

Defocus-TABLEの作成

Defocus-TABLE は材料が異なれば別の TABLE が必要です。

A1 試料の場合、Al-Defocus-TABLE.txt

Cu 試料の場合、Cu-Defocus-TABLE.txt

Fe-A 試料の場合、Fe-A-Defocus-TABLE.txt

Fe-G 試料の場合、Fe-G-Defocus-TABLE.txt

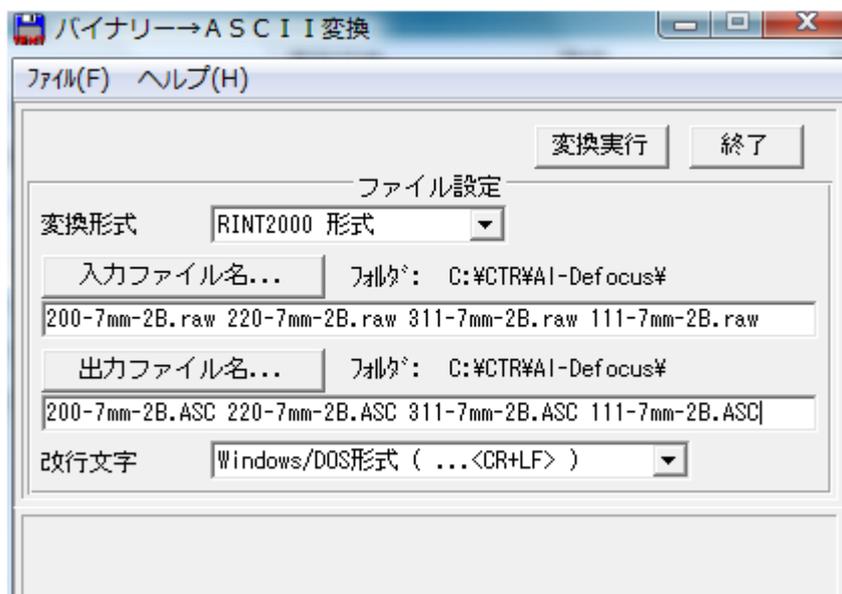
など

A1の無配向試料からDefocus-TABLEの作成

Al-Slit-TABLE.txt に従った測定を行う。

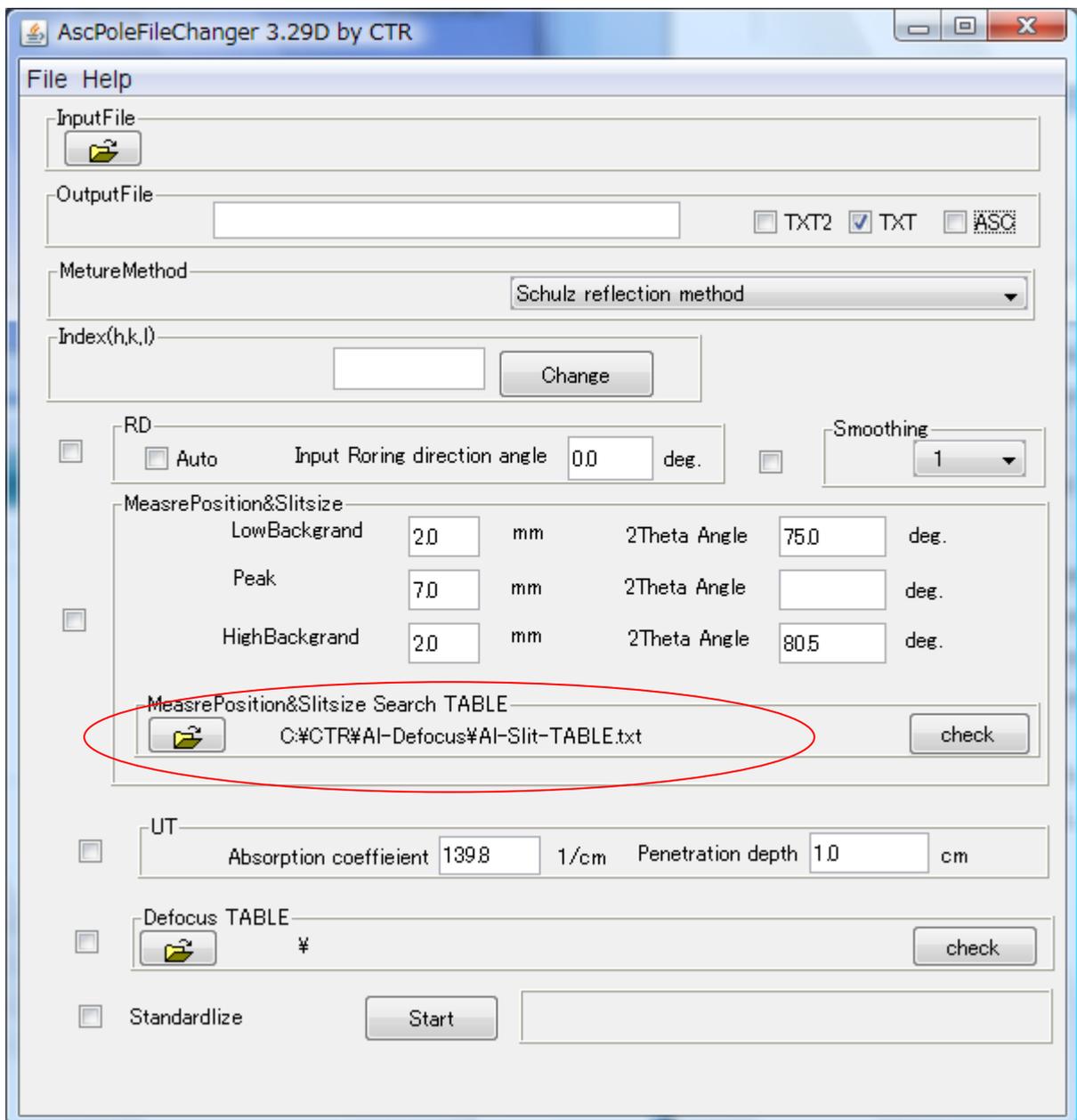
TXT ファイル (1)		
Al-Slit-TABLE.txt	2008/08/02 8:56	TXT ファイル
生データ (4)		
111-7mm-2B.raw	2008/06/26 11:09	生データ
200-7mm-2B.raw	2008/06/27 1:09	生データ
220-7mm-2B.raw	2008/06/27 15:43	生データ
311-7mm-2B.raw	2008/06/30 23:32	生データ

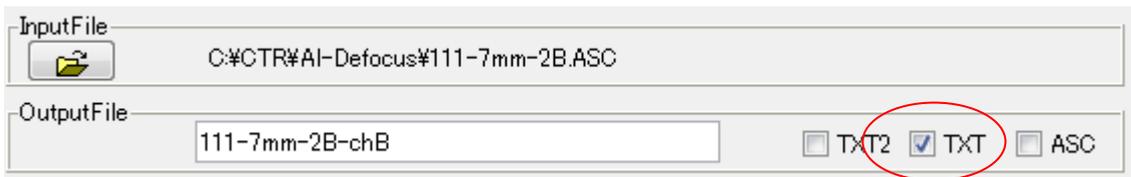
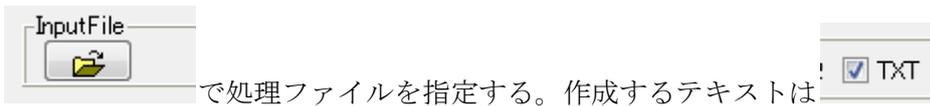
バイナリー→ASCII変換ソフトでRINT2000ASCIIファイル作成



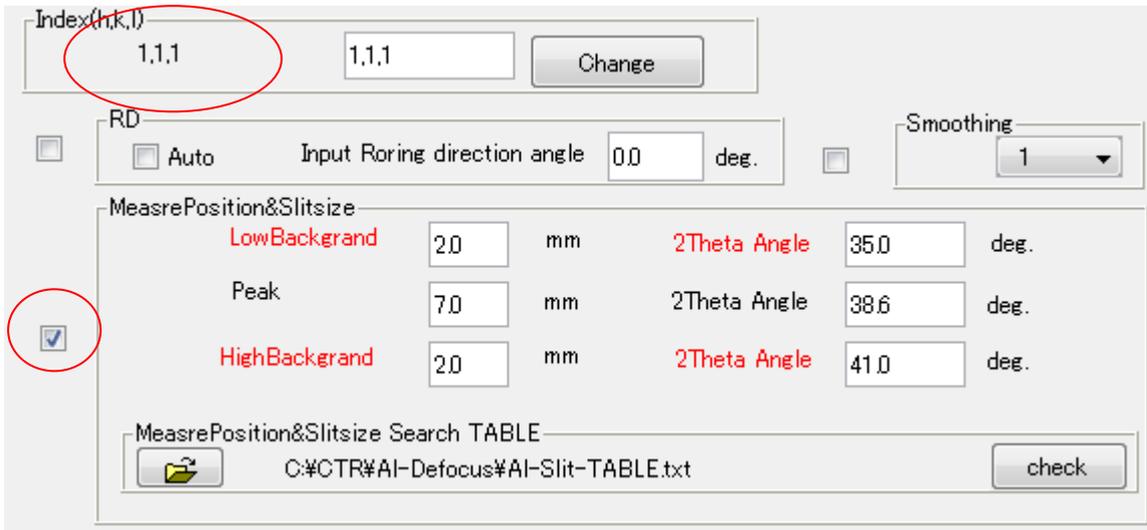
RINT2000アスキー (4)		
111-7mm-2B.ASC	2008/08/02 8:58	RINT2000アスキー
200-7mm-2B.ASC	2008/08/02 8:58	RINT2000アスキー
220-7mm-2B.ASC	2008/08/02 8:58	RINT2000アスキー
311-7mm-2B.ASC	2008/08/02 8:58	RINT2000アスキー
TXT ファイル (1)		
AI-Slit-TABLE.txt	2008/08/02 8:56	TXT ファイル
生データ (4)		
111-7mm-2B.raw	2008/06/26 11:09	生データ
200-7mm-2B.raw	2008/06/27 1:09	生データ
220-7mm-2B.raw	2008/06/27 15:43	生データ
311-7mm-2B.raw	2008/06/30 23:32	生データ

AscPoleFileChangerを使ってデータ処理
Slit-TABLEを指定する。





処理はバックグラウンド除去



指定したファイルに登録された{h,k,l}を元に、Slit-TABLE からバックグラウンド情報を表示

{h,k,l}が間違っていたら変更し する。



作成されるファイル名は、



111.7mm-2B-chBS.txt

他のデータも同様に処理する。

TXT ファイル (5)		
111-7mm-2B-chBS.TXT	2008/08/02 9:13	TXT ファイル
200-7mm-2B-chBS.TXT	2008/08/02 9:13	TXT ファイル
220-7mm-2B-chBS.TXT	2008/08/02 9:13	TXT ファイル
311-7mm-2B-chBS.TXT	2008/08/02 9:13	TXT ファイル
AI-Slit-TABLE.txt	2008/08/02 8:56	TXT ファイル

バックグラウンド処理と強度の規格化が行われたデータ

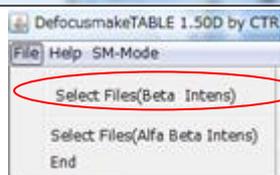
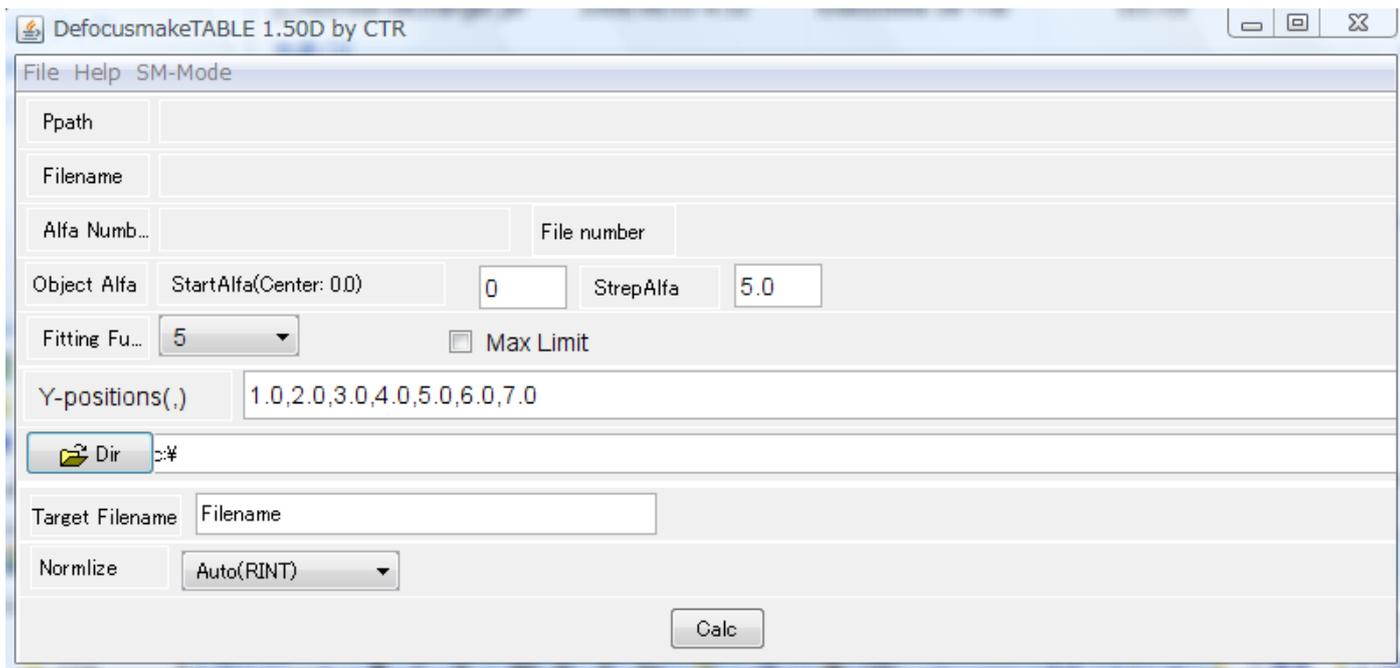
処理結果の極点図を見る場合、TXTと共にASCにチェックを入れて処理すれば

処理結果のASCファイルが作成され、RINT極点処理で表示できます。

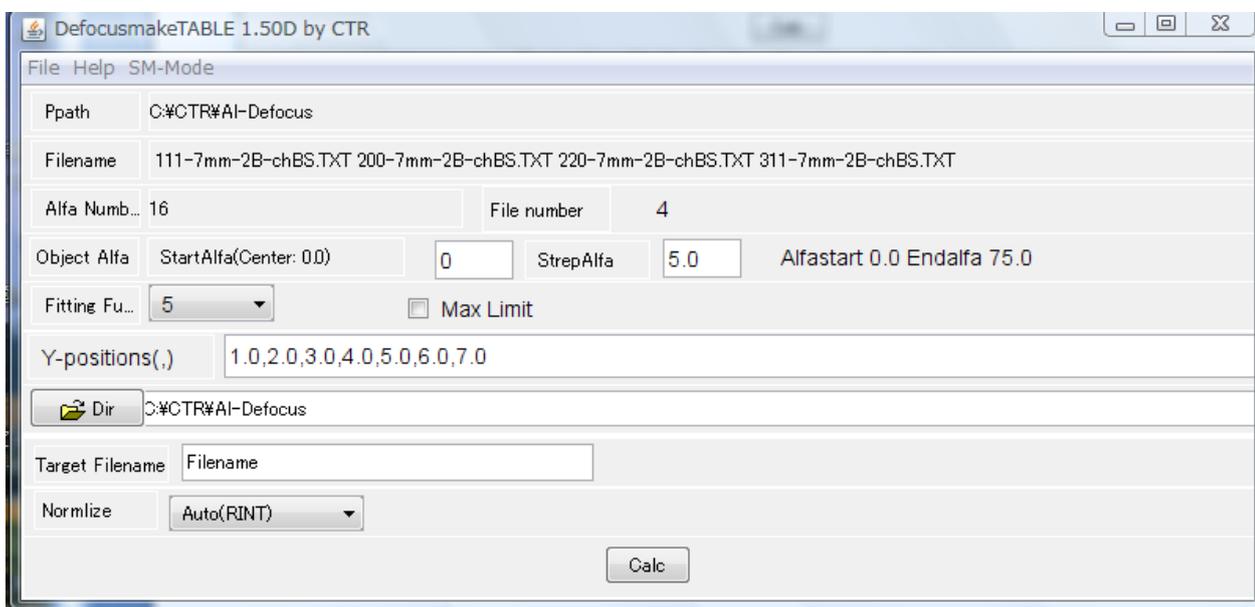
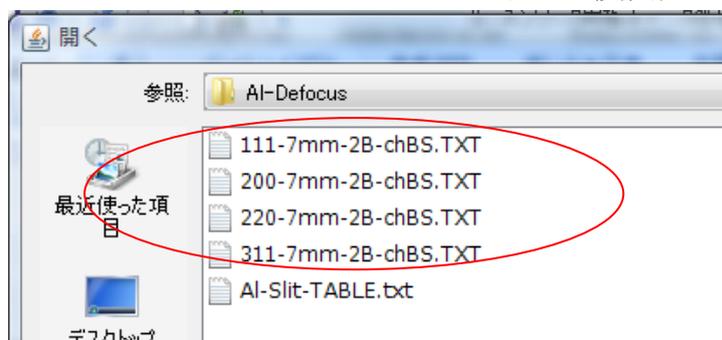
Defocus-TABLEの作成

バックグラウンドが処理された無配向試料TXTデータから

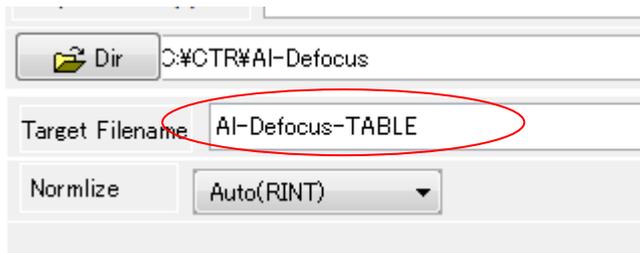
DefocusMakeTABLEプログラムで作成



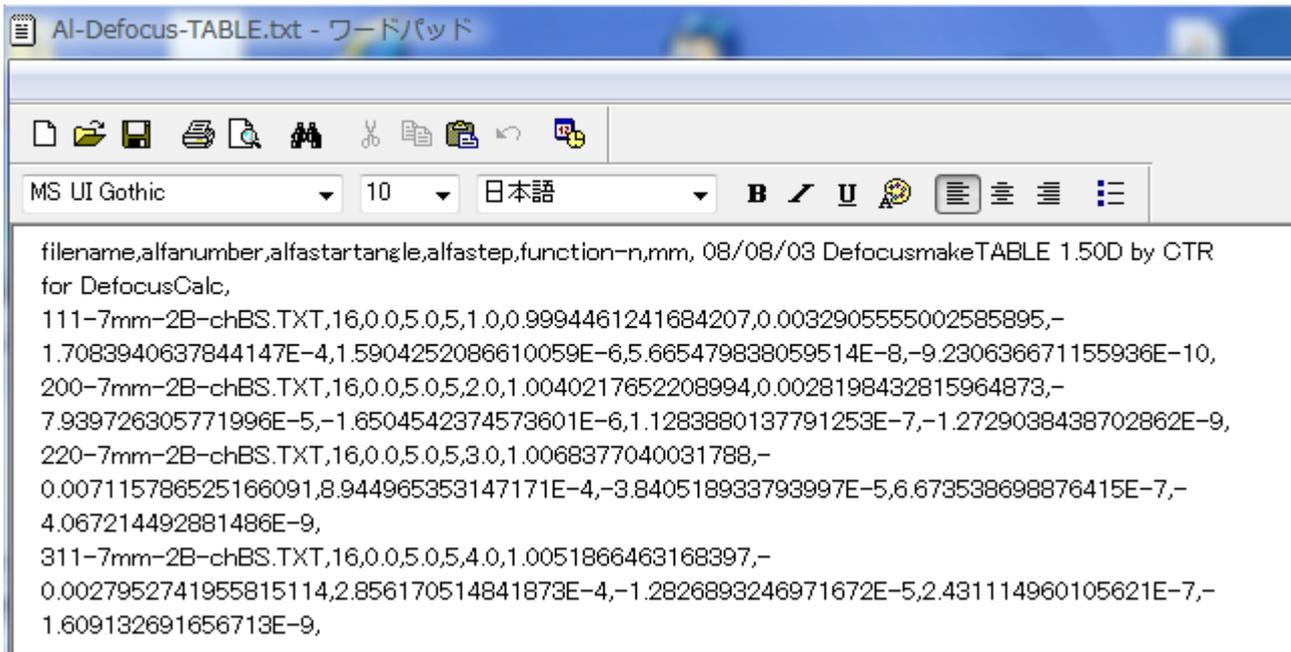
でTXTデータを同時に複数指定



作成するファイル名を AI-defocus-TABLE とする。



で計算スタート以下の T A B L E が表示される。



作成されるファイル

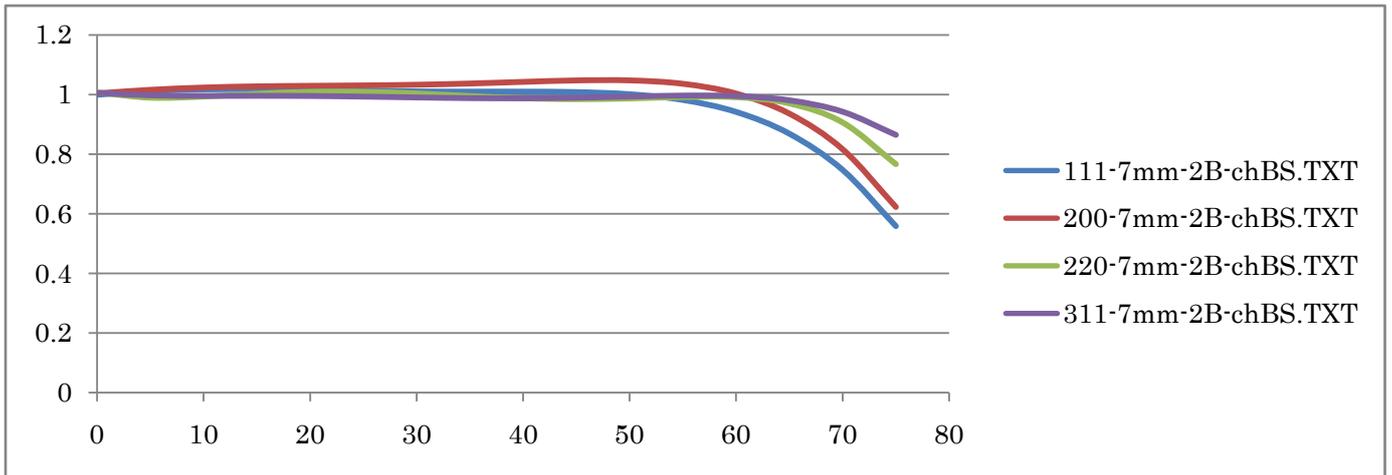
TXT ファイル (7)		
111-7mm-2B-chBS.TXT	2008/08/02 9:13	TXT ファイル
200-7mm-2B-chBS.TXT	2008/08/02 9:13	TXT ファイル
220-7mm-2B-chBS.TXT	2008/08/02 9:13	TXT ファイル
311-7mm-2B-chBS.TXT	2008/08/02 9:13	TXT ファイル
AI-Defocus-TABLE.txt	2008/08/03 4:49	TXT ファイル
AI-Slit-TABLE.txt	2008/08/02 8:56	TXT ファイル
realAI-Defocus-TABLE.txt	2008/08/03 4:49	TXT ファイル

AI-Defocus-TABLE.txt は、A s c P o l e F i l e C h a n g e r 用の T A B L E

realAI-Defocus-TABLE.txt は、E x c e l 表示用ファイル

_0,0,5,0,10,0,15,0,20,0,25,0,30,0,35,0,40,0,45,0,50,0,55,0,60,0,65,0,70,0,75,0,		
111-7mm-2B-chBS.TXT,0.99945,1.01186,1.01733,1.0179,1.01576,1.0129,1.01081,1.01006,1.010		
200-7mm-2B-chBS.TXT,1.00402,1.016,1.02363,1.02763,1.02944,1.03075,1.03307,1.03716,1.04		
220-7mm-2B-chBS.TXT,1.00684,0.98922,0.99299,1.00244,1.00884,1.00889,1.00319,0.99475,0.9		
311-7mm-2B-chBS.TXT,1.00519,0.99689,0.99524,0.99532,0.99466,0.99265,0.98988,0.98758,0.9		

realAI-Defocus-TABLE を Excel で表示させると



図では横軸 0 → 80 度 0 : は極点図の中心です。
極点図の外側では強度が低くなるのが分かります。

これで、A1 用の準備が完了しました。

