

データベースからdefocus曲線を計算する

DefocusCalc用テーブルの作り方

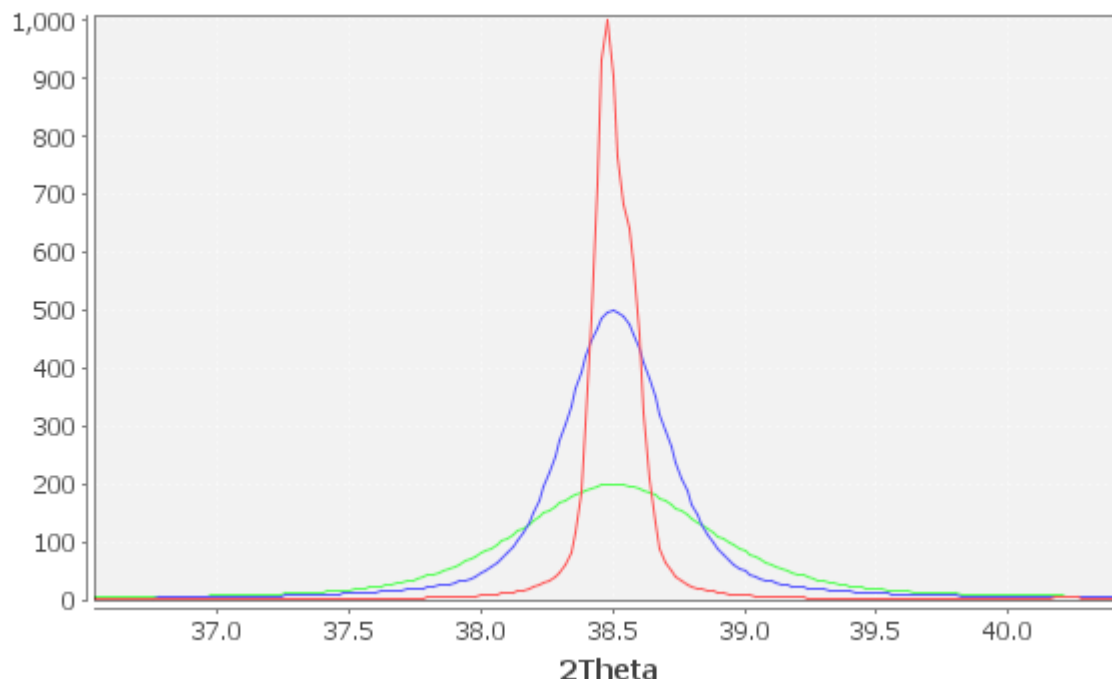
2011年05月06日

概要

反射極点図では `defocus` 補正が重要である。

この補正に用いる `defocus` 曲線は測定試料と同一材料で無配向試料の極点図測定から得られる。しかしながら、無配向試料を得ることが難しい場合、測定試料の粉末から極点図測定を行い得られる。この現象は、極点図測定で試料が傾くにつれて、プロファイルが広がり、有限なスリットから外れる為、極点図の外側で強度が低下する。

2θ 角度が低いほど低下する比率が大きくなり、受光スリット幅も影響している。



参考文献は、

Defocusing for the Schulz Technique of Determining Preferred Orientation*

E. TENCKHOFF

Oak Ridge National Laboratory, Oak Ridge, Tennessee 37830

(Received 16 January 1970; in final form 3 April 1970)

極点測定の光学系は従来と異なり、多様な光学系で測定が行われている。

同一試料を測定しても、測定される極点図は若干異なり、多様な光学系に合った補正が必要になる。

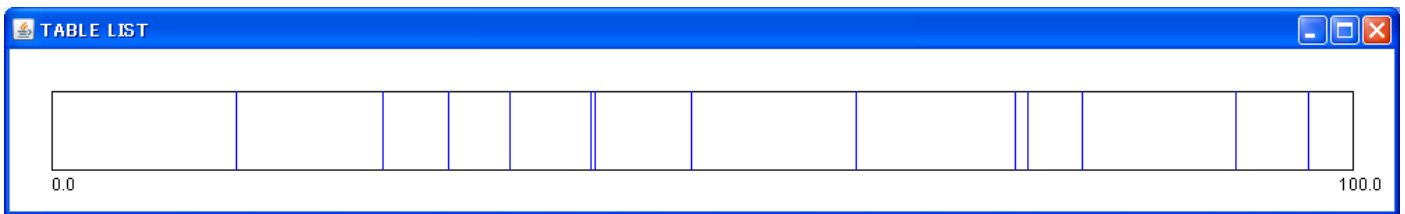
`DefocusCalc` ソフトウェアは、光学系別に特有なデータベースを作成し、

データベースから必要とする `defocus` 極点図、あるいは `defocus` 多項式近似曲線を提供する

実験結果から

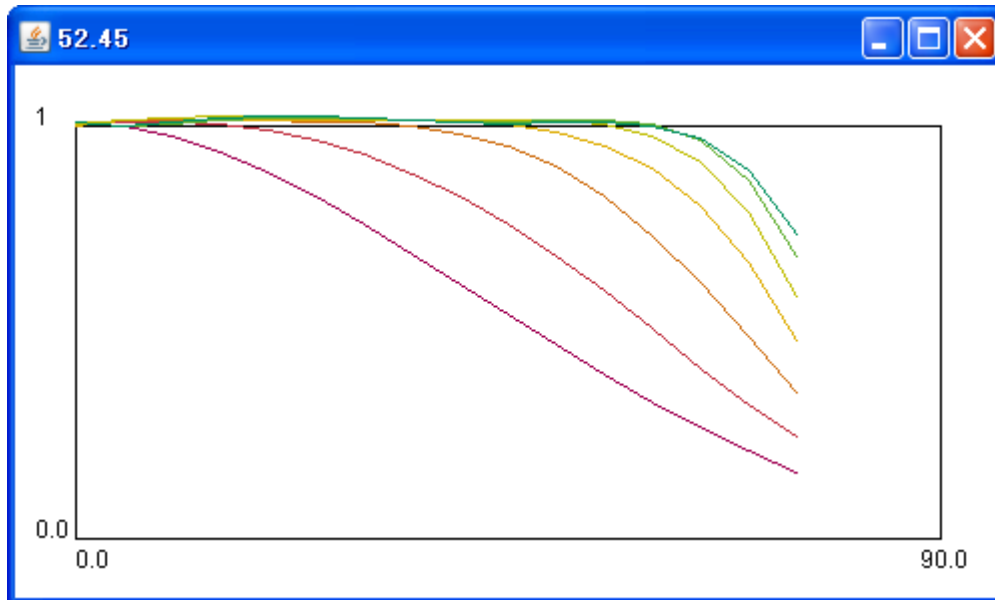
`defocus` 曲線は、測定 2θ 角度と受光スリットに依存する。

DefocusCalcの動作説明



上記図は測定 2θ 角度を表す。

枠内をクリックすると



$2\theta = 52.45$ 度のRSスリット幅1, 2, 3, 4, 5, 6, 7 mmのdefocus曲線を表す。
このデータは

C:\CTR\work\DefocusCalc\TABLE\POINT-BB185mm

名前	サイズ	種類	更新日時
17.40	2 KB	テキスト文書	2011/05/06 10:58
28.66	2 KB	テキスト文書	2011/05/06 11:11
33.72	2 KB	テキスト文書	2011/05/06 13:47
38.48	2 KB	テキスト文書	2011/05/06 9:14
44.72	2 KB	テキスト文書	2011/05/06 9:27
45.00	2 KB	テキスト文書	2011/05/05 16:12
52.45	2 KB	テキスト文書	2011/05/05 16:25
65.12	2 KB	テキスト文書	2011/05/06 9:42
77.36	2 KB	テキスト文書	2011/05/05 16:43
78.24	2 KB	テキスト文書	2011/05/06 9:58
82.46	2 KB	テキスト文書	2011/05/06 10:06
94.24	2 KB	テキスト文書	2011/05/06 8:22
99.82	2 KB	テキスト文書	2011/05/06 8:31
124.1	2 KB	テキスト文書	2011/05/06 8:41

このファイルを表で表している。

5 2. 4 5. TXTファイル

```
TextDisplay 1.003GS by CTR user:HelperTex CTR
File Help
filename,alfanumber,alfastartangle,alfastep,function-n,mm, 11/05/05 DefocusmakeTABLE 3.153GS by CTR user:HelperTex CTR for DefocusCalc,
200-1mm_chBOS_2.TXT,16,0.0,5.0,5,1.0,1.005541377426183,-8.562412629936915E-5,-3.4647669379166764E-4,2.046154330008432E-6,2.0914384718612642E-8,-1.7607454700143491E-10,
200-2mm_chBOS_2.TXT,16,0.0,5.0,5,2.0,1.0015704705939624,0.0023073286343229535,-1.6639355381251508E-4,1.6476789137924937E-6,-6.367832827265998E-8,5.585161045122272E-10,
200-3mm_chBOS_2.TXT,16,0.0,5.0,5,3.0,0.9973444690825358,0.004799555281500488,-4.7201683326772285E-4,1.962852699997004E-5,-3.549390373560078E-7,1.9379382082220436E-9,
200-4mm_chBOS_2.TXT,16,0.0,5.0,5,4.0,0.9980194205909754,0.0038768848723182564,-2.963263257601998E-4,8.59628434998685E-6,-8.467642524133805E-8,-3.8393287112667945E-11,
200-5mm_chBOS_2.TXT,16,0.0,5.0,5,5.0,1.0024516200979126,0.0015983349205592034,7.360024835182766E-5,-9.685124448864797E-6,2.6065800447422465E-7,-2.1541088115954395E-9,
200-6mm_chBOS_2.TXT,16,0.0,5.0,5,6.0,1.0058702648658433,-0.004592611923563505,6.979937989200946E-4,-3.228765566910206E-5,5.987305644763804E-7,-3.88979644192495E-9,
200-7mm_chBOS_2.TXT,16,0.0,5.0,5,7.0,1.005781505418997,-0.003920181586737523,6.4188706789902E-4,-2.9839427350671428E-5,5.455914525935629E-7,-3.4820648546636358E-9,
|
filename,alfanumber,alfastartangle,alfastep,function-n,mm,
200-1mm_chBOS_2.TXT,16,0.0,5.0,5,1.0,1.005541377426183,-8.562412629936915E-5,-3.4647669379166764E-4,2.046154330008432E-6,2.0914384718612642E-8,-1.7607454700143491E-10,
200-2mm_chBOS_2.TXT,16,0.0,5.0,5,2.0,1.0015704705939624,0.0023073286343229535,-1.6639355381251508E-4,1.6476789137924937E-6,-6.367832827265998E-8,5.585161045122272E-10,
200-3mm_chBOS_2.TXT,16,0.0,5.0,5,3.0,0.9973444690825358,0.004799555281500488,-4.7201683326772285E-4,1.962852699997004E-5,-3.549390373560078E-7,1.9379382082220436E-9,
200-4mm_chBOS_2.TXT,16,0.0,5.0,5,4.0,0.9980194205909754,0.0038768848723182564,-2.963263257601998E-4,8.59628434998685E-6,-8.467642524133805E-8,-3.8393287112667945E-11,
200-5mm_chBOS_2.TXT,16,0.0,5.0,5,5.0,1.0024516200979126,0.0015983349205592034,7.360024835182766E-5,-9.685124448864797E-6,2.6065800447422465E-7,-2.1541088115954395E-9,
200-6mm_chBOS_2.TXT,16,0.0,5.0,5,6.0,1.0058702648658433,-0.004592611923563505,6.979937989200946E-4,-3.228765566910206E-5,5.987305644763804E-7,-3.88979644192495E-9,
200-7mm_chBOS_2.TXT,16,0.0,5.0,5,7.0,1.005781505418997,-0.003920181586737523,6.4188706789902E-4,-2.9839427350671428E-5,5.455914525935629E-7,-3.4820648546636358E-9,
```

スリット幅別に 5 次の多項式で曲線を保存している。

データベース用測定

同一 2θ 角度に対し、7 個のパラメータ別に極点図を測定する。

パラメータは、スリットの幅である。

測定は $start$ 角度から $stop$ 角度まで、5 度間隔で測定

(測定間隔は等間隔なら 5 度以外でも OK、例えば、Image データは 1 度が適当)

データ処理

バックグラウンドの除去

強度の規格化

上記ファイル名は { 2 0 0 } 極点図を 1 mm から 7 mm で測定し、

データ処理として、

B 0 : low,high のバックグラウンド強度を使いバックグラウンド除去

S : 強度の規格化

が行われ

ファイルフォーマットは

__2. TXT : α 、 β 、I のテキストデータ

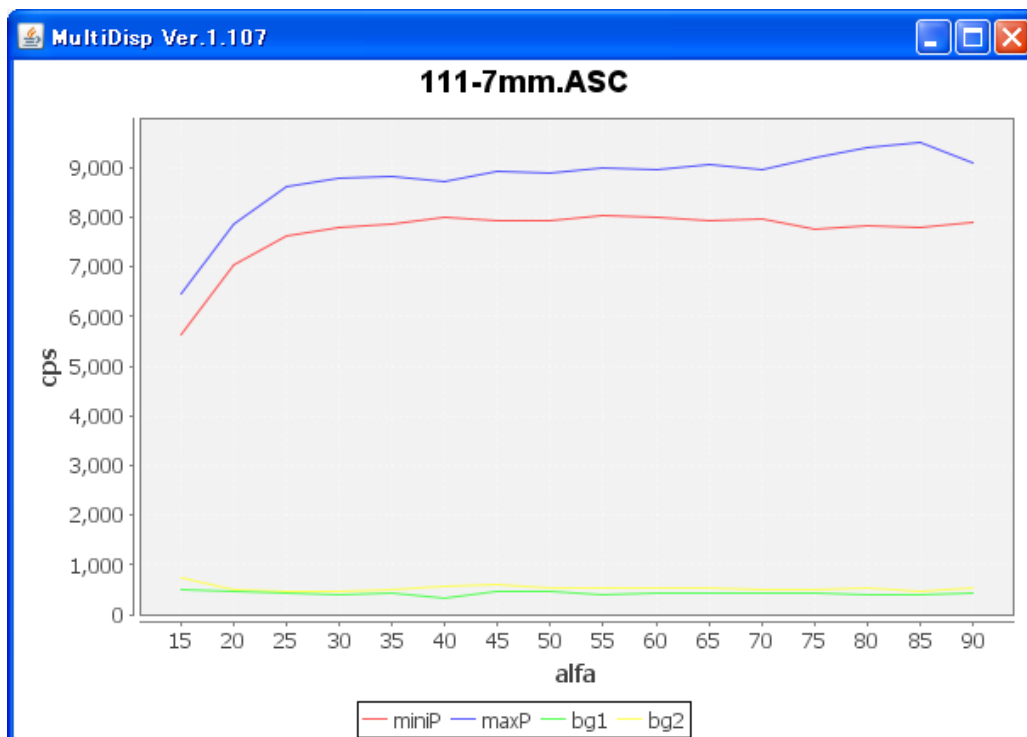
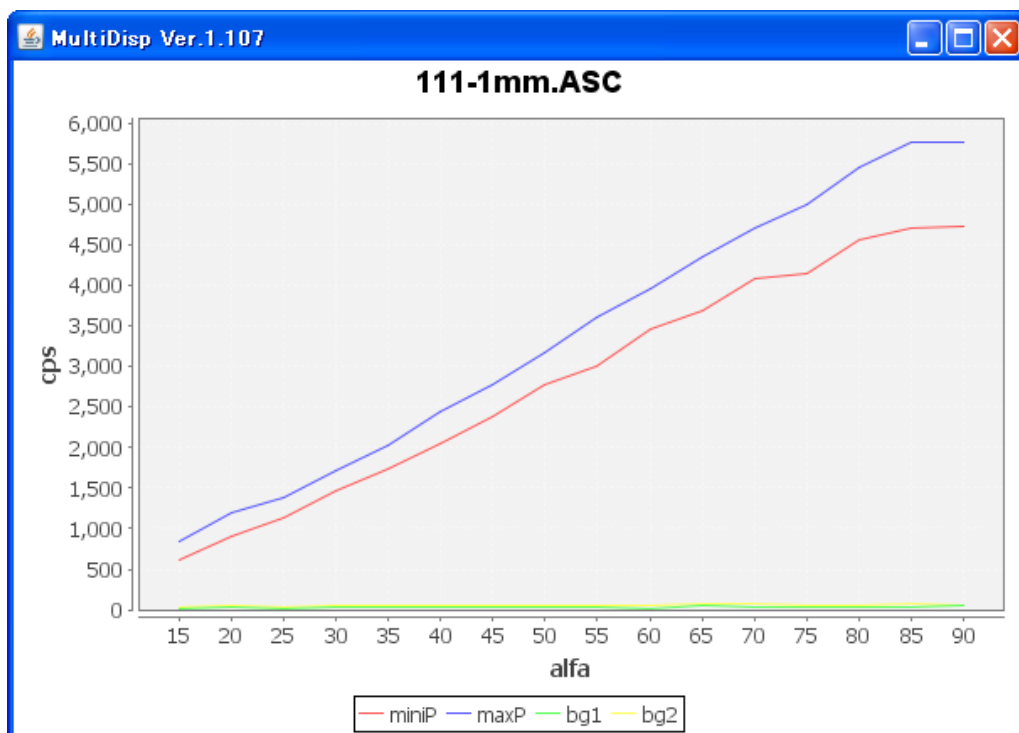
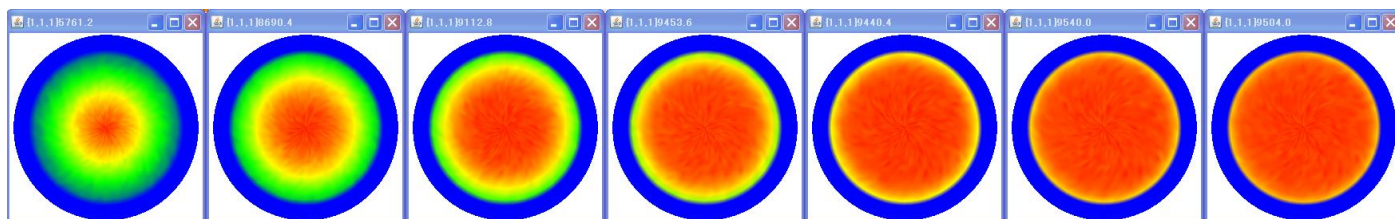
多項式近似

次数は拘らないが、実験結果から次数 5 が適当

測定例

A 1 粉末をC o 管球で { 1 1 1 } 極点図を 1 mm から 7 mm で測定

ODFPoleFigure で表示処理



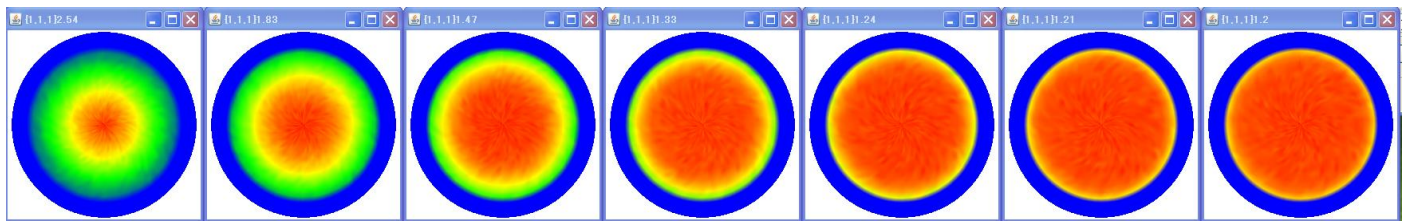
プロファイル

青赤：ピークプロファイルの最大強度、最小強度を α でプロット

緑黄：バックグラウンドの low、high 強度

バックグラウンド補正と強度の規格化

Max=2.54 1.83 1.47 1.33 1.24 1.21 1.2



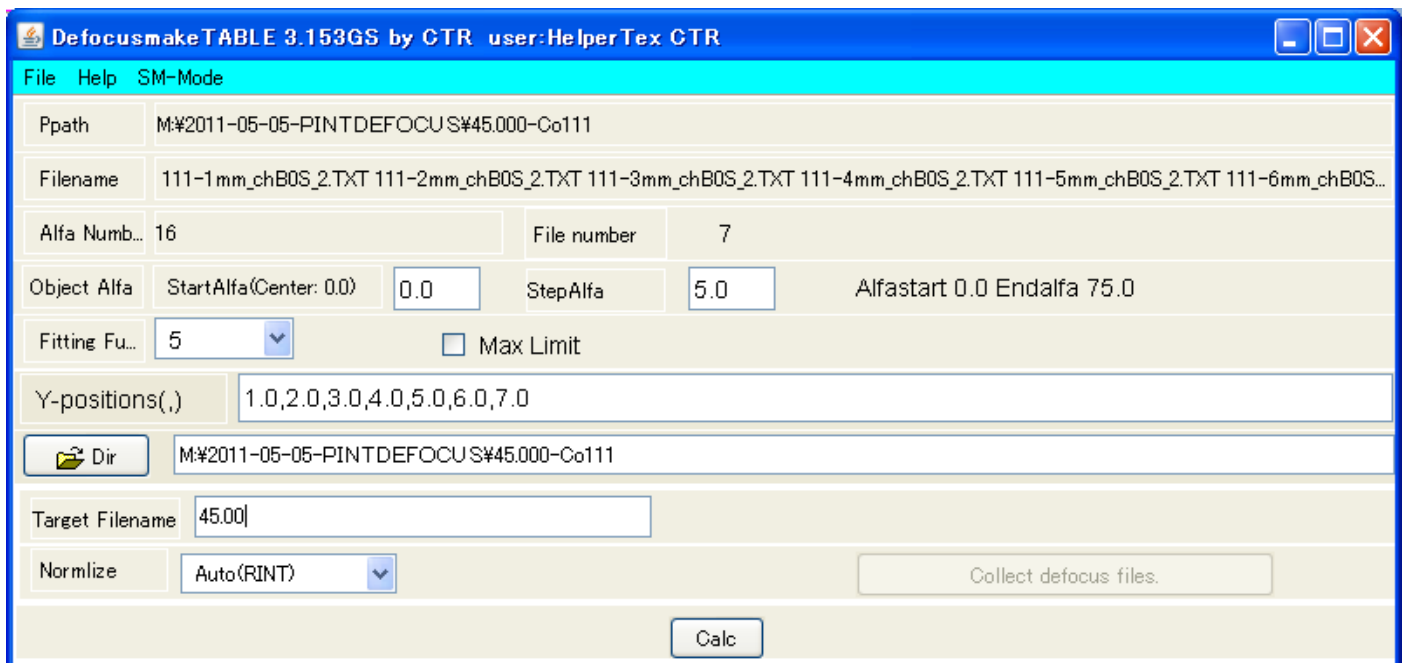
入力データ

111-1mm	22 KB	RINT2000アスキー	2011/05/05 16:07
111-2mm	22 KB	RINT2000アスキー	2011/05/05 16:07
111-3mm	22 KB	RINT2000アスキー	2011/05/05 16:07
111-4mm	23 KB	RINT2000アスキー	2011/05/05 16:07
111-5mm	23 KB	RINT2000アスキー	2011/05/05 16:07
111-6mm	23 KB	RINT2000アスキー	2011/05/05 16:07
111-7mm	23 KB	RINT2000アスキー	2011/05/05 16:07

バックグラウンド処理、規格化された TXT2 ファイル

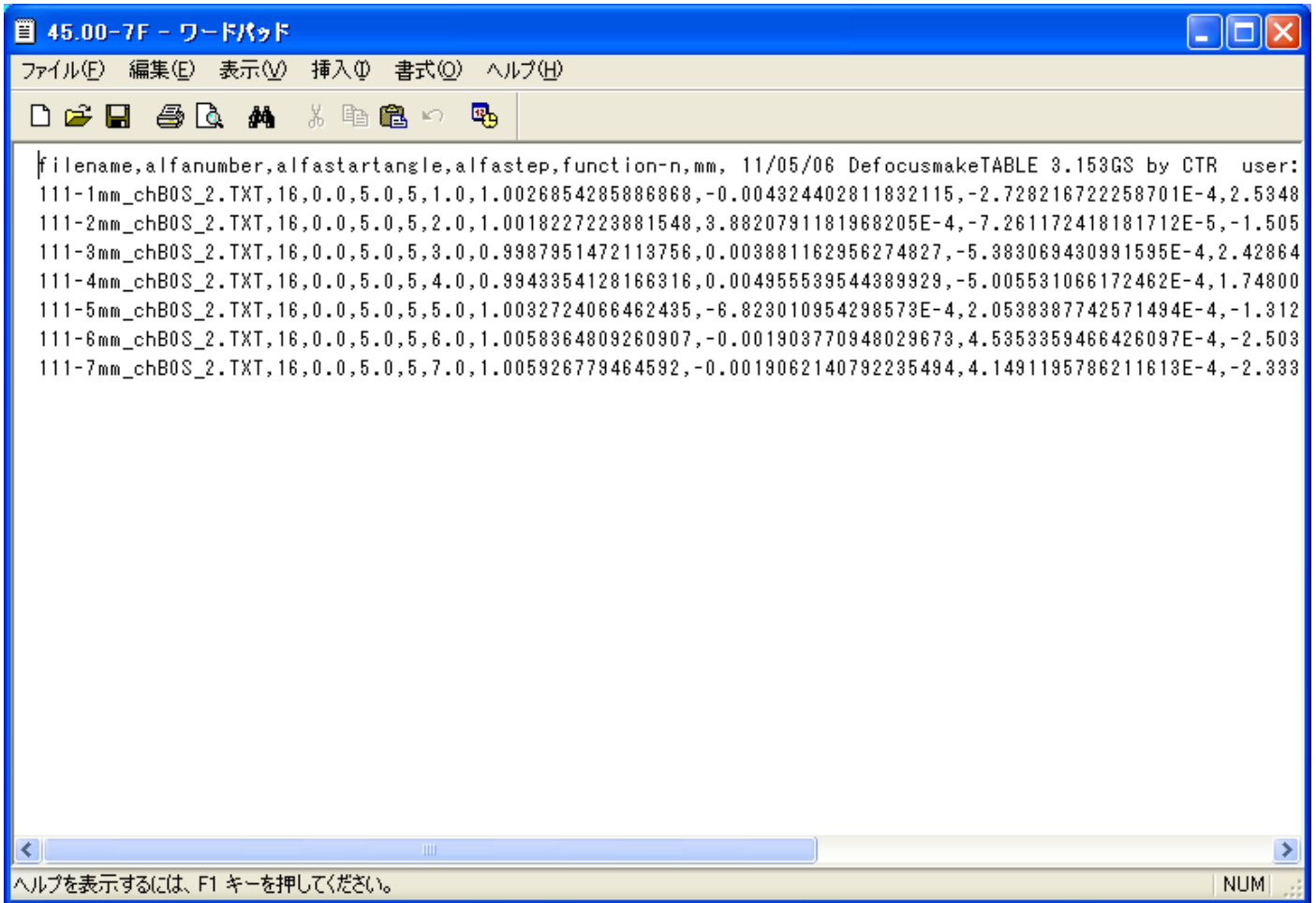
111-1mm_chBOS_2	22 KB	テキスト文書	2011/05/06 14:55
111-2mm_chBOS_2	22 KB	テキスト文書	2011/05/06 14:55
111-3mm_chBOS_2	22 KB	テキスト文書	2011/05/06 14:55
111-4mm_chBOS_2	22 KB	テキスト文書	2011/05/06 14:55
111-5mm_chBOS_2	22 KB	テキスト文書	2011/05/06 14:55
111-6mm_chBOS_2	22 KB	テキスト文書	2011/05/06 14:55
111-7mm_chBOS_2	22 KB	テキスト文書	2011/05/06 14:55

DefocusmakeTEBLEソフトウェアで多項式近似を計算



計算したデータのファイル名を測定 2θ 角度 45.00 とする。

Calc



45.00-7F	2 KB テキスト文書	2011/05/06 15:01
real45.00-7F	2 KB テキスト文書	2011/05/06 15:01

ファイルが作成される。

45.00-7F.TXT が Defocus Calc 用データベースとなる。

Real45.00-7F. TXT を Excel で表示

