

I n v e r s e A 1 1 による

r a n d o m 試料なしで I C D D の強度比による逆極点

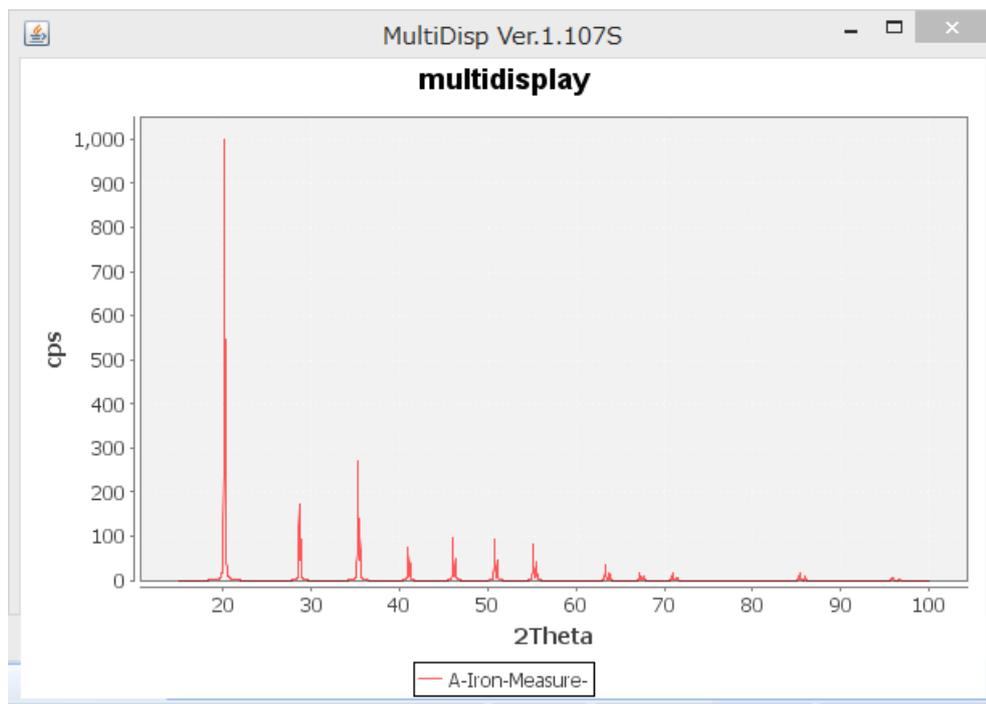
2 0 1 8 年 1 1 月 2 8 日

H e l p e r T e x O f f i c e

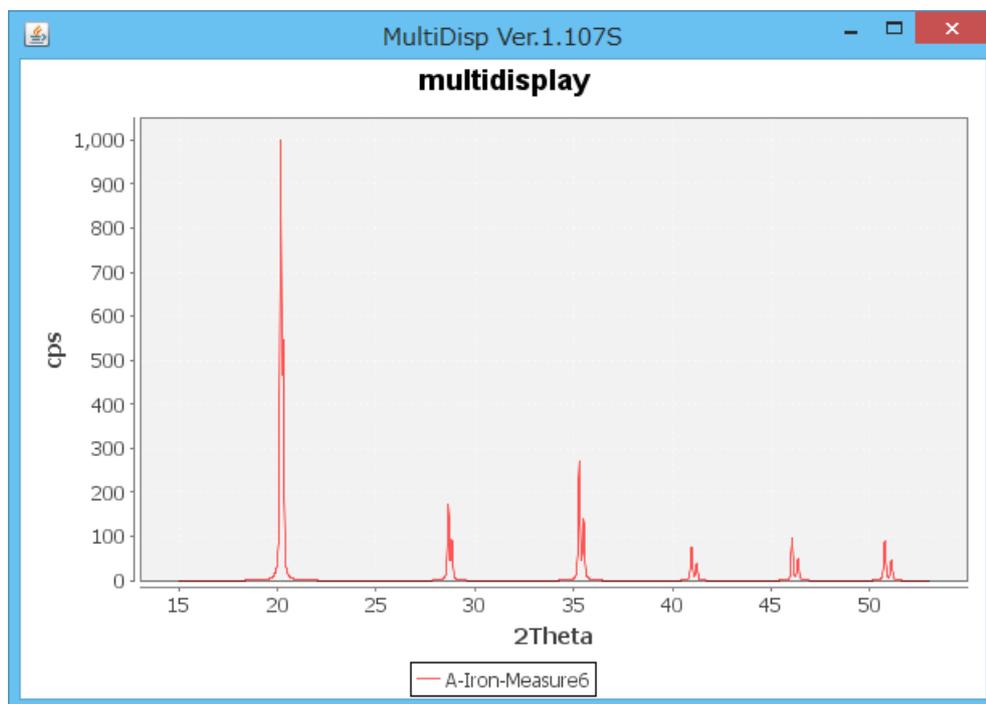
概要

連続データを分割し逆極点計算を行う,InverseAll ソフトウェアでは、広い範囲のデータを用いて計算が行われているが、狭い範囲のデータに対し計算を行うとE r r o rが発生します。

I C D Dデータ

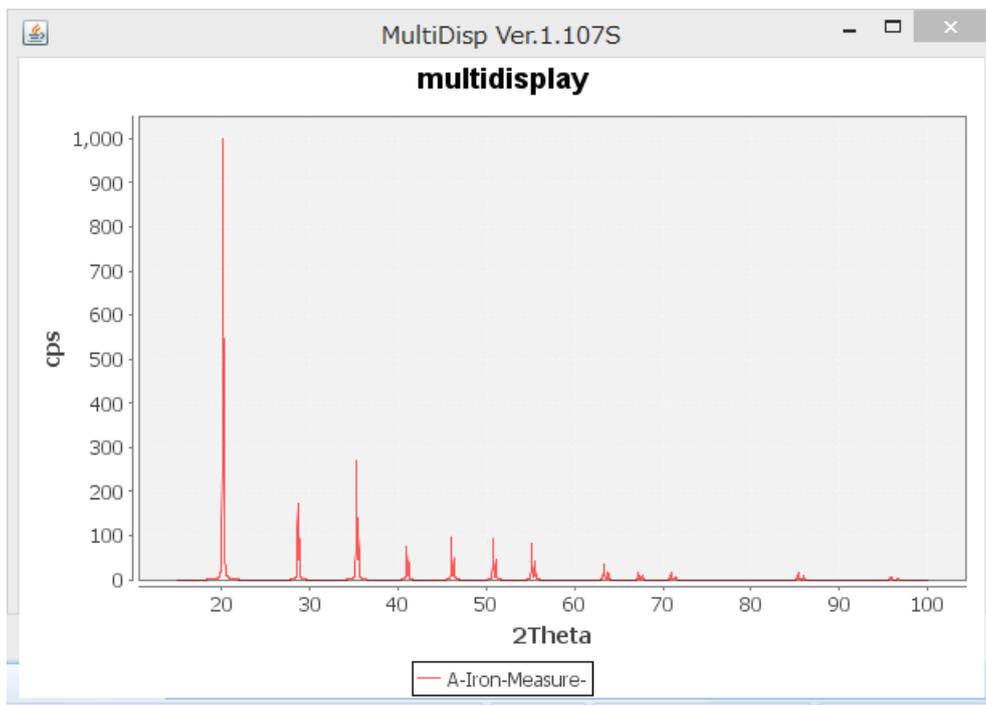


に対し、



で計算を行った場合で説明します。

測定データが



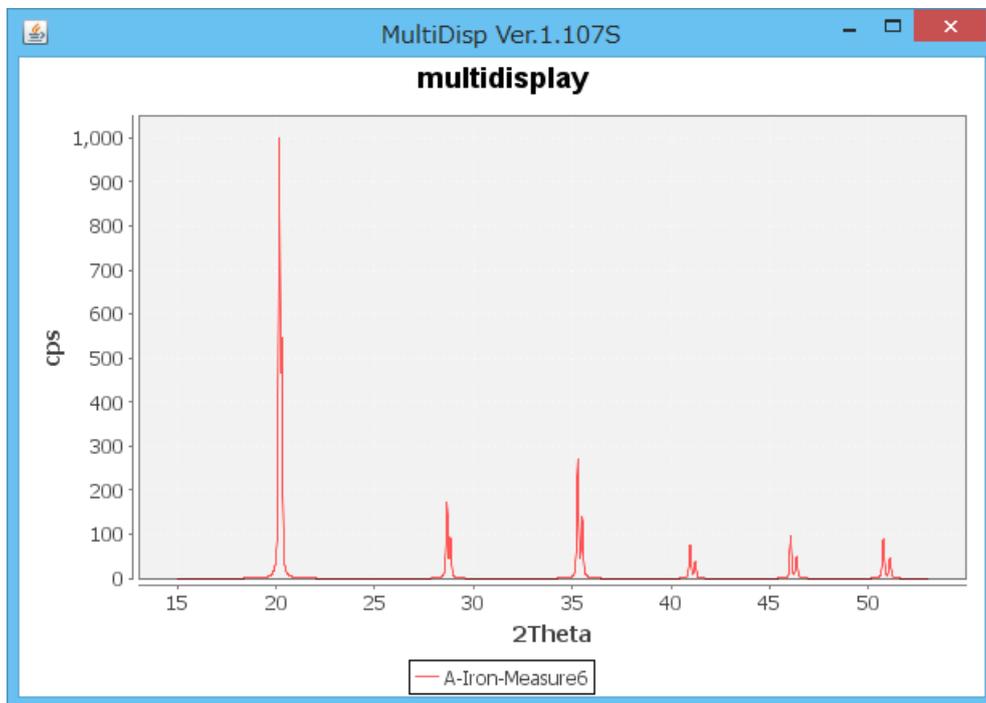
の場合

|CDDmode Standardization BGsmoints=3 PEAK

	[110]	[200]	[211]	[220]	[310]	[222]	[321]	[411]	[420]	[332]	[521]	[442]
FullASC	1.005	0.993	0.989	0.994	0.993	0.994	0.997	1.0	1.003	1.003	1.006	1.009

ほぼ、全てが1.0になります。

測定データが、



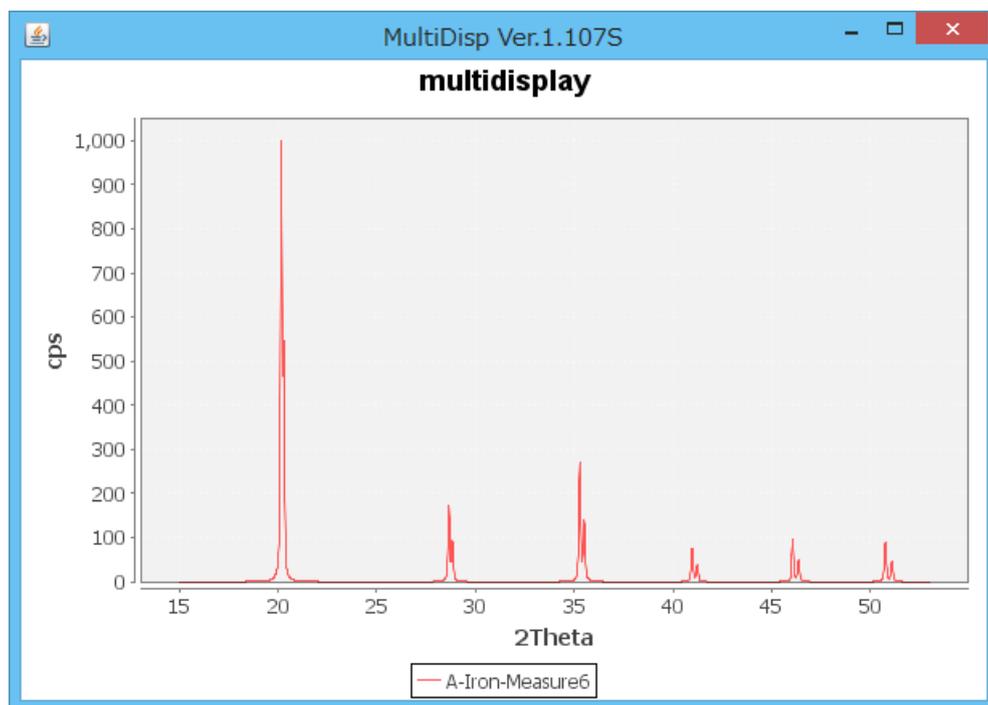
の場合

|CDDmode Standardization BGsmoints=3 PEAK

	[110]	[200]	[211]	[220]	[310]	[222]	[321]	[411]	[420]	[332]	[521]	[442]
TMPASC	1.108	1.095	1.09	1.097	1.095	1.096	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0

若干、1.0を上回ります。

しかし、測定データが、



の場合、ICDDデータを

A-Iron-Measure6-IntegralDataDISP

Cubic

2.8664 (1.0)

2.8664 (1.0)

2.8664 (1.0)

90.0

90.0

90.0

0.7093

6

1	1	0	100.0	2.0269	20.155
2	0	0	17.53	1.4332	28.654
2	1	1	27.85	1.1702	35.284
2	2	0	7.8	1.0134	40.969
3	1	0	9.97	0.9064	46.066
2	2	2	9.39	0.8275	50.758

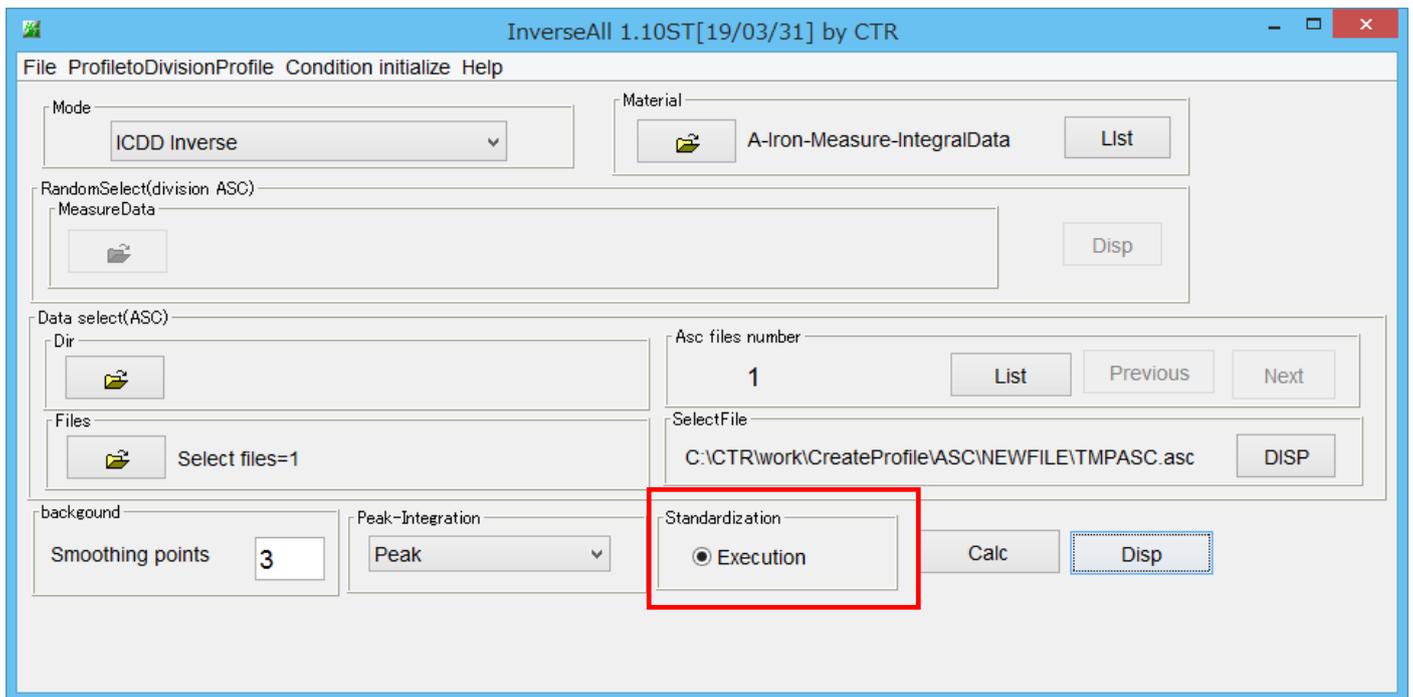
6本にすれば

ICDDmode Standardization BGsmppoints=3 PEAK

	[110]	[200]	[211]	[220]	[310]	[222]
TMPASC	1.005	0.993	0.989	0.994	0.993	0.994

ほぼ1.0になります。

この現象の原因はInverseAllのExecutionの計算時、100に規格化する範囲の問題です。



入力データは6本の場合、6本を100に規格化します。

しかし、ICDDが12本の場合、12本による100の規格化が行われています。

6本の100に規格化とは、

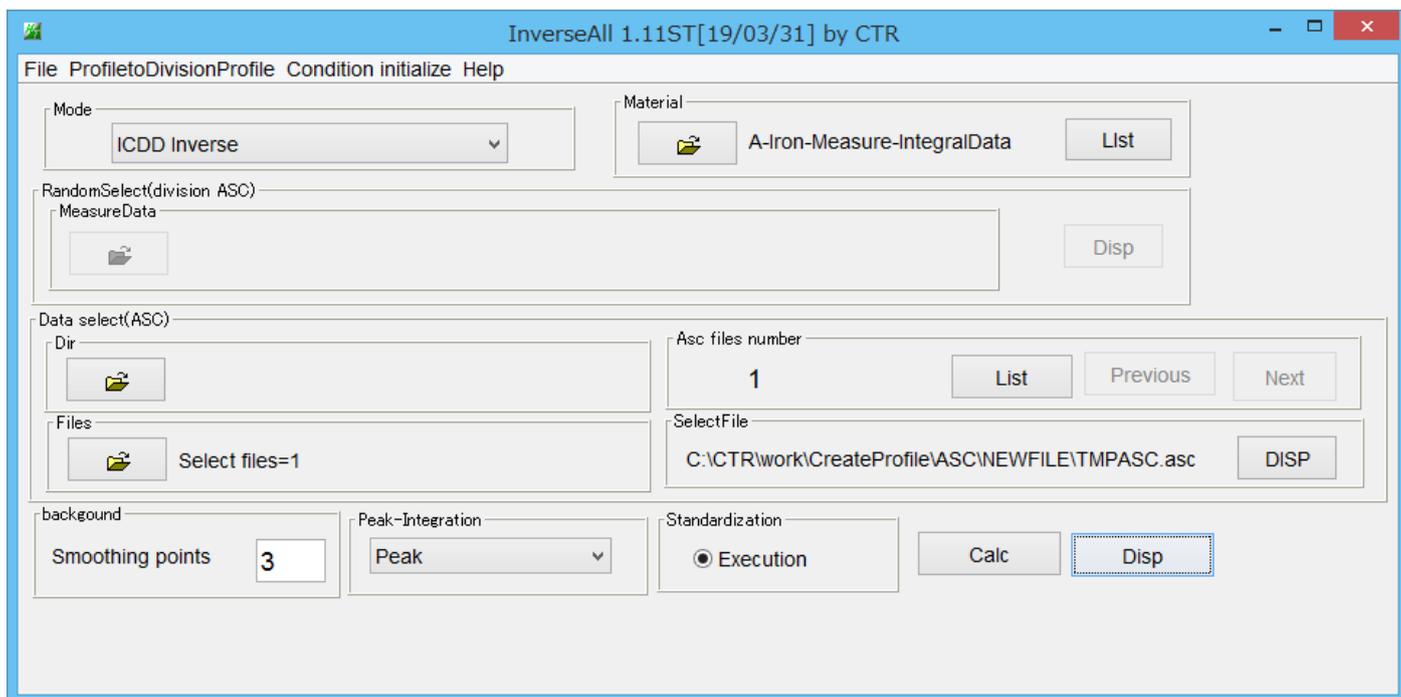
6本の合計で各ピーク強度を割り、100を掛けた値です。

以上の事で、InverseAll (Ver1.10) では、

ICDDデータをcopyし、6本制限を追加してください。

データは、C:\CTR\work\MYICDDにあります。

Ver 1.11による改良



|CDDmode Standardization BGsmoints=3 PEAK

	[110]	[200]	[211]	[220]	[310]	[222]
TMPASC	1.005	0.993	0.989	0.994	0.993	0.994

入力データが6本の場合、UCDDデータを12本から6本として再計算を行いました。

(1 1 0) と (2 2 0) がある場合、逆極点図上では平均値で表示されます。

ICDDmode Standardization BGsmptpoints=3 PEAK

	[110]	[200]	[211]	[220]	[310]	[222]
TMPASC	1.108	1.095	1.09	1.097	1.095	1.096

を逆極点図で表示

