

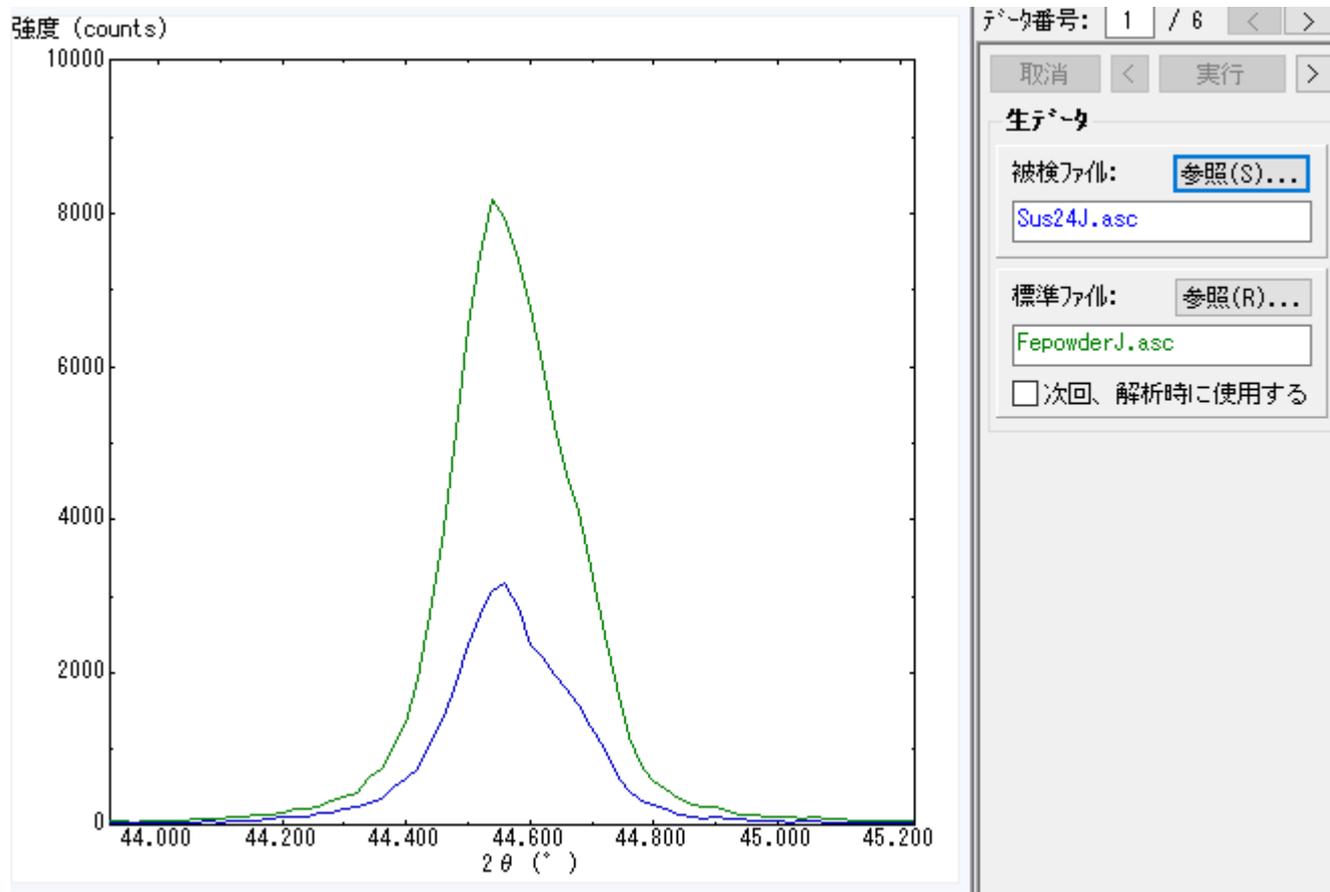
# R I N T逆極点とC T R逆極点 (V e r 1 . 1 5) を比較

2020年09月14日

*HelperTex Office*

## 概要

CTR逆極点は内部で0.02degステップに規格化していたが、0.01degで測定したデータでは良い結果が得られないで、0.02deg以下のデータはそのままのステップで計算する更に、RINTと比較する為、逆極点の比率計算前のデータも出力出来る様に変更を行ってRINT付属データで比較を行う。

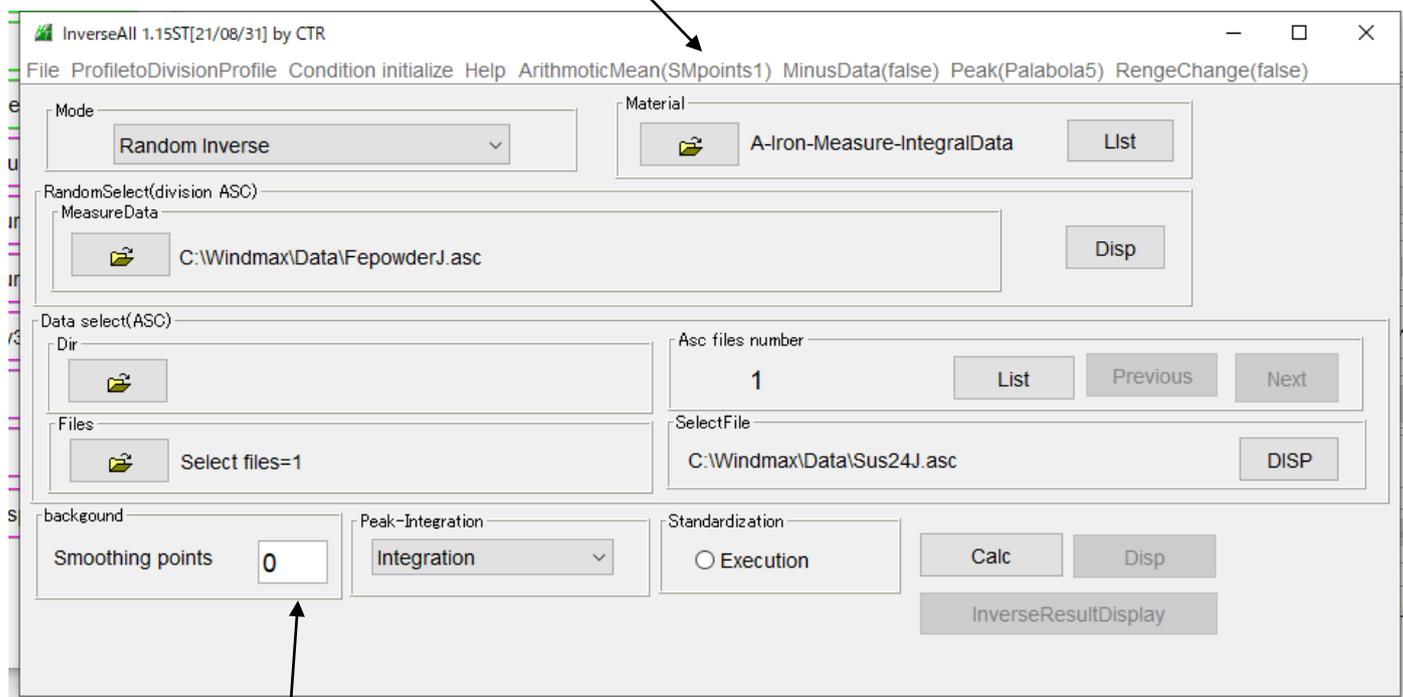


平滑化なし、バックグラウンド除去なし

積分強度

No.	h	k	l	強度低角	強度高角	標準強度	被検強度	強度比
1	1	1	0	43.920	45.220	98575.00	38563.00	0.39
2	2	0	0	64.120	65.860	15937.00	96656.00	6.06
3	2	1	1	81.380	83.340	30867.00	41066.00	1.33
4	2	2	0	97.540	100.180	13109.00	5615.00	0.43
5	3	1	0	115.080	118.020	20530.00	27227.00	1.33
6	2	2	2	136.080	138.680	9336.00	9389.00	1.01

平滑化なし



バックグラウンド削除なし

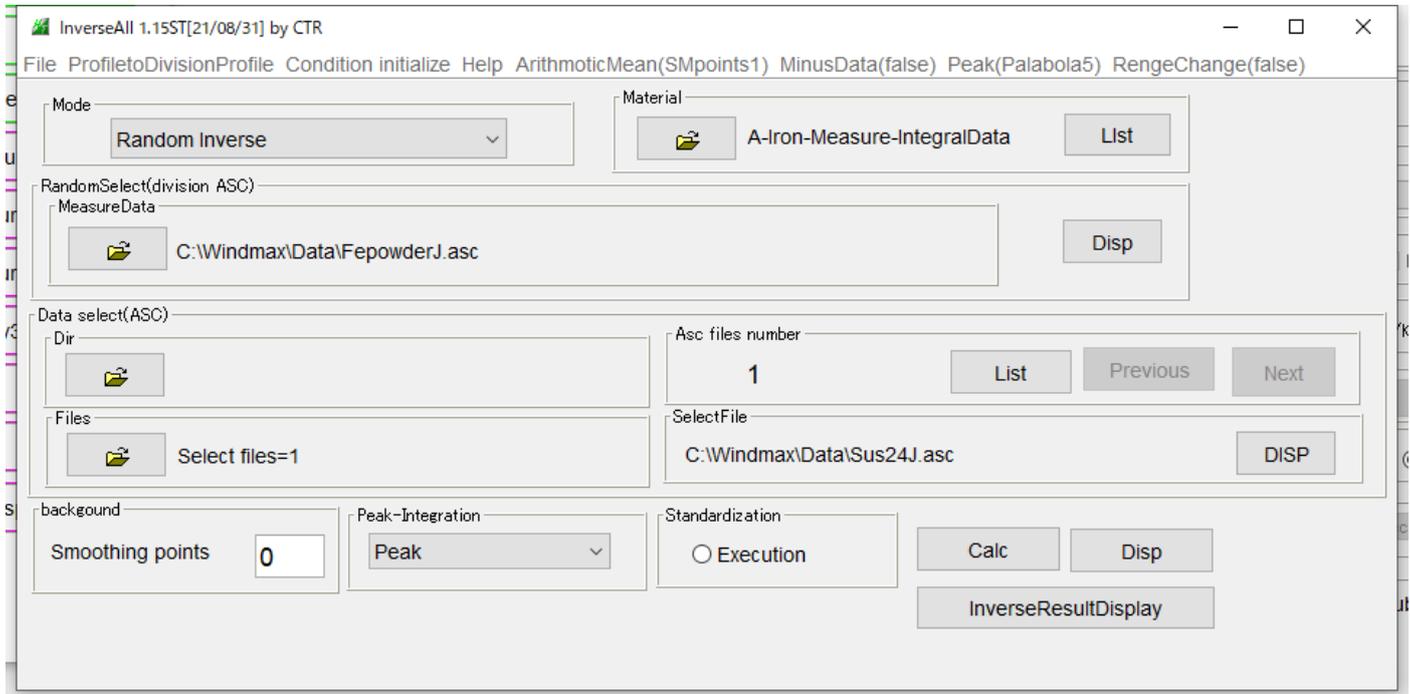
Randommode ArithmeticMean(SMpoints1) BGsmptpoints=0 Integration Minusdata-OFF

	[110]	[200]	[211]	[220]	[310]	[222]
RANDOM	98575.0	15937.0	30867.0	13109.0	20530.0	9336.0
SAMPLE	38563.0	96656.0	41066.0	5615.0	27227.0	9389.0
Sus24J	0.391	6.064	1.33	0.428	1.326	1.005
R I N T	0.39	6.06	1.33	0.43	1.33	1.01

一致する -> 積分方法は同一

ピーク強度

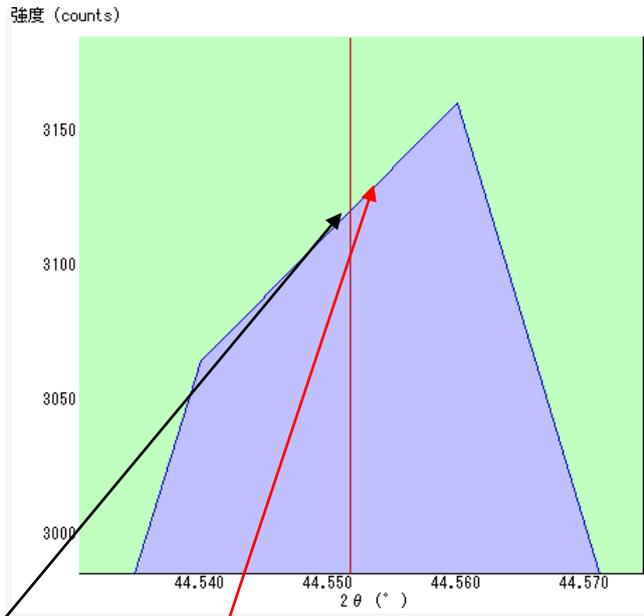
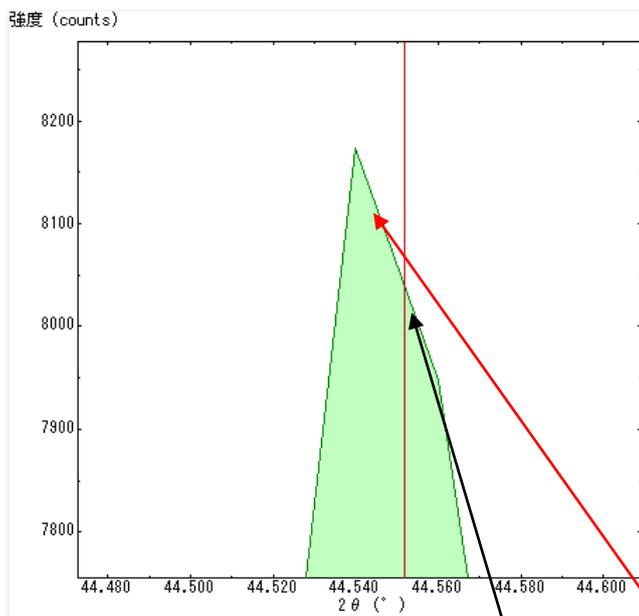
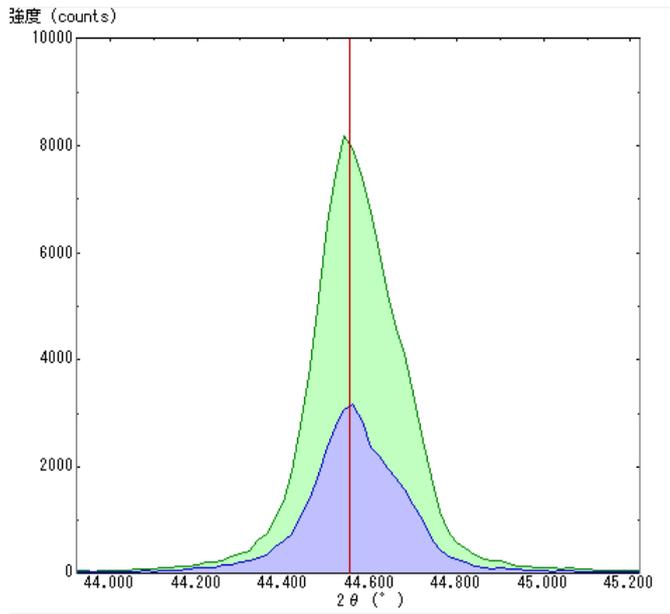
No.	h	k	l	強度低角	強度高角	標準強度	被検強度	強度比
1	1	1	0	43.920	45.220	8037	3108	0.39
2	2	0	0	64.120	65.860	993	5932	5.97
3	2	1	1	81.380	83.340	1852	2307	1.25
4	2	2	0	97.540	100.180	543	141	0.26
5	3	1	0	115.080	118.020	773	760	0.98
6	2	2	2	136.080	138.680	300	241	0.80



	[110]	[200]	[211]	[220]	[310]	[222]
RANDOM	8106.4	1001.3	1865.3	539.2	759.8	303.2
SAMPLE	3139.3	5931.6	2307.4	140.3	764.6	248.5
Sus24J	0.387	5.923	1.237	0.26	1.006	0.819
RINT	0.39	5.97	1.25	0.26	0.98	0.80

若干異なる。

ピーク強度計算を { 1 1 0 } で比較



RINT は計算方法不明

1	1	1	0	43.920	45.220	8037	3108	0.39
---	---	---	---	--------	--------	------	------	------

CTR は Max 強度周辺 (5点) データによる放物線近似

RANDOM	8106.4
SAMPLE	3139.3
Sus24J	0.387

RINTとCTR (放物線近似) ではRINTが低めで最大強度計算方法が異なる。

平滑化  
積分

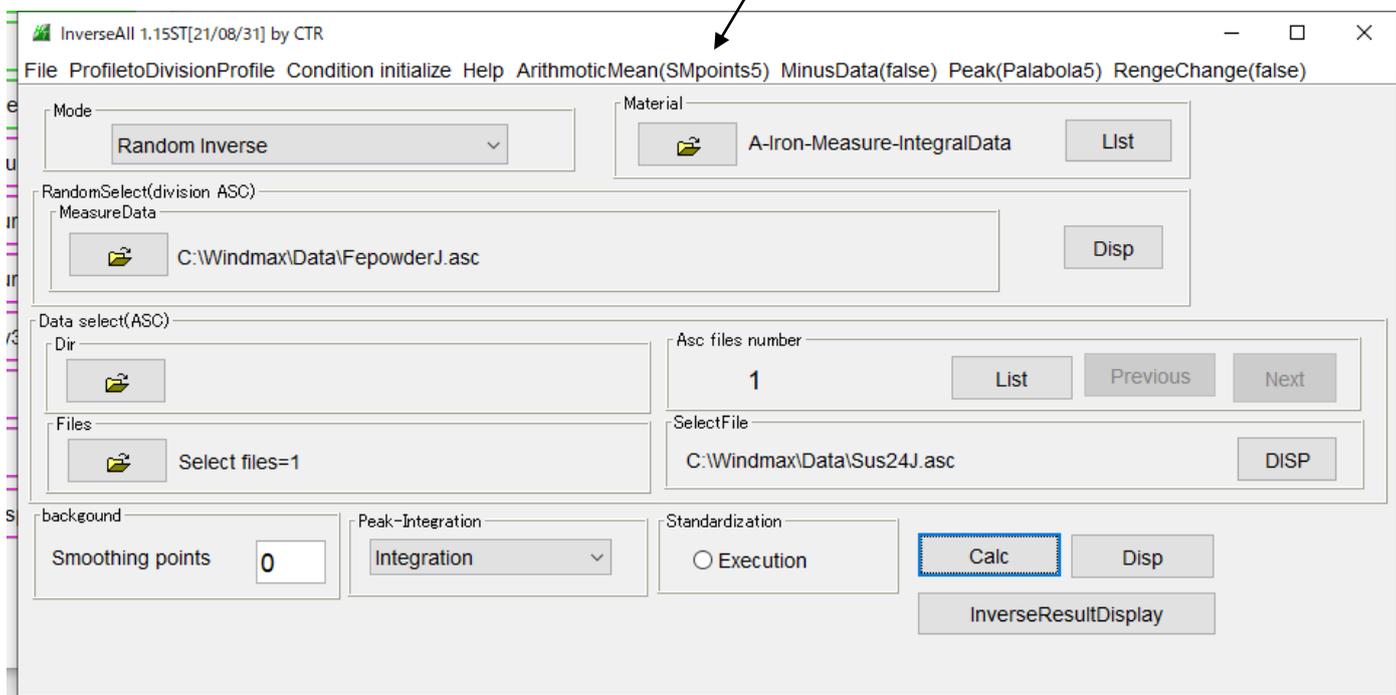
No.	h	k	l	強度低角	強度高角	標準強度	被検強度	強度比
1	1	1	0	43.920	45.220	98573.80	38563.40	0.39
2	2	0	0	64.120	65.860	15937.80	96656.00	6.06
3	2	1	1	81.380	83.340	30868.60	41065.60	1.33
4	2	2	0	97.540	100.180	13107.60	5616.40	0.43
5	3	1	0	115.080	118.020	20532.40	27228.60	1.33
6	2	2	2	136.080	138.680	9337.80	9390.40	1.01

**平滑化**

方法: 単純移動平均

点数: 5  自動

単純移動平均 5 点



バックグラウンド削除しないで積分強度計算

	[110]	[200]	[211]	[220]	[310]	[222]
RANDOM	98576.4	15935.6	30867.5	13108.2	20527.4	9335.1
SAMPLE	38563.1	96659.4	41064.0	5613.0	27223.2	9389.8
Sus24J	0.391	6.065	1.33	0.428	1.326	1.005
RINT	0.39	6.06	1.33	0.43	1.33	1.01

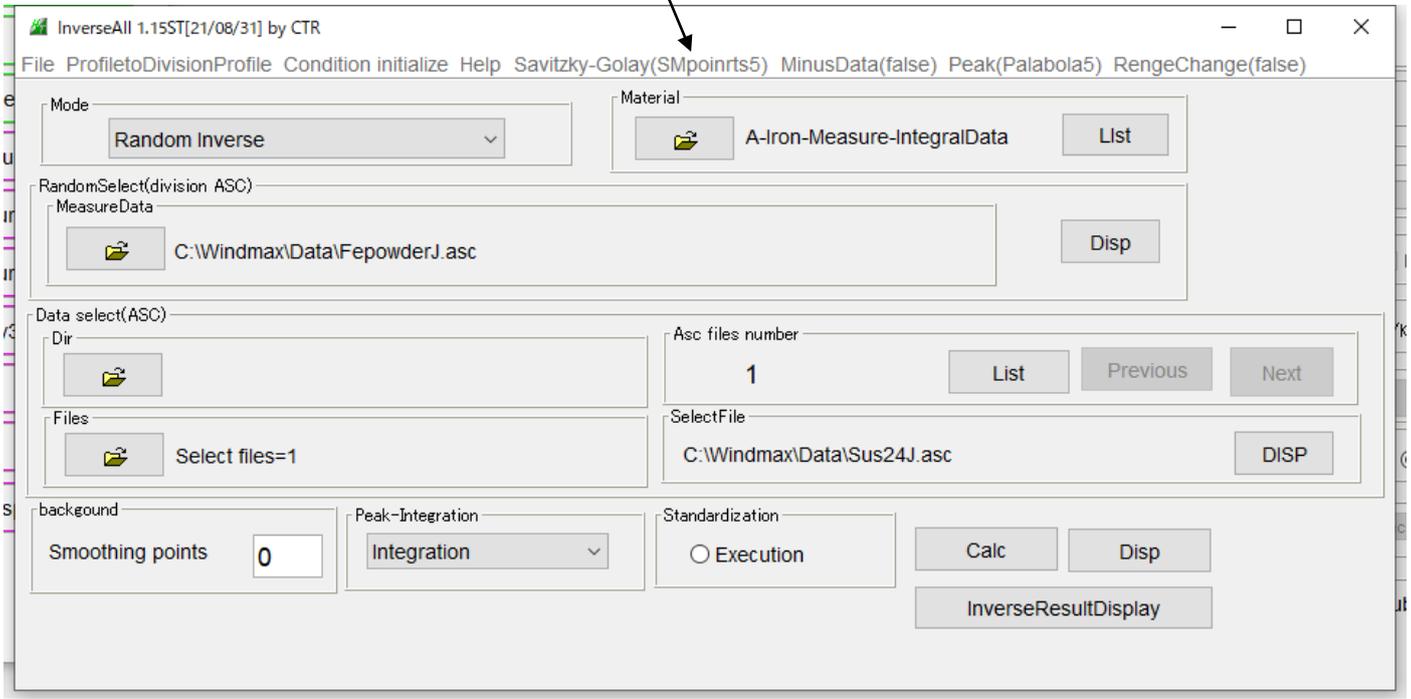
一致するので、単純移動平均処理は同一である。

平滑化 2

No.	h	k	l	強度低角	強度高角	標準強度	被検強度	強度比
1	1	1	0	43.920	45.220	98573.97	38564.66	0.39
2	2	0	0	64.120	65.860	15936.60	96658.29	6.07
3	2	1	1	81.380	83.340	30866.26	41065.43	1.33
4	2	2	0	97.540	100.180	13108.83	5613.86	0.43
5	3	1	0	115.080	118.020	20527.83	27227.51	1.33
6	2	2	2	136.080	138.680	9336.57	9388.89	1.01

**平滑化**  
 方法: 加重平均  
 点数: 5  自動

加重移動平均



Randommode Savitzky-Golay(SMpoints5) BGsmoints=0 Integration Minusdata-OFF

	[110]	[200]	[211]	[220]	[310]	[222]
RANDOM	98573.4	15938.4	30864.0	13111.6	20530.2	9335.7
SAMPLE	38563.3	96652.4	41070.1	5616.2	27231.8	9385.9
Sus24J	0.391	6.064	1.33	0.428	1.326	1.005
RINT	0.39	6.07	1.33	0.43	1.33	1.01

一致するので、加重移動平均処理は同一である。

平均化、バックグラウンド削除方法は同じであり、積分強度は一致するが  
 ピーク強度計算方法は異なるため、ピーク強度の逆極点は若干異なった結果になります。  
 確認のため、一括処理結果で比較する

平滑化（単純移動平均5点）＋バックグラウンド削除（5点）を比較する

積分

**平滑化**

方法:

点数:   自動

**バックグラウンド除去**

方法:

点数:

**強度計算**

強度値:

相対規格比

No.	h	k	l	強度低角	強度高角	標準強度	被検強度	強度比
1	1	1	0	43.920	45.220	94200.82	35759.20	0.38
2	2	0	0	64.120	65.860	14395.50	92425.83	6.42
3	2	1	1	81.380	83.340	28726.91	38316.12	1.33
4	2	2	0	97.540	100.180	9667.52	2603.44	0.27
5	3	1	0	115.080	118.020	17578.57	22723.49	1.29
6	2	2	2	136.080	138.680	7274.15	6033.47	0.83

InverseAll 1.15ST[21/08/31] by CTR

File ProfiletoDivisionProfile Condition initialize Help ArithmeticMean(SMpoints5) MinusData(false) Peak(Palabola5) RengeChange(false)

Mode:  Material:

RandomSelect(division ASC) MeasureData:

Data select(ASC) Dir:  Asc files number:

Files:  SelectFile:

background Smoothing points:  Peak-Integration:  Standardization:  Execution

Randommode ArithmeticMean(SMpoints5) BGsmoints=5 Integration Minusdata-OFF

	[110]	[200]	[211]	[220]	[310]	[222]
RANDOM	94188.9	14409.8	28737.9	9664.9	17645.5	7304.3
SAMPLE	35761.5	92388.1	38329.3	2647.2	22786.9	6034.8
Sus24J	0.379	6.411	1.333	0.273	1.291	0.826
RINT	0.38	6.42	1.33	0.27	1.29	0.83

ピーク強度

No.	h	k	l	強度低角	強度高角	標準強度	被検強度	強度比
1	1	1	0	44.160	45.220	7513	2817	0.38
2	2	0	0	64.120	65.860	904	5514	6.10
3	2	1	1	81.380	83.340	1682	2138	1.27
4	2	2	0	97.540	100.180	490	111	0.23
5	3	1	0	115.080	118.020	718	706	0.98
6	2	2	2	136.080	138.680	265	199	0.75

**強度計算**

強度値:

相対規格比

InverseAll 1.15ST[21/08/31] by CTR

File ProfiletoDivisionProfile Condition initialize Help ArithmeticMean(SMpoints5) MinusData(false) Peak(Palabola5) RengeChange(false)

Mode:  Material:

RandomSelect(division ASC)  
MeasureData:

Data select(ASC)  
Dir:  Asc files number:      
Files:  SelectFile:

background: Smoothing points  Peak-Integration:  Standardization:  Execution

Randommode ArithmeticMean(SMpoints5) BGsmoints=5 PEAK peakPalabola5 Minusdata-OFF

	[110]	[200]	[211]	[220]	[310]	[222]
RANDOM	7505.4	903.9	1681.6	490.4	723.2	267.5
SAMPLE	2810.3	5525.6	2136.7	112.3	710.2	200.2
Sus24J	0.374	6.112	1.27	0.229	0.982	0.748
RINT	0.38	6.10	1.27	0.23	0.98	0.75

なぜか、一致している