

r a n d o m試料がない場合の計算d e f o c u s補正

2019年02月24日

HelperTex Office

概要

Schulzの反射法で測定した極点図はdefocus補正と言われる補正が必要です。
Schulzの反射法は疑似集中法による測定はX線照射面積が広く平均的な方位測定が可能になる。
この面積を確保しているDSスリットの広がりやSchulzスリットの幅がdefocusの原因である。平行ビームに様に照射面積を狭くするdefocusは軽減されるが平均的な方位測定はできない。
defocusは、TenckhoffCalcプログラムの計算式から測定2θ角度、受光スリット幅で計算される曲線になるが、実際は測定2θ角度によりSchulz幅も変化し、概算が計算される。
ODFPoleFigure2ソフトウェアでは、実測値をデータベースとし、補正計算が行われ正しい曲線に計算されているかをValueODFVFソフトウェアで確認します。
ValueODFVFの確認はCubicが対象です。
以下にrandom試料がない場合の使い方を説明します。

defocus曲線

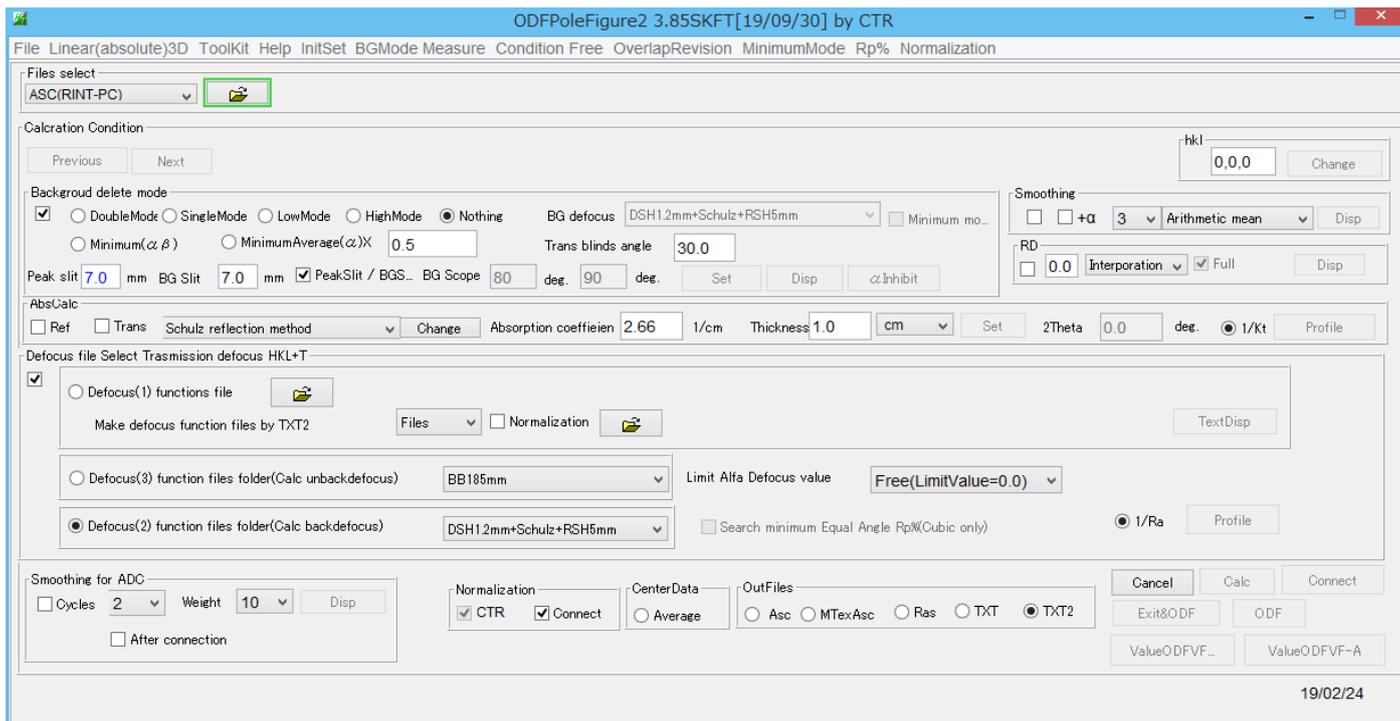
$$\frac{I_{\Delta(\Phi, \theta, W_B, L_R)}}{I_{\Delta(\Phi=0, \theta, W_B, L_R)}} = 1 - \frac{2}{(2\pi)^{1/2}} \int_{-\infty}^{-L_R/P(W_B \tan \Phi \sin 2\theta / \sin \theta)} \exp(-y^2/2) dy.$$

受光スリット幅 測定2θ / 2角度

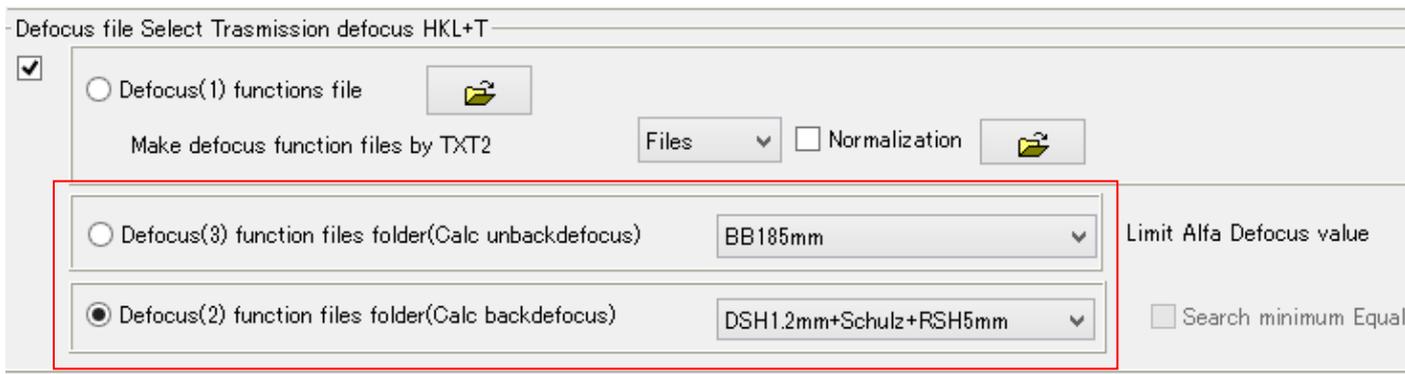
ValueODFVF評価

$$RP_{\{hkl\}} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left| \frac{\{PF_{exp.}\}_i - \{PF_{calc.}\}_i}{\{PF_{exp.}\}_i} \right| \cdot 100\%$$

ODFPoleFigure2ソフトウェア (Ver.3.85以降で説明)



計算 defocus 計算部分

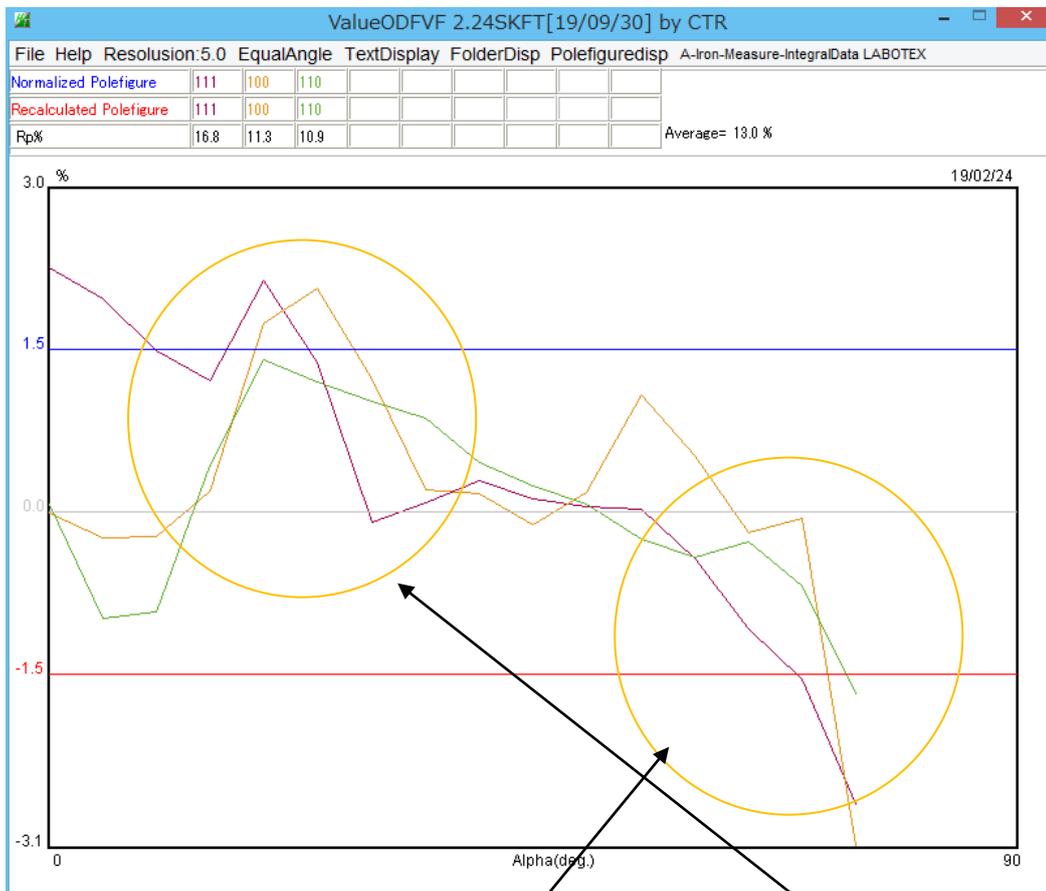
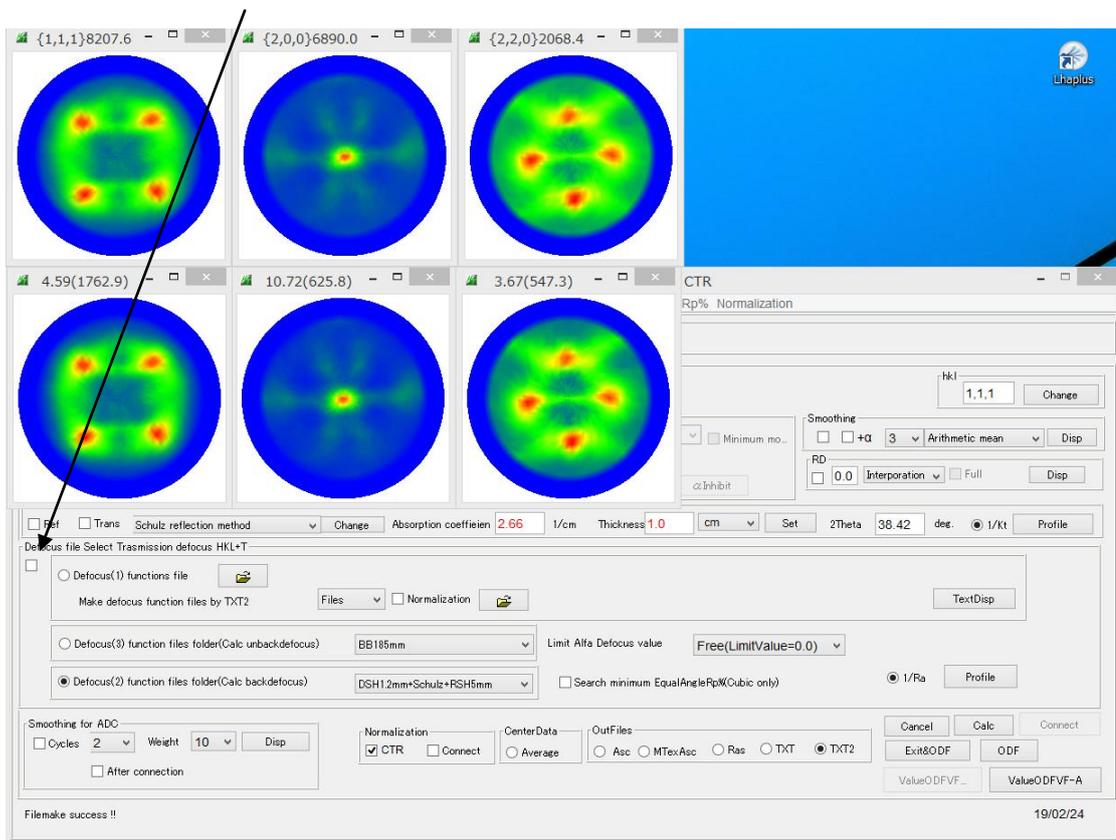


補正評価部分



測定データで評価

defocus補正なしで、単に内部規格の場合



極点図の外周付近で計算値より測定値が低下しています。30度付近に乱れ
これはdefocus補正が足りない（施されていない）状態です。

計算 d e f o c u s 補正 (測定 2 θ 角度、受光スリット幅から計算)

Background delete mode

DoubleMode SingleMode Low

Minimum(α β) MinimumA

Peak slit mm BG Slit mm

CTR

rp% Normalization

hkl

Smoothing: + α

RD Full

α Inhibit

2Theta deg. 1/Kt

Defocus(1) functions file

Make defocus function files by TXT2 Normalization

Defocus(3) function files folder(Calc unbackdefocus)

Defocus(2) function files folder(Calc backdefocus)

Limit Alfa Defocus value

Search minimum EqualAngleRp%(Cubic only) 1/Ra

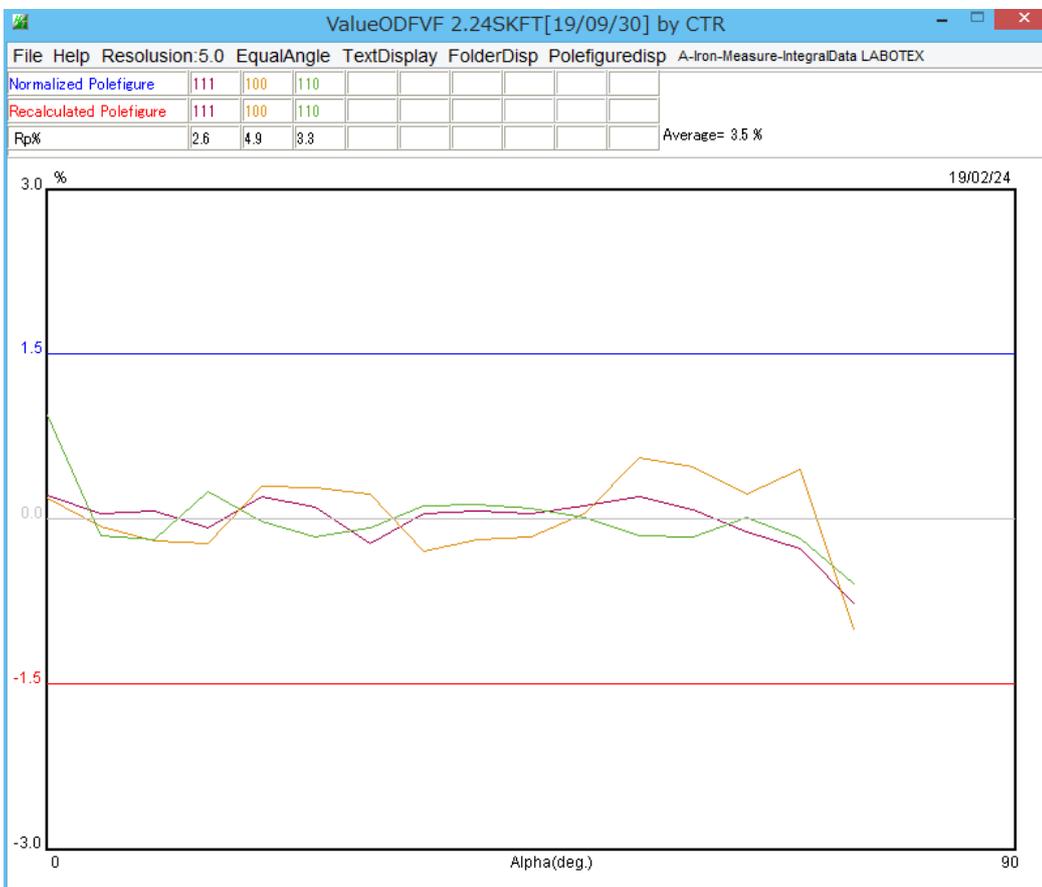
Smoothing for ADC: Cycles After connection

Normalization: CTR Connect Average

CenterData: Asc MTextAsc Ras TXT TXT2

OutFiles:

Filemake success !! 19/02/24



計算 defocus 補正 (測定 2θ 角度、受光スリット幅を 7 mm \rightarrow 6 mm)

Background delete mode

DoubleMode SingleMode LowMode

Minimum(α β) MinimumAverage(α β)

Peak slit mm BG Slit mm PeakSlit

hkl Change

Smoothing + α Arithmetic mean Disp

RD 0.0 Interpolation Full Disp

cm Set 2Theta deg. 1/Kt Profile

Defocus(1) functions file

Make defocus function files by TXT2 Files Normalization TextDisp

Defocus(3) function files folder(Calc unbackdefocus) Limit Alfa Defocus value

Defocus(2) function files folder(Calc backdefocus) Search minimum EqualAngleRp%(Cubic only) 1/Ra Profile

Smoothing for ADC Cycles Weight Disp After connection

Normalization CTR Connect Average

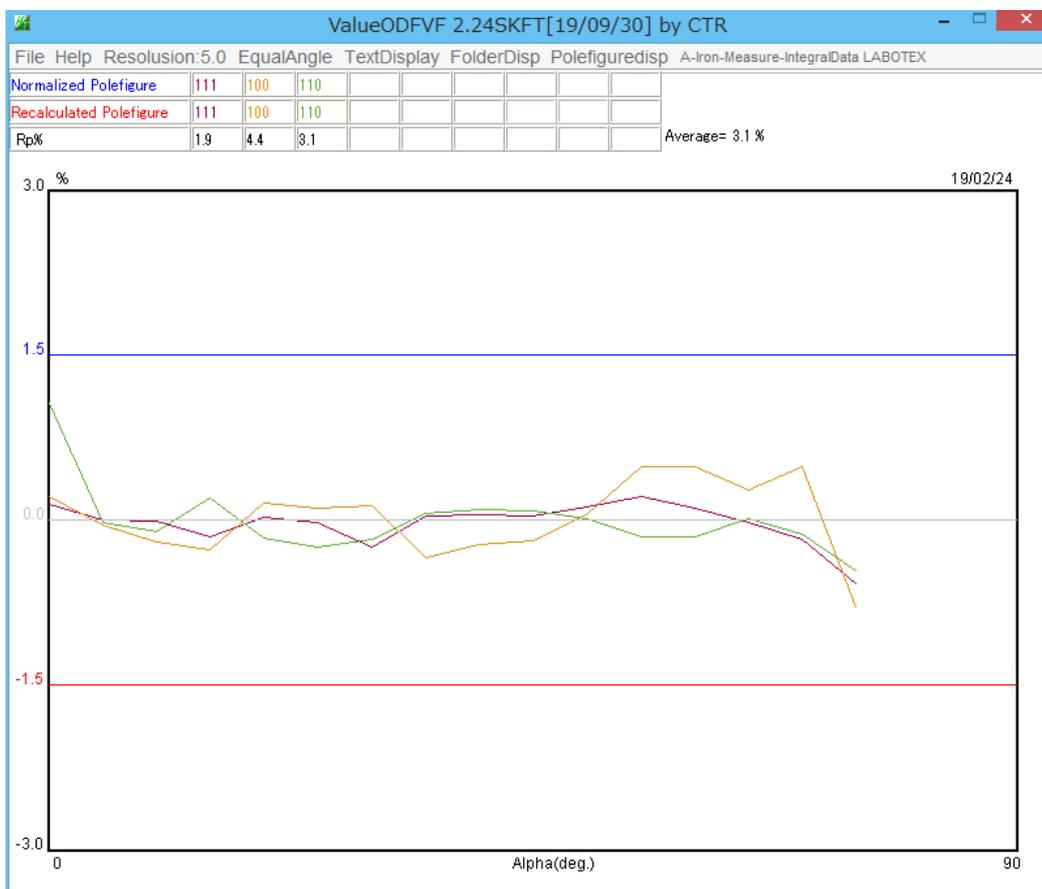
OutFiles Asc MTeXAsc Ras TXT TXT2

Cancel Calc Connect

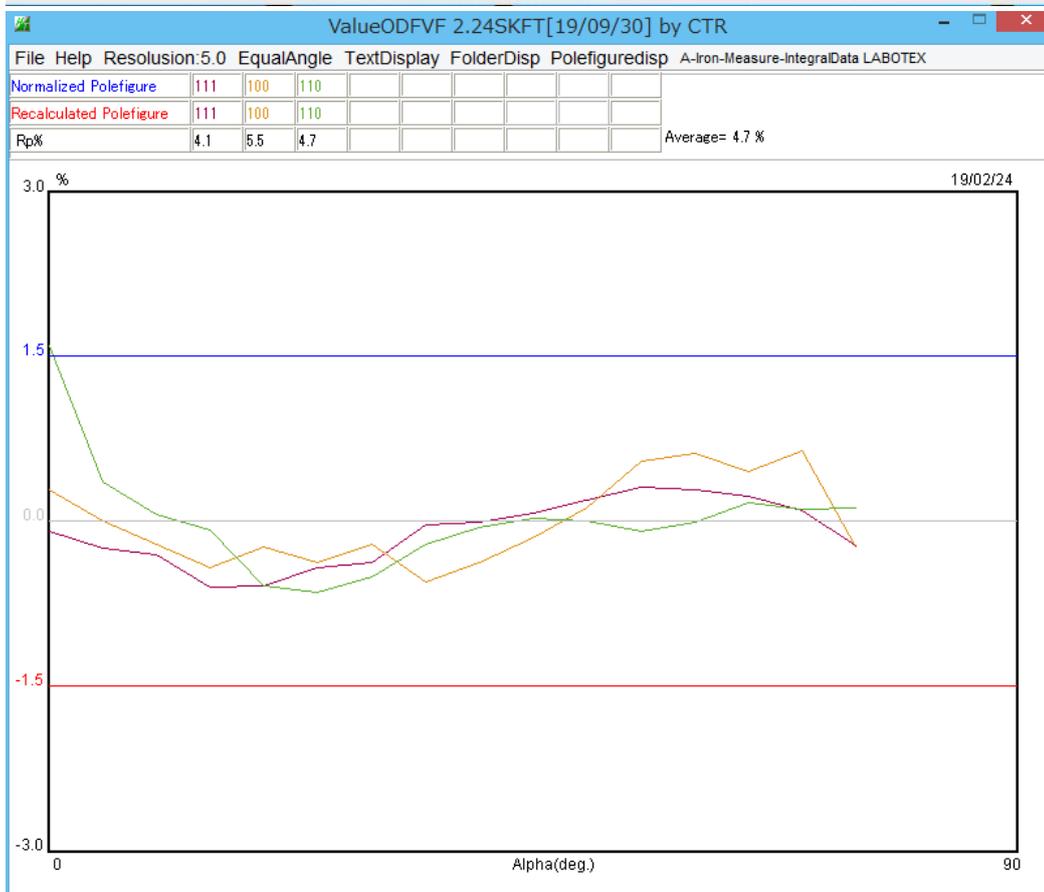
Exit&ODF ODF

ValueODFVF... ValueODFVF-A

Filemake success !! 19/02/24



計算 defocus 補正 (測定 2θ 角度、受光スリット幅を 7 mm \rightarrow 5 mm)



補正過多になっている。6 mmが最良

測定スリット7mmを6mmのdefocus極点で毎回、毎回スリット幅を変更しないで補正するためには6mmのdefocusTABLEを作成すれば良い

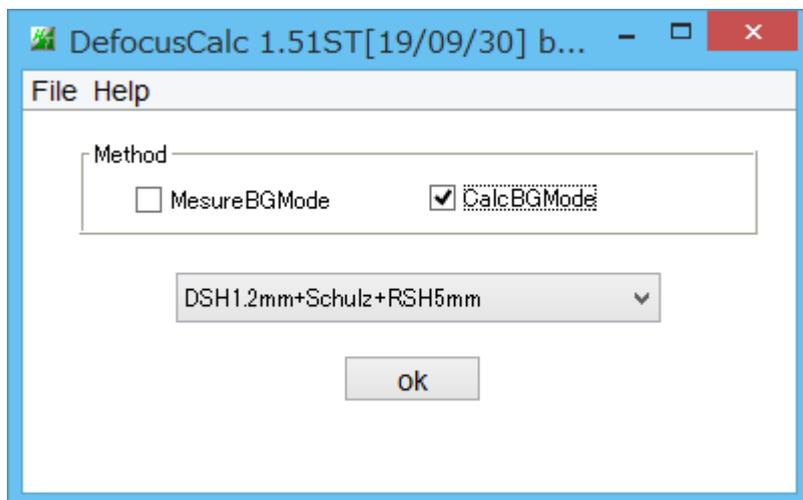
このdefocusTABLEを作成するには、

{111}の $2\theta = 38.42$ 、スリット幅6mm

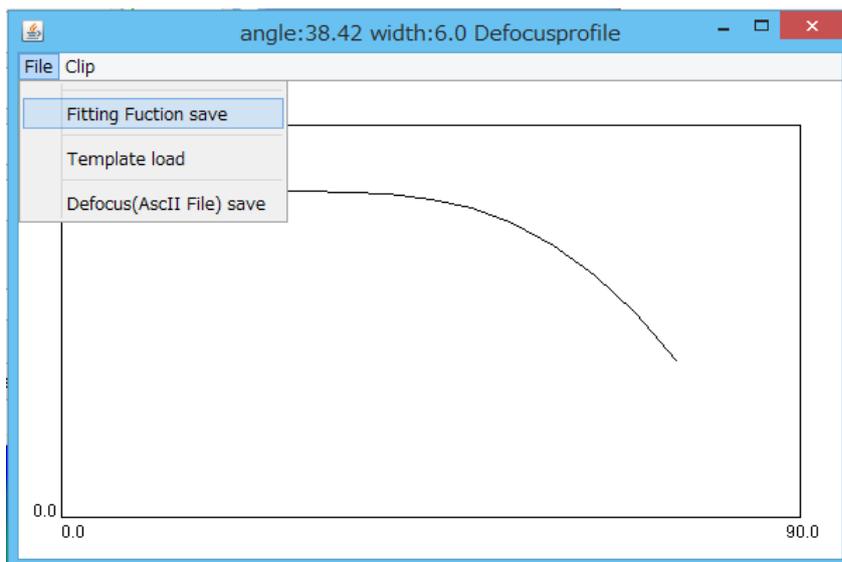
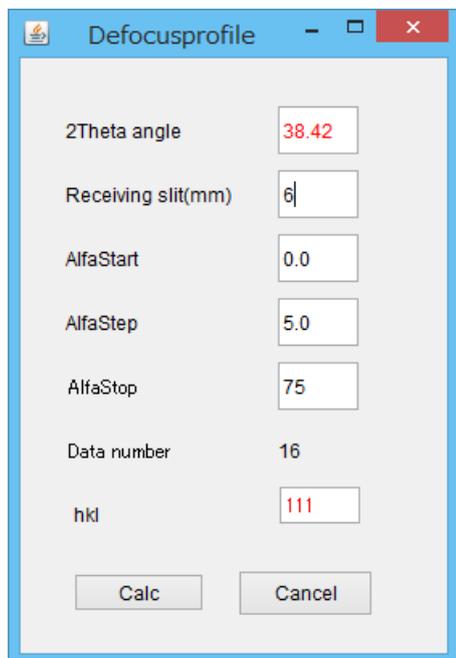
{200}の $2\theta = 44.64$ 、スリット幅6mm

{220}の $2\theta = 65.00$ 、スリット幅6mm を作成する。

ToolKit->DefocusTools->DefocusCalc



この部分をクリックする。



同様に{200},{220}も作成

111-1F.TXT

2019/02/24 15:33

テキスト文書

220-1F.TXT

2019/02/24 15:36

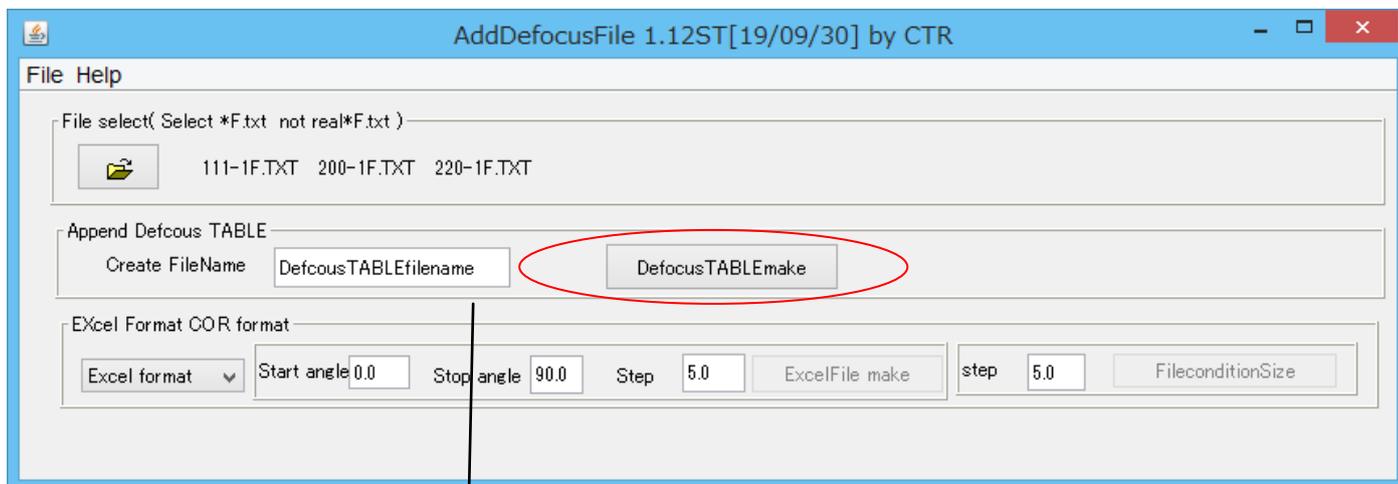
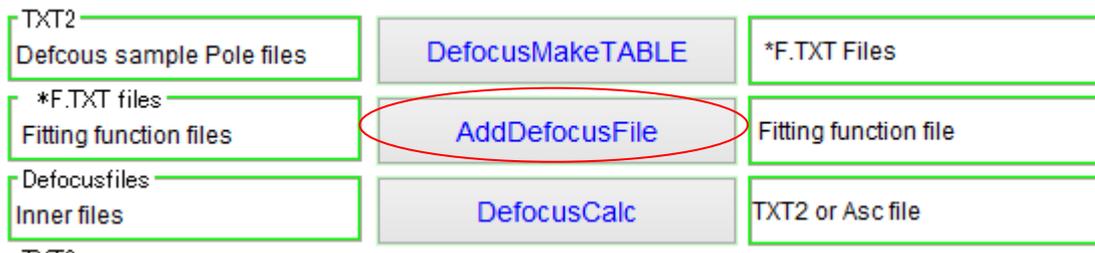
テキスト文書

200-1F.TXT

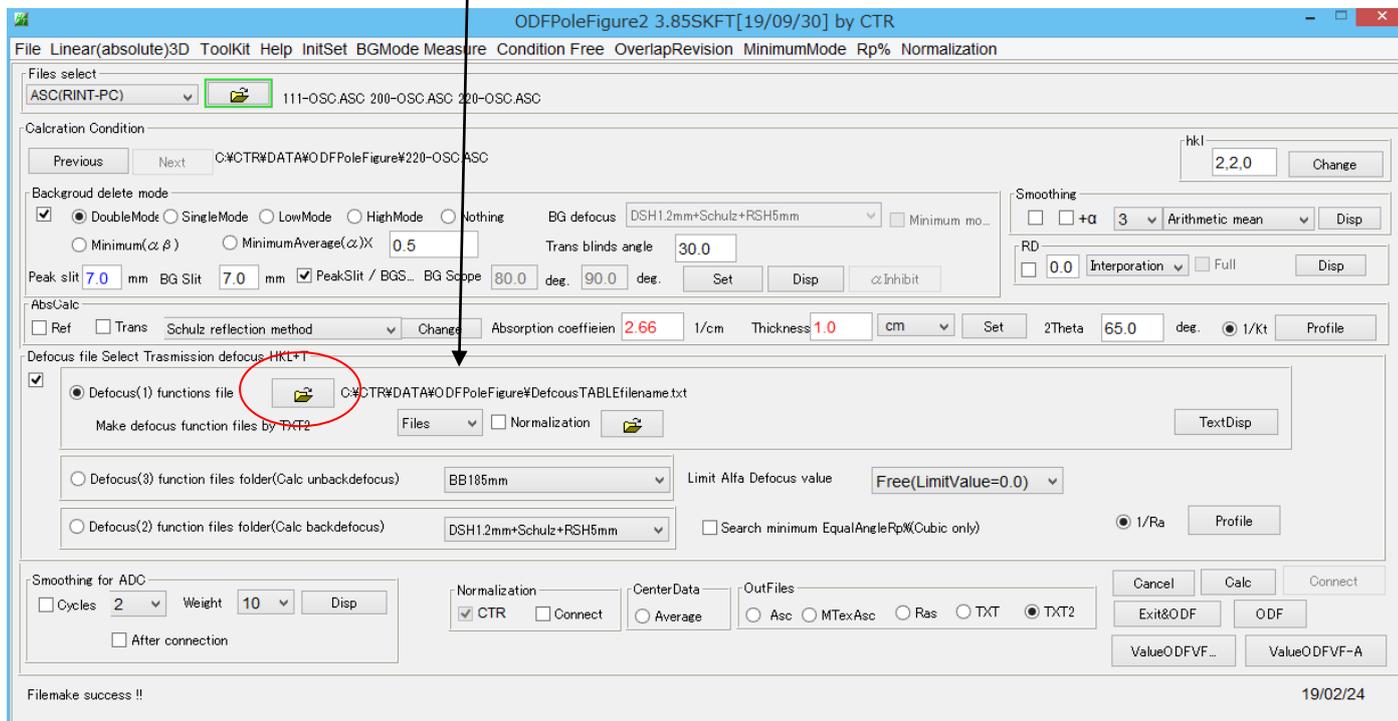
2019/02/24 15:36

テキスト文書

この hkl-1F.txt を 1 つのファイルにする。



defocusファイルのして登録する。



Cubic 以外は ODF Pole Figure 2 → ODF → Value ODFVF で
スリット幅を微調整し手持ちの ODF で解析後再計算極点図を Export し、Value ODFVF で
最適なスリット幅を求め Cubic と同様に defocus TABLE を作成する。
あるいは、計算 defocus のままで補正する。