random試料が入手可能な極点データ処理

極点処理は通常、ODFPoleFigure2ソフトウエアを用いるが、 random試料だけを用いる場合、簡易的なODFPoleFigure1.5ソフトウエアを 用います。

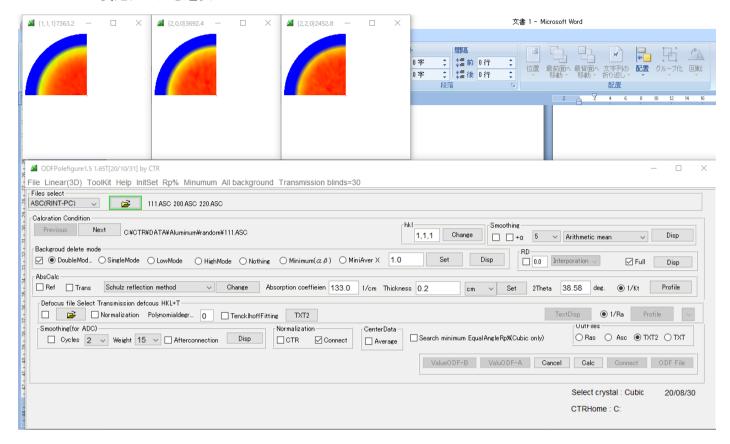
最適な処理方法は、randomデータからdefocusファイル作成時は、Tenckhoffの理論式にFittingを行い、最適化Rp%で補正を行うと良い結果が得られます。以下に説明します。

2020年08月30日 HelperTex Office

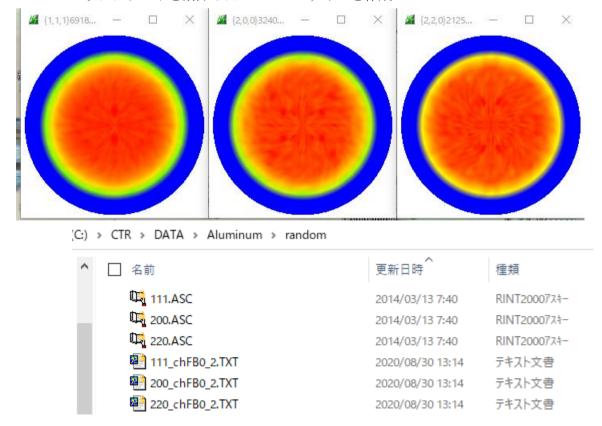
概要

sampleと同一なバルク材で無配向試料が得られる場合、random試料からdefocusファイルを作成して極点データ処理を行う。

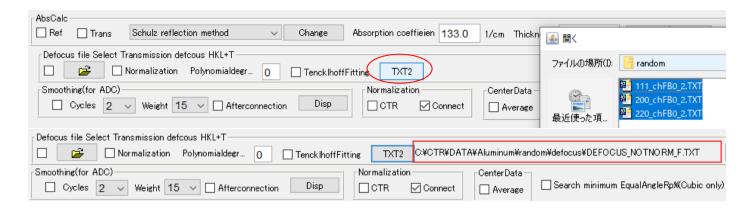
random測定データを選択



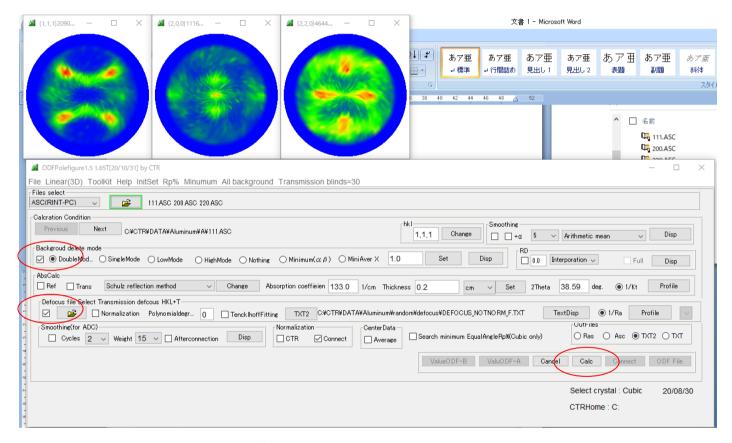
バックグランドを削除したTXT2ファイルを作成



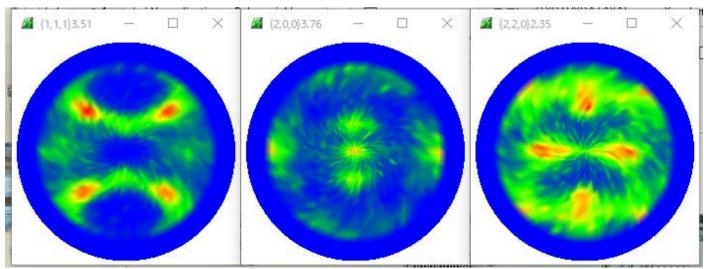
defocusファイルを作成



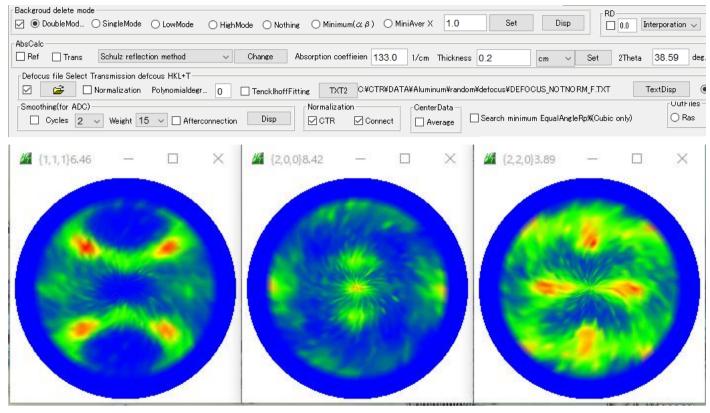
配向データを処理



バックグランド除去+defocus補正



バックグランド除去+defocus補正+規格化



- $\{1111\}$ 3. 51->6. 46
- $\{200\}$ 3. 76 -> 8. 42
- $\{220\}$ 2. 35->3. 89

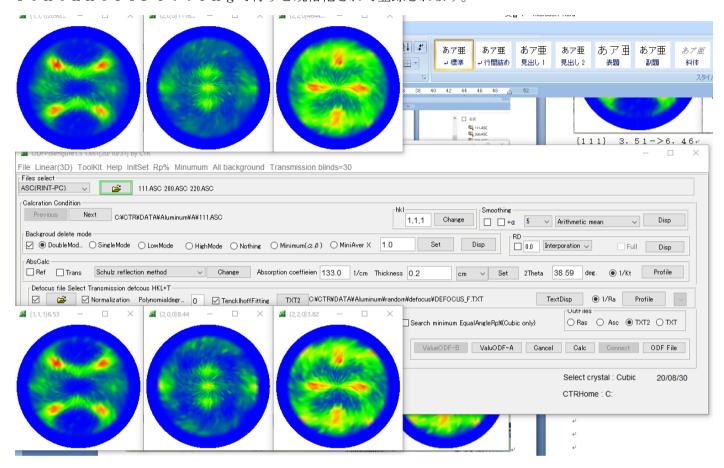
Tenckhoff理論式

$$\begin{split} &\frac{I_{A(\Phi,\Theta,W_B,L_R)}}{I_{A(\Phi=0,\Theta,W_B,L_R)}} = 1 \\ &- \frac{2}{(2\pi)^{1/2}} \int_{-\infty}^{-L_R/P(W_B \tan \Phi \sin 2\Theta/\sin \Theta)} \exp(-y^2/2) dy. \end{split}$$

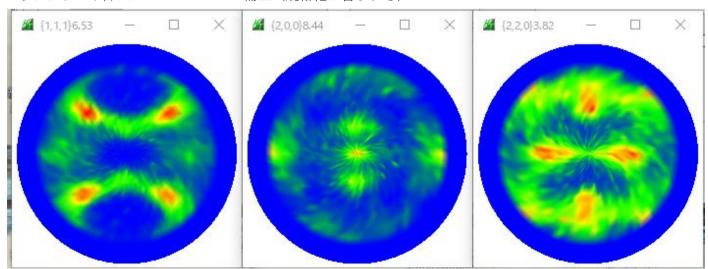
defocusファイルをTenckhoffFittingで行う。

Defocus file Select Transmission defcous HKL+T	
☑ ☑ Normalization Polynomialdegr 0 ☑ TencklhoffFi	ting TXT2 C*CTR*DATA*Aluminum*random*defocus*DEFOCUS_F.TXT
Smoothing(for ADC) NormalizationCenterData	
Cycles 2 V Weight 15 V Afterconnection Disp	☐ CTR ☐ Connect ☐ Average ☐ Search minimum EqualAngleRp%(Cubic only)

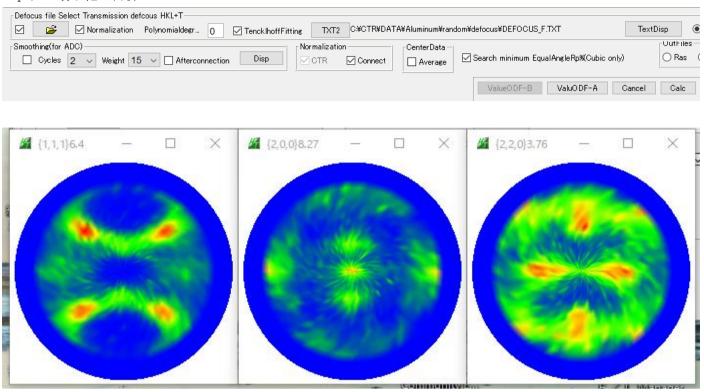
TenckhoffFittingで行うと規格化されて登録されます。



バックグランド除去+defocus補正(規格化が含まれる)

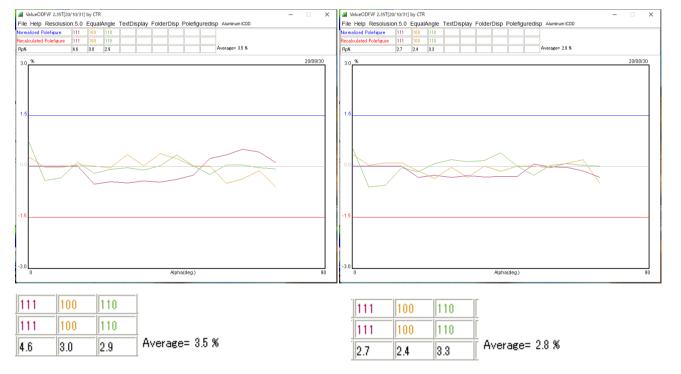


Rp%の最小化で計算



Rp%最小化なし

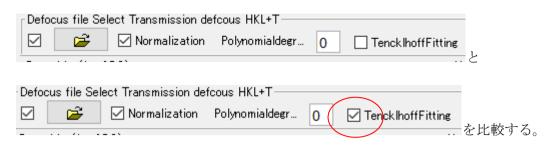
Rp%最小化あり



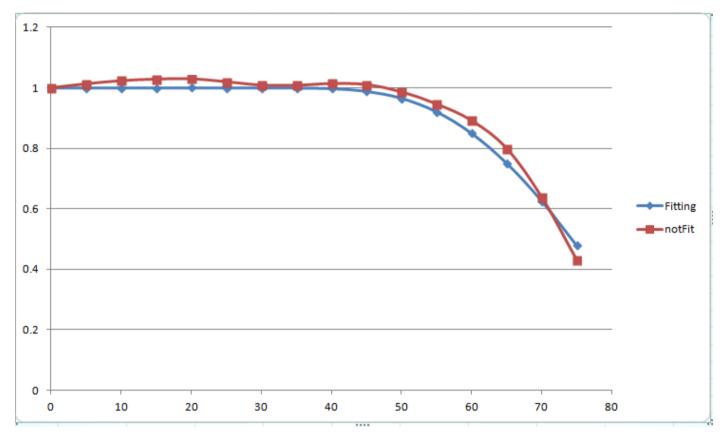
R p %

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

☑ Tenck | hoffFitting の機能を調べるために、defocusファイル作成時



{111} defocus



実測値の凸凹からFiFittingを行うと理論曲線を描く

極点処理を行う場合、TenckhoffFittingと最適化Rp%を組み合わせると良い結果が得られます。

