

x r d m l のバックグラウンドデータを極点図に結合

2020年07月12日

*HelperTex Office*

## 概要

極点測定におけるバックグラウンド強度測定は、各  $\alpha$  毎に測定される。  
通常、バックグラウンドにピーク強度の裾野が影響しない  $\beta$  角度に於いて、 $2\theta$  角度を 3 度位シフトした位置で、統計変動を抑えた測定を行う。  
 $\alpha$  軸毎に最小強度位置の  $\beta$  軸をサーチすることが望ましい。

今回、極点図（ピーク極点図）とバックグラウンドデータの `xrdml` ファイルから CTR ソフトウェアで処理可能な、ピーク極点図とバックグラウンドを結合する方法を説明します。

扱うピーク極点図は `FT=1sec`

バックグラウンドデータは `FT=10sec`、 $\beta$  方法は 1 点

## 処理の流れ

`xrdml` データを極点図 `ASC` 変換

$\beta$  方向 1 点の場合、極点図とするため、 $\beta$  方向 2 点とする。

ピーク極点図とバック極点図を結合

## ファイル名

極点図ファイルの先頭は `hkl` とする。

バックグラウンド極点図は、`hkl_BG1` とする。

`hkl` 部分に材料区分を含めても良い、

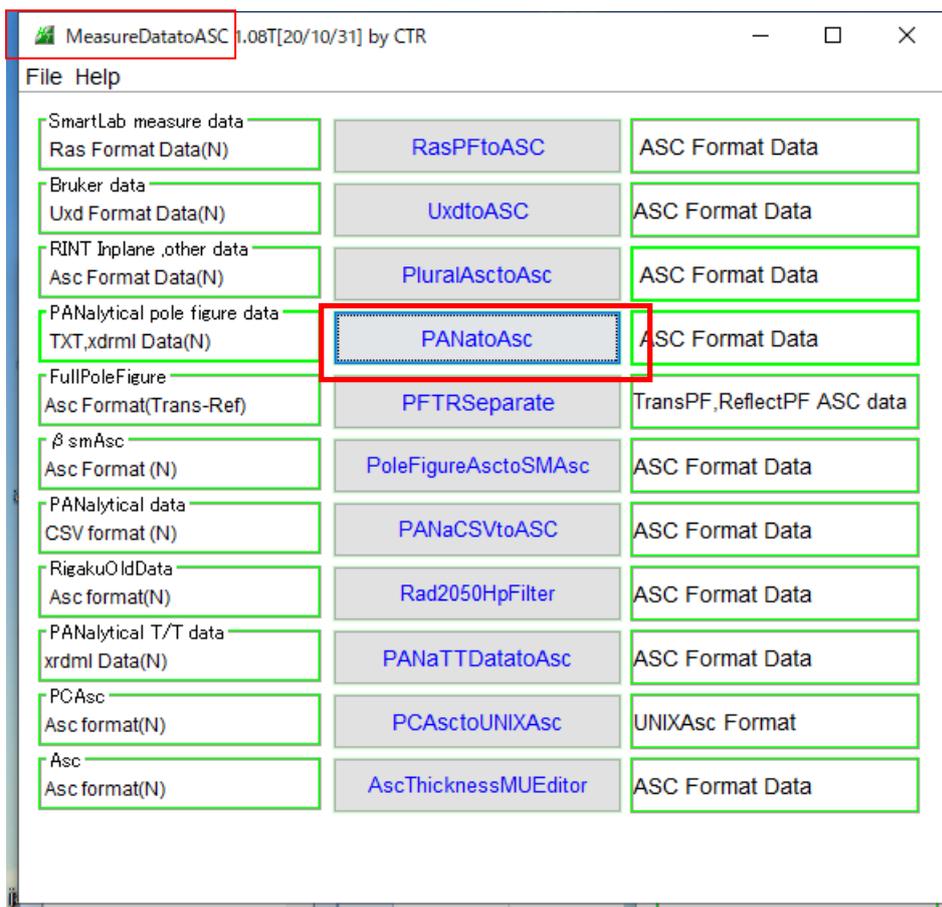
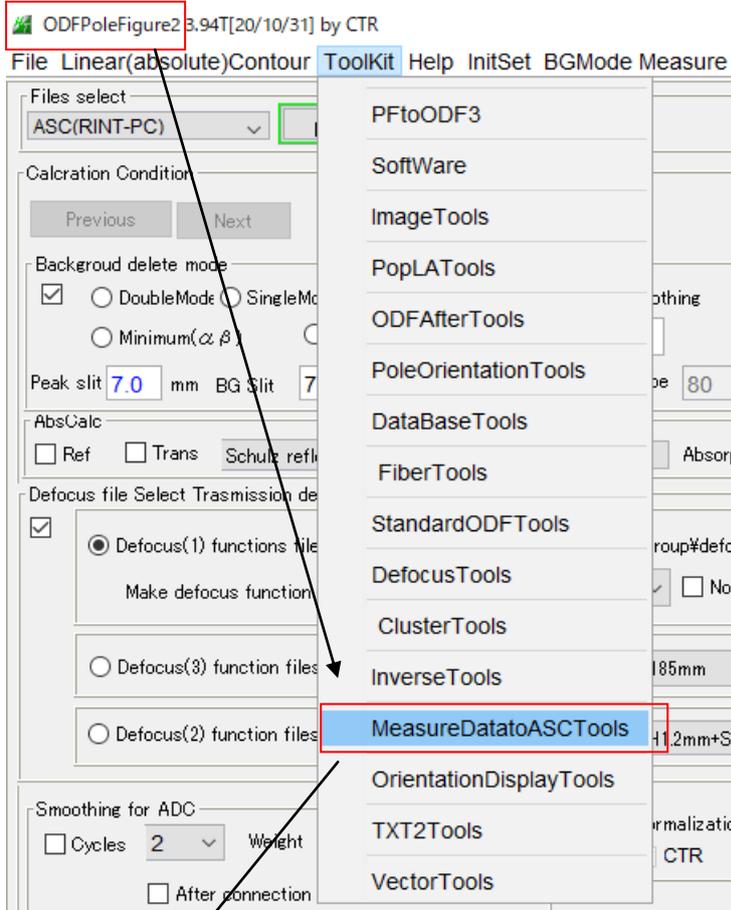
例えば、

```
100_XXX_YYY. xrdml
100_XXX_YYY_BG1. xrdml
100_XXX_YYY_BG2. xrdml
002_XXX_YYY. xrdml
002_XXX_YYY_BG1. xrdml
002_XXX_YYY_BG2. xrdml
101_XXX_YYY. xrdml
101_XXX_YYY_BG1. xrdml
101_XXX_YYY_BG2. xrdml
```

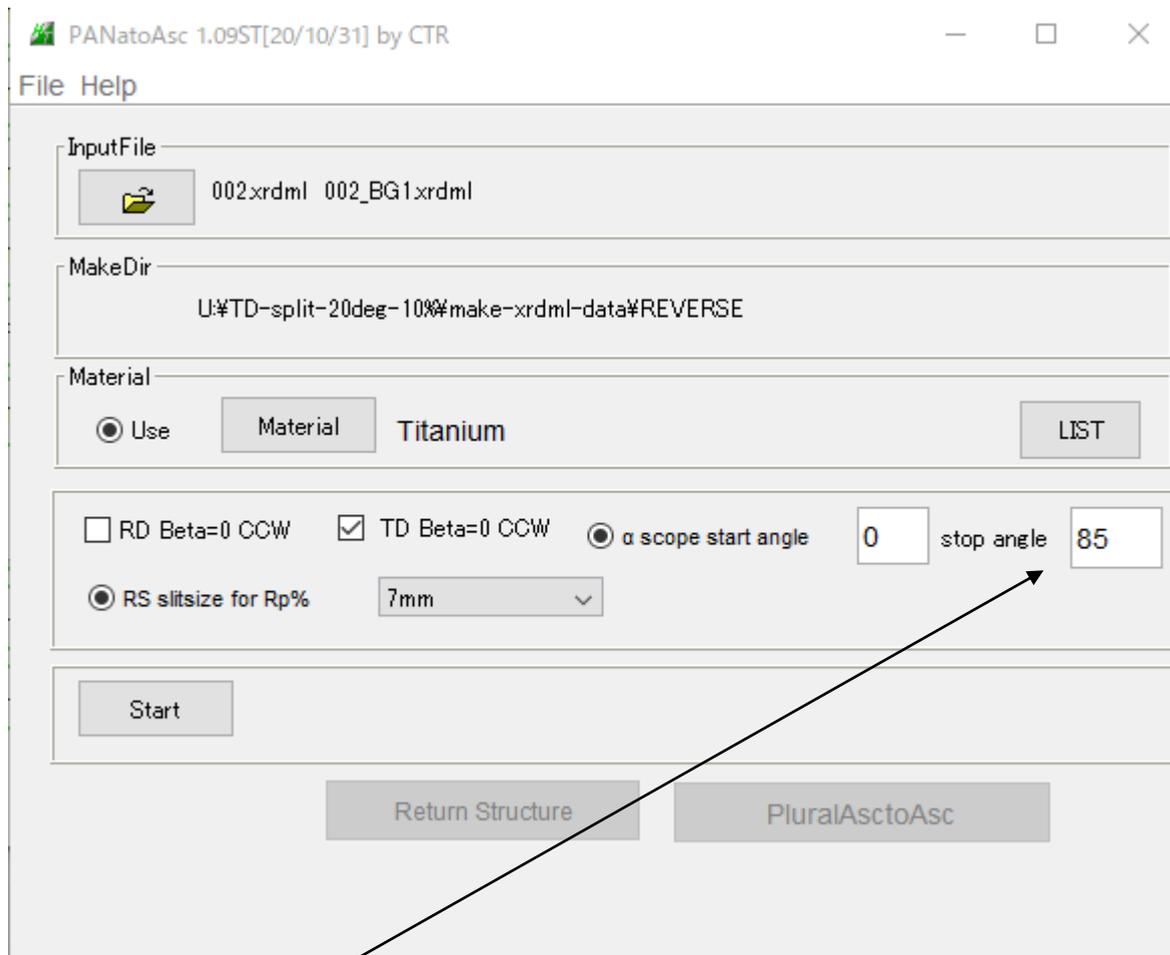
## 扱う `xrdml` ファイル

<code>002.xrdml</code>	2020/07/12 8:36	XRDML ファイル
<code>002_BG1.xrdml</code>	2020/07/12 8:36	XRDML ファイル

# 変換するソフトウェア



# PANatoAscソフトウェアによるxrdml→ASC変換



測定データは、完全極点図として測定されているが、極点図の外周部分は測定出来ないため範囲を狭める（外周部分を除外）。完全極点図では吸収補正やdefocus補正の計算は出来ません  
Startすると



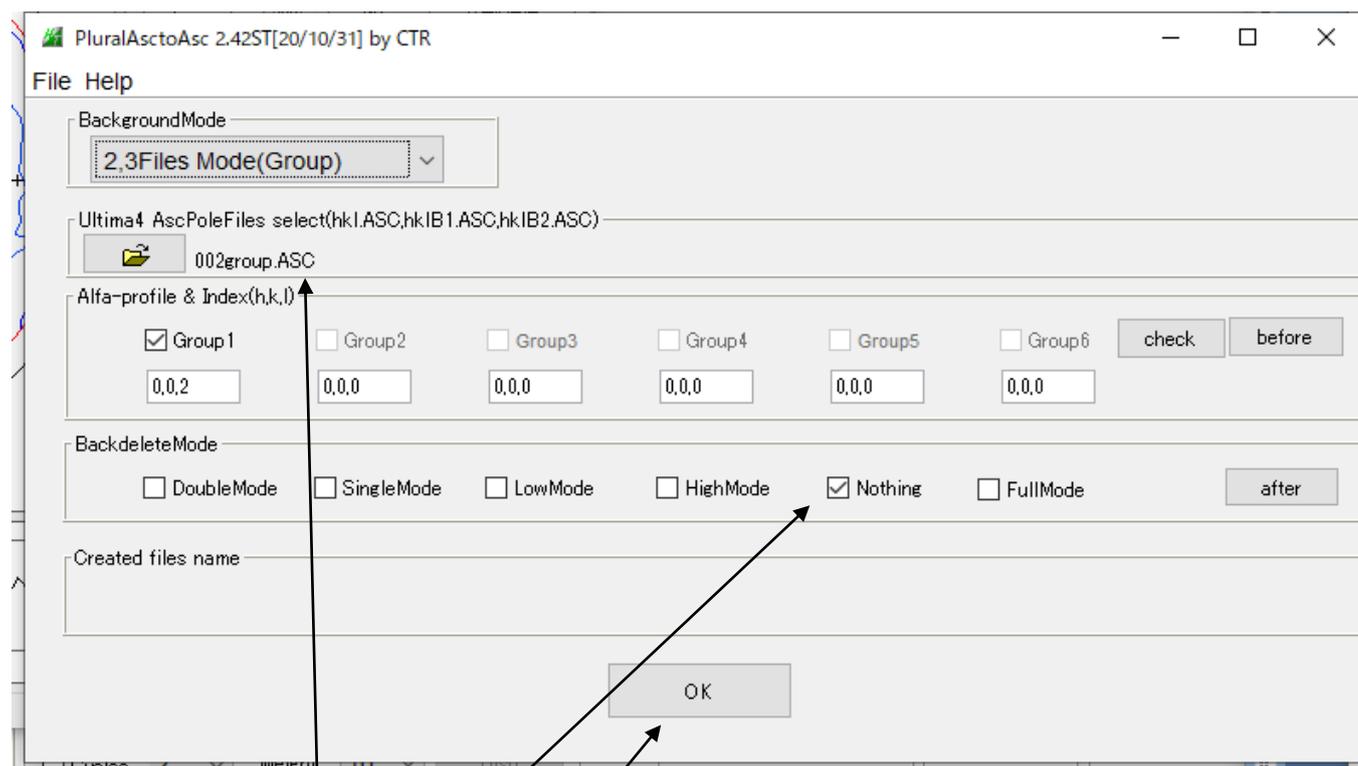
変換終了のコメントが表示される

ピーク極点図とバック極点図の結合を行う

PluralAsctoAscソフトウェアにデータが渡され、結合したファイル名で表示される

ODF解析の様に複数の極点図の場合、同時処理が可能

## 表示されたPluralAsctoAscソフトウェア



結合されたAscファイル

ピーク極点図とバック局点図が表示される場合は、ファイル名が不適当

バックグラウンド削除しないを選択

バックグラウンド削除を行わない変換を行う。

画面が消えます。

ファイルを確認

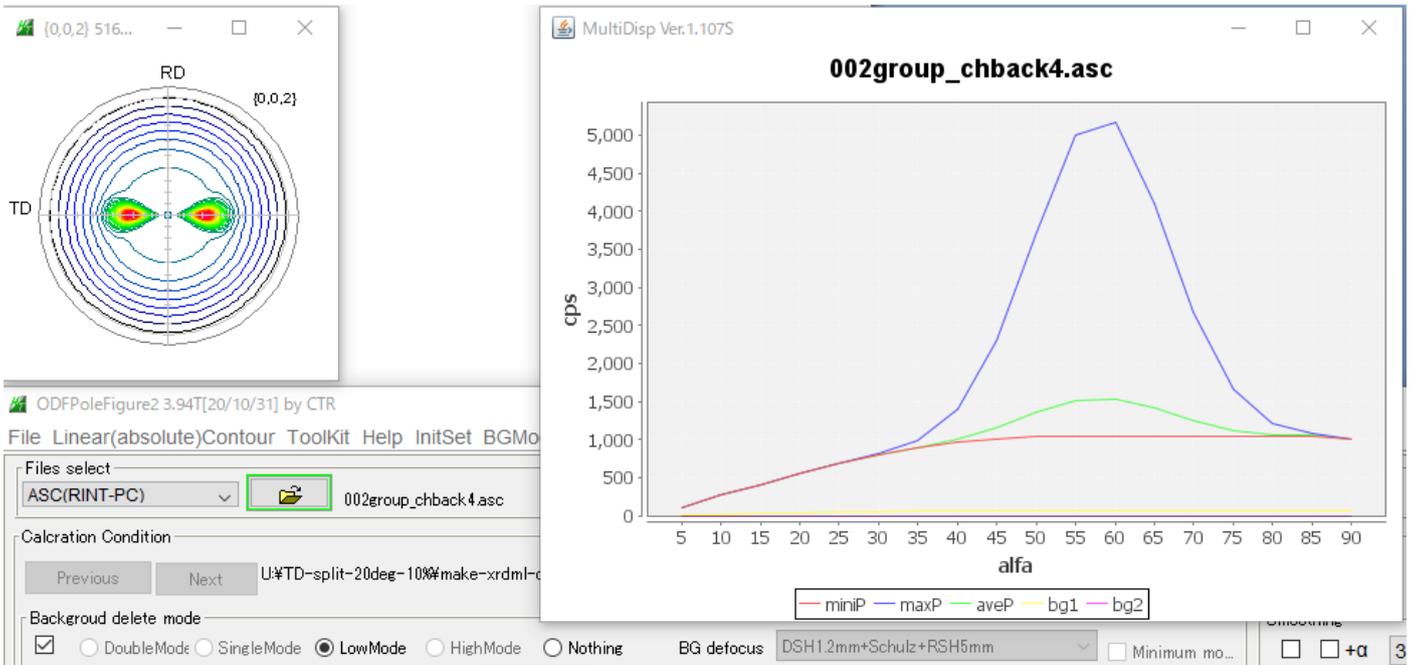
group	2020/07/12 8:15	ファイル フォルダー	
002.xrdml	2020/07/12 8:36	XRDML ファイル	65 KB
002_BG1.xrdml	2020/07/12 8:36	XRDML ファイル	98 KB
002.ASC	2020/07/12 8:47	RINT20007スキー	51 KB
002_BG1.ASC	2020/07/12 8:47	RINT20007スキー	10 KB

結合されたファイルはgroupホルダに作成されています。

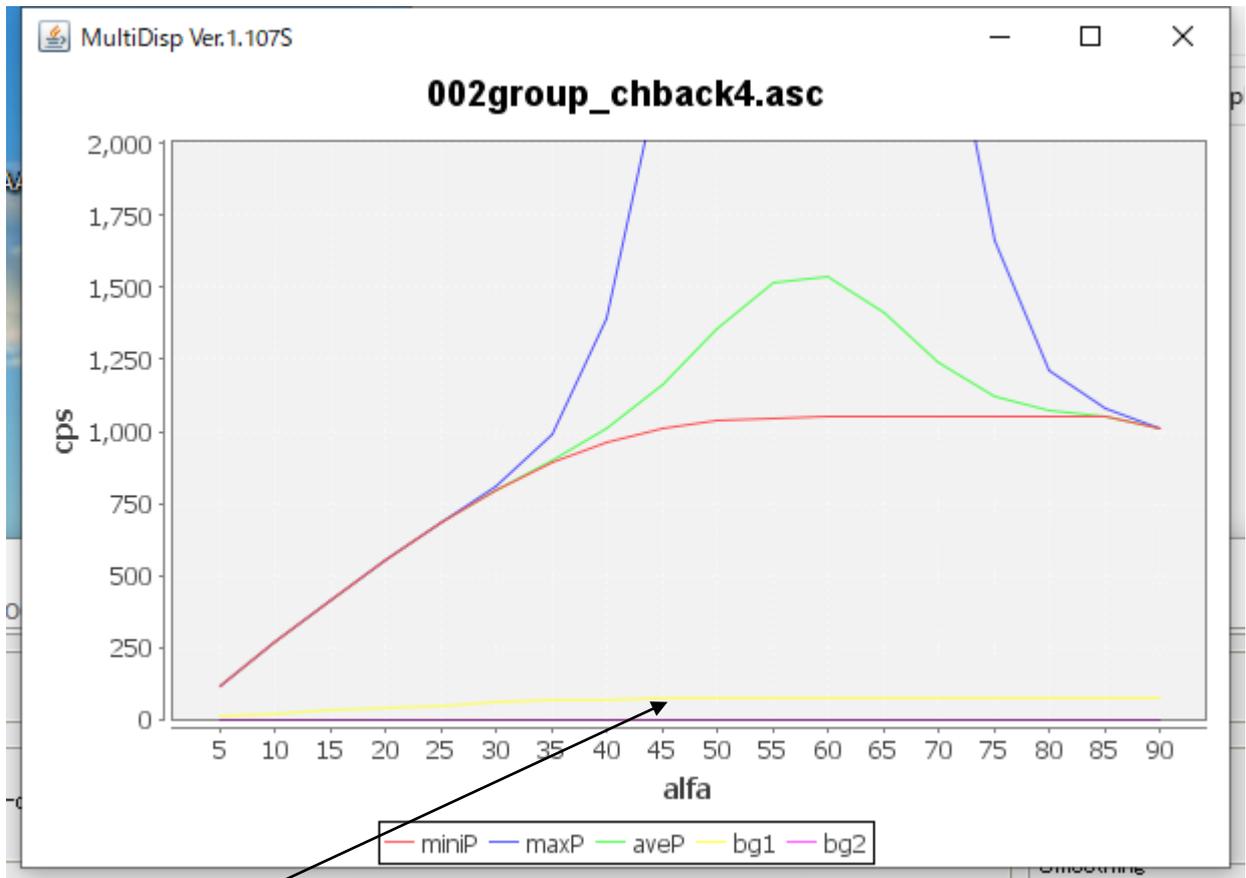
002group.ASC	2020/07/12 8:51	RINT20007スキー	51 KB
002group-chback4.asc	2020/07/12 8:57	RINT20007スキー	51 KB

結合極点図を確認

ODFPoleFigure2ソフトウェアに読み込み



ODFPoleFigure2ソフトウェアの $\alpha$ 軸は  
 外周部分は0度  
 中心部分は90度です。



バックグラウンドは黄色で表示されています。  
 赤色： $\beta$ 方向の最大値を $\alpha$ 方向にプロット、緑色： $\beta$ 方向の平均値を $\alpha$ 方向にプロット  
 $\beta$ 方向の最小値を $\alpha$ 方向にプロット