

広角ゴニオメータ（反射、透過）によるD e f o c u sテーブルデータ
編集プログラム

D e f o c u s m a k e T A B L E

Version 3.21M

2016年09月04日



HelperTex Office

<http://www.geocities.jp/helpertex2>

* @version 1.0

* `Version 1.40 最終データ強度の下駄上げ 1.05倍 allcalc() 2008-07-08

* Version 1.40 スムージングでプロファイルを予測

* Version 1.50 α β 強度 TEXT対応

* Ver 2.01 2008/10/24 Username 対応

* Ver 2.02 2008/12/03 GetHomeDir()対応

* Ver 2.10 2009/01/25 Cor(LaboTex)修正

* Ver 3.000 2009/02/21 RAPID データでも TXT2 で変換可能にした。

* Ver 3.010 2009/02/21 ファイル選択にエラーチェックを追加

* Ver 3.110 2009/02/21 AddDefcousFiles を起動

* Ver 3.120 2009/02/21 TABLE ファイル名の最後にF?.txtを追加

* Ver 3.130 2009/03/02 AllCalc 最終 α 強度の1.05倍を外す。

* Ver 3.140 2009/03/02 HELP 対応

* Ver 3.150 2009/03/02 Krump 修正

* Ver 3.151 2009/12/19 GV

* Ver 3.152 2009/12/21 TextDisplay 対応

* Ver 3.153 2010/01/06 コメントを外す。

概要

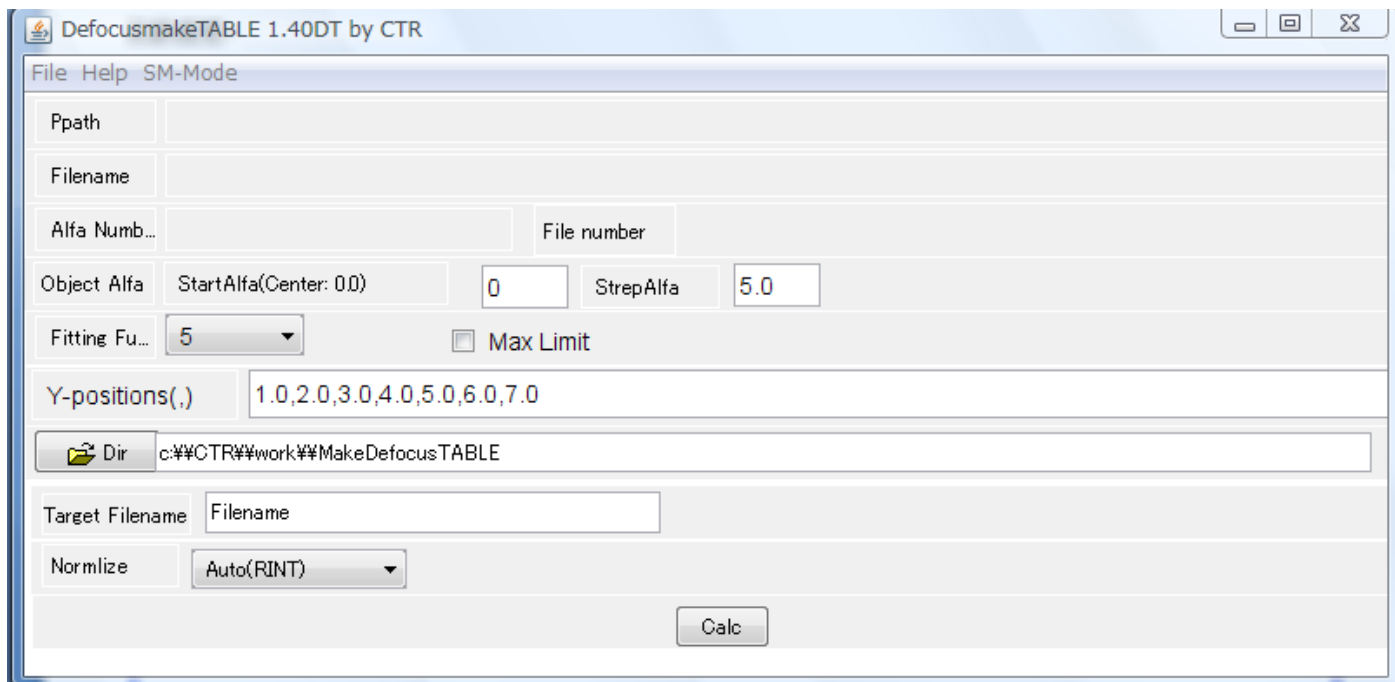
本アプリケーションは、極点におけるD e f o c u sプロファイルのT A B L Eを測定データから作成するプログラムです。D e f o c u sプロファイルは、

測定は、r a n d o m試料を受光スリット1 mm、2 mm、、、7 mmを使った測定を行い測定 2θ としてT A B L Eを作成する。

T A B L Eには、 α 方向のプロファイルが登録される。

最終プロファイルは多項式近似データとして登録されます。

起動画面



SM-Mode

結晶粒径が荒い場合、SM-ONとしてください。

ONの場合、Defcous曲線の下側をトレースします。

パラメータは暫定値になっています。(Clusterソフトウェアのバックグラウンド決定ルーチンと同じ)

File:

1 mmから7 mmまでのTEXTデータ (poleのTEXTデータ) を複数指定

P p t a h : 指定されたファイル群のディレクトリ表示

F i l e n a m e : 指定したファイル群を表示

A l f a N u m b e r : 指定した極点処理結果テキストの測定 α 数を表示

F i l e n u m b e r : 指定したファイル数を表示

Target Alfa

反射法は通常 0.0を指定 (極点図の中心)

透過法は測定開始 α (極点図の中心を0.0として)

StepAlfa:

α 測定間隔

ファイル指定すると実際のA l f a s t a r t、A l f a s t o pを表示

Fitting:

近似多項式の次数の指定 (0 : は近似しない)

Y-positions(,):

ファイルのスリット条件を入力する。

1. 0, 2. 0, 3. 0, 4. 0, 5. 0, 6. 0, 7. 0がデフォルト

Target path:

作成する結果ファイルのディレクトリ指定

Target Filename:

作成するファイル名、拡張子 (t x t) は自動的につけられる。

ファイル名は 2θ 角度とする。

入力ファイル

r a n d o m 試料を測定 (β 方向は 360 度の範囲を測定する必要ない)

ファイル名は、

1 mm - 1 1 0 等 (受光スリット幅 + 指数)

1 1 0 - 1 mm 等 (指数 + 受光スリット)

バック除去、吸収補正、内部規格化を行いファイル出力 (p o l ファイル)

A S C I I 変換ソフトで汎用テキスト化

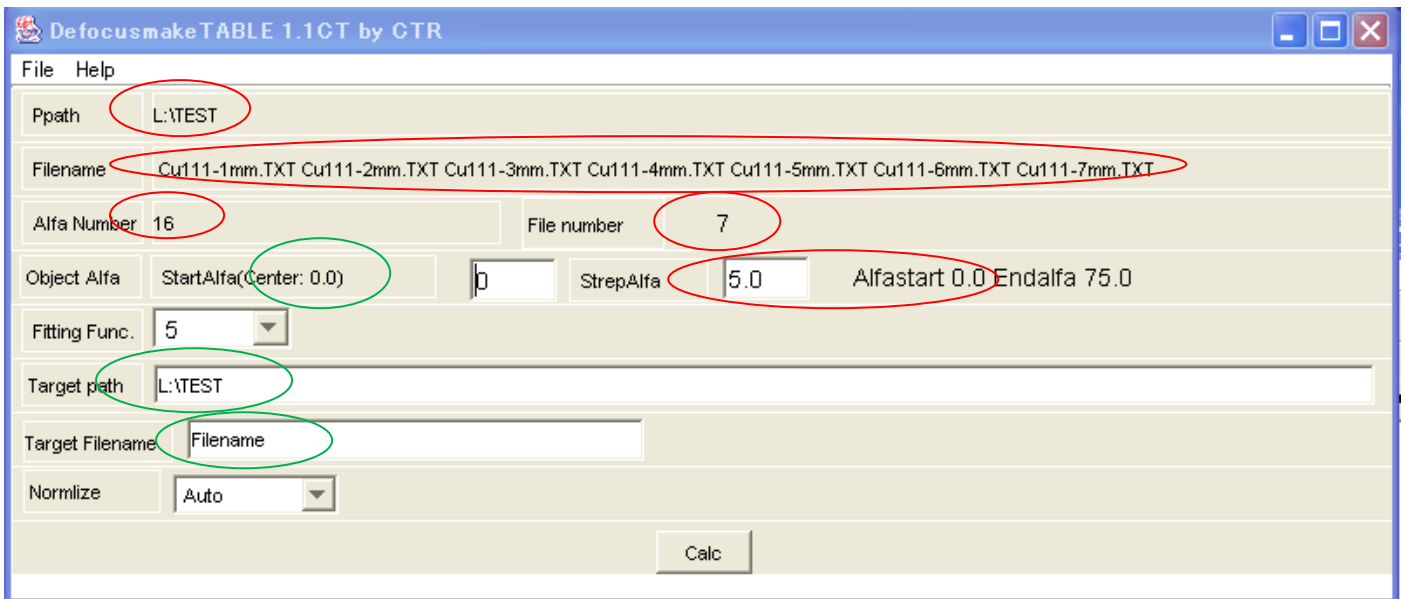
0	1.16272↓
5	1.15323↓
10	1.15994↓
15	1.16325↓
20	1.15699↓
25	1.16414↓
30	1.15321↓
35	1.15973↓
40	1.15361↓
45	1.15743↓
50	1.15004↓
55	1.15469↓
60	1.15618↓
65	1.15905↓
70	1.16858↓
75	1.16506↓
80	1.16081↓
85	1.17045↓
90	1.15781↓
0	1.14716↓
5	1.12292↓
10	1.12464↓

入力ファイル例

1mm-111.txt,2mm-111.txt,3mm-111.txt,4mm-111.txt,5mm-111.txt,6mm-111.txt,7mm-111.txt

ファイル L I S T で読み込み時 1 mm から 7 mm にソートして読み込むため

ファイル選択
複数選択



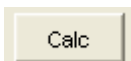
赤い丸で囲まれた部分が選択ファイルにより変更される。

計算を開始する前に

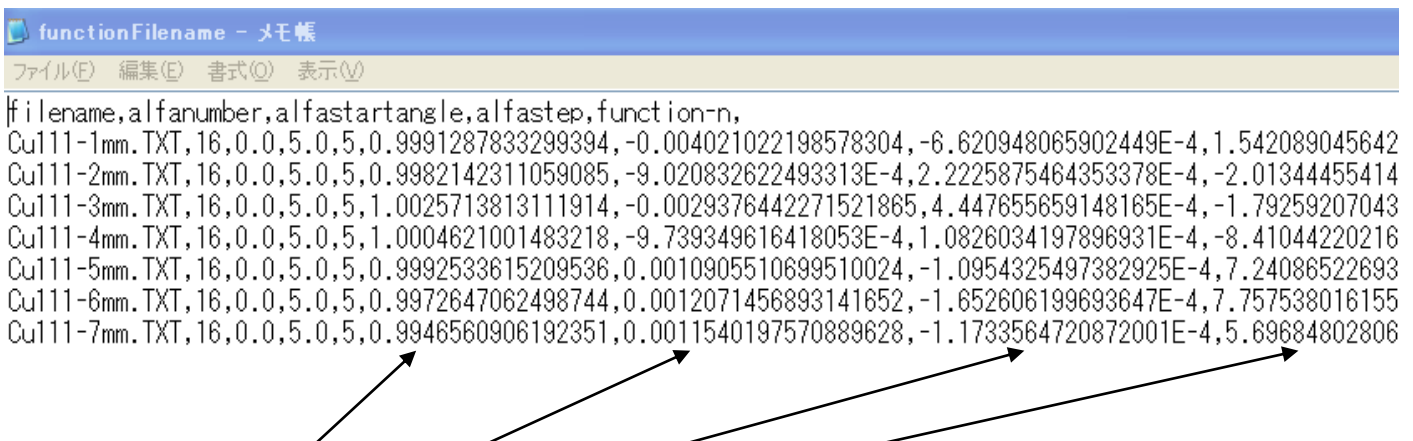
緑丸の部分を変更する。

極点図の中心が測定されている場合、StartAlfaは 0.0とする。

透過法の場合、StartAlfaを変更する。



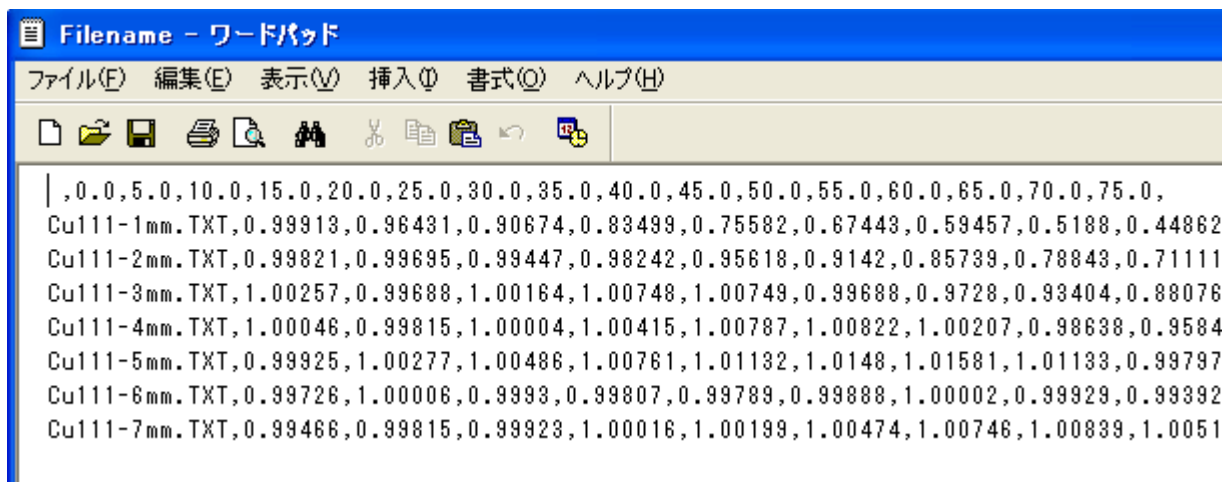
で計算開始、計算完了でWordPad上に結果を表示



上のデータは5次の多項式近似で計算した多項式係数です。

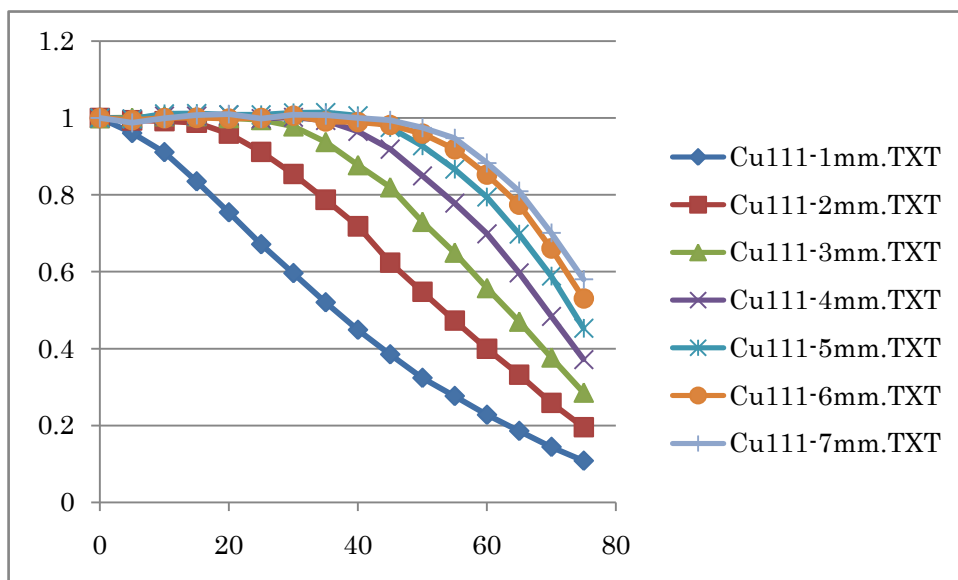
$$F() = f_1 + f_2 * A + f_3 * A * A + f_4 * A * A * A + f_5 * A * A * A * A + f_6 * A * A * A * A * A;$$

同じディレクトリに実データファイルも作成される。

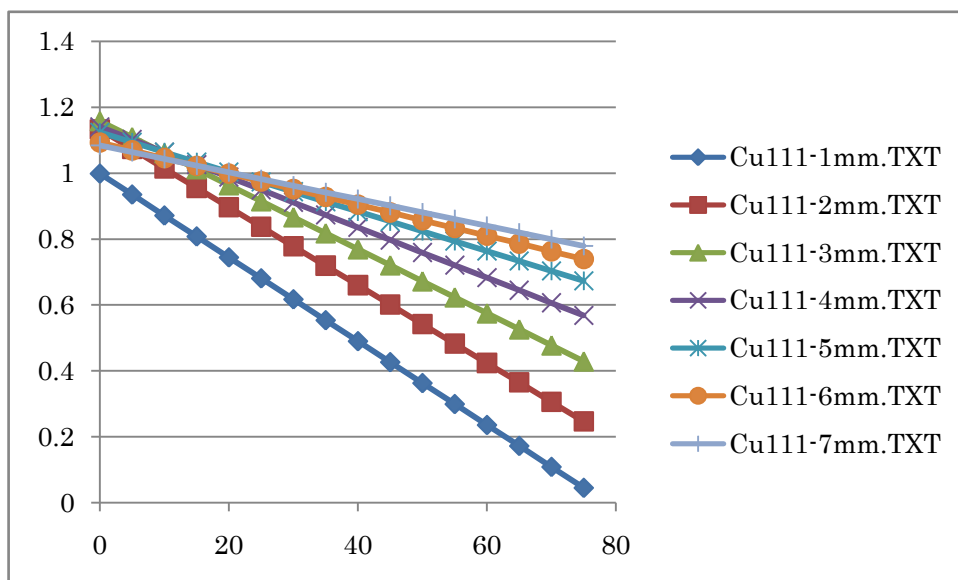


以下は、多項式近似結果をExcelで表示

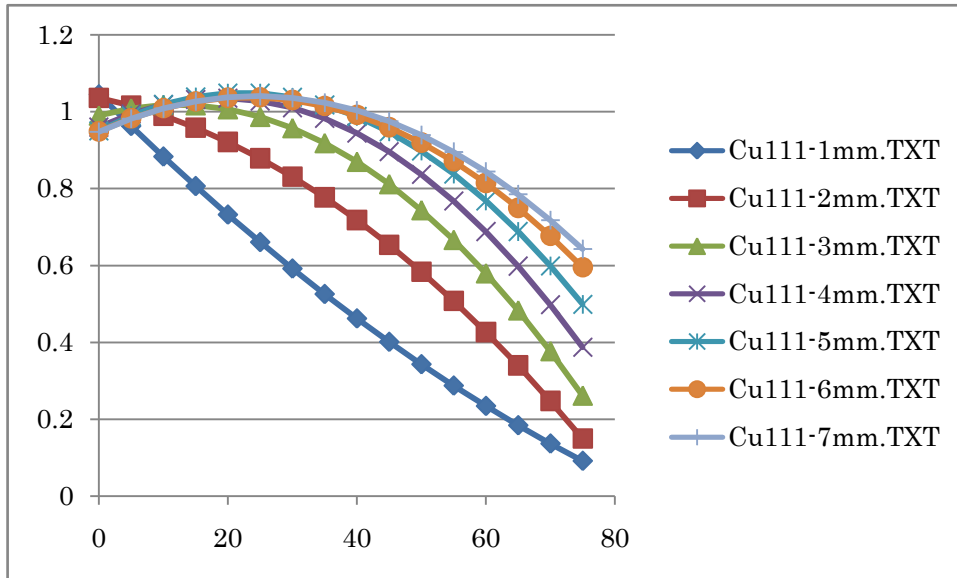
F i t t i n g 0の時



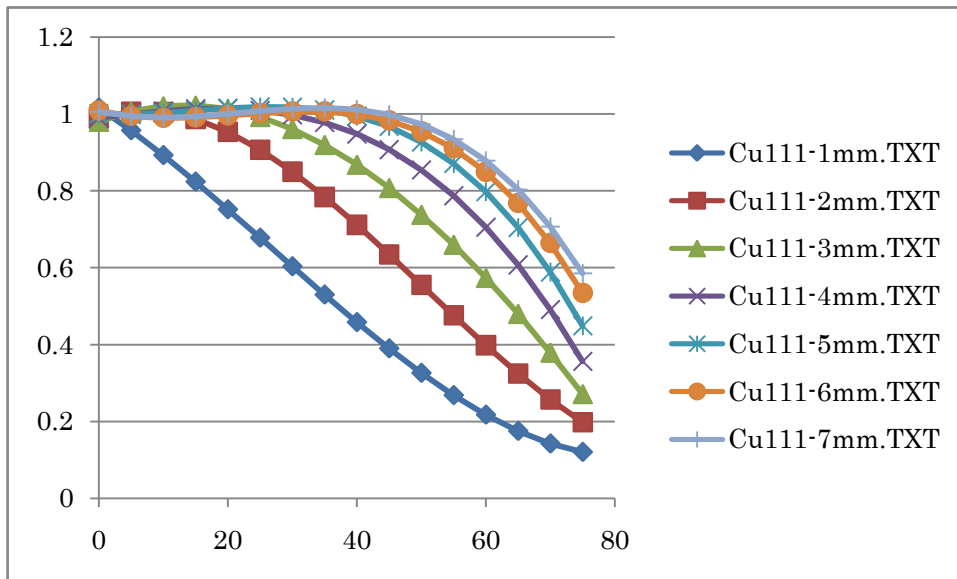
F i t t i n g 1の場合



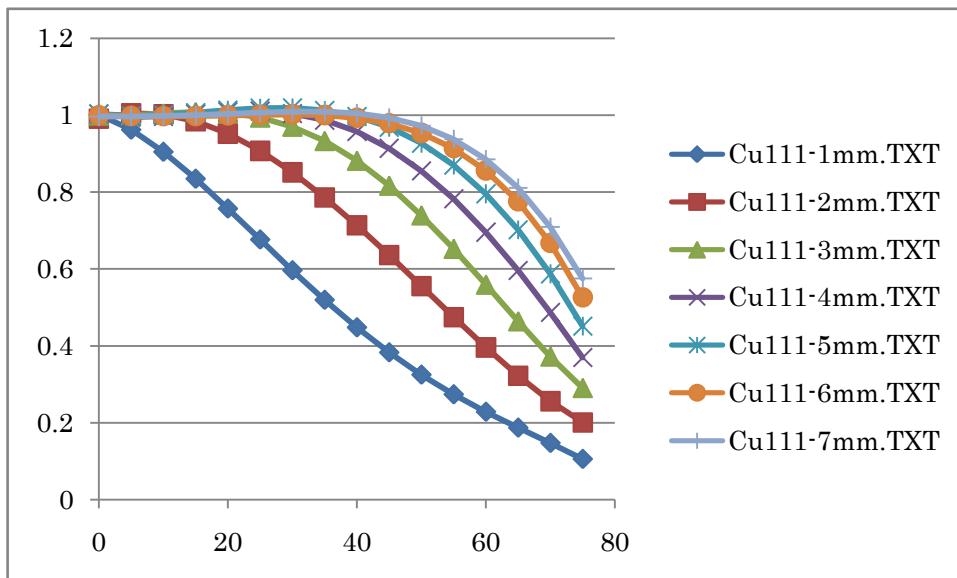
F i t t i n g 2 の場合



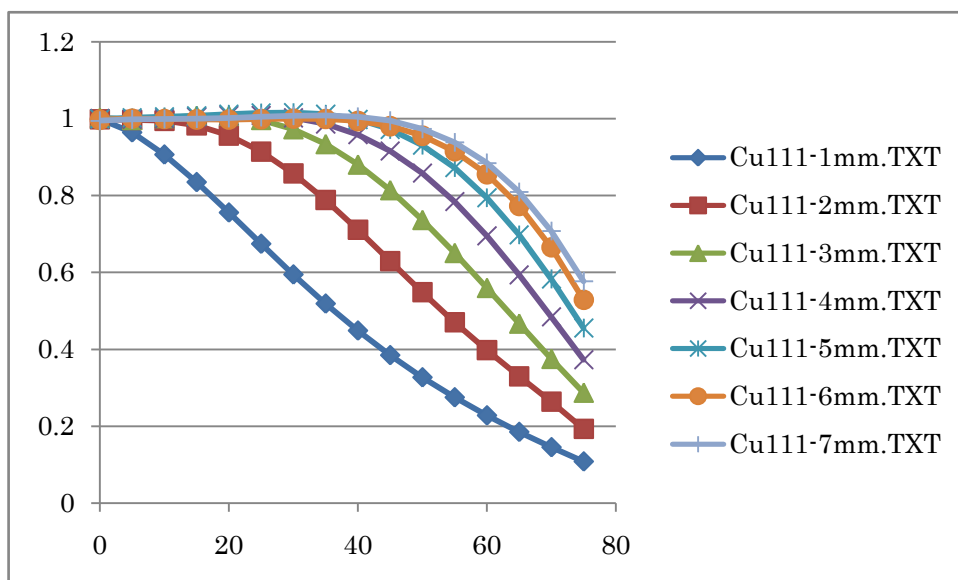
F i t t i n g 3 の場合



F i t t i n g 4 の場合



Fitting 5の場合



DefocusCalc テーブルではない、単独のテーブルも同じ手法で作成する。

例えば、アルミニウムの DefocusTABLE を作る場合、アルミニウムの r a n d o m 試料を用意して、{1 1 1}、{2 0 0}、{2 2 0}、{3 1 1} 極点図を作成し、

上記と同じ手法で defocusTABLE を作成する。

この時、個々のファイル名の先頭を指数で表す。

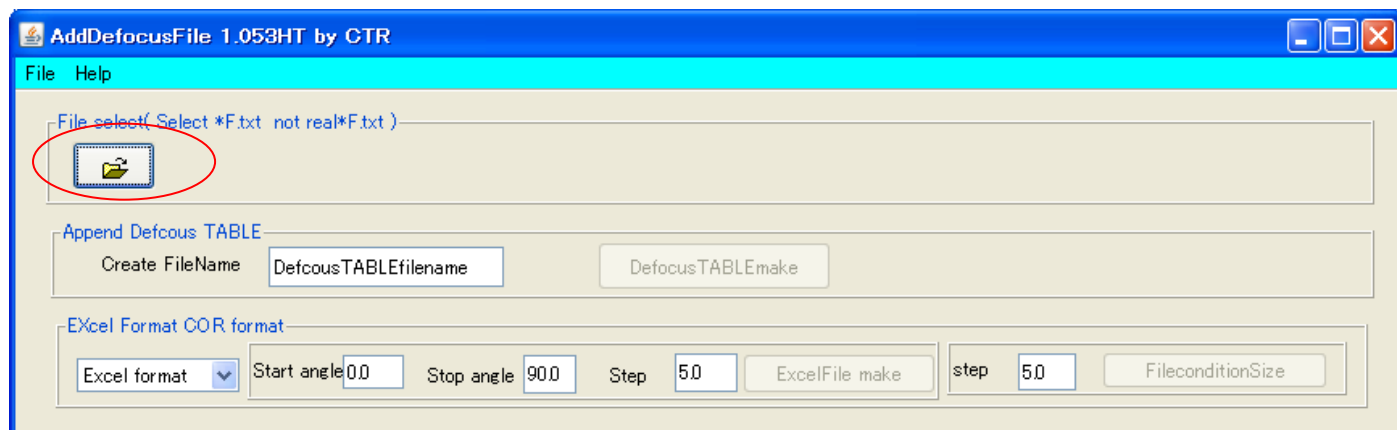
111-al.asc

RAPIDのような、 α 範囲が異なる場合

T X T 2 ファイルを単独で処理し、多項式近似ファイルを作成し、



Collect defocus files 複数の多項式近似ファイルを1つに纏める



多項式ファイルを複数選択して、1つに纏める。