random試料の相互管理を行う

PoleNormalizerソフトウエア 1.00

複数の職場で極点測定を行い、極点図をrandom試料でdefocus補正を行った極密度を 評価する場合、randomの平均強度(規格化値)の違いにより極密度が異なります。 疑似規格化を行うか、あるいはODF解析を行えばrandom試料の平均強度が異なっても 同一の極密度が得られます。

r a n d o m 補正を行った後、不完全極点図の規格化(疑似規格化)は、r a n d o m 試料間の 平均強度の違いを解消しますが、完全極点図の不完全部分とは異なっています。 例えば、C u b e 方位の {001} 極点図を考えると、完全極点図では5個の極がありますが 不完全極点図では1個の極になり、規格化強度が異なってしまいます。 このような考えで、r a n d o m 試料の平均強度の違いを補正します。

> 2017年11月18日 HelperTex Office

目次

- 1. 概要
- 2. ソフトウエアの使い方
- 3. ODFPoleFigure1. 5によるバックグランド削除
- 4. 事業所が異なり複数のrandom試料で運用する場合
- 5. 印刷
- 6. ReferenceではないデータをReferenceとして用いる場合
- 7. randomと配向試料で試料サイズが異なる場合
- 8. r a n d o m 試料サイズが異なる場合
- 9. Tenckhoffソフトウエアによる平均強度(規格化値)の合わせ込みと曲線の整形

1. 概要

極点データ処理では光学系補正にrandom試料を用いてdefocus補正が行われる。 被検試料の極密度算出にはrandom試料の等面積で算出した平均強度(規格化強度)により 規格化される。

異なる被検試料の極密度を比較する場合、同一のrandom試料による平均強度で規格化します。 この場合、random測定を被検試料の測定条件は同一で行います。

ソフトウエアは、以下の状況時利用します。

事業所が異なり複数のrandom試料で運用する場合

異なったrandom試料の場合、平均強度が同じとは限りません。

r a n d o m 試料と被検試料の試料サイズが異なりDSスリット幅を変えて測定した場合

試料サイズが小さいと、DSスリットは狭くします。

 $(d e f c o u s 曲線はDSには関係なく、測定2 <math>\theta$ 角度、受光スリット幅に依存します。)

解決方法

事業所が異なり複数のrandom試料で運用する場合

標準のrandom (Reference) を決めて標準に平均強度を合わせる

r a n d o m試料と被検試料の試料サイズが異なりDSスリット幅を変えて測定した場合
 標準のr a n d o m試料でDSを変えて、X線ビームが試料からはみ出ないα領域の
 測定を行い、平均強度比率を算出し補正を行う。
 例えば、α範囲80->90度を行う。

いずれの場合でも、ODFPoleFigure1.5(2)の疑似規格化を使用すれば解決します。 ODFPoleFigure1.5

-Normalizat	CenterData —	$_{\Box}$ OutFiles —				-1
CTR	Average	🔘 Asc	🔘 Ras	• TXT2	⊖ TXT ()	
	1					_

ODFPoleFigure2

_Smoothing fo	or ADC					/	Nori	malization -	1 [Jent	erData —	-1	_E OutFiles -			
Cycles	2 🗸	Weight	10	~	Disp		✓	CTR		04	verage		🔘 Asc	🔿 Ras	⊖ TXT	• TXT2
1					 											

上記疑似規格化を使用しない場合を説明します。

入力データ

全て、バックグランドを削除したTXT2データを用います。

2. ソフトウエアの使い方

 $ODFPoleFigure 1.5 \verb+>TooKit \verb+>DefocusTools \verb+>PoleNormalizer$

🞽 Defoci	usIndex 1.03ST[18/03/31]	by CTR – 🗆 🗙
File Help		
TXT2 Defcous sample Pole files	DefocusMakeTABLE	*F.TXT Files
*F.TXT files Fitting function files	AddDefocusFile	Fitting function file
Defocusfiles Inner files	DefocusCalc	TXT2 or Asc file
TXT2 Defocus samle Profile	TenckhoffCalc	ASC,TXT2,P,
TXT2 Raw data	Reversedefocus	ASC
TXT2 BackgroudDeletefile	PoleNormalizer	TXT2



3. ODFPoleFigure1. 5によるバックグランド削除



_ 🗆 🗙

Profile

バックグライドデータが異常ない事を確認し、バックグランド削除を指定

極点図の中心は平均する。

バックグランド削除を行う。



補正が不要な場合、バックグランド除去したTXT2データ defocus に登録します。

- 4. 事業所が異なり複数のrandom試料で運用する場合
 - バックグランドを削除した複数の TXT2 ファイルから



最大値が最大の random データを reference として説明します。

Reference に最大値 1708.2 の random 試料を選択

<u>ه</u>	PoleNormalizer 1.00ST[18/03/31] by CTR – \Box ×
File Help	
Reference Y:\source\Pole\PoleNormaliz	er-Ver-1-00(2017-11-18)\DATA\220-120_chB0CA_2.txt Max: 1708.2 Norm: 1472.91
Sample 🚅	
Calc Normalize 1472.91 Magnificati	on 1 Calc
File	S Filename _chNORM Filemake

最大値と規格化値が表示され、Sample の normalize に最大値の規格化値が表示されます。 Sample に最大値 1637.03 の random 試料を選択

<u></u>	PoleNormalizer 1.00ST[18/03/31] by CTR	- 🗆 🗡
File Help		
Reference Y:\source\Pole\PoleNorm	alizer-Ver-1-00(2017-11-18)\DATA\220-120_chB0CA_2.bt Max: 1708.2 Norm: 1472.91	
Sample Y:\source\Pole\PoleNorm	alizer-Ver-1-00(2017-11-18)\DATA\220-115_chB0CA_2.txt Max: 1637.03 Norm: 1411.54	
Calc Normalize 1472.91 Magnific	ation 1 Calc	
File	RAS Filename _chNORM Filemake	

Calc で Sample データに 1472.91/1411.54 を掛け合わせます。



FileMake で sample ファイル名に_chNORM が追加した TXT2 ファイルが作成されます。

これで、Reference と同一の平均強度(規格化強)の sample ファイルが作成されます。



Sample の Reference への規格化プロファイルは Reference に重なっています。 ほぼ重なる事を確認してください。

この画面は重要なパラメータなので、印刷してください・

画面上でマウスを右クリック



Referenceによる規格化は同様に行います。

6. ReferenceではないデータをReferenceとして用いる場合

NO2 (Max1637.03) によりNO3 (Max1423.5)を Reference (Max1708.2)に規格化する

Reference と NO2 の比率 1472.91/1411.54 を入力

PoleNormalizer 1.00ST[12/03/31] by CTR	- 🗆 🗙
File Help	
Reference Y:\source\Pole\Pole\PoleNormalizer-Ver-1-00(2017-11-18)\DATA220-115_chB0CA_2.bt Max: 1637.03 Norm: 1411.54 Sample Y:\source\Pole\Pole\PoleNormalizer-Ver-1-00(2017-11-18)\DATA220-random_S_chB0CA_2.TXT Max: 1423.5 Norm: 1227.42	
Calc Normalize 1411.54 Magnification 1.043477337 Calc	
File TxT2 ASC RAS Filename _chNORM Filemake	

4		PoleNormalizer	r 1.00ST[18/03/31]] by CTR	- 🗆 🗙
File Help					
Reference	Y:\source\Pole\PoleNormalizer-\	/er-1-00(2017-11-18)\L	DATA\220-115_chB0CA_	2.bt Max: 1637.03 Norm: 1411.54	
Sample	Y:\source\Pole\PoleNormalizer-\	/er-1-00(2017-11-18)\E	DATA\220-random_S_chl	BOCA_2.TXT Max: 1423.5 Norm: 1227.42	
Calc Normalize	1411.54 Magnification	1.043477337		Max: 1708.21 Norm: 1472.9	1
File	T2 ASC RAS	Filename	_chNO RM	Filemake	

Reference の規格化値が算出されます。



よって、NO3の random 試料も、Reference に規格化されます。

7. randomと配向試料で試料サイズが異なる場合

r a n d o m試料サイズが小さく、通常のDSスリットでは試料を煽った場合、X線ビームが はみ出す事があります。この様な時は、以下の方法で補正を行います。 例えば、r a n d o mプロファイルをDS=1/4度、配向試料をDS=1/2度で測定する。 1/4度のr a n d o mプロファイルを1/2度のr a n d o mプロファイルに変換します。 広いスリットでもはみ出さない α 領域も極点図を測定する。 α = 7 0 から 9 0 度 バックグランドを削除した極点図を測定



1/2を Reference に指定

1/4を sample に指定

PoleNormalizer 1.00ST[18/03/3	31] by CTR – 🗖 🗙
File Help	
Reference	
Y:\source\Pole\Pole\Pole\Pole\Vernalizer-Ver-1-00(2017-11-18)\DATA\DSを変えた場合	습\220-random_1-2_2.bt Max: 2562.3 Norm: 2311.88
Sample	
Y:lsourCe\Pole\PoleNormalizer-Ver-1-00(2017-11-18)/DATA\DSを変元た場合	
Calc	
Normalize 2311.88 Magnification 1 Calc	
File	
TXT2 ASC RAS FilenamechNORM	Filemake

1/4を1/2に規格化する。



1/4度の random プロファイルから1/2度の random プロファイルを作成

Reference と sample に1/4 度で測定したバックグランドを削除した TXT2 ファイルを指定

<u></u>			PoleNormali	zer 1.00ST[18/	03/31] by	(CTR		- 🗆 🗙
File Help								
Reference	Y:\source\Pole	PoleNormalizer-Ver	r-1-00(2017-11-1	8)\DATA\DSを変え;	た場合\220-r	andom_S_chB0CA_2.TXT M	ax: 1423.5 Norm: 1	1227.42
-Sample	Y:\source\Pole	PoleNormalizer-Ver	r-1-00(2017-11-1	B)\DATA\DSを変え;	た場合\220-r	andom_S_chB0CA_2.TXT M	ax: 1423.5 Norm: ·	1227.42
Calc Normalize	1227.42	Magnification	1.8	Calc		Max: 2562.3 No	orm: 2209.36	
File	CT2 ASC	RAS	Filename	_chNO RM		Filemake		



ファイルを作成

File —						
	✓ TXT2	ASC	RAS	Filename	_chNO RM	Filemake

8. r a n d o m 試料サイズが異なる場合

Referenceを1/2度、サイズの小さいrandomを1/4度で測定した場合

1/2度で測定した Reference	1/4度で測定した別の random 2 を指定
🛃 PoleNorm	nalizer 1 90ST[18/03/31] by CTR – 🗖 🗙
File Help	
Reference	
Y:\source\Pole\PoleHormalizer-Ver-1-00(2017-1	11-18)\DATA\複数の r a n d o m試料\220-120_chB0CA_2.bt Max: 1708.2 Norm: 1472.91
Sample	
Y:\source\Pole\PoleNormalizer-Ver-1-00(2017-1	I1-18)\DATA\DSを変えた場合\220-random_1-4_2.bt Max: 1423.5 Norm: 1284.38
Calc	
Normalize 1472.91 Magnification 1.8	Calc
File	
TXT2 ASC RAS Filenam	e _chNORM Filemake
1	

Random2の1/2度と1/4度の比率 2311.88/1284.38 を入力する

この方法で、DS スリットが異なるデータによる規格化が可能です。

9. TenckhoffCalcソフトウエアによる平均強度(規格化値)の合わせ込みと曲線の整形

Main TenckhoffCalc 1.10MT[18/03/31] by CTR -
File Help
MODE Maxsreach V
TXT2File Y¥source¥Pole¥PoleNormalizer-Ver-1-00(2017-11-18)¥DATA¥複数のrandom読状¥¥220-115_c Max: 1637.03 Norm: 1411.54
TenckhoffParametor
beam width on sample(mm) 1.0 P 0.931
2Theta angle(degree) 65.05 h,k,l 2,2,0 RSSlitSize(mm) 7
Alfa(degree) Start 0.0 Stop 75.0 Step 5.0
MakeFile Noralization Fitting Calc Normalize 1 Normalize 1 O TenckhoffFile I TXT2

Fittingによりプロファイルの整形



CalcでFitting 結果を用いて1472.91に規格化したファイルを作成

