

NO0003

Defocus用ファイルの作り方

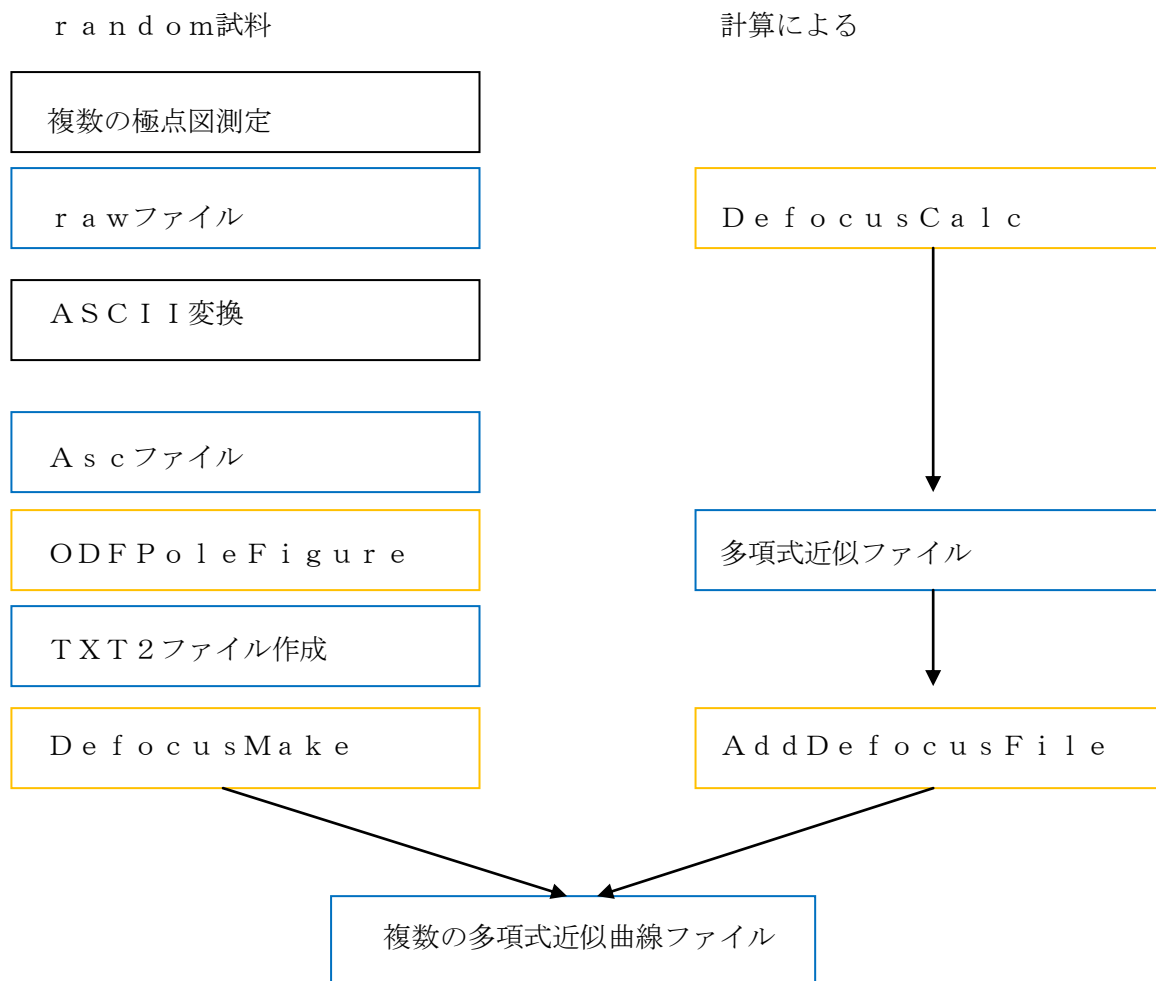
概要

ODFPoleFigureソフトウェアでは、複数のDefocus曲線を抱えていて同時に複数の極点図のDefocus補正を行う機能があります。

この機能実現の為に、物質、受光スリット、別に多項式近似群が必要です。

Defocus曲線は、被検物質と同一条件でrandom試料を測定した極点図が必要です。あるいは、DefocusCalcプログラムで計算により多項式近似曲線を作成します。

作成の流れ



測定データ、或いは計算による多項式の先頭にミラー指数でファイル名を作成する。

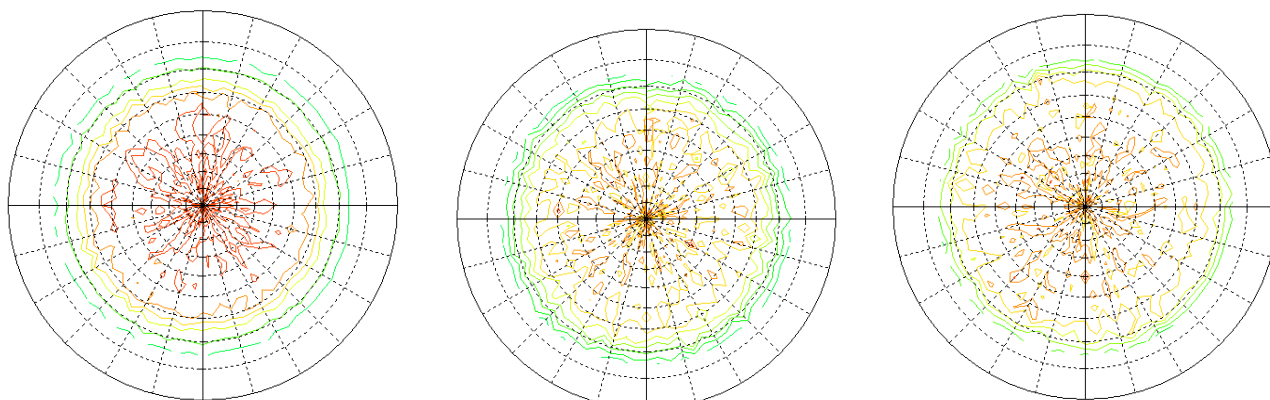
実測定データ (random試料) から多項式近似曲線を作成する。

A l - p o w d e rを受光スリット7mmで測定

(111)

(200)

(220)

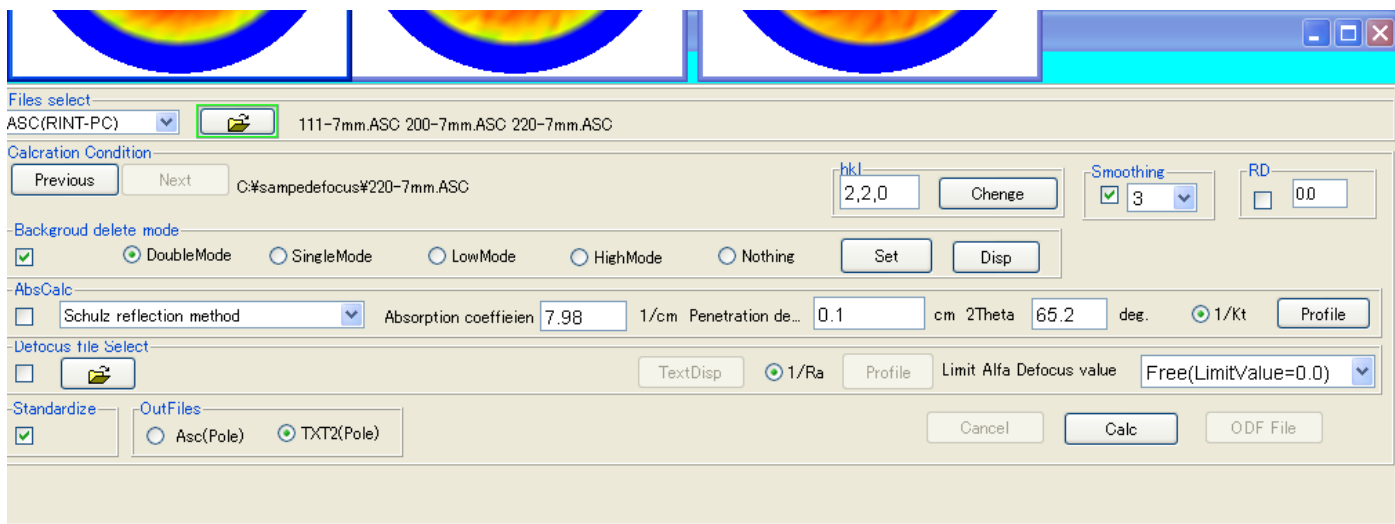


111-7mmraw	28 KB	生データ	2010/04/08 13:37
200-7mmraw	28 KB	生データ	2010/04/08 16:27
220-7mmraw	28 KB	生データ	2010/04/08 19:43

A S C変換プログラムでA s cファイル化

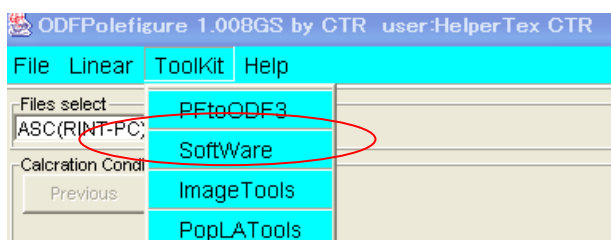
111-7mm.ASC	22 KB	RINT2000アスキー	2010/12/09 14:41
200-7mm.ASC	21 KB	RINT2000アスキー	2010/12/09 14:41
220-7mm.ASC	21 KB	RINT2000アスキー	2010/12/09 14:41

O D F P o l e F i g u r eプログラムでT X T 2ファイル化



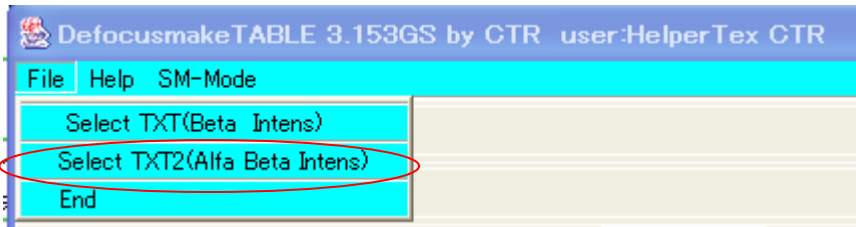
バックグラウンド除去、強度の規格化、でT X T 2ファイルを作成する。

111-7mm_chMB2S_2.TXT	22 KB	テキスト文書	2010/12/09 14:47
200-7mm_chMB2S_2.TXT	22 KB	テキスト文書	2010/12/09 14:47
220-7mm_chMBOS_2.TXT	22 KB	テキスト文書	2010/12/09 14:47

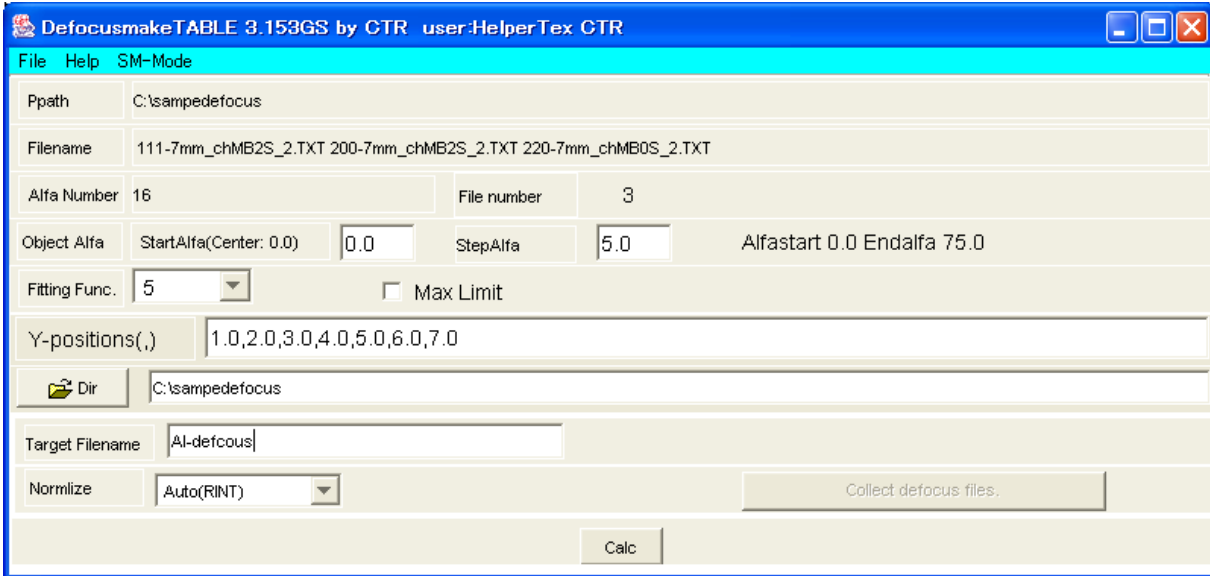


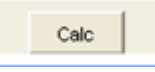
S o f t W a r eから

DefocusMakeTABLE



T X T 2 ファイルの選択

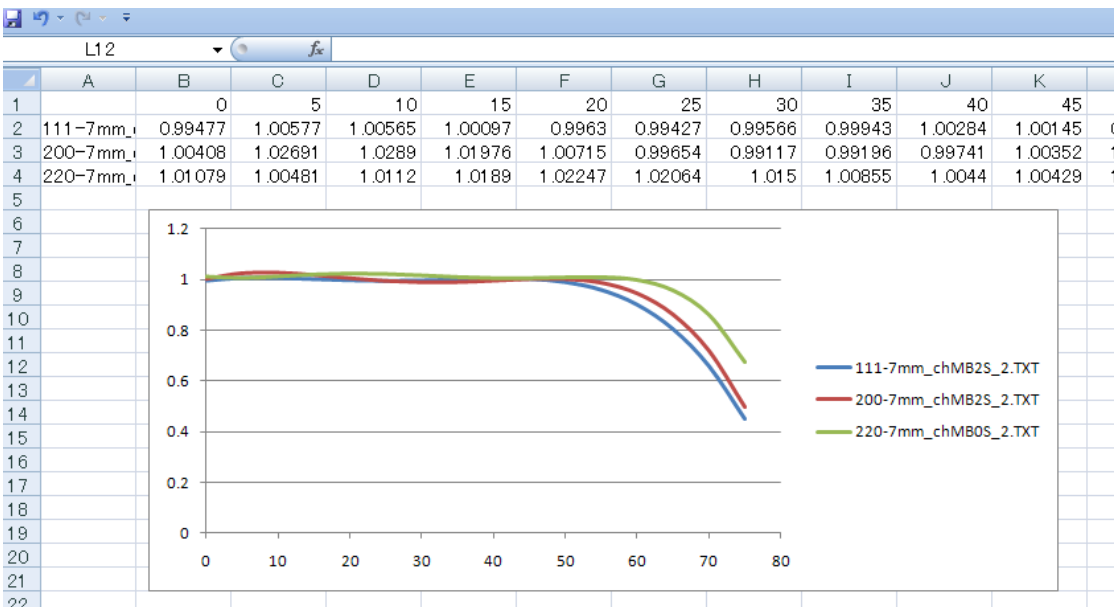


多項式近似ファイル名を入力して  でファイル内容が表示される。

```
filename,alfanumber,alfastartangle,alfastep,function-n,mm, 10/12/09 DefocusmakeTABLE 3.153GS by CTR user:HelperTex
111-7mm_chMB2S_2.TXT,16,0.0,5.0,5,1.0,0.9947714010832975,0.0038535125107009563,-3.9163696167721746E-4,1.29
200-7mm_chMB2S_2.TXT,16,0.0,5.0,5,2.0,1.0040811007915604,0.007399742288544184,-6.481622009530223E-4,1.693E
220-7mm_chMB0S_2.TXT,16,0.0,5.0,5,3.0,1.0107947343883736,-0.0035072856519534866,5.942720953860743E-4,-2.91
```

111-7mm_chMB2S_2.TXT	22 KB	テキスト文書	2010/12/09 14:47
200-7mm_chMB2S_2.TXT	22 KB	テキスト文書	2010/12/09 14:47
220-7mm_chMB0S_2.TXT	22 KB	テキスト文書	2010/12/09 14:47
AI-defocus-3F.txt	1 KB	テキスト文書	2010/12/09 14:53
realAI-defocus-3F.txt	1 KB	テキスト文書	2010/12/09 14:53

完成した多項式近似ファイルと E x c e l 表示用ファイル

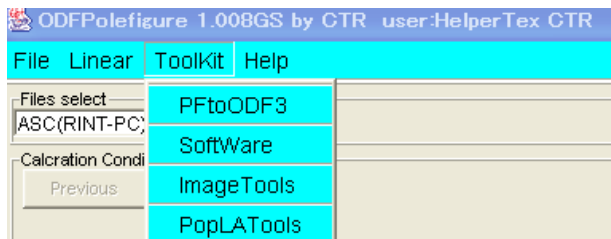


計算による多項式近似曲線の作成

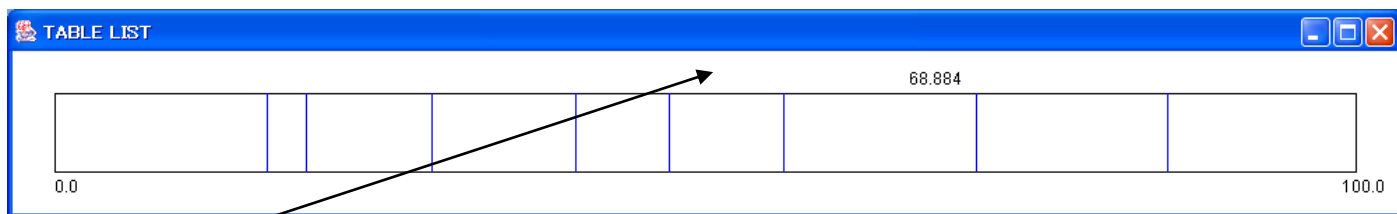
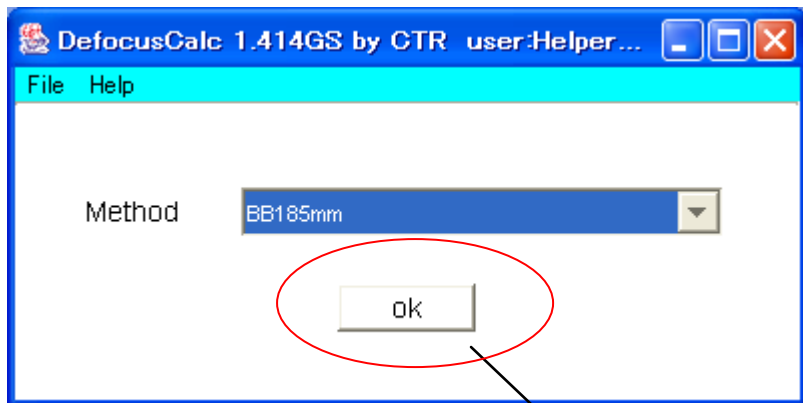
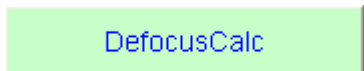
Defocus曲線は、光学系で決まります。

今回、ゴニオ半径185mm、受光スリット7mmとしA1のDefocus曲線の作成

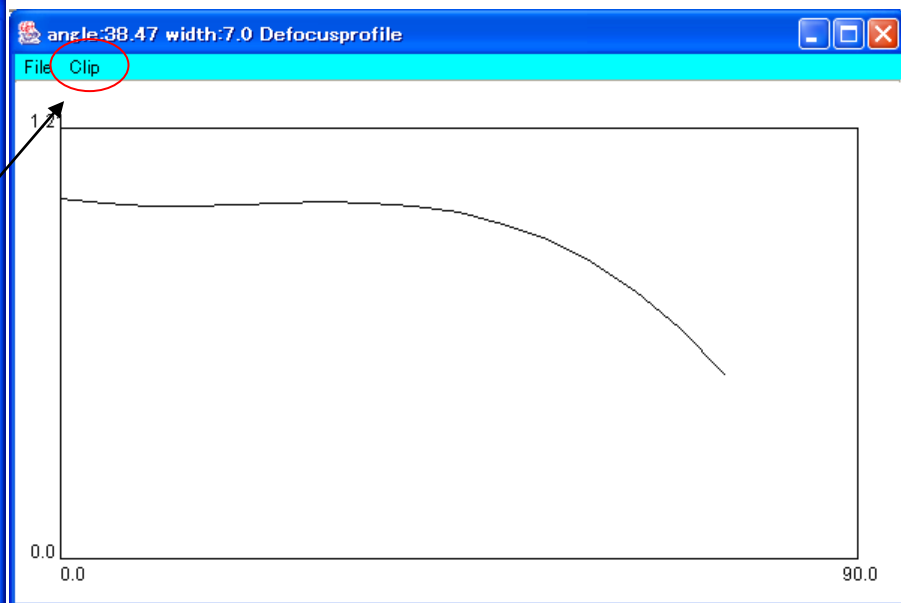
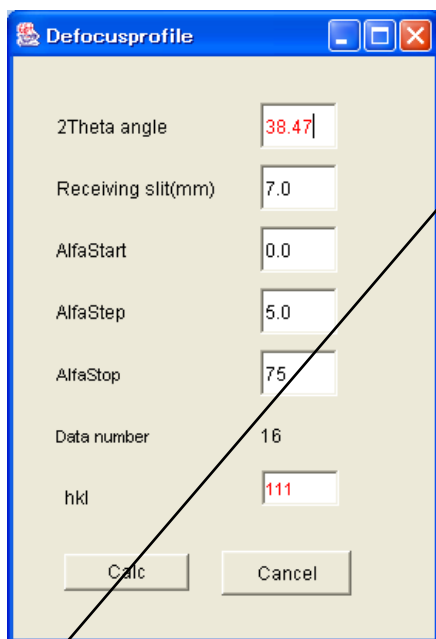
ODFPoleFigureプログラムの



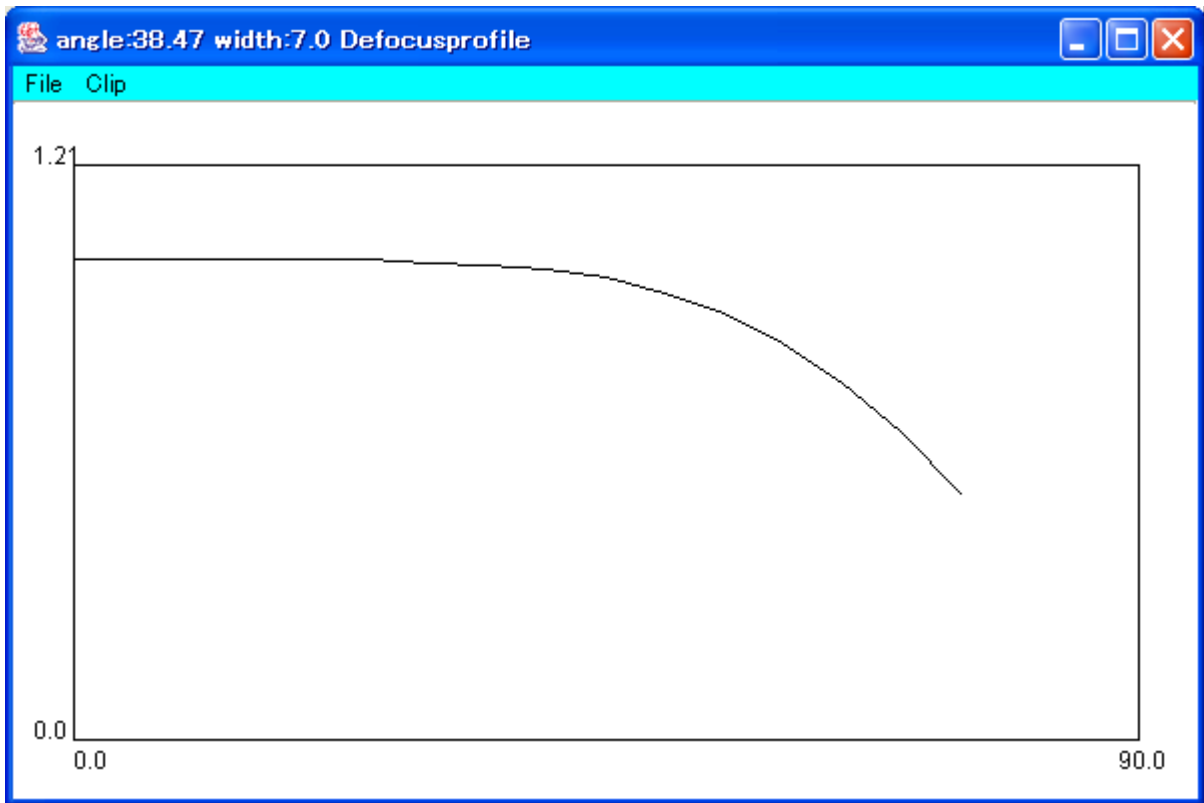
Softwareから



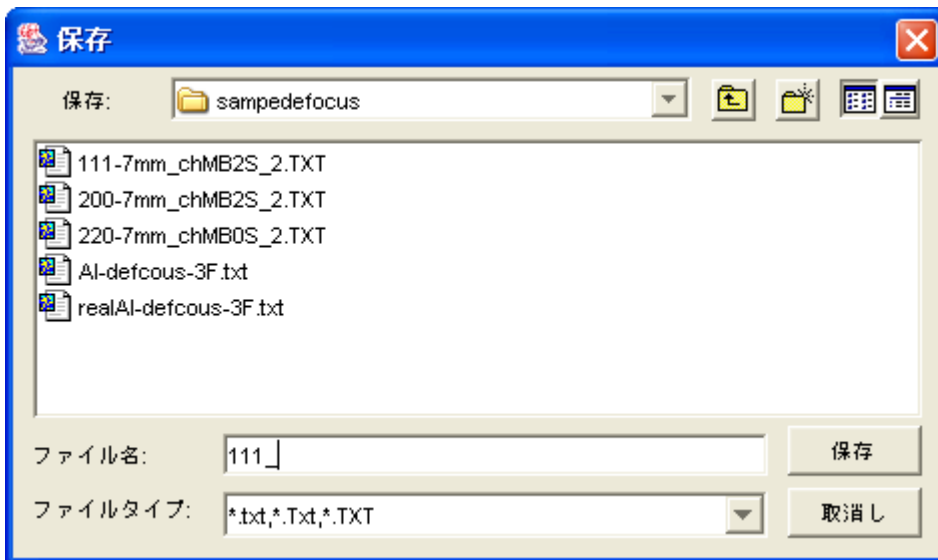
四角の欄外をクリック



Clipで成形する。



File -> Fitting Function save



ファイル名を指定してsaveする。

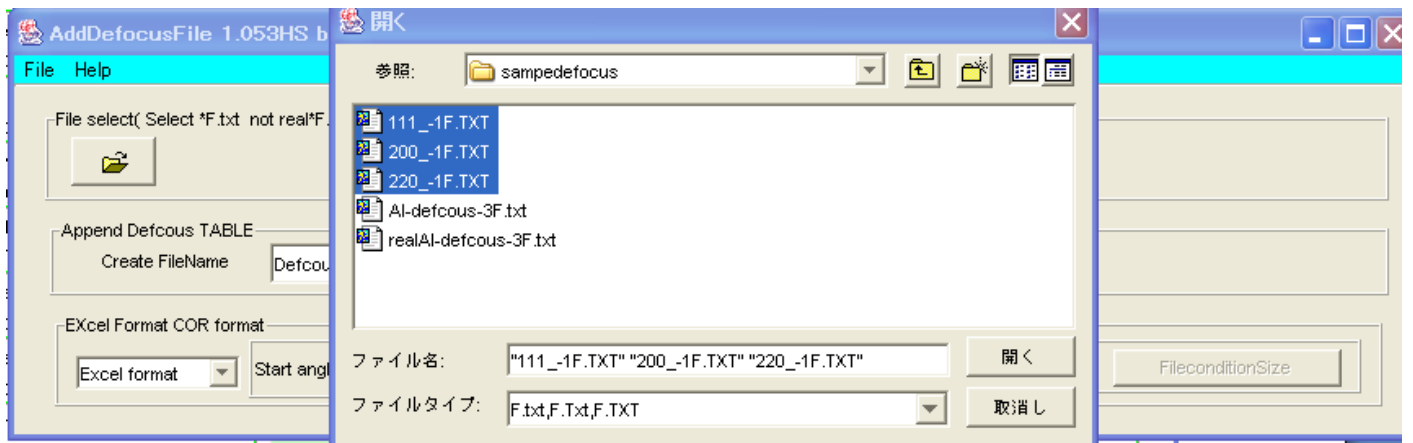
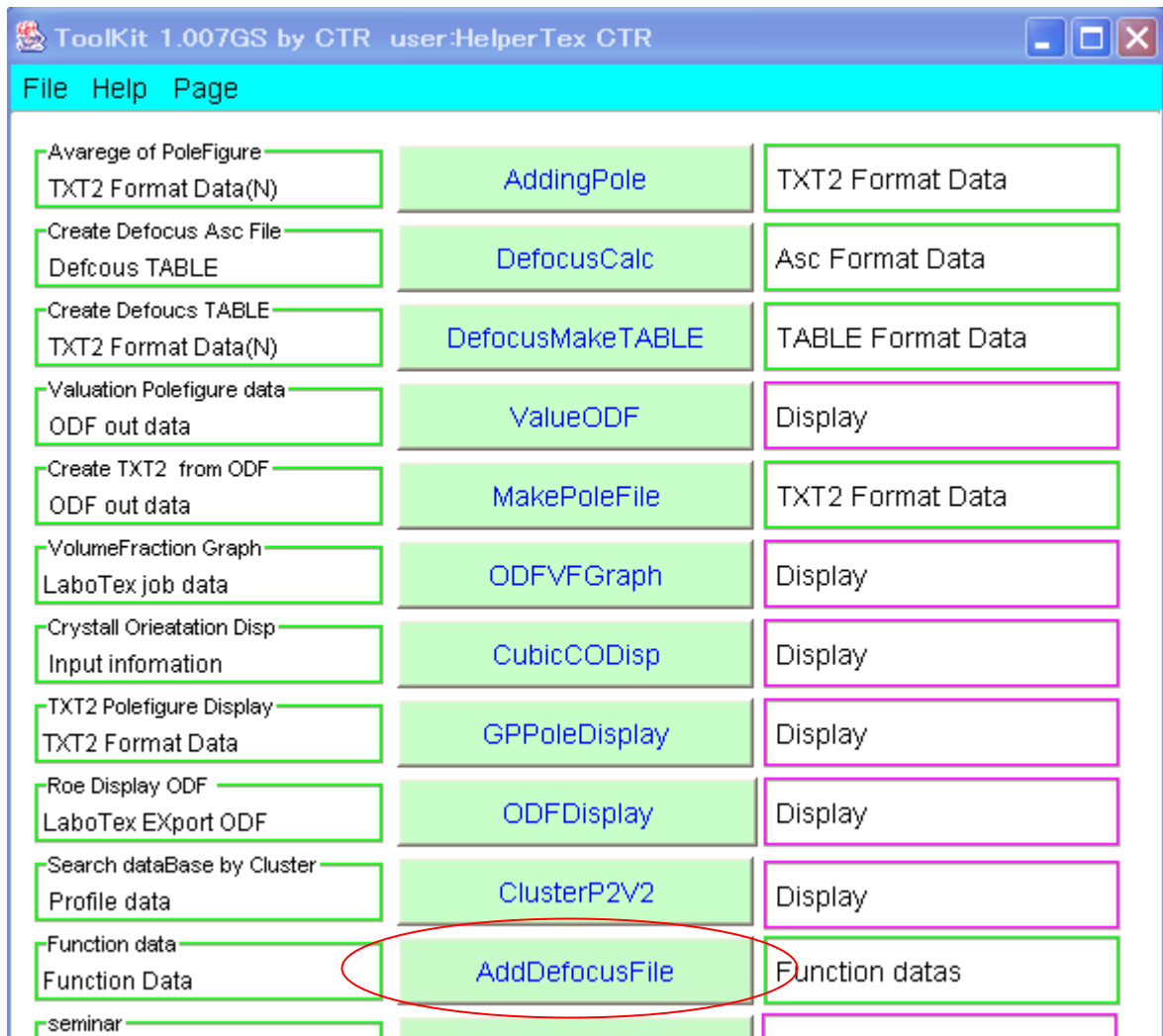
realAI-defcous-3F.txt	1 KB	テキスト文書	2010/12/09 14:53
111_-1F.TXT	1 KB	テキスト文書	2010/12/09 15:08

111__-1F.TXTファイルが作成される。

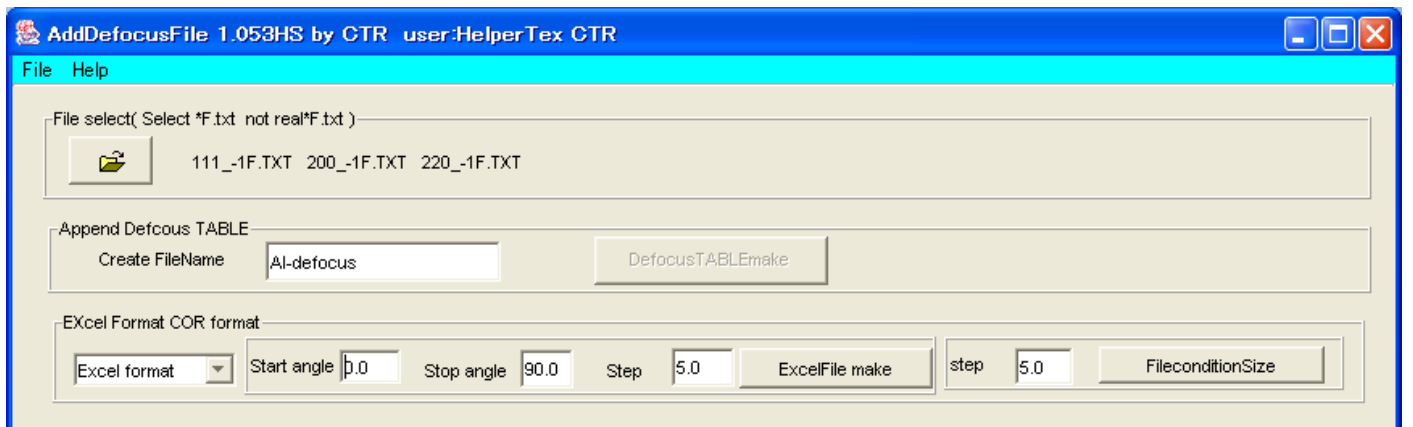
同様に、200、220を作成

111_-1F.TXT	1 KB	テキスト文書	2010/12/09 15:08
200_-1F.TXT	1 KB	テキスト文書	2010/12/09 15:10
220_-1F.TXT	1 KB	テキスト文書	2010/12/09 15:11

複数の多項式近似ファイルが作成される。



先ほど作成した複数の多項式近似ファイルを一括指定



DefocusTABLEmake

ファイル名を入力して

```
TextDisplay 1.003GS by CTR user:HelperTex CTR
File Help
filename,alfanumber,alfastartangle,alfastep,function-n,mm,10/12/09 DefocusCalc 1.414GS by CTR user:HelperTex CTR
111_defocus.txt,16,0.0,5.0,5,7.0,1.009570616102047,9.044559549404737E-4,-1.1865608689161865E-4,5.3831974042184
200_defocus.txt,16,0.0,5.0,5,7.0,1.0140097380684214,9.192939952226912E-4,-1.2724844414022546E-4,5.894213566060
220_defocus.txt,16,0.0,5.0,5,7.0,1.0183863578669856,0.0012321396340212057,-1.6119759803198826E-4,6.75351663875
```

111_-1F.TXT	1 KB	テキスト文書	2010/12/09 15:08
200_-1F.TXT	1 KB	テキスト文書	2010/12/09 15:10
220_-1F.TXT	1 KB	テキスト文書	2010/12/09 15:11
AI-defocus.txt	1 KB	テキスト文書	2010/12/09 15:14

複数の多項式近似曲線が登録された。