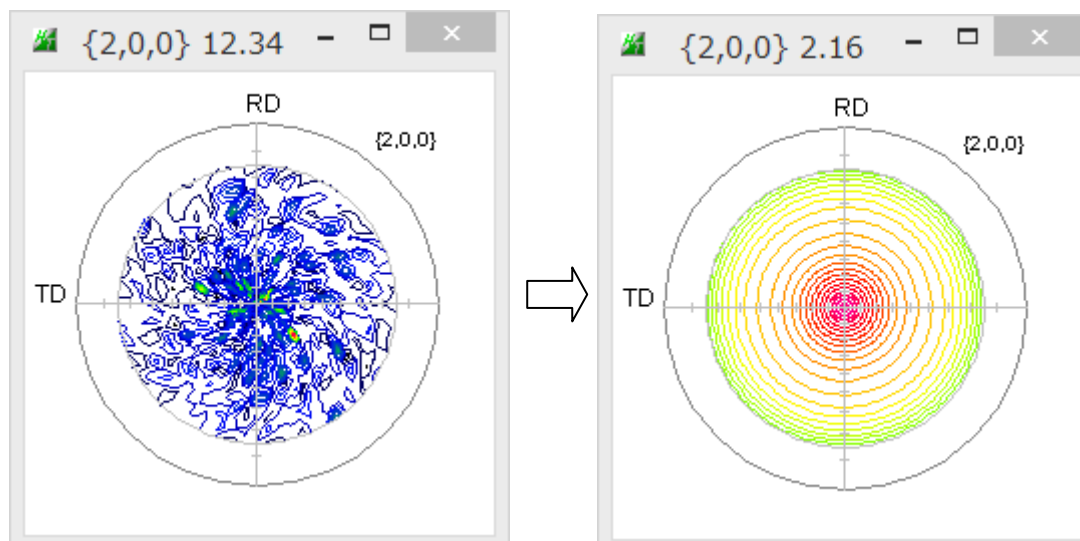


defocusプロファイルを計算で求めるTenckhoffの計算式

TenckhoffCalcプログラム

Version 1.13M

Version1.12以降、Schulzの反射法以外のdefocus曲線修正に対応しています。



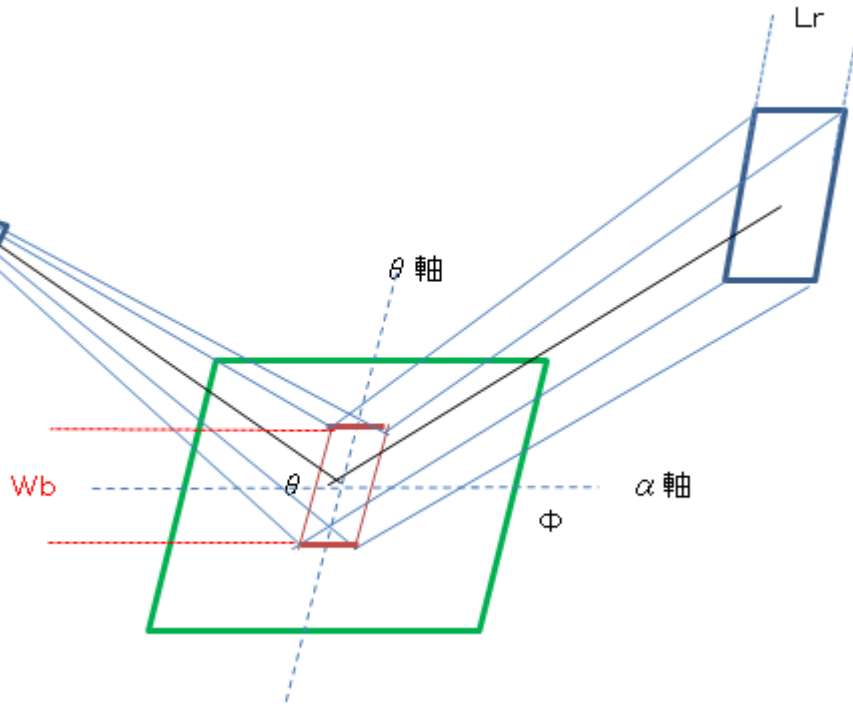
2019年11月25日



HelperTex Office

概要

TenckhoffはSchulz反射光学系のdefocusプロファイルが計算で求められるとし以下の計算式を文献にまとめている。2θ角度、受光スリット、X線の照射高さで決まるとされている。



$$\frac{I_A(\Phi, \theta, W_B, L_R)}{I_A(\Phi=0, \theta, W_B, L_R)} = 1 - \frac{2}{(2\pi)^{1/2}} \int_{-\infty}^{-L_R/P(W_B \tan \Phi \sin 2\theta / \sin \theta)} \exp(-y^2/2) dy.$$

Defocusing for the Schulz Technique of Determining Preferred Orientation*

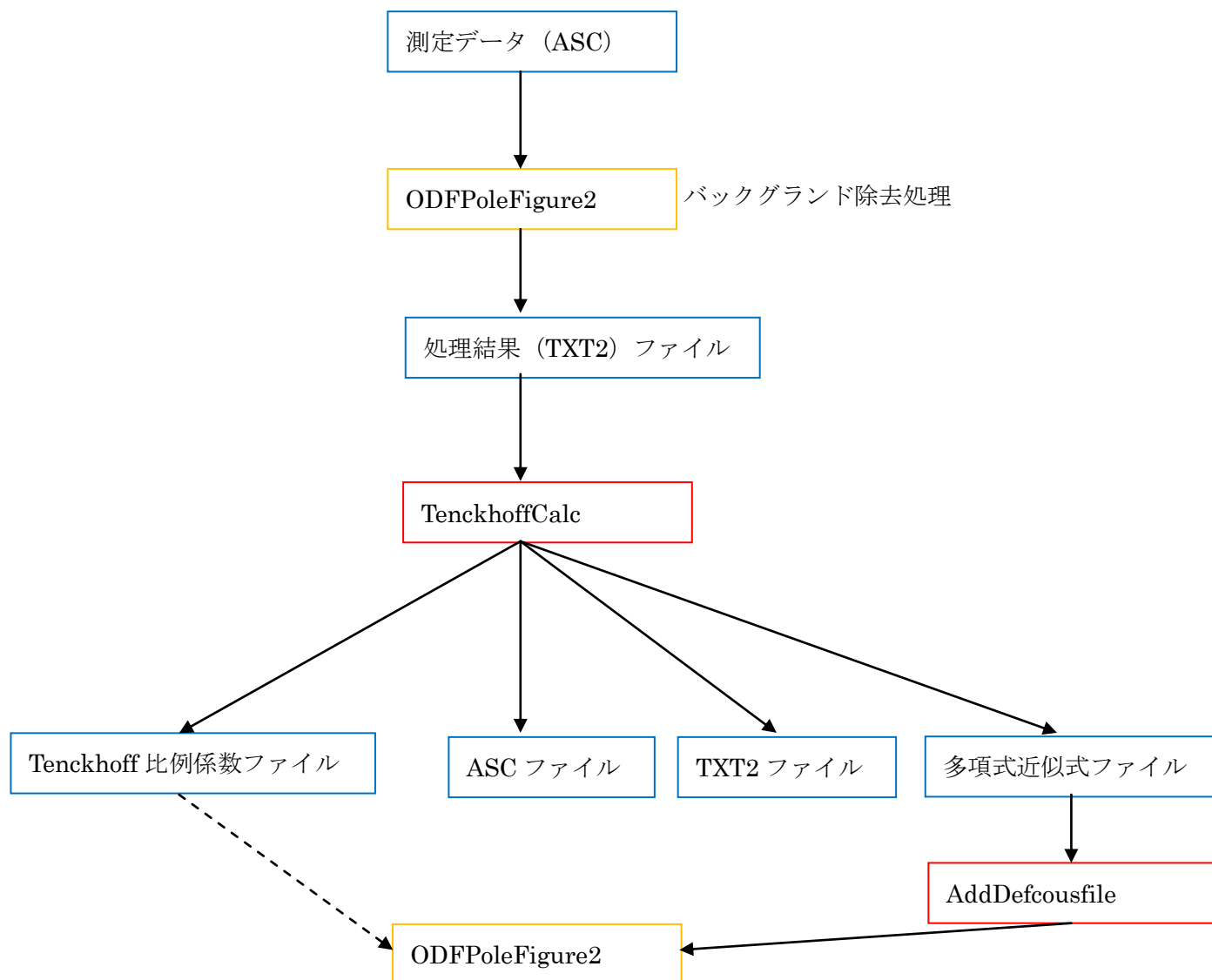
E. TENCKHOFF

Oak Ridge National Laboratory, Oak Ridge, Tennessee 37830

(Received 16 January 1970; in final form 3 April 1970)

上記Wbが測定2θの依存がなければ、比例定数Pは一定であるとしている。しかし、Schulzスリットが常に試料から等距離であれば成り立つのかもしれないが実際に測定計算してみると、比例定数が測定2θと相関があることが分かる。本ソフトウェアでは測定したrandom試料極点図から比例定数を求め、2θの相関をTABLE化する事を目的としている。しかしながら、受光スリットが狭すぎると、理論計算値は極点図の中心側で大きく外れる。

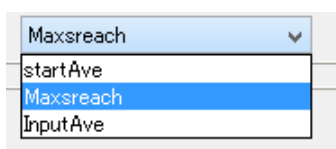
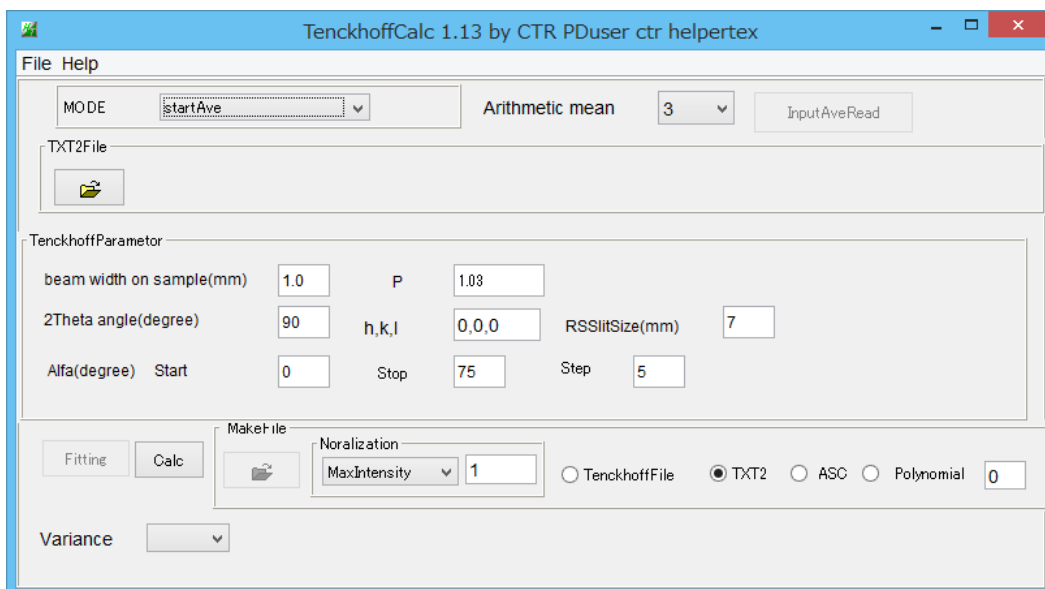
プログラム間のデータの流れ



Tenckhoff 比例係数ファイル群や多項式ファイル群は ODFPoleFigure2 の defocus 補正ファイルとして使います。

応用として、random 試料、測定光学系の良否評価としても使用できます

プログラムの使い方

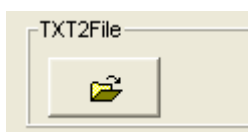


MODEは、startAVE, Maxsreach,InputAve があり、defocus 曲線の規格化の値を決める。

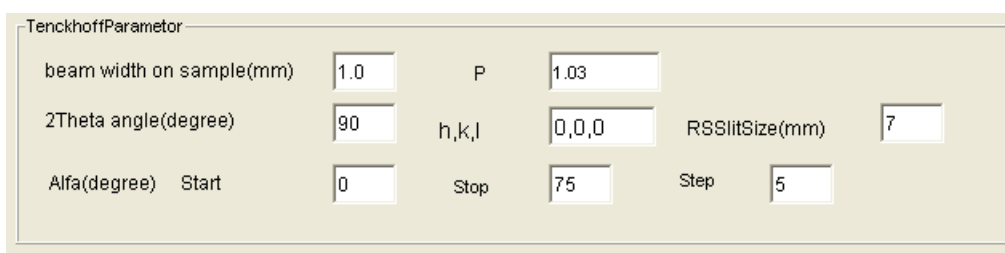
startAve では極点図の中心付近の平均値を規格値とする。

Maxsreach では最大値を規格値とする。

InputAve は入力データを編集し、多項式に近似する



random試料の極点図を測定し、ODFPoleFigure2 ソフトウェアでバックグラウンド除去処理を行った TXT2 データ指定。



Tenckhoffのプロファイルパラメータ



CalcはTenckhoffのプロファイルパラメータから defocus 曲線を計算

FittingはTXT2 データから比例係数を算出する。

算出の際、beamwidth、2Thetaangle、RSSlitSize は手入力してください。

MakeFile で各種ファイルが作成される。

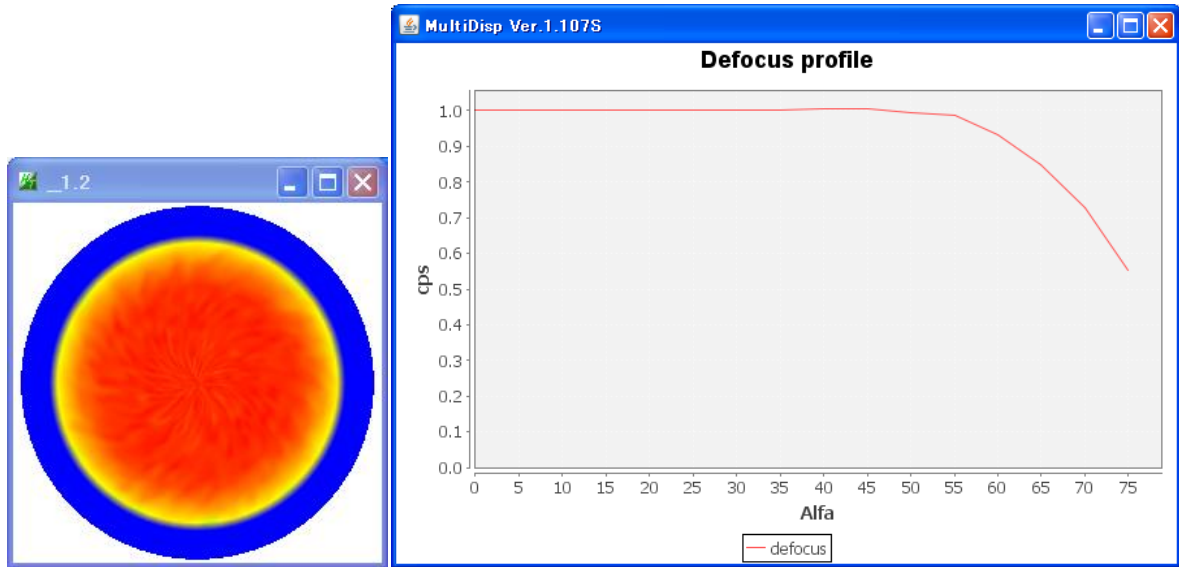
Normalization:通常(MaxIntensity1.0)、

Normalize では規格化強度が表示され、作成されるデータは規格化強度が指定された値になります。

TXT2File
 C:\CTR\DATA\AI-powder-random\111-random_S_chB0S_2.TXT
 Max: 1.2 Norm: 1.0

ファイル指定で極点図と α プロファイルが表示され

ファイル名から指数、 α の start, stop, step が表示される。



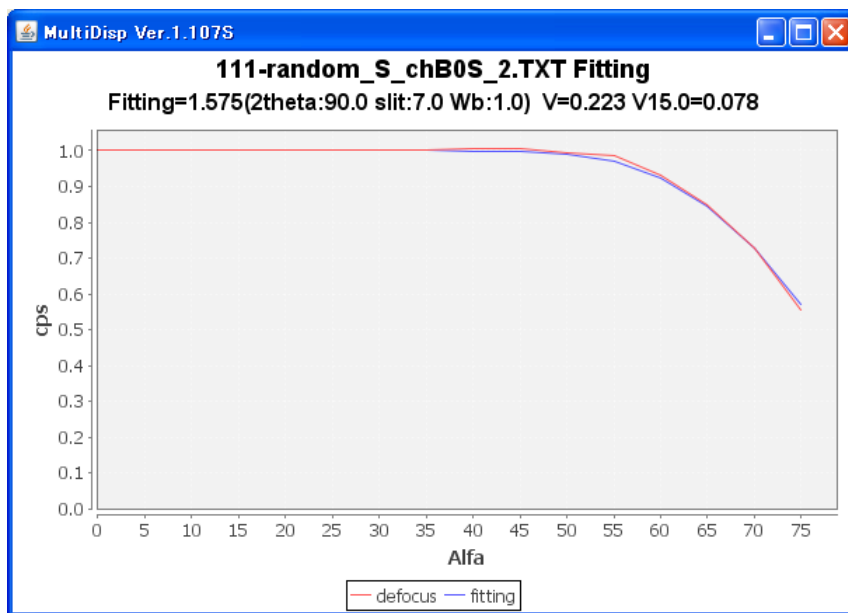
TenckhoffParameter

beam width on sample(mm)	<input type="text" value="1.0"/>	P	<input type="text" value="1.03"/>		
2Theta angle(degree)	<input type="text" value="90"/>	h,k,l	<input type="text" value="1,1,1"/>	RSSlitSize(mm)	<input type="text" value="7"/>
Alfa(degree) Start	<input type="text" value="0.0"/>	Stop	<input type="text" value="75.0"/>	Step	<input type="text" value="5.0"/>

2 Theta 角度とスリットの幅を変更する。

Fitting

で、パラメータから比例係数を計算し、defocus 曲線を描画

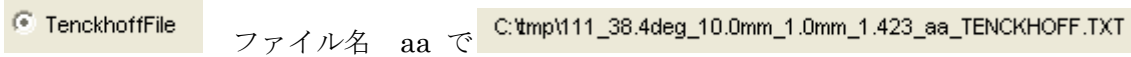


V:全データの分散、V Sはスタート α 角度 (或いは指定 α 角度) の分散

ファイル作成



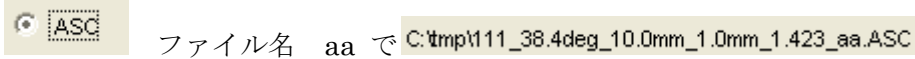
calc後、ファイル名を決めてファイル作成する。



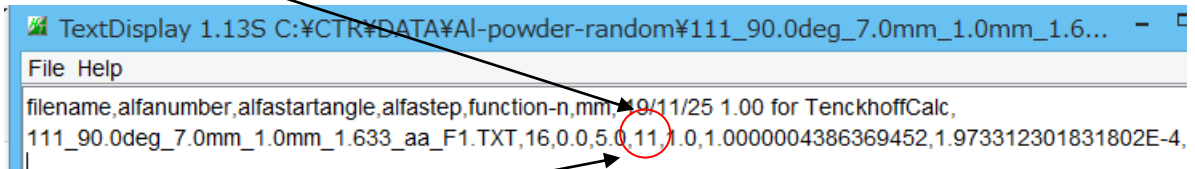
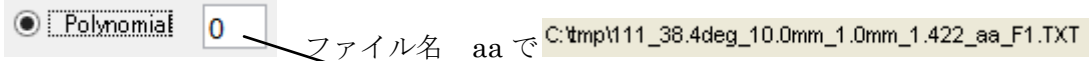
File	Help		
WP	2Theta	Slit	P
1.0	38.4	10.0	1.422



File	Help		
15.0	0.0	0.656719042467425	
15.0	5.0	0.656719042467425	
15.0	10.0	0.656719042467425	

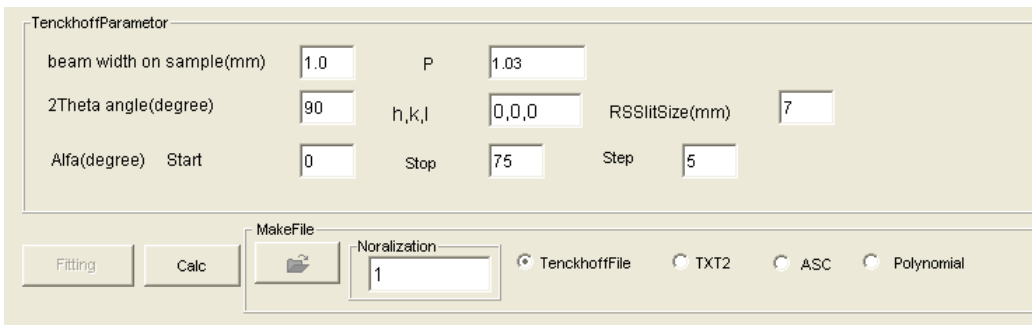


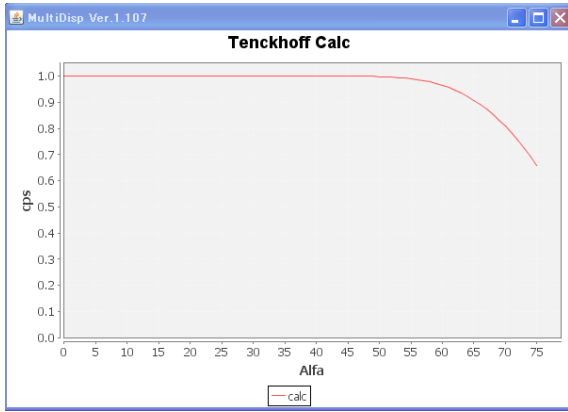
```
*FULL_SCALE          = 1000
*PF_ANGLE = 15.0
*PF_BANGLE = 0.0
*INDEX      = 1,1,1
*COUNT    = 73
0.656719042467425
```



自動決定

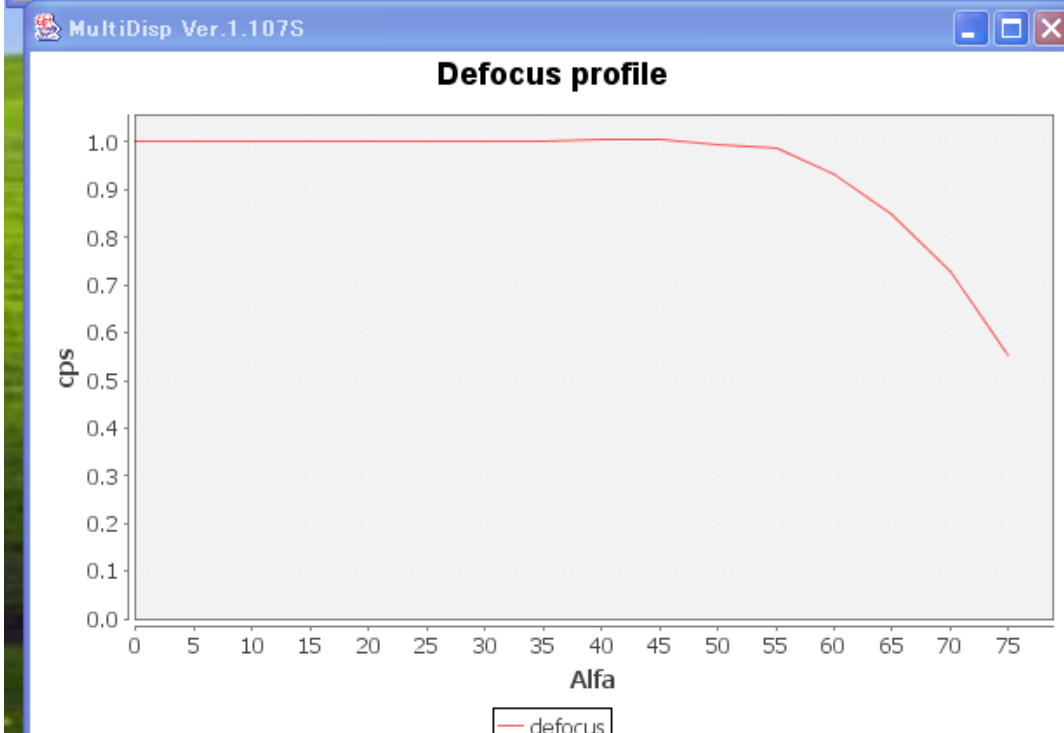
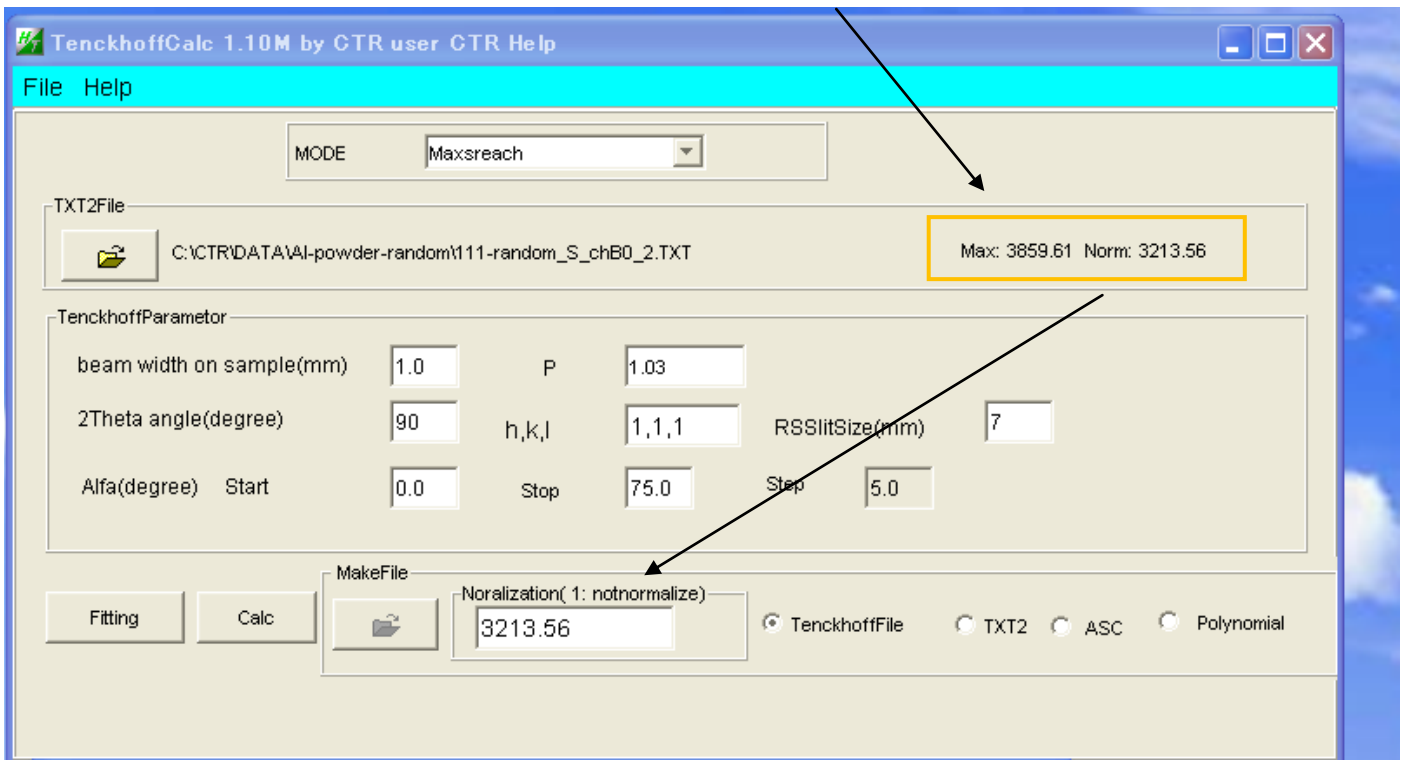
Calc はパラメータが分かっている場合、defocus 曲線を作成





random資料を変更し、規格化値を合わせる

最大値と規格化値を表示

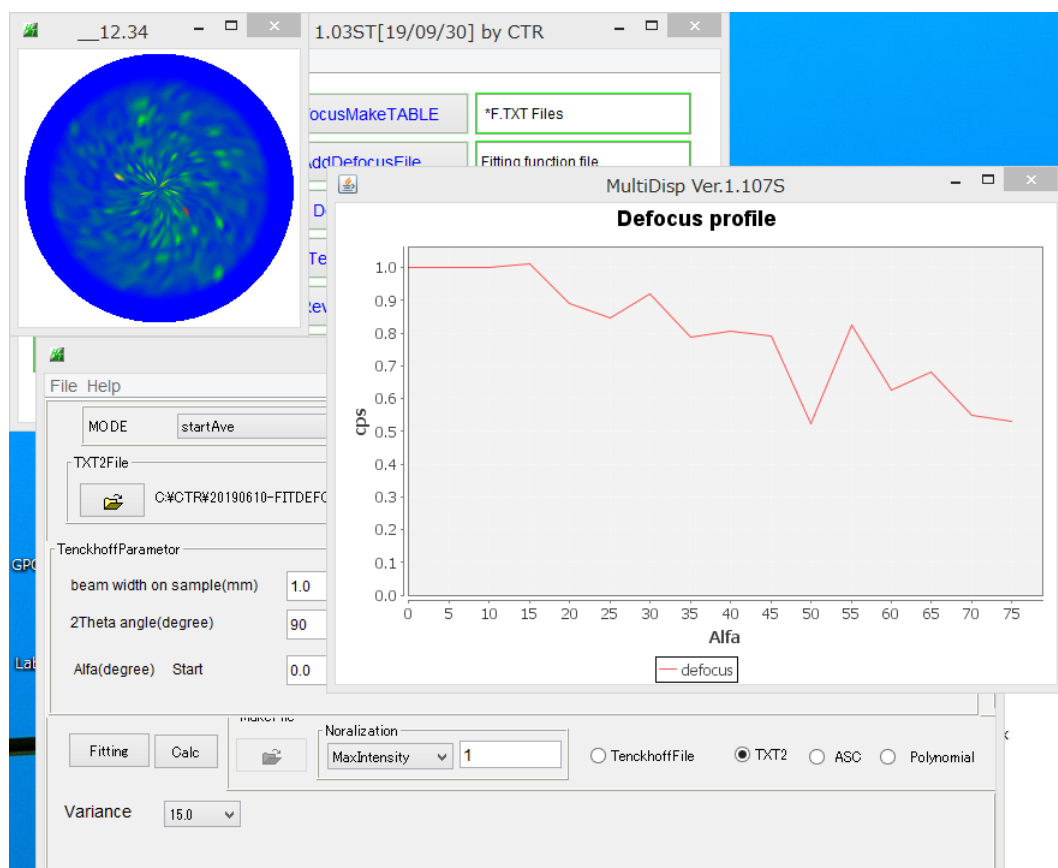


ファイルを指定するとNormalize値には規格化値が表示されます。グラフは最大値が1として表示されています。

MaxIntensityでNormalize値を1にすると最大強度が1に近い値
Normalizeでは、指定された値が**Normalize**値の極点図が作成される。

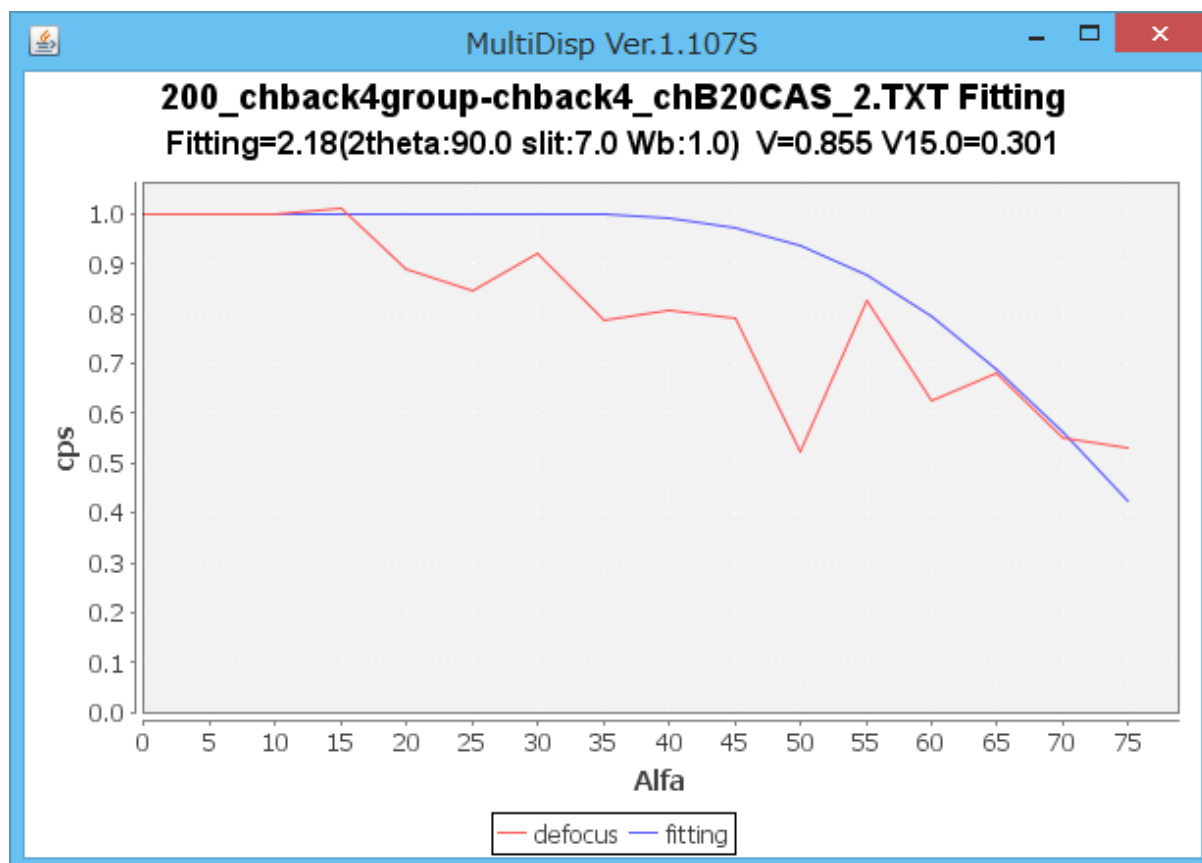
S c h u l z の反射法以外の場合

例えば、受光側の平行性が高い場合や r a n d o m 試料の粒径が大きい場合



粒径が荒く、d e f o c u s 曲線が凸凹している。

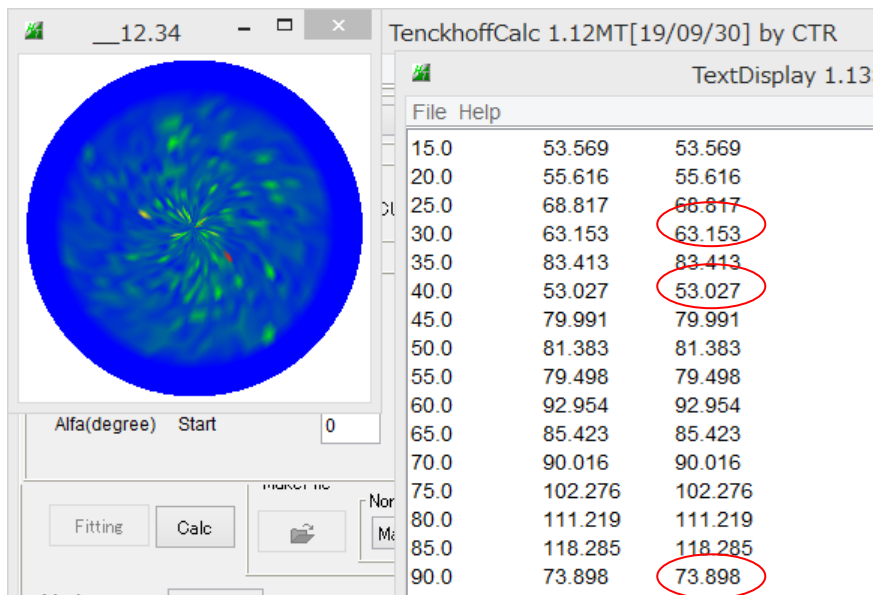
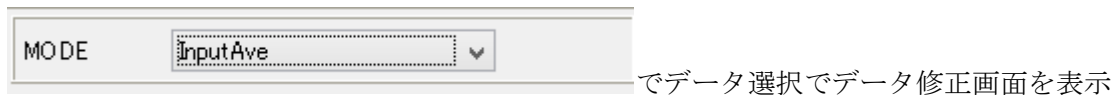
通常の T e n c k h o f f n i f i t t i n g すると



上手く F i t t i n g 出来ません。

d e f o c u s データの修正と多項式近似が適当と考えられます。

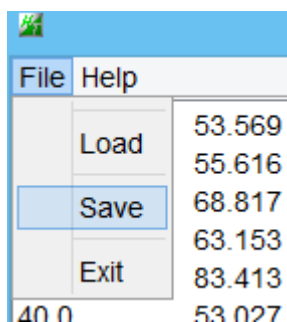
defocusデータの修正と多項式近似の採用 (ModeをInputAveを選択)



凸凹を修正

15.0	53.569	53.569	15.0	53.569	53.569
20.0	55.616	55.616	20.0	55.616	55.616
25.0	68.817	68.817	25.0	68.817	68.817
30.0	63.153	63.153	30.0	63.153	75
35.0	83.413	83.413	35.0	83.413	83.413
40.0	53.027	53.027	40.0	53.027	80
45.0	79.991	79.991	45.0	79.991	79.991
50.0	81.383	81.383	50.0	81.383	81.383
55.0	79.498	79.498	55.0	79.498	79.498
60.0	92.954	92.954	60.0	92.954	92.954
65.0	85.423	85.423	65.0	85.423	85.423
70.0	90.016	90.016	70.0	90.016	90.016
75.0	102.276	102.276	75.0	102.276	102.276
80.0	111.219	111.219	80.0	111.219	111.219
85.0	118.285	118.285	85.0	118.285	118.285
90.0	73.898	73.898	90.0	73.898	120

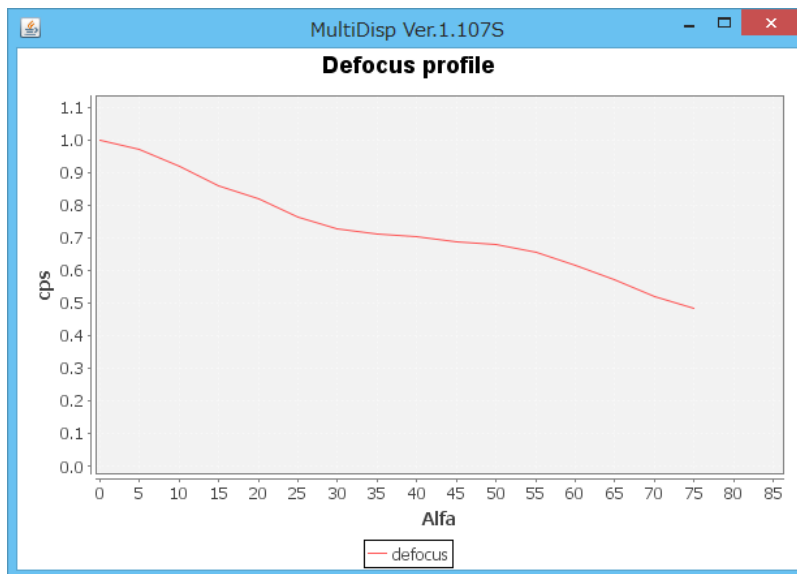
修正後、同一ファイル名に上書き



保存後、移動平均点数を指定し、読み込む

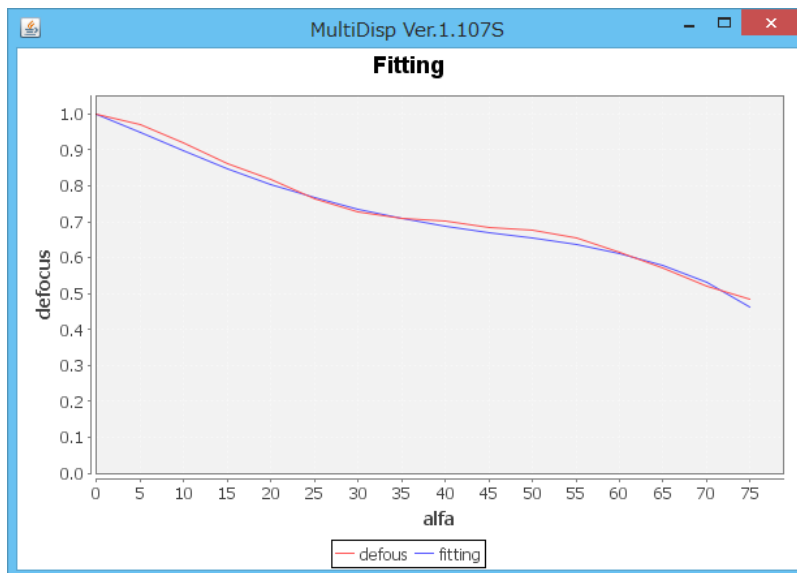


読み込まれた修正後の defocus 曲線



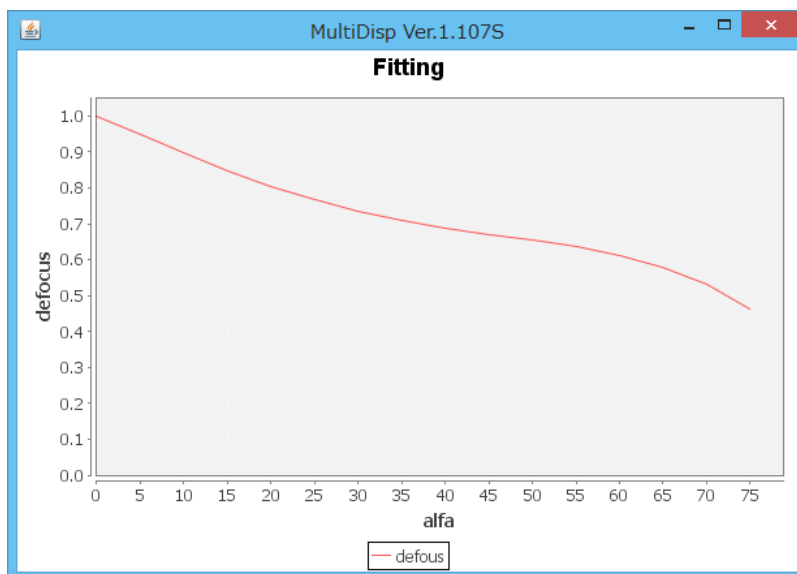
Fitting

で多項式に Fitting



Calc

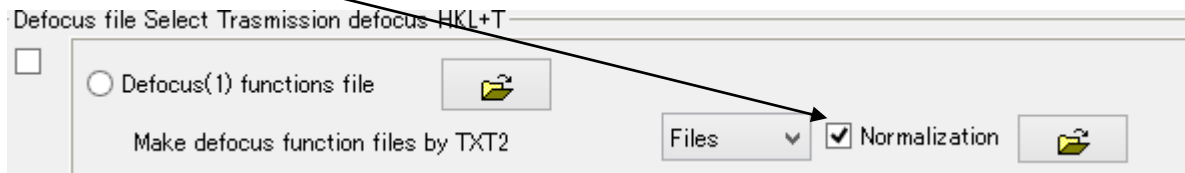
で Fitting 曲線を固定



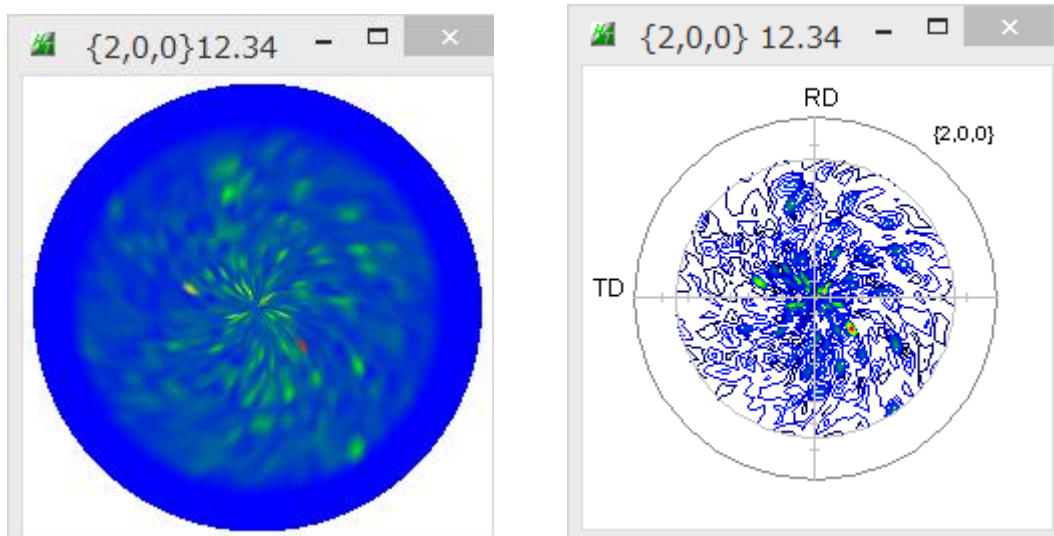
固定された曲線のファイル化



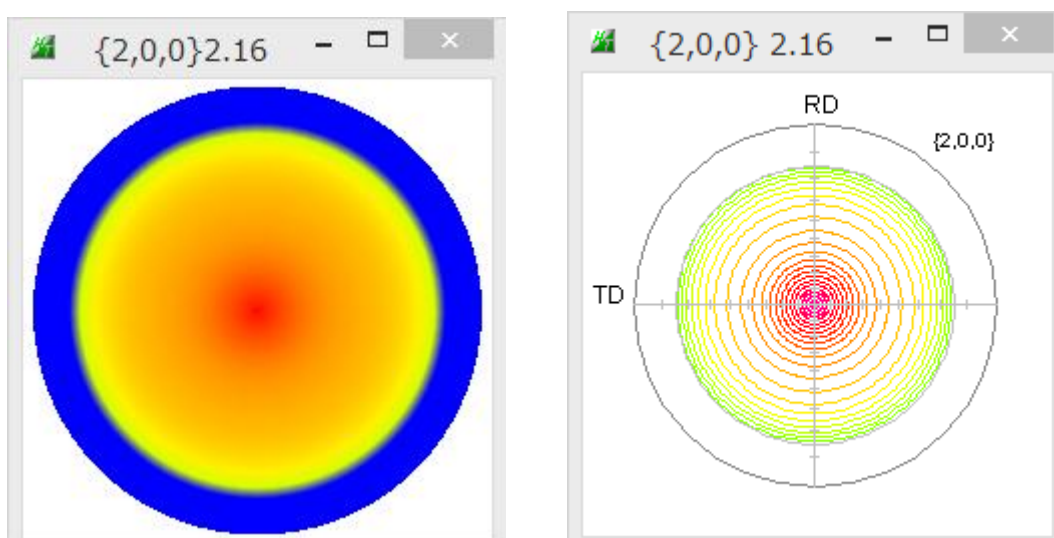
ODFPoleFigure2 で defocus ファイルとして登録するのであれば、TXT2 を選択しファイル作成登録時、Normalization を行う。



修正前データ



修正後 GPPoleDisplay で表示



最大密度の違いは、修正前は粒径が粗いデータのため