

対称反射プロファイルから ND 方向の逆極点表示に関して

2020年09月20日

HelperTex Office

概要

ODF解析結果の逆極点ではあらゆる方向の解析が行われているので等高線描画が行えるが、対称反射プロファイルから解析される逆極点では、解析線が確認出来る面の法線方向のみでF eでは1 2方向しか得られない。

プロファイルから計算する逆極点では、積分強度とピーク強度の手法があるが、積分強度ではピーク全体を評価しているが、ピーク強度では広がり表現出来ていない。

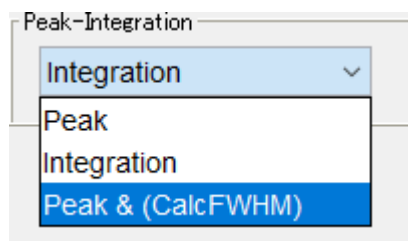
今回、ピーク強度の場合、ピークの広がりを計算し、逆極点図の広がりとして表現を行ってみました。

ピーク強度逆極点の場合、 $FWHM = \text{積分強度} / \text{ピーク強度} * 2 / 3$ とし、G a u s s関数で広げています

対応ソフトウェア

InverseAllソフトウェア (Ver1.16)

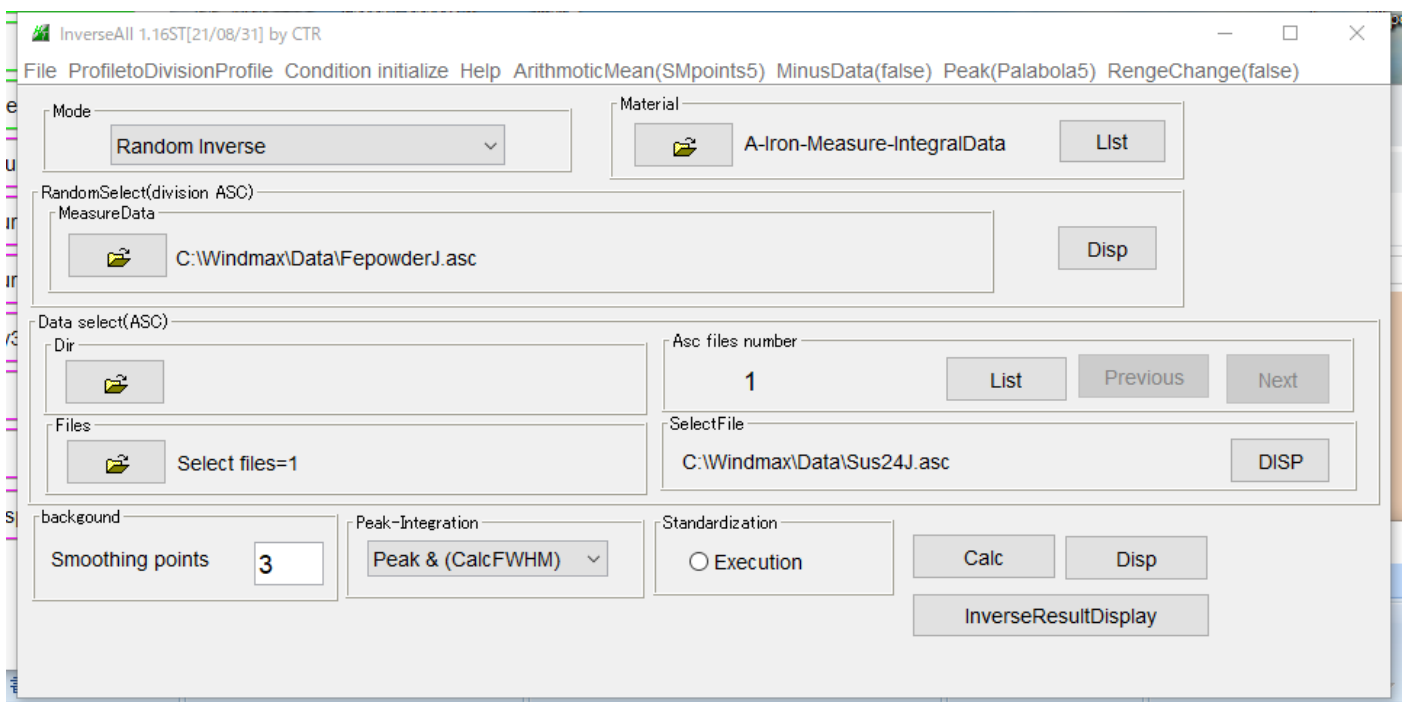
解析手法にP e a k & F W H Mを追加



ピーク強度計算時、入力ファイルホルダにF W H M. T X Tを作成

InverseDisplayソフトウェア (Ver1.16)

F W H M. T X Tファイルが作成されていれば、逆極点の広がり (= 1 0 d e g) に計算F W H Mを利用する。

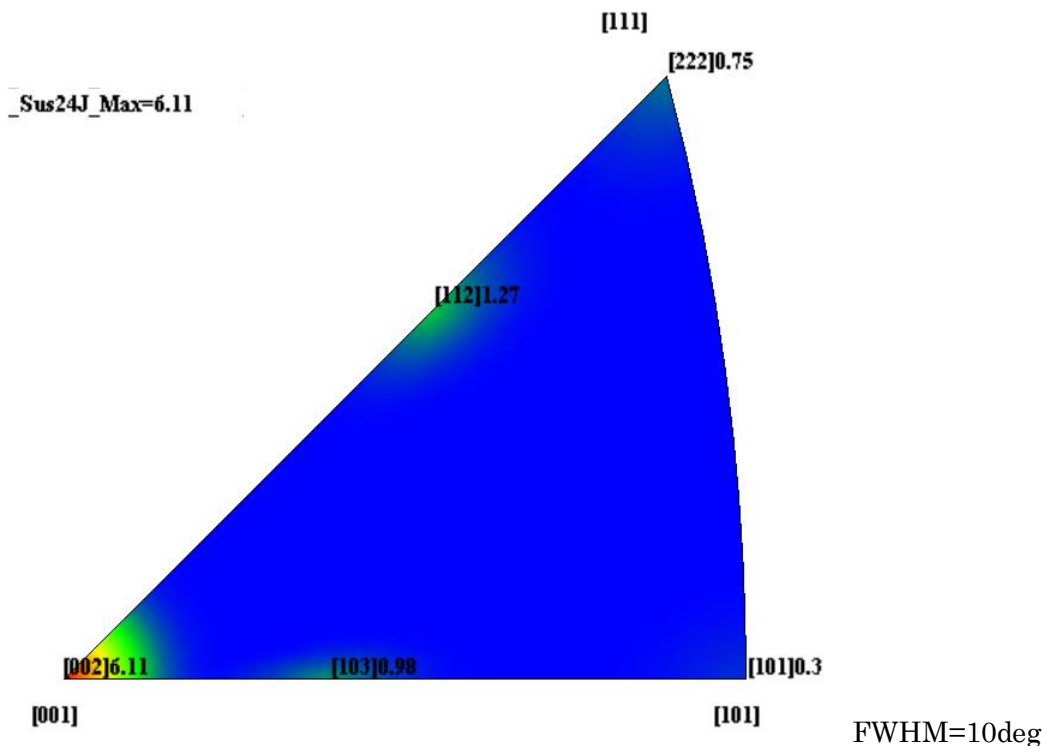


テストデータ比較

Peak-Integration

Randommode ArithmeticMean(SMpoints5) BGsmptpoints=3 PEAK peakPalabola5 Minusdata-OFF

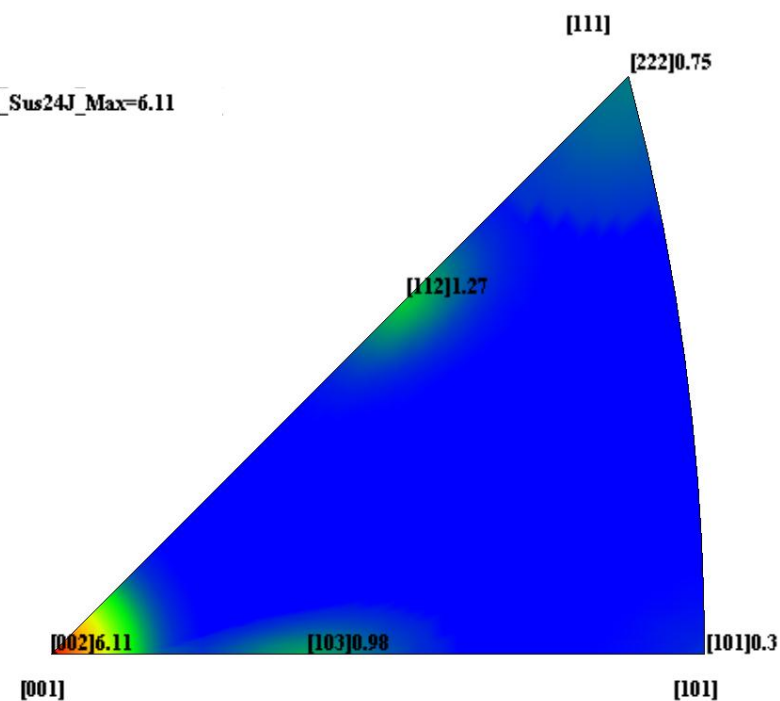
	[110]	[200]	[211]	[220]	[310]	[222]
Sus24J	0.374	6.107	1.27	0.23	0.984	0.751



Peak-Integration

FWHM.TXT データ

Sus24J	8.49	11.159	11.984	16.029	21.544	20.287
--------	------	--------	--------	--------	--------	--------

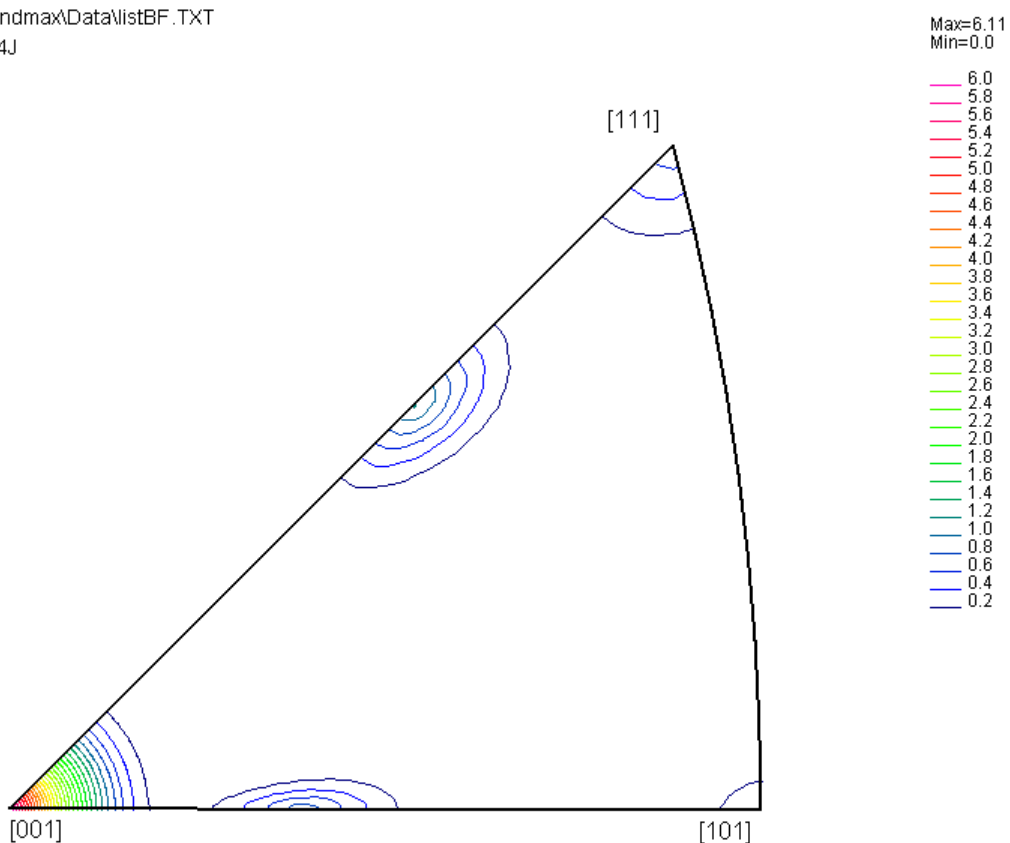


Peak 等高線

Randommode ArithmeticMean(SMpoints5) BGsmoints=3 PEAK peakPalabola5 Minusdata-OFF

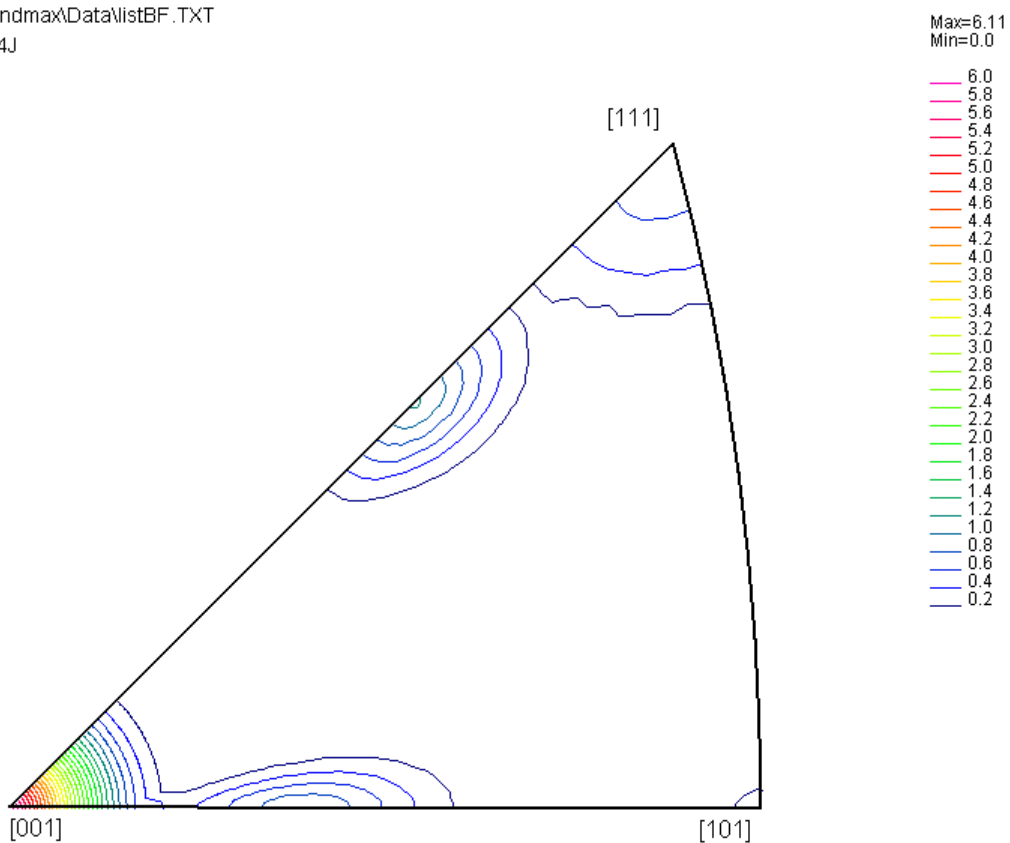
	[110]	[200]	[211]	[220]	[310]	[222]
Sus24J	0.374	6.107	1.27	0.23	0.984	0.751

C:\Windmax\Data\listBF.TXT
Sus24J

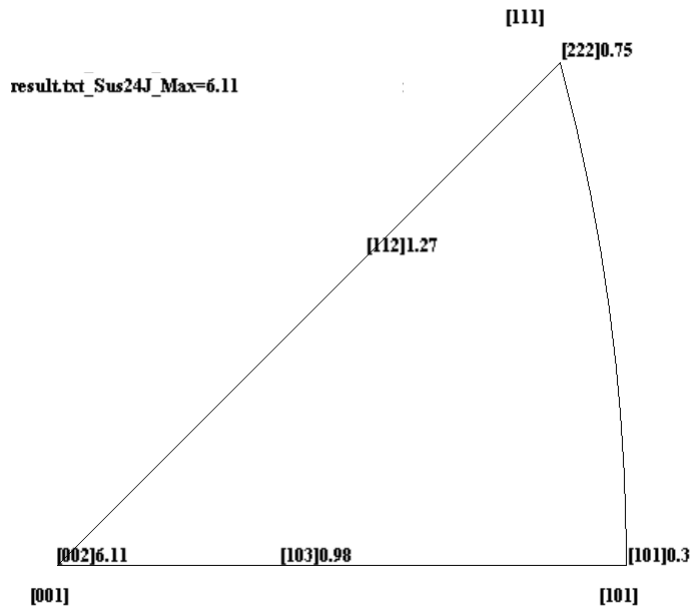


Peak & FWHM 等高線

C:\Windmax\Data\listBF.TXT
Sus24J

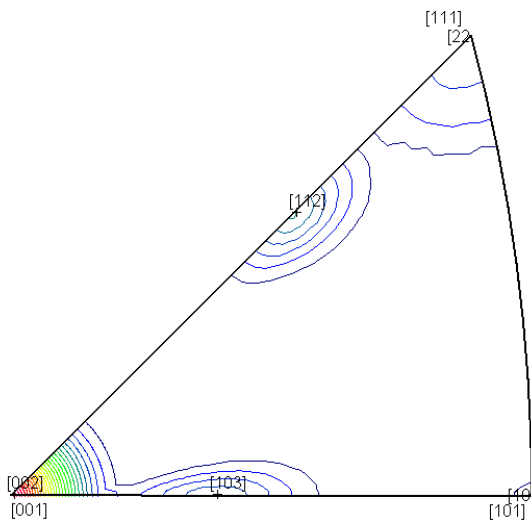


従来の表現も利用出来ます。



指数表示

C:\Windmax\Data\listBF.TXT
C:\Windmax\Data\AngleData-hkl.TXT

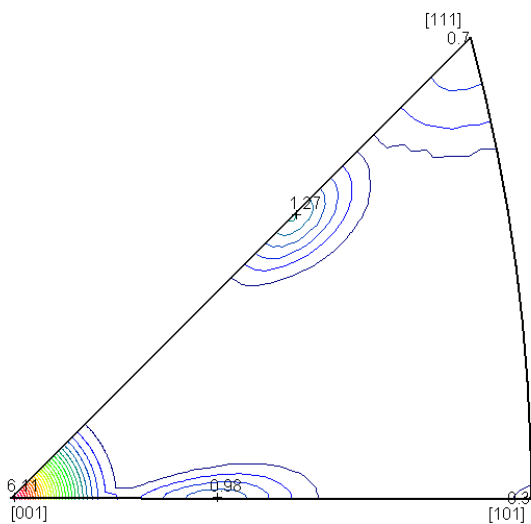


Max=6.11
Min=0.0



Value表示

C:\Windmax\Data\listBF.TXT
C:\Windmax\Data\AngleData-value.TXT



Max=6.11
Min=0.0

