## 高分子、薄膜材料の吸収、defocus補正

高分子材料や薄膜材料を2次元ディテクタを用いて極点測定を行った場合、

d e f o c u s (吸収を含む)が必要になります。

通常の正極点処理にはこの補正はサポートされていません。

このような場合、被検試料と同じ厚さの無配向試料があれば、通常の正極点処理で補正が可能です。

無配向試料を被検試料と同じ測定条件で測定し、defcous曲線を求めれば 補正が可能になります。

このd e f o c u s 曲線には、光学系の補正と試料の吸収補正が含まれていて 極点処理のd e f o c u s 補正で全て処理出来ます。

今回、2次元ディテクタを用いて解説しているが、シンチレーションカウンタを用いた場合や Inplane光学系でも同じ考えで、補正が可能になります。

012年07月20日

2次元ディテクタを用いた極点測定では、試料を 360 度回転した Image データが必要になります。 面内回転を5度間隔で測定すれば73 Imageデータになります。 今回は、1 Imageデータからdefocus曲線を求める方法で説明します。

測定データ
-------



1 I m a g e データを73 I m a g e データに拡張

ODFPOleFigure2 ソフトウエアの ImageTools から ImageRotation 選択

🛃 ImageTools 1.03X by CTR user HelperTex CTR	
File Help	
Image file expend for Defocus Image Format Data	Image Format Datas(N)
Change Oscillation Angle position Image Format datas(N) ImageFileChanger	Image Format Datas(N)

🍰 In	nage Rot	tation 1.11X by	y CTR user HelperTex CTR	
File	Option	Help		
	-mode Expar	nd		
			72 💌	
		Execution	Stop	

File から測定データを選択

📓 ImageRotation 1.11X by CTR user HelperTex CTR
File Option Help
Expand
FIDE I¥村料-PP¥PP¥random-work Random001.img
72 💌
Execution Stop



🚞 I¥材料-PP¥PP¥random-wo	ork		
レンフォルダのタスク ※	Random001.img イメージファイル 14,613 KB	work	_
Work ディレクトリ以下 Cm I¥材料-PP¥PP¥	に irandom-work¥work		
	名前 ▲	サイズ 種類	更新日時
、とフォルダのタスク	Random0011001.img	14,613 KB イメージファイル	2012/07/20 10:43
	Random0011002.img	14,613 KB イメージファイル	2012/07/20 10:43
	RandomUU11003.img	14,613 KB イメージファイル	2012/07/20 10:43
から			
	👩 Random0011070.img	14,613 KB イメージファイル	2012/07/20 10:44
	👩 Random0011071.img	14,613 KB イメージファイル	2012/07/20 10:44
	🙍 Random0011072.img	14,613 KB イメージファイル	2012/07/20 10:44
	📄 Random0011073.img	14,613 KB イメージファイル	2012/07/20 10:44
データが拡張され	る。		

実際に73Imageデータを測定した場合でも以下の操作は同じ

2DP ソフトウエアでデータの切り出し



**Defocus** 曲線の場合、 $\alpha$ 、 $\beta$ 間隔は 1deg が適当、 配向のある被検材料の場合、 $\alpha$ 、 $\beta$ は 5deg が適当



名前を付けて保存								? 🗙
保存する場所型:	🚞 pole			-	-	* 🖻		
した。 最近使ったファイル								
デスクトップ								
21 F=1X21								
マイ ネットワーク	ファイル名( <u>N</u> ):	110-rando	m			•	•	保存( <u>S</u> )
	ファイルの種類(工):	Rint ASC	I (*.asc)			•	•	キャンセル
	Range of Alpha :	C All	Auto					
	Range of Beta :	C All	Auto					

正極点図で表示すると



 $\{1 \ 3 \ 0\}$ 



d e f o c u s - TABLEの作り方

ODFPoleFigure2ソフトウエアでASCファイルをTXT2に変換 必要なら若干のスムージングを行う。

ODFPoleFigure2 2.15Y by CTR
ile Linear ToolKit Help InitSet BGMode Measure Condition Free OverlapRevision
Files select ASC(RINT-PC) 🛛 D40-random.asc 130-random.asc 110-random.asc
Calcration Condition Previous Next I¥村村 - PP¥PP¥random-work¥work¥pole¥040-random.asc D,4,0 Change
Backgroud delete mode
Peak slit 10.0 mm BG Slit 10.0 mm V Background level revision( BGlevel=BGlevel * PeakSlit / BGSlit) Set Disp
AbsCalc           Schulz reflection method         Y         Absorption coefficien         13.9         1/cm         Penetration depth         0.1         cm         2Theta         0.0         deg.         01/Kt         Profile
Defocus file Select
Defocus functions file
O Defocus function files dir(Calc unbackdefocus) BB285-Slit-8mm-14mm
O Defocus function files dir(Calc backdefocus)
Standardize OutFiles Cycle 2 Points 4 Disp V OutFiles Cancel Calc ODF File

補正曲線がゴツゴツしている場合、ADC 用平滑化を行う。

## 上段 入力データ 下段 スムージング処理後



🗀 I¥材料-PP¥PP¥random-w	■ I¥材料 - PP¥PP¥random-work¥work¥pole						
	名前 🔺	サイズ 種類	更新日時				
とフォルダのタスク 📀	🔍 040-random.asc	218 KB RINT2000アスキー	2012/07/20 11:17				
	🕄 110-random.asc	209 KB RINT2000アスキー	2012/07/20 11:03				
*	🕄 130-random.asc	184 KB RINT2000アスキー	2012/07/20 11:08				
	🗿 040-random_ch A24S_2.TXT	479 KB テキスト文書	2012/07/20 11:20				
۲	📳 110-random_ch A24S_2.TXT	458 KB テキスト文書	2012/07/20 11:20				
	📳 130-random_chA24S_2.TXT	440 KB テキスト文書	2012/07/20 11:20				

測定範囲の確認

<sub>E</sub> PF Data-					
	SelectFile(TXT(b,intens),TXT2(a,b,intens.))	h,k,l	2Theta	Alfa Area	AlfaS AlfaE Select
	040-random_chA24S_2.TXT	0,4,0	0.0	2.0->74.0	2.0 74.0 🔽
<b>2</b>	130-random_chA24S_2.TXT	1,3,0	0.0	3.0->69.0	3.0 69.0 🗸
	110-random_chA24S_2.TXT	1,1,0	0.0	0.0->69.0	0.0 69.0 🔽

極点図のα範囲が異なる

DefocusMakeTABLEソフトウエアで多項式近似化



{040}, {110}, {130}を個々に変換(極点図のα範囲が異なる場合、一括処理できない)

File Help S	sM-Mode	
Ppath	I¥材求习-PP¥PP¥random-work¥work¥pole	
Filename	040-random_chA24S_2.TXT	
Alfa Numb	73 File number 1	
Object Alfa	StartAlfa(Center: 0.0) 2.0 StepAlfa 1.0 Alfastart 2.0 Endalfa 74.0	
Fitting Fu	5 Max Limit	
Y-position	s(,) 1.0,2.0,3.0,4.0,5.0,6.0,7.0	
🚅 Dir	I¥材料 - PP¥PP¥random-work¥work¥pole	
Target Filena	ame 040	
Normlize	Auto(RINT) Collect defocus files.	
	Calc	
& Defecus	=skaTADLE 2.21V bu CTD user HelperTay CTD	
File Help S	Makerhold 3.21X by OTK user helpertex OTK SM-Mode	
Ppath	I¥材料 - PP¥PP¥random-work¥work¥pole	
Filename	110-random_chA24S_2.TXT	
Alfa Numb	70 File number 1	
Object Alfa	StartAlfa(Center: 0.0) 0.0 StepAlfa 1.0 Alfastart 0.0 Endalfa 69.0	
Fitting Fu	5 V Max Limit	
Y-position	s(,) 1.0,2.0,3.0,4.0,5.0,6.0,7.0	
🚅 Dir	I¥林村斗一 PP¥PP¥random-work¥work¥pole	
Target Filena	ame 110	
Normlize	Auto(RINT) Collect defocus files.	
le focus File Help S	makeTABLE 3.21X by CTR user HelperTex CTR SM-Mode	
Ppath	I¥材料)- PP¥PP¥random-work¥work¥pole	
Filename	130-random_chA24S_2.TXT	
Alfa Numb	67 File number 1	
Object Alfa	StartAlfa(Center: 0.0) 3.0 StepAlfa 1.0 Alfastart 3.0 Endalfa 69.0	
Fitting Fu	5 Max Limit	
Y-position	s(,) 1.0,2.0,3.0,4.0,5.0,6.0,7.0	
🚅 Dir	I¥村邦斗 ー PP¥PP¥random-work¥work¥pole	
	ame 130	
Target Files		
Target Filena Normlize	Auto(RINT)	
Target Filena Normlize	Auto(RINT) Collect defocus files.	

┛ で多項式近似ファイルを1ファイルに纏める。

🖀 AddDefocusFile 1.11X by CTR user HelperTex CTR
File Help
File select(Select *F.txt not real*F.txt)         Image: Delta of the select s
Append Defcous TABLE           Oreate FileName         PP-defocus           Defocus TABLEmake
Excel Format COR format         Excel format       Start angle00       Stop angle       90.0       Step       5.0       ExcelFile make       step       5.0       FileconditionSize

Append Dercous TABLE				
Create FileName	PP-defocus		DefocusTABLEmake	
		-		7

目 PP-defocus.txt - ワードパッド
ファイル(全) 編集(生) 表示(型) 挿入(型) 書式(型) ヘルプ(出)
filename,alfanumber,alfastartangle,alfastep,function-n.mm, 12/07/20 DefocusmakeTABLE 3.21X by CTR user HelperTex CTR for DefocusCalc,
040-random_ch424S_2.TXT,73,2.0,1.0,5,1.0,0.9696351374167099,0.017660080590937367,-0.0014882829689037986,5.3645111009803054E-5,-9.477382912622411E-7,5.8348515981689055E-5

040-random\_ch424S\_2.TXT,73,2.0,1.0,5,1.0,0.9696351374167093,0.017660080590937867,-0.0014882829689037986,5.3645111009803054E-5,-8.477382912622411E-7,5.8348515981689055E-9, 110-random\_ch424S\_2.TXT,70,0.0,1.0,5,1.0,1.0001320300493648,-0.005276788283958309,8.020538032342027E-4,-3.387165330137022E-5,4.419053223293156E-7,-1.749435495067954E-9, 130-random\_ch424S\_2.TXT,67,3.0,1.0,5,1.0,0.8261428483607611,0.05237619241213239,-0.004136737501330829,1.388216881234692E-4,-2.0525571900815227E-6,1.113666891990855E-8,

ご I ¥材料 - PP ¥ PP ¥ random-work ¥ work ¥ pole						
	名前	サイズ	種類	更新日時 🔺		
,とフォルダのタスク 📀	ः) 110-random.asc	209 KB	RINT2000アスキー	2012/07/20 11:03		
	🕄 130-random.asc	184 KB	RINT2000アスキー	2012/07/20 11:08		
*	🔍 040-random.asc	218 KB	RINT2000アスキー	2012/07/20 11:17		
ス フォルダ 時: 2012年7月20日、11:08	🗿 040-random_chA24S_2.TXT	479 KB	テキスト文書	2012/07/20 11:20		
	🗿 130-random_chA24S_2.TXT	440 KB	テキスト文書	2012/07/20 11:20		
	🕮 110-random_chA24S_2.TXT	458 KB	テキスト文書	2012/07/20 11:20		
	🕮 040-1 F.txt	1 KB	テキスト文書	2012/07/20 11:25		
	🕮 real040-1 F.txt	1 KB	テキスト文書	2012/07/20 11:25		
	🕮 110–1 F.txt	1 KB	テキスト文書	2012/07/20 11:27		
	🕮 real110-1 F.txt	1 KB	テキスト文書	2012/07/20 11:27		
	🕮 130–1 F.txt	1 KB	テキスト文書	2012/07/20 11:29		
	👜 real130-1 F.txt	1 KB	テキスト文書	2012/07/20 11:29		
	PP-defocus.txt	1 KB	テキスト文書	2012/07/20 11:34		
	Excel-PP-defocus.txt	1 KB	テキスト文書	2012/07/20 11:35		



## PPの多項式近似曲線を用いてODFPoleFigure2で確認

ODFPoleFigure2 2.15Y by GTR	
File Linear ToolKit Help InitSet BGMode Measure Condition Free OverlapRevision	
Files select       ASC(RINT-PC)       040-random.asc 110-random.asc	
Calcration Condition Previous Next I¥材料 - PP¥PP¥random-work¥work¥pole¥040-random.asc	hkl 0,4,0 Change
Backgroud delete mode DoubleM. SingleM. LowM. HighM. Nothing Background defocus LINE-BB185mm	Arithmetic mean 💌 Disp
Peak slit 10.0 mm BG Slit 10.0 mm 🕑 Background level revision( BGlevel=BGlevel * PeakSlit / BGSlit) Set Disp	Interporation 💌 Full Disp
AbsCalc-	0.0 deg. <ul> <li>1/Kt</li> <li>Profile</li> </ul>
Perfocus file Select         ✓       ③ Defocus functions file         I¥材採到 – PP¥PP¥random-work¥work¥pole¥PP-defocus.txt	TextDisp
O Defocus function files dir(Calc unbackdefocus) BB285-Slit-8mm-14mm	
O Defocus function files dir(Calc backdefocus)	'alue=0.0) 🔽 💿 1/Ra 🛛 Profile
Smoothing for ADC     Standardize     OutFiles       Cycle     2     Points     4     Disp         Image: Cycle     Cycle     Cycle     Asc(Pole)     TXT2(Pole)         Cance	ODF File

## Defocus用入力データを多項式近似式で補正

