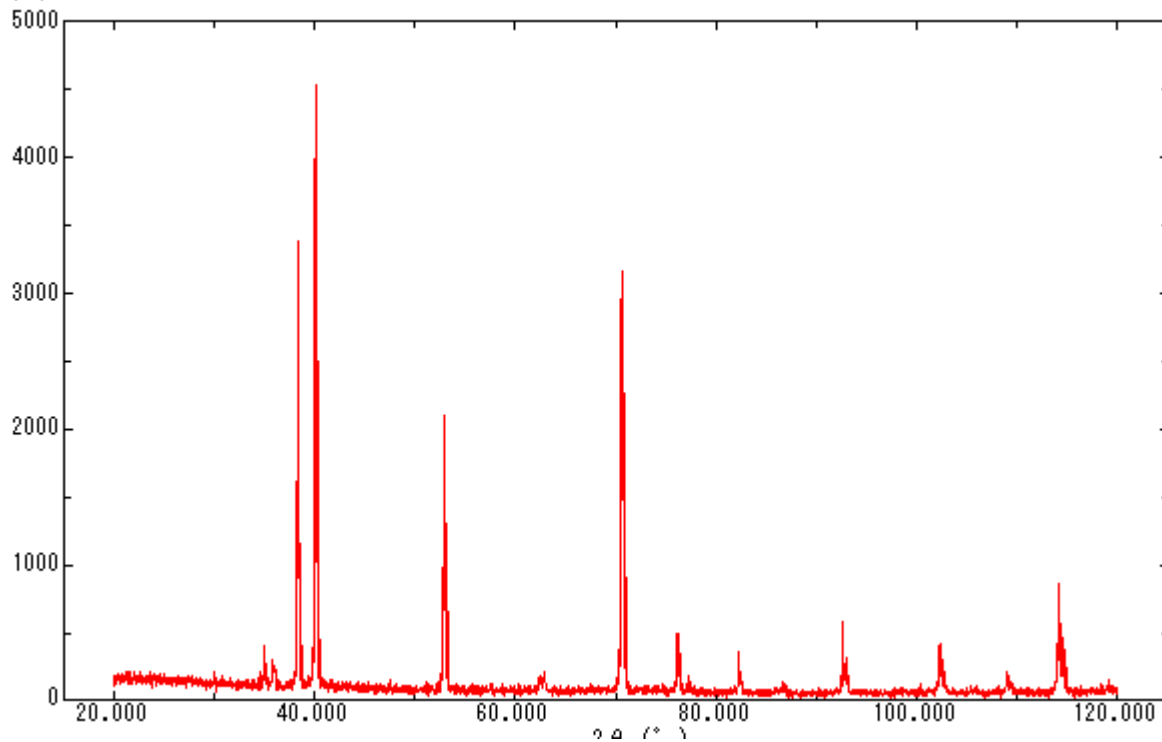


極点測定解析の流れ

極点測定

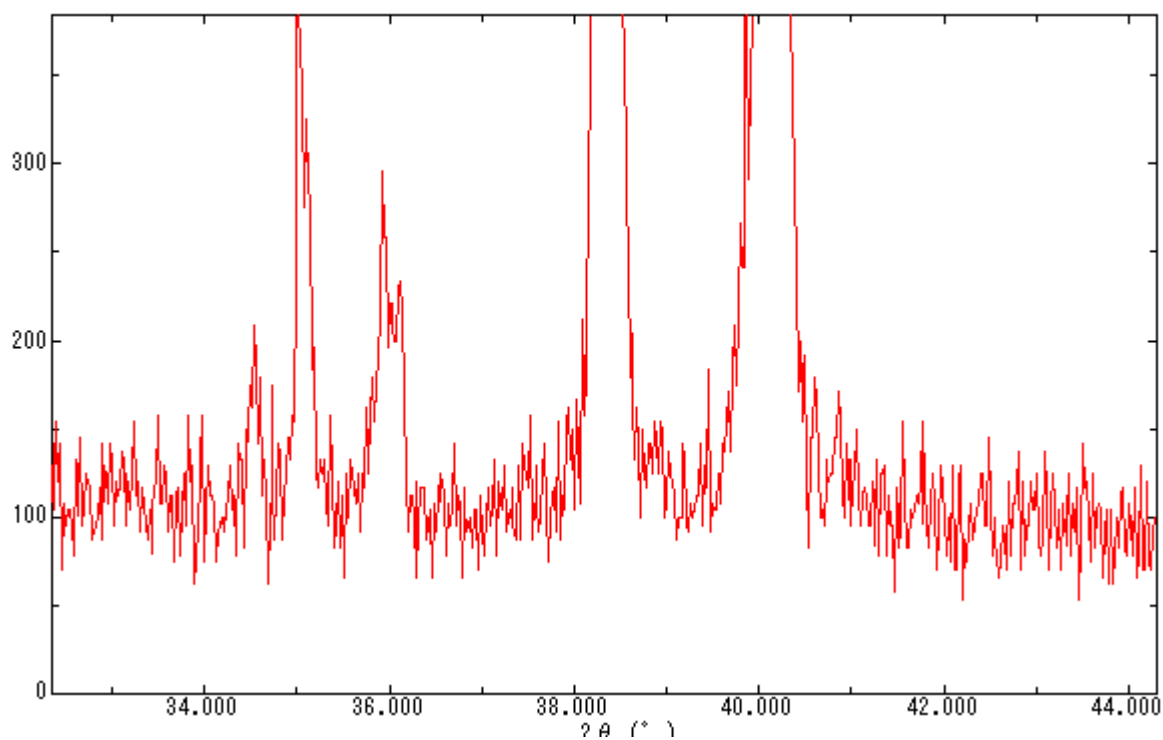
プロファイル測定を行う。

強度 (cps)



拡大してピーク測定とバックグラウンド位置を決める

(cps)



Schulz スリットを取り付けると、極端に強度が落ちる (line 線源のばあい)

通常、測定用スリットは 7 mm か 6 mm が適当

バックグラウンド測定

ピーク角度から±1.0度あるいは1.5度あるいは2.0度

妨害ピークがある場合、そのピーク測定を避けるか、あるいはバックグラウンド位置を個別に指定する。

測定 DS スリット

試料サイズが大きい場合 1 / 2 deg

小さい場合、あるいは2θ角度が30度以下の場合 1 / 4 deg

発散側高制限スリット

DS と Schulz スリットの間に2 mm以下の高さ制限スリットを取り付ける

受光高さ制限スリット

SSの前に5 mm（ゴニオ半径285 mmは10 mm）の高さ制限スリットを取り付ける

受光側SS，RSスリット

通常、6 mmあるいは7 mmのスリットを使う。

しかし、妨害ピークがある場合更に狭いスリットも使う。（例えば高分子）

このスリットはDefocusプロフィールに影響する。

データ処理

データ処理では装置特有なプロファイル補正が必要です。

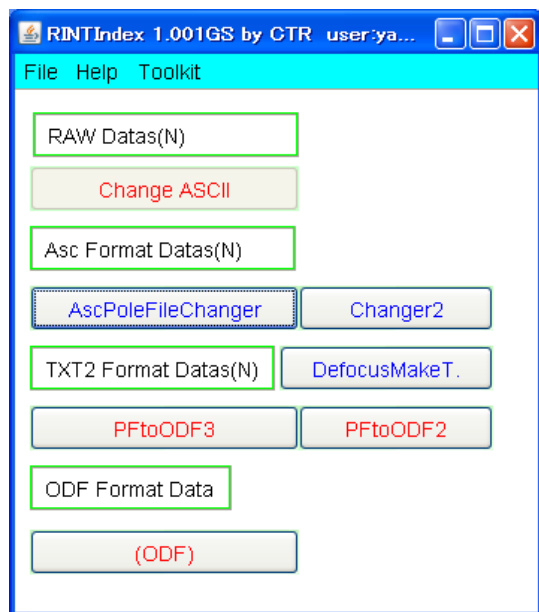
通常、測定試料と同じ材質で配向のない試料を測定試料と同一条件で測定したデータ

あるいは、粉末試料を同一条件で測定したデータ

あるいは、計算で作成したデータ

以降、計算で作成したデータを用いる。

Index化



から全てのプログラムが起動出来るようになりました。

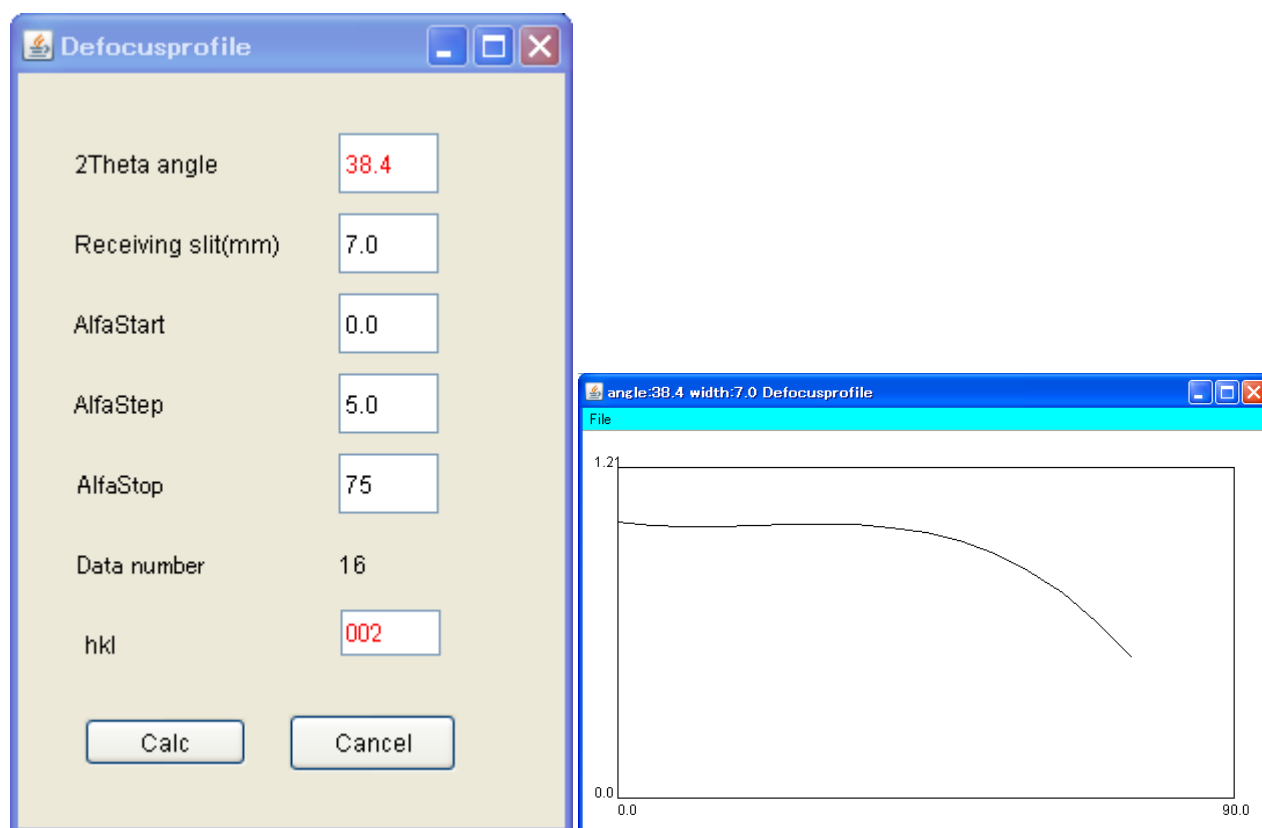
今回の試料はTiでプロファイルの状態から $\{002\}$ 、 $\{101\}$ 、 $\{102\}$ 、 $\{103\}$ を測定した。

Defocusデータの作成

極点図	2θ 角度
$\{002\}$	38.4
$\{101\}$	40.2
$\{102\}$	53.0
$\{103\}$	70.6

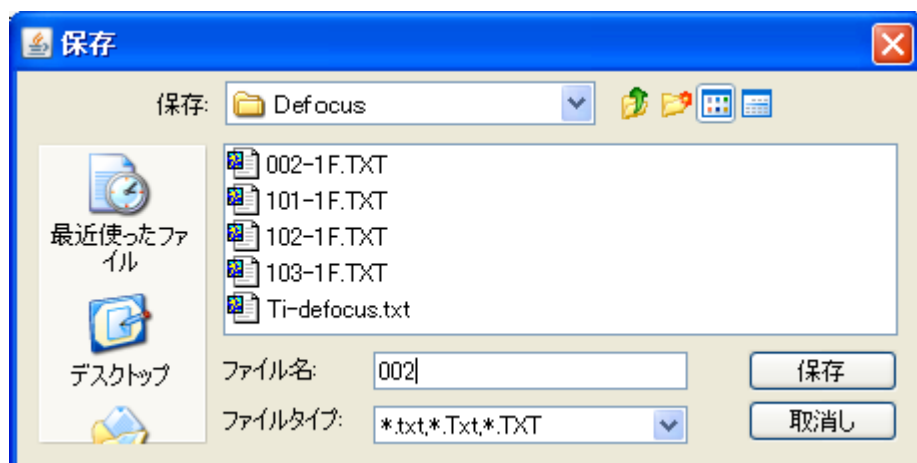
ゴニオ半径185 mm、受光スリットはSS，SSスリットは7 mmである。

DefocusCalcソフトウェア



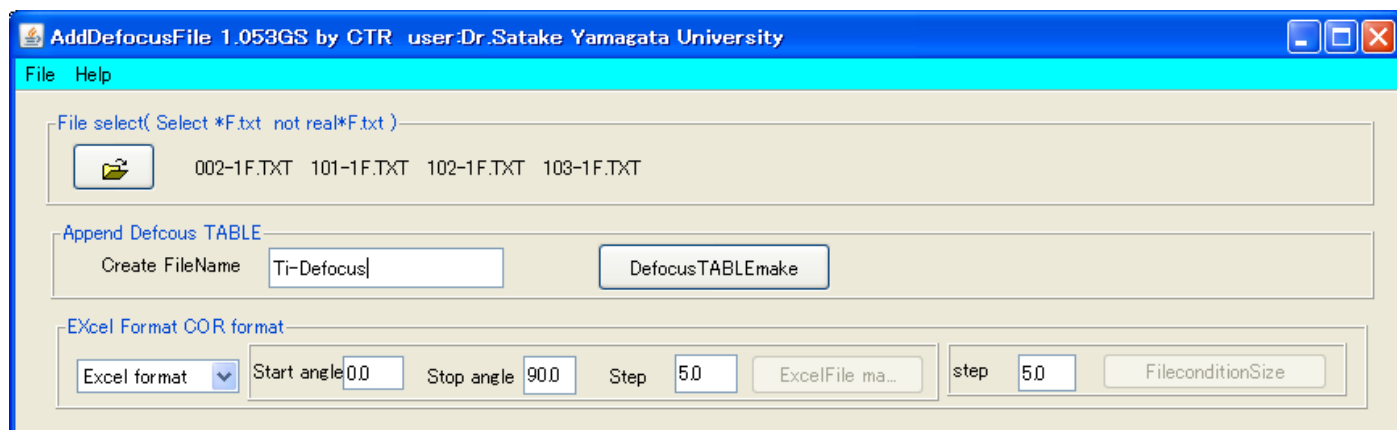
プロファイルに対し

File->Fitting function save で Defocus ファイルを作成

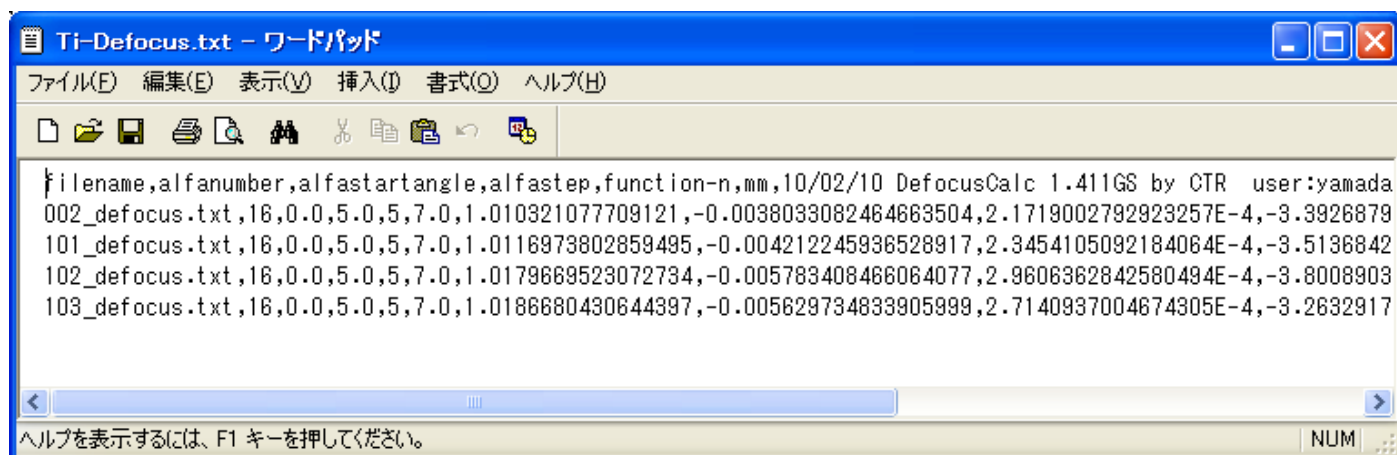


同様に、 $\{101\}$ 、 $\{102\}$ 、 $\{103\}$ を作成する。

AddDefocusFile プログラムで4つのファイルを1ファイルにする。



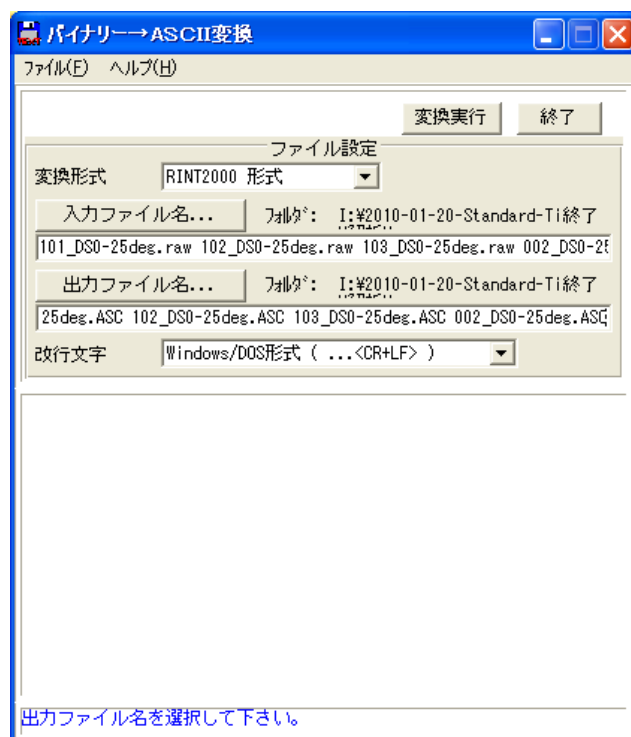
複数のファイルを選択し、ファイル名を入力し、DefocusTABLEmake する。



{002}、{101}、{102}、{103} の DefocusTABLE が作成された。

測定データの処理

測定データ (raw) を asc ファイルにする。



AscPoleFileChanger2 で各種補正を行う。

AscPoleFileChanger2 4.310GS by CTR user:yamada RIGAKU Corporation

File Help

InputFile(*.asc,*.Asc,*.ASC) before

OutputFile ☒ TXT2 ☐ TXT ☐ ASC

MeasureMethod Schulz reflection method

Index(h,k,l) Change

☐ RD ☐ Auto Input Roring direction angle 0.0 deg. ☒ Smoothing 3

MeasurePosition&Slitsize

LowBackground	2.0	mm	2Theta Angle	<input type="text"/>	deg.
Peak	7.0	mm	2Theta Angle	<input type="text"/>	deg.
HighBackground	2.0	mm	2Theta Angle	<input type="text"/>	deg.

MeasurePosition&Slitsize Search TABLE(*.txt) ¥ check

BackDeleteMode

☐ DoubleMo... ☐ SingleMode ☐ LowMode ☐ HighMode ☐ Nothing Graph

☐ UT Absorption coefficient 200 1/cmPenetration depth 1 cm ☒ 1/Kt Graph

Defocus TABLE(*.txt)

☐ I:\2010-01-20-Standard-Ti終了解析\Defocus\Ti-defocus.txt check


Limit Alfa Defocus Value Free (LimitValue 0) ☒ 1/Ra Graph

☐ Standardize Start after

先ほど作成した DefocusTABLEfile を指定する。

測定データを指定する。

File Help

InputFile(*.asc,*.Asc,*.ASC)
 I:\2010-01-20-Standard-Ti終了解析\002_DS0-25deg.ASC before

OutputFile
 002_DS0-25deg-chM ☒ TXT2 ☐ TXT ☐ ASC

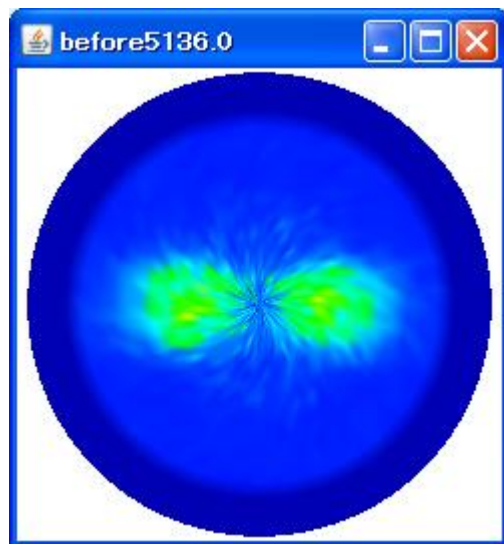
MeasureMethod
 Schulz reflection method Schulz reflection method

Index(h,k,l)
 0,0,2 0,0,2 Change

RD Smoothing

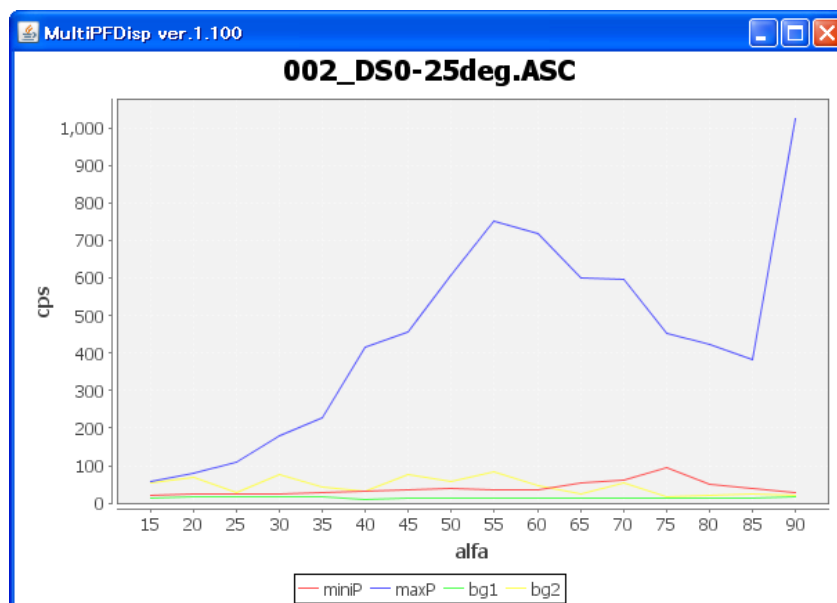
指定とともに、指数が表示される。この指数はa s cファイルから読み出して表示する。
 間違っている場合、変更入力してC h a n g e k e yを押す。

処理は、スムージング、RD、バックグラント処理、吸収補正、D e f o c u sである。
 入力極点図の確認は ファイル名列右側の before



最大強度が表示される。

プロファイルとバックグラントの関係は backdeletemode の check



ここで、バックグラントをどのような引き方をするか決める。


MeasurePosition&Slitsize

LowBackgrand 0.0 mm 2Theta Angle 0.0 deg.

Peak 100 mm 2Theta Angle 38.4 deg.

HighBackgrand 0.0 mm 2Theta Angle 0.0 deg.

MeasurePosition&Slitsize Search TABLE(*.txt)

 ¥ check

BackDeleteMode

☒ DoubleMo... ☐ SingleMode ☐ LowMode ☐ HighMode ☐ Nothing Graph

バックグラウンド位置がピーク位置に対して同じで、且つスリット幅も同じの場合

赤字の部分に入力しなくても処理は行えます。

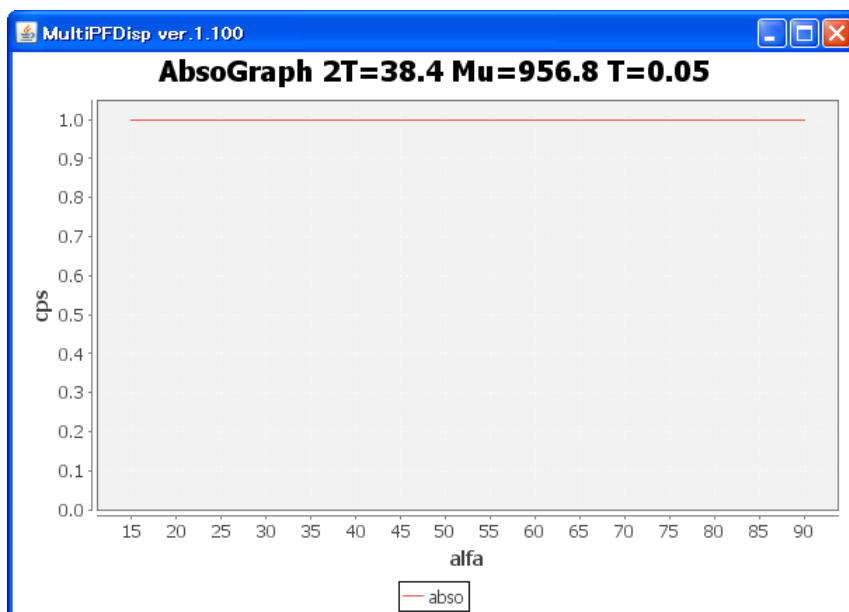
もし、常にバックグラウンド測定位置とスリット幅が同じであればファイル作成して指定出来ます。

吸収補正の確認

吸収係数と試料の厚さを入力し、Graph

UT


Absorption coefficient 956.8 1/cm Penetration depth 0.05 cm ☒ 1/Kt Graph



補正しても結果に変わらない事が分かる。

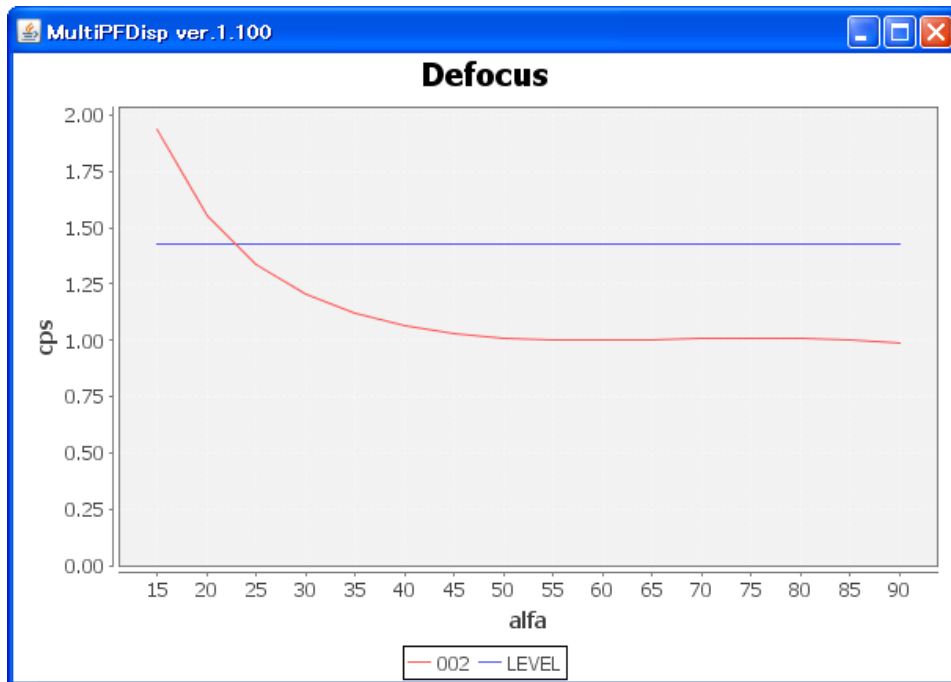
Defocusの確認

Defocus TABLE(*.txt)

 I:\2010-01-20-Standard-Ti終了解析\Defocus\Ti-defocus.txt check

Limit Alfa Defocus Value 0.70 ☒ 1/Ra Graph

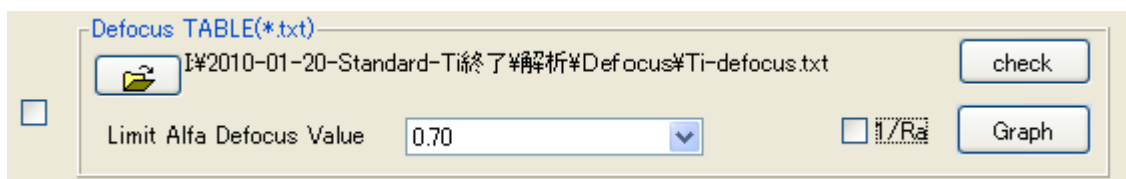
Graph で



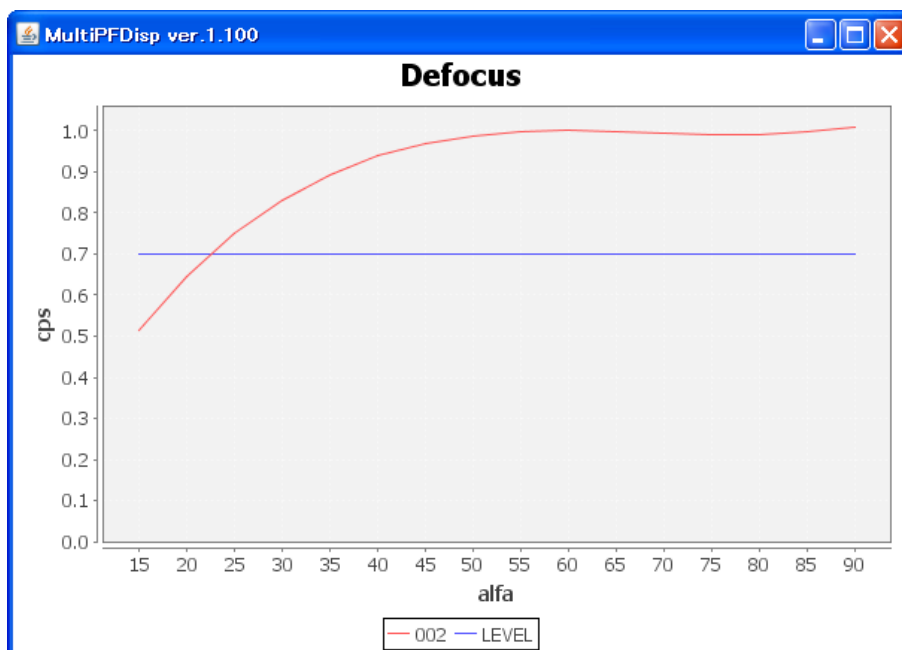
測定データに α 毎にこの計数を掛ける。

Level は青線より低い計数の α 角度に範囲に出力ファイルが制限される。

実際の Defocus プロファイルの確認は Help->Konfilm で



チェックを外し、Graph



見慣れたカーブが現れます。この場合青線以上に制限されます。

通常の処理条件

AscPoleFileChanger2 4.310GS by CTR user:yamada RIGAKU Corporation

File Help

InputFile(*.asc,*.Asc,*.ASC)
I:\2010-01-20-Standard-Ti終了解析\002_DS0-25deg.ASC before

OutputFile
002_DS0-25deg-chMB0DL70S ☒ TXT2 ☐ TXT ☐ ASC

MeasureMethod
Schulz reflection method Schulz reflection method

Index(h,k,l)
0,0,2 0,0,2 Change

☐ RD ☐ Auto Input Roring direction angle 0.0 deg. ☒ Smoothing 3

☒ MeasurePosition&Slitsize
LowBackgrand 0.0 mm 2Theta Angle 0.0 deg.
Peak 10.0 mm 2Theta Angle 38.4 deg.
HighBackgrand 0.0 mm 2Theta Angle 0.0 deg.

MeasurePosition&Slitsize Search TABLE(*.txt)
¥ check

BackDeleteMode
☒ DoubleMo... ☐ SingleMode ☐ LowMode ☐ HighMode ☐ Nothing Graph

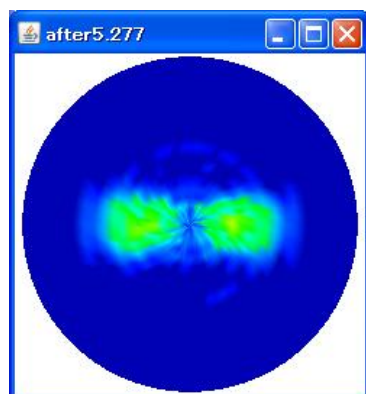
☐ UT
Absorption coefficient 0.56.8 1/cm Penetration depth 0.05 cm ☒ 1/Kt Graph

Defocus TABLE(*.txt)
I:\2010-01-20-Standard-Ti終了解析\Defocus\Ti-defocus.txt check

☒ Limit Alfa Defocus Value 0.70 ☐ 1/Ra Graph

☒ Standardize Start after

Start で処理結果が登録され、after で処理結果極点図が確認出来る。



同様に別のファイルも処理する。

PFtoODF3 6.004GS by CTR user:yamada RIGAKU Corporation

File Option Symmetric Software Data

Lattice constant

Structure Code(Symmetries after Schoenfiles)

a 1.0 <=b 1.0 <=c 1.0 alfa 90.0 beta 90.0 gamm 90.0

getHKL<-Filename

AllFileSelect

PF Data

SelectFile(TXT(b,intens),TXT2(a,b,intens))	h,k,l	2Theta	Alfa Area	AlfaS	AlfaE	Select
<input type="text"/> 002_DS0-25deg-chMB0DL70S2.TXT	0,0,2	0.0	0.0->65.0	0.0	65.0	<input checked="" type="checkbox"/>
<input type="text"/> 101_DS0-25deg-chMB0DL70S2.TXT	1,0,1	0.0	0.0->65.0	0.0	65.0	<input checked="" type="checkbox"/>
<input type="text"/> 102_DS0-25deg-chMB0DL70S2.TXT	1,0,2	0.0	0.0->70.0	0.0	70.0	<input checked="" type="checkbox"/>
<input type="text"/> 103_DS0-25deg-chMB0DL70S2.TXT	1,0,3	0.0	0.0->75.0	0.0	75.0	<input checked="" type="checkbox"/>
<input type="text"/>	2,1,1	0.0		0.0	0.0	<input type="checkbox"/>
<input type="text"/>	2,2,1	0.0		0.0	0.0	<input type="checkbox"/>
<input type="text"/>	1,0,0	0.0		0.0	0.0	<input type="checkbox"/>
<input type="text"/>	1,1,0	0.0		0.0	0.0	<input type="checkbox"/>
<input type="text"/>	1,1,1	0.0		0.0	0.0	<input type="checkbox"/>
<input type="text"/>	2,1,0	0.0		0.0	0.0	<input type="checkbox"/>
<input type="text"/>	2,1,1	0.0		0.0	0.0	<input type="checkbox"/>
<input type="text"/>	2,2,1	0.0		0.0	0.0	<input type="checkbox"/>

Comment

Symmetric type Full

Epf file save

Labotex(EPF),popLA(RAW) filename

labotex

AllFileSelect で複数のファイル指定する。指数はファイル名の頭から自動的に作成される。

ファイル名から AscPoleFileChanger2 でどのような処理が行われているか分かります。

-chMB0DL70S は、スムージング、バックグラウンド処理 (low,high モード)、Defocus (Level0.7)

強度の規格化が行われた、TXT2 ファイルであることが分かります。

ここで、 α 範囲を制限出来ます。

Lattice constant

Structure Code(Symmetries after Schoenfiles) 11 - D6 (hexagonal)

a 1.0 <=b 1.0 <=c 1.587 alfa 90.0 beta 90.0 gamm 120

getHKL<-Filename

AllFileSelect

PF Data

T i の条件を入力