

X線解析結果の扱いに関して

CTRソフトウェアでは、RINT-HP、RINT-PCの処理が再現出来ます。

バックグラウンド除去、平滑化、吸収補正、defocus処理の確認を行いました。

2018年07月10日

HelperTex Office

概要

システム更新時、過去のデータや解析結果の見直しを行う事があります。
例えば、リガクRINTシステムの測定データや解析結果を新しいシステムで扱う場合、新しいシステムで従来と同一の処理が出来なければ比較が行えません。
以下に比較法を紹介します。

従来のシステム

RINTシリーズで解析コンピュータはUNIXのHPコンピュータを利用 (RINT-HP)
RINTシリーズで解析コンピュータはWindowsを利用 (RINT-PC)

新システムへデータ渡し

RINT-HP

ASCII変換でファイル名が ****. **A
拡張子をASCに変更する

RINT-PC

ASCII変換でファイル名が ***. ASC
上記似たようなファイルフォーマットであるが、バックグラウンドデータの扱いが異なります。

バックグラウンドの扱い

RINT-HP

各 α に於いて β プロファイルをバックグラウンドLowとHighで結ぶ直線で削除

RINT-PC

各 α に於いて β プロファイルの面積が簡単に計算出来るように面積のバックグラウンドとして登録されています。

(Low+High) (単位はcps) で計算出来るように登録されている

RINT-HPと比較すると5度間隔の場合34倍されている

データ処理 (平滑化)

RINT-HP

Savitzky-Golay法による β 方向の平滑化

RINT-PC

Savitzky-Golay法による β 方向の平滑化+ α 方向の平滑化

データ処理 (defocus補正)

RINT-PC

バックグラウンド削除したPOLファイルを指定

データ強度をCountsで扱うため、FT時間は同一にする

新しいシステムで上記処理が出来る事が必要になります。

確認

randomファイル

抜検データ

```

*BEGIN↓
*GROUP      = 0↓
*START      = 0.000000↓
*STOP       = 360↓
*STEP       = 5↓
*OFFSET     = ↓
*SPEED      = 1↓
*SLIT_SPEC  = 0, 1°, 1.75, 10↓
*SLIT_SPEC  = 1, 7.00mm, 7, 20↓
*SLIT_SPEC  = 2, 7.00mm, 7, 20↓
*SLIT_SPEC  = 3, 2.00mm, 2, 2↓
*KV         = 40↓
*MA         = 40↓
*LOW        = 15000.0↓
*HIGH       = 15400.0↓

```

```

*BEGIN↓
*GROUP      = 0↓
*START      = 0.000000↓
*STOP       = 360↓
*STEP       = 5↓
*OFFSET     = ↓
*SPEED      = 5↓
*SLIT_SPEC  = 0, 1/2°, 0.87, 10↓
*SLIT_SPEC  = 1, 7.00mm, 7, 20↓
*SLIT_SPEC  = 2, 7mm, 7, 20↓
*SLIT_SPEC  = 3, 2.00mm, 2, 2↓
*KV         = 40↓
*MA         = 40↓
*LOW        = 5760↓
*HIGH       = 10476↓

```

```

*COUNT      = 73↓
2408, 2420, 2427, 2381↓

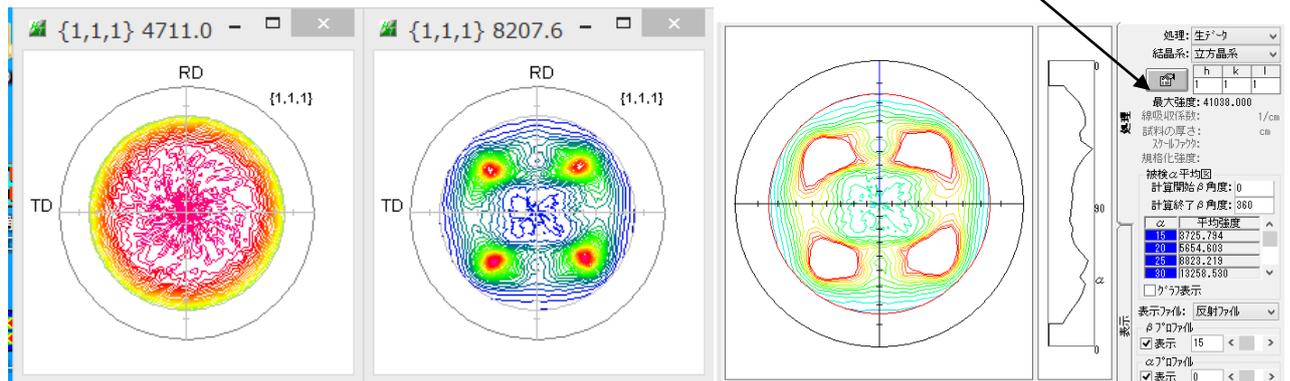
```

```

*COUNT      = 73↓
3309, 3480, 3398, 3379↓

```

最大強度: 41038.000



F T時間が異なります。

CTRでは全てcpsで処理されています。RINT41038/5=8207.6

RINT-PCでは条件が変わると処理出来ないなので、データを合わせます。

作成されるASCファイル

```

*BEGIN↓
*GROUP      = 0↓
*START      = 0.0↓
*STOP       = 360.0↓
*STEP       = 5.0↓
*SPEED      = 1.0↓
*SLIT_SPEC  = 0, 1°, 1.75, 10↓
*SLIT_SPEC  = 1, 7.00mm, 7, 20↓
*SLIT_SPEC  = 2, 7.00mm, 7, 20↓
*SLIT_SPEC  = 3, 2.00mm, 2, 2↓
*LOW        = 15000.0↓
*HIGH       = 15400.0↓

```

```

*BEGIN↓
*GROUP      = 0↓
*START      = 0.0↓
*STOP       = 360.0↓
*STEP       = 5.0↓
*SPEED      = 1.0↓
*SLIT_SPEC  = 0, 1/2°, 0.87, 10↓
*SLIT_SPEC  = 1, 7.00mm, 7, 20↓
*SLIT_SPEC  = 2, 7mm, 7, 20↓
*SLIT_SPEC  = 3, 2.00mm, 2, 2↓
*LOW        = 5760.0↓
*HIGH       = 10476.0↓

```

```

*COUNT      = 73↓
2408.0↓
2420.0↓

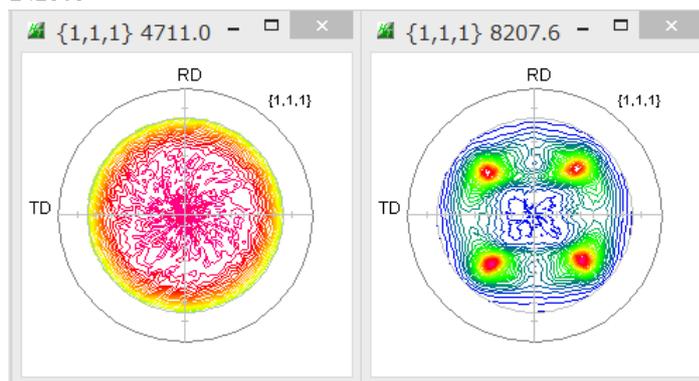
```

```

*COUNT      = 73↓
661.8↓
696.0↓

```

3309/5=661.8

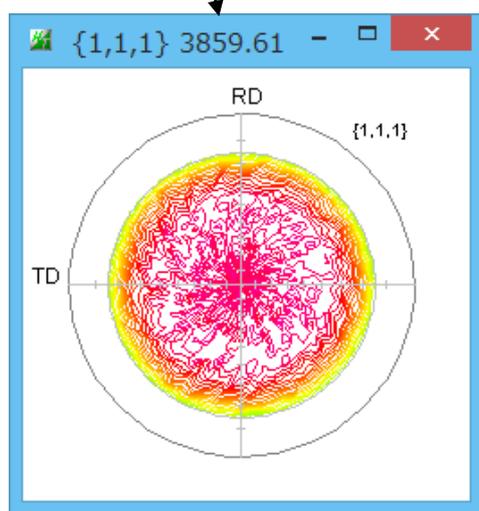
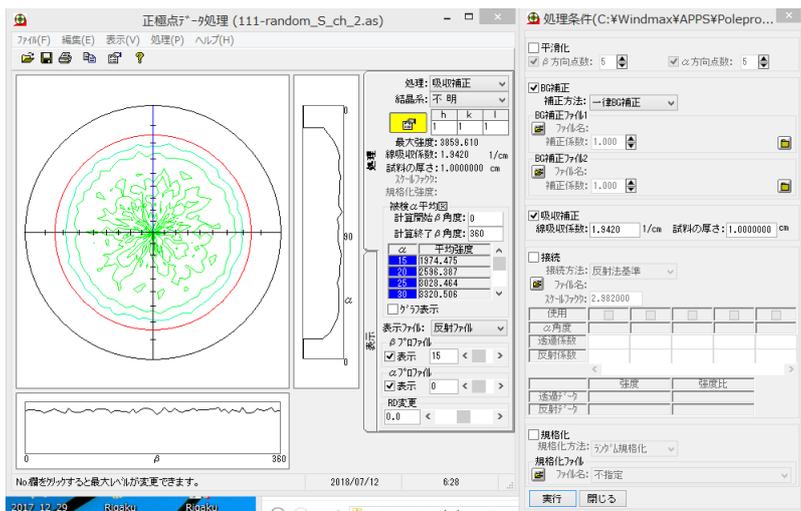


バックグラウンドはcpsで扱われているので変化なし、
データはcountsで扱われているので変化します。

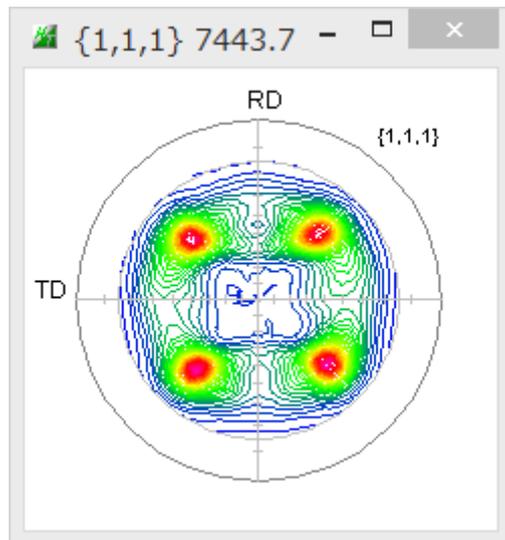
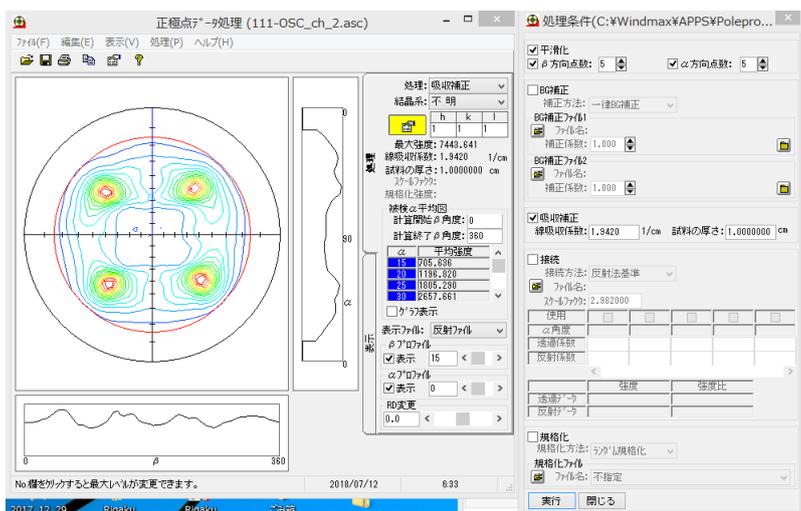
変更結果をCTRで表示してもcpsで扱っているので、同じ極点図

バックグラウンド削除確認

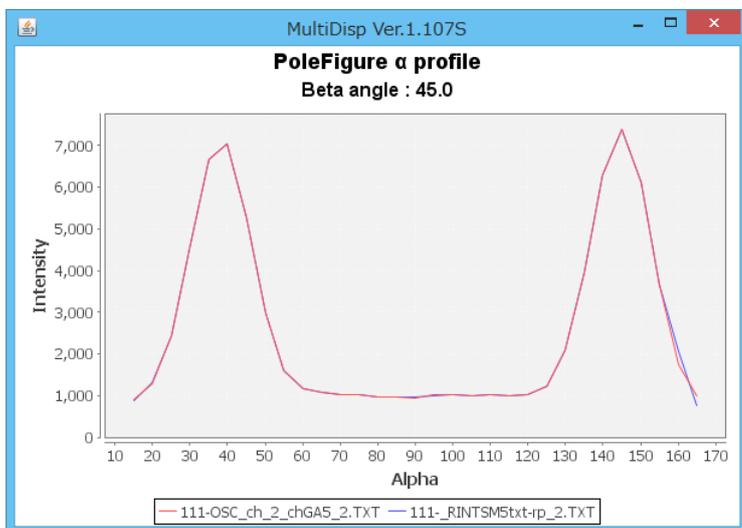
random試料のバックグラウンド削除 RINTMax 最大強度: 3859.610 CTR



平滑化確認 平滑化点数5点 RINTMax 最大強度: 7443.641



平滑化後のプロファイル確認



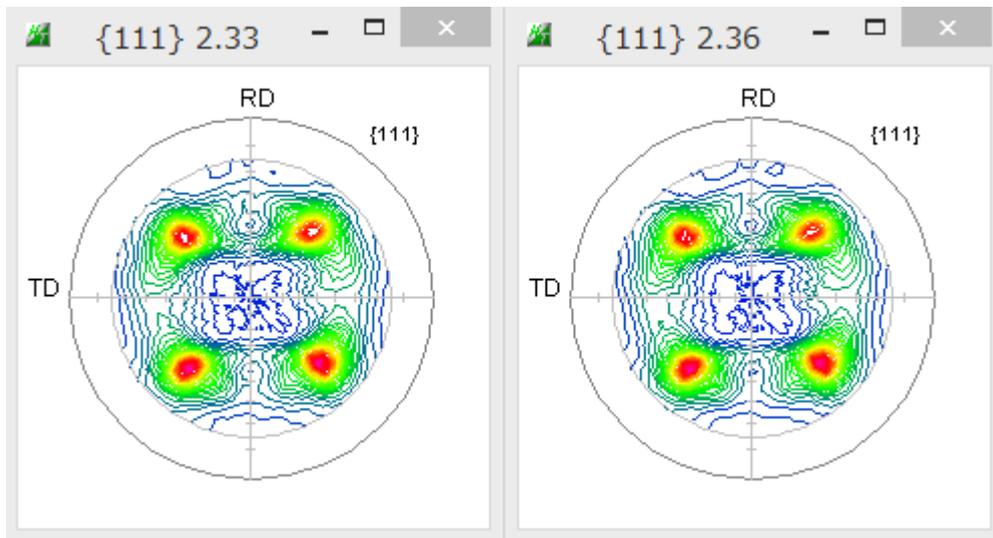
終端で若干異なるが、ほぼ同一

defocus補正 RINT 最大強度: 2.335 CTR 2.36

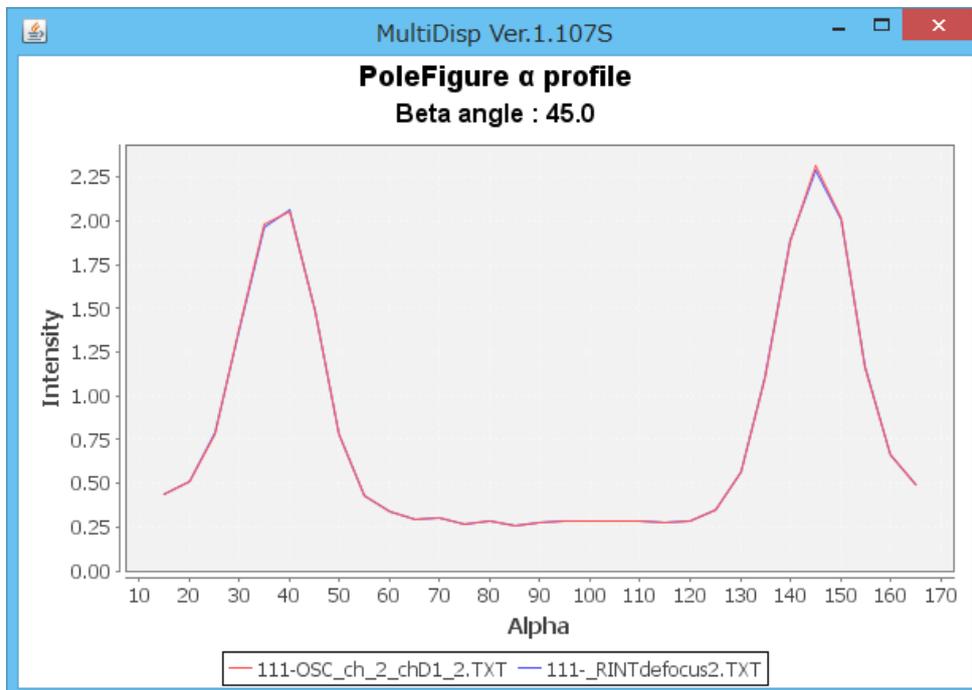


CTRソフトウェアのdefocus曲線は5次の多項式で近似されているためと考えられます。

極点図確認

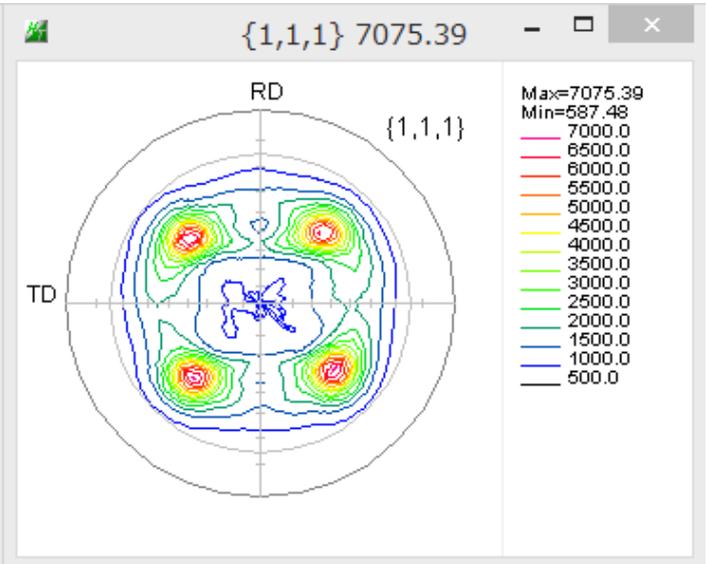
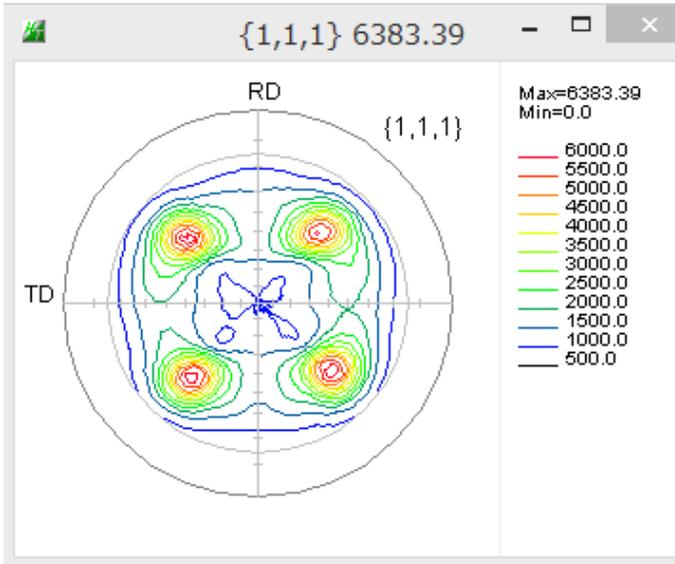
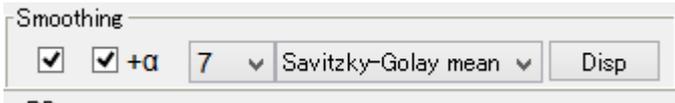


プロファイル確認

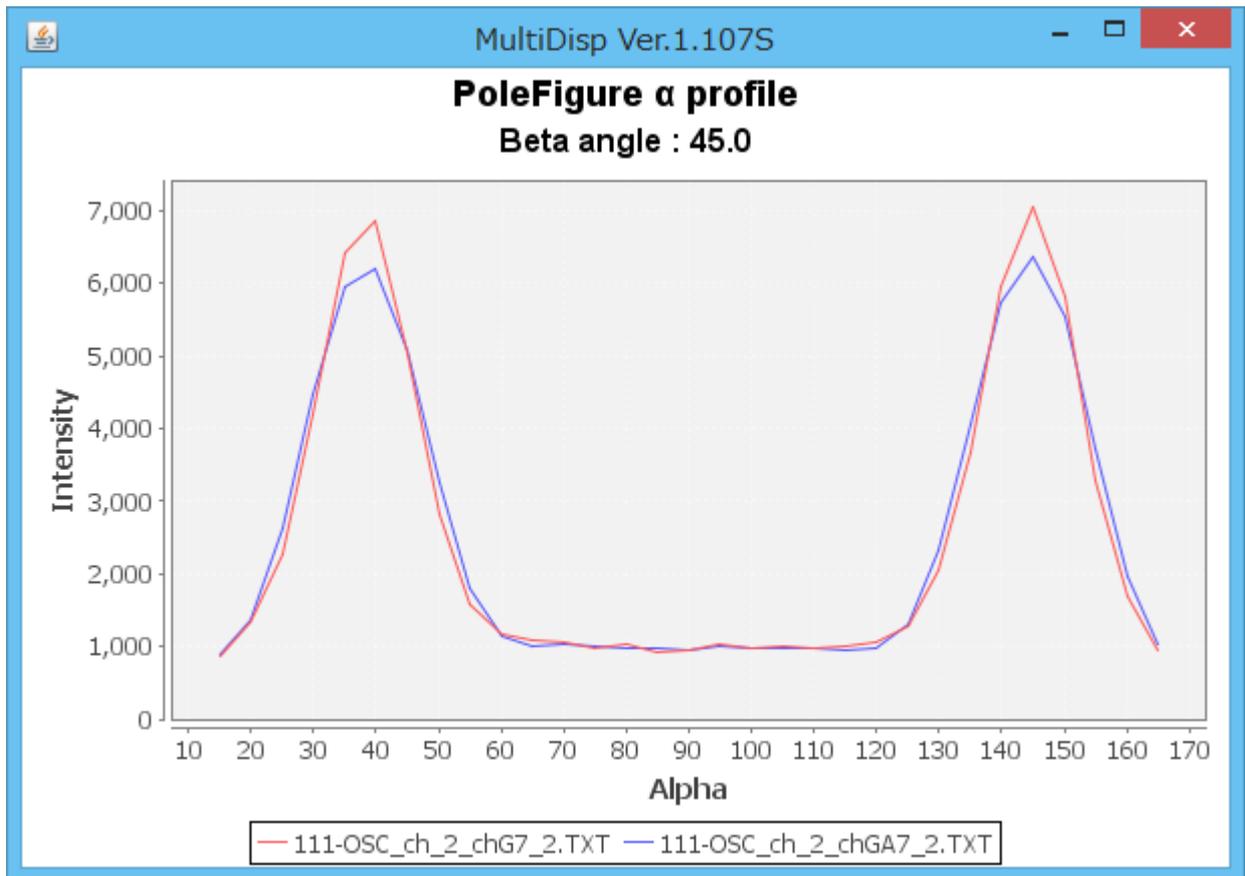


HPの平滑化とPCの平滑化確認

RINT-HPの β 方向のみとRINT-PCの α β 方向の平滑化を比較

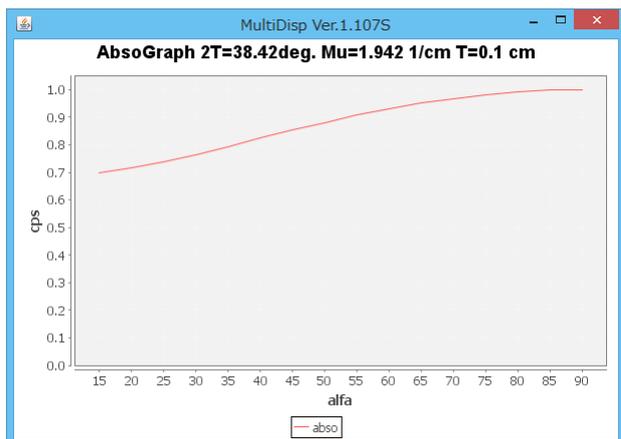


プロフィール確認



反射吸収補正

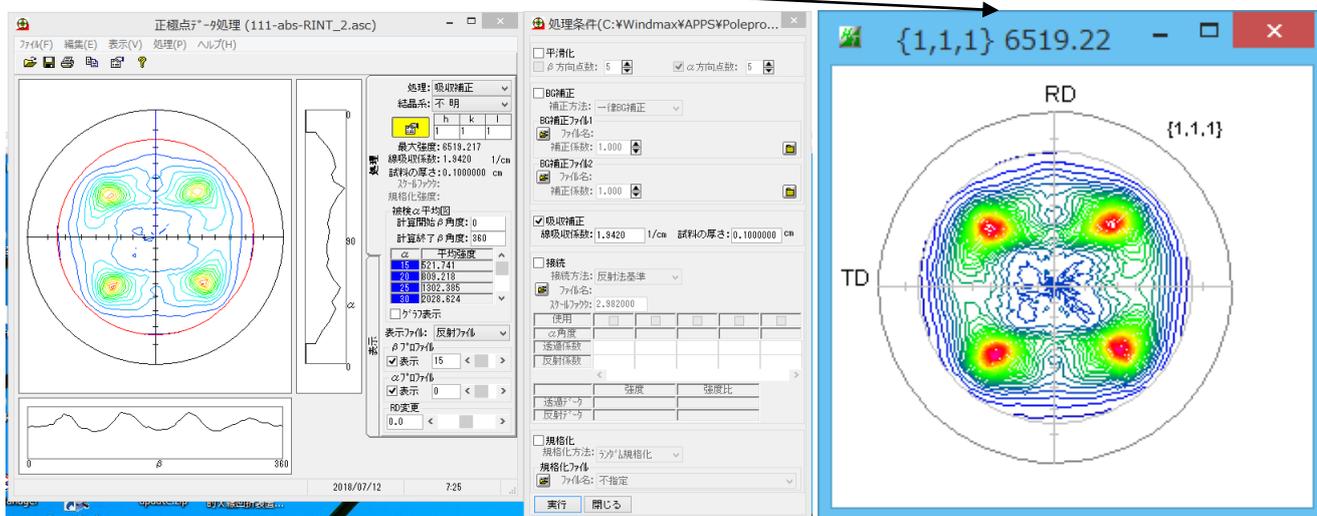
測定データと異なる線吸収係数で比較 補正曲線を以下とする。



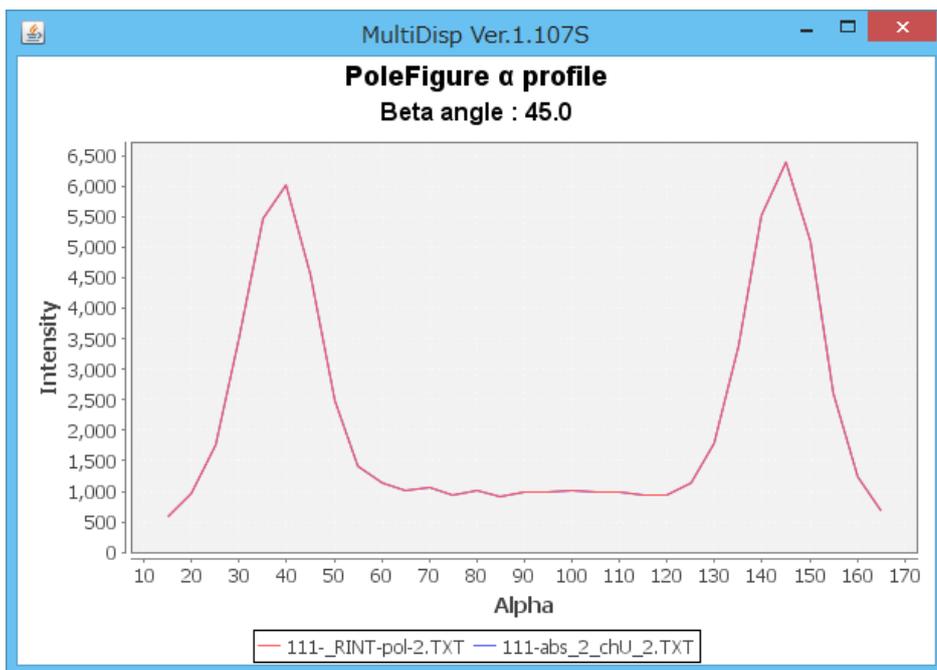
RINT で計算

最大強度: 6519.217

CTR



極点図プロフィールで確認



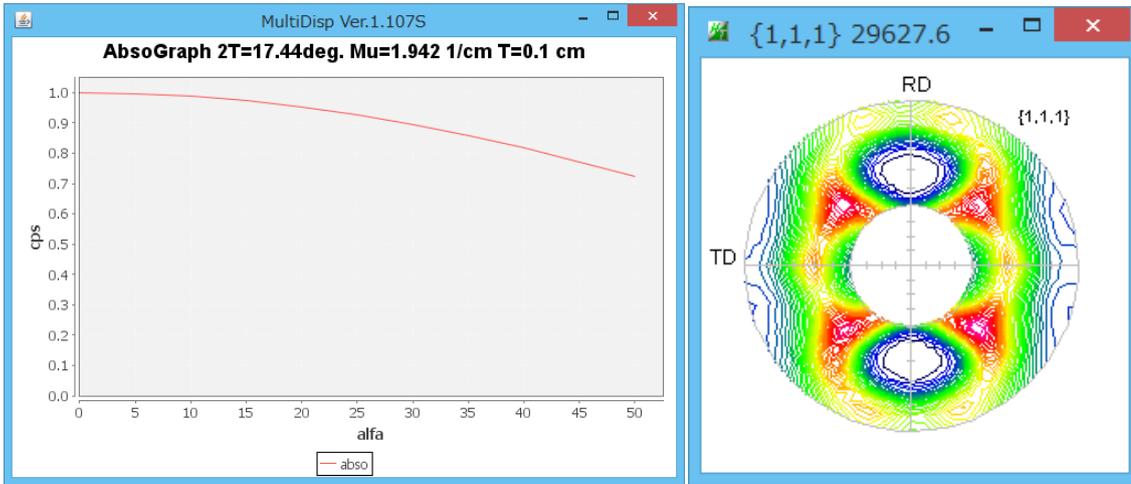
一致しています。

透過吸収補正



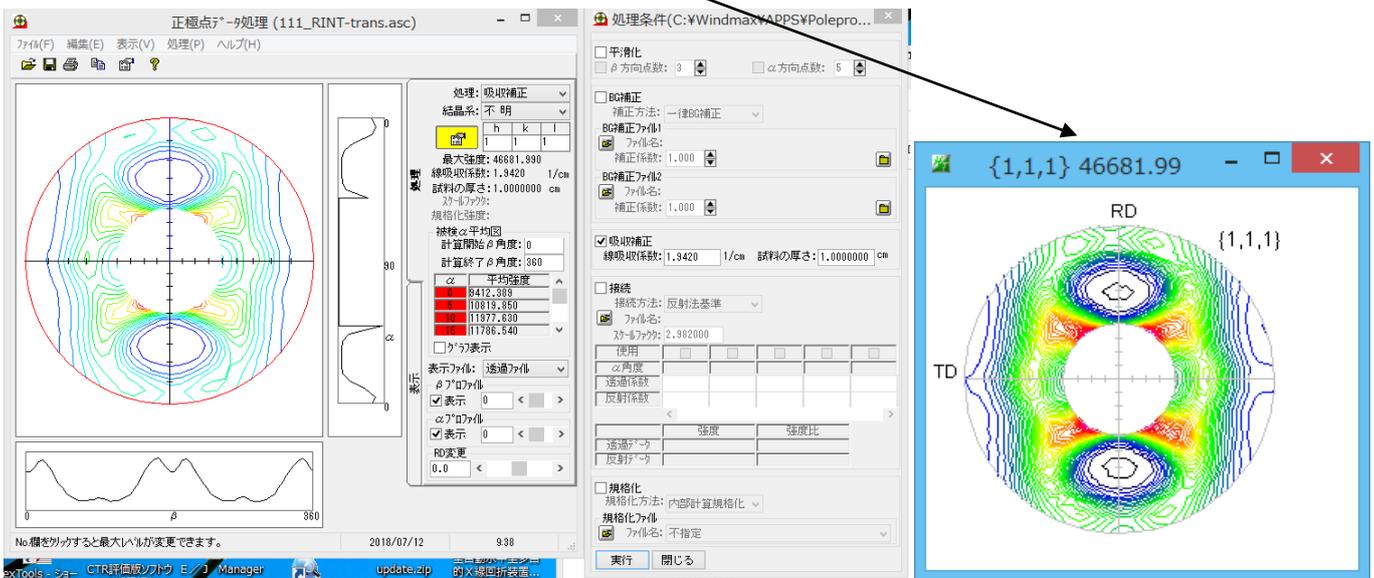
補正曲線

生データ



吸収補正後 RINT 最大強度: 46681.990

CTR



補正後のプロフィール確認

