

r a n d o m試料がない場合の計算 d e f o c u s 補正

2019年02月24日

HelperTex Office

概要

Schulzの反射法で測定した極点図はdefocus補正と言われる補正が必要です。Schulzの反射法は疑似集中法による測定はX線照射面積が広く平均的な方位測定が可能になる。この面積を確保しているDSスリットの広がりSchulzスリットの幅がdefocusの原因である。平行ビームに様に照射面積を狭くするdefocusは軽減されるが平均的な方位測定はできないdefocusは、TenckhoffCalcプログラムの計算式から測定 2θ 角度、受光スリット幅で計算される曲線になるが、実際は測定 2θ 角度によりSchulz幅も変化し、概算が計算される。ODFPoleFigure2ソフトウェアでは、実測値をデータベースとし、補正計算が行われ正しい曲線に計算されているかをValueODFVFソフトウェアで確認します。ValueODFVFの確認はCubicが対象です。以下にrandom試料がない場合の使い方を説明します。

defocus曲線

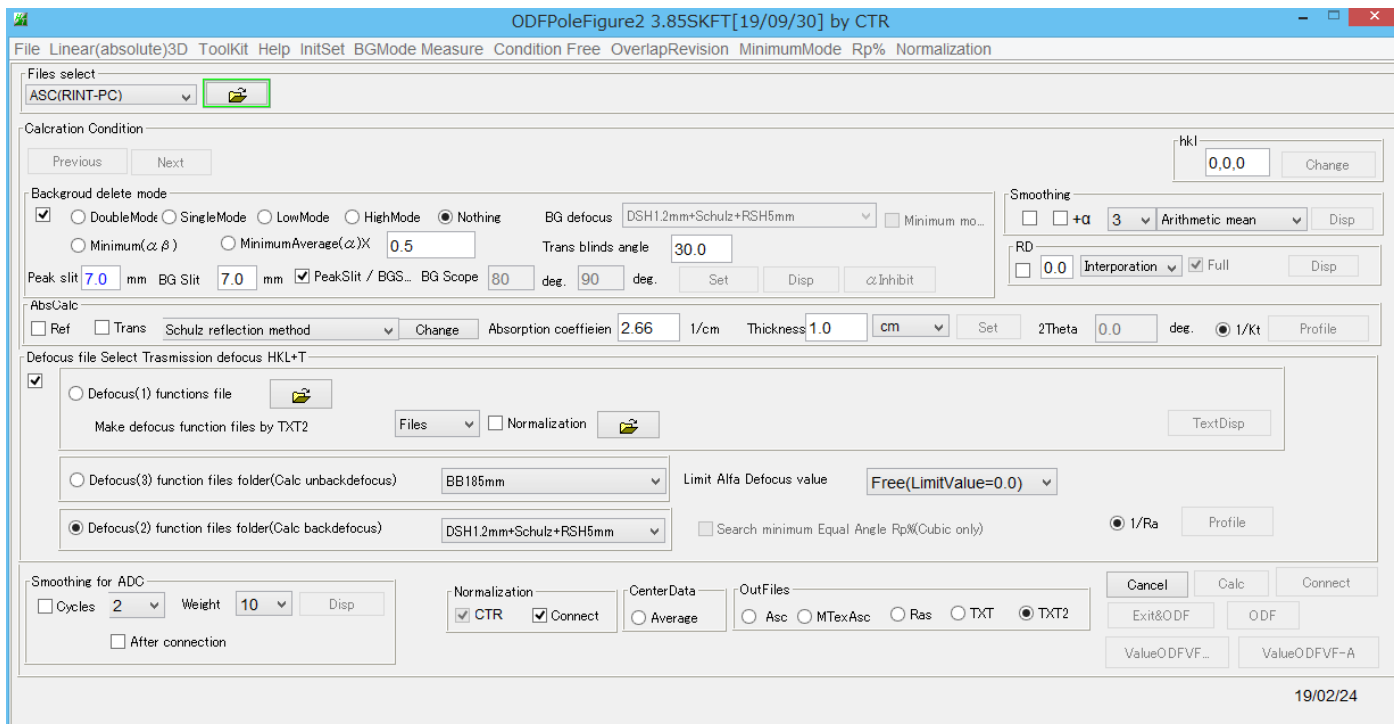
$$\frac{I_{\Delta}(\Phi, \theta, W_B, L_R)}{I_{\Delta}(\Phi=0, \theta, W_B, L_R)} = 1 - \frac{2}{(2\pi)^{1/2}} \int_{-\infty}^{-L_R/P(W_B \tan\Phi \sin 2\theta / \sin\theta)} \exp(-y^2/2) dy.$$

受光スリット幅 測定 $2\theta/2$ 角度

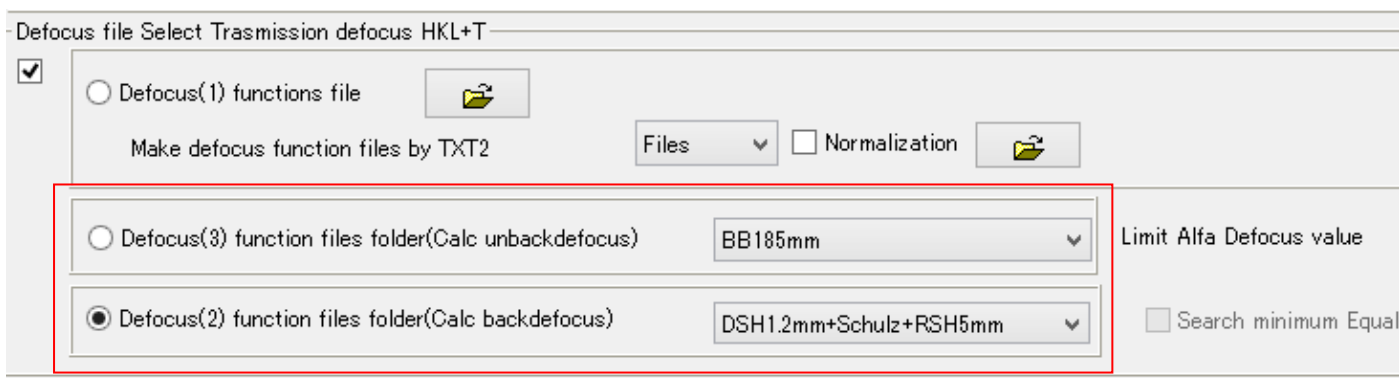
ValueODFVF評価

$$RP_{\{hkl\}} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left| \frac{\{PF_{exp.}\}_i - \{PF_{calc.}\}_i}{\{PF_{exp.}\}_i} \right| \cdot 100\%$$

ODFPoleFigure2ソフトウェア (Ver.3.85以降で説明)



計算 defocus 計算部分

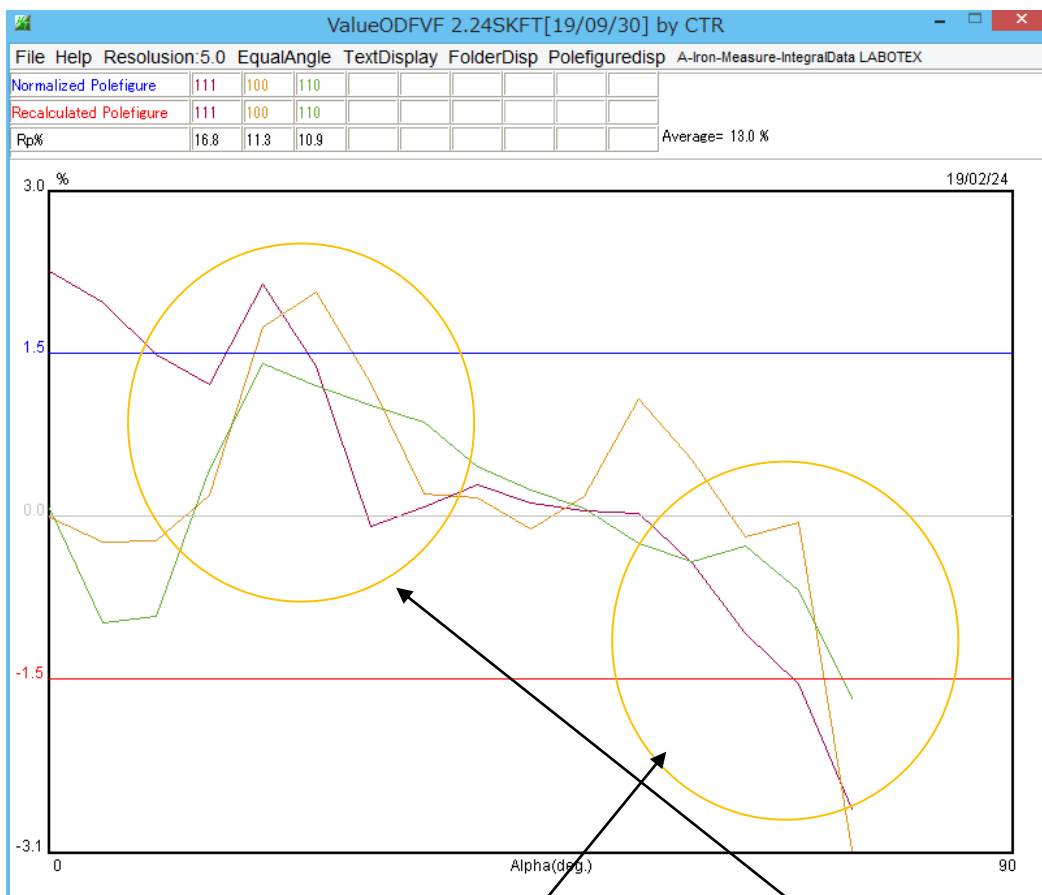
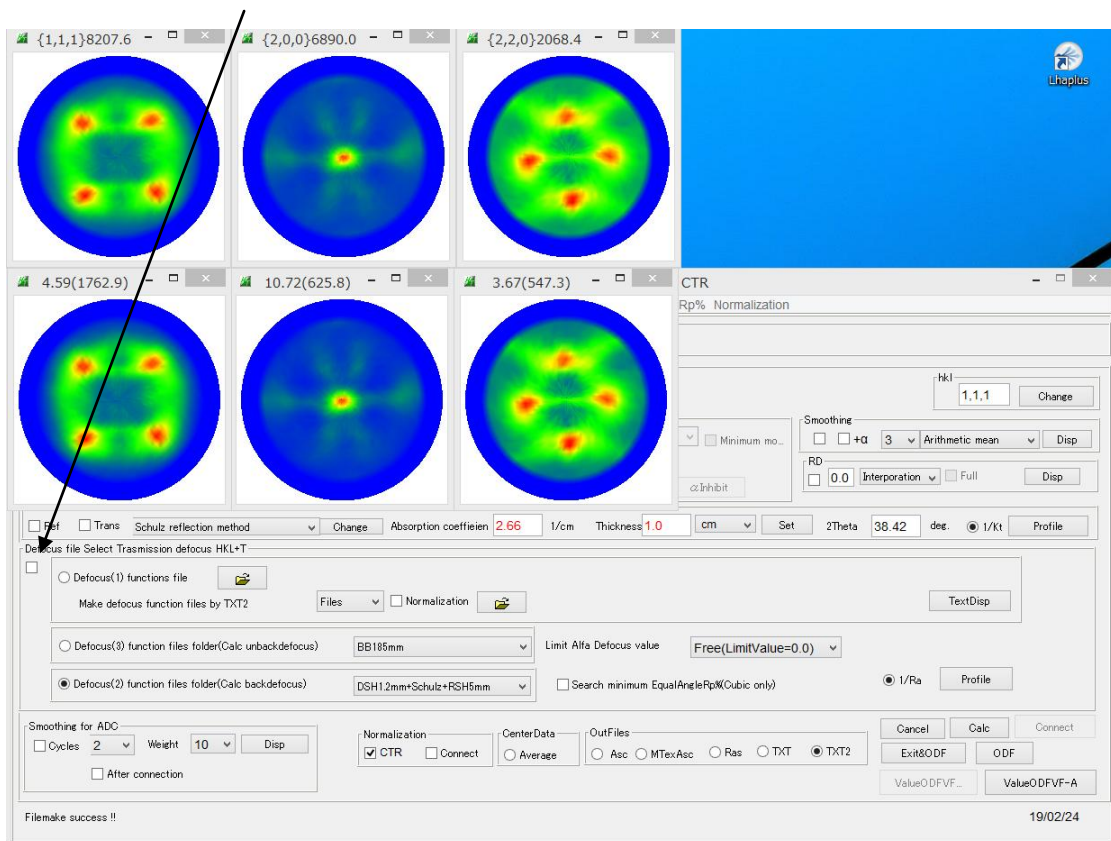


補正評価部分



測定データで評価

defocus補正なしで、単に内部規格の場合



極点図の外周付近で計算値より測定値が低下しています。30度付近に乱れ
これはdefocus補正が足りない（施されていない）状態です。

計算 d e f o c u s 補正 (測定 2θ 角度、受光スリット幅から計算)

Background delete mode

DoubleMode SingleMode Low

Minimum($\alpha\beta$) MinimumA

Peak slit 7.0 mm BG Slit 7.0 mm

CTR

rp% Normalization

hkl 1,1,1 Change

Smoothing: + α 3 Arithmetic mean Disp

RD 0.0 Interporation Full Disp

α Inhibit

cm Set 2Theta 38.42 deg. 1/Kt Profile

Defocus(1) functions file

Make defocus function files by TXT2 Files Normalization TextDisp

Defocus(3) function files folder(Calc unbackdefocus) BB185mm

Defocus(2) function files folder(Calc backdefocus) DSH1.2mm+Schulz+RSH5mm

Limit Alfa Defocus value Free(LimitValue=0.0)

Search minimum EqualAngleRp%(Cubic only) 1/Ra Profile

Smoothing for ADC: Cycles 2 Weight 10 Disp After connection

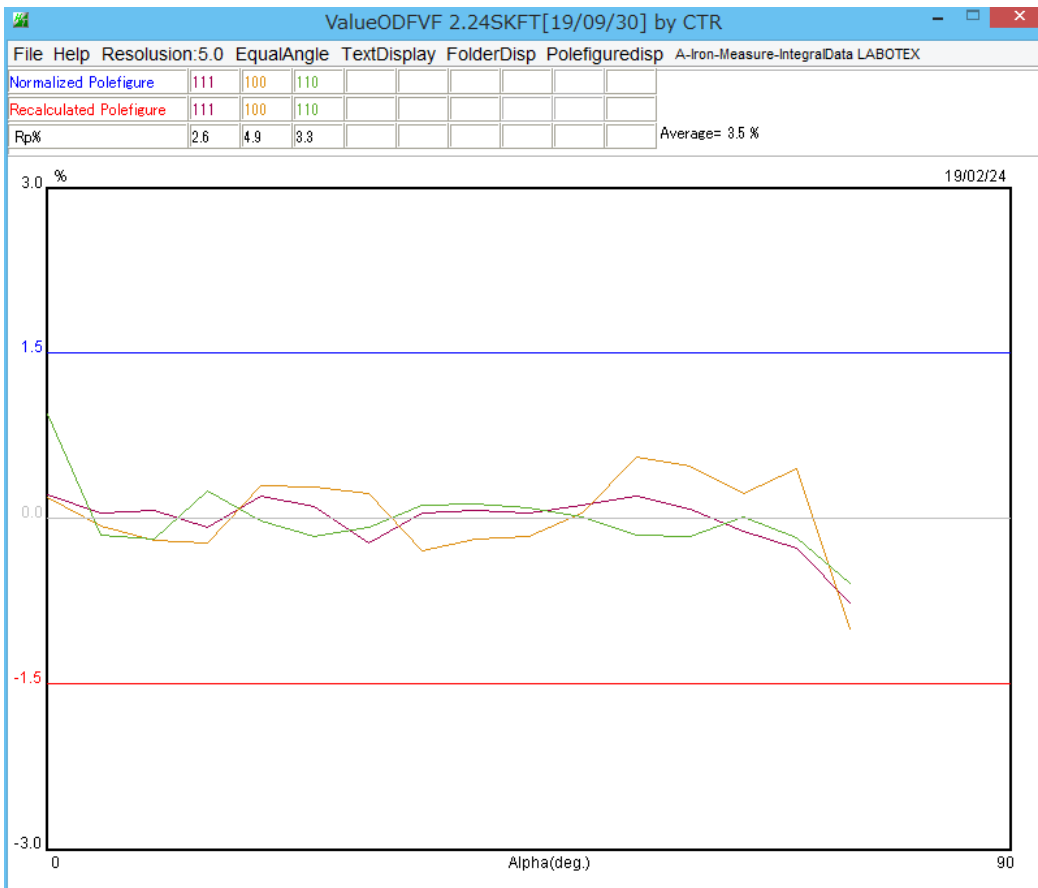
Normalization: CTR Connect CenterData: Average OutFiles: Asc MTextAsc Ras TXT TXT2

Cancel Calc Connect

Exit&ODF ODF

ValueODFVF... ValueODFVF-A

Filemake success !! 19/02/24



計算 defocus 補正 (測定 2θ 角度、受光スリット幅を 7 mm \rightarrow 6 mm)

Background delete mode
 DoubleMode SingleMode LowMode
 Minimum(α β) MinimumAverage(α β)
 Peak slit mm BG Slit mm PeakSlit

hkl Change

Smoothing
 Minimum mo... + α Arithmetic mean
 RD Interpolation Full

cm 2Theta deg. 1/ θ

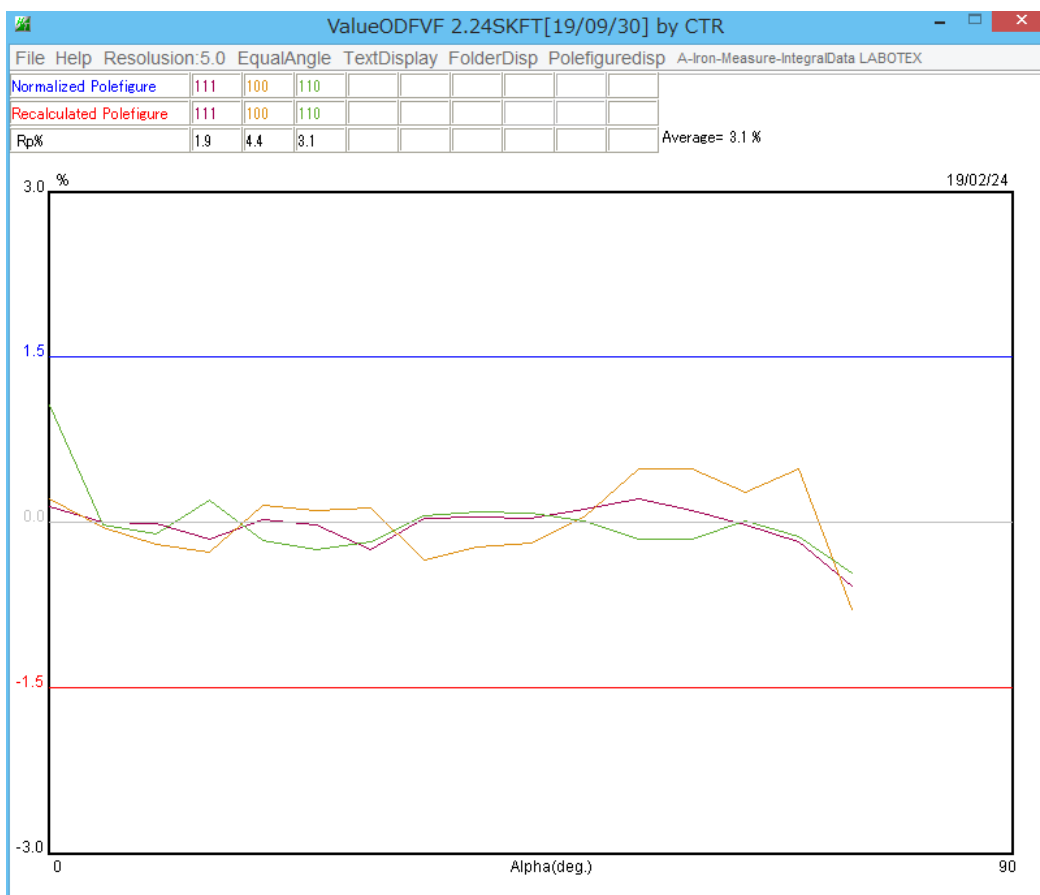
Defocus(1) functions file Normalization
 Make defocus function files by TXT2

Defocus(3) function files folder(Calc unbackdefocus)
 Defocus(2) function files folder(Calc backdefocus) Search minimum EqualAngleRp%(Cubic only) 1/Ra

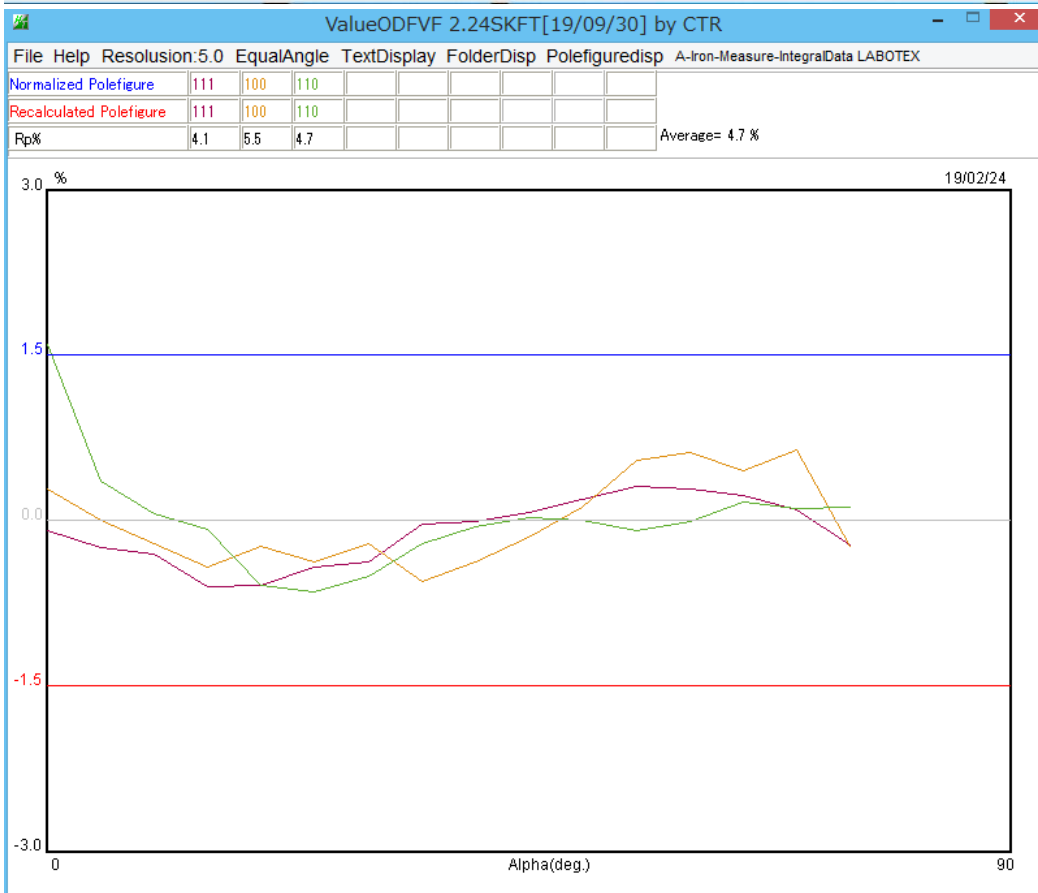
Smoothing for ADC
 Cycles
 After connection

Normalization CTR Connect Average Asc MTeXAsc Ras TXT TXT2

Filemake success !! 19/02/24



計算 defocus 補正 (測定 2θ 角度、受光スリット幅を 7 mm \rightarrow 5 mm)



補正過多になっている。6 mmが最良

測定スリット7mmを6mmのdefocus極点で毎回、毎回スリット幅を変更しないで補正するためには6mmのdefocusTABLEを作成すれば良い

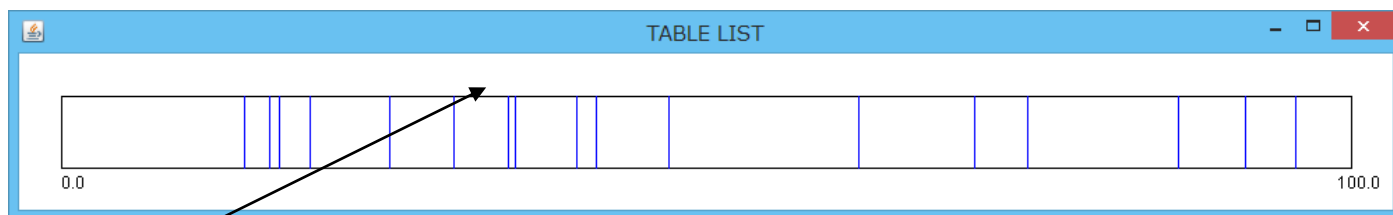
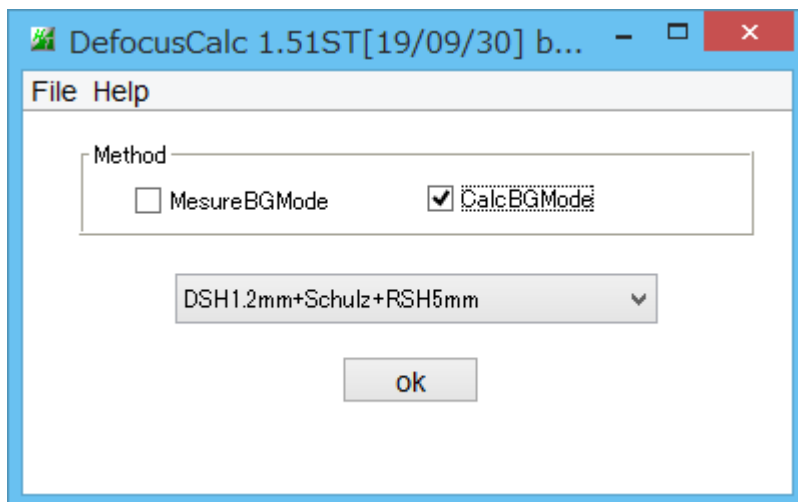
このdefocusTABLEを作成するには、

{111}の $2\theta = 38.42$ 、スリット幅6mm

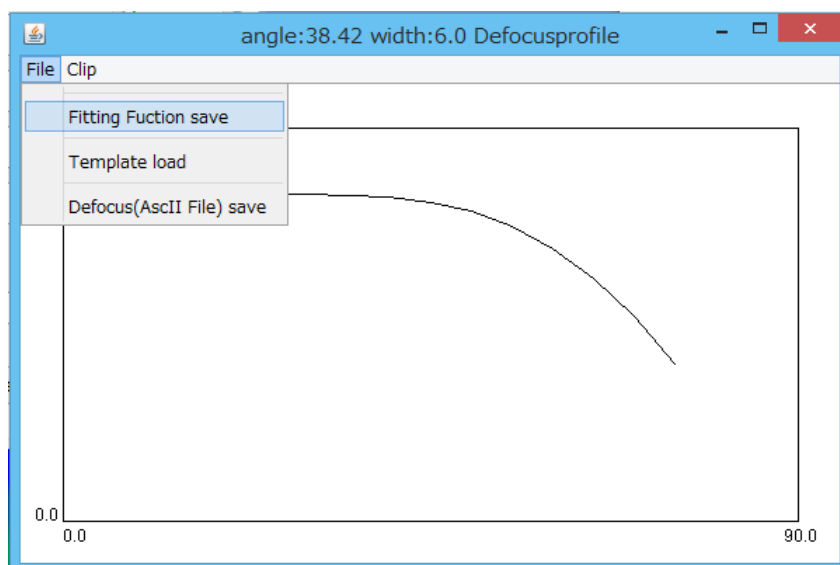
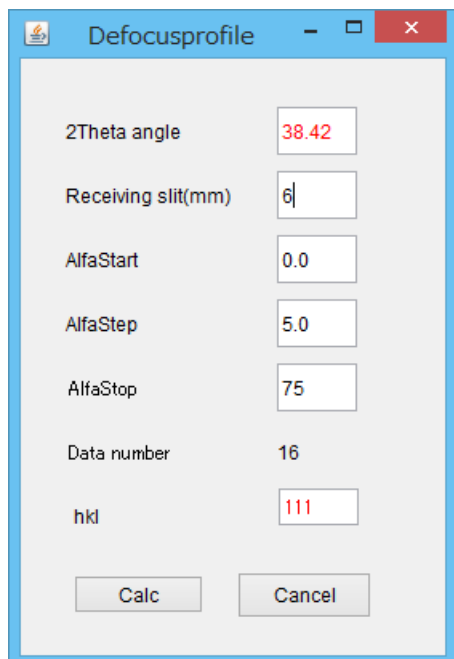
{200}の $2\theta = 44.64$ 、スリット幅6mm

{220}の $2\theta = 65.00$ 、スリット幅6mm を作成する。

ToolKit->DefocusTools->DefocusCalc



この部分をクリックする。



同様に{200},{220}も作成

111-1F.TXT

2019/02/24 15:33

テキスト文書

220-1F.TXT

2019/02/24 15:36

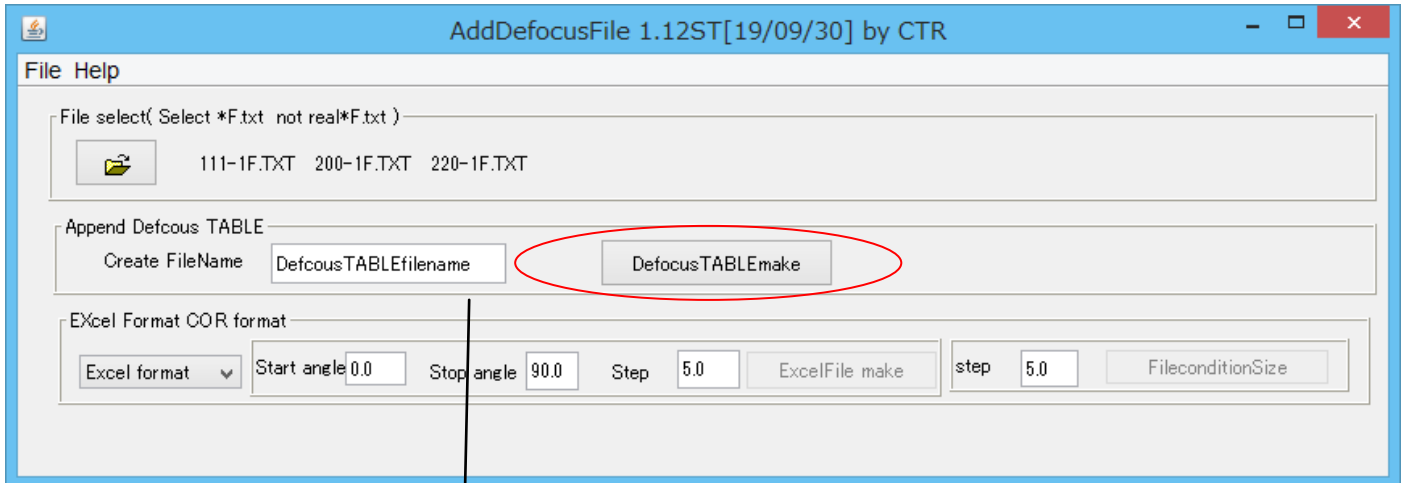
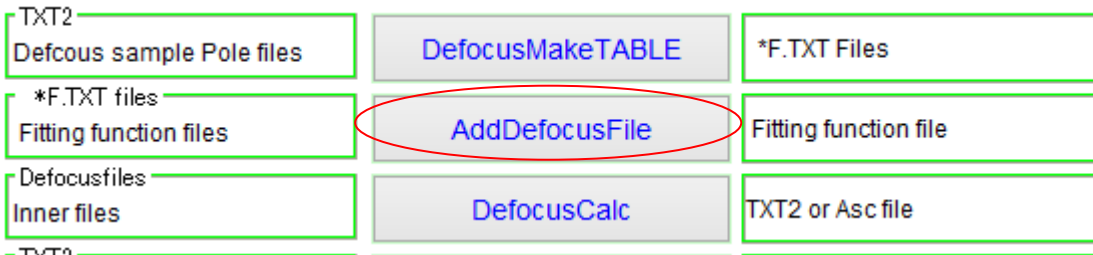
テキスト文書

200-1F.TXT

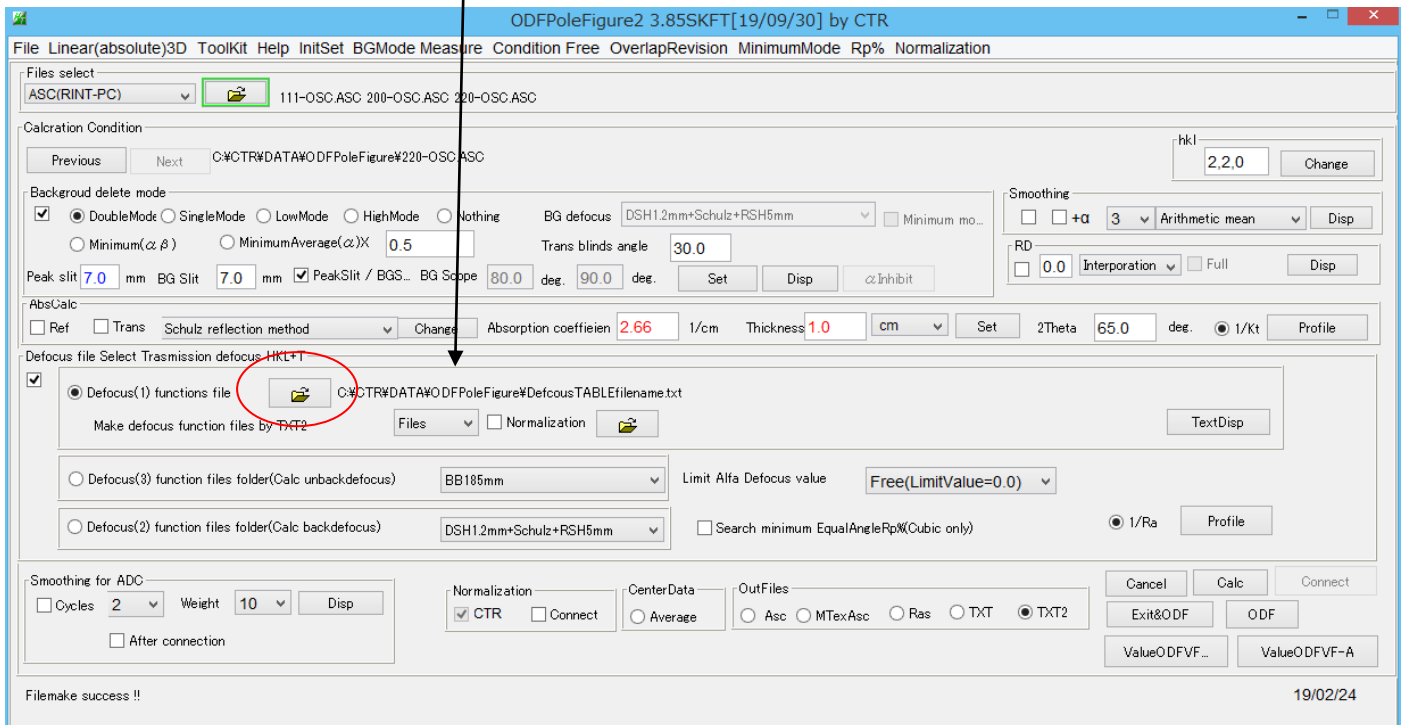
2019/02/24 15:36

テキスト文書

この hkl-1F.txt を 1 つのファイルにする。



defocusファイルのして登録する。



Cubic 以外は ODF Pole Figure 2 → ODF → Value ODFVF でスリット幅を微調整し手持ちの ODF で解析後再計算極点図を Export し、Value ODFVF で最適なスリット幅を求め Cubic と同様に defocus TABLE を作成する。あるいは、計算 defocus のままで補正する。