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スリットの広がりと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20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20角度によりSchulz幅も変化し、概算が計算される。 ODFPoleFigure2ソフトウエアでは、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ソフトウエアで確認します。 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





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ソフトウエア(Ver.3.85以降で説明)

M ODFPoleFigure2 3.85SKFT[19/09/30] by CTR - 🗆 💌
File Linear(absolute)3D ToolKit Help InitSet BGMode Measure Condition Free OverlapRevision MinimumMode Rp% Normalization
Files select ASC(RINT-PC)
Calcration Condition       hkl         Previous       Next         Backgroud delete mode       [0,0,0]         O DoubleMode       SingleMode       LowMode       HighMode       Nothing       BG defocus       DSH12mm+Schulz+RSH5mm       Minimum mon       []       + α       3 × Arithmetic mean v       Disp         Minimum(α β)       MinimumAverage(α)X       0.5       Trans blinds angle       30.0       []       RD       []       0.0       Interporation v       Full       Disp         AbsCalc
Ref Trans Schulz reflection method v Change Absorption coefficien 2.66 1/cm Thickness 1.0 Cm v Set 2Theta 0.0 deg. 1/kt Profile
✓     ○ Defocus(1) functions file     ✓       Make defocus function files by TXT2     Files     ✓   TextDisp
O Defocus(3) function files folder(Calc unbackdefocus)       BB185mm       Limit Alfa Defocus value       Free(LimitValue=0.0)         Image: Defocus(2) function files folder(Calc backdefocus)       DSH12mm+Schulz+RSH5mm       Search minimum Equal Angle Rp%(Cubic only)       Image: 1/Ra
Smoothing for ADC       OutFiles       Cancel       Cancel       Connect         Cycles       2       Weight       10       Disp       OutFiles       OutFiles       Exit&ODF       ODF         After connection       After connection       ValueODFVF_       ValueODFVF_A       ValueODFVF_A       ValueODFVF_A
19/02/24

## 計算defocus計算部分

Defo	cus file Select Trasmission defocus HKL+T		
✓	O Defocus(1) functions file Make defocus function files by TXT2 Files	V Normalization	
	O Defocus(3) function files folder(Calc unbackdefocus)	BB185mm 🗸	Limit Alfa Defocus value
	Defocus(2) function files folder(Calc backdefocus)	DSH1.2mm+Schulz+RSH5mm	Search minimum Equal

# 補正評価部分

-1	Cancel	Ca	ile		Connect	
	Exit&ODF		ODF			
	ValueODFVF		Va	lue(	DDFVF-A	
					19/02/24	

### 測定データで評価

### defocus補正なしで、単に内部規格の場合

# {1,1,1}8207.6 -	0	
▲ 4.59(1762.9) - □ × ▲ 10.72(625.8	)	CTR ×
		Kl         1.1.1         Change           ✓         Minimum mo.         Smoothing
Pet Trans Schulz reflection method CP     Deficus file Select Trasmission defocus HKL+T     O Defocus(1) functions file     Make defocus function files by TXT2     Files	ange Absorption coefficien 2.66 1/cm Thi	hickness 1.0 cm v Set 2Theta 38.42 dec. I/kt Profile
Defocus(3) function files folder(Calc unbackdefocus)     Oefocus(2) function files folder(Calc backdefocus)	BB185mm         V           DSH12mm+Schulz+RSH5mm         V	efocus value Free(LimitValue=0.0) v minimum EqualAngleRpd%(Cubic only) (1/Ra Profile
Smoothing for ADO Cycles 2 v Weight 10 v Disp After connection	Normalization CenterData Outl	tFiles     Cancel     Calc     Connect       Asc     MTexAsc     Ras     TXT     TXT2     Exit80DF     ODF       Value0DFVF-     Value0DFVF-A
Filemake success !!		19/02/24



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defocus補正(測定20角度、受光スリット幅から計算)

₩ {1,1,1}8207.6 - □ ×	🚄 {2,0,0}6890.0 - 🗆 🛛	🛿 {2,2,0}2068.4 - 🗆 🛛 🖄	
			Backgroud delete mode
			🗹 💿 DoubleMod ( 🔾 SingleMode 🔾 Low
		and a state	O Minimum(αβ) O MinimumA
1000		and the second sec	Peak slit 70 mm BG Slit 70 mm
			CTR – 🗆 ×
₩ 4.42(1981.2) - □ ×	Ø.65(680.4) - □ ×	⊿ 3.5(565.3) - □ ×	
			hki 1,1,1 Change
			Smoothing
1000		🕐 egge 🥗	RD RD RD R R
			Cm v Set 2Theta 38.42 deg. (e) 1/Kt Profile
Make defocus function files by T.	T2 Files V Normalizat	ion 🚅	TextDisp
O Defocus(3) function files folder(Ca	aic unbackdetocus) BB185mm	Limit Alta Defocus value	Free(LimitValue=0.0) V
Defocus(2) function files folder(Ca	alc backdefocus) DSH1.2mm+Schulz+F	SH5mm 🗸 🗌 Search minimum Equa	alAngleRpX(Cubic only)   I/Ra Protile
Smoothing for ADC	Normalization	CenterDataCutFiles	Cancel Calc Connect
After connection	CTR Co	nnect O Average O Asc O MTe:	xAsc O Ras O TXT I TXT2 Exit&ODF ODF
			ValueODFVF ValueODFVF-A
Filemake success !!			19/02/24



### 計算defocus補正(測定2 $\theta$ 角度、受光スリット幅を7mm->6mm))

	Backgroud delete mode
	🗹 💿 DoubleMode 🔿 SingleMode 🔿 LowMode 🤇
	O Minimum(αβ) O MinimumAverage(α
	Peak slit <mark>6</mark> mm BG Slit 6 mm ✔ PeakSI
	IR – ¬ ×
4.4(2014.1) - □ ×	% Normalization
	hkl       2,2,0       Change         Minimum mo+α_3 v       Arithmetic mean v       Disp         RD       0.0       Interporation v       Full         Zinhibit       Set       2Theta       65.0       deg.       1/Kt
O Defocus(1) functions file     Make defocus function files by TXT2     Files     Normalization	TextDisp
O Defocus(3) function files folder(Calc unbackdefocus) BB185mm V Limit Alfa Defocus value	Free(LimitValue=0.0) v
Defocus(2) function files folder(Calc backdefocus)     DSH1.2mm+Schulz+RSH5mm      Search minimum Ei	ualAngleRp#(Cubic only)
Smoothing for ADC Cycles 2 V Weight 10 V Disp After connection	TexAsc O Ras O TXT  TXT TXT2 Cancel Calc Connect Exit&ODF ODF ValueODFVF-A ValueODFVF-A
Filemake success !!	19/02/24



# 計算defocus補正(測定2 $\theta$ 角度、受光スリット幅を7mm->5mm))

▲ {1,1,1}8207.6 - □ ×	₩ {2,0,0}6890.0 - □ ×	✓ {2,2,0}2068.4 - □ ×	Deck around delate made
			Backgroud delete mode
			🗹 💿 DoubleModε 🔾 SingleMode 🔾 LowMo
			O Minimum(αβ) O MinimumAve
			Peak slit <mark>5.0</mark> mm BG Slit 5.0 mm 🗹
			Rp% Normalization
	Ø.12(728.2) - □ ×	Ø 3.42(589.7) - □ ×	
			1,1,1 Change
1998		And the second second	Smoothing
		· · · · · · · · · · · · · · · · · · ·	Minimum mo
			Cm v Set 2Theta 38,42 deg.  1/Kt Profile
Defocus file Select Trasmission defocus HK	a l		
Defocus(1) functions file	<b>2</b>		
Make defocus function files by T	TXT2 Files V Normalization	on 🗃	TextDisp
O Defocus(3) function files folder(C	Calc unbackdefocus) BB185mm	Limit Alfa Defocus value	Free(LimitValue=0.0) V
Defocus(2) function files folder(C		ur Couch minimum Four	(IngleRe#(Cubic cpk))  (1/Ra Profile
Belocus(2) function mes folder(0	DSH12mm+Schulz+RS		
Smoothing for ADC	Normalization	CenterData OutFiles	Cancel Calc Connect
	CTR Con	nect Average Asc MTex	Asc O Ras O TXT  TXT2 Exit&ODF ODF
			ValueODFVF ValueODFVF-A
Filemake success !!			19/02/24
	ValueODEVE 2 24SKET[1	9/09/301 by CTR	- • ×
File Help Resolusion:5.0 Equa	alAngle TextDisplay FolderDisp P	olefiguredisp A-Iron-Measure-Integra	IData LABOTEX
Normalized Polefigure 111 100			
Recalculated Polefigure 111 100	110	Average= 4.7 %	
rupai [4.1 [0.0	<b>4</b> .7		49/02/24
3.0 %			19/02/24
1.5			
$\langle \rangle$			
		$\sim$	
	-		
0.0			2
	×X/		



補正過多になっている。6mmが最良

測定スリット7mmを6mmのd e f o c u s 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d e f o c u s TABLEを作成すれば良い

このdefocusTABLEを作成するには、

- $\{1111\}$ 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->DefousTools->DefocusCalc



111-1F.TXT
 220-1F.TXT
 200-1F.TXT

2019/02/24 15:33	テキスト文書
2019/02/24 15:36	テキスト文書
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。

- TXT2 Defcous sample Pole files	DefocusMakeTABLE	*F.TXT Files
F.TXT files Fitting function files	AddDefocusFile	Fitting function file
- Defocusfiles Inner files	DefocusCalc	TXT2 or Asc file

▲ AddDefocusFile 1.12ST[19/09/30] by CTR - □ ×
File Help
File select(Select *F.txt_not real*F.txt)         I11-1F.TXT_200-1F.TXT_220-1F.TXT
Append Defcous TABLE Create FileName DefcousTABLEfilename DefocusTABLEmake
Excel Format COR format          Excel format       Start angle 0.0       Stop angle 90.0       Step 5.0       ExcelFile make       step 5.0       FileconditionSize

defocusファイルのして登録する。

<b>24</b>	ODFPoleFigure2 3.85SKFT[19/09/30] by CTR – 🗆 🗙
File Linear(absolute)3D ToolKit Help InitSet BGMode Meas	re Condition Free OverlapRevision MinimumMode Rp% Normalization
Files select ASC(RINT-PC) V 200-OSCASC 200-OSCASC 2	20-OSC ASC
Calcration Condition           Previous         Next         C#CTR#DATA#ODFPoleFigure#220-OSC	ASC hkl
Backgroud delete mode	Smoothing
🗹 💿 DoubleMode 🔿 SingleMode 🔿 LowMode 🔿 HighMode 🔿	Nothing BG defocus DSH12mm+Schulz+RSH5mm Υ Minimum mo Δ + α 3 v Arithmetic mean v Disp
O Minimum(αβ) O MinimumAverage(α)X 0.5 Peak slit 7.0 mm BG Slit 7.0 mm IV PeakSlit / BGS BG Sco	Trans blinds angle     30.0       ppe     80.0       deg.     90.0       deg.     Set       Disp     α Inhibit
AbsCalc AbsCalc Ref Trans Schulz reflection method  Change	Absorption coefficien 2.66 1/cm Thickness 1.0 Cm v Set 2Theta 65.0 deg. (1/Kt Profile
Defocus file Select Trasmission defocus HKL+T	
Defocus(1) functions file     C*CTR*DATA¥ODFF     Make defocus function files by TAT2     Files	PoleFigure¥DefcousTABLEfilenametxt       Image:
O Defocus(3) function files folder(Calc unbackdefocus)	Limit Alfa Defocus value Free(LimitValue=0.0) V
O Defocus(2) function files folder(Calc backdefocus)	H12mm+Schulz+RSH5mm v Search minimum EqualAngleRpX(Cubic only)  () 1/Ra Profile
Smoothing for ADC Cycles 2 V Weight 10 V Disp After connection	ormalization     CenterData     OutFiles     Cancel     Calc     Connect       I CTR     Connect     Average     Asc     MTexAsc     Ras     TXT     TXT2     Exit&ODF     ODF
	ValueUDFVF-A ValueUDFVF-A
Filemake success !!	19/02/24

Cubic以外はODFPoleFigure2―>ODFー>ValueODFVF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、ValueODFVFで
最適なスリット幅を求めCubicと同様にdefocusTABLEを作成する。
あるいは、計算defocusのままで補正する。