

r a n d o mが残存する可能性データの解析

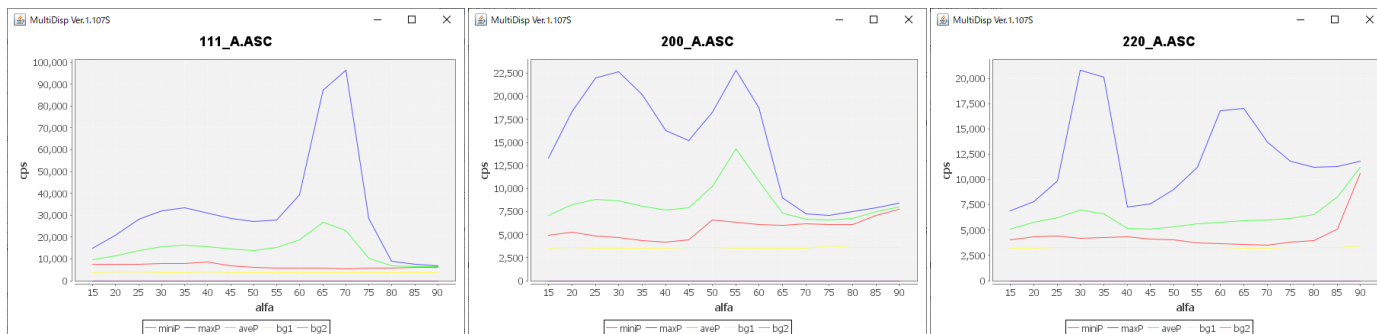
2021年08月11日

HelperTex Office

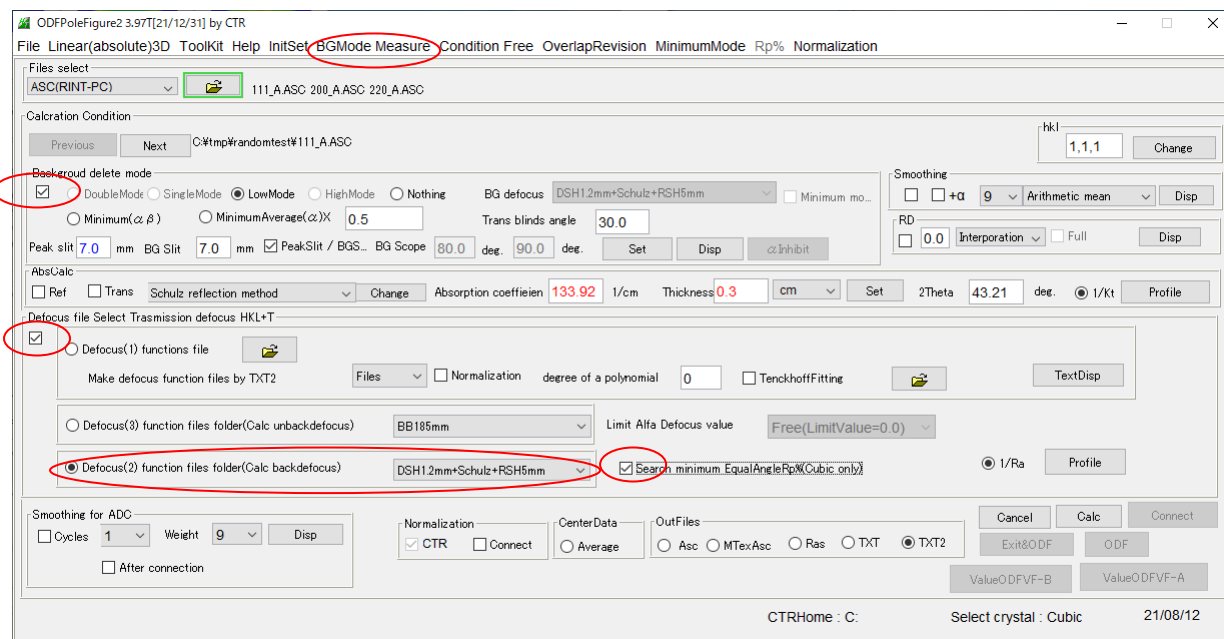
概要

random level機能によるrandom定量に関し、過去に測定したデータからrandomが残存する可能性のあるデータ解析を行ってみました。

データ処理 {111}、{200}、{220}



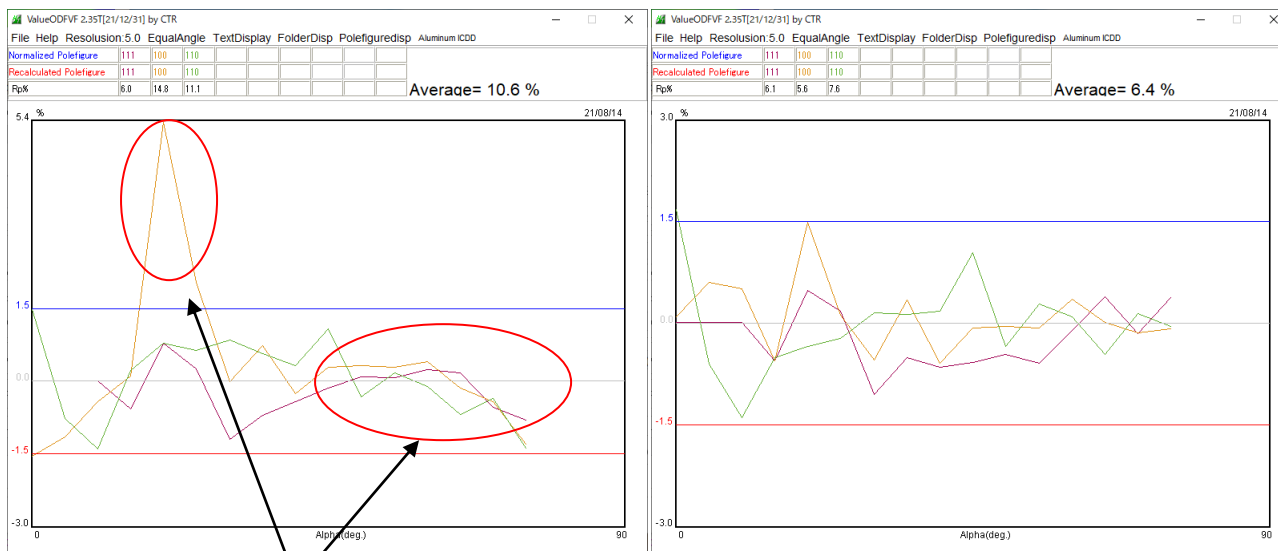
各 α のバックグラウンドは β 方向の最小値に近い強度を示す、バックグラウンド測定は良好



バックグラウンド (measuremode)削除、defocus (内部計算) 処理、最適化 Rp%処理を行う

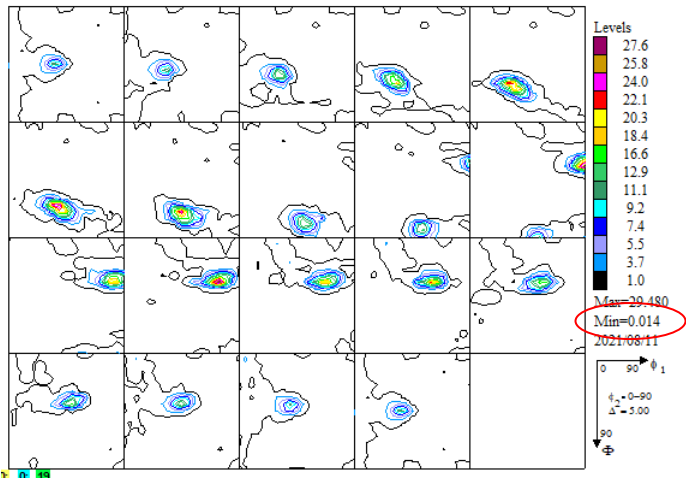
Defocus 補正なし(ValueODFVF-B)

内部計算 defocus+最適化R p % (ValueODFVF-A)

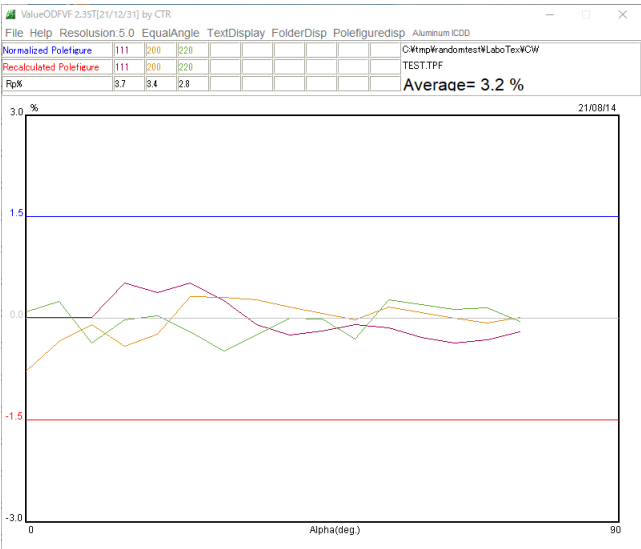


この部分が改善される

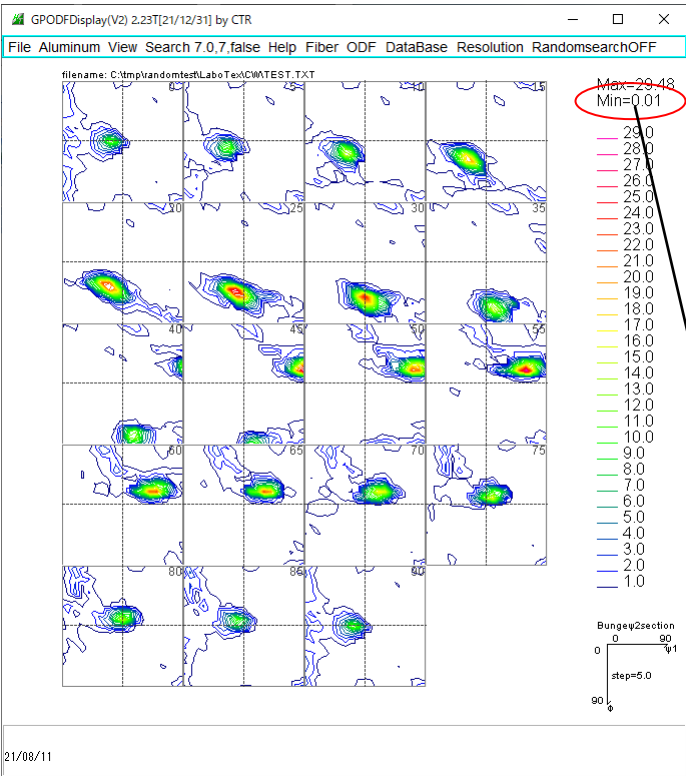
LaboTexで解析



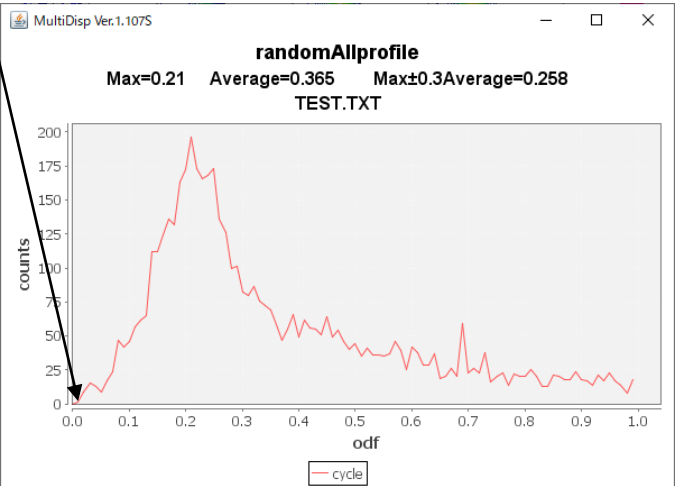
r a n d o mの存在を示しています。



測定時に予測したR p %より低く計算されている

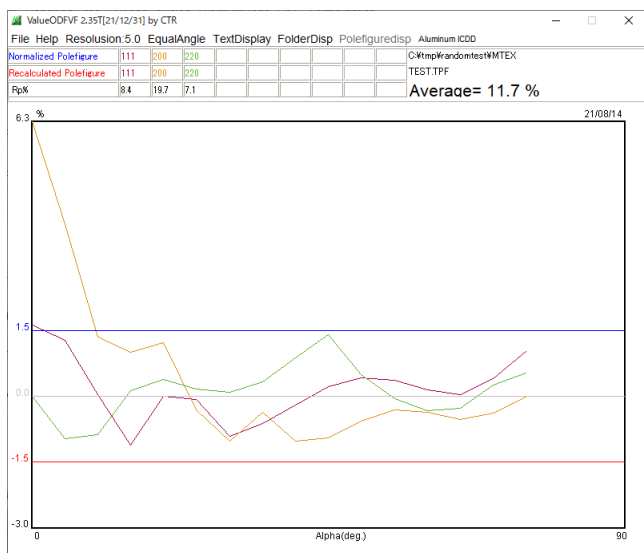
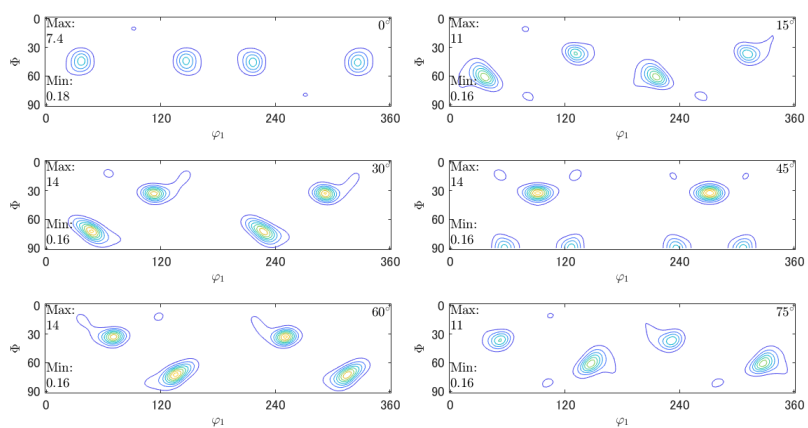
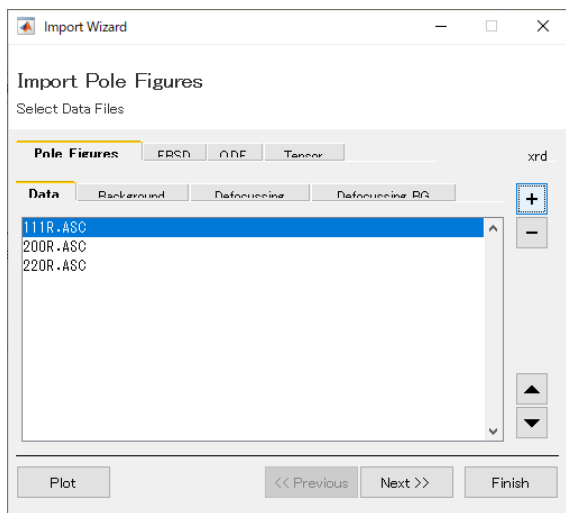


Random の存在を示している

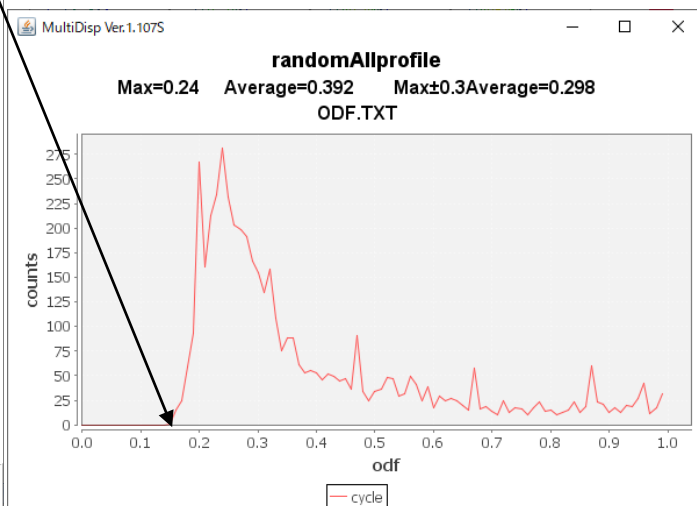
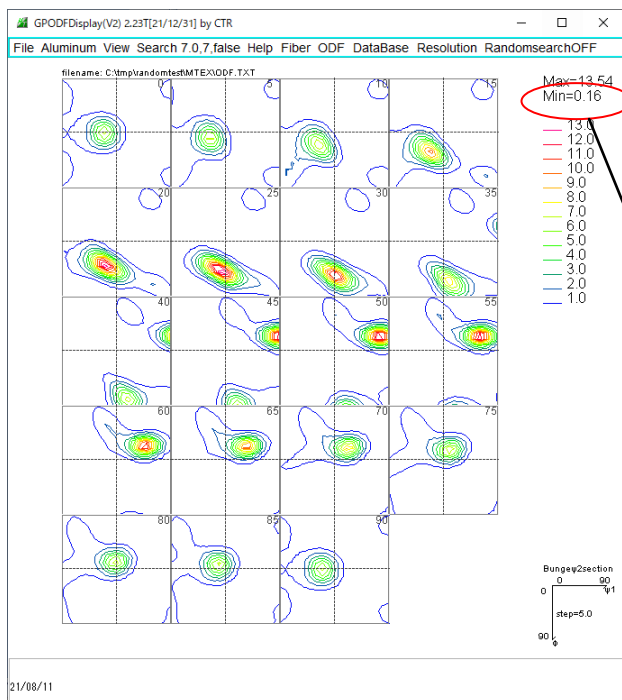


r a n d o m成分= 2 1 %

MT E Xで評価

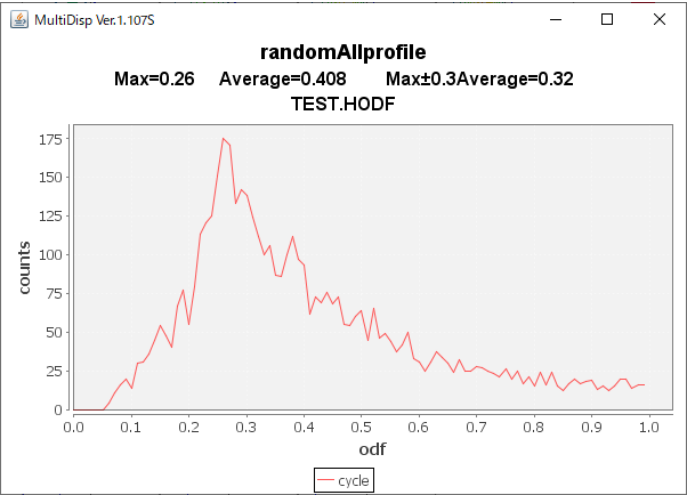
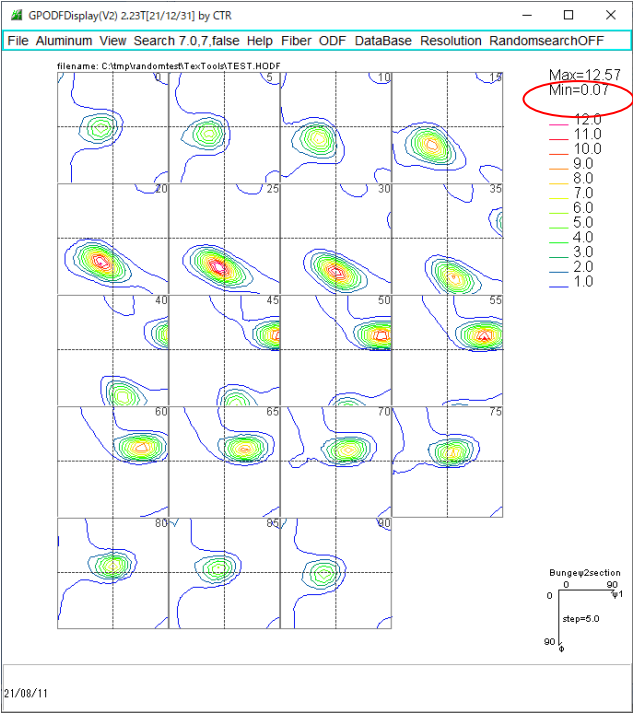
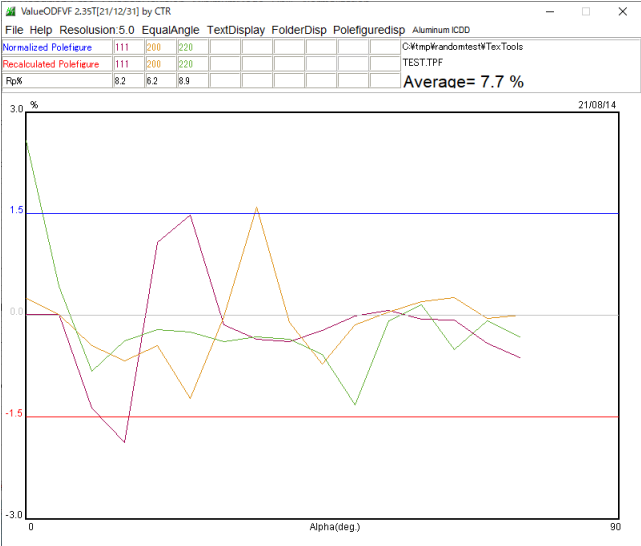
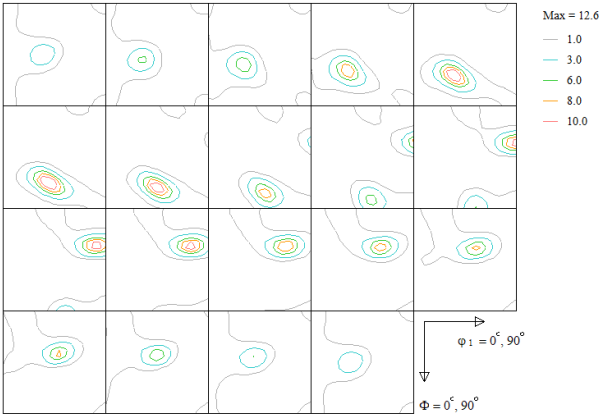
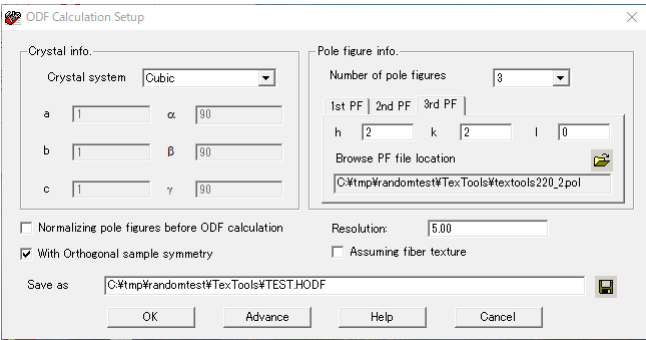


R p %はなぜか低い



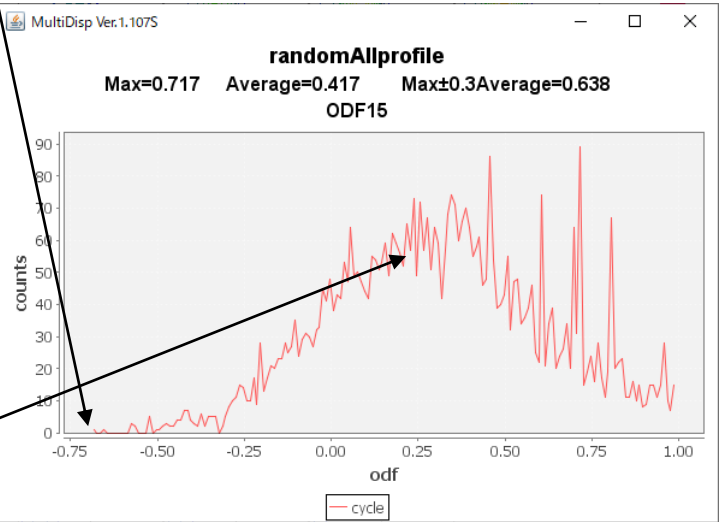
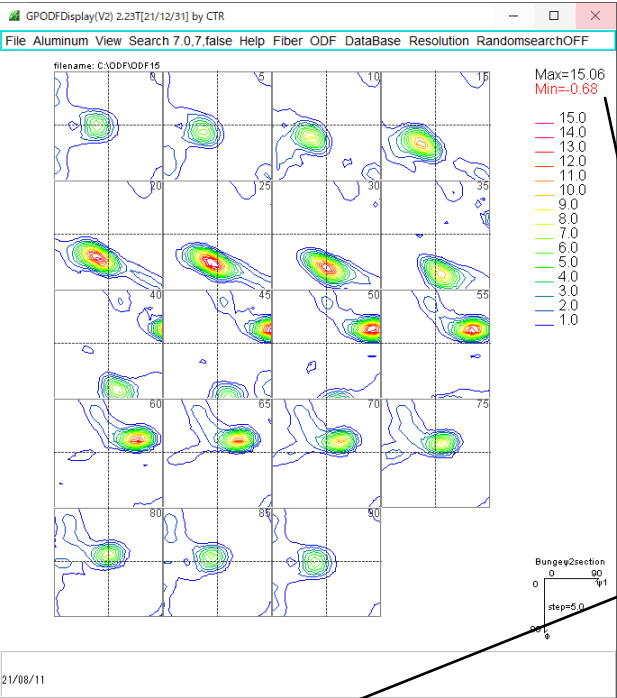
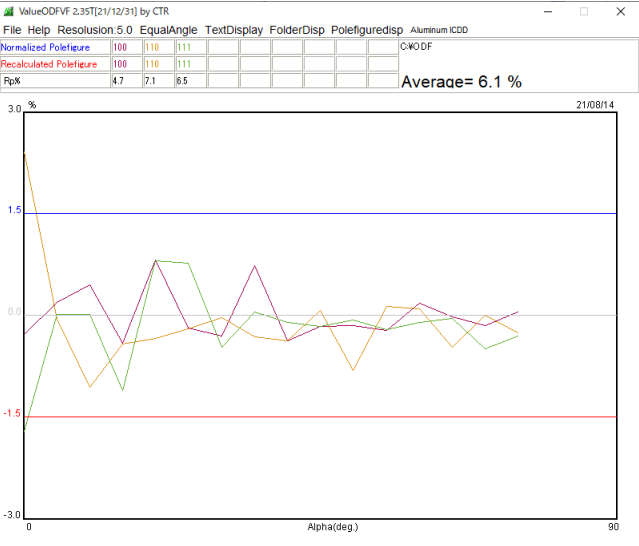
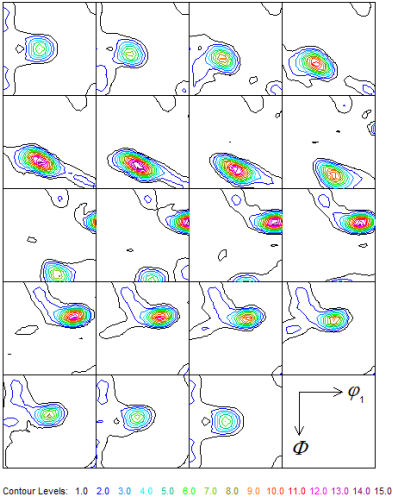
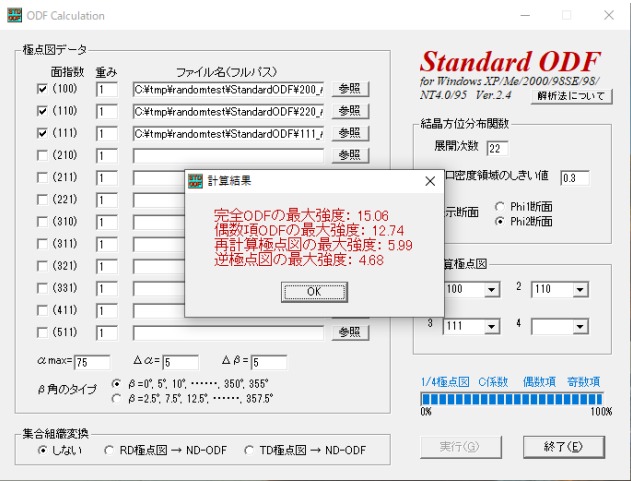
r a n d o m成分= 2 4 %

TexTools



random成分=26%

Standard ODF



この辺の可能性はあるが数値計算は難しい
StandardODF の方位密度 1.0 以下はこのようなマイナス方位も存在する (オーバーシュート)

まとめ

`random`のODF値は全て 1.0 となる。

配向材料に `goss=20%`であれば、`random=80%`で方位密度では 0.8 を示す。

この方位密度 0.8 は、ODF の格子点 $18 \times 19 \times 19$ の大部分を占め、

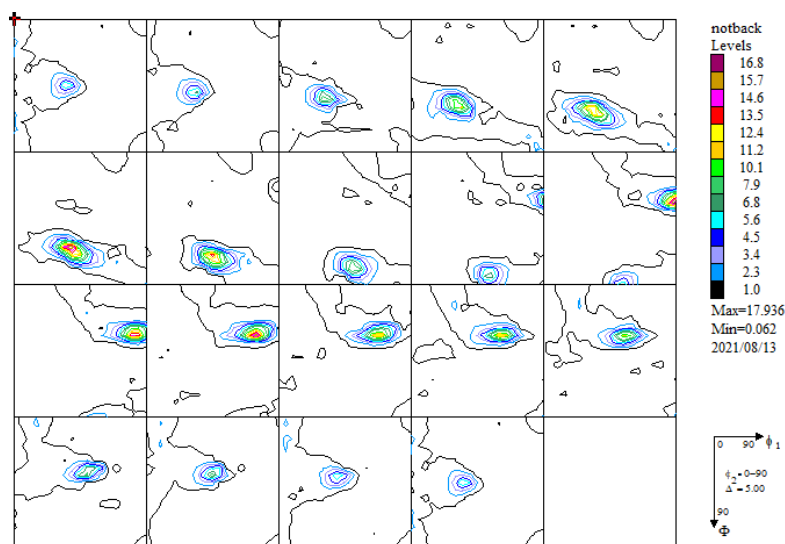
方位密度に対する頻度グラフ (`randomlevel`) で大きなピークになります。

配向試料にも `random`が存在する試料もあり、この `randomlevel`機能は使える可能性があります。

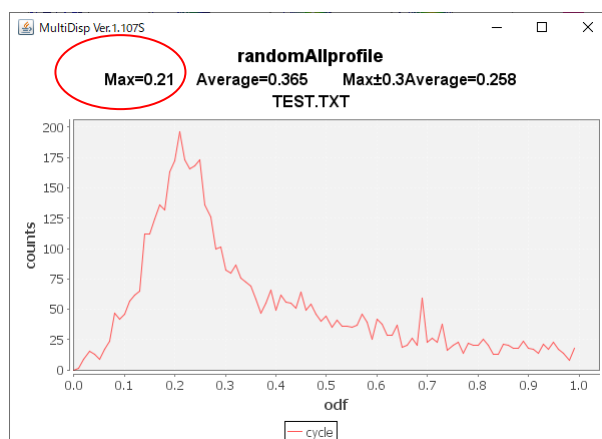
ODF により計算手法は異なるが、`random`は同じような値が計算される
ぜひご利用ください。

`random`機能で重要なのは、`background`の正確な削除です。

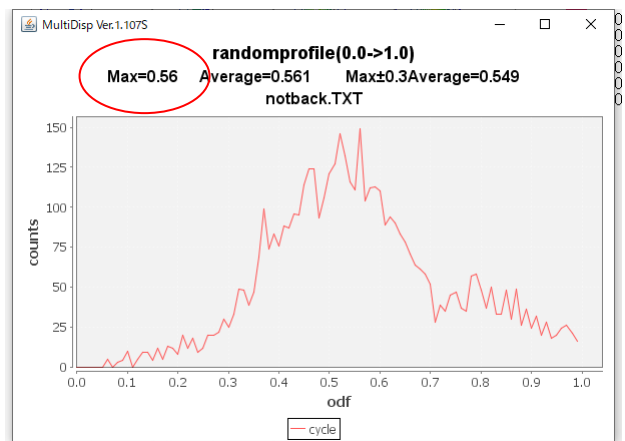
今回のデータを `background`削除せずに解析を行うと



`background`削除結果



`background`削除なし



`random` = 21% から 56% に増えます。

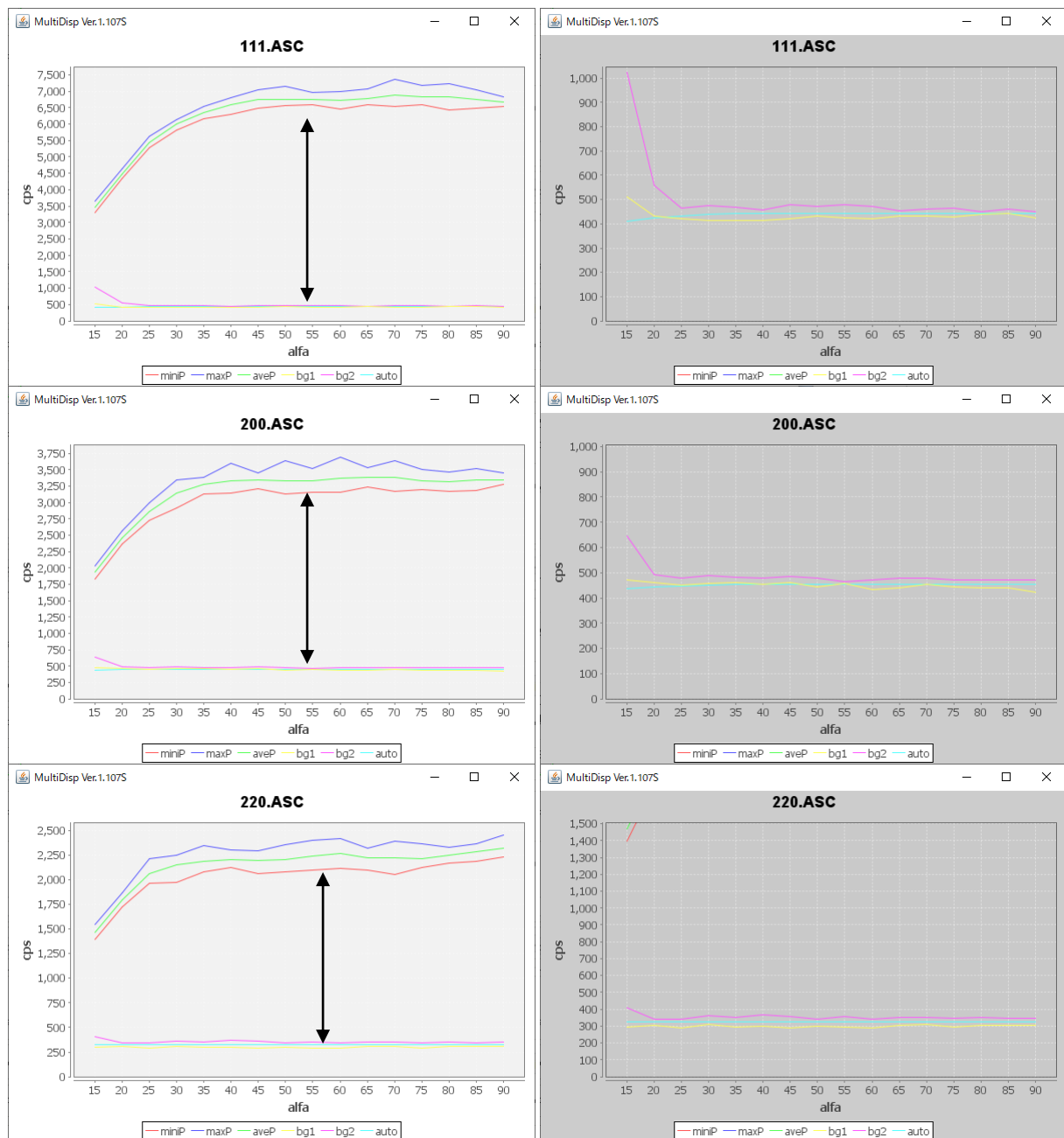
`background`を削除しないと `background`の `random`として計算されます。

`background`の測定は統計変動を考慮して測定を行います

通常、極点測定の 1 点測定時間の 10 倍程度で測定を行います。

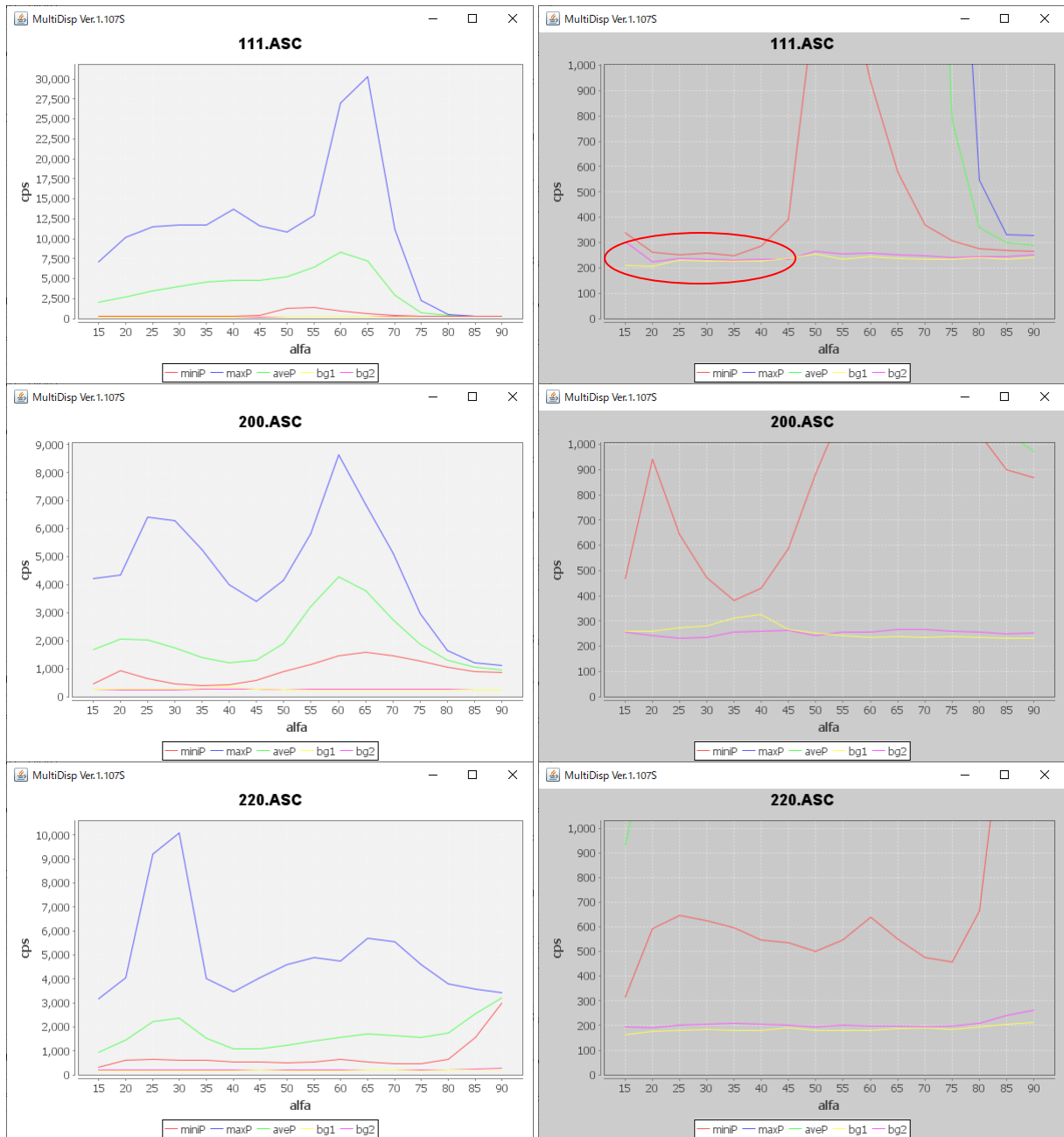
粉末データの測定のバックグラウンド

backgroundは黄色で目立たないので、背景色を変更して表示



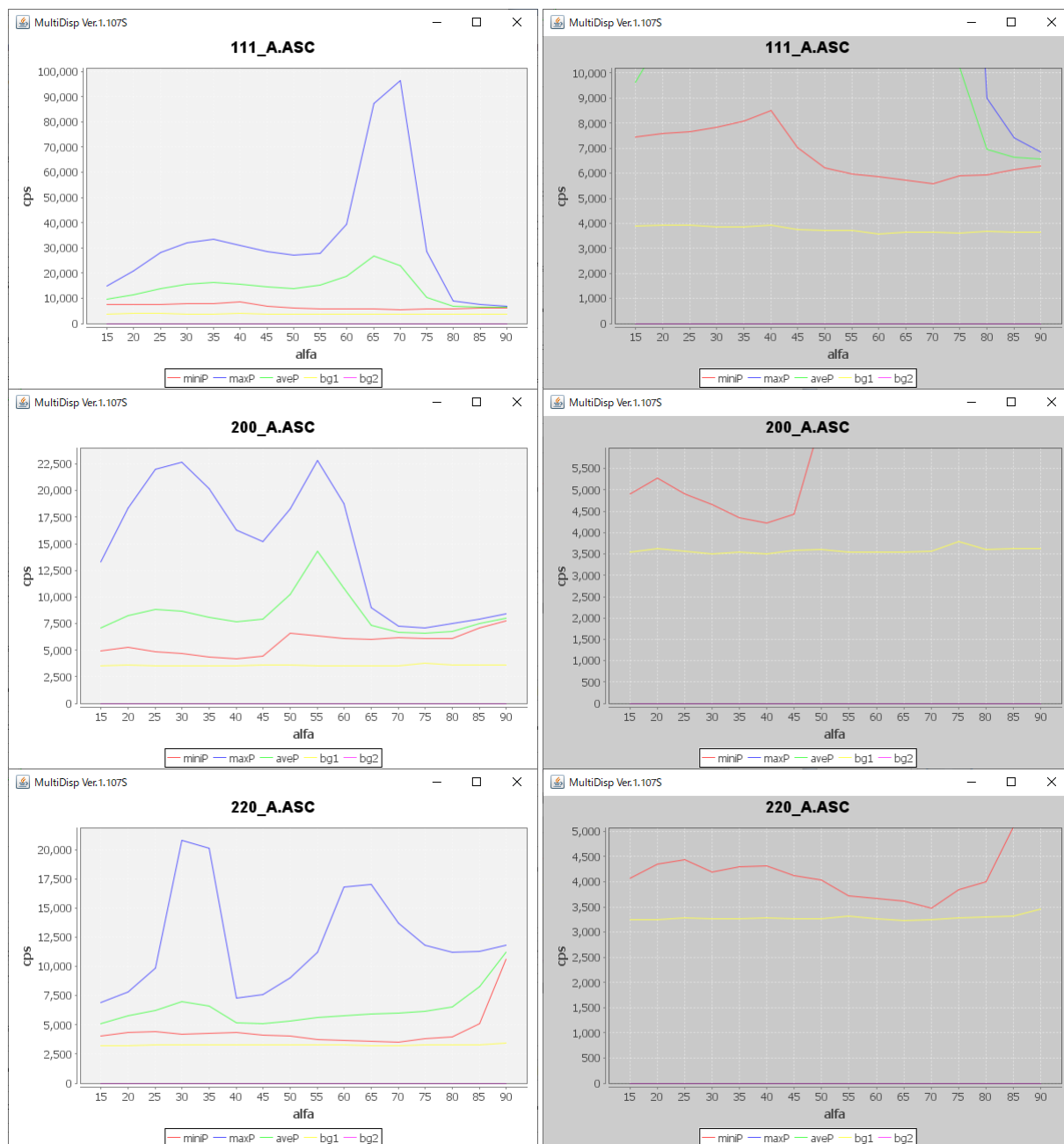
矢印の部分が r a n d o m成分

randomを含まない測定データのバックグラウンド



最小プロファイルとバックグラウンドプロファイルがほぼ一致する部分がある。

今回の測定のバックグラウンド



すべての極点図で α 毎の最小値とバックグラウンドが離れている。(縦軸スケールも参考に)
赤線 (α 毎の β 方向最小値) と黄色 (background) の間に random が存在する。
background がデコボコしていたら修正してください。

以下の機能を組み合わせて修正を行ってください。

BGMode Measure Condition Free Ov

Measure

Straight(Optional)

Defocus(Optional)

Measure(Calc)

Minimum

All background

BG defocus

Trans blinds an

deg. 90.0

Background delete mode

☐

☐ DoubleMode

☐ SingleMode

☒ LowMode

☐ HighMode

☐ Nothing

BG defocus

DSH1.2

☐ Minimum(α β)

☐ MinimumAverage(α)X

0.5

Peak slit

7.0

mm

BG Slit

7.0

mm

☒ PeakSlit / BGS...

BG Scope

80.0

deg.

90.0

deg.

Trans blinds angle

あるいは直接 ASC ファイル b a c k g o r u n d データを修正します。

PoleBackgroundEditor 1.04ST[21/12/31] by CTR

File Help Excel

InputFile(ASC)

Editor

BG Peak average 1./2

Peakdata

☒ Magnification (X)

1.0

☐ BackgroundPlus

Create AscFile

Create

バックグラウンド修正例 (BGMode Defocus)

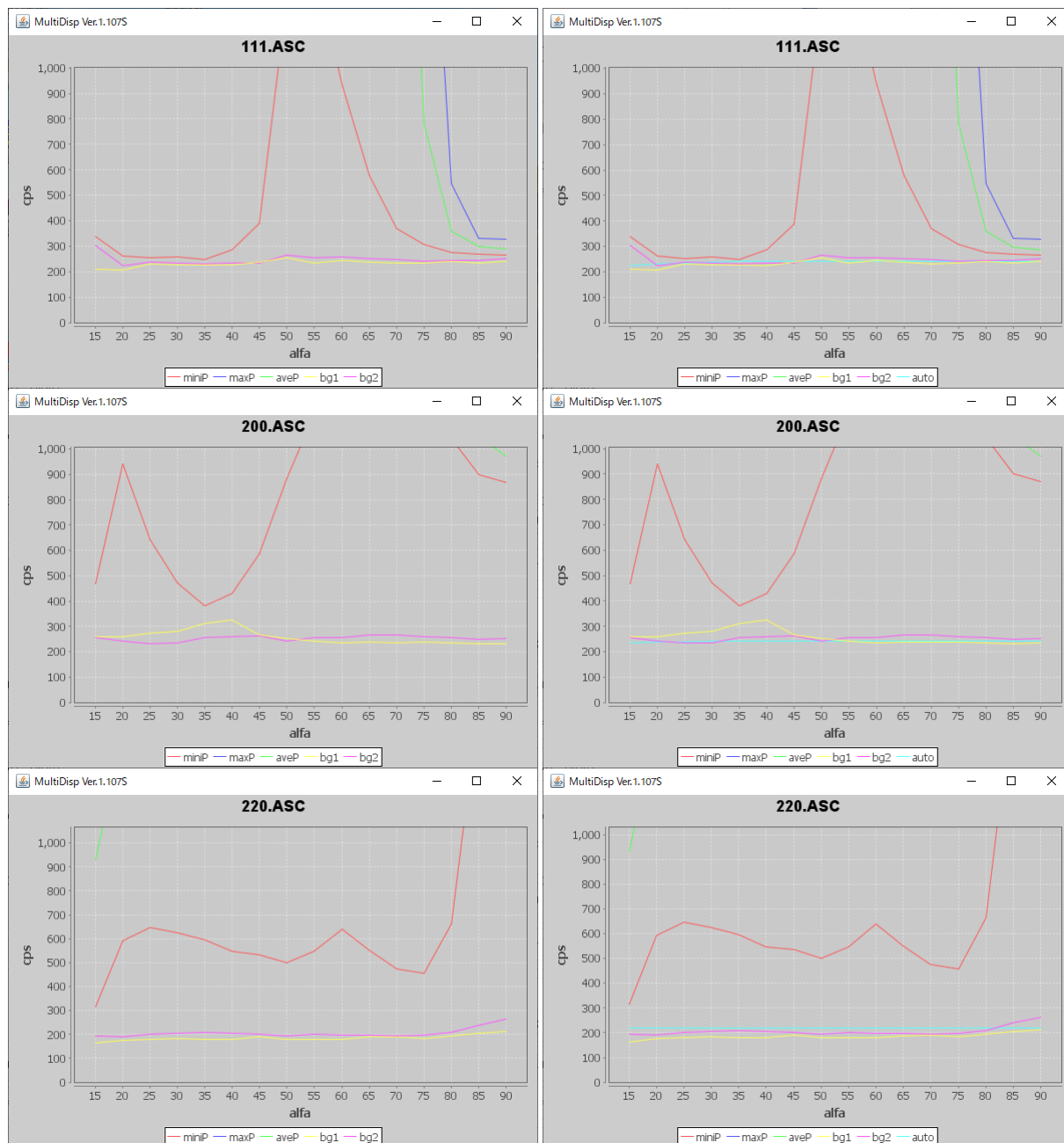
Background delete mode

☒ ☒ DoubleMode ☐ SingleMode ☐ LowMode ☐ HighMode ☐ Nothing BG defocus DSH1.2m

☐ Minimum(α β) ☐ MinimumAverage(α)X 0.5 Trans blinds angle

Peak slit 7.0 mm BG Slit 7.0 mm ☒ PeakSlit / BGS... BG Scope 80.0 deg. 90.0 deg.

バックグラウンドは Low と High で測定されていて、平均値で扱い範囲は 80->90 で算出
右図の auto (水色) が計算されたバックグラウンドです。

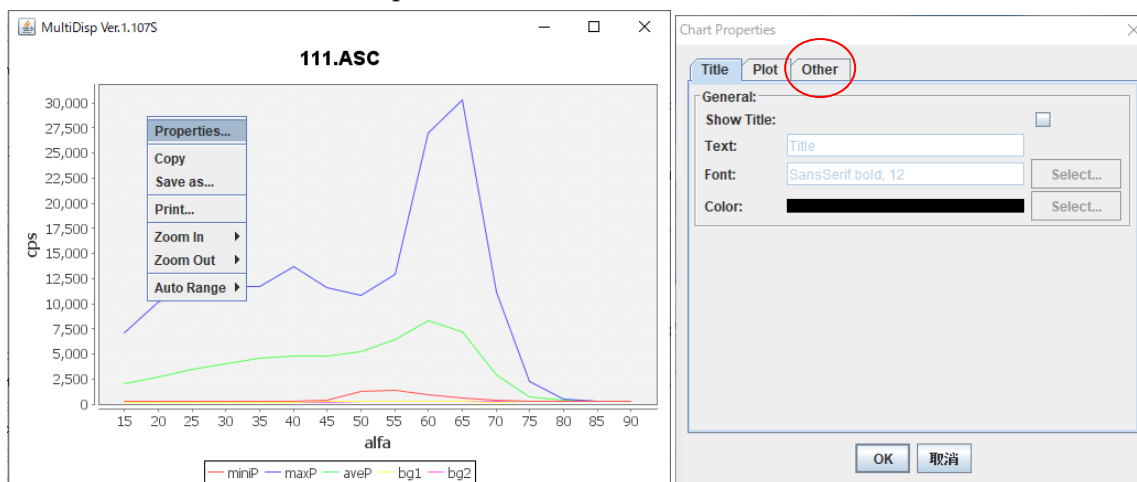


まとめ 2

極点図から方位解析を行う場合、極点処理におけるバックグラウンド除去と `defocus` が確実に
行われている事が重要です。測定バックグラウンドプロファイルを確認し、必要なら修正してください。
`cubic` の場合、測定データの `Rp%` を確認し、最適な `defocus` 補正を行った後、ODF 解析を
行って下さい。更にODF 解析後の `Rp%` の確認と必要なら、あるいは `cubic` 以外では
`ValueODFVF` による再 `defocus` 補正を行ってください。
単に、極点処理とODF 解析を機械的に行うと、矛盾する結果の場合、検証出来ません。
注意：平滑化は `Rp%` が改善されるが結果も改善されるか分かりません。

`background` の背景変更

マウス右クリック Properties の Other



Other の background paint の Select から色を選択

