

背景

- 放射光ビームラインが整備され今まで測定が不可能であった微結晶からの回折データ集種が可能になった。回折実験に用いる結晶が小さくなっていくと、今までの様に一つの結晶だけをループに拾うのが困難でありそのため2個以上の結晶の回折イメージが重なったデータを収集する機会が増えている。
- また、結晶が割れているまたは多結晶である場合もある。

コンセプト

- 今まで使用していたツールに簡単なソフトウェアを組み合わせることにより、2種類の方位の結晶からの回折像を処理する。

利点

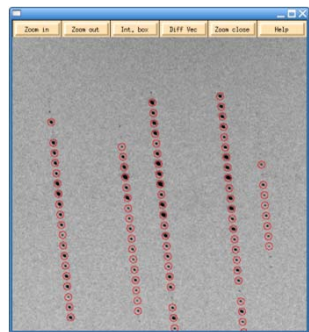
2種類の方位の結晶からの回折点が重なっている場合、強度データを正確に見積もることができないため、そのようなデータはノイズとなる。

- ①重なっている反射は取り除くことにより、データの精度を上げる。
- ②2つの方位の回折データをそれぞれ処理できるので、観測反射数が増える。

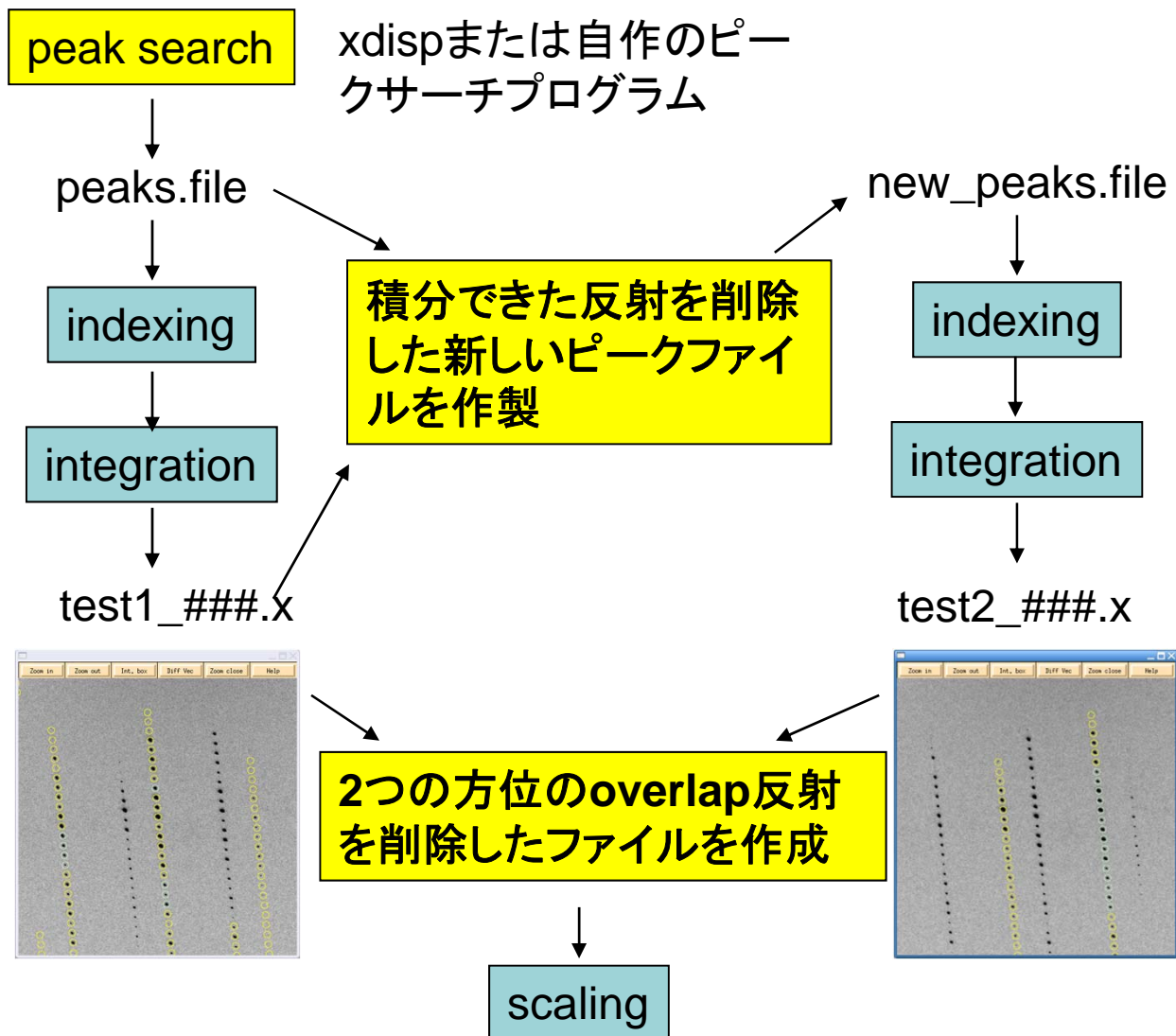
2種類の方位の結晶が混ざっている回折イメージの処理

第1方位の処理

第2方位の処理



test001.img



他のソフトの状況

- autoPROCでは同様のことが可能
- XDSでも同様のことが可能

```
$cp SPOT.XDS SPOT.XDS.1
```

```
$grep " 0          0          0 " ¥ SPOT.XDS.1 > SPOT.XDS
```

```
# ゼロの間はスペース7個
```

```
$ xds
```

```
#return IDXREF step
```