

薄膜材料の極点図測定とODF解析

2014年12月12日

HelperTex Office

山田 義行

odftex@ybb.ne.jp

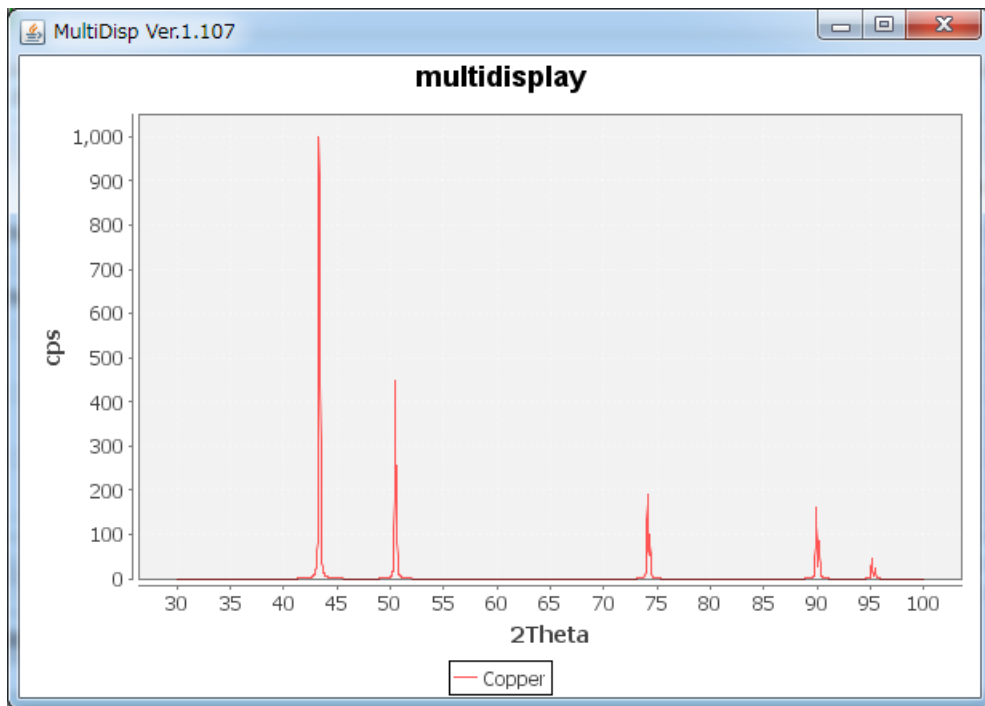
不明な点をご質問下さい。データ解析も行います。

概要

近年、薄膜材料の方位測定として、極点が利用されているが、極点測定の信頼性に関して議論されていない為、本資料を作成してみました。

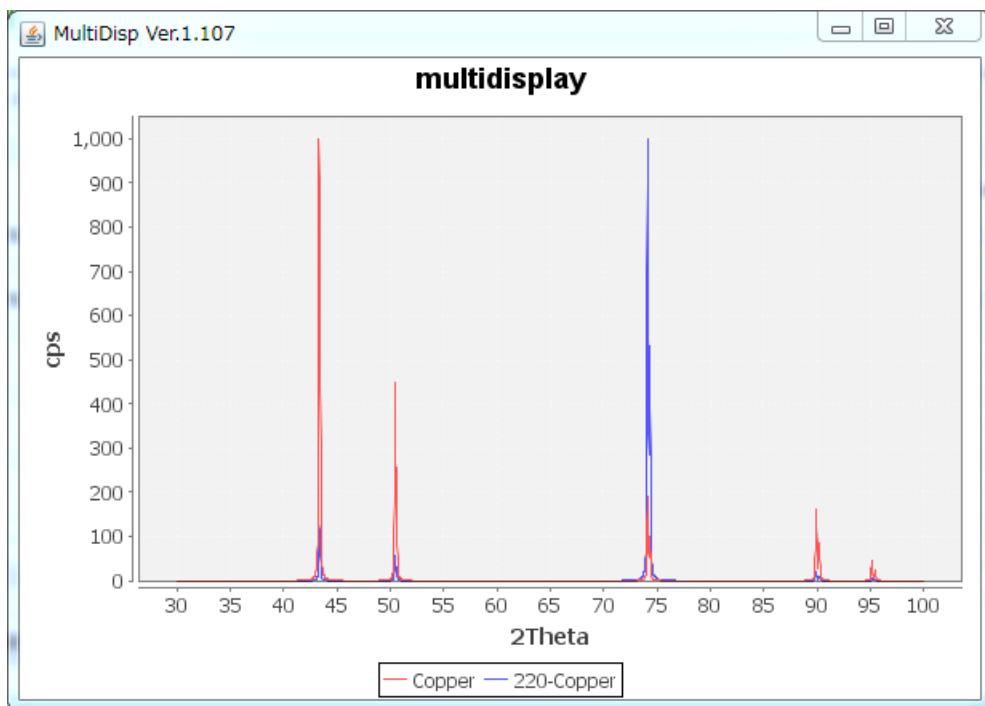
ほとんどの薄膜材料では、繊維配向（//ND-Fiber）になる事が多く、以下説明ではCuの{220} //ND-Fiberとして扱います。

無配向Cu材料 θ/θ プロファイル



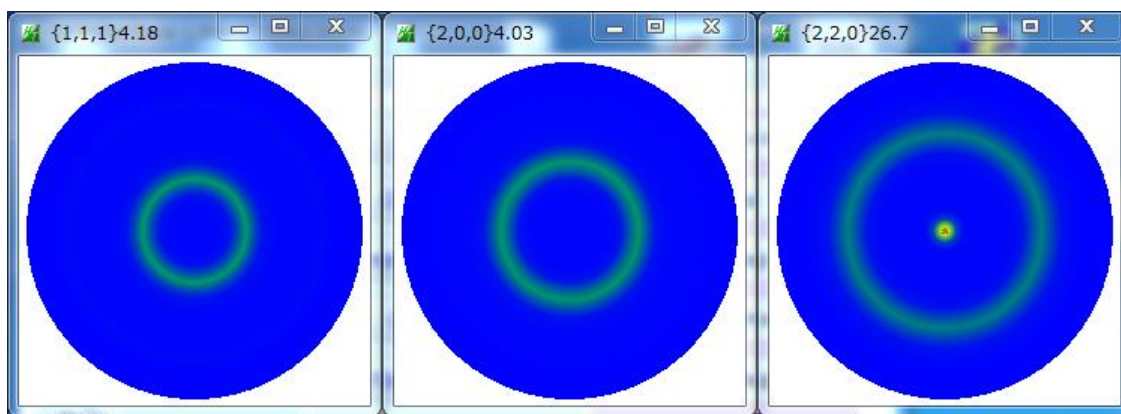
{220} 88%配向のCu材料プロファイル

無配向材料から{220} //NDに80%配向した θ/θ プロファイル (青)



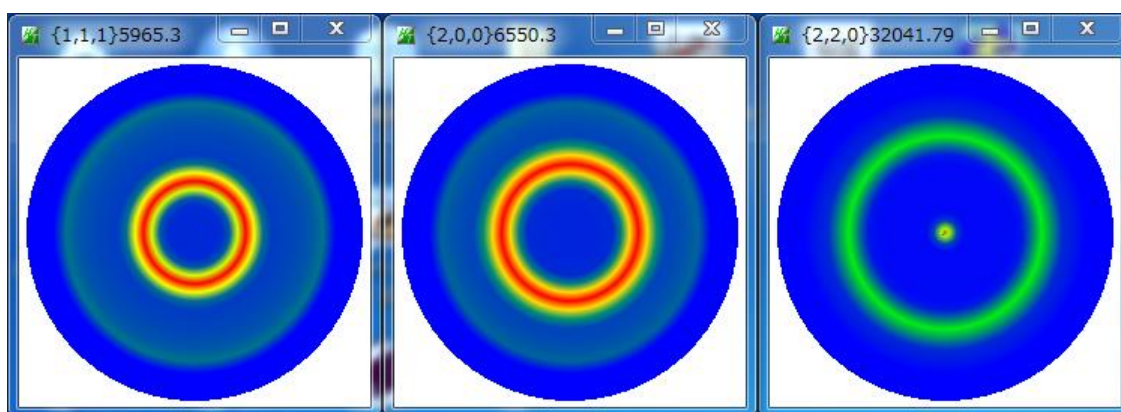
このように、ICDD強度比と異なった場合、配向があります。

{220} // ND、88%配向のCu材料の極点図のシュミレーション



実際に測定される極点図予測

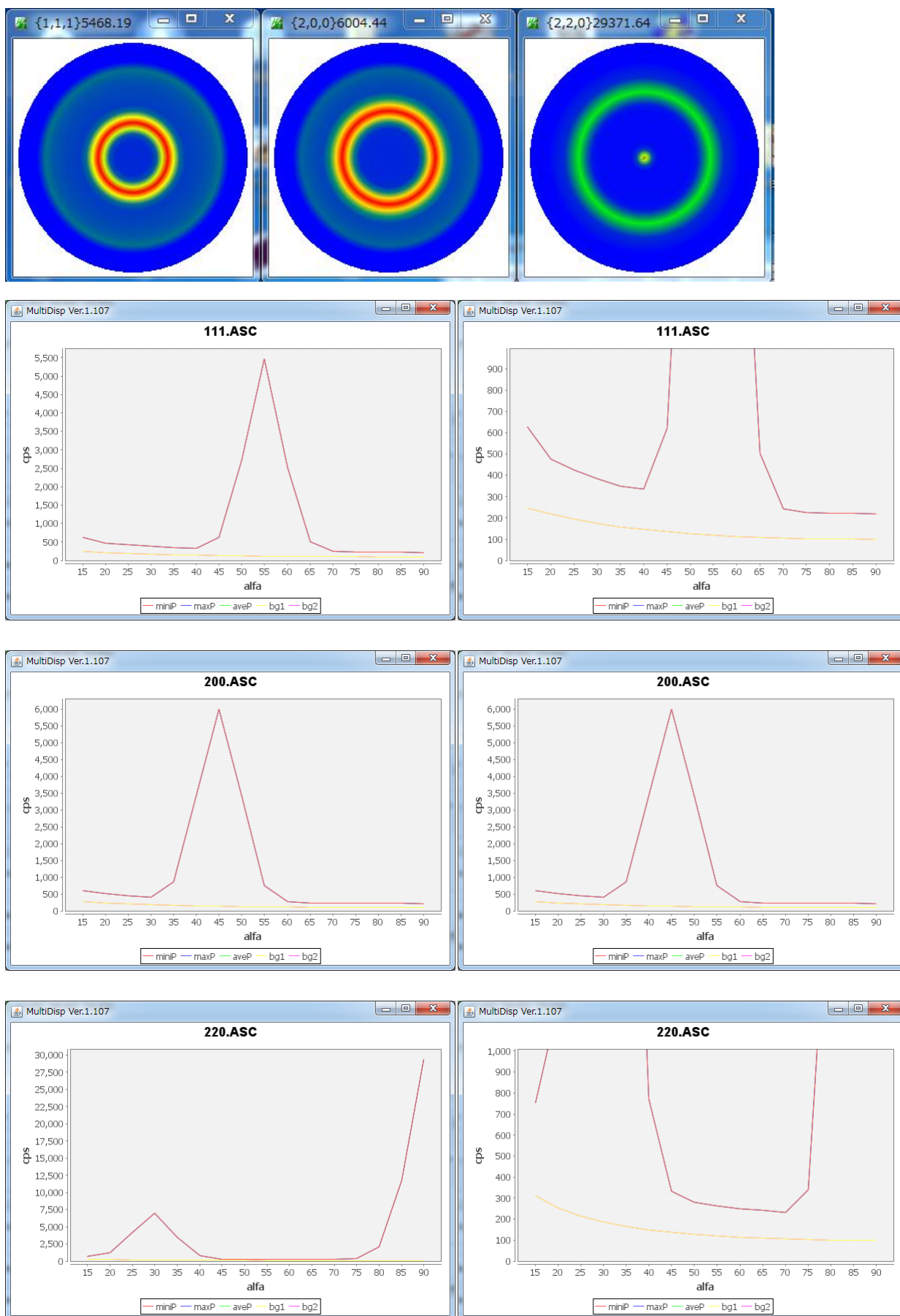
XRDで測定される極点図では、バックグラウンド、吸収、defocusの影響を受けます。しかし、薄膜の場合 吸収 > defocus と考えられます。



極点測定では、

バックグラウンドを正確に測定
試料の吸収係数を正確に測定
が重要です。

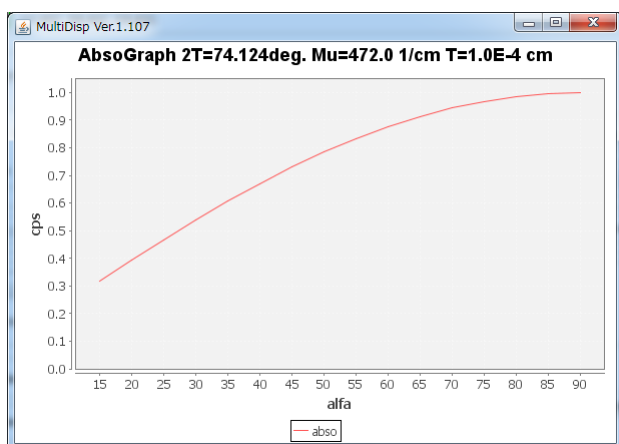
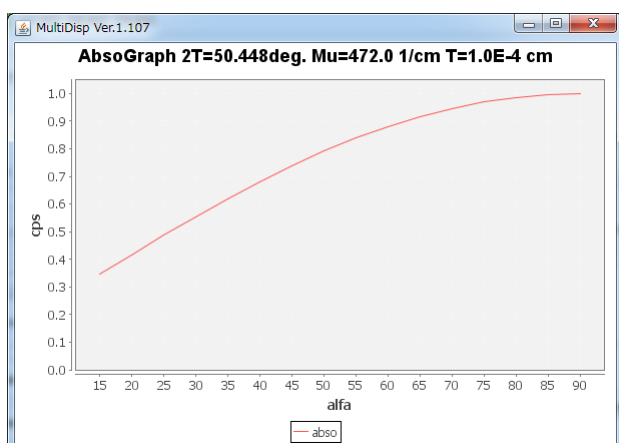
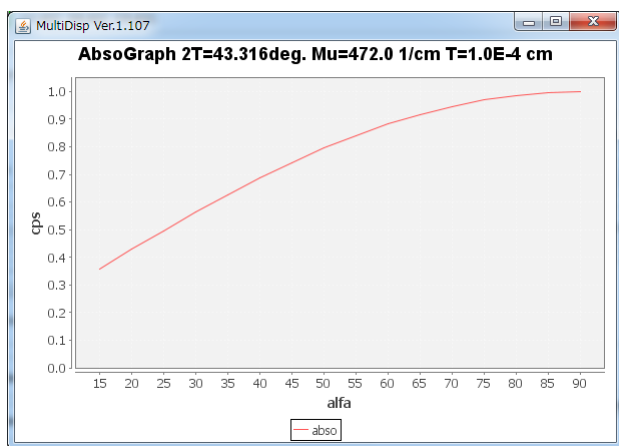
α プロファイルとバックグラウンド



バックグラウンドが極点図の外周付近で盛り上がっているのは吸収の影響と考えられます。

薄膜の場合、試料を傾けて測定するので、極点図の周辺では反射に寄与する体積が中心付近より増えている為と考えられます。

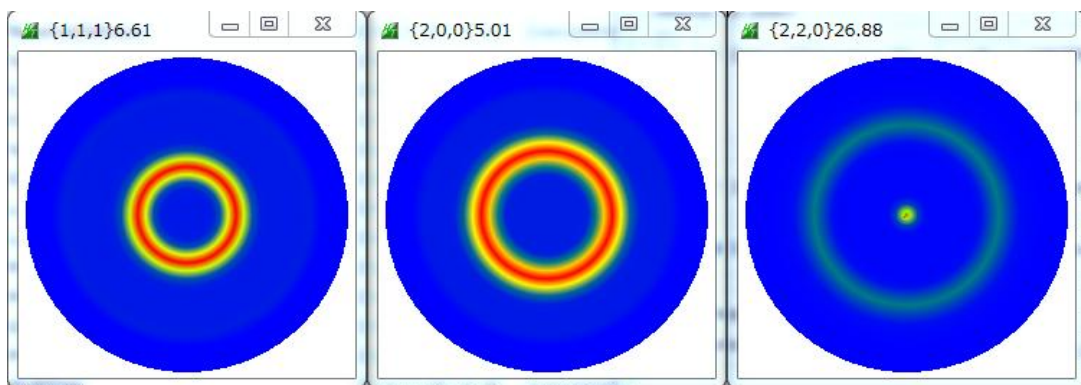
薄膜材料の場合、BG削除と吸収補正を行う（最初は defocus 補正を行わない）。各反射の吸収補正量



吸収補正は吸収係数と試料の厚さ、測定 2θ 、 α 角度から計算されます。

薄膜材料の defocus は吸収と区別が付き難い。

BG 削除と吸収補正を行った極点図



ODF 解析入力データ

Lattice constant

Material: Copper.txt

Structure Code(Symmetries after Schoenfiles): 7 - O (cubic)

a: 1.0 <=b: 1.0 <=c: 1.0 alfa: 90.0 beta: 90.0 gamm: 90.0

Initialize: Start

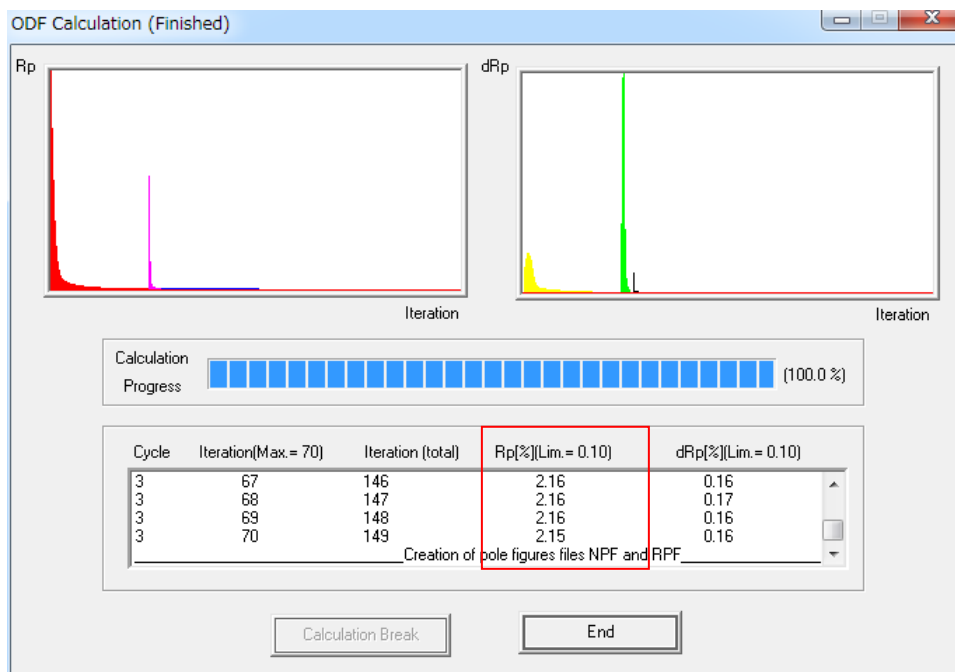
getHKL<-Filename

AllFileSelect

PF Data

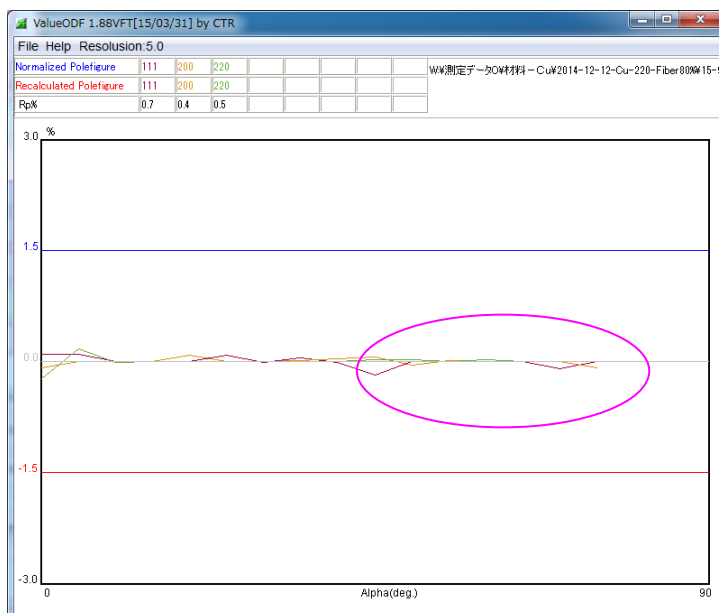
SelectFile(TXT(b,intens),TXT2(a,b,intens.))	h,k,l	2Theta	Alfa Area	AlfaS	AlfaE	Select
111_chUB00S_2.TXT	1,1,1	43.316	0.0->75.0	0.0	75.0	<input checked="" type="checkbox"/>
200_chUB00S_2.TXT	2,0,0	50.448	0.0->75.0	0.0	75.0	<input checked="" type="checkbox"/>
220_chUB00S_2.TXT	2,2,0	74.124	0.0->75.0	0.0	75.0	<input checked="" type="checkbox"/>

ODF 解析の E r r o r



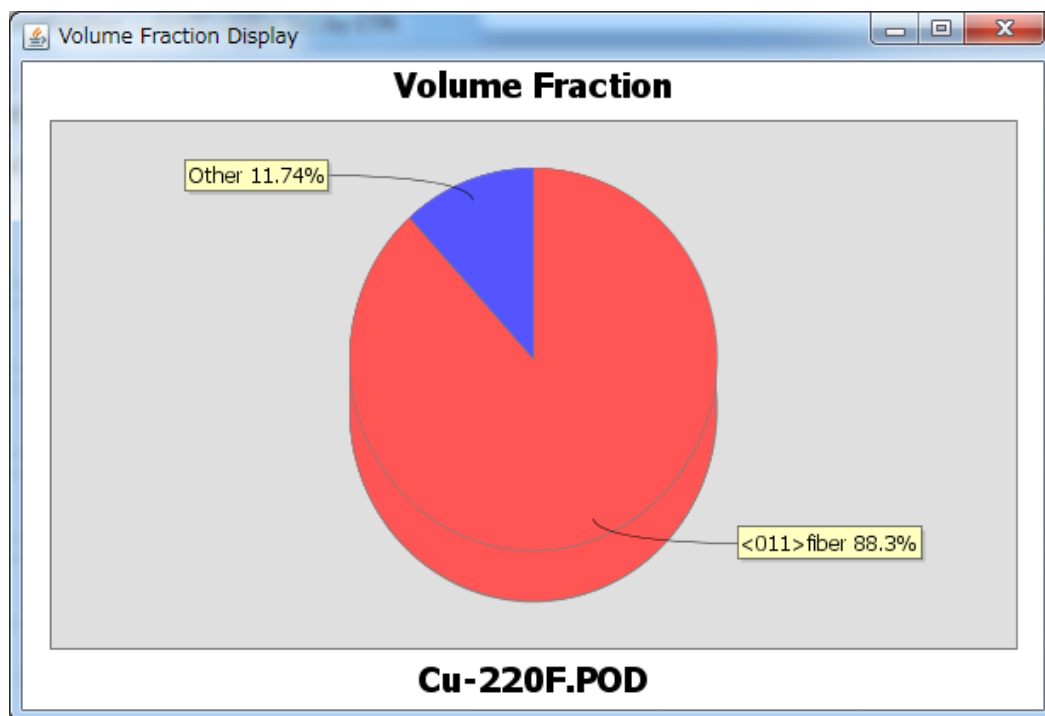
R p %は入力極点図の信頼性である。

極点図を E x p o r t して、吸収や、d e f o c u s に問題がないかチェックする。

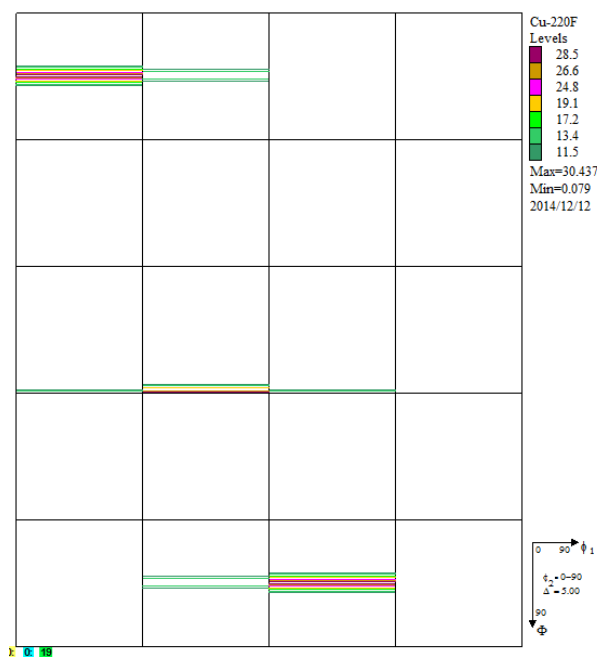


右肩上がりの場合
吸収補正が足りない
このデータは E r r o r が少ない

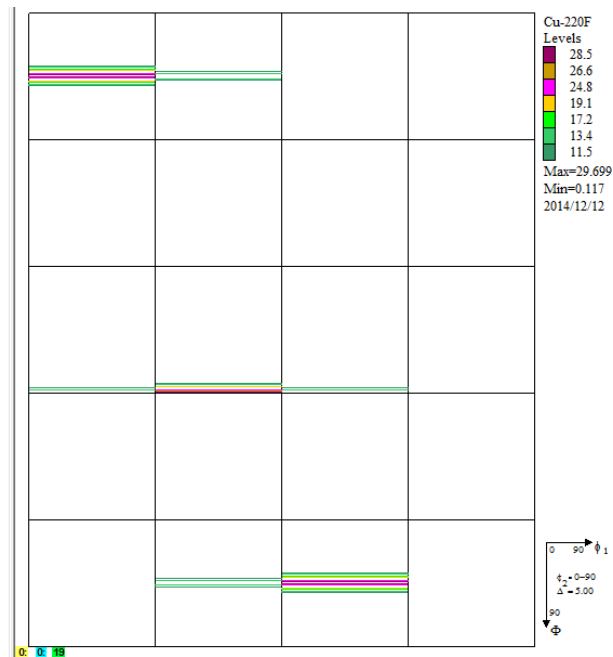
Volume Fraction 計算



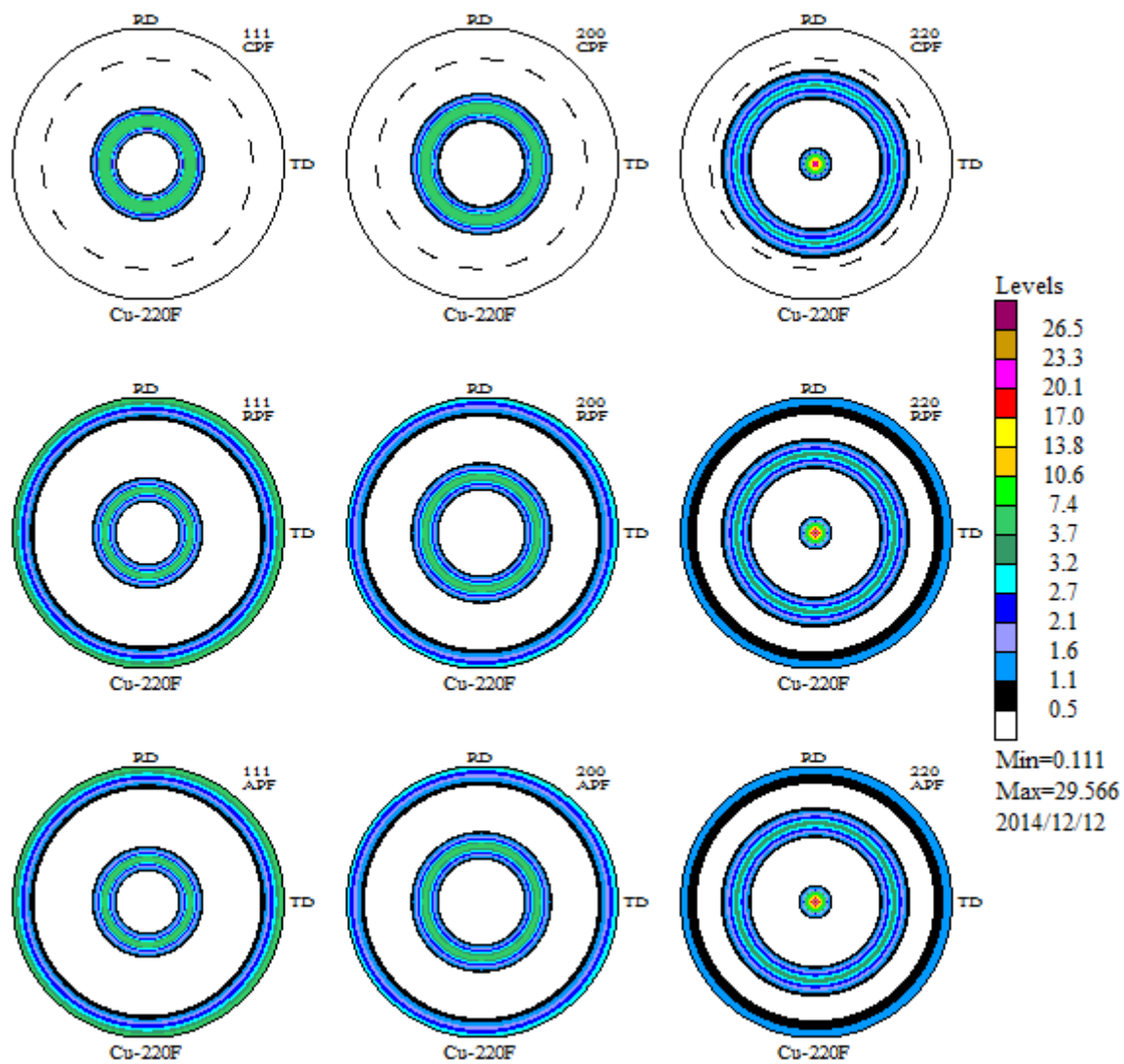
左：入力極点図のODF 解析



右：VolumeFraction 結果の ODF 図



入力極点図（上）、再計算極点図（中央）、VolumeFraction 結果(下)



B G削除、吸収補正を行わない場合

Lattice constant

Material: Copper.txt

Structure Code(Symmetries after Schoenfiles): 7 - O (cubic)

a: 1.0, b: 1.0, c: 1.0, alpha: 90.0, beta: 90.0, gamma: 90.0

Initialize: Start

getHKL<-Filename

AllFileSelect

PF Data

SelectFile(TXT(b,intens),TXT2(a,b,intens.))	h,k,l	2Theta	Alfa Area	AlfaS	AlfaE	Select
111_chS_2.TXT	1,1,1	43.316	0.0->75.0	0.0	75.0	<input checked="" type="checkbox"/>
200_chS_2.TXT	2,0,0	50.448	0.0->75.0	0.0	75.0	<input checked="" type="checkbox"/>
220_chS_2.TXT	2,2,0	74.124	0.0->75.0	0.0	75.0	<input checked="" type="checkbox"/>

ODF Calculation (Finished)

Calculation Progress: 100.0%

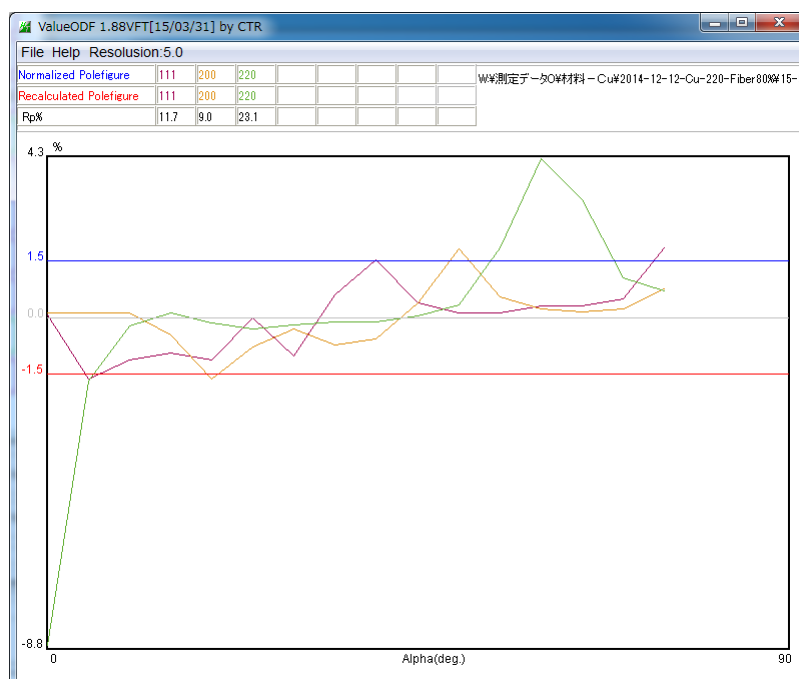
Cycle	Iteration(Max. = 70)	Iteration (total)	Rp[%](Lim. = 0.10)	dRp[%](Lim. = 0.10)
3	2	37	37.11	0.99
3	3	38	36.90	0.57
3	4	39	36.86	0.09

Creation of pole figures files NPF and RPF

Creation of orientation distribution file ODF

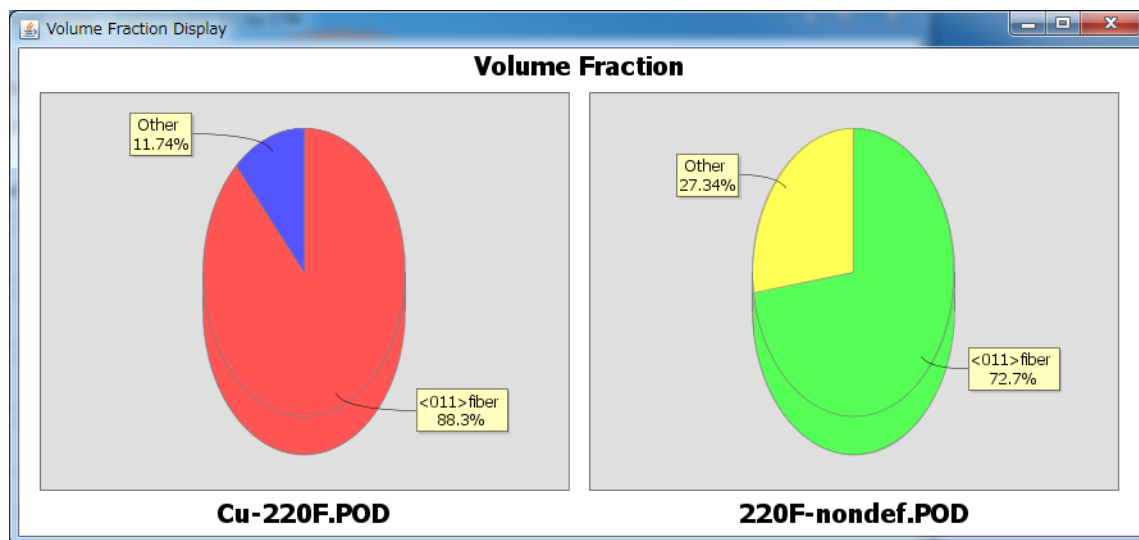
Calculation Break End

R p %は大きな値になり、PF を Export すると



右肩上がりで
吸収補正されていない事が
原因である。

Volume Fractionを比較



220//ND-Fiber 定量値が下がります。