

ODFPoleFigure2(Ver3.35)による

Feなどrandom試料が得難い材料のdefocus補正対策

2014年11月23日

*HelperTex Office*

山田 義行

## 概要

X線を用いて極点測定する場合、極点図の外側で回折強度が低下する減少があります。この現象は `defocus` と呼ばれています。通常、測定する材料と同じ無配向材料を用いて、実際の極点測定と同一の測定を行い、光学系補正を行います。しかしながら材料によっては無配向試料が得られない場合があります。

`defocus` は、測定  $2\theta$  角度と受光スリットの幅に影響される事から

`defocus` 補正は

同一材料の無配向材料による補正

格子定数の近い材料による補正 (Fe の場合アルミニウムを使う)

計算による補正

が考えられます。

本資料では計算により極点図を作成し、この計算極点図を用いて、配向試料の `defocus` 補正を行い、ODF解析後の再計算極点図と入力極点図の差を観察して、`defocus` 補正量の変更方法を説明します。計算による極点図を無配向材料の極点図とすれば、応用できると考えます。

## 流れ

1) 計算による極点図 (無配向材料の極点図)

2) `defocus` ファイルの作成

3) 配向材料の極点図データ処理

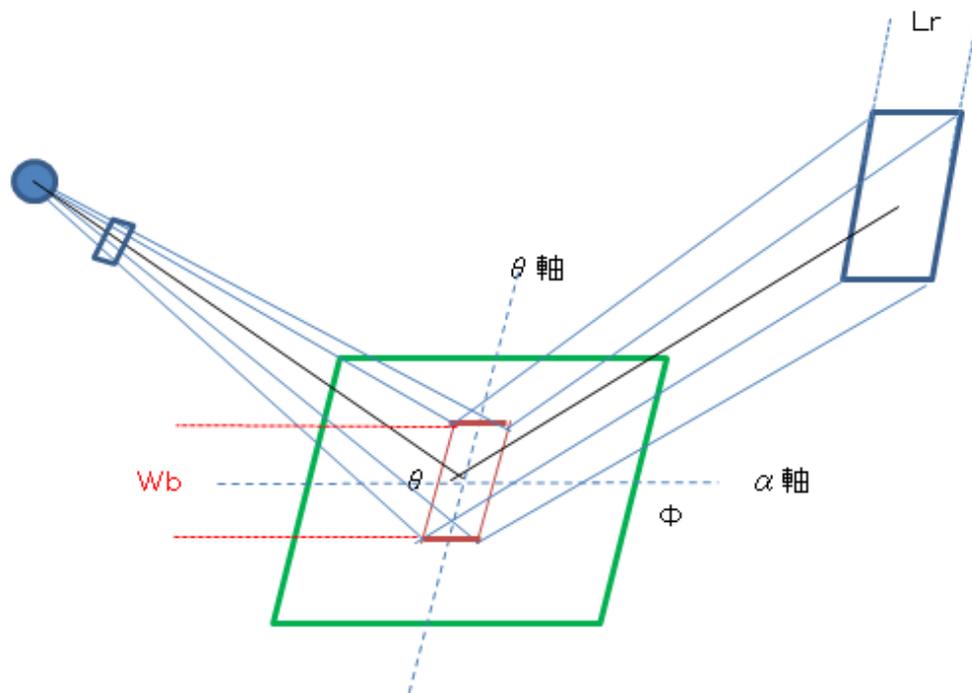
4) ODF解析を行い、極点図の `Export`

5) 入力極点図と再計算極点図の差から `Rp%`

6) 3) の処理で `defocus` 量を調整

理論

TenckhoffはSchulz反射光学系のdefocusプロファイルが計算で求められるとして以下の計算式を文献にまとめている。2θ角度、受光スリット、X線の照射高さで決まるとされている。



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

JOURNAL OF APPLIED PHYSICS

VOLUME 41, NUMBER 10

SEPTEMBER 1970

### Defocusing for the Schulz Technique of Determining Preferred Orientation\*

E. TENCKHOFF

Oak Ridge National Laboratory, Oak Ridge, Tennessee 37830

(Received 16 January 1970; in final form 3 April 1970)

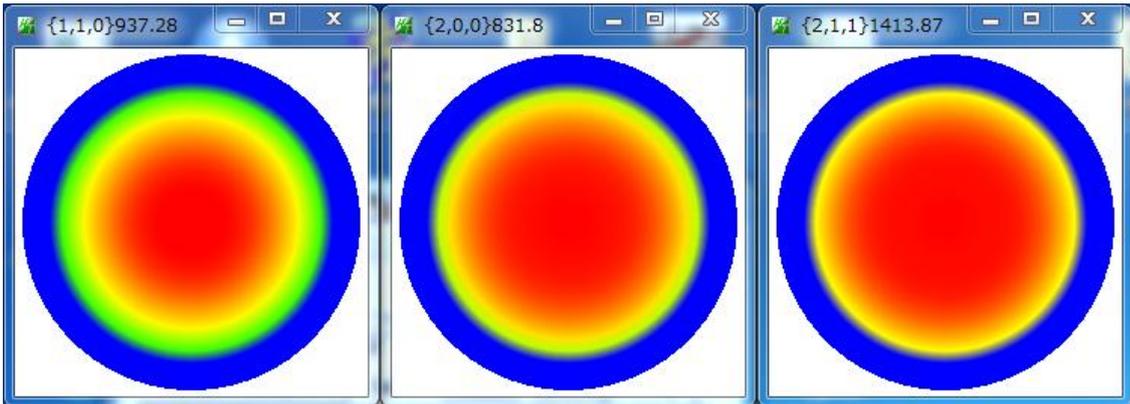
上記Wbが測定2θの依存がなければ、比例定数Pは一定であるとしている。

しかし、Schulzスリットが常に試料から等距離であれば成り立つのかもしれないが実際に測定計算してみると、比例定数が測定2θと相関があることが分かる。

本ソフトウェアでは測定defocus曲線noFittingを行い、比例係数を算出し、受光スリット幅を変えて再計算defocus曲線を算出しています。

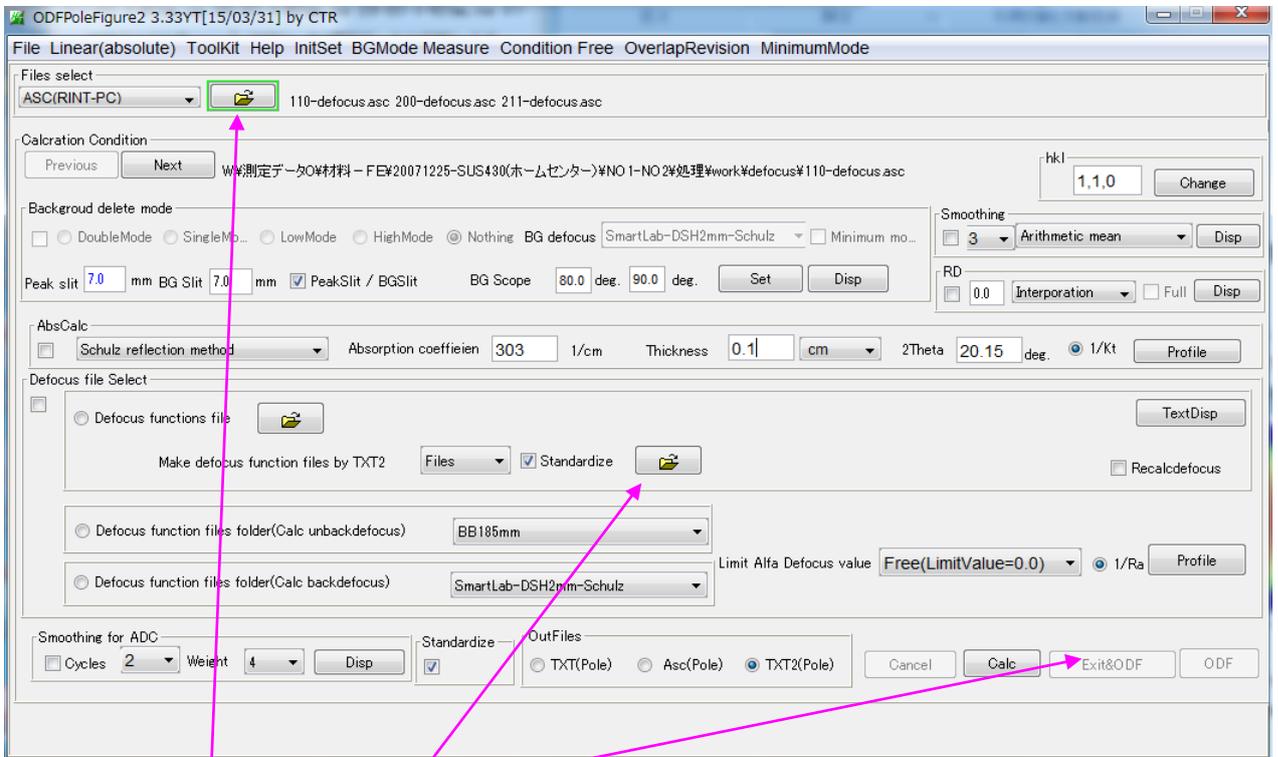
## 1. 計算による極点図

TenckhoffCalc ソフトウェアで作成したMo 管球を用いた Fe の random 極点図



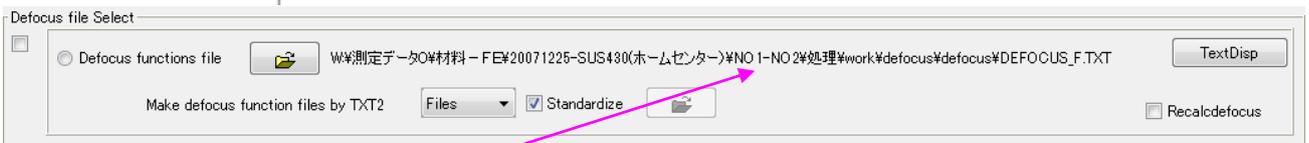
## 2. defocus ファイルの作成

ODFPoleFigure2 (Ver.3.33 以降) による



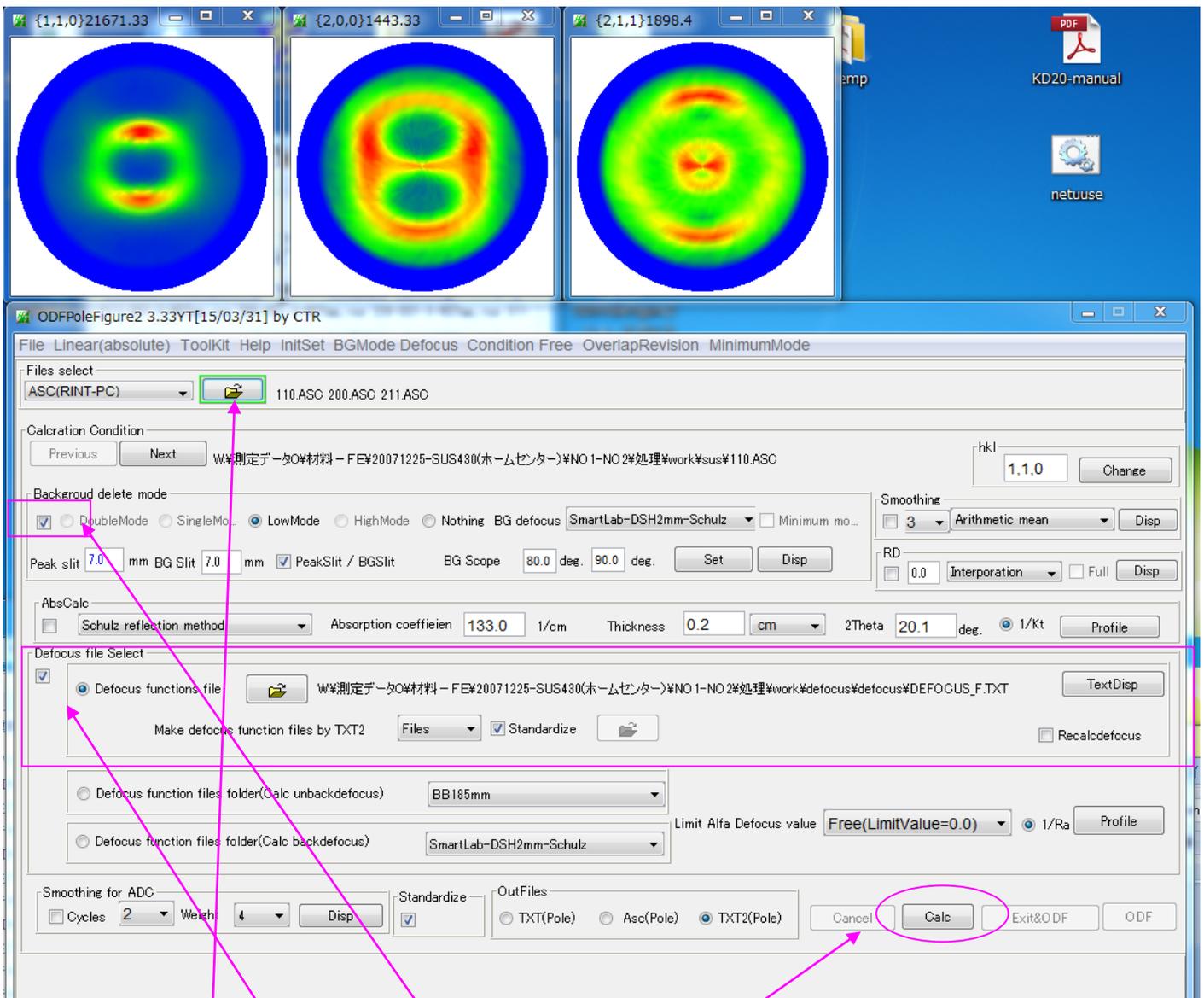
入力極点図を選択して Calc (TXT2 ファイルが作成されます。  
作成した TXT2 ファイルを選択

110-defocus\_chS\_2  
200-defocus\_chS\_2  
211-defocus\_chS\_2



作成された defocus ファイルが表示されます。

### 3. 配向材料の極点図データ処理



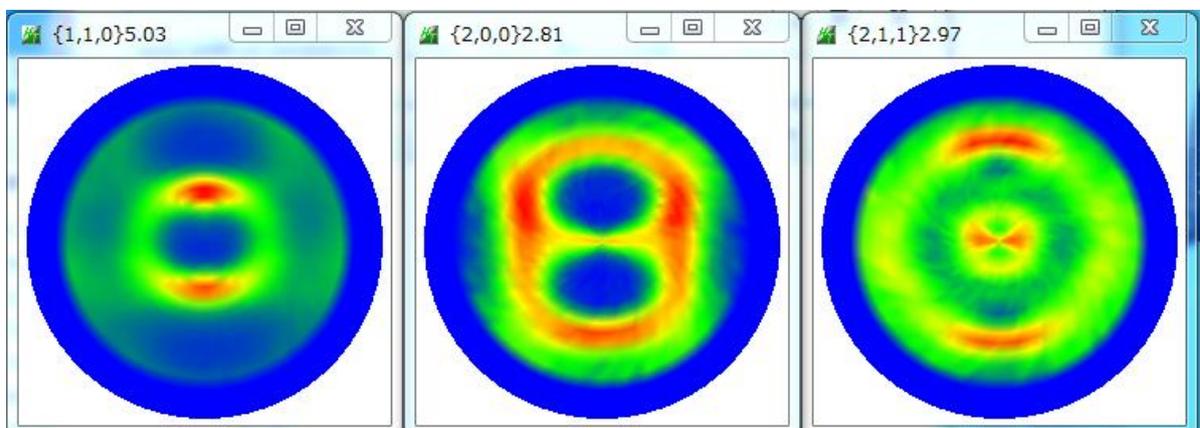
ファイル選択

バックグラウンド処理を選択

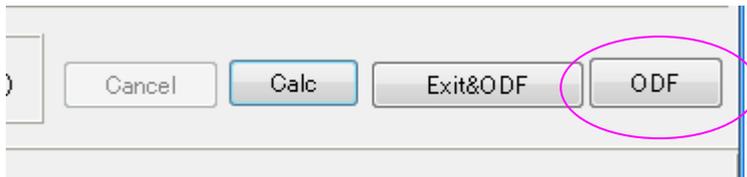
Defocus モードの選択

極点図データ処理 (Calc) を行う

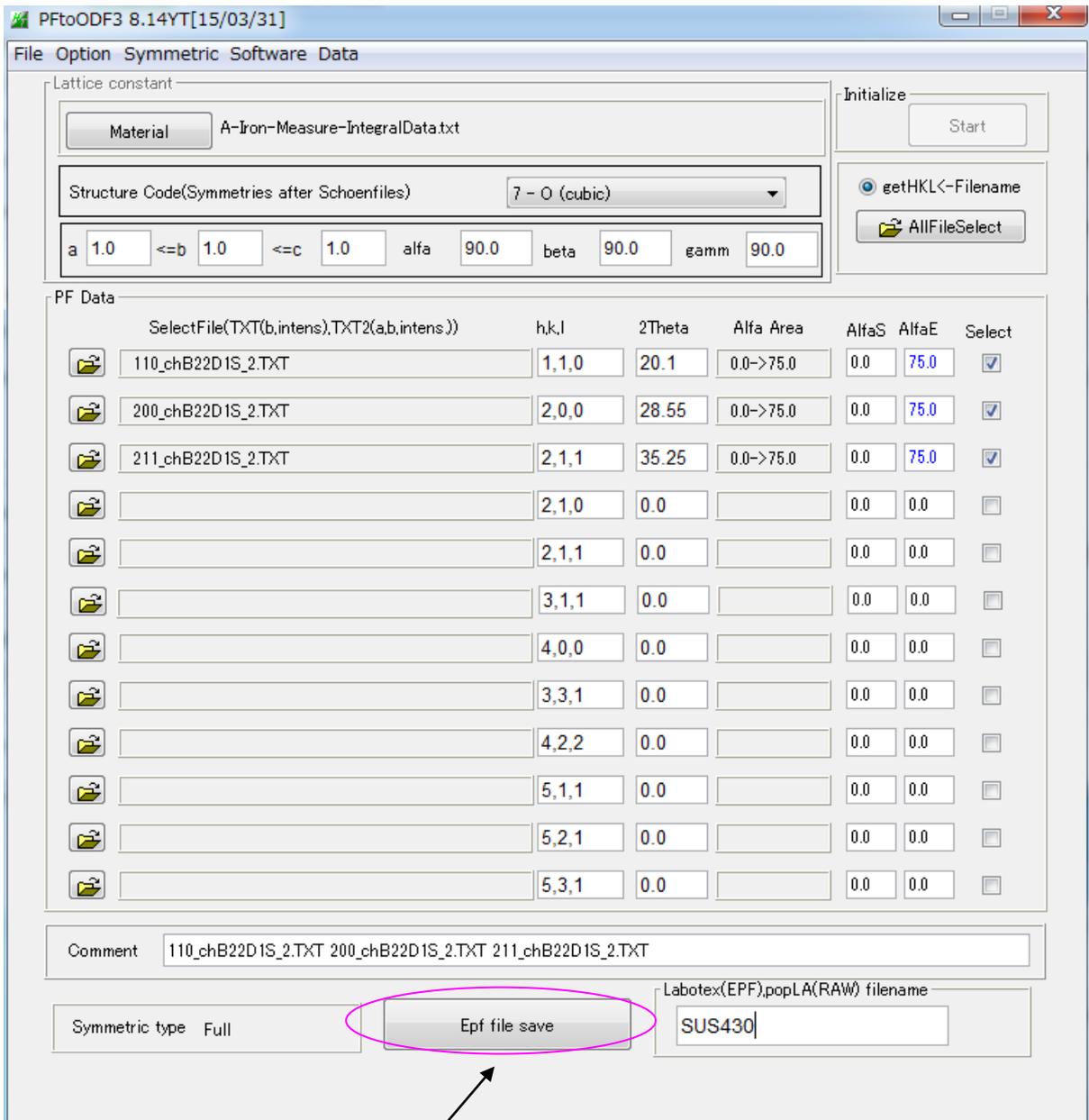
極点図処理後の極点図が表示



#### 4. ODF解析を行い、極点図のExport



ODFでODF入力データ作成



ファイル名の\_ch以降に

B22: バックグラウンド処理方法

D1: Defocus モード

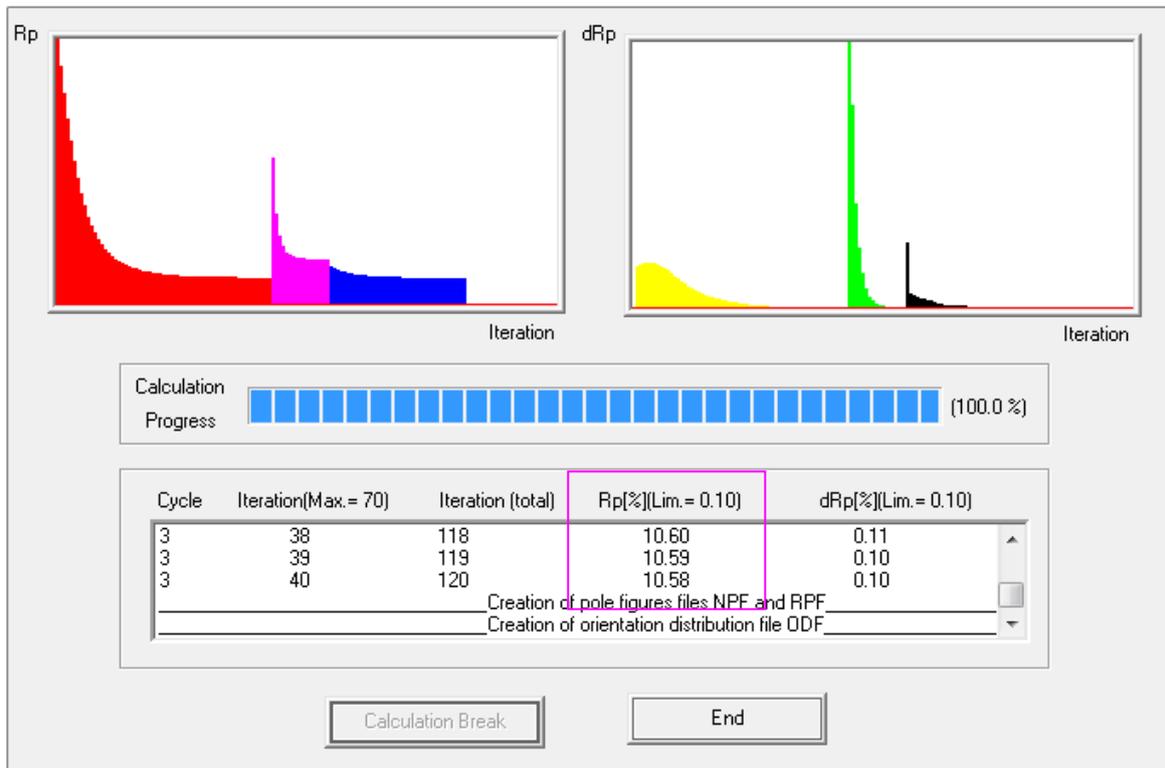
S: 疑似規格化

処理が行われている事が表示されています。

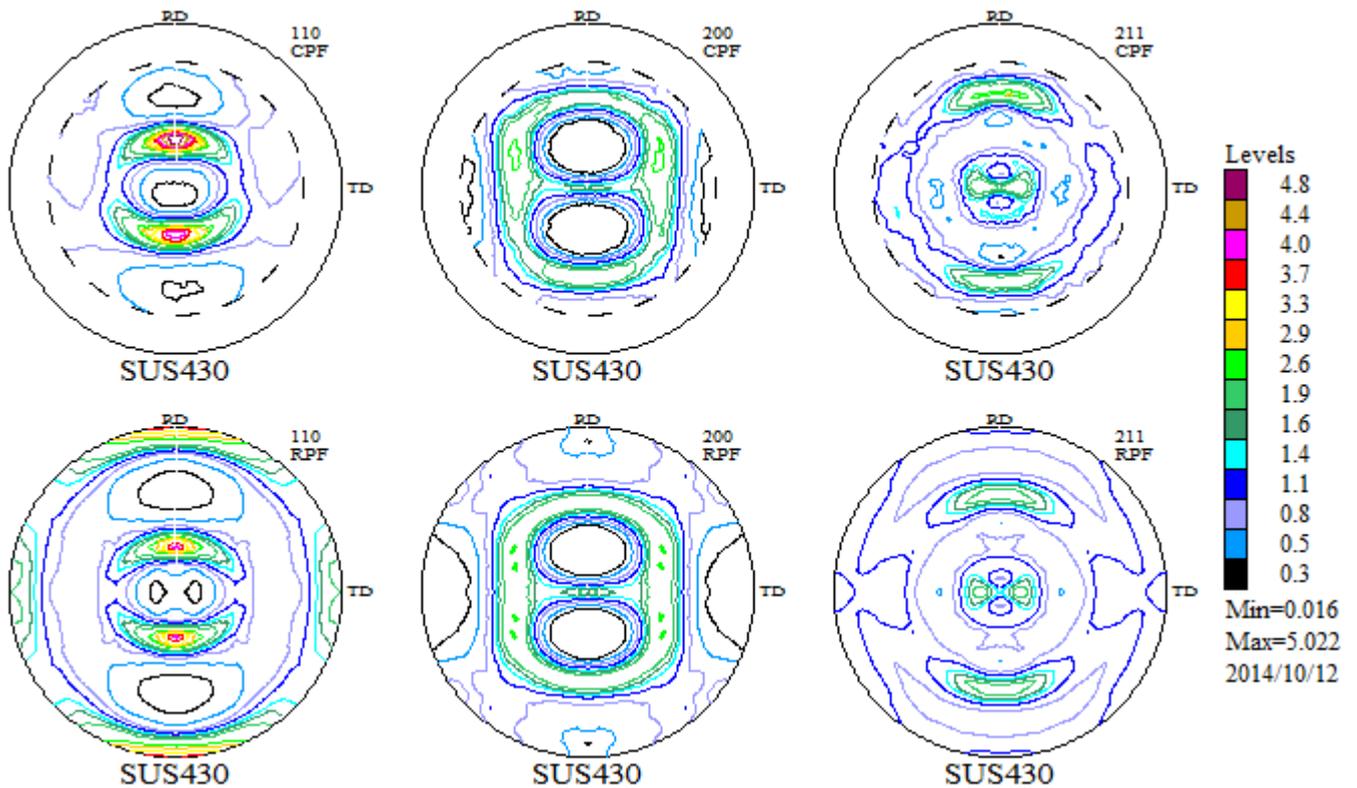
LaboTex 用 EPF ファイルの作成

# LaboTex で ODF 解析時の Error

ODF Calculation (Finished)



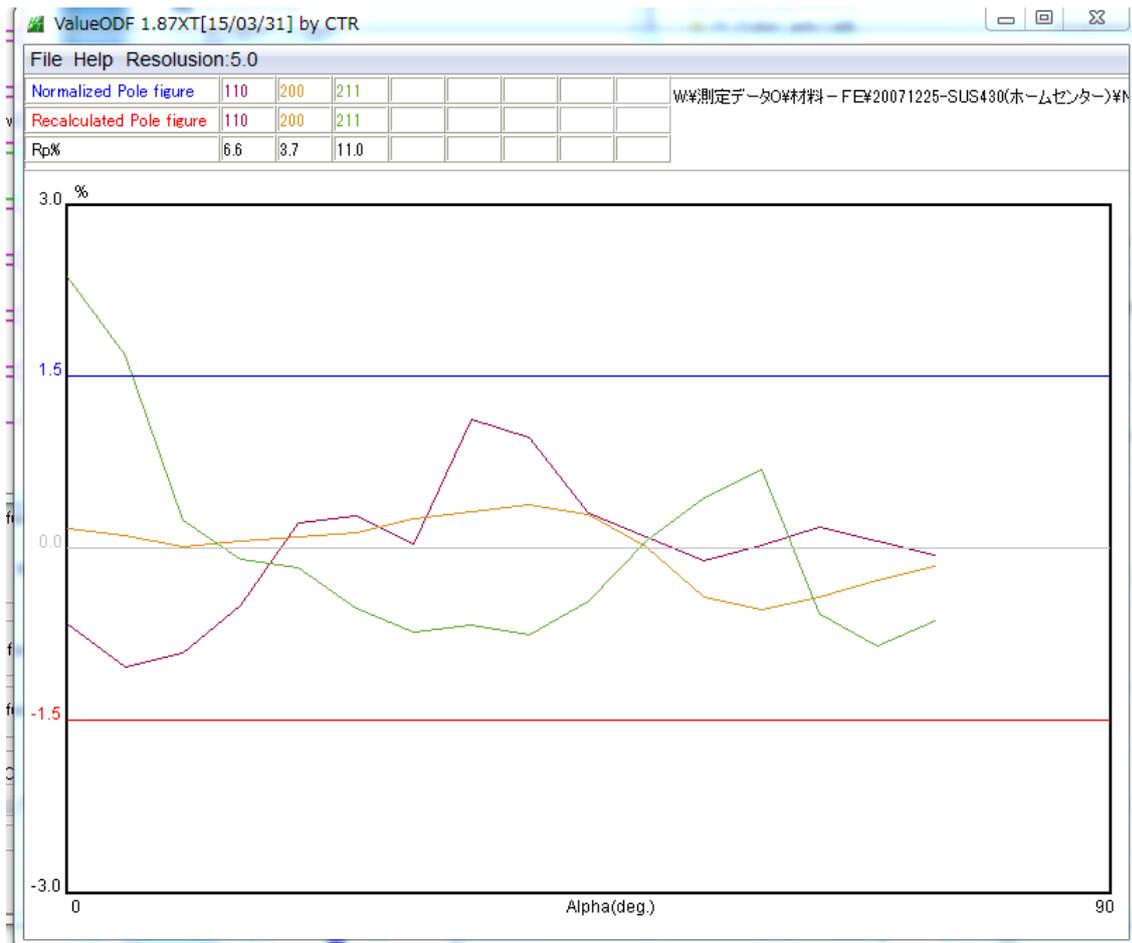
入力極点図と再計算極点図の差 (Error) を表示しています。



極点図の Export を行う。

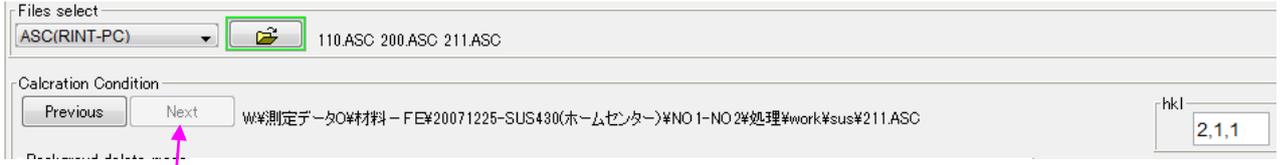
5. 入力極点図と再計算極点図の差から R p %

ValueODF ソフトウェアを使う。

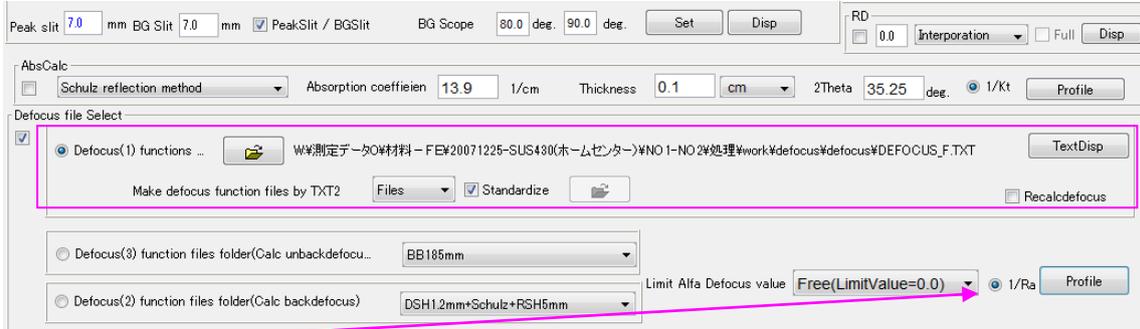


ほぼ解析出来ていますが、{ 2 1 1 } 極点図の defocus 補正を強くしてみます。

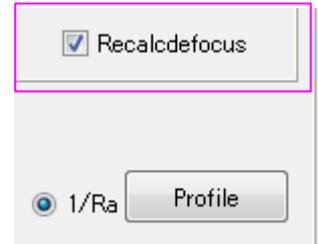
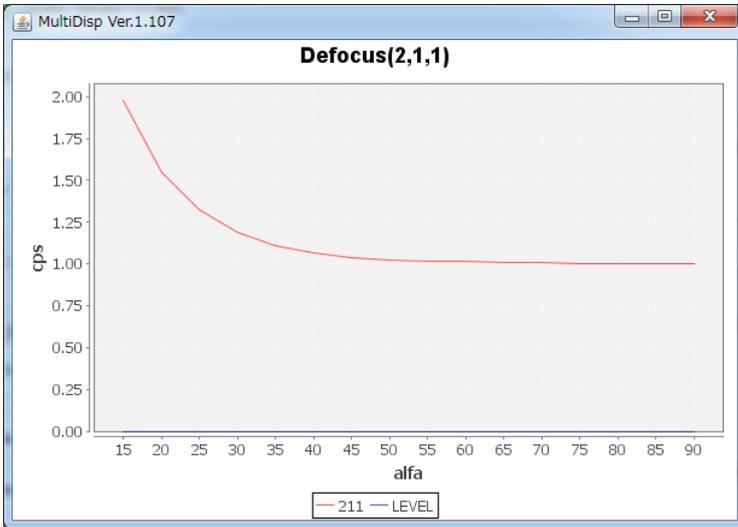
6. 3) の処理で `defocus` 量を調整



Next を使って {211} 極点図とし、



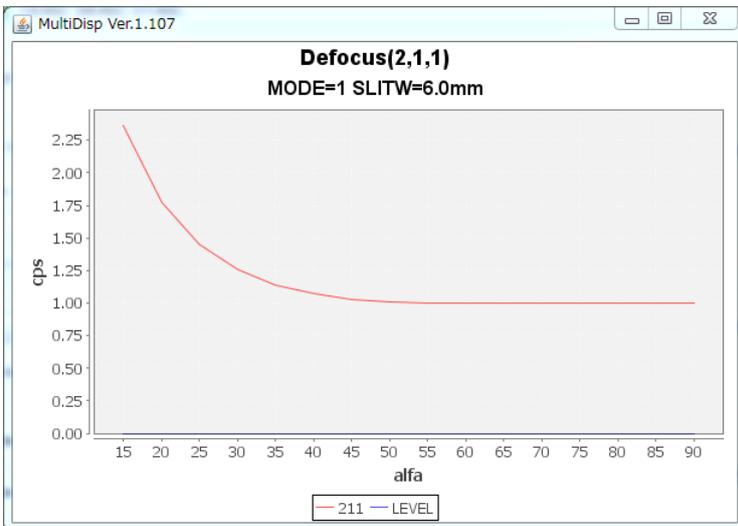
Profile で補正量を確認



補正量を強くするには受光スリット幅を狭くする。



Set を行い Profile



補正量が大きくなっています。

再度極点図データを処理行い ODF で確認

このように `defocus` 補正量を変える事が出来ます。

計算方法

Tenckhoff の計算式に元の曲線を Fitting し比例係数を算出する。

受光スリットを変更し

Recaldefocus で曲線を再計算する。  
2θ を変えると比例係数が変わるので適切ではありません。

ODFPoleFigure2(Ver3.35 以降)

Defocus ファイルホルダの

NEWDEF ホルダ以下に新しい

Defocus ファイルが作成される