

簡易極点処理 ODFPoleFigure1.5 による

極点処理の自動処理による R p % の評価

2015年10月05日

HelperTex Office

Pole¥ODFPoleFigure1_5¥ODFPoleFigure1_5Rpp

概要

Schulz の反射法に於いて、極点処理や ODF 解析を行った時の Error 評価は、ValueODFVF ソフトウェアによる、ODF 入力極点図と ODF 再計算極点図の差で行っている。この ValueODFVF の Error 評価から、再度極点処理条件を変更して、ODF 解析、Error 評価を繰り返す。

若し、極点処理の中で、Error を最少にする機能が組み込まれていれば短時間で最良の結果が得られます。この考えで、ODFPoleFigure1.5,ODFPoleFigure2 ソフトウェアの改造を行いました。

Error の要因は、不適切なバックグラウンド、他成分の重なり、defocus 不良などが考えられます。不適切なバックグラウンドに関しては ODFPoleFigure2 ソフトウェアで対応していますが ODFPoleFigure1.5 では対応していません。

他成分の重なりによる Error の改良は出来ませんが、

良好な random 試料で測定した defocus に関しては本ソフトウェアで可能になります。

Schulz の反射法における defocus

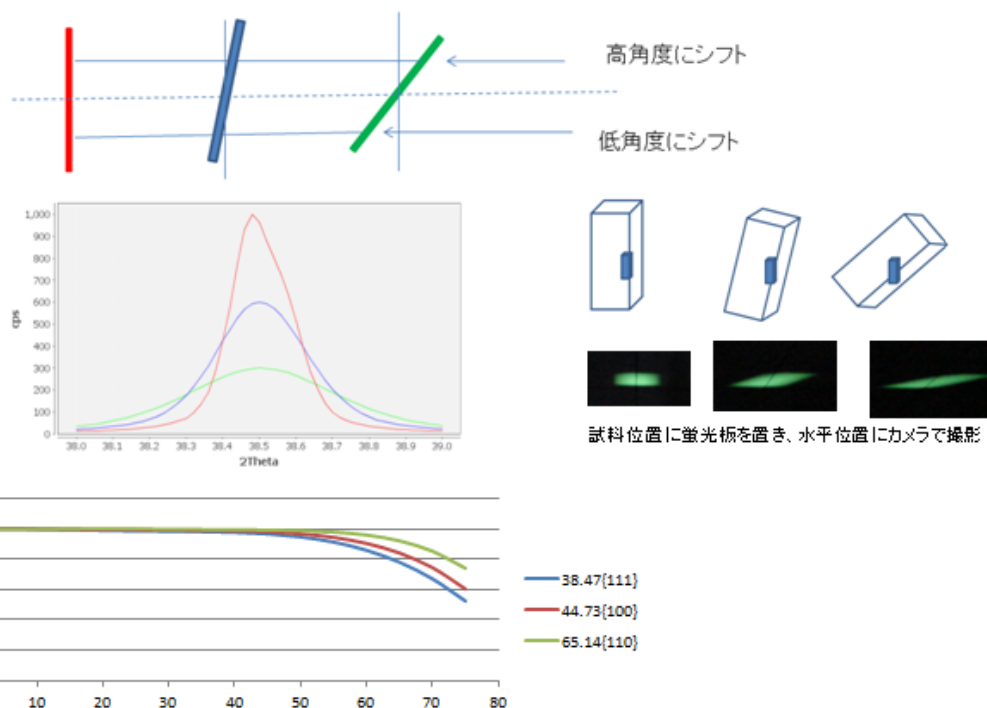
極点図測定では試料をビーム対して傾けて測定しています。

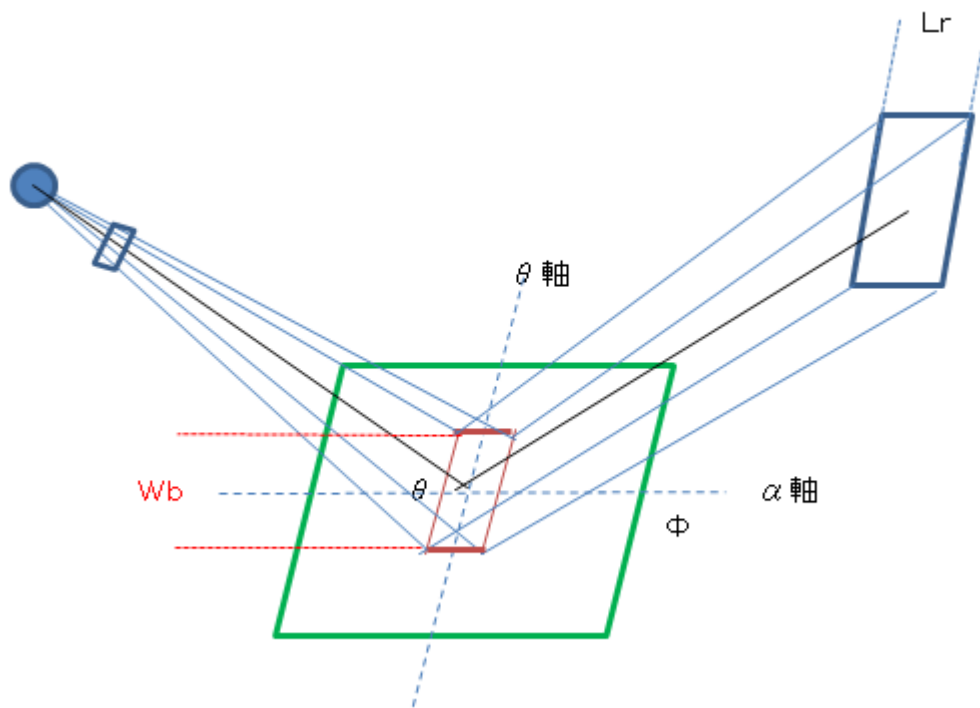
傾ける事で、回折線は 2θ 方向に広がります。

試料を 90° 傾けると回折線の強度はゼロになります。

補正量を少なくするために α は 0° から 75° とし、更に補正を行います。

試料を傾けるとプロファイルが広がる (Defocus)





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

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やスリット幅と相関があることが分かる。

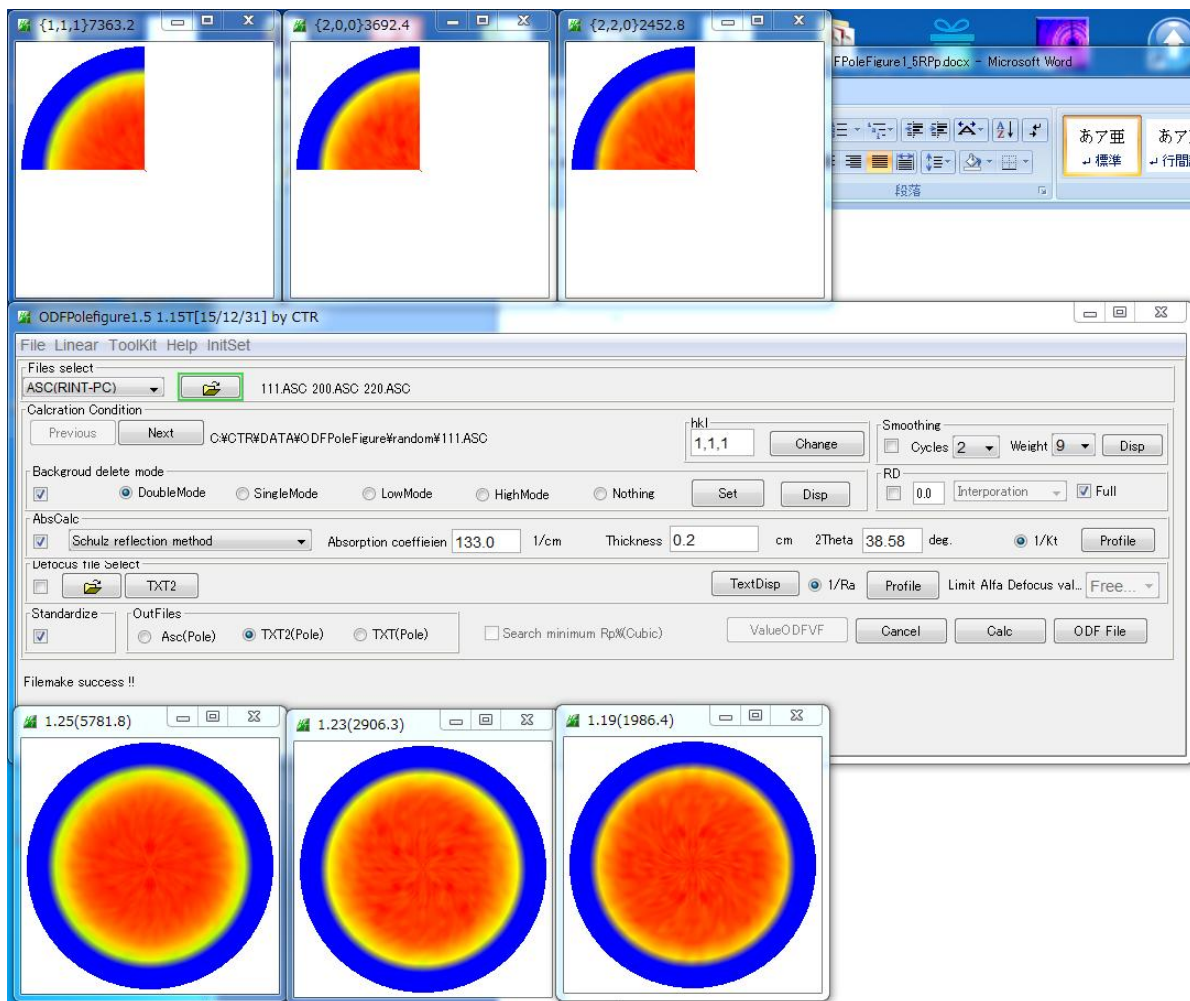
本ソフトウェアでは、実際の random 測定から作成された defocus 曲線を
 上記理論式で再計算し、相関状態を変えながら最適な Rp%を求めた結果を極点処理としています。

使用例

データは、CTR¥DATA¥ODFPoleFigure データを使用

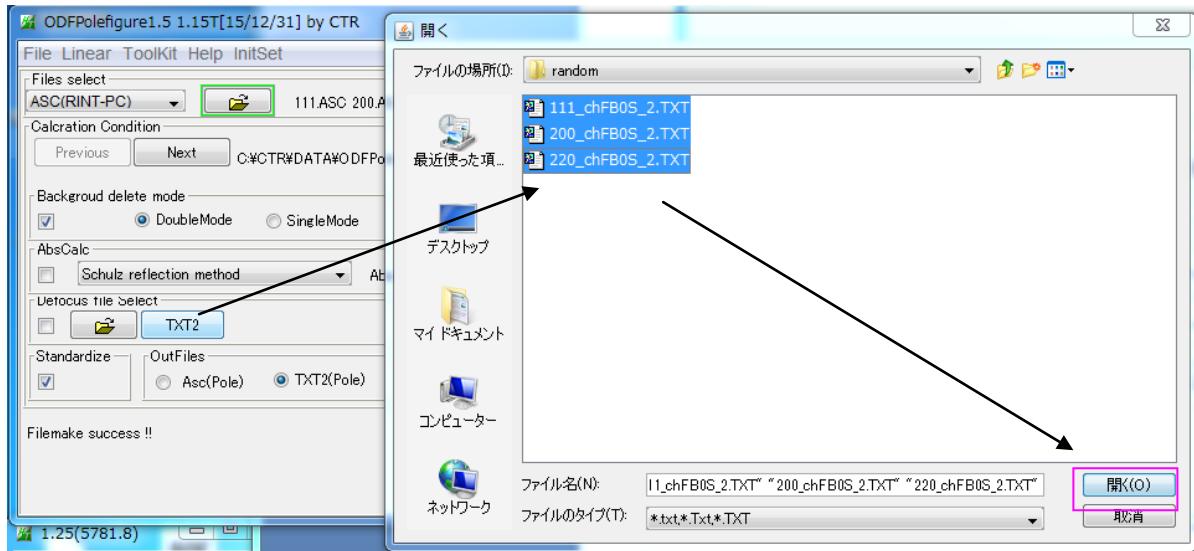
Defocus 曲線を作成

CTR¥DATA¥ODFPoleFigure¥random データを defocus 補正なしで処理

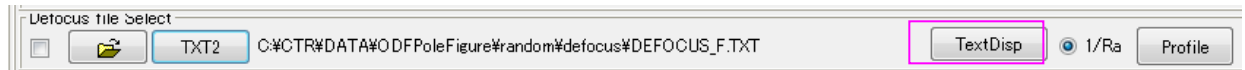


作成された TXT2 データから defocus 曲線を作成

Defocus 曲線の登録



DEFOCUS_F.TXT として defocus ファイルが作成されます。

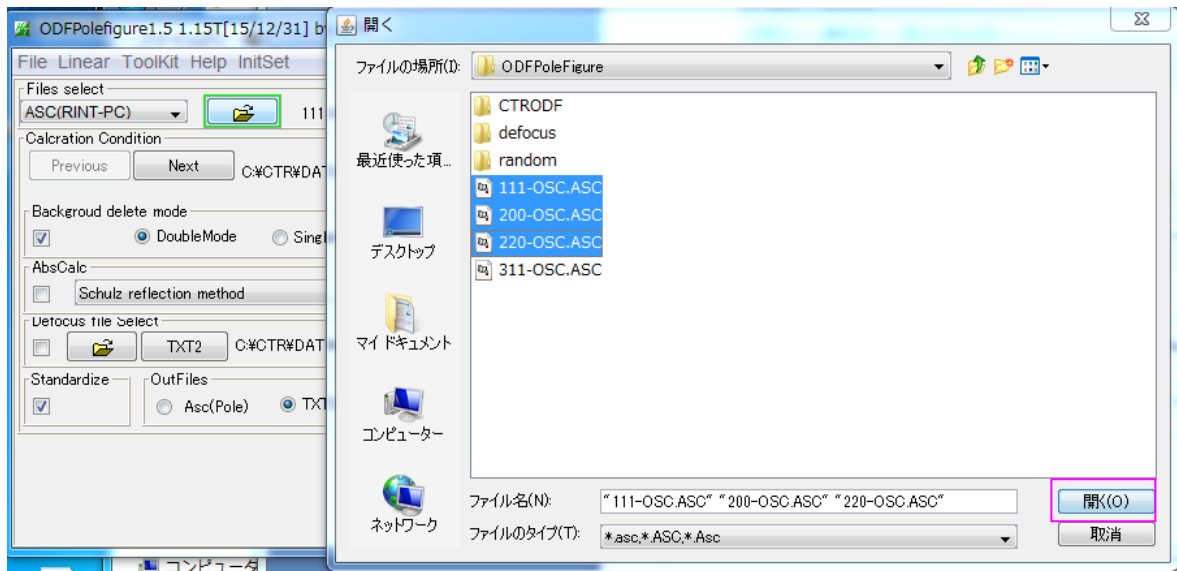


filename, alfanumber, alfstartangle, alfstep, function-n, mm, 15/10/05 3.10 for DefocusCalc.

111_chFB0S_2.TXT,16,0.0,5.0,5.7,0.0,996810023261569,0.0067643904415228655,-5.195374344988798E-4,1.5630284271532113E-5,-1.8492260952845102E-7,4.92354686744974E-10,38.58
 200_chFB0S_2.TXT,16,0.0,5.0,5.7,0.0,9985658803450581,-5.425320466262325E-4,1.1017873974498673E-4,-5.957844371358092E-6,1.4087621587787994E-7,-1.2523139698631716E-9,44.82
 220_chFB0S_2.TXT,16,0.0,5.0,5.7,0.1,0041178616409216,-0.008445127701160854,6.728557897000935E-4,-2.4801233462125573E-5,4.207513185279399E-7,-2.693205038757078E-9,65.18

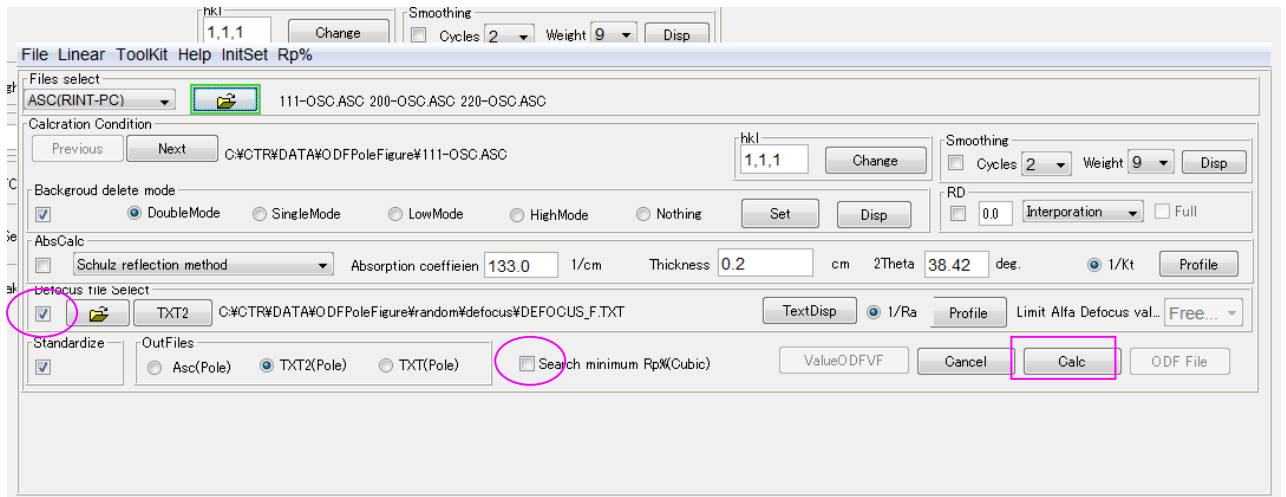


Rp%の検索モードによる極点処理

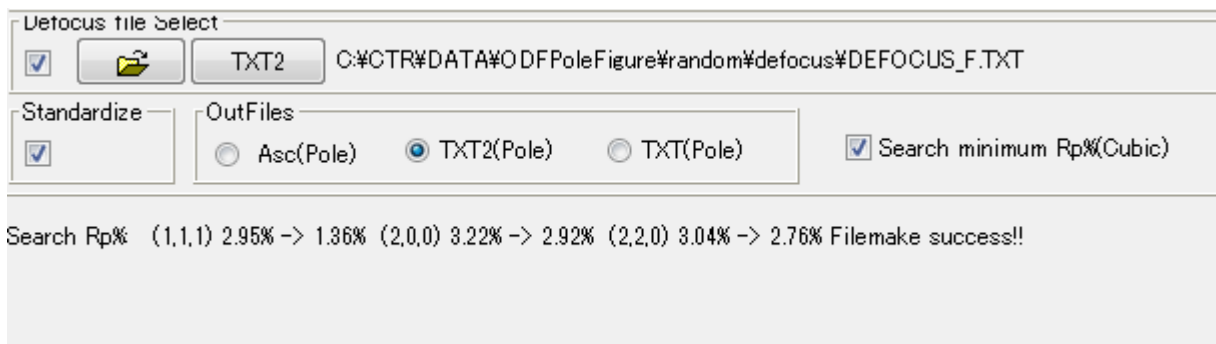


Defocus 補正処理と Rp%の検索モード

登録されている defocus 曲線を微妙に変化させ、最適な Rp%を探します。



結果



R p %検索なしの場合、

{111}=2.95% {200}=3.22% {220}=3.04%

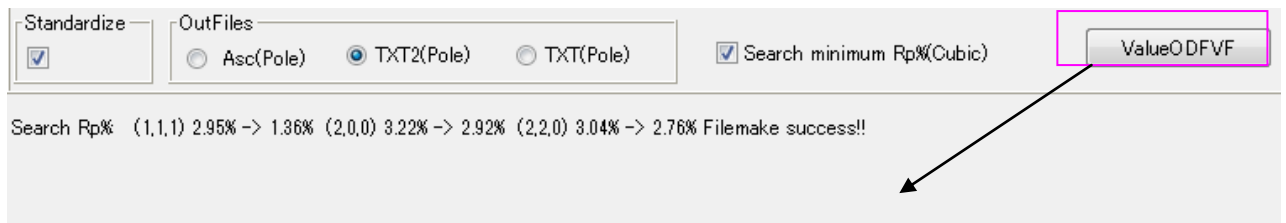
Rp%検索の場合

{111}=1.36% {200}=2.92% {220}=2.76%

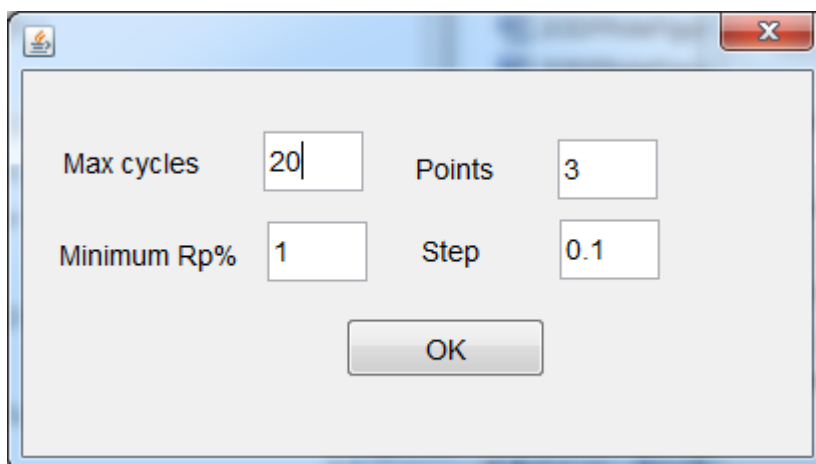
に改善されます。

計算時間は、R p %の誤差により変わります。

Rp%の表示



上記計算で使用した処理条件



極点の外側 Points 数の平均で補正方向を決定し、Step でスリット幅を変化させ、cycle 内で最少 Rp%を探します。

Cubicの場合、

ODFPoleFigure1.5 ソフトウェアで最適な補正条件を決定する事が可能になります。