

極点図処理におけるD e f o c u s 補正の効果

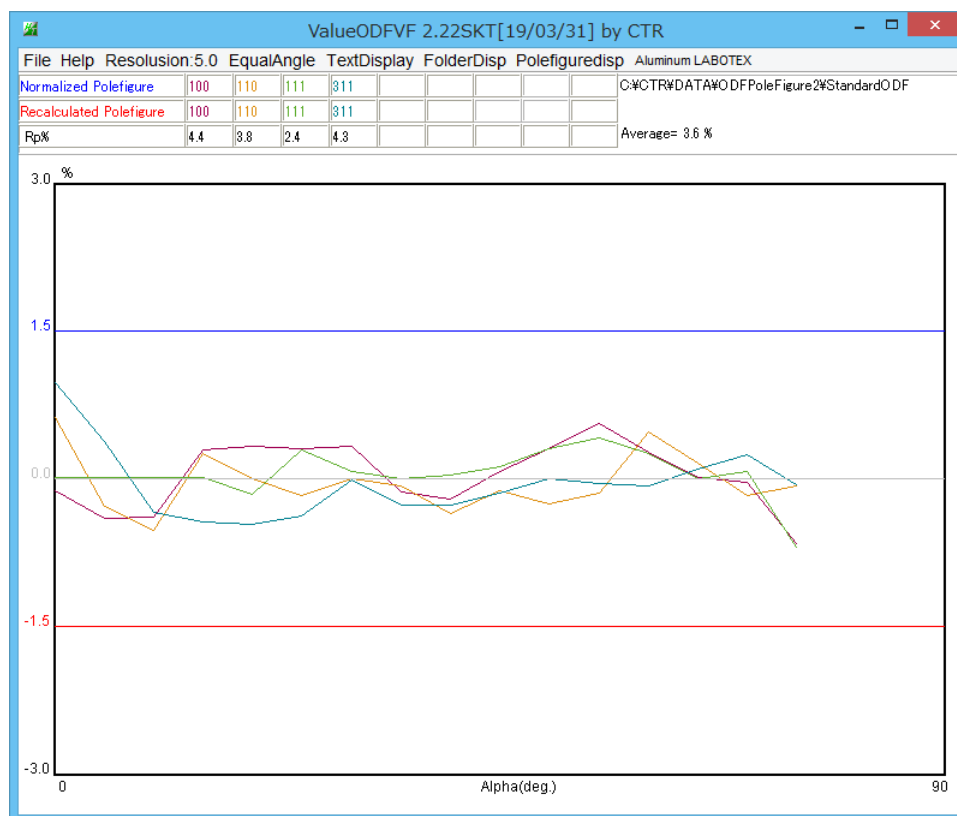
2018年12月03日

HelperTex Office

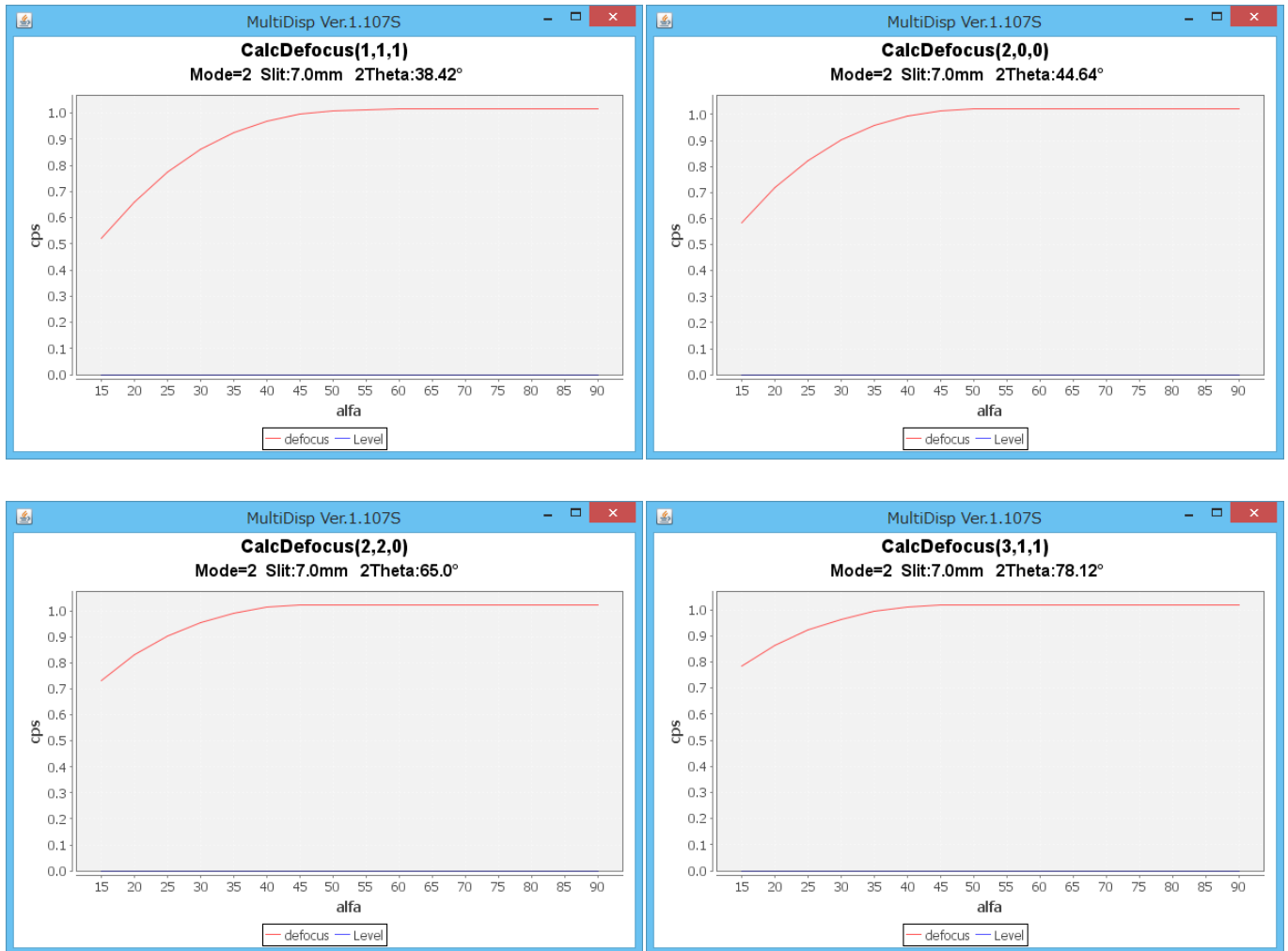
概要

XRD測定では光学系の補正として $d e f o c u s$ 補正が行われている。
補正量は、測定 2θ 角度、受光スリット幅、X線照射幅 (Schulz スリット)、ゴニオ半径などで異なる。
以下にゴニオ半径 185mm のアルミニウム測定で $d e f o c u s$ 補正有り無しを比較してみます。
比較方法としては、ODF 解析後の $R p \%$ を採用します。
 $R p \%$ は ODF 解析後、入力極点図と ODF 解析後の再計算極点図の差から計算される。
L a b o T e x の場合、 $R p \%$ が表示される。
T e x T o o l s の場合、ODF 解析で作成される HODF ファイルに記述されている。
S t a n d a r d O D F では $R p \%$ 計算は行われていない。
L a b o T e x, T e x T o o l s 共、複数の極点図の平均値を示すが、 $d e f o c u s$ の E r r o r を表示するのは不十分で、 $d e f o c u s$ は極点図の α 方向の重みで示されるので、 $R p \%$ を、各極点図で、 α 方向の E r r o r で示さなければ $d e f o c u s$ E r r o r は表現出来ません。
この表現が出来るのは、V a l u e O D F V F ソフトウェアです。
前回、「r a n d o m 試料がない場合の $d e f o c u s$ 補正」を用いて比較してみます。

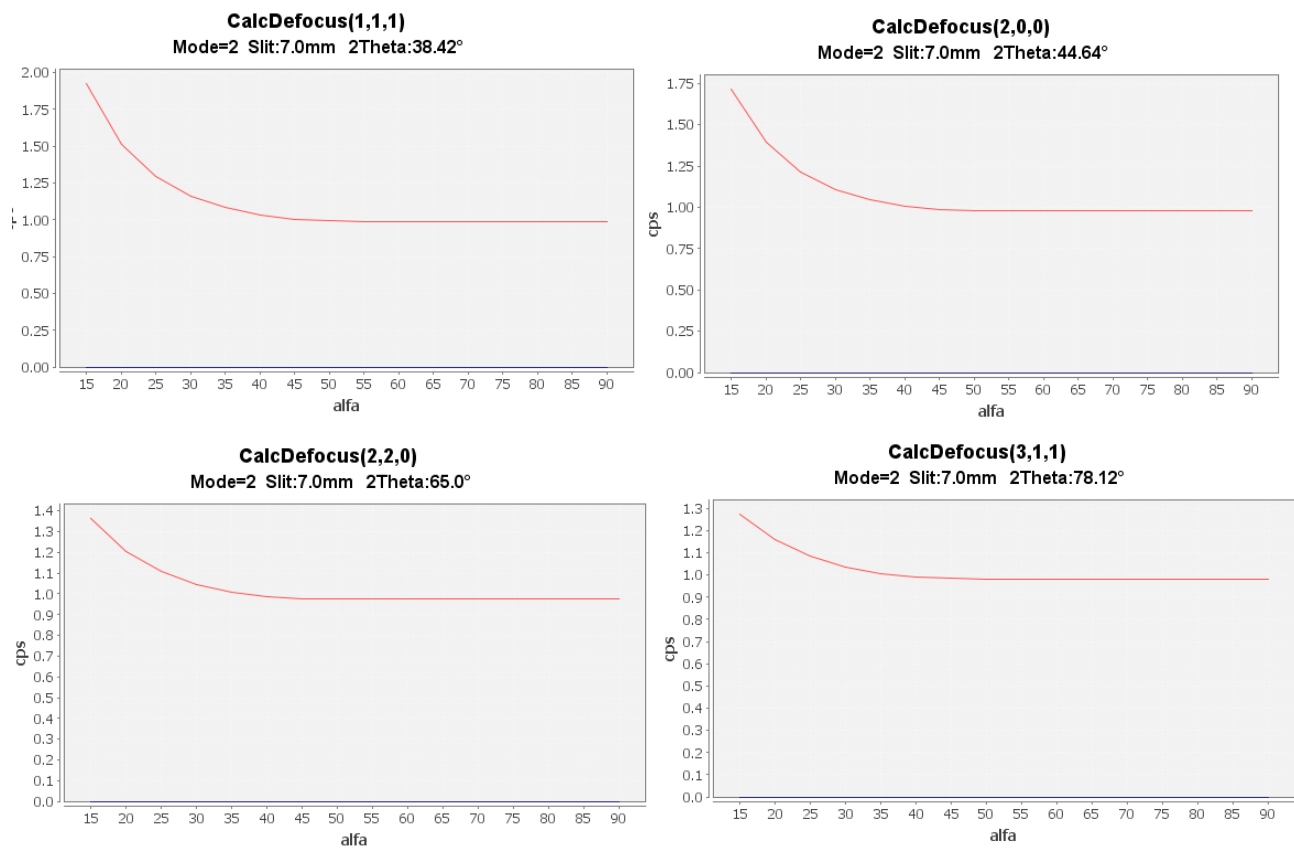
今回は、ODFPoleFigure2 ソフトウェアの計算 random 補正を行い StandardODF で ODF 解析後 $R p \%$ が以下のように求められています。



計算に用いた `defocus` 曲線 (+適正 Rp%処理を行う)



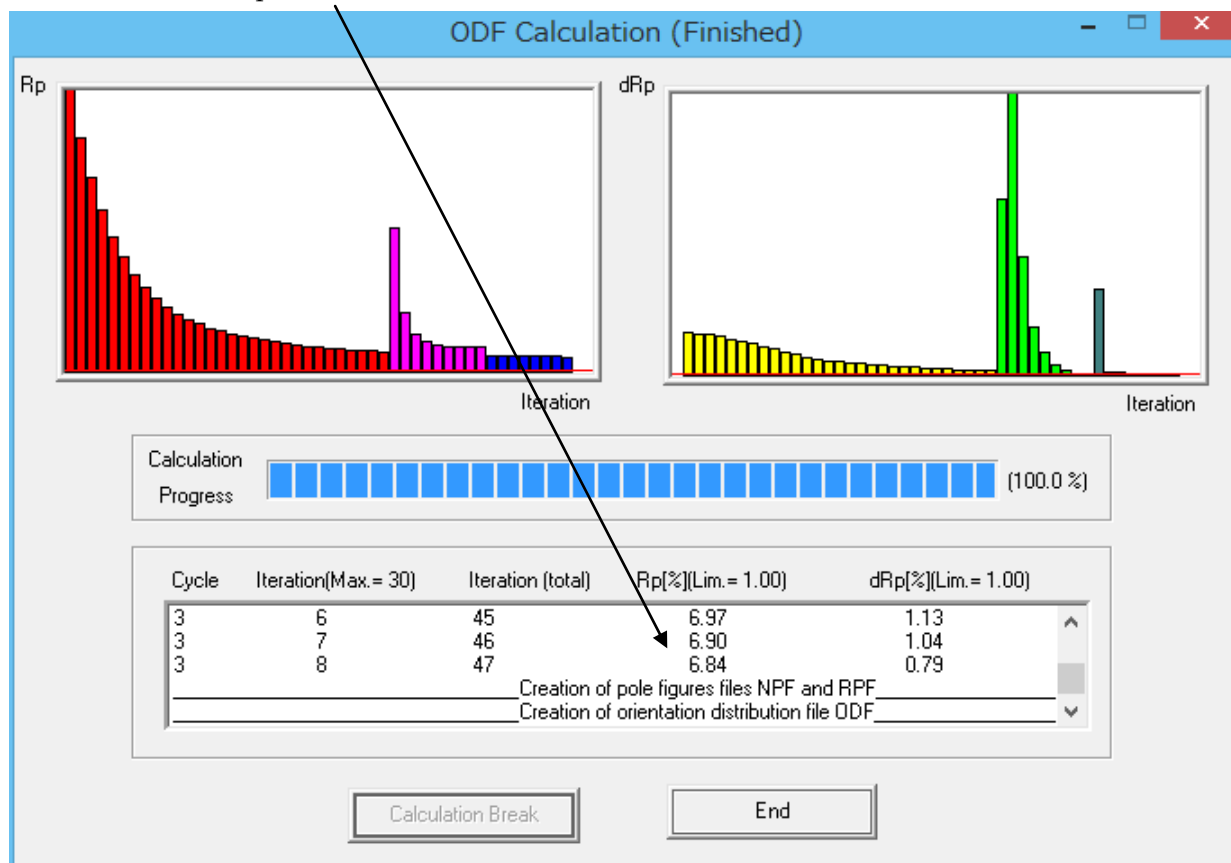
補正量



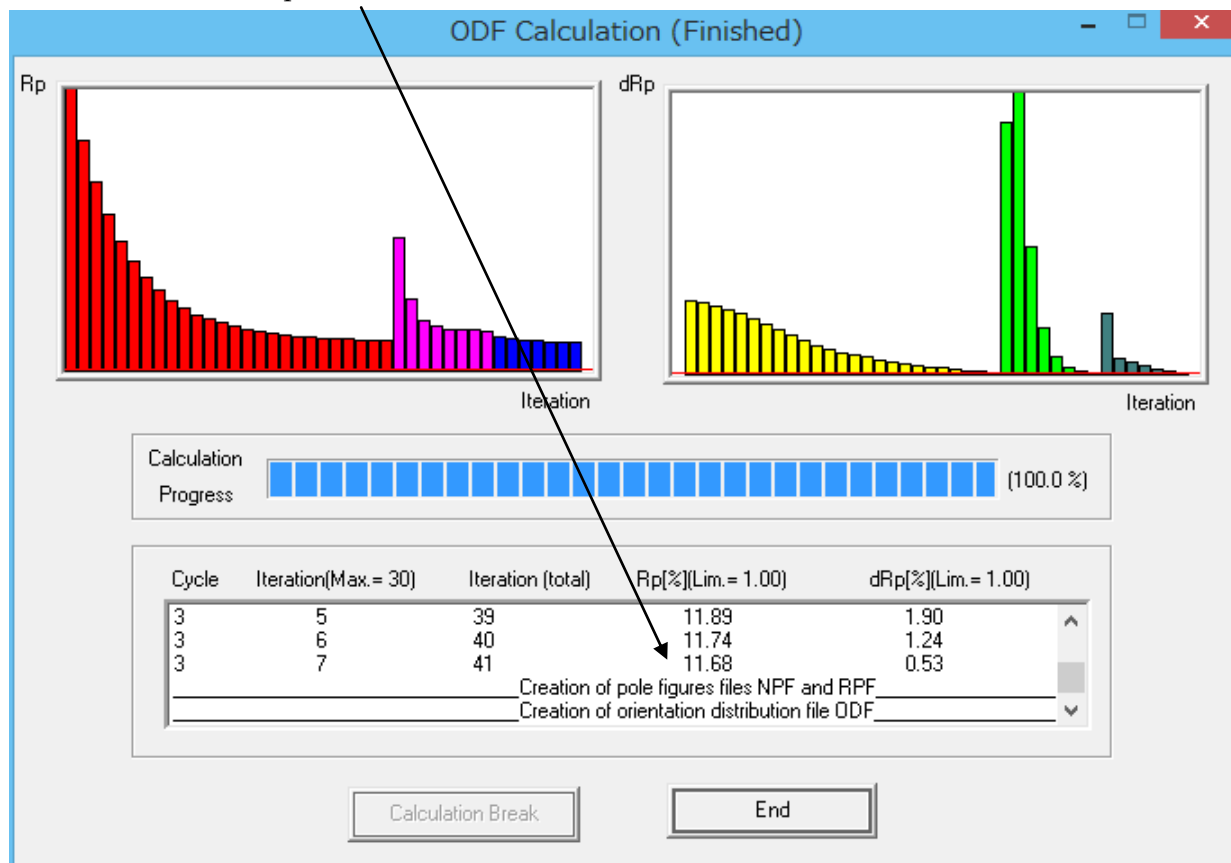
同一極点図を計算defocus補正(+適正Rp%処理を含む)ありなしをLaboTexで比較してみます。

LaboTexによるRp%比較

Defocusを行う。(Rp%=6.84%)

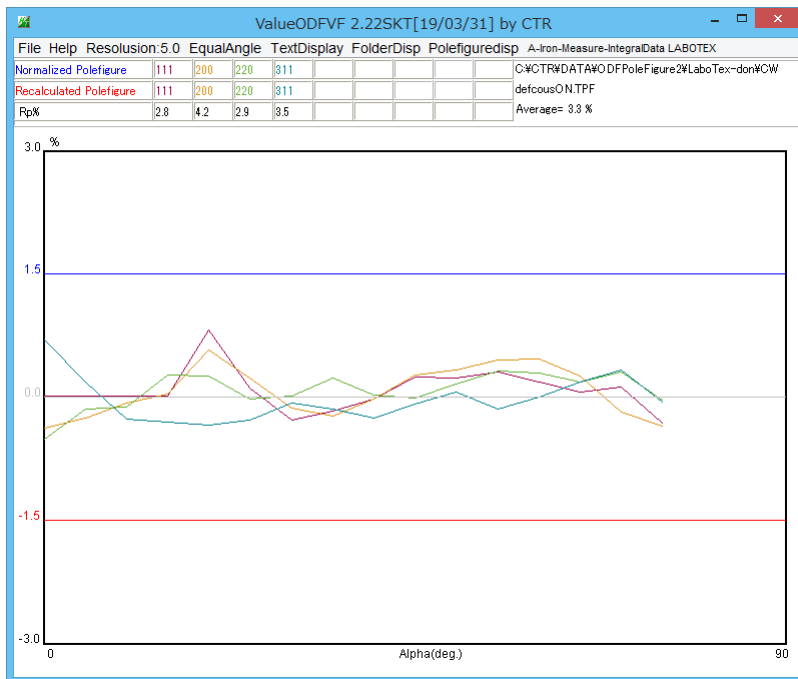


Defocusを行わない(Rp%=11.68%)



ValueODF-VF で比較

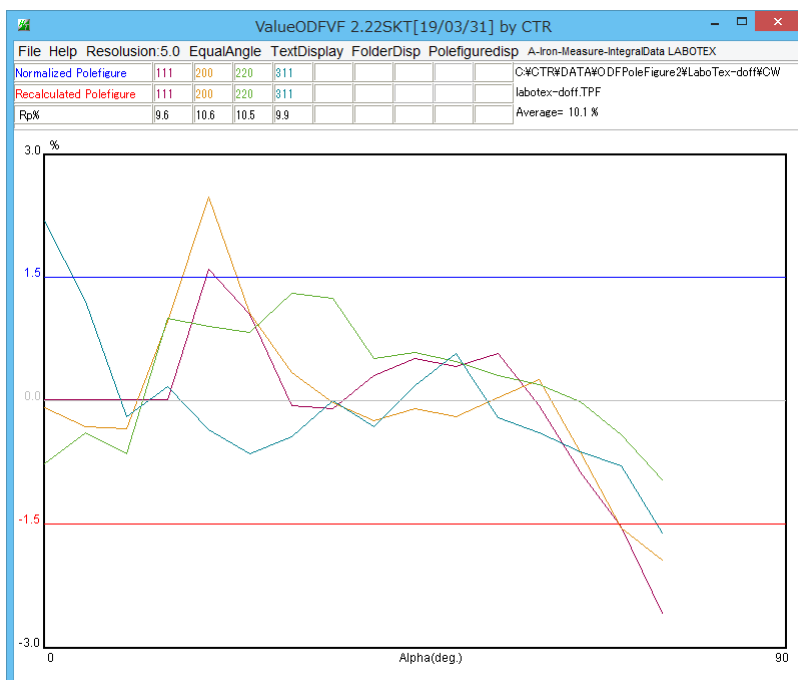
Defocus 補正を行う。(LaboTex:Rp%=6.84%) → 3.3%



Normalized Polefigure	111	200	220	311
Normalized Polefigure	111	200	220	311
Recalculated Polefigure	111	200	220	311
Rp%	2.8	4.2	2.9	3.5

C:\CTR\DATA\ODFPoleFigure2\LaboTex-donà
defocusON.TPF
Average= 3.3 %

Defocus 補正を行わない(LaboTex:Rp%=11.68%) → 10.1%



Normalized Polefigure	111	200	220	311
Normalized Polefigure	111	200	220	311
Recalculated Polefigure	111	200	220	311
Rp%	9.6	10.6	10.5	9.9

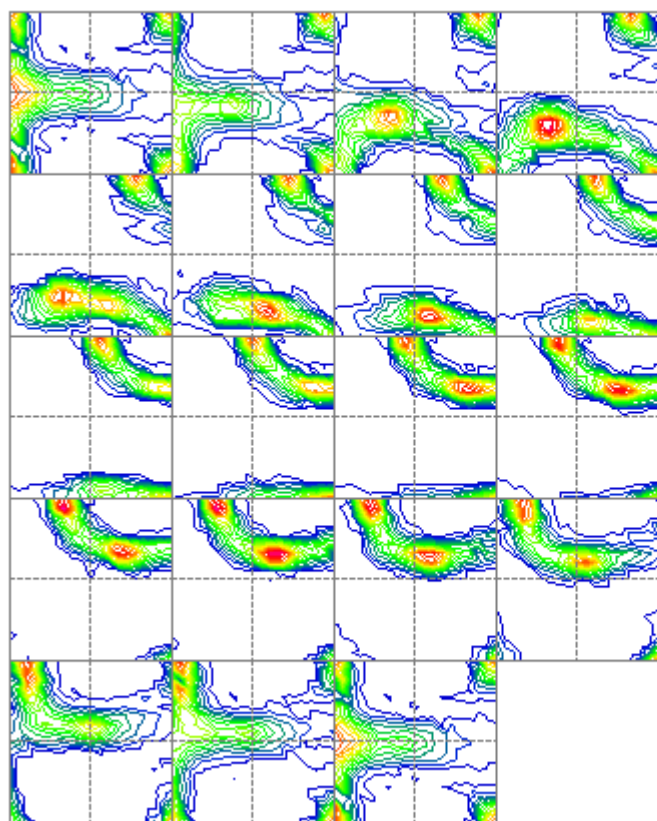
C:\CTR\DATA\ODFPoleFigure2\LaboTex-doff#\
labotex-doff.TPF
Average= 10.1 %

ValueODF-VFのRp%計算では、方位密度の小さい領域は計算に含めないため、小さめに計算される。ValueODF-VFの説明書を参考にして下さい。(Rp%プロファイルが0%レベルの直線部分)
defocusの大きい極点図の外側に向け、Errorが大きくなり、その影響で極点図全体のErrorが増す様に見えます。
defocusを行わないと、極点図全体が影響を受けています。

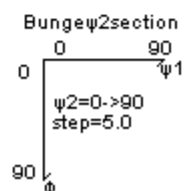
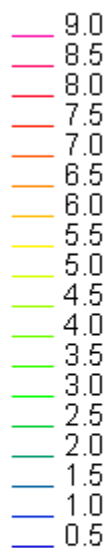
ODF 図比較

Defocus 補正を行う。

filename: C:\CTR\DATA\ODFPoleFigure2\LaboTex-don\CW\defocusON.TXT

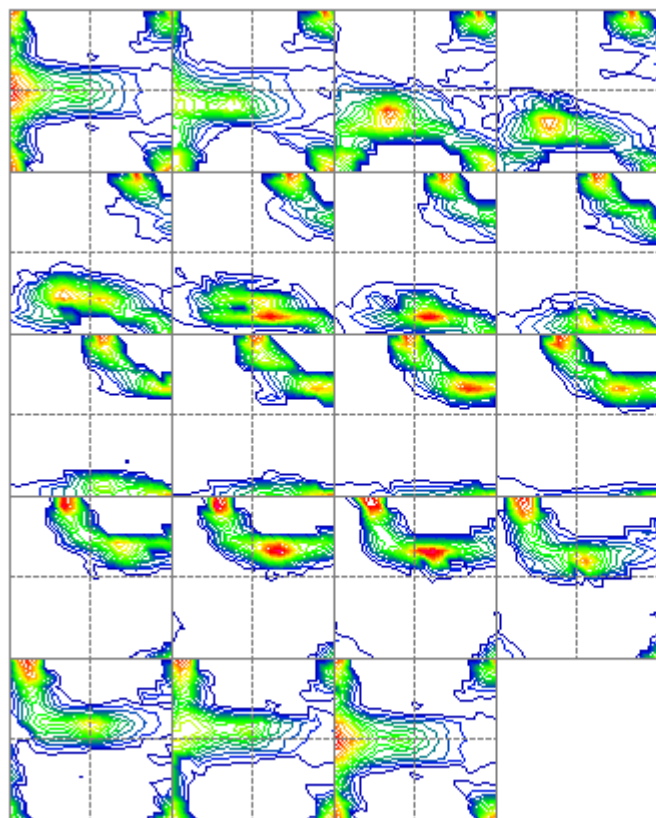


Max=9.09
Min=0.04

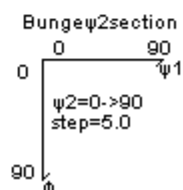
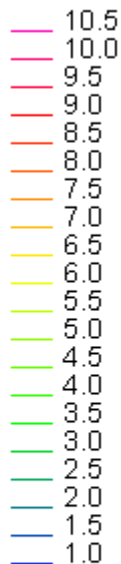


Defocus 補正を行わない

filename: C:\CTR\DATA\ODFPoleFigure2\LaboTex-doff\CW\labotex-doff.TXT



Max=10.52
Min=0.01

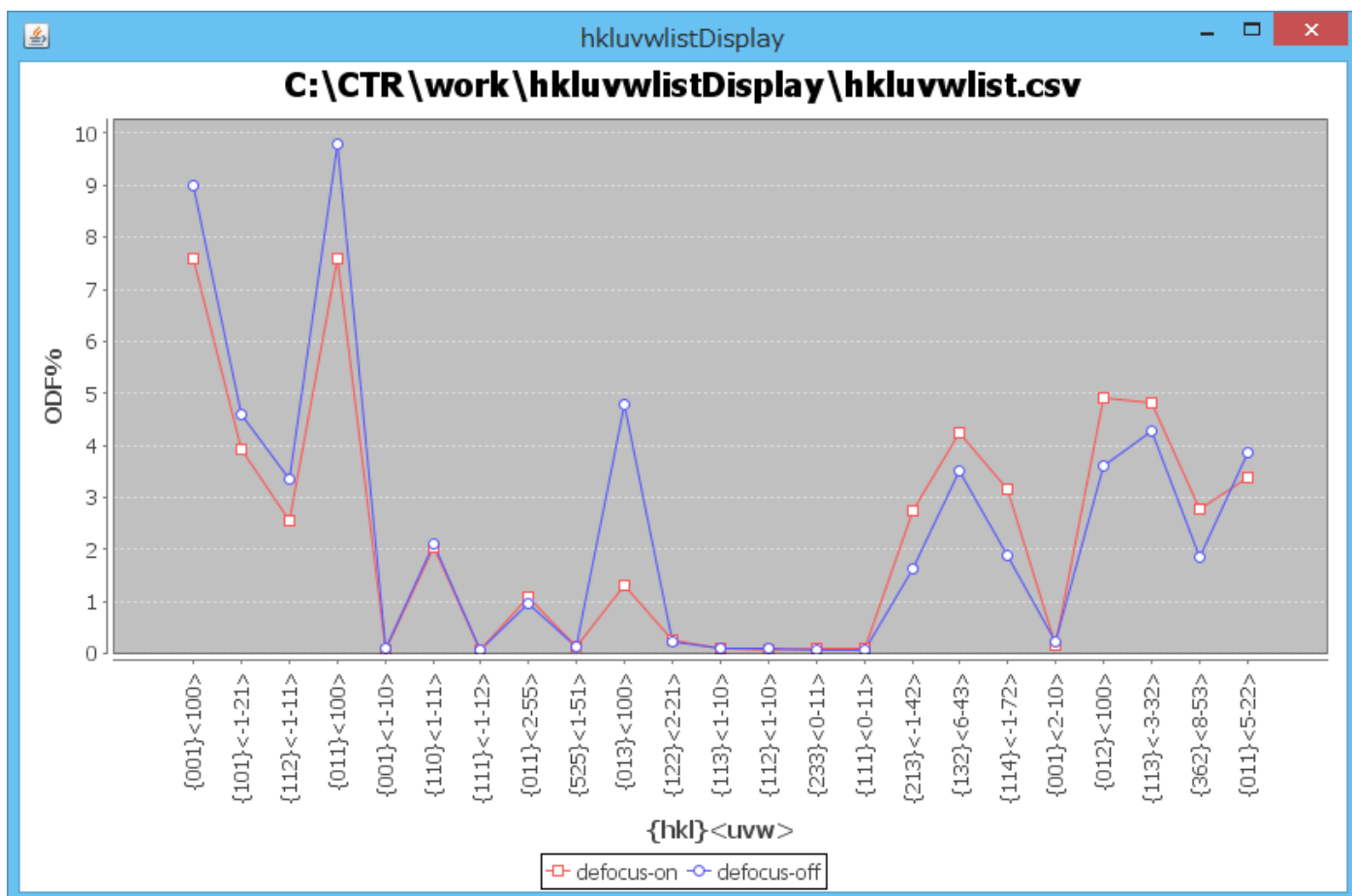


ODF 図に似ているが、最大方位密度が異なる。

各方位で比較

ValueODF-VF ソフトウェアで計算した各方位の方位密度を比較

```
{hkl}<uvw>,defocus-on,defocus-off
{001}<100>,7.6,9.0
{101}<-1-21>,3.94,4.6
{112}<-1-11>,2.55,3.35
{011}<100>,7.59,9.79
{001}<1-10>,0.07,0.11
{110}<1-11>,2.03,2.12
{111}<-1-12>,0.07,0.07
{011}<2-55>,1.1,0.97
{525}<1-51>,0.14,0.12
{013}<100>,1.31,4.77
{122}<2-21>,0.25,0.22
{113}<1-10>,0.09,0.09
{112}<1-10>,0.08,0.09
{233}<0-11>,0.11,0.08
{111}<0-11>,0.1,0.06
{213}<-1-42>,2.74,1.62
{132}<6-43>,4.23,3.52
{114}<-1-72>,3.16,1.9
{001}<2-10>,0.16,0.24
{012}<100>,4.9,3.6
{113}<-3-32>,4.83,4.29
{362}<8-53>,2.77,1.85
{011}<5-22>,3.37,3.87
```



大きく異なっています。

正しいのは、defocus補正を行ったODF図です。

判断は、ValueODF-VFのRp%プロファイルと±1.5%が参考になります。