

# G o s s 方位の極点図、ODF図の半価幅

Goss-1

2025年03月02日

*HelperTex Office*

## 1. 概要

XRDによる極点図測定で得られる極点図からODF解析した場合の極点図方位の半価幅とODF解析したODF図方位の半価幅は一致する事を説明します。

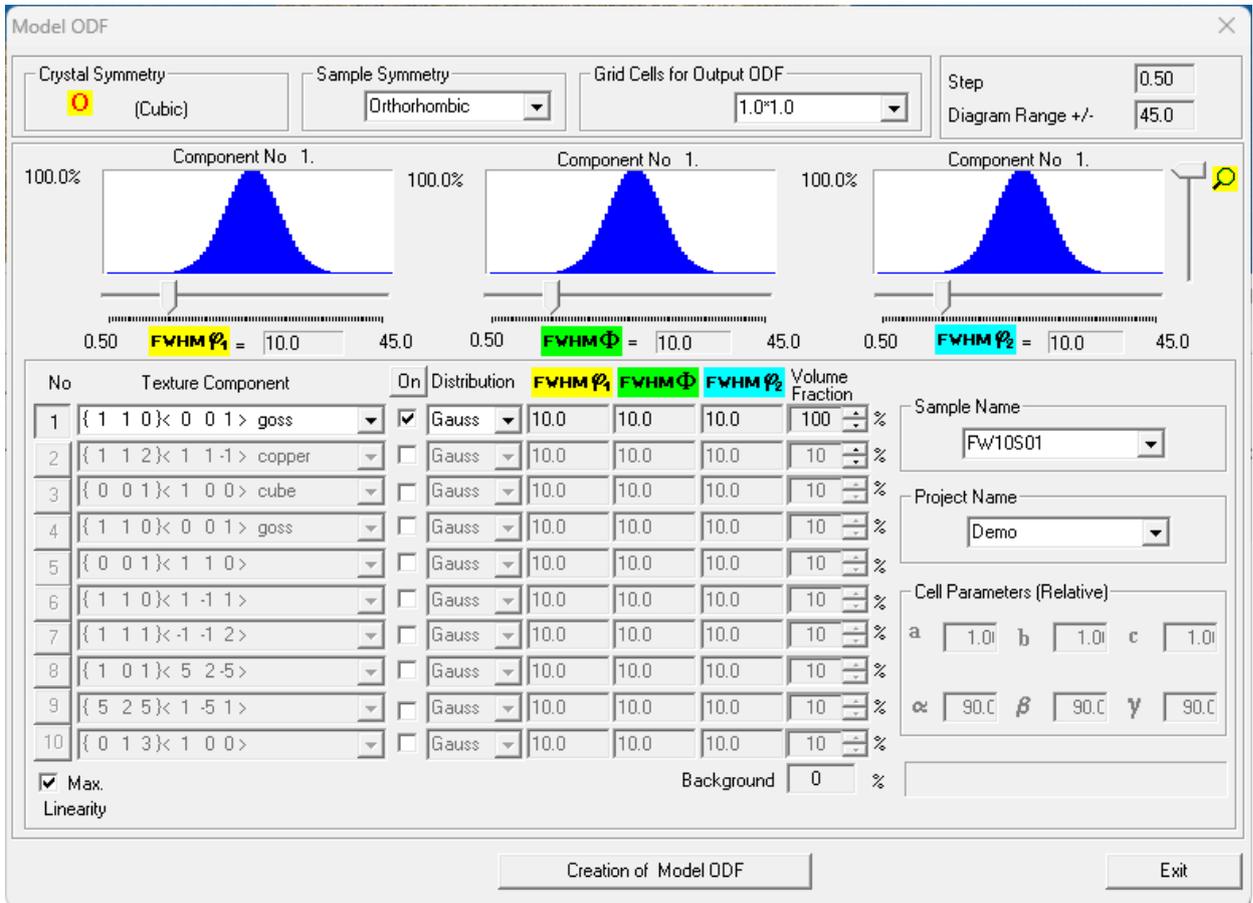
しかし半価幅が狭く、極点図測定時の測定間隔によりこの関係が成り立たない場合があります。解析を簡単にするため、G o s s方位を使って説明します。

G o s s方位では、{0 0 1} 極点図では、(4 5, 9 0) に極があり、ODF図では、(0, 4 5, 0) に極があり、5度サンプリングでも最大値がデータ上に存在する。

## 2. T o o l s

### 2. 1 ODF図の作成

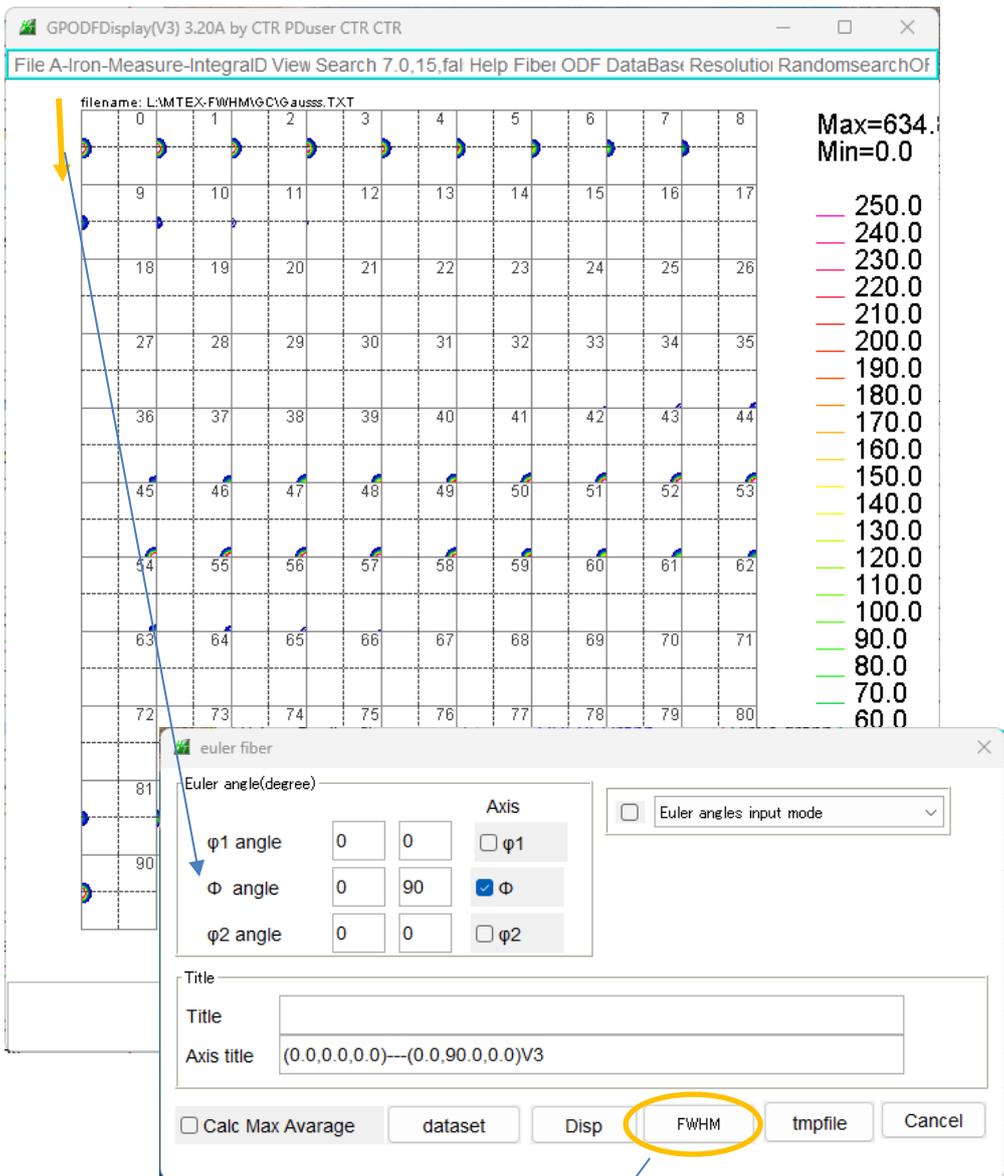
L a b o T e xのM o d e l l i n gを使用



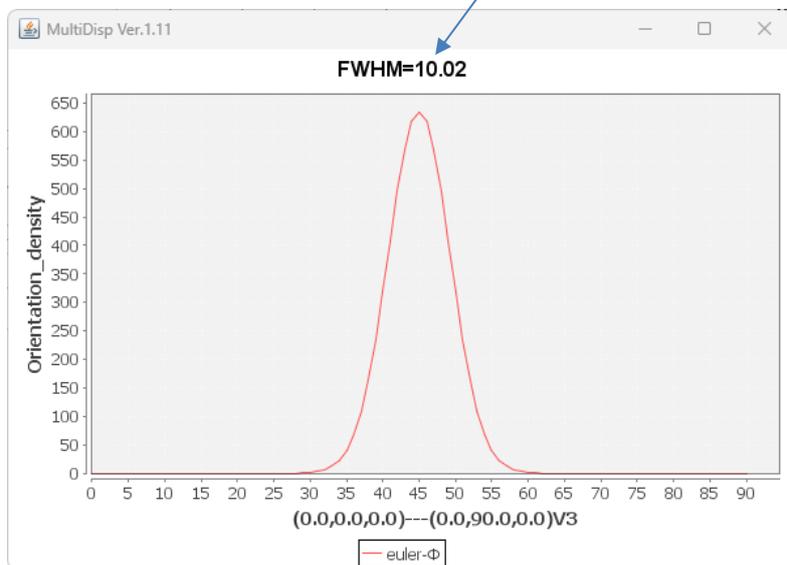
上記画面では、ステップ1. 0度間隔、G a u s s関数FWHM=10degのODF図が作成される。

ODF図はE x p o r可能

## 2. 2 ODF図の半幅幅計算はGPODFDisplay



FWHM の算出



## 2.3 Exportした{001}極点図からFWHM算出

File Help

1 file or 2 files select(TXT2)

Select Path L:\MTEX-FWHM\GC

File1 001\_Gauss\_2.TXT File2

Normalization

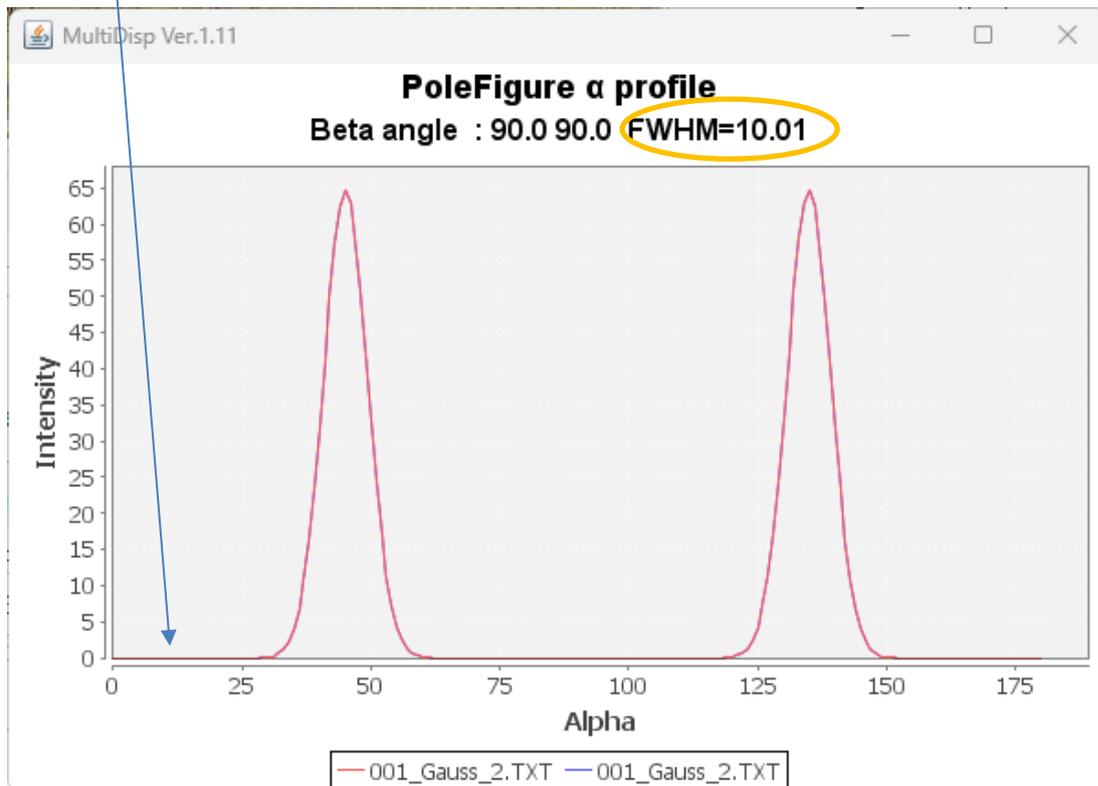
$\alpha$  profile Input beta angle(0 ->360)

average 90 90 Display FWHM

$\beta$  profile Input alpha angle(center 90)(start $\alpha$ -> end $\alpha$ )

30 60 Display FWHM

Comment



## 2. 4 極点図作成

CrystalOrientationDisp 2.12S by CTR PDuser CTR CTR

File Help Symmetry Special Index

Material  
 Material Cubic A-Iron-Measure-IntegralData  
 1.0 1.0 1.0 90.0 90.0 90.0

Miller Indices  
 (hkl)[uvw] 1 1 0 0 0 1 Calc

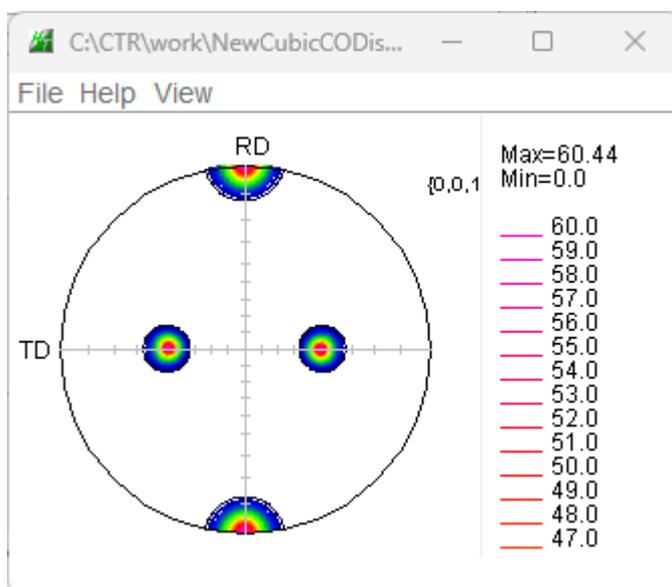
Euler Angle  
 (p1 P p2) <=90 90.0 90.0 45.0 Calc

Present Condition  
 Euler Angle  
 Double Miller Indices

DISP  
 Position 10 Disp size 400 DISP  
 BG color Black Line size 2.0 Minus

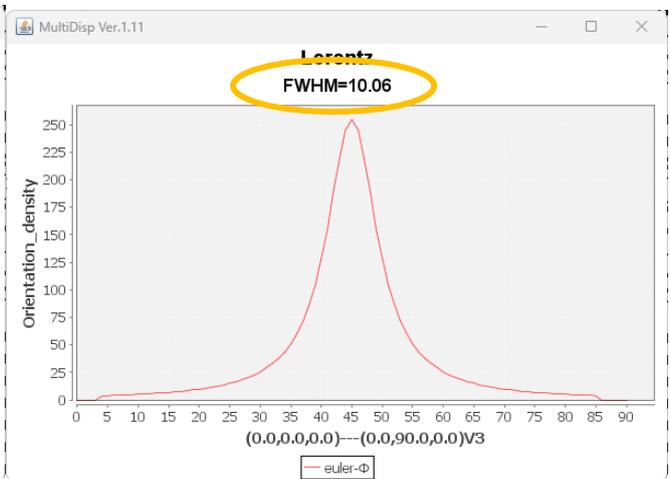
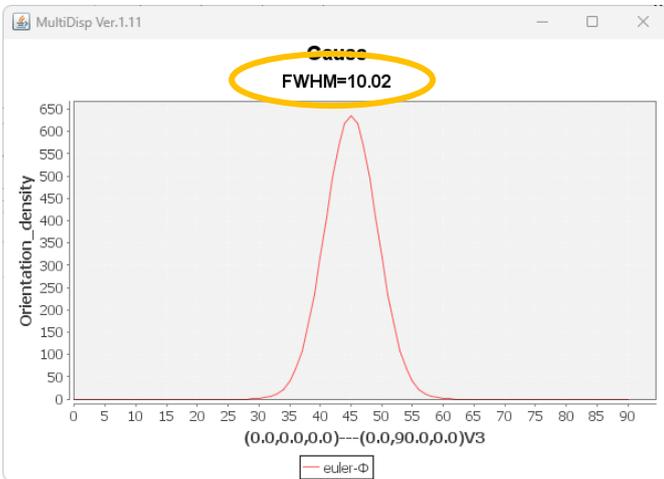
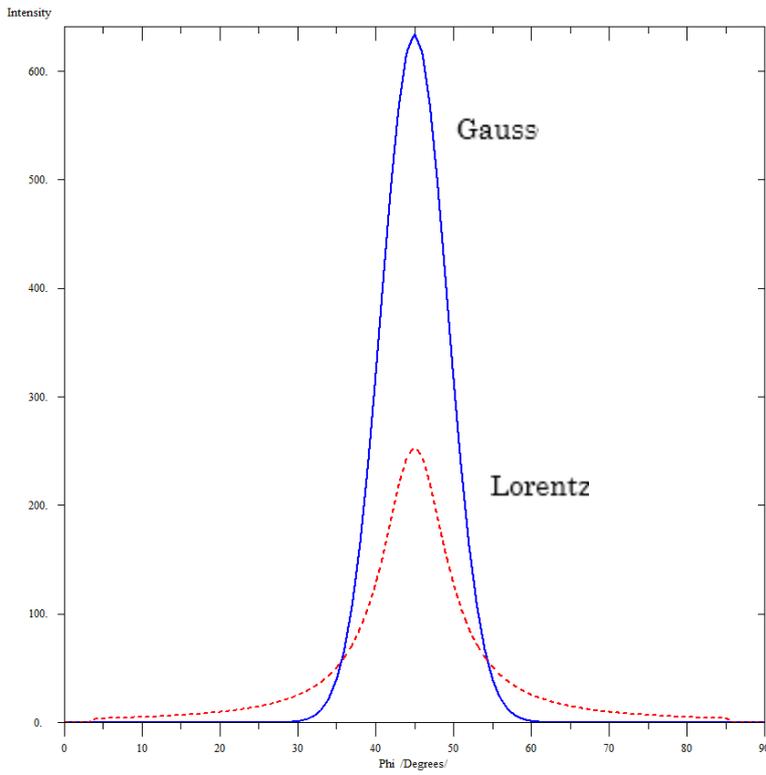
OK Return Structure

Polefigure  
 FWHM 10 degree Polefigure 0 0 1  Orthorhombic Disp  
 Step 1 degree Disp2 PFRotation



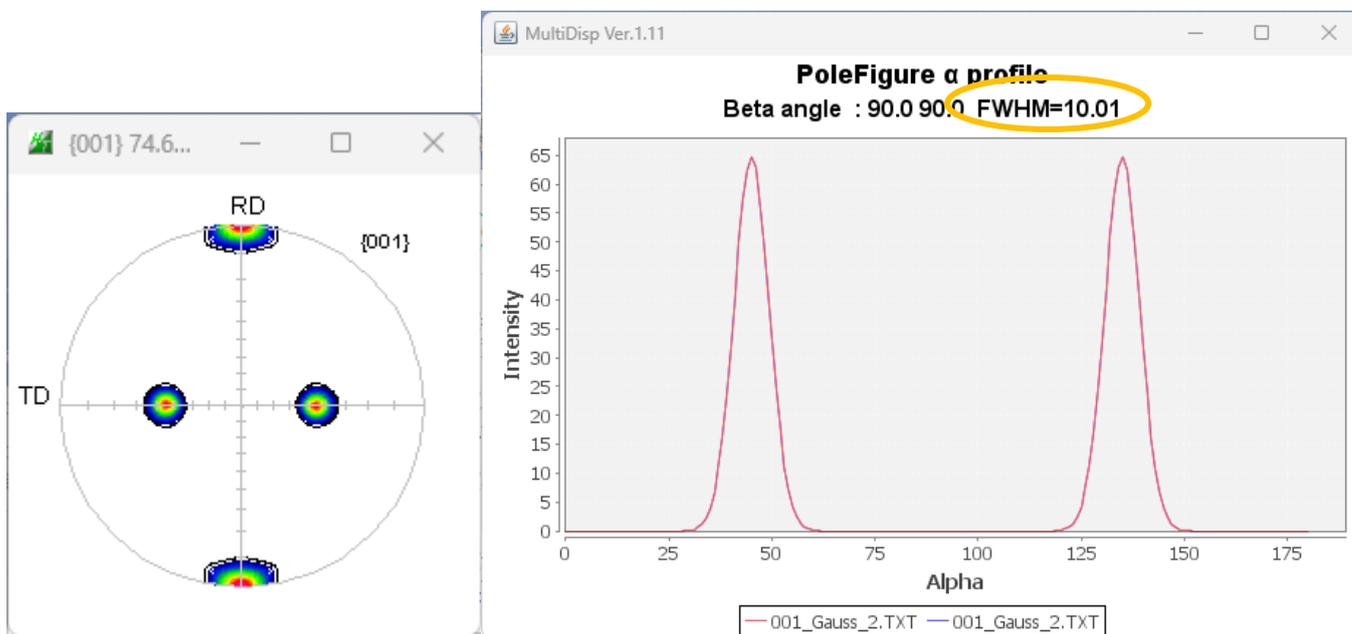
{0 0 1}, {0 1 1}, {1 1 1} 極点図から ODF 解析を行えば極点図に対する ODF 図の FWHM が計算できる。

3. G o s s の O D F 図を f w h m = 1 0 d e g で作成した ( 0 , 0 → 9 0 , 0 )

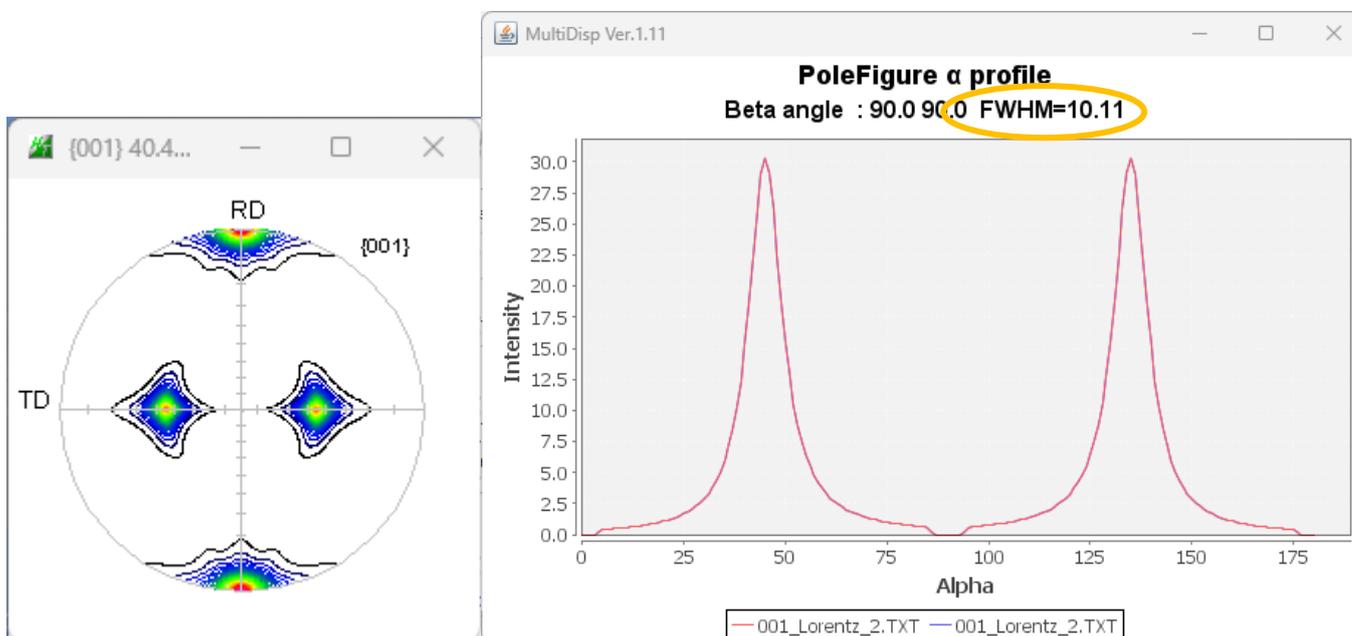


計算手法を変えても、FWHMはほぼ同一

## Gauss関数



## Lorentz関数



FWHM=10degでODF図作成し、作成される極点図のfwhm=10degが得られます。

以上は

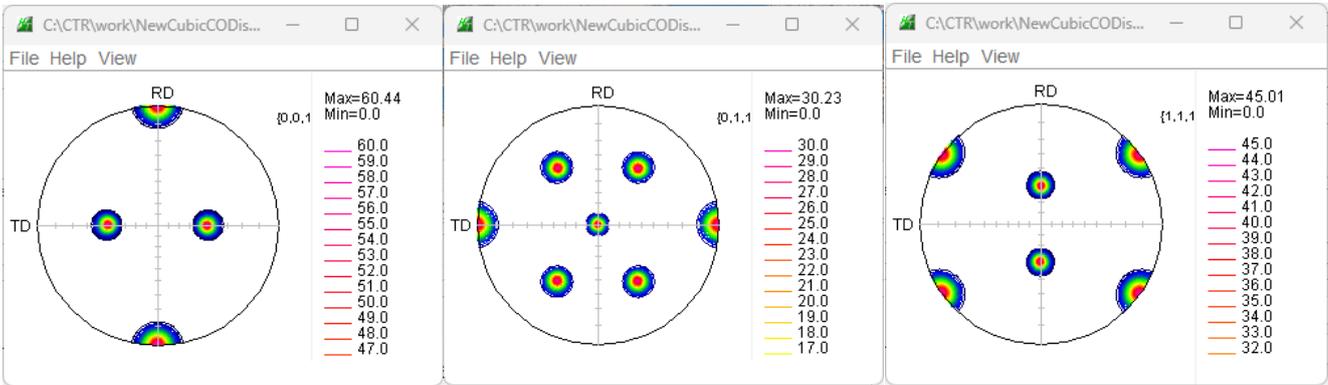
LaboTexでODF図作成

ODF図のFWHM計算はGPODFDisplay (Ver. 3.20)

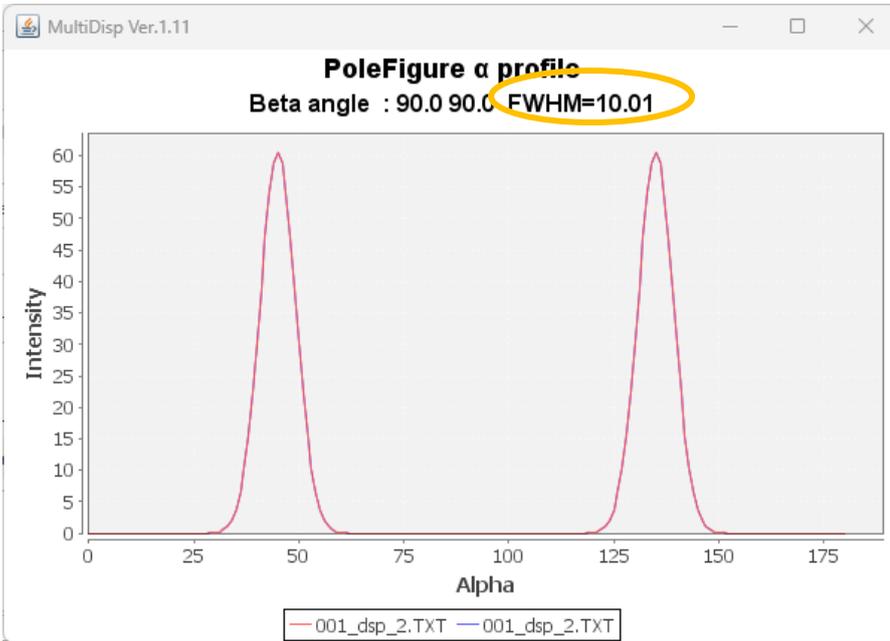
極点図のFWHM計算はPoleFigureProfile (Ver. 1.06)

で評価しました。

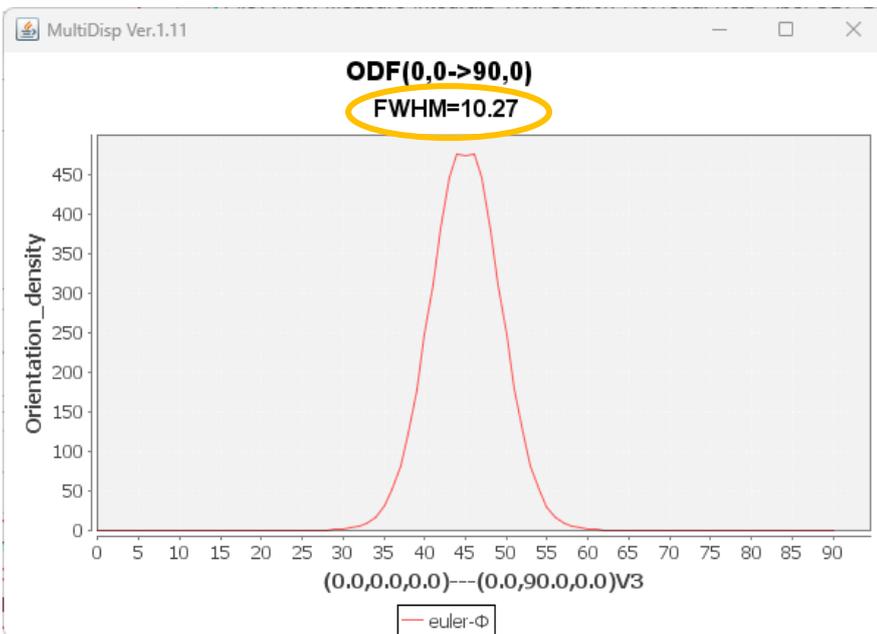
#### 4. FWHM=10degの極点図からODF解析し、ODF図のFWHM計算



fwhm=10degで作成し、fwhm=10.01を得る。

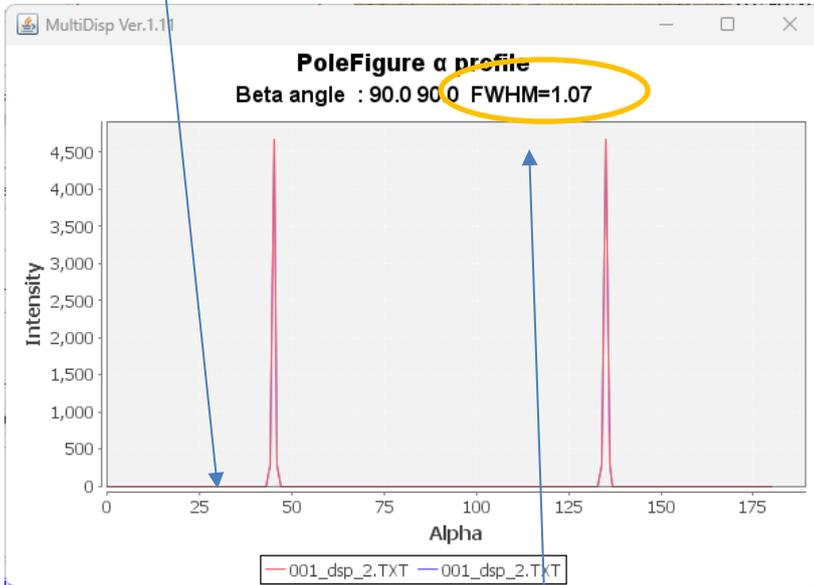
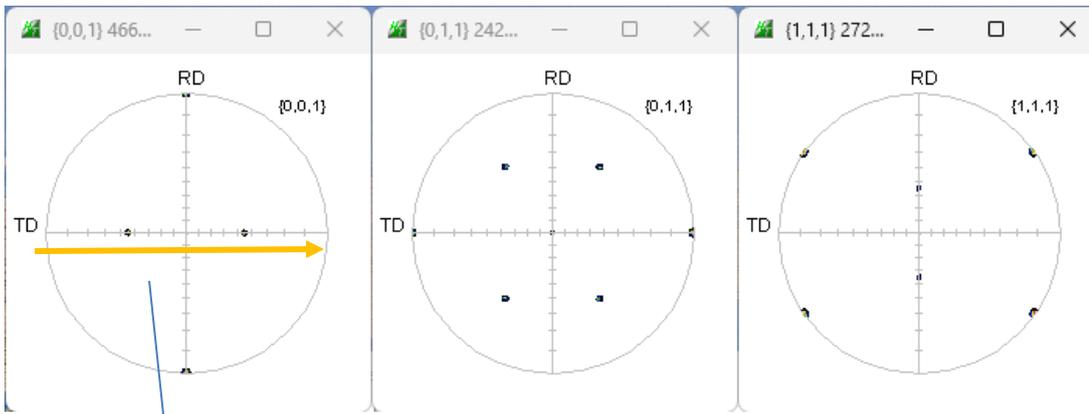


ODF 解析のODF 半幅幅

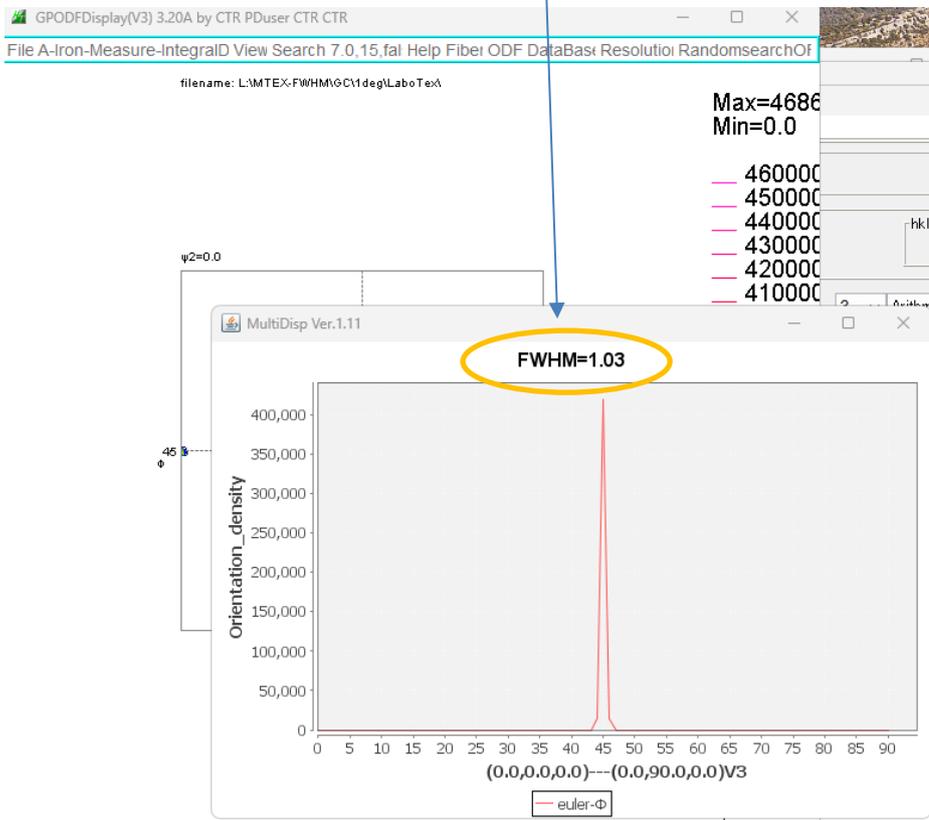


一致します。

5. FWHM=1 degで作成した極点図、ODF図の半価幅

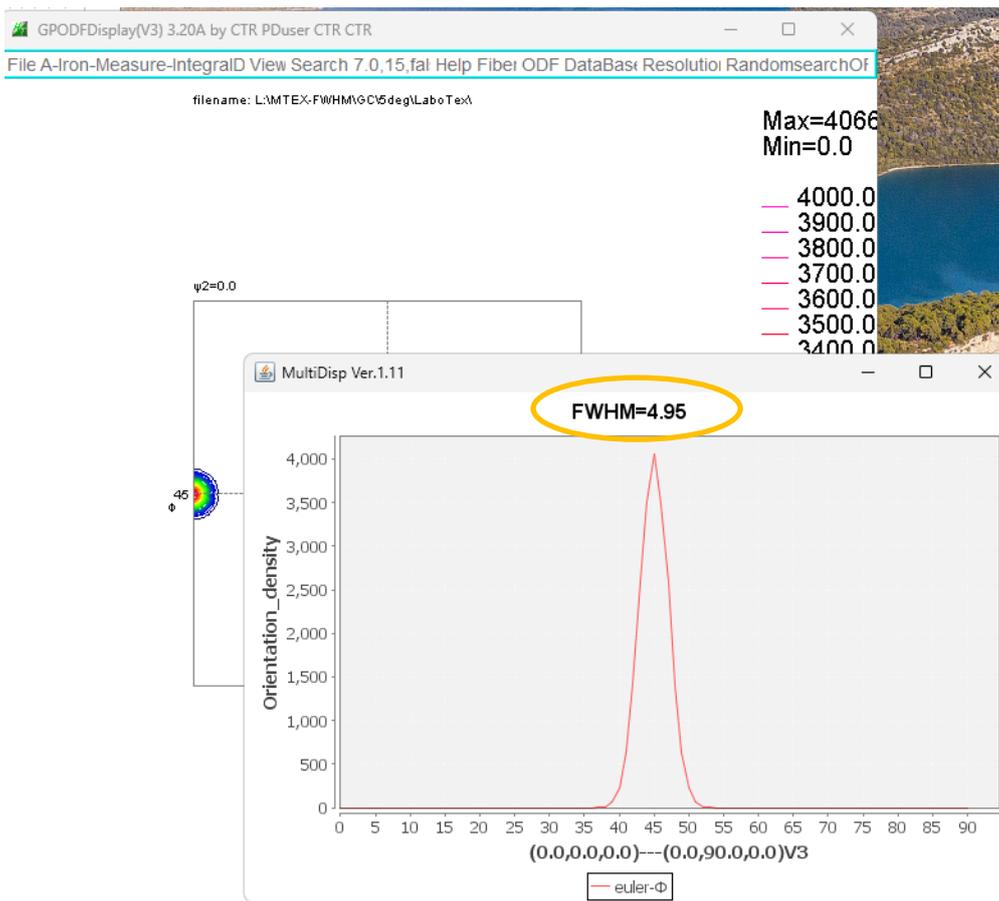
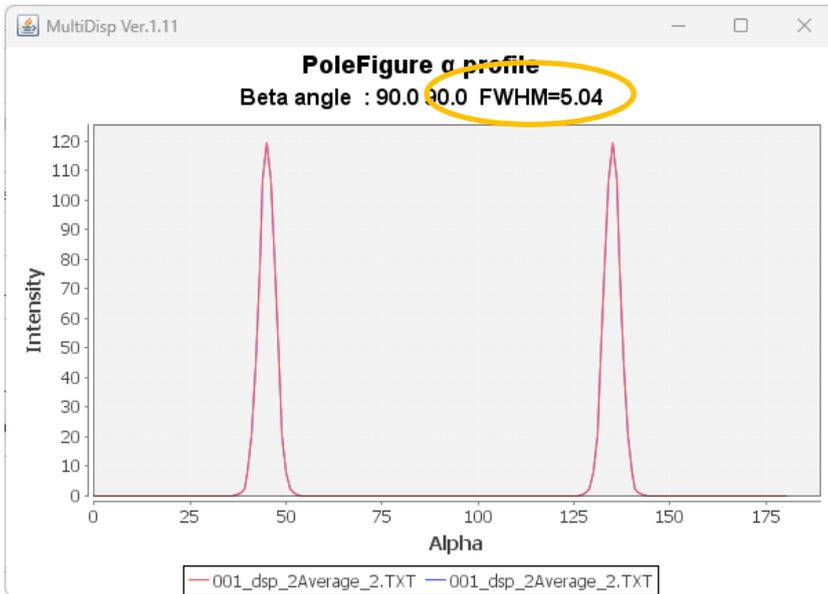
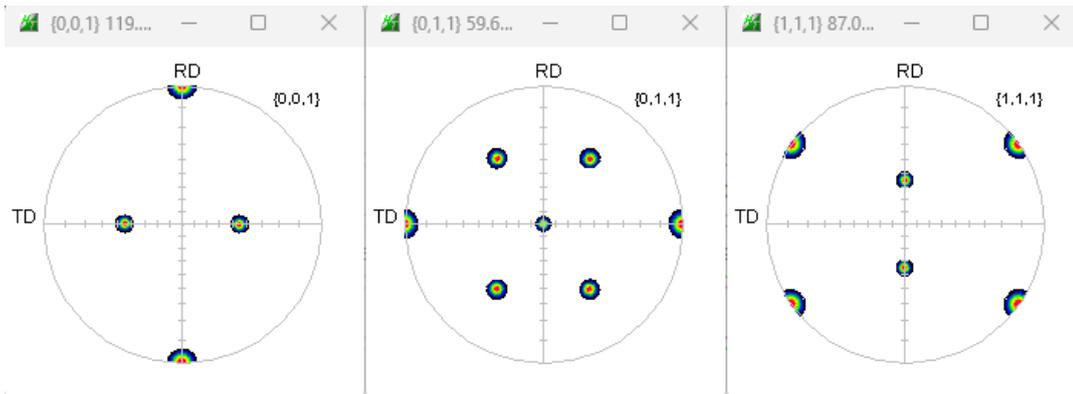


ODF 解析結果



一致する。

6. FWHM=5 degで作成した極点図、ODF図の半幅幅



一致する。

## 7. まとめ

極点図		ODF解析
作成FWHM	解析FWHM	ODF FWHM
1	1.07	1.03
5	5.04	4.96
10	10.01	10.27

G o s s 方位にて、極点図測定ステップ d e g の場合

測定極点図の極半価幅と O D F 解析結果の方位半価幅は一致する。