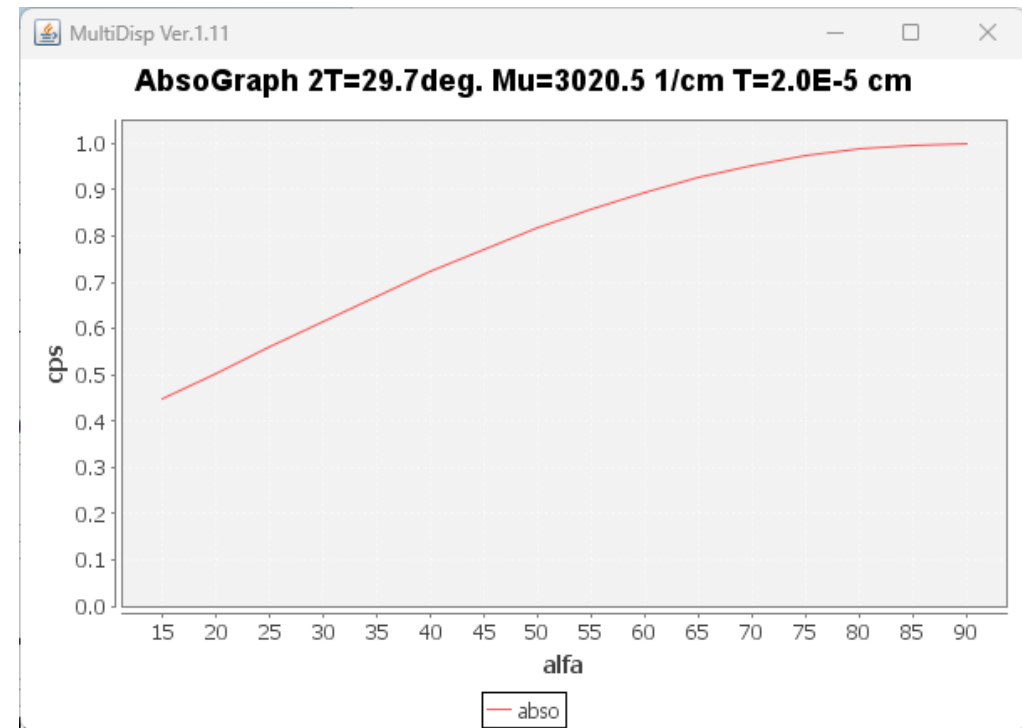
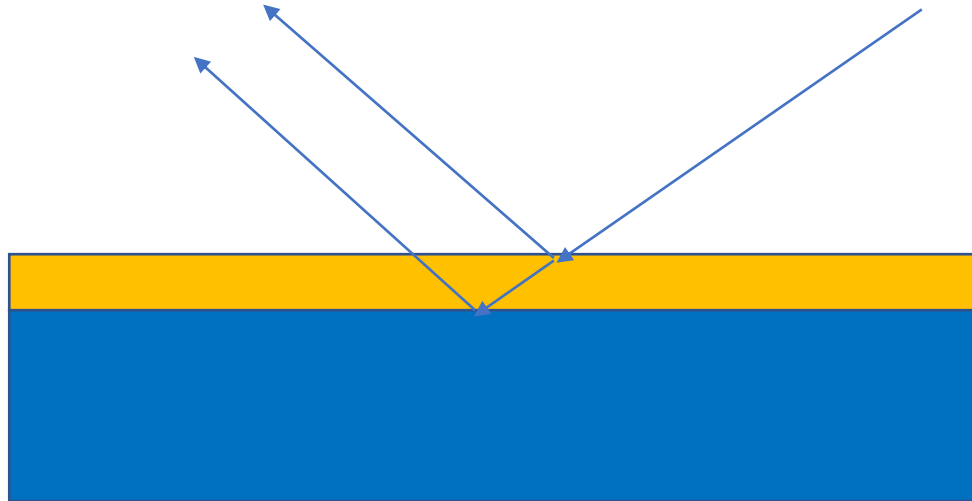


# TetragonalCuFeS2他成分重なり補正法 2

前回、CuFeS2他成分重なり補正をrandomが含まれる状態のシュミレーション行ったが  
今回、random成分が含まれないシュミレーションを行ってみます

CuFeS2(112)  $\mu = 3020.5$   $t=200\text{nm}$   $2\theta = 29.7$



基板からの極点測定における反射はCuFeS2の吸収に比例する

# CuFeS<sub>2</sub>の極点図 <112>Fiber VF=100% FWHM=20deg

Model ODF

Crystal Symmetry:  $D_4$  (Tetragonal) | Sample Symmetry: Orthorhombic | Grid Cells for Output ODF: 5.0\*5.0 | Step: 0.50 | Diagram Range +/-: 45.0

Component No. 1: 100.0% (Three plots showing intensity profiles)

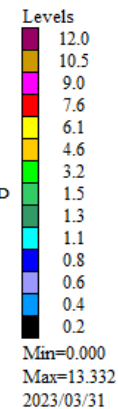
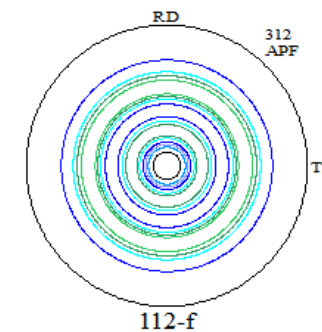
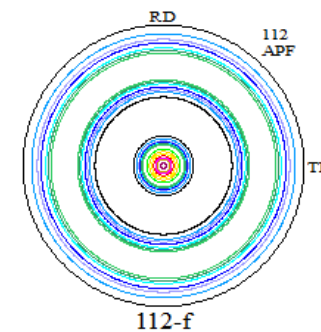
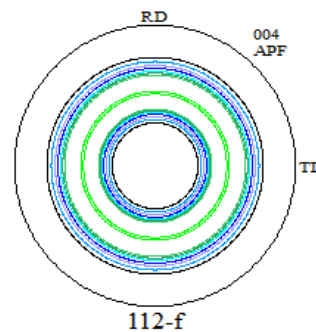
FWHM  $\phi_1$  = fiber | FWHM  $\phi$  = 20.00 | FWHM  $\phi_2$  = 20.00

No	Texture Component	On	Distribution	FWHM $\phi_1$	FWHM $\phi$	FWHM $\phi_2$	Volume Fraction
1	< 1 1 2 > fiber	<input checked="" type="checkbox"/>	Gauss	fiber	20.00	20.00	100 %
2	{ 54.74, 90.0, 45. } brass	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	10 %
3	{ 39.23, 65.91, 26.5 } copper	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	10 %
4	{ 0.0, 45., 0. } goss	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	10 %
5	{ 45., 90., 0. }	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	10 %
6	{ 35.26, 90., 45. }	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	10 %
7	{ 35.26, 90., 45. }	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	10 %
8	{ 90., 54.74, 45. }	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	10 %
9	{ 74.21, 45., 90. }	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	10 %
10	{ 15.23, 47.12, 68.20 }	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	10 %

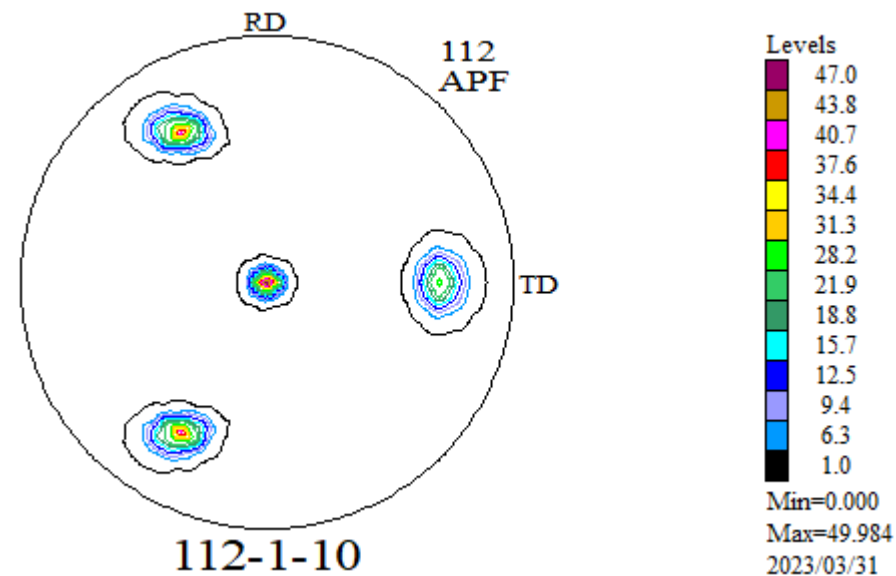
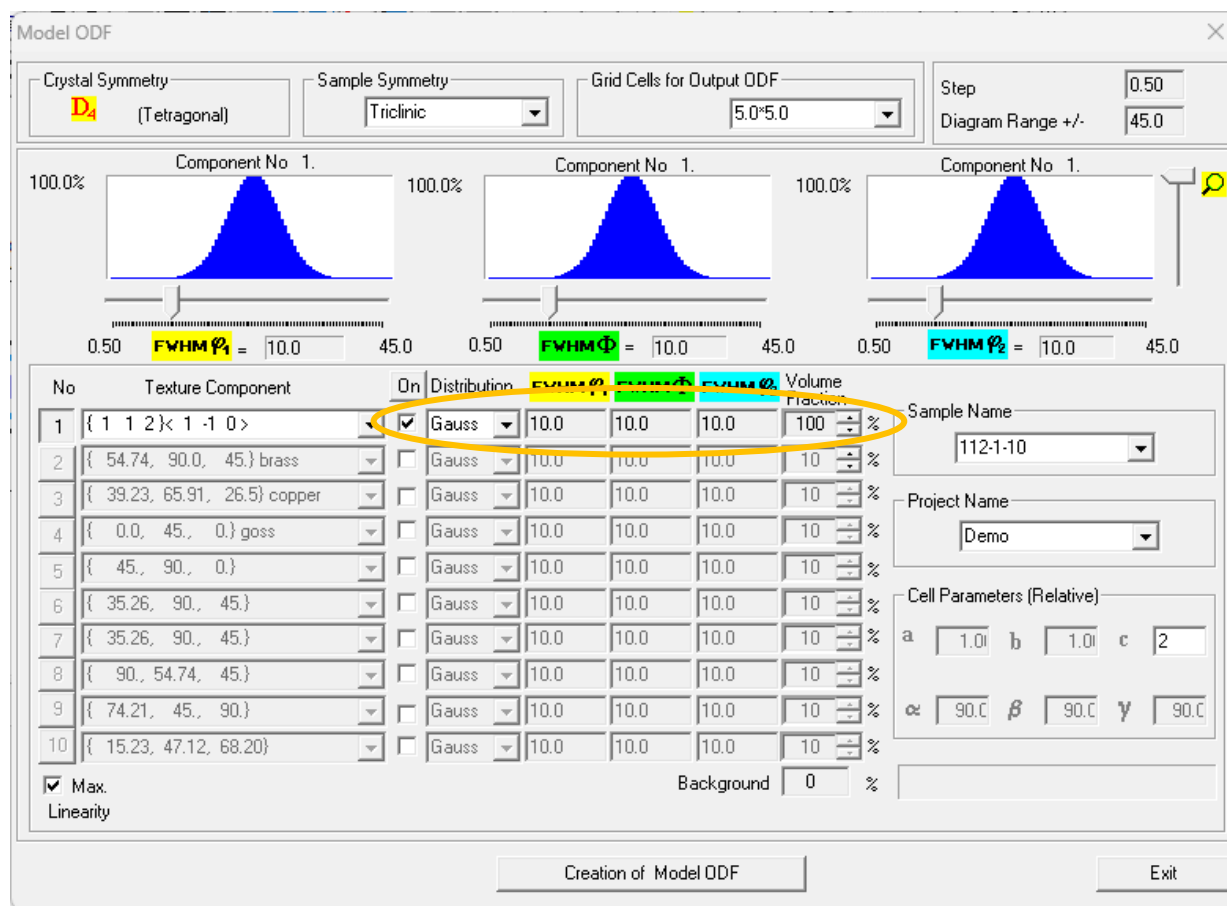
Cell Parameters (Relative): a: 1.0 | b: 1.0 | c: 2 |  $\alpha$ : 90.0 |  $\beta$ : 90.0 |  $\gamma$ : 90.0

Background: 0 %

Buttons: Once more, Exit

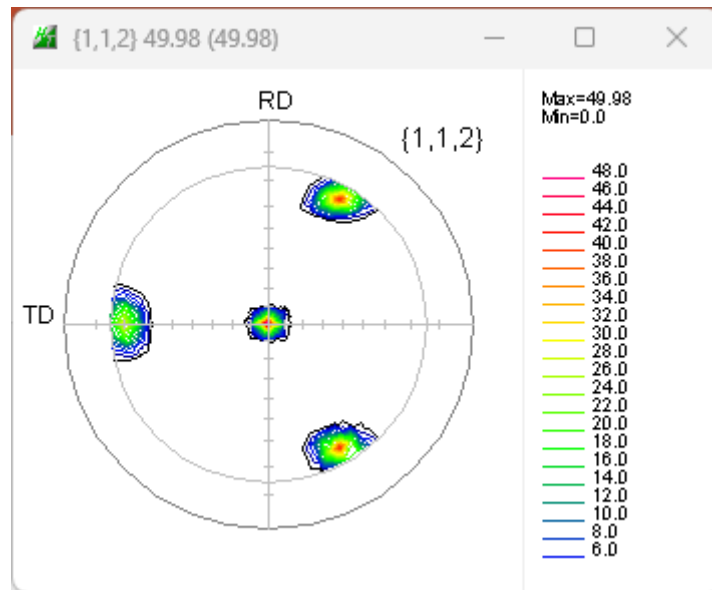


# 基板からの反射{112}<1-10>

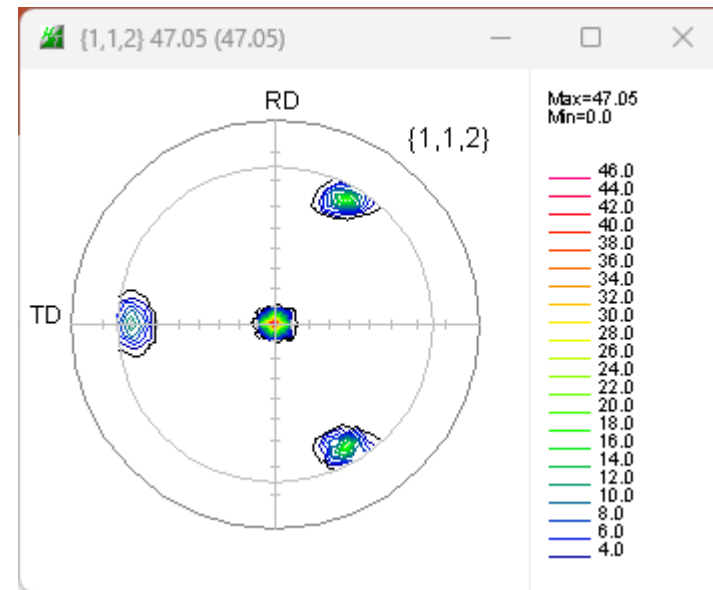


# 基板極点図、CuFeS<sub>2</sub>の吸収による補正

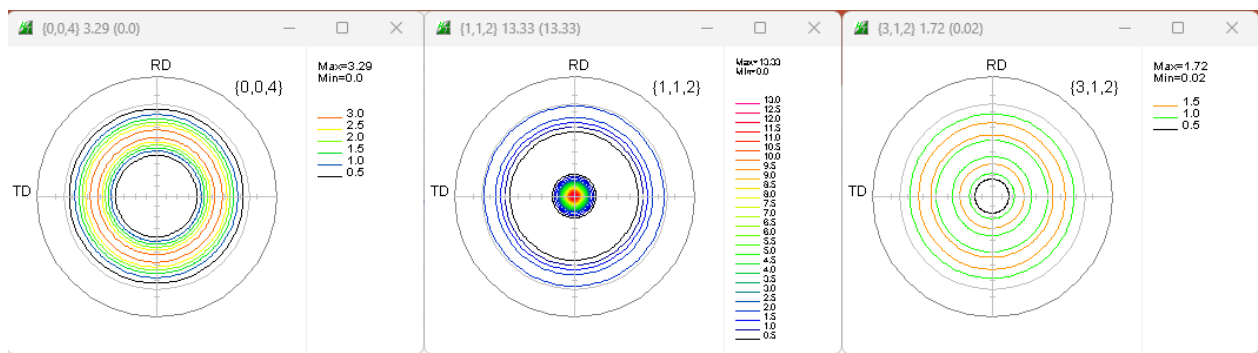
補正前



補正後

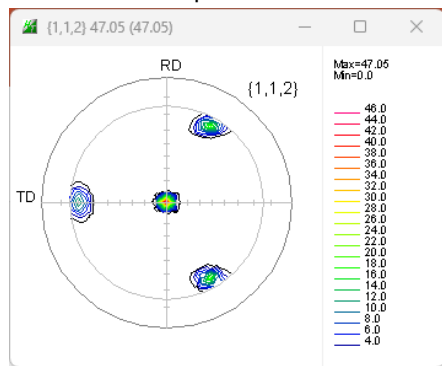


# 測定される極点図



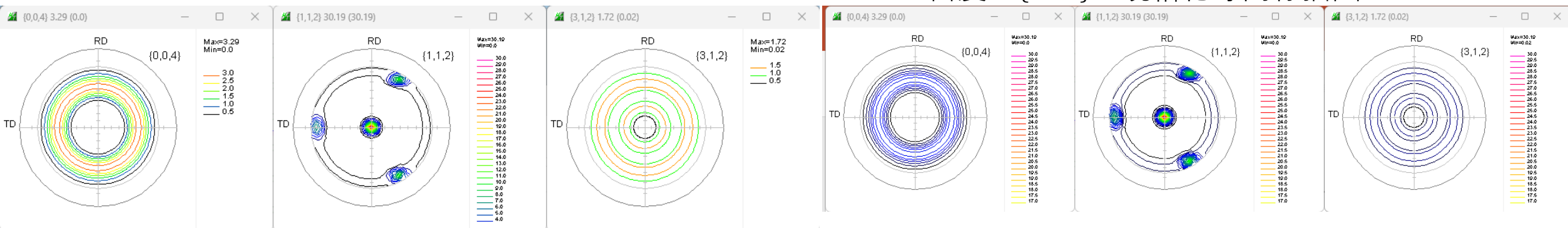
CuFeS2薄膜

+

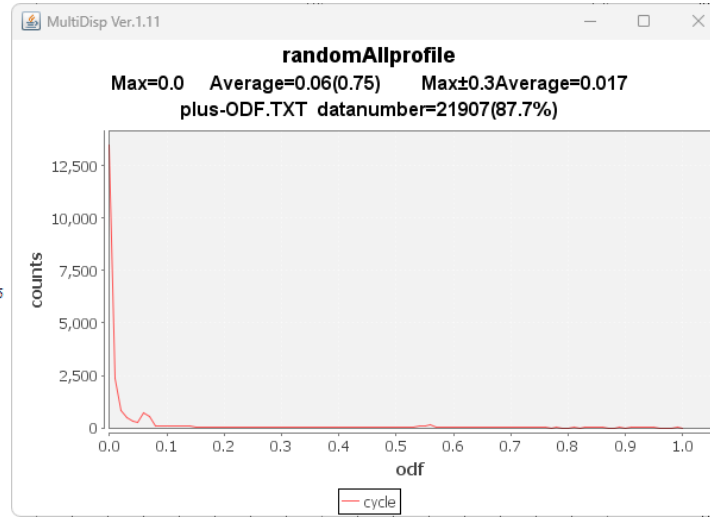
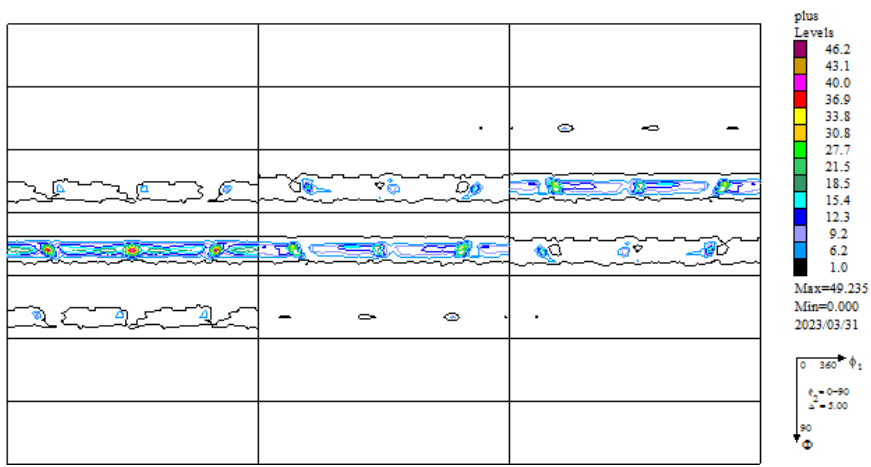


基板からの極点図

密度を{112}で規格化等高線描画

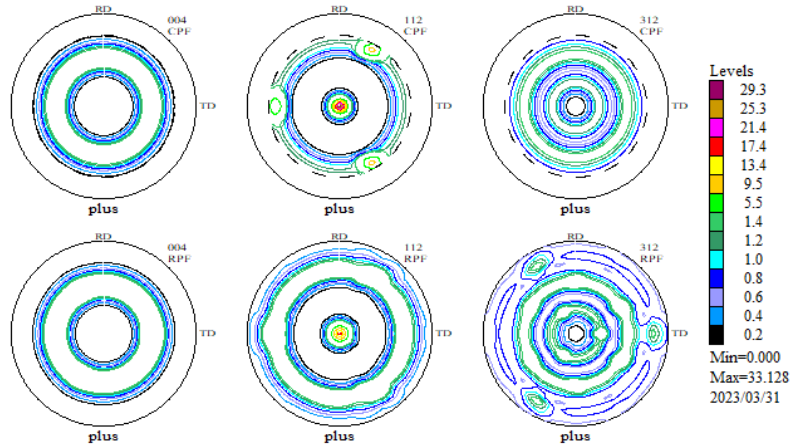


# ODF解析



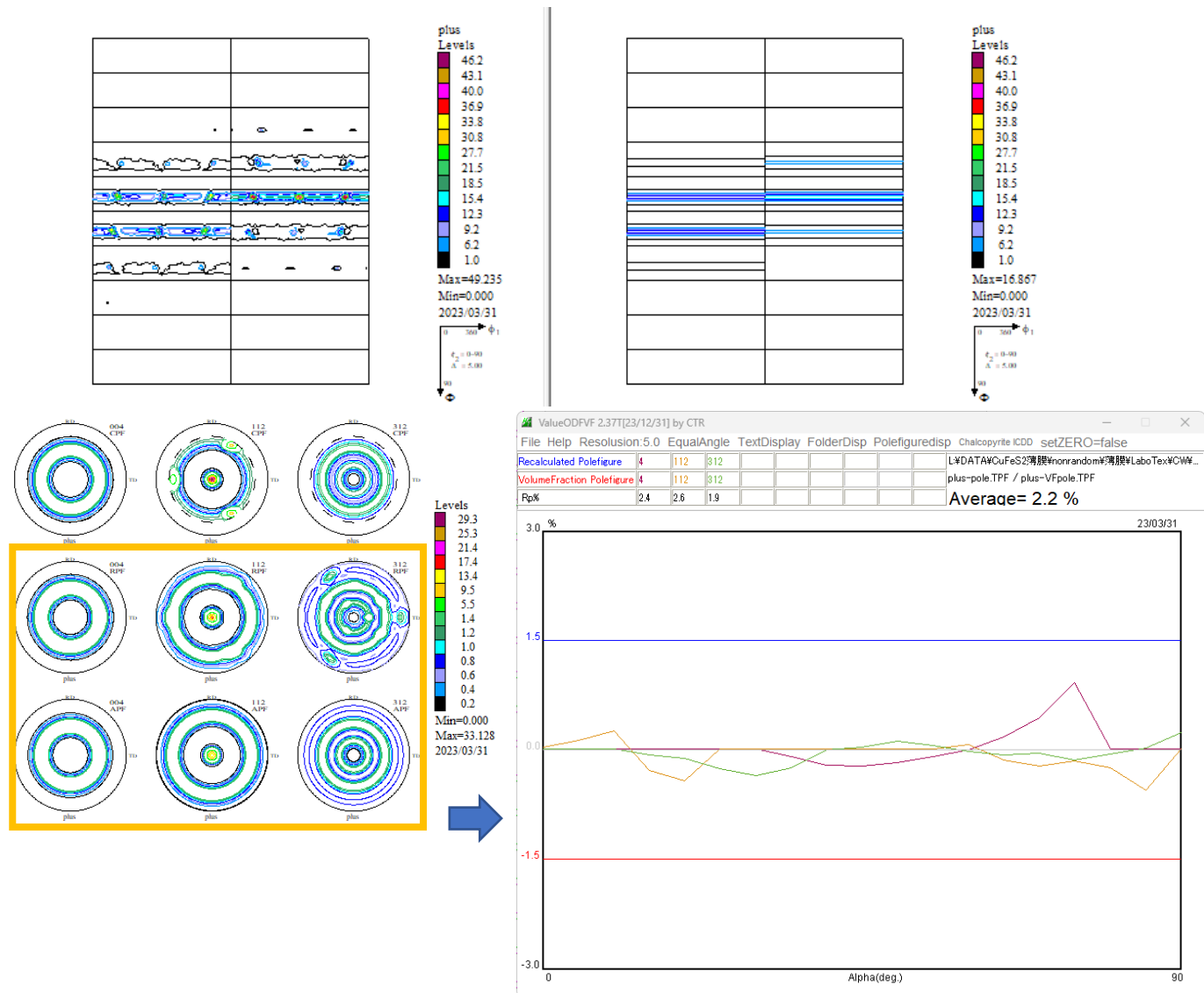
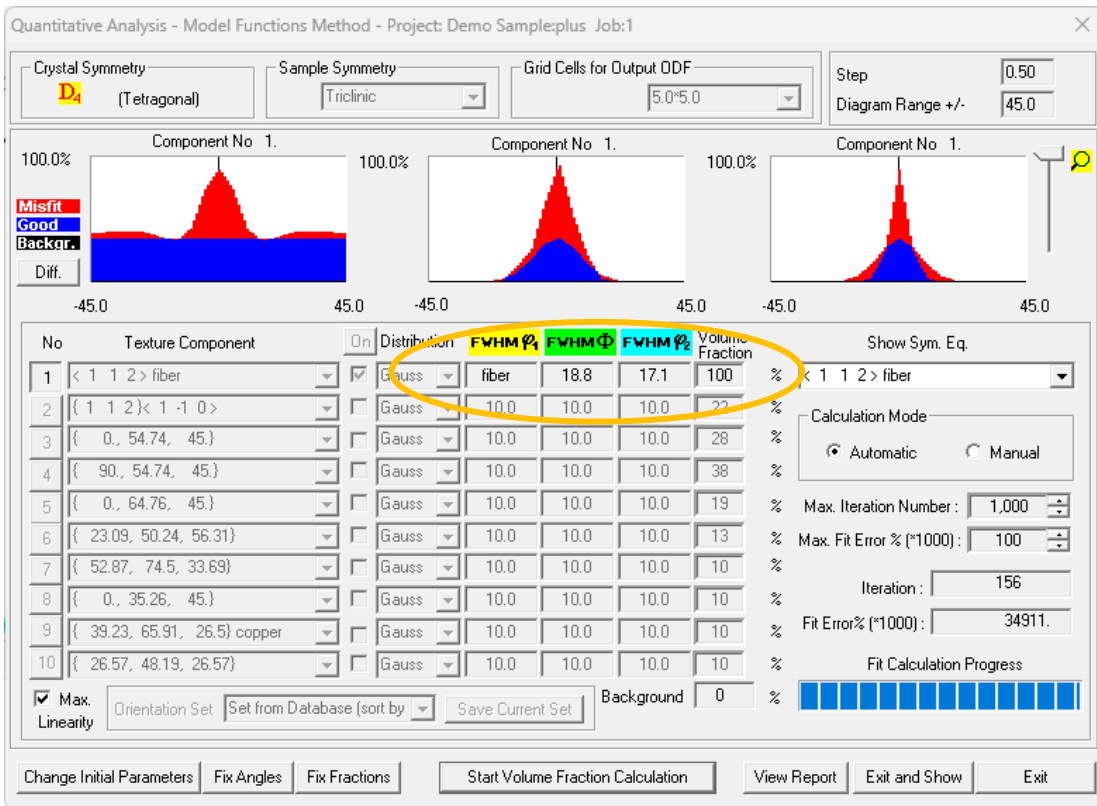
Random=0%

基板の極点図で{112},{312}が乱れている



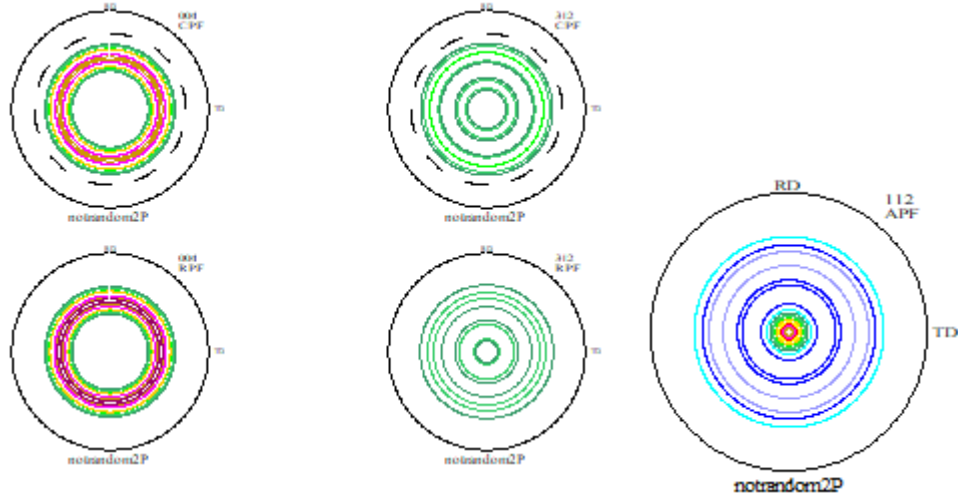
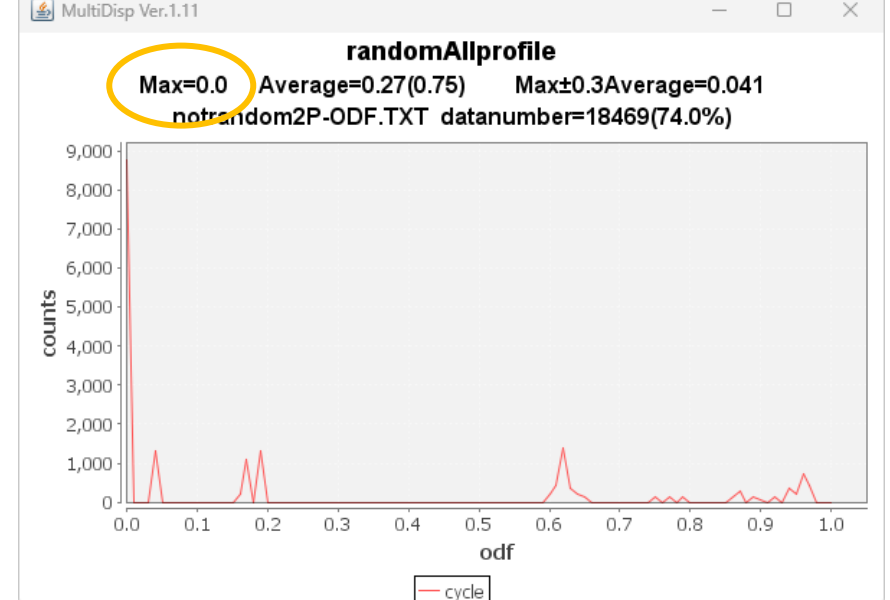
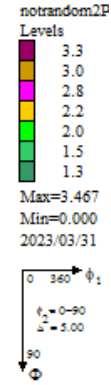
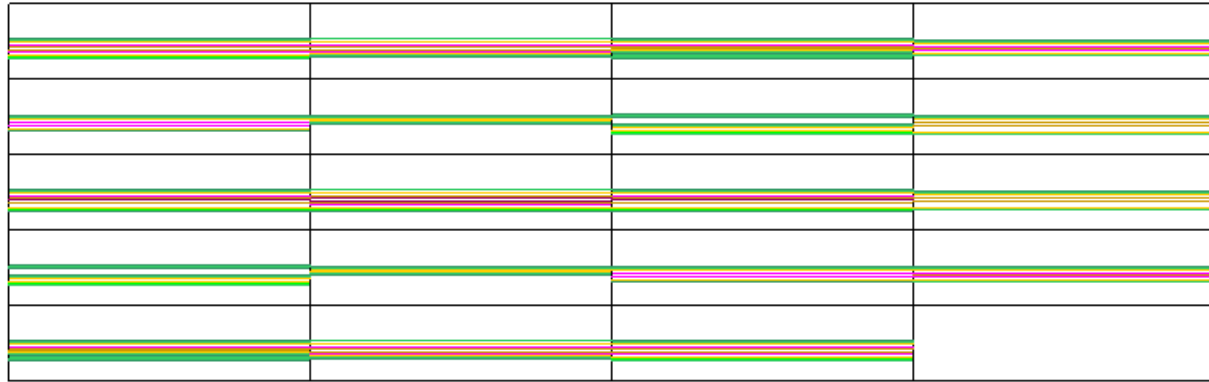
ODF解析結果に対し、  
{1 1 2} 極点図に乱れが発生

# VolumeFraction

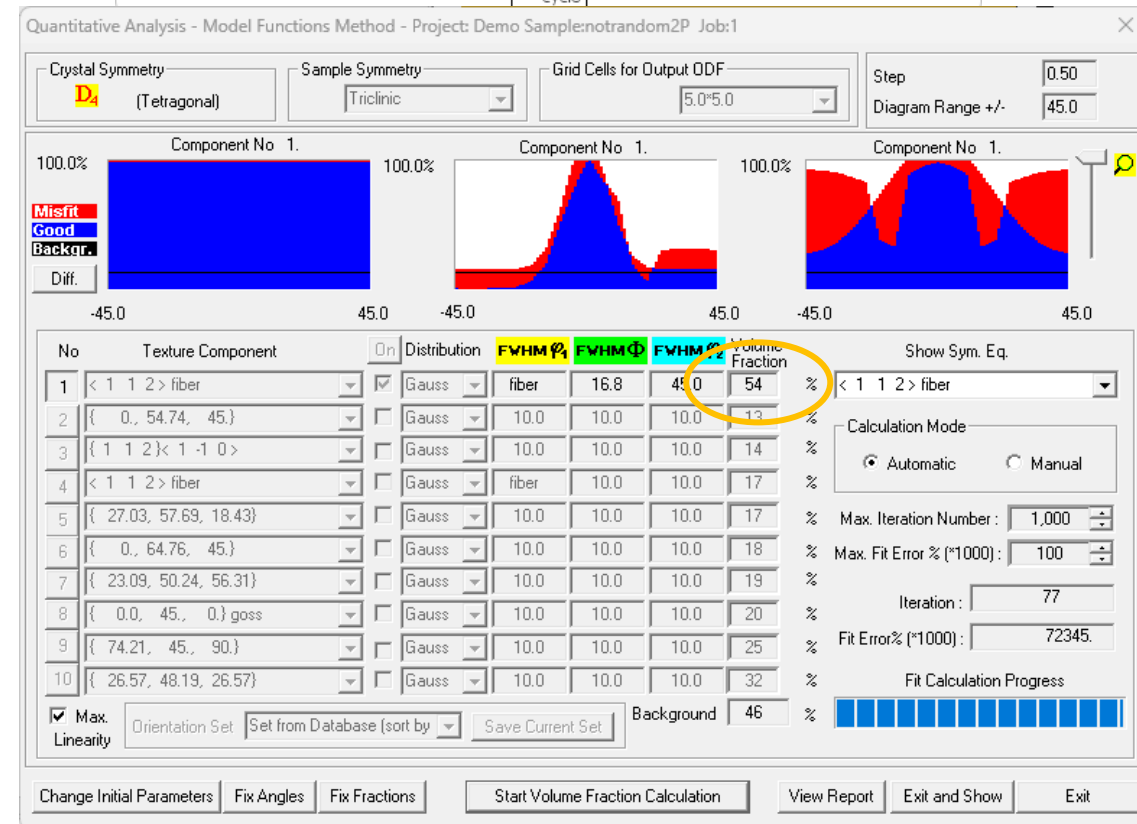


VF%= 1 0 0 %の正解が得られる  
 ODF解析結果の再計算極点図に対し<112>fiberは正確に計算されている

# {004}, {312}による解析



Random=0%であるが、  
 $\langle 112 \rangle$  fiberのVF%は100%が54%で解析できていない





# {112}単独解析

{112}<1-10>は<112>Fiberに含まれるので意味がありません。

# まとめ

他成分の $\{112\}\langle 1-10 \rangle$ が極点図 $\{112\}$ に重なった $\langle 112 \rangle$  fiber=100%のVolumeFractionを $\{004\}\{112\},\{312\}$ 極点図から求めると、VF%=100%が求められる。  
 $\{004\},\{312\}$ 求めると、random%=0%であるが、VF%=100%が得られない。