

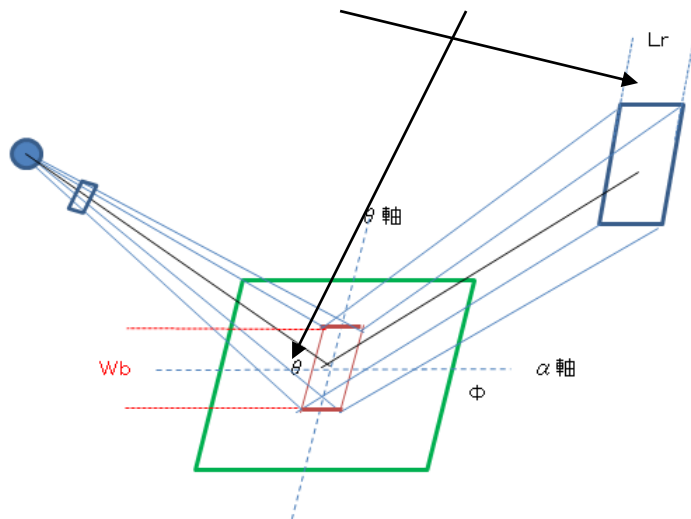
CTRソフトウェアによるrandom補正

2023年02月28日

HelperTex Office

概要

XRDによる極点測定では光学系によるdefocus補正は必須である。
defocusは受光スリット幅と測定 2θ 角度に起因している現象である。



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

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)

実際は、Schulzスリットの位置や形状、ゴニオ半径などシステムに依存するパラメータも関係している。
極点測定では、試料を煽って測定するため、あおり角度 (α 軸) により測定強度が変化する。

この補正をrandom試料により補正による行われている。この補正がdefocus補正である。

測定 2θ 角度により補正量が変化します。合金の場合、 2θ 角度がシフトするため、合金のrandom試料が必要になります。

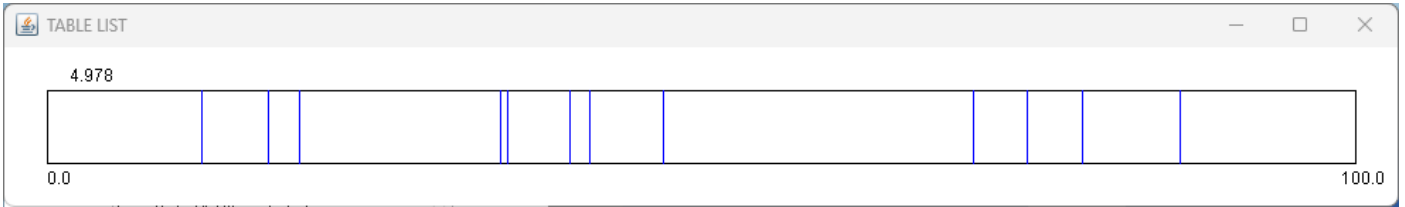
CTRソフトウェアでは、random補正なし、

random補正による一般的なdefocus補正と、

RINT, Ultima, SmartLabで実測したdefocus曲線による、 2θ 補正機能付き補正、
更に上記3種類の補正に対し、最小化Rp%補正を行っています。

この機能を説明します。

S m a r t L a bによる d e f o c u s 測定データ(実測定データ)



各角度データファイル

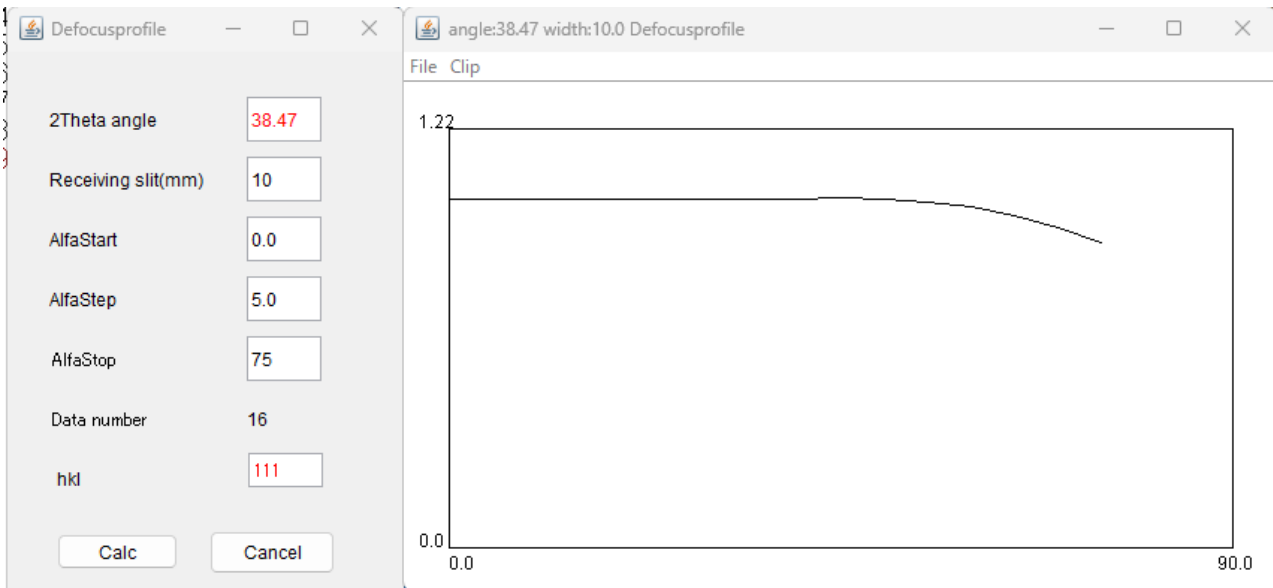
15.1.txt	2012/08/11 19:54	テキスト文書	2 KB
20.16.txt	2012/08/20 10:57	テキスト文書	2 KB
22.6.txt	2012/08/20 11:19	テキスト文書	2 KB
37.98.txt	2012/08/20 11:41	テキスト文書	2 KB
38.47.txt	2012/08/14 9:50	テキスト文書	2 KB
43.29.txt	2012/08/20 9:48	テキスト文書	2 KB
44.71.txt	2012/08/14 10:07	テキスト文書	2 KB
50.42.txt	2012/08/20 10:05	テキスト文書	2 KB
74.06.txt	2012/08/20 10:26	テキスト文書	2 KB
78.2.txt	2012/08/14 10:34	テキスト文書	2 KB
82.4.txt	2012/08/14 10:56	テキスト文書	2 KB
89.88.txt	2012/08/20 10:39	テキスト文書	2 KB

アルミニウムをCu管球、{111} 測定 38.47.txt

```
filename,alfanumber,alfastartangle,alfastep,function-n,mm,12/08/14 DefocusmakeTABLE 3.21X by CTR use
111_ref_1mm_beta_chGFB00S_2.TXT,16,0.0,5.0,5,1.0,1.00243260809926,0.0040783562784557454,-0.001466986614
111_38.47deg_2.0mm_1.0mm_1.024_Calc_2.TXT,16,0.0,5.0,5,2.0,1.0014223232327657,-0.0039361490126248195,
111_38.47deg_4.0mm_1.0mm_0.978_Calc_2.TXT,16,0.0,5.0,5,4.0,0.9987426421279242,0.0019961354045265364,-
111_38.47deg_6.0mm_1.0mm_1.019_Calc_2.TXT,16,0.0,5.0,5,6.0,0.9983851041475088,0.0015024163949307813,-
111_38.47deg_8.0mm_1.0mm_1.044_Calc_2.TXT,16,0.0,5.0,5,8.0,1.0009535496139639,-0.0013791921080065295,
111_38.47deg_10.0mm_1.0mm_1.062_Calc_2.TXT,16,0.0,5.0,5,10.0,1.0023502783000933,-0.002704330199093919
111_38.47deg_12.0mm_1.0mm_1.16_calc_2.TXT,16,0.0,5.0,5,12.0,1.0025100943765948,-0.0027895380985302363
[EOF]
```

受光スリット1mmから12mmまで実測定データ

$2\theta = 38.47$ を受光スリット10mmで測定のdefocus曲線

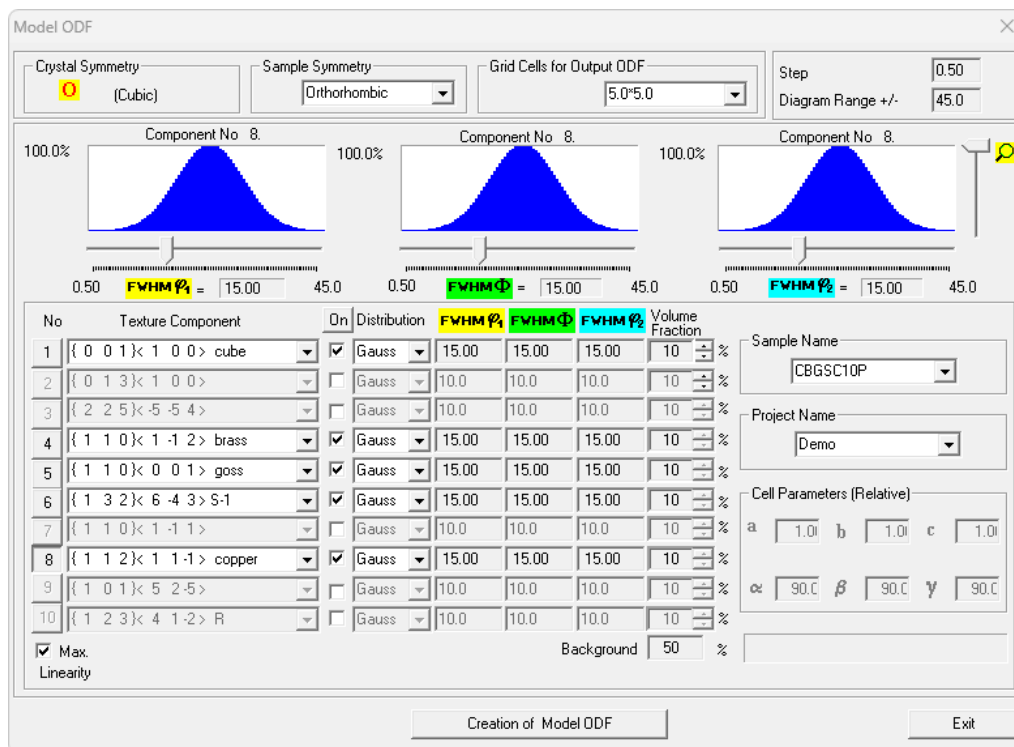


受光スリットと 2θ 角度によりS m a r t L a bの光学系による曲線が計算される。

上記データから 2θ 確度、受光スリット幅による曲線を得る。

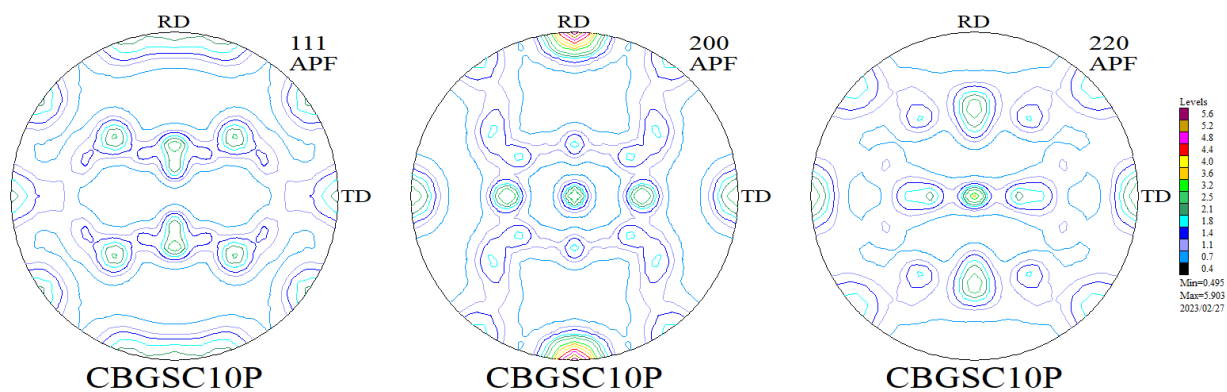
説明に使用するデータ作成

LaboTexによる cube, brass, goss, S, copper 10%を含む極点図

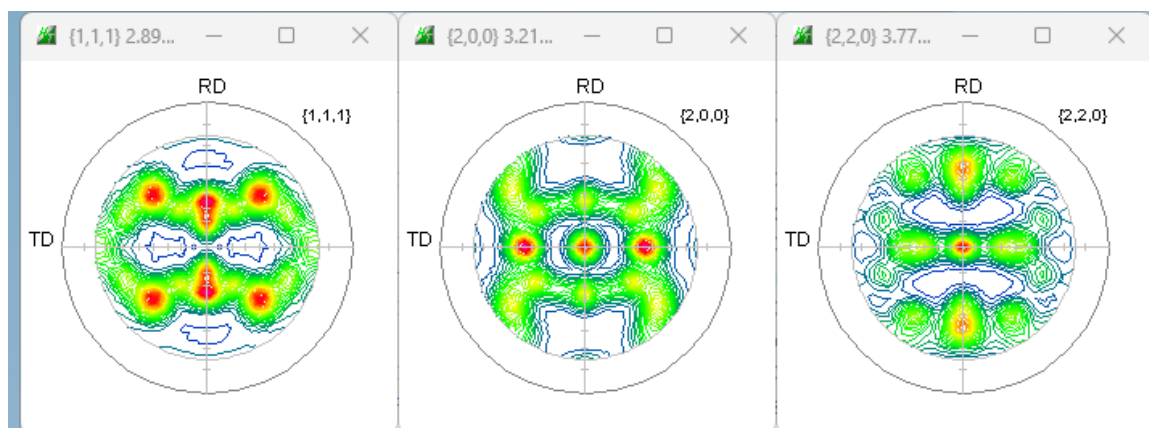


random = 50%

から極点図を作成



反射極点図



調べる内容

完全極点図と不完全極点図の ODF 解析結果比較

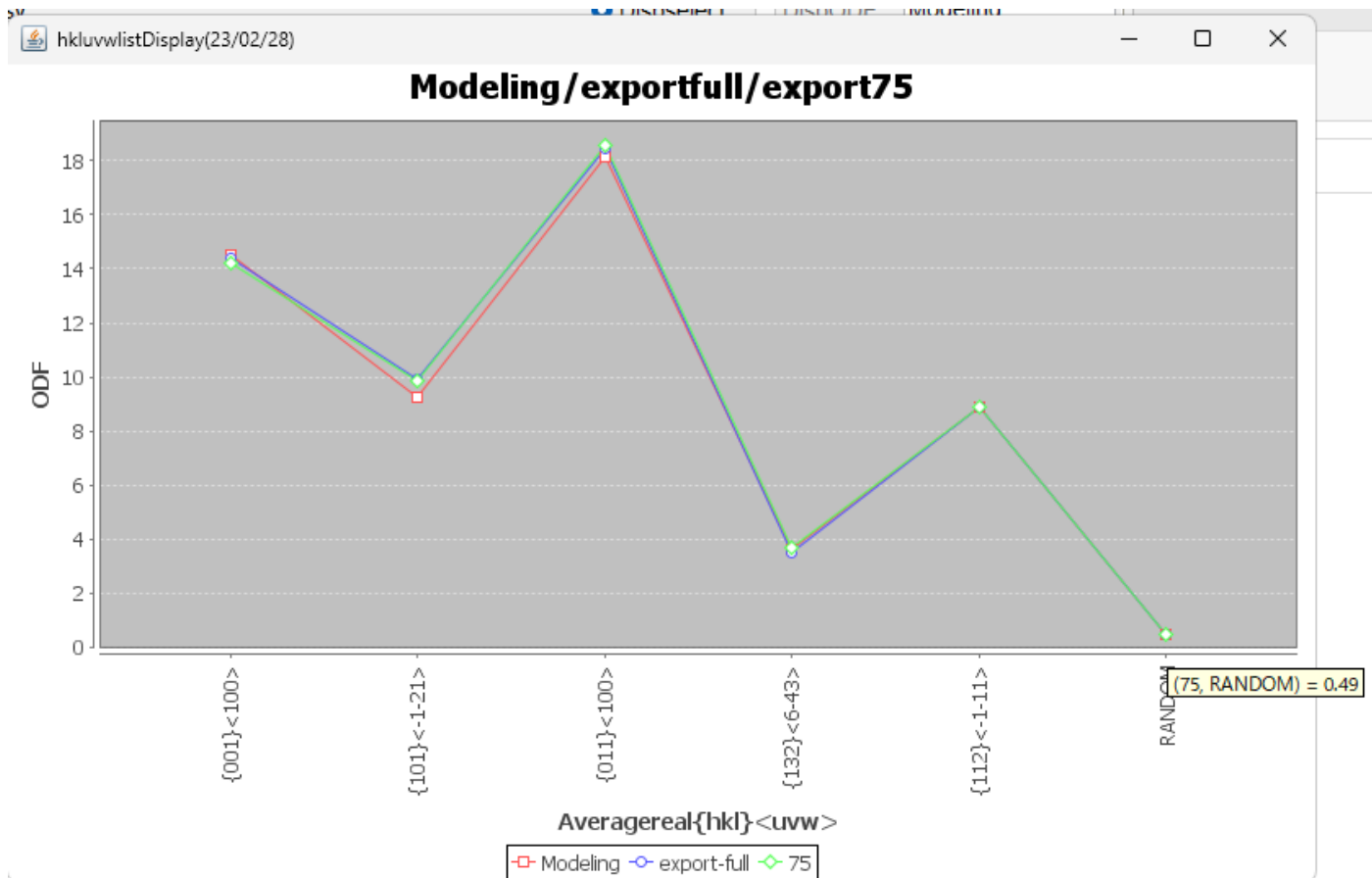
不完全極点の d e f o c u s 補正なしと不完全極点図の ODF 解析結果比較

不完全極点図の d e f o c u s 補正ありと不完全極点図の ODF 解析結果比較

完全極点図と不完全極点図の ODF 解析結果比較

ODF 図から各方位角度の密度比較

```
Averagereal{hkl}<uvw>,Modeling,export-full,75  
{001}<100>,14.49,14.4,14.2  
{101}<-1-21>,9.27,9.91,9.85  
{011}<100>,18.13,18.46,18.56  
{132}<6-43>,3.62,3.52,3.67  
{112}<-1-11>,8.9,8.92,8.91  
RANDOM,0.5,0.5,0.49
```



Modelingは、LaboTexでModellingしたODF図による密度

Export-fullは、Modelling極点図をExportし、再度LaboTexに読み込みODF計算したODF図に密度

75は、Exportした極点図から反射極点図を作成し、LaboTexに読み込みODF計算したODF図の密度

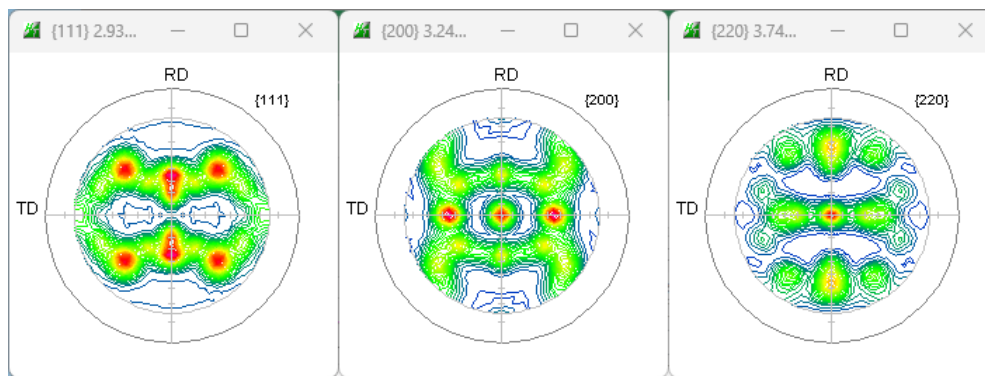
Fullと反射極点図は一致している。

この結果は以下で評価している

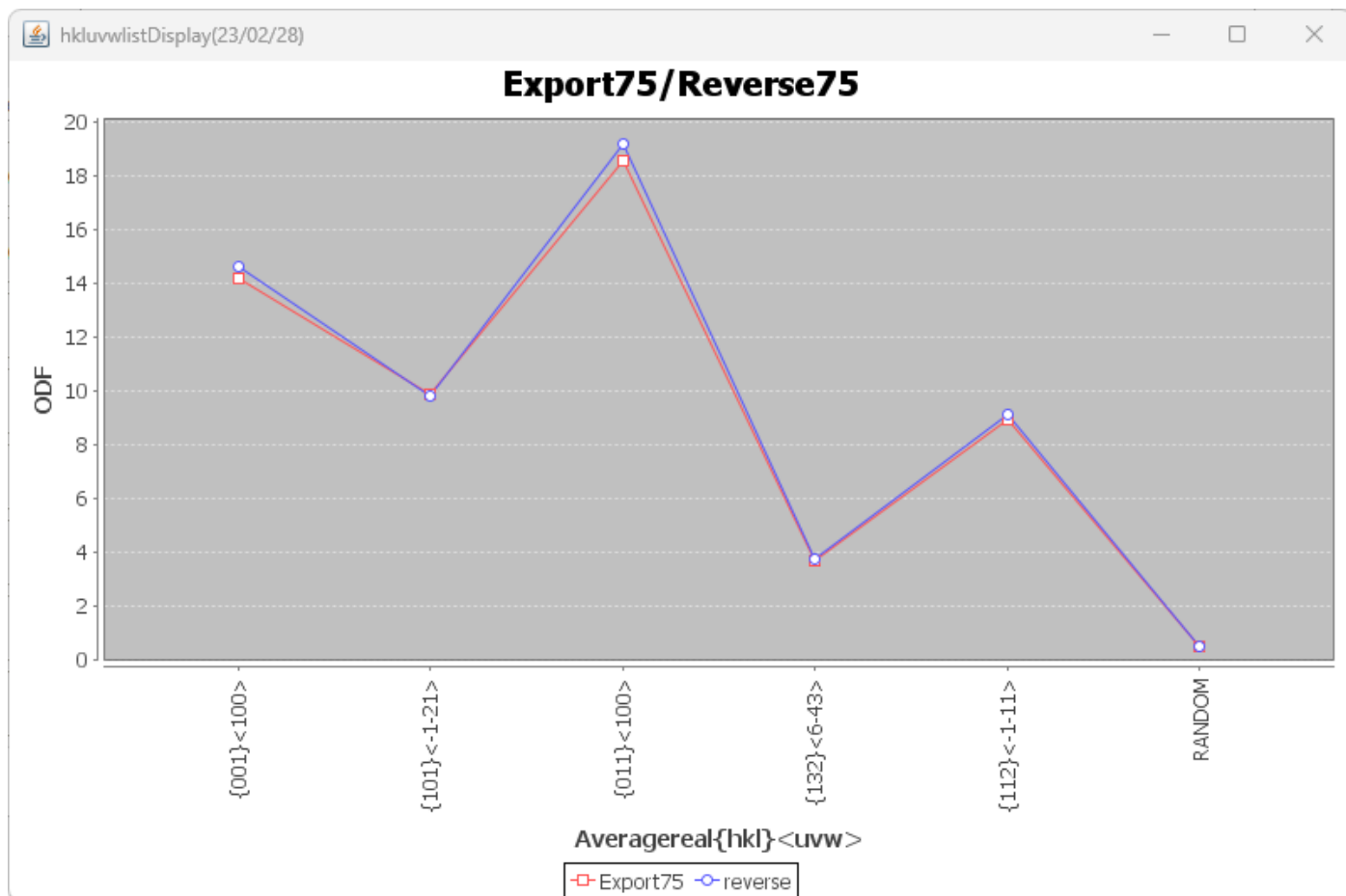
<https://helpertex.sakura.ne.jp/Soft/DOC/LaboTex/LaboTex-PoleErea.pdf>

不完全極点の defocus 補正なしと不完全極点図の ODF 解析結果比較

defocus 補正を行わない場合



```
Averagereal{hkl}<uvw>,Export75,reverse
{001}<100>,14.2,14.63
{101}<-1-21>,9.85,9.81
{011}<100>,18.56,19.17
{132}<6-43>,3.67,3.74
{112}<-1-11>,8.91,9.11
RANDOM,0.49,0.49
```



defocus 補正を行わないと全ての方位で異なった結果が計算される

不完全極点図の defocus 補正ありと不完全極点図の ODF 解析結果比較

Defocus file Select Transmission defocus HKL+T

Defocus(1) functions file L:\DATA\calc\DefocusODF\AI-defocus\DefocusTABLEfilename.txt

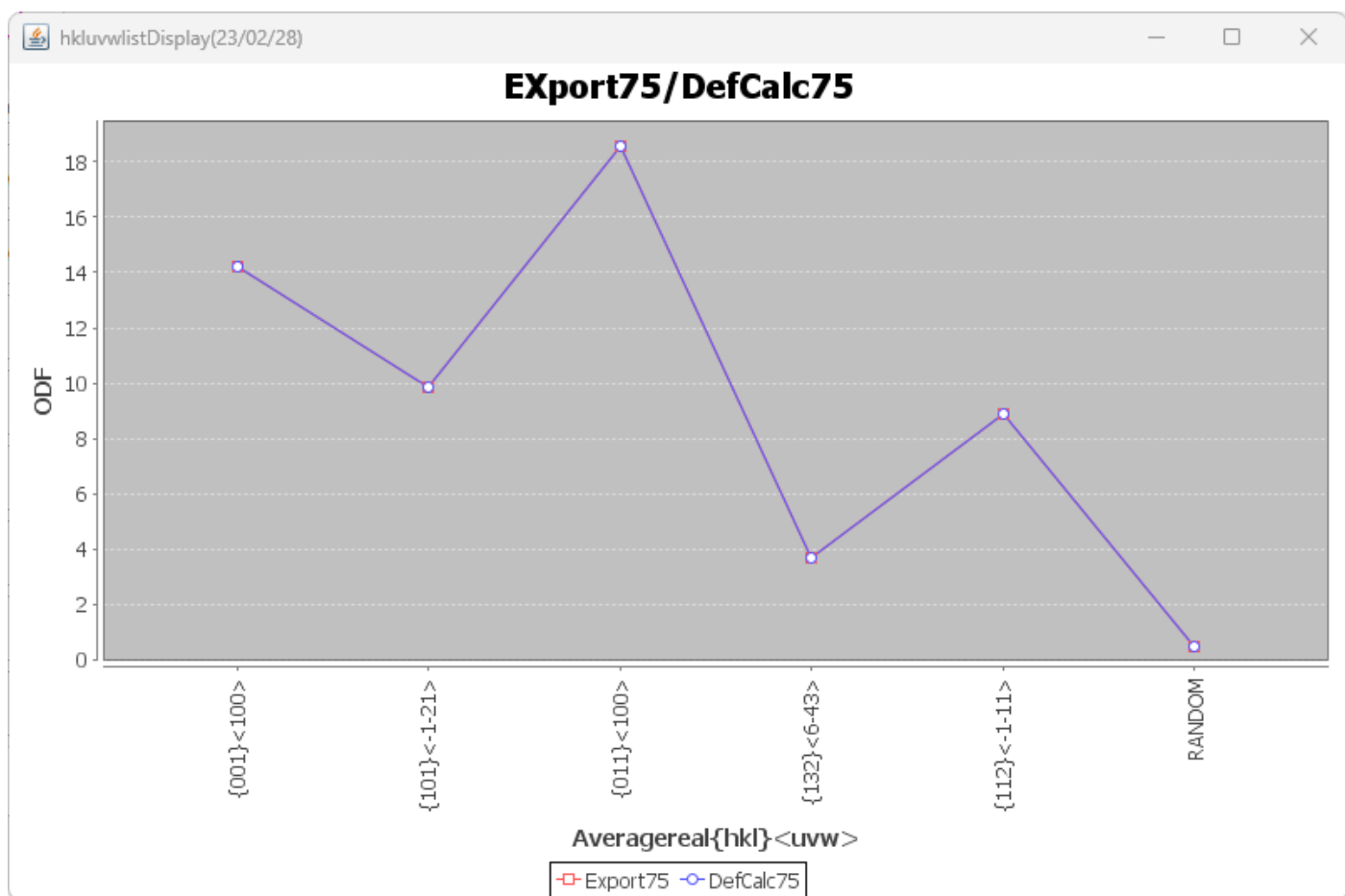
Make defocus function files by TXT2 Normalization degree of a polynomial TenckhoffFitting

Defocus(3) function files folder(Calc unbackdefocus) Limit Alfa Defocus value

Defocus(2) function files folder(Calc backdefocus) Search minimum EqualAngleRp%(Cubic only) 1/Ra

defocus 曲線を使い補正を行う。

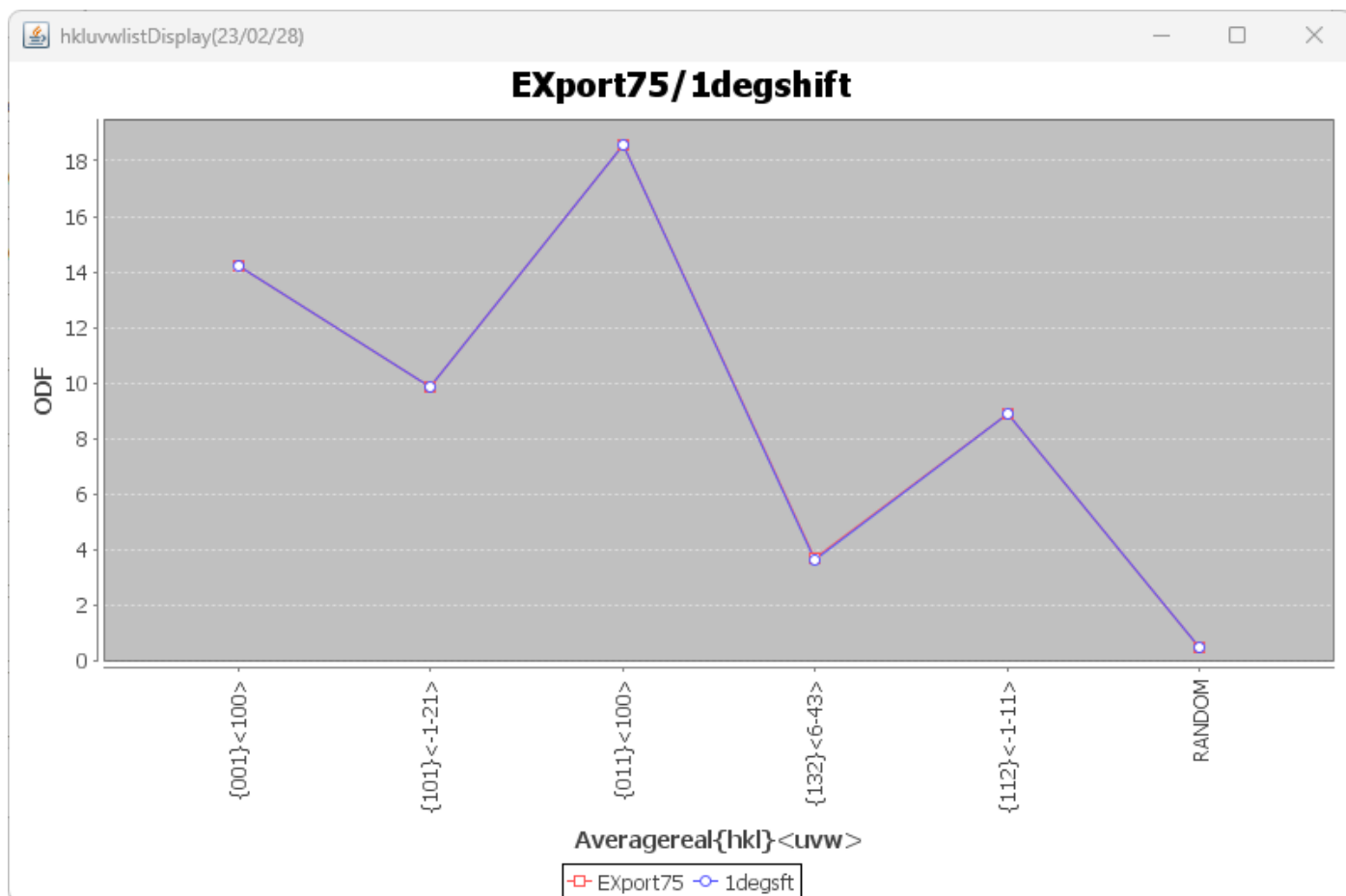
```
Averagereal{hkl}<uvw>,EXport75,DefCalc75
{001}<100>,14.2,14.2
{101}<-1-21>,9.85,9.86
{011}<100>,18.56,18.56
{132}<6-43>,3.67,3.67
{112}<-1-11>,8.91,8.9
RANDOM,0.49,0.49
```



想定される defocus が一致すれば、同一結果になります。

不完全極点図の d e f o c u s 補正ありと不完全極点図の O D F 解析結果比較

```
Averagereal{hkl}<uvw>,EXport75,1degsft  
{001}<100>,14.2,14.19  
{101}<-1-21>,9.85,9.87  
{011}<100>,18.56,18.57  
{132}<6-43>,3.67,3.66  
{112}<-1-11>,8.91,8.91  
RANDOM,0.49,0.49
```



合金のように 2θ 角度がシフトを想定した補正、
1 d e g 位なら、同一結果が得られます。

まとめ

ModelingしたODFとExportした極点図をそのままLaboTexで解析した場合、一致しないが、Exportした極点図の範囲制限しても、制限なしと一致する。

defocus補正有無では密度が異なる。defocusは 2θ 角度に依存するが、1度位のシフトは影響しない。