

# 極点図の極密度に関して

2015年07月08日

*HelperTex Office*

山田 義行

odftex@ybb.ne.jp

## 極点図の規格化

規格化には、内部規格、外部規格、random 規格があります。

### Internal calculating normalization

$$Rc[\alpha, \beta] = \frac{Ic[\alpha, \beta]}{\langle I \rangle} = \frac{Ic}{\frac{\sum_{\alpha=0}^{90} \sum_{\beta=0}^{360-\Delta\delta} Ic[\alpha, \beta] \times \cos \alpha}{\sum_{\alpha=0}^{90} \sum_{\beta=0}^{360-\Delta\delta} \cos \alpha}}$$

### External calculating normalization

$$Rc[\alpha, \beta] = \frac{Ic[\alpha, \beta]}{\langle I \rangle} = \frac{Ic}{\frac{\sum_{\alpha=0}^{90} \sum_{\beta=0}^{360-\Delta\delta} Io[\alpha, \beta] \times \cos \alpha}{\sum_{\alpha=0}^{90} \sum_{\beta=0}^{360-\Delta\delta} \cos \alpha}}$$

### Random normalization

$$Rc[\alpha, \beta] = \frac{Ic[\alpha, \beta]}{Ir[\alpha]} = \frac{Ic[\alpha, \beta]}{\sum_{\beta=0}^{360-\Delta\delta} Ir[\alpha, \beta]}$$

内部規格と外部規格の、 $\cos \alpha$ の項は、等面積化を行っています。

計算式から分かるように、**内部と外部は、完全極点図に対応した計算方法です。**

Random 規格は、絶対強度の補正なので、バルク材に対し、粉末の random 補正を行った場合、パッキングファクターの問題があります。

本来なら、

内部規格化

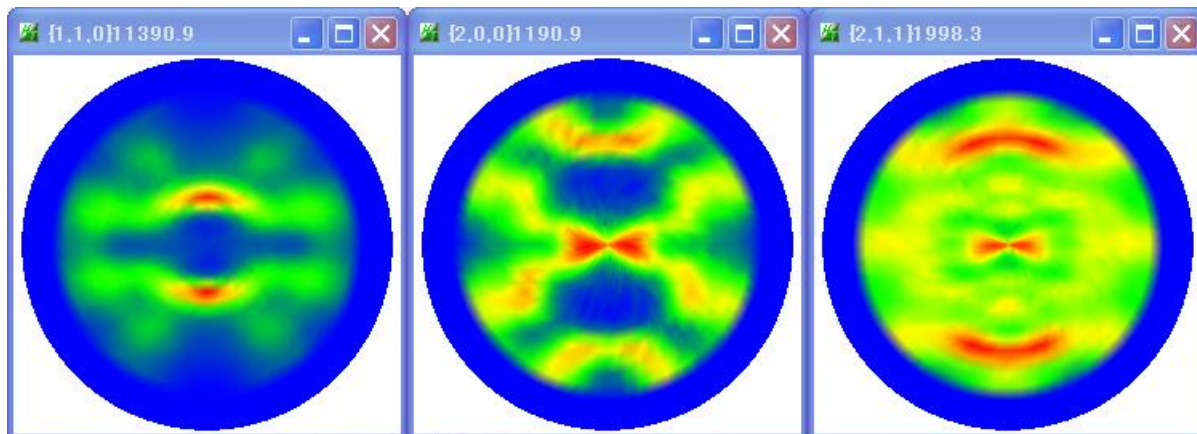
外部規格化

Random 規格化を行った後、**再度規格化**を行う必要があります。

**しかし、完全極点図ではないので、私は、疑似規格化と呼んでいます。**

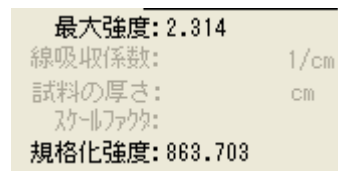
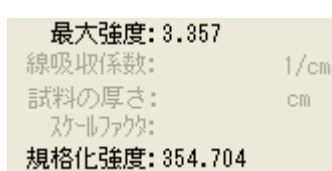
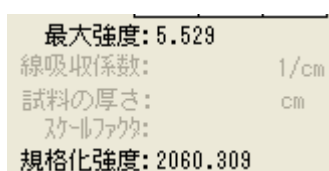
## テストデータ

各極点図の規格化強度に対して、規格化強度が2倍の random 極点図を作成してみました。

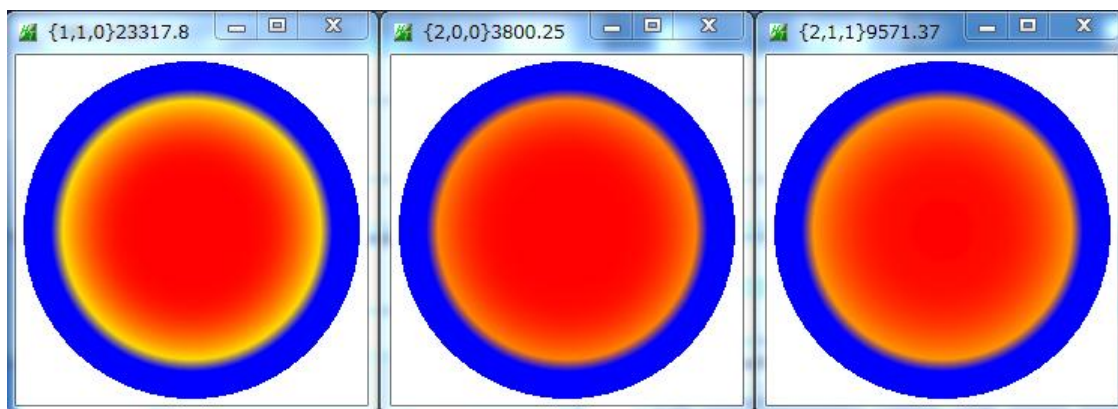


FT5sec->FT1sec

内部規格化

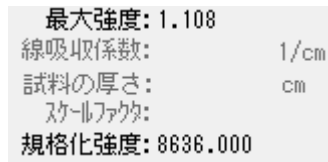
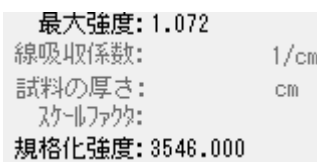
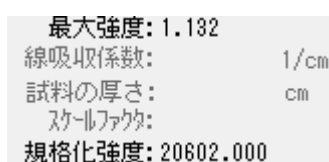


Random

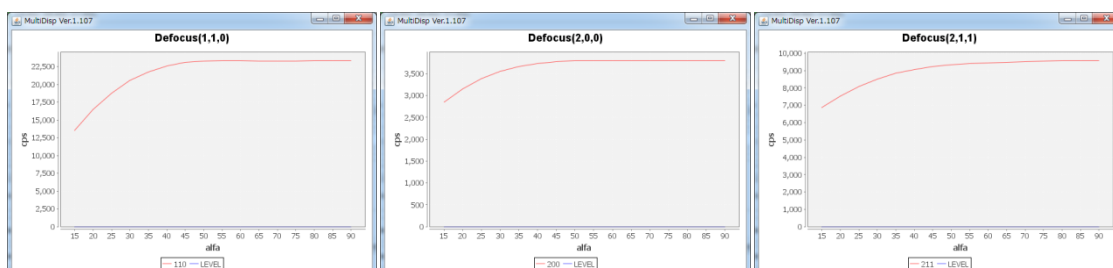


FT=1sec

内部規格化



補正曲線

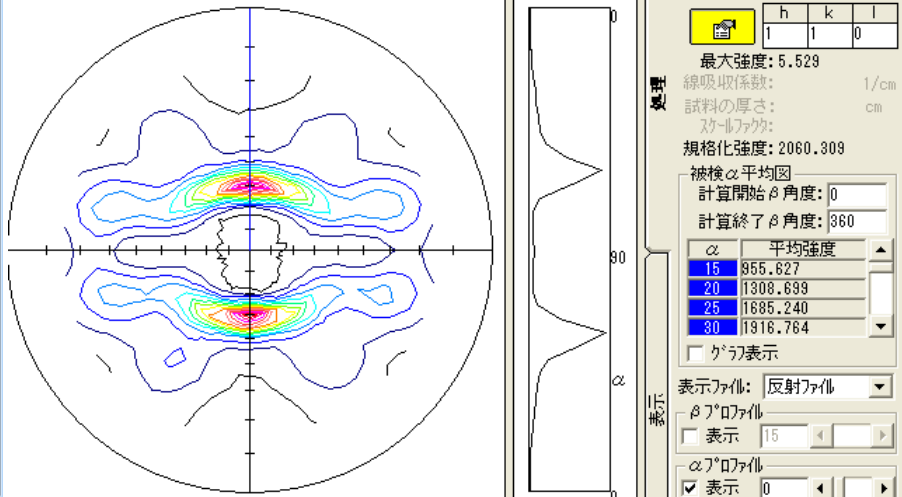


## R I N T 内部規格化と外部規格化

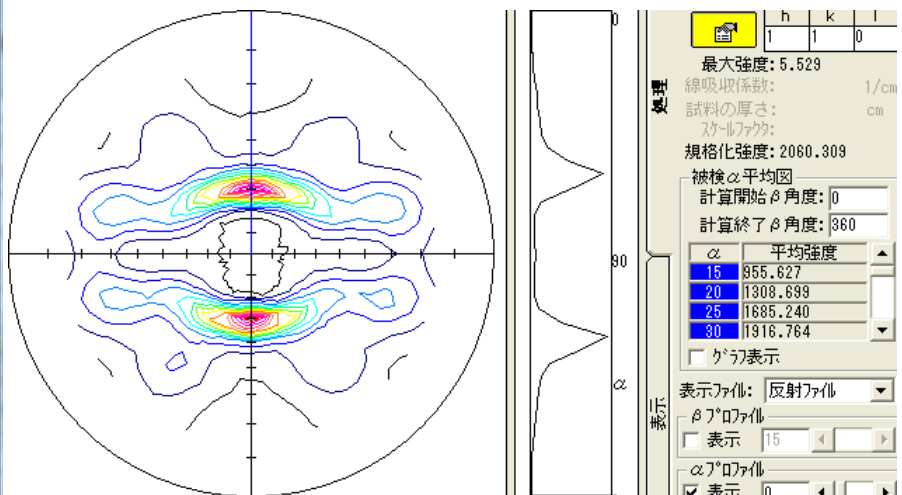
例（100）極点図を用いて、外部計算規格化と内部計算規格化を比較



バックグラウンドのみ削除した pol データを作成し、この pol データを外部標準データとする。



内部規格化を行う

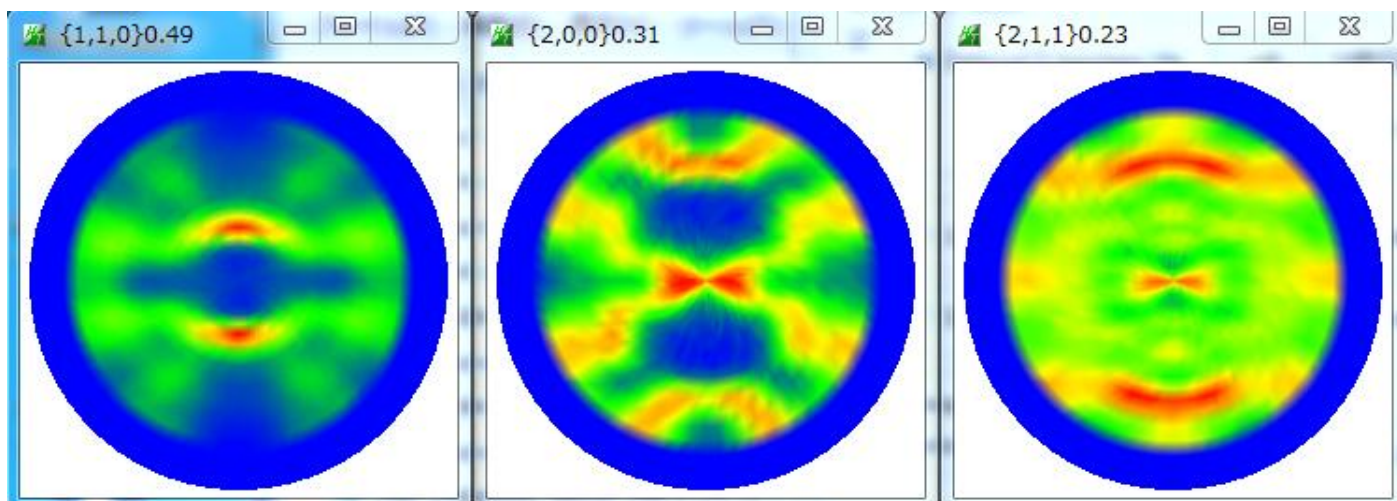


同一の極密度が得られます。

外部計算に使うファイルは、バックグラウンド削除したデータを用いる事  
**注意：外部、random データの FT 時間は同一の事**

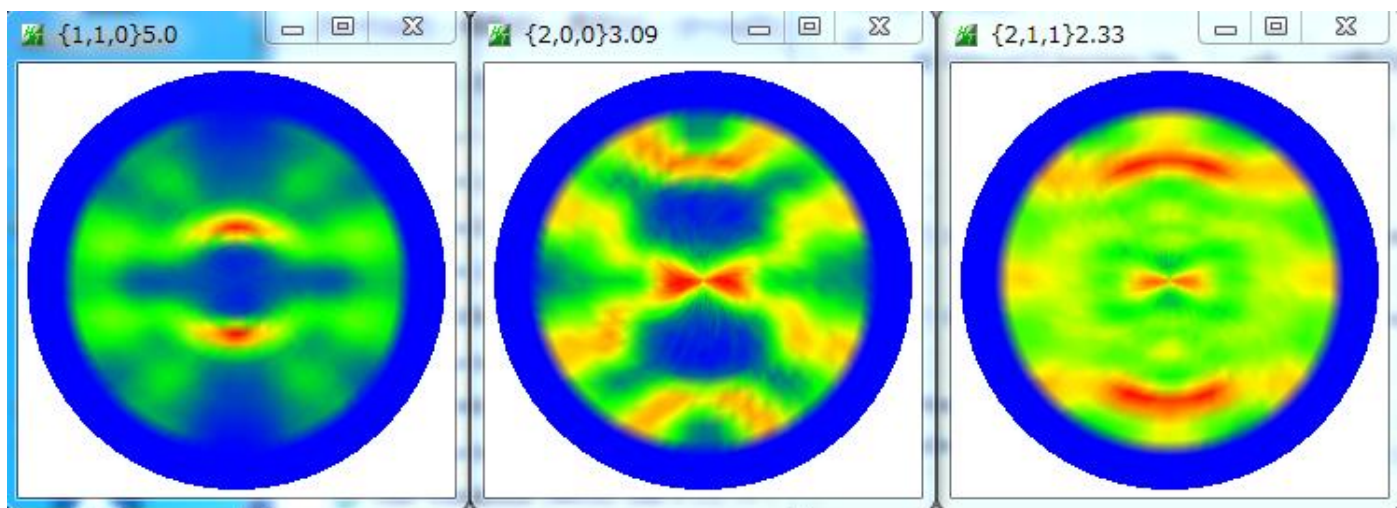
random補正したデータに対し規格化あり、無しの比較

Random 補正（規格化なし） FT 時間が配向は 5sec、random は 1sec



RINT は FT 時間を参照していないため、5 倍の極密度になっている。

Random 補正+規格化



しかしながら、ODF で読み込む場合、ODF 内部で規格化されるので、疑似規格化なしでも OK

バックグラウンド削除 + r a n d o m補正で規格化なし(ファイル名 B00:BG 補正、D1:defocus 補正)

PFtoODF3 8.15YT[15/10/31]

File Option Symmetric Software Data

Lattice constant

Material: A-Iron-Measure-IntegralData.txt

Structure Code(Symmetries after Schoenfiles): 7 - O (cubic)

a: 1.0, b: 1.0, c: 1.0, alfa: 90.0, beta: 90.0, gamma: 90.0

Initialize: Start

getHKL<-Filename

AllFileSelect

PF Data

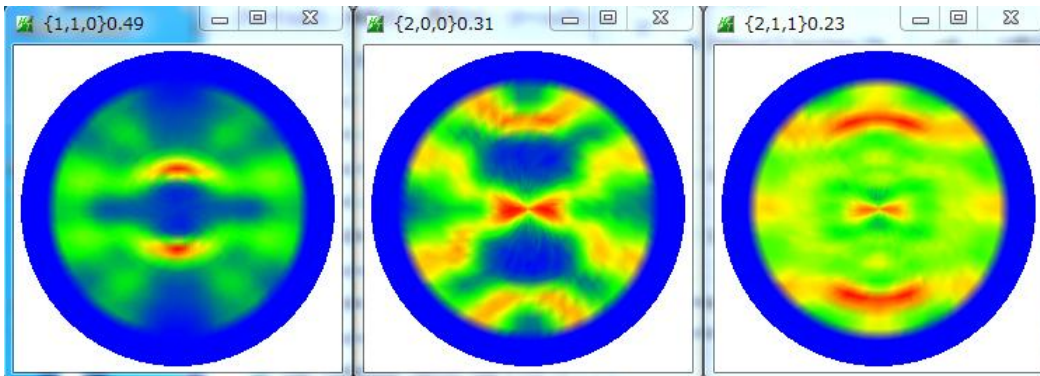
SelectFile(TXT(b,intens),TXT2(a,b,intens.))	h,k,l	2Theta	Alfa Area	AlfaS	AlfaE	Select
110_chB00D1_2.TXT	1,1,0	52.44	0.0->75.0	0.0	75.0	<input checked="" type="checkbox"/>
200_chB00D1_2.TXT	2,0,0	77.36	0.0->75.0	0.0	75.0	<input checked="" type="checkbox"/>
211_chB00D1_2.TXT	2,1,1	99.9	0.0->75.0	0.0	75.0	<input checked="" type="checkbox"/>

110\_chB00D1\_2.TXT 200\_chB00D1\_2.TXT 211\_chB00D1\_2.TXT

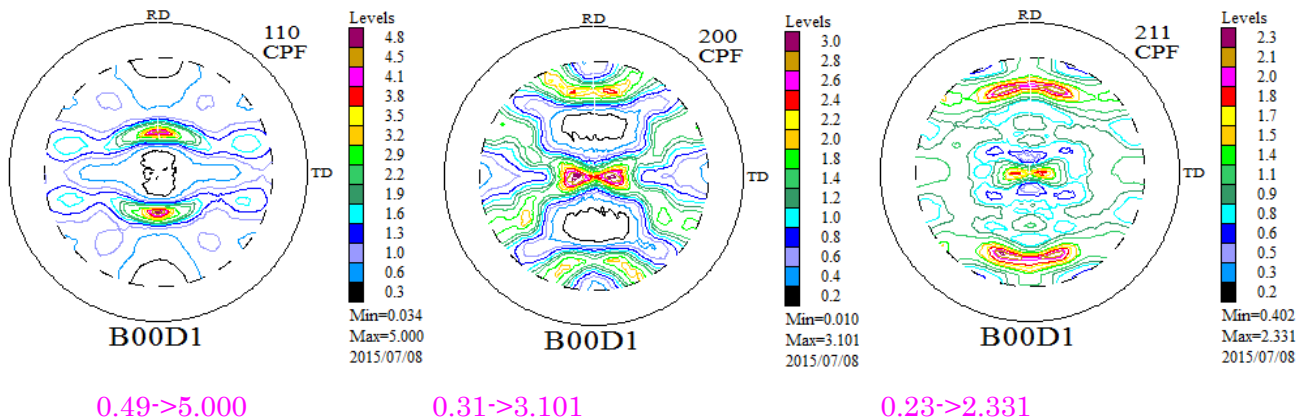
```
Structure Code a b c alfa beta gamma
7 1.0 1.0 1.0 90.0 90.0 90.0
3
2Theta alf-s alf-e d-alf bet-s bet-e d-bet index H K L P/B
52.44 0.0 75.0 5.0 0.0 355.0 5.0 0 1 1 0 1
77.36 0.0 75.0 5.0 0.0 355.0 5.0 0 2 0 0 1
99.9 0.0 75.0 5.0 0.0 355.0 5.0 0 2 1 1 1
```

```
0.025136 0.025136 0.025136 0.025136 0.025136 0.025136 0.025136 0.025136
0.025136 0.025136 0.025136 0.025136 0.025136 0.025136 0.025136 0.025136
0.025136 0.025136 0.025136 0.025136 0.025136 0.025136 0.025136 0.025136
0.025136 0.025136 0.025136 0.025136 0.025136 0.025136 0.025136 0.025136
```

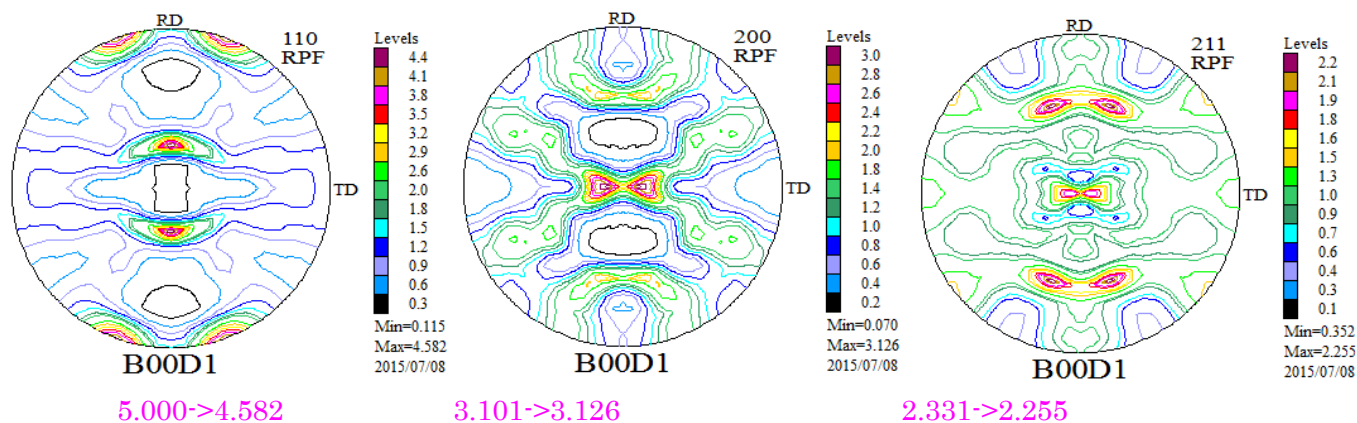
入力データ



ODFに読み込むと規格化されます。



しかし、ODF解析した完全極点図とは異なります。



試料間の極密度の大小を比較するには、

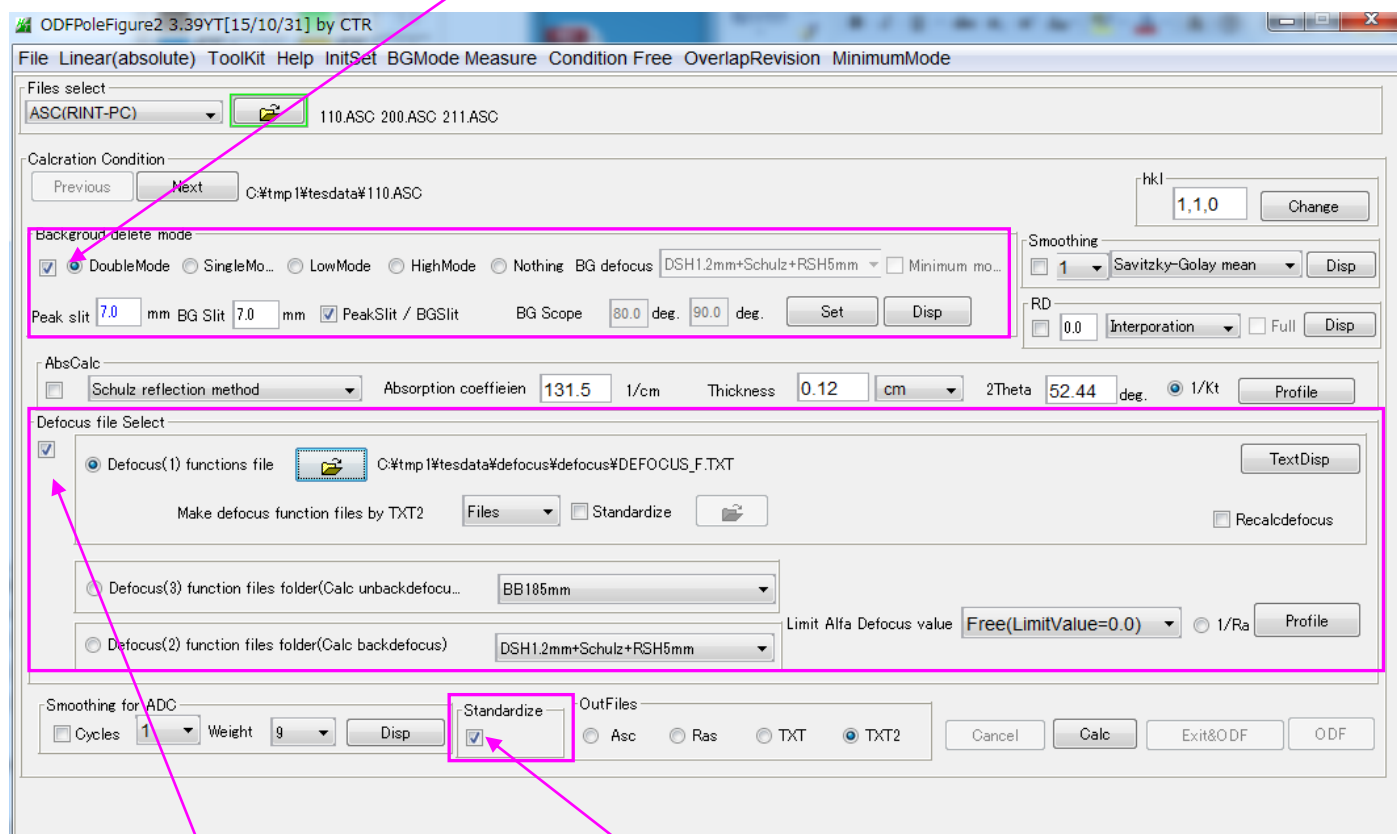
random補正を行って、ODF解析を行い、極密度の比較が正解です。

ODF解析を行わないのであれば、

random補正+極点図の疑似規格化を行います。

ODFPoleFigure2 ソフトウェアでは複数の極点図に対し、random 補正+疑似規格化処理を行います。

バックグラウンド処理



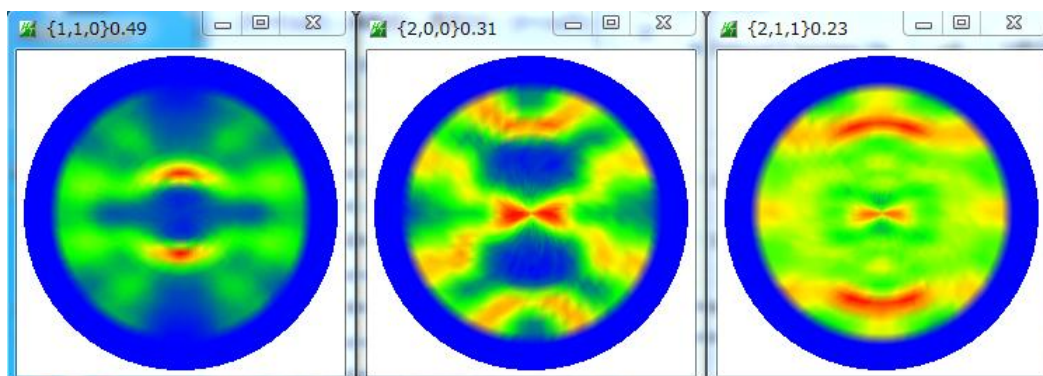
Defocus 補正

疑似規格化

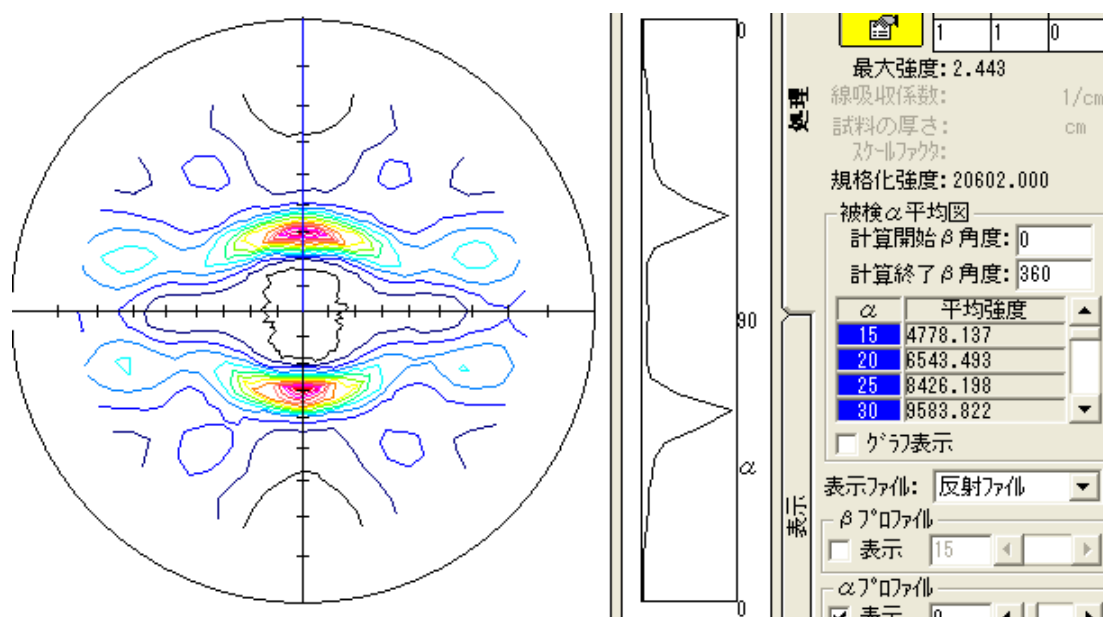
R I N T 処理で、配向データと r a n d o m データの F T 時間が異なる場合

配向データ F T = 5 s e c , r a n d o m データ F T = 1 s e c の場合

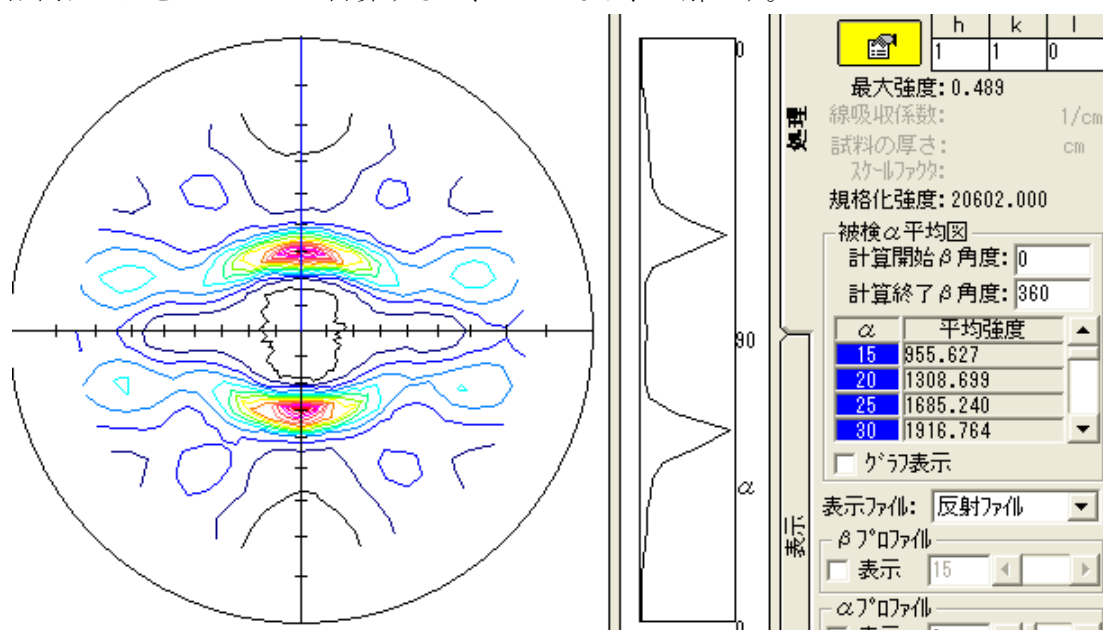
正しい r a n d o m 補正



R I N T では、F T 時間が同一として計算しているの、5 倍の m a x 密度が計算されています。



配向データを F T = 1 s e c で計算すると、1/5 になり、正解です。



よって、規格化を行う場合、F T 時間を同じでなければなりません。