ODFPoleFigure2(Ver3.35)による

Feなどrandom試料が得難い材料のdefocus補正対策

2014年11月23日 *HelperTex Office* 山田 義行 X線を用いて極点測定する場合、極点図の外側で回折強度が低下する減少があります。

この現象はdefocusと呼ばれています。

通常、測定する材料と同じ無配向材料を用いて、実際の極点測定と同一の測定を行い、光学系補正を 行います。しかしながら材料によっては無配向試料が得られない場合があります。

defocusは、測定20角度と受光スリットの幅に影響される事から

d e f o c u s 補正は

同一材料の無配向材料による補正

格子定数の近い材料による補正(Feの場合アルミニウムを使う)

計算による補正

が考えられます。

本資料では計算により極点図を作成し、この計算極点図を用いて、配向試料のd e f o c u s 補正を 行い、ODF解析後の再計算極点図と入力極点図の差を観察して、d e f o c u s 補正量の変更方法を 説明します。計算による極点図を無配向材料の極点図とすれば、応用できると考えます。

流れ

1)計算による極点図(無配向材料の極点図)

2) defocusファイルの作成

3) 配向材料の極点図データ処理

4) ODF解析を行い、極点図のExport

5)入力極点図と再計算極点図の差からRp%

6) 3)の処理でdefocus量を調整

÷

÷

TenckhoffはSchulz反射光学系のdefocusプロファイルが計算で求められるとし 以下の計算式を文献にまとめている。2 θ 角度、受光スリット、X線の照射高さで決まるとされている。



$$\frac{I_{\mathcal{A}(\Phi,\Theta,W_B,L_R)}}{I_{\mathcal{A}(\Phi=0,\Theta,W_B,L_R)}} = 1$$

$$-\frac{2}{(2\pi)^{1/2}} \int_{-\infty}^{-L_R/P(W_B \tan\Phi\sin2\Theta/\sin\theta)} \exp(-y^2/2) dy.$$

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)

上記Wbが測定2 θ の依存がなければ、比例定数Pは一定であるとしている。 しかし、Schulzスリットが常に試料から等距離であれば成り立つのかもしれないが 実際に測定計算してみると、比例定数が測定2 θ と相関があることが分かる。 本ソフトウエアでは測定defocus曲線noFittingを行い、比例係数を算出し、 受光スリット幅を変えて再計算defocus曲線を算出しています。

1. 計算による極点図

TenckhoffCalc ソフトウエアで作成したMo管球を用いたFeのrandom 極点図



2. defocusファイルの作成

ODFPoleFigure2 (Ver.3.33 以降) による

e Linear(absolute) ToolKit Help InitSet BGMode Measure Condition Free OverlapRevision MinimumMode
SOCKINI-FC) V La
alcration Condition
Previous Next Wk割定データO¥材料 - FE¥20071225-SUS430(ホームセンター)¥NO 1-NO 2¥処理¥work¥defocus¥110-defocus.asc 1,1,0 Chai
Backgroud delete mode Smoothing
DoubleMode SingleMo LowMode HighMode Nothing BG defocus SmartLab-DSH2mm-Schulz V Minimum mo
2eak slit 7.0 mm BG Slit 7.0 mm IV PeakSlit / BGSlit BG Scope 80.0 deg. 90.0 deg. Set Disp RD
Schulz reflection method Absorption coefficien 303 1/cm Thickness 0.1 cm 2Theta 20.15 deg. 1/Kt Profile
Defocus file Select
C Defocus functions file
Uetocus tunction tiles tolder(Uaic unbackdetocus) Uetocus tunction tiles tolder(Uaic unbackdeto
Defocus function files folder(Calc backdefocus) SmartLab-DSH2pm-Schulz
力極点図を選択してCaleTXT2ファイルが作成されます。
成した $IXIZ$ ノアイルを選択
110-defocus_chS_2
Diagonal and the second
e 211-defocus_cns_2
le Select
Defocus functions file W¥測定データO¥材料-FE¥20071225-SUS430(ホームセンター)¥NO1-NO 2¥処理¥work¥defocus¥defocus¥DEFOCUS_F.TXT TextDis

🔲 Recalcdefocus

作成された defocus ファイルが表示されます。

Make defocus function files by TXT2 Files 🔻 🗹 Standardize

3. 配向材料の極点図データ処理

🌠 {1,1,0}21671.33 🗖 🗖 🗙	¥ {2,0,0}1443.33	<u> </u>	% {2,1,1}1898.4			PDF
					amb	KD20-manual
						netuuse
M ODFPoleFigure2 3.33YT[15/03/31] b	by CTR	Pag. 10 1711				<u> </u>
File Linear(absolute) ToolKit Help	InitSet BGMode Defocu	is Condition Fre	e OverlapRevision	MinimumMode		
Files select ASC(RINT-PC)	110.ASC 200.ASC 211.ASC					
Calcration Condition						
Previous Next W¥創定デー	-タO¥材料 — FE¥20071225-SU	IS430(ホームセンター)	¥NO 1-NO 2¥処理¥work¥sı	us¥110.ASC		hkl
Backgroud delete mode					Smoothing	
🔽 🔿 DoubleMode 🔵 SingleMo 🔘 La	owMode 🔘 HighMode 🔘 N	lothing BG defocus	SmartLab-DSH2mm-Sch	ulz 🔻 🗌 Minimu	m mo 🔲 3 🔹	Arithmetic mean 👻 Disp
Peak slit 7.0 mm BG Slit 7.0 mm	🔽 PeakSlit / BGSlit 🛛 🛛	BG Scope 80.0	deg. 90.0 deg. S	iet Disp	RD 0.0	Interporation 🗸 🗌 Full Disp
AbsCalc						
Schulz reflection method	 Absorption coefficient 	n 133.0 1/cm	n Thickness 0.2	cm 🗸	2Theta 20.1	deg. 🔍 1/Kt 🛛 Profile
Defocus file Select						TestDire
 Defocus functions file 	3 ₩¥測定データO¥材料+-	• FE¥20071225-SUS	430(ホームセンター)¥NO 1-1	√O2¥処理¥work¥de	focus¥defocus¥DEFC	OCUS_F.TXT
Make defocus functio	n files by TXT2 Files	▼ 📝 Standardi	ze			Recalcdefocus
Defdcus function files folder(Ca	alc unbackdefocus) BE	3185mm	T limit 4	Nfa Defecue value	Ereo/Limit\/aluo	
 Defocus function files folder(Ca 	lc backdefocus) Sm	artLab-DSH2mm-Sc	hulz 🔻	ana Delocus value		
-Smoothing for ADC			J	1		
Cycles 2 Velish: 4			le) 🔘 Asc(Pole) 🧿	TXT2(Pole)	Cancel Ca	
					\nearrow	
	$\langle \rangle$					
	$\langle \rangle$					
ハックク	/ X / ト処理を:	进灯				
Defocus	sモードの選択		/			
	極点図データタ	処理(Ca	l c) を行う			

極点図処理後の極点図が表示



4.	ODF解析を行い、	極点図のExport
----	-----------	------------

Lattice	onstant — Material	A-Irc	on-Meas	ure-Integ	ralData.t	×t					Initia	ize	Start
Struc	Structure Code(Symmetries after Schoenfiles) 7 - O (cubic)									⊚ getHKL<-Filename			
a 1.0	<=b	1.0	<=C	1.0	alfa	90.0	beta	90.0	ga	umm 90.0	j •	🗳 AllFi	leSelect
PF Data	Selec	tFile(TX	T(b,inten	s),TXT2(a	a,b, intens))	h,k,l		2Theta	Alfa Area	AlfaS	; AlfaE	Select
	110_chB	(22D1S_2	2.TXT				1,1,0		20.1	0.0->75.0	0.0	75.0	V
	200_chB	22D1S_2	P.TXT				2,0,0		28.55	0.0->75.0	0.0	75.0	
	211_chB	22D1S_2	2.TXT				2,1,1		35.25	0.0->75.0	0.0	75.0	
~							2,1,0		0.0		0.0	0.0	
2							2,1,1		0.0		0.0	0.0	
							3,1,1		0.0		0.0	0.0	
2							4,0,0		0.0		0.0	0.0	
2							3,3,1		0.0		0.0	0.0	
2							4,2,2		0.0		0.0	0.0	
~							5,1,1		0.0		0.0	0.0	
2							5,2,1		0.0		0.0	0.0	
2							5,3,1		0.0		0.0	0.0	
Comn	ient 110) chB22[)1S_2.TX	T 200 chl	B22D1S_	2.TXT 211	chB22D1S	5_2.TX	T				
			_					_	Labot	tex(EPF),popL#	(RAW) file	ename —	
Symm	ietric type	Full		\langle		Epf file	save		SL	JS430]

LaboTex で ODF 解析時の Error

ODF Calculation (Finished)



入力極点図と再計算極点図の差(Error)を表示しています。



極点図のExportを行う。

5. 入力極点図と再計算極点図の差から R p %

ValueODF ソフトウエアを使う。



ほぼ解析出来ていますが、{211} 極点図の defocus 補正を強くしてみます。

Files select ASC(RINT-PC) II0.ASC 200.ASC 211.ASC	
- Calcration Condition Previous Next W¥測定データO¥材料 - FE¥20071225-SUS430(ホームセンター)¥NO 1-NO 2¥処3	理¥work¥sus¥211.ASC
↓ Next を使って{211}極点図とし、	
eak slit 70 mm BG Slit 70 mm 🖉 PeakSlit / BGSlit BG Scope 80.0 deg. 90.0 deg. Set Dis	P RD Full Disp
AbsCalc Absorption coefficien 13.9 1/cm Thickness 0.1 cm	▼ 2Theta 35.25 dec ● 1/Kt Profile
lefocus file Select	
O Defocus(1) functions W¥測定データOV材料料 - FEV20071225-SUS430(ホームセンター)¥N01-N02¥処理¥work Make defocus function files by TXT2 Files V Standardize	¥defocus¥defocus¥DEFOCUS_F.TXT IextUisp
	Necalodetocus
Defocus(3) function files folder(Calc unbackdefocu. BB185mm Limit Alfa Defocus va	lue Free(LimitValue=0.0) 👔 💿 1/Ra Profile
Defocus(2) function files folder(Calc backdefocus) DSH12mm+Schulz+RSH5mm	
Profile で補正量を確認	
MultiDisp Ver.1.107 Defocus(2.1.1)	
2.00	
1.75	
1.50	
1.25	
0.75	
0.50 -	Recalcdefocus
0.25 -	
	I/Ra Profile
正量を強くするには受光スリット幅を狭くする	
veak slit 6 mm BG Slit 6 mm ⊘ PeakSlit / BGSlit BG Scope 80.0 deg. 90.0 deg. Set	 DispSet を行い Profile
MultiDisp Ver.1.107	
Defocus(2,1,1) MODE=1 SLITW=6.0mm	計算方法
2.25	Tenckhoffの計算式に
2.00	 元の曲線をFittingし
1.75	 比例係数を算出する。
S 1.25	受光スリットを変更し
0.75	Recalcdefocus で曲線を再計算する。
0.50	2 θを変えると比例係数が変わるの
	で適切ではありません。
15 20 25 30 35 40 45 50 55 60 65 70 75 80 85 90 alfa	
	ODFPoleFigure2(Ver3.35以降)
補止重が大きくなっています。	Defocus ファイルホルダの
F度極点図テータを処埋行いODFで確認	NEWDEF ホルダ以下に新しい
Lのようにdetocus補止量を変える事が出来ます。	Defocus ファイルが作成される