簡易極点処理 ODFPoleFigure 1.5 による

極点処理の自動処理による R p %の評価

2015年10月05日 *HelperTex Office* 

Schulzの反射法に於いて、極点処理や ODF 解析を行った時の Error 評価は、

ValueODFVF ソフトウエアによる、ODF 入力極点図と ODF 再計算極点図の差で行っている。 この ValueODFVF の Error 評価から、再度極点処理条件を変更して、ODF 解析、Error 評価を 繰り返す。

若し、極点処理の中で、Errorを最少にする機能が組み込まれていれば短時間で最良の結果が得られます。 この考えで、ODFPoleFigure1.5,ODFPoleFigure2 ソフトウエアの改造を行いました。

Error の要因は、不適切なバックグランド、他成分の重なり、defocus 不良などが

考えられます。不適切なバックグランドに関しては ODFPoleFigure2 ソフトウエアで対応していますが ODFPoleFigure1.5 では対応していません。

他成分の重なりによる Error の改良は出来ませんが、

良好な random 試料で測定した defocus に関しては本ソフトウエアで可能になります。

Schulzの反射法における defocus

極点図測定では試料をビーム対して傾けて測定しています。

傾ける事で、回折線は2θ方向に広がります。

試料を90度傾けると回折線の強度はゼロになります。

補正量を少なくするためにαは0度から75度とし、更に補正を行います。







OURNAL 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2θ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2θやスリット幅と相関があることが分かる。

本ソフトウエアでは、実際の random 測定から作成された defocus 曲線を 上記理論式で再計算し、相関状態を変えながら最適な Rp%を求めた結果を極点処理としています。

## データは、CTR¥DATA¥ODFPoleFigure データを使用

Defocus 曲線を作成

### CTR¥DATA¥ODFPoleFigue¥random データを defocus 補正なしで処理

(1,1,1)7363.2 ODFPolefigure1.5 1.15T[15/12/31] by CTR File Linear ToolKit Help InitSet Files select ASC(RINT-PC) • • • 111 ASC 200 ASC 220 ASC Calcration Condition Previous Next C.¥CTRNDATAWO DFPoleFigure¥ras Backgroud delete mode Ø DoubleMode • SingleMode • Lowi Absorption co Vertous tite Select Schulz reflection method • Absorption co Vertous tite Select IntT2 Standardize • OutFiles Ø 1.25(5781.8) • • TXT2(Pole) • TXT(FPIENDERS III) I 1.25(5781.8) • • TXT2(Pole) • TXT(FPIENDERS III) I 1.25(5781.8) • • • • • • • • • • • • • • • • • • •	Image: Second	PoleFigure 1,5RPp.docx = 1 PoleFigure 1,5RPp.docx = 1 From the second	Alcrosoft Word
<ul> <li>111.ASC</li> <li>200.ASC</li> <li>220.ASC</li> <li>111_chFB0S_2.TXT</li> <li>200_chFB0S_2.TXT</li> <li>220_chFB0S_2.TXT</li> <li>SLITTTHETAFILE</li> </ul>	2014/03/13 7:40	RINT2000アスキー	17 KB
	2014/03/13 7:40	RINT2000アスキー	17 KB
	2014/03/13 7:40	RINT2000アスキー	17 KB
	2015/10/05 4:32	テキスト文書	22 KB
	2015/10/05 4:32	テキスト文書	22 KB
	2015/10/05 4:32	テキスト文書	22 KB
	2015/10/05 4:32	ファイル	1 KB

作成された TXT2 データから defocus 曲線を作成

#### Defocus 曲線の登録

ODFPolefigure1.5 1.15T[15/12/31] by CTR	開く		23
File Linear ToolKit Help InitSet	ファイルの場所(I): 🌗	random 🔹 🦻 📴 🖽 🗸	
ASC(RINT-PC)   Ill.ASC 200.A		.11_chFB0S_2.TXT	
Previous Next C#CTR#DATA¥O DFPo	していたす… 単う していたす… 単う	100_chFB0S_2.TXT 120_chFB0S_2.TXT	
Backgroud delete mode			
AbsCalc	デスクトップ		
Vetocus tile select	21 K+1 X/h		
Standardize OutFiles Standardize OutFiles Standardize OutFiles Standardize OutFiles			
Filemake success !!	コンピューター		
	2771	レ老(N): [1]_chFB0S_2.TXT* * 200_chFB0S_2.TXT* * 220_chFB0S_2.TXT* ] [ ] ((())	Ī
<b>1.25(5781.8)</b>	771	W0917(U: *txt,*.Txt*.TXT ▼ 取消	

#### DEFOCUS\_F.TXT として defocus ファイルが作成されます。

Detoc	us file Sel	Iect TXT2	C#CTR#DATA#ODFPoleFigure¥random#defocus#DEFOCUS_F.TXT	TextDisp	) 💿 1/Ra	Profile	
<u></u>							

4

filename,alfanumber,alfastartangle,alfastep,function-n,mm, 15/10/05 3.10 for DefocusCalc,

111\_chFB0S\_2.TXT,16,0.0,5.0,5,7.0,0.996810023261569,0.0067643904415228655,-5.195374344988798E-4,1.5630284271532113E-5,-1.8492260952845102E-7,4.92354686744974E-10.38.58 200\_chFB0S\_2.TXT,16,0.0,5.0,5,7.0,0.9985658803450581,-5.425320466262325E-4,1.1017873974498673E-4,-5.957844371358092E-6,1.4087621587787994E-7,-1.2523139698631716E-9,44.82 220\_chFB0S\_2.TXT,16,0.0,5.0,5,7.0,1.0041178616409216,-0.008445127701160854,6.728557897000935E-4,-2.4801233462125573E-5,4.207513185279399E-7,-2.693205038757078E-9,65.18

windows7-64 (C:) > CTF	▶ DATA ▶ ODFPoleFigure	🛛 🕨 random 🕨 defocus
------------------------	------------------------	----------------------

ツール(T)	ヘルプ	(H)			
共有 ▼	書き〕	込む 新しいフォルダー			
	<b>^</b>	名前	更新日時	種類	サイズ
		📳 0_1F.TXT	2015/10/05 4:38	テキスト文書	1 KB
		🖳 1_1F.TXT	2015/10/05 4:38	テキスト文書	1 KB
		🖳 2_1F.TXT	2015/10/05 4:38	テキスト文書	1 KB
	=	DEFOCUS_F.TXT	2015/10/05 4:38	テキスト文書	1 KB
		🖳 real0_1F.TXT	2015/10/05 4:38	テキスト文書	1 KB
		🖳 real1_1F.TXT	2015/10/05 4:38	テキスト文書	1 KB
		🖳 real2_1F.TXT	2015/10/05 4:38	テキスト文書	1 KB

#### Rp%の検索モードによる極点処理

M ODFPolefigure1.5 1.15T[15/12/31] b	_ 篇<			X
File Linear ToolKit Help InitSet	ファイルの場所(I):	📙 ODFPoleFigure	•	🔊 📂 🛄 -
Files select ASC(RINT-PC)  Calcration Condition	œ.	CTRODF		
Previous Next C:¥CTR¥DA	最近使った項	in random		
Backgroud delete mode	デスクトップ	<ul> <li>200-OSC.ASC</li> <li>220-OSC.ASC</li> <li>311-OSC.ASC</li> </ul>		
Central Schulz reflection method	ال الرادية الم			
Standardize OutFiles OutFiles Standardize Asc(Pole) IN	<b>1</b> コンピューター			
	ネットワーク	ファイル名(N): "1 ファイルのタイプ(T): <sub>*a</sub>	11-OSC ASC" "200-OSC ASC" "220-OSC ASC" asc.* ASC,* Asc	■ ■ ■ ■ ■ ■ ■ ■ ■ ■ ■ ■ ■ ■ ■ ■ ■ ■ ■

Defocus 補正処理と Rp%の検索モード

### 登録されている defocus 曲線を微妙に変化させ、最適な Rp%を探します。

	hki Smoothing
	1,1,1 Change Cycles 2 - Weight 9 - Disp
F	ile Linear ToolKit Help InitSet Rp%
-+[	Files select
-	ASC(RINT-PC) 🗸 😰 111-OSC ASC 200-OSC ASC 220-OSC ASC
- 6	Caloration Condition
=	Previous Next C¥OTR¥DATA¥ODFPoleFigure¥111-OSCASC
C	Backgroud delete mode
	V O DoubleMode SingleMode LowMode HighMode Nothing Set Disp 0.0 Interporation - Full
)e	AbsCalc
-	Schulz reflection method       Absorption coefficien       133.0       1/cm       Thickness       0.2       cm       2Theta       38.42       deg.       0       1/kt       Profile
зk	belogus tile Select
(	TXT2 C#CTR#DATA#ODFPoleFigure#random#defocus#DEFOCUS_F.TXT TextDisp © 1/Ra Profile Limit Alfa Defocus val Free *
	Standardize   OutFiles
	Image: Control of the sector of the secto
-	

#### 結果

Vetocus file Sele	ect TXT2 C:¥0	TR¥DATA¥ODFPo	leFigure¥random¥defo	cus¥DEFOCUS_F.TXT
Standardize —	OutFiles OutFiles	TXT2(Pole)	TXT(Pole)	📝 Search minimum Rp%(Cubic)

Search Rp% (1,1,1) 2.95% -> 1.36% (2,0,0) 3.22% -> 2.92% (2,2,0) 3.04% -> 2.76% Filemake success!!

R p %検索なしの場合、 {111}=2.95% {200}=3.22% {220}=3.04% Rp%検索の場合 {111}=1.36% {200}=2.92% {220}=2.76% に改善されます。

計算時間は、Rp%の誤差により変わります。

#### **Rp%**の表示



上記計算で使用した処理条件

<u>ی</u>		1.2	×
Max cycles	20	Points	3
Minimum Rp <sup>e</sup>	% 1	Step	0.1
		ОК	

極点の外側 Points 数の平均で補正方向を決定し、Step でスリット幅を変化させ、cycle 内で 最少 Rp%を探します。

Cubicの場合、

ODFPoleFigure1.5 ソフトウエアで最適な補正条件を決定する事が可能になります。