

極点図の規格化

極点図の比較に規格化極点図を用いる事がありますが、装置間で比較する場合、r a n d o m試料の規格化定数が同一であるか重要です。しかし、r a n d o m試料の規格化定数が異なっても、+内部規格化することで問題は解決します。

2017/06/21 StandardODF の規格化調査を追加

2017年04月19日

2017年06月21日

HelperTex Office

概要

極点図には、複数の極点図があります。

測定された極点図

平滑化された極点図

バックグラウンドを削除した極点図

RD処理された極点図

r a n d o mでd e f c o u s補正を行った極点図

内部規格化を行った極点図

更に、ソフトウェア(極点処理、ODF)より規格化計算が異なります。

以下にCTRソフトウェアによる処理を以下の項目で説明します。

r a n d o m試料のバックグラウンド処理を行った極点図から補正曲線を作成

内部規格化あり、なしが考えられます。

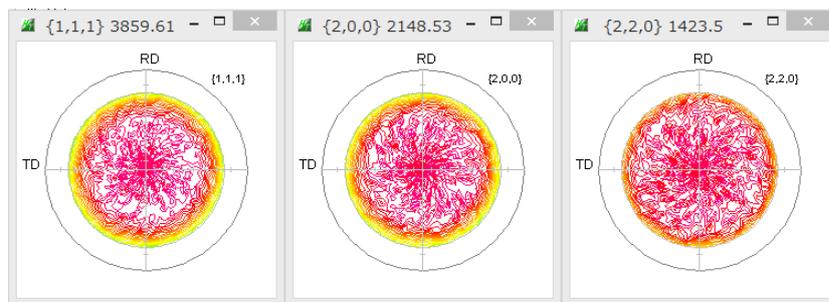
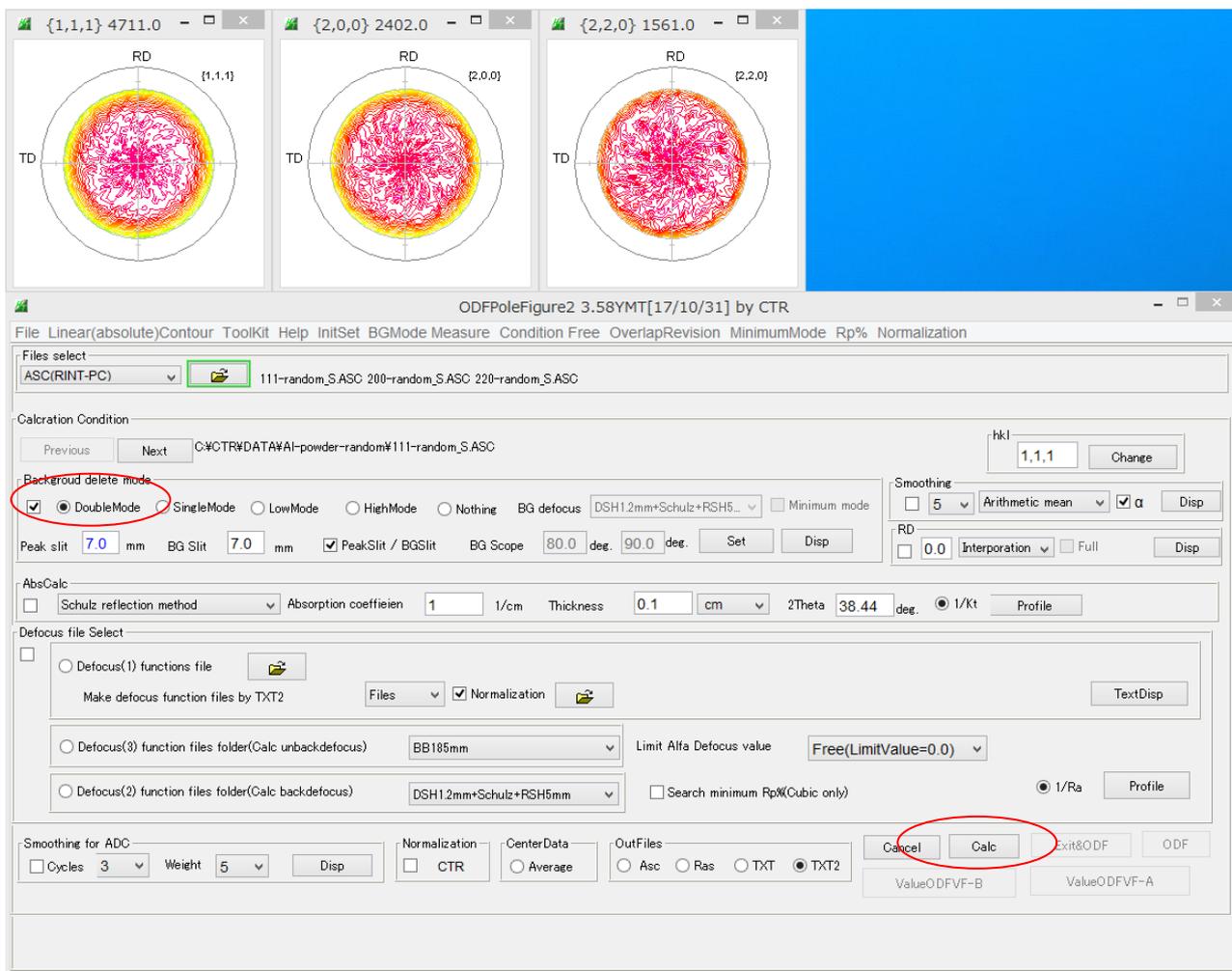
r a n d o m補正極点線によるd e f o c u s補正

d e f o c u s補正後極点図の内部規格化

random試料のバックグラウンド処理を行った極点図から補正曲線を作成

アルミニウム粉末による極点図からdefocus補正曲線を作成

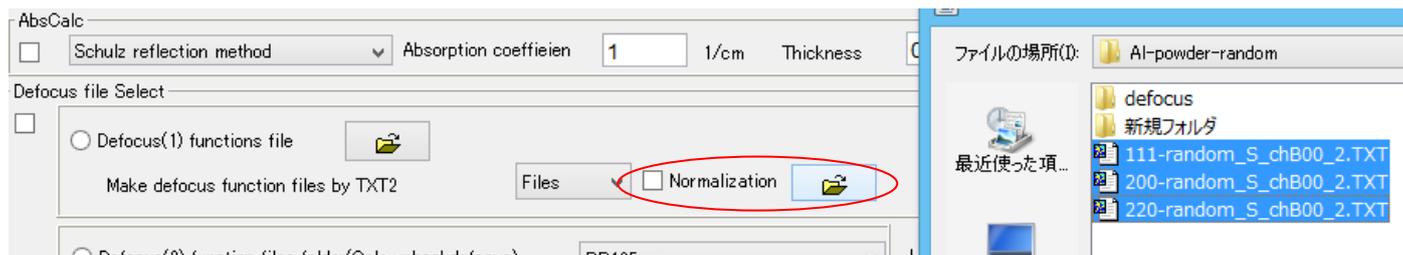
バックグラウンドを削除



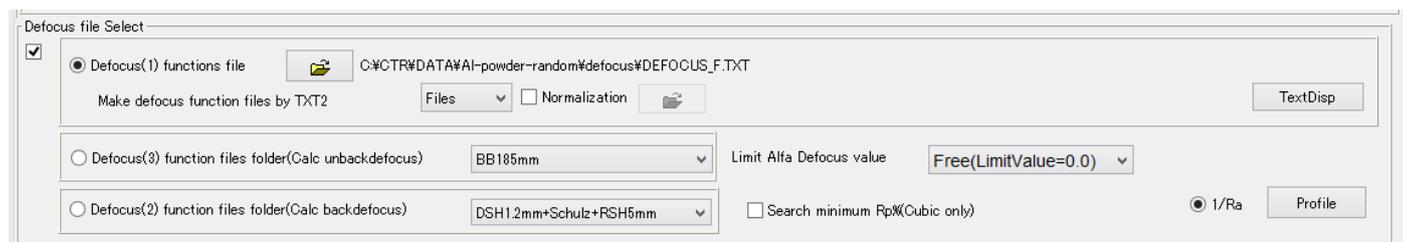
バックグラウンドを削除したTXT2ファイルが作成されます。

111-random_S.ASC	2016/02/27 15:05	RINT20007*
200-random_S.ASC	2016/02/27 15:07	RINT20007*
220-random_S.ASC	2016/02/27 15:10	RINT20007*
111-random_S_chB00_2.TXT	2017/04/19 4:01	テキスト文書
200-random_S_chB00_2.TXT	2017/04/19 4:01	テキスト文書
220-random_S_chB00_2.TXT	2017/04/19 4:01	テキスト文書

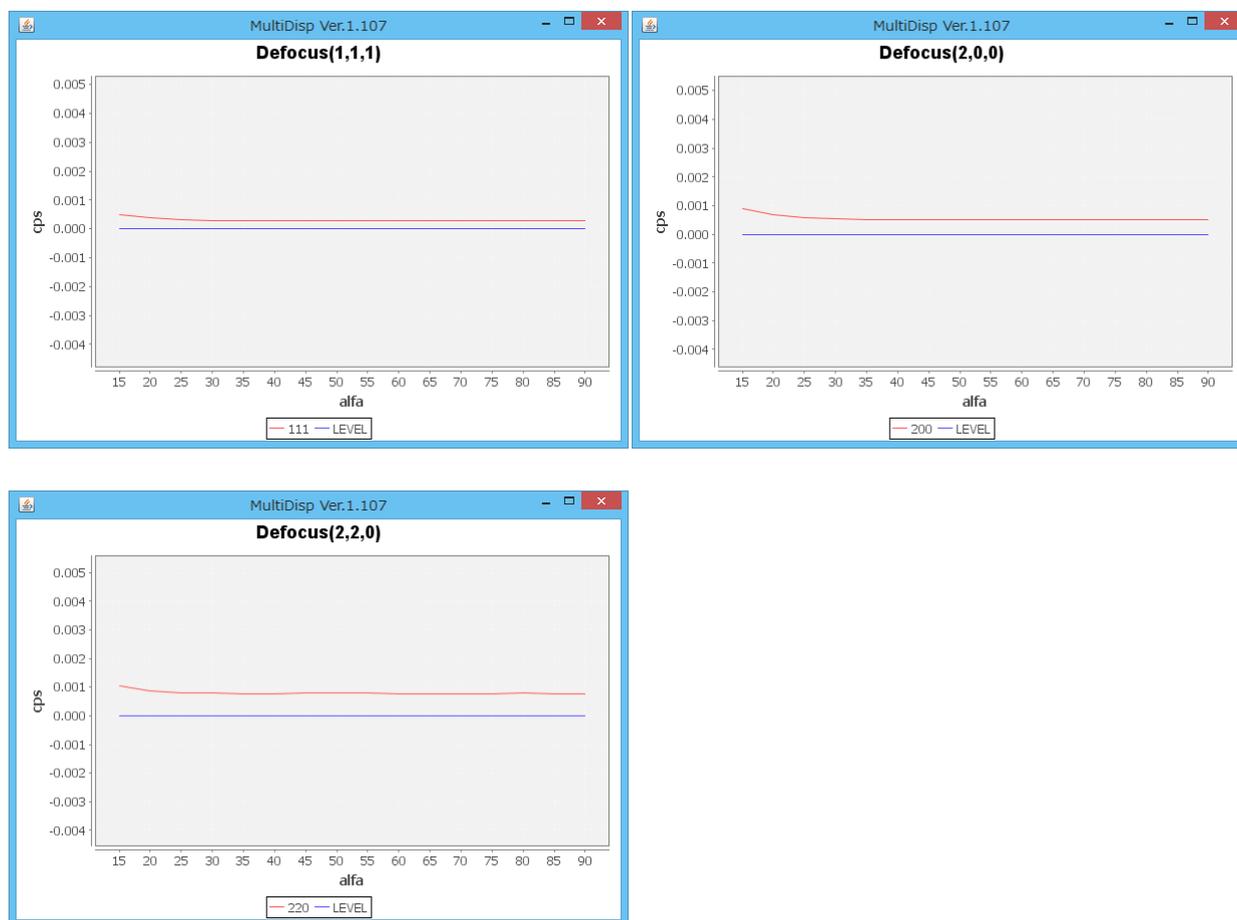
TXT 2 ファイルから defocus ファイルを作成



複数の 2 ファイルを選択すると defocus ファイル名を表示



Normalize なしで登録すると補正曲線は



この補正曲線で、配向材料を補正します。

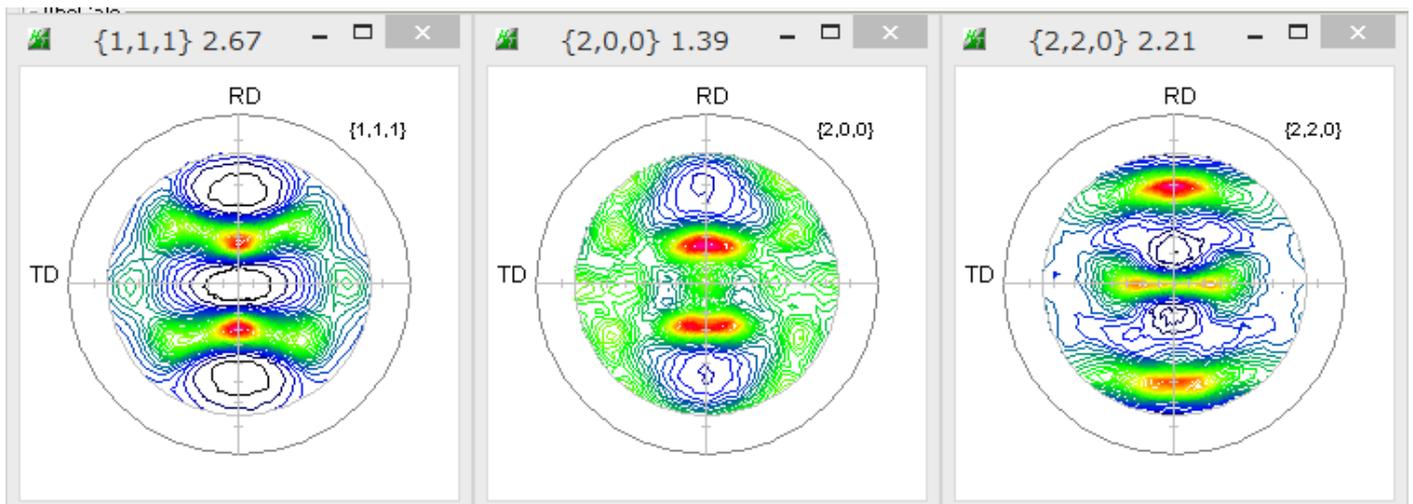
random補正極点線によるdefocus補正

The screenshot displays the ODFPoleFigure2 software interface. At the top, three pole figure windows are open, showing RD vs TD plots for hkl values {1,1,1} (9637.5), {2,0,0} (2820.5), and {2,2,0} (2882.0). The main window title is "ODFPoleFigure2 3.58YMT[17/10/31] by CTR".

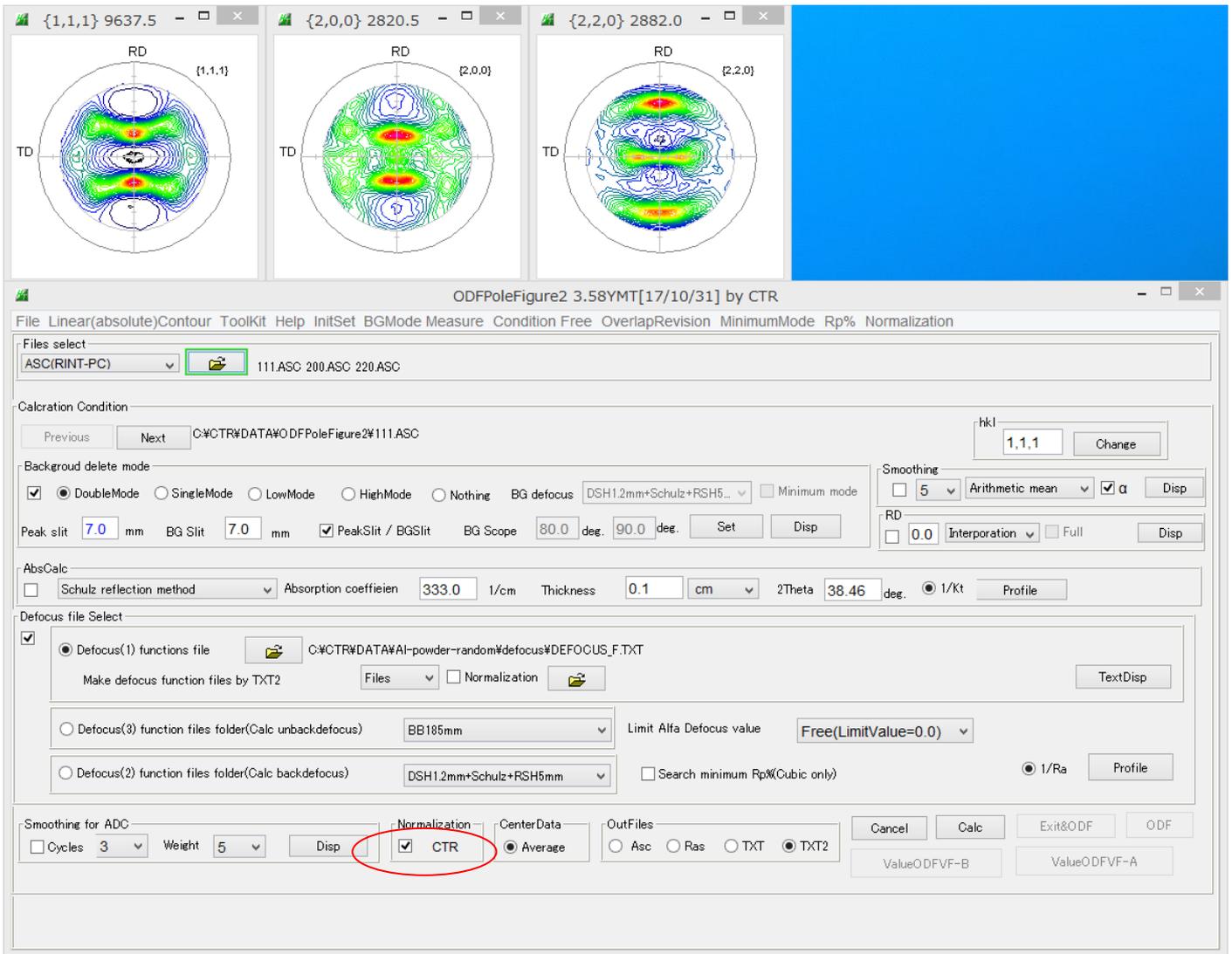
The software settings panel includes the following options:

- Files select:** ASC(RINT-PC), 111.ASC 200.ASC 220.ASC
- Calculation Condition:** C:\CTR\DATA\ODFPoleFigure2\111.ASC
- Background delete mode:** DoubleMode, SingleMode, LowMode, HighMode, Nothing
- Peak slit:** 7.0 mm, **BG Slit:** 7.0 mm, **PeakSlit / BGSlit:** BG Scope: 80.0 deg, 90.0 deg
- AbsCalc:** Schulz reflection method, Absorption coefficient: 333.0 1/cm, Thickness: 0.1 cm, 2Theta: 38.46 deg, 1/Kt
- Defocus file Select:** Defocus(1) functions file, C:\CTR\DATA\AI-powder-random\defocus\DEFOCUS_F.TXT
- Smoothing for ADC:** Cycles: 3, Weight: 5, Normalization, CTR, Average
- Buttons:** Calc, Exit&ODF, ODF

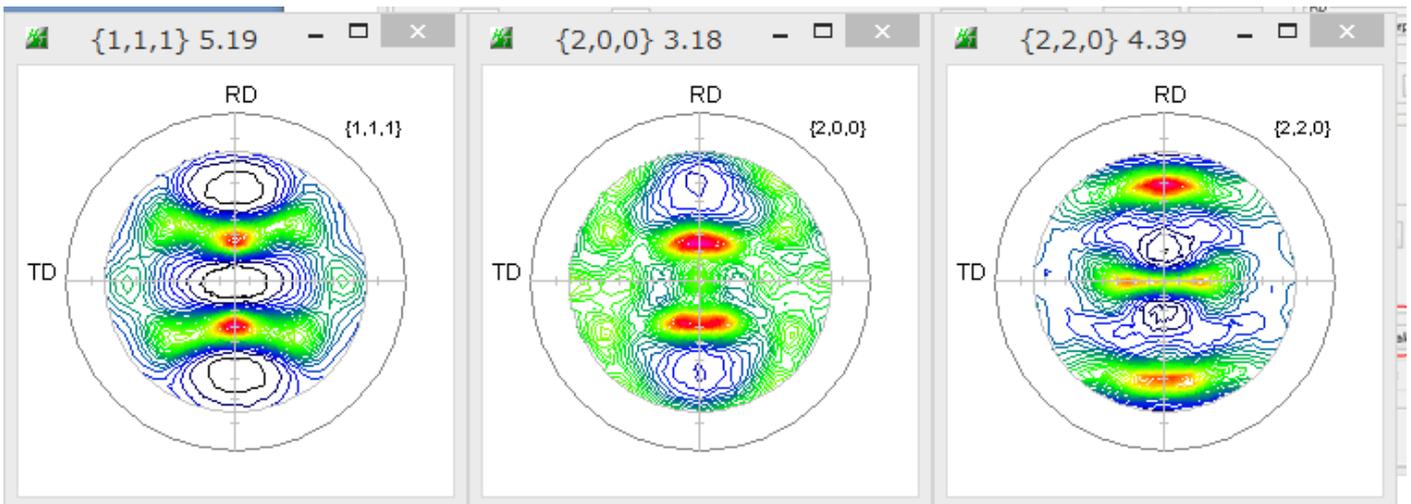
バックグラウンド削除+defocus補正 (規格化なし)



random補正極点線によるdefocus補正+内部規格化



バックグラウンド削除+defocus補正 (規格化あり)



バックグラウンド削除+ d e f o c u s 補正 (規格化なし) を L a b o T e x に読み込み

PFToODF3 8.28MT[17/10/31] by CTR

File Option Symmetric Software Data Help

Lattice constant

Material Aluminum.txt

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

a 1.0 <=<b 1.0 <=<c 1.0 alpha 90.0 beta 90.0 gamm 90.0

Initialize Start

getHKL<-Filename

AllFileSelect

PF Data

SelectFile(TXT(b,intens),TXT2(a,b,intens.))	h,k,l	2Theta	Alpha scope	AlphaS	AlphaE	Select
111_chB00D1CA_2.TXT	1,1,1	38.46	0.0->75.0	0.0	75.0	<input checked="" type="checkbox"/>
200_chB00D1CA_2.TXT	2,0,0	44.7	0.0->75.0	0.0	75.0	<input checked="" type="checkbox"/>
220_chB00D1CA_2.TXT	2,2,0	65.08	0.0->75.0	0.0	75.0	<input checked="" type="checkbox"/>
	2,1,0	0.0		0.0	0.0	<input type="checkbox"/>
	2,1,1	0.0		0.0	0.0	<input type="checkbox"/>
	3,1,1	0.0		0.0	0.0	<input type="checkbox"/>
	4,0,0	0.0		0.0	0.0	<input type="checkbox"/>
	3,3,1	0.0		0.0	0.0	<input type="checkbox"/>
	4,2,2	0.0		0.0	0.0	<input type="checkbox"/>
	5,1,1	0.0		0.0	0.0	<input type="checkbox"/>
	5,2,1	0.0		0.0	0.0	<input type="checkbox"/>
	5,3,1	0.0		0.0	0.0	<input type="checkbox"/>

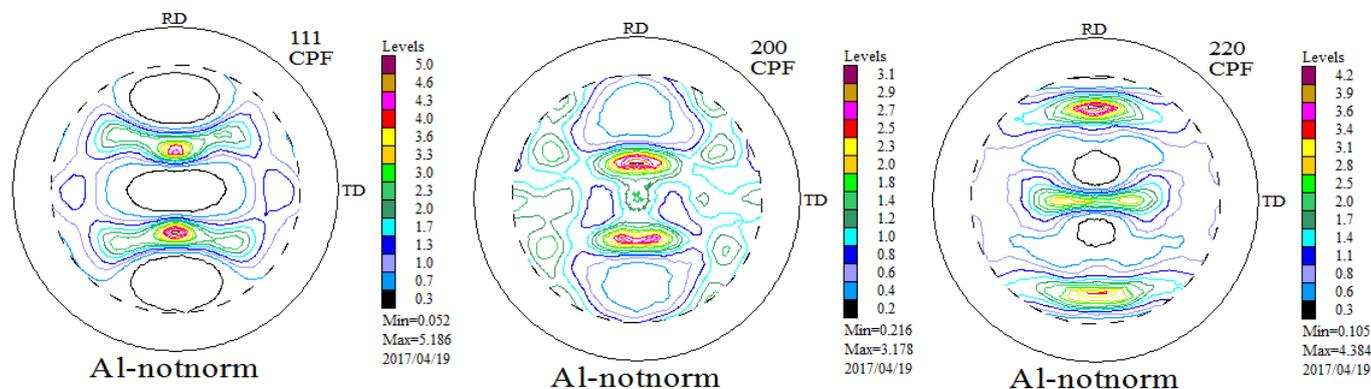
Comment 111_chB00D1CA_2.TXT 200_chB00D1CA_2.TXT 220_chB00D1CA_2.TXT

Symmetric type Full

CenterData Average

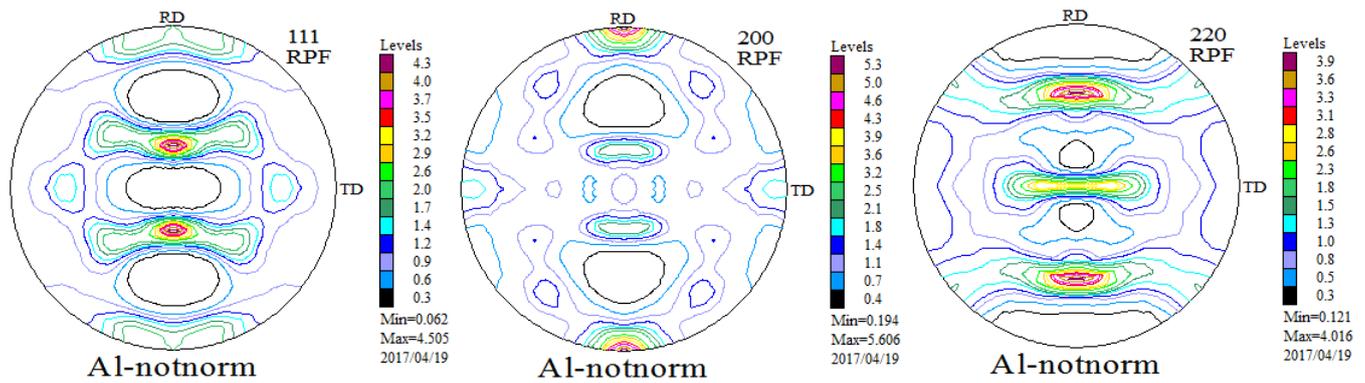
Epf file save

Labotex(EPF).popLA(RAW) filename Al-hotnorm



最大値を見ると、内部規格化された値と一致する。

ODF解析後の再計算極点図



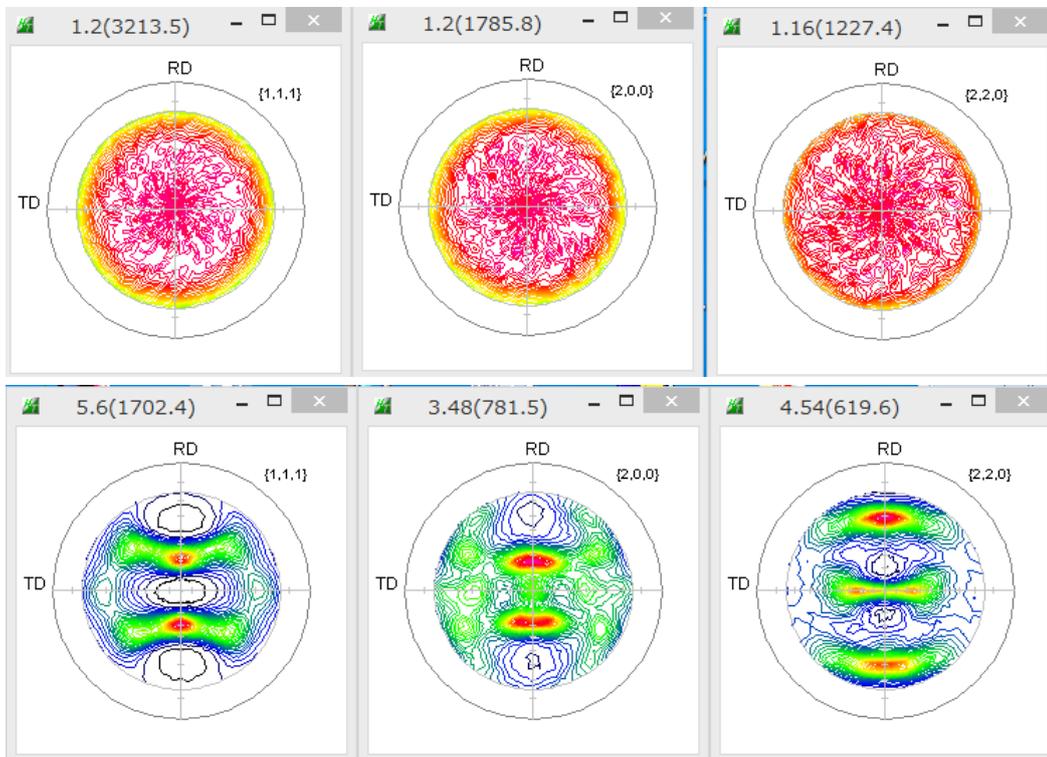
極密度比較

		{111}	{200}	{220}
CTR	defocus補正	2.67	1.39	2.21
CTR	defocus補正+内部規格化	5.19	3.18	4.39
LaboTex	defocus補正データ読み込み	5.186	3.178	4.384
LaboTex	再計算極点図	4.505	5.606	4.016

内部規格化ありなしの極密度の違いは r a n d o m 試料と被検材料の規格化定数 < I > の違いです。

$$\langle I \rangle = \frac{\int_0^{\pi/2} \int_0^{2\pi} I(\alpha, \beta) \cdot \cos \alpha \, d\beta \, d\alpha}{\int_0^{\pi/2} \int_0^{2\pi} \cos \alpha \, d\alpha \, d\beta}$$

以下に < I > を比較してみます。



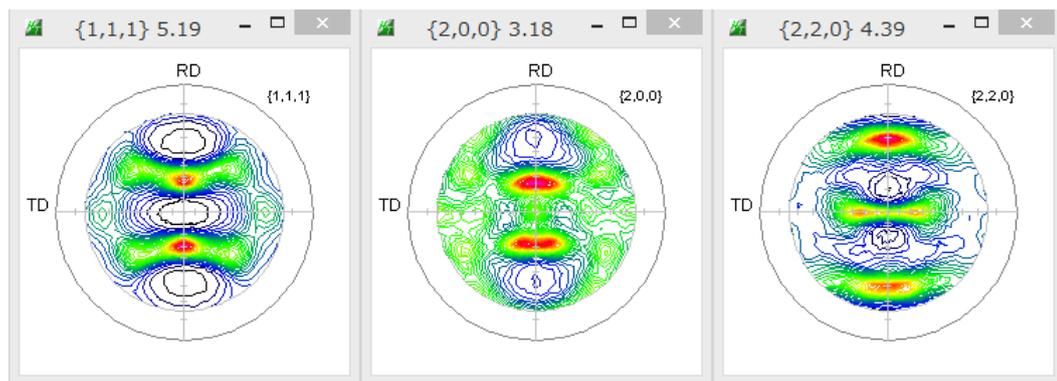
最大密度 < 規格化定数 > を表示しています。

r a n d o m 試料と被検材料では、規格化定数が大きく異なります。

この為、CTRソフトウェアでは、r a n d o m 補正+内部規格化を勧めています。

StandardODFの規格化

ODFPoleFigure2 の規格化でTXT2 作成

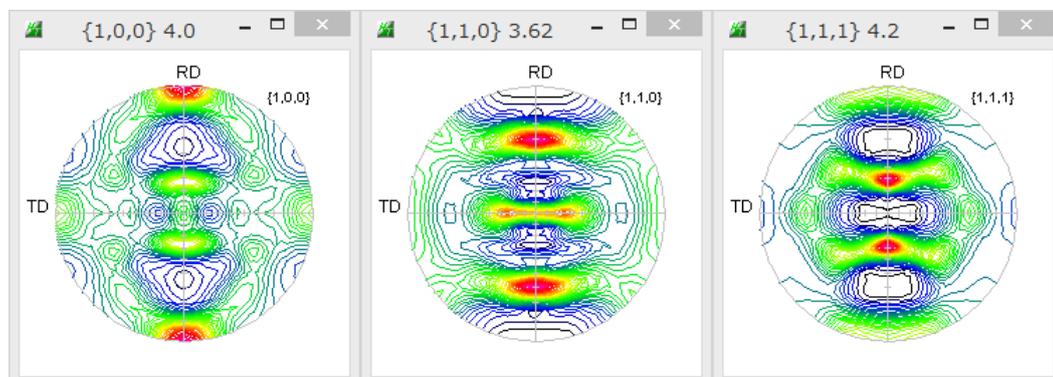


StandardODF で読み込み (データ読み込みで規格化が行われる)

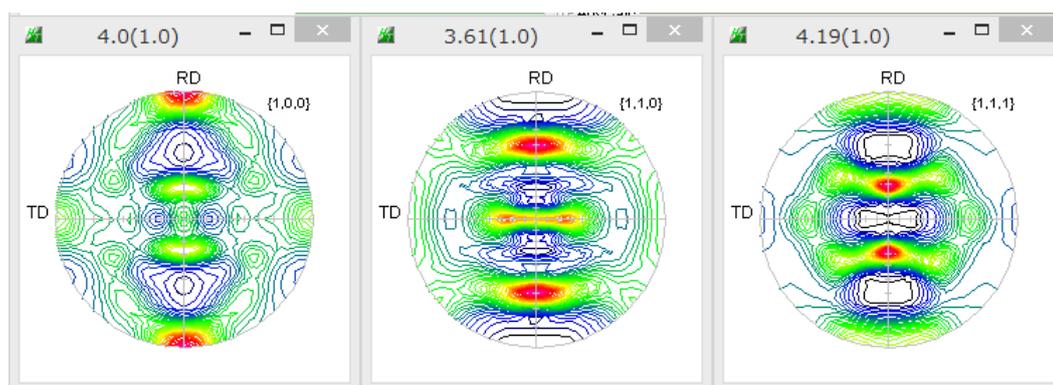
```
ESTIMATED POLE FIGURE (100)↓  
↓  
NORMALIZATION FACTOR NI=.100170E+01↓  
  
ESTIMATED POLE FIGURE (110)↓  
NORMALIZATION FACTOR NI=.986127E+00↓  
ESTIMATED POLE FIGURE (111)↓  
NORMALIZATION FACTOR NI=.982431E+00、
```

内部で独自の規格化定数が計算されている。

この調査に、StandardODFで計算した完全極点図で調査を行う。



ODFPoleFigure2 で規格化



規格化定数は、1.0と計算される。完全極点図では一致する。