

極点図の極密度に関して

外部規格化、内部規格化、random規格化などは、完全極点図を前提にした計算式です。

完全極点図は透過極点図と反射極点図を各種補正後、極点図の接続をして得られます。あるいは、複数の反射極点図（透過極点図）からODF解析して得られます。

完全極点図の極密度を不完全極点図から計算するには、random補正+疑似規格化で近い値が得られます。

2016年09月14日



HelperTex Office

<http://www.geocities.jp/helpertex2>

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

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

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等の問題があります。

本来なら、

内部規格化

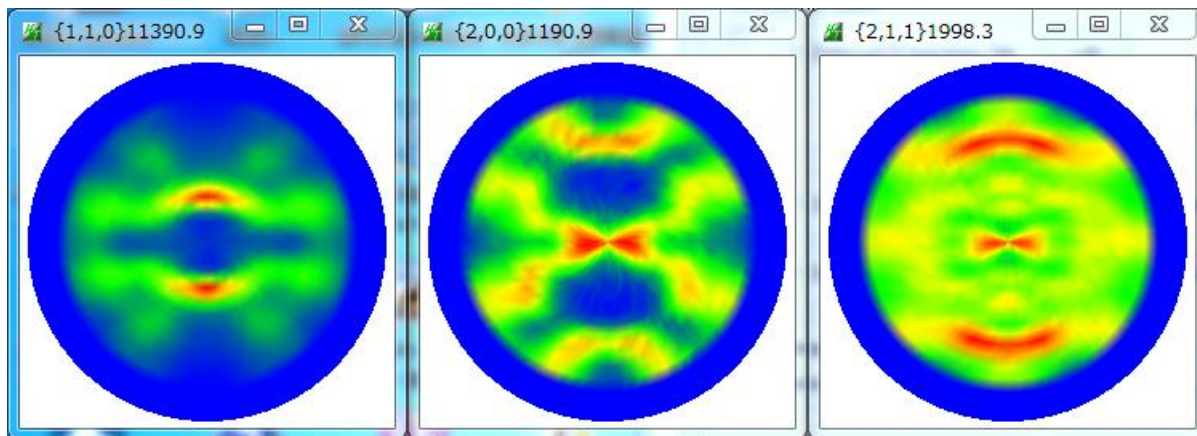
外部規格化

Random 規格化を行った場合は、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、この規格化を疑似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。



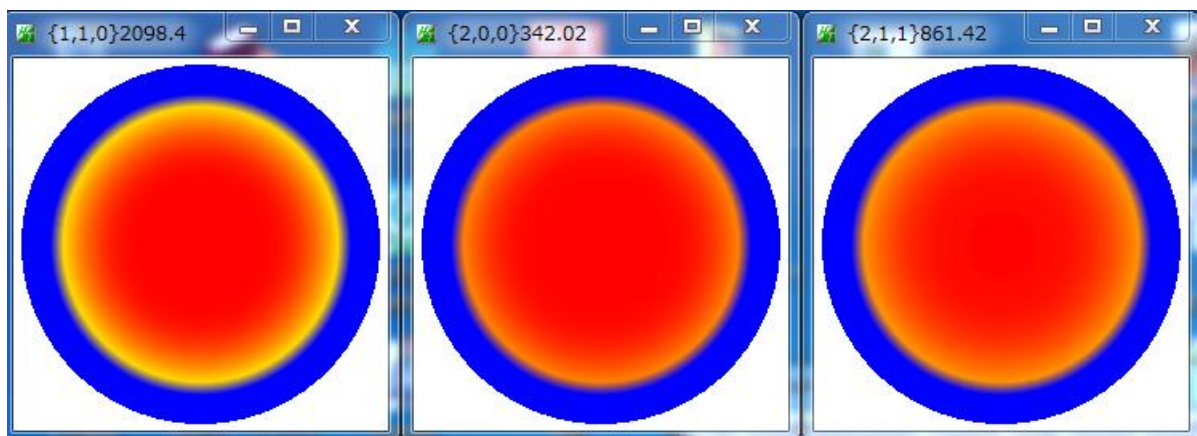
内部規格化

最大強度: 5.529	
線吸収係数:	1/cm
試料の厚さ:	cm
スケールファクタ:	
規格化強度: 2060.309	

最大強度: 3.357	
線吸収係数:	1/cm
試料の厚さ:	cm
スケールファクタ:	
規格化強度: 354.704	

最大強度: 2.314	
線吸収係数:	1/cm
試料の厚さ:	cm
スケールファクタ:	
規格化強度: 863.703	

Random



FT=1sec

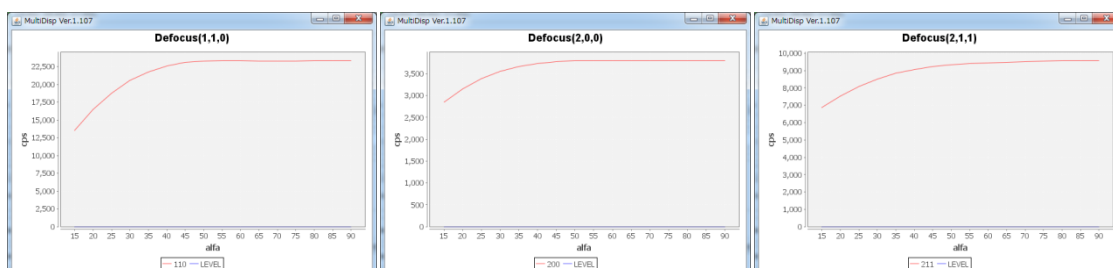
内部規格化

最大強度: 1.132	
線吸収係数:	1/cm
試料の厚さ:	cm
スケールファクタ:	
規格化強度: 1854.000	

最大強度: 1.072	
線吸収係数:	1/cm
試料の厚さ:	cm
スケールファクタ:	
規格化強度: 319.140	

最大強度: 1.108	
線吸収係数:	1/cm
試料の厚さ:	cm
スケールファクタ:	
規格化強度: 777.240	

補正曲線

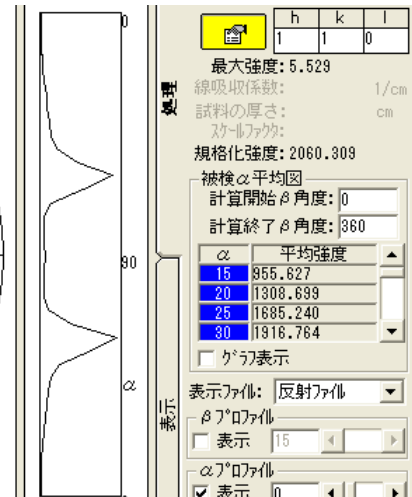
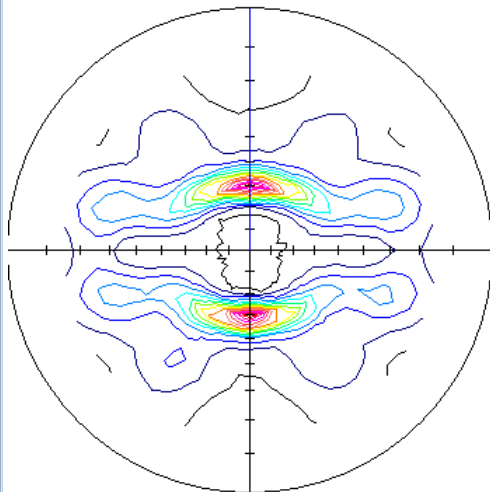


R I N T 内部規格化と外部規格化

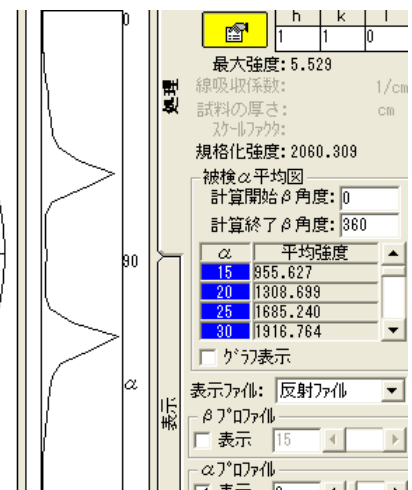
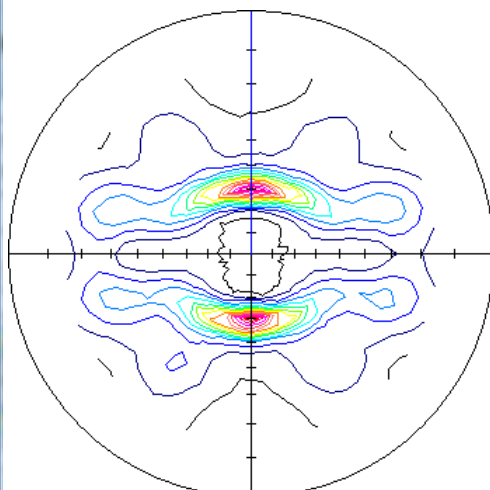
例 (110) 極点図を用いて、外部計算規格化 I (外部規格化データは同一) と内部計算規格化を比較



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



内部規格化を行う



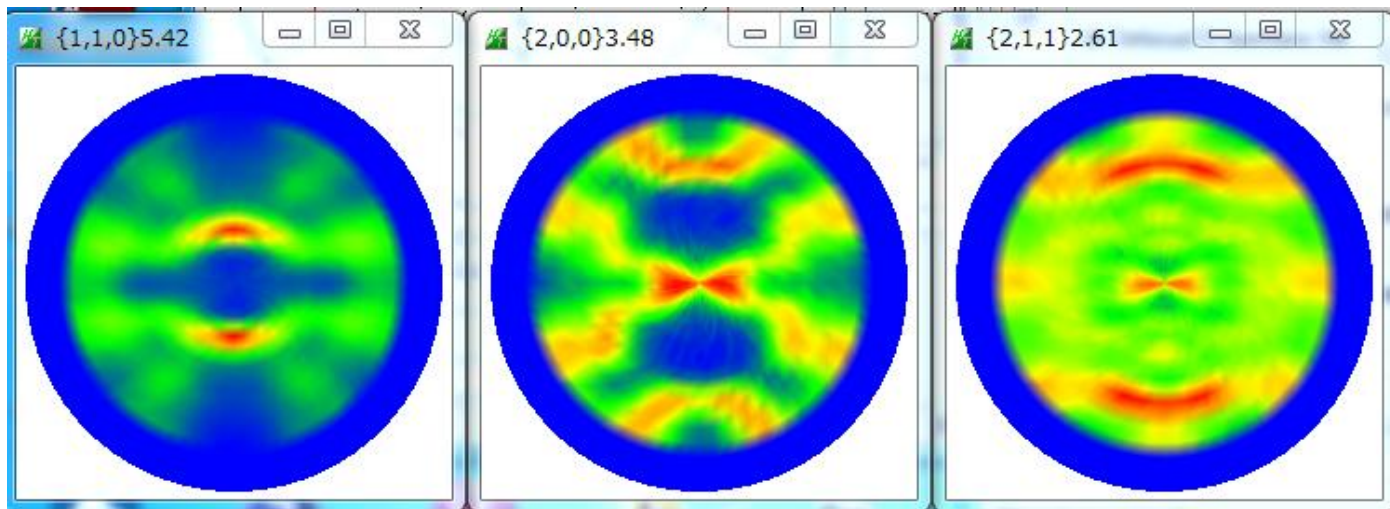
外部ファイルを同一とすれば外部規格化と内部規格化は同一の極密度が得られます。

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

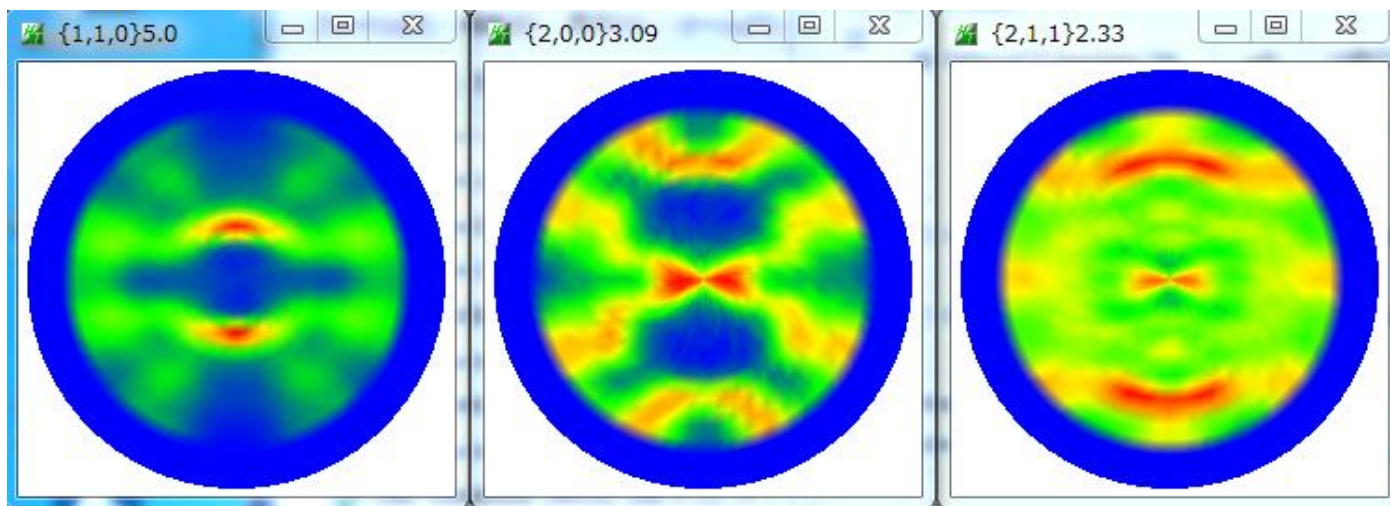
配向試料と r a n d o m 試料が F T 時間を含めて、同一条件で測定されていれば

r a n d o m 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



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 gamm 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

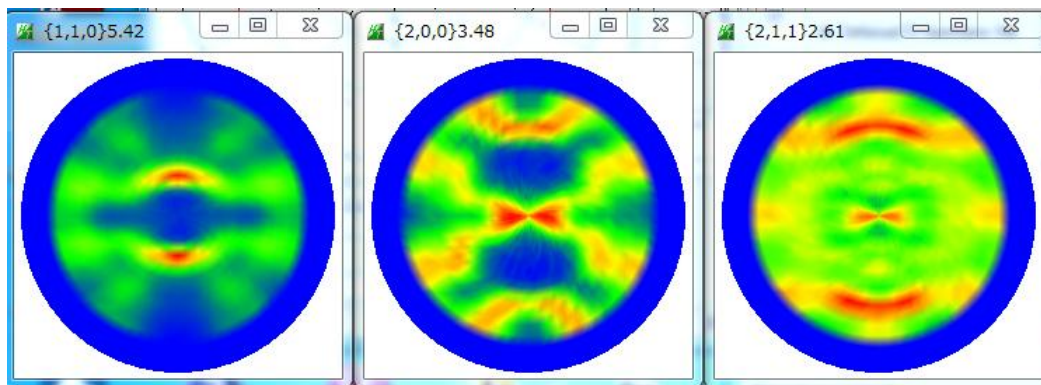
0.025136 0.025136 0.025136 0.025136 0.025136 0.025136 0.025136 0.025136

0.025136 0.025136 0.025136 0.025136 0.025136 0.025136 0.025136 0.025136

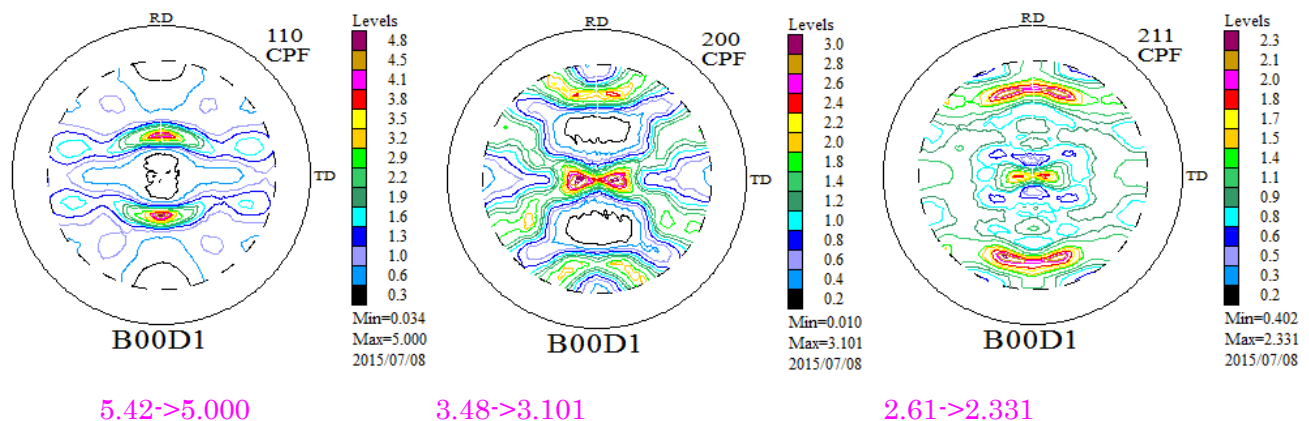
0.025136 0.025136 0.025136 0.025136 0.025136 0.025136 0.025136 0.025136

0.025136 0.025136 0.025136 0.025136 0.025136 0.025136 0.025136 0.025136

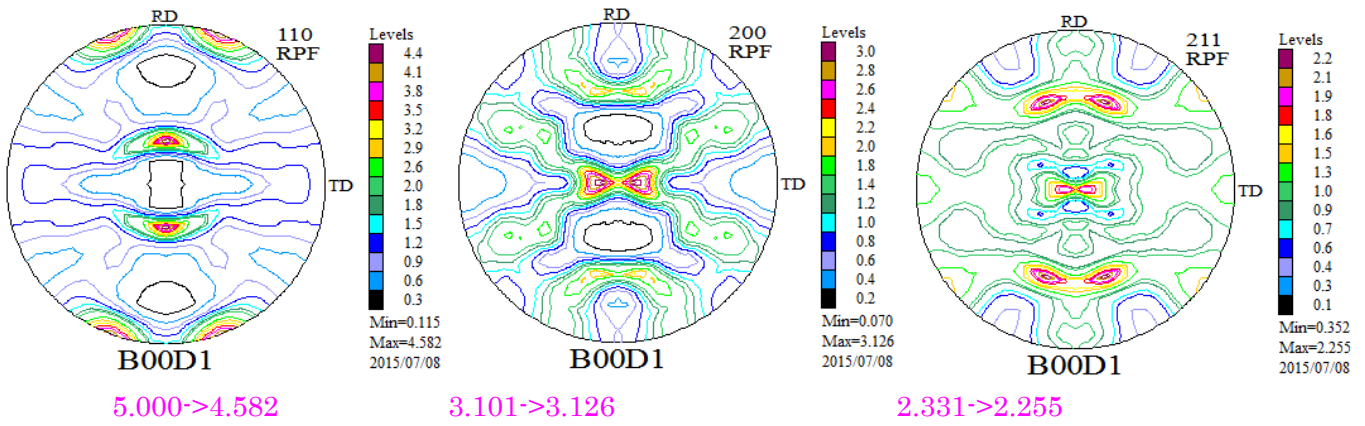
入力データ



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きさを比較するには、

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。

疑似規格化あり

5.00->4.582

3.09->3.126

2.33->2.255

疑似規格化なし

5.42->4.582

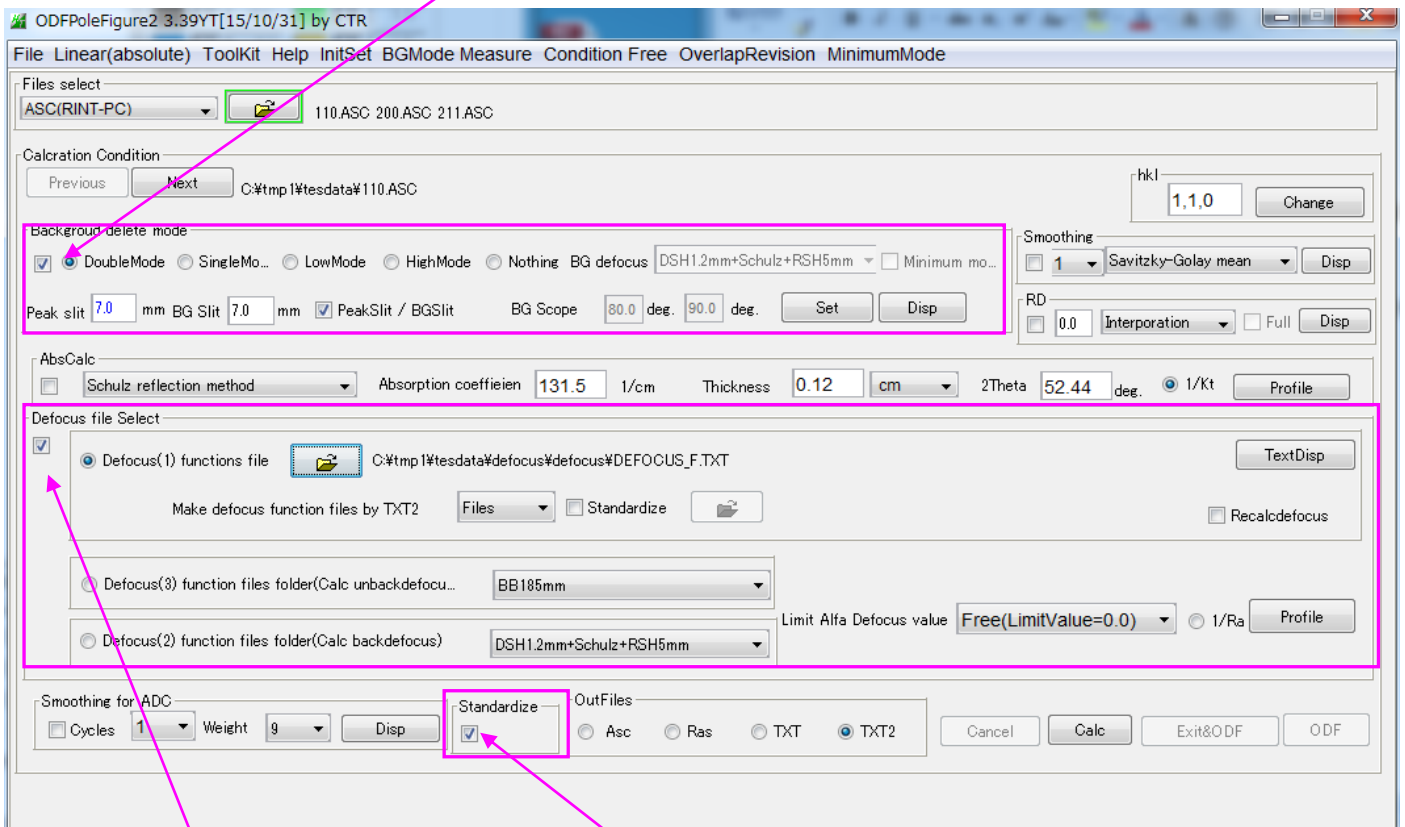
3.48->3.126

2.61->2.255

ODF解析後の極点図は、random補正+疑似規格化に近い値に収束します。

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