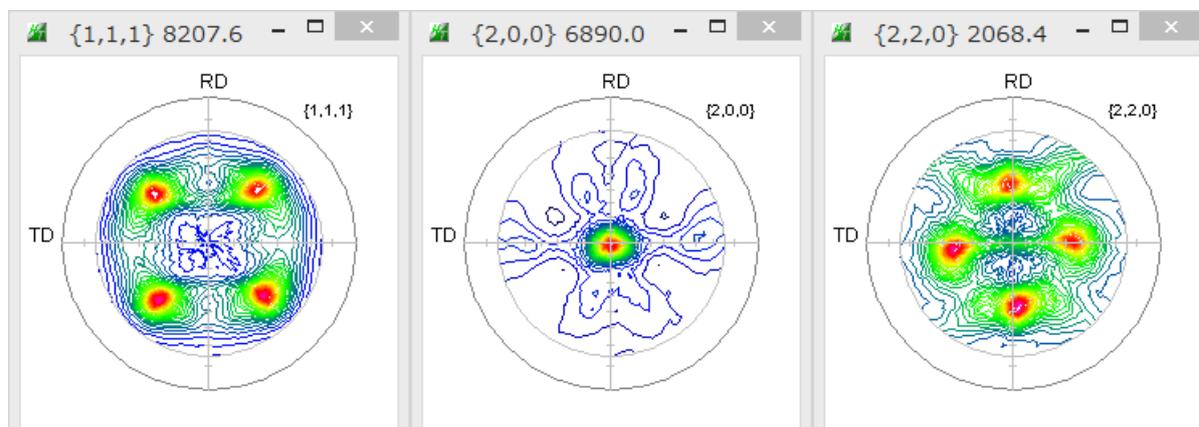


極点図の規格化



まとめ

規格化の正解が ODF 入力時の規格化値とした場合
CTR モードが最適と考えます。

	不完全極点図			完全極点図		
	{111}	{200}	{220}	{111}	{200}	{220}
CTR	4.59	9.8	3.67	4.73	8.58	3.47
ODF	4.42	9.53	3.58	4.73	8.55	3.47
ODF2	4.42	9.38	3.59	4.8	8.16	3.42
RINT	4.59	9.91	3.67	4.8	8.16	3.42
正極点	4.585	10.833	3.671	4.795	8.164	3.424
LaboTex	4.589	9.802	3.671	4.73	8.58	3.47

不完全極点図 {200} の正極点解析の最大密度が大きく異なる原因は
ODFPoleFigure2 ソフトウェアでは、極点図の中心データは平均化して計算が行われているが、
正極点では、平均化が行われていないと考えます。
極点図の中心に最大密度がある場合、注意してください。

2016年10月09日



HelperTex Office

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

規格化TEST

概要

極点図の規格化方法としては、幾つか方法があります。

一般的には、以下に計算方法が示されます。(極点図の中心を 90 とした場合)

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

しかし、この計算式だけでは詳細が不明、実際に内部では異なる計算方法が採用されています。

特に、 α 方向に関して、終端処理が示されていません。

又、測定間隔により規格化値が異なる問題もあります。

ODFの内部では、測定間隔を狭くし、データを補間して計算が行われています。

データの補間を行わないで、計算する場合、極点図の中心データは規格化から外されています。

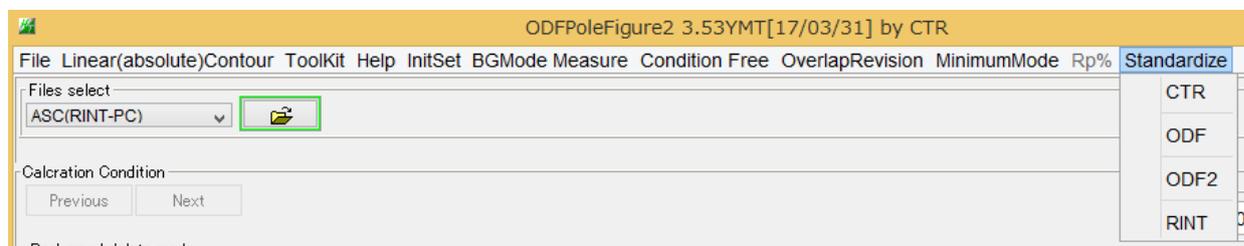
データの補間を行えば、中心データも規格化に含まれます。

又、終端データを 1 / 2 で計算する事もあります。

このような事から、不完全極点図、完全極点図を各種方法で計算した比較を行ってみます。

比較は、リガク正極点ソフト、ODFPoleFigure2 ソフト、LaboTex で行います。

ODFPoleFigure2 ソフトウェアでは、規格化の方法の切り替えが可能



CTR では、終端処理のみ採用

ODF では、ステップを 1 / 3 2 としてデータ補間を行う。

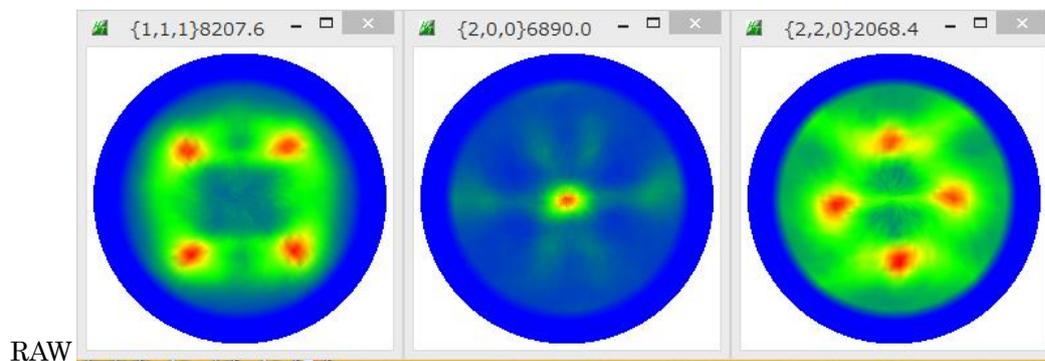
ODF2 では、 α 方向のステップを 1 / 1 0 としてデータ補間を行う。

RINT では、リガク正極点処理を行う。

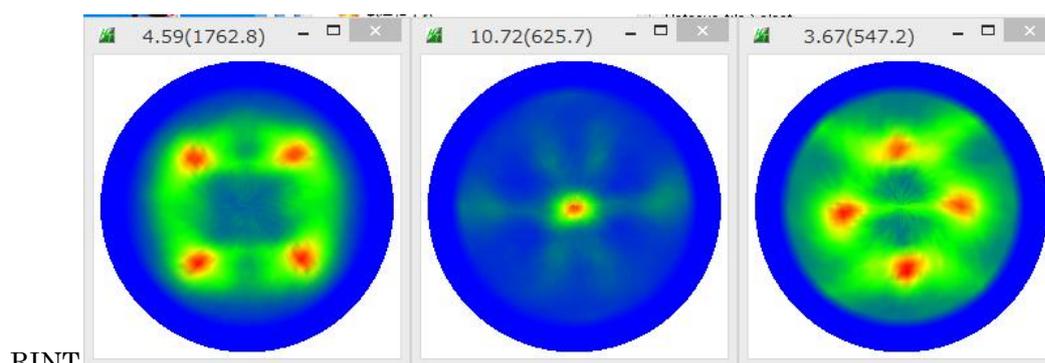
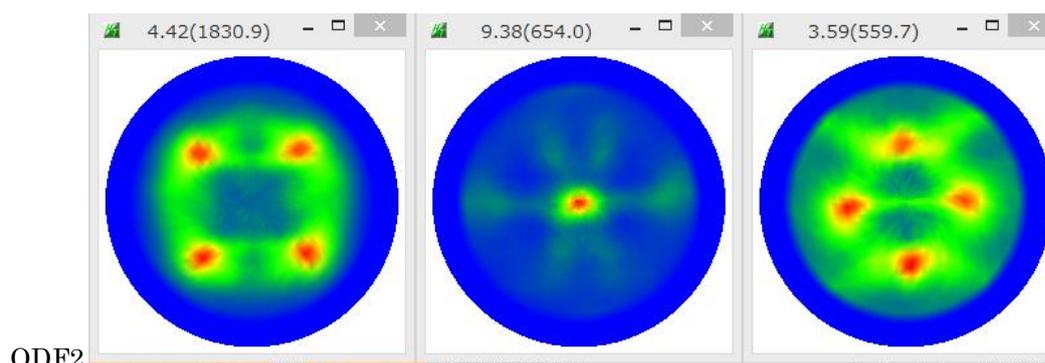
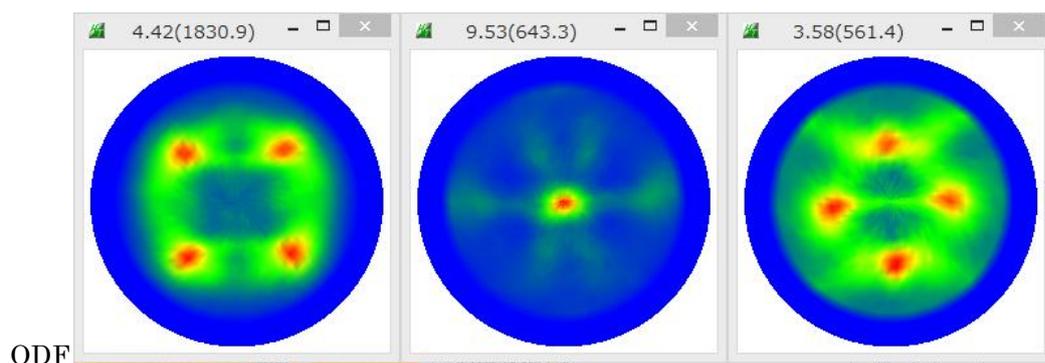
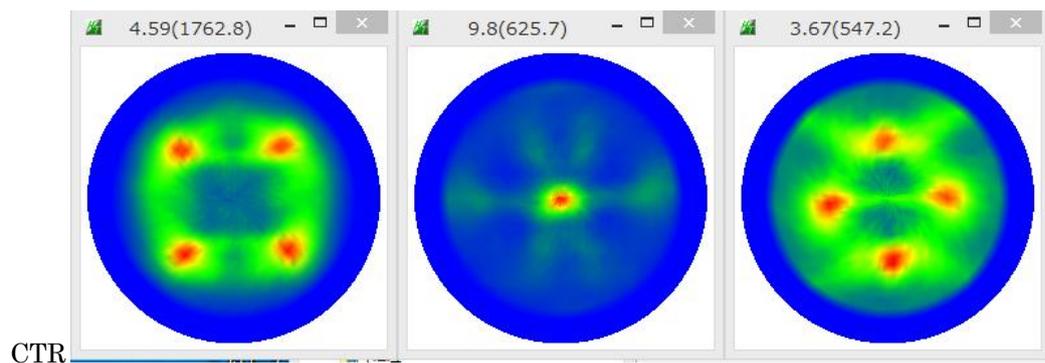
極点図の中心は平均値を用いる

正極点ソフト、極点図中心は平均化を行わない

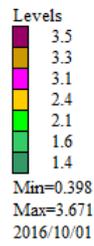
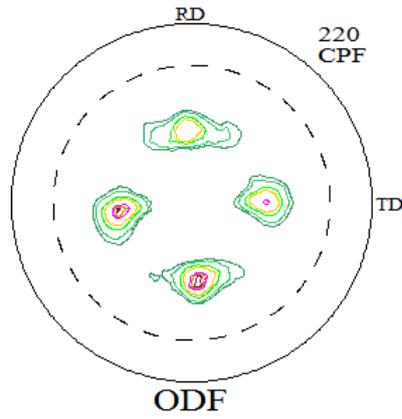
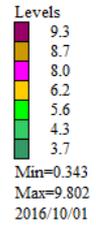
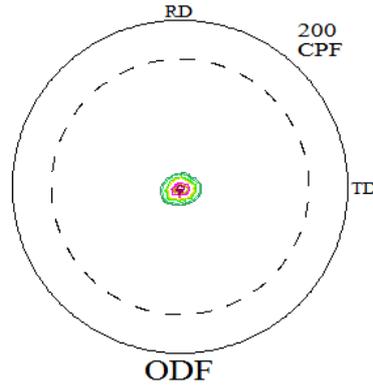
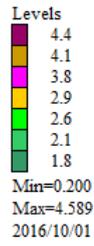
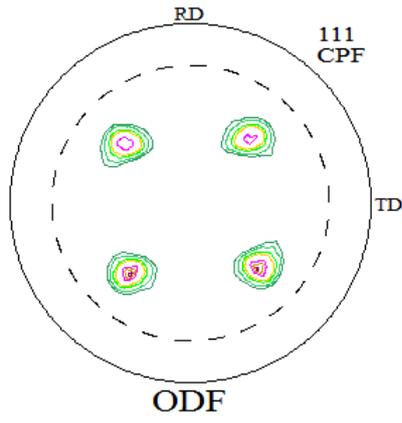
使用する不完全極点図データ (CTR¥DATA¥OdfPoleFigure 以下のデータ)



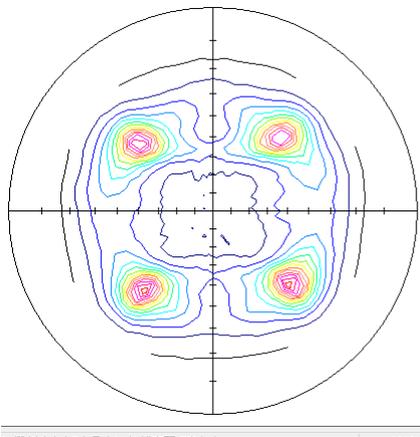
バックグラウンド削除を行い規格化



LaboTex



Dmax



処理: 規格化

結晶系: 立方晶系

h k l

最大強度: 4.585

線吸収係数: 1/cm

試料の厚さ: cm

規格化強度: 8919.896

被検α平均角

計算開始β角度: 0

計算終了β角度: 360

α	平均強度
15	2598.294
20	4829.108
25	8043.719
30	11262.030

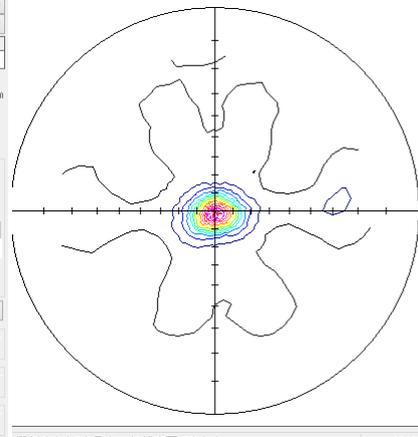
表示方法: 反射強度

β°D°

α°D°

RD変更

0.0



処理: 規格化

結晶系: 正方晶系

h k l

最大強度: 10.833

線吸収係数: 1/cm

試料の厚さ: cm

規格化強度: 3095.791

被検α平均角

計算開始β角度: 0

計算終了β角度: 360

α	平均強度
15	1197.411
20	2126.541
25	2308.452
30	2402.570

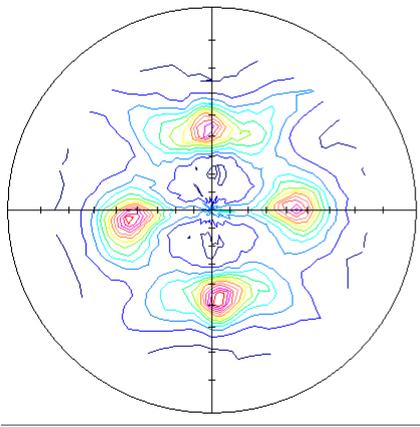
表示方法: 反射強度

β°D°

α°D°

RD変更

0.0



処理: 規格化

結晶系: 立方晶系

h k l

最大強度: 3.671

線吸収係数: 1/cm

試料の厚さ: cm

規格化強度: 2736.191

被検α平均角

計算開始β角度: 0

計算終了β角度: 360

α	平均強度
15	1454.849
20	1612.863
25	1901.336
30	2363.657

表示方法: 反射強度

β°D°

α°D°

RD変更

0.0

完全極点図 (LaboTex で解析した結果)

