

Eine Methode zur Aufzeichnung von Polfiguren mit einer Datenverarbeitungsanlage

A. WAGENDRISTEL, W. SCHNEIDER, P. SKALICKY
und H. EBEL

Institut für Angewandte Physik der Technischen Hochschule
Wien

(Z. Naturforsch. 25 a, 1524—1527 [1970]; eingegangen am 10. Juni 1970)

Es wird ein Rechenprogramm beschrieben, welches Polfiguren als Rasterbild aufzeichnet und die Flächenpoldichte durch einfache und kombinierte Schriftsymbole mit unterschiedlichem Schwärzungswert darstellt. Die Aufzeichnung kann wahlweise qualitativ, semiquantitativ und quantitativ erfolgen.

Einleitung

Die röntgenographische Ermittlung von Texturen beruht auf dem linearen Zusammenhang zwischen dem Volumensanteil der beugungsgünstig orientierten Kristallite und der Intensität der an ihnen gebeugten Strahlung. Die von SCHULZ angegebene Rückstrahlmethode erfaßt die Häufigkeitsverteilung der Kristallitorientierungen über einen großen Bereich der Lagenkugel. Hierbei erfolgt die Probenbewegung in einem auf die Interferenz (hkl) justierten Zählrohrsgoniometer so, daß die Lagenkugel entweder längs einer Spirale

(gleichzeitige Veränderung von Poldistanz und Azimut) oder aber entlang von Breitenkreisen (konstante Poldistanz) abgetastet wird. Die mittlere Impulsrate wird gleichzeitig mit einem Schreiber registriert und anschließend händisch in die Polfigur übertragen.

Zur Vermeidung dieser sehr zeitraubenden Tätigkeit stehen grundsätzlich zwei Methoden zur Verfügung: die Verwendung von Polfigurschreibern¹⁻⁴ und die Darstellung der Polfigur mit Hilfe einer Datenverarbeitungsanlage.

Bei den bisher veröffentlichten Computerverfahren markiert die Ausgabereinheit Punkte gleicher Intensität⁵ oder die in gleichen Zeitintervallen gezählten Impulse am zugehörigen Punkt der Registrierspirale⁶. Im vorliegenden Bericht wird nach einer kurzen Beschreibung dieser Verfahren eine Methode angegeben, welche die Polfigur in einen den Schreibstellen des Druckers entsprechenden Raster auflöst.

Methode von SEGMÜLLER und ANGILELLO⁵

Die Impulsrate wird in der Registereinheit gemittelt, in konstanten Zeitintervallen mit einem digitalen Voltmeter abgefragt und auf einer Magnetplatte gespeichert. Analog zur händischen Darstellung ermittelt eine Rechenanlage aus diesen Daten die Koordinaten bestimmter Intensitätsniveaus und markiert diese mit einem Plotter in der Polfigur (Abb. 1).

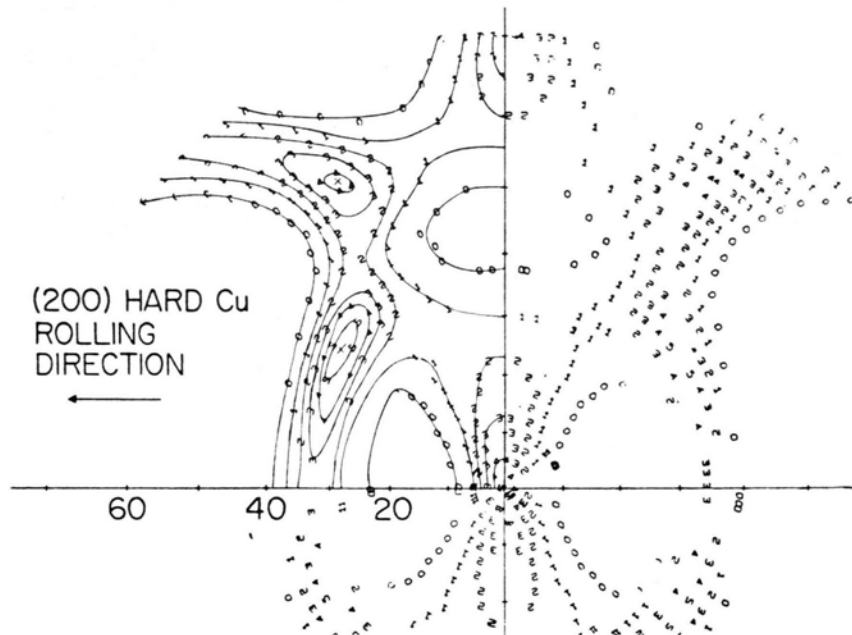


Abb. 1. (200)-Polfigur von Kupfer nach SEGMÜLLER.

Sonderdruckanforderungen an Dr. A. WAGENDRISTEL, Institut für Angewandte Physik der Technischen Hochschule Wien, AU-1040 Wien, Karlsplatz 12.

¹ K. LÜCKE, Siemens Vertriebsprogramm, Oktober 1968.

² R. BARO, persönliche Mitteilung.

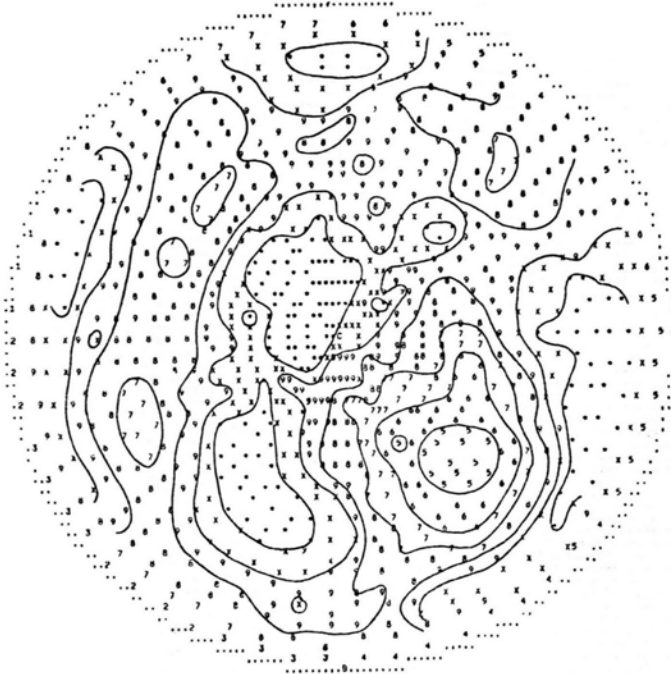
³ H. EBEL u. B. ORTNER, J. Sci. Instrum. 42, 959 [1966].

⁴ A. WAGENDRISTEL, H. EBEL, W. SCHNEIDER u. O. MARIHART, Z. Werkstoffprüf., demnächst.

⁵ A. SEGMÜLLER u. J. ANGILELLO, Shared Computer in an X-Ray Lab: Pole Figure Evaluation, 1968 Pittsburgh Diffraction Conference, November 6—8, 1968.

⁶ H. SIEMES, N. Jb. Miner. Mh. 2/3, 49 [1967].

Abb. 2. (1011)-Polfigur von Quarzit nach SIEMES.

*Methode von SIEMES⁶*

Die Intensitätsmessung entlang der Registrierspirale erfolgt durch Impulszählung in konstanten Zeitintervallen. Das Rechenprogramm ermittelt die zugehörigen Koordinaten und läßt den normierten Wert an der nächstgelegenen Schreibstelle ausdrucken. Im mittleren Bereich der Polfigur, in dem mehrere Meßwerte auf einer Schreibstelle liegen können, wird deren arithmetisches Mittel geschrieben (Abb. 2).

Vollständige Aufzeichnung von Polfiguren

Die Darstellung von Bildern durch Auflösen in Rasterpunkte mit unterschiedlicher Schwärzung ist ein gebräuchliches Verfahren. Von HEAD⁷ stammt eine Methode, welche Beugungskontraste elektronenmikroskopischer Aufnahmen durch einfache oder kombinierte Schriftsymbole des Computerprinters wiedergibt. In analoger Weise kann man Polfiguren in einen den Schreibstellen des Schnelldruckers entsprechenden Raster zerlegen und der Flächenpoldichte entsprechende Schwärzungswerte zuordnen. Diese Darstellung ent-

spricht jener eines Polfigurenschreibers mit photographischer Aufzeichnung^{3, 4}.

In Abb. 3 ist die Grauskala wiedergegeben. Der Gradationsumfang kann beliebig variiert werden. Dies ist dann von Vorteil, wenn bestimmte Bereiche der Polfigur von besonderem Interesse sind. Die Daten werden auf die gleiche Weise wie bei der von SIEMES angegebenen Methode gewonnen. Während des Durchlaufens der Probe im Texturgoniometer werden die in gleichen Zeitintervallen gezählten Impulse von einem Drucker ausgeschrieben. Diese werden auf Lochkarten übertragen und von einem Rechenprogramm in folgender Weise ausgewertet:

Zunächst wird die zu beiden Seiten der Interferenz gemessene Untergrundintensität gemittelt und von den Daten abgezogen. Die Normierung der Meßwerte erfolgt nach den Ansprüchen, welche an die Polfigur gestellt werden:

1. Einteilung der Meßwerte in zehn Intervalle (qualitative Darstellung);
2. Normierung auf die mittlere Intensität einer texturlosen Bezugsprobe (semiquantitative Darstellung);

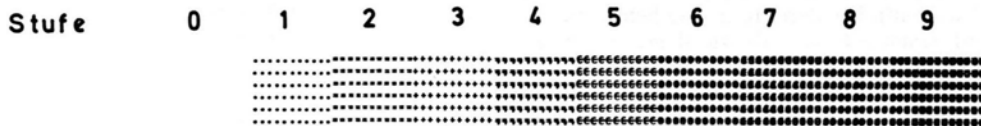


Abb. 3. Aus Schriftsymbolen aufgebaute Grauskala.

⁷ A. K. HEAD, Austr. J. Phys. **20**, 557 [1967].

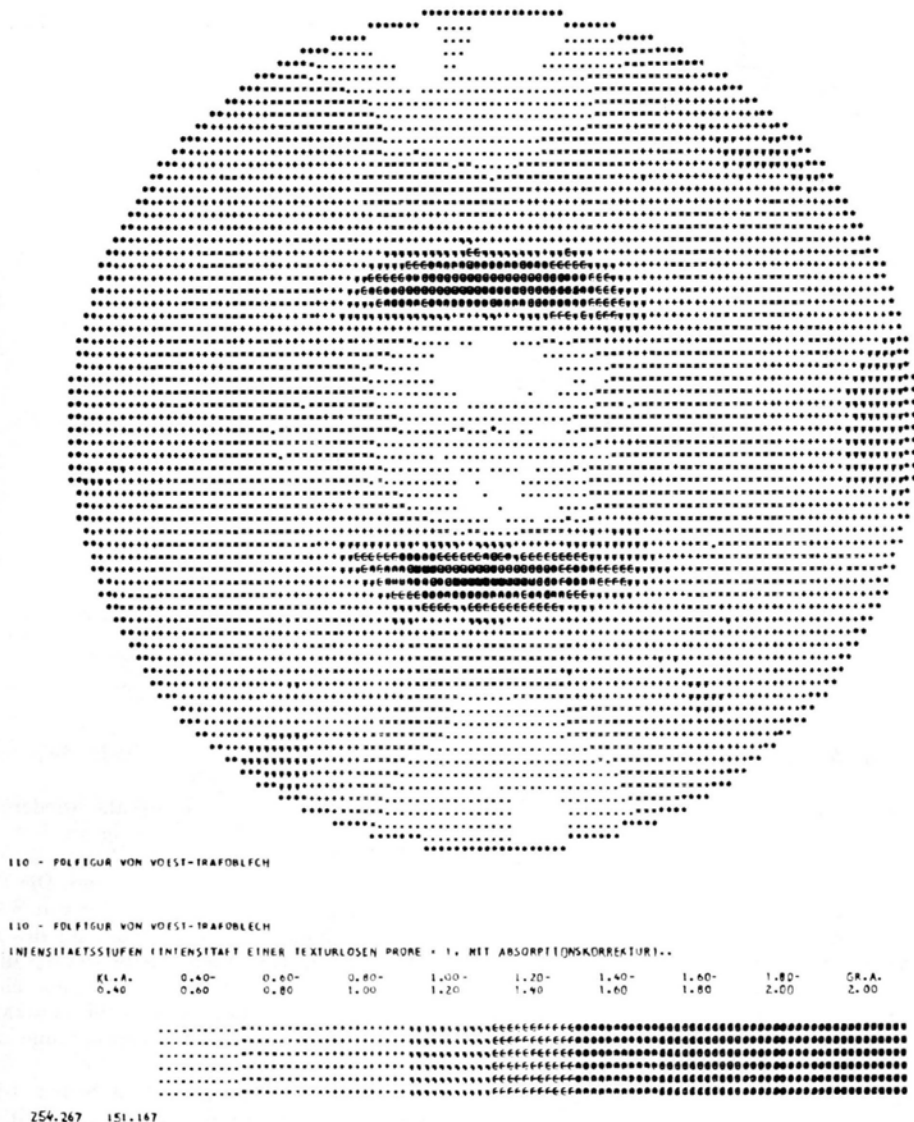


Abb. 4. 110-Polfigur eines VÖEST-Transformatorbleches, geringer Kontrast.

3. Normierung jedes Wertes auf die den gleichen Lagekoordinaten entsprechende Impulszahl einer texturlosen Probe (quantitative Darstellung).

Die Meßwerte werden jenen Schreibstellen zugeordnet, welche den tatsächlichen Koordinaten am nächsten liegen, während an allen anderen aus vier umliegenden Meßwerten interpolierte Werte ausgedrückt werden. Ebenso wird im zentralen Bereich, in welchem mehrere Meßwerte auf einer Schreibstelle zu liegen kommen, deren Mittel herangezogen.

Abschließend wird zur Illustration des Verfahrens die Polfigur eines Transformatorbleches wiedergegeben. Abbildung 4 zeigt sie mit geringem Gradationsumfang, während sie Abb. 5 mit stärkeren Kontrast darstellt. Die auf eine texturlose Probe bezogenen Intensitätsintervalle werden in Tab. 1 mit den beiden

INTENSITÄTSINTERVALL		kombinierte Symbole
kontrastreich	kontrastarm	
< 0,6	< 0,4	
0,6 - 0,7	0,4 - 0,6	. → .
0,7 - 0,8	0,6 - 0,8	= → =
0,8 - 0,9	0,8 - 1,0	+ → +
0,9 - 1,0	1,0 - 1,2	=, → =,
1,0 - 1,1	1,2 - 1,4	C- → C
1,1 - 1,2	1,4 - 1,6	○= → ○
1,2 - 1,3	1,6 - 1,8	C- → C
1,3 - 1,4	1,8 - 2,0	○= → ○
> 1,4	> 2,0	○=X → ○

Tab. 1

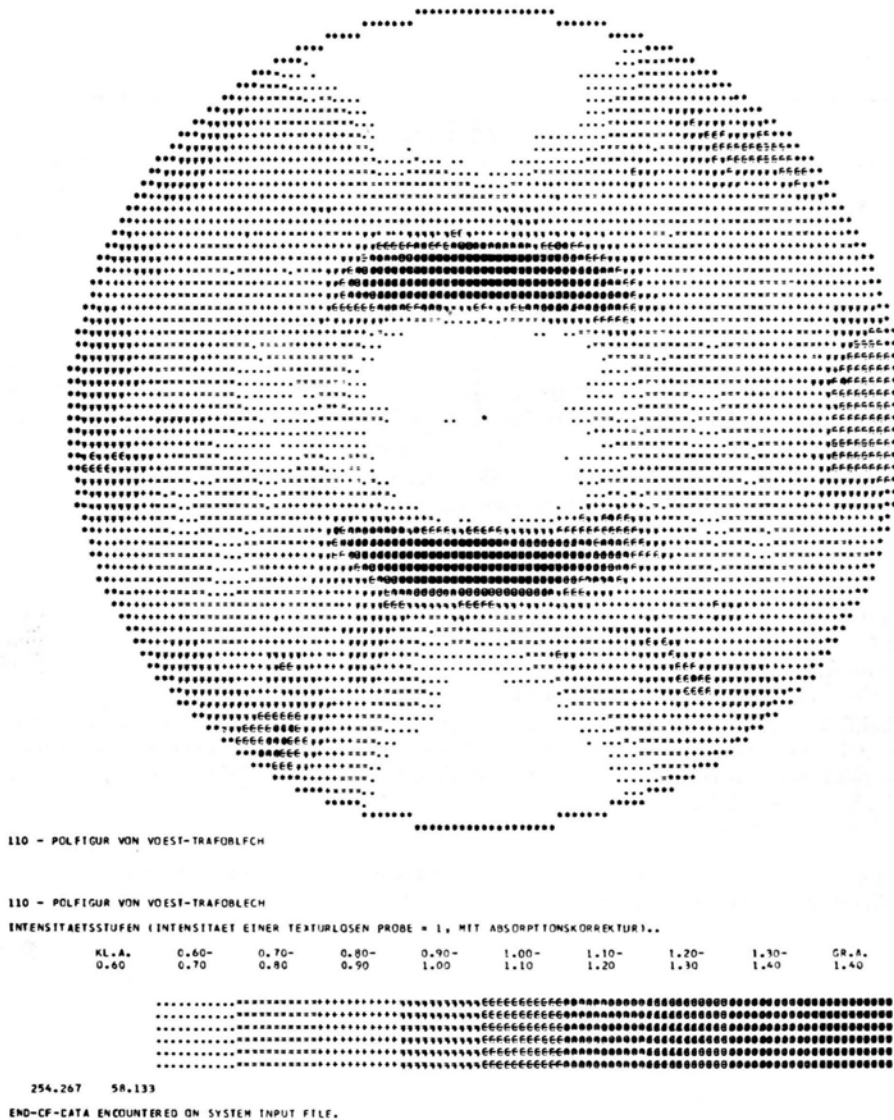


Abb. 5. 110-Polfigur eines VÖEST-Transformatorbleches, hoher Kontrast.

Darstellungsarten entsprechenden Grauwerten korreliert.

Die kontrastreichere Aufnahme bietet ein übersichtliches Bild der Textur, es geht jedoch bei kleinen und großen Flächenpoldichten Information verloren. Eine solche Darstellung wird man also zweckmäßigerweise dann wählen, wenn nur ein Überblick gegeben werden

soll, oder wenn nur gewisse Details von besonderem Interesse sind. Die kontrastärmere Aufnahme zeigt bei voller Ausnützung der Information zunächst etwas weniger Übersichtlichkeit. Dies kann durch nachträgliches Eintragen von Höhenlinien behoben werden.

Herrn Prof. LIHL danken wir für sein wohlwollendes Interesse an dieser Arbeit.