



(19)
Bundesrepublik Deutschland
Deutsches Patent- und Markenamt

(10) **DE 10 2006 053 433 B3** 2008.01.17

(12)

Patentschrift

(21) Aktenzeichen: **10 2006 053 433.6**
 (22) Anmeldetag: **13.11.2006**
 (43) Offenlegungstag: –
 (45) Veröffentlichungstag
 der Patenterteilung: **17.01.2008**

(51) Int Cl.⁸: **G01N 23/20 (2006.01)**
G01N 23/207 (2006.01)

Innerhalb von drei Monaten nach Veröffentlichung der Patenterteilung kann nach § 59 Patentgesetz gegen das Patent Einspruch erhoben werden. Der Einspruch ist schriftlich zu erklären und zu begründen. Innerhalb der Einspruchsfrist ist eine Einspruchsgebühr in Höhe von 200 Euro zu entrichten (§ 6 Patentkostengesetz in Verbindung mit der Anlage zu § 2 Abs. 2 Patentkostengesetz).

(66) Innere Priorität:
10 2006 050 342.2 25.10.2006

(73) Patentinhaber:
**Technische Universität Bergakademie Freiberg,
 09599 Freiberg, DE; Technische Universität
 Chemnitz, 09111 Chemnitz, DE; Universität zu
 Lübeck, 23562 Lübeck, DE**

(74) Vertreter:
Viering, Jentschura & Partner, 81675 München

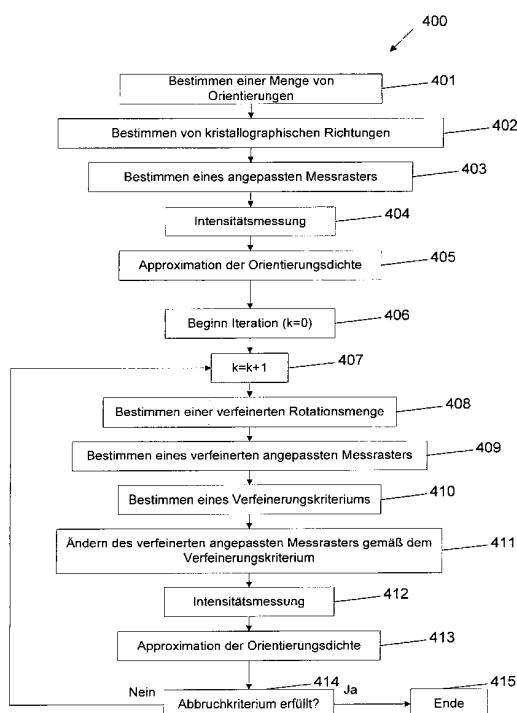
(72) Erfinder:
**Schaeben, Helmut, Prof., 66123 Saarbrücken, DE;
 Hielscher, Ralf, 09599 Freiberg, DE; Prestin,
 Jürgen, Prof., 23923 Schönberg, DE; Potts, Daniel,
 Prof., 09116 Chemnitz, DE**

(56) Für die Beurteilung der Patentfähigkeit in Betracht
 gezogene Druckschriften:
DE10 2004 006431 A1
DE10 2004 006429 A1
DE 10 085 49 3T5
WO 01/09 925 A2
**Review of Scientific Instruments, Vol. 76 (2005),
 S. 093 902 -1 bis 093 902 -7;**

(54) Bezeichnung: **Verfahren zum Steuern eines Texturgeniometers im Rahmen einer texturanalytischen Untersuchung einer Probe und Vorrichtung zum Steuern eines Texturgeniometers im Rahmen einer texturanalytischen Untersuchung einer Probe**

(57) Zusammenfassung: Die Erfindung betrifft ein Verfahren zum Steuern eines Texturgeniometers im Rahmen einer texturanalytischen Untersuchung einer Probe sowie eine Vorrichtung zum Steuern eines Texturgeniometers im Rahmen einer texturanalytischen Untersuchung einer Probe.

Bei einem Verfahren zum Steuern eines Texturgeniometers im Rahmen einer texturanalytischen Untersuchung einer Probe wird in einem ersten Messdurchgang für jede Messposition einer ersten Mehrzahl von Messpositionen innerhalb eines Messbereiches jeweils mindestens ein Intensitätswert ermittelt. Ferner wird basierend auf den ermittelten Intensitätswerten die Form mindestens eines Teilbereiches des Messbereiches ermittelt. Ferner wird eine zweite Mehrzahl von Messpositionen ermittelt, wobei in dem mindestens einen Teilbereich des Messbereiches mehr Messpositionen der zweiten Mehrzahl von Messpositionen vorhanden sind als Messpositionen der ersten Mehrzahl von Messpositionen. Weiterhin wird in einem zweiten Messdurchgang für jede Messposition der zweiten Mehrzahl von Messpositionen jeweils mindestens ein Intensitätswert ermittelt.



Beschreibung

[0001] Die Erfindung betrifft ein Verfahren zum Steuern eines Texturgoniometers im Rahmen einer texturanalytischen Untersuchung einer Probe sowie eine Vorrichtung zum Steuern eines Texturgoniometers im Rahmen einer texturanalytischen Untersuchung einer Probe.

[0002] In der Kristallographie bezeichnet der Fachbegriff "Textur" die Verteilung von kristallographischen Orientierungen in einem polykristallinen Aggregat (wie z.B. Metallen, Gesteinen, Keramiken, etc.), und der Begriff "Texturanalyse" die Analyse kristallographischer Vorzugsorientierungen. Die Texturanalyse nutzt den Effekt der Beugung (Diffraktion) von Strahlung (zum Beispiel Röntgenstrahlung, Synchrotronstrahlung, Neutronenstrahlung, Elektronenstrahlung, etc.) an einem Kristallgitter, d.h. an den kristallographischen Netzebenen des Kristallgitters, aus.

[0003] Alle Beugungsmethoden basieren auf der Bragg'schen Gleichung (Bragg-Bedingung)

$$n\lambda = 2d_{(hkl)} \sin\vartheta_{(hkl)}, \quad (1)$$

worin λ die Wellenlänge der Strahlung bezeichnet, $d_{(hkl)}$ den Abstand zweier benachbarter paralleler Netzebenen (bzw. Gitterebenen) einer durch die Miller-Indizes (hkl) gekennzeichneten Netzebenenschar bezeichnet ($h, k, l \in \mathbb{Z}$), $\vartheta_{(hkl)}$ den Einfallswinkel der Strahlung gegen eine Netzebene bezeichnet, und $n \in \mathbb{N}$. Wenn Gleichung (1) erfüllt ist, so tritt konstruktive Interferenz ein, d.h. die Intensität der gebeugten Strahlung nimmt ein Maximum an. Anschaulich bedeutet Gleichung (1), dass der Wegunterschied zwischen an zwei benachbarten Netzebenen gebeugten Wellenzügen der Strahlung ein ganzzahliges Vielfaches der Wellenlänge der Strahlung betragen muss, damit sich die Amplituden benachbarter Wellenzüge konstruktiv überlagern.

[0004] Fig. 1a veranschaulicht die Bragg'sche Bedingung (Gleichung (1)), indem beispielhaft die Beugung von Röntgenstrahlung der Wellenlänge λ an parallelen Netzebenen **101** einer durch die Miller-Indizes (hkl) gekennzeichneten Netzebenenschar eines eine Vielzahl von Atomen **102** aufweisenden Kristallgitters **100** dargestellt ist. Ein erster Röntgenstrahl **103a** der Röntgenstrahlung fällt unter einem Winkel $\vartheta_{(hkl)}$ ein, wird an einer Netzebene **101** der Netzebenenschar gebeugt und als erster gebeugter Strahl **103b** (unter demselben Winkel) zurückgeworfen. Ein zu dem ersten einfallenden Röntgenstrahl **103a** paralleler zweiter Röntgenstrahl **104a** trifft auf eine im Abstand $d_{(hkl)}$ benachbarte parallele Netzebene **101**, wird von dieser gebeugt und als zweiter gebeugter Strahl **104b** zurückgeworfen. Wie aus Fig. 1a ersichtlich, beträgt der geometrische Gangunterschied zwischen den an benachbarten Netzebenen **101** gebeugten Röntgenstrahlen $2d_{(hkl)} \sin\vartheta_{(hkl)}$. Gleichung (1) besagt nun, dass, wenn dieser Gangunterschied (rechte Seite von Gl. (1)) ein ganzzahliges Vielfaches n der Wellenlänge λ der Strahlung beträgt, konstruktive Interferenz zwischen den gebeugten Strahlen **103b** und **104b** (sowie zwischen an weiteren Netzebenen **101** gebeugten Strahlen) auftritt, und die gebeugte Intensität ein Maximum annimmt. Die gebeugte Intensität bzw. das Intensitätsmaximum kann beispielsweise mit einem Detektor nachgewiesen werden bei geeigneter Ausrichtung der Röntgenstrahlungsquelle, der Probe und des Detektors.

[0005] Fig. 1b zeigt das Kristallgitter **100** aus Fig. 1a, wobei in Fig. 1b eine durch die Miller-Indizes (h'k'l') gekennzeichnete Netzebenenschar von im Abstand $d_{(h'k'l')}$ beabstandeten parallelen Netzebenen **101'** dargestellt ist. Ferner ist ein unter dem Winkel $\vartheta_{(h'k'l')}$ einfallender Röntgenstrahl **105a** dargestellt, welcher an einer Netzebene **101'** der Netzebenenschar gebeugt und als gebeugter Strahl **105b** zurückgeworfen wird. Gleichung (1) besagt wiederum, dass, wenn der Gangunterschied $2d_{(h'k'l')} \sin\vartheta_{(h'k'l')}$ zwischen benachbarten parallelen Strahlen ein ganzzahliges Vielfaches n der Wellenlänge λ beträgt, die gebeugten Strahlen konstruktiv interferieren. Das Intensitätsmaximum kann wiederum mittels des Detektors nachgewiesen werden, wobei zu beachten ist, dass im Vergleich zu Fig. 1a das Intensitätsmaximum an einem anderen Ort auftritt.

[0006] In vielen Fällen liegen zu untersuchende Materialproben als polykristalline Aggregate bzw. Polykristalle vor, d.h. als Festkörper, die aus vielen kleinen Einkristallen (Kristalliten) bestehen, deren Größe und relative Orientierung regellos variiert. Bei Verwendung von monochromatischer Strahlung (d.h. Strahlung einer einzigen Wellenlänge λ) während einer Beugungsmessung ist die gebeugte Intensität bei konstantem Einfallswinkel $\vartheta_{(hkl)}$ ein Maß für das Volumen solcher Kristallite mit Netzebenenabstand $d_{(hkl)}$, deren Netzebenennormalen sich in einer Ebene mit einfallendem und gebeugtem Strahl, also in der Aufnahmeebene, befinden. Folglich ist die gemessene Intensität ein statistisches Maß für die volumenhafte Häufigkeit der Übereinstimmung einer bestimmten kristallographischen Richtung mit einer bestimmten makroskopischen Richtung.

[0007] In einem (Röntgen-)Diffraktometer mit Textur-Goniometer kann eine Materialprobe auf geeignete Wei-

se so gedreht werden, dass im Rahmen eines Beugungsexperiments im Prinzip alle Kristallite mit Netzebenenabstand $d_{(hkl)}$ einmal die Bragg-Bedingung (Gleichung (1)) erfüllen. Somit liefert das Experiment für eine durch die Miller-Indizes $\{hkl\}$ beschriebene Netzebenen-schar eine Intensitätsverteilung auf der Polkugel (anders ausgedrückt, in dem Raumwinkelbereich), die in der Texturanalyse $\{hkl\}$ -Polfigur genannt wird. Zusätzlich zur Drehung der Probe lässt sich durch eine Pendelbewegung der Probe die beleuchtete Fläche und damit die Anzahl der erfassten Kristallite vergrößern. Mit ortsauflösenden Detektoren ist es möglich, mehrere Polfiguren (z.B. die $\{100\}$ -Polfigur und die $\{110\}$ -Polfigur) gleichzeitig zu messen.

[0008] In früheren texturanalytischen Verfahren wurde die Drehung der Probe in einem Textur-Goniometer so von Schrittmotoren gesteuert, dass die Probe eine unveränderliche Folge von Messpositionen einnahm, z.B. gemäß eines bezüglich Polwinkel und Azimutwinkel regelmäßigen Gitters von Messpositionen mit konstanten Schrittweiten oder gemäß eines regelmäßigen Gitters entlang einer Spirale mit konstantem Winkelabstand. Später wurde die Steuerung von einem Personal Computer (PC) so übernommen, dass die Merkmale des Messvorgangs bis heute weitgehend erhalten blieben: (i) Die Liste der Messpositionen wird vor Beginn einer Messung festgelegt und dann nicht mehr verändert, insbesondere ist die Liste der Messpositionen auch unabhängig vom Fortschritt der Messung (das heißt unabhängig von den Zwischenergebnissen der Messung); (ii) Die Messpositionen bilden ein regelmäßiges Muster (Messgitter) auf der Polkugel.

[0009] Fig. 2 zeigt eine ebene Darstellung **200** eines herkömmlichen regelmäßigen Messgitters (Gitters von Messpositionen) **202**, **204**, **206**, **208**, **210**, welches zur Messung von fünf verschiedenen Polfiguren, i.e. der $\{222\}$ -Polfigur (Bezugszeichen **202**), der $\{310\}$ -Polfigur (Bezugszeichen **204**), der $\{211\}$ -Polfigur (Bezugszeichen **206**), der $\{200\}$ -Polfigur (Bezugszeichen **208**) sowie der $\{110\}$ -Polfigur (Bezugszeichen **210**), einer Probe verwendet wurde. Das Messgitter **202** bis **210** weist eine Schrittweite $\Delta\psi$ von 5 Grad im Azimutwinkel ψ ($0 \leq \psi \leq 360$ Grad) und eine Schrittweite $\Delta\theta$ von 2,5 Grad im Polwinkel θ (bis maximal 80 Grad, d.h. $0 \leq \theta \leq 80$ Grad) auf. Das Messgitter **202** bis **210** wurde für alle Kristallformen, deren sphärische Intensitätsverteilungen gemessen werden sollen, verwendet. In diesem Zusammenhang ist anzumerken, dass $\{hkl\}$ eine Netzebenen-schar bezeichnet. Die "Kristallform" $\{hkl\}$ bezeichnet wiederum alle Flächen eines Flächenkörpers gemäß der Kristallsymmetrie, d.h. alle kristallsymmetrisch äquivalenten Netzebenen-scharen.

[0010] Jeder einzelne Punkt des Messgitters **202** bis **210** stellt eine Messposition dar. Die Anzahl der Messpositionen beträgt (unter Verwendung der oben angegebenen Schrittweiten $\Delta\psi$, $\Delta\theta$ und Winkelbereiche für den Azimutwinkel ψ bzw. Polwinkel θ) für jede zu messende Polfigur $72 \times 32 = 2304$. Werden beispielsweise vier (bzw. fünf) Polfiguren für eine Probe gemessen, so beträgt die Anzahl der Messpositionen folglich insgesamt $4 \times 2304 = 9216$ (bzw. $5 \times 2304 = 11520$). Die Helligkeitskodierung einer Messposition zeigt die Größe der dort gemessenen Intensität an. Das heißt, je dunkler der jeweilige Punkt in Fig. 2 dargestellt ist, desto höher ist die für diese Messposition gemessene Intensität.

[0011] Eine polykristalline Probe besteht aus einer Vielzahl von Kristallen, welche einer bestimmten Punktgruppe $G \subseteq SO(3)$ zugeordnet sind, wobei $SO(3)$ die spezielle orthogonale Gruppe im dreidimensionalen Raum bezeichnet, d.h. die Gruppe, deren Elemente g die Drehungen (Rotationen) im dreidimensionalen Raum sind. Jedem einzelnen Kristall der Probe kann ein kanonisches (rechtshändiges, orthogonales) Kristall-Koordinatensystem K_c zugeordnet werden (kristallfestes Koordinatensystem), welches eindeutig ist bis auf Operationen der Punktgruppe G . Wird ferner ein Proben-Koordinatensystem K_s festgelegt (probenfestes Koordinatensystem), so ist die Orientierung eines Kristalls definiert als diejenige Klasse von Rotationen $g \in SO(3)/G$, welche die Basistransformation vom Proben-Koordinatensystem K_s zum Kristall-Koordinatensystem K_c realisiert, anders ausgedrückt, welche das probenfeste Koordinatensystem K_s in das kristallfeste Koordinatensystem K_c überführt, d.h. $g: K_s \rightarrow K_c$. Die Klasse von Rotationen g ist ein Element aus der Faktorgruppe von $SO(3)$ nach G (bezeichnet mit $SO(3)/G$) und ist somit eine Klasse von Rotationen, deren Elemente aus $SO(3)$ sind und sich lediglich um ein Element aus G unterscheiden. Auf das Kristall-Koordinatensystem K_c bezogene Richtungen werden im Folgenden als kristallographische Richtungen bzw. Kristall-Richtungen bezeichnet, während auf das Probenkoordinatensystem K_s bezogene Richtungen als Probenrichtungen bezeichnet werden.

[0012] Eines der vorrangigen Ziele der Texturanalyse bestand und besteht darin, aus den experimentell gemessenen Polfiguren einer Probe die so genannte Orientierungsverteilungsfunktion bzw. Orientierungsdichtefunktion (Orientation Density Function, ODF) rechnerisch zu bestimmen. Die Orientierungsverteilungsfunktion $f: SO(3)/G \rightarrow \mathbb{R}$ ist dabei definiert als die relative Häufigkeit pro Volumen von (Kristall-)Orientierungen in der Probe, $V_g/V = f(g)dg$, wobei V das totale Volumen aller Kristallite und V_g das Volumen der Kristallite mit Orientierung g bezeichnet.

[0013] Bei der Bestimmung der Orientierungsverteilungsfunktion handelt es sich um die praktische Lösung

eines schwierigen inversen Problems, das keine eindeutige Lösung besitzt. Nimmt man eine Reihenentwicklung der Orientierungsverteilungsfunktion in verallgemeinerte Harmonische vor, so lassen sich die (Entwicklungs-)Koeffizienten gerader Ordnung als Lösung eines schlecht gestellten Problems und die Koeffizienten ungerader Ordnung nur unter Berücksichtigung zusätzlicher mathematischer Modellannahmen bestimmen, wenn hinreichend viele Polfiguren gemessen worden sind. Die Berechnung der Orientierungsverteilungsfunktion erfolgt üblicherweise nach Beendigung der Messungen. Mit Hilfe der Orientierungsverteilungsfunktion lassen sich Polfiguren der gemessenen Kristallformen zurückrechnen, zusätzliche Polfiguren berechnen und vor allem isotrope oder anisotrope Materialeigenschaften berechnen.

[0014] Druckschrift [1] beschreibt ein Verfahren zum Bestimmen einer Orientierungsdichtefunktion aus Intensitätswerten.

[0015] In Druckschrift [2] ist beschrieben, bei einer Texturanalyse ein Messgitter gemäß einer Wavelet-Repräsentation einer Orientierungsdichtefunktion sukzessive zu verfeinern.

[0016] In [3] ist die Anwendung sphärischer Wavelets beschrieben, um eine mathematische Darstellung einer Funktion, die auf einer Sphäre definiert ist, zu erzeugen. Druckschrift [4] beschreibt die Anwendung von Wavelets für die mathematische Darstellung von Polfiguren.

[0017] Die Druckschriften [3], [4] behandeln die Anwendung von Wavelets basierend auf dem Dirichlet-Kern (siehe [Fig. 3a](#) und [Fig. 3b](#), welche eine graphische Darstellung eines Dirichlet-Kerns im Ortsbereich (Diagramm 240 in [Fig. 3a](#)) bzw. im Frequenzbereich (Diagramm 280 in [Fig. 3b](#)) zeigen), mit denen lediglich eine geringe Ortsauflösung erreicht werden kann.

[0018] In [6] und [7] sind ein Verfahren bzw. eine Einrichtung zum Bestimmen des lokalen Kristallgitterzustandes von Stoffen aus dem örtlichen Verlauf der Dichte der Rückstreuелеktronen im Gebiet von Rückstreuелеktronen-Beugungsmustern, wobei zunächst bei einer niedrigen Ortsauflösung der örtliche Verlauf der Rückstreuелеktronen-Dichte in einem vorgegebenen Raumwinkel-Bereich ermittelt wird, der bei dieser Ortsauflösung ermittelte Verlauf der Rückstreuелеktronen-Dichte dazu dient, die Position eines Teilbereiches aus dem Raumwinkel-Bereich zu bestimmen, der Beugungsbänder/Kikuchi-Linien enthält, und der ermittelte Teilbereich ein Messgebiet definiert, in dem nachfolgend der örtliche Verlauf der Dichte der Rückstreuелеktronen-Dichte mit einer zweiten, sehr hohen Ortsauflösung ermittelt wird.

[0019] In [8] ist ein diffraktometrisches Verfahren beschrieben, bei dem zunächst mit einer niedrigen Auflösung und anschließend mit einer verfeinerten Auflösung gemessen wird.

[0020] In [9] sind eine Vorrichtung und ein Verfahren offenbart zur Texturanalyse von Halbleiter-Wafern unter Verwendung eines Flächendetektors und einer kollimierten Röntgenstrahlungsquelle, wobei der Flächendetektor und die Röntgenstrahlungsquelle in einer spezifischen festgelegten räumlichen Anordnung zueinander stehen, welche von den Eigenschaften der zu untersuchenden Probe abhängt.

[0021] In [10] ist ein Polmessverfahren offenbart zum Analysieren von polykristallinen Proben unter Benutzung eines Röntgenstrahldiffraktometers, wobei mittels des Verfahrens eine Polmessung von dicken Proben oder Proben, die auf einem Substrat gebildet sind, bei niedrigen Neigungswinkeln unter Benutzung eines Reflexionsverfahrens ermöglicht wird.

[0022] Der Erfindung liegt das Problem zugrunde, die zum Ermitteln einer Polfigur erforderliche Messzeit zu reduzieren im Vergleich mit herkömmlichen Verfahren.

[0023] Das Problem wird gelöst durch ein Verfahren zum Steuern eines Texturgoniometers im Rahmen einer texturanalytischen Untersuchung einer Probe sowie eine Vorrichtung zum Steuern eines Texturgoniometers im Rahmen einer texturanalytischen Untersuchung einer Probe mit den Merkmalen der Patentansprüche 1 und 20.

[0024] Beispielhafte Ausgestaltungen ergeben sich aus den Unteransprüchen. Die Ausgestaltungen, welche im Zusammenhang mit dem Verfahren beschrieben sind, gelten sinngemäß auch für die Vorrichtung, und umgekehrt.

[0025] Bei dem Verfahren zum Steuern eines Texturgoniometers im Rahmen einer texturanalytischen Untersuchung einer Probe wird in einem ersten Messdurchgang für jede Messposition einer ersten Mehrzahl von

Messpositionen innerhalb eines Messbereiches jeweils mindestens ein Intensitätswert ermittelt. Ferner wird basierend auf den ermittelten Intensitätswerten die Form mindestens eines Teilbereiches des Messbereiches ermittelt. Weiterhin wird eine zweite Mehrzahl von Messpositionen ermittelt, wobei in dem mindestens einen Teilbereich des Messbereiches mehr Messpositionen der zweiten Mehrzahl von Messpositionen vorhanden sind als Messpositionen der ersten Mehrzahl von Messpositionen. Ferner wird in einem zweiten Messdurchgang für jede Messposition der zweiten Mehrzahl von Messpositionen jeweils mindestens ein Intensitätswert ermittelt.

[0026] Es wird ferner eine Vorrichtung bereitgestellt zum Steuern eines Texturgoniometers im Rahmen einer texturanalytischen Untersuchung einer Probe. Die Vorrichtung weist eine erste Ermittlungseinrichtung und eine zweite Ermittlungseinrichtung auf. Die erste Ermittlungseinrichtung ist eingerichtet zum Ermitteln von Intensitätswerten für mindestens eine Messposition innerhalb eines Messbereiches. Die zweite Ermittlungseinrichtung ist so eingerichtet, dass sie basierend auf von der ersten Ermittlungseinrichtung in einem ersten Messdurchgang für eine erste Mehrzahl von Messpositionen ermittelten Intensitätswerten die Form mindestens eines Teilbereiches des Messbereiches ermittelt. Die zweite Ermittlungseinrichtung ist ferner so eingerichtet, dass sie eine zweite Mehrzahl von Messpositionen ermittelt, wobei in dem mindestens einen Teilbereich des Messbereiches mehr Messpositionen der zweiten Mehrzahl von Messpositionen vorhanden sind als Messpositionen der ersten Mehrzahl von Messpositionen, und die erste Ermittlungseinrichtung ist so eingerichtet, dass sie in einem zweiten Messdurchgang für jede Messposition der zweiten Mehrzahl von Messpositionen jeweils mindestens einen Intensitätswert ermittelt.

[0027] Eine der Erfindung zu Grunde liegende Idee kann darin gesehen werden, dass die Form eines Teilbereichs des Messbereichs ermittelt wird. Auf diese Weise kann die Messgenauigkeit genau für einen interessierenden Teilbereich beliebiger Form erhöht werden und es wird nicht der interessierende Teilbereich in einen größeren Teilbereich eingebettet, für den die Genauigkeit erhöht wird, wie es beispielsweise bei einer Verfeinerung entsprechend einer Wavelet-Repräsentation erforderlich wäre, da für Wavelets eine gleichmäßige Verfeinerung des Messgitters erforderlich ist. In den Druckschriften [3], [4] wurden Wavelets basierend auf dem Dirichlet-Kern (vgl. [Fig. 3a](#) und [Fig. 3b](#)) behandelt, mit denen jedoch, wie oben bereits erwähnt, lediglich eine geringe Ortsauflösung erreicht werden kann.

[0028] Gemäß einem Ausführungsbeispiel werden deshalb gut ortsauflösende Basisfunktionen mit gewissen Glattheitseigenschaften im Frequenzbereich wie z.B. radiale Basisfunktionen vom Gauss-Weierstrass-Typ, Abel-Poisson-Typ oder de la Vallée Poussin-Typ verwendet (siehe [Fig. 4a](#) und [Fig. 4b](#), welche eine graphische Darstellung einer Basisfunktion vom de la Vallée Poussin-Typ im Ortsbereich (Diagramm 540 in [Fig. 4a](#)) bzw. im Frequenzbereich (Diagramm 580 in [Fig. 4b](#)) zeigen).

[0029] Im Folgenden bezeichnet der Begriff Ansatzfunktionen ausschließlich solche Basisfunktionen, die im Ortsbereich gut auflösend und im Frequenzbereich glatt abklingend sind (vgl. [5]), oder ihre Approximationen. Diese Ansatzfunktionen ermöglichen eine frei wählbare Form des Teilbereichs.

[0030] Gemäß einer Ausgestaltung ist die Probe als kristalline Probe ausgebildet, und basierend auf den in dem ersten Messdurchgang ermittelten Intensitätswerten wird eine Orientierungsverteilungsfunktion als Linearkombination von Ansatzfunktionen ermittelt. Die Orientierungsverteilungsfunktion spezifiziert die Häufigkeit von in der Probe auftretenden Kristallorientierungen. Ferner wird gemäß dieser Ausgestaltung basierend auf der Orientierungsverteilungsfunktion die Form des mindestens einen Teilbereiches des Messbereiches ermittelt.

[0031] Gemäß einer Ausgestaltung wird in dem ersten Messdurchgang für jede Messposition der ersten Mehrzahl von Messpositionen jeweils ein Intensitätswert mittels einer diffraktometrischen Einzelmessung ermittelt. Mit anderen Worten wird für jede Messposition jeweils eine Beugungsmessung durchgeführt, und die Intensität der gebeugten Strahlung als Messwert bzw. Intensitätswert für die jeweilige Messposition aufgenommen und zum Beispiel gespeichert.

[0032] Gemäß einer anderen Ausgestaltung wird in dem zweiten Messdurchgang für mindestens eine Messposition der Mehrzahl von zweiten Messpositionen ein Intensitätswert mittels einer diffraktometrischen Einzelmessung ermittelt.

[0033] Gemäß einer anderen Ausgestaltung wird nur für diejenigen Messpositionen der zweiten Mehrzahl von Messpositionen ein Intensitätswert mittels einer diffraktometrischen Einzelmessung ermittelt, für welche noch kein Intensitätswert in dem ersten Messdurchgang ermittelt wurde. Mit anderen Worten wird, falls die zweite

Mehrzahl von Messpositionen eine oder mehrere Messpositionen der ersten Mehrzahl enthält, in dem zweiten Messdurchgang für diese Messpositionen keine Beugungsmessung durchgeführt. Anschaulich ausgedrückt wird für diejenigen Messpositionen, für welche bereits in dem ersten Messdurchgang ein Intensitätswert mittels einer Beugungsmessung ermittelt wurde, nicht noch einmal ein Messwert aufgenommen.

[0034] Gemäß einer anderen Ausgestaltung wird für diejenigen Messpositionen der zweiten Mehrzahl von Messpositionen, für welche ein Intensitätswert in dem ersten Messdurchgang ermittelt wurde, der in dem ersten Messdurchgang ermittelte Intensitätswert verwendet. Zum Beispiel kann ein in dem ersten Messdurchgang gemessener Intensitätswert gespeichert sein, und der gespeicherte Intensitätswert kann erneut verwendet werden, so dass in dem zweiten Messdurchgang für die entsprechende Messposition nicht noch einmal ein Messwert mittels einer Beugungsmessung aufgenommen werden muss.

[0035] Gemäß einer anderen Ausgestaltung wird basierend auf den in dem ersten Messdurchgang ermittelten Intensitätswerten die Größe des mindestens einen Teilbereiches des Messbereiches ermittelt.

[0036] Gemäß einer anderen Ausgestaltung erfolgt die diffraktometrische Einzelmessung unter Verwendung eines Diffraktometers, zum Beispiel eines Röntgen-Diffraktometers.

[0037] Gemäß einer anderen Ausgestaltung erfolgt die diffraktometrische Einzelmessung unter Verwendung eines Flächendetektors.

[0038] Gemäß einer anderen Ausgestaltung werden die Messpositionen mittels Drehens der Probe angenommen.

[0039] Gemäß einer anderen Ausgestaltung erfolgt das Drehen der Probe bezüglich des Flächendetektors.

[0040] Gemäß einer anderen Ausgestaltung erfolgt das Drehen der Probe unter Verwendung eines Goniometers.

[0041] Gemäß einer anderen Ausgestaltung werden die Messpositionen der ersten und/oder der zweiten Mehrzahl von Messpositionen an eine Steuereinrichtung übermittelt zum Steuern des Goniometers.

[0042] Gemäß einer anderen Ausgestaltung werden bei der Ermittlung der Orientierungsverteilungsfunktion Ansatzfunktionen, z.B. radiale Basisfunktionen vom Gauss-Weierstrass-Typ, Abel-Poisson-Typ oder de la Vallée Poussin-Typ verwendet. Anders ausgedrückt erfolgt die Entwicklung der Orientierungsverteilungsfunktion nach Ansatzfunktionen, z.B. unter Verwendung von Gauss-Weierstrass-Kernen, Abel-Poisson-Kernen oder de la Vallée Poussin-Kernen. Alternativ können andere geeignete Ansatzfunktionen verwendet werden.

[0043] Die in der Linearkombination auftretenden Entwicklungskoeffizienten können durch die Lösung eines Optimierungsproblems bestimmt werden. Das Optimierungsproblem besteht in der Minimierung der gewichteten Summe des Fehlers zwischen gemessenen und den gemäß den Entwicklungskoeffizienten modellierten Intensitäten und eines geeigneten Regularisierungsterms.

[0044] Zur numerischen Lösung können schnelle Methoden zur Matrix-Vektor-Multiplikation mit iterativen Lösern gekoppelt werden.

[0045] Gemäß einer Ausgestaltung werden Matrix-Vektor-Multiplikationen zum Beispiel unter Verwendung von schnellen Fourier-Transformationen (Fast Fourier Transforms) realisiert. Andere Möglichkeiten zur Multiplikation sind schnelle Multipol-Methoden oder Multigrid-Methoden.

[0046] Gemäß einer Ausgestaltung wird als Löser der "modified steepest descent" Algorithmus benutzt. Es kann aber auch jeder andere iterative Löser für nicht negativ beschränkte Optimierungsprobleme genutzt werden, wie z.B. Richardson-Luci, GPRN, GPRNCG.

[0047] Das entsprechende Gleichungssystem kann iterativ schnell gelöst werden, gemäß einer Ausgestaltung der Erfindung zum Beispiel unter Verwendung von schnellen Fourier-Transformationen. Mit anderen Worten können die Entwicklungskoeffizienten der Linearkombination unter Verwendung von schnellen Fourier-Transformationen ermittelt werden. Andere Möglichkeiten zur schnellen Lösung sind schnelle Multipol-Methoden oder Multigrid-Methoden.

[0048] Gemäß einer anderen Ausgestaltung wird basierend auf den im ersten Messdurchgang und/oder zweiten Messdurchgang ermittelten Intensitätswerten die Form mindestens eines zweiten Teilbereiches des Messbereiches ermittelt. Gemäß dieser Ausgestaltung wird weiterhin eine dritte Mehrzahl von Messpositionen ermittelt, wobei in dem mindestens einen zweiten Teilbereich des Messbereiches mehr Messpositionen der dritten Mehrzahl von Messpositionen vorhanden sind als Messpositionen der ersten Mehrzahl von Messpositionen und/oder der zweiten Mehrzahl von Messpositionen. Weiterhin wird gemäß dieser Ausgestaltung in einem dritten Messdurchgang für jede Messposition der dritten Mehrzahl von Messpositionen jeweils mindestens ein Intensitätswert ermittelt.

[0049] Gemäß einer anderen Ausgestaltung wird basierend auf den im ersten Messdurchgang und/oder zweiten Messdurchgang ermittelten Intensitätswerten und/oder basierend auf der Orientierungsverteilungsfunktion eine zweite Orientierungsverteilungsfunktion als Linearkombination von Ansatzfunktionen ermittelt. Gemäß dieser Ausgestaltung wird ferner basierend auf der zweiten Orientierungsverteilungsfunktion die Form des mindestens einen zweiten Teilbereiches des Messbereiches ermittelt.

[0050] Gemäß einer anderen Ausgestaltung wird das Ermitteln von Intensitätswerten iterativ fortgesetzt, derart, dass basierend auf den im ersten Messdurchgang bis n -ten ($n \in \mathbb{N}$, $n \geq 3$) Messdurchgang ermittelten Intensitätswerten und/oder basierend auf der $(n - 1)$ -ten Orientierungsverteilungsfunktion eine n -te Orientierungsverteilungsfunktion als Linearkombination von Ansatzfunktionen (z.B. radialen Basisfunktionen) ermittelt wird. Gemäß dieser Ausgestaltung wird ferner basierend auf der n -ten Orientierungsverteilungsfunktion die Form mindestens eines n -ten Teilbereiches des Messbereiches ermittelt. Weiterhin wird gemäß dieser Ausgestaltung eine $(n + 1)$ -te Mehrzahl von Messpositionen ermittelt, wobei in dem mindestens einen n -ten Teilbereich des Messbereiches mehr Messpositionen der $(n + 1)$ -ten Mehrzahl von Messpositionen vorhanden sind als Messpositionen von einer oder mehrerer der ersten Mehrzahl bis n -ten Mehrzahl von Messpositionen. Ferner wird gemäß dieser Ausgestaltung in einem $(n + 1)$ -ten Messdurchgang für jede Messposition der $(n + 1)$ -ten Mehrzahl von Messpositionen jeweils mindestens ein Intensitätswert ermittelt.

[0051] Gemäß einer Ausgestaltung weist die erste Ermittlungseinrichtung ein Diffraktometer auf, zum Beispiel ein Röntgendiffraktometer. Die erste Ermittlungseinrichtung kann als Röntgendiffraktometer ausgebildet sein und beispielsweise eine Röntgenstrahlungsquelle (z.B. Röntgenröhre), eine Goniometer-Einrichtung (Goniometer) und einen Detektor aufweisen.

[0052] Als Detektor kann ein Detektor verwendet werden, der die Intensität an einer bestimmten Stelle misst, d.h. die Intensität der Strahlung misst, die aus einer bestimmten Richtung der Probe ausgestrahlt wird. Um die Intensität gemäß einer bestimmten Richtung zu messen, wird die Position des Detektors beispielsweise geeignet gewählt. Alternativ kann auch ein Flächendetektor eingesetzt werden, der in der Lage ist, für alle Richtungen (oder zumindest einen großen Teil von Richtungen, beispielsweise für alle Richtungen entsprechend einer Halbkugel um die Probe) die Intensität der Strahlung für diese Richtung der Strahlung von der Probe aus zu messen.

[0053] Die Erfindung beschreibt ein Verfahren zur adaptiven Steuerung eines Texturgoniometers im Rahmen einer diffraktometrischen Messung bzw. einer texturanalytischen Messung. Die adaptive Steuerung unterscheidet sich beispielsweise durch zwei Merkmale von herkömmlichen Vorgehensweisen:

(i) Die Liste der Messpositionen ist zu Beginn der Messungen unvollständig. Beispielsweise werden zunächst nur für einige wenige, beispielsweise gemäß einem groben Gitter verteilte, Messpositionen Intensitätswerte mittels Messungen ermittelt.

(ii) Die Liste der Messpositionen hängt sowohl vom Fortschritt der Messungen selbst als auch von der gleichzeitigen Analyse der Messungen in Form einer Orientierungsverteilungsfunktion bezüglich des aktuellen Datendargebots gemessener Intensitäten ab. Nach jedem Messdurchgang können die in dem Messdurchgang ermittelten Intensitätswerte dazu verwendet werden, eine (weitere) Näherung der Orientierungsverteilungsfunktion zu berechnen. Aus der Orientierungsverteilungsfunktion können wiederum die Intensitäten zurückgerechnet werden, und es können zusätzliche Messpositionen bestimmt werden, für die Intensitätswerte in einem folgenden Messdurchgang gemessen werden sollen. Anschaulich kann die Messauflösung in Teilen des Messbereiches iterativ verfeinert werden, indem in einem oder mehreren Teilbereichen des Messbereiches zusätzliche Messungen vorgenommen werden. Mittels der jeweiligen Näherung der Orientierungsverteilungsfunktion kann dabei anschaulich entschieden werden, welche Teilbereiche des Messbereiches "interessant" sind und daher mit feinerer Auflösung vermessen werden sollten.

[0054] Anschaulich beeinflussen sich somit Messung und Auswertung gegenseitig. Diese adaptive Steuerung ist zum Beispiel für die Erfassung, mathematische Darstellung und Analyse extrem scharfer Texturen (z.B.

Peaks mit einer Breite kleiner als 5 Grad) in optimierter Messzeit besonders geeignet.

[0055] Gemäß einer Ausgestaltung werden in einem ersten Messdurchgang (Messturnus) Intensitäten für Messpositionen gemäß eines groben, näherungsweise gleichmäßigen sphärischen Gitters gemessen. Diese Intensitäten werden während der Messungen zu einer vorläufigen Orientierungsverteilungsfunktion (ODF) invertiert. Grundlagen der numerischen Inversion sind Approximation und Fourier Analyse auf S^2 und $SO(3)$. Auf der Grundlage einer vorläufigen Analyse der Messungen und ihrer entsprechenden Orientierungsverteilungsfunktion können Gebiete der Polkugel festgelegt werden, innerhalb derer das ursprüngliche grobe Messgitter lokal verfeinert wird. Fällt eine Messposition des lokal verfeinerten Messgitters mit einer Messposition des größeren Messgitters zusammen, für die die Intensität zuvor schon gemessen wurde, wird diese Messposition nicht für den nächsten Messturnus an das Goniometer übergeben. Mit anderen Worten werden nur die neu hinzugekommenen Messpositionen übergeben. Das Goniometer kann dann die neuen zusätzlichen Messpositionen anfahren, d.h. für diese Messpositionen Intensitätsmessungen durchführen, zum Beispiel Computer-gesteuert. Die Sequenz der Messpositionen kann in Abhängigkeit von der Bauart des Goniometers bezüglich des Ablaufs der Probenbewegung optimiert werden. Mit anderen Worten kann die Reihenfolge, in der das Goniometer die einzelnen Messpositionen anfährt, so festgelegt werden, dass beispielsweise die Gesamtzeitdauer aller Probenbewegungen zusammengerechnet minimal oder annähernd minimal wird.

[0056] Die zu den Messpositionen des lokal verfeinerten Messgitters gehörenden und in einem zweiten Messturnus zusätzlich gemessenen Intensitäten gehen in die Berechnung der nächsten iterativen Approximation der Orientierungsverteilungsfunktion ein. Dabei kann die zuvor berechnete Orientierungsverteilungsfunktion als Start für die nächste Iteration benutzt werden. Die neuerliche Interpretation der weiter approximierten Orientierungsverteilungsfunktion führt zu einer Revision der gerade vorgenommenen Verfeinerung oder zu einer weiteren lokalen Verfeinerung entsprechender Teilbereiche. Das heißt, basierend auf der Orientierungsverteilungsfunktion werden wiederum zusätzliche Messpositionen ermittelt, für die in einem dritten Messdurchgang mittels Beugungsmessungen Intensitätswerte ermittelt (d.h. gemessen) werden.

[0057] Die in dem dritten Messturnus zusätzlich gemessenen Intensitäten gehen wiederum in die nächste Berechnung ein und können zu einer Auffrischung der Verfeinerung oder einer weiteren Verfeinerung entsprechender Teilbereiche benutzt werden.

[0058] Die Folge von Messungen und Auswertungen kann iterativ fortgesetzt werden und kann beispielsweise abgebrochen werden, falls ein vorgegbares Abbruchkriterium erfüllt ist, zum Beispiel falls

- die Kriterien zur Verfeinerung erschöpft sind;
- kein wesentlicher Informationsgewinn mehr mit Messungen an weiter lokal verfeinerten Gittern eintritt; oder
- die technischen Grenzen des Texturgoniometers erreicht werden.

[0059] Die Gebiete (Teilbereiche des Messbereiches), für die das Messgitter verfeinert wird, können nach verschiedenen Kriterien festgelegt werden. Zum Beispiel kann eine Verfeinerung eines Gebietes erfolgen, falls in diesem Gebiet

- die aus der Orientierungsverteilungsfunktion zurückgerechneten Intensitäten größer sind als eine vorgebbare (benutzerdefinierte) Schranke; und/oder
- die numerische Näherung des Gradienten der zurückgerechneten Intensitätsverteilung größer ist als eine benutzerdefinierte untere Schranke; und/oder
- die numerische Näherung der Laplace-Form der zurückgerechneten Intensitätsverteilung größer ist als eine benutzerdefinierte untere Schranke; und/oder
- die Differenz zwischen gemessenen und zurückgerechneten Intensitäten größer ist als eine benutzerdefinierte untere Schranke,
- etc.

[0060] Die Werte für die oben genannten unteren Schranken können konstant oder vom Turnus des Messvorgangs abhängig sein. Die oben genannten Kriterien können von einem Nutzer alternativ ausgewählt oder gewichtet bzw. hierarchisch kombiniert werden.

[0061] Ein Vorteil des Verfahrens und der Vorrichtung kann darin gesehen werden, dass eine effiziente Messstrategie bereitgestellt wird durch die Verwendung adaptiver Messgitter. Im Einzelnen bestehen die Vorteile adaptiver Messgitter zunächst in einer optimierten Nutzung der Messzeit oder in einer Verkürzung der Messzeit bei optimiertem Informationszugewinn. Ein weiterer Vorteil besteht darin, dass feste Messgitter durch variable, an die zu messende Textur angepasste Messgitter ersetzt werden. Ein weiterer Vorteil der Erfindung besteht

darin, dass scharfe Texturen ("technische Einkristalle") in optimierter Messzeit erfasst und überhaupt erst mathematisch dargestellt und analysiert werden können.

[0062] Ein anderer Vorteil der Erfindung kann darin gesehen werden, dass die adaptive Steuerung besonders zur Erfassung, Darstellung und Analyse extrem scharfer Texturen geeignet ist.

[0063] Beispielhafte Ausgestaltungen der Erfindung sind in den Figuren gezeigt und werden im Folgenden näher erläutert. Die in den Figuren gezeigten Darstellungen sind schematisch und daher nicht notwendigerweise maßstabsgetreu gezeichnet. In den Figuren sind gleiche oder ähnliche Elemente, soweit sinnvoll, mit gleichen oder identischen Bezugszeichen versehen.

[0064] Es zeigen

[0065] Fig. 1a und Fig. 1b schematische Darstellungen der Beugung von Röntgenstrahlung an einem Kristallgitter;

[0066] Fig. 2 an einer Probe gemessene Beugungsintensitäten unter Verwendung eines herkömmlichen Messgitters;

[0067] Fig. 3a und Fig. 3b graphische Darstellungen eines Dirichlet-Kerns im Ortsbereich bzw. im Frequenzbereich.

[0068] Fig. 4a bis Fig. 4e an einer Probe mittels eines Verfahrens zum Ermitteln von Intensitätswerten zu verschiedenen Zeitpunkten ermittelte Beugungsintensitäten gemäß einem Ausführungsbeispiel der Erfindung;

[0069] Fig. 5 zeigt ein Ablaufdiagramm gemäß einem Ausführungsbeispiel der Erfindung.

[0070] Fig. 6a und Fig. 6b graphische Darstellungen einer Ansatzfunktion vom de la Vallée Poussin-Typ im Ortsbereich bzw. im Frequenzbereich.

[0071] Im Folgenden wird unter Bezug auf die Fig. 4a bis Fig. 4e ein Verfahren zum Steuern eines Texturgoniometers gemäß einem Ausführungsbeispiel näher erläutert. Das Verfahren wird dabei im Zusammenhang mit der adaptiven Steuerung des Texturgoniometers während der Ermittlung von Polfiguren für verschiedene Kristallformen (in dem gezeigten Beispiel für die vier verschiedenen Kristallformen {110}, {200}, {211} und {321}) im Rahmen einer texturanalytischen Untersuchung beschrieben, wobei insbesondere auf das geometrische Element der adaptiven Verfeinerung der verwendeten Messgitter eingegangen wird.

[0072] Fig. 4a zeigt eine ebene Darstellung **300** eines groben, näherungsweise sphärisch gleichmäßigen Messgitters **302**, **304**, **306**, **308** mit 54 Messpositionen (jede Messposition wird durch einen Punkt **303** des jeweiligen Messgitters **302**, **304**, **306**, **308** dargestellt) für einen ersten Messturnus aller zu messenden Polfiguren. Diese Messpositionen bilden eine erste Mehrzahl von Messpositionen.

[0073] In dem gezeigten Beispiel werden vier verschiedene Polfiguren ermittelt, i.e. die {110}-Polfigur (Messgitter **302**), die {200}-Polfigur (Messgitter **304**), die {211}-Polfigur (Messgitter **306**) und die {321}-Polfigur. Der Winkelabstand zwischen zwei benachbarten Messpositionen **303** des Messgitters beträgt annähernd 20 Grad. Für alle vier zu messenden Polfiguren ergeben sich zusammen $4 \times 54 = 216$ Messpositionen. Die Helligkeitskodierung einer Messposition **303** zeigt in Fig. 4a sowie in den Fig. 4b bis Fig. 4e wiederum (analog zu Fig. 2) die Größe der an dieser Messposition **303** anschließend gemessenen Intensität an.

[0074] Aus den ermittelten Polfiguren (bzw. den ermittelten Intensitätsverteilungen) für die vier Kristallformen {110}, {200}, {211}, {321} können sukzessive genäherte Orientierungsverteilungsfunktion (ODE), mit anderen Worten Approximationen der wahren, unbekanntes ODE, ermittelt bzw. berechnet werden, zum Beispiel auf die oben beschriebene Art und Weise. Aus den ermittelten (genäherten) Orientierungsverteilungsfunktionen können dann die für die jeweilige Kristallform zu erwartenden Intensitätsverteilungen auf der Polkugel zurückgerechnet werden. Die zurückgerechnete Intensitätsverteilung ist dabei im Unterschied zu der durch Messung an diskreten Messpositionen experimentell ermittelten Intensitätsverteilung kontinuierlich. Das heißt, die mittels der genäherten ODE berechnete Intensitätsverteilung reproduziert nicht nur die an den Messpositionen **303** gemessenen Intensitätswerte, es können auch für solche Orte der Polkugel, für die (noch) kein Messwert vorliegt, das heißt für den im ersten Messturnus keine Intensitätsmessung durchgeführt wurde, die zu erwartenden Intensitätswerte angegeben werden.

[0075] Darauf basierend können ein oder mehrere Teilbereiche mit wählbarer Form des Messbereiches ermittelt werden, in dem (denen) das Messgitter lokal verfeinert wird (durch Auswahl zusätzlicher Messpositionen), und mittels anschließender zusätzlicher Messungen an den neuen Messpositionen kann eine genauere (verfeinerte) Intensitätsverteilung bzw. Polfigur experimentell ermittelt werden. Somit wird eine zweite Mehrzahl von Messpositionen basierend auf den im ersten Messdurchgang ermittelten Intensitätsmessungen ermittelt und für die zweite Mehrzahl von Messpositionen werden in einem zweiten Messdurchgang Intensitätswerte gemessen. Ist eine Messposition der zweiten Mehrzahl von Messpositionen auch eine Messposition der ersten Mehrzahl von Messpositionen, so kann der im ersten Messdurchgang ermittelte Intensitätswert wiederverwendet werden und muss nicht notwendigerweise neu gemessen werden.

[0076] Gemäß dem gezeigten Ausführungsbeispiel der Erfindung wurden lokale Verfeinerungen eines Messgitters jeweils in solchen Gebieten der Polkugel vorgenommen, für die die zurückgerechneten Intensitäten größer als eine benutzerdefinierbare (d.h. vorgebbare) untere Schranke, deren Wert in dem gezeigten Ausführungsbeispiel als 1 gewählt wurde, waren.

[0077] Fig. 4b zeigt eine ebene Darstellung **320** von kristallformspezifischen, einfach verfeinerten Messgittern **322, 324, 326, 328** für einen zweiten Messturnus der texturanalytischen Messung. Der Winkelabstand zwischen zwei benachbarten Messpositionen **323** des verfeinerten Gitters beträgt annähernd 10 Grad. Die Anzahl der Messpositionen **323** hängt in dem Sinne von der Kristallform $\{hkl\}$ ab, dass sie mit zunehmender kristallographischer Multiplizität zunimmt und beispielsweise zwischen 91, 100, 123, 129 variiert für $\{hkl\} = \{200\}, \{110\}, \{211\}, \{321\}$. Für alle vier zu messenden Polfiguren ergeben sich somit insgesamt $91 + 100 + 123 + 129 = 443$ Messpositionen, welche als Teilmenge die 216 Messpositionen des ersten Messturnus enthalten. Von diesen 443 Messpositionen werden gemäß dem gezeigten Ausführungsbeispiel nur die zu den Messpositionen des ersten Messturnus neu hinzugekommenen Messpositionen an das Goniometer übergeben. Mit anderen Worten werden die 216 Messpositionen, für die bereits im ersten Messturnus Intensitätswerte ermittelt (d.h. gemessen) wurden, nicht an das Goniometer übergeben. Somit werden insgesamt $443 - 216 = 227$ (neue) Messpositionen an das Goniometer für den zweiten Messturnus übergeben. Auf diese Weise wird vermieden, dass für ein und dieselbe Messposition die Intensität mehrfach gemessen wird, und es kann somit die Gesamt-Messzeit deutlich verringert werden.

[0078] Fig. 4c zeigt eine ebene Darstellung **340** von kristallformspezifischen, zweifach verfeinerten Messgittern **342, 344, 346, 348** für einen dritten Messturnus der texturanalytischen Messung.

[0079] Der Winkelabstand zweier Messpositionen **343** des verfeinerten Gitters beträgt annähernd 5 Grad. Die Anzahl der Messpositionen **343** hängt in dem Sinne von der Kristallform $\{hkl\}$ ab, dass sie beispielsweise zwischen 245, 343, 497, 536 variiert für $\{hkl\} = \{200\}, \{110\}, \{211\}, \{321\}$. Für alle vier zu messenden Polfiguren ergeben sich somit insgesamt 1621 Messpositionen, welche als Teilmenge die 443 Messpositionen des zweiten Messturnus enthalten.

[0080] Analog zum zweiten Messturnus werden $1621 - 443 = 1178$ (neue) Messpositionen an das Goniometer für den dritten Messturnus übergeben.

[0081] Fig. 4d zeigt eine ebene Darstellung **360** von kristallformspezifischen, dreifach verfeinerten Messgittern **362, 364, 366, 368** für einen vierten Messturnus der texturanalytischen Messung.

[0082] Der Winkelabstand zweier Messpositionen **363** des verfeinerten Gitters beträgt annähernd 2,5 Grad. Die Anzahl der Messpositionen **363** hängt in dem Sinne von der Kristallform $\{hkl\}$ ab, dass sie beispielsweise zwischen 837, 1121, 1675, 1878 variiert für $\{hkl\} = \{200\}, \{110\}, \{211\}, \{321\}$. Für alle vier zu messenden Polfiguren ergeben sich somit insgesamt 5511 Messpositionen, welche als Teilmenge die 1621 Messpositionen des zweiten Messturnus enthalten.

[0083] Analog zum zweiten Messturnus werden $5511 - 1621 = 3890$ (neue) Messpositionen an das Goniometer für den vierten Messturnus übergeben.

[0084] Fig. 4e zeigt eine ebene Darstellung **380** von kristallformspezifischen, vierfach verfeinerten Messgittern **382, 384, 386, 388** für einen fünften Messturnus der texturanalytischen Messung.

[0085] Der Winkelabstand zweier Messpositionen **383** des verfeinerten Gitters beträgt annähernd 1,25 Grad. Die Anzahl der Messpositionen **383** hängt in dem Sinne von der Kristallform $\{hkl\}$ ab, dass sie beispielsweise zwischen 3850, 3943, 5155, 6243 variiert für $\{hkl\} = \{200\}, \{110\}, \{211\}, \{321\}$. Für alle vier zu messenden Pol-

figuren ergeben sich somit insgesamt 19191 Messpositionen, welche als Teilmenge die 5511 Messpositionen des dritten Messturnus enthalten.

[0086] Analog zum zweiten Messturnus werden $19191 - 5511 = 13680$ (neue) Messpositionen an das Goniometer für den fünften Messturnus übergeben.

[0087] Die gesamte Messzeit ist näherungsweise proportional zur Anzahl aller Messpositionen. Die Zeiterparnis bzw. der Informationszugewinn ergibt sich damit aus der Differenz der Gesamtanzahl der Messpositionen verschiedener Messstrategien und Goniometersteuerungen. In diesem Beispiel sind es $4 \times 2304 = 9216$ Messpositionen gemäß des herkömmlichen $5,0 \times 2,5$ Grad-Gitters gegenüber 5511 Messpositionen in der vorletzten ($2,5$ Grad) bzw. 19191 Messpositionen in der letzten ($1,25$ Grad) instrumententechnisch sinnvollen Verfeinerung des Gitters gemäß dem gezeigten Ausführungsbeispiel der Erfindung. Zum Vergleich sei erwähnt, dass ein regelmäßiges $1,25 \times 1,25$ Grad-Gitter aus 18432 Punkten, und ein annähernd gleichmäßiges, annähernd äquidistantes $1,25$ Grad-Gitter aus 13000 Punkten besteht. Die Rechenzeit zwischen je zwei Messturni ist relativ klein.

Messgitter	# ₁	# ₄	$\Delta\#_4$	Dauer	kum. Dauer
regelmäßig 5×5	1152	4608		12,80 h	
regelmäßig $5 \times 2,5$	2304	9216		25,60 h	
regelmäßig $2,5 \times 2,5$	4608	18432		51,20 h	
regelmäßig $1,25 \times 1,25$	18432	73728		204,80 h	
gleichmäßig $1,25$	13000	52000		144,44 h	
gleichmäßig 20	54	216		0,60 h	
einfach verfeinert 10		443	227	0,63 h	1,23 h
zweifach verfeinert 5,0		1621	1178	3,27 h	4,50 h
dreifach verfeinert 2,5		5511	3890	10,80 h	15,30 h
vierfach verfeinert 1,25		19191	13680	38,00 h	53,30 h

[0088] Die Tabelle fasst die Anzahl der Messpositionen für eine bzw. vier Polfiguren und die reine Messzeit ohne Berücksichtigung der Zeit für die Bewegung zusammen.

[0089] Es ist anzumerken, dass die im Zusammenhang mit [Fig. 4a](#) bis [Fig. 4e](#) sowie der Tabelle beschriebenen Verfeinerungsschritte bzw. Verfeinerungsstufen des Messgitters lediglich als beispielhaft anzusehen sind. Alternativ können natürlich auch beliebige andere Verfeinerungen des Messgitters in den jeweiligen Messturni vorgenommen werden.

[0090] Im Folgenden wird mit Bezug auf [Fig. 5](#) ein Ablauf einer texturanalytischen Messung gemäß einem Ausführungsbeispiel der Erfindung erläutert.

[0091] [Fig. 5](#) zeigt ein Ablaufdiagramm **400** gemäß einem Ausführungsbeispiel der Erfindung.

[0092] In Schritt **401** wird eine Menge von Orientierungen $g_m^{(0)} \in S^0(3)$, $m = 1, \dots, M^{(0)}$ bestimmt, wobei jede Rotation einer Orientierung der Kristallprobe entspricht, wie oben erläutert.

[0093] In Schritt **402** werden kristallographische Richtungen $h_i \in S^2$, $i = 1, \dots, N$, festgelegt. Jede kristallographische Richtung spezifiziert eine Kristallform, für die eine Polfigur gemessen werden soll.

[0094] Die Produkte $g_m^{(0)} \underline{h}_i$ bestimmen Raumrichtungen (und damit auch Punkte auf der Sphäre S^2). Ein Produkt $g_m^{(0)} \underline{h}_i$ spezifiziert eine Messposition, beispielsweise dadurch, dass die Intensität der reflektierten Strahlung an einem Punkt auf einer Sphäre um die Kristallprobe gemessen wird, der sich aus Sicht der Kristallprobe durch die von $g_m^{(0)} \underline{h}_i$ bestimmten Raumrichtung befindet. Die Produkte $g_m^{(0)} \underline{h}_i$ spezifizieren somit beispielsweise auf der Einheitssphäre S^2 eine Menge von Punkten, die im Folgenden auch als Messraster bezeichnet werden.

[0095] In diesem Ausführungsbeispiel werden nicht direkt die den Produkten $g_m^{(0)} \underline{h}_i$ entsprechenden Messpositionen als Messpositionen verwendet, da das entsprechende Messraster auf der Einheitssphäre (oder auf einer Teilmenge der Einheitssphäre) (zu) ungleichmäßig verteilt ist.

[0096] In Schritt **403** wird deshalb zunächst ein initiales Messraster $\underline{r}_{im}^{(0)} = g_m^{(0)} \underline{h}_i$ und dann ein angepasstes vergleichmäßigt initiales grobes Messraster von Richtungen $\underline{r}_{ij}^{(0)} \in S^2$, bestimmt, das einer nullten Menge von Messpositionen entspricht.

[0097] In Schritt **404** wird für jede Richtung $\underline{r}_{ij}^{(0)}$ (d.h. für jede Messposition der nullten Menge von Messpositionen) ein entsprechender Intensitätswert $I_{ij}^{(0)}$ gemessen. Die Intensitätswerte $I_{ij}^{(0)}$ können als die Werte der Polfigur $\chi f(\underline{h}_i, \underline{r}_{ij})$ der (unbekannten) Orientierungsdichte f interpretiert werden.

[0098] In Schritt **405** wird (durch entsprechendes Invertieren) aus den Intensitätswerten $I_{ij}^{(0)}$ eine nullte Approximation $f^{(0)}$ der Orientierungsdichte bestimmt.

[0099] Dazu wird beispielsweise $f^{(0)}$ als Linearkombination (mit zunächst unbekanntem Koeffizienten) von Ansatzfunktionen, z.B. Gauss-Weierstrass, Abel-Poisson, de la Vallée Poussin, dargestellt. Die Ansatzfunktionen werden derart gewählt, dass für jede Orientierung $g_m^{(0)}$ eine Ansatzfunktion vorhanden ist, die ihr Zentrum (Modalwert) an der Stelle $g_m^{(0)}$ aufweist. Die Breite (beispielsweise der Träger oder der Bereich, an dem ein bestimmter Schwellwert überschritten wird) der Ansatzfunktionen kann gewählt werden. Anders ausgedrückt kann die Breite der Ansatzfunktionen angepasst werden. [Fig. 6a](#) zeigt beispielhaft eine graphische Darstellung **540** einer Ansatzfunktion vom de la Vallée Poussin-Typ im Ortsbereich, und [Fig. 6b](#) zeigt eine entsprechende graphische Darstellung **580** der Ansatzfunktion im Frequenzbereich.

[0100] Als Ansatzfunktionen kann auch ein anderes geeignetes lokalisiertes Funktionensystem verwendet werden.

[0101] Zur Bestimmung der Koeffizienten der Linearkombination wird ein entsprechendes Optimierungsproblem formuliert und gelöst, beispielsweise durch Quadratur, etwa durch Formulierung als Least-Squares-Problem. Ein dabei zu lösendes Gleichungssystem wird beispielsweise iterativ gelöst, zum Beispiel unter Verwendung einer schnellen Fourier-Transformation.

[0102] In Schritt **406** beginnt die iterative Verfeinerung des Messrasters. Ein entsprechender Iterationsindex k wird mit dem Wert 0 initialisiert.

[0103] In Schritt **407** wird der Wert von k um 1 erhöht, d.h.

$$k \leftarrow k + 1.$$

[0104] In Schritt **408** wird eine verfeinerte Menge von Orientierungen $g_m^{(k)} \in SO(3)$, $m = 1, \dots, M^k$ bestimmt, wobei beispielsweise $M^{k-1} < M^k$ so dass die Anzahl der Messpositionen gegenüber der vorhergehenden Iteration erhöht ist.

[0105] In Schritt **409** wird analog zu Schritt **403** zunächst ein verfeinertes Messraster $\underline{r}_{im}^{(k)} = g_m^{(k)} \underline{h}_i$ und dann ein angepasstes vergleichmäßigt verfeinertes Messraster von Richtungen $\underline{r}_{ij}^{(k)} \in S^2$, bestimmt.

[0106] In Schritt **410** wird ein Verfeinerungskriterium bestimmt (beispielsweise eine Schranke für den Wert der $(k-1)$ -ten Approximation der Orientierungsdichte $f^{(k-1)}$, den Wert der Polfigur $\chi f^{(k-1)}$, den Wert des Gradienten der $(k-1)$ -ten Approximation der Orientierungsdichte $f^{(k-1)}$, den Wert der Laplace-Form der $(k-1)$ -ten Approximation der Orientierungsdichte $f^{(k-1)}$ oder der zurückgerechneten Polfigur $\chi f^{(k-1)}$ an den durch die Orientierungen $g_m^{(k)}$ die Richtungen $\underline{r}_{ij}^{(k)}$ gegebenen Stellen oder an Umgebungen dieser Stellen).

[0107] In Schritt **411** wird das angepasste, vergleichmäßigte Messraster $\underline{r}_{im}^{(k)}$ gemäß dem Verfeinerungskriterium gegebenenfalls abgeändert. Das heißt, dass aus dem angepassten, vergleichmäßigten Messraster $\underline{r}_{im}^{(k)}$ ein

neues verfeinertes Messraster (welches als k-te Mehrzahl von Messpositionen verwendet wird) erzeugt wird, bei dem das Verfeinerungskriterium nicht verletzt wird. Beispielsweise wird eine Richtung $\underline{r}_m^{(k)}$ als Messposition der k-ten Mehrzahl von Messpositionen verwendet, wenn die Richtung das Verfeinerungskriterium erfüllt, also beispielsweise der Wert der (k - 1)-ten Approximation der Orientierungsdichte $f^{(k-1)}$ in einer Umgebung von $\underline{r}_m^{(k)}$ einen Schwellwert nicht überschreitet.

[0108] In Schritt **412** wird für jede Messposition der k-ten Mehrzahl von Messpositionen ein Intensitätswert $I_{ij}^{(k)}$ gemessen.

[0109] In Schritt **413** wird aus den Intensitätswerten $I_{ij}^{(k)}$ analog zu Schritt **405** eine k-te Approximation $f^{(k)}$ der Orientierungsdichte bestimmt.

[0110] In Schritt **414** wird überprüft, ob ein Abbruchkriterium für die Iteration erfüllt ist. Ist das Abbruchkriterium erfüllt, wird die texturanalytische Messung in Schritt **415** beendet. Ist das Abbruchkriterium nicht erfüllt, so wird mit Schritt **407** und dementsprechend mit dem nächsten Iterationsschritt fortgefahren.

[0111] Das Abbruchkriterium ist beispielsweise erfüllt, wenn das maximale Auflösungsvermögen des Textur-Goniometers erreicht wurde oder die gewünschte Güte der Approximation der Orientierungsdichte erreicht worden ist.

[0112] In einer Variante des mit Bezug auf **Fig. 4** beschriebenen Ablaufs wird kein angepasstes, vergleichmäßigt Messraster erzeugt. Es werden im k-ten Iterationsschritt hingegen eine verfeinerte Menge von Orientierungen $g_m^{(k)} \in \text{SO}(3)$, $m = 1, \dots, M^k$ und (anschaulich unabhängig davon) ein verfeinertes Messraster von (Probe-)Richtungen $\underline{r}_{ij}^{(k)} \in S^2$ bestimmt, die dem k-ten Messturnus zu Grunde gelegt werden.

[0113] Die mit Bezug auf die **Fig. 4a** bis **Fig. 4e** und **Fig. 5** beschriebenen Ausführungsbeispiele werden mittels eines gewöhnlichen Detektors durchgeführt, welcher "punktweise" misst (Detektor ortsfest, Probe wird gedreht).

[0114] Gemäß eines anderen Ausführungsbeispiels der Erfindung kann aber auch wie oben bereits erwähnt ein Flächendetektor zum Messen eingesetzt werden (Detektor umgibt die Probe, Probe bleibt orientierungsfest). Der Verfeinerung des Messrasters entspricht dann das verfeinerte Auslesen aus der Matrix, die den Flächendetektor abbildet.

[0115] In diesem Dokument sind folgende Veröffentlichungen zitiert:

- [1] Hielscher, R., Bernstein, S., Schaeben, H., Boogaart, K.G.v.d., Beckmann, J., Prestin, J., 2005, PDF-to-ODF inversion by approximation with spherical radial basis functions, in: van Houtte, P. and Kestens, L., (eds.), Proceedings ICOTOM14, Leuven, Jul 11–15, 2005, Materials Science Forum 495–497, 313–318
- [2] Schaeben, H., Bernstein, S., Hielscher, R., Beckmann, J., Keiner, J., Prestin, J., 2005, High resolution texture analysis with spherical wavelets, Invited Lecture, in: van Houtte, P. and Kestens, L., (eds.), Proceedings ICOTOM14, Leuven, Jul 11–15, 2005, Materials Science Forum 495–497, 245–254
- [3] Schaeben, H., Potts, D., Prestin, J., 2001, Spherical wavelets with an application in preferred crystallographic orientation: CD-ROM Proceedings of the Annual Conference of the International Association for Mathematical Geology, Cancun, Mexico, Sep 6–12, 2001
- [4] Schaeben, H., Prestin, J., Potts, D., 2001, Wavelet representation of diffraction pole figures: Advances in X-ray Analysis 44, Proceedings of the 49th Denver X-ray Conference, Denver, Jul 31–Aug 4, 2000, 235–240
- [5] Boogaart, K.G.v.d., Hielscher, R., Prestin, J., Schaeben, H., 2007, Kernel-based methods for inversion of the Radon transform on $\text{SO}(3)$ and their applications to texture analysis: Journal of Computational and Applied Mathematics 199, 122–140
- [6] DE 10 2004 006 431 A1
- [7] DE 10 2004 006 429 A1
- [8] R. Kondo, S. Kagoshima, J. Harada, Review of Scientific Instruments, Vol. 76 (2005), S. 093902-1 bis 093902-7
- [9] WO 01/09925 A2
- [10] DE 100 85 493 T5

Bezugszeichenliste

100	Kristallgitter
101	Netzebene
101'	Netzebene
102	Atome
103a	erster einfallender Röntgenstrahl
103b	erster gebeugter Strahl
104a	zweiter einfallender Röntgenstrahl
104b	zweiter gebeugter Strahl
105a	einfallender Röntgenstrahl
105b	gebeugter Strahl
200	ebene Darstellung
202–210	regelmäßiges Messgitter
240	Darstellung eines Dirichlet-Kerns im Ortsbereich
280	Darstellung im Frequenzbereich
300	ebene Darstellung
302	Messgitter
303	Messposition
304–308	Messgitter
320	ebene Darstellung
322	Messgitter
323	Messposition
324–328	Messgitter
340	ebene Darstellung
342	Messgitter
343	Messposition
344–348	Messgitter
360	ebene Darstellung
362	Messgitter
363	Messposition
364–368	Messgitter
380	ebene Darstellung
382	Messgitter
383	Messposition
384–388	Messgitter
400	Ablaufdiagramm
401–415	Ablaufschritte
540	Darstellung einer Basisfunktion vom de la Vallée Poussin-Typ im Ortsbereich
580	Darstellung im Frequenzbereich

Patentansprüche

1. Verfahren zum Steuern eines Texturgoniometers im Rahmen einer texturanalytischen Untersuchung einer Probe, bei dem:

- in einer Mehrzahl von Messdurchgängen eine Mehrzahl von diffraktometrischen Intensitätsmessungen an der Probe durchgeführt werden; wobei
- in einem ersten Messdurchgang für jede Messposition einer ersten Mehrzahl von Messpositionen innerhalb eines Messbereiches jeweils mindestens ein Intensitätswert ermittelt wird;
- basierend auf den ermittelten Intensitätswerten die Form mindestens eines Teilbereiches des Messbereiches ermittelt wird;
- eine zweite Mehrzahl von Messpositionen ermittelt wird, wobei in dem mindestens einen Teilbereich des Messbereiches mehr Messpositionen der zweiten Mehrzahl von Messpositionen vorhanden sind, als Messpositionen der ersten Mehrzahl von Messpositionen;
- in einem zweiten Messdurchgang für jede Messposition der zweiten Mehrzahl von Messpositionen jeweils mindestens ein Intensitätswert ermittelt wird; und
- wobei das Texturgoniometer unter Verwendung der ermittelten Messpositionen gesteuert wird.

2. Verfahren gemäß Anspruch 1, wobei

- die Probe als kristalline Probe ausgebildet ist;

- basierend auf den in dem ersten Messdurchgang ermittelten Intensitätswerten eine Orientierungsverteilungsfunktion als Linearkombination von Ansatzfunktionen ermittelt wird, welche Orientierungsverteilungsfunktion die Häufigkeit von in der Probe auftretenden Kristallorientierungen spezifiziert; und
- basierend auf der Orientierungsverteilungsfunktion die Form des mindestens einen Teilbereiches des Messbereiches ermittelt wird.

3. Verfahren gemäß einem der Ansprüche 1 oder 2, wobei in dem ersten Messdurchgang für jede Messposition der ersten Mehrzahl von Messpositionen jeweils ein Intensitätswert mittels einer diffraktometrischen Einzelmessung ermittelt wird.

4. Verfahren gemäß einem der Ansprüche 1 bis 3, wobei in dem zweiten Messdurchgang für mindestens eine Messposition der Mehrzahl von zweiten Messpositionen ein Intensitätswert mittels einer diffraktometrischen Einzelmessung ermittelt wird.

5. Verfahren gemäß Anspruch 4, wobei nur für diejenigen Messpositionen der zweiten Mehrzahl von Messpositionen ein Intensitätswert mittels einer diffraktometrischen Einzelmessung ermittelt wird, für welche noch kein Intensitätswert in dem ersten Messdurchgang ermittelt wurde.

6. Verfahren gemäß Anspruch 5, wobei für diejenigen Messpositionen der zweiten Mehrzahl von Messpositionen, für welche ein Intensitätswert in dem ersten Messdurchgang ermittelt wurde, der in dem ersten Messdurchgang ermittelte Intensitätswert verwendet wird.

7. Verfahren gemäß einem der Ansprüche 1 bis 6, wobei basierend auf den in dem ersten Messdurchgang ermittelten Intensitätswerten die Größe des mindestens einen Teilbereiches des Messbereiches ermittelt wird.

8. Verfahren gemäß einem der Ansprüche 3 bis 7, wobei die diffraktometrische Einzelmessung unter Verwendung eines Diffraktometers erfolgt.

9. Verfahren gemäß einem der Ansprüche 1 bis 8, wobei die Messpositionen mittels Drehens der Probe angenommen werden.

10. Verfahren gemäß Anspruch 9, wobei das Drehen der Probe unter Verwendung des Texturgoniometers erfolgt.

11. Verfahren gemäß Anspruch 10, wobei die Messpositionen der ersten Mehrzahl von Messpositionen und/oder der zweiten Mehrzahl von Messpositionen an eine Steuereinrichtung übermittelt werden zum Steuern des Texturgoniometers.

12. Verfahren gemäß einem der Ansprüche 9 bis 11, wobei die diffraktometrische Einzelmessung unter Verwendung eines Flächendetektors erfolgt.

13. Verfahren gemäß Anspruch 12, wobei das Drehen der Probe bezüglich des Flächendetektors erfolgt.

14. Verfahren gemäß einem der Ansprüche 2 bis 13, wobei als Ansatzfunktionen lokalisierte Basisfunktionen mit glattem Frequenzspektrum verwendet werden.

15. Verfahren gemäß Anspruch 14, wobei als lokalisierte Basisfunktionen radiale Basisfunktionen vom Gauss-Weierstrass-Typ, Abel-Poisson-Typ oder de la Vallée Poussin-Typ verwendet werden.

16. Verfahren gemäß einem der Ansprüche 2 bis 15, wobei in der Linearkombination auftretende Entwicklungskoeffizienten unter Verwendung von schnellen Fourier-Transformations-Methoden oder schnellen Multipol-Methoden ermittelt werden.

17. Verfahren gemäß einem der Ansprüche 2 bis 16, wobei

- basierend auf den im ersten Messdurchgang und/oder zweiten Messdurchgang ermittelten Intensitätswerten die Form mindestens eines zweiten Teilbereiches des Messbereiches ermittelt wird;
- eine dritte Mehrzahl von Messpositionen ermittelt wird, wobei in dem mindestens einen zweiten Teilbereich des Messbereiches mehr Messpositionen der dritten Mehrzahl von Messpositionen vorhanden sind als Messpositionen der ersten Mehrzahl von Messpositionen und/oder der zweiten Mehrzahl von Messpositionen;
- in einem dritten Messdurchgang für jede Messposition der dritten Mehrzahl von Messpositionen jeweils min-

destens ein Intensitätswert ermittelt wird.

18. Verfahren gemäß Anspruch 17, wobei

- basierend auf den im ersten Messdurchgang und/oder zweiten Messdurchgang ermittelten Intensitätswerten und/oder basierend auf der Orientierungsverteilungsfunktion eine zweite Orientierungsverteilungsfunktion als Linearkombination von Ansatzfunktionen ermittelt wird; und
- basierend auf der zweiten Orientierungsverteilungsfunktion die Form des mindestens einen zweiten Teilbereiches des Messbereiches ermittelt wird.

19. Verfahren gemäß Anspruch 18, wobei das Ermitteln von Intensitätswerten iterativ fortgesetzt wird, derart, dass

- basierend auf den in dem ersten Messdurchgang bis n-ten ($n \in \mathbb{N}$, $n \geq 3$) Messdurchgang ermittelten Intensitätswerten und/oder basierend auf der ($n - 1$)-ten Orientierungsverteilungsfunktion eine n-te Orientierungsverteilungsfunktion als Linearkombination von Ansatzfunktionen ermittelt wird; und
- basierend auf der n-ten Orientierungsverteilungsfunktion die Form mindestens eines n-ten Teilbereiches des Messbereiches ermittelt wird; und
- eine ($n + 1$)-te Mehrzahl von Messpositionen ermittelt wird, wobei in dem mindestens einen n-ten Teilbereich des Messbereiches mehr Messpositionen der ($n + 1$)-ten Mehrzahl von Messpositionen vorhanden sind als Messpositionen von einer oder mehrerer der ersten Mehrzahl bis n-ten Mehrzahl von Messpositionen;
- in einem ($n + 1$)-ten Messdurchgang für jede Messposition der ($n + 1$)-ten Mehrzahl von Messpositionen jeweils mindestens ein Intensitätswert ermittelt wird.

20. Vorrichtung zum Steuern eines Texturgoniometers im Rahmen einer texturanalytischen Untersuchung einer Probe, aufweisend:

- eine erste Ermittlungseinrichtung, eine zweite Ermittlungseinrichtung sowie eine Steuereinrichtung;
- wobei die erste Ermittlungseinrichtung eingerichtet ist zum Ermitteln von Intensitätswerten für mindestens eine Messposition innerhalb eines Messbereiches, und wobei die erste Ermittlungseinrichtung so eingerichtet ist, dass mindestens einer der Intensitätswerte mittels einer diffraktometrischen Intensitätsmessung ermittelbar ist;
- wobei die zweite Ermittlungseinrichtung so eingerichtet ist, dass sie basierend auf von der ersten Ermittlungseinrichtung in einem ersten Messdurchgang für eine erste Mehrzahl von Messpositionen ermittelten Intensitätswerten die Form mindestens eines Teilbereiches des Messbereiches ermittelt;
- wobei die zweite Ermittlungseinrichtung ferner so eingerichtet ist, dass sie eine zweite Mehrzahl von Messpositionen ermittelt, wobei in dem mindestens einen Teilbereich des Messbereiches mehr Messpositionen der zweiten Mehrzahl von Messpositionen vorhanden sind als Messpositionen der ersten Mehrzahl von Messpositionen,
- wobei die erste Ermittlungseinrichtung eingerichtet ist, in einem zweiten Messdurchgang für jede Messposition der zweiten Mehrzahl von Messpositionen jeweils mindestens einen Intensitätswert zu ermitteln; und
- wobei die Steuereinrichtung eingerichtet ist zum Steuern des Texturgoniometers unter Verwendung der ermittelten Messpositionen.

21. Vorrichtung gemäß Anspruch 20, wobei die erste Ermittlungseinrichtung ein Diffraktometer aufweist.

Es folgen 10 Blatt Zeichnungen

Fig. 1a

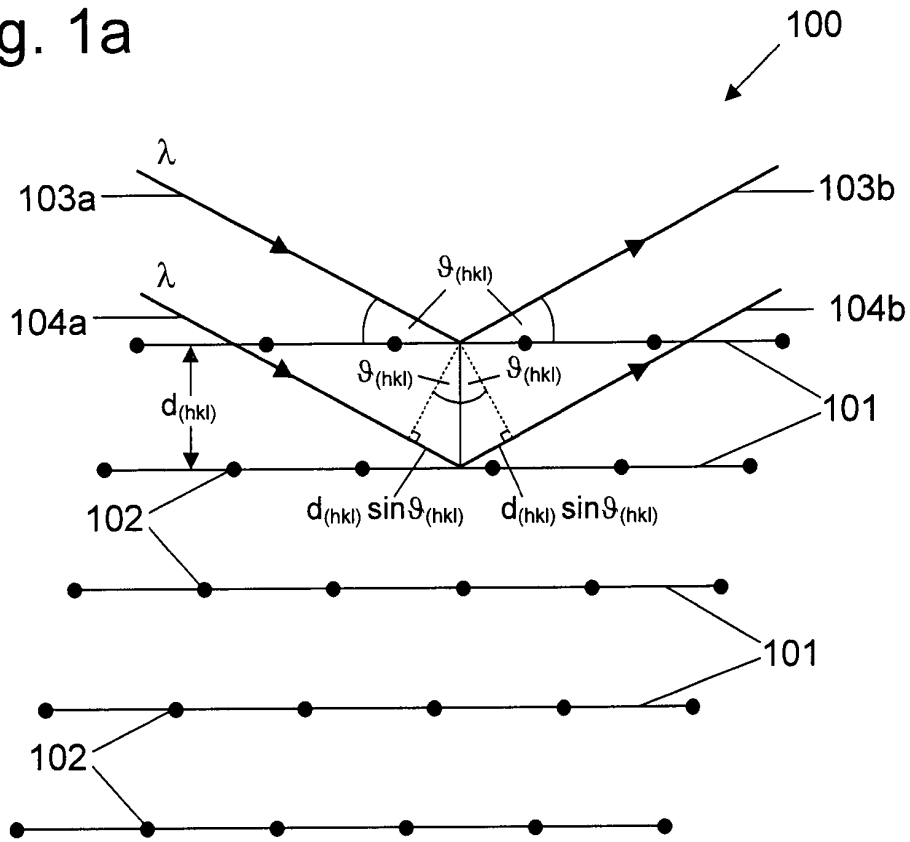


Fig. 1b

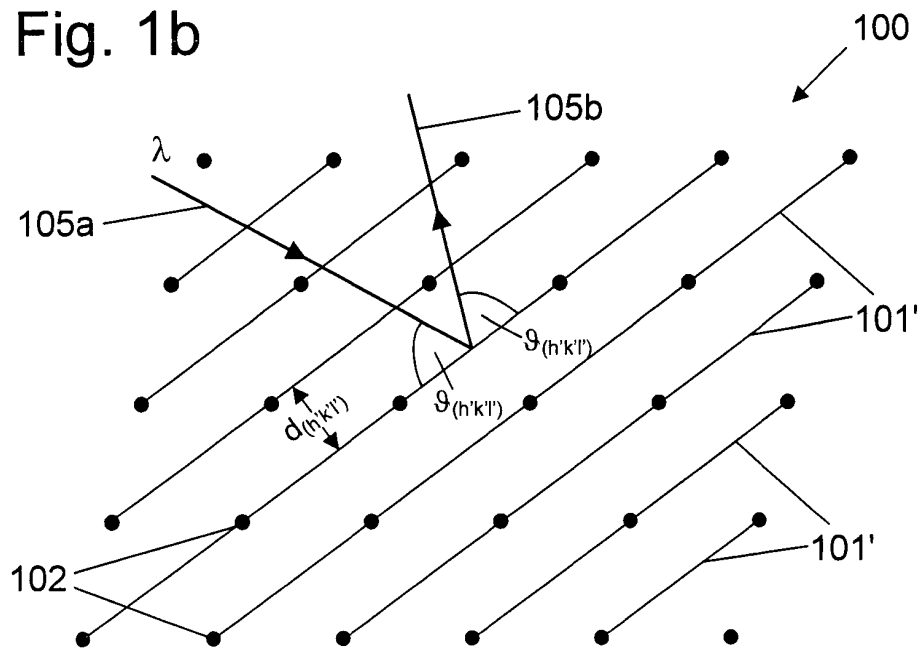


Fig. 2

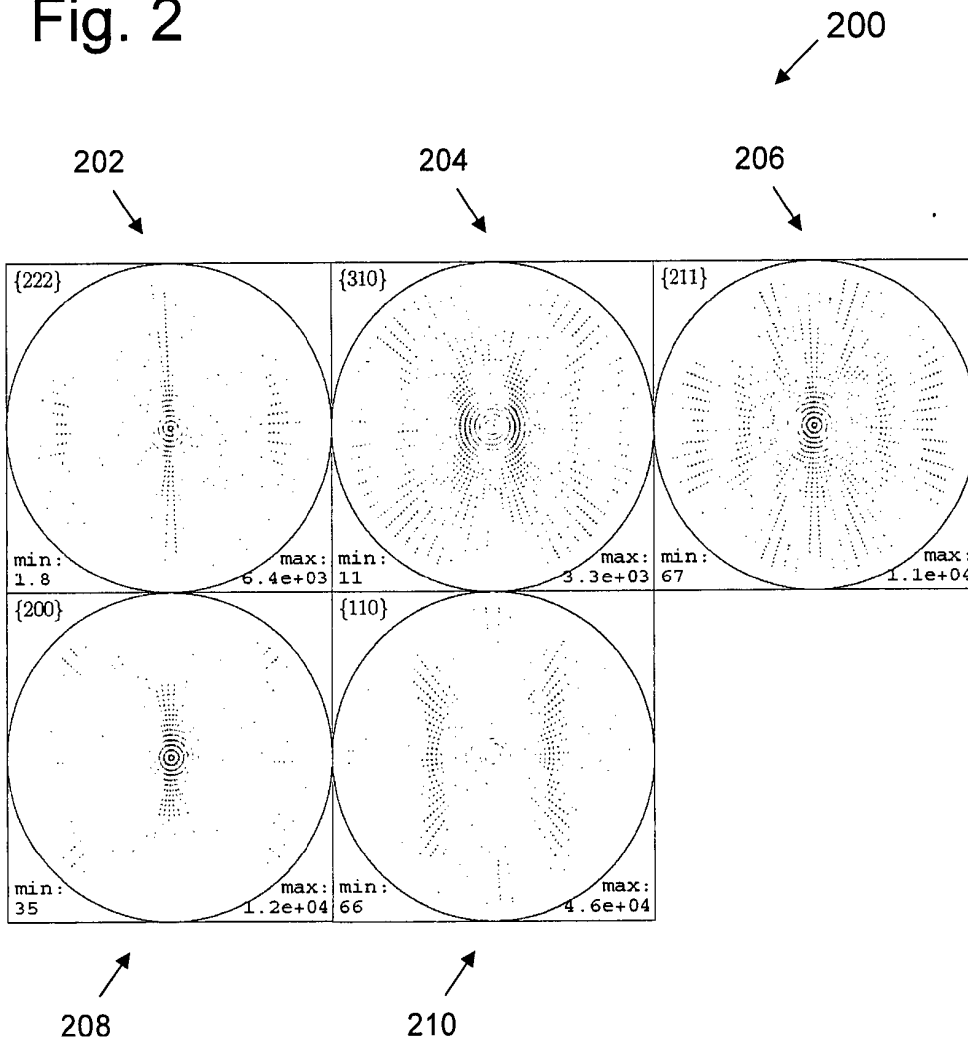


Fig. 3a

240

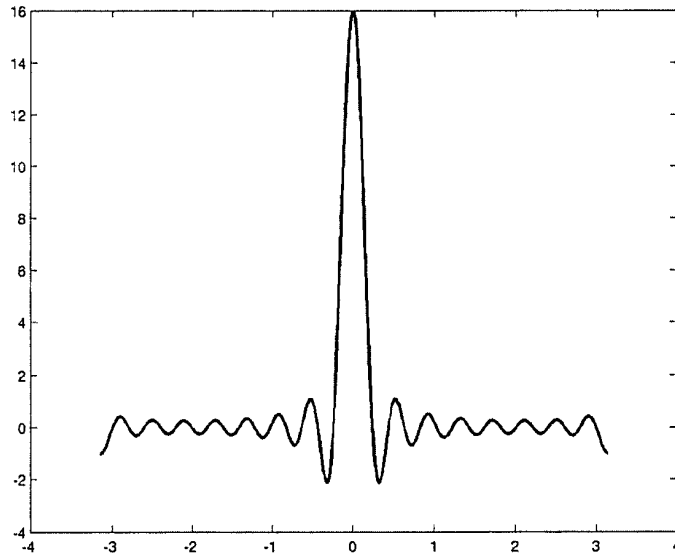


Fig. 3b

280

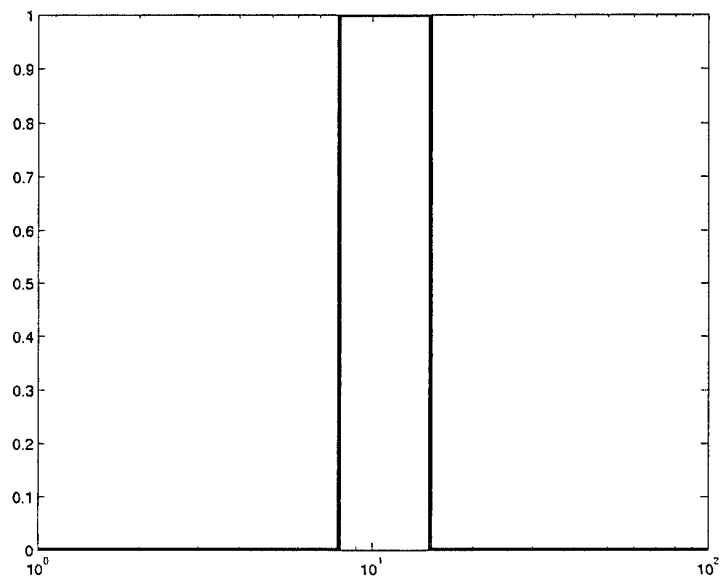


Fig. 4a

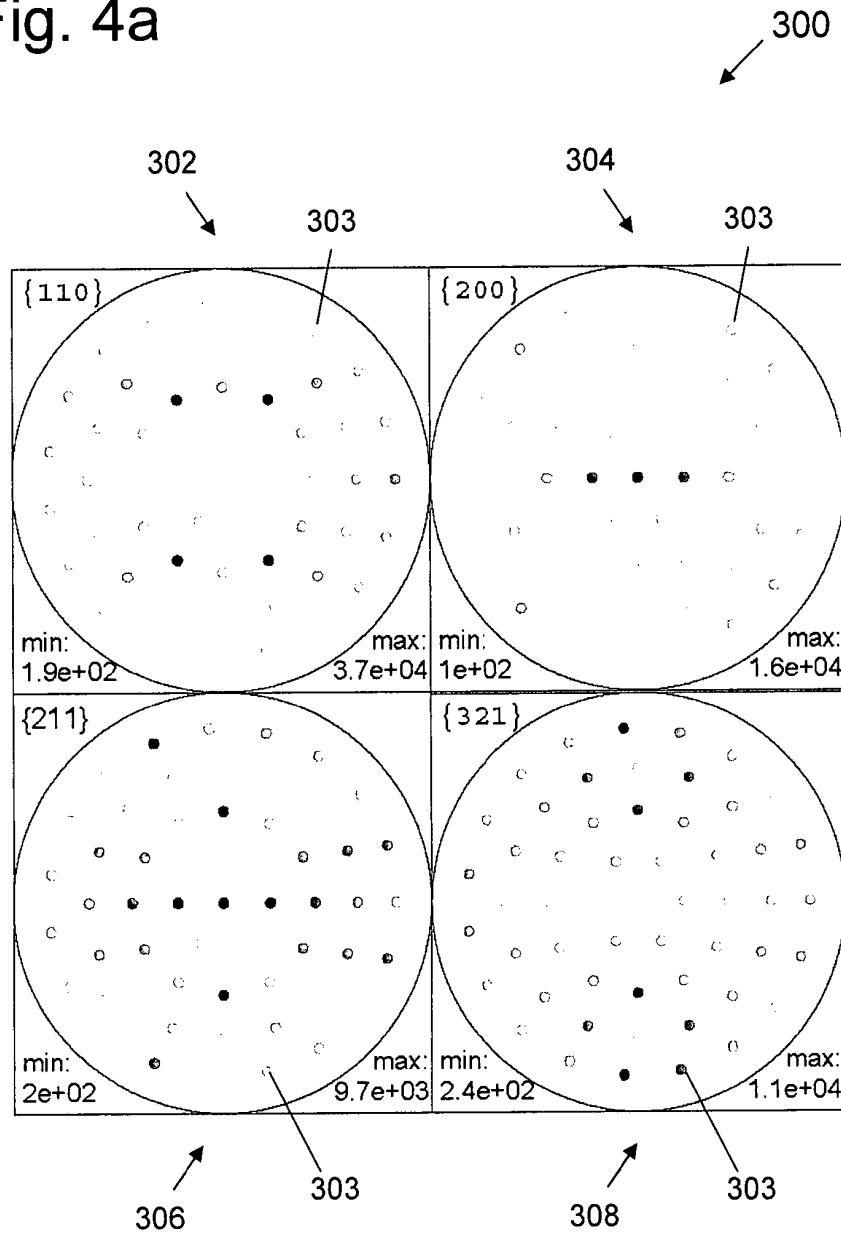


Fig. 4b

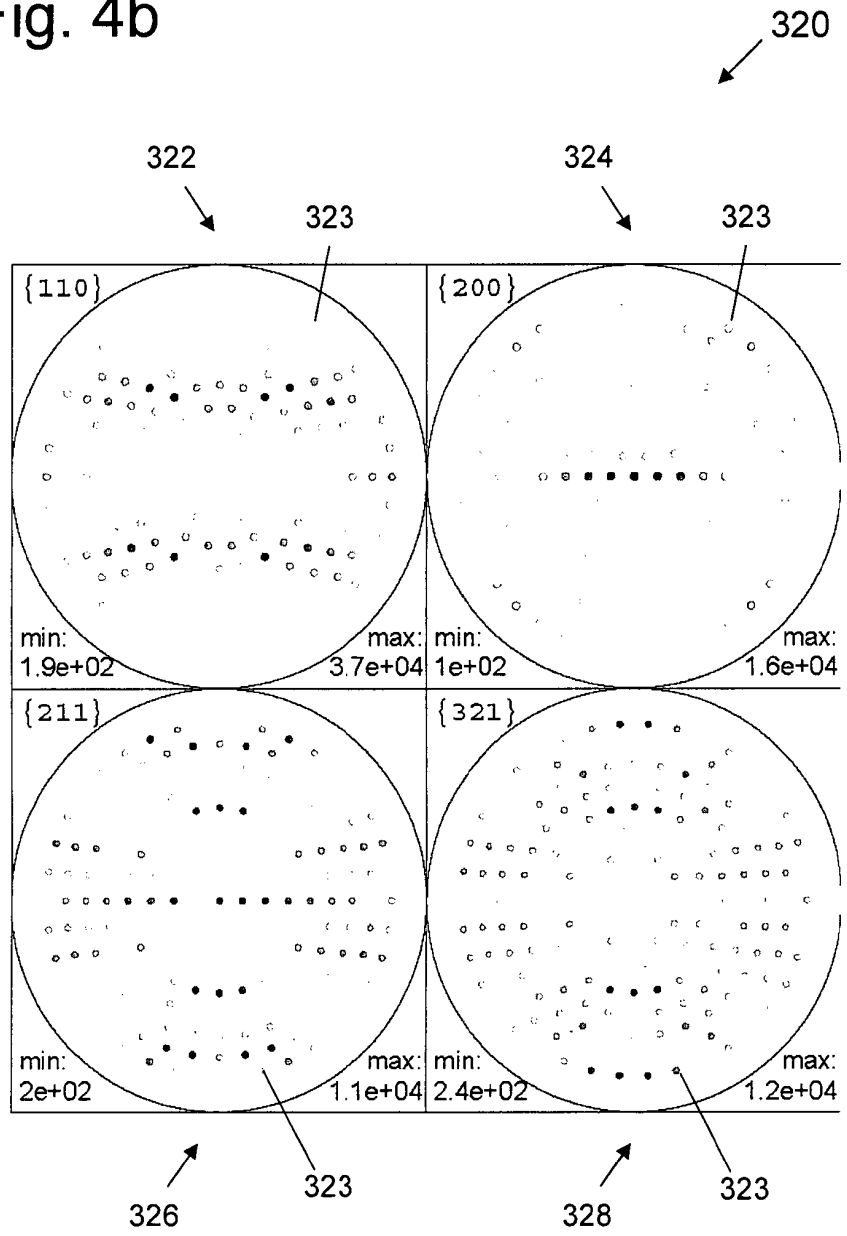


Fig. 4c

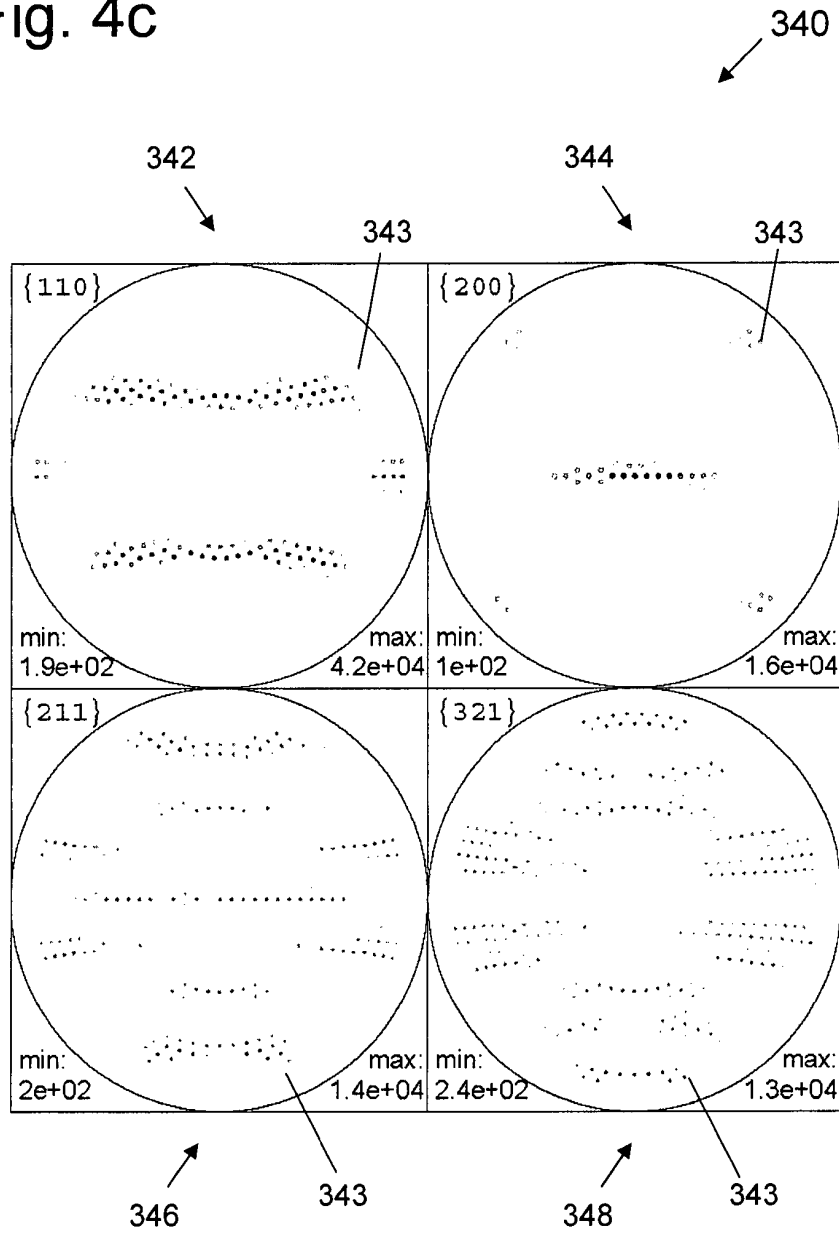


Fig. 4d

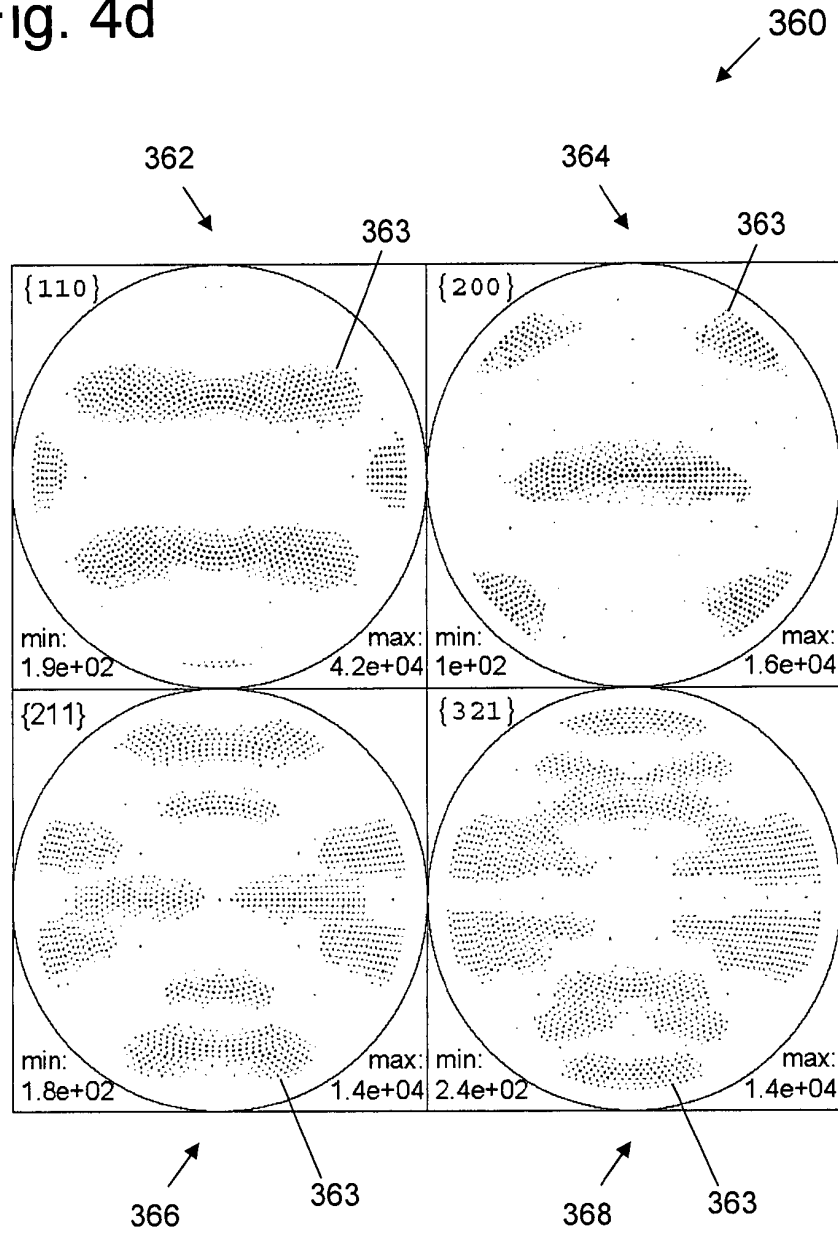


Fig. 4e

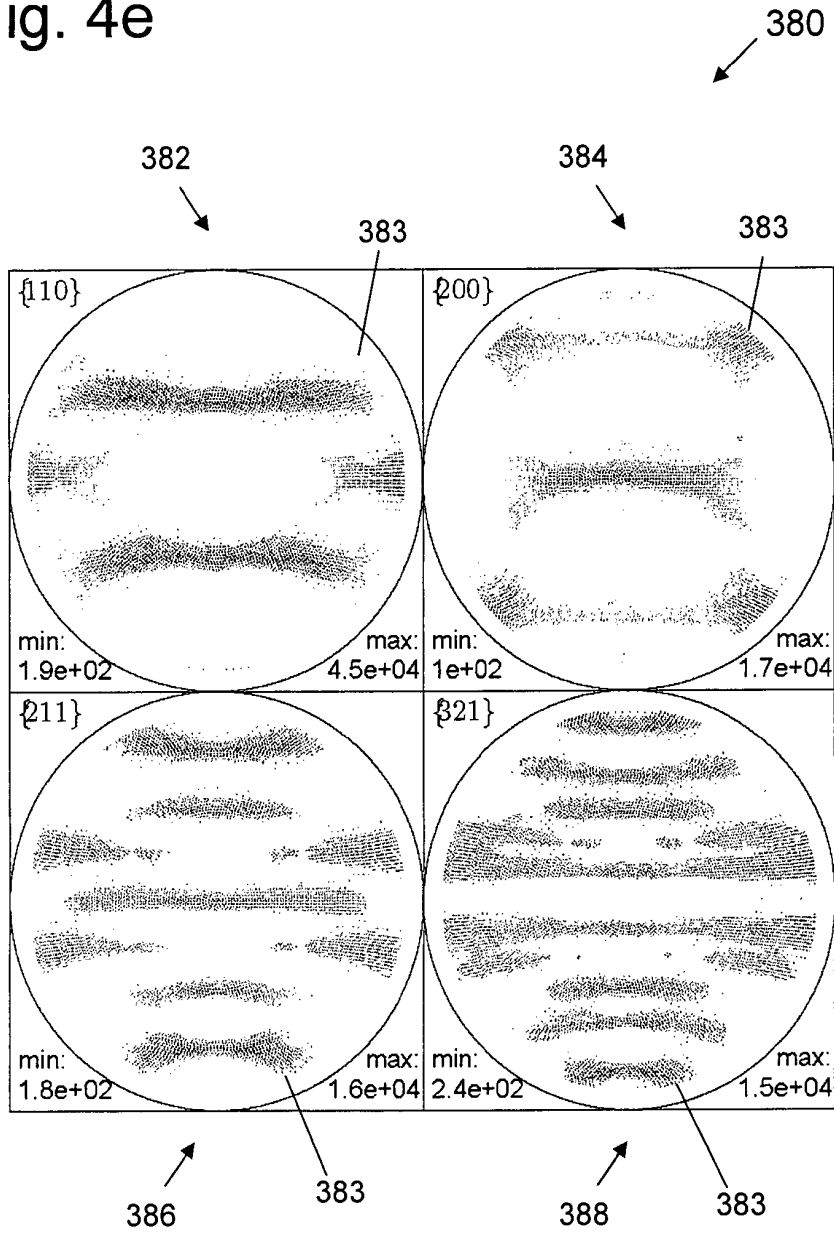


Fig. 5

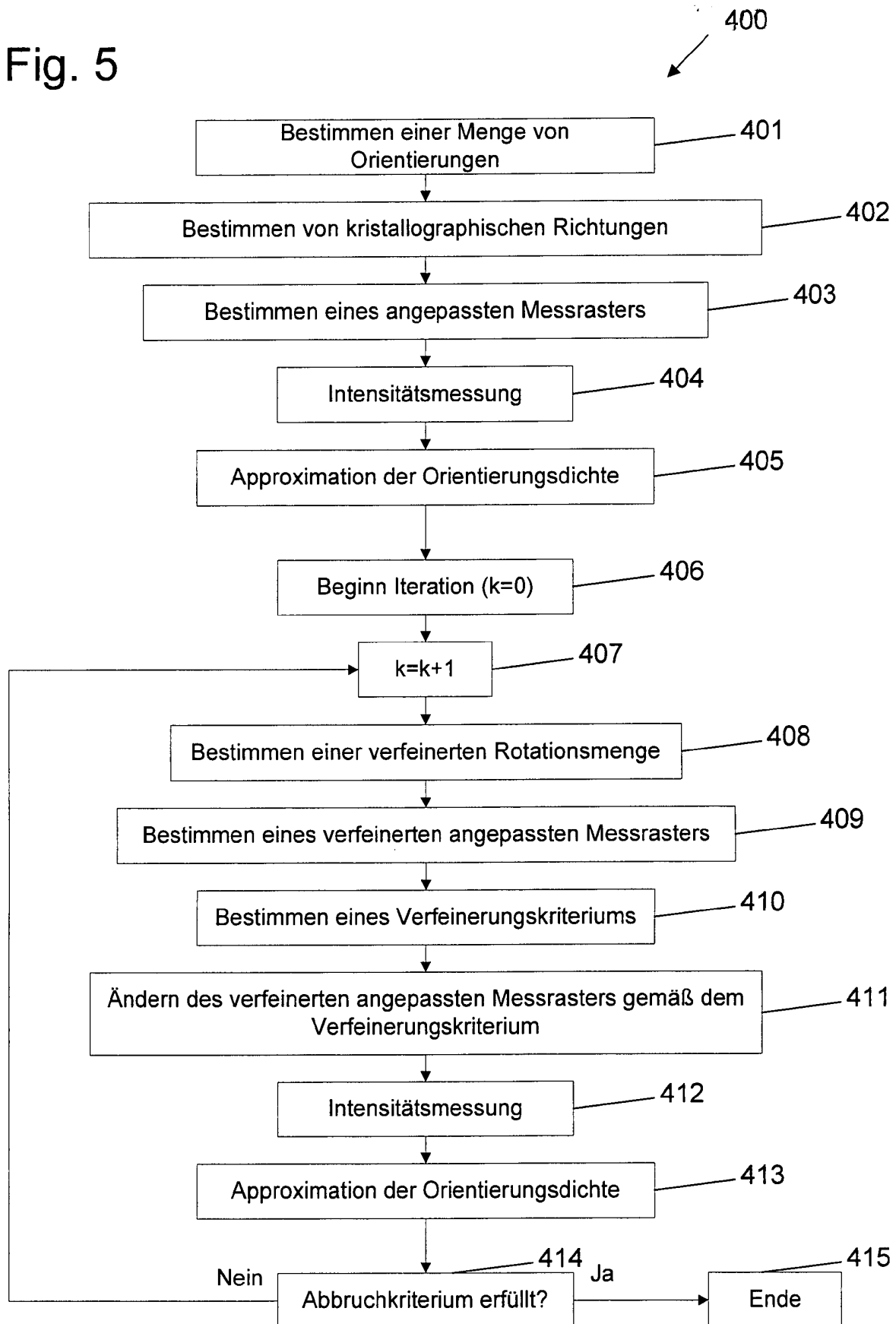


Fig. 6a

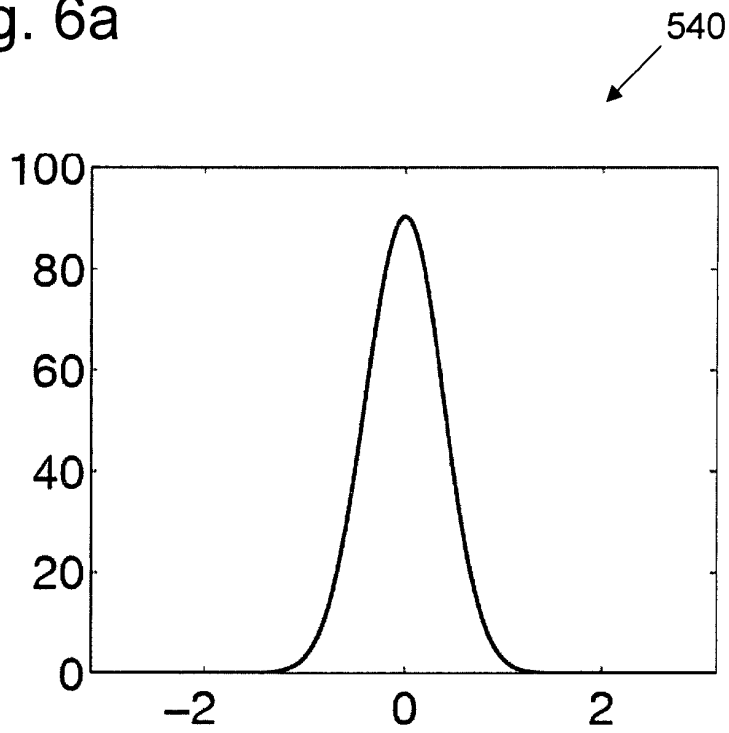


Fig. 6b

