対称反射測定プロファイルから ND 方向の逆極点図を表示

2020年09月17日 *HelperTex Office* 逆極点は、極点図測定からODF解析後、あらゆる方向の逆極点図を計算できるが、最も重要な ND方向に関しては、通常測定である対称反射プロファイルから計算できる。 通常は、サンプルチェンジャーと組み合わせ、面内回転を行い測定します。 定性測定と異なり20法方向の分解能は必要としないので発散光学系とし発散スリットを広くし 多数の結晶粒を測定し、受光スリットの分解能は必要としないので0.3mm程度を利用する。 以下にアルミニウムを例に連続測定データから指数付きの分割データに変換し、randomと sampleの比率を計算し、ステレオ三角形上に表示する手順を説明します。

測定データ

CTR > DATA > Profile-Inverse > Aluminum

·	名前 ^	更新日時	種類
	📭 A-H18.ASC	2012/06/26 10:44	RINT20007スキー
	🕰 Al-powder.ASC	2012/06/26 10:44	RINT2000774-
	🕰 A-T4.ASC	2012/06/26 10:44	RINT2000774-
	📭 B-H18.ASC	2012/06/26 10:44	RINT2000774-
	🕰 B-O.ASC	2012/06/26 10:44	RINT200077+-
	📭 C-Bach.ASC	2012/06/26 10:44	RINT200077+-
	🕰 C-CAL.ASC	2012/06/26 10:44	RINT200077+-
	D-H14.ASC	2012/06/26 10:44	RINT200077+-
	📭 D-H18.ASC	2012/06/26 10:44	RINT200077+-
	📭 D-O.ASC	2012/06/26 10:44	RINT200077+-

解析プログラム

ProfiletoDivisionProfile

複数の連続データから指数付きの分割データに変換

InverseAll

分割データから各種処理を行い、Sample/Random 計算を行う

InverseDisplay

ステレオ三角形上に、数値表示、3D表示を行う。

解析																			
			InverseTools 1.13ST[21/08/31]	by CTR	- 🗆 X														
			File Help																
M ODFPolefigure1.5	1.65T[21/08/31] by CTR		Asc Profile(or Division)	ProfiletoDivisionProfile	DivisionProfile(index) Asc														
File Linear(3D) To	olKit Help InitSet Rp% Mir	numur	- Asc DivisionProfile(Index)	InverseAll	Inverse TXT File														
ASC(RINT-PC)	PFtoODF3		- TXT HKL Intens 2Theta TEXT data	MeasureDatatoMYICDD	MYICDD data														
Calcration Conditio	SoftWare	_	InverseTXT Inverse Data	InverseDisplay	Inverse 3D Display														
Previous	ImageTools		InverseTXT Hexainverse Data	InverseDisplayHexa	Hexalnverse 3D Display														
Backgroud delete	PopLATools		Asc Profile	Lotgering Method	Text Data														
	ODFAfterTools			- Asc(files) Profiles	Lotgering and Inverse	Text Data													
🗌 Ref 🔄 Tra	PoleOrientationTools			ODF-Inverse	InverseDirection	Direction-Plane Data disp													
Defocus file Se	DataBaseTools							ODF-Inverse	GPInverseDisplay	Inverse Contour Display									
Smoothing(for A	FiberTools			Inverselist Inverse Data	InverseCubicContourDisplay	InverseContour Display													
Cycles	StandardODFTools			necti	necti	necti	necti	necti	necti	necti	necti	necti	necti	necti	necti	necti	Inverselist Inverse Data	InverseContourDisplay	InverseContour Display
	DefocusTools					Inverselist Inverse Data	InverseDisp2	InverseDisplay36Box											
	ClusterTools			txtdata apend	hkllistDisplay	csv file													
·	InverseTools			hkIlisdtDisplay listDisplay	InverseResultDisplay	resultDisplay													
	MeasureDatatoAscTools		ODF-Inverse	GPInverseDisplay-old	Inverse 3D Display														
	OrientationDisplayTools				_														
+	VectorTools																		

材料を選択(管球も指定)

M ProfiletoDivision	nProfile 1.07ST[21/08/31] by CTR	_		X
File Help	/			
Material	A-Iron-Measure-IntegralData			
Full Profiles(ASC	C) or Division profiles(ASC) select files number	=0	List	
Smoothing	Data scope condition for division Index change datafile(division files to NEWFILE) ± 1.8 O Change O Create(NEWFILE)	E	xecute	
		Inver	rseAll	
プロファ	イルデータを複数選択 切り出し範囲指定 分割開始 InverseA	山 の走	記動	

材料の選択	1
-------	---

Material		
₩ MaterialData 1.37T[21/08/31] by CTR — □ ×		
File Help Disp		
Search		
Cubic ~		
$ \begin{tabular}{c c c c c c c c c c c c c c c c c c c $		
Wave length		
1.54056		
Select		
Aluminum. TXT		
Aluminum		
Formula: Al		
Disp. Cancel Return Structure		
Chaminal formula		
Input(e. g. C2 H4) Ai		
ProfiletoDivisionProfile 1.07ST[21/08/31] by CTR	- 🗆	×
File Help		
Material		
Aluminum		
E-II D(I(ASO) Division(I(ASO)		
Files 🗸 🖆 select files number	=0 List	
Smoothing — Data scope condition for division — Index change datafile(division files to NEWFILE) — — —		_
1 . 18 de r O Change O Create(NEWEILE)	Execute	
	InverseAll	
MillahaTayDicelayian Evacutable lar File 70 KB 201		

1 1 30

p

Full Profiles(ASC) or Division profiles(ASC)	
Files		
ふ 開く		×
ファイルの場所(I):	📑 Aluminum 🗸 🤌 📂 🖽 -	
最近使った項	A-H18.ASC Al-powder.ASC A-T4.ASC B-H18.ASC B-O.ASC	
デスクトップ	C-Bach.ASC C-CAL.ASC D-H14.ASC	
בי איא אכאב+א	D-H18.ASC D-O.ASC Tandom-plate.ASC	
PC		
ネットワーク	ファイル名(N): .SC* *C-CALASC* *D-H14.ASC* *D-H18.ASC* *D-O.ASC* ファイルのタイプ(T): *asc,*.ASC,*.Asc	<mark>罰<</mark> 双肖
r 🎽 ProfiletoDivisionProfile 1.	1.07ST[21/08/31] by CTR -	×
Material Alumin	List	
Full Profiles(ASC) or Divi	ision profiles(ASC) C:\CTR\DATA\Profile-Inverse\Aluminum Select files number =10	ist
Smoothing Data sc 1 ±	cope condition for division Index change datafile(division files to NEWFILE) 1.8 O Change Index change Create(NEWFILE)	te
p	InverseAl	

Smoothing Data scope condition for division Index change datafile(division files to NEWFILE) 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1	E) Execute
r AProfiletoDivisionProfile 1.07ST[21/08/31] by CTR	- / □ ×
Material List Full Profiles(ASC) or Division profiles(ASC) Either Criter Criter Inverse Aluminum	
Select files numbers and the second select files numbers and the s	Execute
Division file has been Created !!	InverseAll
> CTR > DATA > Profile-Inverse > Aluminum	

□ 名前 ^	更新日時	種類
NEWFILE	2020/09/17 7:33	ファイル フォルダー
📭 A-H18.ASC	2012/06/26 10:44	RINT2000774-
🛱 Al-powder.ASC	2012/06/26 10:44	RINT2000774-
📭 A-T4.ASC	2012/06/26 10:44	RINT2000774-
📭 B-H18.ASC	2012/06/26 10:44	RINT2000774-
📭 B-O.ASC	2012/06/26 10:44	RINT20007スキー
📭 C-Bach.ASC	2012/06/26 10:44	RINT2000774-
📭 C-CAL.ASC	2012/06/26 10:44	RINT2000774-
D-H14.ASC	2012/06/26 10:44	RINT2000774-
D-H18.ASC	2012/06/26 10:44	RINT2000774-
🕰 D-O.ASC	2012/06/26 10:44	RINT2000774-
	▲前 NEWFILE NEWFIL	名前 更新日時 NEWFILE 2020/09/17 7:33 Ui A-H18.ASC 2012/06/26 10:44 Ui A-H18.ASC 2012/06/26 10:44 Ui A-T4.ASC 2012/06/26 10:44 Ui A-T4.ASC 2012/06/26 10:44 Ui B-H18.ASC 2012/06/26 10:44 Ui B-O.ASC 2012/06/26 10:44 Ui C-Bach.ASC 2012/06/26 10:44 Ui C-CAL.ASC 2012/06/26 10:44 Ui D-H14.ASC 2012/06/26 10:44 Ui D-H18.ASC 2012/06/26 10:44 Ui D-O.ASC 2012/06/26 10:44



^	□ 名前 ^	更新日時	種類
	🛄 A-H18.ASC	2020/09/17 7:33	RINT200077.+-
	🛱 Al-powder.ASC	2020/09/17 7:33	RINT2000774-
	🛱 A-T4.ASC	2020/09/17 7:33	RINT2000774-
	📭 B-H18.ASC	2020/09/17 7:33	RINT2000774-
	🛱 B-O.ASC	2020/09/17 7:33	RINT2000774-
	🛱 C-Bach.ASC	2020/09/17 7:33	RINT2000774-
	🛱 C-CAL.ASC	2020/09/17 7:33	RINT2000774-
	📭 D-H14.ASC	2020/09/17 7:33	RINT2000774-
	D-H18.ASC	2020/09/17 7:33	RINT2000774-
	🛱 D-O.ASC	2020/09/17 7:33	RINT2000774-

データ確認

連続データ



分割データ

指数付けが行われている。

		Division	file	has	been	Created	11
--	--	----------	------	-----	------	---------	----

InverseAll

InverseAll 1.15ST[21/08/31] by CTR File ProfiletoDivisionProfile Condition initialize Help ArithmoticMea	- C X
Mode Main Random Inverse V RandomSelect(division ASC) MeasureData	Aluminum List Disp
Data select(ASC)	Asc files number List Previous Next DISP
Smoothing points 1	Standardization Calc Disp O Execution InverseResultDisplay

解析手法を指定

InverseAll 1.15ST[21/08/31] by CTR



Random指定

MarseAll 1.15ST[21/08/31] b	y CTR			
File ProfiletoDivisionProfile	Condition initial	lize Help Arithmot	icMean(SMpoir	nts1) Minus[
Mode			Material	_
Random Inverse	1 887		~~~	Aluminum
RandomSelect(division ASC) — MeasureData	■ 用ヽ ファイルの場所(I):	NEWFILE		
	•	A-H18.ASC		
Data select(ASC)	最近使った項	B-H18.ASC		
Ê ≧		C-Bach.ASC		
Files	デスクトップ	D-H14.ASC		
		D-H18.ASC		

分割データが保存されている NEWFILE / Al-powder.ASC を選択

RandomSelect(division ASC)				
	\Profile-Inverse\Alu	Iminum\NEWFILE\Al-pov	vder.ASC	
Data select(ASC)	篇<			
	ファイルの場所(I):			
Files	最近使った項	UT A-H18.ASC UT Al-powder.ASC UT A-T4.ASC UT B-H18.ASC		
Smoothing points	デスクトップ	ua B-O.ASC UG C-Bach.ASC UG C-CAL.ASC UG D-H14.ASC UG D-H18.ASC		
Marka InverseAll 1.15ST[21/08/31] by CTR		U D-O.ASC		– 🗆 X
File ProfiletoDivisionProfile Condition initialize	Help ArithmoticMea	n(SMpoints1) MinusData(fa ^{terial}	lse) Peak(Palabola5) RengeCh	ange(false)
Random Inverse		Aluminum	LIst	
RandomSelect(division ASC) MeasureData	Aluminum\NEWFILE\A	I-powder.ASC	Disp	
Data select(ASC)		Asc files number		
		10	List Previous	Next
Files Select files=10		SelectFile C:\CTR\DATA\Profile-In	verse\Aluminum\NEWFILE\A-H18	B DISP
Smoothing points 1	ntion on ~	Standardization	Calc Disp	
<u> </u>			InverseResultDisplay	

ピーク強度の場合各種条件を指定するが、積分強度の場合、バックグランドの平均化点数のみ 逆極点の場合、等高線で表示されているが、本手法では方位 [h k 1]の数値のみのため、 広がりを含めた積分強度手法が望ましい。

積分強度開始

File Pro	rseAll 1.15ST[21/08 ofiletoDivisionPr	/31] by CTR ofile Condit	ion initialize Hel	p Arithmotic!	Mean(SMpoir	nts1) MinusDa	ita(false) Peak	(Palabola5)	RengeChan	- □ ge(false)	×
Mode	Random Inve	rse			Material	Aluminum		L	Ist		
N Randon Meas	nSelect(division AS sureData	C) R\DATA\Prot	ile-Inverse\Alum	inum\NEWFII	LE\Al-powder	ASC		Di	sp		
Data se	elect(ASC)				Asc fil	es number		List	Previous	Next	
Files	Select	files=10			C:\C	TR\DATA\Prof	ile-Inverse\Alur	minum\NEWF	LE\A-H18	DISP	
Smoo	undothing points	3	Peak-Integration	~	Standard O E	dization Execution	Ca	verseResultDi	Disp splay		
										¥₽8K₽.%	
Randomn	node Arithmetici [111] 0.354	viean(SMpoi [200] 0.839	nts1) BGsmpoin [220] 1 137	[311] [395] [312]	on Minusdat [222] 0.289	a-UFF [400] 0.606	[331] 0.375	[420] 0.814	[422] 1 113		

A-H18	0.354	0.839	1.137	1.985	0.289	0.606	0.375	0.814	1.113
A-T4	0.232	2.109	0.333	0.442	0.185	2.706	0.293	0.577	0.097
Al-powder	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0
B-H18	0.185	0.39	0.742	0.628	0.259	0.318	0.454	0.521	0.518
B-O	0.295	1.491	0.35	0.517	0.346	1.991	0.323	0.522	0.48
C-Bach	0.114	2.869	1.496	1.021	0.112	3.185	0.521	1.01	0.841
C-CAL	0.524	3.008	1.089	0.808	0.542	3.167	0.649	0.98	0.512
D-H14	0.14	1.098	1.143	2.228	0.121	1.089	0.327	1.087	0.655
D-H18	0.133	0.542	1.786	2.661	0.075	0.457	0.26	0.642	1.057
D-O	0.031	4.946	0.767	0.975	0.139	5.608	0.27	0.873	0.56

逆極点図表示

Smoothing points 3	V Standar	dization Execution	Calc	Disp		
表示するデー	タ選択					
M InverseDisplay 1.14T[21/08/31] by CTR			- 0	×		
File Help Inverse[hkl] Other Average OFF Dataexpand OFF				b		
ODF		<u>\</u>		4		
LaboTex popLA StdODF ND ~		s 🗹 Other				
InverseTXTFile						
C:\CTR\DATA\Profile-Inverse\Aluminum\NEWFILE\	result.txt	A-H18		~		
[Inverse						
Max level 1.99 2D V 3D Max-value(N	/lax 1.0) 0.15	Data Disp	List Dsiplay			
WindowsWidth 800 Disp Intens. Random Le	vel 0.1	[hkl] Intens.	InverseDsiplay	/		
3DWhite ContourDisplay						
			_	, in the second		

逆極点種別選択

Other に InverseAll にする。(2回目以降は選択不要)

✓ InverseDisplay 1.14T[21/08/31] by CTR – □ >							
ile Help Inverse[hkl] Other Average OFF Dataexpand OFF							
ODF Invers	eAll						
LaboTex popLA	StdODF ND V	ools 🗹 Other					
InverseTXTFile							
C:\CTR\DATA\Profile-Inverse\Aluminum\NEWFILE\result.txt							
Inverse							
Max level 1.99 2D V	3D Max-value(Max 1.0) 0.15	Data Disp List	Dsiplay				
WindowsWidth 800	Disp Intens. Random Level 0.1	[hkl] Intens. Invers	eDsiplay				
□ 3DWhite ContourDisplay							
<u> </u>							
InverseDisplay 1.14T[21/08/31] by C	TR	_					
File Help Inverse[hkl] Other Av	TR erage OFF Dataexpand OFF	_					
File Help Inverse[hkl] Other Av	TR erage OFF Dataexpand OFF	_					
InverseDisplay 1.14T[21/08/31] by C File Help Inverse[hkl] Other Av ODF DLaboTex popLA	TR erage OFF Dataexpand OFF	ools 🔽 InverseAll					
InverseDisplay 1.14T[21/08/31] by C File Help Inverse[hkl] Other Av ODF LaboTex popLA InverseTXTFile	TR erage OFF Dataexpand OFF	- ools ⊡ InverseAll					
InverseDisplay 1.14T[21/08/31] by C File Help Inverse[hkl] Other Av ODF LaboTex popLA InverseTXTFile C:\CTR\DATA\Profile	TR erage OFF Dataexpand OFF StdODF ND Tex1 le-Inverse\Aluminum\NEWFILE\result.txt	- Tools ☑ InverseAll A-H18	- ×				
InverseDisplay 1.14T[21/08/31] by C File Help Inverse[hkl] Other Av ODF LaboTex popLA InverseTXTFile C:\CTR\DATA\Profit Inverse	TR erage OFF Dataexpand OFF StdODF ND TexT le-Inverse\Aluminum\NEWFILE\result.txt	- Tools ☑ InverseAll A-H18	- ×				
A InverseDisplay 1.14T[21/08/31] by C File Help Inverse[hkl] Other Av ODF LaboTex popLA InverseTXTFile C:\CTR\DATA\Profit Inverse Max level 1.99 2D ~	TR erage OFF Dataexpand OFF StdODF ND TexT le-Inverse\Aluminum\NEWFILE\result.txt 3D Max-value(Max 1.0) 0.15	Tools ☑ InverseAll A-H18 Data Disp List	Dsiplay				
InverseDisplay 1.14T[21/08/31] by C File Help Inverse[hkl] Other Av ODF LaboTex popLA InverseTXTFile C:\CTR\DATA\Profit Inverse Max level 1.99 2D ~ WindowsWidth	TR erage OFF Dataexpand OFF StdODF ND Tex1 Ie-Inverse\Aluminum\NEWFILE\result.txt 3D Max-value(Max 1.0) 0.15 Disp Intens. Random Level 0.1	Tools ☐ InverseAll A-H18 Data Disp [hkl] Intens.	Dsiplay seDsiplay				



3D表示や等高線の幅は、見やすくするためで意味はありません。

InverseAllソフトウエアにFWHM計算追加

backgound		Peak-Integration
Smoothing points	3	Integration ~
		Peak
		Integration
		Peak & (CalcFWHM)

Peak計算にFWHMを追加し、3D表示や等高線表示の広がりに適用 Peak



3D表示をやめて数値表示のみ



等高線間隔を 0.2 に変更して表示

InverseDisplay の Version1.15 以降は AngleData ファイルが作成される



Inverseプロファイルの表示

InverseAll 1.15ST[21/08/31] by CTR File ProfiletoDivisionProfile Condition initialize Help ArithmoticMea	− □ × n(SMpoints1) MinusData(false) Peak(Palabola5) RengeChange(false) =					
Random Inverse	Aluminum List					
MeasureData C:\CTR\DATA\Profile-Inverse\Aluminum\NEWFILE\Al-powder.ASC Disp						
□ Data select(ASC)	Asc files number					
	10 List Previous Next					
Files Select files=10	SelectFile C:\CTR\DATA\Profile-Inverse\Aluminum\NEWFILE\A-H18 DISP					
Smoothing points 3	O Execution Calc Disp					
	inversekesuitDisplay					





画面をマウス右クリックで印刷可能



 \times