アルミニウムのODF解析 (LaboTex)

2014年03月16日 *HelperTex Office* 山田 義行 <u>odfte@ybb.ne.jp</u> 目次

- 1. 概要
- 2. LaboTexの起動
- 3. 新しいデータの解析
- 4. ODF 解析
- 5. 手動で方位の確認
- 6. 再計算極点図の表示
- 7. 逆極点図の表示
- 8. VolumeFractionの計算
- 9. A1-O材の VolumeFraction 計算
  - 9.1 {114} <-1-72>を追加した理由
- 10. A1-H材の VolumeFraction 計算
- 11. A1-O材とA1-H材再計算極点図比較
- 12. A1-O材とA1-H材の逆極点図比較
- 13. A1-O材とA1-H材のODF図比較
- 14. A1-O材とA1-H材の VolumeFraction 結果比較
- 15. VolumeFraction 結果をExcelへ
- 16. Excelで開く
- 17. LaboTexによりα-Fiber比較
- 18. ODFExportデータからβ-Fiberを表示
- 19. CTRパッケージソフトウエアのODFDisplayで表示
- 20. CTRパッケージソフトウエアの FiberMultiDisplay で表示

# 1. 概要

アルミニウムO材、H材の測定「アルミニウム材料の測定とデータ補正」、「ODF解析のための準備」 で用意したLaboTex向けデータのLaboTexでの解析方法を紹介します。

#### 2. LaboTexの起動

La La	boTex - yamada User	
File	Edit View Calculation Analysis	Modelling Help
	+ 🗅 🖻 🗩 🔤 🖉 4	? ⅲ╘╘╘╘╘╘╘╘╘╘╘╘╘╘╘╘╘╘╘╘╘╘╘╘╘╘╘╘╘╘╘╘╘╘╘╘
g (H	elp	Version が確認出来ます。14/03/16 で Version 3.0.31
রা	Contents	Hundato け切約書に記載されています
<u> </u>		Upuale (a天前)音(Chl戰 C4) (C1) (C1)
	Search	

#### 3. 新しいデータの解析

About LaboTex...



# New sample/Project で選択

	~
New Sample	
Choose Experimental Data (LaboTex Experimental Pole Figure Files) • EPF C PPF C SOR C NJC C NJA C RW1 C epf Selected : 0	Crystal Symmetry O (Cubic)
C1_Triclinic.epf D6_Hexagonal.epf C2_Monoclinic.epf D_Cubic.epf C3_Tingonal.epf D_Cubic_1X1.epf C4_Tetragonal.epf D_Cubic_arb.epf C6_Hexagonal.epf D_Cubic_c2.epf D2_Orthorhombic.epf D_Cubic_d2.epf D3_Trigonal.epf T_Cubic.epf D4_Tetragonal.epf	Project Name Demo
Path C:\LaboTex2\USER\yamada.LAB\EPF\	
Info	Project Name : Demo
Choose Defocussing Correction	Sample Name
Correction Data from File     Correction Data from Formula     (COR,POW,DFB,ASC,PFG,NJA,DAT,POL,NJC,COA,RWA,UXD,EXP)     Cor(1x1).cor     Cor(5x5).cor	N013W70 D_Cubic D_Cubic_1x1 D_Cubic_arb D_Cubic_c2 D_Cubic_22 s_orient testcube
	Sample Name :
Cancel Create of Binary File in LaboTex Form	at (Corrected Pole Figure(s) (CPF))

Path で EPF ファイルを選択する。

×.	CTR	Þ.	DATA 🕨	Aluminum-H-O	۱.	Aluminum-O	LaboTex	۱.	CW	-	4.		CWの検索
	~					, and the second second					- 7	1 1	CHONEN

					- 1
*	名前	<u>^</u>	更新日時	種類	サイズ
	🔡 Al-O		2014/03/16 5:35	Exchange Certifi	35 KB

New Sample	×
Choose Experimental Data (LaboTex Experime © EPF C PPF C SOR C NJC C	ntal Pole Figure Files) NJA C RW1 C epf Selected : 1 O (Cubic)
Al-O.epf	Project Name Demo
Path C:\CTR\DATA\Aluminum-H-0\Al Info 111_chB02D1S_2.TXT 200_chB02D1S	uminum-O\LaboT Al-O.epf _2.TXT 220_ch802D1S_2.TXT Project Name : Demo
Choose Defocussing Correction	Sample Name At2-2
Correction Data from File     (CDR,PDW,DFB,ASC,PFG,NJA,DAT,POL,N     Cor(1x1).cor     Cor(5x5).cor	C Correction Data from Formula JC,CDA,RWA,UXD,EXP) 0_Cubic 0_Cubic_arb 0_Cubic_c2 0_Cubic_d2 s_orient testcube
Path C:\LaboT ex2\USER\yamada.LA	
Cancel	Create of Binary File in LaboTex Format (Corrected Pole Figure(s) (CPF))

LaboTexの defocus モードを外して、Create する。

Project Demo	Al-O	
Crystal Symmetry	ubic	
Cell Parameters (Relative)		
a 1.00 b 1.00 c	1.00 ∝ 90.0 β 90.0 γ 90.00	
Description		
111_chB02D1S_2.TXT 200_c	hB02D1S_2.TXT 220_chB02D1S_2.TXT	
PF Data Files		
Al-O.epf		
	P <sub>I</sub> → P	
	Counter-clockwise 🔲 Reverse radial direc. 🔲	
	None (Start PF Registration from RD)	
	C 90 deg (Start PF Registration from TD) C 180 deg	
Calculations Progress		
Merge (files) 1		BUN->END でデータガ LaboTox
Conversion		
		画面に取り込まれる。

File Edit View Calculation Analysis Modelling Help	
🔕 🕂 🗅 🖆 🖉 📾 🖉 🗮 🛛 🖽 🖾 🖾 🖾 💷 😾 🗠	7
CPF NPF RPF APF INV ODF 111 200 220	

# 4. ODF 解析

ODF 解析はメニューの碁盤の目をマウスクリック



C monoclinic to axial

custom to axial

Ċ

orthorhombic to axial

Min=0.000 Max=6.569

2014/03/16

# <sup>象</sup> <sup>Q</sup> <sup>Q</sup> RUN ODF CALCULATION で ODF 計算が行われる。



#### 5. 手動で方位の確認

ODF 図上の $\phi 2 = 0$ の方位密度の Max 点をクリックする。



対称 menber も表示される。OK で (HKL) [UVW]で計算された Euler 角度位置に+が表示される。

6. 再計算極点図の表示

メニュー部分を非選択にして、RPF を選択、極点図を選択



7. 逆極点図の表示



ND=001,TD=010,RD=100 である。

8. VolumeFractionの計算



Crystal Sy O	mmetry (Cubic)	Sample	Symm Drthor	netry nombic		- Gr	id Cells for	Output ODF	0	Ŧ	Step 0.50 Diagram Range +/- 45.0
00.0%	Centre of D	ientation	1	00.0%		Centre	of Orientati	ion	100.0%		Centre of Orientation
, 0.50	) <mark>ғұнм</mark> <mark>ғ</mark> =	10.0	- 45.0	0.	50	FYHM¢	<b>)</b> = 10.0	45	.0 0	0.50	<b>F¥HM 12</b> = 10.0 45.0
No	Texture Compon	ent	On T	Distribu	ition	ENHM 🖗	<del>FWHM</del> Φ	FWHM \$2	Fraction		Show Sym. Eq.
1 10	01)<100>c	ube		Gauss	Ψ.	10.0	10.0	10.0		*	(U U 1)< 1 U U> cube
2 10	0181005	-		Gauss		10.0	10.0	10.0	28 🛨	*	Calculation Mode
3 10	1020013			Gauss	~	10.0	10.0	10.0		/0 0/	<ul> <li>Automatic</li> <li>C Manual</li> </ul>
4 10	1321005			Gauss	-	10.0	10.0	10.0		14	
5 10	10%00130	oss 🔻		la auss	Ψ	10.0	10.0	10.0		%	Max. Iteration Number : 1,000
6 1 2 7	31/(-34-6>5	4		Cause	~	10.0	10.0	10.0		*	Max. Fit Error % (*1000) :   100 ;
0 1 1	31/(3-46)5	2		Cause	~	10.0	10.0	10.0		~~ ~/	Iteration :
9 1/ 2	1 2 2 . 2 . 6 4 5 5	2 -		Gauce	-	10.0	10.0	10.0		~	Fit Error% (*1000) :
10 ( 1	23241.25	-		Gauss	-	10.0	10.0	10.0		2	Fit Calculation Progress
✓ Max. Linearity	Orientation Set S	et from Datab	ase (s	ort by 👻	1	Save Currer	t Set B	ackground	6	%	
										t	

可能性のある結晶方位が表示され、Startで Volume Fraction 計算が始まる。

今回は、O材とH材の比較を行うために、双方の可能性のある方位を含めて定量を行う。 VolumeFractionの計算は指定された方位位置のEuler角度と方位密度を振った計算の為 Errorが変化しなくなるまで繰り返すため、長時間を要す。

又、VolumeFraction 計算したODF図と入力極点図のODF図を比較して、BataBase に 結晶方位を追加して Error を下げることも同時に行う事も必要になります。

## 9. A1-O材の VolumeFraction 計算



**VolumeFraction** が計算される。 左側は入力極点図から計算した **ODF** 図

右側は、VoluemFraction から計算した ODF 図



ODF図はExport出来ます。



9.1 {114} <-1-72>を追加した理由

{114}<-1-72>なしで定量を行い、再計算ODF図をみると、オリジナルODF図と異なります。



この異なる部分の方位{114}<-1-72>を DataBase 追加して計算した結果



良い結果になります。

# 10. Al-H材の VolumeFraction 計算

Quantitative Analysis - Model Functions Method - Project: Demo Sample:Al-H Job:1										
Cryst.	al Symmetry Samp (Cubic)	Step 0.50 Diagram Range +/- 45.0								
100.0% Misfit Good Backor Diff.	Centre of Orientation	10	00.0%	Centre	of Orientatio	on	100.0%	Centre of Orientation	<mark>Q</mark> 1	
	-45.0	45.0	-45.0			45	.0 -45.	0 45.0		
No	Texture Component	On	Distribution	FYHM 🆗	г₩нмФ	FYHM 🖗	Volume Fraction	Show Sym. Eq.		
1	{ 0 0 1 }< 1 0 0 > cube	- 1	Gauss 👻	16.2	29.6	20.9	4 2 %	{ 1 1 4}< 1 -7 2>	-	
2	{510}<001>	<b>→</b> 12	Gauss 👻	23.1	22.6	23.1	0 🗄 %	Calculation Mode		
3	{013}<100>	- 12	Gauss 👻	24.9	23.5	22.5	1 🗄 %	Automatic C Manual		
4	{110}<001> goss	- IV	Gauss 👻	24.9	20.6	18.3	3 🕂 %			
5	{ 1 3 2}< 6 -4 3> S-1	<b>▼</b> 🗹	Gauss 👻	16.3	14.4	16.5	23 🕂 %	Max. Iteration Number : 🚺 1,000 📑	-	
6	{ 1 2 3}< 4 1-2> R	<b>▼</b> 🗹	Gauss 👻	22.3	19.2	20.4	10 🕂 %	Max. Fit Error % (*1000) : 🗾 100 📑	-	
7	{ 1 1 2 }< 1 1 ·1 > copper	<u> </u>	Gauss 👻	25.6	18.2	24.3	6 🕂 %	June 10 503	-	
8	{ 1 1 0 }< 1 -1 2 > brass	<u> </u>	Gauss 👻	20.2	18.2	19.5	15 🕂 %	Titeration : 000	_	
9	{0 613}< 1 0 0>	- 12	Gauss 👻	15.8	18.1	18.2	11 🕂 %	Fit Error% (*1000) :   79896.	_	
10	{ 1 1 4}<-1 -7 2>	- ⊻	Gauss 👻	16.8	17.4	20.3	25 🕂 %	Fit Calculation Progress		
☑ M Line	ax. Orientation Set SET6		<b>S</b>	ave Curren	t Set	ickground	2 %			
	Change Initial Param	eters		Start Vo	lume Fracti	on Calculati	ion	Exit Exit and Show	]	

VolumeFraction が計算される。 左側は入力極点図から計算した ODF 図



ODF図はExport出来ます。

右側は、VoluemFraction から計算した ODF 図



## 11. A1-O材とA1-H材再計算極点図比較



12. A1-O材とA1-H材の逆極点図比較



13. A1-O材とA1-H材のODF図比較



Levels 14.5 12.8 11.1 9.4 7.7 6.0 4.3 2.0 1.6 1.3 1.0 0.7 =0.000

Min=0.009 Max=16.052 2014/03/16

## 14. A1-O材とA1-H材の VolumeFraction 結果比較

## CTRパッケージソフトウエアの CompareVolumeFrtaction で比較できます。

CompareVolumeFraction 1.02XT[14/10/31] by CTR	
File Help	
Inputfile : LaboTex-Texture-Quantative Analysis Report	
C:\LaboTex2\USER\yamada.LAB\O-Cubic.LAB\Demo.LAB\AI-O.LAB\Job03\AI-O.POD	Disp 🔽
C:\LaboTex2\USER\yamada.LAB\O-Cubic.LAB\Demo.LAB\AI-H.LAB\Job03\AI-H.POD	Disp 🔽
	Disp 🗌
%display BackGroundAlfa(1.0:gray 0.0:white)	

GrahDisp で表示する。



# 15. VolumeFraction 結果をExcelへ

%display	BackGroundAlfa(1.0:gray 0.0:white)	0.5	GraphDisp	TextDisplay	Cancel
TextD	i s p l a y でデータを表	示			

실 TextDispla	y 1.11S c:¥C	TR¥work¥Compa	reVolumeFracto	on¥Paitext.t	xt				22
File Help									
Samplenam	e cube	{510}<001>	{013}<100>	goss	S-1	R	copper	brass	
AI-O.POD	19.1	7.0	0.1	3.3	8.9	12.1	2.3	1.2	
AI-H.POD	4.1	0.0	0.8	3.1	23.1	10.0	6.1	14.9	

# TextDisplay 1.11S c:¥CTR¥work¥Comp

File Help		
Load	e cube <u>1</u> 9.1	{510}<001> 7.0
Save	4.1	0.0
Exit		

Save で TEXT データとして f i l e を書きだします。

<u>▲</u> 保存	1	1.1	 10.1	×
保存:	🔒 CompareVolumeF	racton	- 🦻 📂 🛛	
最近使った項 目	<table-of-contents> Pai 🗐 Paitext</table-of-contents>			
デスクトップ	ファイル名(N): Pa ファイルのタイプ(T): す	itext.txt «ፕወጋァイル	▼	【 <u>保存(S)</u> 取消

名前	更新日時	種類	サイズ
🖳 Pai	2014/03/16 9:41	テキスト文書	1 KB
Paitext	2014/03/16 9:49	テキスト文書	1 KB

テキスト ファイル ウィサ	fード - 2 / 3					2 X			
フィールドの区切り文字を指定してください。[データのブレビュー] ボックスには区切り位置が表示されます。									
区切り文字 ◎ タブ(1) □ セミコロン(M) □ カンマ(C) □ スペース(S) □ その他(Q):									
データのプレビュー( <u>P</u> )	データのプレビュー(P)								
Samplename cube {510	}<001> {013}<100> goss	S-1 R	copper br	rass {0613}<10	00> {114}<-1-72)	) Other 🔺			
AI-0.POD 19.1 7.0		8.9 12.1	2.3 1.	2 7.3	18.6	20.19			
AI-N.FOD 4.1 0.0	0.0 0.1	20.1 10.0	0.1 14		20.4	T.01 -			
<pre></pre>									
	キャンセル 〈戻る(B) <u>次へ(N)</u> 完了(F)								

Ŧ	<b>C.</b>	) 🖬 🤊 -	<b>(</b> ?/ ▼) ₹					Paitext	- Microsoft E	xcel			
		ホーム	挿入 /	ページ レイアウト	た楼	データ 相	交閲 表示						
	ľ	<b>*</b> [	MS Pゴシック	<b>→</b> 11	• A *	= = =	• 🗞 -	ず 標準		•			⊶挿入 ▼ Σ ≫ 削除 ▼ □
	貼り	付け 🍡 🛛	BI <u>U</u> -	-	<u>A</u> - <u>#</u> -			æ• 🕎•	% , .0	-00 条件付き 書式▼	* テーブルとして 書式設定 *	セルの スタイル +	▲ 法 ● 2
7	クリップ	/ボード 回		フォント	G	Ē	置	Gi i	数値	G.	スタイル		セル
		I1 6	•	(• <i>f</i> x									
		A	В	С	D	E	F	G	Н	I	J	K	L
4	1	Samplena	rrcube	{510}<001>	{013}<100>	goss	S-1	R	copper	brass	{0613}<100	{114}<-1-7	Other
4	2	AI-O.POD	19.1	7	0.1	3.3	8.9	12.1	2.3	1.2	7.3	18.6	20.19
-	3	AI-H.POD	4.1	0	0.8	3.1	23.1	10	6.1	14.9	10.9	25.4	1.51
F	3	AI-H.POD	4.1	0	0.8	3.1	23.1	10	6.1	14.9	10.9	25.4	1.5

**▼** 4<del>3</del>

#### 17. LaboTexによりα-Fiber比較

FCCの $\alpha$ -fiber(110)//NDは  $\phi$ 2断面における、 $\Phi$ =45の $\phi$ 1が0->35.0の分布である。 LaboTexでは2D表示で実現している He Edit View Calculation Analysis Modelling Help  $\widehat{\phi}$  + D  $\widehat{\phi}$  意味 の 2 囲脈隠隠隠隠隠隠  $\widehat{\phi}$  四  $\widehat{\phi}$  本 R ( $\widehat{\phi}$  i 2D) の # FIF Her Ref PET INV OUF J1 J2 J3 9 7 7  $\phi$  0









# 18. ODFExportデータから $\beta$ -Fiberを表示

## ODF図の Export は LaboTex-FileODF Export-Export(Phi1,Phi2,Phi)Fill range で行う

L	aboTex - yamada User		
File	Edit View Calculation Analysis	M	odelling Help
	New Sample/Project		🎟 🖽 🖽 🔃 🔃 🔛 💷 🐨 🗸 🖍 🔊 💊 🗛 🖪
	Open Sample Change/New User		2Φ
	ODF Export	F	ODF Export (Phi 1 Section)
	PF Export		ODF Export (Phi 2 Section)
	EPF/PPF/COR/POW/SOR Export		ODF Export (Phi 1, Phi 2, Phi, Odf) Basic area
	Print		ODF Export(Phi1,Phi2,Phi) Full range
	Print Setup		$\sim \sim $
	Crystal Symmetry		
	Recent Sample	١.	
	Exit		< <u> </u> '\_  < <u> </u> '\_  < <u> </u> '\_  < <u> </u> ''\_  < <u> </u> '''
		• •	

Al-O 材、Al-H 材の LaboTex-Cw 以下に登録する。

Export ODF as Text file (Phi 1,Phi 2, Phi, ODF)				1.000	×
🕞 💭 📲 🕊 windows7-64 (C:) 🔸 CTR 🕨 DATA 🕨 Aluminum-H-O 🕨 Aluminum-O 🕨 Labo	oTex	▶ CW	▼ \$ <sub>7</sub>	CWの検索	Q
整理 ▼ 新しいフォルダー	_			1	i 🔹 🔞
	*	名前		^	更新日時
■ コンピューター			10 ± 5 m .		
🏭 windows7-64 (C:)			検察条件に一	·致する項目はありませ,	h.
🝙 Windows-XP (D:)					
👝 windows7-32 (E:)	Ξ				
👝 HelperTex-Office-DATA (G:)					
P-Source-D2 (H:)					
👝 Windows-XP-D0 (I:)					
🕞 NO2-4-DATA-D1 (J:)					
keese (17.)	-	•			۲.
ファイル名(N): Al-O					-
ファイルの種類(T): LaboTex ODF Text Files (*.TXT)					•
● フォルダーの非表示				保存(S) =	キャンセル



19. CTRパッケージソフトウエアのODFDisplayで表示

▲ ODFDisplay2 1.30YT[14/10/31] by CTR	
File RoeModeEnable Help 3dispODF OtherODF Cubic	
_ODF	
🔽 LaboTex 📄 popLA 📄 StdODF 📄 TexTools 📄 StdODF(c:¥OD 📄 Bunge	
ODFTXTFile(or ODF15)	
Contour(Max=40)	
( ▲ 開く	<u> </u>
 Si ファイルの場所(D: 🌗 CW 🔹 🦻 📂	<b></b> -
Di 目 Al-O	
デスクトップ         ファイル名(N):         AI-O.TXT           St         ファイルのタイプ(T):         *txt,*.Txt,*.TXT	開((O) 取消
	J

💁 ODFDisplay2 1.30YT[14/10/31] by CTR
File RoeModeEnable Help 3dispODF OtherODF Cubic
_ODF
🔽 LaboTex 📄 popLA 📄 StdODF 📄 TexTools 📄 StdODF(c:¥OD 📄 Bunge
ODFTXTFile(or ODF15)
C:¥CTR¥DATA¥Aluminum-H-O¥Aluminum-O¥LaboTex¥CW¥AI-O.TXT
Contour(Max=40)
ODFMax= 49.0704 DispMax 49 Steplevel 1 Number=40
Sample Symmetry( \$\phi 1)
Monoclinic φ1 range set φ1 range 0->90 -
Display
Bunge Roe
Phi1 Phi2 PHI Phi1 O RINT all
Smoothing
Cycle 1  Center points 9 Display

Dislpay で ODF 図を表示

メニュー・Fiber・FCC・ $\beta$ ・Sskeleton で $\beta$ ・fiber を表示



## ファイルが作成され、表示される。

▶ CTR ▶ DATA ▶ Aluminum-H-O ▶ Aluminum-O ▶ LaboTex ▶ CW ▶								
む 新しい	フォルダー							
	名前	更新日時	種類	サイズ				
	퉬 FIBER	2014/03/16 10:09	ファイル フォル					
	📴 Al-O	2014/03/16 5:35	Exchange Certifi					
	🖳 Al-O	2014/03/16 10:02	テキスト文書	7,895 KB				
CTR DATA	Aluminum-H-O	Aluminum-0 🕨 LaboTe	X CW FIBER	_				
ら 新しいフォ	+ルダー							
•	名前	*	更新日時	種類	ĥ			
	FCC-beta-fiber-ODF	SMOFF-SMOFF	2014/03/10	5 10:09 テキス	スト文書			

Al-H 材も同様に $\beta$ -Fiber 表示する。

# 20. CTRパッケージソフトウエアの FiberMultiDisplay で表示

Si FiberMultiDisplay 1.01XT[14/10/31] by CTR			- • ×
File Help			
C:#CTR#DATA#Aluminum-H-O#Aluminum-O#LaboTex#CW#FIBER#FCC-beta-fiber-ODFSMOFF-SMOFF.TXT	Dispselect	DispTytle AI-O	
C:#CTR#DATA#Aluminum-H-O#Aluminum-H#LaboTex#CW#FIBER#FCC-beta-fiber-ODFSMOFF-SMOFF.TXT	<ul> <li>Dispselect</li> </ul>	DispTytle AI-H	
	O Dispselect	DispTytle NO 3	
	Dispselect	DispTytle NO 4	
	Dispselect	DispTytle NO5	
	O Dispselect	DispTytle NO6	
Main Tytle FCC-beta-fiber(Skeleton)		Disp	lay

