

極点図から `random` を評価する

概要

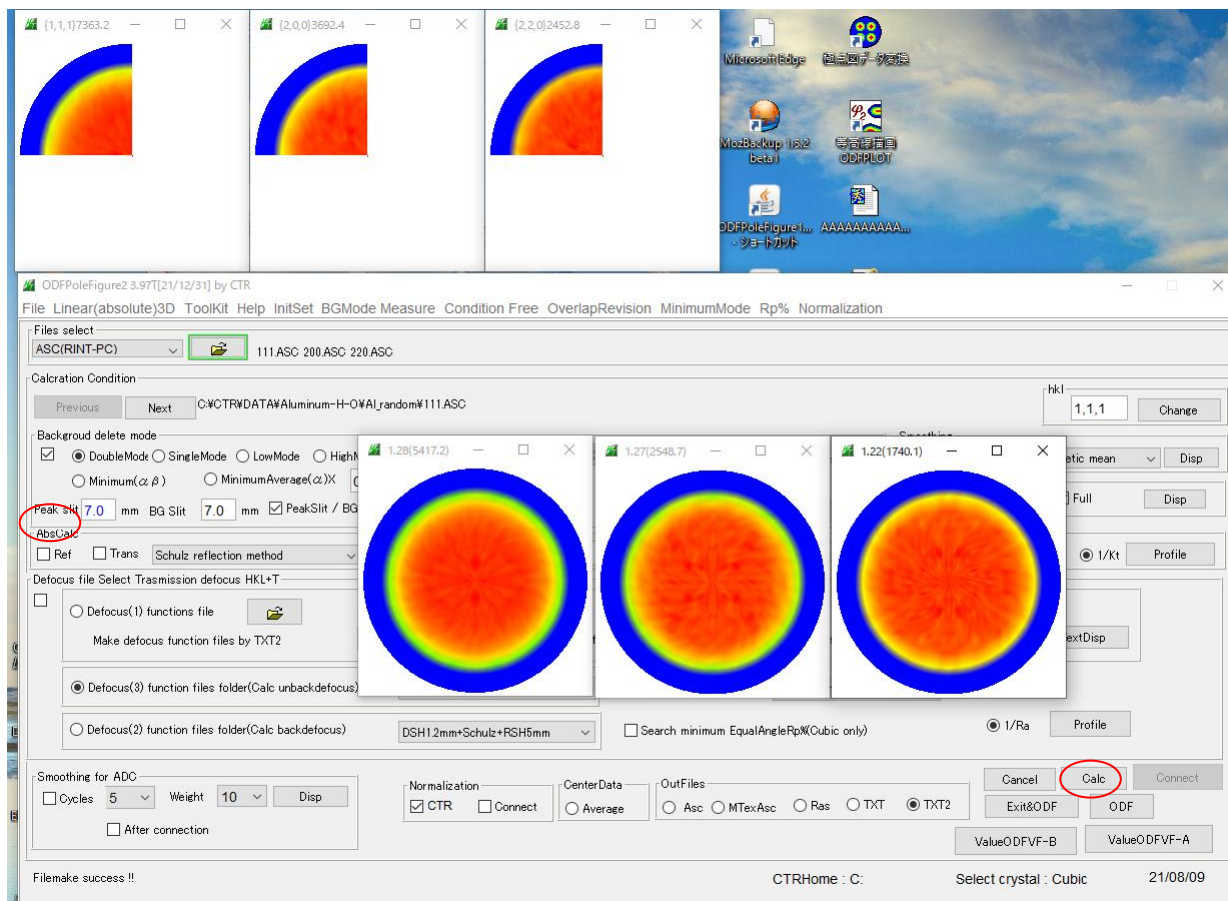
配向材料の random 成分 (%) は ODF 図の random 分布から計算できます。

以下に、粉末試料の極点図から defocus 曲線を作成し、自分自身に defocus 補正を行い、ODF 解析を行ってみます。粉末は $\text{random} = 100\%$ が期待できます。

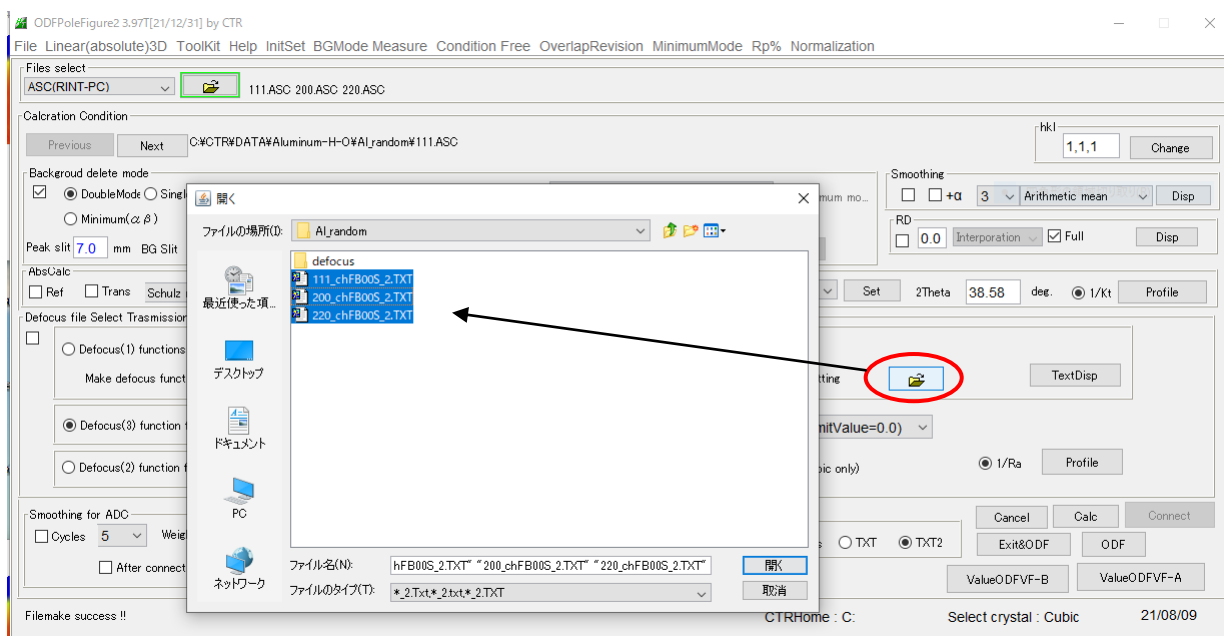
更に、実際の配向材の random レベルを求めてみます。

Data は、C:\CTR\DATA\Aluminum-H-O\Al_random\111.ASC (RINT2200 で測定)

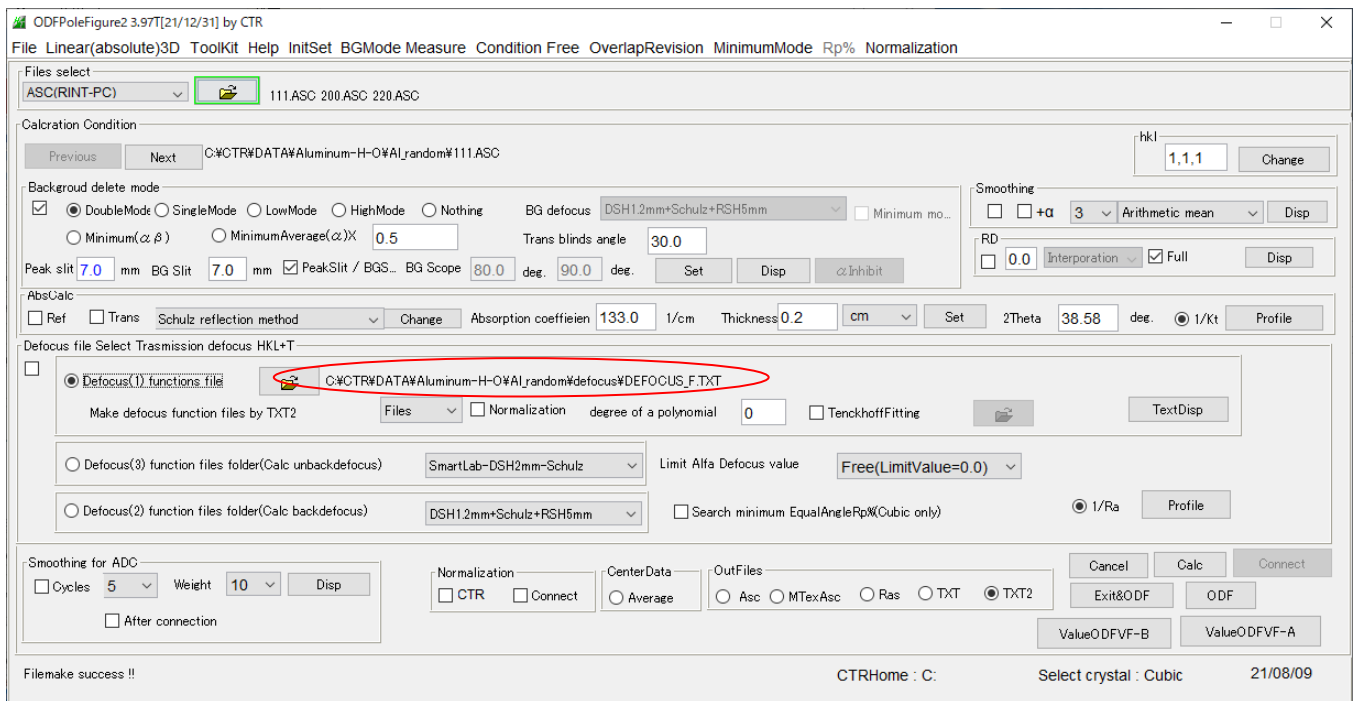
測定データから background 処理



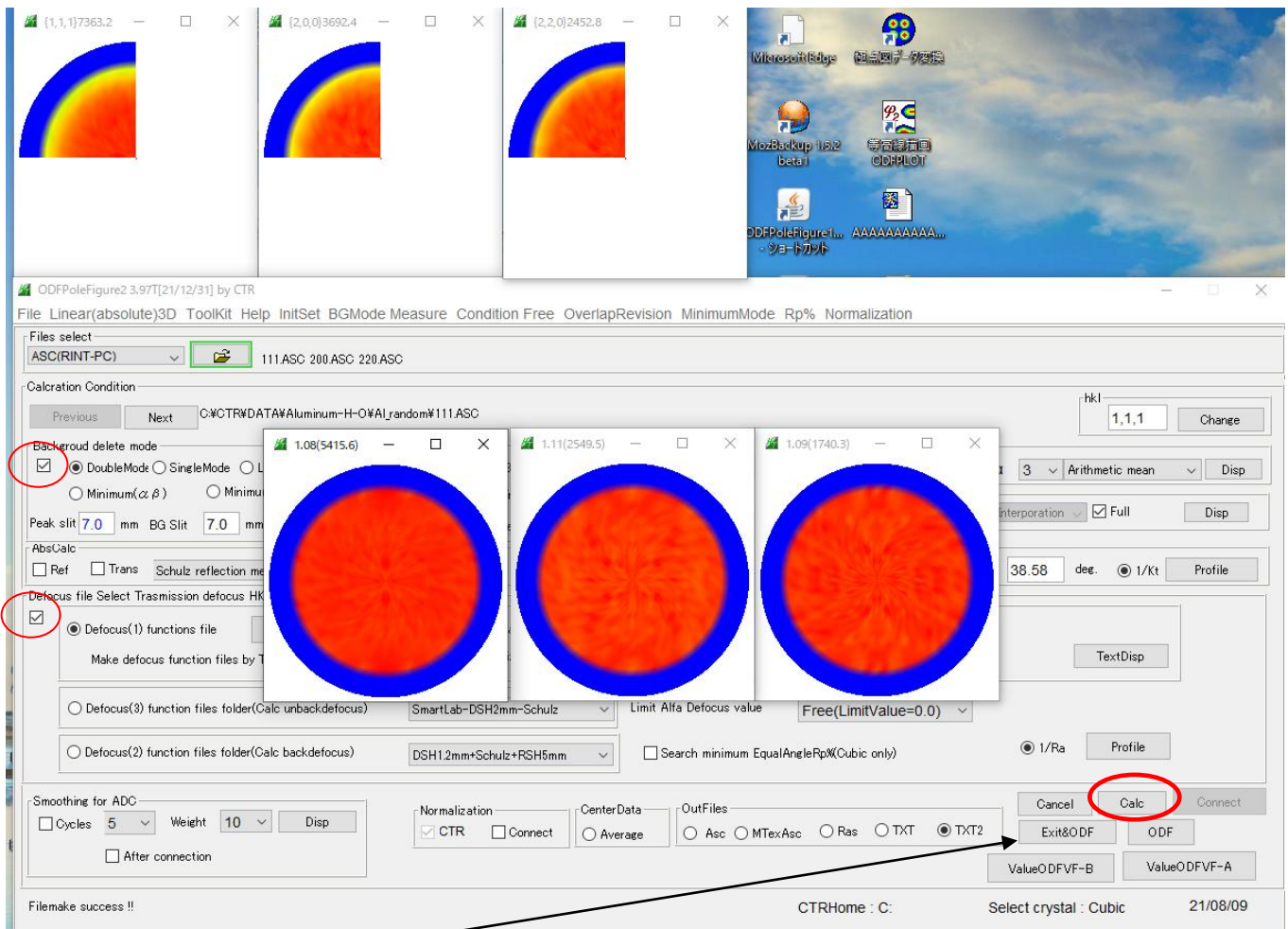
処理結果から defocus 曲線作成



登録した d e f o c u s ファイルが表示される



では、粉末試料に d e f o c u s 補正を行います



このデータの ODF 解析を行い r a n d o m レベルを求める

File

Option

Symmetric

Software

Data

Help

Lattice constant

Material

Aluminum.txt

Structure Code(Symmetries after Schoenfiles)

cif

7 - O (cubic)

a

1.0

<=b

1.0

<=c

1.0

alpha

90.0

beta

90.0

gamma

90.0

Initialize

Start

getHKL<-Filename

AllFileSelect

PF Holder

C:\CTR\DATA\Aluminum-H-O\Al_random

PF Data

SelectFile(TXT(b,intens),TXT2(a,b,intens))	h,k,l	2Theta	Alpha scope	AlphaS	AlphaE	Select
111_chFB00D1S_2.TXT	1,1,1	38.58	0.0->75.0	0.0	75.0	<input checked="" type="checkbox"/>
200_chFB00D1S_2.TXT	2,0,0	44.82	0.0->75.0	0.0	75.0	<input checked="" type="checkbox"/>
220_chFB00D1S_2.TXT	2,2,0	65.18	0.0->75.0	0.0	75.0	<input checked="" type="checkbox"/>
	2,1,0	0.0		0.0	0.0	<input type="checkbox"/>
	2,1,1	0.0		0.0	0.0	<input type="checkbox"/>
	3,1,1	0.0		0.0	0.0	<input type="checkbox"/>
	4,0,0	0.0		0.0	0.0	<input type="checkbox"/>
	3,3,1	0.0		0.0	0.0	<input type="checkbox"/>
	4,2,2	0.0		0.0	0.0	<input type="checkbox"/>
	5,1,1	0.0		0.0	0.0	<input type="checkbox"/>
	5,2,1	0.0		0.0	0.0	<input type="checkbox"/>
	5,3,1	0.0		0.0	0.0	<input type="checkbox"/>

Comment

111_chFB00D1S_2.TXT 200_chFB00D1S_2.TXT 220_chFB00D1S_2.TXT

Symmetric type

Full

Center Data

Average

Epf file save

Labotex(EPF),popLA(RAW) filename

labotex

ODF Calculation (Finished)

Rp

dRp

Iteration

Iteration

Calculation Progress (100.0 %)

Cycle	Iteration(Max = 30)	Iteration (total)	Rp[%](Lim. = 1.00)	dRp[%](Lim. = 1.00)
3	10	36	1.63	0.97
3	11	37	1.63	0.97

Creation of inverse figures file INV

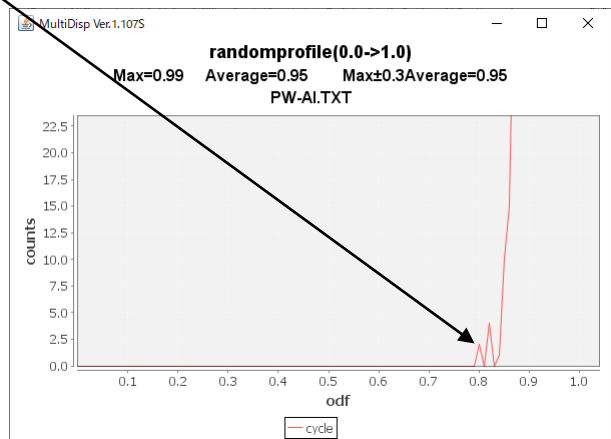
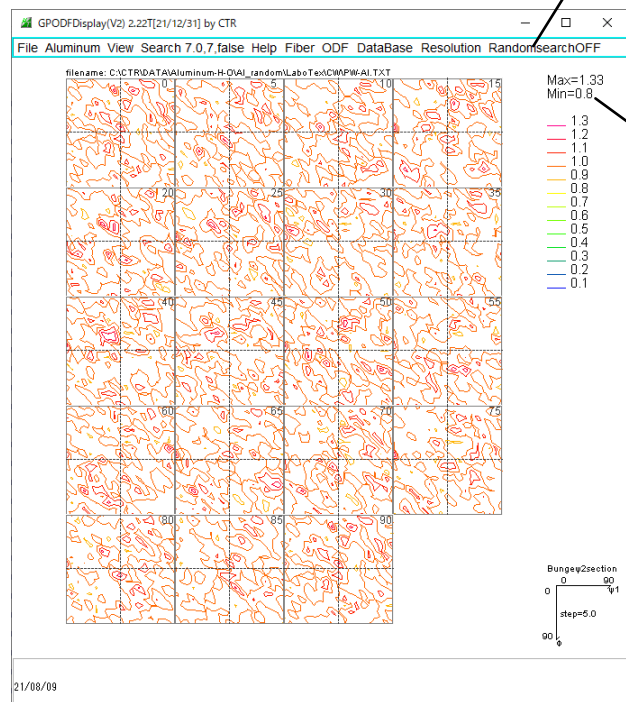
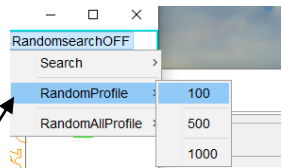
Creation of inverse figures file INV

Creation of inverse figures file INV

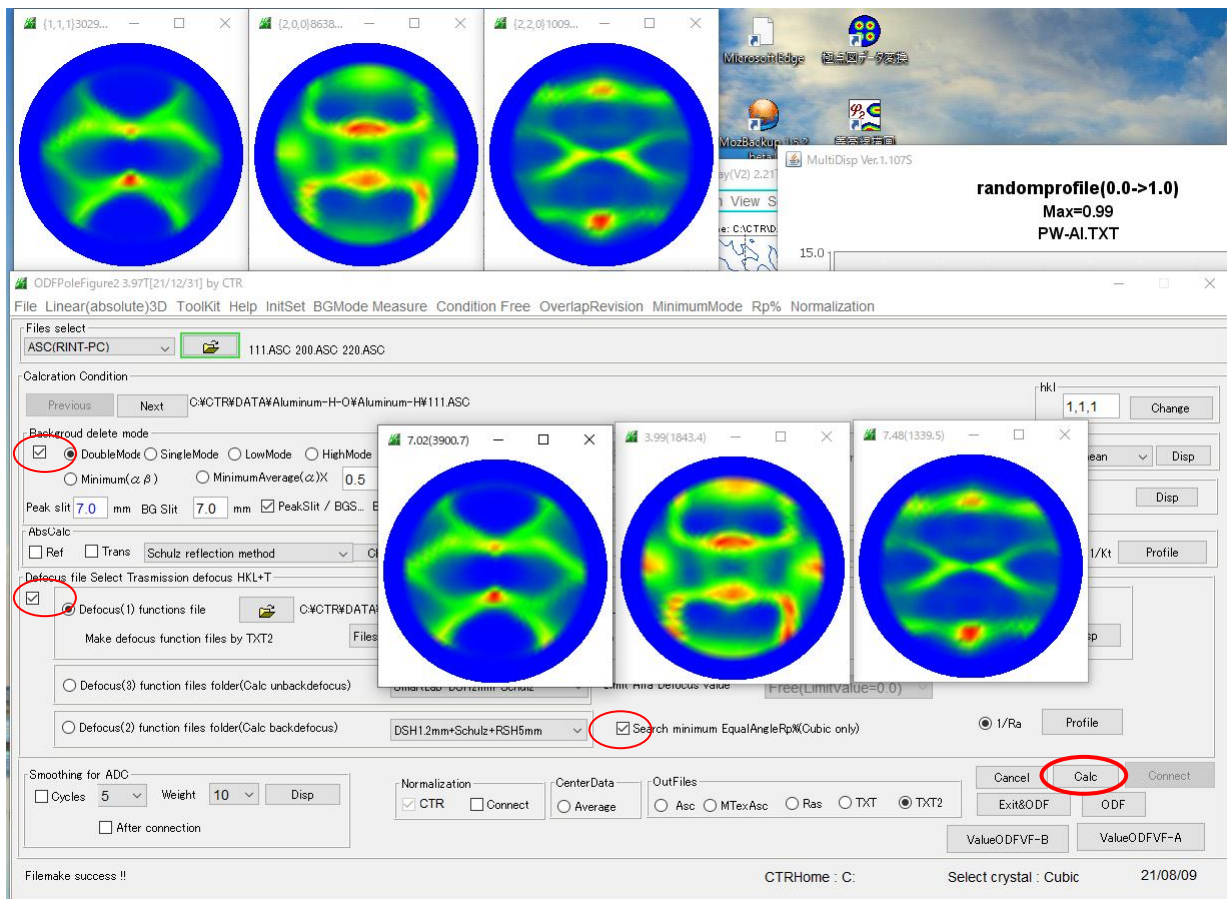
Calculation Break

End

Calculation Break

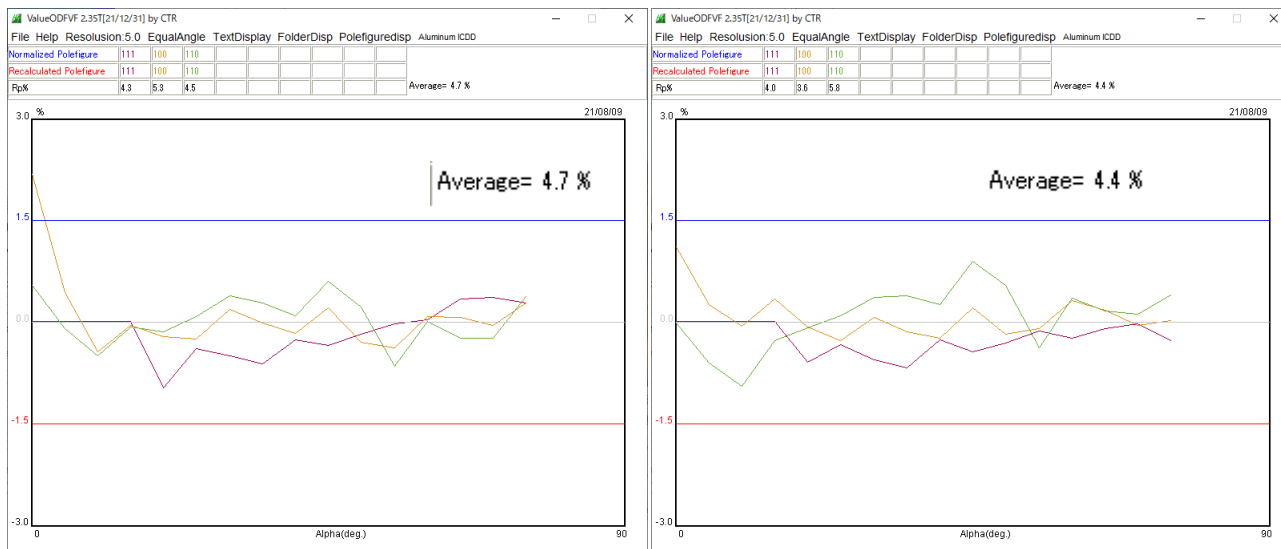


randomレベルは99%であるが、0.9から1.0に広がりがあり、平均値95%
本来randomサンプルでは、最大値1.0、最小値1.0で100%に定量されるが



最適化 Rp%以前

最適化 R p % の結果



この結果を ODF 解析し、randomレベルを求める

Lattice constant

Material

Aluminum.txt

Structure Code(Symmetries after Schoenflies)

cif

7 - O (cubic)

a

1.0

<=b

1.0

<=c

1.0

alpha

90.0

beta

90.0

gamma

90.0

Initialize

Start

☒ getHKL<-Filename



AllFileSelect

PF Holder

C:\CTR\DATA\Aluminum-H-O\Aluminum-H

PF Data

SelectFile(TXT(b,intens),TXT2(a,b,intens))	h,k,l	2Theta	Alpha scope	AlphaS	AlphaE	Select
111_chB00D1S_2.TXT	1,1,1	38.5	0.0->75.0	0.0	75.0	<input checked="" type="checkbox"/>
200_chB00D1S_2.TXT	2,0,0	44.73	0.0->75.0	0.0	75.0	<input checked="" type="checkbox"/>
220_chB00D1S_2.TXT	2,2,0	65.1	0.0->75.0	0.0	75.0	<input checked="" type="checkbox"/>
	2,1,0	0.0		0.0	0.0	<input type="checkbox"/>
	2,1,1	0.0		0.0	0.0	<input type="checkbox"/>
	3,1,1	0.0		0.0	0.0	<input type="checkbox"/>
	4,0,0	0.0		0.0	0.0	<input type="checkbox"/>
	3,3,1	0.0		0.0	0.0	<input type="checkbox"/>
	4,2,2	0.0		0.0	0.0	<input type="checkbox"/>
	5,1,1	0.0		0.0	0.0	<input type="checkbox"/>
	5,2,1	0.0		0.0	0.0	<input type="checkbox"/>
	5,3,1	0.0		0.0	0.0	<input type="checkbox"/>

Comment

111_chB00D1S_2.TXT 200_chB00D1S_2.TXT 220_chB00D1S_2.TXT

Symmetric type Full

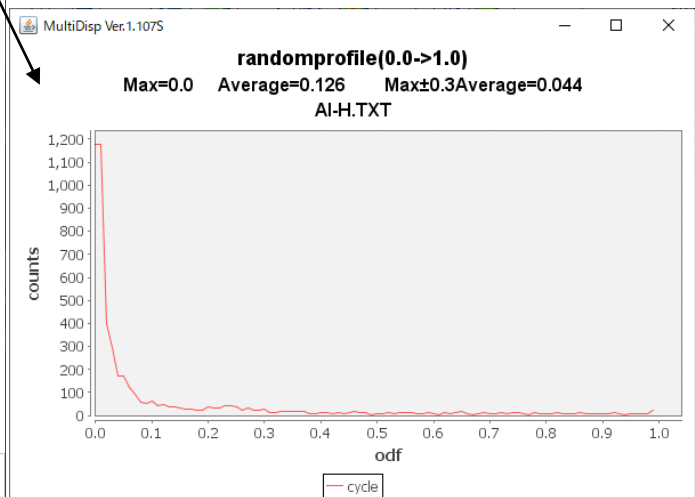
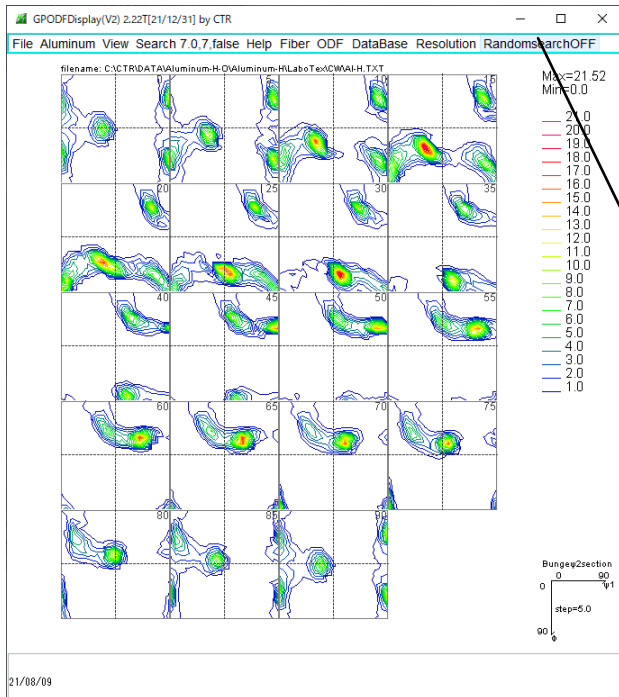
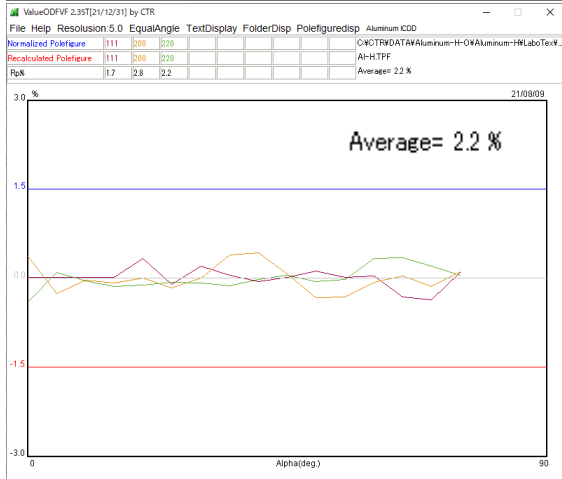
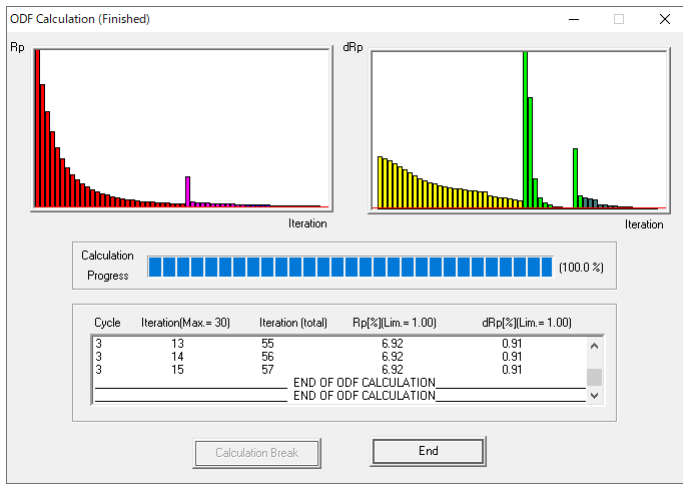
CenterData

☒ Average

Epf file save

Labotex(EPF),popLA(RAW) filename

Al-H

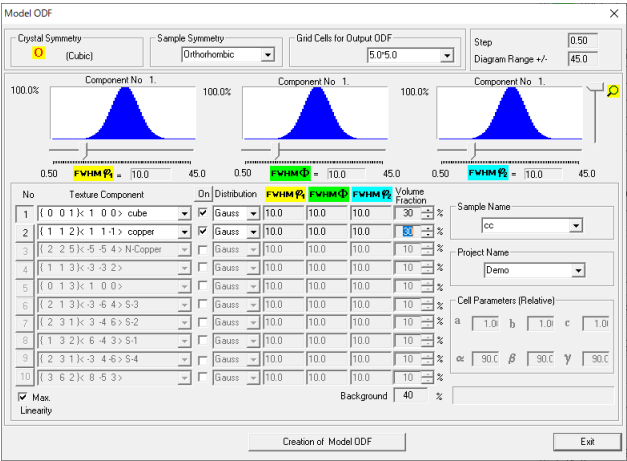


randomレベル0. 0→1でrandom成分は0%です。

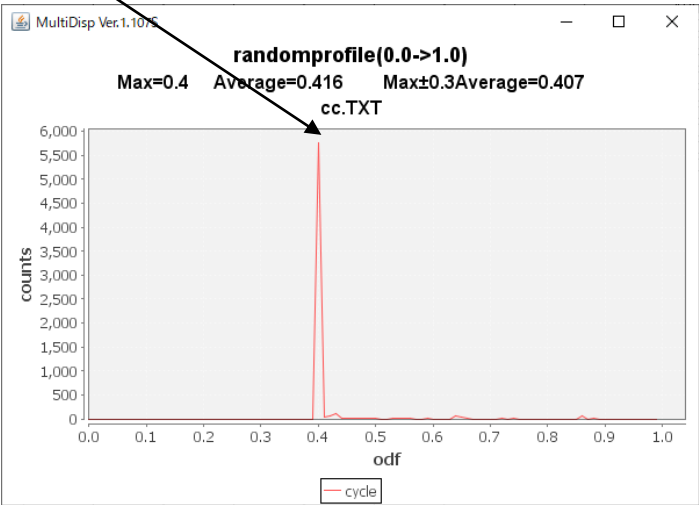
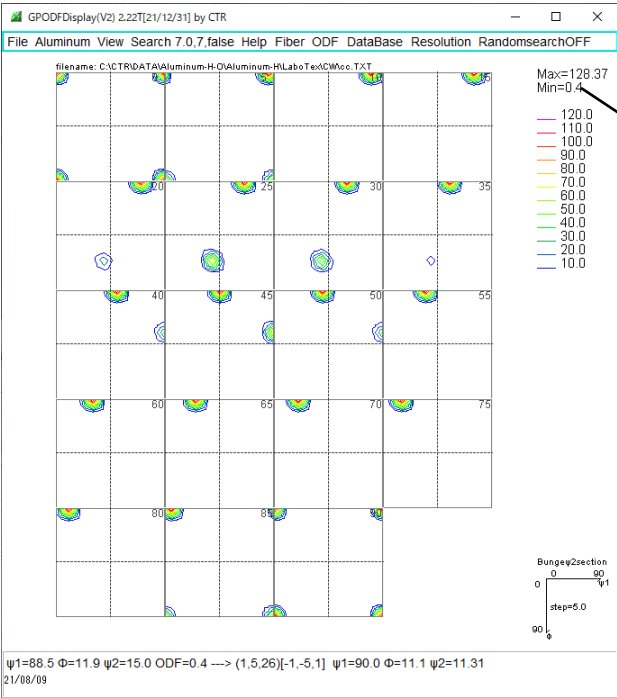
しかし広がりを持ち、平均値で4. 4 %

random方位は1. 0以下で方位が集中する部分に現れます。

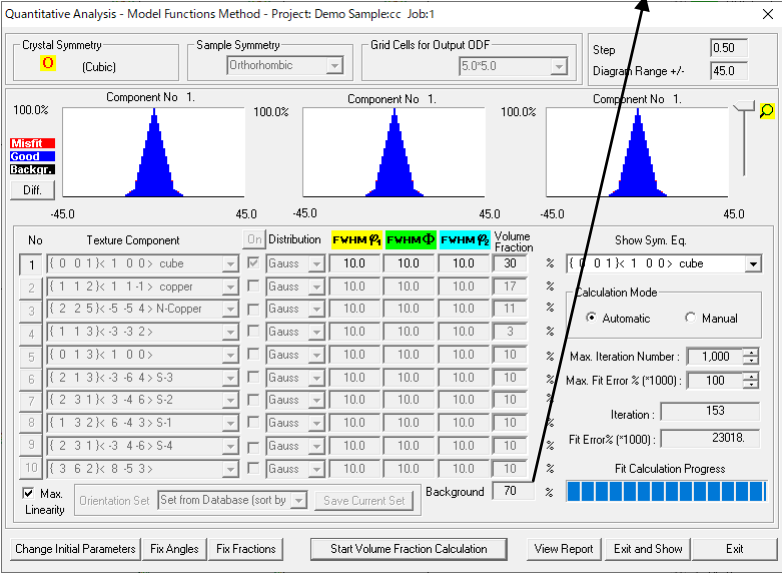
LaTeXの方位シュミレーション



この場合、background=40%、randomレベルは0.4になります。

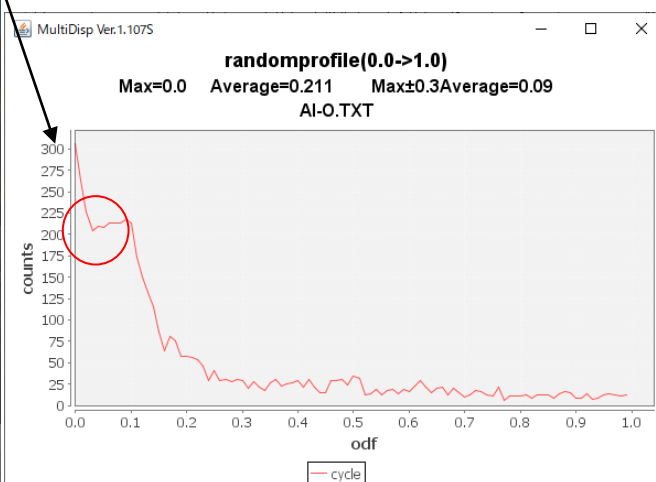
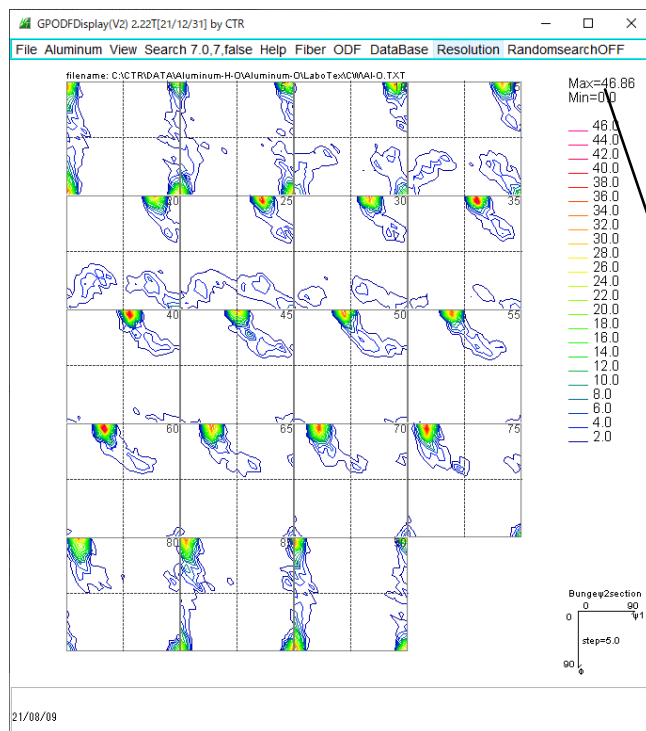
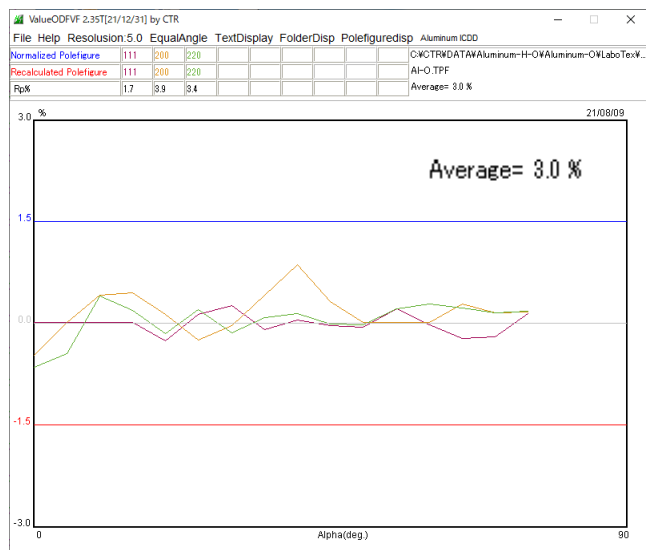
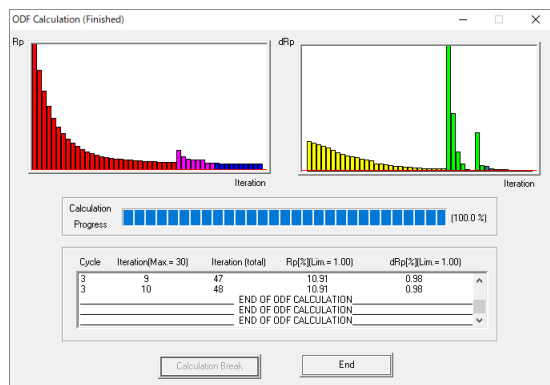


cubeのみで volumeFraction を計算すると Background=random (40%) + copper (30%)



ただし、2つの方位が近い場合、指定しない方位が片方に取り込まれる可能性があります。

同様に O 材を調べてみます



r a n d o m プロファイルから H 材に比較し、プロフィールに広がりがあるため 9 % の r a n d o m が含まれていると考えます。