

入力極点図と r a n d o m 極点図の E r r o r を最小にする

r a n d o m レベル大小極点図の d e f o c u s 補正

randomレベルが少ない

実データrandom補正	計算random補正	再defocus補正	LaboTexRp%	CTRRp%	ODFMax	ODFMin
×	×	×	13.10%	8.40%	22.41	0.004
○	×	×	7.36%	3.50%	21.24	0.004
×	○	×	6.75%	3.70%	21.19	0.005
×	×	○	8.89%	4.60%	20.73	0.003
○	×	○	6.27%	2.30%	20.59	0.003
×	○	○	5.72%	2.00%	20.68	0.003

Rp%の差が少ない

randomレベルが比較的大きい

計算random補正	再defocus補正	LaboTexRp%	CTRRp%	ODFMax	ODFMin
×	×	19.67%	19.20%	47.04	0.130
○	×	14.23%	14.80%	41.78	0.073
×	○	9.23%	7.60%	42.96	0.053
○	○	9.11%	7.60%	42.24	0.051

Rp%の差が大い

r a n d o m レベルが少ないと、d e f o c u s 補正ありなしでも R p % の差が少なく
r a n d o m レベルが大きいと、d e f o c u s 補正ありなしで R p % の差が大きくなる。

再 d e f o c u s の効果が大きい

ODFP o l e F i g u r e の再 d e f o c u s 補正は C u b i c を対象とし
C u b i c 以外は V a l u e O D F V F に同一の機能があります。

r a n d o m レベルは、ODF 解析後の V o l u m e F r a c t i o n (V F %) を求める
Background (その他の方位 + r a n d o m レベル) の指標になります。

2019年12月28日

HelperTex Office

1. 概要
2. アルミニウム実測定データ
 2. 1 アルミニウム r a n d o m データ
 2. 2 データ処理
 2. 2. 1 結晶系の選択
 2. 3 r a n d o m 補正曲線作成
 2. 3. 1 入力データ
 2. 3. 2 バックグラウンド削除+規格化
 2. 3. 3 d e f o c u s 曲線登録
3. 計算 d e f o c u s 曲線
4. r a n d o m レベルとは
5. アルミニウムの解析
 5. 1 d e f o c u s 補正なしでアルミニウム解析
 5. 2 d e f o c u s なし+再 d e f o c u s 補正でアルミニウム解析
 5. 3 実測 d e f o c u s 曲線によるデータ処理
 5. 4 実測 d e f o c u s 曲線+再 d e f o c u s によるデータ処理
 5. 5 内部 d e f o c u s 計算によるデータ処理
 5. 6 内部 d e f o c u s 計算+再 d e f o c u s によるデータ処理
6. r a n d o m レベルの高い銅材料の解析
 6. 1 d e f o c u s 補正なしによるデータ処理
 6. 2 d e f o c u s 補正なし+再 d e f o c u s によるデータ処理
 6. 3 内部 d e f o c u s 計算によるデータ処理
 6. 4 内部 d e f o c u s 計算+再 d e f o c u s によるデータ処理
7. V a l u e O D F V F による再 d e f o c u s 補正
 7. 1 O D F P o l e F i g u r e による d e f o c u s 補正 (再 d e f o c u s なし)
 7. 2 L a b o T e x による O D F 解析
 7. 3 E x p o r t された極点図を V a l u e O D F V F で処理
 7. 4 L a b o T e x で再 O D F 解析
 7. 5 再 d e f o c u s 補正結果を V a l u e O D F V F で評価
 7. 6 V a l u e O D F V F による再 d e f o c u s マトメ

1. 概要

defocusは、randomレベルにより多く作用することが知られている。

<http://helpertex.sakura.ne.jp/Soft/DOC2/randomLevel-Rp-VolumeFraction.pdf>

一方、ODFPoleFigure2 ソフトウェアでは、defocus 補正として

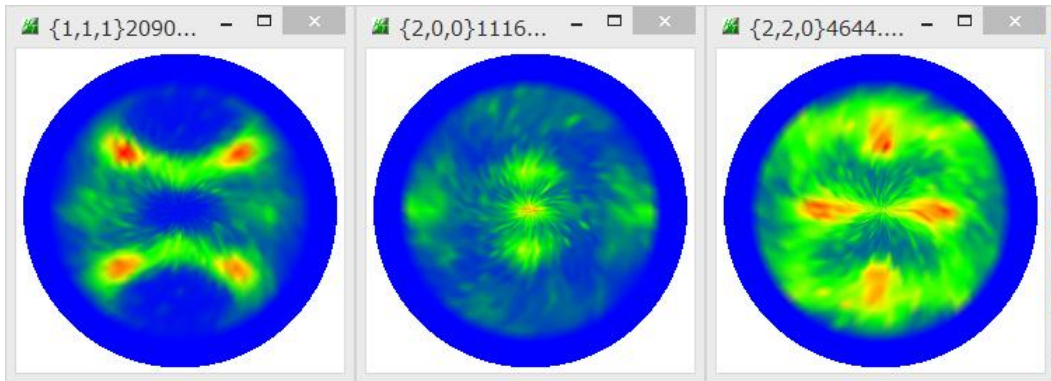
実測定の random 試料による補正

内部 defocus 計算による補正(ODFPoleFigure1.5 には付属しない)

再 defocus 機能 (入力極点図と randomデータのErrorを最小にする機能)
をサポートしている。

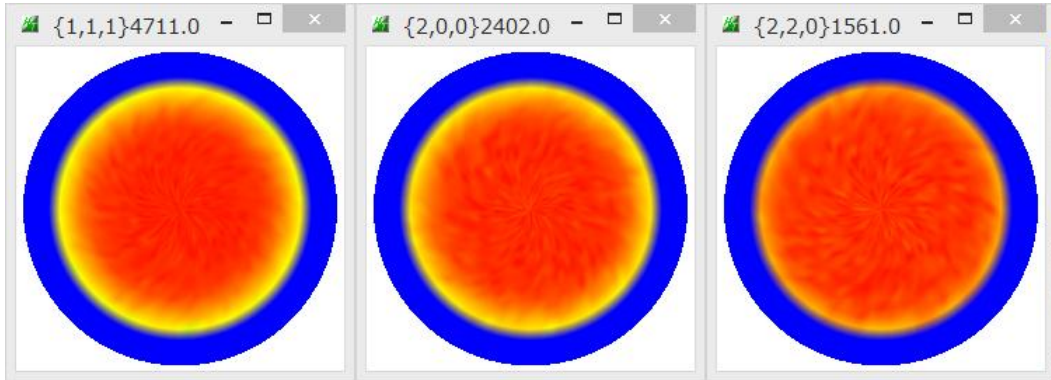
以下に、randomレベルが少ないアルミニウムとrandomレベルが高い銅に関して
defocusに対するError評価 (Rp%) を比較してみます、

2. アルミニウム実測定データ (C:\¥CTR¥DATA¥Aluminium-H-O¥Aluminium-O¥)



を各 defocus 補正を行い、Rp%で比較を行ってみます。

2. 1 アルミニウム randomデータ (C:\¥DATA¥Al-powder-random¥)



2. 2 データ処理

ODFPoleFigure2 ソフトウェア

実データの平滑化

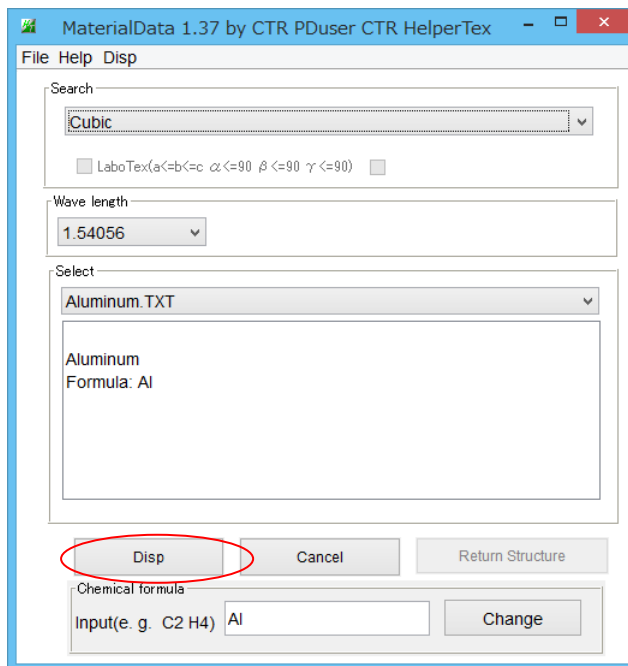
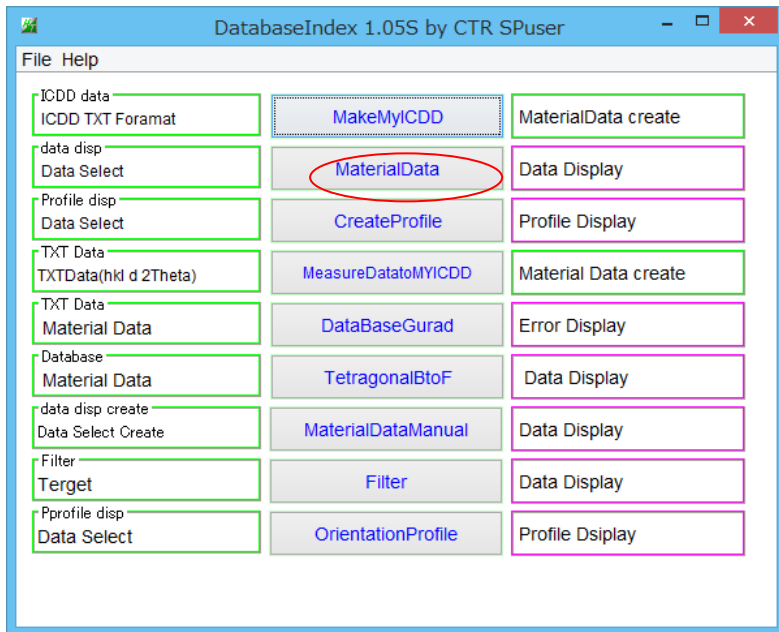
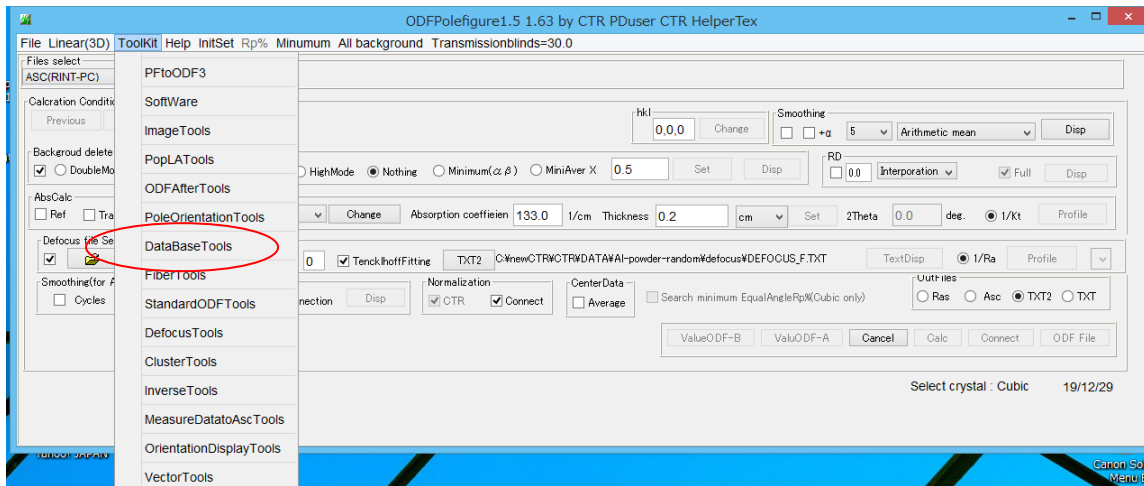


実測定のアルミニウムは分散が大きいため、平滑化を行う

2. 2. 1 結晶系の選択

CTRシステムでは、DataBaseを内蔵し、選択、追加、編集が行えます。

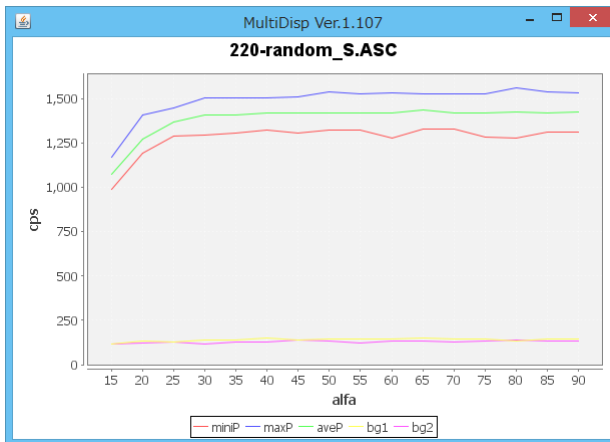
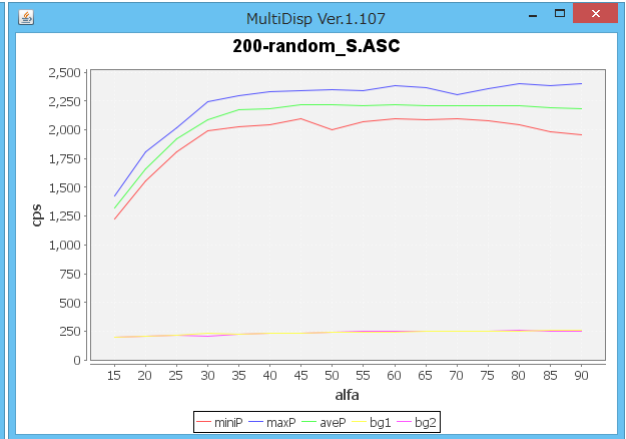
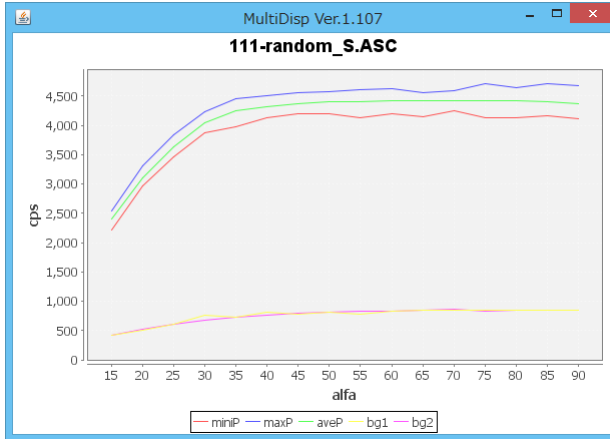
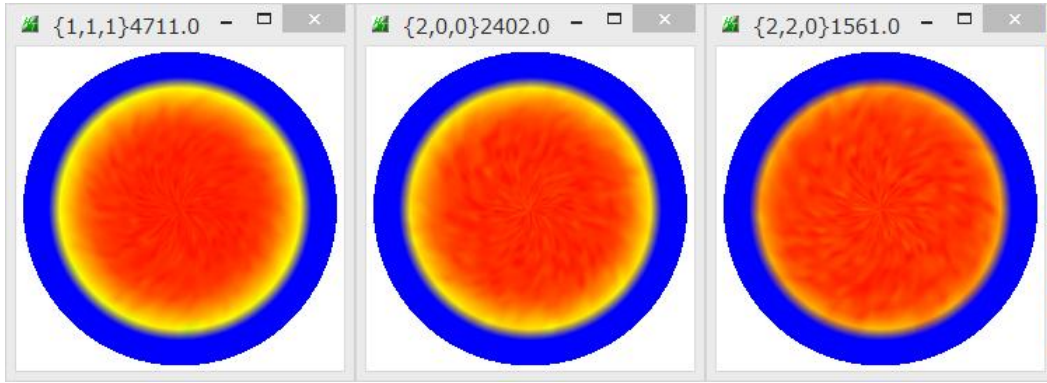
結晶系の選択は、ODFPoleFigureのメニューから選択します。



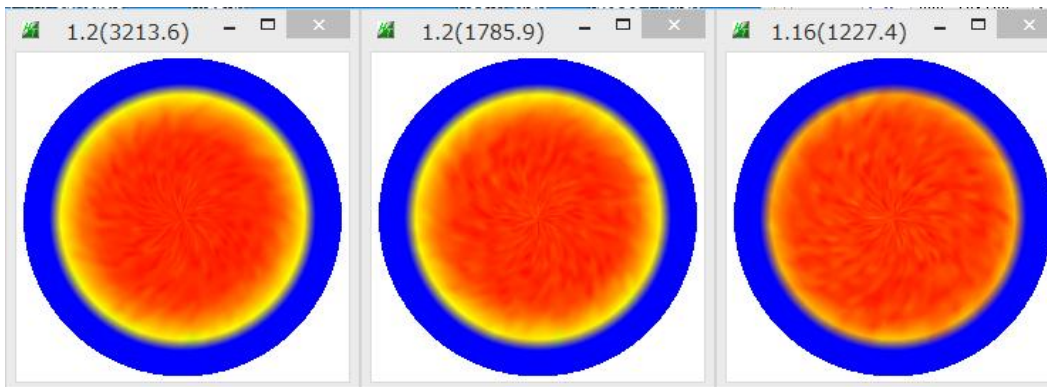
結晶系と材料を選択し、Dispでシステムの結晶系と材料が決まる。

2. 3 r a n d o m補正曲線作成


2. 3. 1 入力データ





2. 3. 2 バックグラウンド削除+規格化




2. 3. 3 defocus 曲線登録 (次数0を指定すると最適次数で Fitting を行う)

Defocus(1) functions file 

 Make defocus function files by TXT? Files Normalization degree of a polynomial TenckhoffFitting  TextDisp

Defocus(1) functions file  C:\CTR\DATA\AI-powder-random\defocus\DEFOCUS_F.TXT

 Make defocus function files by TXT? Files Normalization degree of a polynomial TenckhoffFitting  TextDisp

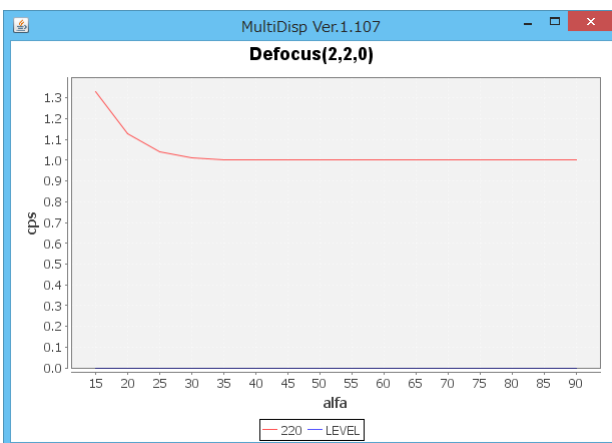
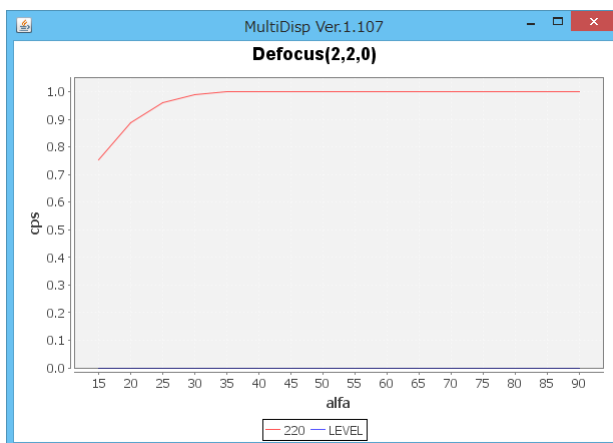
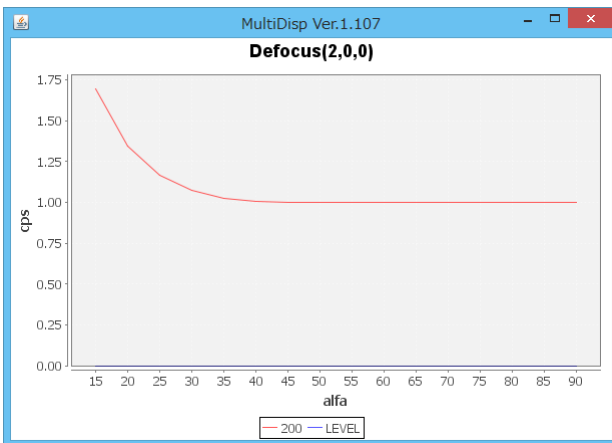
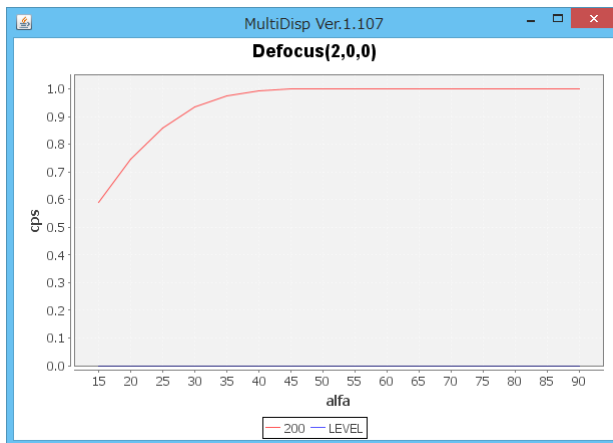
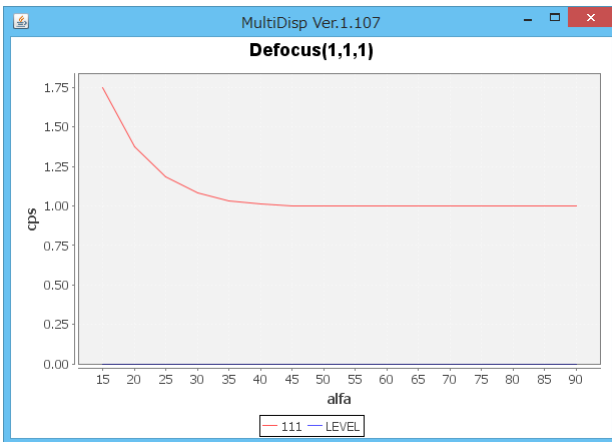
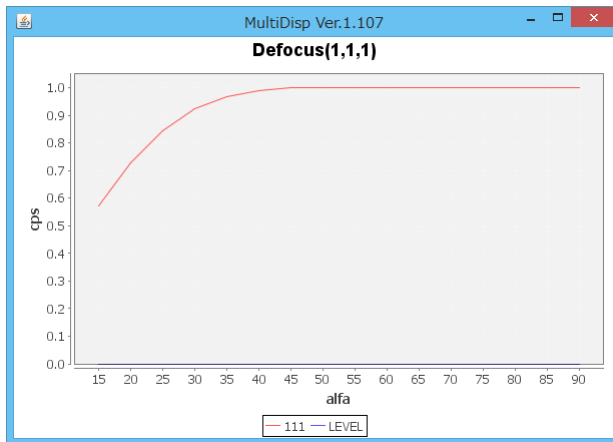
Tenckhoff 次数 1 1 で登録されている。(Flat 部が強調されています)

```

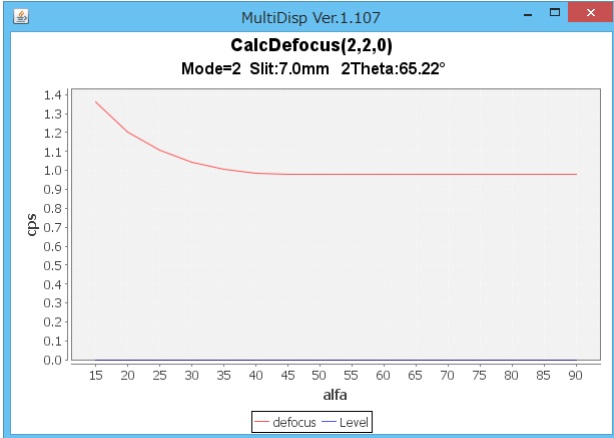
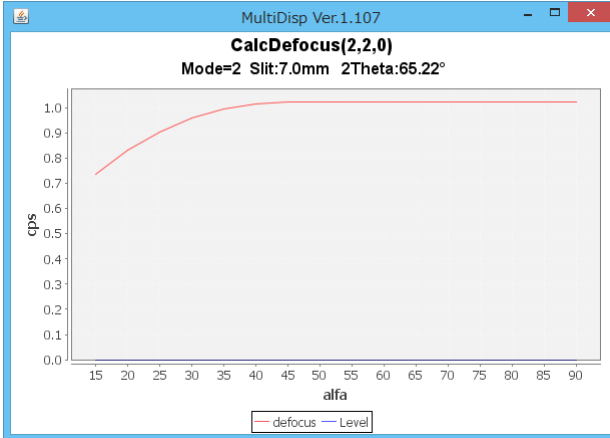
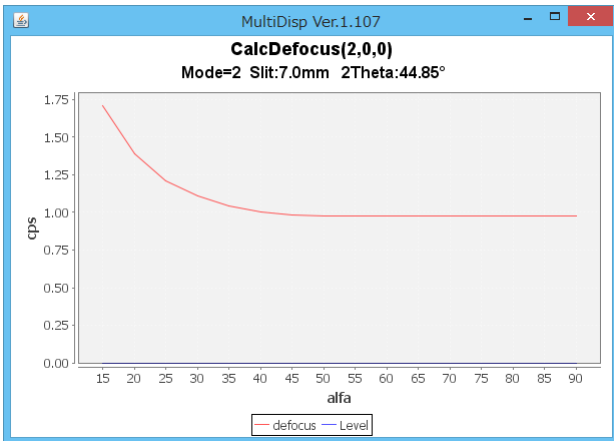
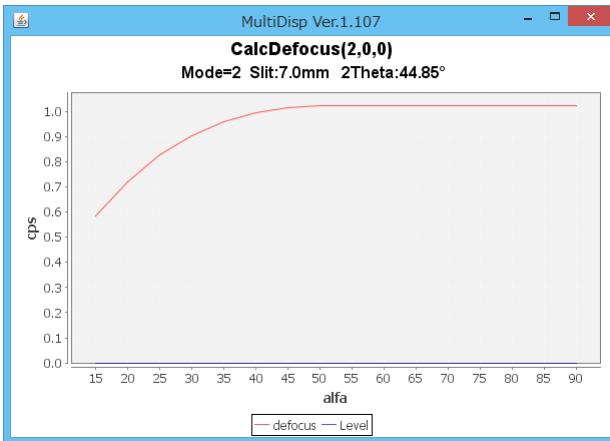
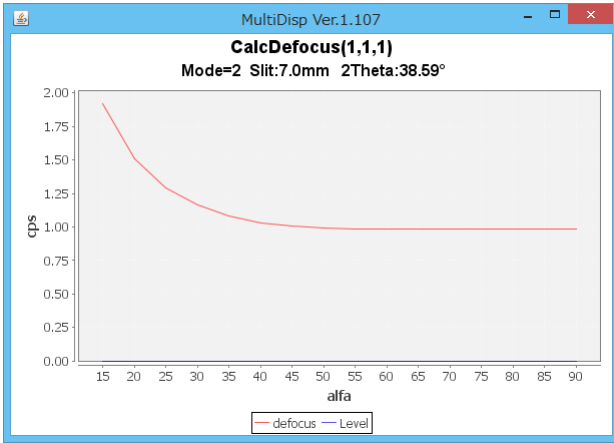
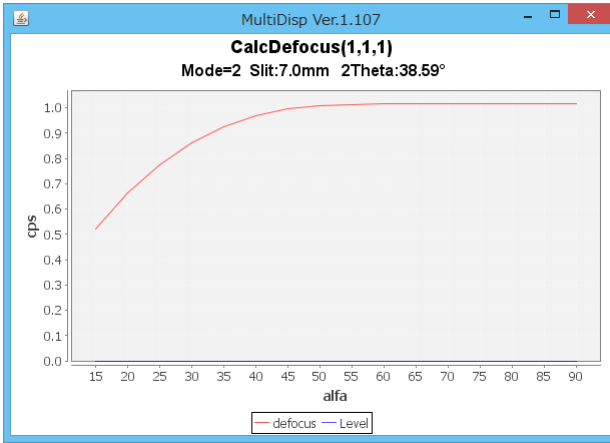
filename,alfanumber,alfastartangle,alfastep,function-n,mm, 19/12/28 3.10 for DefocusCalc,
111-random_S_chB00S_2.TXT,16,0.0,5.0,11,7.0,1.0000002766480862,2.3372113588644705E-4,-1.228704757495626E-4
200-random_S_chB00S_2.TXT,16,0.0,5.0,11,7.0,1.0000000971853573,2.3437636451493834E-4,-1.2013125946688044E-4
220-random_S_chB00S_2.TXT,16,0.0,5.0,11,7.0,0.9999999427361566,-1.6882312291022938E-4,8.654134844747387E-5
    
```

実測データの Fitting

補正曲線



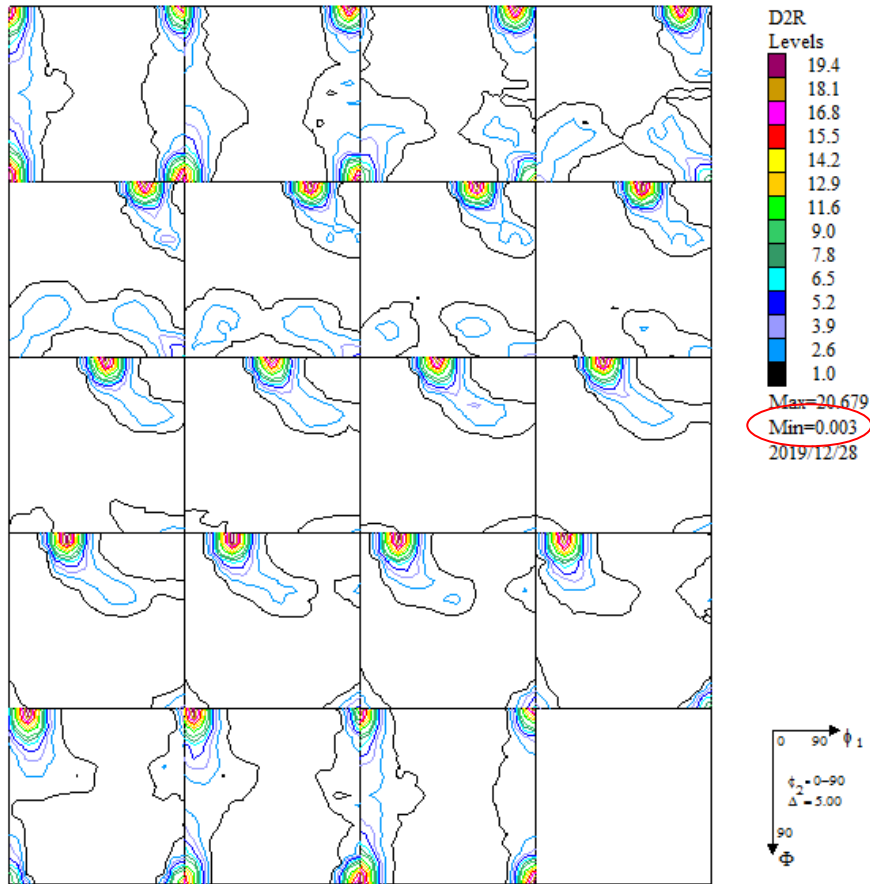
3. 計算 defocus 曲線 (測定に使用した受光スリット幅と 2θ 角度から計算)



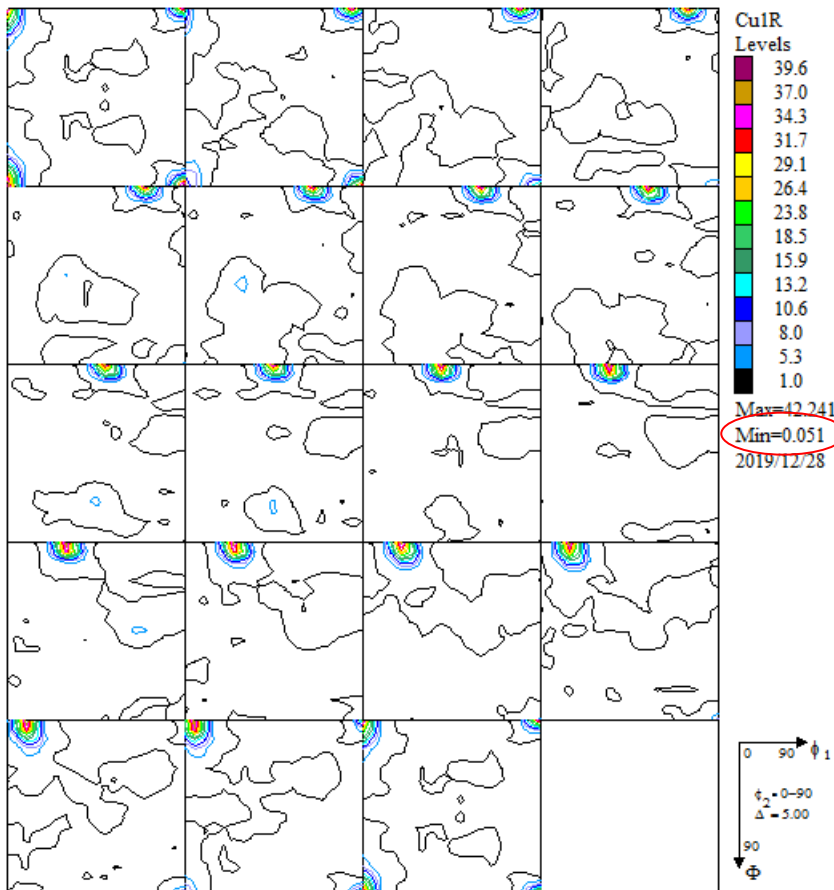
4. randomレベルとは

LaTeXのような直接法のODFは最小方位がrandomレベルを示す

(Hermonic法では、ゴーストの影響を受け評価できない、マイナスを表示することもあります。)



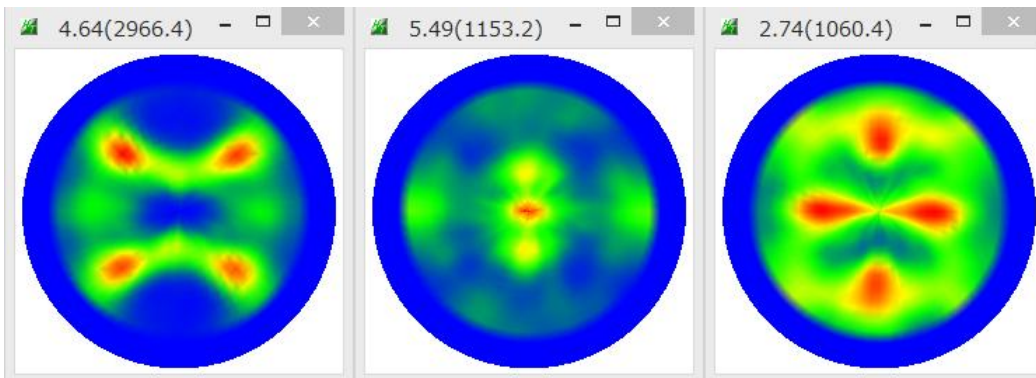
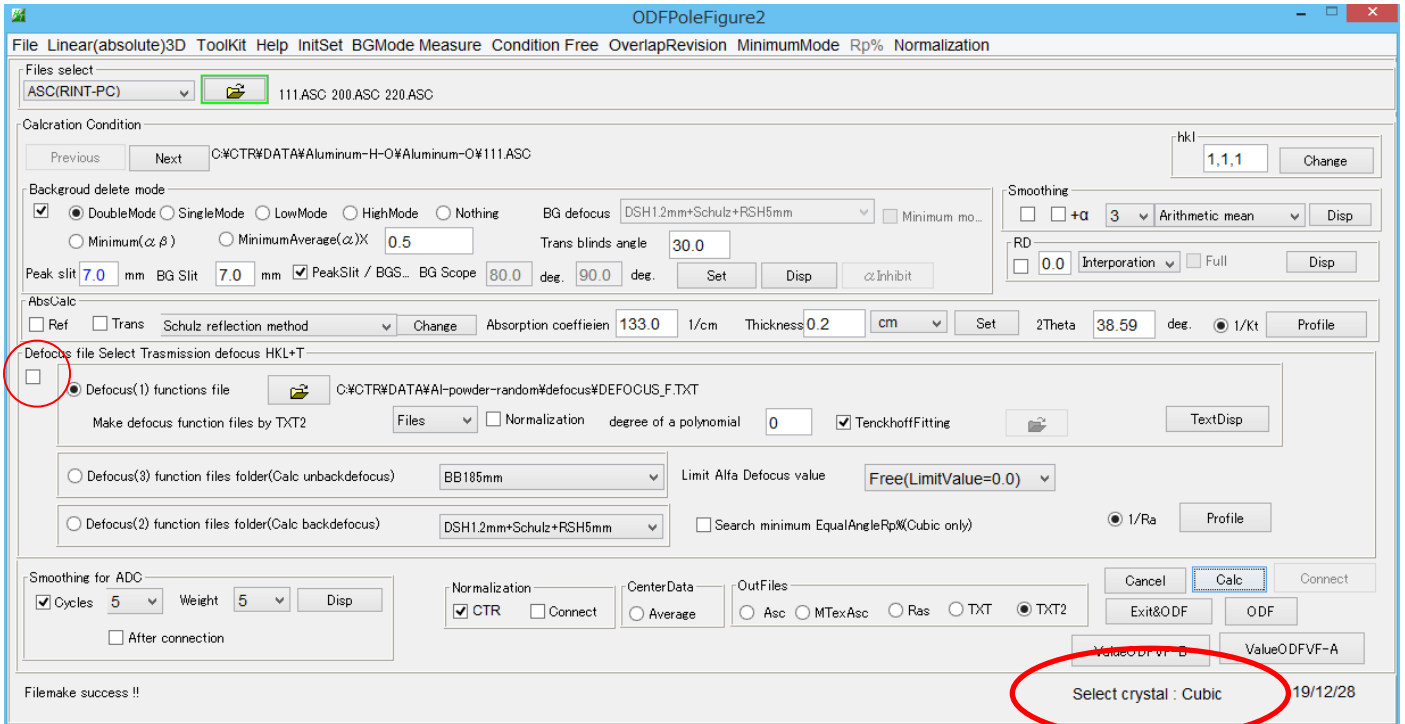
Min=0.003 は
Random レベルが
0.3%
random の VF%が
0.3%



Min=0.051 は
Random レベルが
5.1%
Random の VF%が
5.1%

5. アルミニウムの解析

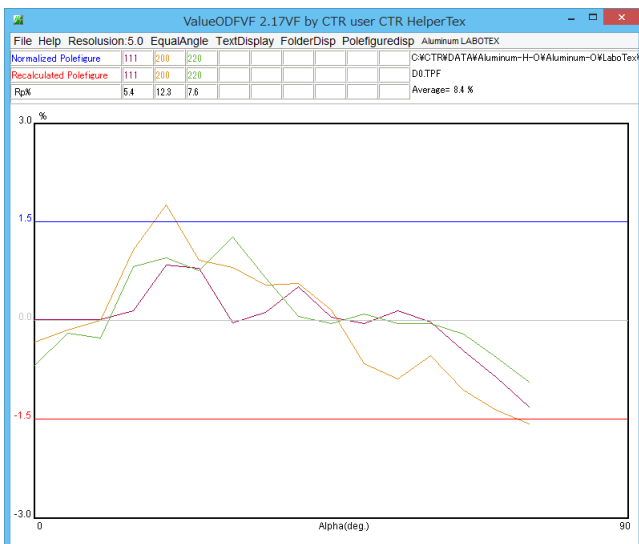
5. 1 d e f o c u s 補正なしでアルミニウム解析



Cubic 以外を表示している場合
MaterialDataで
Cubic を選択

LaboTexによるODF解析結果

Cycle	Iteration(Max. = 30)	Iteration (total)	Rp[%](Lim. = 1.00)	dRp[%](Lim. = 1.00)
3	5	35	13.06	1.11
3	6	36	13.01	0.42

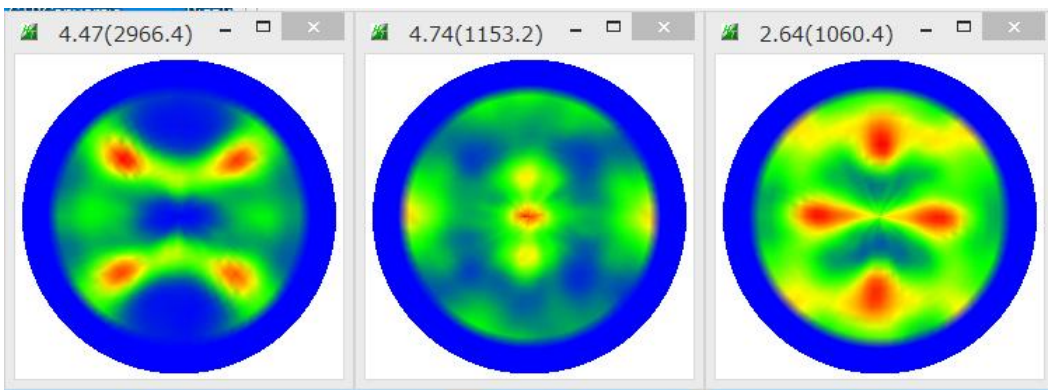
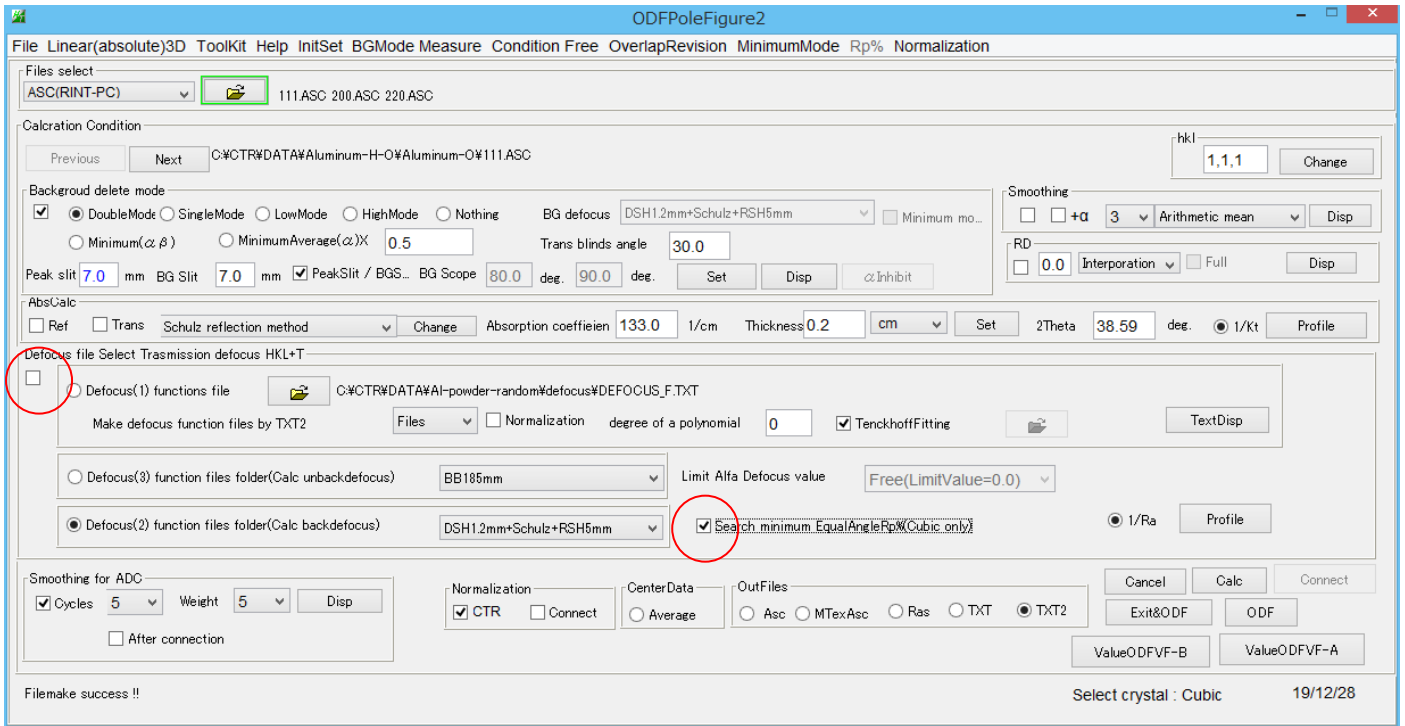


Normalized Polefigure	111	200	220
Recalculated Polefigure	111	200	220
Rp%	5.4	12.3	7.6

D0.TPF
Average= 8.4 %

Rp%は
入力極点図のErrorを表します

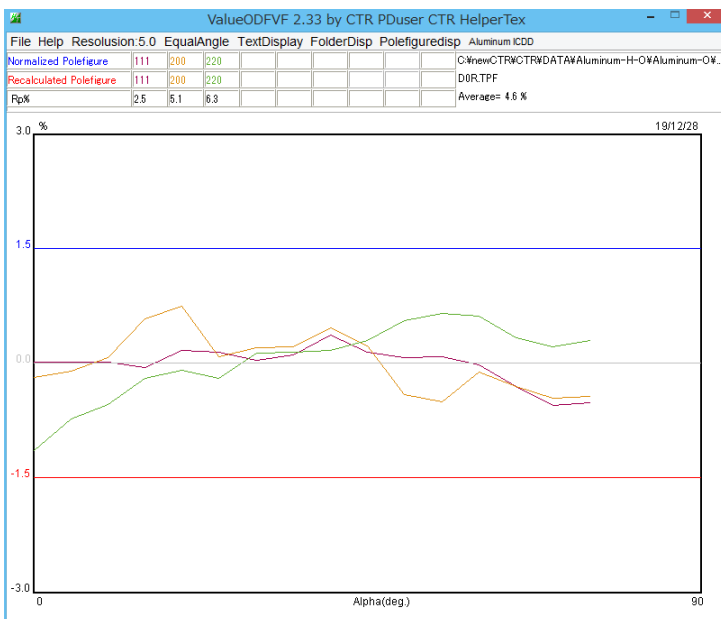
5. 2 defocusなし+再defocus補正でアルミニウム解析



LaboTexによるODF解析結果

Cycle	Iteration(Max. = 30)	Iteration (total)	Rp%](Lim. = 1.00)	dRp%](Lim. = 1.00)
3	7	44	8.97	1.27
3	8	45	8.89	0.92

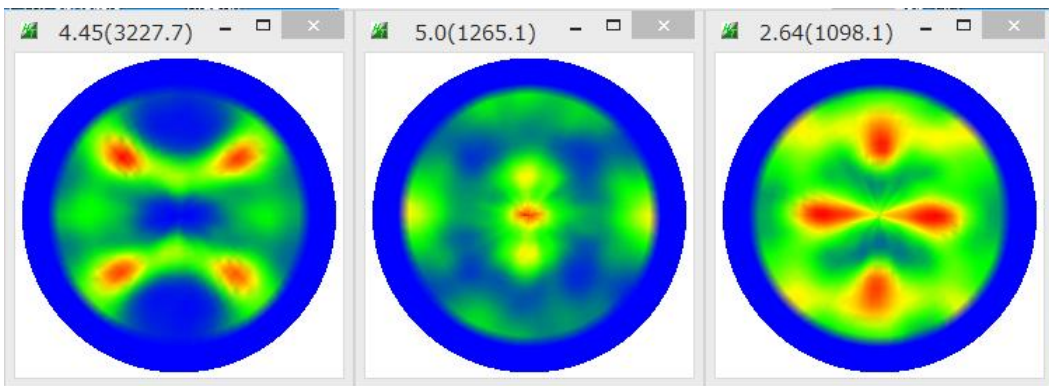
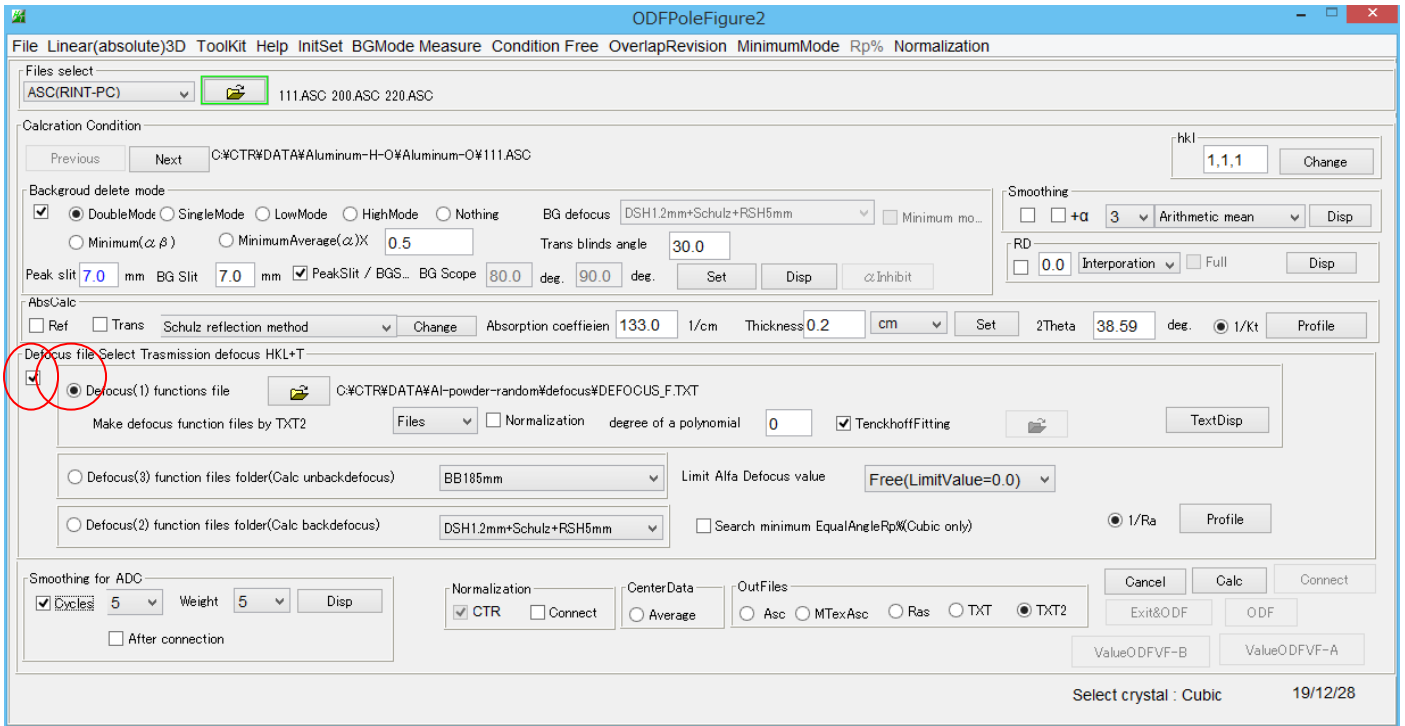
Creation of pole figures files NPF and RPF



Normalized Polefigure	111	200	220
Recalculated Polefigure	111	200	220
Rp%	2.5	5.1	6.3

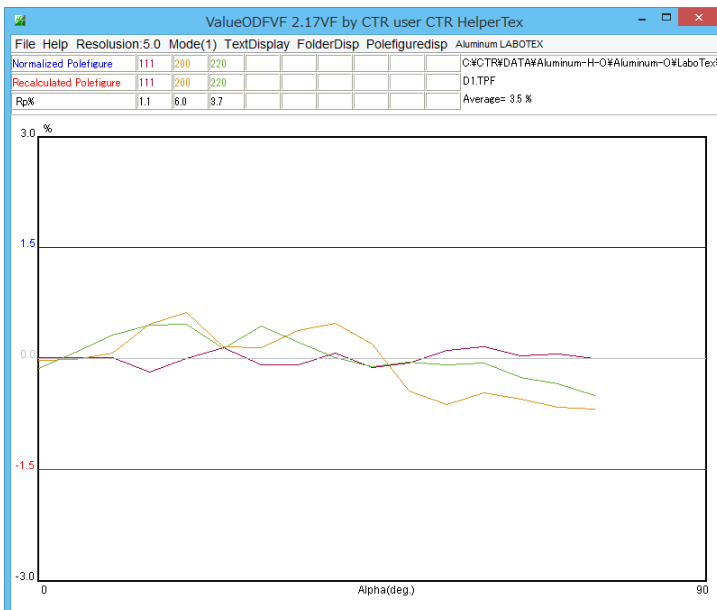
DOR.TPF
Average= 4.6 %

5. 3 実測 defocus 曲線によるデータ処理



LaboTexによるODF解析結果

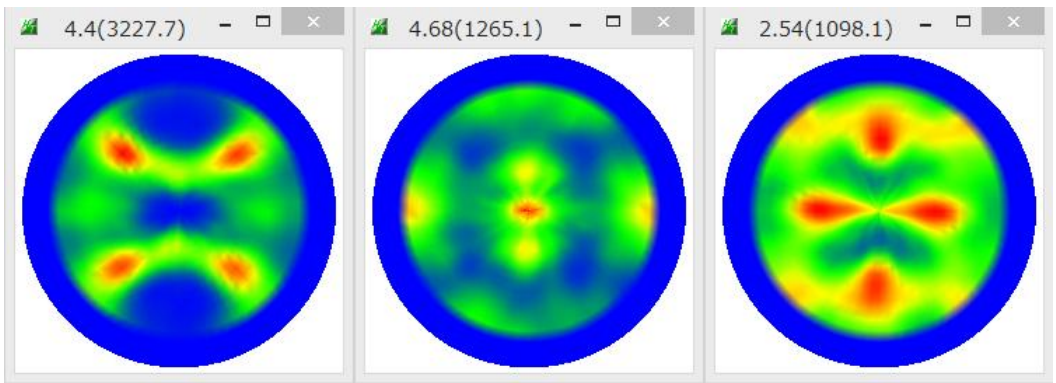
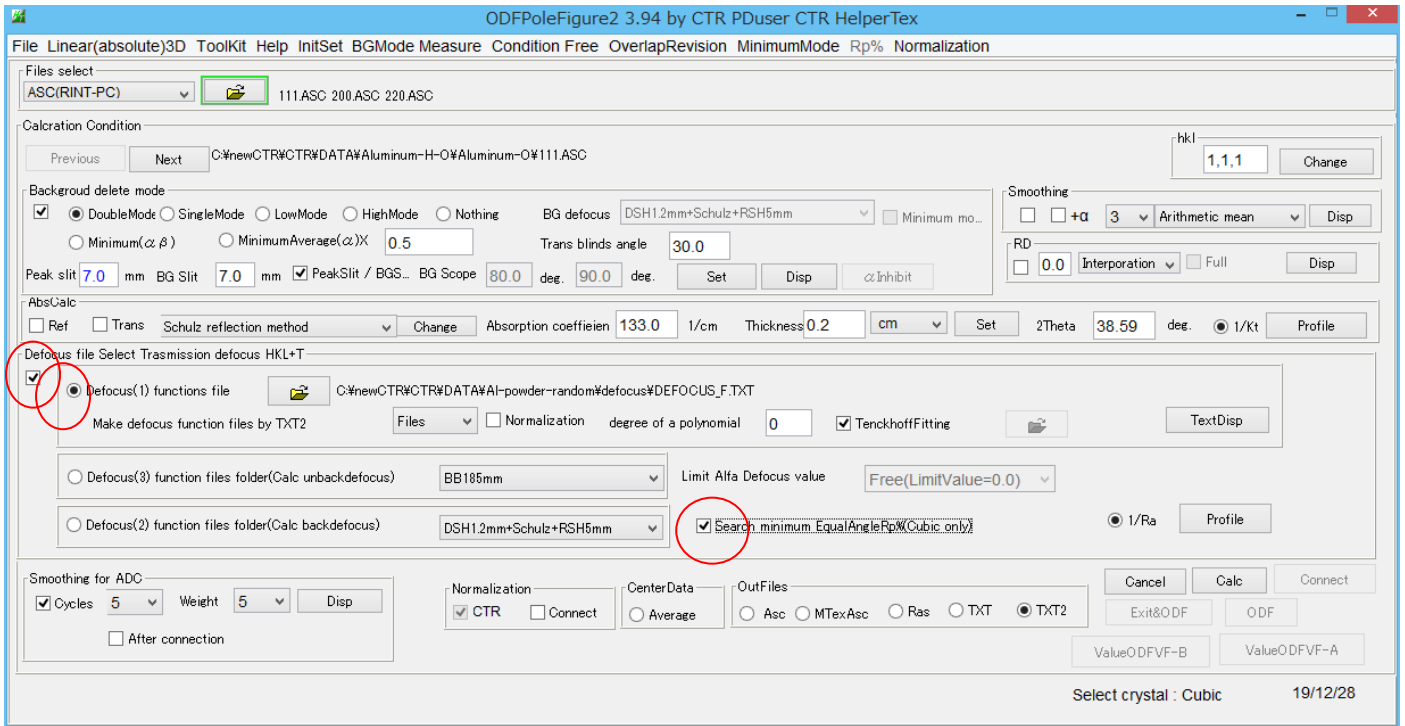
Cycle	Iteration(Max. = 30)	Iteration (total)	Rp[%](Lim. = 1.00)	dRp[%](Lim. = 1.00)
3	9	47	7.41	1.04
3	10	48	7.36	0.73



Normalized Polefigure	111	200	220
Recalculated Polefigure	111	200	220
Rp%	1.1	6.0	3.7

D1.TPF
Average= 3.5 %

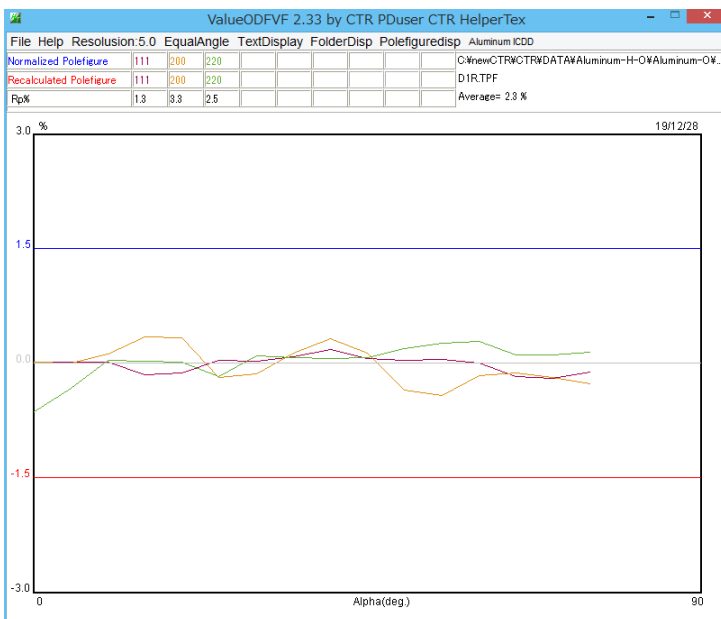
5. 4実測defocus曲線+再defocusによるデータ処理



LaboTexによるODF解析結果

Cycle	Iteration(Max. = 30)	Iteration (total)	Rp[%](Lim. = 1.00)	dRp[%](Lim. = 1.00)
3	13	51	6.33	1.12
3	14	52	6.27	0.90

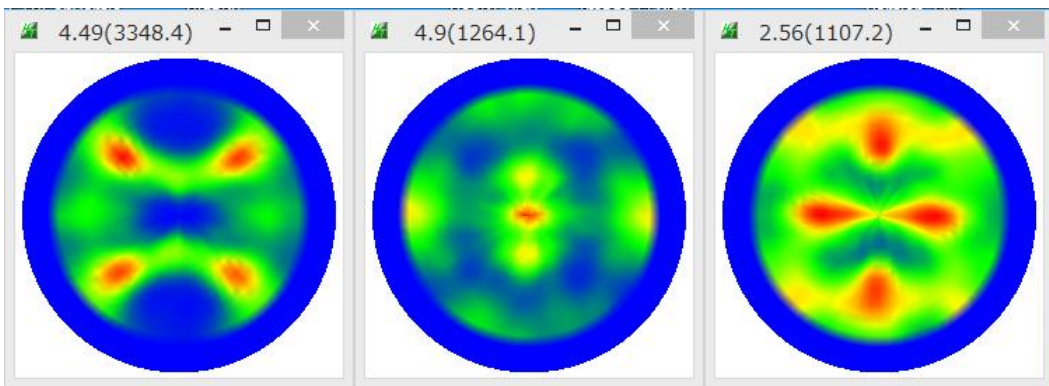
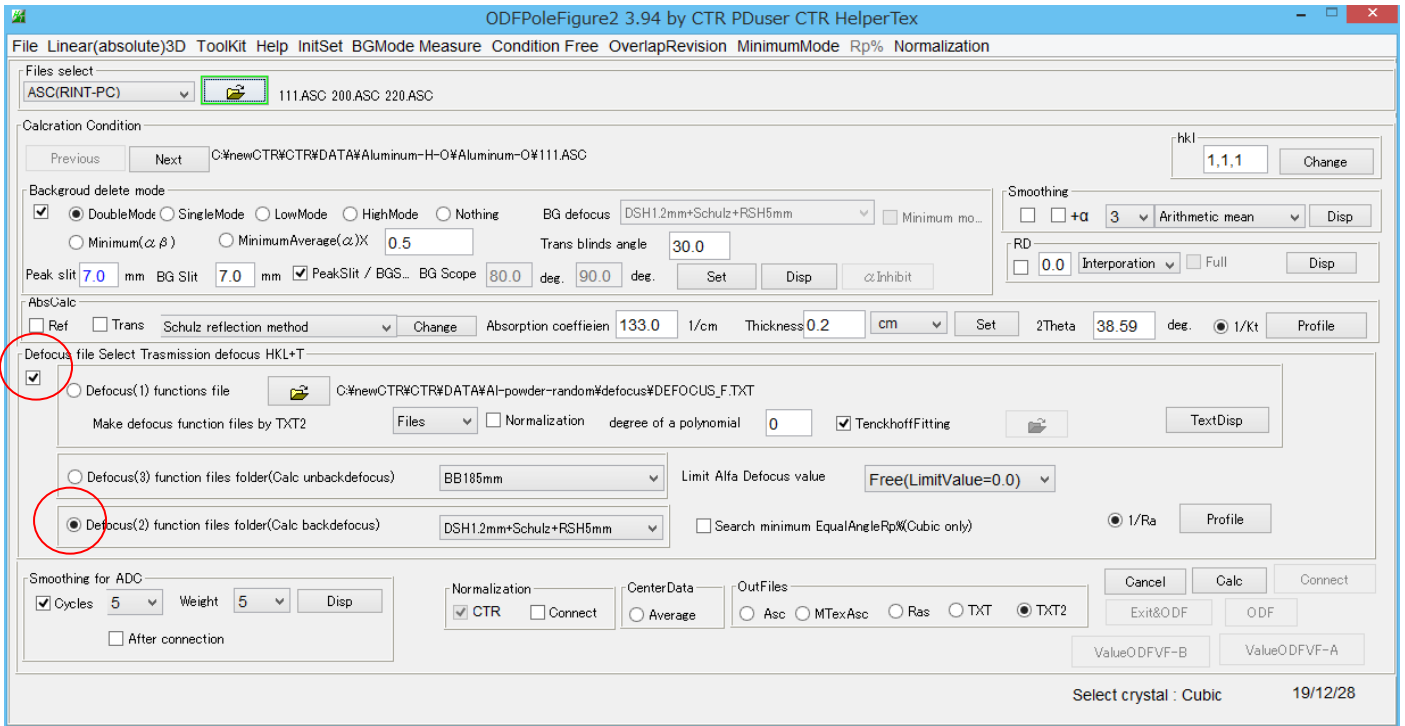
Creation of pole figures files NPF and RPF



Normalized Polefigure	111	200	220
Recalculated Polefigure	1.11	2.00	2.20
Rp%	1.3	3.3	2.5

D1R.TPF
Average= 2.3 %

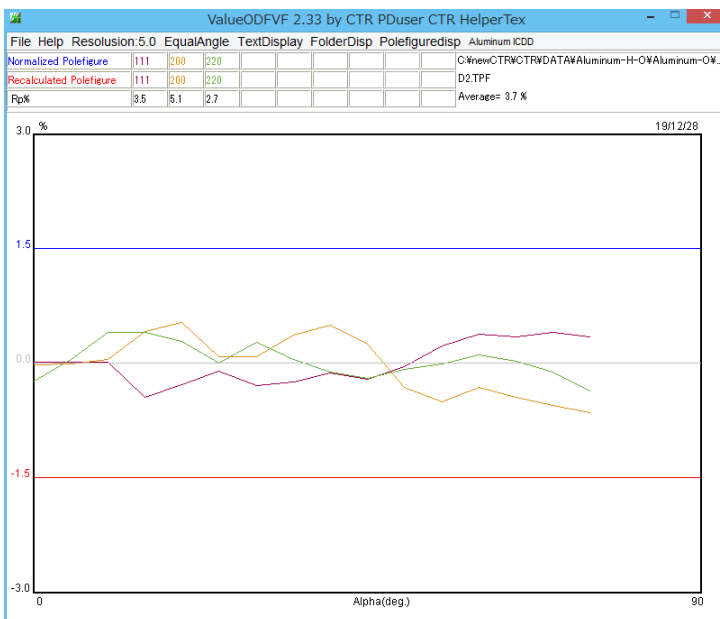
5. 5内部defocus計算によるデータ処理



LaboTexによるODF解析結果

Cycle	Iteration[Max. = 3U]	Iteration [total]	Hp[%](Lim. = 1.0U)	dHp[%](Lim. = 1.0U)
3	13	51	6.82	1.02
3	14	52	6.76	0.96

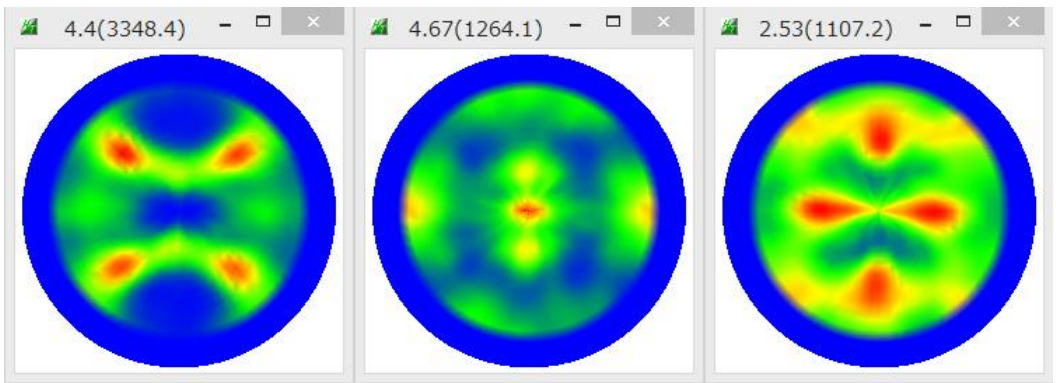
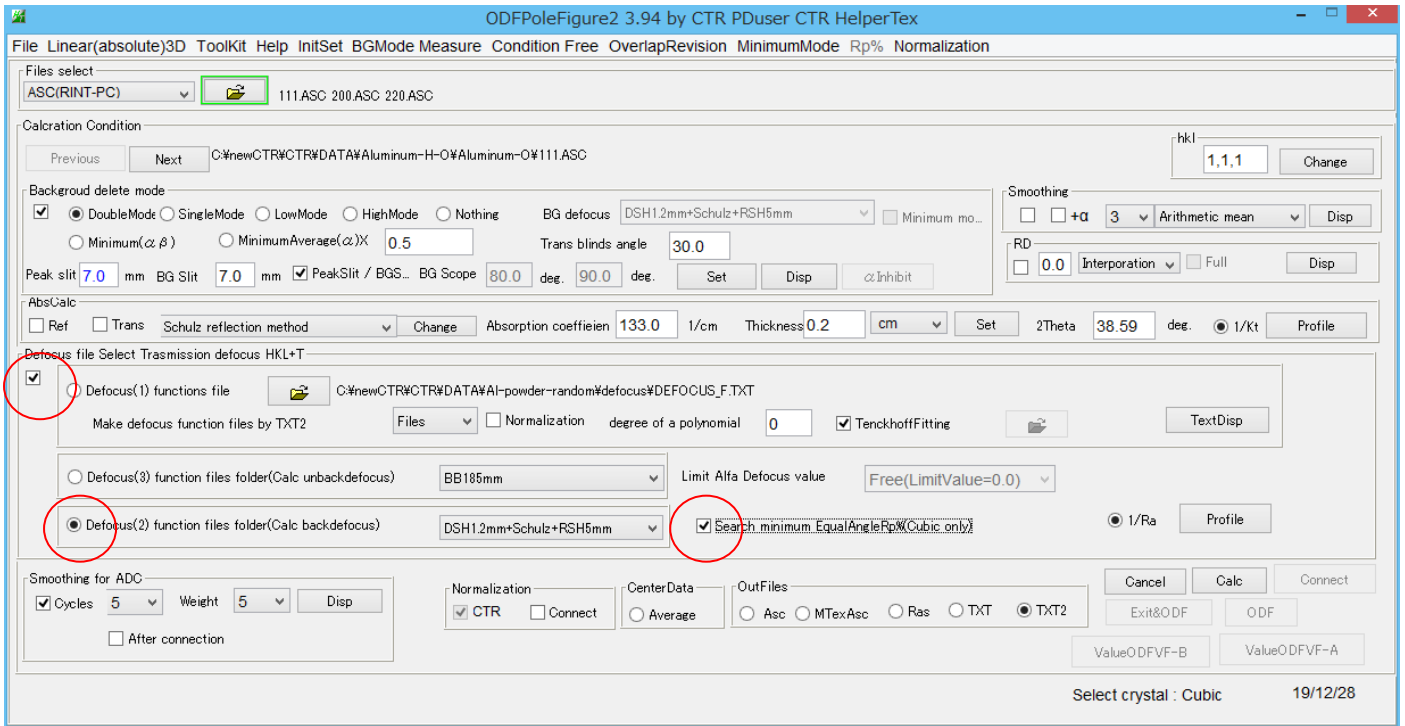
Creation of pole figures files NPF and RPF



Normalized Polefigure	111	200	220
Recalculated Polefigure	111	200	220
Rp%	3.5	5.1	2.7

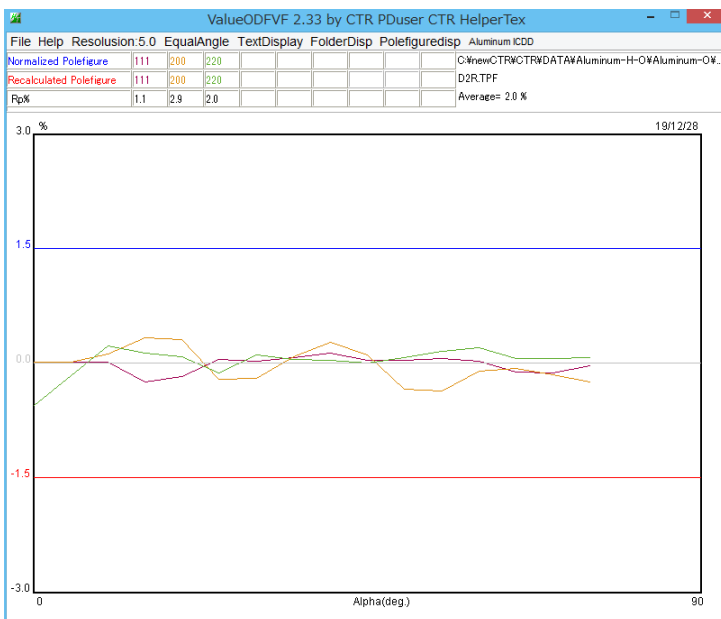
D2.TPF
Average= 3.7 %

5. 6内部defocus計算+再defocusによるデータ処理



LaboTexによるODF解析結果

Cycle	Iteration(Max. = 30)	Iteration (total)	Rp%(Lim. = 1.00)	dRp%(Lim. = 1.00)
3	15	53	5.77	1.17
3	16	54	5.72	0.98



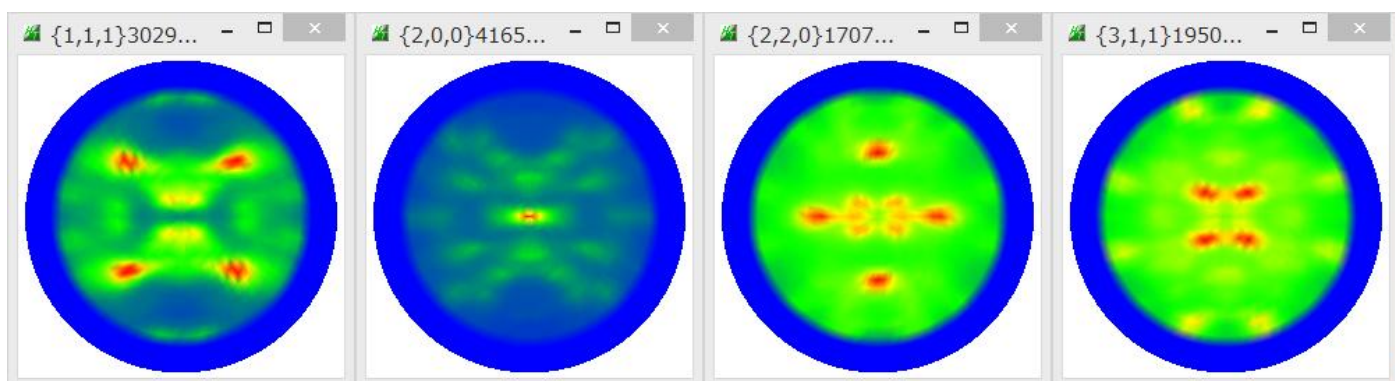
Normalized Polefigure	111	200	220
Recalculated Polefigure	111	200	220
Rp%	1.1	2.9	2.0

D2R.TPF
Average= 2.0 %

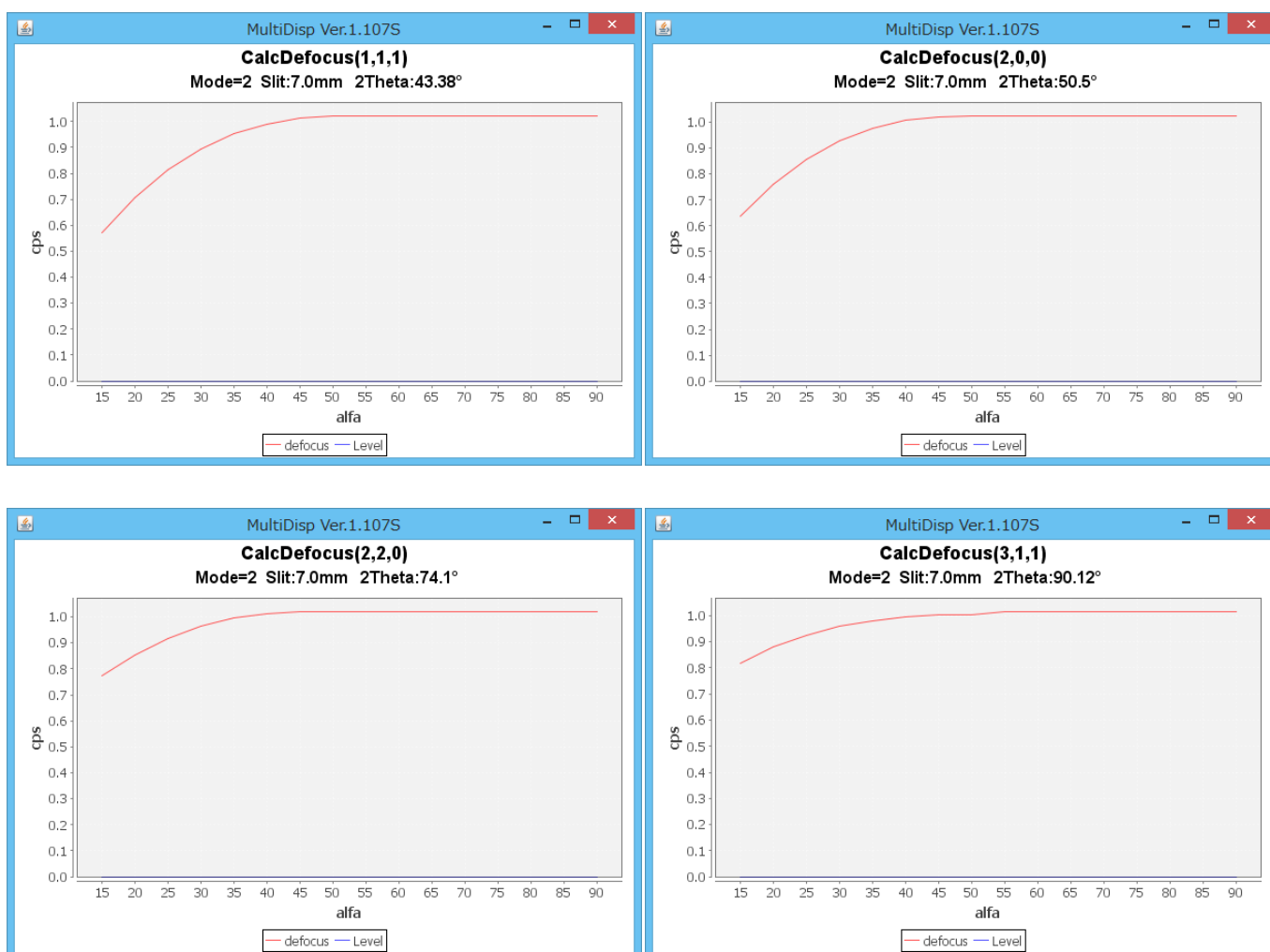
6. randomレベルの高い銅材料のdefocus補正

Random データがないため、内部計算randomと再defocus補正を行ってみます。

入力データ (Cu材料)



内部計算defocus曲線



平滑化は行いません。

Smoothing for ADC

Cycles 5 Weight 5 Disp

After connection

6. 1 d e f o c u s 補正なしによるデータ処理

ODFPoleFigure2 3.94 by CTR PDuser CTR HelperTex

File Linear(absolute)3D ToolKit Help InitSet BGMode Measure Condition Free OverlapRevision MinimumMode Rp% Normalization

Files select
ASC(RINT-PC) 111-7mm-2B.ASC 200-7mm-2B.ASC 220-7mm-2B.ASC 311-7mm-2B.ASC

Calculation Condition
Previous Next C:\newCTR\CTR\DATA\Cu-0#111-7mm-2B.ASC hkl 1,1,1 Change

Background delete mode
 DoubleMode SingleMode LowMode HighMode Nothing
 BG defocus DSH1.2mm+Schulz+RSH5mm Minimum mo...
 Minimum(α β) MinimumAverage(α)X 0.5 Trans blinds angle 30.0

Peak slit 7.0 mm BG Slit 7.0 mm PeakSlit / BGS... BG Scope 80.0 deg. 90.0 deg. Set Disp α Inhibit

AbsCalc
 Ref Trans Schulz reflection method Change Absorption coefficient 133.0 1/cm Thickness 0.2 cm Set 2Theta 43.38 deg. 1/Kt Profile

Defocus file Select Transmission defocus HKL+T
 Defocus(1) functions file C:\newCTR\CTR\DATA#AI-powder-random#defocus#DEFOCUS_F.TXT
 Make defocus function files by TXT2 Files Normalization degree of a polynomial 0 TenckhoffFitting TextDisp

Defocus(3) function files folder(Calc unbackdefocus) BB185mm Limit Alfa Defocus value Free(LimitValue=0.0)

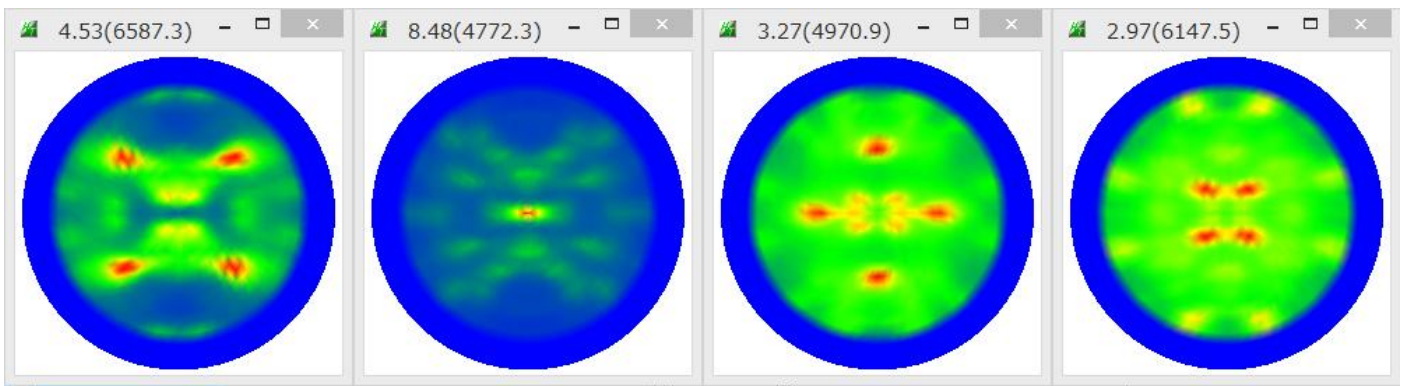
Defocus(2) function files folder(Calc backdefocus) DSH1.2mm+Schulz+RSH5mm Search minimum EqualAngleRp%(Cubic only) 1/Ra Profile

Smoothing for ADC
 Cycles 5 Weight 5 Disp After connection

Normalization CTR Connect Average CenterData OutFiles
 Asc MTextAsc Ras TXT TXT2

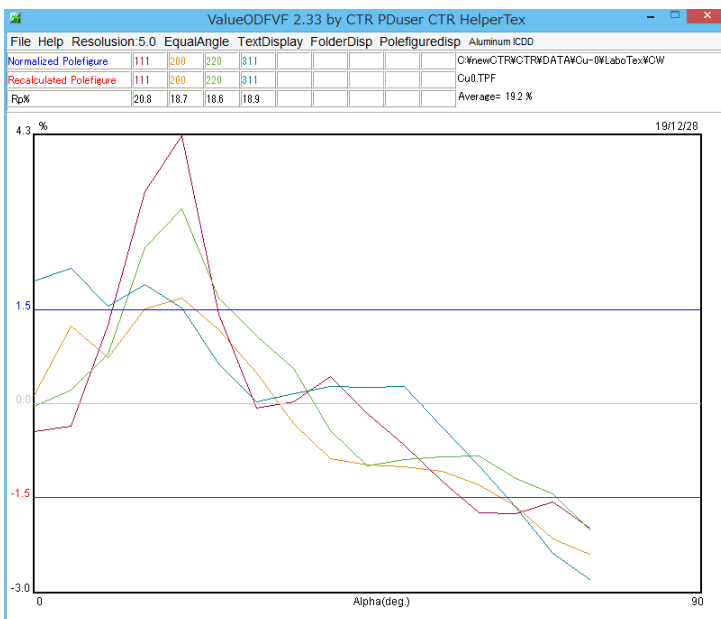
Cancel Calc Connect
Exit&ODF ODF
ValueODFVF-B ValueODFVF-A

Filemake success !! Select crystal : Cubic 19/12/28



LaboTexによるODF解析結果

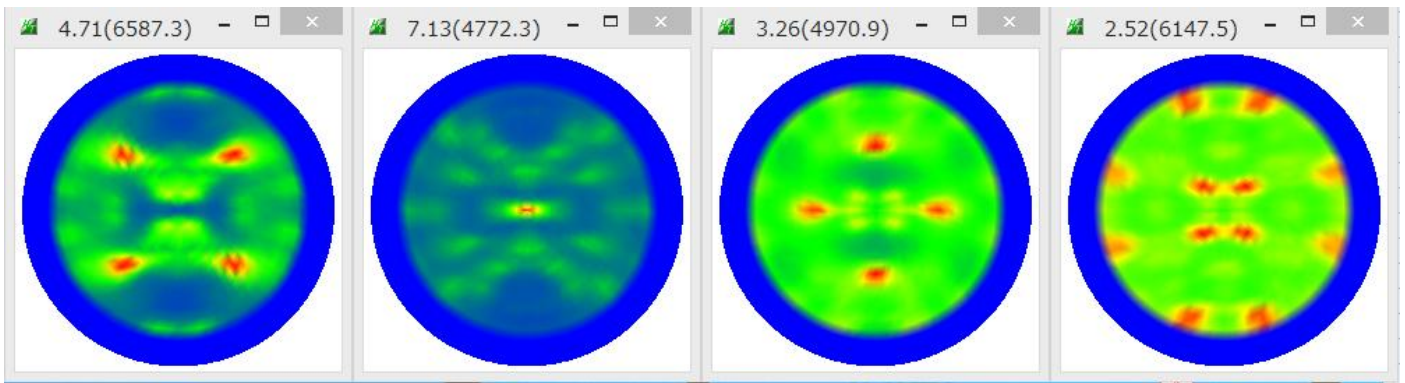
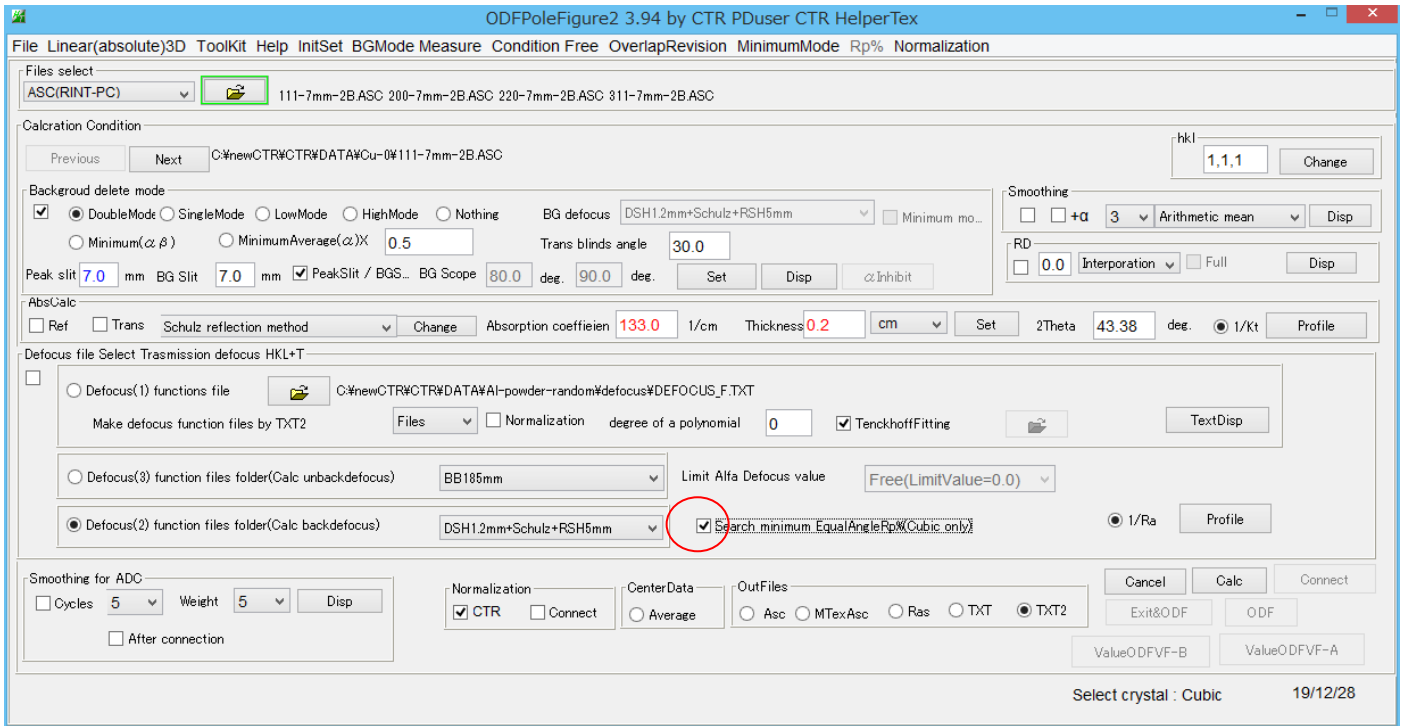
Cycle	Iteration(Max. = 30)	Iteration (total)	Rp[%](Lim. = 1.00)	dRp[%](Lim. = 1.00)
3	2	14	19.06	2.12
3	3	15	18.89	0.91



Normalized Polefigure	111	200	220	311
Recalculated Polefigure	111	200	220	311
Rp%	20.8	18.7	18.6	18.9

Cu0.TPF
Average= 19.2 %

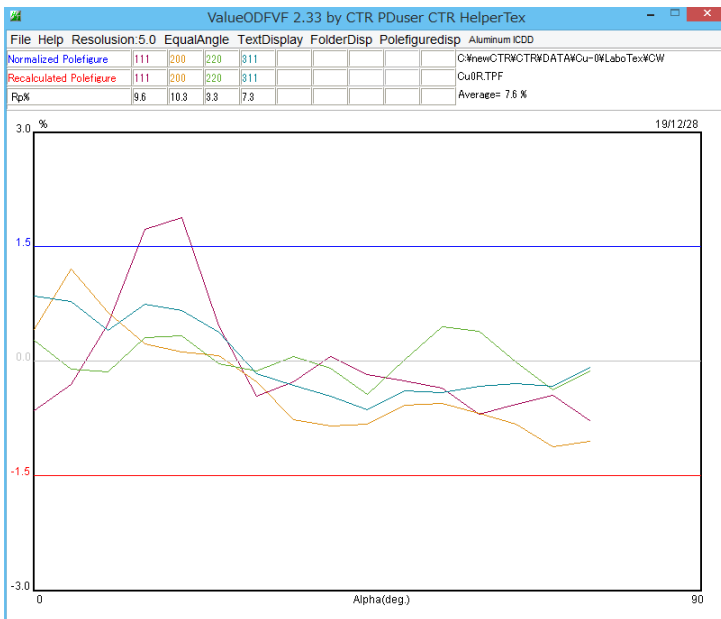
6. 2 defocus 補正なし+再defocusによるデータ処理



LaboTexによるODF解析結果

Cycle	Iteration(Max. = 30)	Iteration (total)	Rp[%](Lim. = 1.00)	dRp[%](Lim. = 1.00)
3	8	32	9.32	1.28
3	9	33	9.23	0.97

Creation of pole figures files NPF and RPF



Normalized Polefigure	111	200	220	311
Recalculated Polefigure	111	200	220	311
Rp%	9.6	10.3	3.3	7.3

Cu0R.TPF
Average = 7.6 %

6. 3内部defocus計算によるデータ処理

ODFPoleFigure2 3.94 by CTR PDuser CTR HelperTex

File Linear(absolute)3D ToolKit Help InitSet BGMode Measure Condition Free OverlapRevision MinimumMode Rp% Normalization

Files select
ASC(RINT-PC) 111-7mm-2B.ASC 200-7mm-2B.ASC 220-7mm-2B.ASC 311-7mm-2B.ASC

Calculation Condition
Previous Next C:\newCTR\CTR\DATA\Cu-0#111-7mm-2B.ASC hkl 1,1,1 Change

Background delete mode
 DoubleMode SingleMode LowMode HighMode Nothing
 BG defocus DSH1.2mm+Schulz+RSH5mm Minimum mo...
 Minimum(α β) MinimumAverage(α)X 0.5 Trans blinds angle 30.0
 Peak slit 7.0 mm BG Slit 7.0 mm PeakSlit / BGS... BG Scope 80.0 deg. 90.0 deg. Set Disp α Inhibit

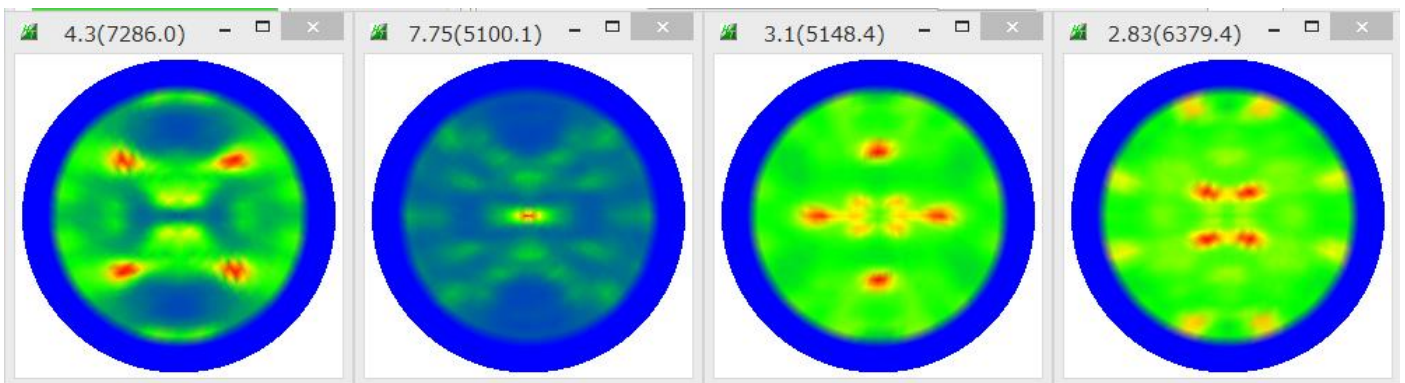
AbsCalc
 Ref Trans Schulz reflection method Change Absorption coefficient 133.0 1/cm Thickness 0.2 cm Set 2Theta 43.38 deg. 1/Kt Profile

Defocus file Select Transmission defocus HKL+T
 Defocus(1) functions file C:\newCTR\CTR\DATA#A1-powder-random#defocus#DEFOCUS_F.TXT
 Make defocus function files by TXT2 Files Normalization degree of a polynomial 0 TenckhoffFitting TextDisp
 Defocus(3) function files folder(Calc unbackdefocus) BB185mm Limit Alfa Defocus value Free(LimitValue=0.0)
 Defocus(2) function files folder(Calc backdefocus) DSH1.2mm+Schulz+RSH5mm Search minimum EqualAngleRp%(Cubic only) 1/Ra Profile

Smoothing for ADC
 Cycles 5 Weight 5 Disp
 After connection

Normalization CenterData OutFiles
 CTR Connect Average Asc MTextAsc Ras TXT TXT2
 Cancel Calc Connect
 Exit&ODF ODF
 ValueODFVF-B ValueODFVF-A

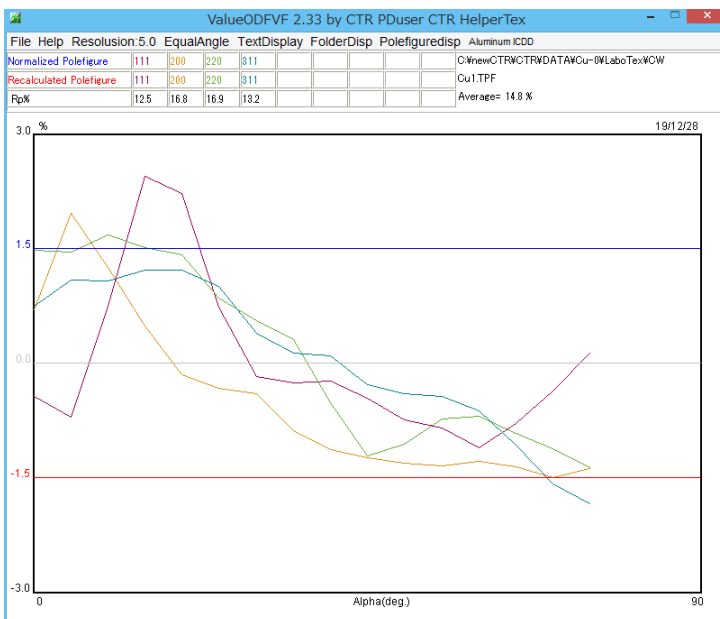
Select crystal : Cubic 19/12/28



LaboTexによるODF解析結果

Cycle	Iteration(Max. = 30)	Iteration (total)	Rp% (Lim. = 1.00)	dRp% (Lim. = 1.00)
3	5	22	14.34	1.09
3	6	23	14.23	0.81

Creation of pole figures files NPF and RPF
 Creation of orientation distribution file ODF



Normalized Polefigure	111	200	220	311
Recalculated Polefigure	111	200	220	311
Rp%	12.5	16.8	16.9	13.2

Cu1.TPF
Average= 14.8 %

6. 4内部defocus計算+再defocusによるデータ処理

ODFPoleFigure2 3.94 by CTR PDuser CTR HelperTex

File Linear(absolute)3D Toolkit Help InitSet BGMode Measure Condition Free OverlapRevision MinimumMode Rp% Normalization

Files select: ASC(RINT-PC) 111-7mm-2B.ASC 200-7mm-2B.ASC 220-7mm-2B.ASC 311-7mm-2B.ASC

Calculation Condition: C:\newCTR\CTR\DATA\Cu-0#111-7mm-2B.ASC

Background delete mode: DoubleMode SingleMode LowMode HighMode Nothing

Peak slit: 7.0 mm BG Slit: 7.0 mm PeakSlit / BGS... BG Scope: 80.0 deg. 90.0 deg.

AbsCalc: Ref Trans Schulz reflection method: Change Absorption coefficient: 133.0 1/cm Thickness: 0.2 cm 2Theta: 43.38 deg. 1/Kt Profile

Defocus file Select Transmission defocus HKL+T

Defocus(1) functions file: C:\newCTR\CTR\DATA#AI-powder-random#defocus#DEFOCUS_F.TXT

Defocus(3) function files folder(Calc unbackdefocus): BB185mm Limit Alfa Defocus value: Free(LimitValue=0.0)

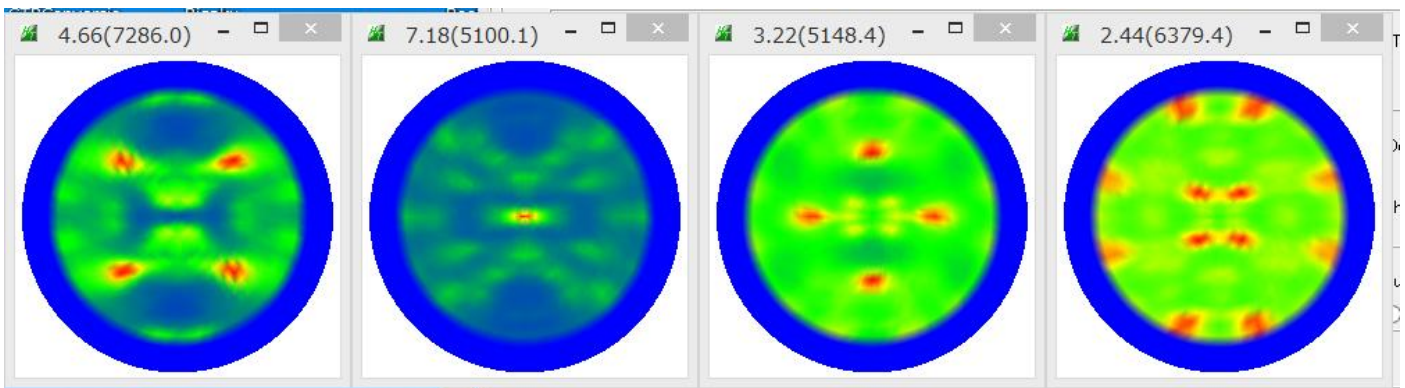
Defocus(2) function files folder(Calc backdefocus): DSH12mm+Schulz+RSH5mm Search minimum EqualAngleRp%(Cubic only) 1/Ra Profile

Smoothing for ADC: Cycles 5 Weight 5 Disp

Normalization: CTR Connect Average OutFiles: Asc MTextAsc Ras TXT TXT2

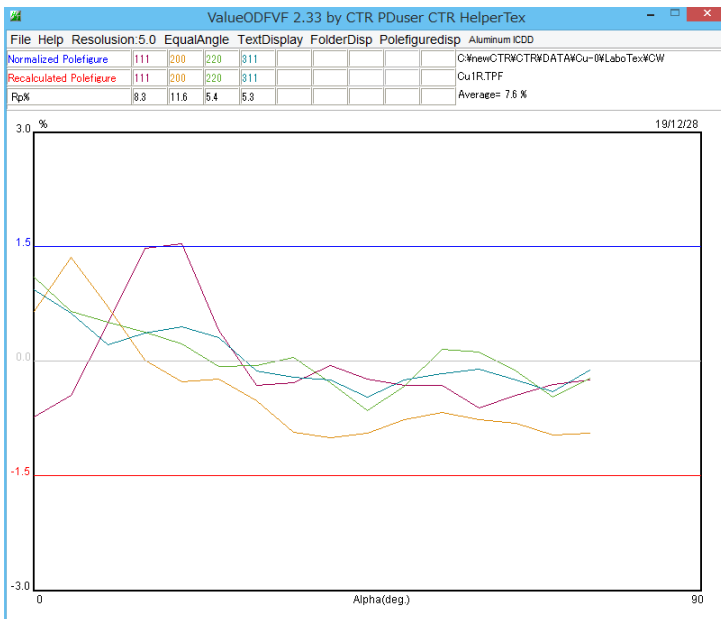
Cancel Calc Connect Exit&ODF ODF ValueODFVF-B ValueODFVF-A

Select crystal : Cubic 19/12/28



LaboTexによるODF解析結果

Cycle	Iteration(Max. = 30)	Iteration (total)	Rp[%](Lim. = 1.00)	dRp[%](Lim. = 1.00)
3	10	34	9.19	1.03
3	11	35	9.11	0.91

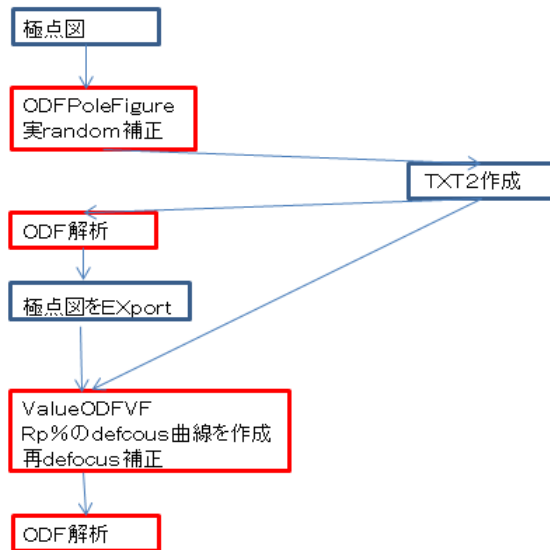


Normalized Polefigure	111	200	220	311
Recalculated Polefigure	111	200	220	311
Rp%	8.3	11.6	5.4	5.3

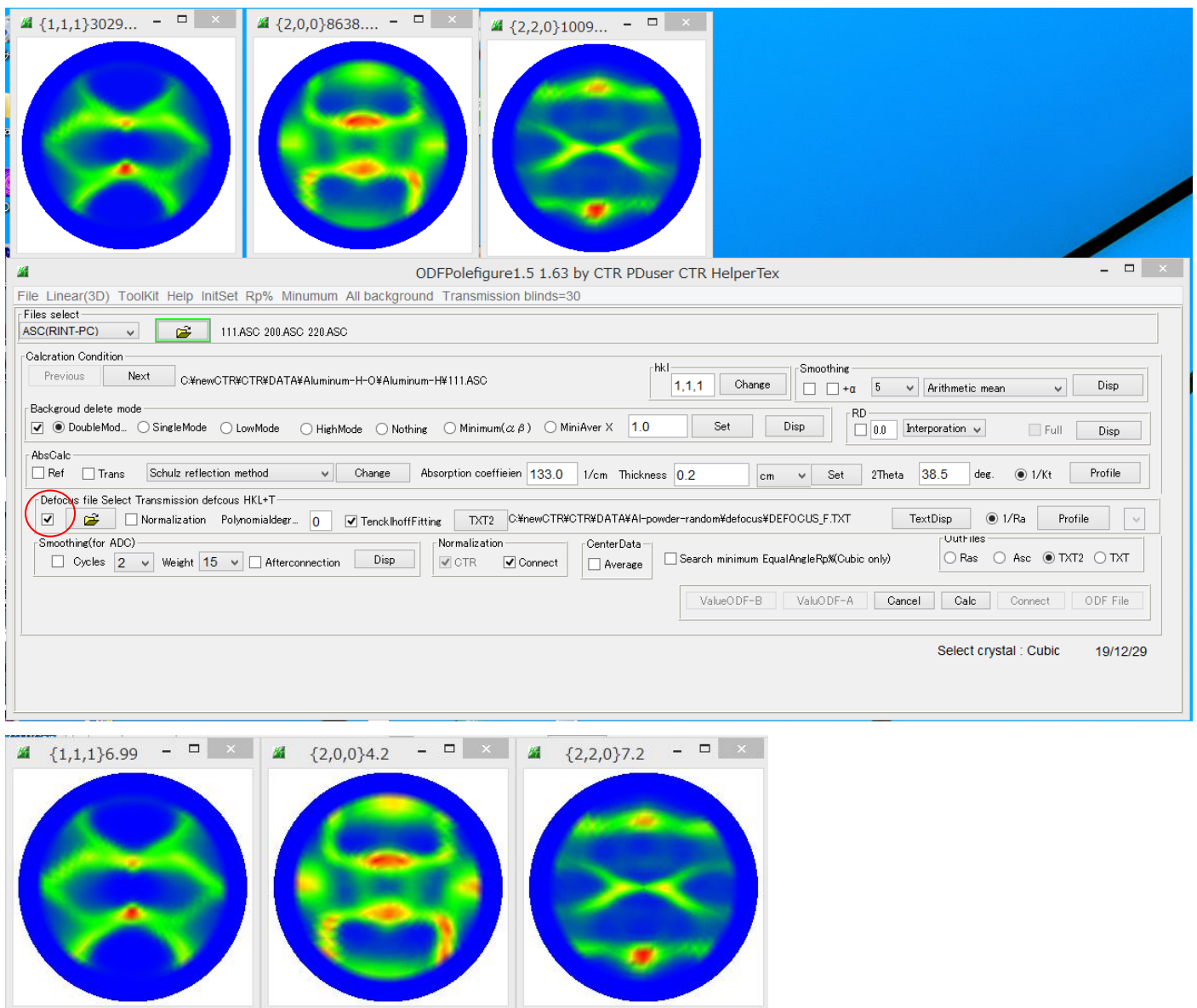
Cu1R.TPF
Average= 7.6 %

7. ValueODFVFによる再defocus補正

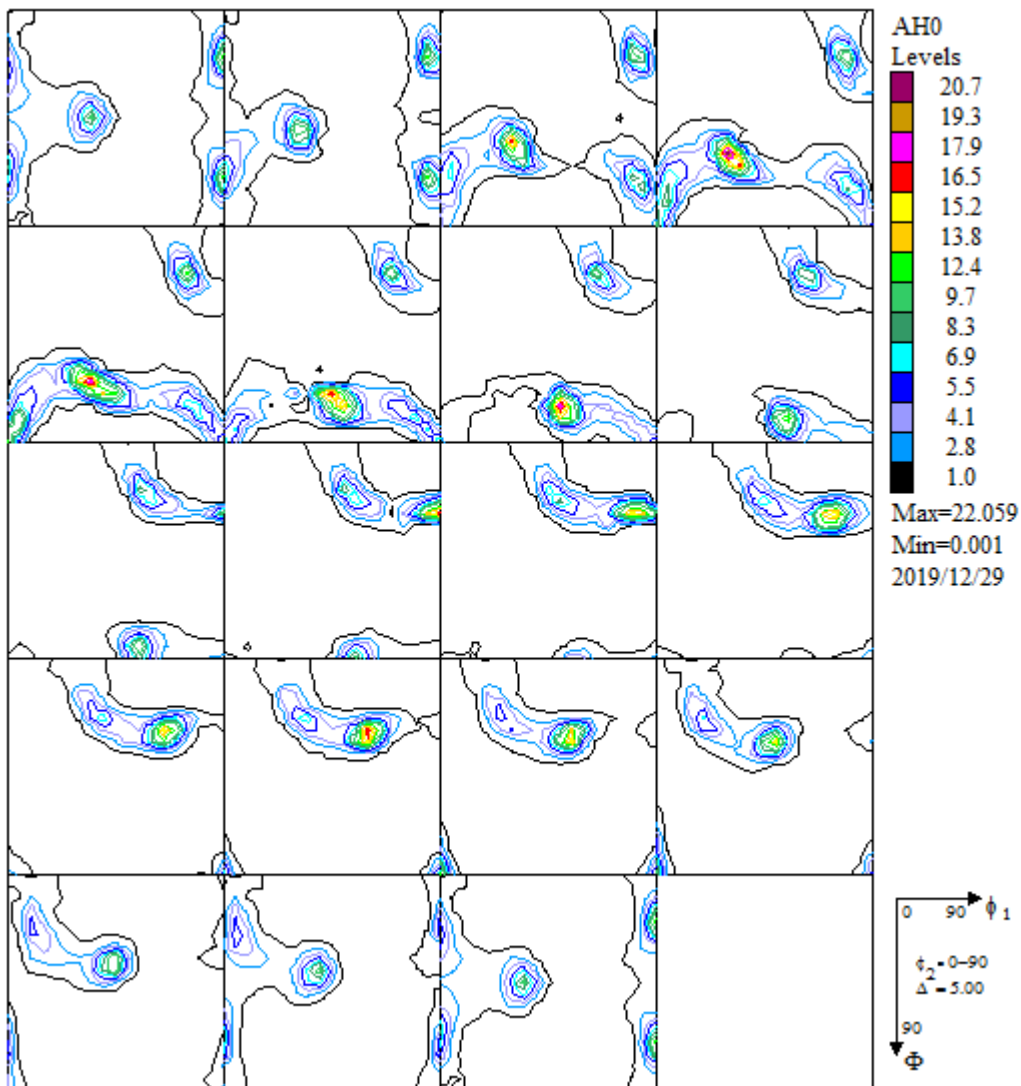
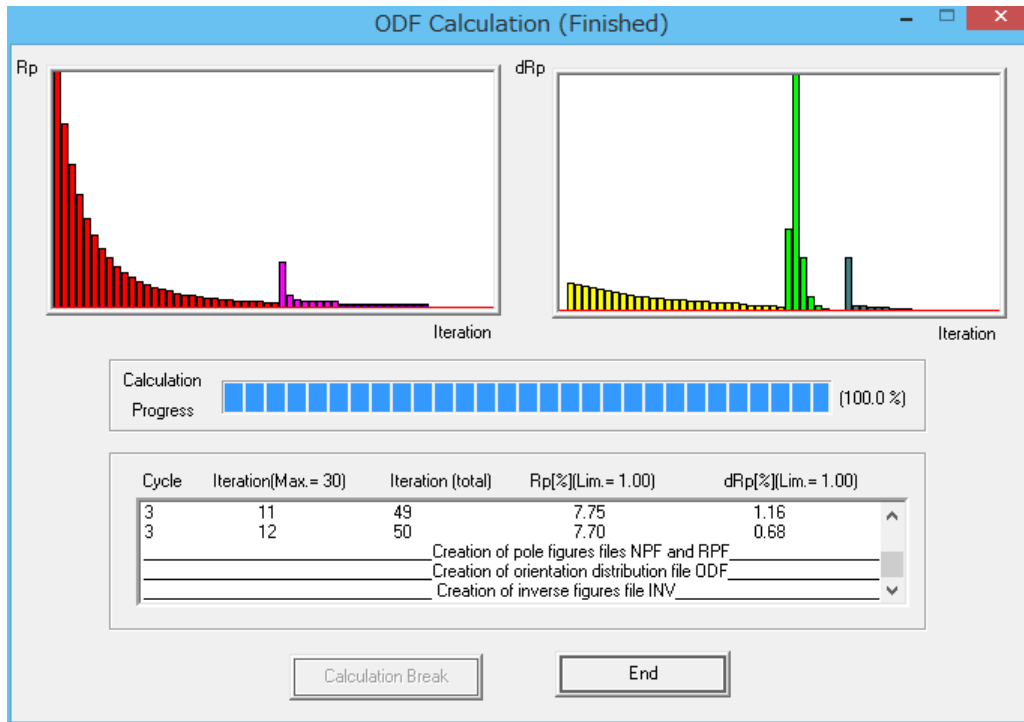
本来Cubic以外を対象にするが、Cubicでも計算可能、以下に流れを説明します。



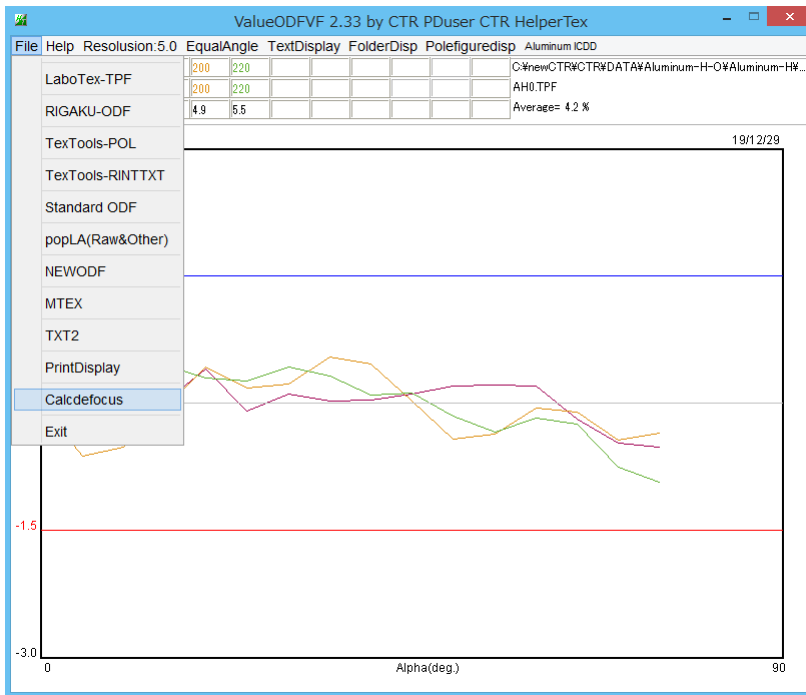
7. 1ODFPoleFigureによるdefocus補正 (再defocusなし)



7. 2LaboTexによるODF解析

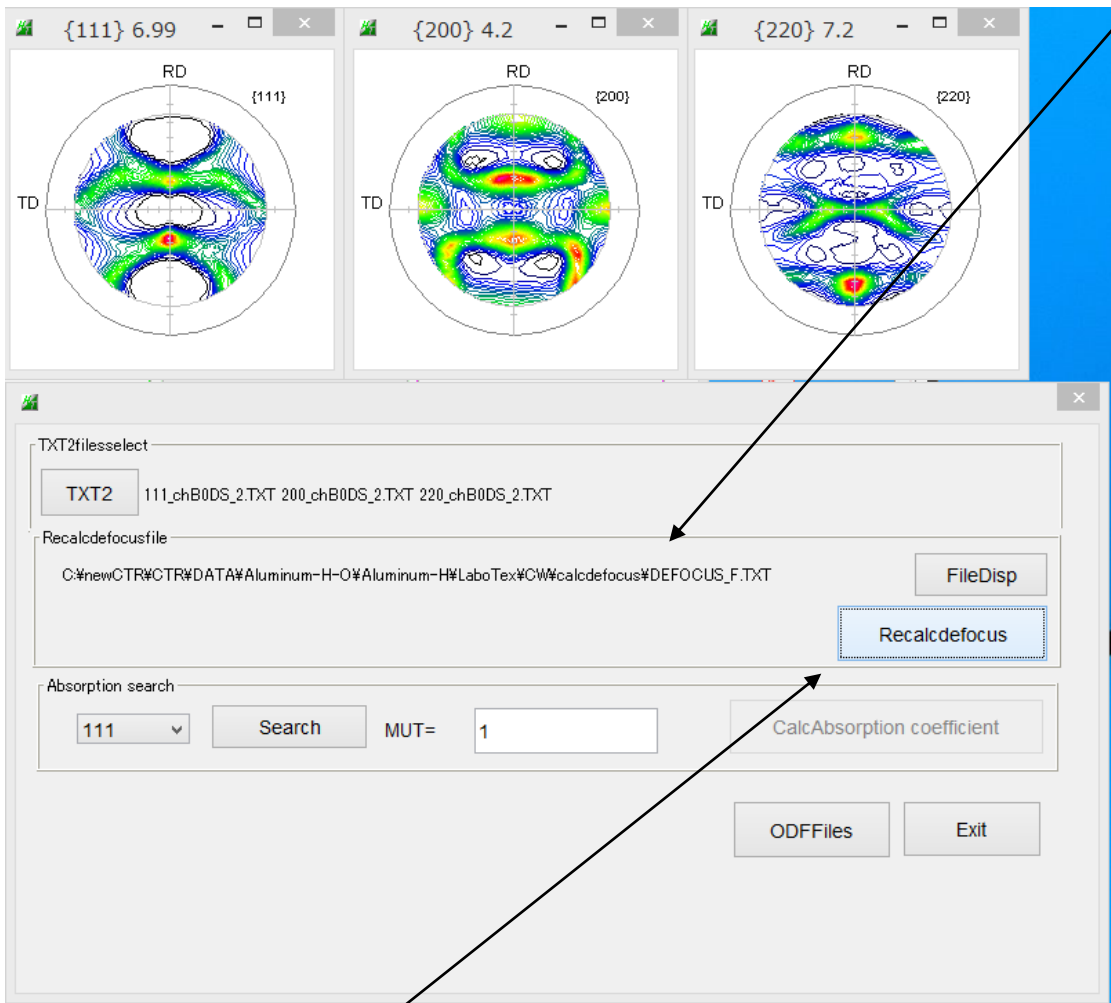


7. 3 Exportされた極点図をValueODFVFで処理



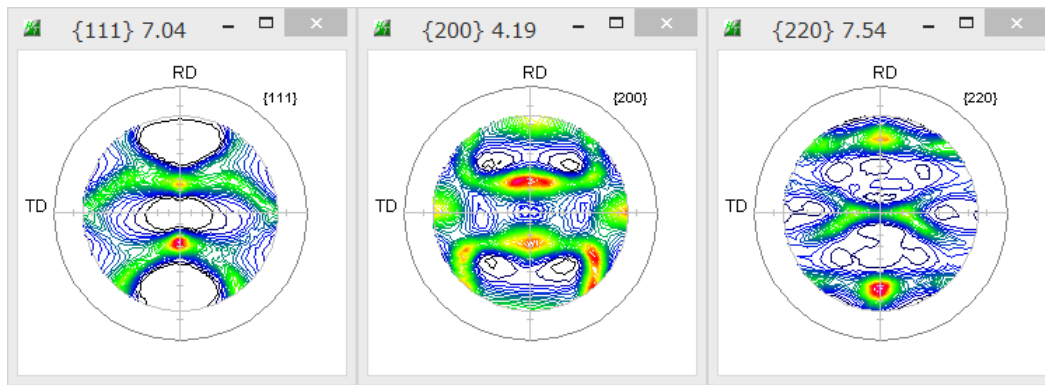
ODF入力極点図

ODF入力極点図と再計算極点図のRp%から計算した再 defocus 曲線



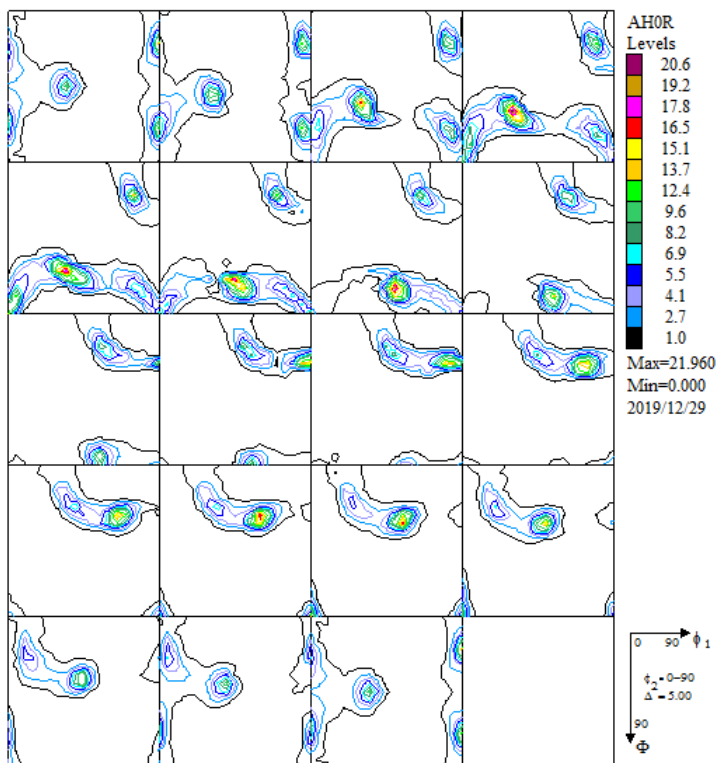
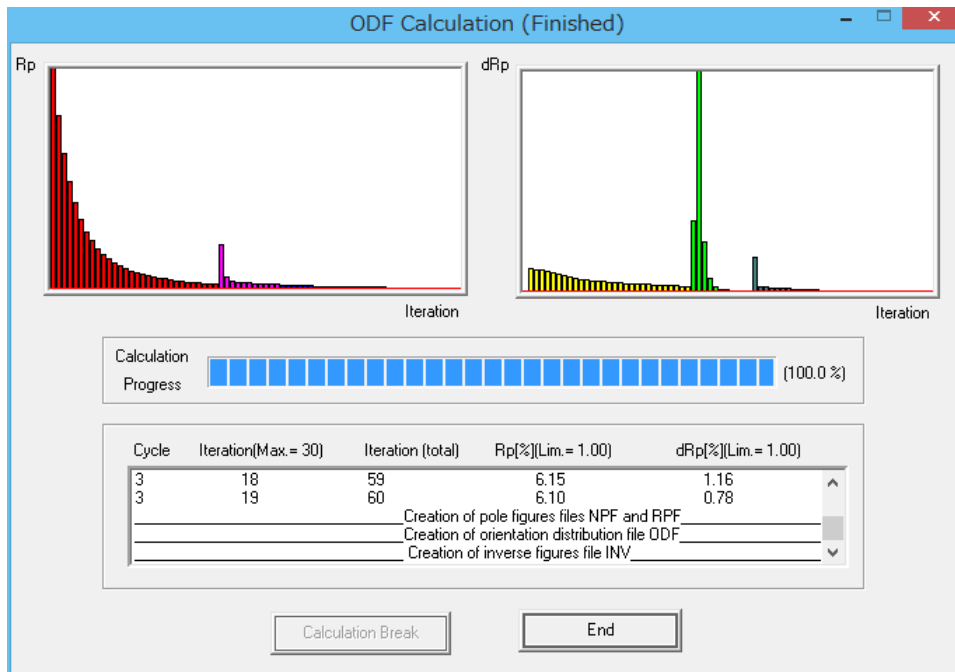
入力極点図を再 defocus 曲線で補正

補正された極点図

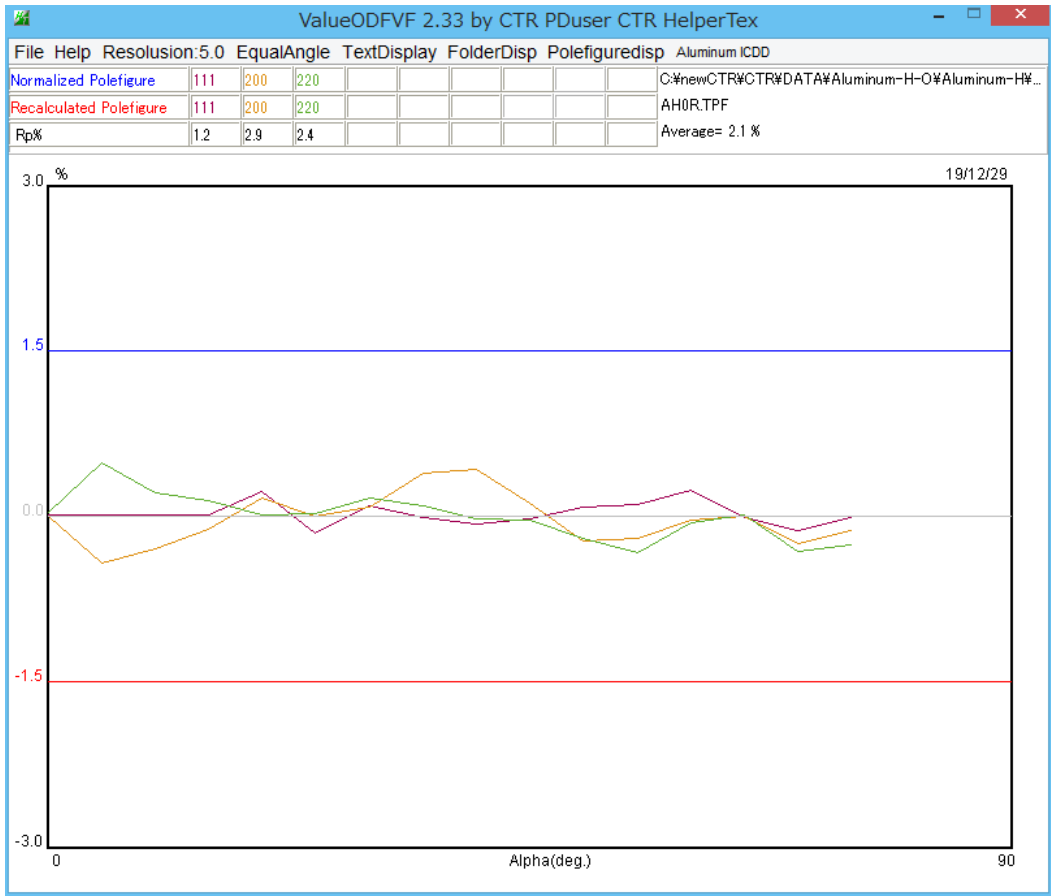


ODFfiles で ODF 再入力データを作成

7. 4 L a b o T e x で再ODF 解析



7. 5再defocus補正結果をValueODFVFで評価



今回Cubicで解析を行ったが、他の結晶系にも利用可能

又、実randomデータを利用したが、ODFPoleFigure2の計算defocusも利用可能

7. 6ValueODFVFによる再defocusマトメ

実データrandom補正	再defocus補正	LaboTexRp%	CTRRp%	ODFMax	ODFMin
○	×	7.70%	4.20%	22.06	0.001
	○	6.10%	2.10%	21.96	0.000

再defocus補正を利用することで、Rp%を下げたデータが得られます。