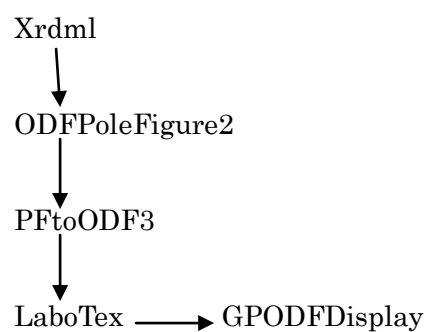


P A N a 極点測定データから r a n d o m の定量 (%)



2021年09月12日

*HelperTex Office*

## 1. 概要

材料の `random` 成分は、正確な極点処理と ODF 解析から定量が可能になります。

今回は、BCC 金属の PANA の `xrdml` ファイルから ODF 解析を行い、`random` 成分の定量を行う。

`defocus` ファイルから補正曲線を作成し、`metal` データの解析を行う。

手持ち極点 `xrdml` データではバックグラウンドが登録されていないため、バックグラウンド極点データを使って評価しています。

`random` の定量では、粉末を用いた極点図から `defocus` 曲線を作成し







`metal` 極点図を補正し、`LaboTex` で ODF 解析を行い、ODF ファイルの `Export` `Export` した ODF から `randomlevel` (%) を計算

`LaboTex` にて `VolumeFraction` を計算し `other` の評価  
手順を説明します。

### `defocus` データ

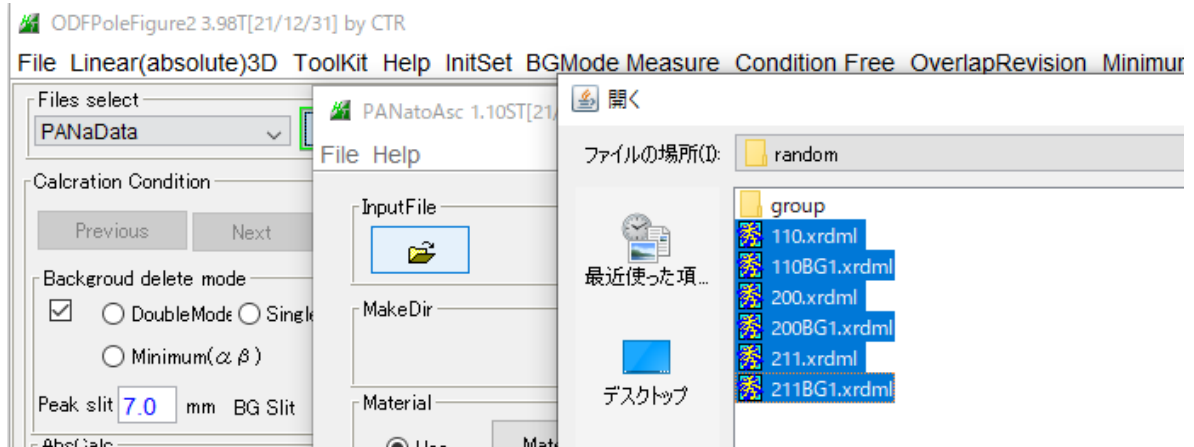
 211BG1.xrdml	XRDML ファイル
 110.xrdml	XRDML ファイル
 110BG1.xrdml	XRDML ファイル
 200.xrdml	XRDML ファイル
 200BG1.xrdml	XRDML ファイル
 211.xrdml	XRDML ファイル

### `metal` データ

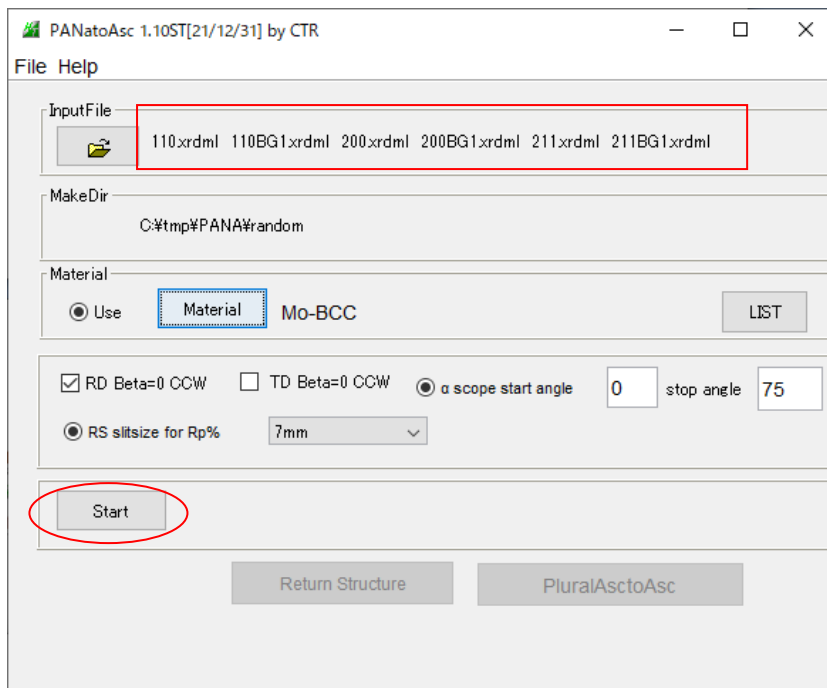
 211M.xrdml	XRDML ファイル
 200MBG1.xrdml	XRDML ファイル
 200M.xrdml	XRDML ファイル
 110MBG1.xrdml	XRDML ファイル
 110M.xrdml	XRDML ファイル
 211MBG1.xrdml	XRDML ファイル

## 2. d e f o c u s 曲線を作成する

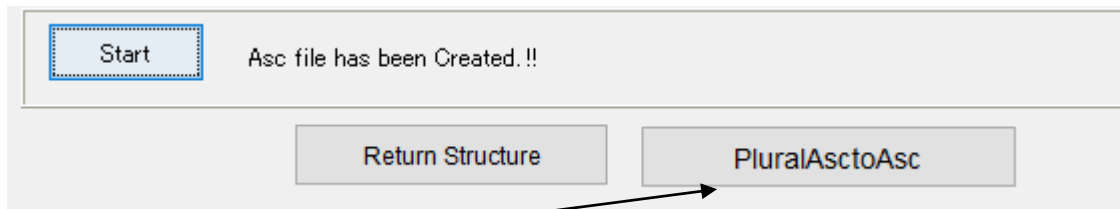
入力データを P A N a モードに切り替え、データの選択



選択した x r d m l ファイルが表示される

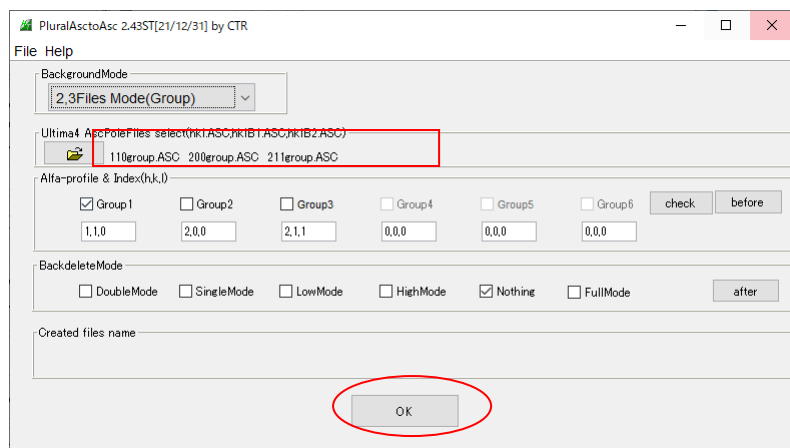


s t a r t で x r d m l → A S C 変換が行われる

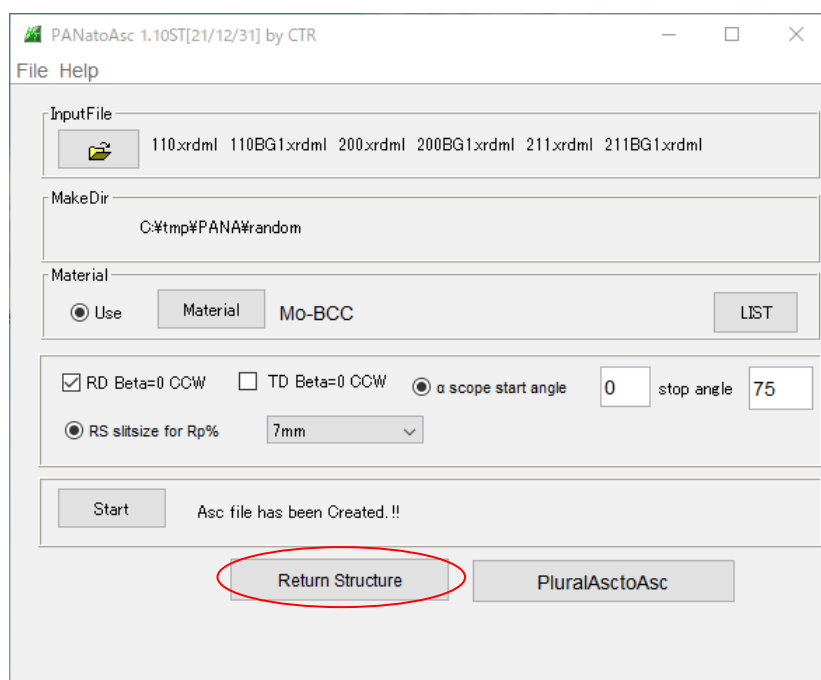


バックグラウンドと極点図を接続する。

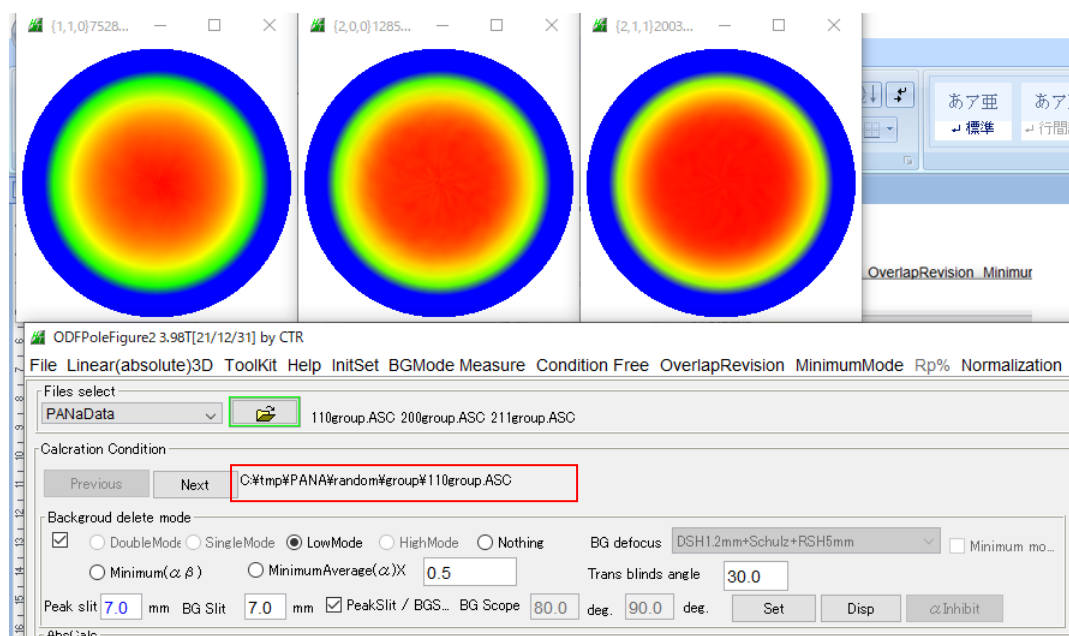
極点図にバックグラウンドを組み込んだ ASC ファイル名が表示されます。



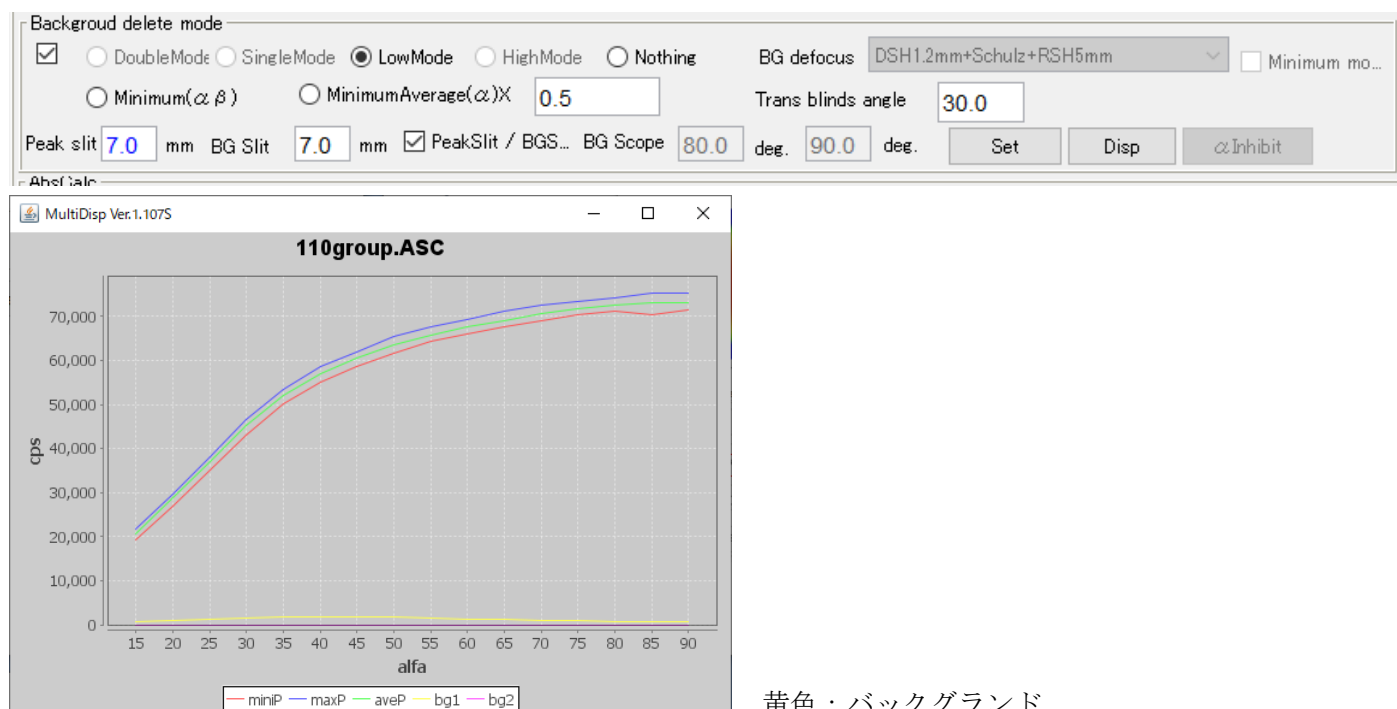
OK で画面が消える



x x r d m l ファイルからバックグラウンドを取り込んだ ASC ファイルが表示される



## バックグラウンドの確認



## バックグラウンド除去

ODFPoleFigure2 3.98T[21/12/31] by CTR

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

Files select PANaData 110group.ASC 200group.ASC 211group.ASC

Calculation Condition

Previous Next C:\tmp\#PANa\random\group\#110group.ASC

Background delete mode

☒ ☐ DoubleMode ☐ SingleMode ☒ LowMode ☐ HighMode ☐ Nothing

☐ Minimum( $\alpha\beta$ ) ☐ MinimumAverage( $\alpha$ )X 0.5

Peak slit 7.0 mm BG Slit 7.0 mm ☒ PeakSlit / BGS... BG Scope 80.0 deg. 90.0 deg. Set Disp  $\alpha$ Inhibit

BG defocus DSH1.2mm+Schulz+RSH5mm ☐ Minimum mo...

Trans blinds angle 30.0

Smoothing ☐ ☐ + $\alpha$  9 Arithmetic mean Disp

RD ☐ 0.0 Interpolation ☐ Full Disp

AbsCalc ☐ Ref ☐ Trans Schulz reflection method Change Absorption coefficient 133.0 1/cm Thickness 0.2 cm Set 2Theta 40.51 deg. ☒ 1/Kt Profile

Defocus file Select Transmission defocus HKL+T

☐ Defocus(1) functions file C:\CTR\DATA\#Aluminum-H-O\#Al\_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)

Limit Alfa Defocus value Free(LimitValue=0.0)

☐ Defocus(2) function files folder(Calc backdefocus)

☐ Search minimum EqualAngleRp%(Cubic only) ☒ 1/Ra Profile

Smoothing for ADC ☐ Cycles 1 Weight 9 Disp ☐ After connection

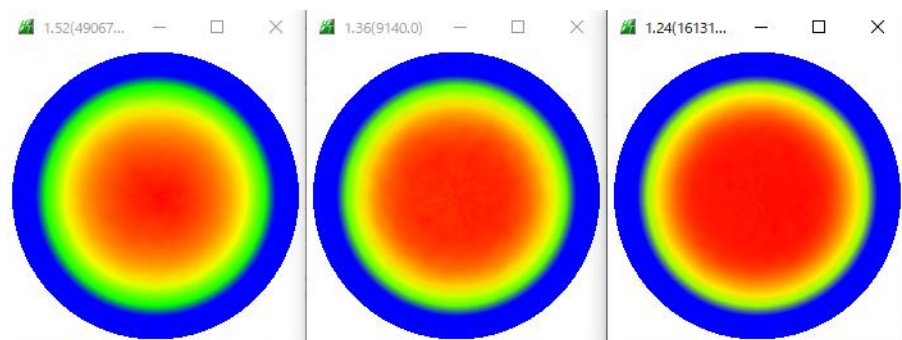
Normalization ☒ CTR ☐ Connect ☐ Average

OutFiles ☐ Asc ☐ MTextAsc ☐ Ras ☐ TXT ☒ TXT2

Cancel Calc Connect

Exit&ODF ODF ValueODFVF-B ValueODFVF-A

CTRHome : C: Select crystal : Cubic 21/09/12




補正曲線を呼び込む

> PANA > random > group > defocus

名前	更新日時	種類	サイズ
0_1F.TXT	2015/10/22 17:47	テキスト文書	1 KB
1_1F.TXT	2015/10/22 17:47	テキスト文書	1 KB
2_1F.TXT	2015/10/22 17:47	テキスト文書	1 KB
DEFOCUS_F.TXT	2015/10/22 17:47	テキスト文書	1 KB
real0_1F.TXT	2015/10/22 17:47	テキスト文書	1 KB
real1_1F.TXT	2015/10/22 17:47	テキスト文書	1 KB
real2_1F.TXT	2015/10/22 17:47	テキスト文書	1 KB

Defocus file Select Transmission defocus HKL+T


☐ Defocus(1) functions file  C:\CTR\DATA\Aluminum-H-O\AI\_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) Limit Alfa Defocus value Free(LimitValue=0.0)

☐ Defocus(2) function files folder(Calc backdefocus) ☐ Search minimum EqualAngleRp%(Cubic only) 1/Ra Profile

Defocus file Select Transmission defocus HKL+T

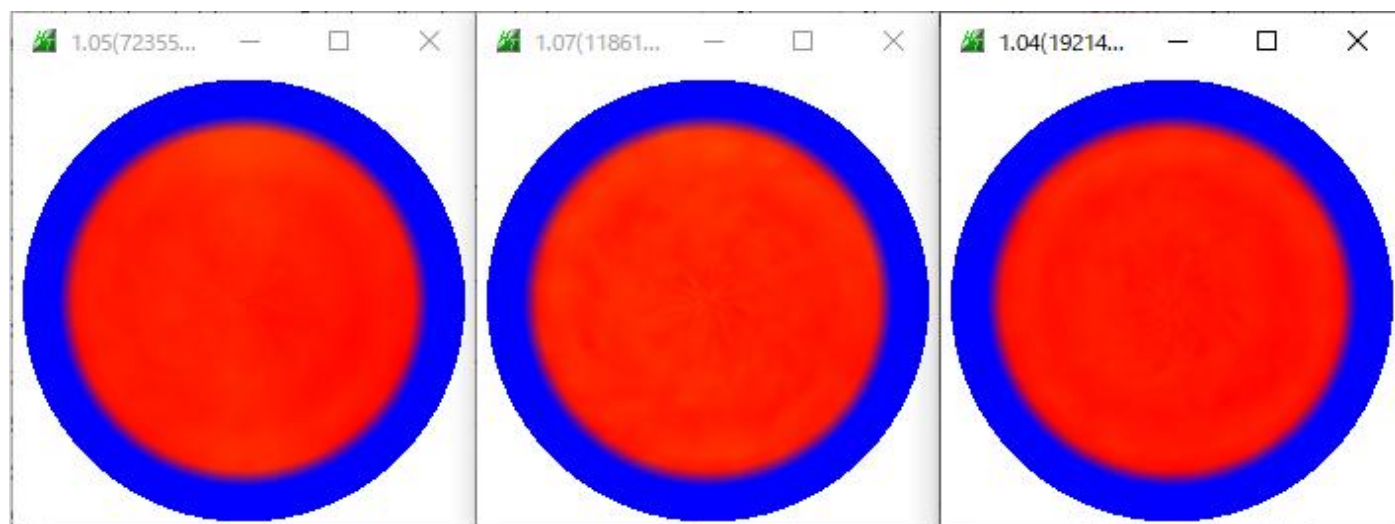
☒ Defocus(1) functions file  C:\tmp\PANA\random\group\defocus\DEFOCUS\_F.TXT

Make defocus function files by TXT2 Files ☐ Normalization degree of a polynomial 0 ☐ TenckhoffFitting

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

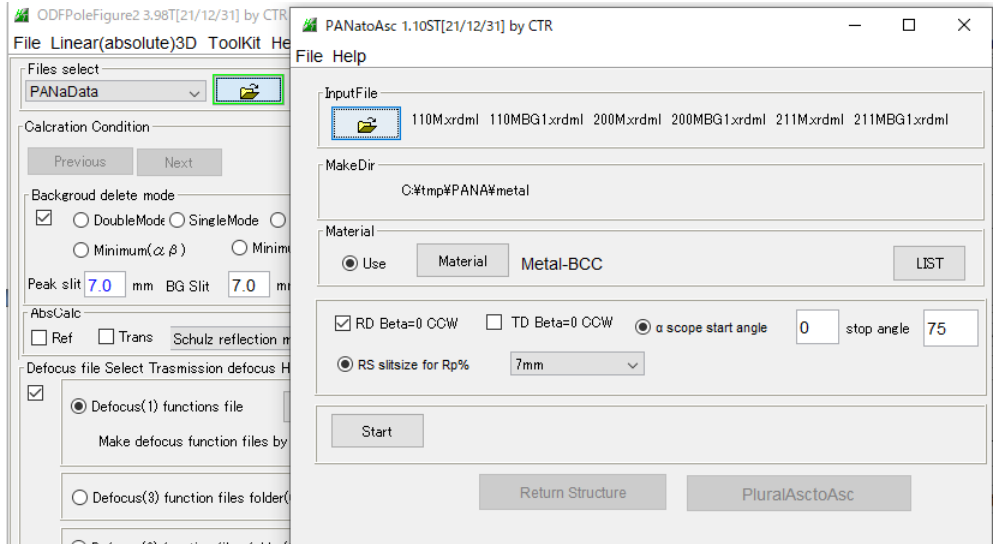
☐ Defocus(2) function files folder(Calc backdefocus) ☐ Search minimum EqualAngleRp%(Cubic only)

この補正曲線で r a n d o m データを補正すると

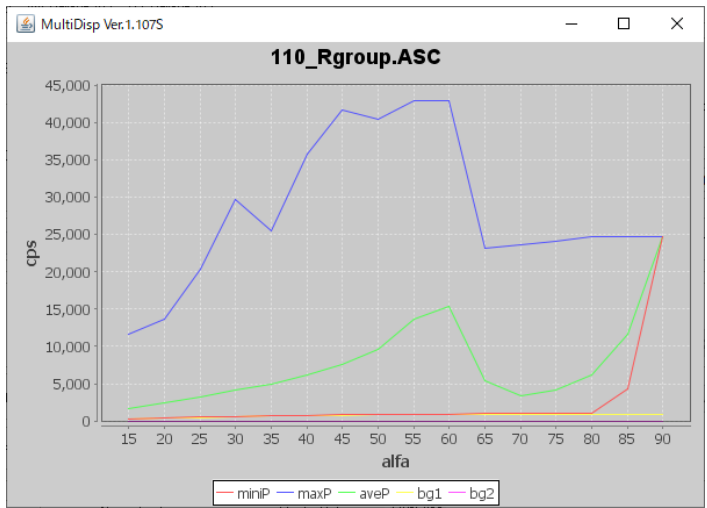
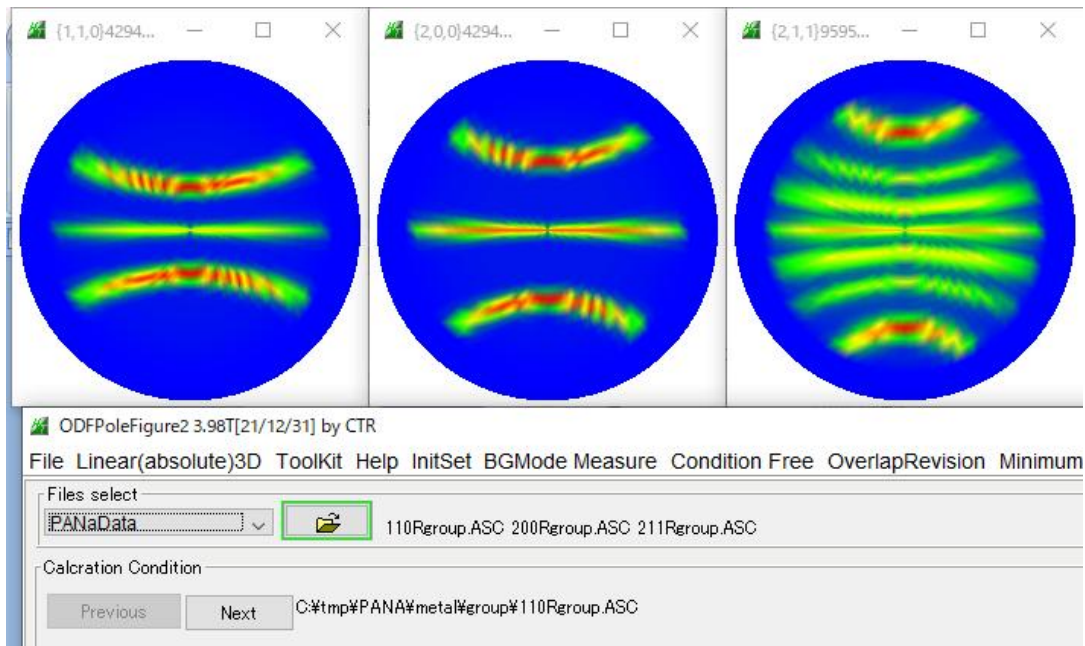


### 3. Metal のデータ処理

randomと同様にxrdml→ascを行う。



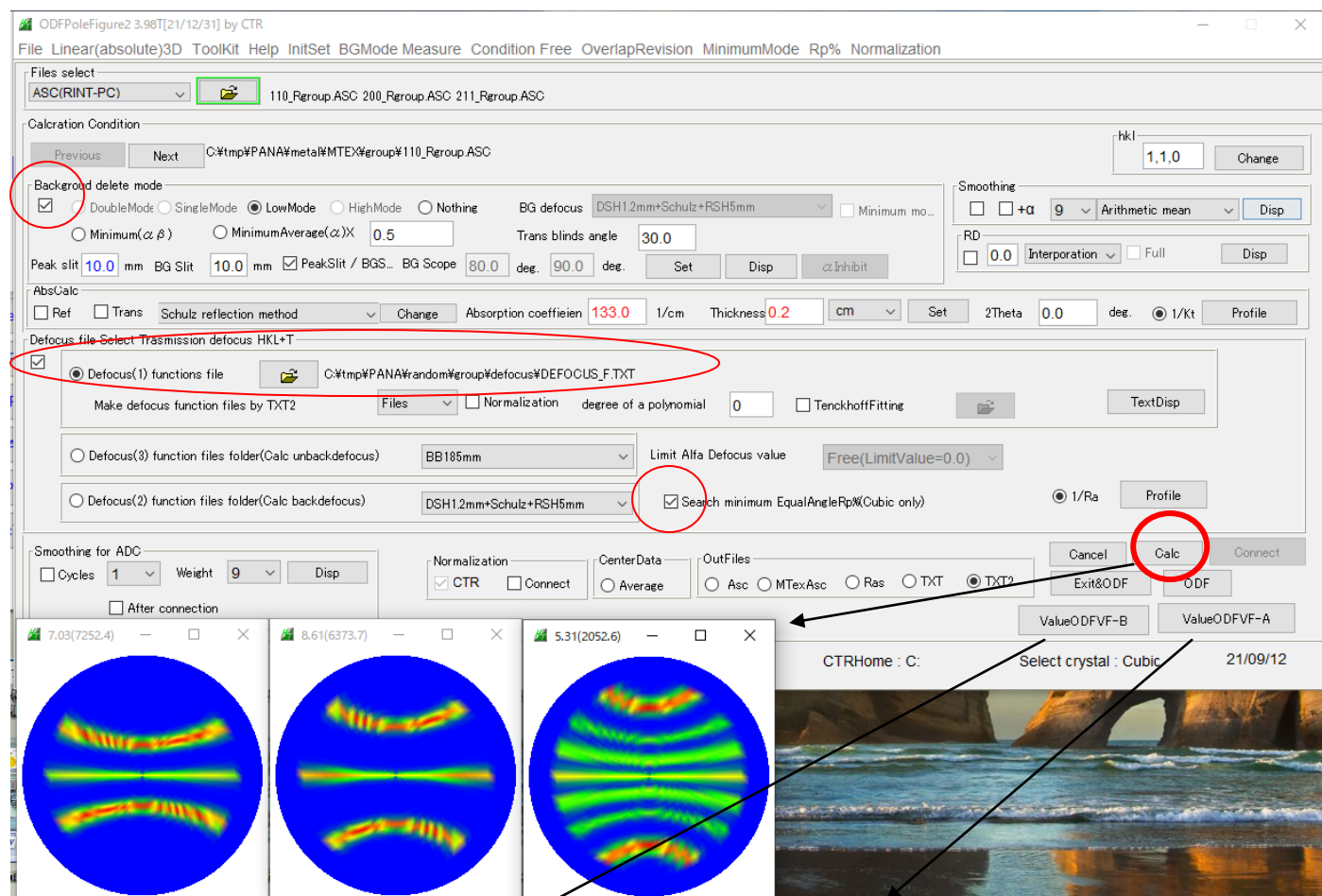
xrdml→asc変換データが表示される



黄色：バックグラウンドが登録されている。

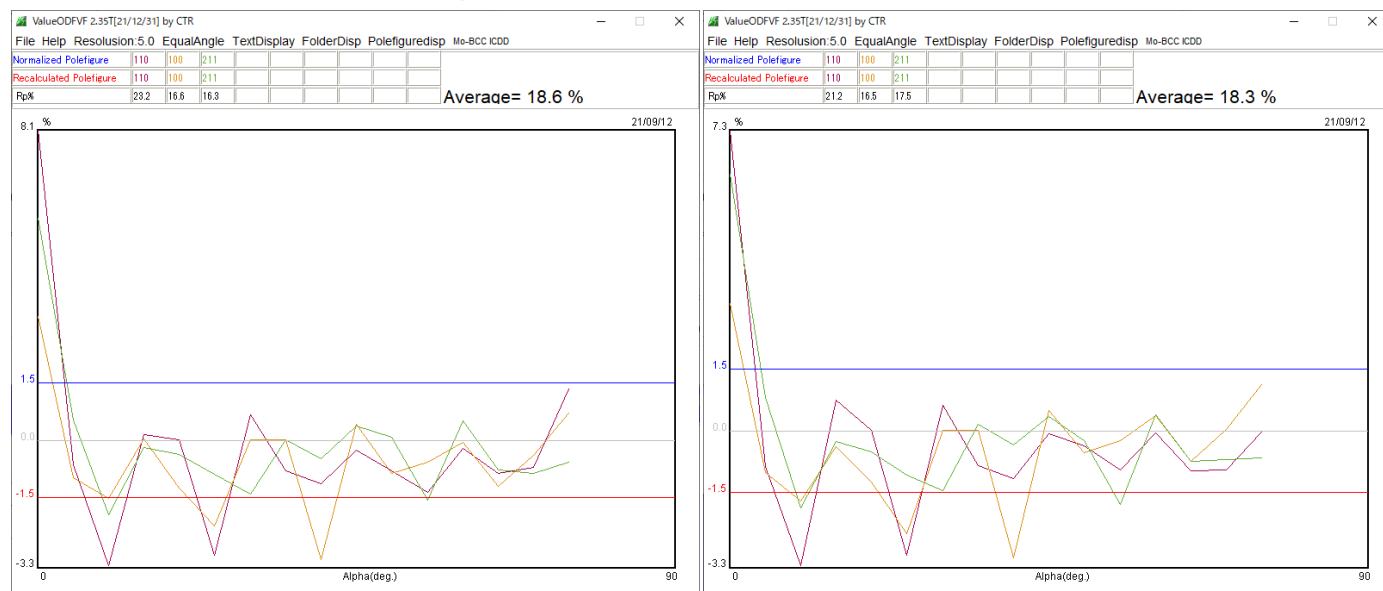


## バックグラウンド除去と d e f o c u s 補正

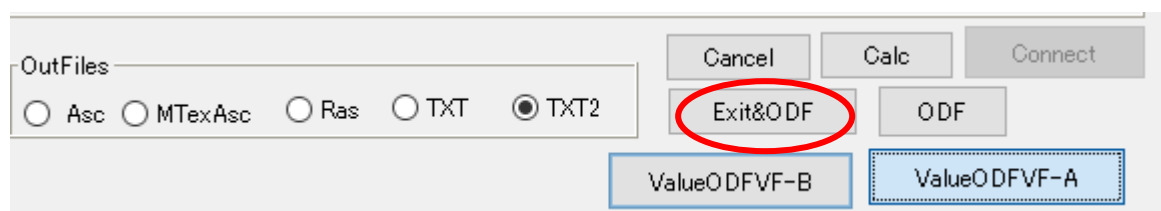


R p % の確認

再計算 R p %



ODF 向けデータ作成





4. P F t o O D F 3 で L a b o T e x 向けデータ作成

PFtoODF3 8.54T[21/12/31] by CTR

FileOptionSymmetricSoftwareDataHelp

Outside text(Vector) CCW

Outside CSV(Vector) CCW

Inside text CCW

\*LaboTex(EPF)CCW

Labotex(EPF) CW

Stadard ODF CCW

Siemens CCW

TexTools(txt) CCW

\*TexTools(pol) CCW

TexTools(pol) CW

\*TexTools(pol)CCW-zero cut

TexTools(pol)CW-zero cut

\*popLA(RAW)CCW

popLA(RAW)CW

StandaradODF2.5 CCW

Bunge(PF) CCW

MulTex(TD:beta=0)CCWXT2

\*MTEX(ASC) CCW

MTEX(ASC) CW

LaboTex(PPF) CW

\*LaboTex(PPF) ATEX CCW

TXT2

RAS

files) cif 7 - 0 (cubic)

alpha 90.0 beta 90.0 gamm 90.0

Initialize

Start

getHKL<-Filename

AllFileSelect

a,b,intens))	h,k,l	2Theta	Alpha scope	AlphaS	AlphaE	Select
	1,1,0	0.0	0.0->75.0	0.0	75.0	<input checked="" type="checkbox"/>
	2,0,0	0.0	0.0->75.0	0.0	75.0	<input checked="" type="checkbox"/>
	2,1,1	0.0	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"/>

Data

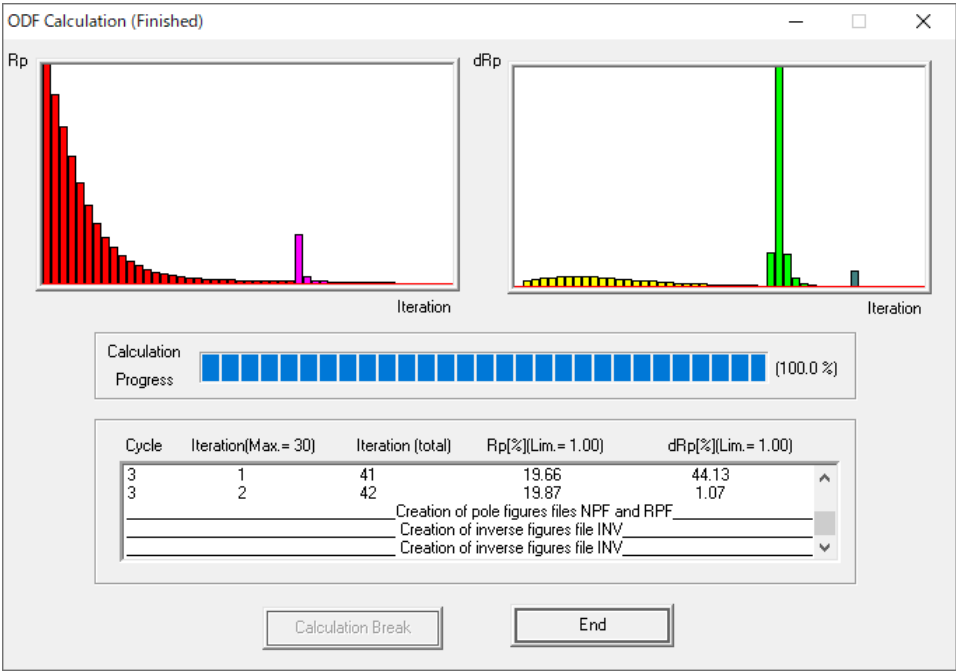
erage

Epf file save

Labotex(EPF),popLA(RAW) filename

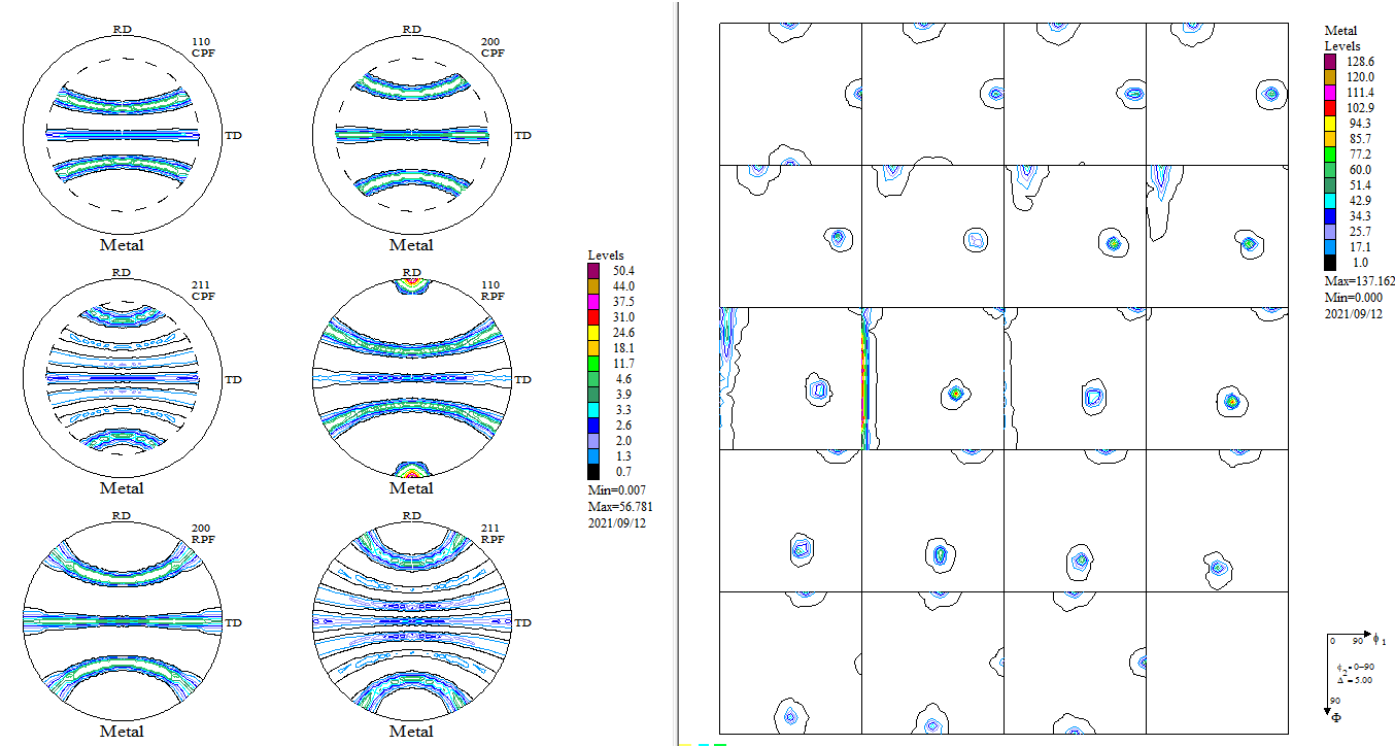
labotexCCW

5. L a b o T e xで読み込み



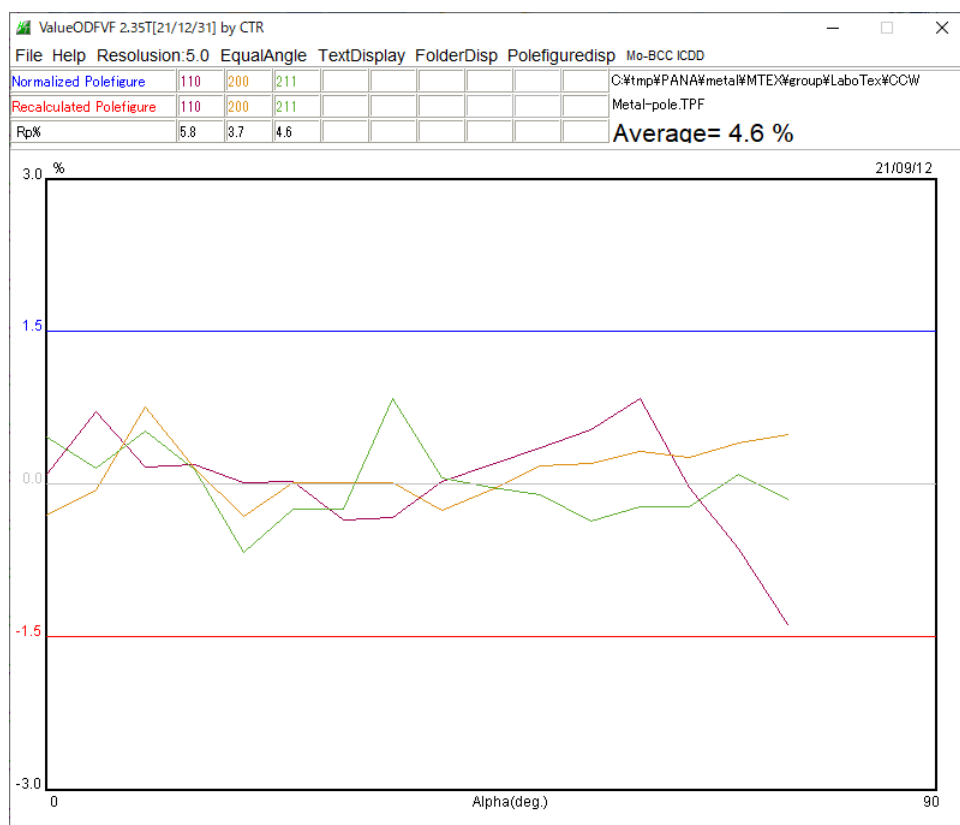
上段：入力極点図 下段：再計算極点図

入力極点図から計算した ODF 図



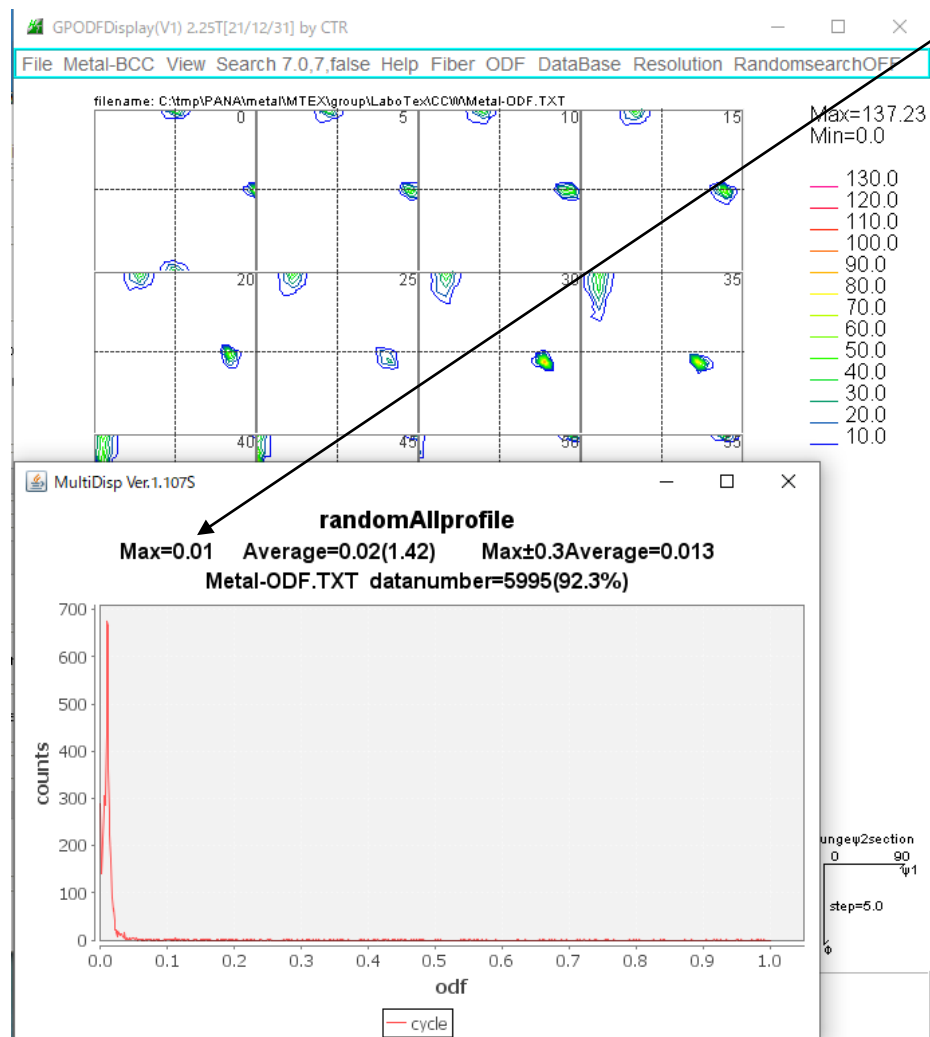
極点図と ODF 図を E x p o r t し評価を行う。

## 極点図から R p % 計算

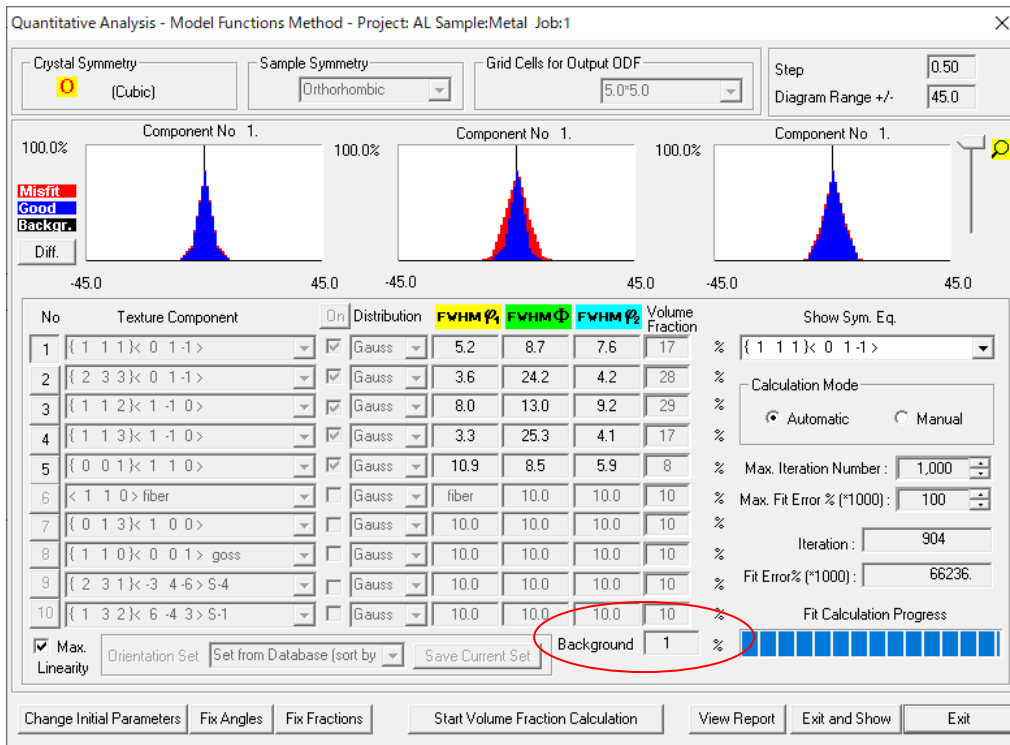


## 6. ODF 図から r a n d o m l e v e l 計算

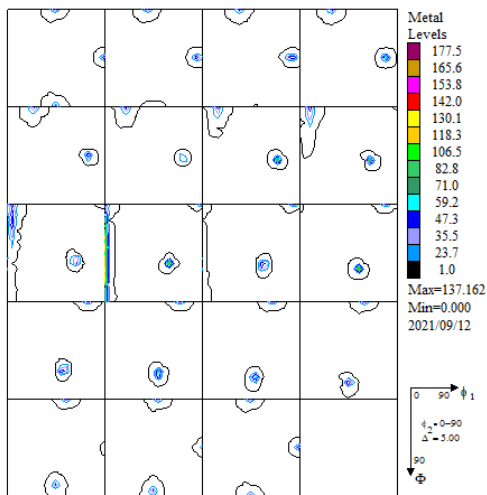
r a n d o m = 1 % の可能性が高い



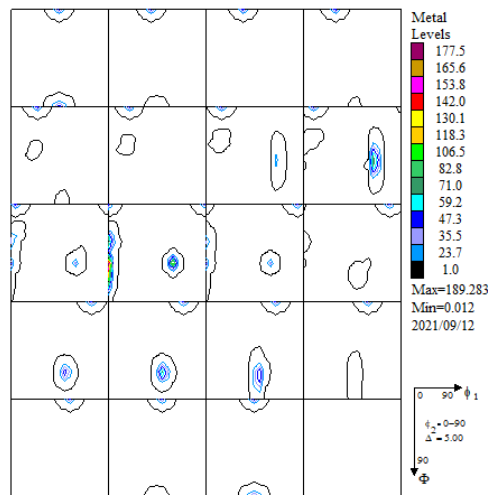
## 7. LaboTexによるVolumeFraction



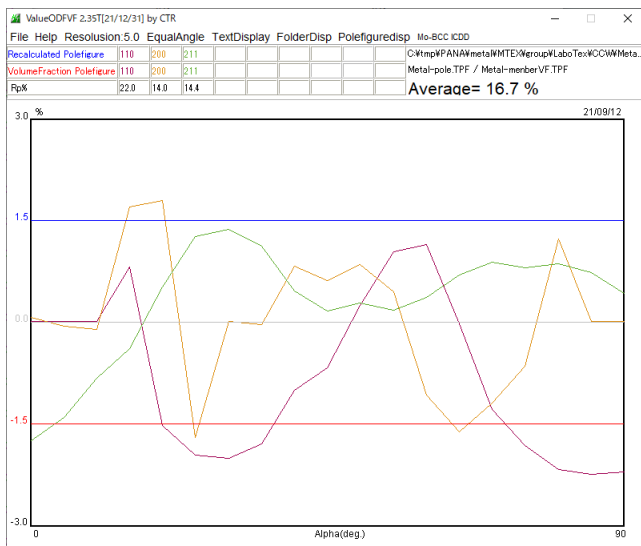
入力極点図から計算した ODF



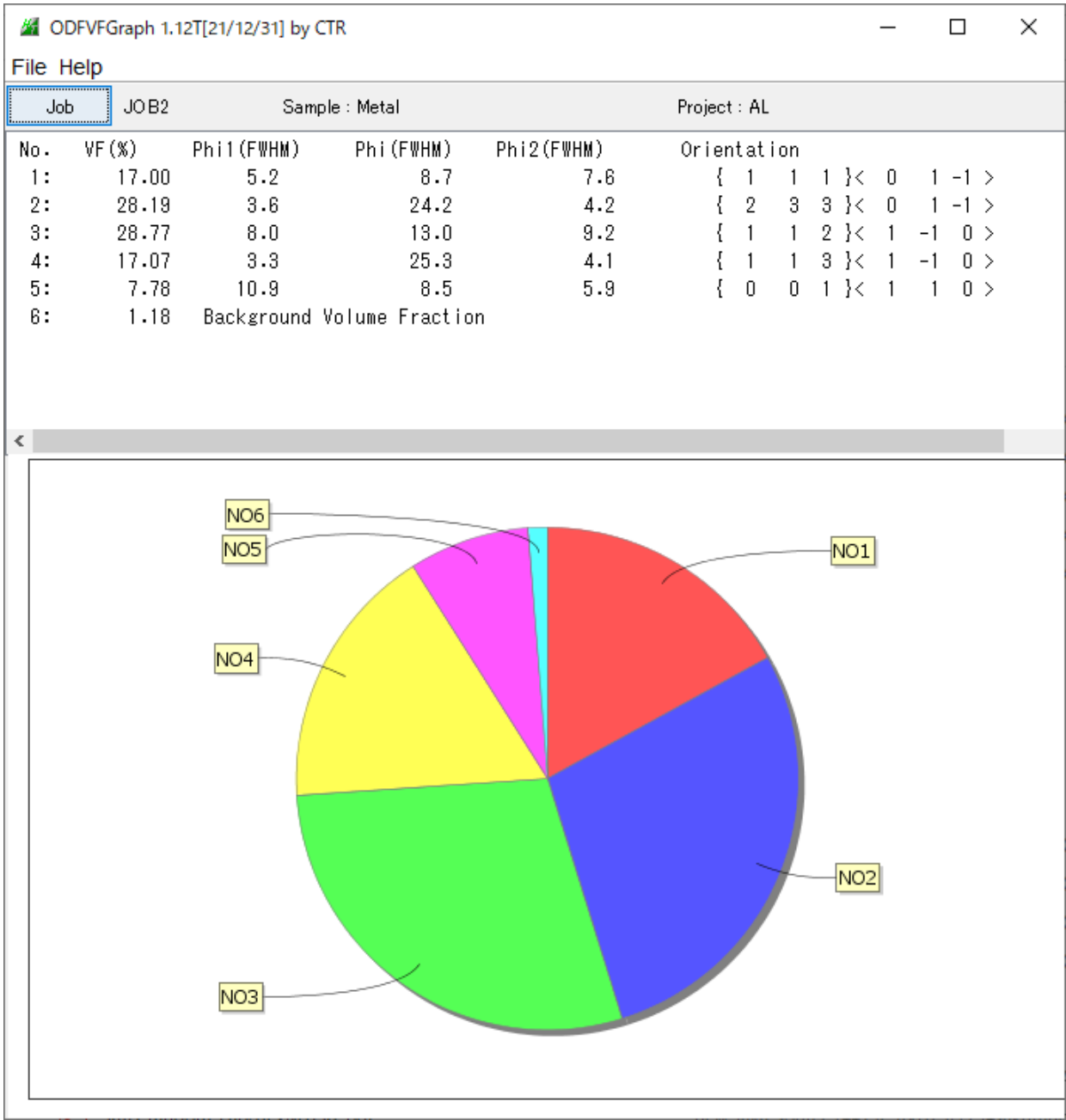
VolumeFraction から計算した ODF



VolumeFraction の Rp%



VolumeFraction結果



background=random+otherと考えると  
=random (1%) +other (0. 18%)  
GPODFDisplay結果と一致している。