

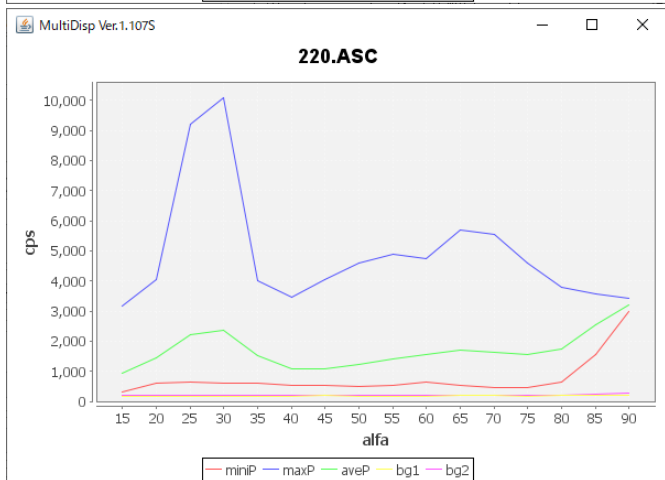
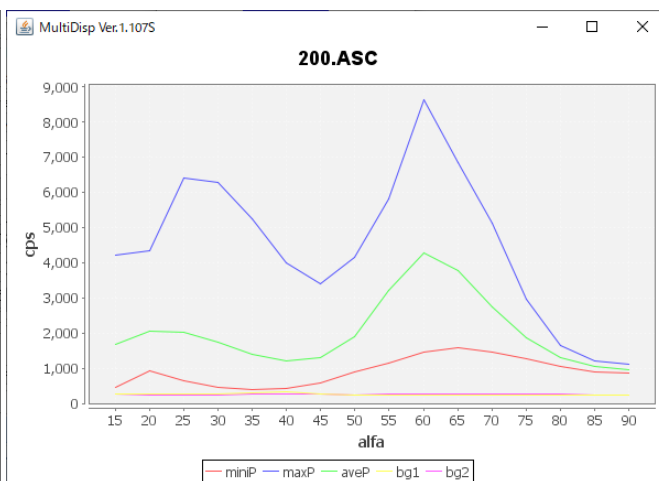
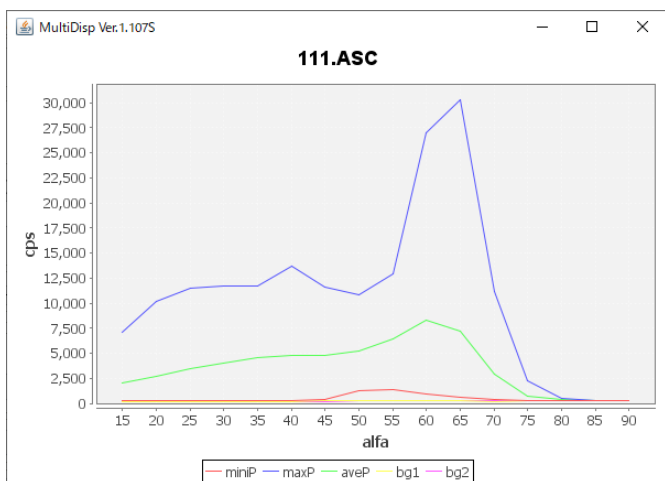
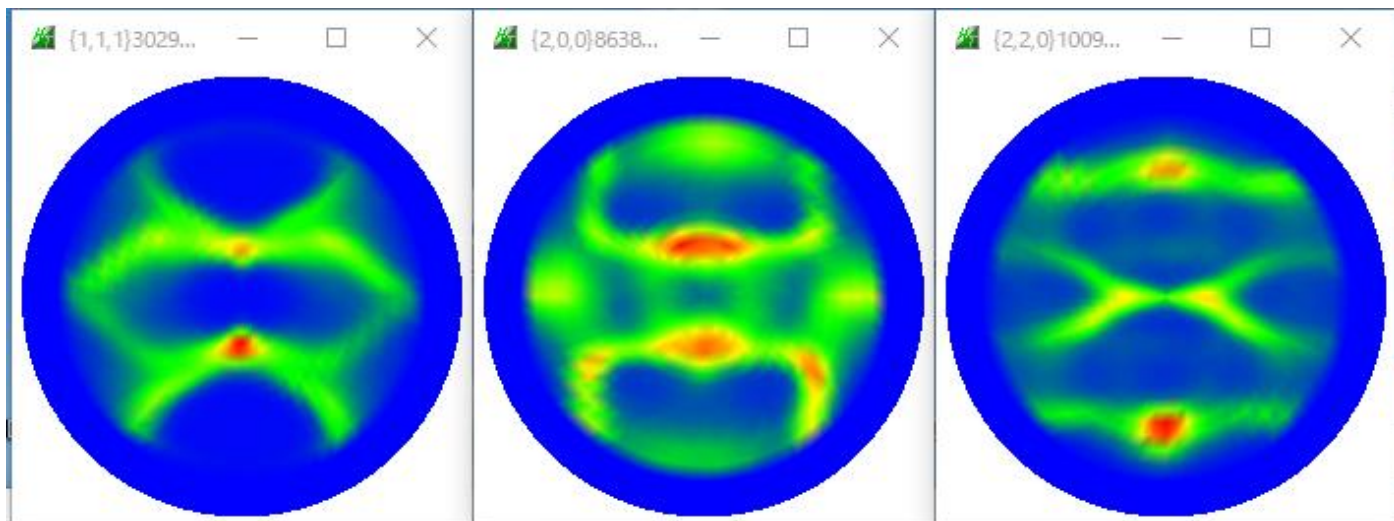
極点データ処理、VolumeFraction計算、シュミット因子計算
アルミニウムH材、O材のシュミット因子計算

2021年09月07日

HelperTex Office

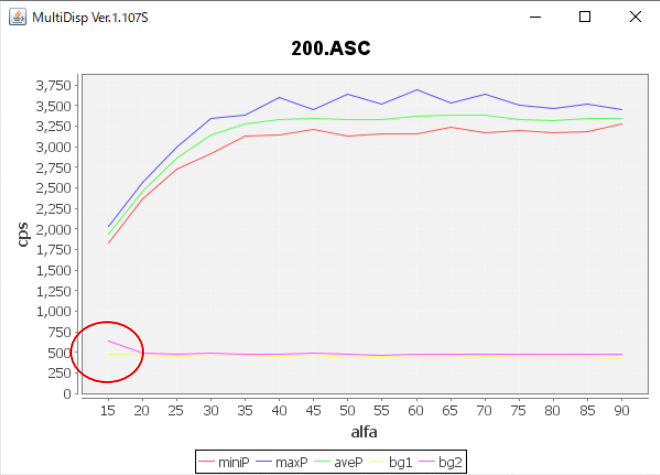
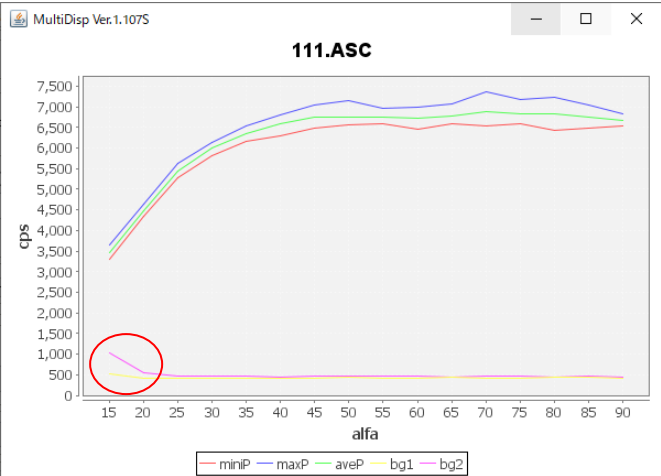
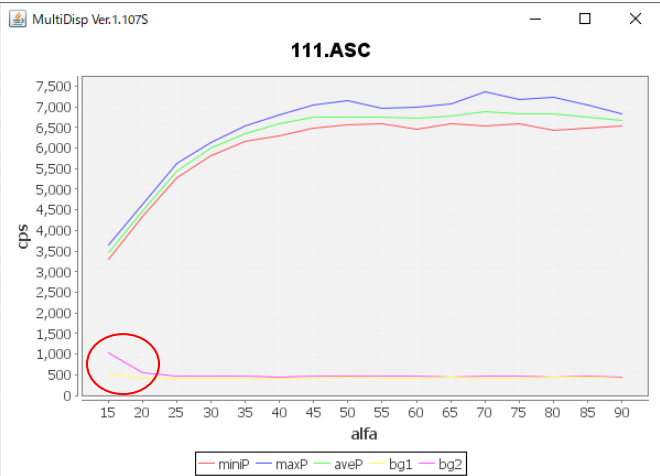
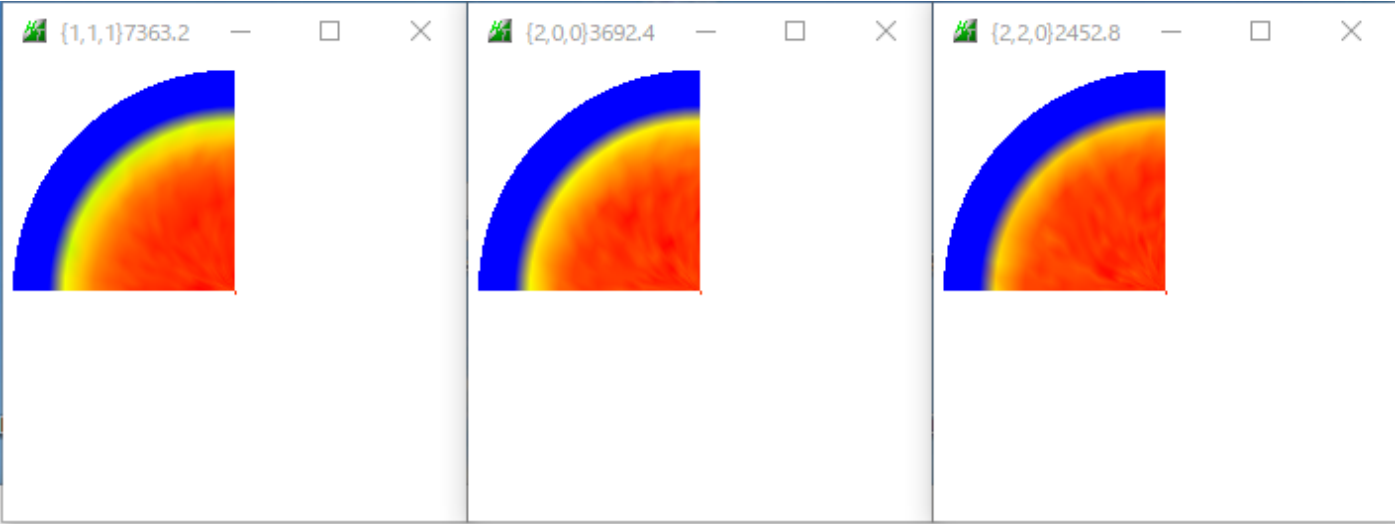
1. Sample (アルミニウムH材)
2. アルミニウム粉末 (random)
 2. 1 random試料からdefocus補正曲線作成
 2. 2 random試料データ処理
3. Sample (H材) データ処理
4. LaboTex入力データ作成
5. LaboTexODF解析
 5. 1入力極点図と ODF 解析後の極点図からRp%計算
 5. 2VolumeFraction評価
 5. 3 {301} <-103>を追加してVolumeFraction計算
 5. 4DataBaseに2方位追加したVolumeFraction計算
 5. 5入力極点図から計算した ODF 図の極点図とVF%の極点図比較
6. DataBaseに2方位追加したVolumeFractionからシュミット因子計算
7. Sample (アルミニウムO材)
8. Sample (O材) データ処理
9. LaboTex入力データ作成
10. LaboTexODF解析
 10. 1入力極点図と ODF 解析後の極点図からRp%計算
 10. 2VolumeFraction評価
 10. 3 {114} <-1-72>を追加してVolumeFraction計算
 10. 4入力極点図から計算した ODF 図の極点図とVF%の極点図比較
11. DataBaseに1方位追加したVolumeFractionからシュミット因子計算

1. Sample (アルミニウムH材)



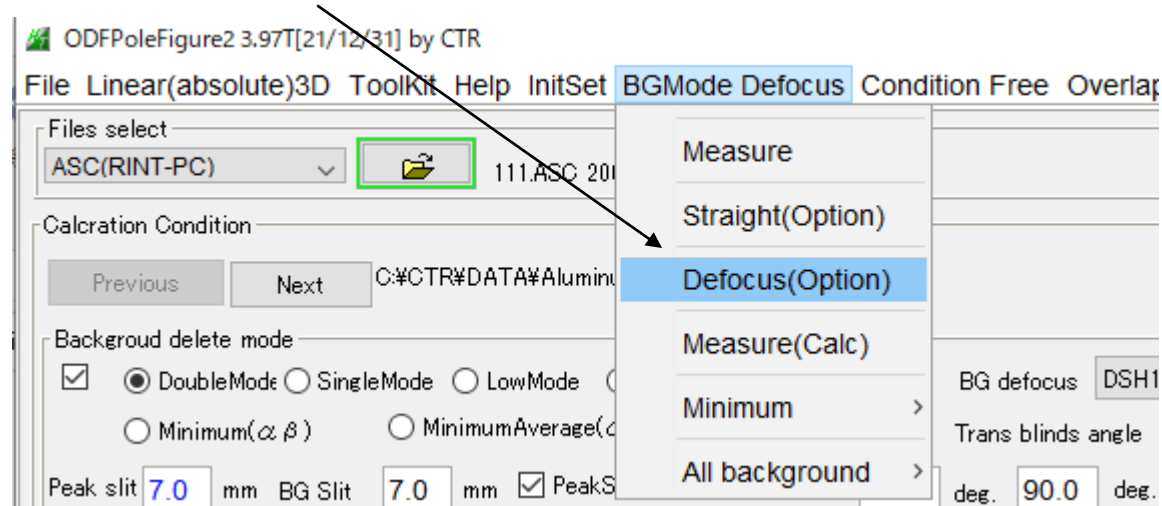
バックグラウンドが非常に小さい→ random成分なし

2. アルミニウム粉末 (random)

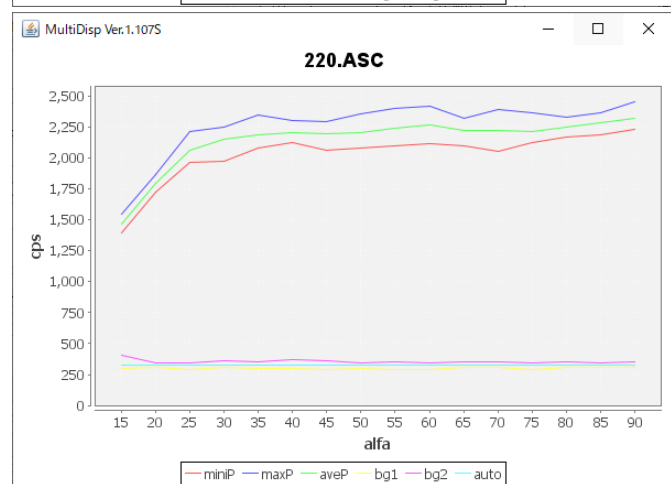
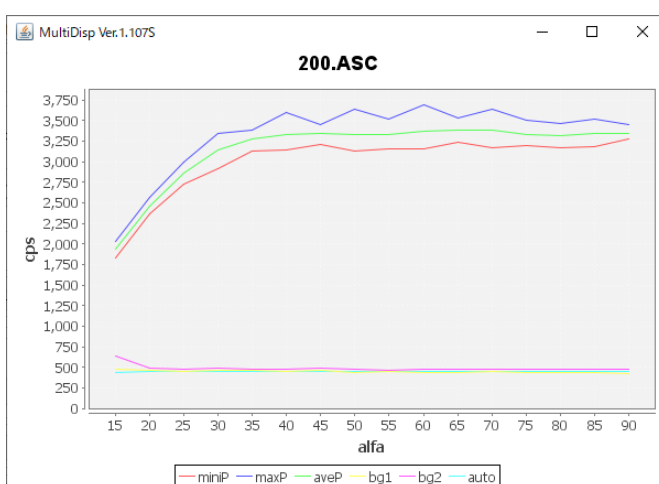
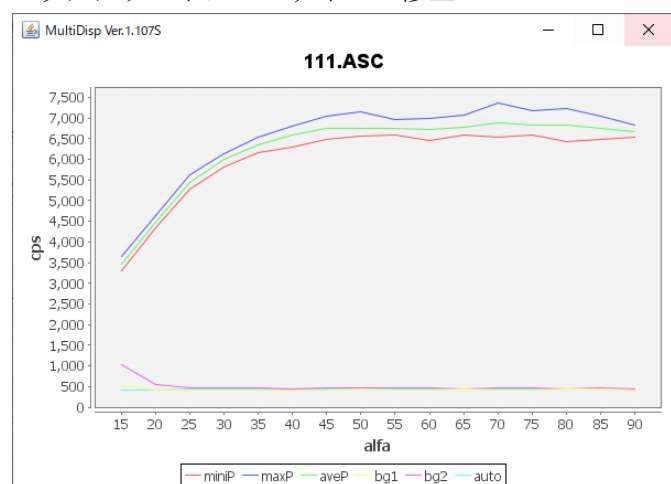


試料を煽った $\alpha = 15$ 度のバックグラウンドが上がり気味のため、データ処理で修正を行う。

2. 1 random試料からdefocus補正曲線作成 バックグラウンド修正モード



バックグラウンドプロファイルの修正



2. 2 r a n d o m試料データ処理

ODFPoleFigure2 3.97T[21/12/31] by CTR

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

Files select

ASC(RINT-PC) 111.ASC 200.ASC 220.ASC

Calcration Condition

Previous Next C:\CTR\DATA\Aluminum-H-O\Al_random\220.ASC

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

Smoothing

☐ ☐ +a 3 Arithmetic mean Disp

RD 0.0 Interporation ☒ Full Disp

AbsCalc

☐ Ref ☐ Trans Schulz reflection method Change Absorption coeffien 133.0 1/cm Thickness 0.2 cm Set 2Theta 65.18 deg. ☒ 1/Kt Profile

Defocus file Select Transmission defocus HKL+T

☐ Defocus(1) functions file

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 6 Disp

☐ After connection

Normalization

☒ CTR ☐ Connect ☒ Average

OutFiles

☐ Asc ☐ MTexAsc ☐ Ras ☐ TXT ☒ TXT2

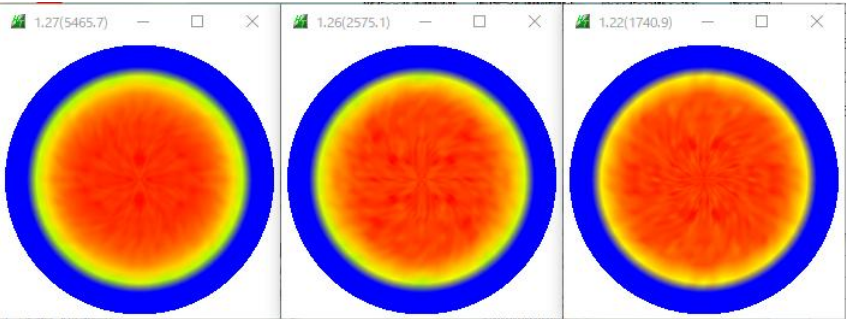
Cancel Calc Connect

Exit&ODF ODF

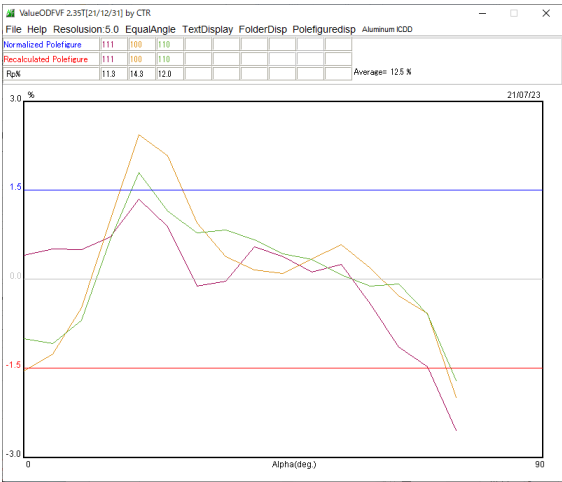
ValueODFVF-B ValueODFVF-A

CTRHome : C: Select crystal : Cubic 21/07/23

バックグラウンド削除+規格化



R p %



d e f o c u sデータ登録

Defocus file Select Trasmission 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

3. Sample (H材) データ処理

ODFPoleFigure2 3.97T[21/12/31] by CTR

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

Files select

ASC(RINT-PC) 111.ASC 200.ASC 220.ASC

Calculation Condition

Previous Next C:\CTR\DATA\Aluminum-H-O\Aluminum-H\111.ASC

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 38.5 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) 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 6 Disp ☐ After connection

Normalization

☒ CTR ☐ Connect ☒ Average

OutFiles

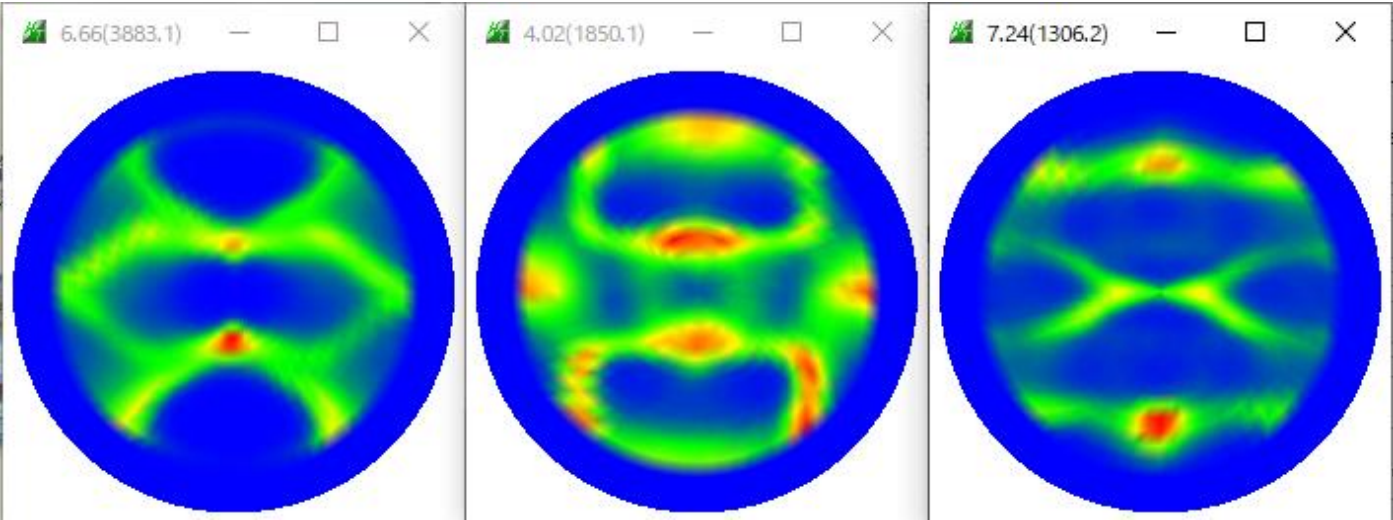
☐ Asc ☐ MTexAsc ☐ Ras ☐ TXT ☒ TXT2

Cancel Calc Connect

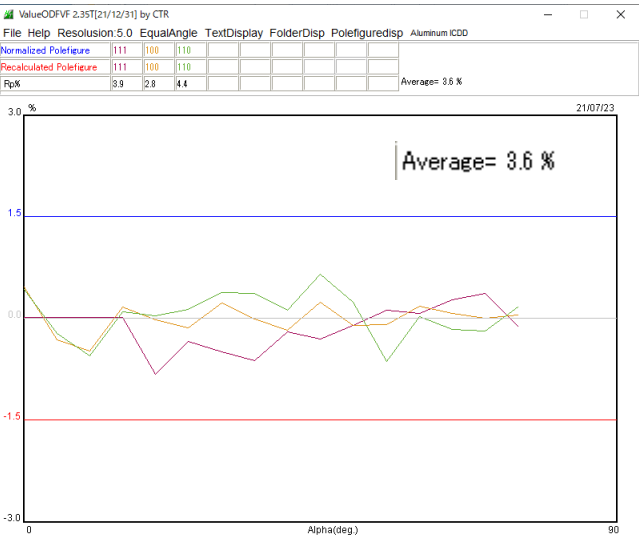
Exit&ODF ODF

ValueODFVF-B ValueODFVF-A

Filemake success !! CTRHome : C: Select crystal : Cubic 21/07/23



R p %が最小に調整する。



d e f o c u sは補正されています。

4. LaboTex入力データ作成

PfToODF3 8.52T[21/12/31] by CTR

FileOptionSymmetricSoftwareDataHelp

Lattice constant

MaterialAluminum.txt

Structure Code(Symmetries after Schoenfiles)cif7 - O (cubic)

a1.0<=b1.0<=c1.0alpha90.0beta90.0gamm90.0

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 |
|--|-------|--------|-------------|--------|--------|-------------------------------------|
| <div>111_chB02D1CAS_2.TXT</div> | 1,1,1 | 38.5 | 0.0->75.0 | 0.0 | 75.0 | <input checked="" type="checkbox"/> |
| <div>200_chB02D1CAS_2.TXT</div> | 2,0,0 | 44.73 | 0.0->75.0 | 0.0 | 75.0 | <input checked="" type="checkbox"/> |
| <div>220_chB02D1CAS_2.TXT</div> | 2,2,0 | 65.1 | 0.0->75.0 | 0.0 | 75.0 | <input checked="" type="checkbox"/> |
| <div></div> | 2,1,0 | 0.0 | | 0.0 | 0.0 | <input type="checkbox"/> |
| <div></div> | 2,1,1 | 0.0 | | 0.0 | 0.0 | <input type="checkbox"/> |
| <div></div> | 3,1,1 | 0.0 | | 0.0 | 0.0 | <input type="checkbox"/> |
| <div></div> | 4,0,0 | 0.0 | | 0.0 | 0.0 | <input type="checkbox"/> |
| <div></div> | 3,3,1 | 0.0 | | 0.0 | 0.0 | <input type="checkbox"/> |
| <div></div> | 4,2,2 | 0.0 | | 0.0 | 0.0 | <input type="checkbox"/> |
| <div></div> | 5,1,1 | 0.0 | | 0.0 | 0.0 | <input type="checkbox"/> |
| <div></div> | 5,2,1 | 0.0 | | 0.0 | 0.0 | <input type="checkbox"/> |
| <div></div> | 5,3,1 | 0.0 | | 0.0 | 0.0 | <input type="checkbox"/> |

Comment

111_chB02D1CAS_2.TXT 200_chB02D1CAS_2.TXT 220_chB02D1CAS_2.TXT

Symmetric typeFull

Center Data

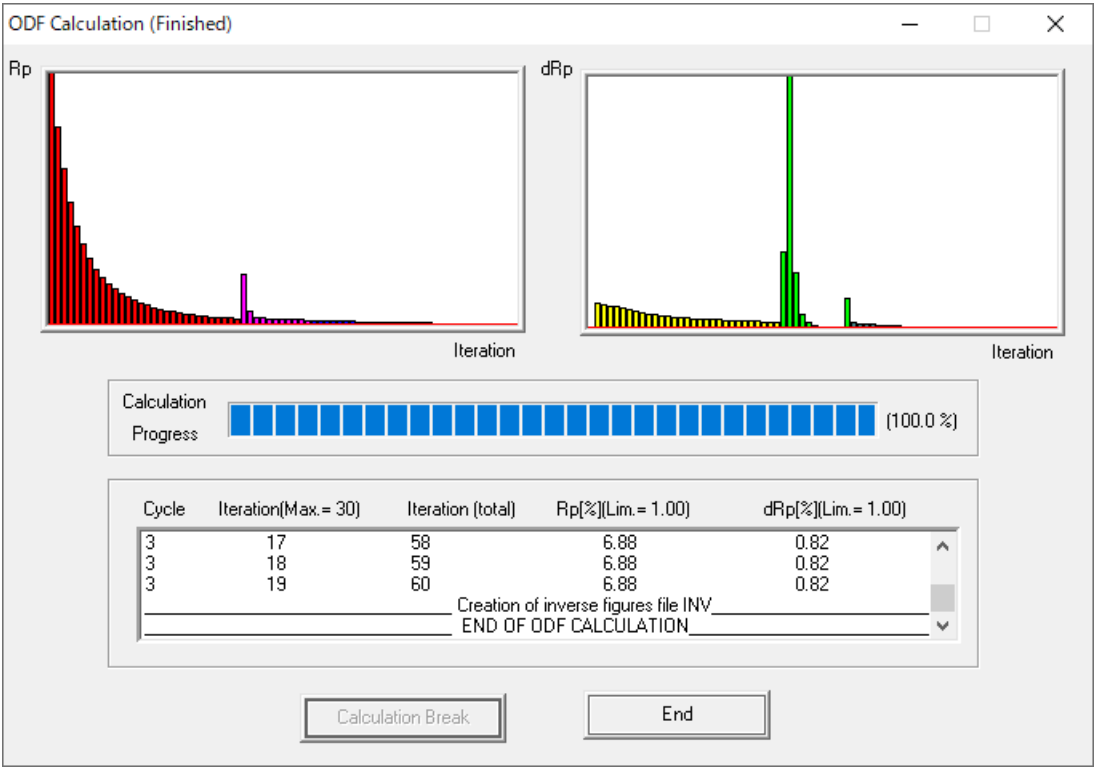
Average

Epf file save

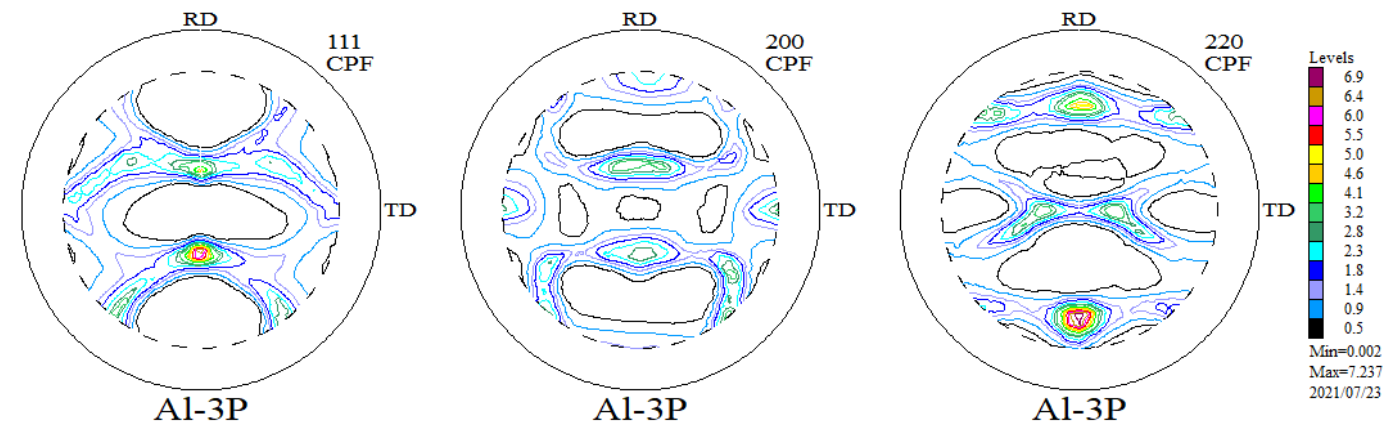
Labotex(EPF),popLA(RAW) filename

AI-3P

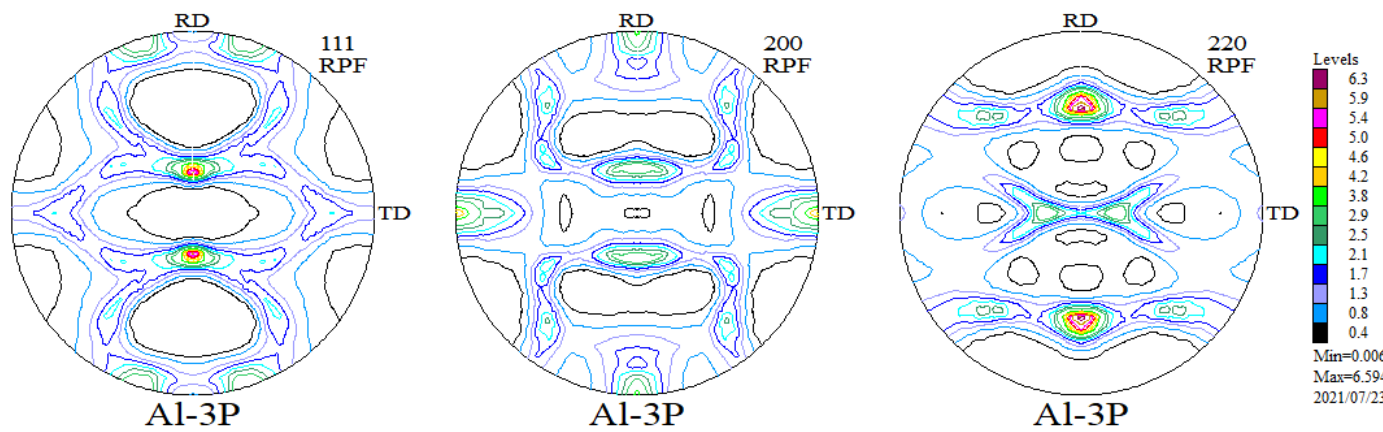
5. LaboTexODF解析



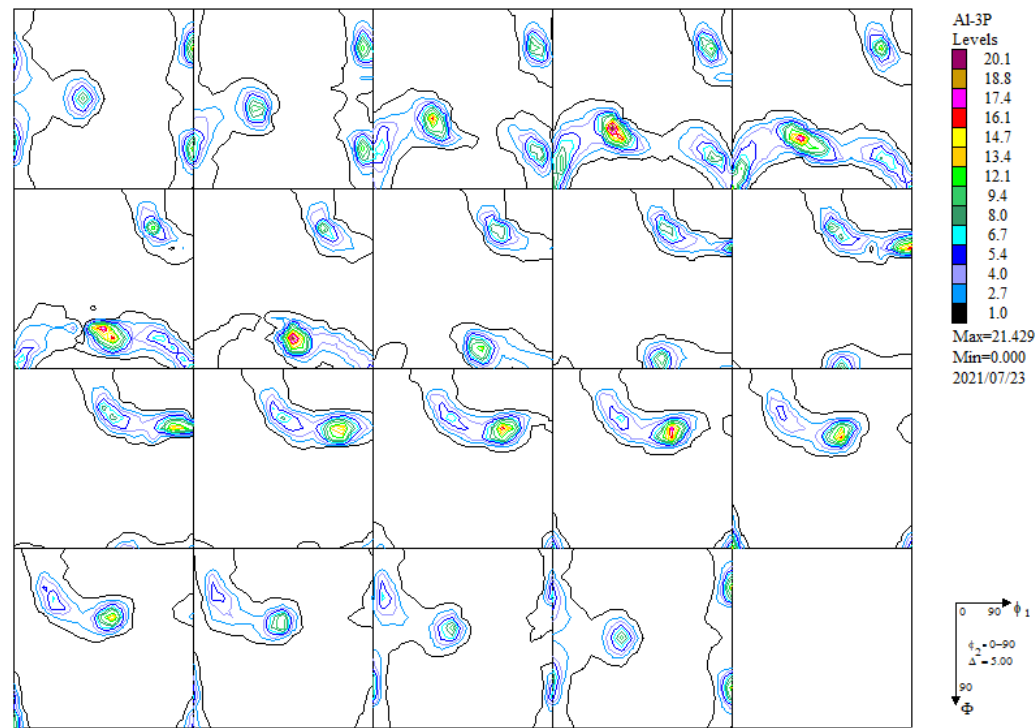
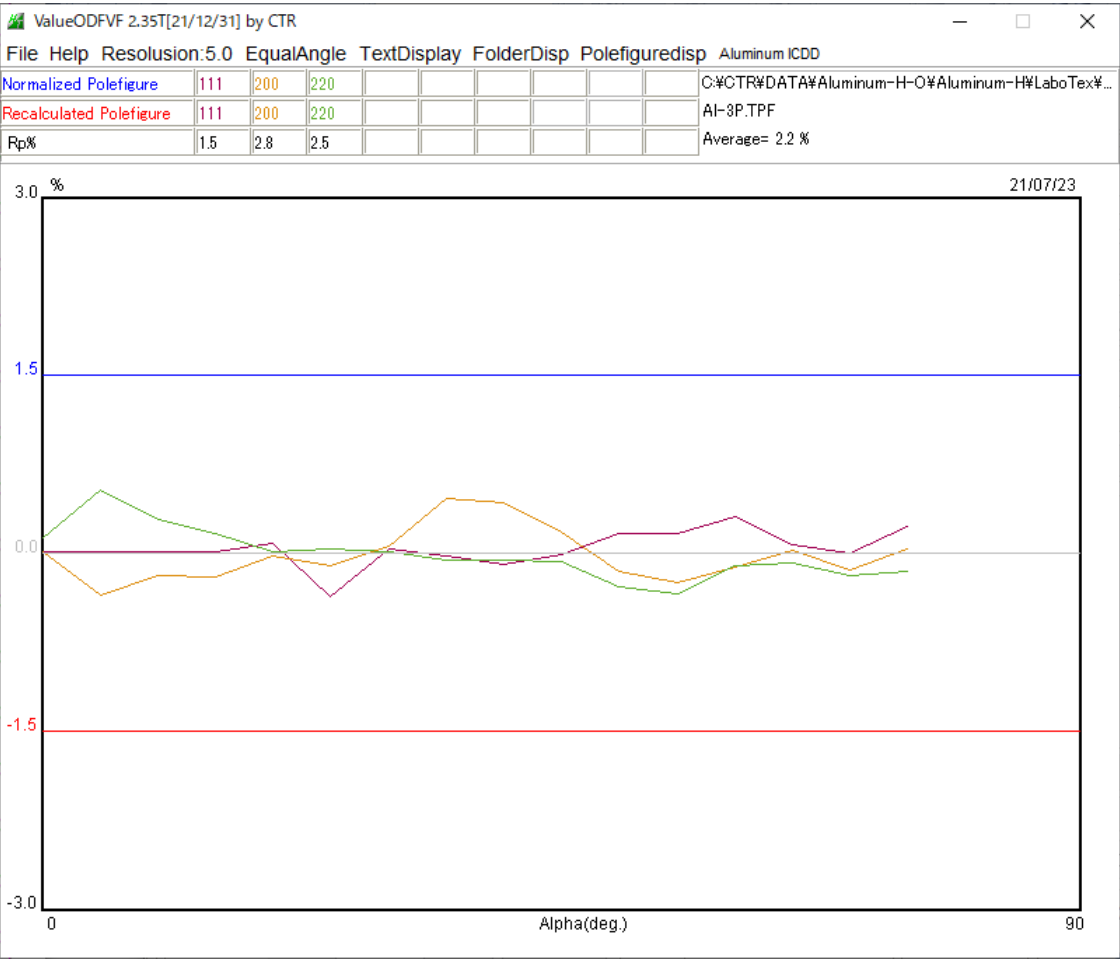
入力データ



ODF 解析後の極点図



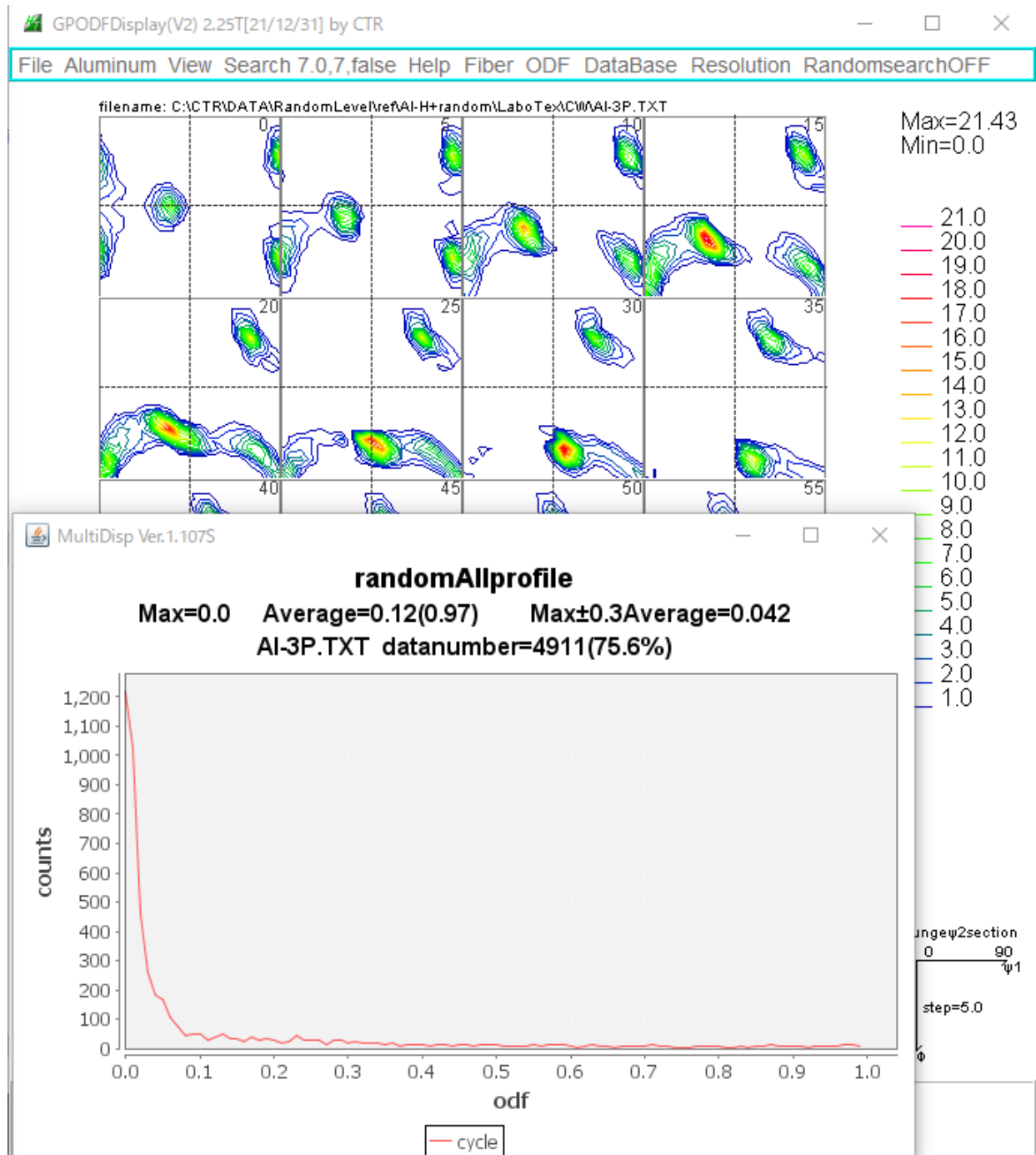
5. 1 入力極点図と ODF 解析後の極点図から R p %計算



R p % = 2. 2 %で入力データは良好、更にODF 解析のM i n = 0. 0 0 0でr a n d o m方位なし
R p %が大きい場合、入力データに異常があります。

ODFをExportしGPODFDisplayでRandomLevel評価

若し、random成分が存在していれば、方位密度1.0以下にrandomのピークが形成されるが、ExportされたODF図から、0位置にピークが形成されているためrandomは0%である。



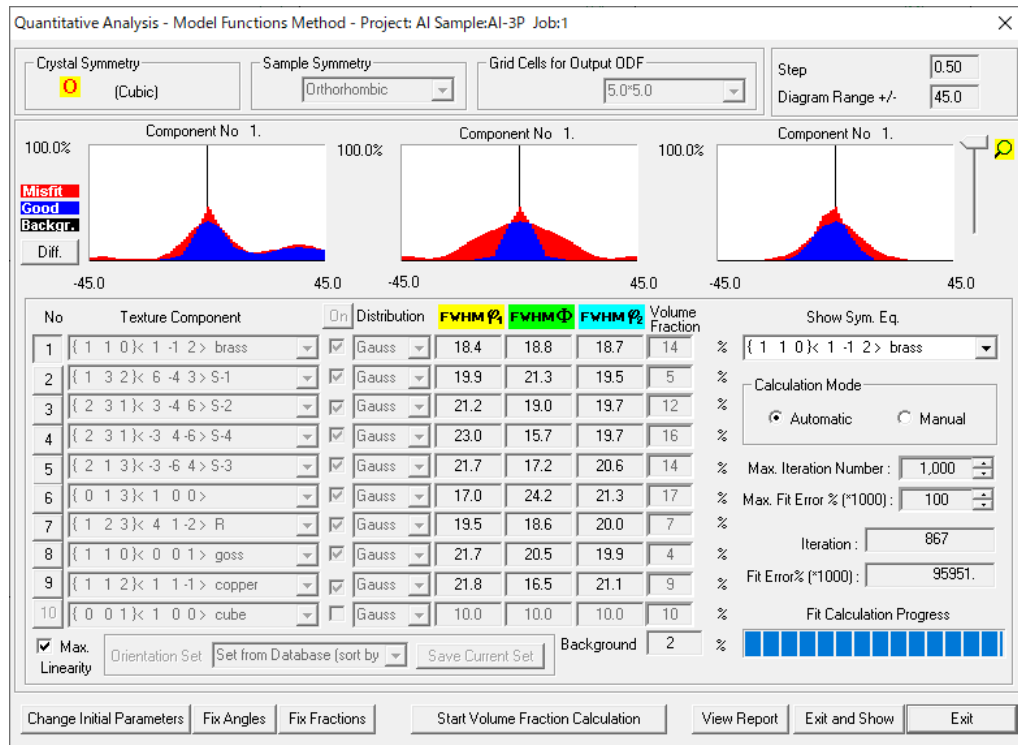
Max=0.0 random=0%

Average=0.12(0.97) 1.0以下の平均値は0.12 全ての平均値0.97

datanumber=4911(75.6%) 方位密度1.0以下が4911点(割合)

$$4911 / (19 \times 19 \times 18) \times 100\%$$

5. 2 Volume Fraction 評価

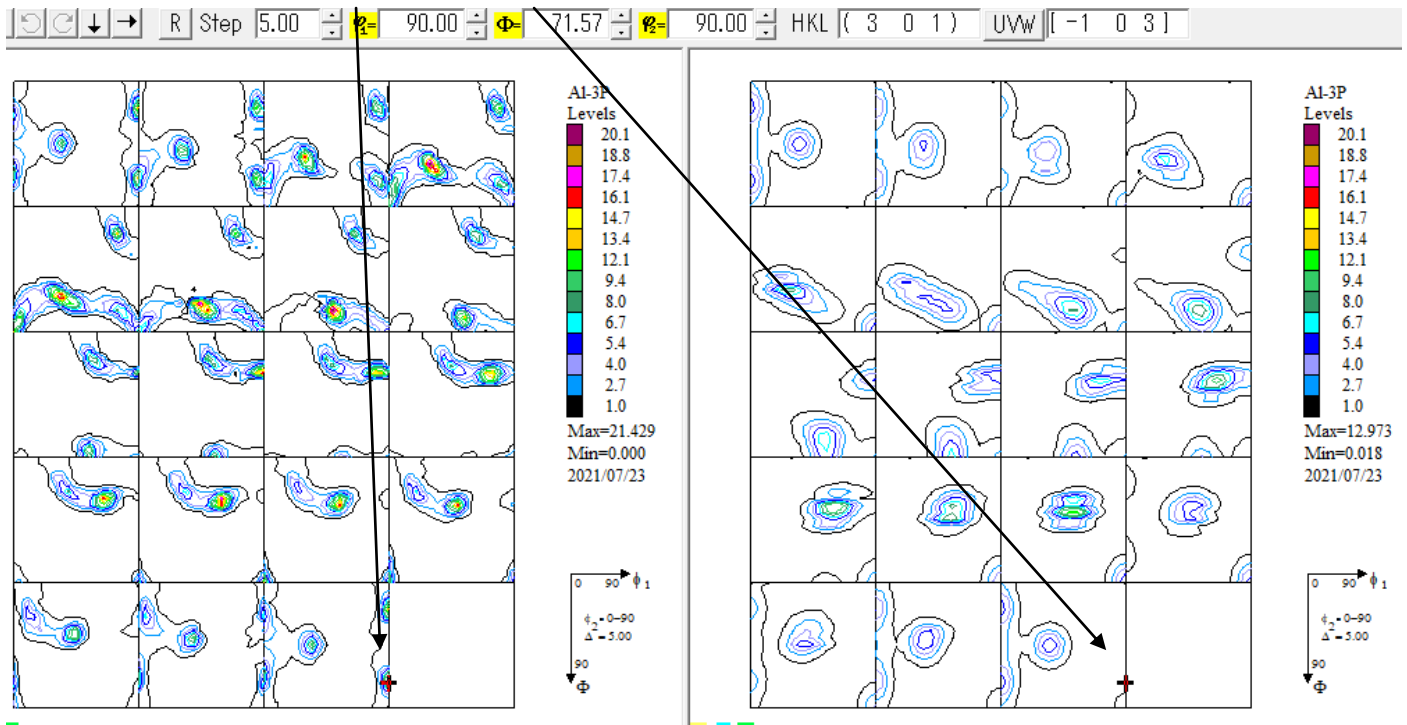


backgroundはrandomを含まないその他の方位である。

極点図から ODF 解析結果

VF%から計算した ODF 図

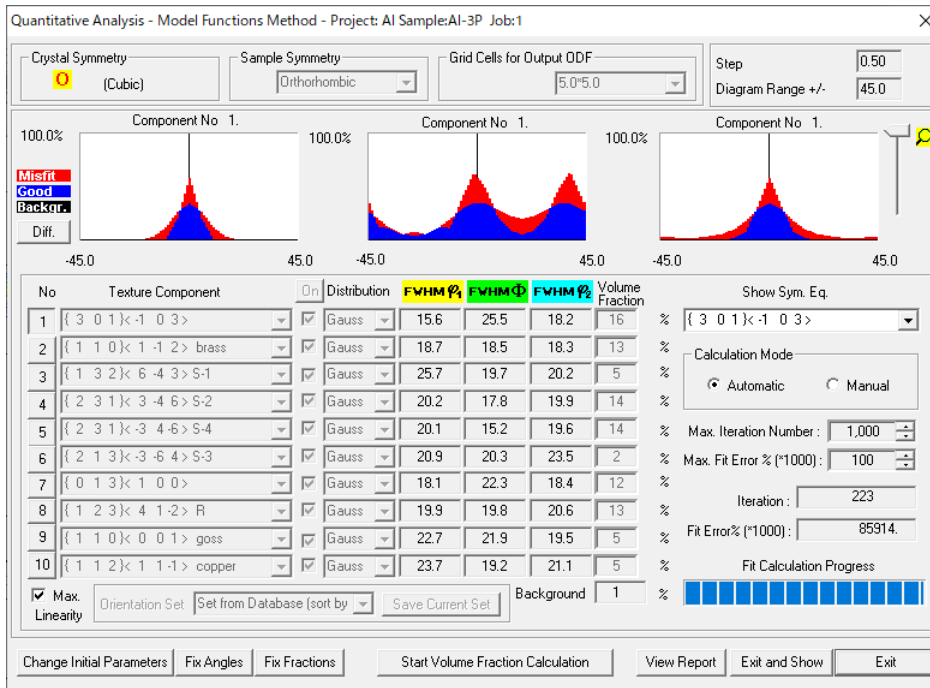
{ 3 0 1 } < -1 0 3 > が検索されていない



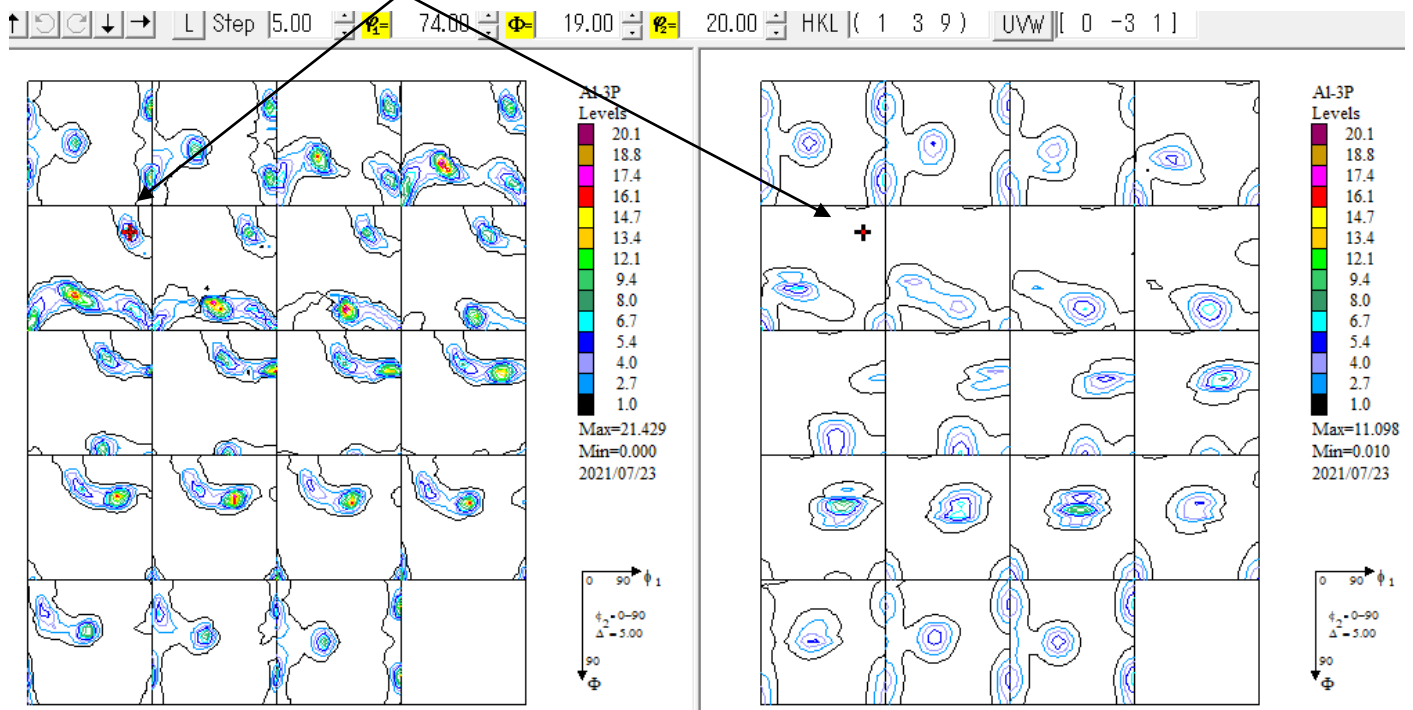
左右同じODF図になるように方位を追加します。

DataBaseに { 3 0 1 } < -1 0 3 > 追加

5. 3 {301} <-103>を追加してVolume Fraction計算

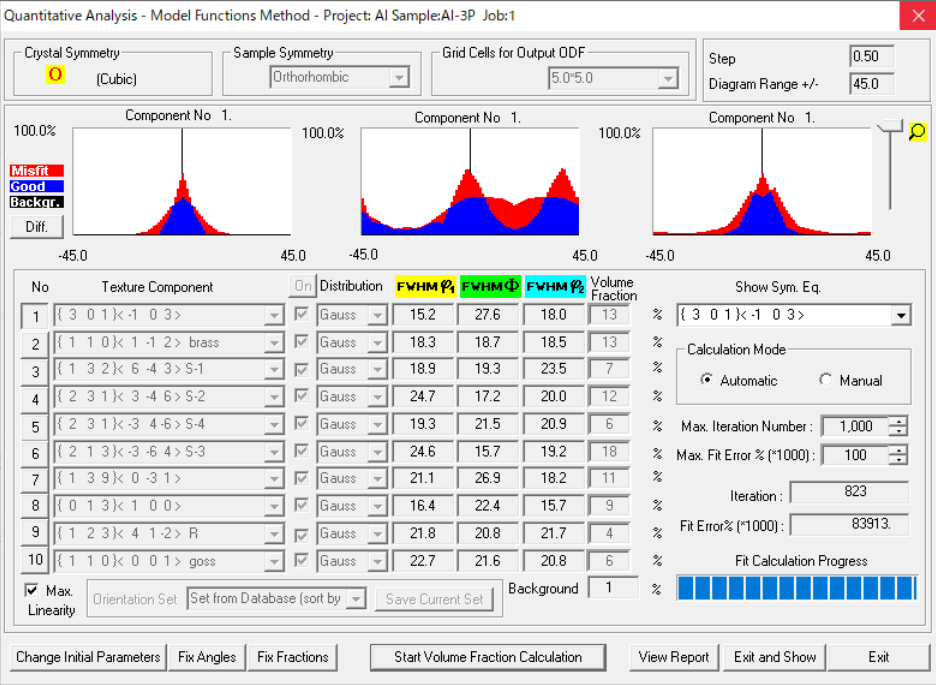


{139} <0-31>も検出されていないので追加

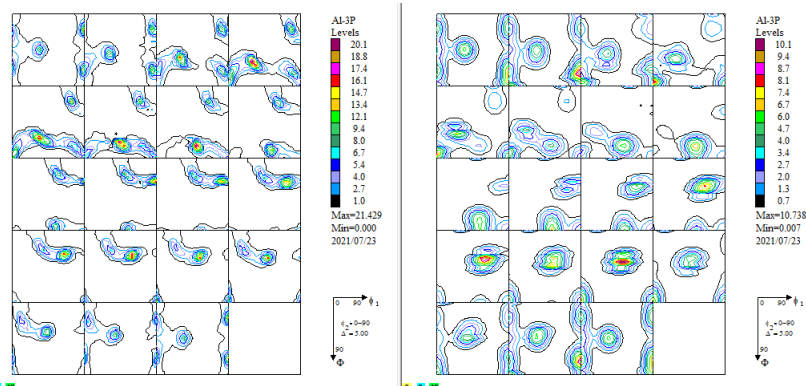


{139} <0-31>をData Baseに追加

5. 4 D a t a B a s e に 2 方 位 追 加 し た V o l u m e F r a c t i o n 計 算

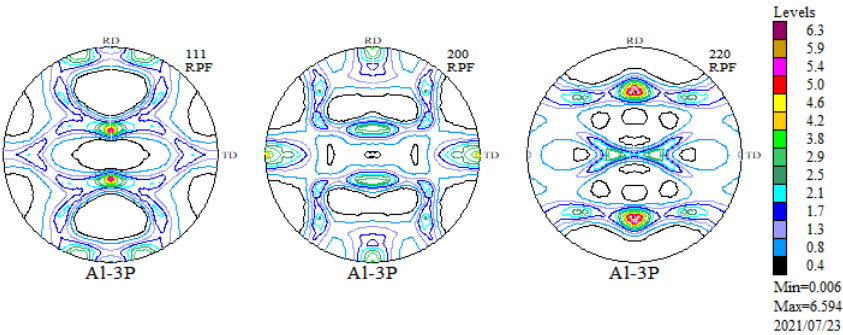


VF%から計算した ODF 図

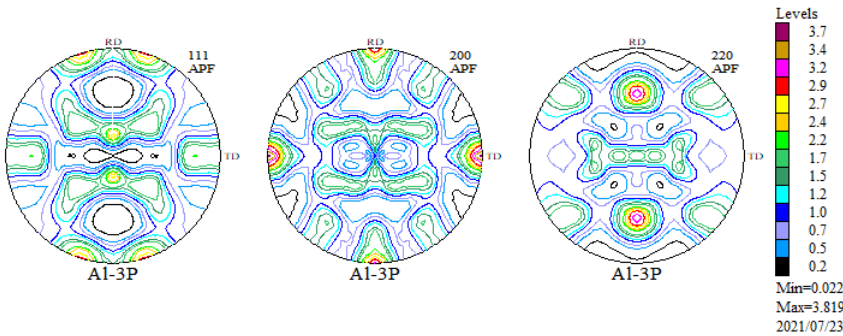


ほぼ同一のODF図になりました。

入力極点図から計算した ODF から計算した極点図

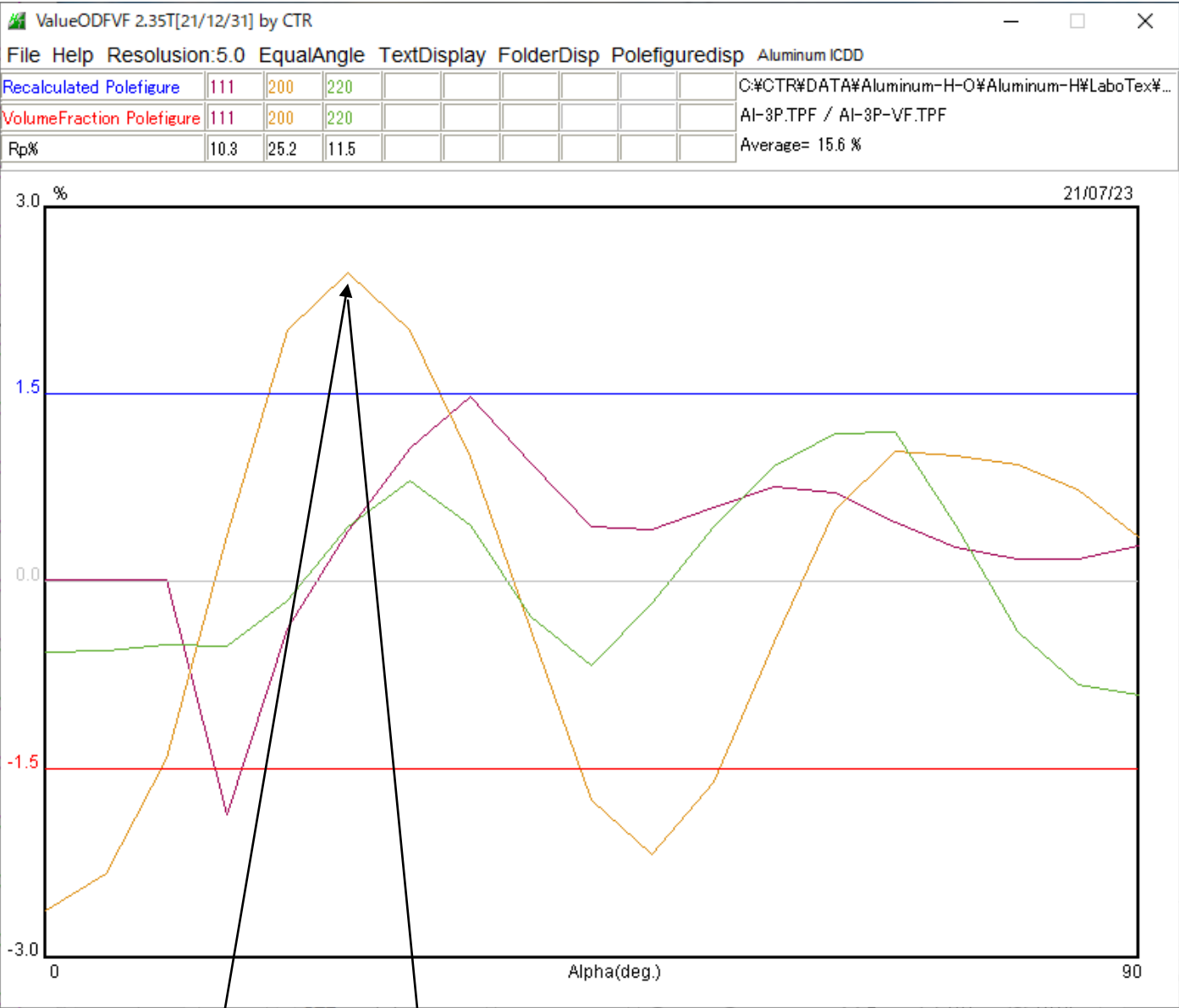


VF%から計算した極点図

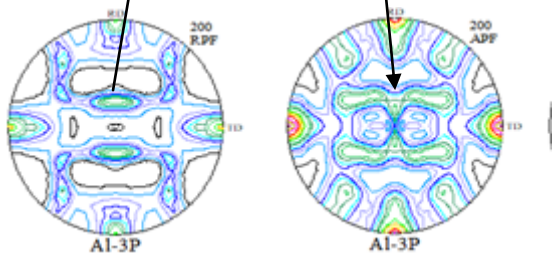


主要な極密度は一致しています。

5. 5 入力極点図から計算した ODF 図の極点図と V F % の極点図比較



{ 2 0 0 } の極密度の違い





6. Data Baseに2方位追加したVolume Fractionからシュミット因子計算
アルミニウムH材

FCCSchmidFactorCalc 1.11T[21/12/31] by CTR






File Help


InputFile(TXT)

LaboTex VolumeFraction(100%VfMode) 

C:\LaboTex2\USER\AILAB\O-Cubic.LAB\AILAB\AI-3P.LAB\Job04\AI-3P.POD 

Data input

$\{h\ k\ l\}$ or $\{h\ k\ l\}$  $\{h\ k\ l\}Ku\ v\ w\}$  $\phi_1\ PHI\ \phi_2$  Roop  5 

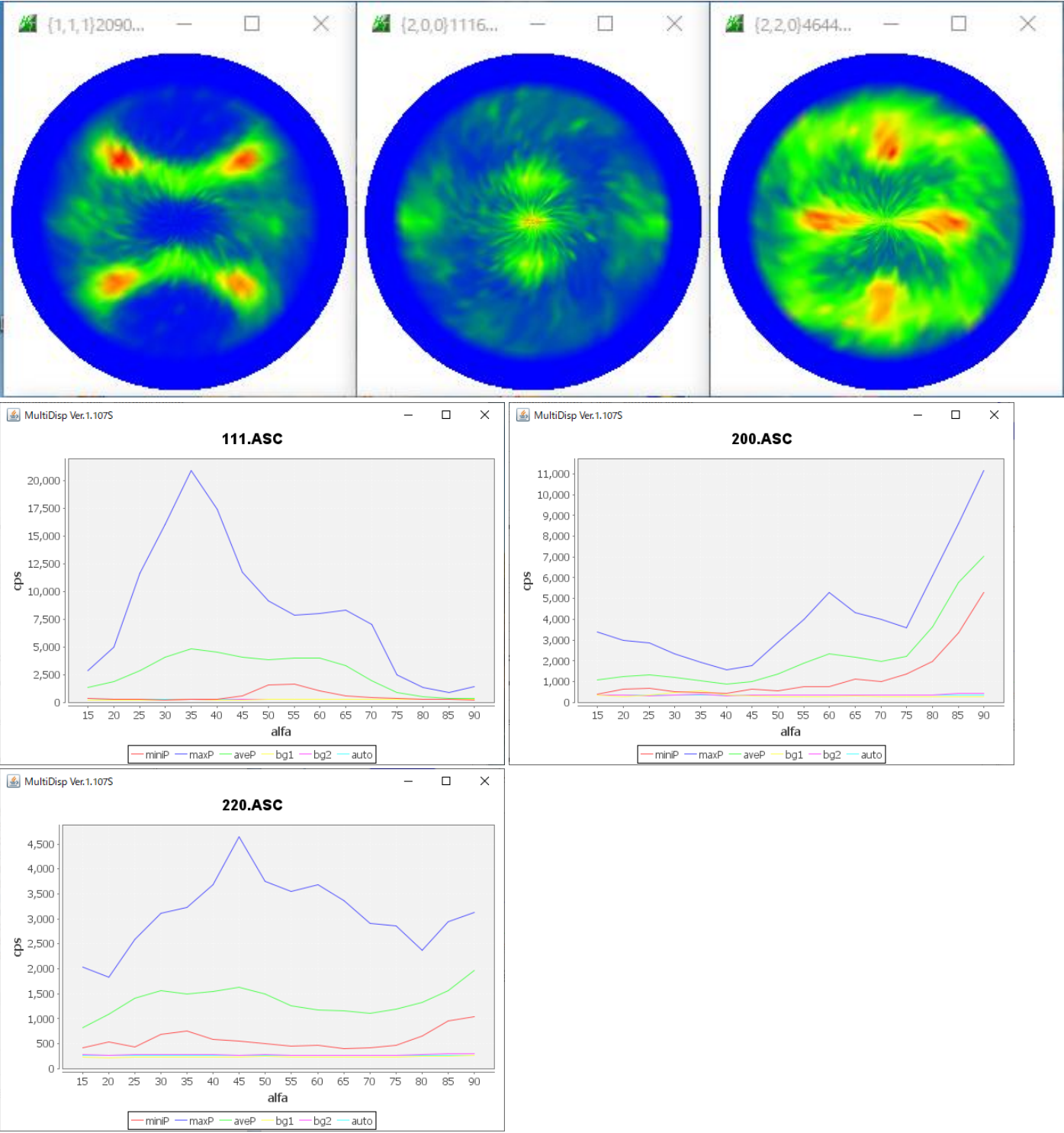
☐ ND 

| | Calc result | Vf(%) | Sch | S*Vf/100 |
|-------------------------------------|-------------|---------|-------|----------|
| {3 0 1}<-1 0 3> | 13.21 | 0.489 | 0.064 | |
| {1 1 0}<-1 -1 2> | 12.95 | 0.408 | 0.052 | |
| {1 3 2}<-6 -4 3> | 7.28 | 0.466 | 0.033 | |
| {2 3 1}<-3 -4 6> | 12.08 | 0.466 | 0.056 | |
| {2 3 1}<-3 4 -6> | 5.82 | 0.466 | 0.027 | |
| {2 1 3}<-3 -6 4> | 18.09 | 0.466 | 0.084 | |
| {1 3 9}<0 -3 1> | 11.34 | 0.493 | 0.055 | |
| {0 1 3}<1 0 0> | 8.69 | 0.489 | 0.042 | |
| {1 2 3}<4 1 -2> | 4.31 | 0.466 | 0.02 | |
| {1 1 0}<0 0 1> | 5.59 | 0.408 | 0.022 | |
| sum-volumefraction= | 99.36% | | | |
| Schmid function($\sum S*Vf/100$)= | | 0.46093 | | |

Schmidcalc Symmetry SchmidCalc SchmidFDisp

入力データのrandom方位なしからVF%が計算し、ほぼ定量されている。

7. Sample (アルミニウムO材)



8. Sample (O材) データ処理

ValueODFVF 2.35T[21/12/31] by CTR

File Help Resolution:5.0 EqualAngle TextDisplay FolderDisp Polefiguredisp Aluminum ICDD

| | 111 | 100 | 110 | | | | | | | |
|-------------------------|-----|-----|-----|--|--|--|--|--|--|--|
| Normalized Polefigure | 111 | 100 | 110 | | | | | | | |
| Recalculated Polefigure | 111 | 100 | 110 | | | | | | | |

Pp% 3.1 2.5 3.8 Average= 3.1 %

3.0 % 21/07/24

Average= 3.1 %

Alpha(deg)

9. Lab o T e x 入力データ作成

PFToODF3 8.52T[21/12/31] by CTR

File
Option
Symmetric
Software
Data
Help

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-O

PF Data

| SelectFile(TXT(b,intens),TXT2(a,b,intens)) | h,k,l | 2Theta | Alpha scope | AlphaS | AlphaE | Select |
|--|-------|--------|-------------|--------|--------|-------------------------------------|
| 111_chB00D1CAS_2.TXT | 1,1,1 | 38.59 | 0.0->75.0 | 0.0 | 75.0 | <input checked="" type="checkbox"/> |
| 200_chB00D1CAS_2.TXT | 2,0,0 | 44.85 | 0.0->75.0 | 0.0 | 75.0 | <input checked="" type="checkbox"/> |
| 220_chB00D1CAS_2.TXT | 2,2,0 | 65.22 | 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_chB00D1CAS_2.TXT 200_chB00D1CAS_2.TXT 220_chB00D1CAS_2.TXT

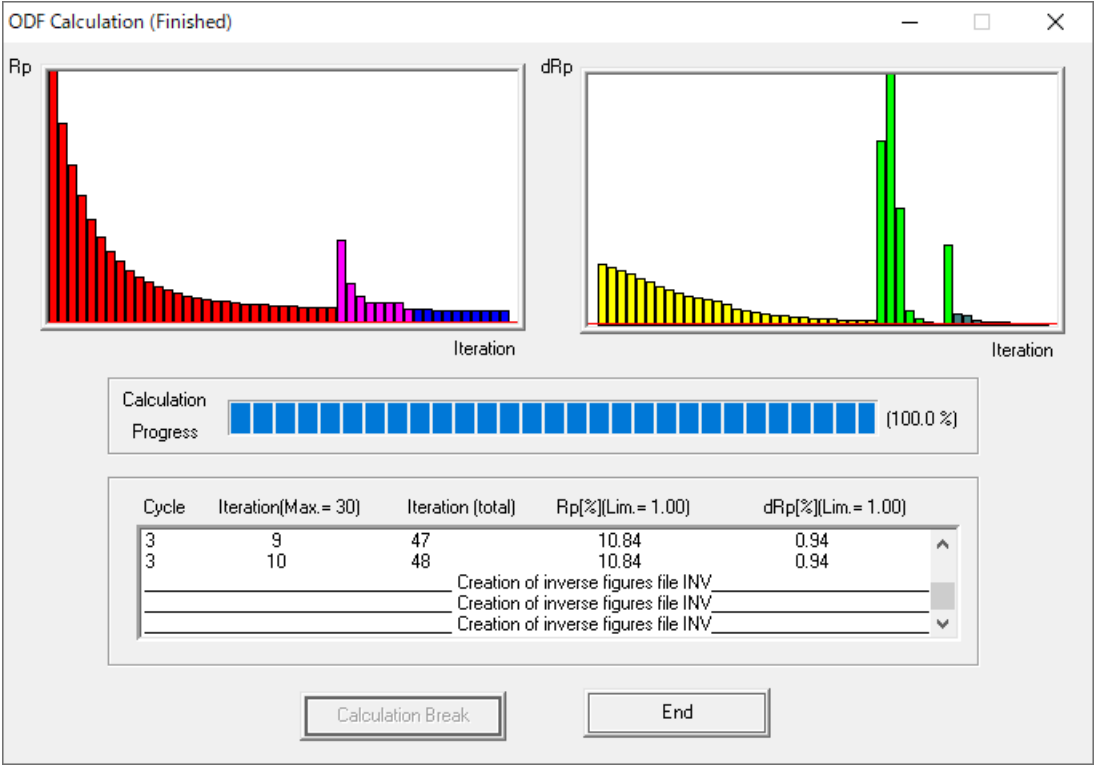
Symmetric type
Full

CenterData
Average

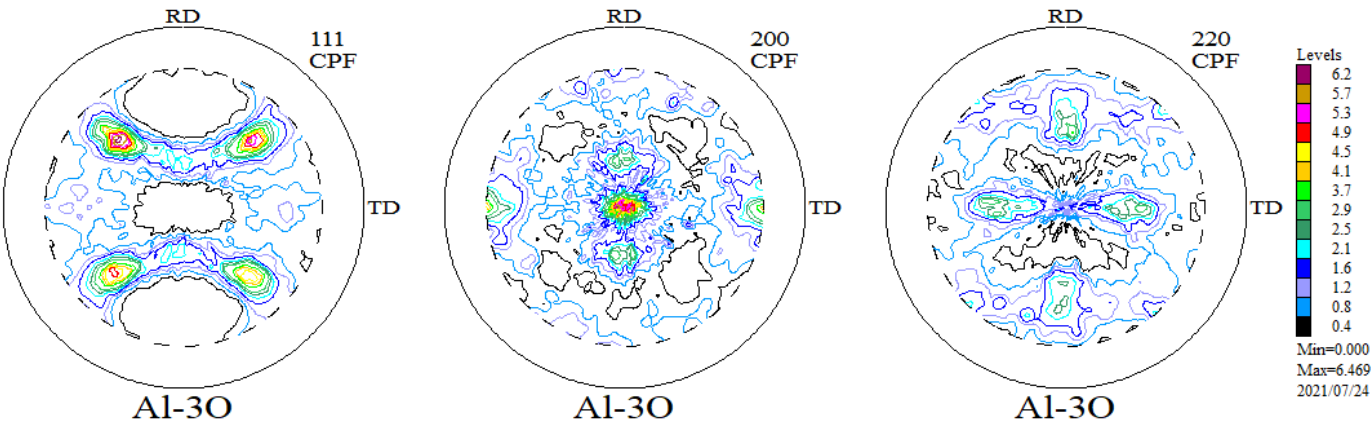
Epf file save

Labotex(EPF),popLA(RAW) filename
Al-3O

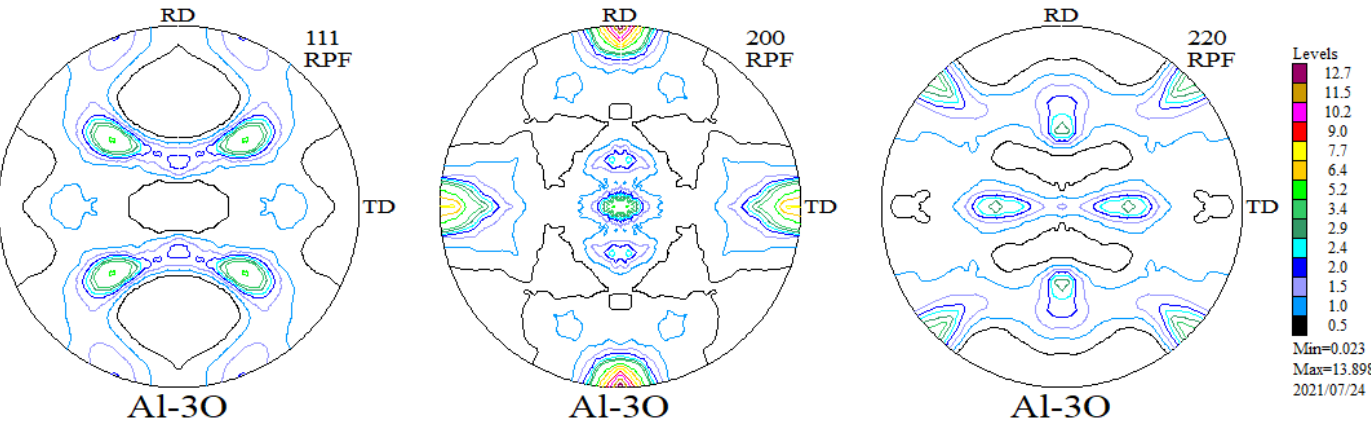
10. LaboTexODF解析



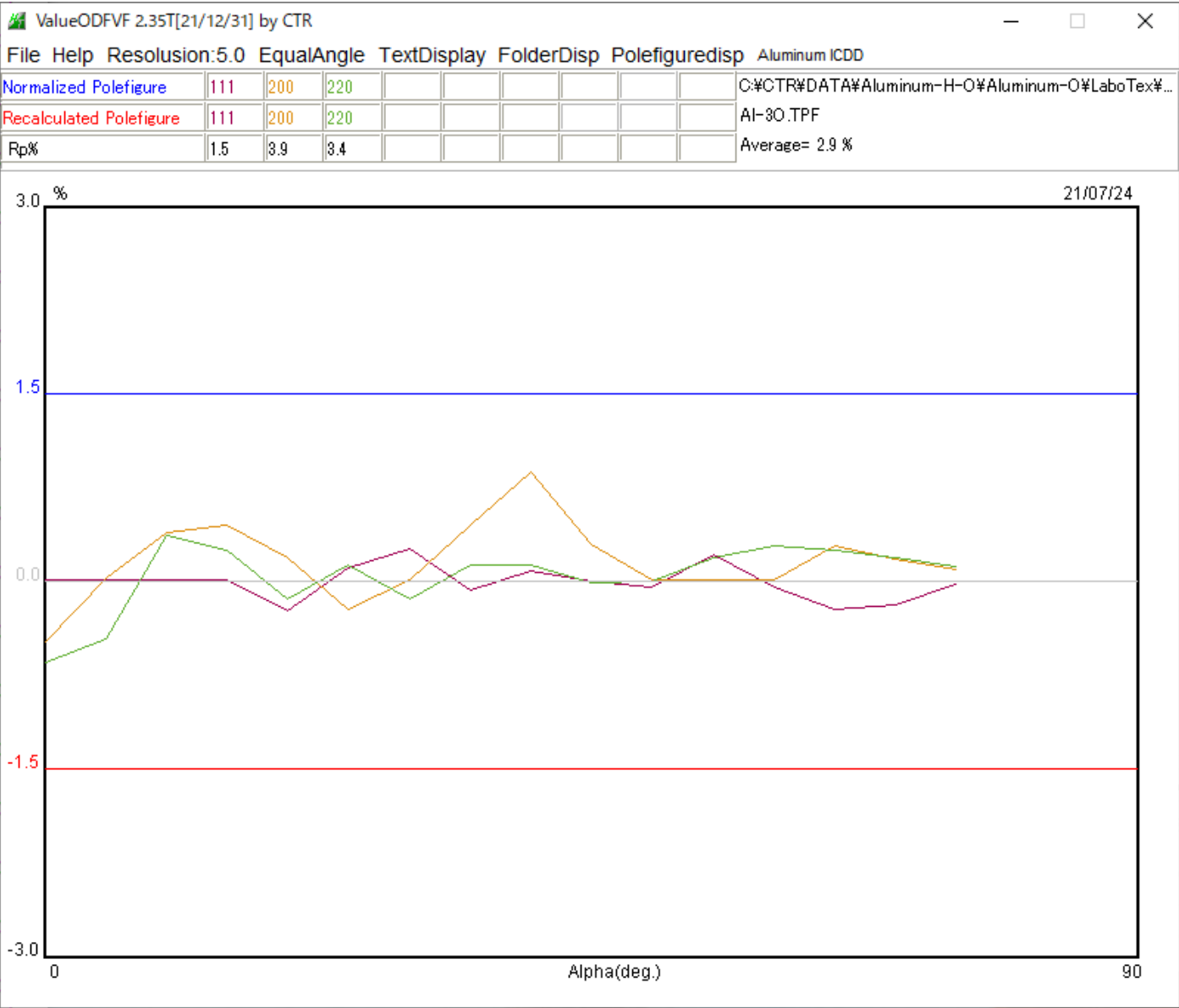
入力極点図



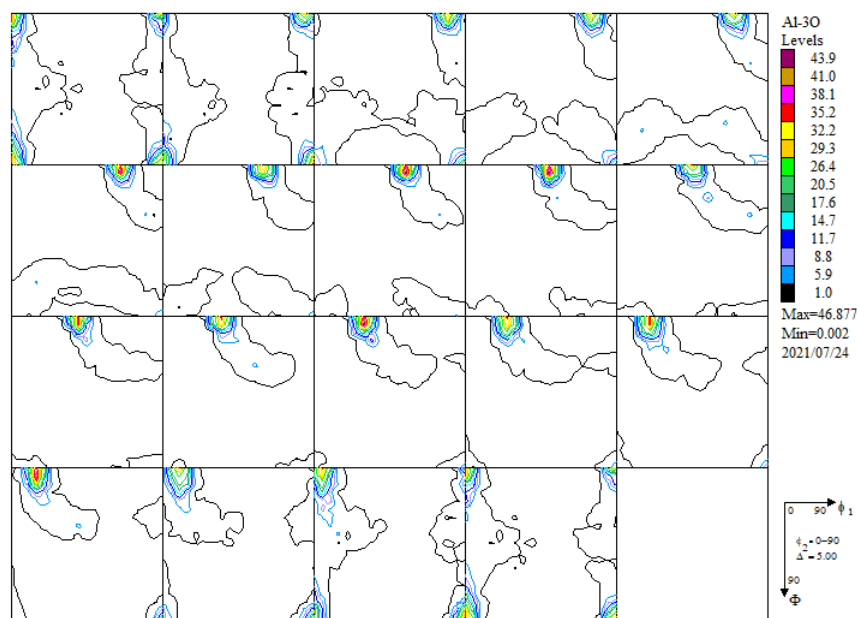
ODF 解析後の極点図



1 0． 1 入力極点図と ODF 解析後の極点図から R p %計算

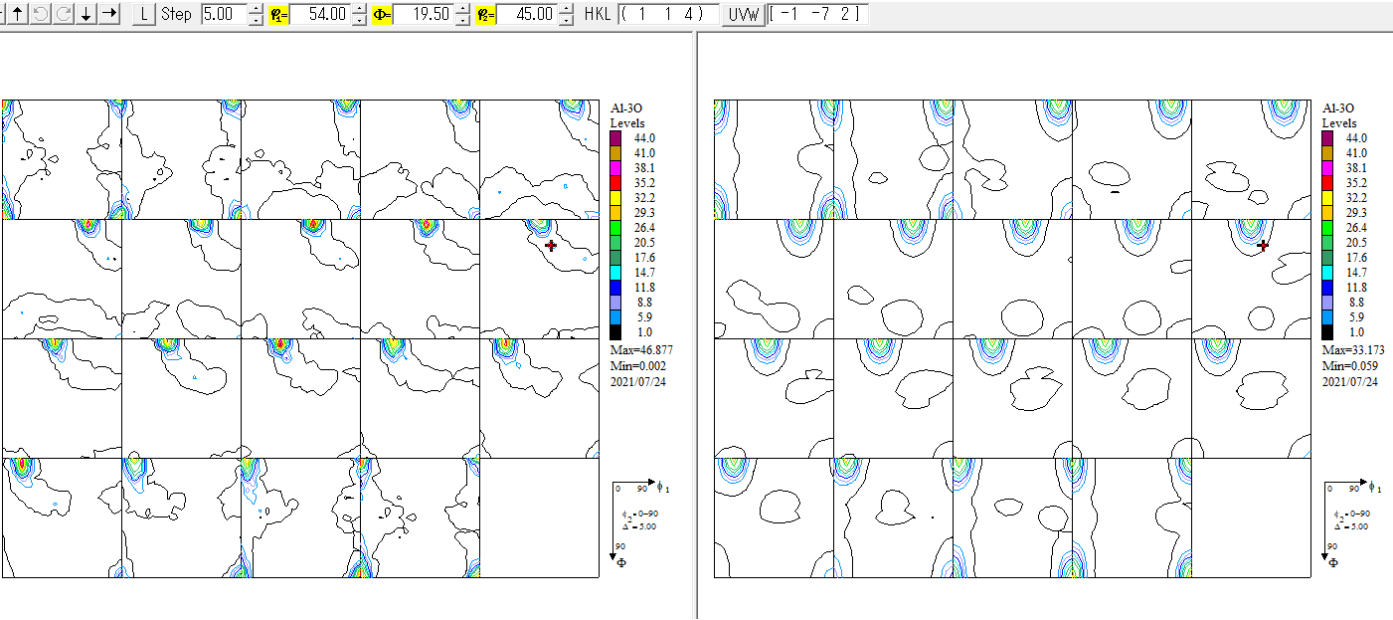
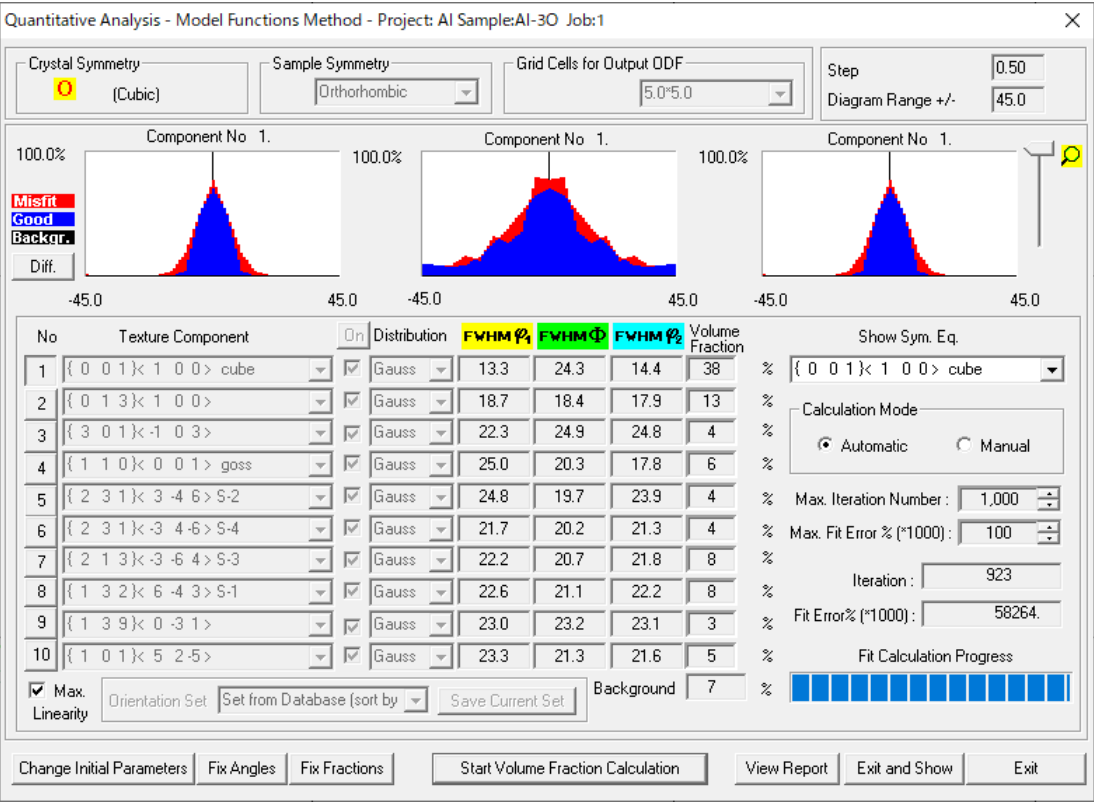


ODF P o l e F i g u r e 2 で予測した R p % = 3 . 1 と同様な結果が得られています。

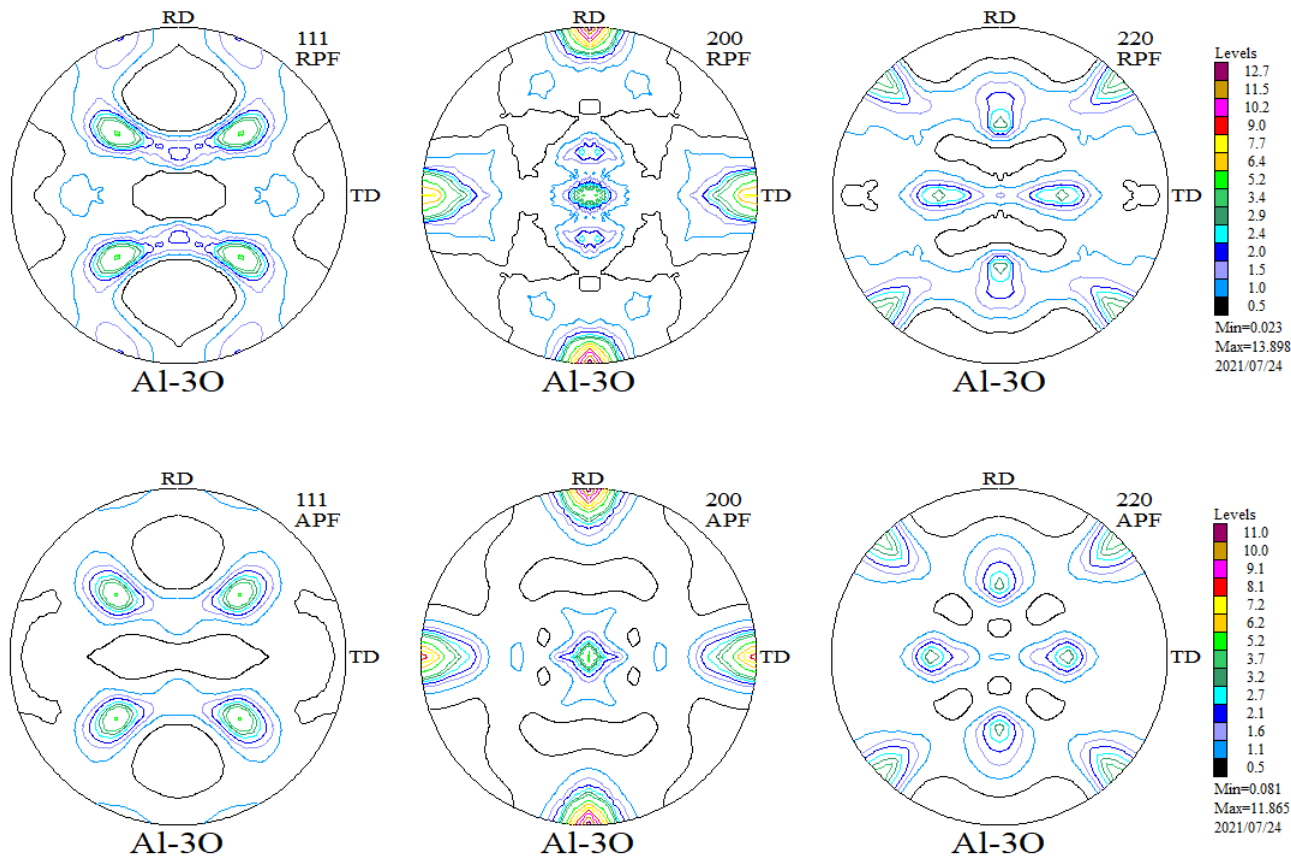
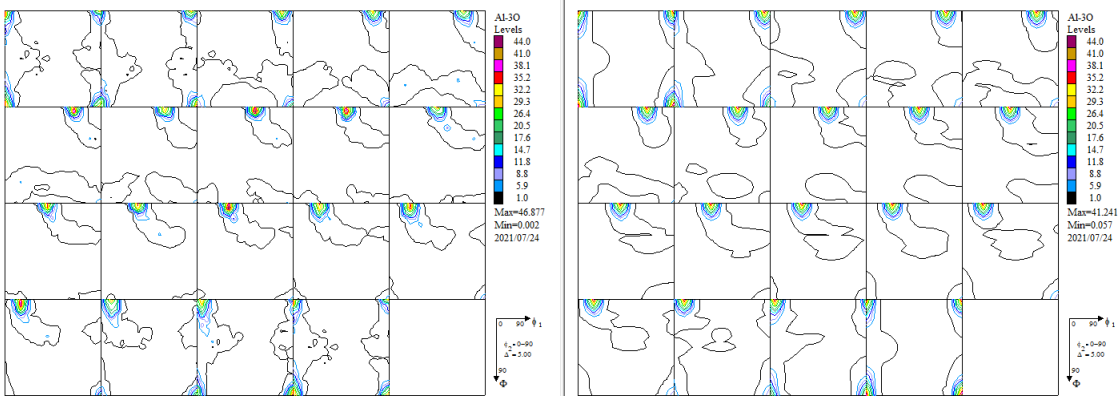
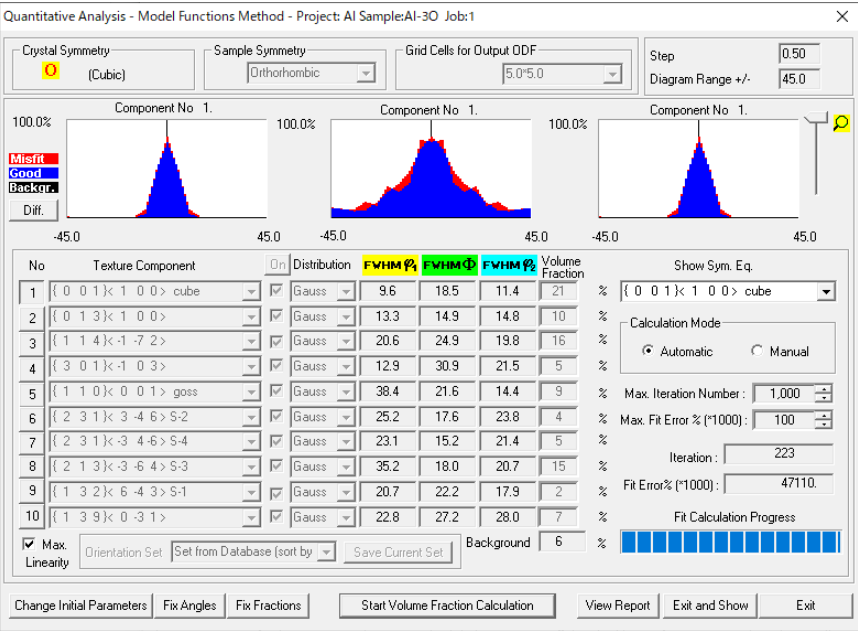


r a n d o mレベルは、0 . 2 %でほぼ0 . 0 %が得られています。

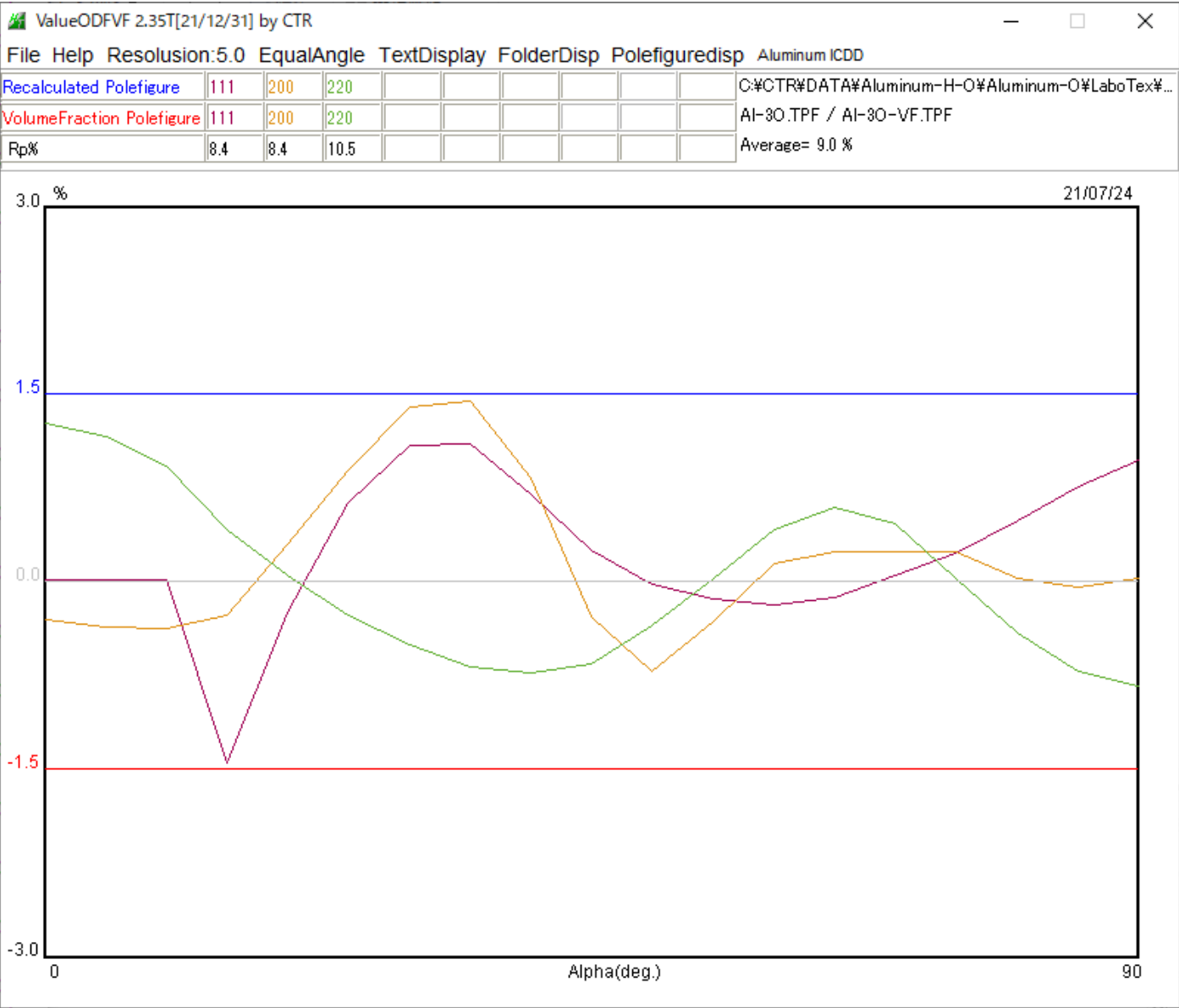
10. 2VolumeFraction評価



10. 3 {114} <-1-72>を追加してVolumeFraction計算



1 0． 4 入力極点図から計算した ODF 図の極点図と V F %の極点図比較



基準内に収まりました。

11. DataBaseに1方位追加したVolumeFractionからシュミット因子計算

FCCSchmidFactorCalc 1.11T[21/12/31] by CTR

File Help

InputFile(TXT)

LaboTex VolumeFraction(100%VfMode)

C:\LaboTex2\USER\AILAB\O-Cubic.LAB\AILAB\AI-3O.LAB\Job03\AI-3O.POD

Disp

Data input

☐ ND

Input

$\{h\ k\ l\}$ or $\{h\ k\ l\}$

$\{h\ k\ l\} \{u\ v\ w\}$

Input

ϕ_1 PHI ϕ_2

Roop

5

Input

| | Calc result | Vf(%) | Sch | S*Vf/ |
|-------------------------------------|------------------|--------|---------|-------|
| {0 0 1}<1 0 0> 20.89 | {0 0 1}<1 0 0> | 20.89 | 0.408 | 0.085 |
| {0 1 3}<1 0 0> 10.02 | {0 1 3}<1 0 0> | 10.02 | 0.489 | 0.049 |
| {1 1 4}<-1 -7 2> 16.03 | {1 1 4}<-1 -7 2> | 16.03 | 0.432 | 0.069 |
| {3 0 1}<-1 0 3> 5.02 | {3 0 1}<-1 0 3> | 5.02 | 0.489 | 0.024 |
| {1 1 0}<0 0 1> 9.02 | {1 1 0}<0 0 1> | 9.02 | 0.408 | 0.036 |
| {2 3 1}<3 -4 6> 4.04 | {2 3 1}<3 -4 6> | 4.04 | 0.466 | 0.018 |
| {2 3 1}<-3 4 -6> 5.04 | {2 3 1}<-3 4 -6> | 5.04 | 0.466 | 0.023 |
| {2 1 3}<-3 -6 4> 15.02 | {2 1 3}<-3 -6 4> | 15.02 | 0.466 | 0.07 |
| {1 3 2}<6 -4 3> 2.05 | {1 3 2}<6 -4 3> | 2.05 | 0.466 | 0.009 |
| {1 3 9}<0 -3 1> 7.2 | {1 3 9}<0 -3 1> | 7.2 | 0.493 | 0.035 |
| sum-volumefraction= | | 94.33% | | |
| Schmid function($\sum S*Vf/100$)= | | | 0.42273 | |

Schmidcalc

Symmetry SchmidCalc

SchmidFDisp

FCCSchmidFactorCalc 1.11T[21/12/31] by CTR

File Help

InputFile(TXT)

LaboTex VolumeFraction(SumVfMode)

C:\LaboTex2\USER\AILAB\O-Cubic.LAB\AILAB\AI-3O.LAB\Job03\AI-3O.POD

Disp

Data input

☐ ND

Input

$\{h\ k\ l\}$ or $\{h\ k\ l\}$

$\{h\ k\ l\} \{u\ v\ w\}$

Input

ϕ_1 PHI ϕ_2

Roop

5

Input

| | Calc result | Vf(%) | Sch | S*Vf/ |
|--|------------------|--------|---------|-------|
| {0 0 1}<1 0 0> 20.89 | {0 0 1}<1 0 0> | 20.89 | 0.408 | 0.09 |
| {0 1 3}<1 0 0> 10.02 | {0 1 3}<1 0 0> | 10.02 | 0.489 | 0.052 |
| {1 1 4}<-1 -7 2> 16.03 | {1 1 4}<-1 -7 2> | 16.03 | 0.432 | 0.073 |
| {3 0 1}<-1 0 3> 5.02 | {3 0 1}<-1 0 3> | 5.02 | 0.489 | 0.026 |
| {1 1 0}<0 0 1> 9.02 | {1 1 0}<0 0 1> | 9.02 | 0.408 | 0.036 |
| {2 3 1}<3 -4 6> 4.04 | {2 3 1}<3 -4 6> | 4.04 | 0.466 | 0.019 |
| {2 3 1}<-3 4 -6> 5.04 | {2 3 1}<-3 4 -6> | 5.04 | 0.466 | 0.024 |
| {2 1 3}<-3 -6 4> 15.02 | {2 1 3}<-3 -6 4> | 15.02 | 0.466 | 0.074 |
| {1 3 2}<6 -4 3> 2.05 | {1 3 2}<6 -4 3> | 2.05 | 0.466 | 0.01 |
| {1 3 9}<0 -3 1> 7.2 | {1 3 9}<0 -3 1> | 7.2 | 0.493 | 0.037 |
| sum-volumefraction= | | 94.33% | | |
| Schmid function($\sum S*Vf/\text{sumVf}$)= | | | 0.44814 | |

Schmidcalc

Symmetry SchmidCalc

SchmidFDisp