

対称反射測定プロファイルから **ND** 方向の逆極点図を表示

2020年09月17日

*HelperTex Office*

## 概要

逆極点は、極点図測定からODF解析後、あらゆる方向の逆極点図を計算できるが、最も重要なND方向に関しては、通常測定である対称反射プロファイルから計算できる。

通常は、サンプルチェンジャーと組み合わせ、面内回転を行い測定します。

定性測定と異なり $2\theta$ 法方向の分解能は必要としないので発散光学系とし発散スリットを広くし多数の結晶粒を測定し、受光スリットの分解能は必要としないので0.3 mm程度を利用する。

以下にアルミニウムを例に連続測定データから指数付きの分割データに変換し、randomとsampleの比率を計算し、ステレオ三角形上に表示する手順を説明します。

## 測定データ

CTR > DATA > Profile-Inverse > Aluminum

名前	更新日時	種類
A-H18.ASC	2012/06/26 10:44	RINT20007スケー
Al-powder.ASC	2012/06/26 10:44	RINT20007スケー
A-T4.ASC	2012/06/26 10:44	RINT20007スケー
B-H18.ASC	2012/06/26 10:44	RINT20007スケー
B-O.ASC	2012/06/26 10:44	RINT20007スケー
C-Bach.ASC	2012/06/26 10:44	RINT20007スケー
C-CAL.ASC	2012/06/26 10:44	RINT20007スケー
D-H14.ASC	2012/06/26 10:44	RINT20007スケー
D-H18.ASC	2012/06/26 10:44	RINT20007スケー
D-O.ASC	2012/06/26 10:44	RINT20007スケー

## 解析プログラム

### ProfiletoDivisionProfile

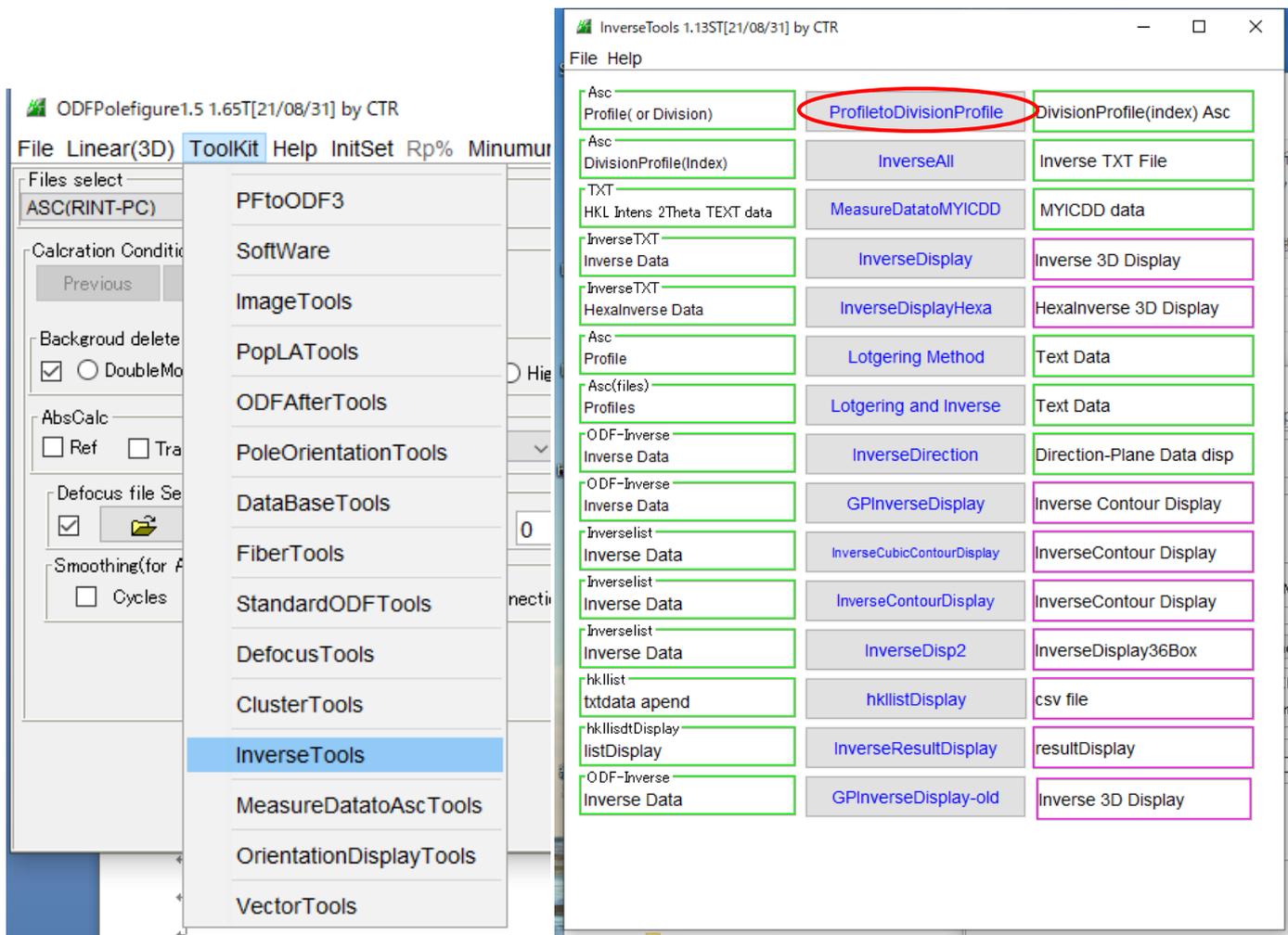
複数の連続データから指数付きの分割データに変換

### InverseAll

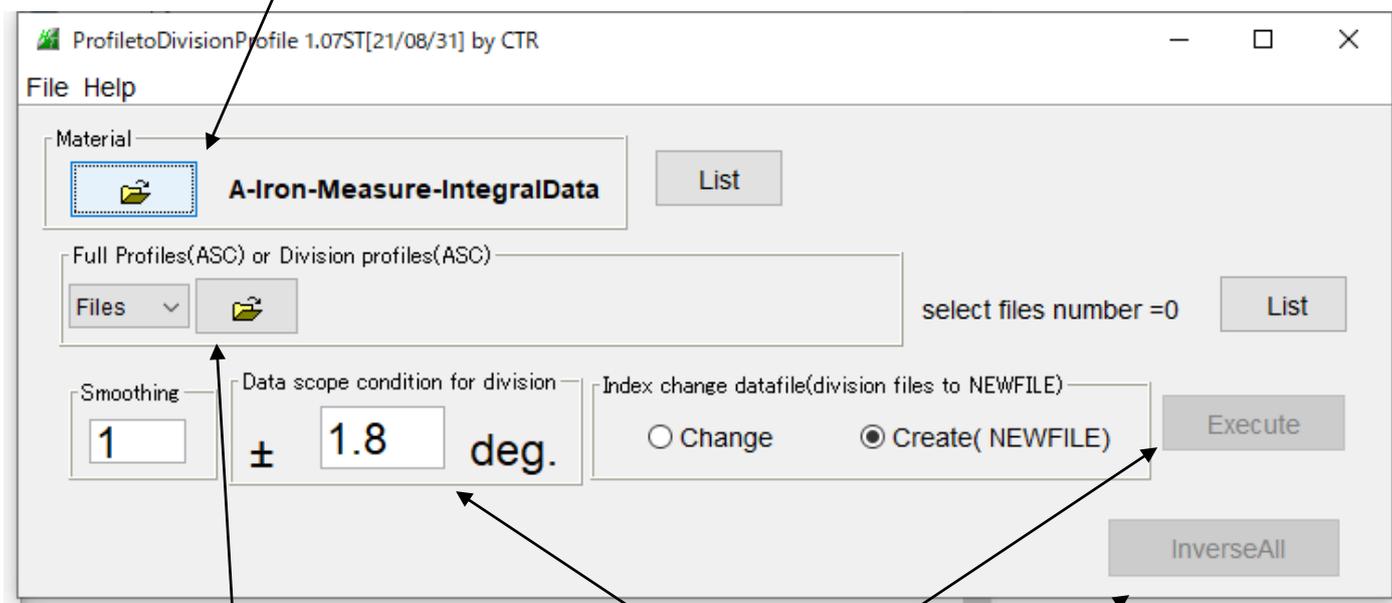
分割データから各種処理を行い、Sample/Random 計算を行う

### InverseDisplay

ステレオ三角形上に、数値表示、3D表示を行う。



材料を選択 (管球も指定)



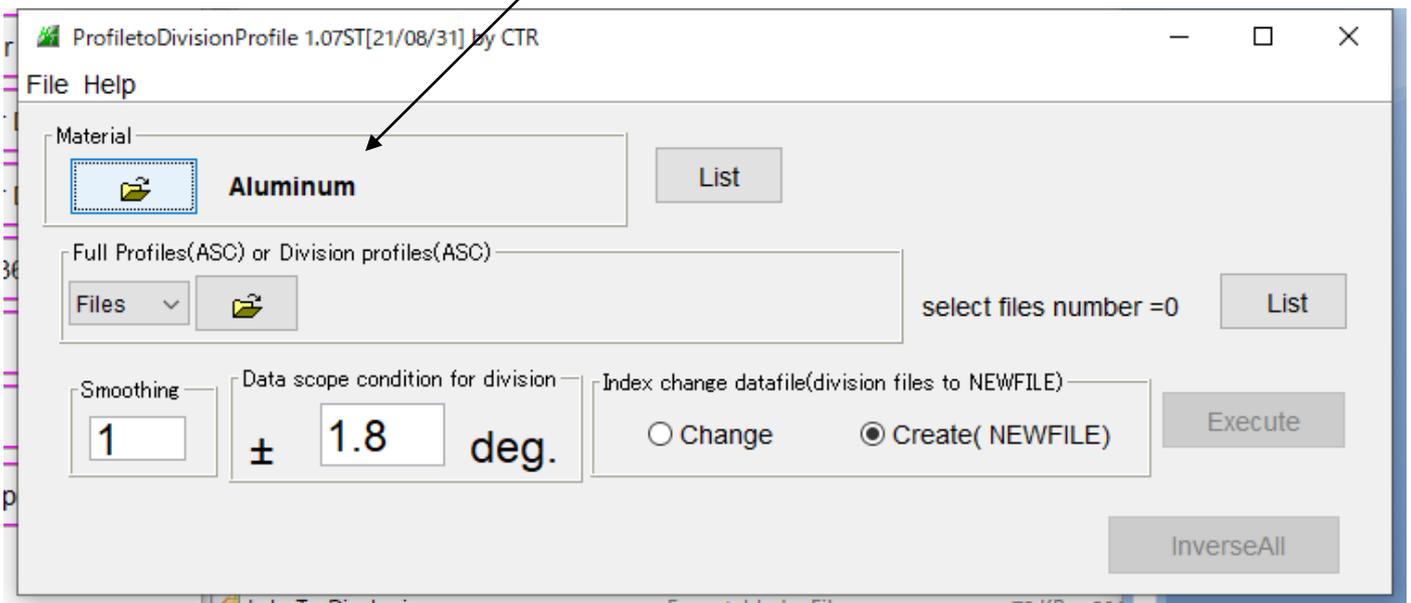
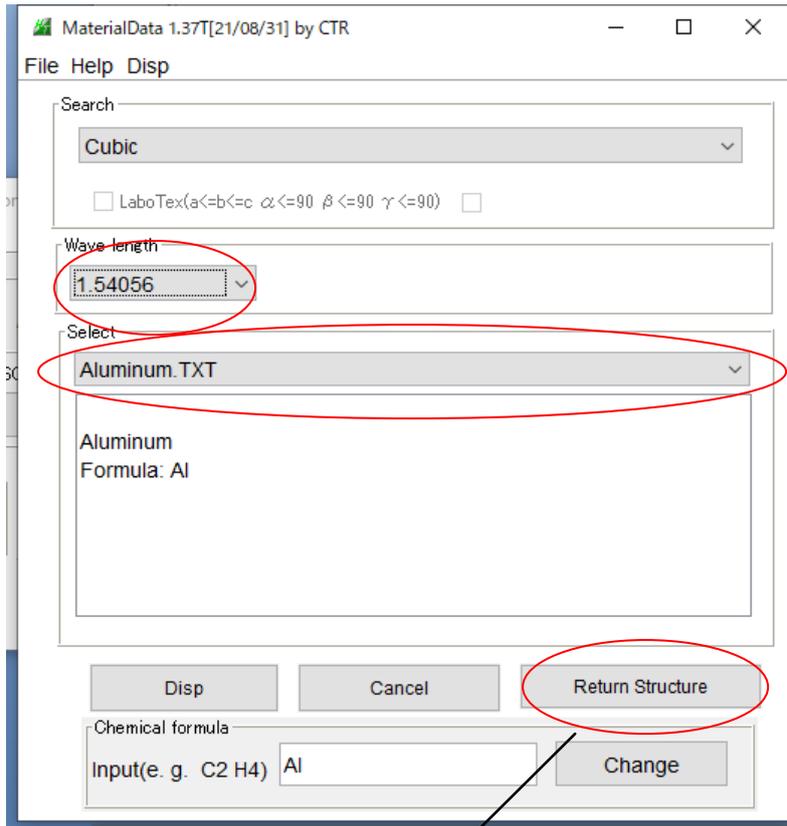
プロファイルデータを複数選択

切り出し範囲指定

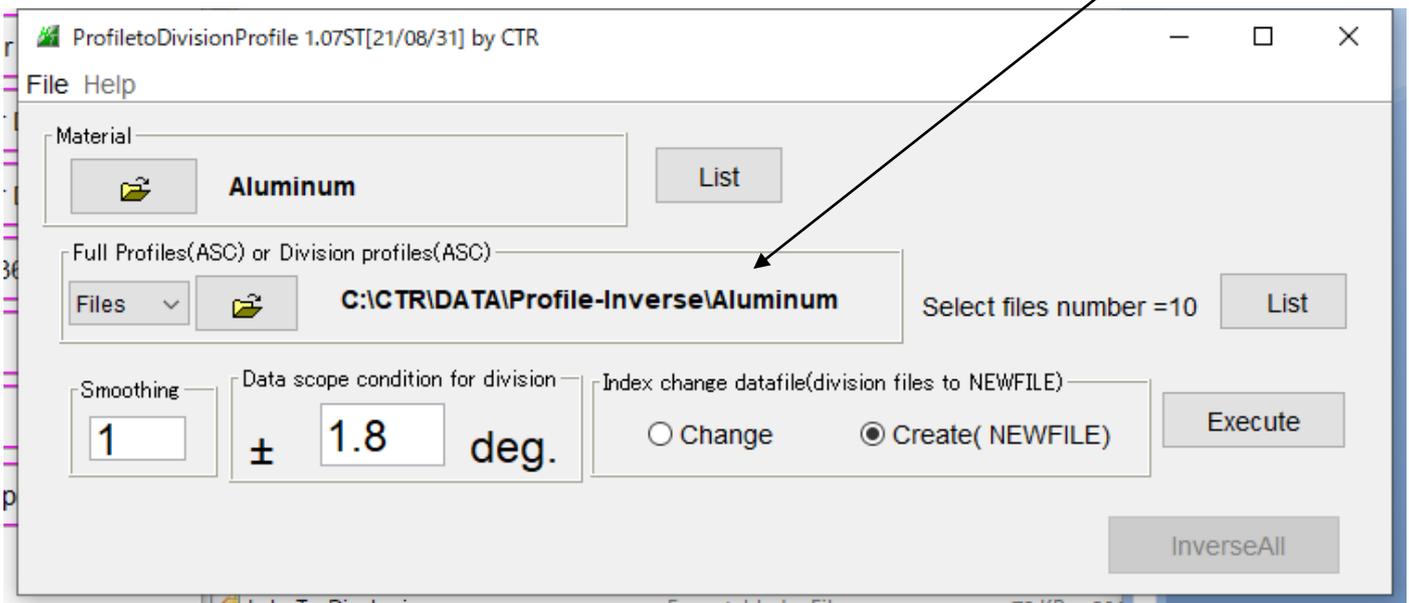
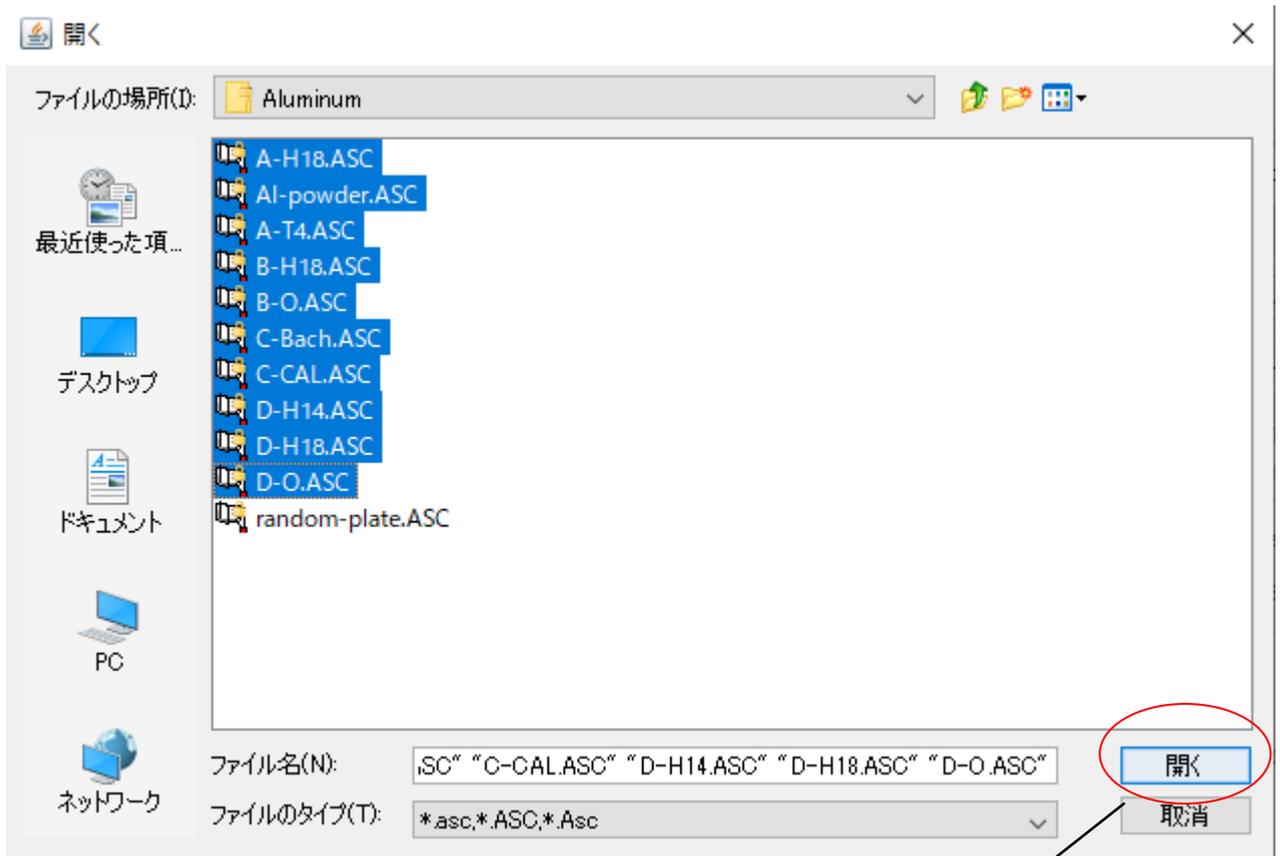
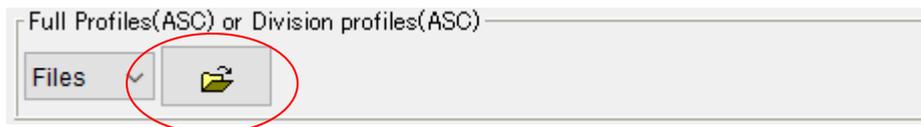
分割開始

InverseAll の起動

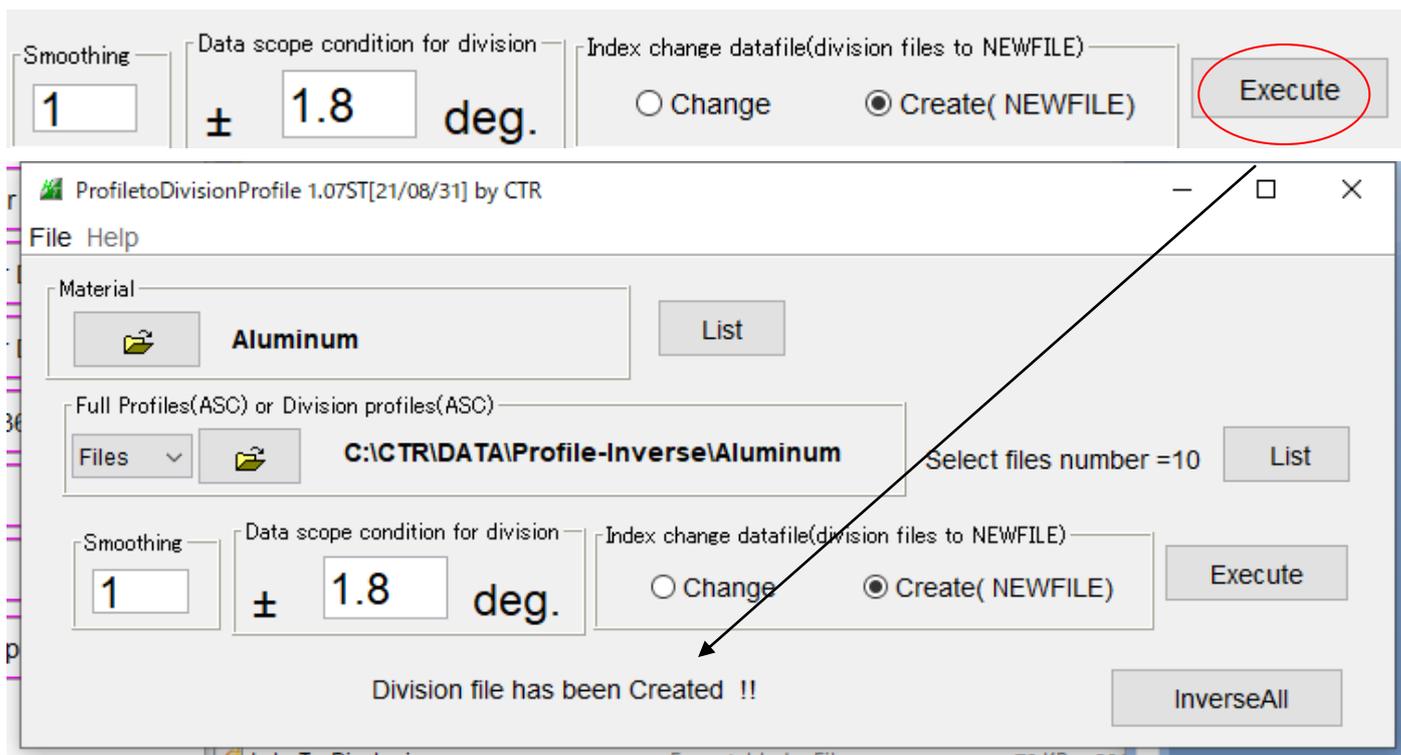
材料の選択



## 連続データの選択



分割データを Create



CTR > DATA > Profile-Inverse > Aluminum

名前	更新日時	種類
NEWFILE	2020/09/17 7:33	ファイル フォルダー
A-H18.ASC	2012/06/26 10:44	RINT20007スキャン
Al-powder.ASC	2012/06/26 10:44	RINT20007スキャン
A-T4.ASC	2012/06/26 10:44	RINT20007スキャン
B-H18.ASC	2012/06/26 10:44	RINT20007スキャン
B-O.ASC	2012/06/26 10:44	RINT20007スキャン
C-Bach.ASC	2012/06/26 10:44	RINT20007スキャン
C-CAL.ASC	2012/06/26 10:44	RINT20007スキャン
D-H14.ASC	2012/06/26 10:44	RINT20007スキャン
D-H18.ASC	2012/06/26 10:44	RINT20007スキャン
D-O.ASC	2012/06/26 10:44	RINT20007スキャン

CTR > DATA > Profile-Inverse > Aluminum > NEWFILE

名前	更新日時	種類
A-H18.ASC	2020/09/17 7:33	RINT20007スキャン
Al-powder.ASC	2020/09/17 7:33	RINT20007スキャン
A-T4.ASC	2020/09/17 7:33	RINT20007スキャン
B-H18.ASC	2020/09/17 7:33	RINT20007スキャン
B-O.ASC	2020/09/17 7:33	RINT20007スキャン
C-Bach.ASC	2020/09/17 7:33	RINT20007スキャン
C-CAL.ASC	2020/09/17 7:33	RINT20007スキャン
D-H14.ASC	2020/09/17 7:33	RINT20007スキャン
D-H18.ASC	2020/09/17 7:33	RINT20007スキャン
D-O.ASC	2020/09/17 7:33	RINT20007スキャン

データ確認

連続データ

分割データ

分割数 1 → 9

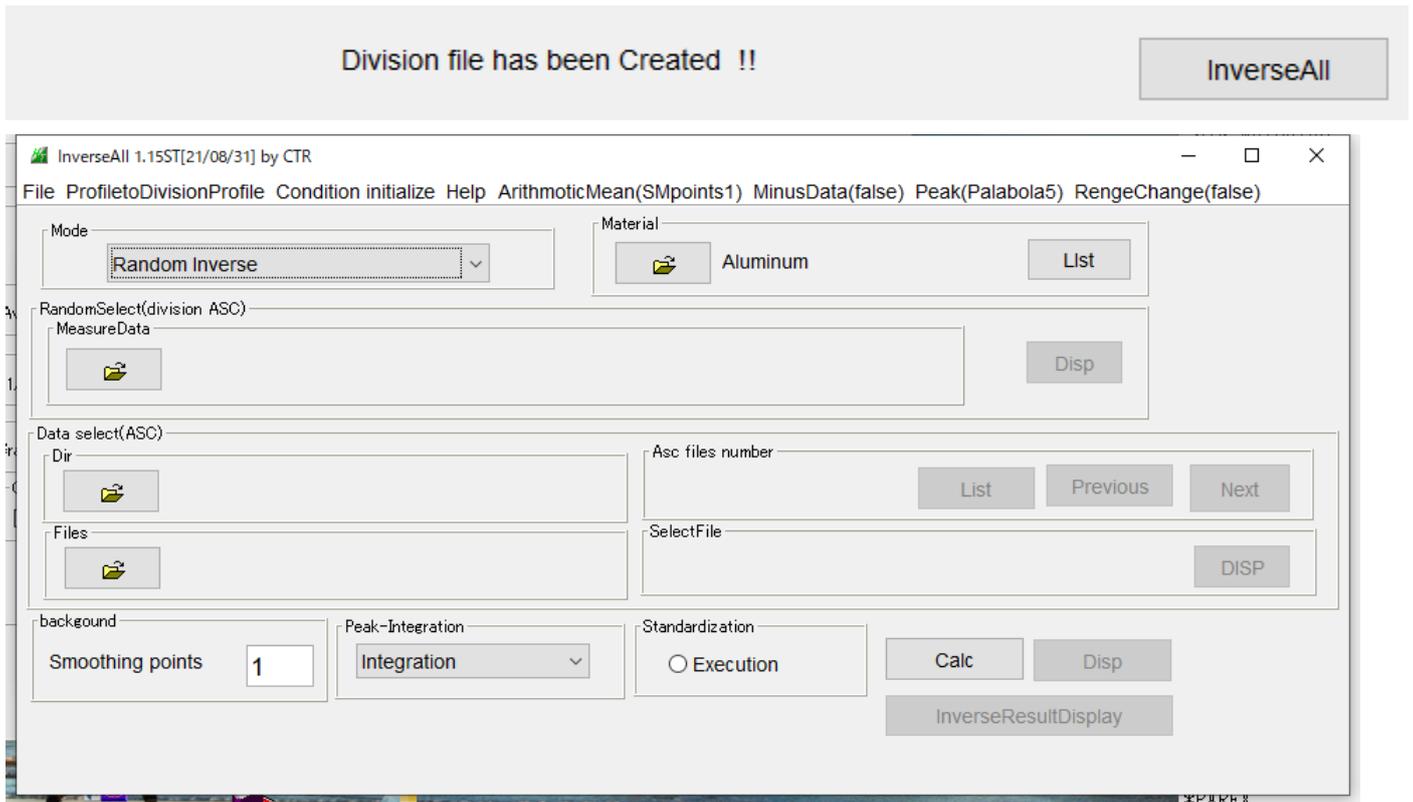
Dataの切り出し

```
*SEC_COUNT = 1
*TSPEC_SIZE = 0
*EXTRA_SIZE = 0
*MEMO =
*BEGIN
*GROUP = 0
*START = 30
*STOP = 140
*STEP = 0.02
*OFFSET = 0.000000
*SPEED = 0.24
*SLIT_SPEC = 0, 1°, 1.75, 10
*SLIT_SPEC = 1, 10mm, 8, 10
*SLIT_SPEC = 2, 1°, 0.94, 20
*SLIT_SPEC = 3, 0.3mm, 0.3, 20
*KV = 40
*MA = 40
*LOW = 0.000000
*HIGH = 0.000000
*CTEMPER = 0, 0.000000
*CTEMPER = 1, 0.000000
*CTEMPER = 2, 0.000000
*PAREX = 0, 0.000000
*PAREX = 1, 0.000000
*PAREX = 2, 0.000000
*PAREX = 3, 0.000000
*PAREX = 4, 0.000000
*PAREX = 5, 0.000000
*PAREX = 6, 0.000000
*PAREX = 7, 0.000000
*PAREX = 8, 0.000000
*PAREX = 9, 0.000000
*PAREX = 10, 0.000000
*PAREX = 11, 0.000000
*PAREX = 12, 0.000000
*PAREX = 13, 0.000000
*PAREX = 14, 0.000000
*PAREX = 15, 0.000000
*FULL_SCALE = 1000
*INDEX = 0, 0, 0
*COUNT = 5501
42, 41, 36, 46
```

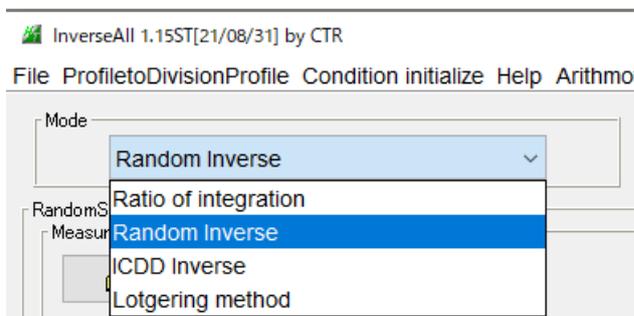
```
*SEC_COUNT = 9
*TSPEC_SIZE = 0
*EXTRA_SIZE = 0
*MEMO =
*BEGIN
*GROUP = 0
*START = 36.66
*STOP = 40.42
*STEP = 0.02
*OFFSET = 0.000000
*SPEED = 0.24
*SLIT_SPEC = 0, 1°, 1.75, 10
*SLIT_SPEC = 1, 10mm, 8, 10
*SLIT_SPEC = 2, 1°, 0.94, 20
*SLIT_SPEC = 3, 0.3mm, 0.3, 20
*KV = 40
*MA = 40
*LOW = 0.000000
*HIGH = 0.000000
*CTEMPER = 0, 0.000000
*CTEMPER = 1, 0.000000
*CTEMPER = 2, 0.000000
*PAREX = 0, 0.000000
*PAREX = 1, 0.000000
*PAREX = 2, 0.000000
*PAREX = 3, 0.000000
*PAREX = 4, 0.000000
*PAREX = 5, 0.000000
*PAREX = 6, 0.000000
*PAREX = 7, 0.000000
*PAREX = 8, 0.000000
*PAREX = 9, 0.000000
*PAREX = 10, 0.000000
*PAREX = 11, 0.000000
*PAREX = 12, 0.000000
*PAREX = 13, 0.000000
*PAREX = 14, 0.000000
*PAREX = 15, 0.000000
*FULL_SCALE = 1000
*INDEX = 1, 1, 1
*COUNT = 189
43.0
```

指数付けが行われている。

# InveraeAll の呼び出し

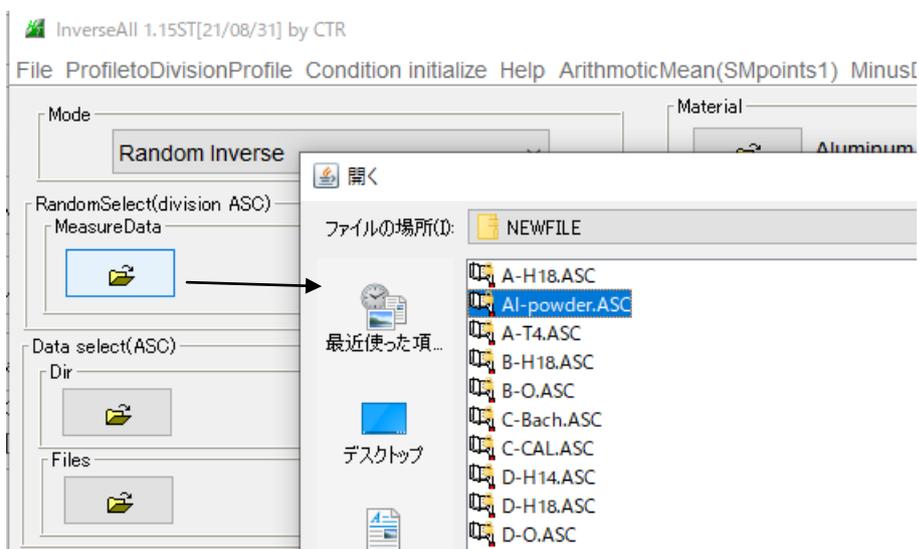


解析手法を指定



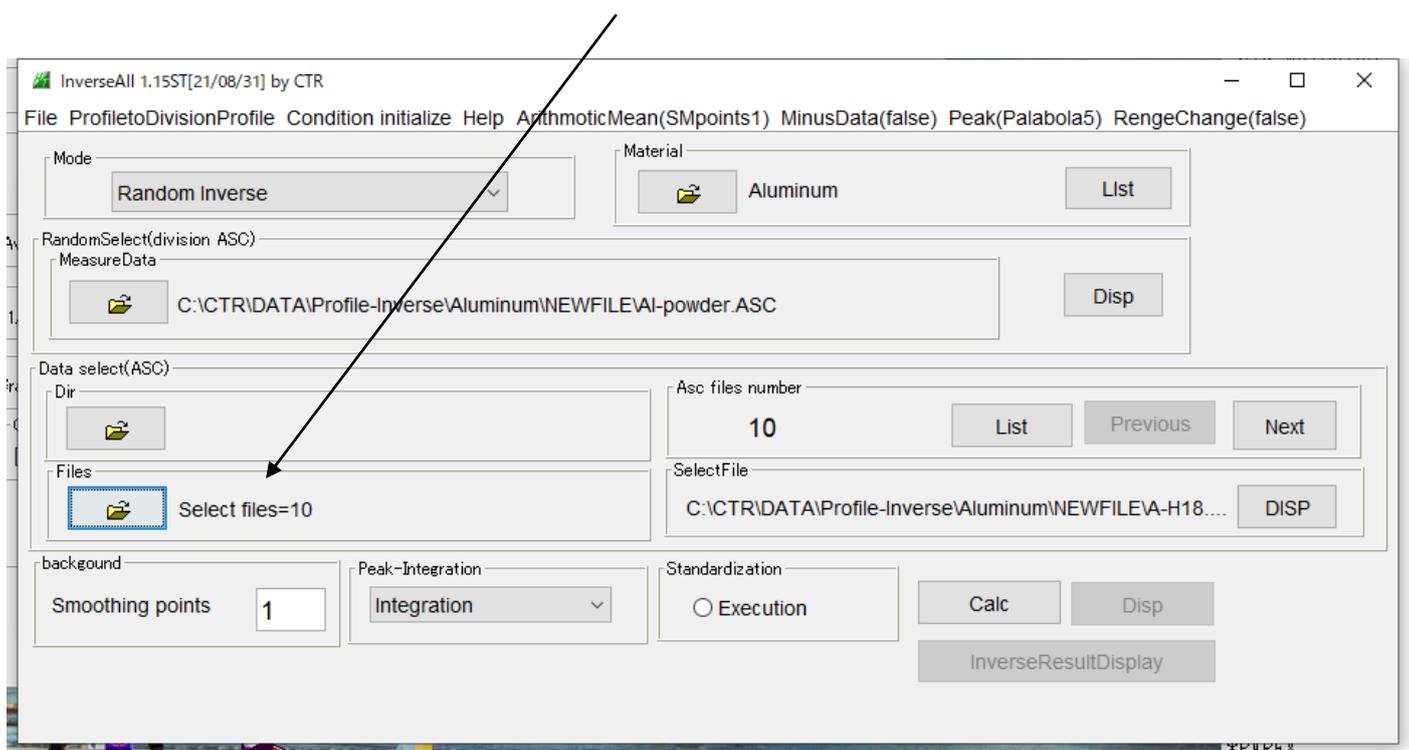
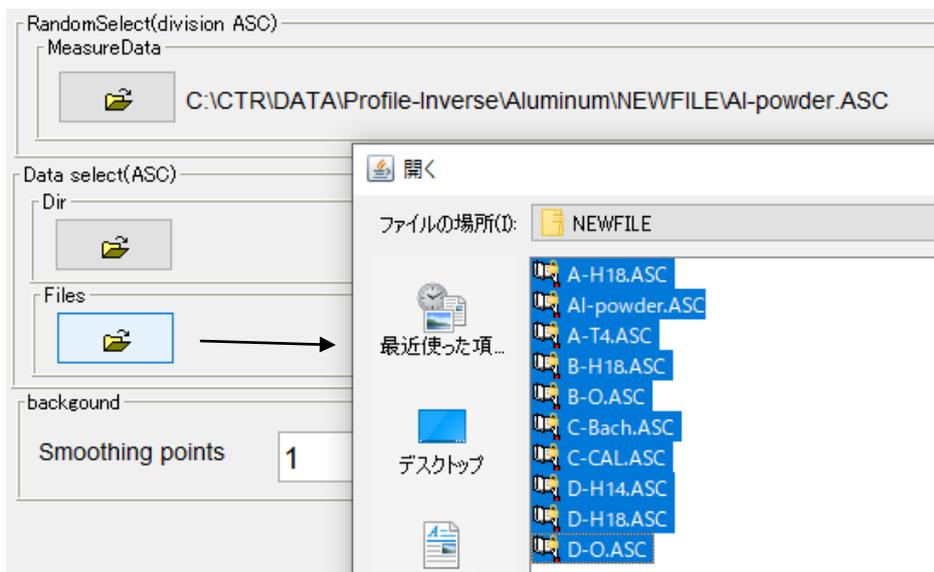
Random Inverse を選択

Random 指定



分割データが保存されている NEWFILE / Al-powder.ASC を選択

## Sample の選択



ピーク強度の場合各種条件を指定するが、積分強度の場合、バックグラウンドの平均化点数のみ  
逆極点の場合、等高線で表示されているが、本手法では方位 [h k l] の数値のみのため、  
広がりを含めた積分強度手法が望ましい。

## 積分強度開始

InverseAll 1.15ST[21/08/31] by CTR

File ProfiletoDivisionProfile Condition initialize Help ArithmeticMean(SMpoints1) MinusData(false) Peak(Palabola5) RengeChange(false)

Mode: Random Inverse

Material: Aluminum

RandomSelect(division ASC)

MeasureData: C:\CTR\DATA\Profile-Inverse\Aluminum\NEWFILEVAI-powder.ASC

Data select(ASC)

Dir: [Browse]

Asc files number: 10

Files: Select files=10

SelectFile: C:\CTR\DATA\Profile-Inverse\Aluminum\NEWFILEVA-H18... DISP

background: Smoothing points 3

Peak-Integration: Integration

Standardization: Execution

Calc

Disp

InverseResultDisplay

Randommode ArithmeticMean(SMpoints1) BGsmoints=3 Integration Minusdata-OFF

	[111]	[200]	[220]	[311]	[222]	[400]	[331]	[420]	[422]
A-H18	0.354	0.839	1.137	1.985	0.289	0.606	0.375	0.814	1.113
A-T4	0.232	2.109	0.333	0.442	0.185	2.706	0.293	0.577	0.097
Al-powder	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0
B-H18	0.185	0.39	0.742	0.628	0.259	0.318	0.454	0.521	0.518
B-O	0.295	1.491	0.35	0.517	0.346	1.991	0.323	0.522	0.48
C-Bach	0.114	2.869	1.496	1.021	0.112	3.185	0.521	1.01	0.841
C-CAL	0.524	3.008	1.089	0.808	0.542	3.167	0.649	0.98	0.512
D-H14	0.14	1.098	1.143	2.228	0.121	1.089	0.327	1.087	0.655
D-H18	0.133	0.542	1.786	2.661	0.075	0.457	0.26	0.642	1.057
D-O	0.031	4.946	0.767	0.975	0.139	5.608	0.27	0.873	0.56

## 逆極点図表示

background: Smoothing points 3

Peak-Integration: Integration

Standardization: Execution

Calc

Disp

InverseResultDisplay

表示するデータ選択

InverseDisplay 1.14T[21/08/31] by CTR

File Help Inverse[hkl] Other Average OFF Dataexpand OFF

ODF: LaboTex popLA StdODF ND TexTools Other

InverseTXTFile: C:\CTR\DATA\Profile-Inverse\Aluminum\NEWFILE\result.txt

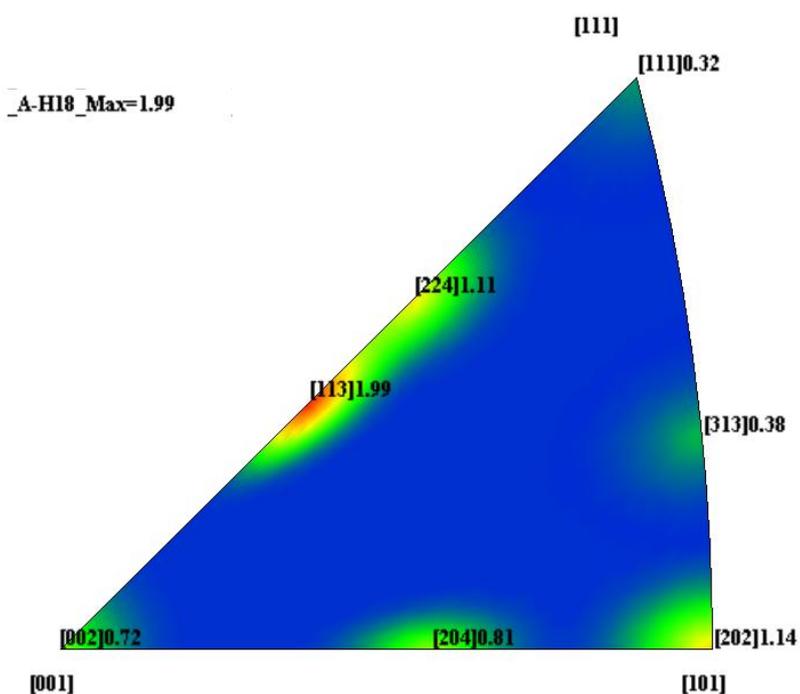
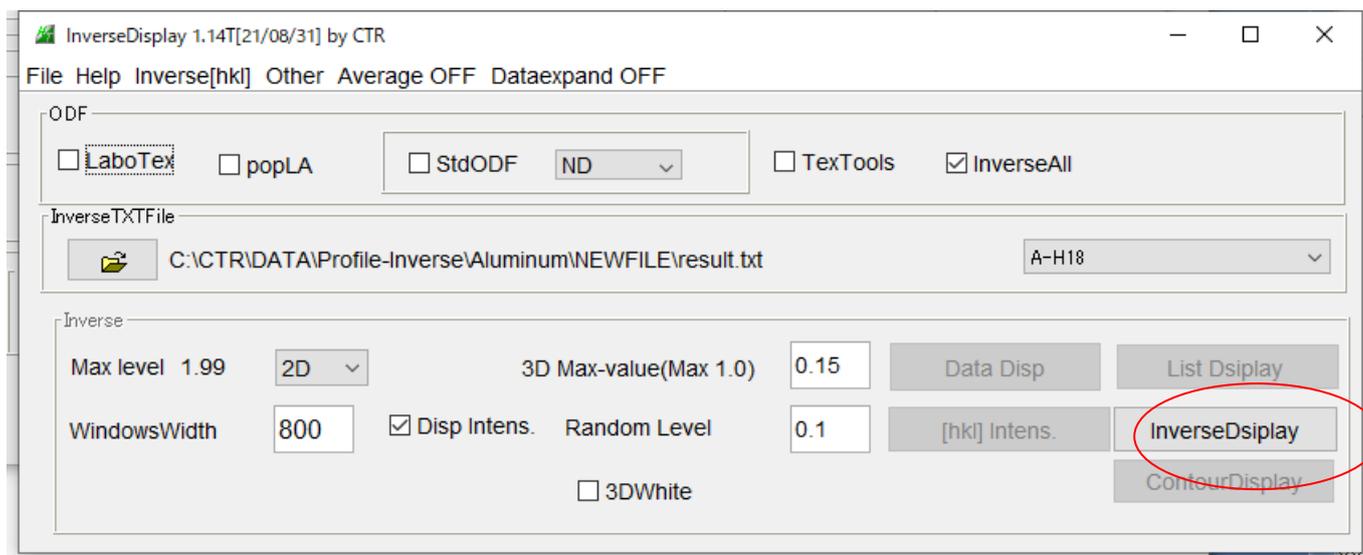
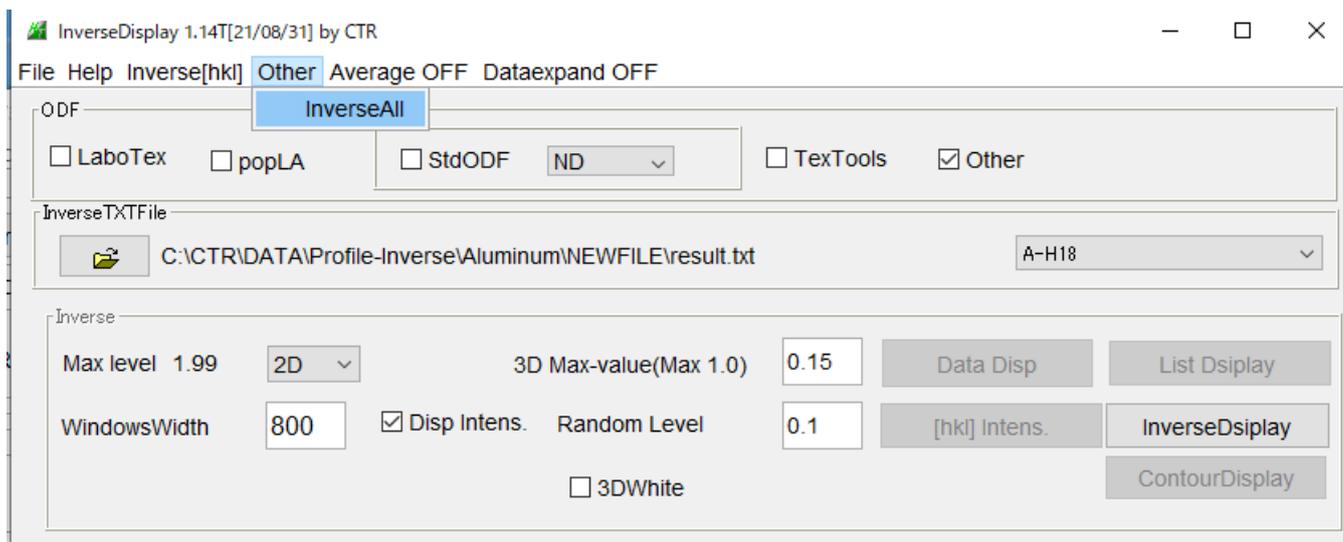
Inverse: Max level 1.99 2D 3D Max-value(Max 1.0) 0.15 Data Disp List Dsplay

WindowsWidth 800 [hkl] Intens. InverseDsplay

3DWhite ContourDisplay

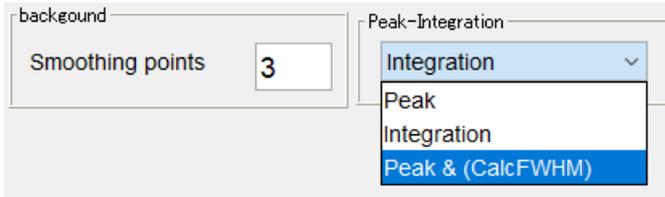
## 逆極点種別選択

Other に InverseAll にする。(2回目以降は選択不要)

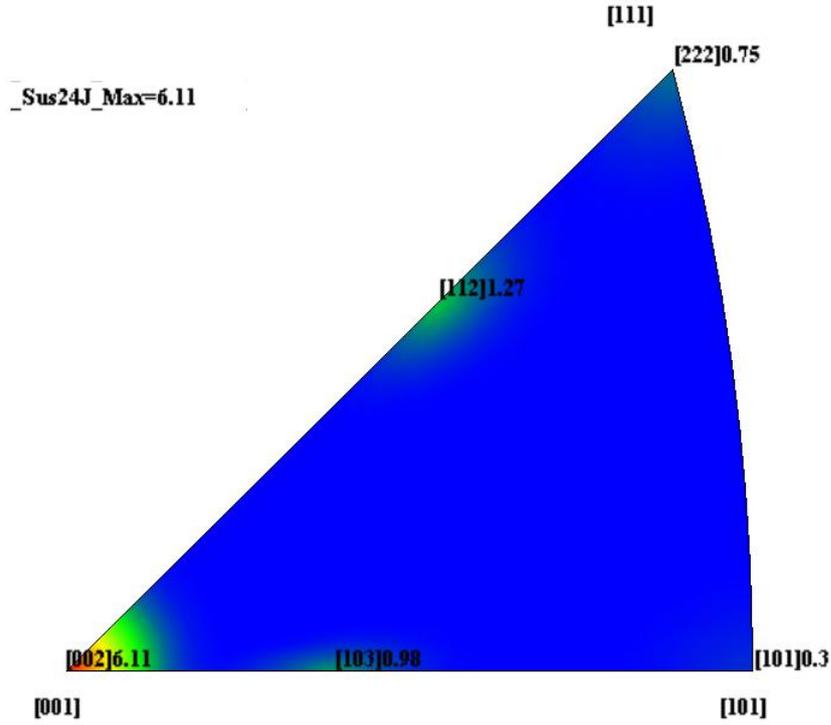


3D表示や等高線の幅は、見やすくするために意味はありません。

# InverseAllソフトウェアにFWHM計算追加

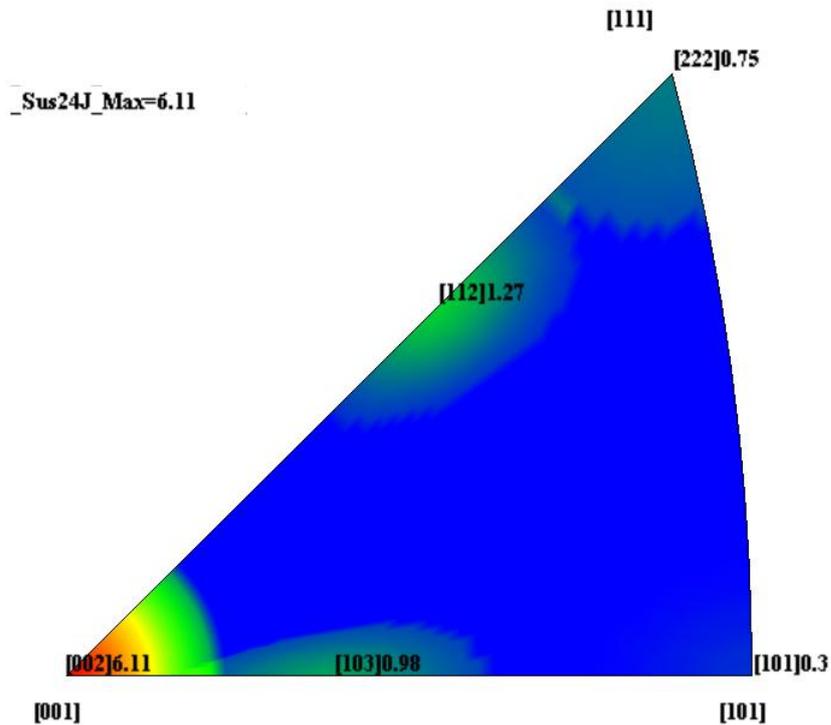


Peak計算にFWHMを追加し、3D表示や等高線表示の広がりにも適用  
Peak



FWHM=10deg で表示

Peak & FWHM



FWHM は、積分強度 / ピーク強度で計算

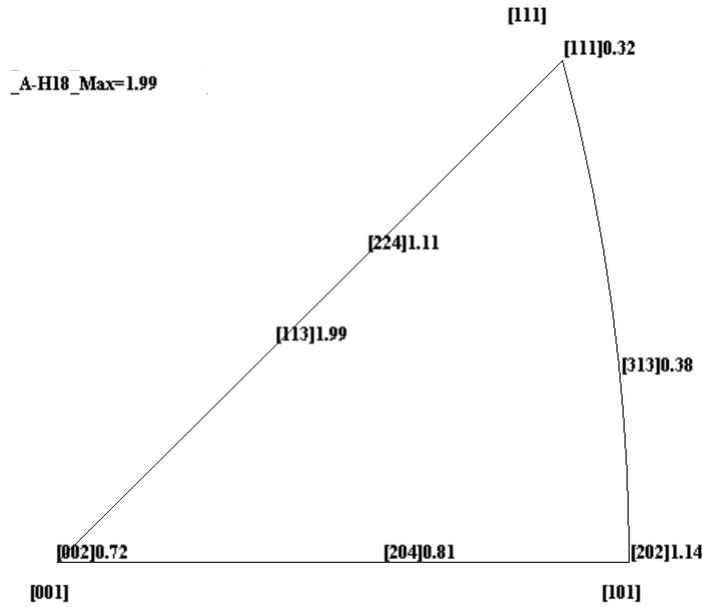
3D表示をやめて数値表示のみ

Inverse

Max level 1.99    2D    3D Max-value(Max 1.0) 0.15    Data Disp    List Dsisplay

WindowsWidth 800     Disp Intens.    Random Level 0    [hkl] Intens.    InverseDsisplay

3DWhite    ContourDisplay



等高線描画

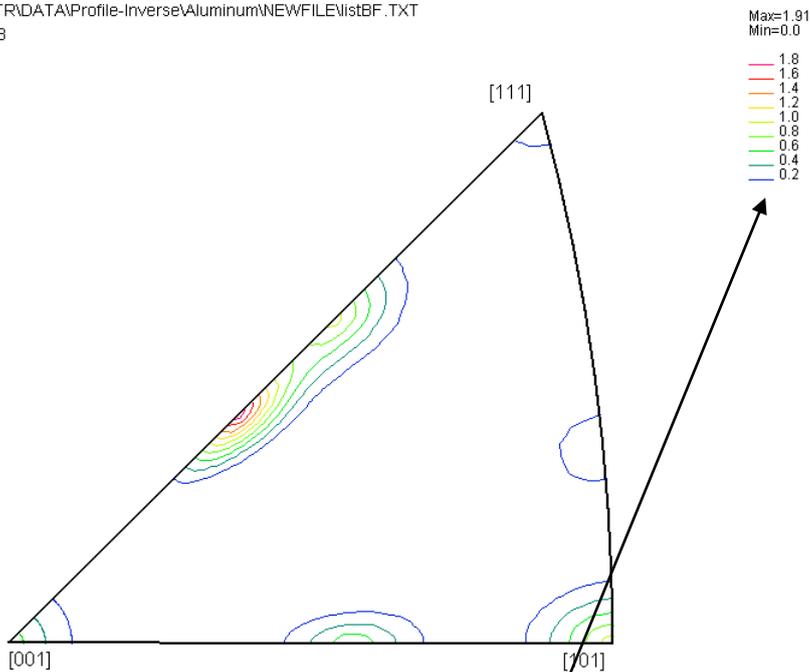
Inverse

Max level 1.99    2D    3D Max-value(Max 1.0) 0.15    Data Disp    List Dsisplay

WindowsWidth 800     Disp Intens.    Random Level 0    [hkl] Intens.    InverseDsisplay

3DWhite    **ContourDisplay**

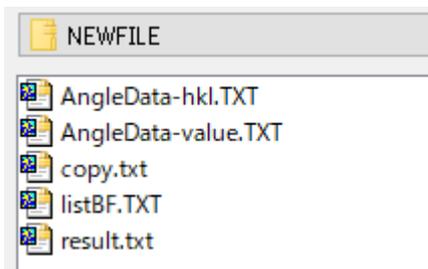
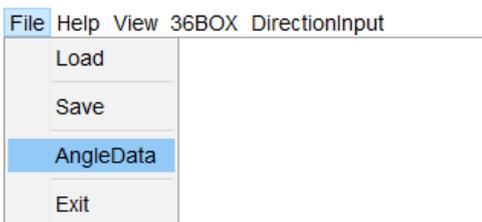
C:\CTR\DATA\Profile-Inverse\Aluminum\NEWFILE\istBF.TXT  
A-H18



等高線間隔を 0.2 に変更して表示

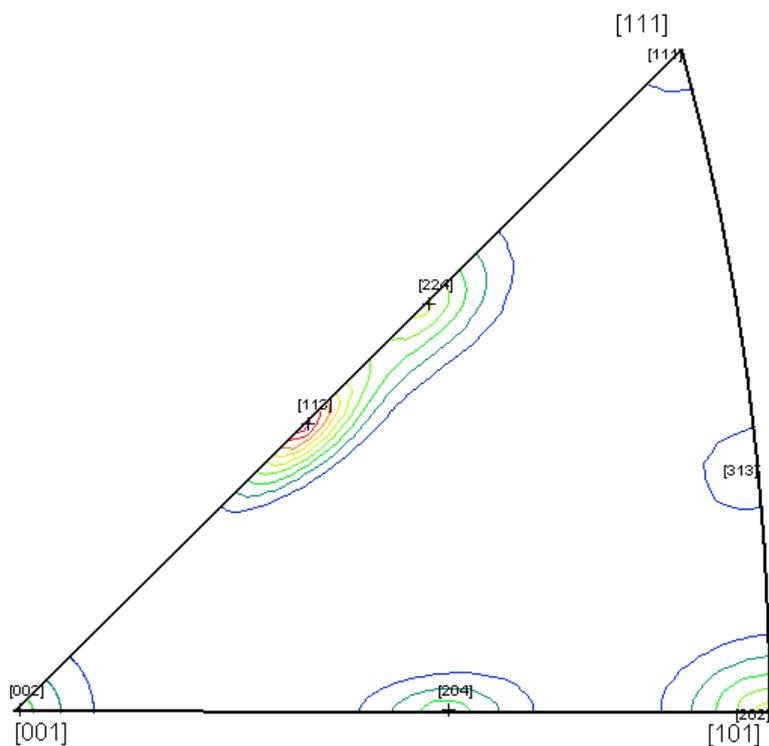
InverseDisplay の Version1.15 以降は AngleData ファイルが作成される

InverseCubicContourDisplay 1.17ST[21/08/31] by CTR

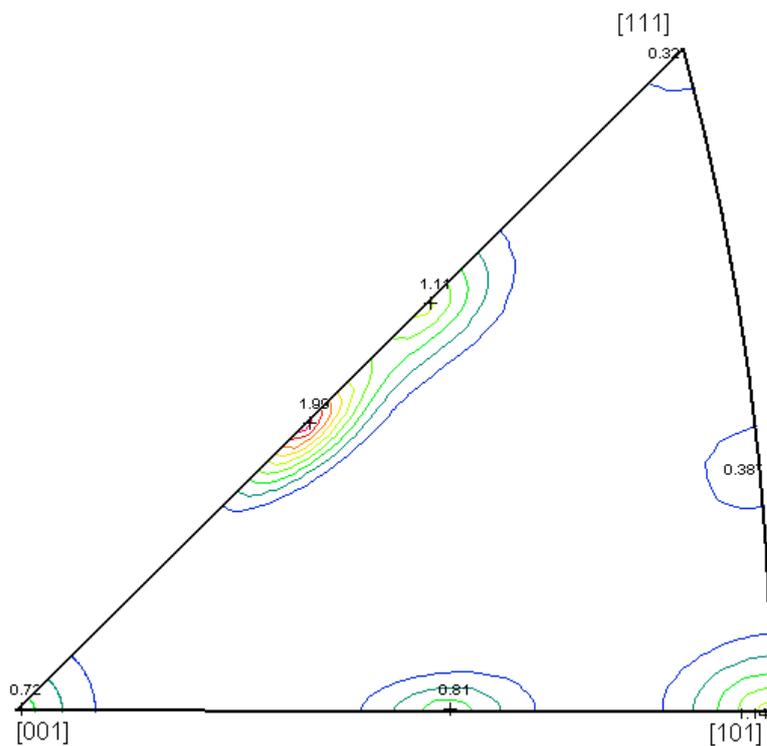


AngleData を選択

hkl で



Value で



# Inverseプロファイルの表示

