

補正された極点図から方位解析

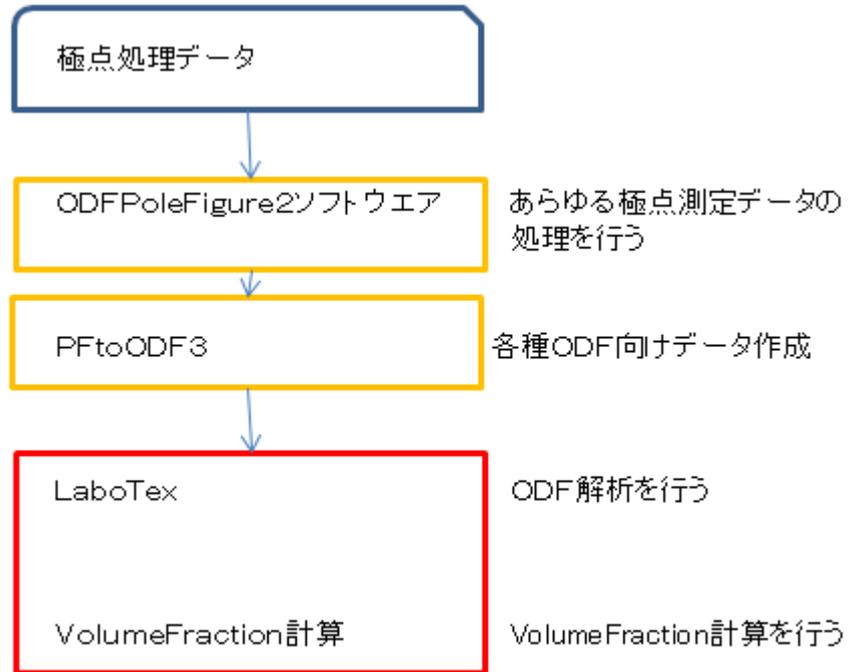
2020年6月29日

HelperTex Office

1. 概要

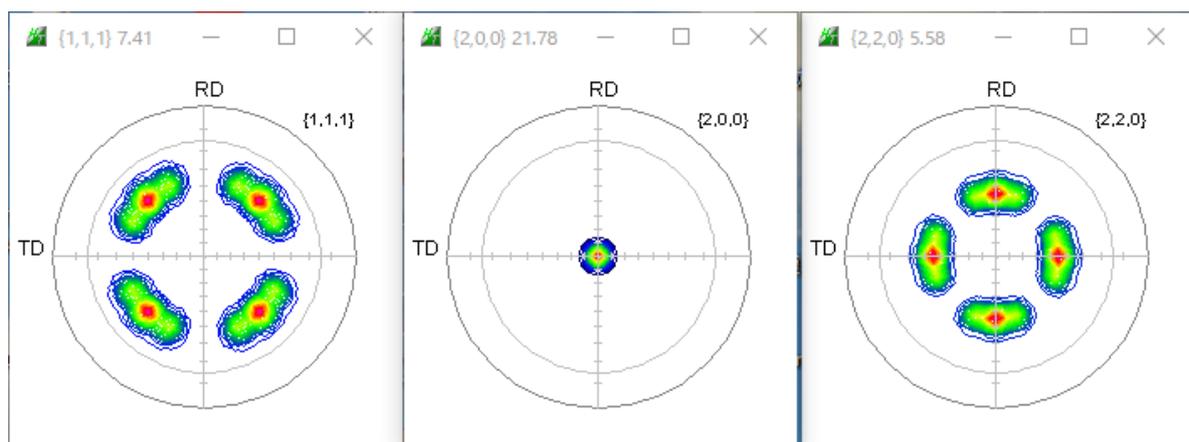
XTRによる方位解析では、ODF解析を行う前に、バックグラウンド除去や`defocus`補正などの極点図処理が行われる。

本資料ではこのような前段処理が行われたASCデータから方位解析を行う手順を説明します。



2. 入力データ(極点処理結果)

各種測定データをODFPoleFigure2ソフトウェアで処理した結果



3. ODF Pole Figure 2で極点処理結果を読み込む

ODFPoleFigure2 3.94T[20/10/31] by CTR

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

Files select
ASC(RINT-PC) 111_JabotexCWASC 200_JabotexCWASC 220_JabotexCWASC

Calculation Condition
Previous Next U*アルミニウムの方角解析#TEST#111_JabotexCWASC 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 Inhibit

Smoothing
 α 3 Arithmetic mean Disp
RD 0.0 Interpolation Full Disp

AbsCalc
 Ref Trans Schulz reflection method Change Absorption coefficient 13.9 1/cm Thickness 0.1 cm Set 2Theta 0.0 deg. 1/Kt Profile

Defocus file Select Transmission defocus HKL+T
 Defocus(1) functions file Files Normalization degree of a polynomial 0 TenckhoffFitting TextDisp
Make defocus function files by TXT2
 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 2 Weight 10 Disp
 After connection

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

Filemake success !! CTRHome : C: Select crystal : Cubic 20/06/29

本来は測定データの極点処理を行うが、今回は処理結果の入力なので、処理は行わない
ASC→TXT2に変換する。

PF to ODF 3を起動 (4. ~)

4. P F t o O D F 3 ソフトウェアで各種 O D F 向けデータを作成

File Option Symmetric Software Data Help

Lattice constant

Material Aluminum.txt

Structure Code(Symmetries after Schoenfiles) 7 - O (cubic)

a 1.0 <=b 1.0 <=c 1.0 alpha 90.0 beta 90.0 gamm 90.0

Initialize Start

getHKL<-Filename AllFileSelect

PF Data

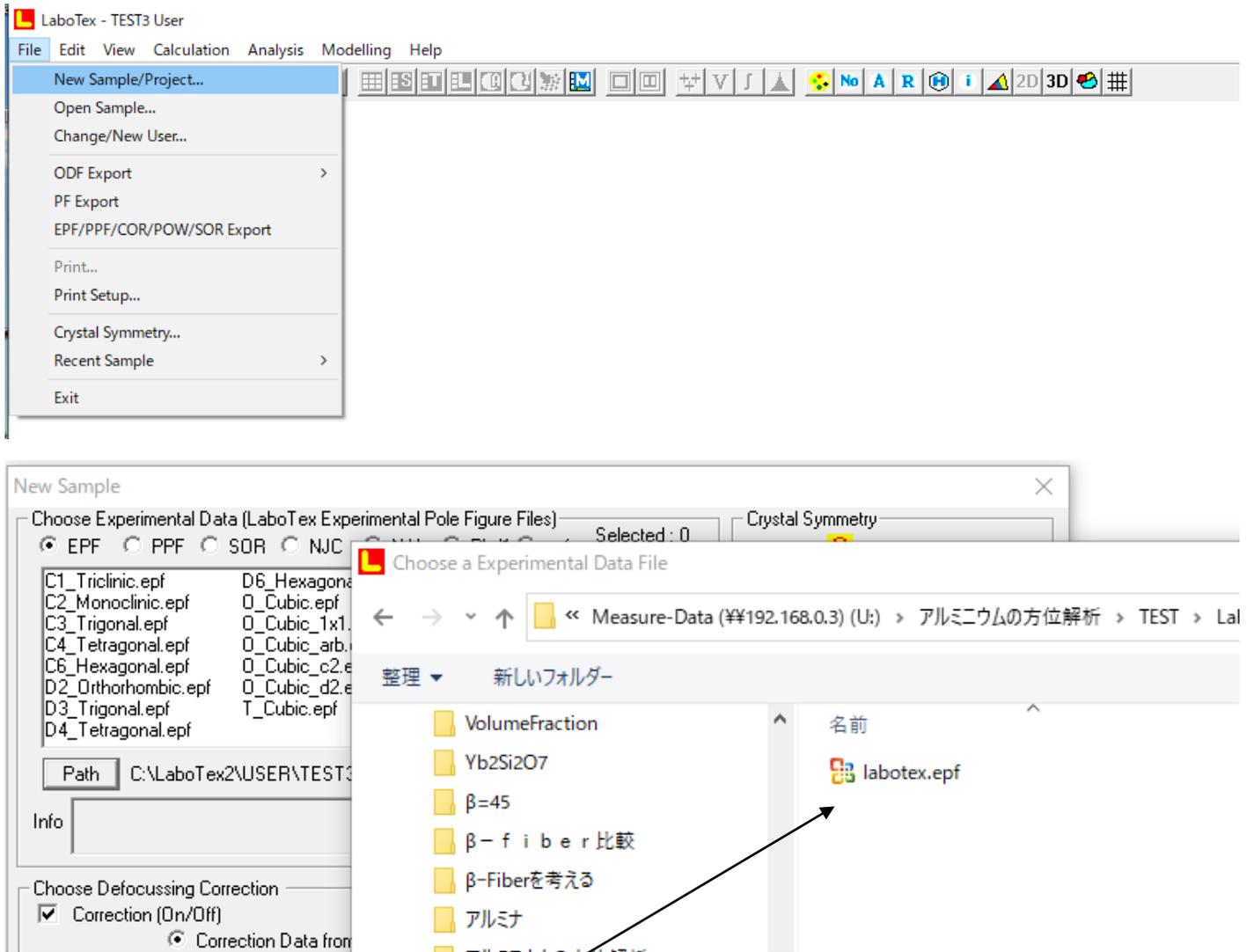
SelectFile(TXT(b,intens),TXT2(a,b,intens))	h,k,l	2Theta	Alpha scope	AlphaS	AlphaE	Select
111_labotexCW_ch_2.TXT	1,1,1	0.0	0.0->75.0	0.0	75.0	<input checked="" type="checkbox"/>
200_labotexCW_ch_2.TXT	2,0,0	0.0	0.0->75.0	0.0	75.0	<input checked="" type="checkbox"/>
220_labotexCW_ch_2.TXT	2,2,0	0.0	0.0->75.0	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"/>

Comment 111_labotexCW_ch_2.TXT 200_labotexCW_ch_2.TXT 220_labotexCW_ch_2.TXT

Symmetric type Full CenterData Average Epf file save Labotex(EPF),popLA(RAW) filename labotex

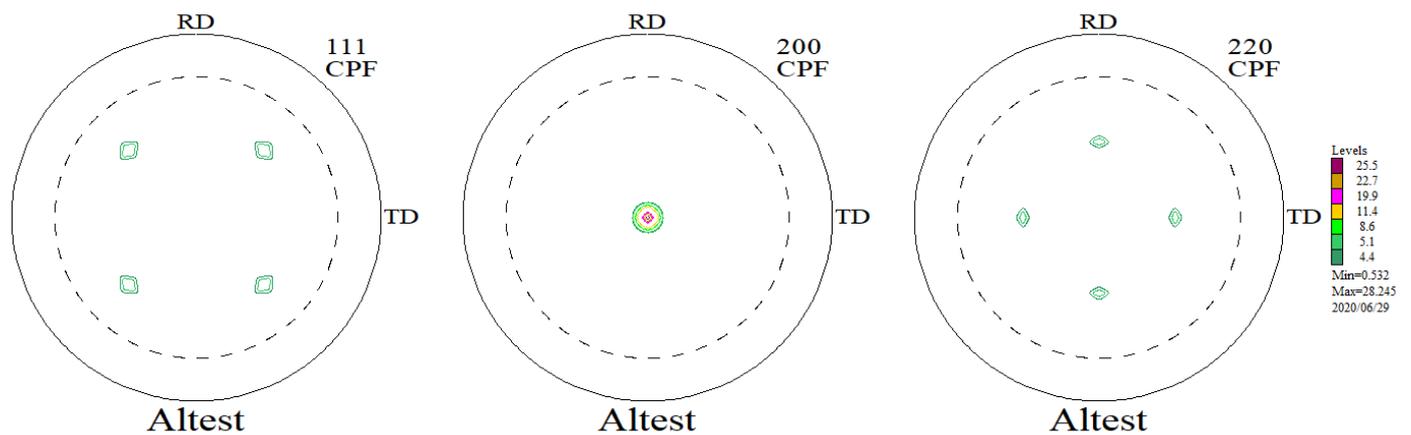
L a b o T e x 入力データを作成

5. LaboTexで読み込む

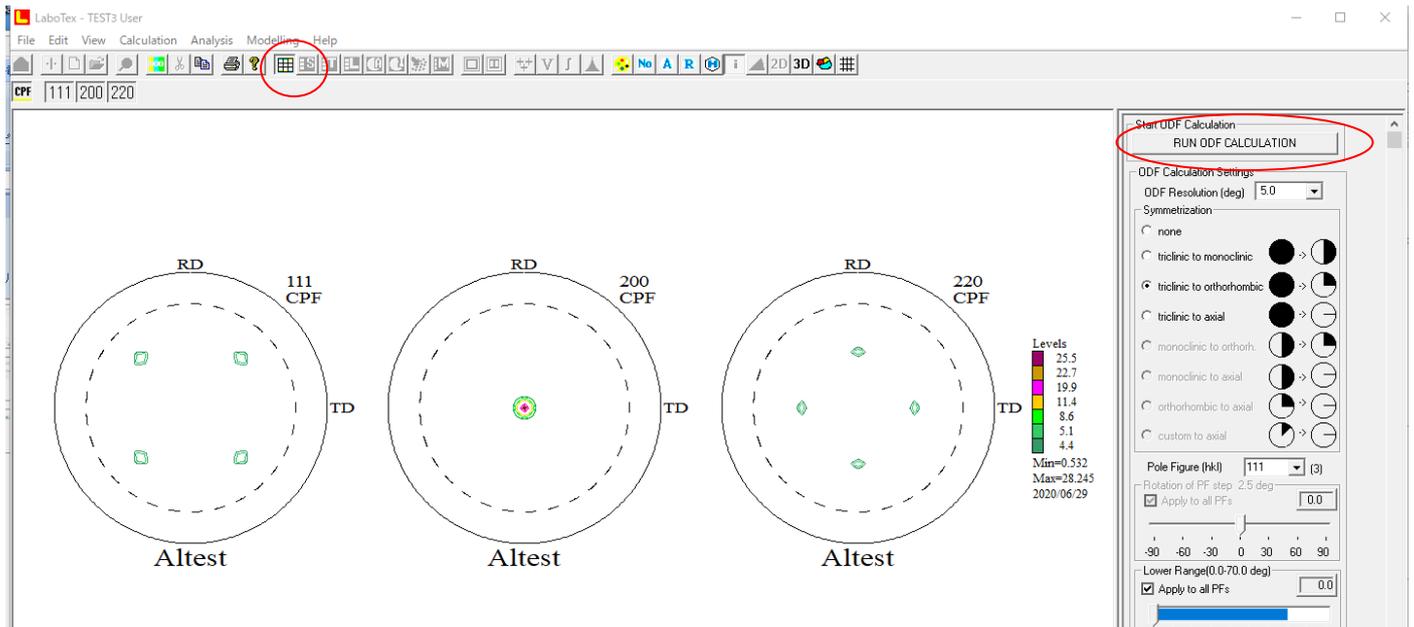


PF to ODF 3 で作成したデータを選択

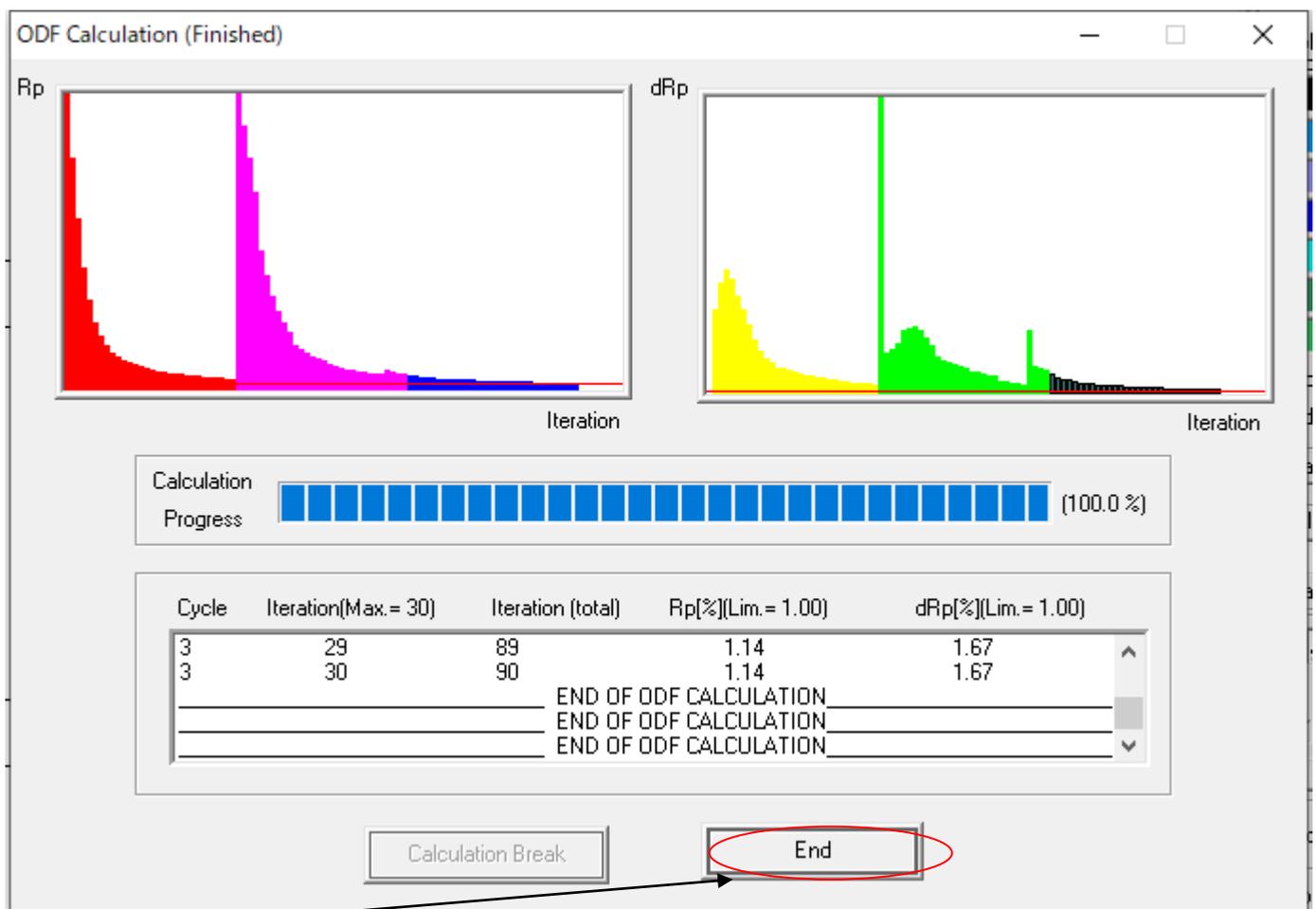
LaboTex に読み込まれる。



ODF解析を行う。



ODF解析のRp% (Error) が表示される。



確認する

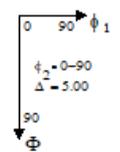
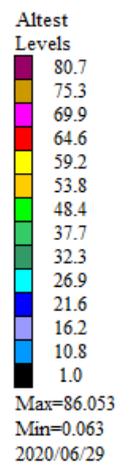
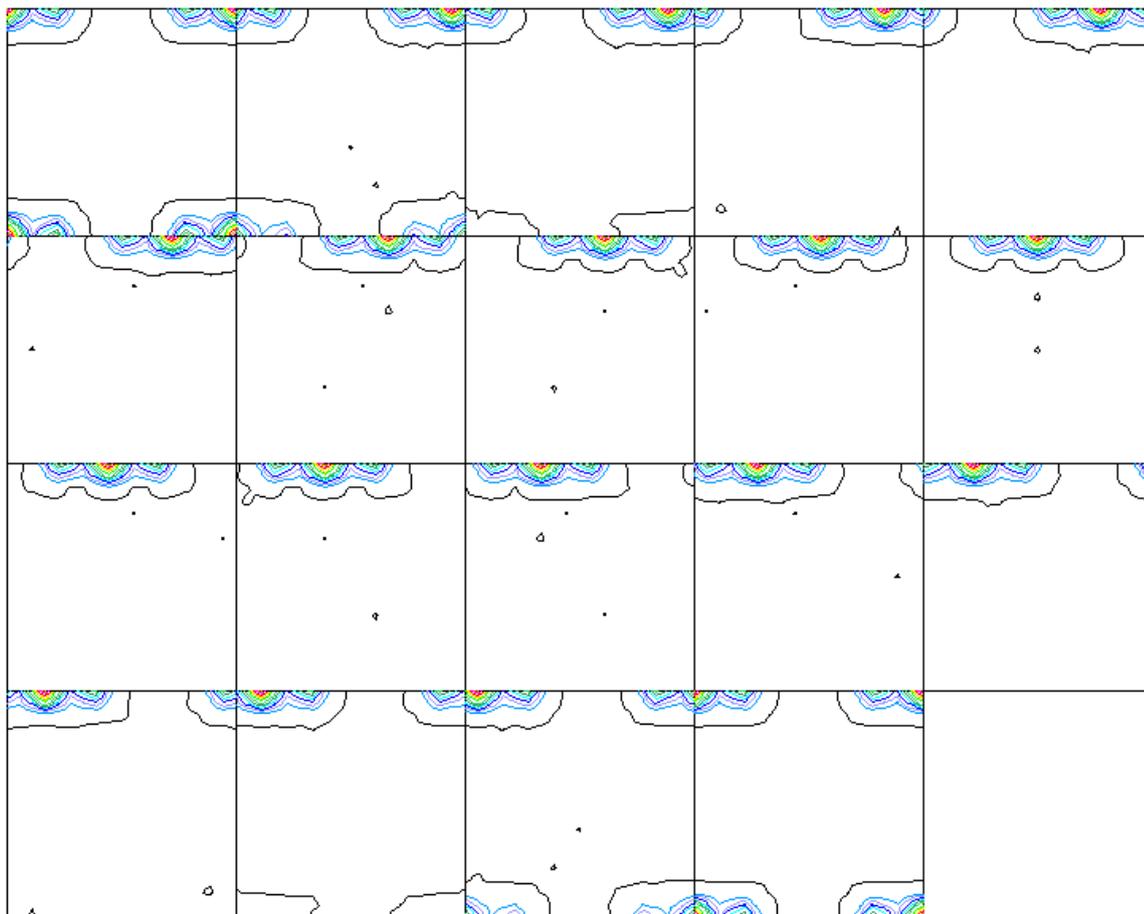
ODF図を表示

LaboTex - TEST3 User

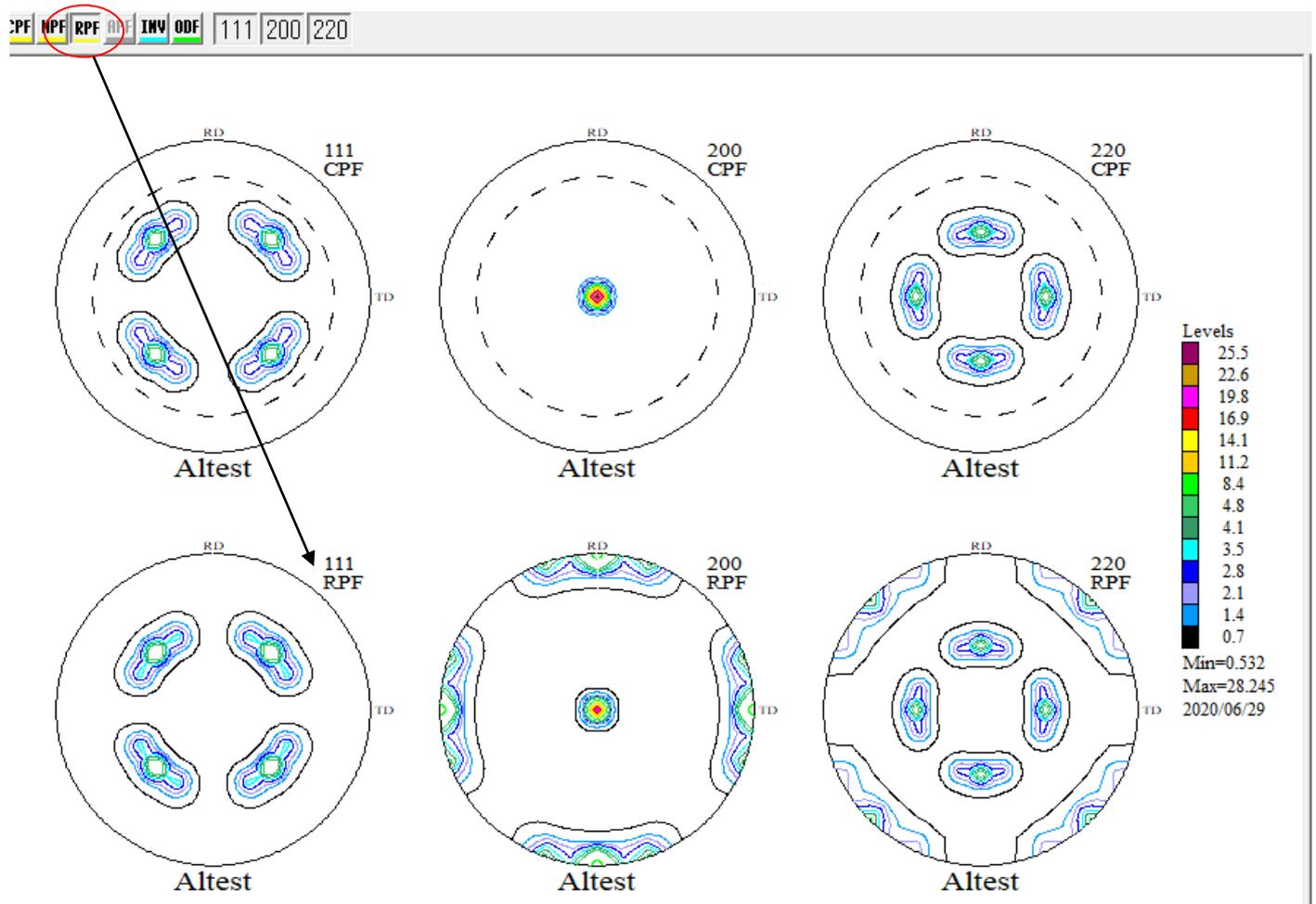
File Edit View Calculation Analysis Modelling



Euler 角度を指定



入力極点図と ODF 解析後の極点図を比較

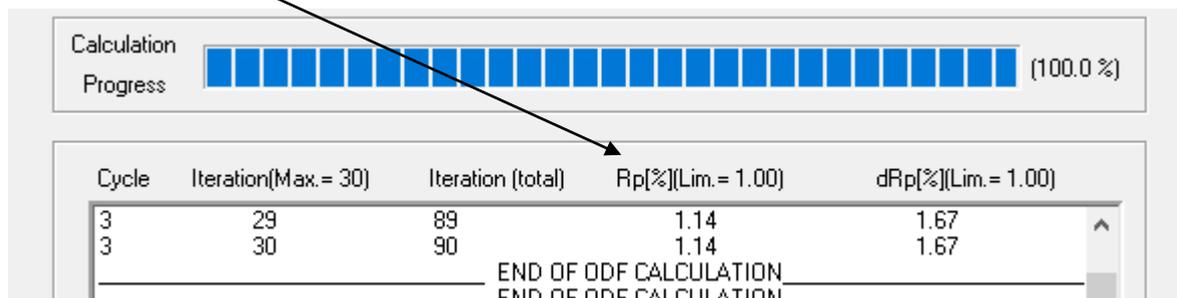


上段が入力極点図

下段が ODF 解析後の極点図

本来、ODF 後の極点図は入力極点図と一致するが入力極点図に E r r o r があると一致しない
この E r r o r が R p %

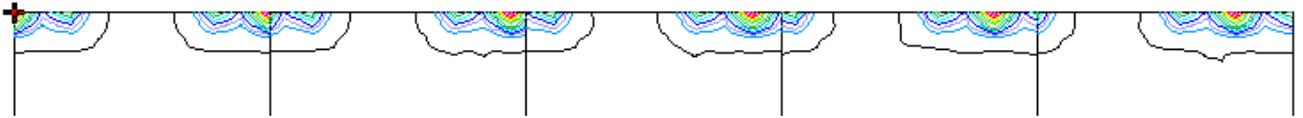
$$RP_{\{hkl\}} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left| \frac{\{PF_{exp.}\}_i - \{PF_{calc.}\}_i}{\{PF_{exp.}\}_i} \right| \cdot 100\%$$



6. ODF図から VolumeFraction を計算する。

LaboTex - TEST3 User

File Edit View Calculation Analysis Modelling Help



可能性が高い方位が検出される。

Quantitative Analysis - Model Functions Method - Project: Demo Sample:Altest Job:1

Crystal Symmetry: (Cubic) Sample Symmetry: Orthorhombic Grid Cells for Output ODF: 5.0*5.0 Step: 0.50 Diagram Range +/-: 45.0

Component No. 1. 100.0% FWHM φ_1 = 10.0 45.0

No	Texture Component	On	Distribution	FWHM φ_1	FWHM Φ	FWHM φ_2	Volume Fraction	Show Sym. Eq.
1	{ 0 0 1 } < 1 0 0 > cube	<input checked="" type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	64 %	{ 0 0 1 } < 1 0 0 > cube
2	{ 1 0 0 } < 0 1 3 >	<input checked="" type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	29 %	
3	{ 0 1 3 } < 1 0 0 >	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	10 %	
4	{ 1 2 2 } < 2 -2 1 >	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	10 %	
5	{ 1 1 2 } < 1 -1 0 >	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	10 %	
6	{ 1 1 2 } < 1 1 -1 > copper	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	10 %	
7	{ 5 2 5 } < 1 -5 1 >	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	10 %	
8	{ 1 1 1 } < -1 -1 2 >	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	10 %	
9	{ 1 1 1 } < 0 1 -1 >	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	10 %	
10	{ 2 3 1 } < -3 4 -6 > S-4	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	10 %	

Start Volume Fraction Calculation

VolumeFraction を計算する。

計算結果

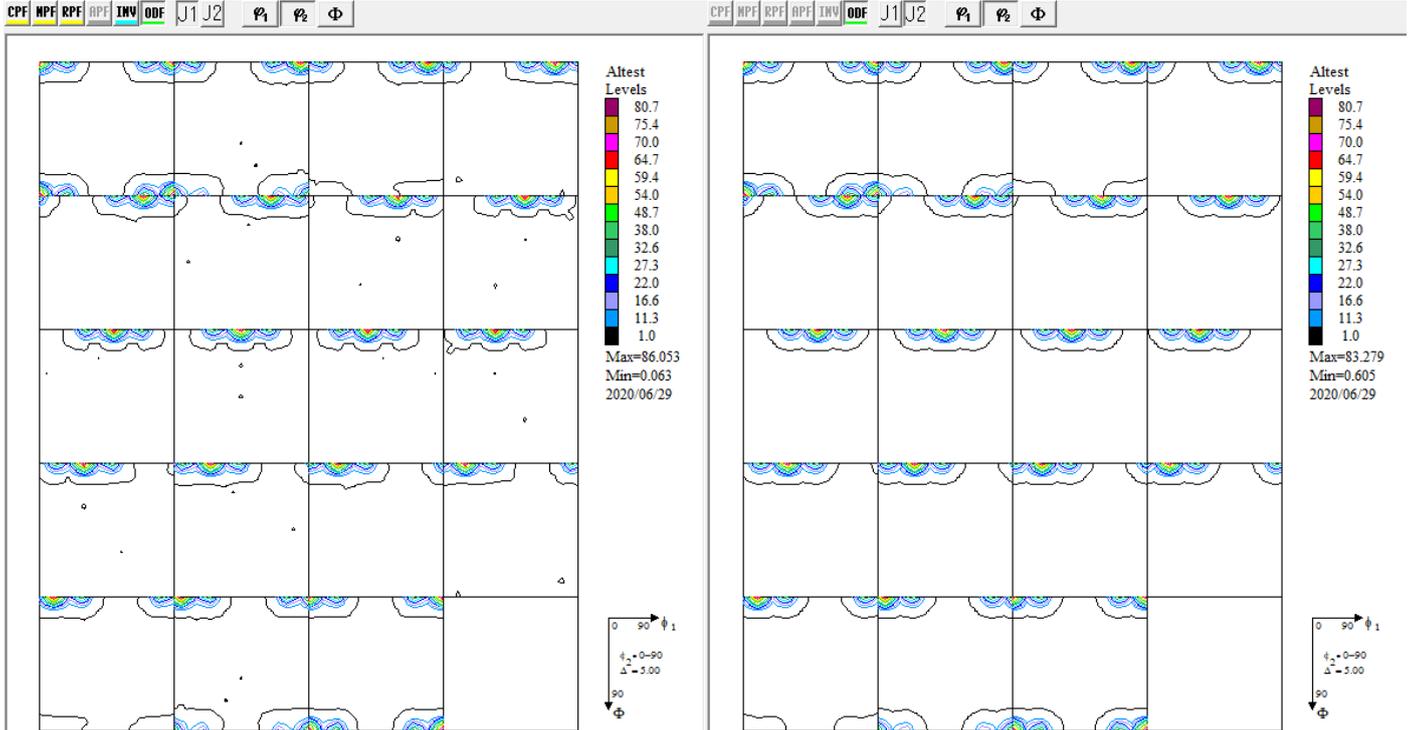
Misfit Good Backgr. Diff.

Component No. 1. 100.0% -45.0 45.0

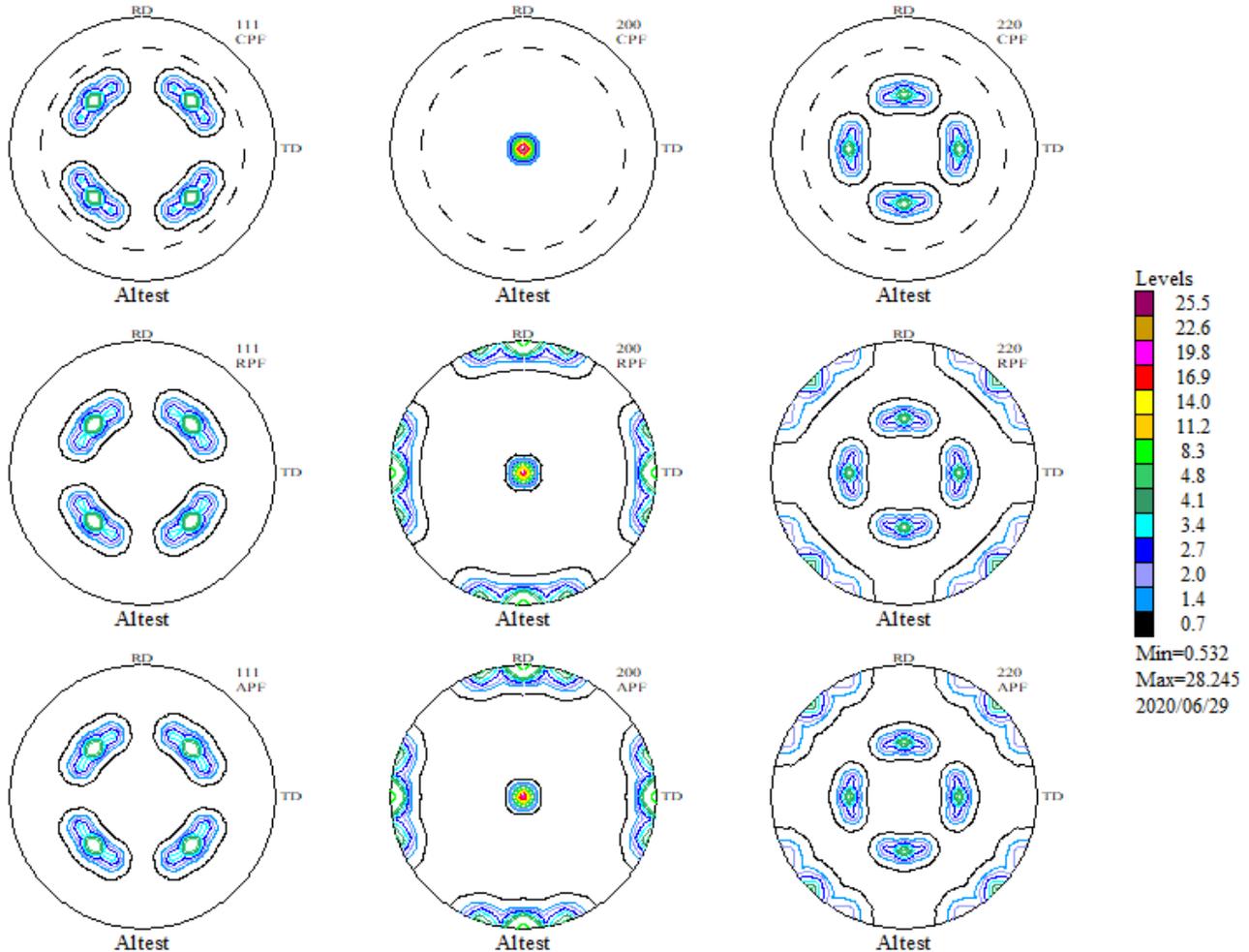
No	Texture Component	On	Distribution	FWHM φ_1	FWHM Φ	FWHM φ_2	Volume Fraction	Show Sym. Eq.
1	{ 0 0 1 } < 1 0 0 > cube	<input checked="" type="checkbox"/>	Gauss	11.0	9.7	10.0	20 %	{ 0 0 1 } < 1 0 0 > cube
2	{ 1 0 0 } < 0 1 3 >	<input checked="" type="checkbox"/>	Gauss	10.9	9.5	9.8	20 %	

7. VolumeFraction 結果の評価

7. 1 ODF 図比較



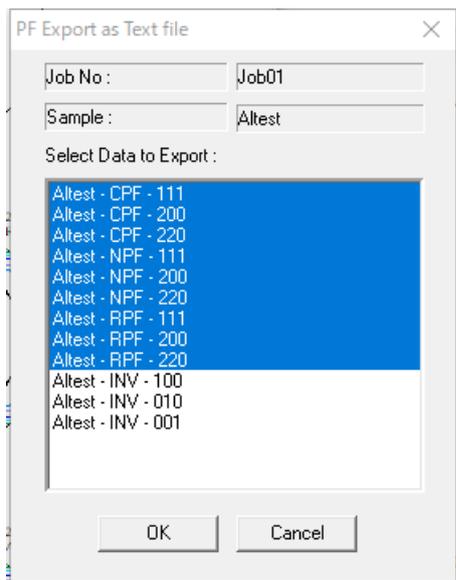
7. 2 再計算局点図と VolumeFraction から計算した極点図比較



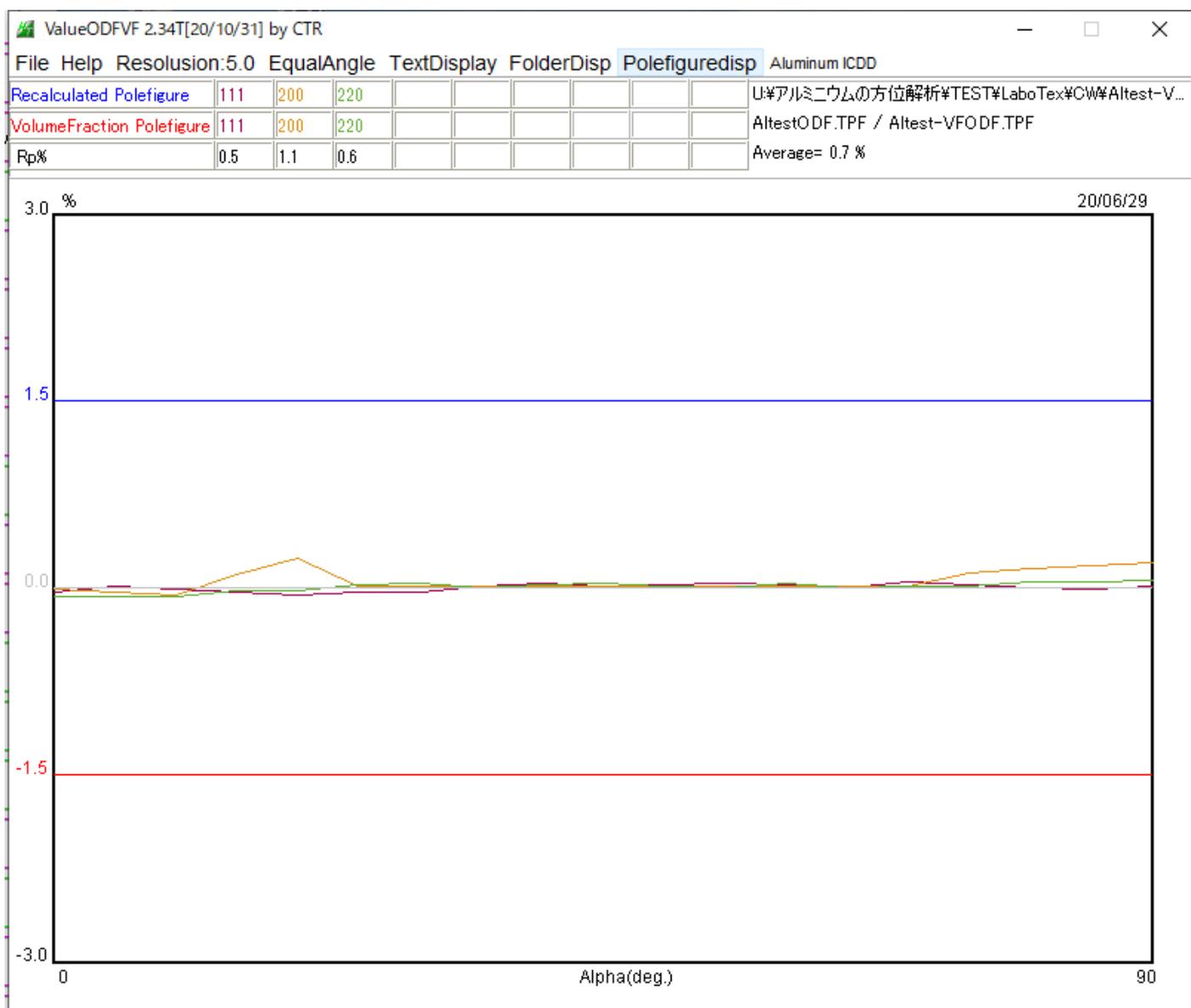
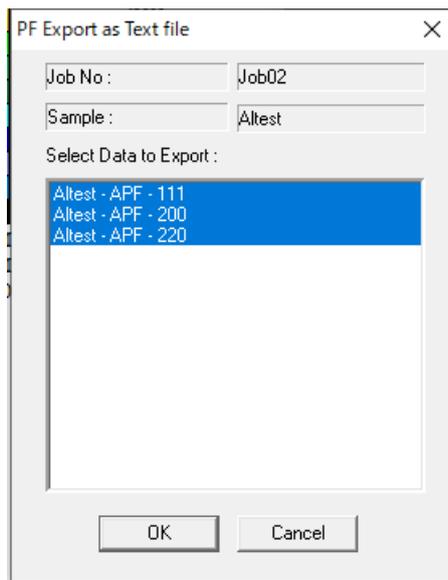
上段：入力局点図、中段：ODF 解析結果極点図、下段：VolumeFraction から計算した極点図

ODF 解析結果極点図と VolumeFraction 結果極点図から R p %を計算

ODF 解析結果極点図 Export



VolumeFraction 結果の Export



Rp%は0.7%であり、正確に VolumeFraction が計算されています。

まとめ

測定データを正確に極点処理が行われていれば、ODF 図から VolumeFraction (体積分率) が計算できます。

ただし、VolumeFraction は1回に最大10個の方位解析に限られます。

又、測定データに e r r o r が含まれる場合、ODF 解析結果の R p % が小さくならない事もあります。

最新のCTRソフトウェアでは、最小化R p %をサポートしています。

ぜひ、最新のCTRソフトウェアをお使いください。

納品時のコンピュータであれば、無償で u p d a t e 可能です。

<http://helpertex.sakura.ne.jp/Soft/DOC2/CTRSoftware-Conversion2.pdf>