r a n d o m 試料の得られないT i t a n i u m の O D F 解析

2021年07月29日 *HelperTex Office* 1. 概要

XRDによる極点測定ではdefocusが発生する。このdefocus補正はrandom試料を 用いて補正を行うが、完全なrandom試料は得難い。あるいは、 $3 \leq 2 \mu \nu$ 程度の粉末試料を用いる。 本資料では、defocus補正を行わないでODF解析を行い、得られた再計算極点図と入力極点図か らdefocus曲線を作成し、defcous補正を行う手法でODF解析を行う。 この方法では、入力極点図と再計算極点図から計算されるRp%とrandomレベルが重要である。

2. 入力極点図





データが粗い、更にバックグランドが凸凹しているのでバックグランドの平滑化を行う。 データの平滑化も行う。

3. バックグランドの平滑化

ī.

ODFPoleFigure2 3.97T[21/12/31] by CTR		
File Linear(absolute)3D ToolKit Help InitSet	BGMode Defocus Con	dition Free OverlapRevis
Files select ASC(RINT-PC) Biggin Discrete Discre	Measure	02_DS0-25deg.ASC 103_DS0-
Calcration Condition	Straight(Option)	
Previous Next U-¥測定データO¥材料-	Defocus(Option)	itandard-Ti-終了¥解析¥Ti-R¥
Backgroud delete mode	Measure(Calc)	
I I I I I I I I I I I I I I I I I I I	Minimum	BG defocus DSH1.2mm+S
O Minimum(αβ) O Minimum Average(α)		Trans blinds angle 30.0
Peak slit 7.0 mm BG Slit 7.0 mm 🗹 PeakS	All background	> deg 90.0 deg.

バックグランドモードは通常測定データ(Measure)を用いるが、バックグランドの状態により モード変更を行う。

以下にDefocusモードを説明する。

{103} 極点図では、α(45->55) に盛り上がりが発生している



α (55->70) で平均値を算出し、バックグランドのd e f o c u s 曲線で補完します。

Backgroud delete mode			
🗹 💿 Double Mode 🔾 Single	eMode 🔾 LowMode 🔾 HighMode 🔿 Nothing	BG defocus DSH1.2mm+Schulz+RSH5mm	Minimum mo
⊙ Minimum(αβ)	\bigcirc MinimumAverage(α)X 0.5	Trans blinds angle 30.0	
Peak slit 7.0 mm BG Slit	7.0 mm 🗹 PeakSlit / BGS BG Scope 55.0	deg. 70 deg. Set Disp	∝Inhibit

Setの赤色を押し、Dispすると水色の補完バックグランドを表示します。



このsetは各々の極点図で別々に指定します。

4. 極点データ処理(バックグランド削除(BGMode=Defocus)、平滑化、規格化)

File Linear(absolute)3D ToolKit Help InitSet BGMode Defocus Condition Free OverlapRevision MinimumMode Rp% Mormalization							
Files select							
ASC(RINT-PC) 002_DS0-25deg ASC 101_DS0-25deg ASC 102_DS0-25deg ASC 103_DS0-25deg ASC							
Previous Next U¥測定データO¥材料 - 輕金爾研究部会¥2010-01-20-Standard-Ti-終了¥解析¥Ti-R¥103 050-25deg ASC 10.3 Change							
Backgrout delete mode Smoothing							
🗹 🖲 DoubleMode 🔾 SingleMode 🔾 LowMode 🔾 HighMode 🔿 Nothing 🛛 BG defocus DSH12mm+Schulz+RSH5mm 🚽 🖊 Minimum mo 🔲 🗆 + a 3 🗸 Arithmetic mean 🧹 Disp							
O Minimum(α β) O MinimumAverage(α)X 0.5 Trans bligers angle 30.0							
Peak slit 7.0 mm BG Slit 7.0 mm 🗹 PeakSlit / BGS_ BG Scope 55.0 jreg. 70 deg. Set Disp 🛛 Inhibit							
AbsCalc							
Ref Trans Schulz reflection method V Change Absorption coefficien 133.0 1/cm This Ress 0.2 cm V Set 2Theta 70.64 dec. (a) 1/kt Profile							
Defocus file Select Trasmission defocus HKL+T							
Make defocus function files by TXT2 Piles C I Normalization degree of polynomial 0 TenckhoffFitting							
Unit Aira Defocus Value =0.0 V							
Defocus(2) fuperion files folder(Calc backdefocus) DSH12mm+Schulz RSH5mm Select crsytal Cubic							
Smoothinger ADC Cancel Calc Connect							
ValueODFVF-B ValueODFVF-A							
CTRHome : C: Select crystal : Hexagonal 21/07/29							

補正前



処理後





attice co	Titanium-alpha tyt			InitializeStart
Structu				
a 1.0	AllFileSelect			
PF Holde U:¥	ff 測定データO¥材料-軽金属研究部会¥2010−01−20−S	tandard-Ti-終	了¥解释析¥Ti−R	
PF Data	SelectFile(TXT(b,intens),TXT2(a,b,intens))	h,k,l	2Theta Alpha scope	AlphaS AlphaE Select
2	002_DS0-25deg_chB02A56CAS_2.TXT	0,0,2	38.4 0.0->75.0	0.0 75.0
2	101_DS0-25deg_chB02A56CAS_2.TXT	1,0,1	40.14 0.0->75.0	0.0 75.0
2	102_DS0-25deg_chB02A56CAS_2.TXT	1,0,2	52.98 0.0->75.0	0.0 75.0
2	103_DS0-25deg_chB02A56CAS_2.TXT	1,0,3	70.64 0.0->75.0	0.0 75.0
2		2,1,1	0.0	0.0 0.0
2		3,1,1	0.0	0.0 0.0
2		4,0,0	0.0	0.0 0.0
2		3,3,1	0.0	0.0 0.0
2		4,2,2	0.0	0.0 0.0
2		5,1,1	0.0	0.0 0.0
2		5,2,1	0.0	0.0 0.0
2		5,3,1	0.0	0.0 0.0
0			AFROAD ATUT 100 DOG (





極点図をExportしてRp%評価



d e f o c u s の影響

🌌 V	alueODFVF 2.35T[21/12/31]	by CTR							- 🗆 X	
File	Help Resolusion:5.0	Equal	Angle	TextDisplay	Folde	rDisp	Polefi	guredisp) Titanium-alpha ICDD	
	LaboTex-TPF	101	102	103		-			U¥測定データO¥材料 - 軽金属研究部会¥2010-01-20-St	t
		101	102	103			_	_ i	notdet.IPF	
	RIGAKU-ODF	25.1	18.9	1.9						
	TexTools-POL	<u> </u>							21/07/29	
	TexTools-RINTTXT									
	Standard ODF									
	popLA(Raw&Other)									
	NEWODF	$ \rangle$								
	MTEX									
	TXT2									
	PrintDisplay		_							
	Calcdefocus					\geq		<u> </u>		
	Exit						$\overline{\}$. / .	
		-								
	ODFへの入力	亟点図	と再詞	計算極点図	からd	e f	ocu	s 曲線	が作成されています	
16									×	
TXT	2filesselect									
	TXT2									
Rec	calcdefbcustile U:¥測定データO¥材料-軽金属研究	部会¥201	0-01-20-8	itandard-Ti-終了¥	解析¥Ti−R¥	LaboTex¥	CW¥calcd	lefocus	FileDisp	
									Peralsdefocus	
	sorption search								Recalcueiocus	
	002 V Searc	h	MUT=	1			Ca	alcAbsorpt	tion coefficient	
							OE	OFFiles	Exit	

入力極点図を選択

選択極点図が表示されます。



 $\{101\}$ を比較すると、下段のd e f o c u s 補正極点図の外周部分が強調されています。 ODF f i l e s でODF入力データを再作成

attice co	nstant						Initializ	:e			
Ma	aterial Titan	ium-alpha.txt						Start			
Structu	re Code(Symmetri	es after Schoenfiles)	cif	11 - D6 (k	nexagonal)	~	● getHKL<-Filename				
a 1.0	<=b 1.0	<=c 1.5885 alph	a 90.0	beta 9	0.0 gai	mm 120.0		🖁 AllFile	Select		
°F Holde U:¥)	r 則定データO¥材料・	- 軽金属研究部会¥201	0-01-20-Star	ndard-Ti-終	了¥解¥析¥Ti−F	R¥LaboTex¥CW¥	calcdefoc	us¥New	data		
PF Data-	SelectFile(TX)	(b.intens).TXT2(a.b.inte	ns))	hk.l	2Theta	Alpha scope	AlphaS	AlohaE	Select		
2	002_DS0-25deg_	chB02A56CAS_2.TXT		0,0,2	0	0.0->75.0	0.0	75.0			
2	101_DS0-25deg_0	hB02A56CAS_2.TXT		1,0,1	0	0.0->75.0	0.0	75.0			
2	102_DS0-25deg_0	hB02A56CAS_2.TXT		1,0,2	0	0.0->75.0	0.0	75.0			
2	103_DS0-25deg_0	chB02A56CAS_2.TXT		1,0,3	0	0.0->75.0	0.0	75.0	\checkmark		
2				2,1,1	0.0		0.0	0.0			
2				3,1,1	0.0]	0.0	0.0			
2				4,0,0	0.0		0.0	0.0			
2				3,3,1	0.0		0.0	0.0			
2				4,2,2	0.0		0.0	0.0			
2				5,1,1	0.0		0.0	0.0			
2				5,2,1	0.0		0.0	0.0			
2				5,3,1	0.0		0.0	0.0			
Comme	nt 002_DS0-25	deg_chB02A56CAS_2.T)	<t 101_ds0-:<="" td=""><td>25deg_chB0;</td><td>2A56CAS_2.T</td><td>XT 102_DS0-25d</td><td>leg_chB02</td><td>2A56CAS</td><td>5_2.TXT 1</td></t>	25deg_chB0;	2A56CAS_2.T	XT 102_DS0-25d	leg_chB02	2A56CAS	5_2.TXT 1		
		CenterData —				Labotex(E	PF),popLA	A(RAW)	filename -		

9. defocus補正データによるODF解析







Rp%が13.1%から4.7%に改善されました。



Mini=0.00でrandom成分を含まないODFが得られています。



11. VolumeFraction計算

11.1 主方位のみで計算



副方位の指定一



11.2 主方位、副方位による計算



11.3 主方位、副方位によるRp%評価



Rp%=4.9%として、十分に評価できる結果が得られます。



Otherには、その他の方位が含まれています。