

粉末極点データと配向極点データの極点図の配合による r a n d o m 評価

2021年08月22日

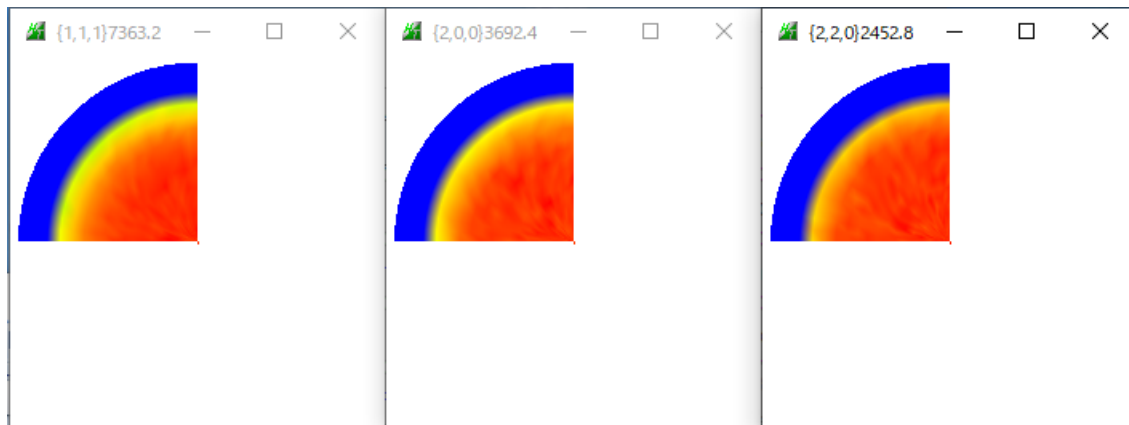
HelperTex Office

概要

測定データから `random` 定量評価を行うため、`random` 極点図と配向極点図の配合を行い `random` 定量の評価を行う。

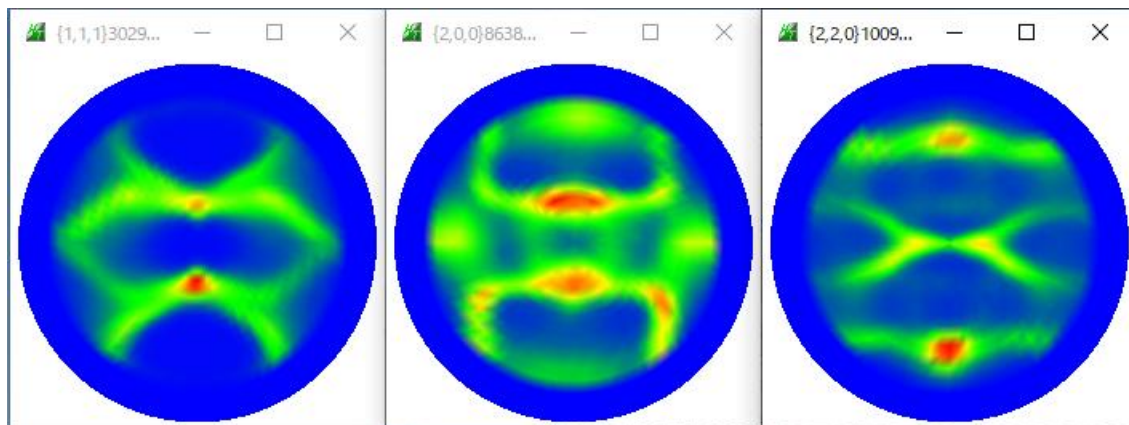
扱う極点図

粉末データ（アルミニウム粉末）



`defocus` 補正と `random` 定量配合に使用

配向試料（アルミニウム H 材）

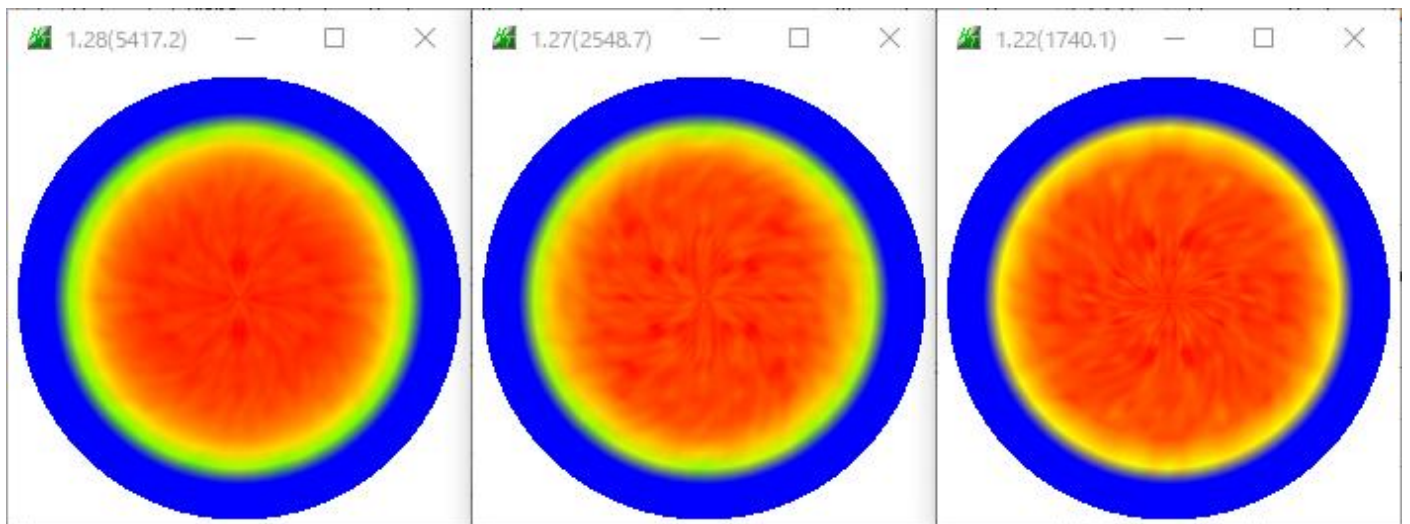
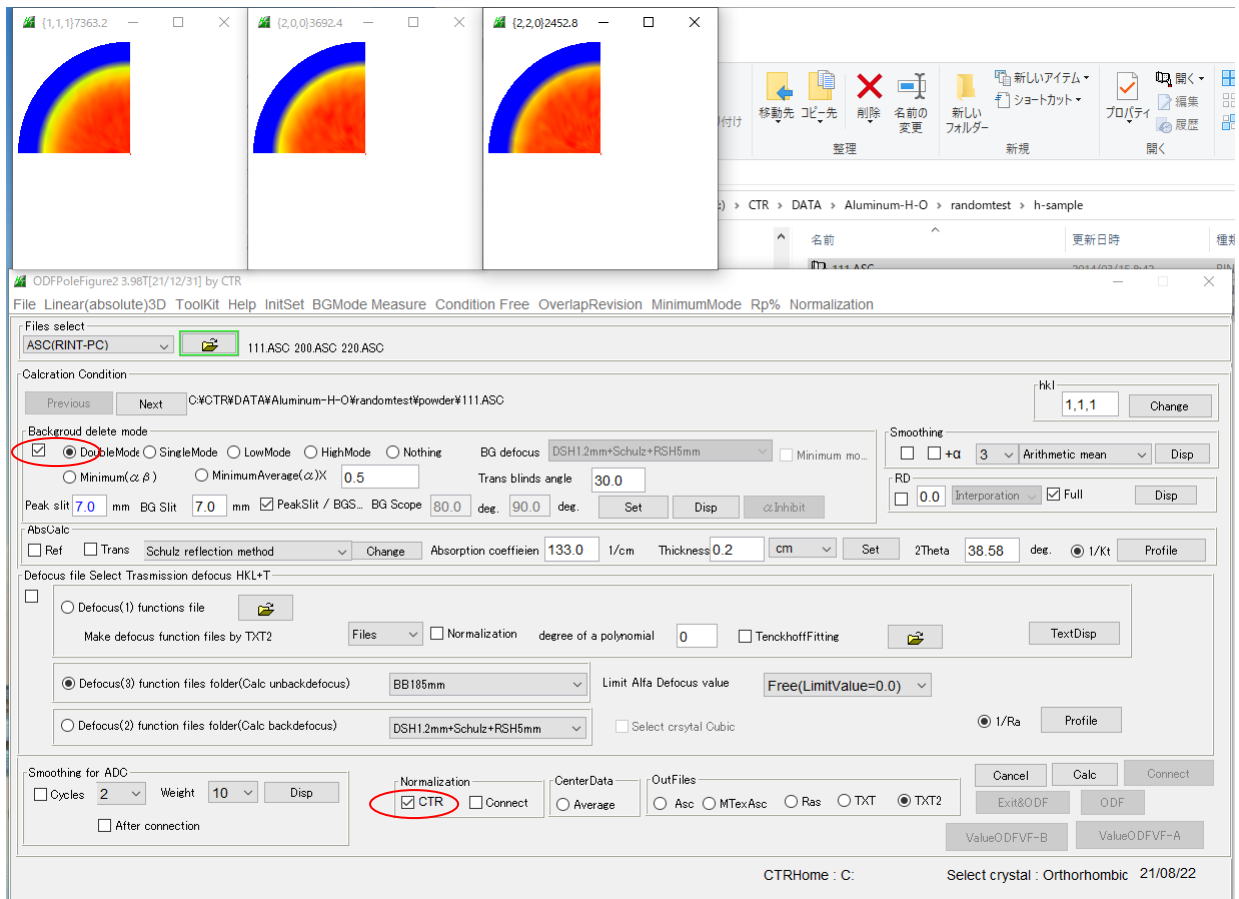


評価方法

1. 粉末、配向極点図のバックグラウンドのみ除去
2. 配合極点図 粉末 10% + 配向 90% 極点図作成
3. 配合極点図の `defocus` 補正を行う。
4. ODF 解析
5. ODF 図から `random` 評価を行う。

1. 粉末、配向極点図のバックグラウンドのみ除去

粉末データバックグラウンド処理



配向データバックグラウンド処理

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

Calculation Condition
Previous Next C:\CTR\DATA\Aluminum-H-O\randomtest\h-sample\111.ASC 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 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

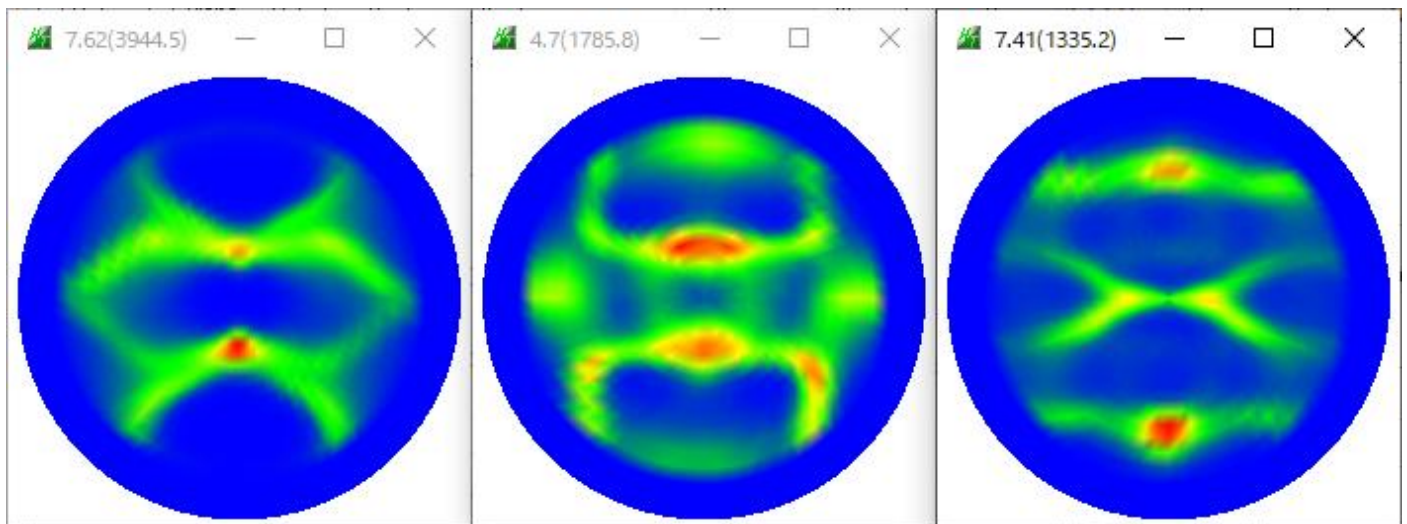
Defocus file Select Transmission defocus HKL+T
☐ Defocus(1) functions file Make defocus function files by TXT2 Files ☐ Normalization degree of a polynomial 0 ☐ TenckhoffFitting TextDisp
☒ Defocus(3) function files folder(Calc unbackdefocus) BB185mm Limit Alfa Defocus value Free(LimitValue=0.0)
☐ Defocus(2) function files folder(Calc backdefocus) DSH1.2mm+Schulz+RSH5mm ☐ Select crystal Cubic ☒ 1/Ra Profile

Smoothing for ADC
☐ Cycles 2 Weight 10 Disp
☐ After connection

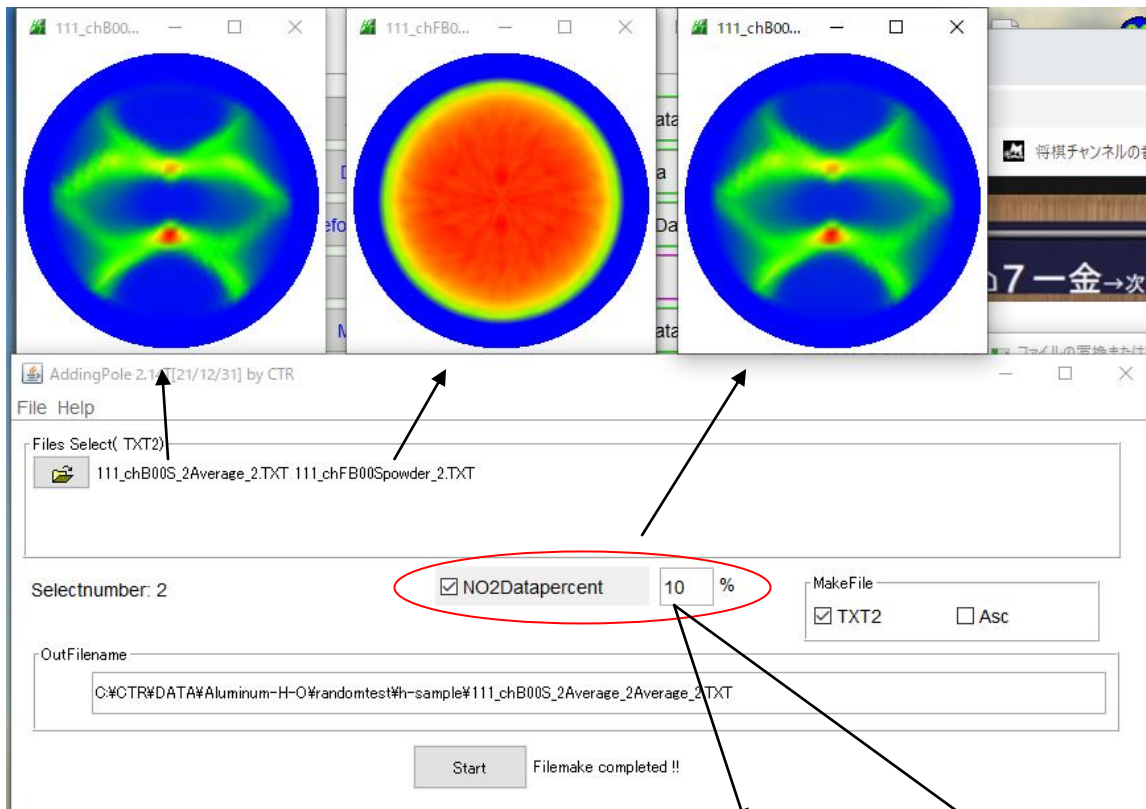
Normalization
☒ CTR ☐ Connect CenterData ☐ Average OutFiles ☐ Asc ☐ MTextAsc ☐ Ras ☐ TXT ☒ TXT2

Cancel Calc Connect
Exit&ODF ODF
ValueODFVF-B ValueODFVF-A

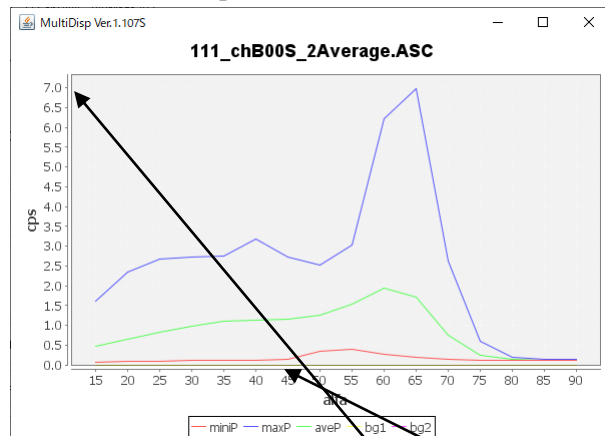
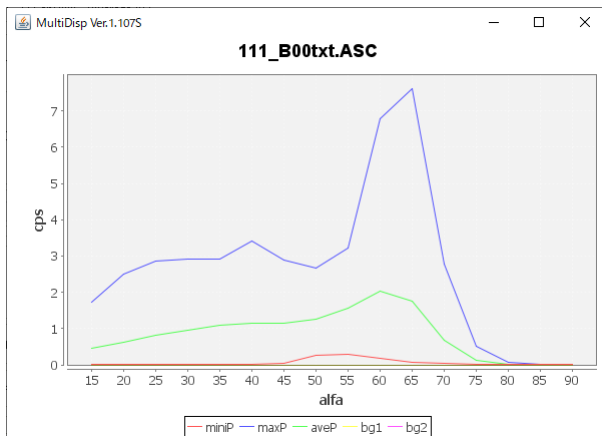
CTRHome : C: Select crystal : Orthorhombic 21/08/22



2. 配合極点図 粉末10%+配向90%極点図作成

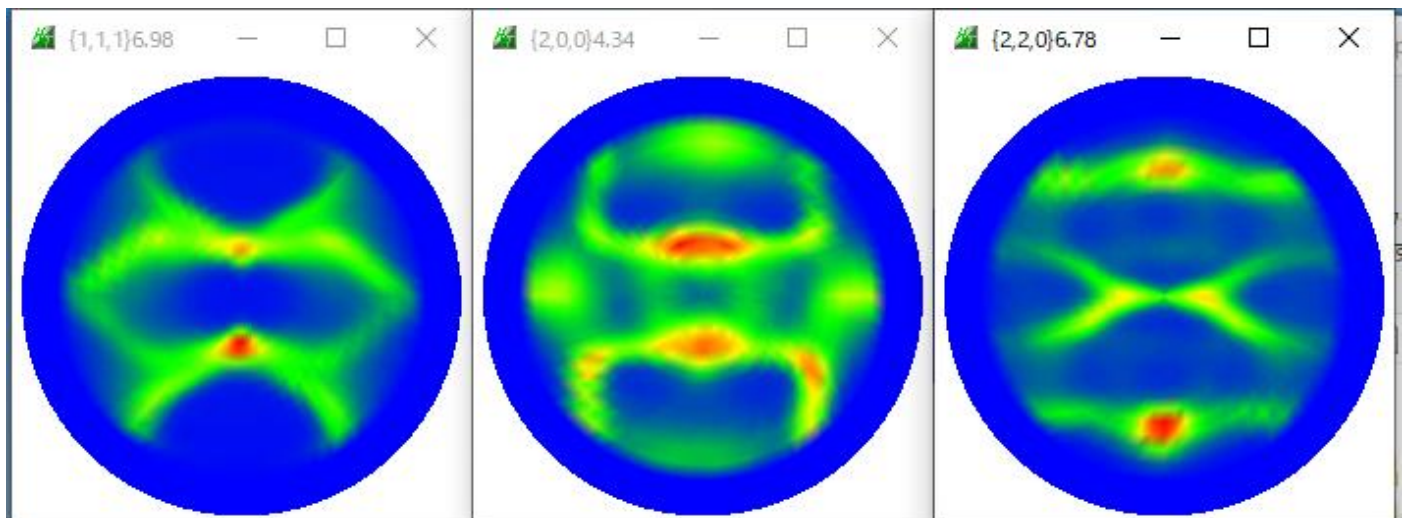


$$\text{Sample} * (100 - 10) / 100 + \text{powder} * 10 / 100$$

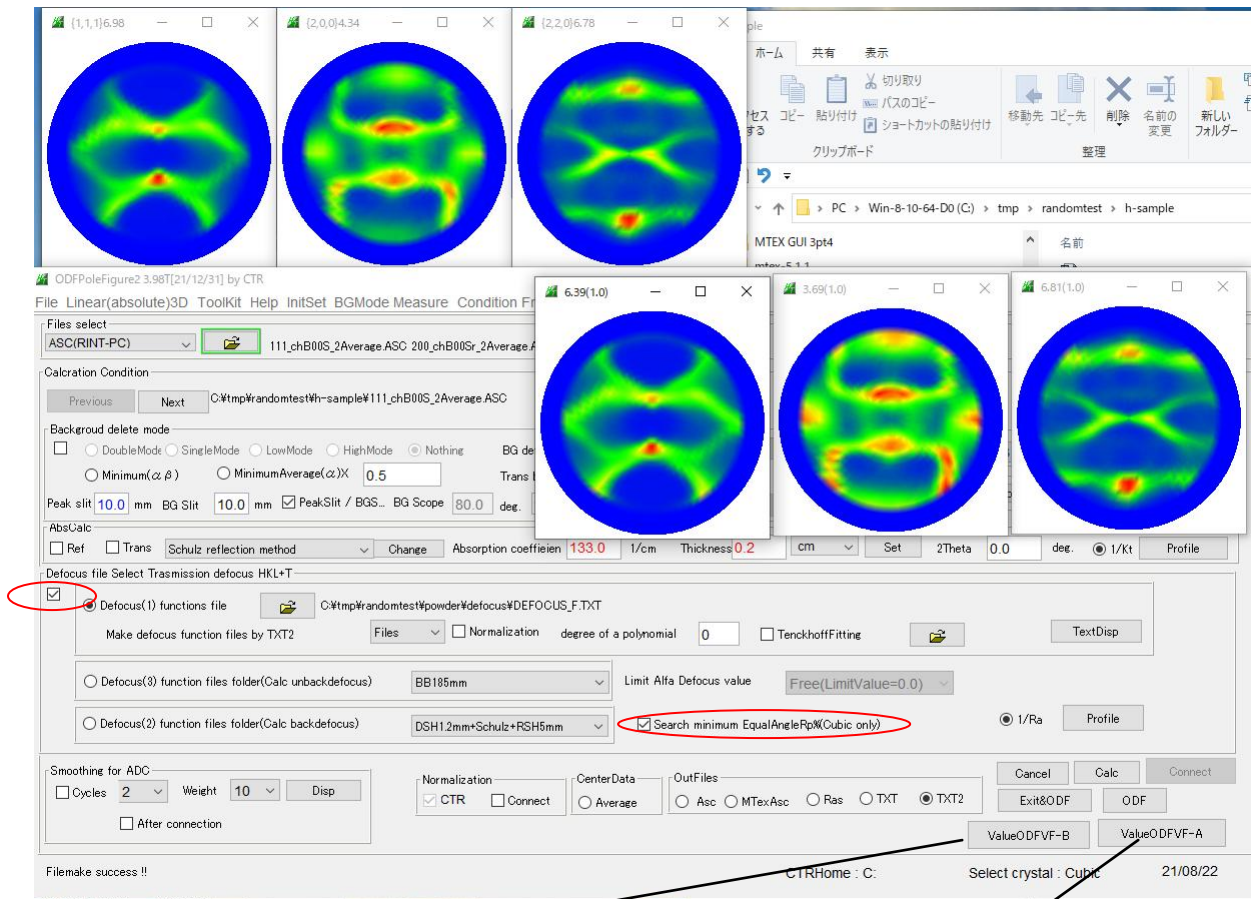


Random*10%+で若干プロファイルが上がる。

同様に計算して

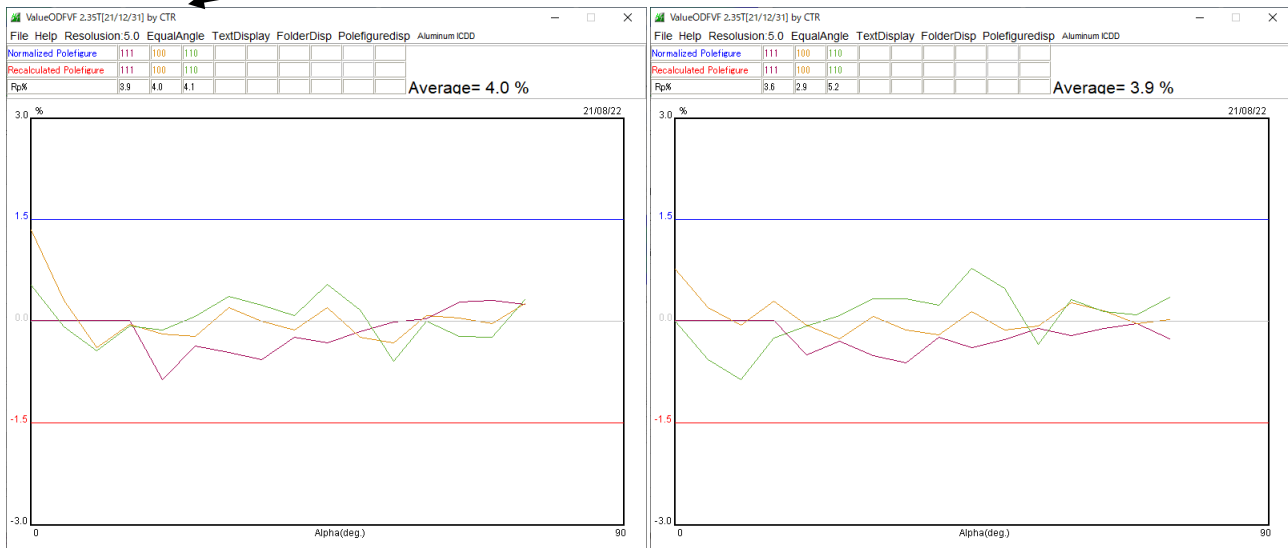


3. 配合極点図の defocus 補正を行う。



Rp%Before

Rp%After



ODFファイル作成 (L a b o T e x, M T E X向けデータ)

PF to MTEX by CTR PFtoODF3 8.53T[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 gamm 90.0

Initialize Start

getHKL<-Filename

AllFileSelect

PF Holder

C:\tmp\randomtest\h-sample

PF Data

SelectFile(TXT(b,intens),TXT2(a,b,intens))	h,k,l	2Theta	Alpha scope	AlphaS	AlphaE	Select
111_chB00S_2Average_chD1S_2.TXT	1,1,1	0.0	0.0->75.0	0.0	75.0	<input checked="" type="checkbox"/>
200_chB00Sr_2Average_chD1S_2.TXT	2,0,0	0.0	0.0->75.0	0.0	75.0	<input checked="" type="checkbox"/>
220_chB00S_2Average_chD1S_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_chB00S_2Average_chD1S_2.TXT 200_chB00Sr_2Average_chD1S_2.TXT 220_chB00S_2Average_chD1S_2.TXT

Symmetric type Full

Center Data

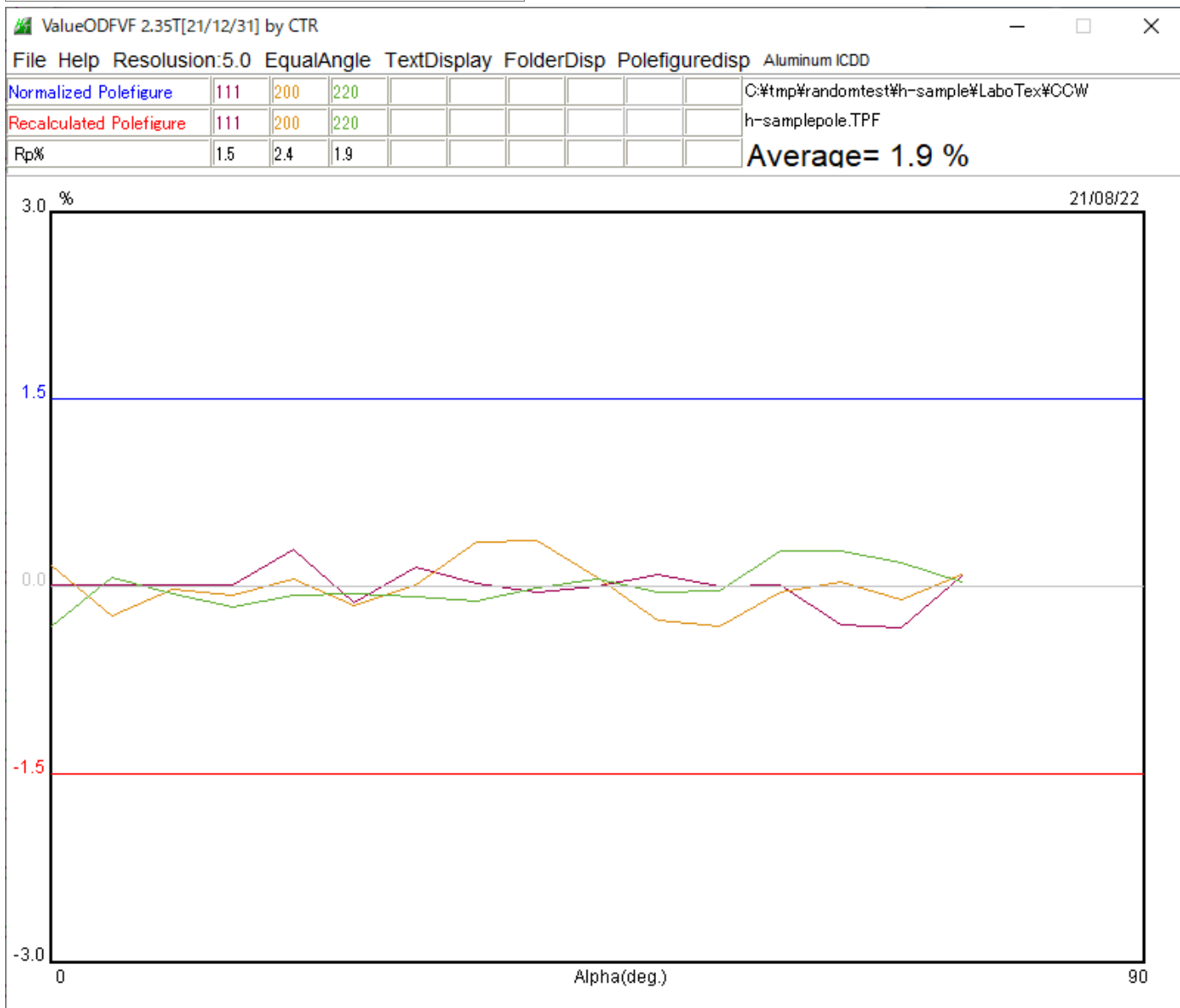
Average

Asc(CCW) file save

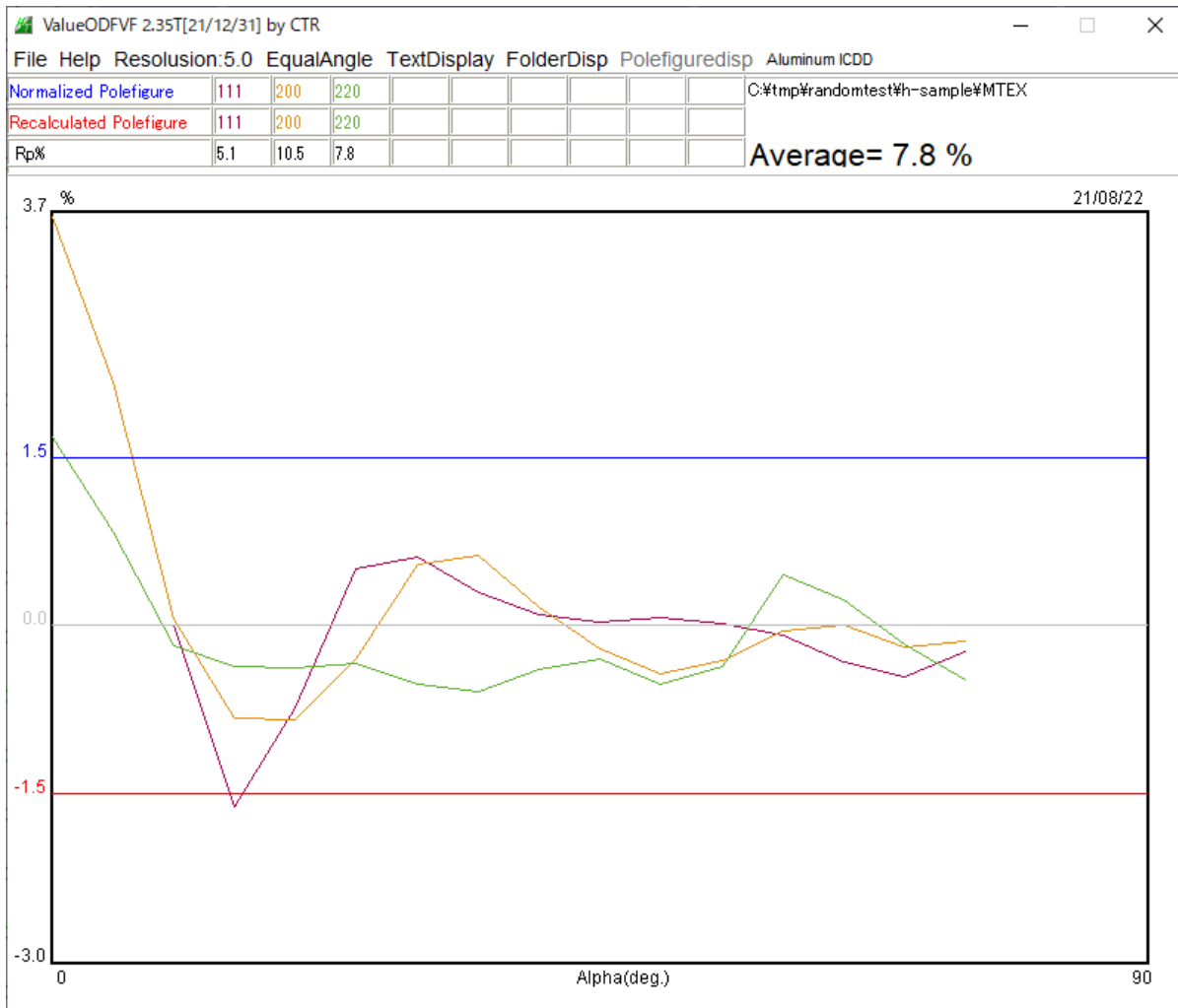
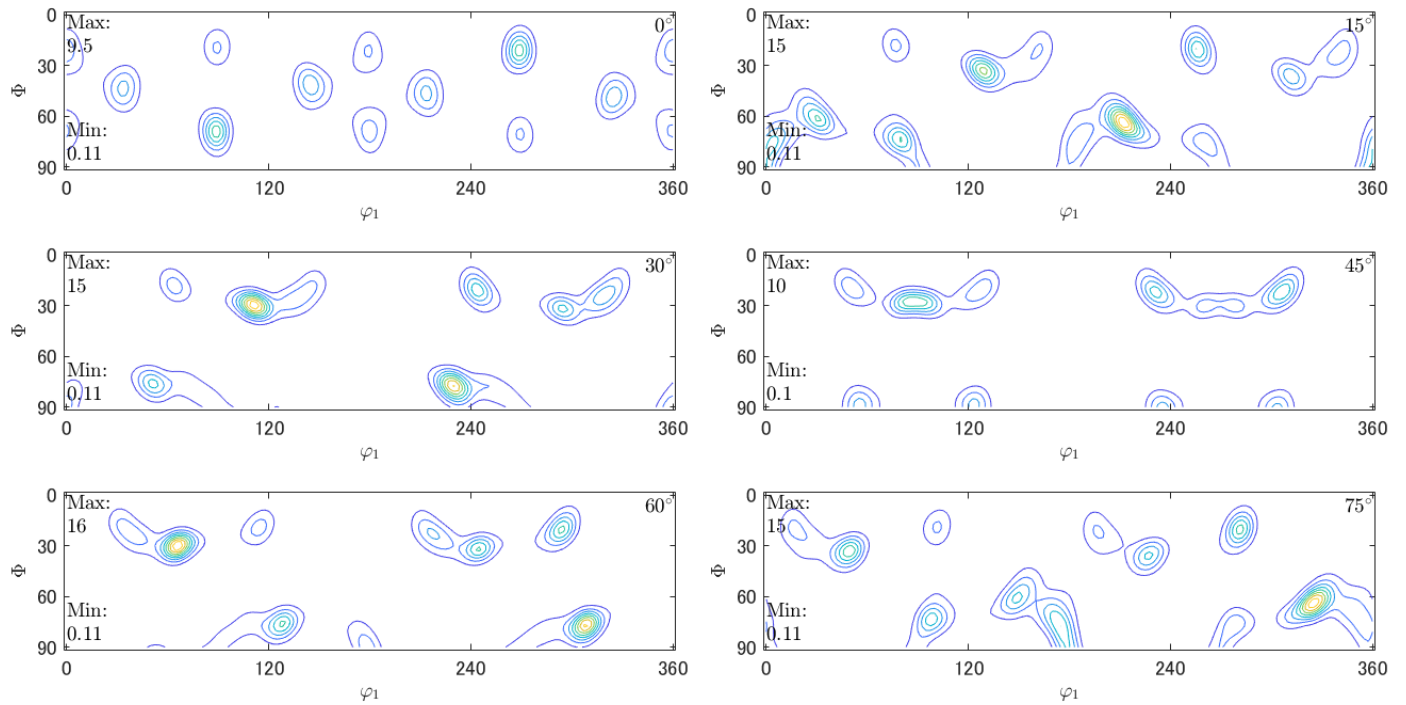
Labotex(EPF),popLA(RAW) filename

ASC

L a b o T e x

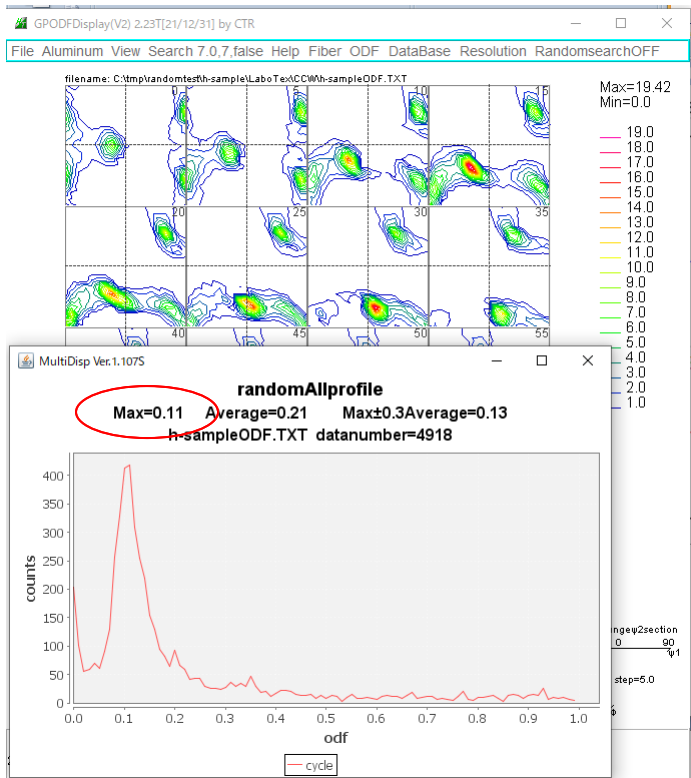


MTEX解析

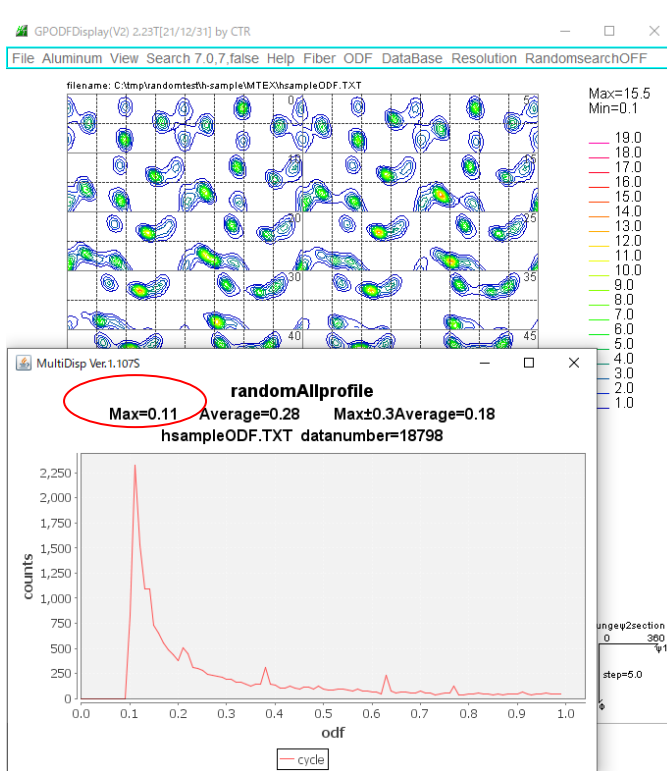


5. ODF図からrandom評価を行う。

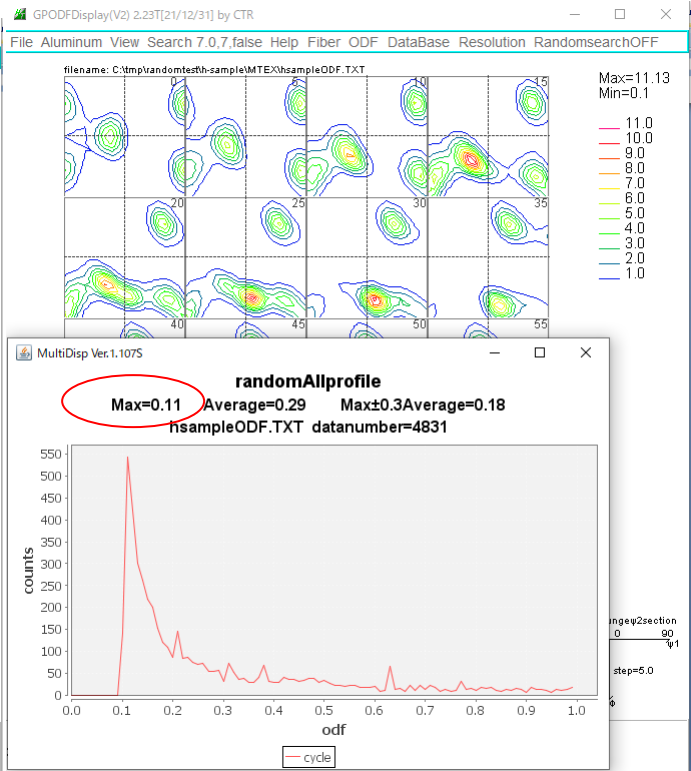
LaboTex



MTEx



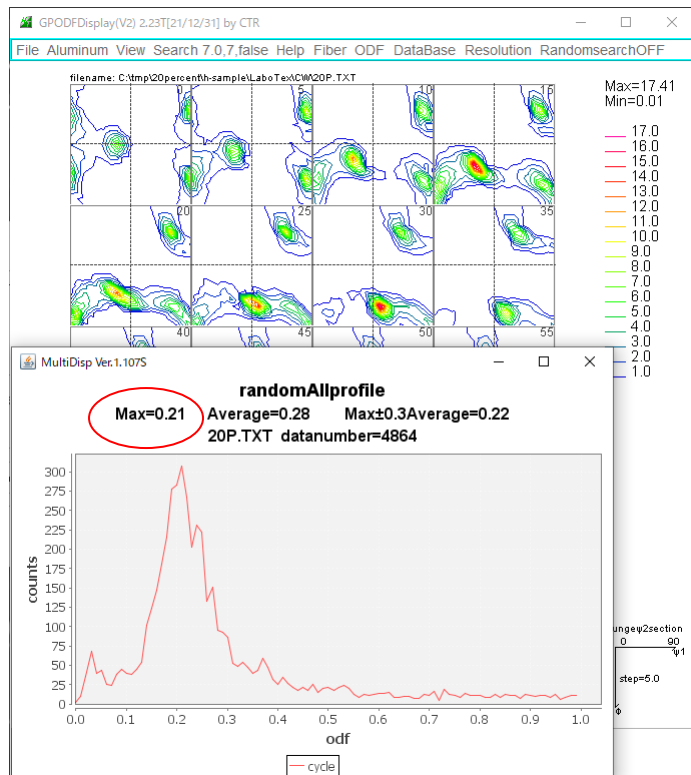
Triclinic->Orthorhombic



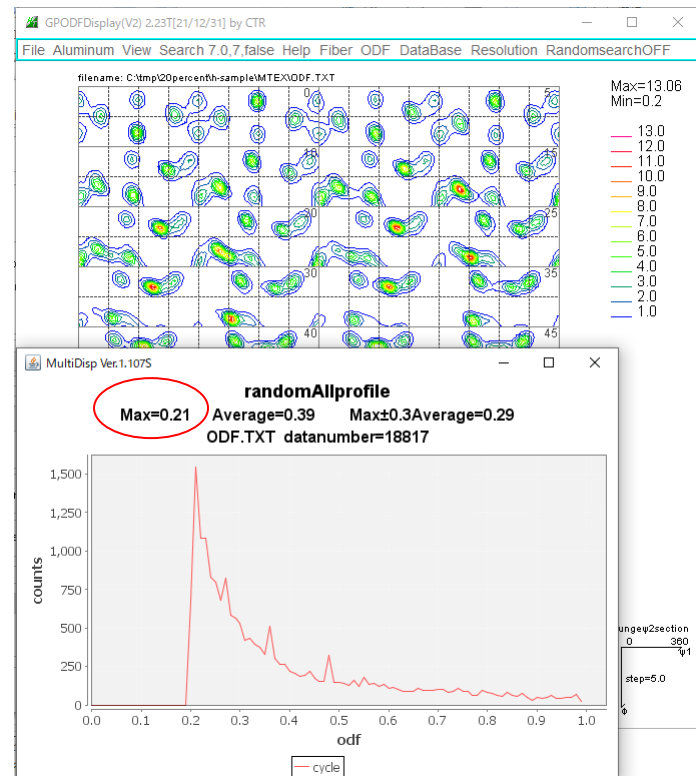
どちらも期待値10%に対し11%が得られます。

同様に random 20%の確認

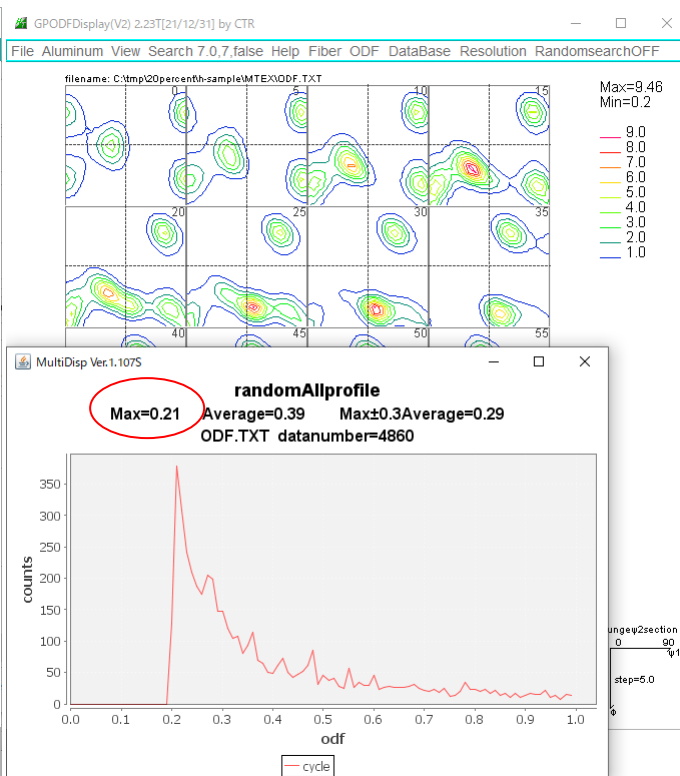
LaTeX



MTEx



Triclinic->Orthorhombic



期待値 20%に対し 21%が得られる。

まとめ

本来なら、randomと配向試料の完全極点図で計算すべきであるが、この反射極点図でも10%程度なら期待値に近い値が得られました。

しかし、疑似的に不完全極点図を規格化しているため、誤差が発生していると思われます。