

アルミ材5052Pの極点図から結晶方位を求める。

P o l e H K L U V W S e a r c h ソフトウェア

2013年07月25日

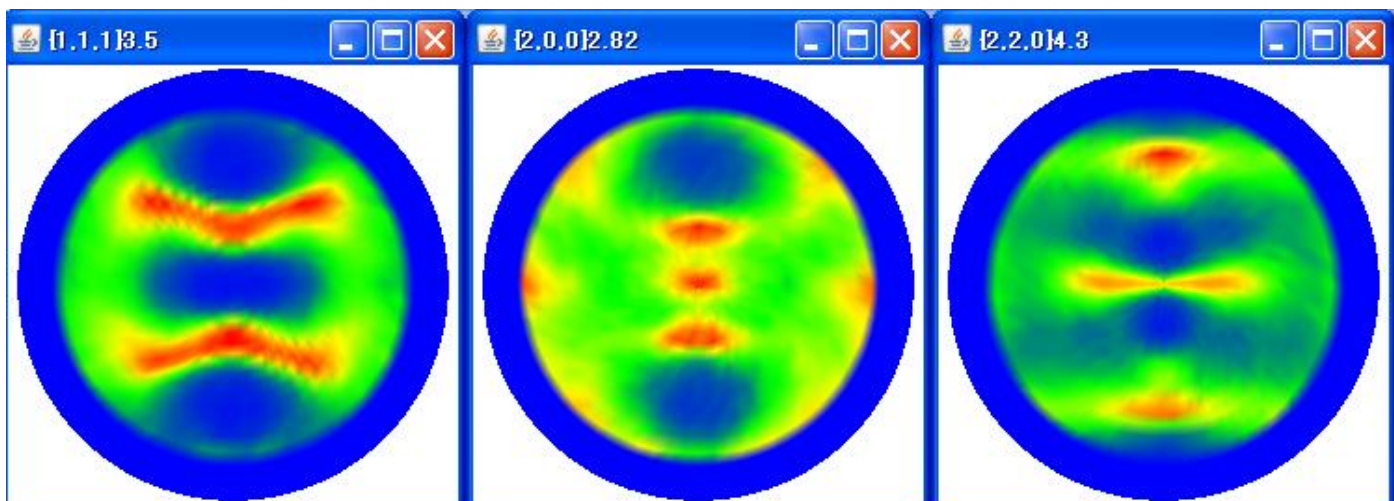
*HelperTex Office*

## 概要

PoleHKLUVWSearchソフトウェアは、極点図から結晶方位  $\{hkl\} \langle uvw \rangle$  を簡易的に求めるソフトウェアである。本来、単独ピークが極点図に現れるデータに対して作成されている。 $\beta$ -Fiberのような連続的に結晶方位が存在している極点図に適用した場合、どのように動作するか調べてみました。

## 極点図

バックグラウンド処理、defocus処理の終わった極点図  $\{111\} \{200\} \{220\}$  データは、AL¥2011-02-14-標準AI 試料¥5052P¥NO010



The screenshot shows the main window of the PoleHKLUVWsearch 1.04XT software. The title bar reads 'PoleHKLUVWsearch 1.04XT[14/03/31] by CTR'. The menu bar includes 'File', 'Help', and 'Simulation'. The interface is divided into several sections:

- TXT2 files select:** A folder icon button is on the left. The 'Holder' field contains 'Y:\測定データ\材料-A L ¥2011-02-14-標準AI 試料¥5052P¥NO010\ASC'. The 'FileName' field contains '111-NO010\_chB0DS\_2.TXT 200-NO010\_chB0DS\_2.TXT 220-NO010\_chB0DS\_2.TXT'. The '{HKL}' field contains '{1,1,1} {2,0,0} {2,2,0}'.
- PeakSearch:** The 'Peak search' section has 'Peaksearch minimum level' set to 0.1 and 'Same peak scope(degree)' set to 5. The 'Exclude' section has a checked box for 'αstart angle(l=0.0)' and 'Minimum level' set to 0.5. A 'Search' button is located to the right.
- HKLUVWSearch:** The 'Limit Distance' is set to 15. An 'HKLUVW' button is located to the right.

ピークサーチ

多めなピークを検出出来るように、SamePeak 幅を狭く、密度敷きい値を低くして検出

1,1,1	aangle	bangle	Polelevel
J	30.0	50.0	2.47
1	30.0	310.0	2.6
2	35.0	45.0	3.36
3	35.0	135.0	2.82
4	35.0	225.0	3.01
5	35.0	315.0	3.36
6	40.0	40.0	3.42
7	40.0	135.0	3.18
3	40.0	225.0	3.12
3	40.0	320.0	3.48
10	45.0	35.0	2.98
11	45.0	140.0	2.96
12	45.0	220.0	3.0
13	45.0	325.0	3.02
14	50.0	30.0	2.76
15	50.0	145.0	2.91
16	50.0	215.0	2.92
17	50.0	330.0	2.97
18	55.0	15.0	2.98
19	55.0	160.0	3.07
20	55.0	205.0	3.17
21	55.0	340.0	2.96
22	60.0	180.0	3.49
23	60.0	350.0	3.13
24	65.0	180.0	3.39
2,0,0	aangle	bangle	Polelevel
J	90.0	0.0	2.64
1	55.0	25.0	1.79
2	55.0	150.0	1.8
3	55.0	205.0	1.83
4	60.0	0.0	2.73
5	60.0	170.0	2.47
6	60.0	195.0	2.57
7	65.0	0.0	2.33
3	65.0	175.0	2.38
2,2,0	aangle	bangle	Polelevel
J	25.0	155.0	2.02
1	25.0	200.0	1.96
2	30.0	0.0	4.3
3	30.0	185.0	3.35
4	35.0	0.0	3.02
5	35.0	180.0	2.85
6	55.0	85.0	2.9
7	60.0	90.0	3.01
3	65.0	270.0	2.98
3	85.0	85.0	2.63

{111}極点図は多めなピークが検出されている。

# 結晶方位の決定

1,1,1	aangle	bangle	Polelevel											
0	30.0	50.0	2.47	{001}<100>(7.0)	{013}<100>(9.2)	{122}<2-21>(7.0)	{132}<6-43>(8.0)							
1	30.0	310.0	2.6	{001}<100>(7.0)	{013}<100>(9.2)	{122}<2-21>(7.0)	{132}<6-43>(8.0)							
2	35.0	45.0	3.36	{001}<100>(0.0)	{122}<2-21>(0.0)	{132}<6-43>(5.0)	{213}<-1-42>(8.5)							
3	35.0	135.0	2.82	{001}<100>(0.0)	{122}<2-21>(0.0)	{132}<6-43>(5.0)	{213}<-1-42>(8.5)							
4	35.0	225.0	3.01	{001}<100>(0.0)	{122}<2-21>(0.0)	{132}<6-43>(5.0)	{213}<-1-42>(8.5)							
5	35.0	315.0	3.36	{001}<100>(0.0)	{122}<2-21>(0.0)	{132}<6-43>(5.0)	{213}<-1-42>(8.5)							
6	40.0	40.0	3.42	{001}<100>(7.0)	{013}<100>(10.6)	{122}<2-21>(7.0)	{132}<6-43>(9.2)	{213}<-1-42>(3.6)						
7	40.0	135.0	3.18	{001}<100>(5.0)	{013}<100>(14.7)	{122}<2-21>(5.0)	{132}<6-43>(4.4)	{213}<-1-42>(8.2)						
8	40.0	225.0	3.12	{001}<100>(5.0)	{013}<100>(14.7)	{122}<2-21>(5.0)	{132}<6-43>(4.4)	{213}<-1-42>(8.2)						
9	40.0	320.0	3.48	{001}<100>(7.0)	{013}<100>(10.6)	{122}<2-21>(7.0)	{132}<6-43>(9.2)	{213}<-1-42>(3.6)						
10	45.0	35.0	2.98	{001}<100>(14.1)	{013}<100>(3.6)	{110}<1-12>(10.0)	{122}<2-21>(14.1)	{213}<-1-42>(7.2)						
11	45.0	140.0	2.96	{001}<100>(11.1)	{013}<100>(8.2)	{110}<1-12>(11.1)	{122}<2-21>(11.1)	{132}<6-43>(11.4)	{213}<-1-42>(7.6)					
12	45.0	220.0	3.0	{001}<100>(11.1)	{013}<100>(8.2)	{110}<1-12>(11.1)	{122}<2-21>(11.1)	{132}<6-43>(11.4)	{213}<-1-42>(7.6)					
13	45.0	325.0	3.02	{001}<100>(14.1)	{013}<100>(3.6)	{110}<1-12>(10.0)	{122}<2-21>(14.1)	{213}<-1-42>(7.2)						
14	50.0	30.0	2.76	{013}<100>(3.6)	{110}<1-12>(7.0)	{213}<-1-42>(13.8)								
15	50.0	145.0	2.91	{013}<100>(4.2)	{110}<1-12>(5.0)	{213}<-1-42>(12.1)								
16	50.0	215.0	2.92	{013}<100>(4.2)	{110}<1-12>(5.0)	{213}<-1-42>(12.1)								
17	50.0	330.0	2.97	{013}<100>(3.6)	{110}<1-12>(7.0)	{213}<-1-42>(13.8)								
18	55.0	15.0	2.98	{132}<6-43>(13.9)										
19	55.0	160.0	3.07	{013}<100>(14.4)										
20	55.0	205.0	3.17	{013}<100>(10.6)	{110}<1-12>(10.0)									
21	55.0	340.0	2.96	{013}<100>(14.4)										
22	60.0	180.0	3.49	{110}<001>(5.0)	{112}<-1-11>(11.0)	{132}<6-43>(12.8)	{132}<6-43>(12.8)	{213}<-1-42>(8.0)	{525}<-1-51>(11.0)					
23	60.0	350.0	3.13	{132}<6-43>(8.0)										
24	65.0	180.0	3.39	{110}<001>(10.0)	{112}<-1-11>(6.0)	{132}<6-43>(10.4)	{132}<6-43>(10.4)	{213}<-1-42>(3.0)	{525}<-1-51>(6.0)					
1,0,0	aangle	bangle	Polelevel											
0	90.0	0.0	2.64	{001}<100>(0.0)	{001}<110>(0.0)									
1	55.0	25.0	1.79	{101}<52-5>(13.4)	{110}<1-11>(14.1)	{122}<2-21>(13.0)	{132}<6-43>(6.3)							
2	55.0	150.0	1.8	{110}<1-11>(11.1)	{122}<2-21>(13.6)	{132}<6-43>(2.2)	{213}<-1-42>(13.1)							
3	55.0	205.0	1.83	{101}<52-5>(13.4)	{110}<1-11>(14.1)	{122}<2-21>(13.0)	{132}<6-43>(6.3)							
4	60.0	0.0	2.73	{112}<-1-11>(5.0)										
5	60.0	170.0	2.47	{112}<-1-11>(11.1)										
6	60.0	195.0	2.57											
7	65.0	0.0	2.33	{112}<-1-11>(10.0)										
8	65.0	175.0	2.38	{112}<-1-11>(11.1)										
1,1,0	aangle	bangle	Polelevel											
0	25.0	155.0	2.02	{101}<52-5>(14.8)	{110}<001>(11.1)	{110}<1-11>(7.8)	{112}<-1-11>(10.0)	{132}<6-43>(13.3)	{213}<-1-42>(10.7)					
1	25.0	200.0	1.96	{110}<1-11>(5.0)	{112}<-1-11>(13.6)	{122}<2-21>(13.4)	{132}<6-43>(8.5)	{132}<6-43>(14.8)	{213}<-1-42>(10.0)					
2	30.0	0.0	4.3	{110}<1-12>(0.0)	{112}<-1-11>(5.0)	{132}<6-43>(14.4)	{213}<-1-42>(8.0)							
3	30.0	185.0	3.35	{110}<1-11>(14.0)	{110}<1-12>(5.0)	{112}<-1-11>(7.0)	{132}<6-43>(10.6)	{132}<6-43>(14.8)	{132}<6-43>(6.4)					
4	35.0	0.0	3.02	{001}<100>(10.0)	{110}<1-12>(5.0)	{110}<1-11>(0.0)	{122}<2-21>(11.0)	{132}<6-43>(9.0)	{213}<-1-42>(13.0)					
5	35.0	180.0	2.85	{001}<100>(10.0)	{110}<1-12>(5.0)	{112}<-1-11>(0.0)	{122}<2-21>(11.0)	{132}<6-43>(9.0)	{132}<6-43>(9.0)					
6	55.0	85.0	2.9	{001}<100>(11.1)	{013}<100>(10.2)	{111}<01-1>(5.0)	{112}<-1-11>(7.0)	{122}<2-21>(10.2)	{132}<6-43>(12.0)					
7	60.0	90.0	3.01	{013}<100>(4.0)	{111}<01-1>(5.0)	{112}<-1-11>(0.0)	{122}<2-21>(14.0)	{233}<01-1>(5.0)						
8	65.0	270.0	2.98	{013}<100>(1.0)	{111}<01-1>(10.0)	{112}<-1-11>(5.0)	{132}<6-43>(14.8)	{132}<6-43>(14.8)	{233}<01-1>(0.0)					
9	85.0	85.0	2.63											
***Result**														
1,1,1	3.5	0.0	2.12	0.0	1.0	0.0	2.25	0.0	0.33	1.75	1.8	1.8	0.0	0.5
1,0,0	1.0	0.0	0.0	0.5	0.0	0.75	0.0	0.0	0.66	0.25	0.25	0.08	0.0	0.0
1,1,0	0.75	0.0	0.37	0.11	0.2	0.42	0.57	0.5	1.12	0.62	0.87	0.42	0.5	0.2

{001} <100> cube

{112} <1-11> copper

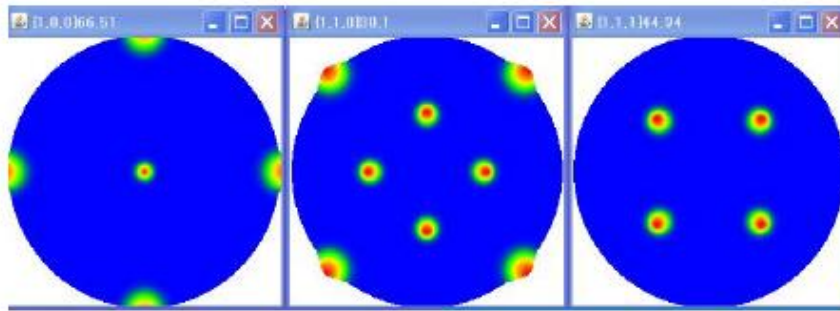
{122} <2-21>

{132} <6-43> S

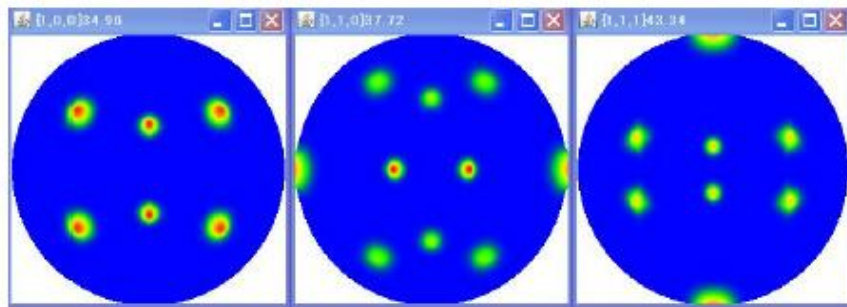
と、妥当と思われる方位が検出します。

本来、評価比率は 1.0 以下であるが、近接した位置にピークサーチされているため、1, 0 以上の評価比率が出現する。

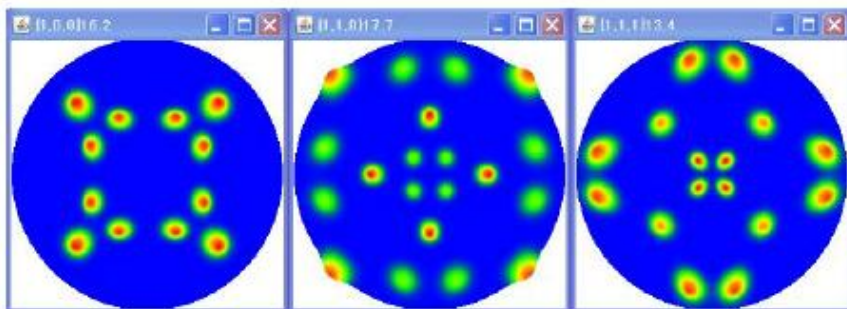
$\{001\}\langle 100\rangle$  Cube



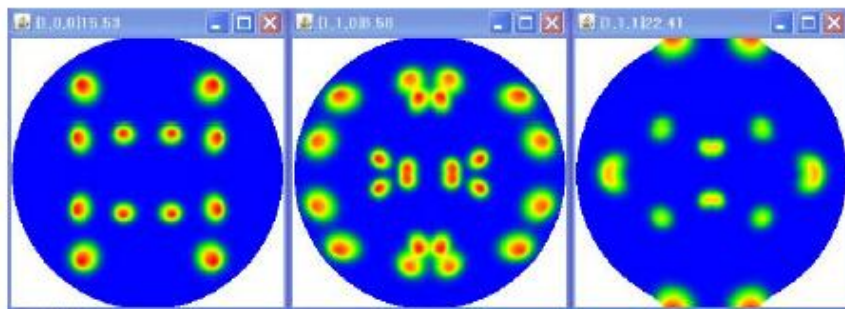
$\{112\}\langle 11\bar{1}\rangle$  copper



$\{122\}\langle 2\bar{2}1\rangle$



$\{132\}\langle 6\bar{4}3\rangle$  S





Simulation-Result で検索極点図を合成

The image displays a software interface for processing diffraction data. It features six circular plots arranged in a 2x3 grid, each showing a different diffraction pattern. The plots are labeled with Miller indices and values:  $[1, 1, 1]3.5$ ,  $[2, 0, 0]2.82$ ,  $[2, 2, 0]4.3$ ,  $[100]3.3$ ,  $[110]9.59$ , and  $[111]2.91$ . Below the plots is a control panel with the following sections:

- PeakSearch**
  - Peak search**
    - Peaksearch minimum level:
    - Same peak scope(degree):
  - Exclude**
    - $\alpha$ start angle( $\neq 0.0$ )
    - Minimum level:
- Search** button
- HKLUVWSearch**
  - Limit Distance:
  - HKLUVW** button