

StandardODFの概要

2008年5月11日

概要

日本国内のODFは級数展開法が主流で、大阪府立大学の井上先生がゴースト軽減に奇数項のアルゴリズムを取り込む改良を加えた後、急速に普及した。

立法晶の方位解析では、ほとんどこのODFが使われている。

リガクの極点処理を行ったテキストデータをDATA CONVソフトを介して読み込みODF解析を経て、ODF Φ 2断面図、再計算極点図、逆極点図表示が行えます。

又、この計算結果はテキストファイルとして、DOFディレクトリに登録されています。

処理の流れ

測定

リガクWindowsシステムで極点測定を行う。
測定範囲は75度（極点の外側15度から極点の中心まで）
測定反射は3面が望ましい。（A1の場合(111),(200),(220)）
測定時バックグラウンド測定も同時に行う。

極点処理

RD補正、スムージング、バックグラウンド処理を行う。
規格化はrandom規格化を行う。
処理した結果を*.polファイルとして登録する。

テキスト変換

*.polデータはバイナリーファイルです。ODFで読み込めるファイルに変換
この変換はリガクソフトの標準付属をASC変換ソフトを使う。

Standard ODFで読み込むフォーマットに変換

Standard ODF 付属のDATA CONVソフト
リガク製ソフトPF to ODFソフト

Standard ODF

上記変換されたデータを複数指定してODF計算を行う。

処理が完了すると、完全極点図の最大強度、再計算極点図の強度、逆極点図の強度を表示
等高線描画ソフトODF PLOT

ODF図、極点図、逆極点図を表示

ソフトウェアはシンプル

本ソフトウェアは、最初にしっかりしたODF計算部分があり、その計算部分に外部からデータを読み込み、結果をファイル出力します。この部分がStandard ODFです。

この計算結果を表示する部分がODF PLOTです。

どちらのソフトも処理がループしているのではなく、一回の処理で完了してしまいます。

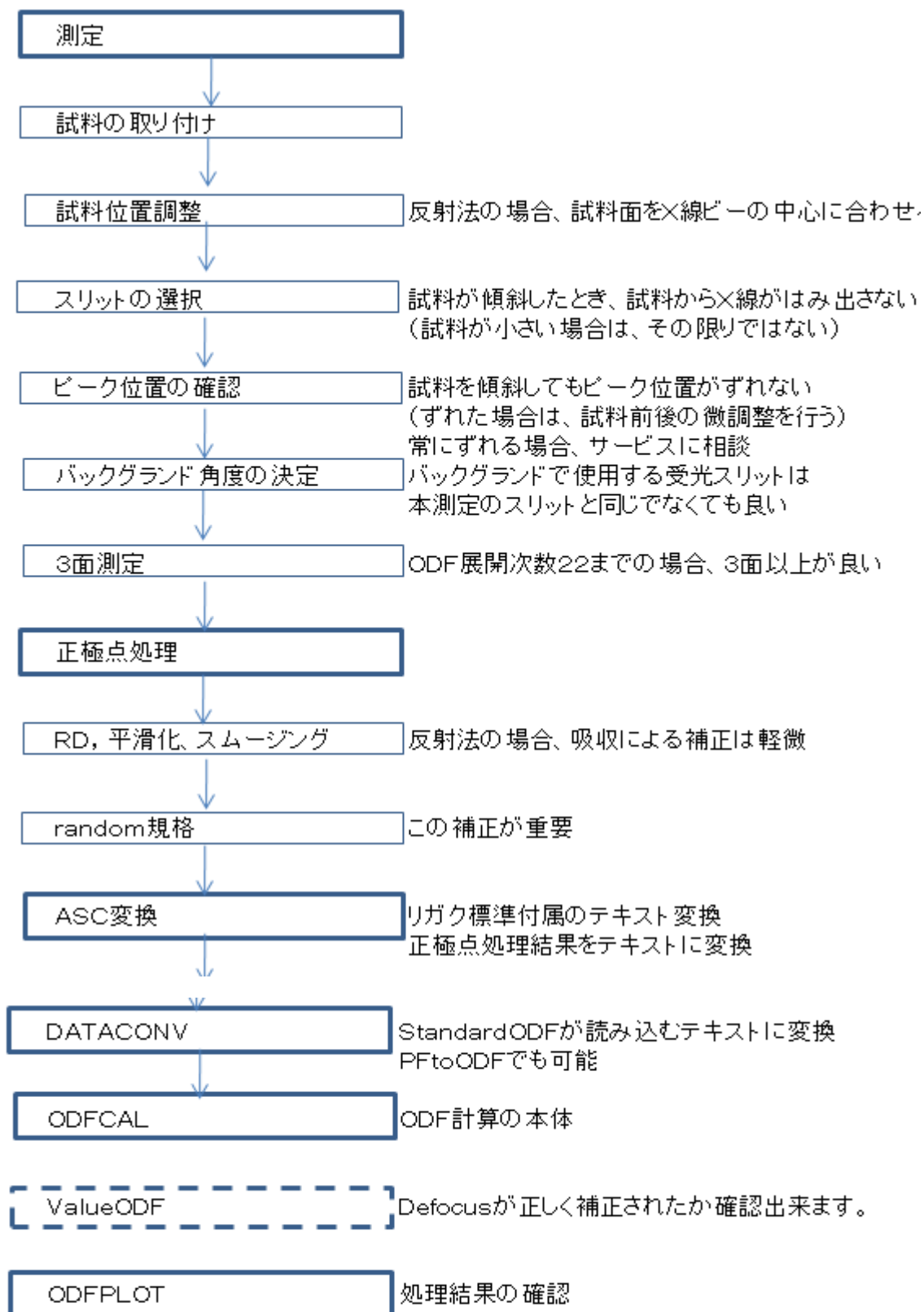
ODF解析の重要な要素

XRD極点測定では、光学系によるDefocusの影響があります。

特にShultzの反射法では極点図の外側では測定強度が低下しています。

かならず、random試料による補正、あるいはDefocus補正曲線を作成してrandom補正を行って下さい。

処理の流れ図

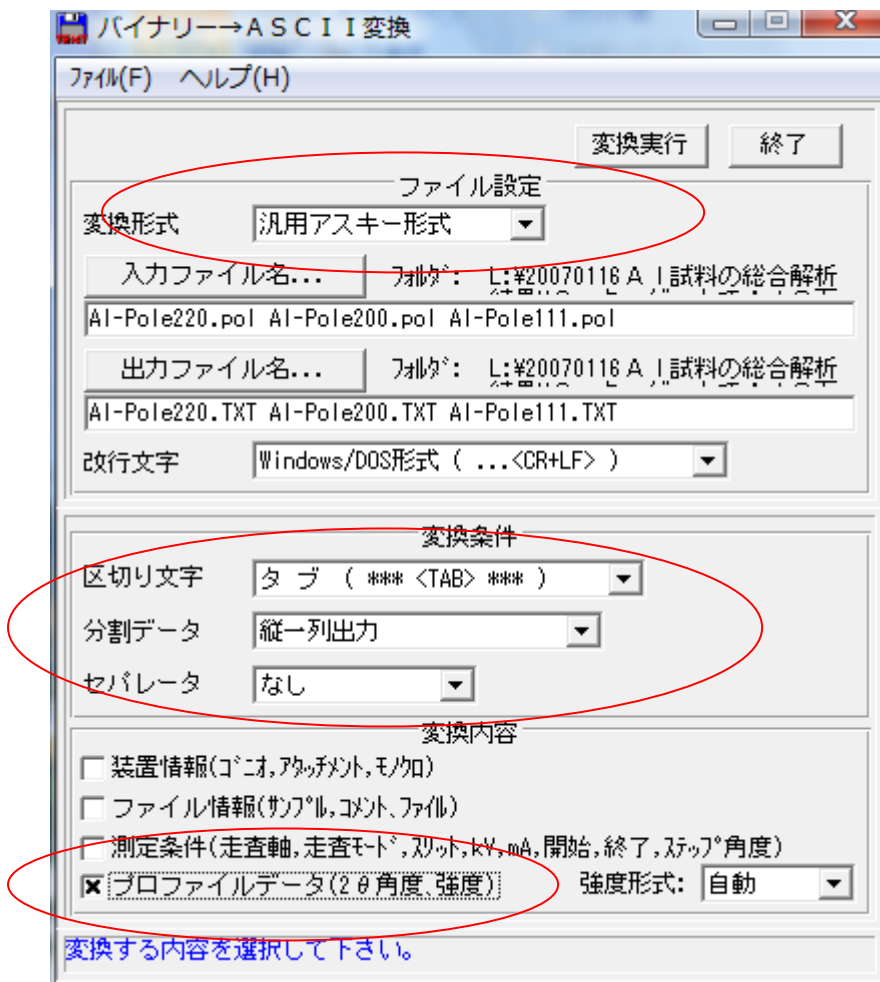


性格なEuler角度はテキストデータから確認出来ます。

ソフトウェアの操作

ASC変換

極点処理結果をテキストファイルに変換



極点処理結果（POL）縦一列のテキストデータに変換します。

変換されたデータ

0	0.0955765↓
5	0.0962182↓
10	0.0932095↓
15	0.0833748↓
20	0.0746286↓
25	0.0857957↓
30	0.132696↓
35	0.190343↓
40	0.209653↓
45	0.181139↓
50	0.145454↓
55	0.131659↓
60	0.134826↓

β 角度と強度データが登録されるが、 α 角度情報はありません。

Standard ODFの場合、極点の中心（0度）、極点の開始 α 角度は75度

DATA CONVソフトウェア
プログラムスタート画面

極点図データ変換

測定装置

- リガク製 - PC版
- リガク製 - UNIX版 (反射法)
- マック・サイエンス製

極点図描画用データの作成

α角

測定範囲 間隔

β角

測定範囲 間隔

次へ キャンセル

αの開始角度に75度を入力

極点図データ変換

測定装置

- リガク製 - PC版
- リガク製 - UNIX版 (反射法)
- マック・サイエンス製

極点図描画用データの作成

α角

測定範囲 間隔

β角

測定範囲 間隔

次へ キャンセル

次へ

ファイル設定

変換前のデータ読込先

参照...

読込データ

- 縦一列形式
- 複数行形式

変換後のデータ保存先

参照...

戻る OK キャンセル

ファイル選択

ファイル設定

変換前のデータ読込先

参照...

読込データ

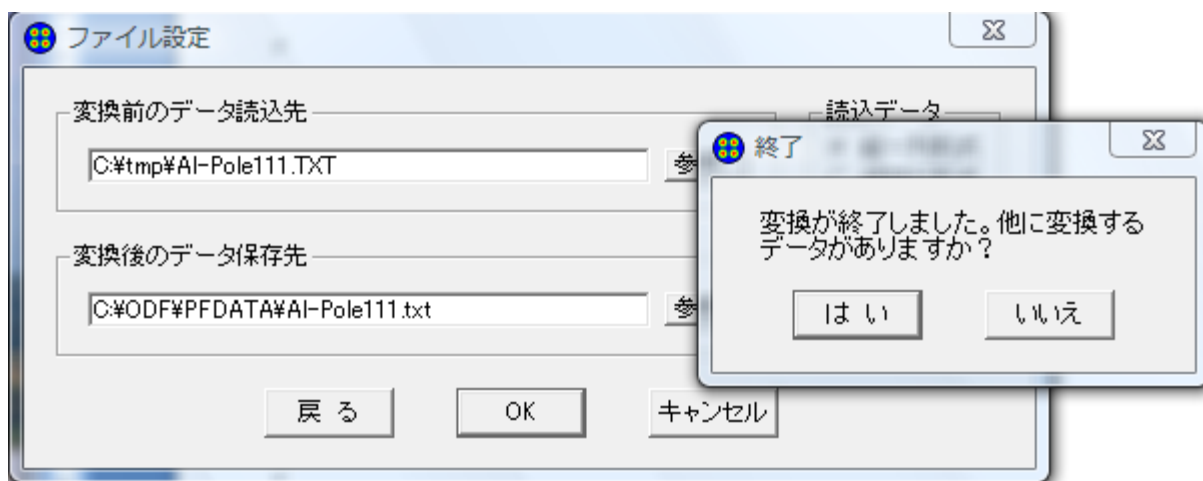
- 縦一列形式
- 複数行形式

変換後のデータ保存先

参照...

戻る OK キャンセル

OKで



3回繰り返す。

返還後の保存先に変換されたデータが登録されます。

ファイル名	日時	ファイルタイプ	サイズ
AI-Pole111.txt	2008/05/11 7:15	TXT ファイル	12 KB
AI-Pole200.txt	2008/05/11 7:16	TXT ファイル	10 KB
AI-Pole220.txt	2008/05/11 7:16	TXT ファイル	10 KB

Standard ODF



ファイルの選択 選択する面指数にチェックを入れる。

面指数	重み	ファイル名(フルパス)	
<input checked="" type="checkbox"/> (100)	1	C:\ODF\PFDATA\	参照
<input checked="" type="checkbox"/> (110)	1	C:\ODF\PFDATA\	参照
<input checked="" type="checkbox"/> (111)	1	C:\ODF\PFDATA\	参照
<input type="checkbox"/> (210)	1		参照
<input type="checkbox"/> (211)	1		参照

α Max を入力

α max = <input type="text" value="75"/>	$\Delta \alpha =$ <input type="text" value="5"/>	$\Delta \beta =$ <input type="text" value="5"/>
β 角のタイプ	<input checked="" type="radio"/> $\beta = 0^\circ, 5^\circ, 10^\circ, \dots, 350^\circ, 355^\circ$	
	<input type="radio"/> $\beta = 2.5^\circ, 7.5^\circ, 12.5^\circ, \dots, 357.5^\circ$	

集合組織変換

しない RD極点図 → ND-ODF TD極点図 → ND-ODF

ファイル選択

面指数	重み	ファイル名(フルパス)	
<input checked="" type="checkbox"/> (100)	1	C:\ODF\PFDATA\AI-Pole200.txt	参照
<input checked="" type="checkbox"/> (110)	1	C:\ODF\PFDATA\AI-Pole220.txt	参照
<input checked="" type="checkbox"/> (111)	1	C:\ODF\PFDATA\AI-Pole111.txt	参照
<input type="checkbox"/> (210)	1		参照

再計算極点図の選択

結晶方位分布関数

展開次数

ゼロ密度領域のしきい値

表示断面 Phi1断面
 Phi2断面

再計算極点図

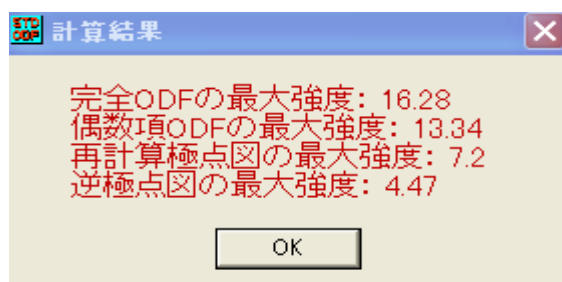
1 2

3 4

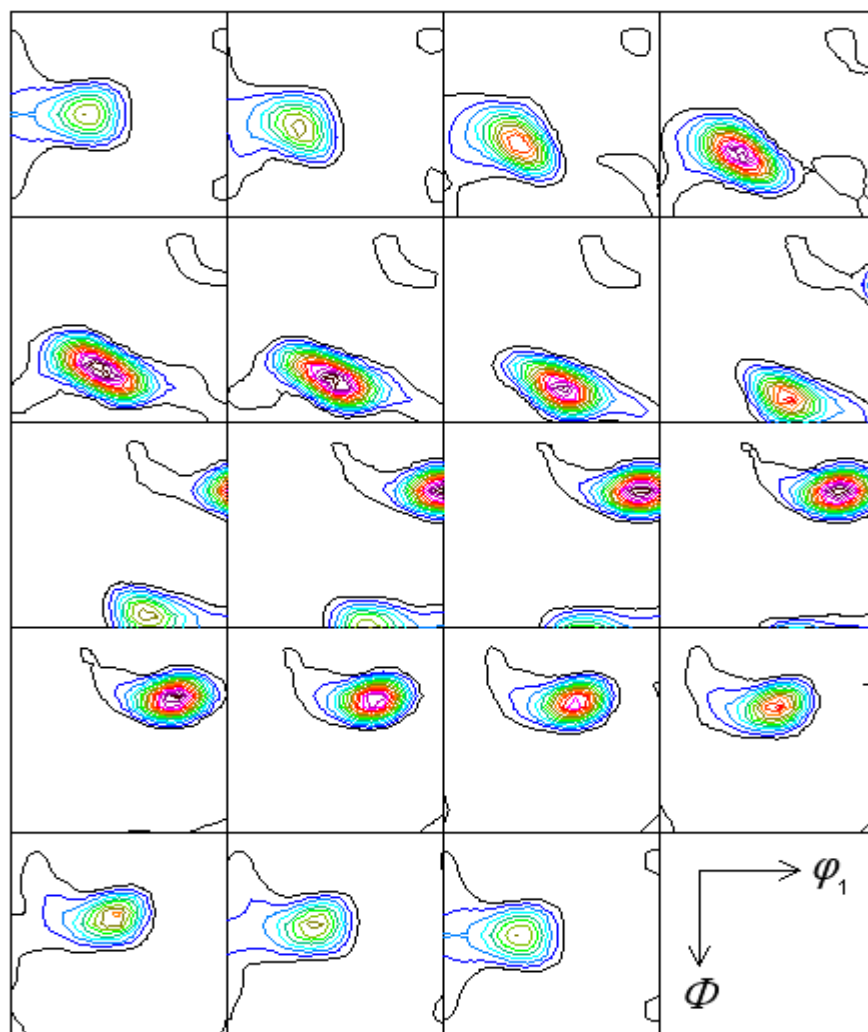
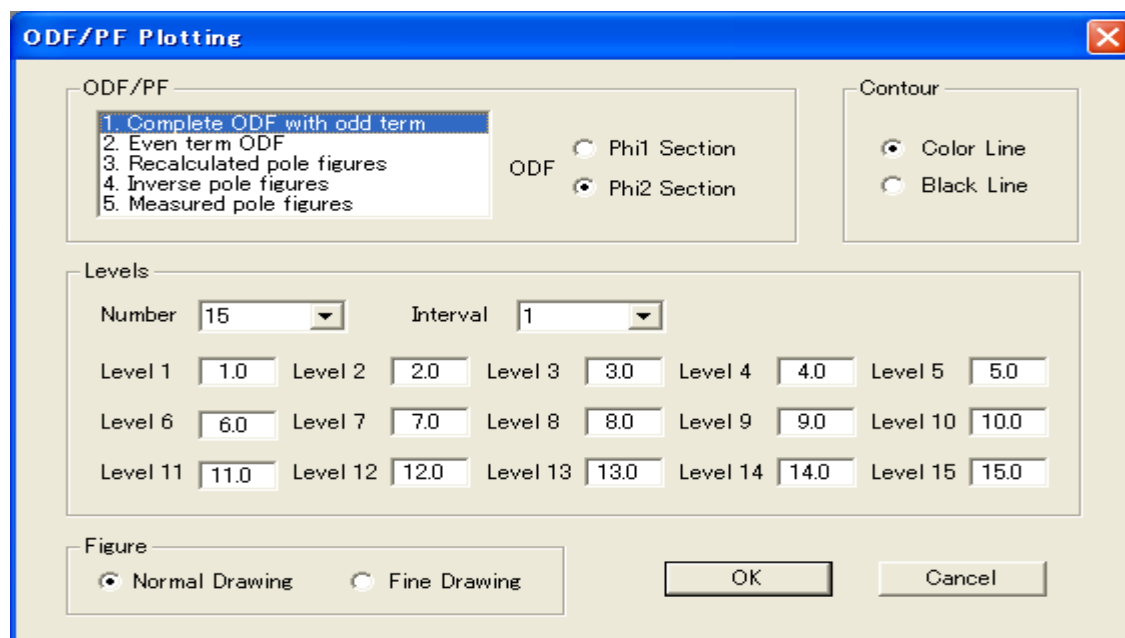
処理条件はデフォルトでOK

計算の開始

計算が完了すると

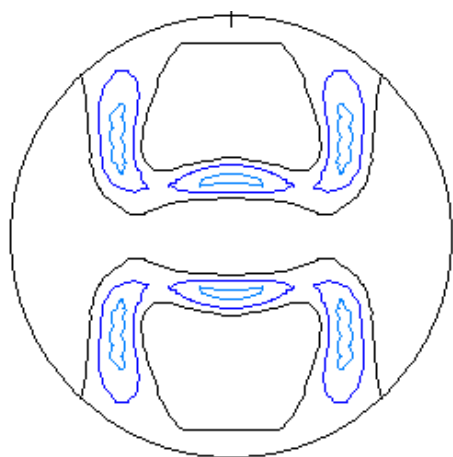
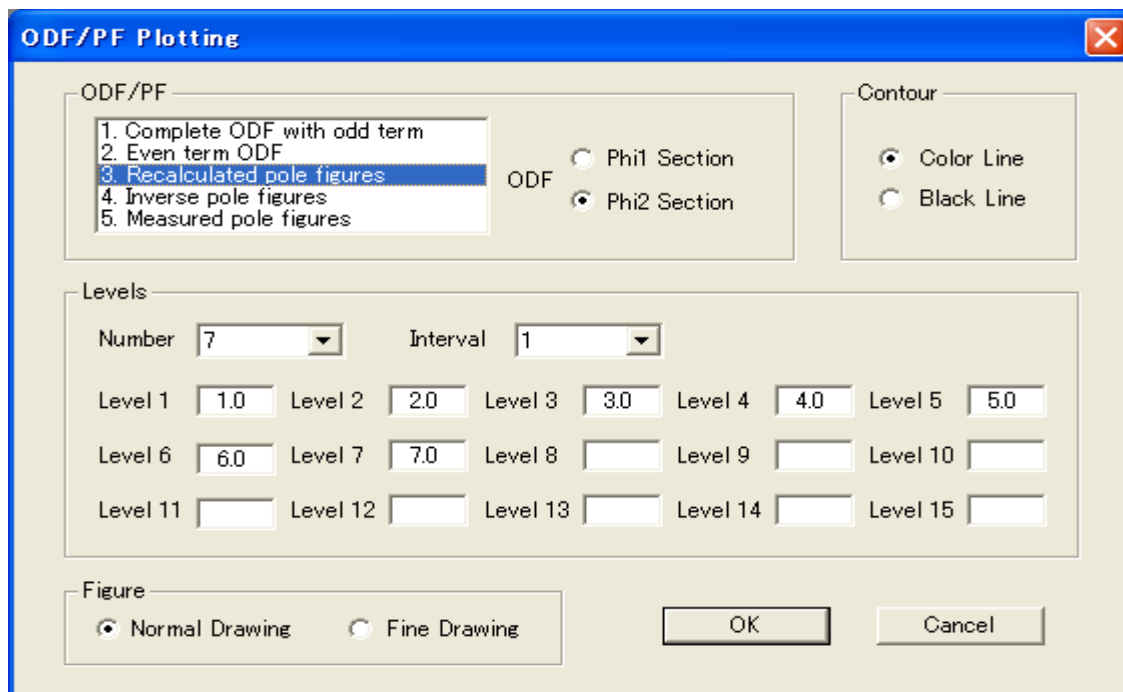


が表示されます。

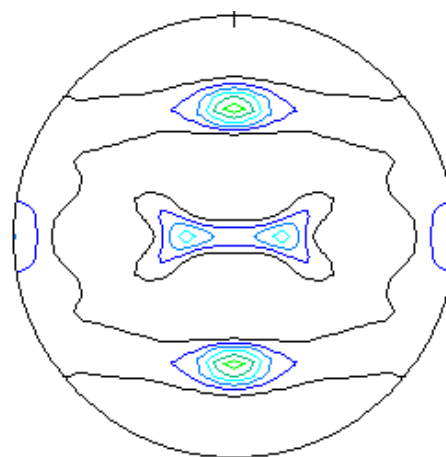


Contour Levels: 1.0 2.0 3.0 4.0 5.0 6.0 7.0 8.0 9.0 10.0 11.0 12.0 13.0 14.0 15.0

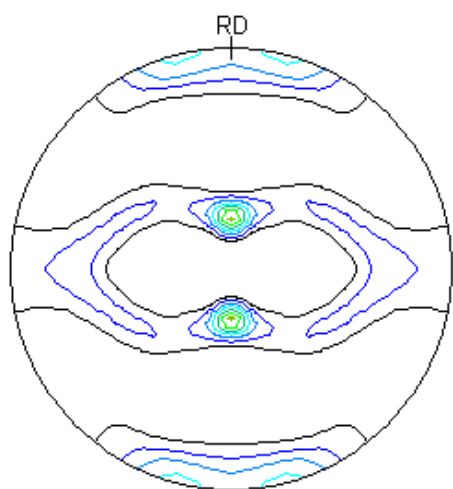
再計算極点図の表示



{100}



{110}



{111}

Contour Levels: 1.0 2.0 3.0 4.0 5.0 6.0 7.0

逆極点図の表示

ODF/PF Plotting ✖

ODF/PF

- 1. Complete ODF with odd term
- 2. Even term ODF
- 3. Recalculated pole figures
- 4. Inverse pole figures
- 5. Measured pole figures

ODF Phi1 Section Phi2 Section

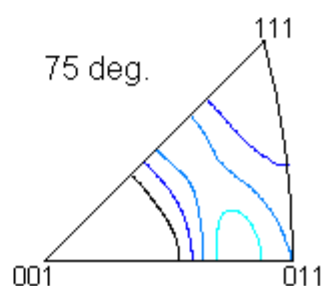
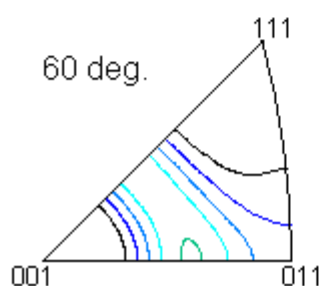
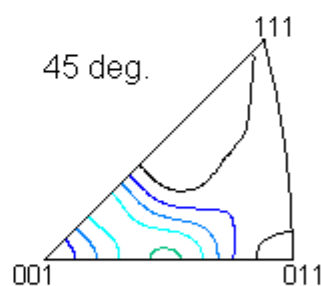
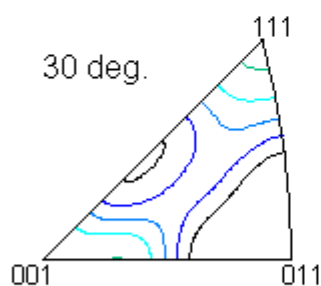
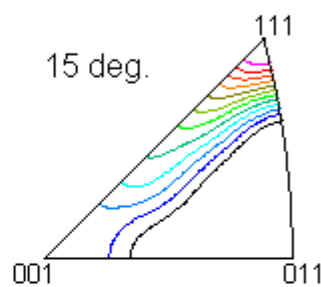
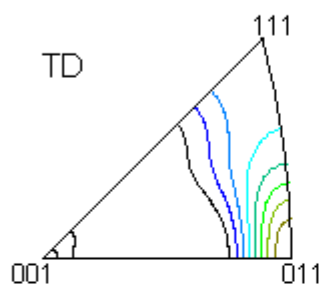
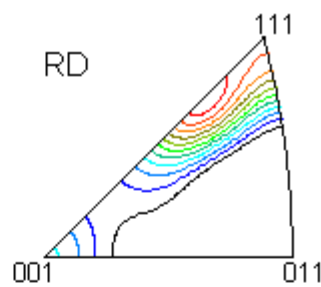
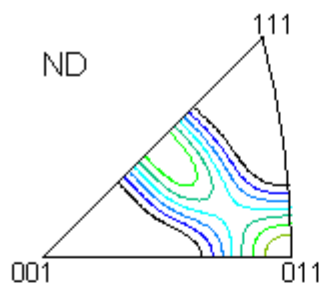
Contour Color Line Black Line

Levels

Number Interval

Level 1 Level 2 Level 3 Level 4 Level 5
 Level 6 Level 7 Level 8 Level 9 Level 10
 Level 11 Level 12 Level 13 Level 14 Level 15

Figure Normal Drawing Fine Drawing



ValueODFによる入力データチェック (StandardODFの付属ではありません)

ODF解析前の極点図と解析後の極点図の比較を行い、Defocus補正量の大きい極点図の外側の乖離を確認する。FileでStandardODFを選択 (c:¥ODFが選択される)
計算結果が表示されます。



極点図の外側が下がり気味であるのでDefocus補正が少し足りない事を表しています。

しかし、±1.5%以内であるのでOK

valueODFの詳細は

<http://www.geocities.jp/helpertex2/Soft/Soft-index.html>

結晶方位の決定

ODF図 ϕ 2断面 45度に着目

メモ帳で c:\¥ODF¥OUTPUT3.txt を開く

```
COMPLETE ODF, PHI2 PROJECTION
```

```
45.0      0.0      5.0     10.0     15.0     20.0
```

部分の最大強度

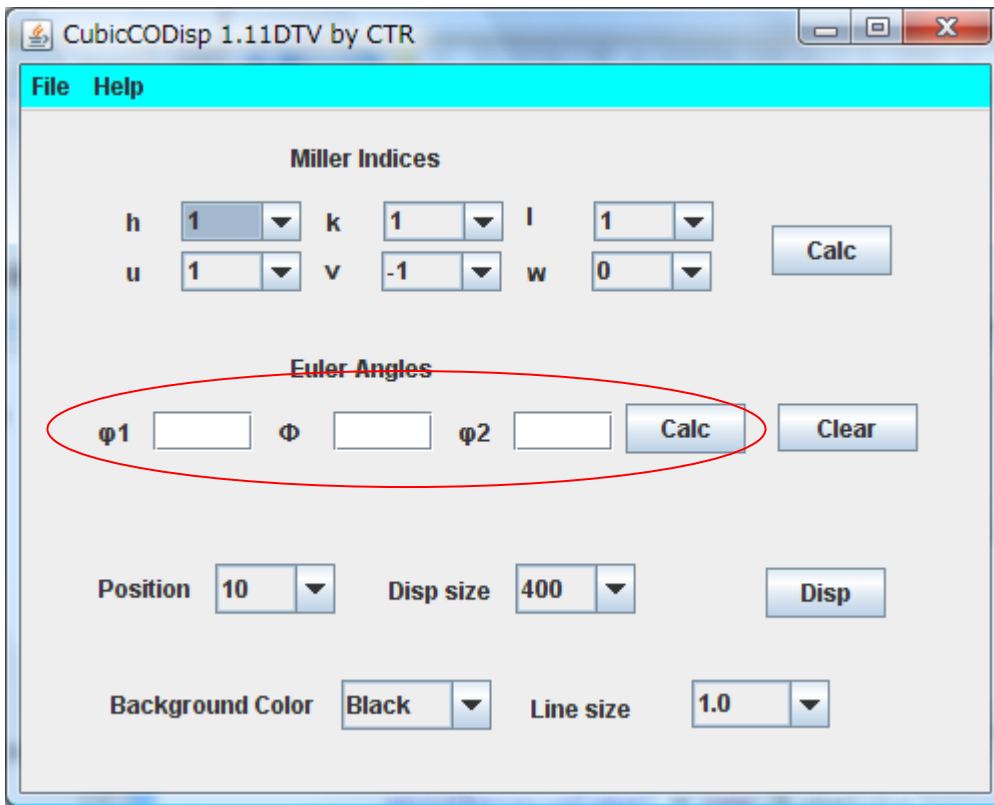
45.0	0.0	5.0	10.0	15.0	20.0	25.0	30.0	35.0	40.0	45.0	50.0	55.0	60.0	65.0	70.0	75.0	80.0	85.0	90.0
0.0	-0.3	-0.3	-0.4	-0.2	0.1	0.6	0.8	0.7	0.4	0.3	0.4	0.7	0.8	0.6	0.1	-0.2	-0.4	-0.3	-0.3
5.0	-0.3	-0.3	-0.3	-0.2	0.1	0.4	0.5	0.6	0.6	0.6	0.7	0.6	0.5	0.4	0.3	0.2	0.1	0.1	0.1
10.0	-0.4	-0.4	-0.3	-0.1	0.1	0.2	0.2	0.4	0.7	1.1	1.0	0.5	0.0	0.1	0.5	0.6	0.5	0.3	0.2
15.0	-0.7	-0.7	-0.6	-0.2	0.3	0.5	0.3	0.1	0.5	1.0	1.1	0.7	0.3	0.2	0.3	0.3	0.2	0.3	0.3
20.0	-0.8	-0.8	-0.8	-0.3	0.3	0.6	0.3	-0.1	0.0	0.6	1.3	1.4	1.1	0.7	0.5	0.9	2.0	3.4	4.0
25.0	-0.6	-0.7	-0.7	-0.4	0.0	0.2	0.0	-0.3	-0.3	0.3	1.1	1.7	1.8	1.6	1.9	3.7	7.0	10.3	11.7
30.0	-0.5	-0.5	-0.5	-0.3	-0.1	-0.2	-0.2	-0.2	-0.1	0.0	0.4	1.1	1.6	2.0	3.1	6.0	10.4	14.5	16.2
35.0	-0.5	-0.5	-0.4	-0.3	-0.2	-0.2	-0.2	0.1	0.2	0.0	-0.1	0.2	0.7	1.2	2.2	4.5	7.8	10.8	12.0
40.0	-0.4	-0.4	-0.5	-0.4	-0.2	-0.1	-0.1	0.0	0.2	0.2	0.1	0.2	0.2	0.2	0.4	1.1	2.3	3.6	4.2

から (ϕ 1、 Φ 、 ϕ 2) は、(90, 30, 45) が読み取れます。

この結果からこの近傍に極があることが分かります。

(hkl)[uvw]と Euler 角度の関係から(hkl)[uvw]を決めることとなります。

CubicCODispによる方位解析 (StandardODFの付属ではありません)

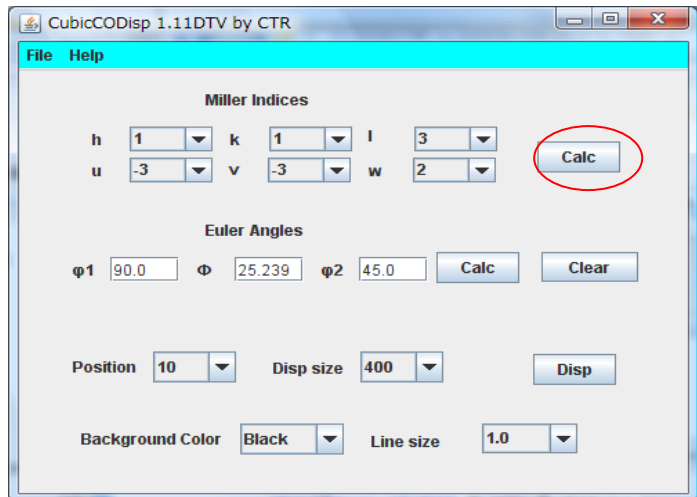
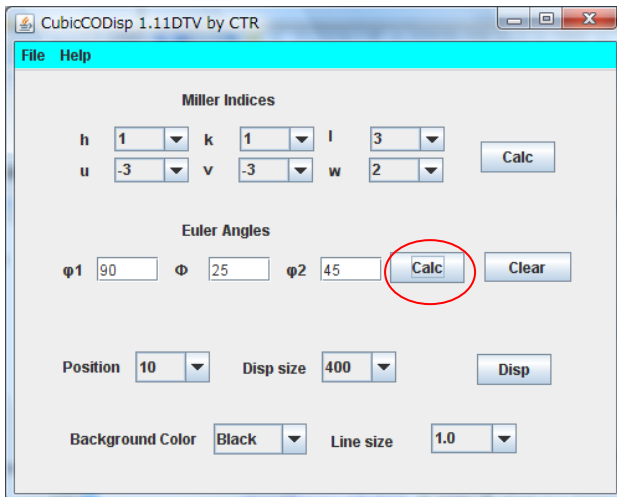


予測される Euler 角度を入力さいて Calc でチェックを行う。

Calc で入力した Euler 角度が(0.0,0.0,0.0)が表示される場合、入力する Euler 角度の変化させてください。

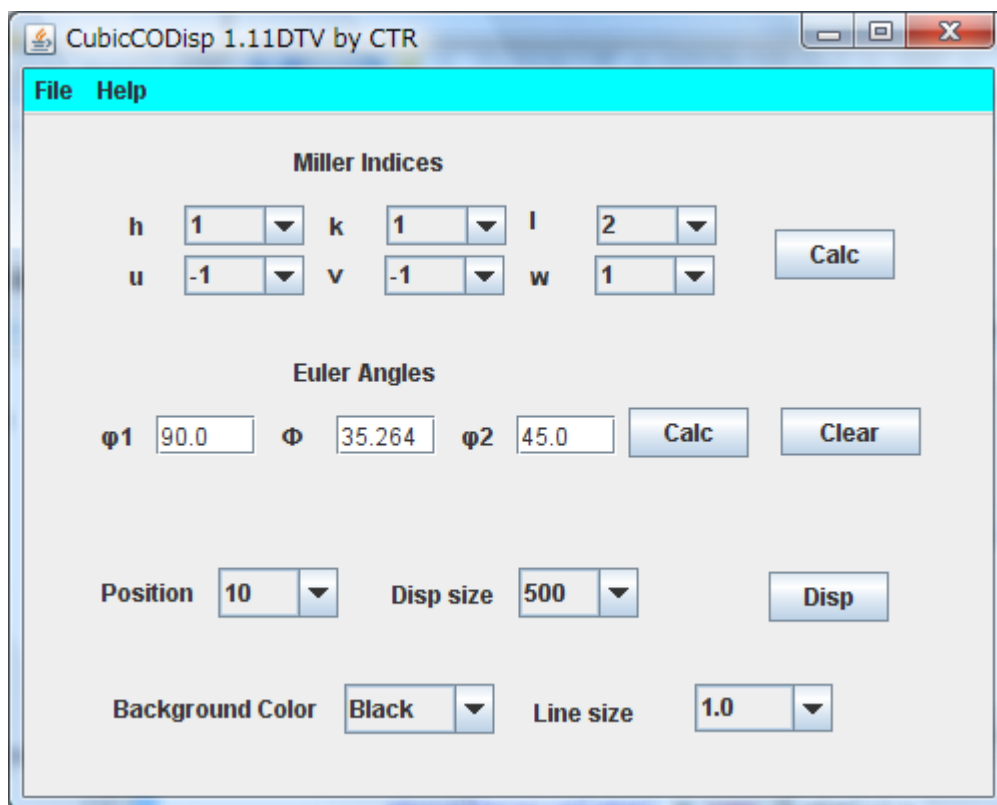
(90,30,45)では決まりません。

(90,25,45)の場合方位が計算されます。その場合、方位で Euler 角度を再計算します。

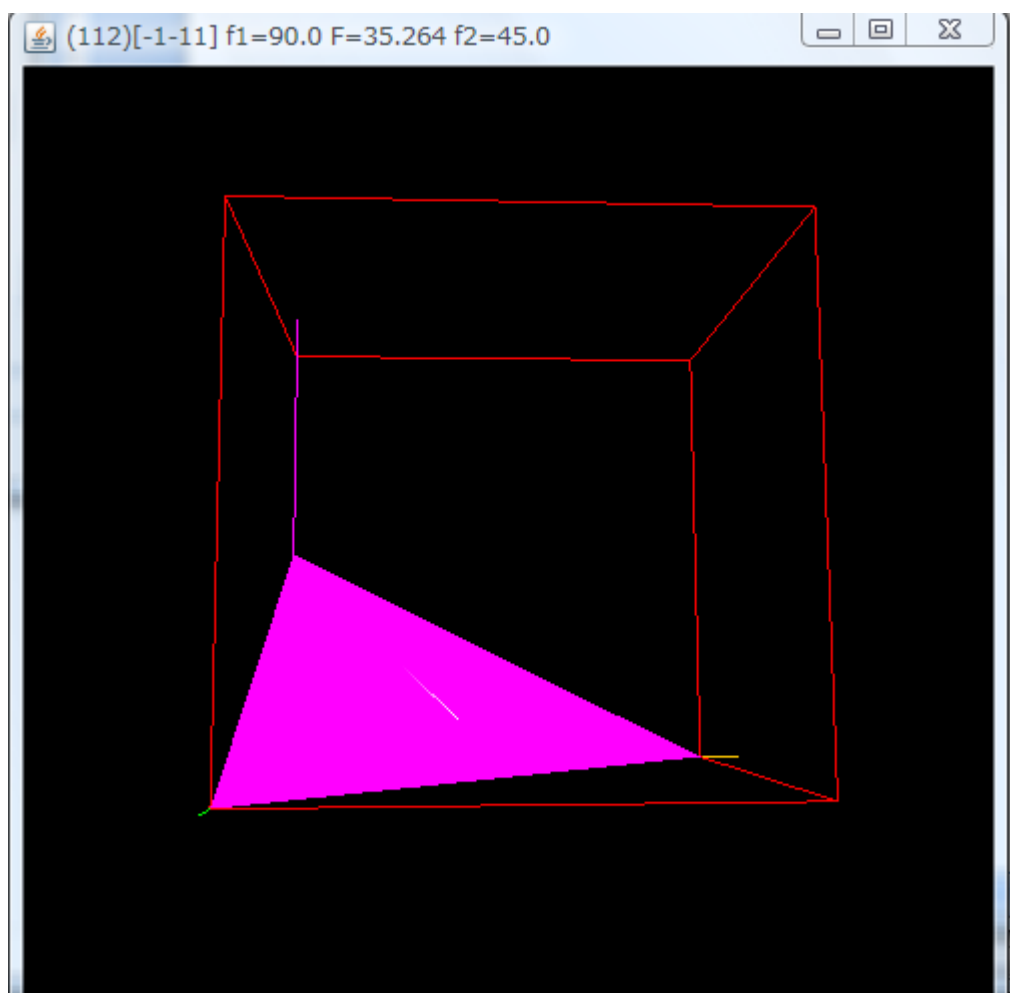


又、(90,35,45)でも(112)[-1-11]が計算されます。

(112)[-1-11]の場合



Disp で結晶方位の表示が可能



CubicCODispの詳細は

<http://www.geocities.jp/helpertex2/Soft/Soft-index.html>