

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。

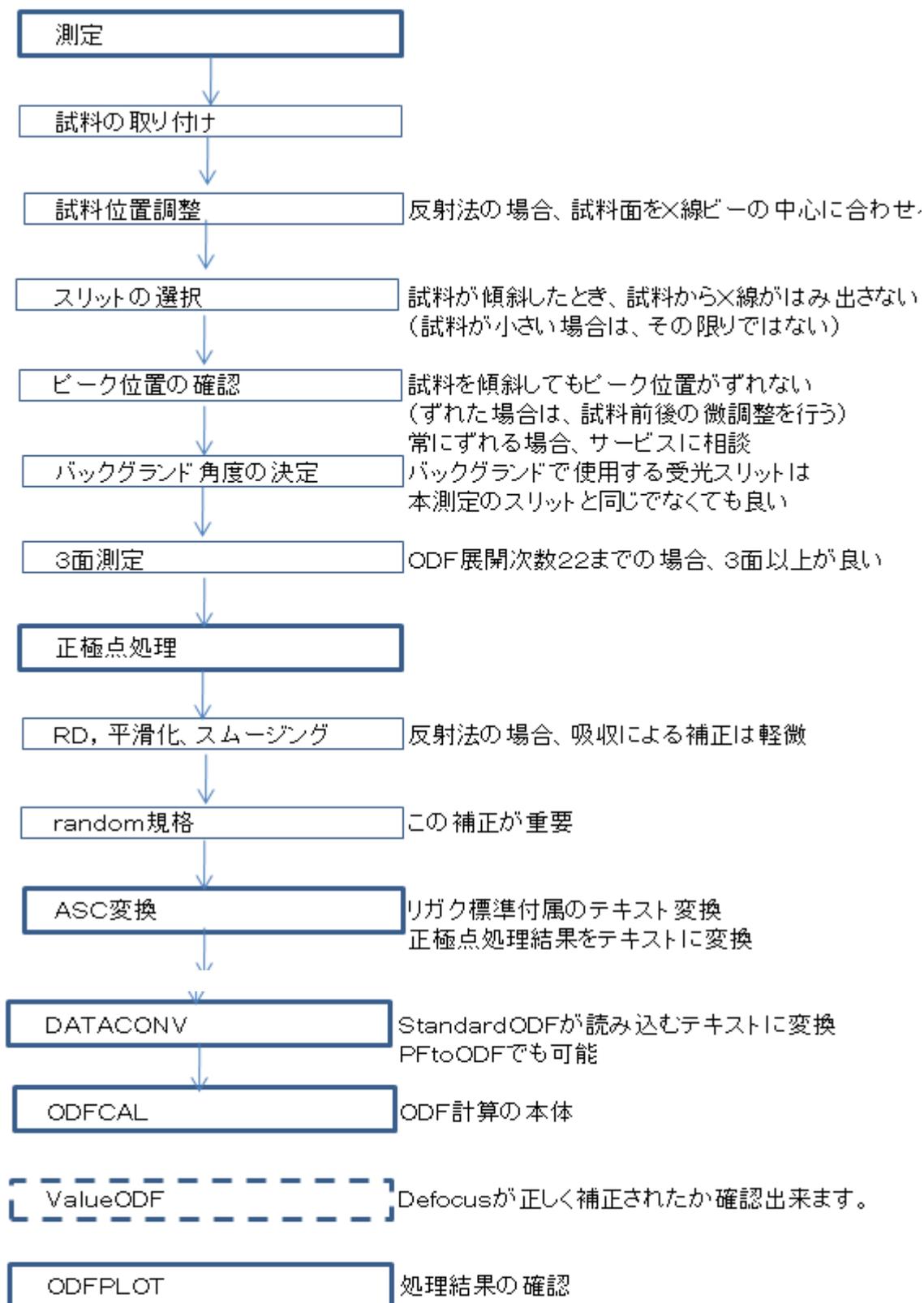
ODF解析の重要な要素

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

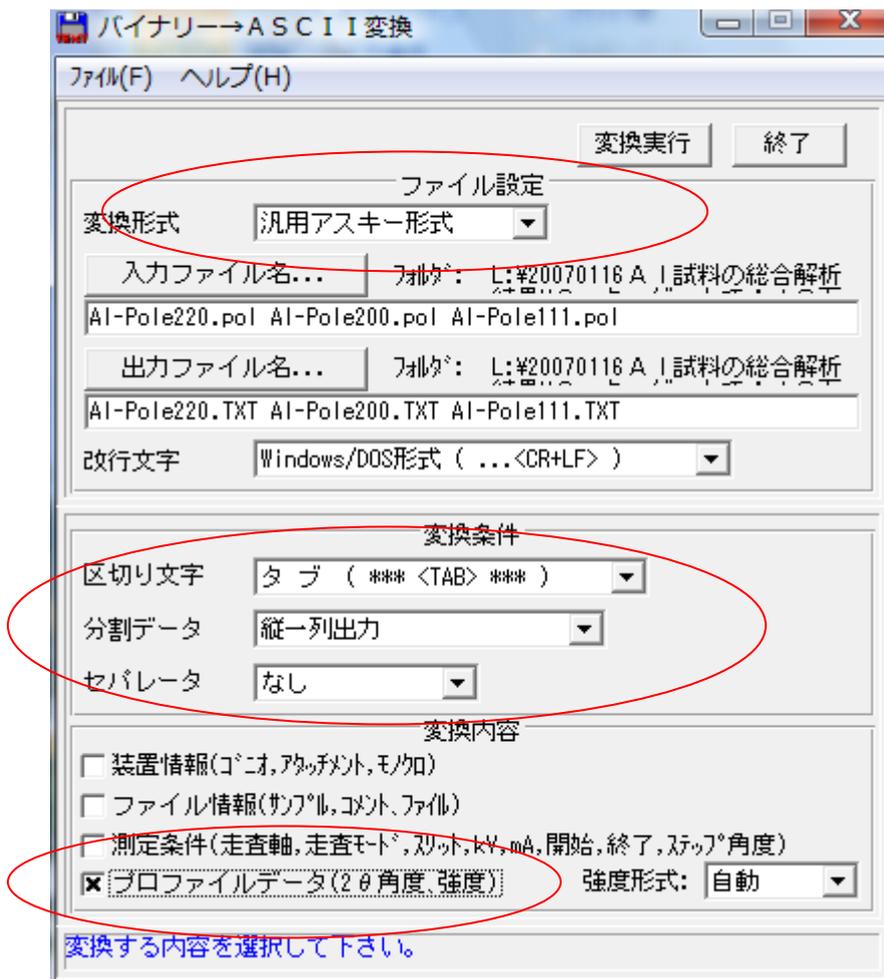


性格なEuler角度はテキストデータから確認出来ます。

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

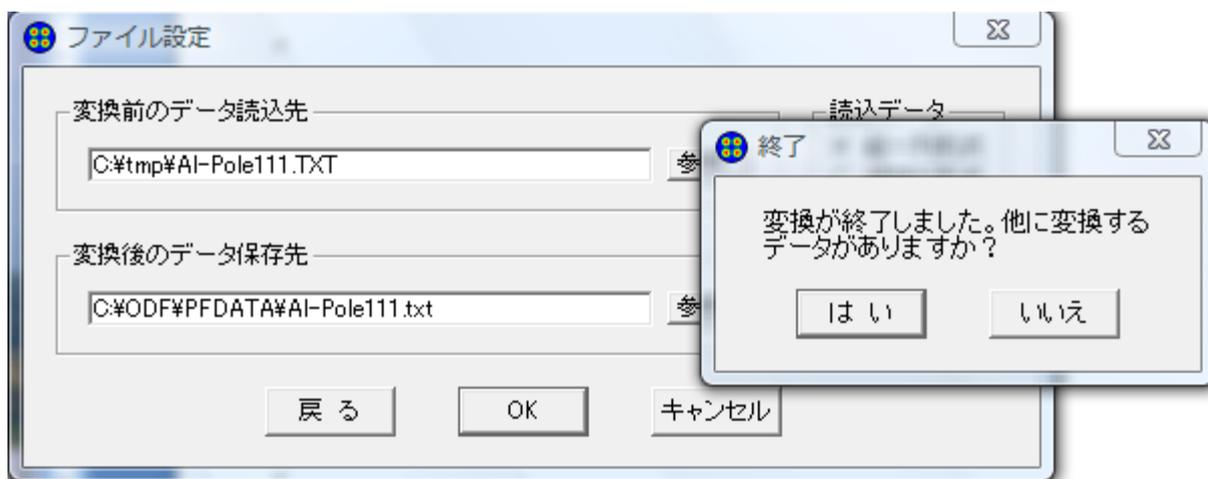
- 縦一列形式
- 複数行形式

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 = $\Delta\alpha$ = $\Delta\beta$ =

β 角のタイプ $\beta = 0^\circ, 5^\circ, 10^\circ, \dots, 350^\circ, 355^\circ$
 $\beta = 2.5^\circ, 7.5^\circ, 12.5^\circ, \dots, 357.5^\circ$

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

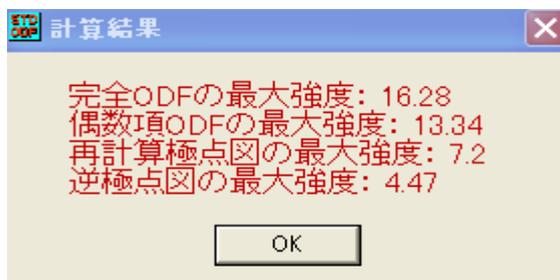
1 2

3 4

処理条件はデフォルトでOK

計算の開始

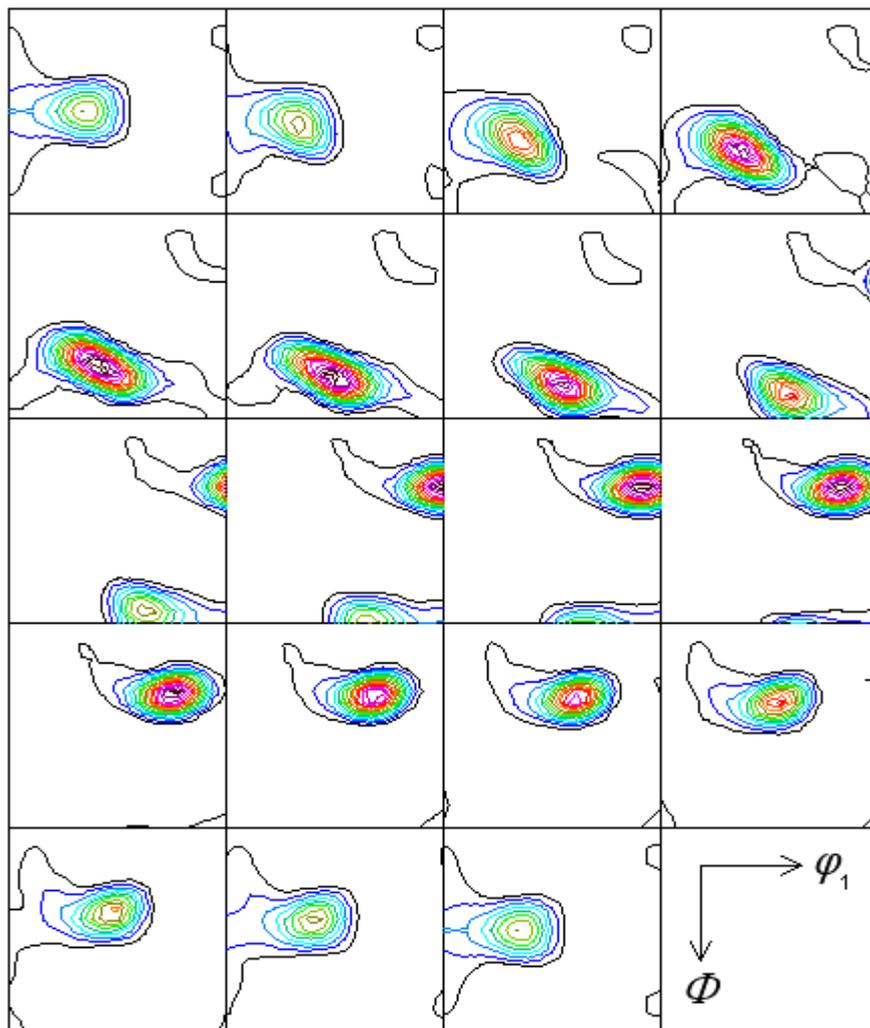
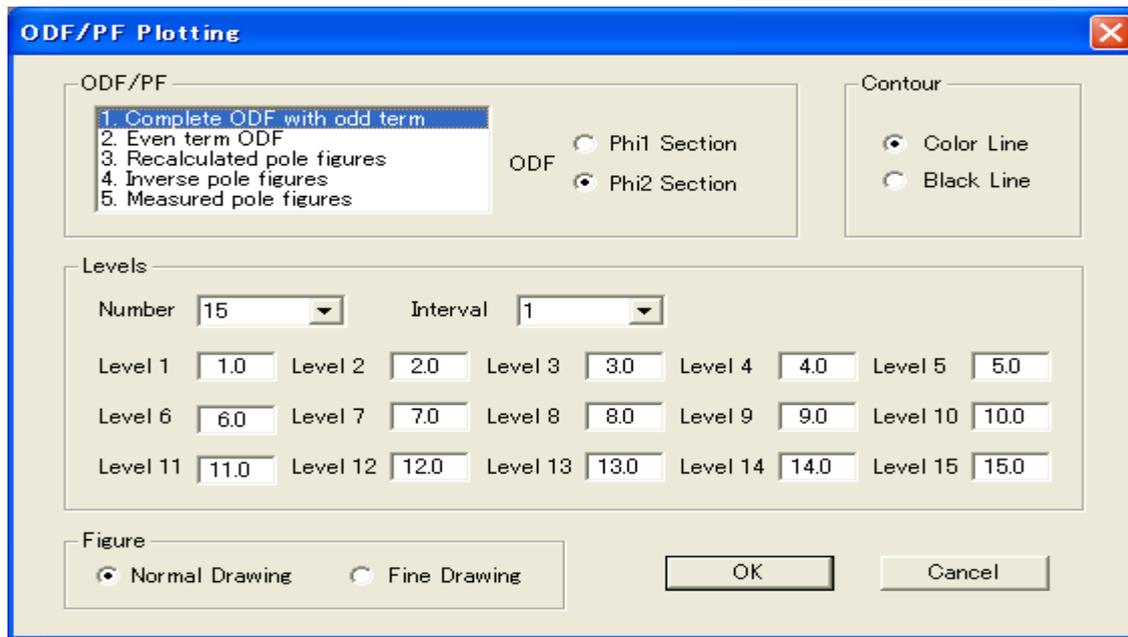
計算が完了すると



が表示されます。

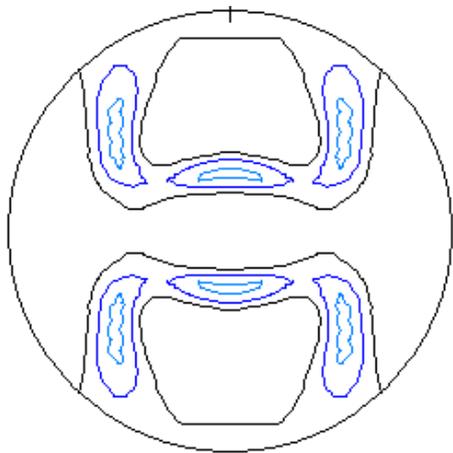
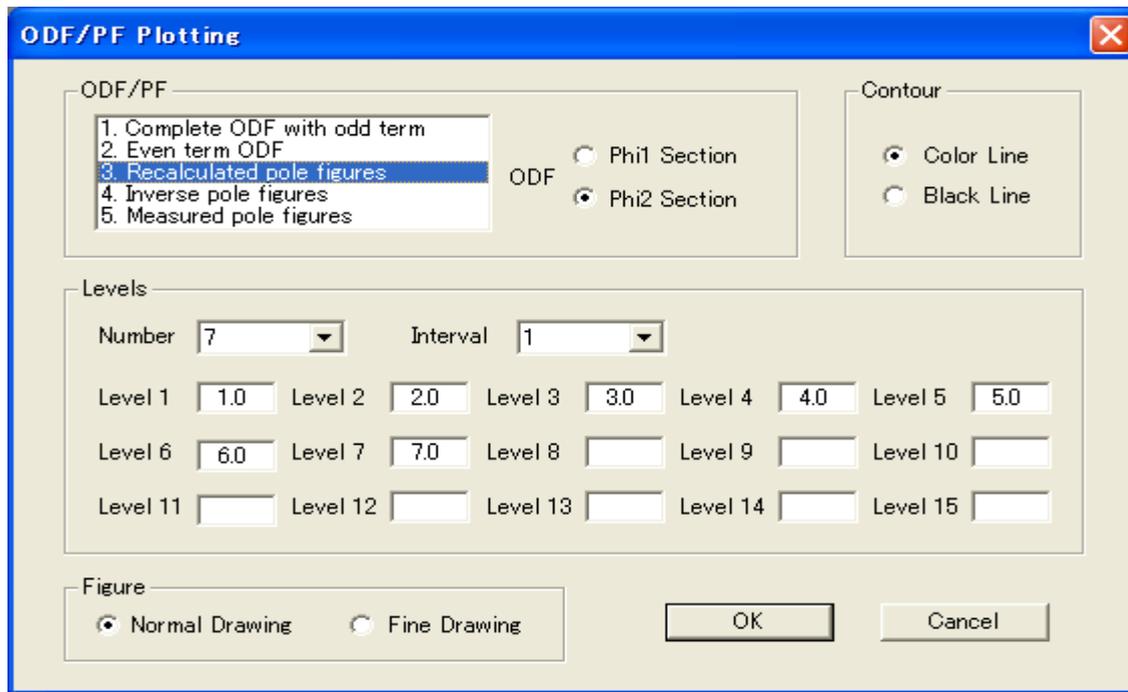
等高線表示プログラムPDF PLOT

ODF図の表示

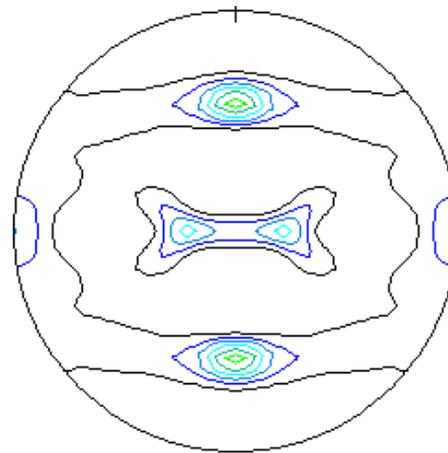


Contour Levels: 1.0 2.0 3.0 4.0 5.0 6.0 7.0 8.0 9.0 10.0 11.0 12.0 13.0 14.0 15.0

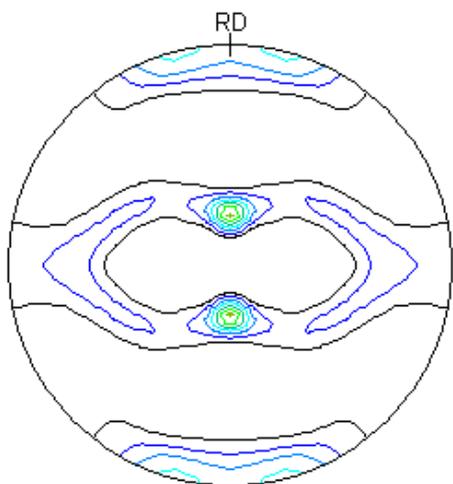
再計算極点図の表示



{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

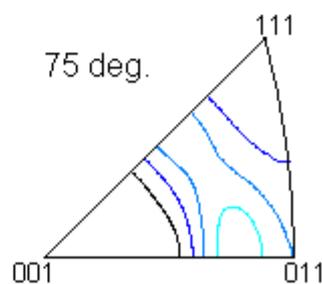
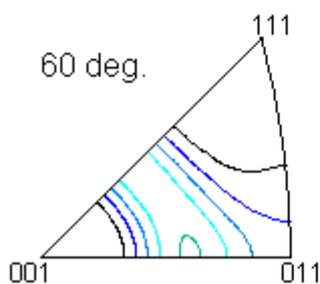
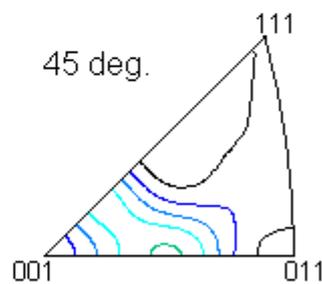
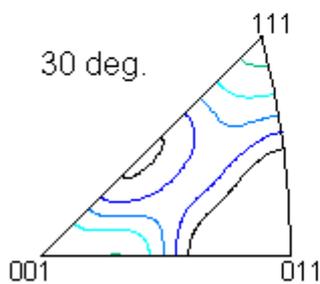
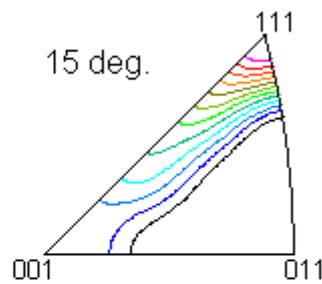
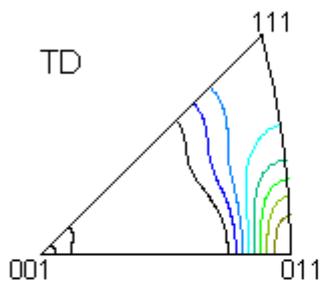
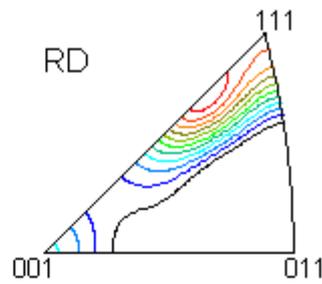
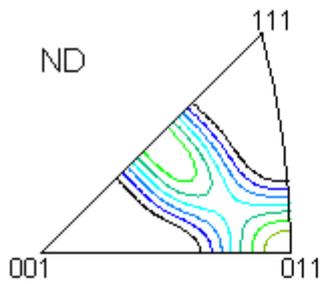
Contour Color Line Black Line

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

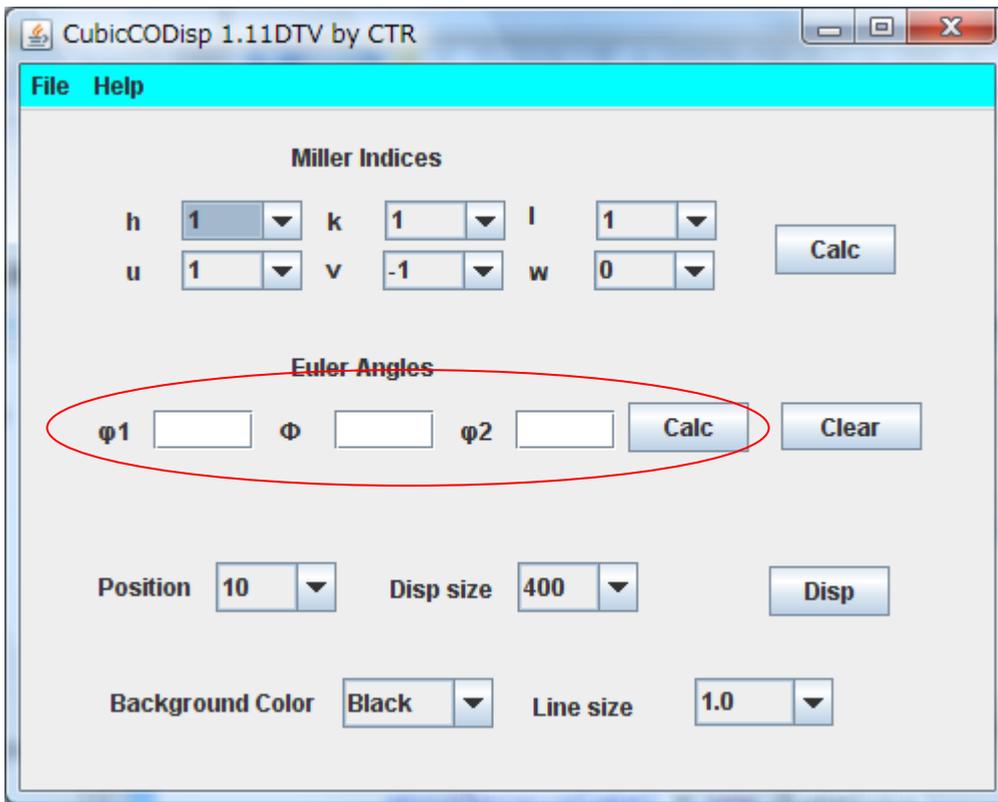
45.0	0.0	5.0	10.0	15.0	20.0	25.0	30.0	35.0	40.0	45.0	50.0	55.0	60.0	65.0	70.0	75.0	80.0	85.0	90.0
0.0	-0.3	-0.3	-0.4	-0.2	0.1	0.6	0.8	0.7	0.4	0.3	0.4	0.7	0.8	0.6	0.1	-0.2	-0.4	-0.3	-0.3
5.0	-0.3	-0.3	-0.3	-0.2	0.1	0.4	0.5	0.6	0.6	0.6	0.7	0.6	0.5	0.4	0.3	0.2	0.1	0.1	0.1
10.0	-0.4	-0.4	-0.3	-0.1	0.1	0.2	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。

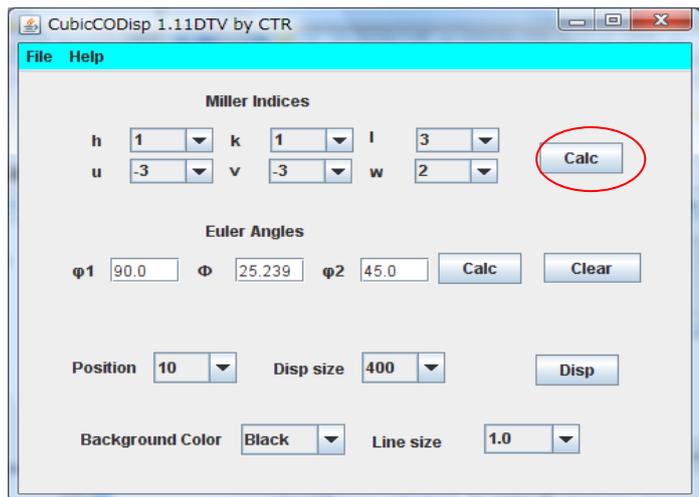
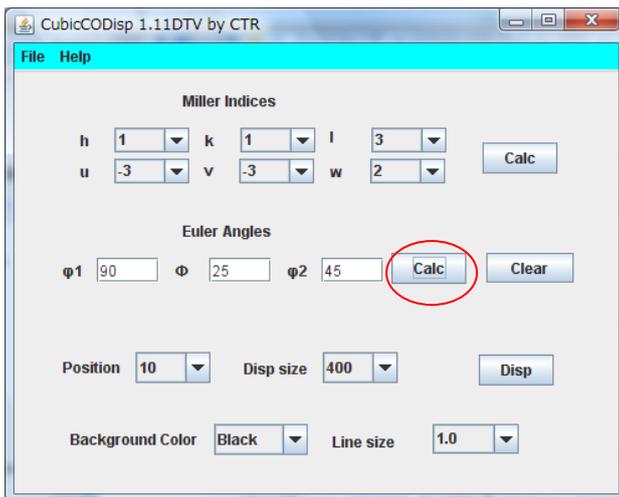
CubicCODispによる方位解析 (StandardODFの付属ではありません)



予測される Euler 角度を入力さいて Calc でチェックを行う。

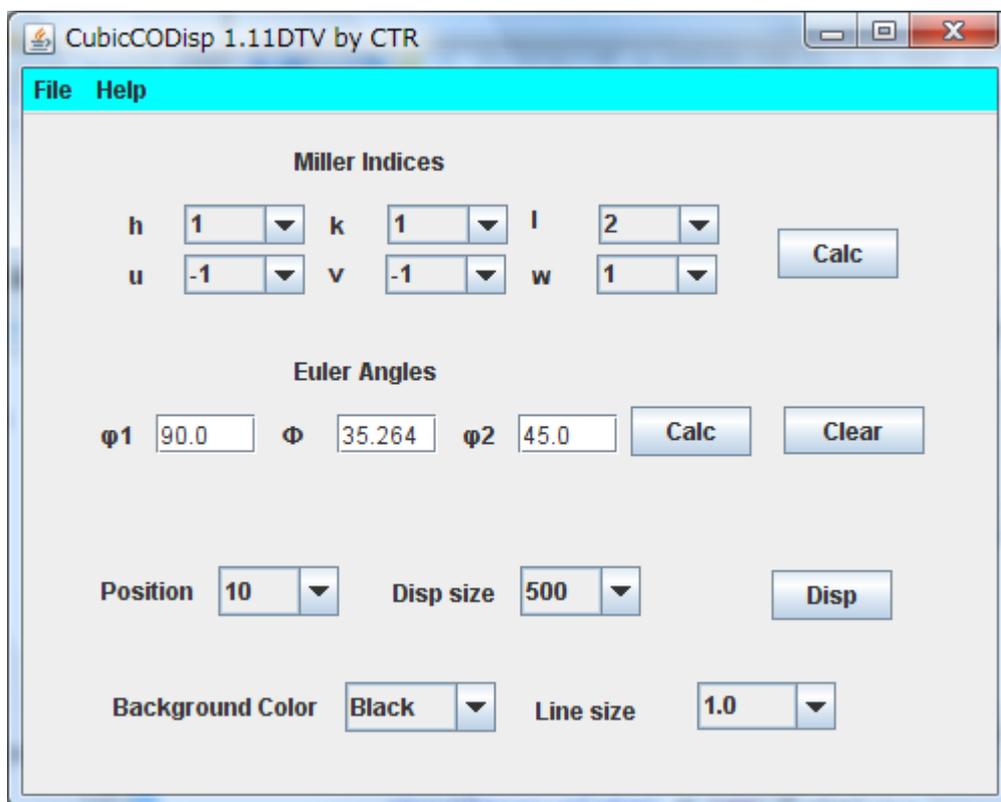
Calc で入力した Euler 角度が(0.0,0.0,0.0)が表示される場合、入力する Euler 角度の変化させてください。(90,30,45)では決まりません。

(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。

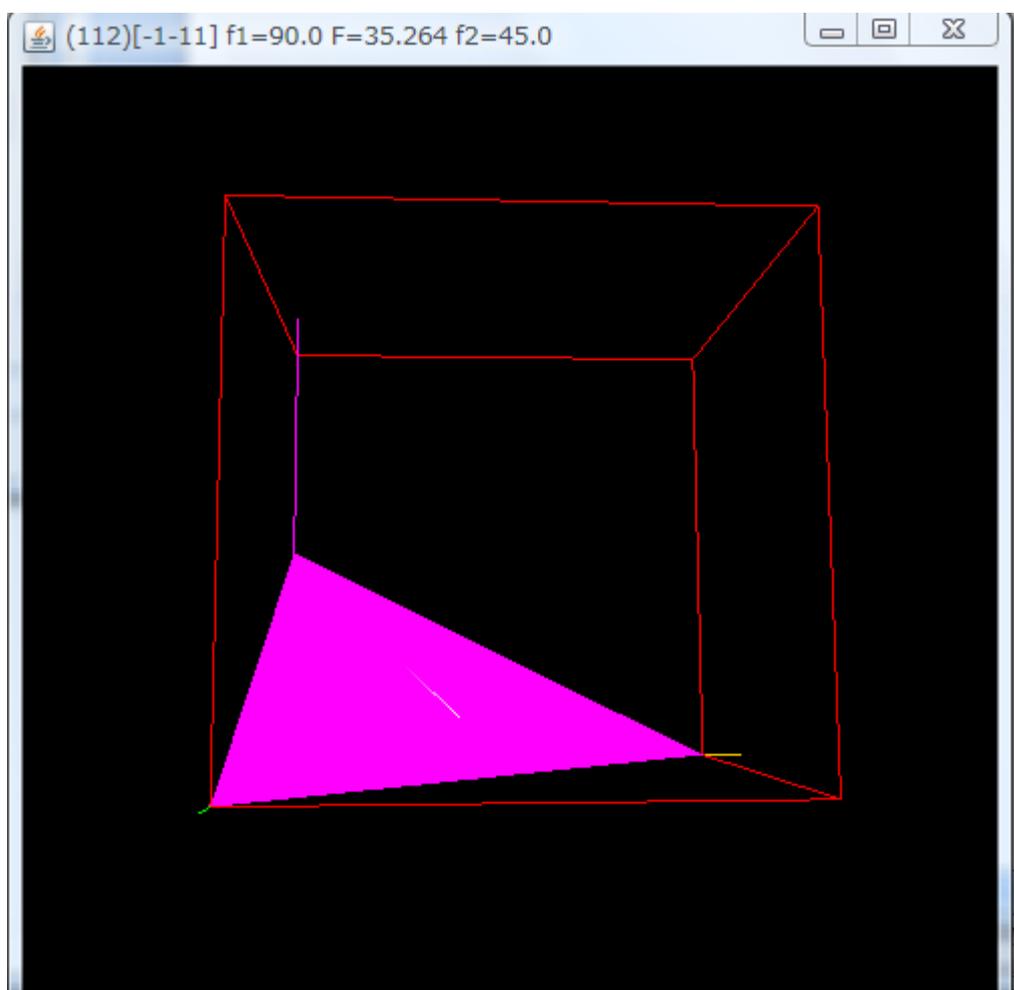


又、(90,35,45)でも(112)[-1-11]が計算されます。

(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>