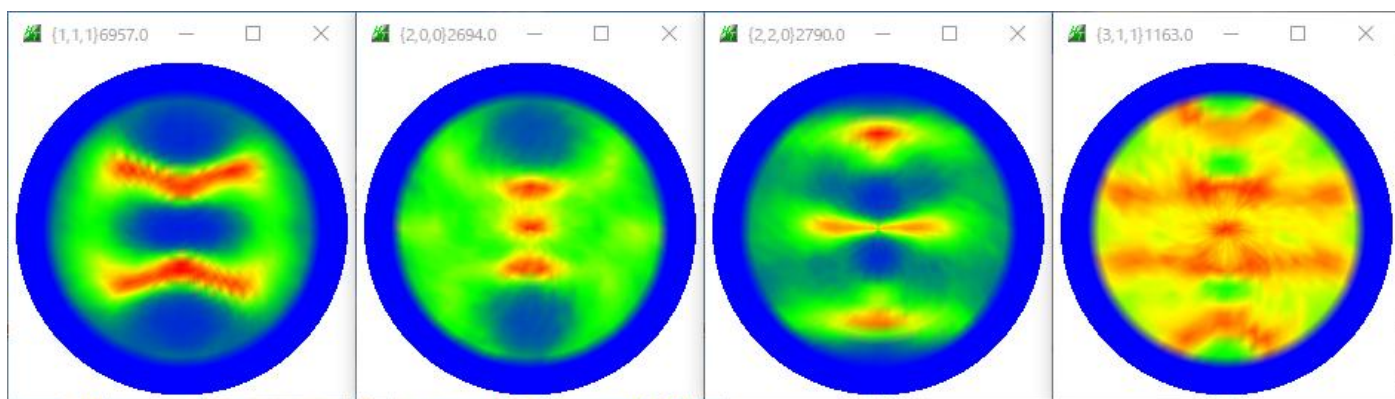


標準アルミニウムA5052Pの各種シュミット因子計算

測定データ



2021年07月17日

HelperTex Office

概要

標準アルミニウムデータを用い、

バックグラウンド除去+計算 `d e f o c u s` (最小化 $R_p\%$)

バックグラウンド除去なし

を `L a b o T e x` の VF 計算からシュミット因子計算比較を行ってみます。

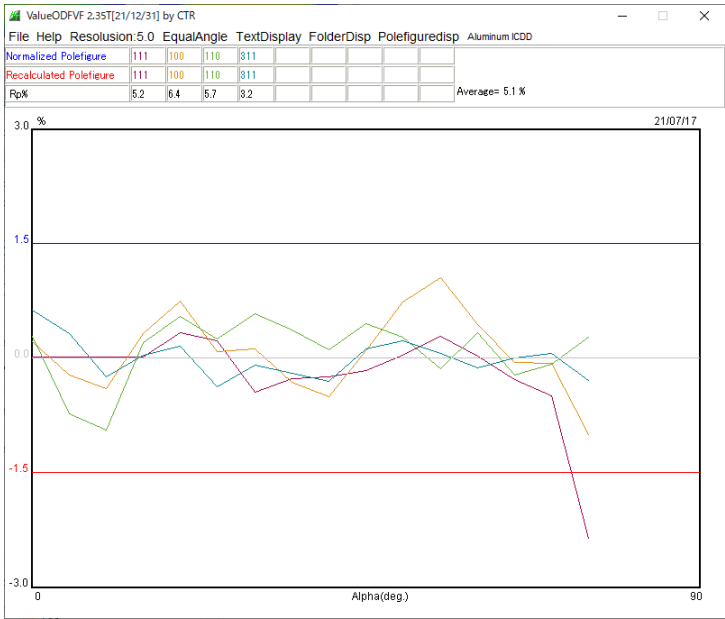
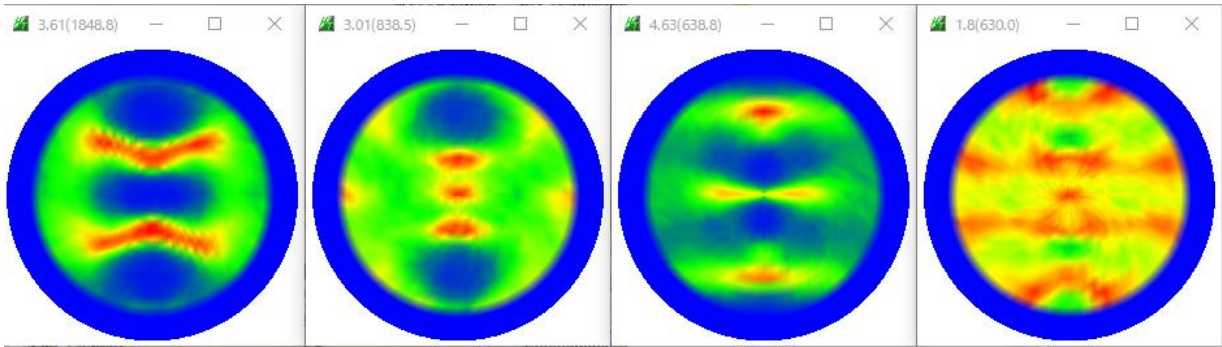
ODF P o ね F i g u r e 2 を用いて
バックグラウンド除去+計算 d e f o c u s （最小化 R p %）

☒ Defocus(2) function files folder(Calc backdefocus)

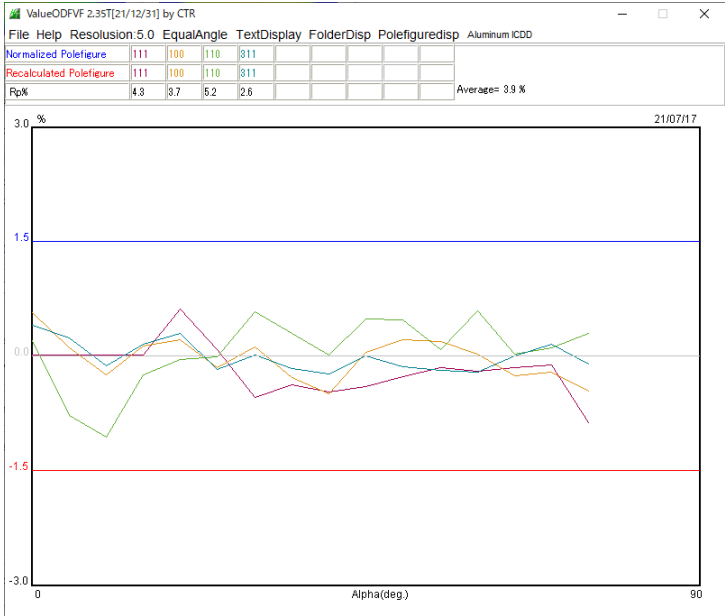
DSH1.2mm+Schulz+RSH5mm

☒ Search minimum EqualAngleRp%(Cubic only)

データ処理結果



最小化 R p % で 5 . 1 % → 3 . 9 % に改善



PFtoODF3 8.52T[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

U#測定データ#材料 - Al#2011-02-14-標準A試料#A5052P#NO 010#TEST

PF Data

SelectFile(TXT(b,intens),TXT2(a,b,intens))	h,k,l	2Theta	Alpha scope	AlphaS	AlphaE	Select
111-NO 010_chB00D2S_2.TXT	1,1,1	38.34	0.0->75.0	0.0	75.0	☒
200-NO 010_chB00D2S_2.TXT	2,0,0	44.56	0.0->75.0	0.0	75.0	☒
220-NO 010_chB00D2S_2.TXT	2,2,0	64.86	0.0->75.0	0.0	75.0	☒
311-NO 010_chB00D2S_2.TXT	3,1,1	77.94	0.0->75.0	0.0	75.0	☒
	2,1,1	0.0		0.0	0.0	☐
	3,1,1	0.0		0.0	0.0	☐
	4,0,0	0.0		0.0	0.0	☐
	3,3,1	0.0		0.0	0.0	☐
	4,2,2	0.0		0.0	0.0	☐
	5,1,1	0.0		0.0	0.0	☐
	5,2,1	0.0		0.0	0.0	☐
	5,3,1	0.0		0.0	0.0	☐

Comment
111-NO 010_chB00D2S_2.TXT 200-NO 010_chB00D2S_2.TXT 220-NO 010_chB00D2S_2.TXT 311-NO 010_chB00D2S_2.T

Symmetric type
Full

CenterData

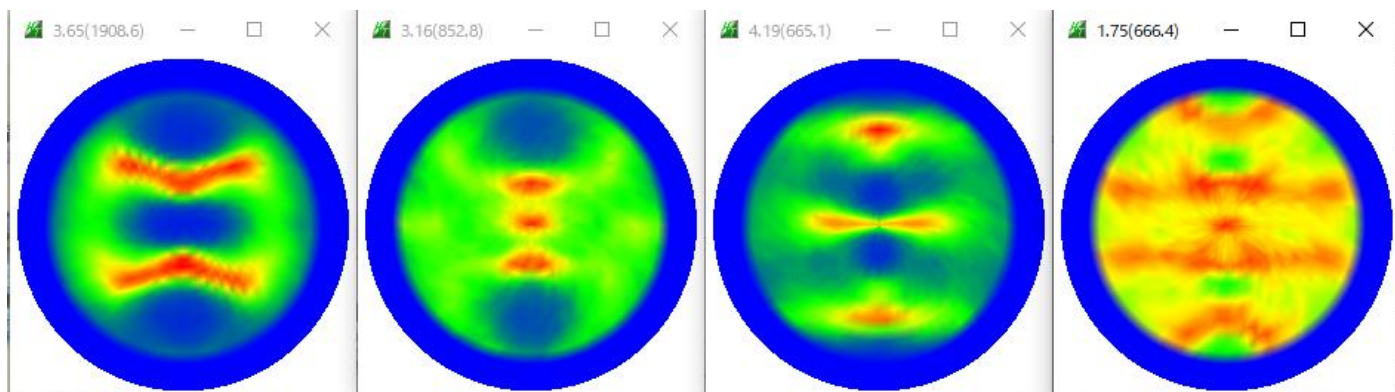
Average

Epf file save

Labotex(EPF).popLA(RAW) filename

BG-cdef-mRp

バックグラウンド除去なし+規格化



Rp%



PFToODF3 8.52T[21/12/31] by CTR

File Option Symmetric Software Data Help

Lattice constant

Material
A-Iron-Measure-IntegralData.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
gamma
90.0

Initialize

Start

☒ getHKL<-Filename

AllFileSelect

PF Holder

U*測定データO*材料 - A*2011-02-14-標準A*試料* A5052P*NO 010*TEST

PF Data

SelectFile(TXT(b,intens),TXT2(a,b,intens))	h,k,l	2Theta	Alpha scope	AlphaS	AlphaE	Select
111-NO 010_chS_2.TXT	1,1,1	38.34	0.0->75.0	0.0	75.0	☒
200-NO 010_chS_2.TXT	2,0,0	44.56	0.0->75.0	0.0	75.0	☒
220-NO 010_chS_2.TXT	2,2,0	64.86	0.0->75.0	0.0	75.0	☒
311-NO 010_chS_2.TXT	3,1,1	77.94	0.0->75.0	0.0	75.0	☒
	2,1,1	0.0		0.0	0.0	☐
	3,1,1	0.0		0.0	0.0	☐
	4,0,0	0.0		0.0	0.0	☐
	3,3,1	0.0		0.0	0.0	☐
	4,2,2	0.0		0.0	0.0	☐
	5,1,1	0.0		0.0	0.0	☐
	5,2,1	0.0		0.0	0.0	☐
	5,3,1	0.0		0.0	0.0	☐

Comment
111-NO 010_chS_2.TXT 200-NO 010_chS_2.TXT 220-NO 010_chS_2.TXT 311-NO 010_chS_2.TXT

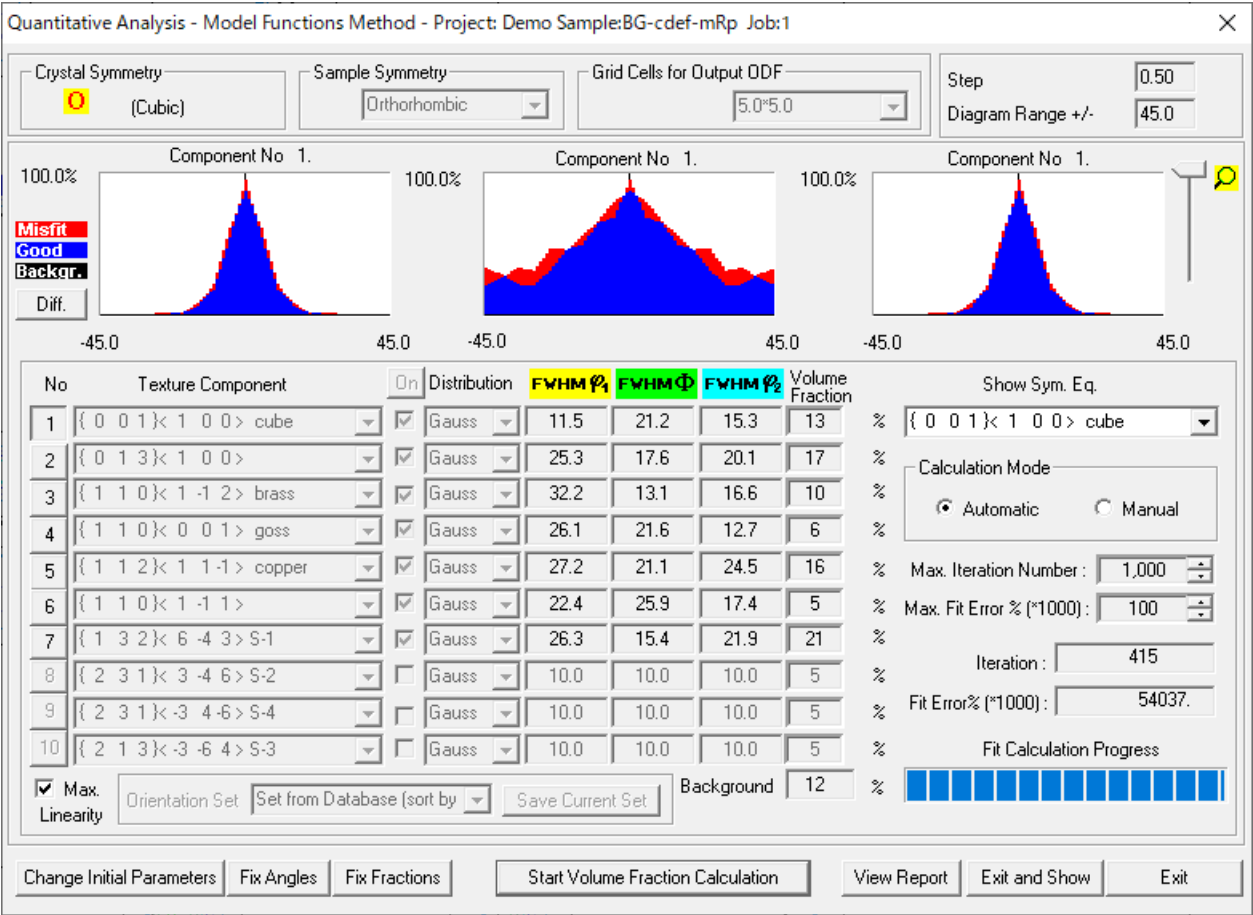
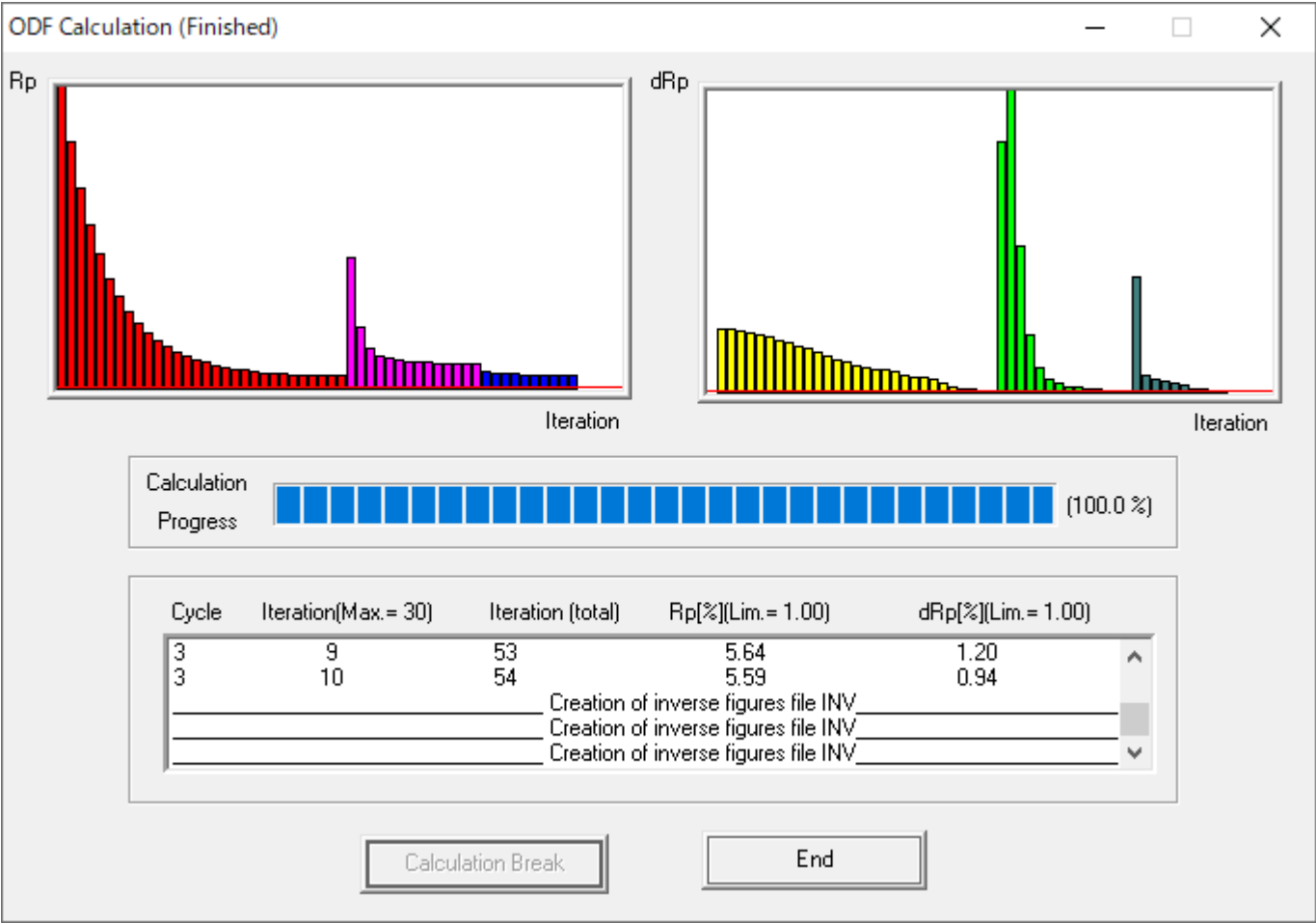
Symmetric type
Full

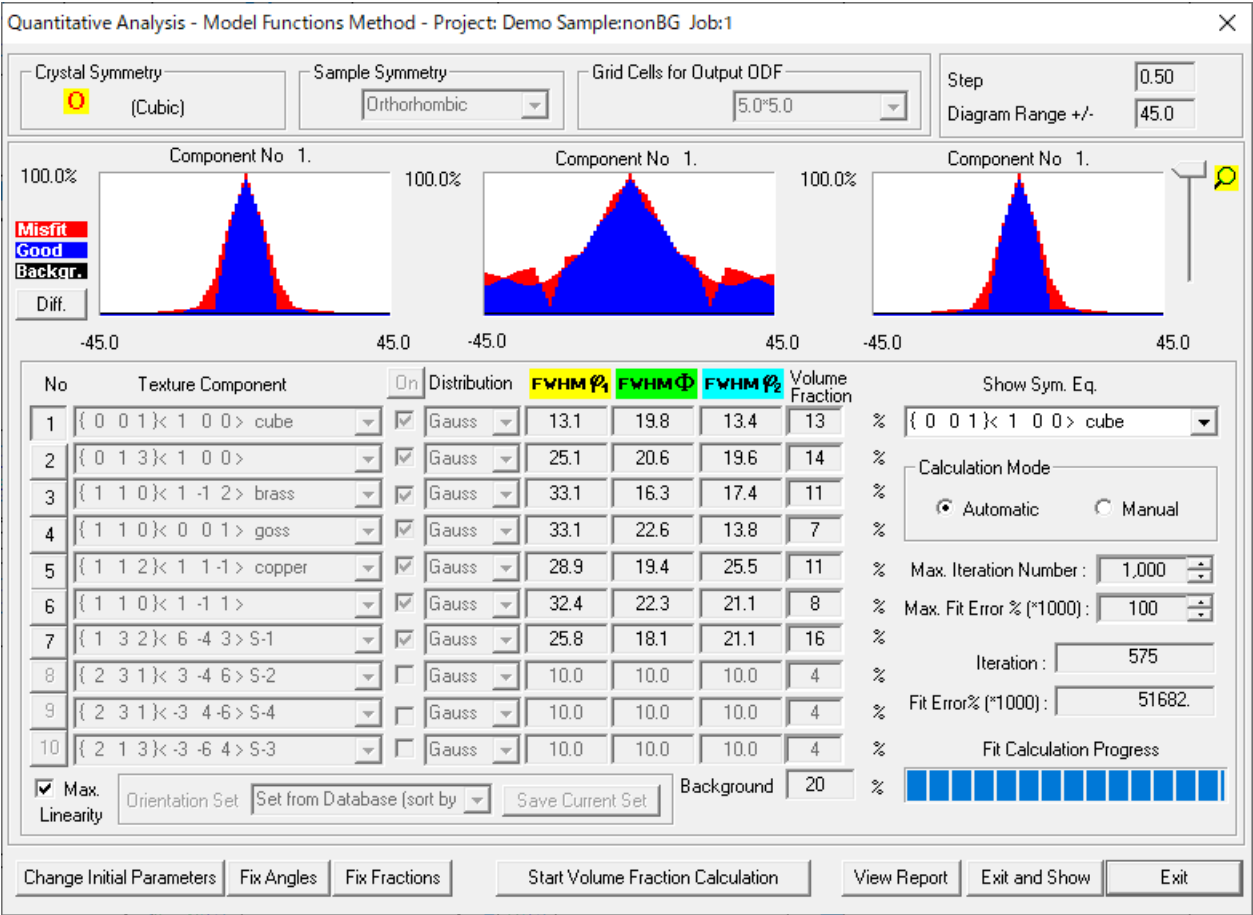
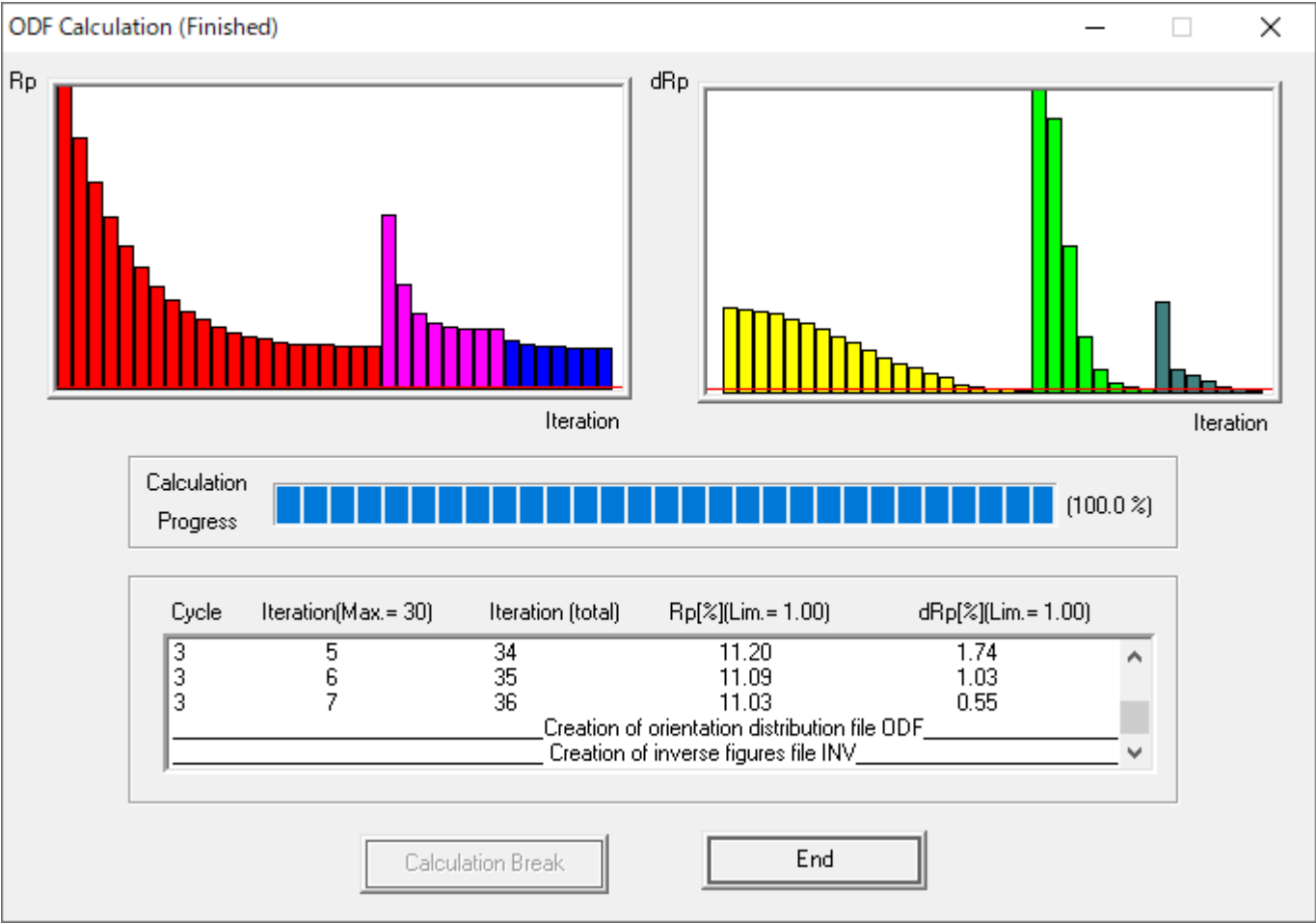
CenterData
☒ Average

Epf file save

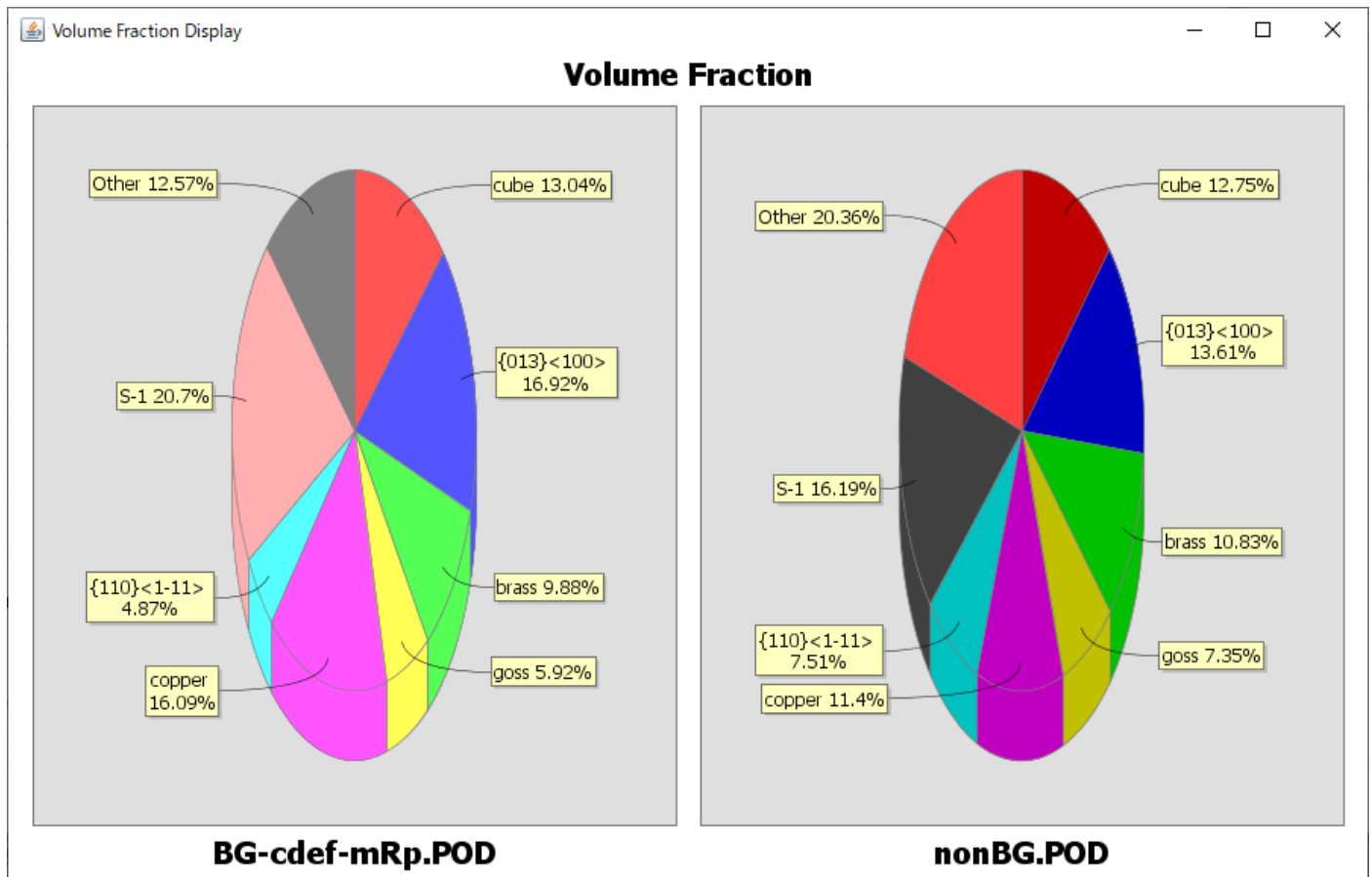
Labotex(EPF),popLA(RAW) filename
nonBG

LaboTexでVF計算 (BG 処理+計算defocus+最小化Rp%)





VF %比較



バックグラウンド削除なしでは、Other (random) が増える。

BG 処理+計算 d e f o c u s +最小化 R p %から計算されたシュミット因子

FCCSchmidFactorCalc 1.11T[21/12/31] by CTR

File Help

InputFile(TXT)

LaboTex VolumeFraction(100%VfMode)

C:\LaboTex2\USER\Sch.LAB#O-Cubic.LAB#Demo.LAB#BG-cdef-mRp.LAB#Job02#BG-cdef-mRp.POD

Disp

Data input

☐ h k l or ☐ h k l

☐ ND

Input

☐ h k l Ku v w

Input

phi1 PHI phi2

Roop

5

Input

Calc result	Vf(%)	Sch	S*Vf/100
{0 0 1}<1 0 0>	13.04	0.408	0.053
{0 1 3}<1 0 0>	16.92	0.489	0.082
{1 1 0}<1 -1 2>	9.88	0.408	0.04
{1 1 0}<0 0 1>	5.92	0.408	0.024
{1 1 2}<1 1 -1>	16.09	0.408	0.065
{1 1 0}<1 -1 1>	4.87	0.408	0.019
{1 3 2}<6 -4 3>	20.7	0.466	0.096
sum-volumefraction=	87.42%		
Schmid function($\Sigma S*Vf/100$)=		0.38277	

BG 処理なし+ d e f o c u s 補正なし

FCCSchmidFactorCalc 1.11T[21/12/31] by CTR

File Help

InputFile(TXT)

LaboTex VolumeFraction(100%VfMode)

C:\LaboTex2\USER\Sch.LAB#0-Cubic.LAB#Demo.LAB#nonBG.LAB#Job02#nonBG.POD

Disp

Data input

$h k l$ or $h k l$

☐ ND

$h k l$ $Ku v w$

ϕ_1 Φ_1 ϕ_2

Roop

5

Input

$h k l$	Calc result	Vf(%)	Sch	$S^*Vf/100$
$\{0 0 1\} \langle 1 0 0 \rangle$	12.75	0.408	0.052	
$\{0 1 3\} \langle 1 0 0 \rangle$	13.61	0.489	0.066	
$\{1 1 0\} \langle 1 -1 2 \rangle$	10.83	0.408	0.044	
$\{1 1 0\} \langle 0 0 1 \rangle$	7.35	0.408	0.03	
$\{1 1 2\} \langle 1 1 -1 \rangle$	11.4	0.408	0.046	
$\{1 1 0\} \langle 1 -1 1 \rangle$	7.51	0.408	0.03	
$\{1 3 2\} \langle 6 -4 3 \rangle$	16.19	0.466	0.075	
sum-volumefraction=	79.64%			
Schmid function($\Sigma S^*Vf/100$)=		0.34568		

Schmidcalc Symmetry SchmidCalc SchmidFDPD

Schmitt function 0.3827 $\rightarrow$ 0.3456 と値が少なくなる。

randomを除いて比較

FCCSchmidFactorCalc 1.11T[21/12/31] by CTR

File Help

InputFile(TXT)

LaboTex VolumeFraction(SumVFmode)

C:\LaboTex2\USER\Sch.LAB\O-Cubic.LAB\Demo.LAB\BG-cdef-mRp.LAB\Job02\BG-cdef-mRp.POD

Disp

Data input

h k l or h k l

☐ ND

Input

h k l Ku v w

Input

phi1 PHI phi2

Roop

5

Input

h k l	Calc result	Vf(%)	Sch	S*Vf/sumVf
{0 0 1}<1 0 0>	13.04	13.04	0.408	0.06
{0 1 3}<1 0 0>	16.92	16.92	0.489	0.094
{1 1 0}<1 -1 2>	9.88	9.88	0.408	0.046
{1 1 0}<0 0 1>	5.92	5.92	0.408	0.027
{1 1 2}<1 1 -1>	16.09	16.09	0.408	0.075
{1 1 0}<1 -1 1>	4.87	4.87	0.408	0.022
{1 3 2}<6 -4 3>	20.7	20.7	0.466	0.11
sum-volumefraction=	87.42%			
Schmid function(Σ S*Vf/sumVf)=			0.43786	

Schmidcalc Symmetry SchmidCalc SchmidFDisp

FCCSchmidFactorCalc 1.11T[21/12/31] by CTR

File Help

InputFile(TXT)

LaboTex VolumeFraction(SumVFmode)

C:\LaboTex2\USER\Sch.LAB\O-Cubic.LAB\Demo.LAB\nonBGLAB\Job02\nonBG.POD

Disp

Data input

h k l or h k l

ND

Input

h k l Ku v w

Input

phi1 PHI phi2

Roop

5

Input

h k l	Calc result	Vf(%)	Sch	S*Vf/sumVf
{0 0 1}<1 0 0>	12.75	12.75	0.408	0.061
{0 1 3}<1 0 0>	13.61	13.61	0.489	0.083
{1 1 0}<1 -1 2>	10.83	10.83	0.408	0.051
{1 1 0}<0 0 1>	7.35	7.35	0.408	0.037
{1 1 2}<1 1 -1>	11.4	11.4	0.408	0.056
{1 1 0}<1 -1 1>	7.51	7.51	0.408	0.038
{1 3 2}<6 -4 3>	16.19	16.19	0.466	0.094
sum-volumefraction=		79.64%		
Schmid function(Σ S*Vf/sumVf)=			0.43405	

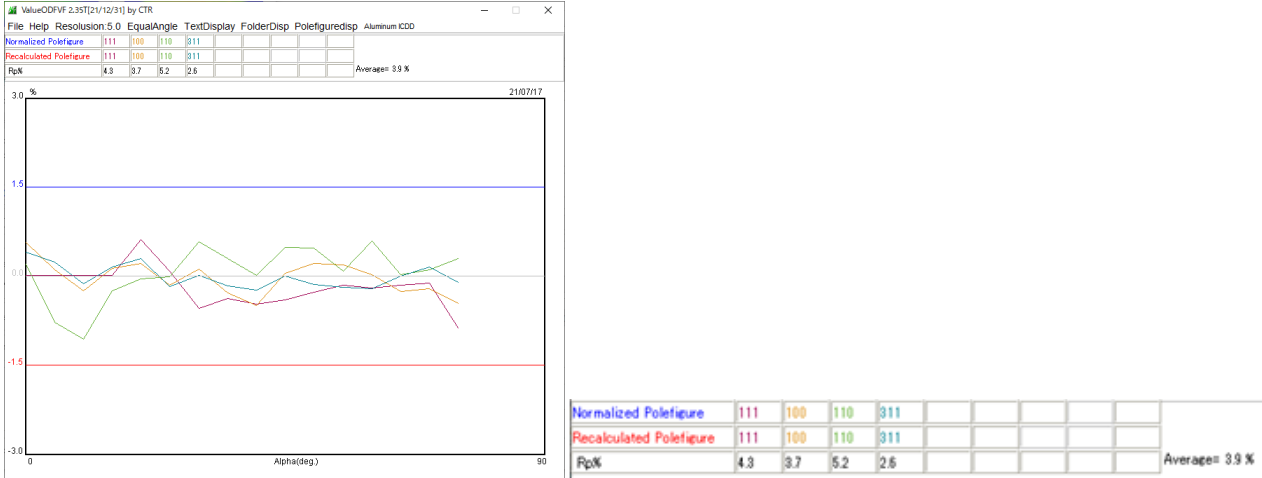
Schmidcalc Symmetry SchmidCalc SchmidFDisp

一致する。

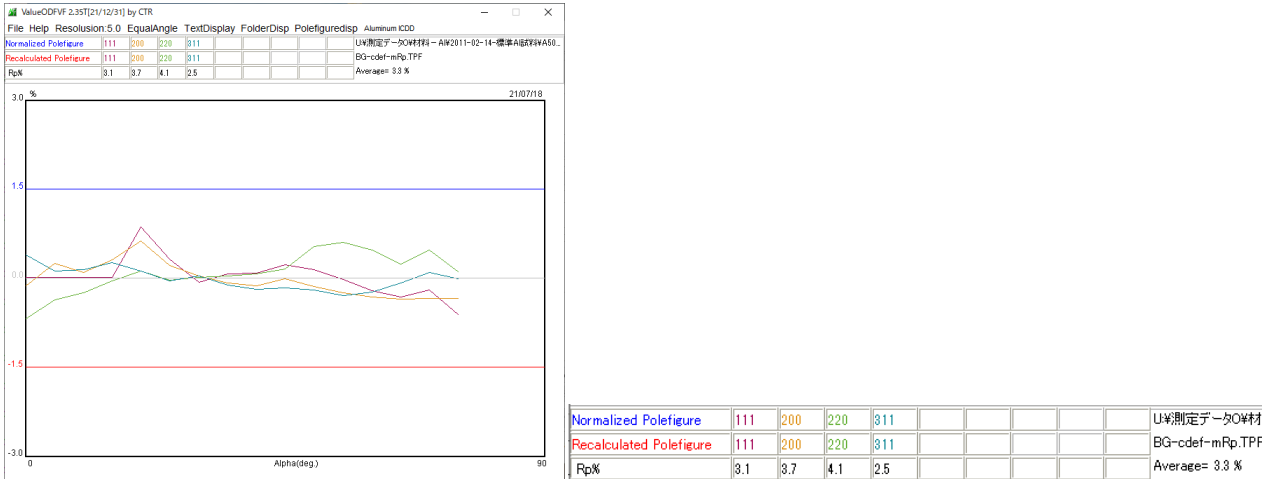
まとめ

極点処理では、バックグランド処理は重要で、補正を行わないと `random`が増える。
更にVF %にも影響し、シュミット因子計算にも影響する。
又、`defocus`はVF %に影響し、VF %から計算されるシュミット因子も影響される。
正確な、バックグランド処理、`defocus`補正を行い、処理が正常に行われているかを
`Rp %`で確認する。

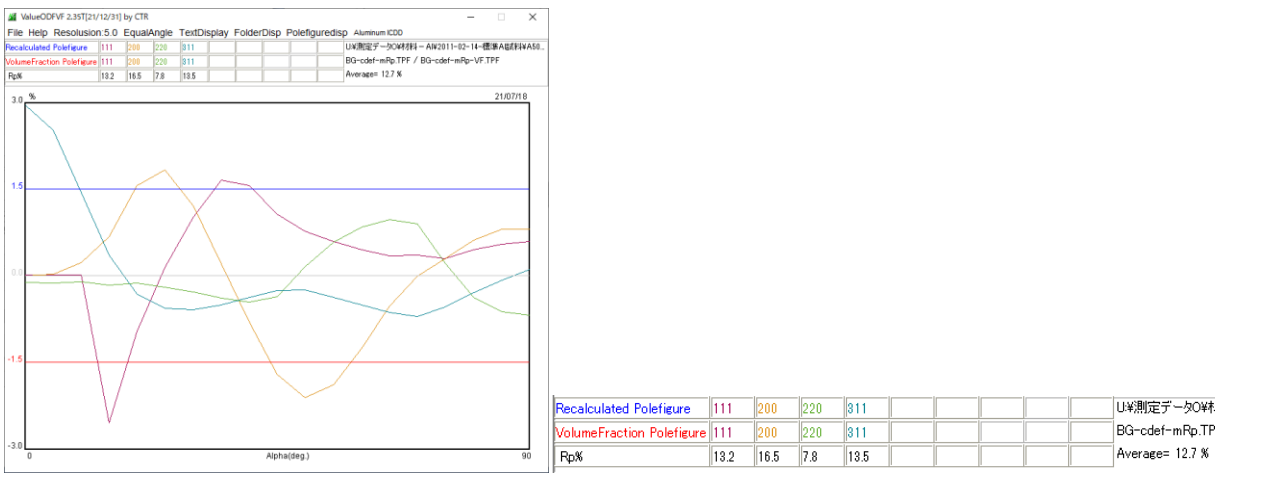
正極点処理直後のRp %



LaboTexODF 処理後

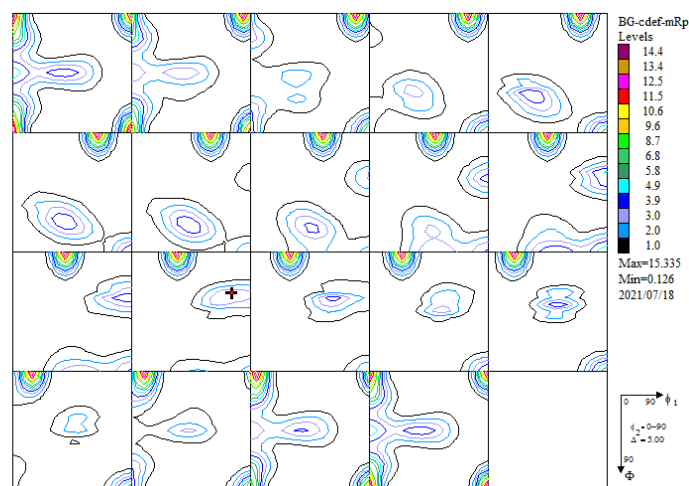
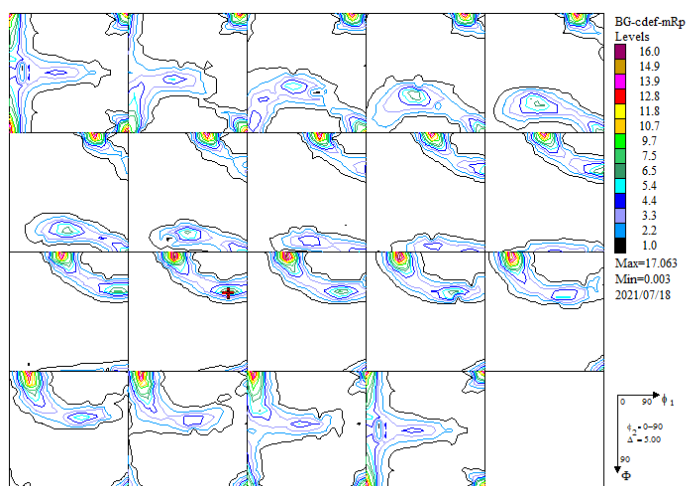


VF%後



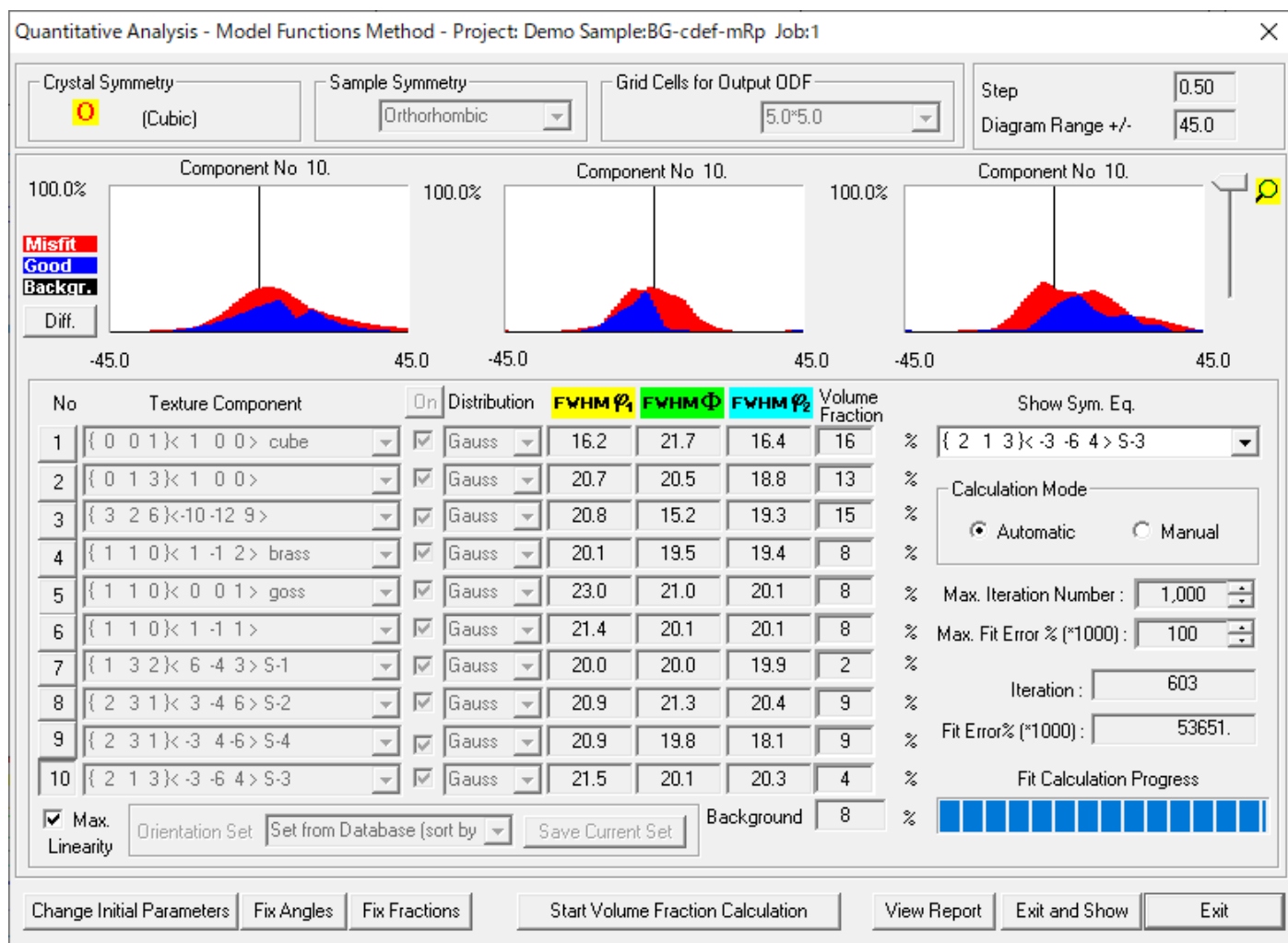
最適値を求める

極力 random 値を少なくするために方位の見直し

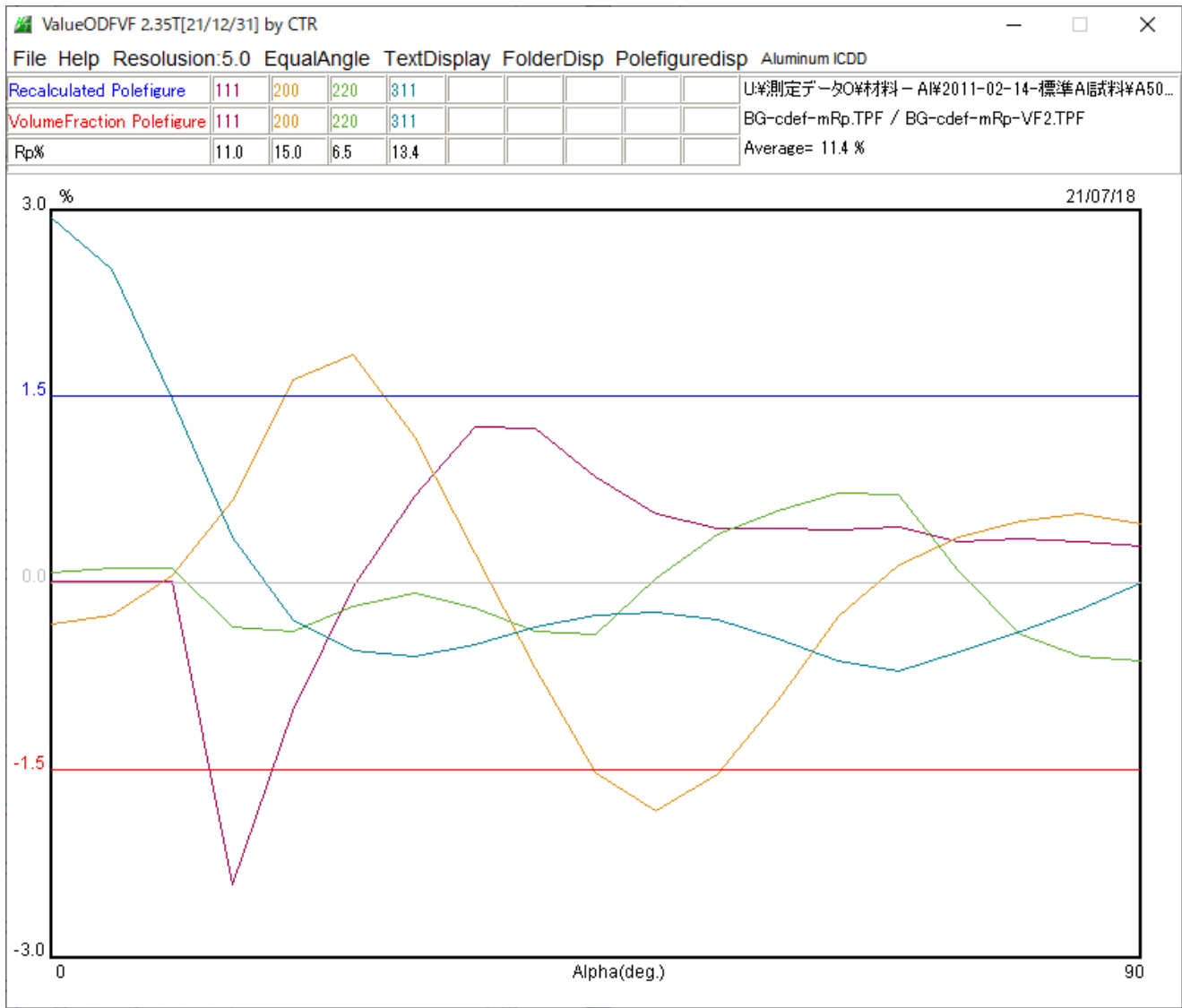


copper 方位にずれが発生している。

Copper 方位の変更し VF %を求める



変更した Copper から計算した VF%から計算したError-Rp%



Recalculated Polefigure	111	200	220	311						U#測定データ材料
VolumeFraction Polefigure	111	200	220	311						BG-cdef-mRp.TP
Rp%	13.2	16.5	7.8	13.5						Average= 12.7 %

random 12%→8%でRp%が 12.7%→11.4%の改善

R p % = 1. 4 % \mathcal{O} S c h m i d F o c t e r

FCCSchmidFactorCalc 1.11T[21/12/31] by CTR

File Help

InputFile(TXT)

LaboTex VolumeFraction(100%VfMode)

C:\LaboTex2\USER\Sch.LAB\O-Cubic.LAB\Demo.LAB\BG-cdef-mRp.LAB\Job03\BG-cdef-mRp.POD

Disp

Data input

$\{h\ k\ l\}$ or $\{h\ k\ l\}$

$\{h\ k\ l\} \{u\ v\ w\}$

☐ ND

Input

phi1 PHI phi2

Roop

5

Input

	Calc result	Vf(%)	Sch	S*Vf/100
{0 0 1}<1 0 0>	15.54	0.408	0.063	
{0 1 3}<1 0 0>	13.28	0.489	0.065	
{3 2 6}<-10 -12 9>	14.5	0.466	0.067	
{1 1 0}<-1 -1 2>	7.59	0.408	0.03	
{1 1 0}<0 0 1>	7.81	0.408	0.031	
{1 1 0}<-1 -1 1>	7.98	0.408	0.032	
{1 3 2}<-6 -4 3>	1.63	0.466	0.007	
{2 3 1}<-3 -4 6>	8.75	0.466	0.04	
{2 3 1}<-3 4 -6>	8.76	0.466	0.04	
{2 1 3}<-3 -6 4>	3.87	0.466	0.018	
sum-volumefraction=	89.71%			
Schmid function($\Sigma S^*Vf/100$)=		0.39895		

Schmidcalc Symmetry SchmidCalc SchmidFDisp

FCCSchmidFactorCalc 1.11T[21/12/31] by CTR

File Help

InputFile(TXT)

LaboTex VolumeFraction(SumVFmode)

C:\LaboTex2\USER\Sch.LAB\O-Cubic.LAB\Demo.LAB\BG-cdef-mRp.LAB\Job03\BG-cdef-mRp.POD

Disp

Data input
[h k l] or [h k l]

☐ ND

Input

[h k l] [k u v w]

Input

phi1 PHI phi2

Roop

5

Input

	Calc result	Vf(%)	Sch	S*Vf/
{0 0 1}<1 0 0>	15.54			
{0 1 3}<1 0 0>	13.28			
{3 2 6}<-10 -12 9>	14.5			
{1 1 0}<-1 -1 2>	7.59			
{1 1 0}<0 0 1>	7.81			
{1 1 0}<-1 -1 1>	7.98			
{1 3 2}<-6 -4 3>	1.63			
{2 3 1}<-3 -4 6>	8.75			
{2 3 1}<-3 4 -6>	8.76			
{2 1 3}<-3 -6 4>	3.87			
sum-volumefraction=	89.71%			
Schmid function($\Sigma S^*Vf/\text{sumVf}$)=		0.44472		

Schmidcalc Symmetry SchmidCalc SchmidFDisp

randomレベルを極力少なくするVF%の計算が必要になります。