

測定データからODF解析の体験

2018年11月18日

HelperTex Office

概要

L a b o T e x によるODF解析の体験、T e x T o o l s によるODF解析の体験として、デモソフトウェアを紹介してきましたが、実際の測定データによるODF解析を紹介します。実際の測定データは、皆さんが測定したデータでも構いませんが、今回はアルミニウムの実測データを用いて説明します。

XRD測定では、光学系の補正用に r a n d o m データが必要になりますが、無配向試料は得るのが難しいので、粉末試料で代用します。

データは、CTRソフトウェア付属の粉末試料測定データと、配向試料を持ちます。

使用するODFソフトウェアはCTRソフトウェア付属のCTR ODFソフトウェアを使用します。

CTRソフトウェアの入手方法

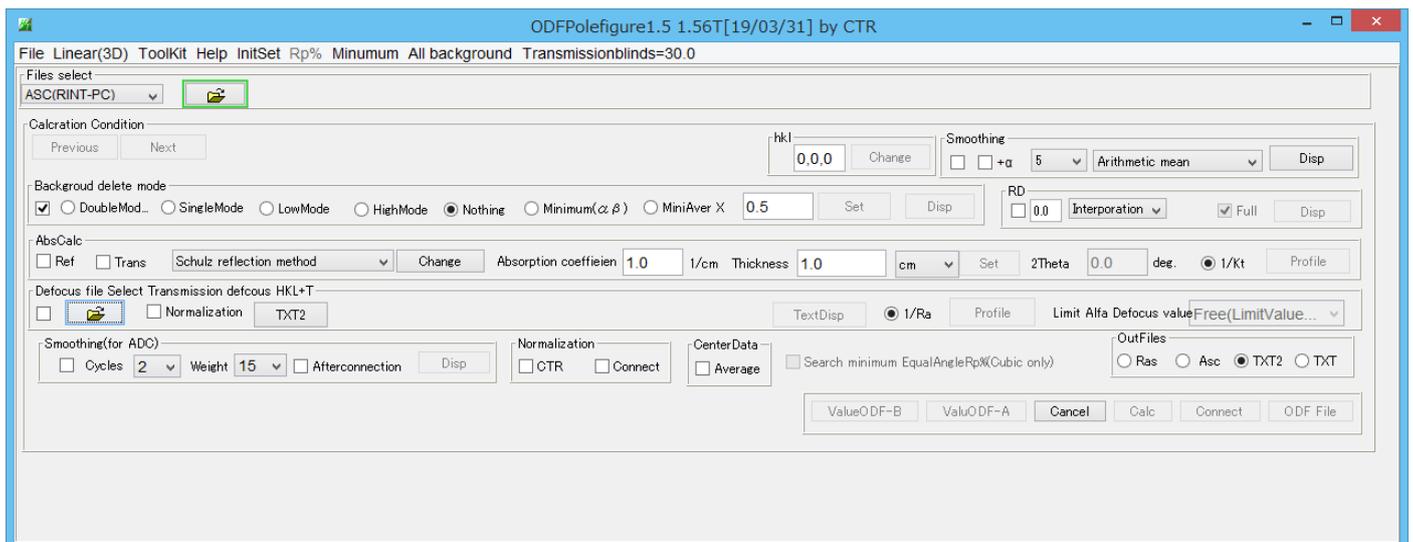
<http://helpertex.sakura.ne.jp/CTR-download.pdf>

CTRソフトウェア d o w n l o a d

<http://helpertex.sakura.ne.jp/HelperTexOffice/CTR.zip>

CTRソフトウェアをセットアップ確認後

C:\¥CTR¥bin¥ODFPoleFigure1_5.jar を立ち上げます。

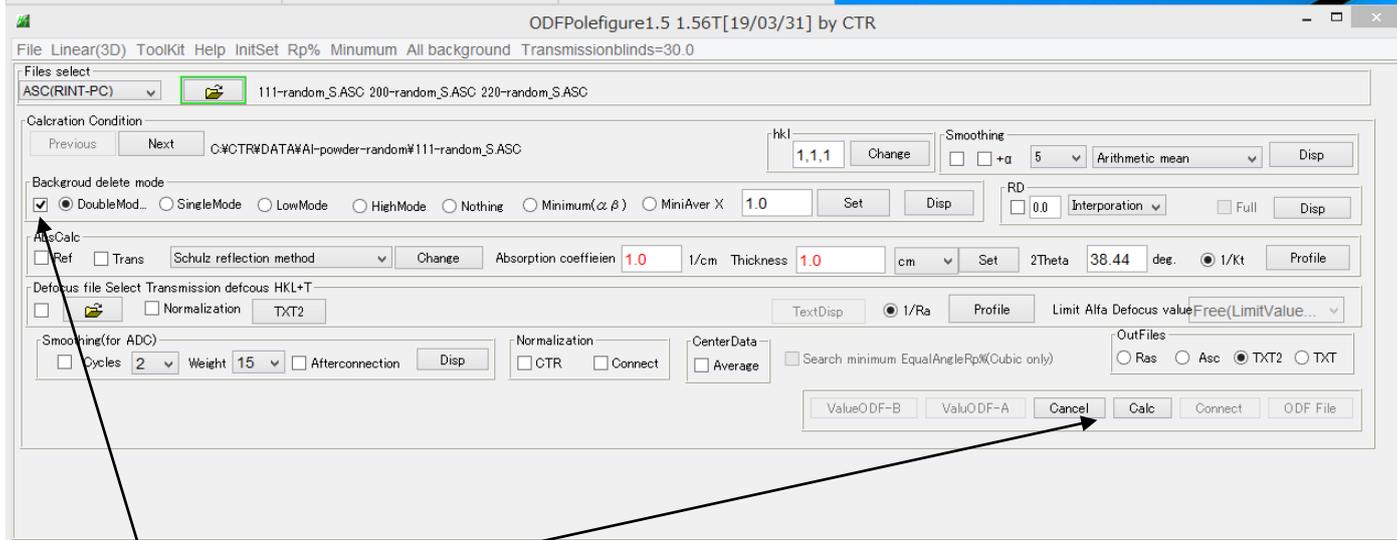
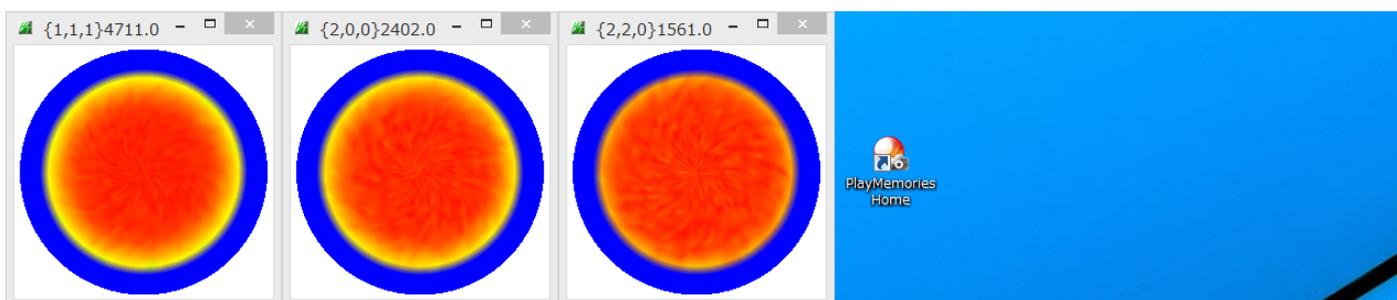
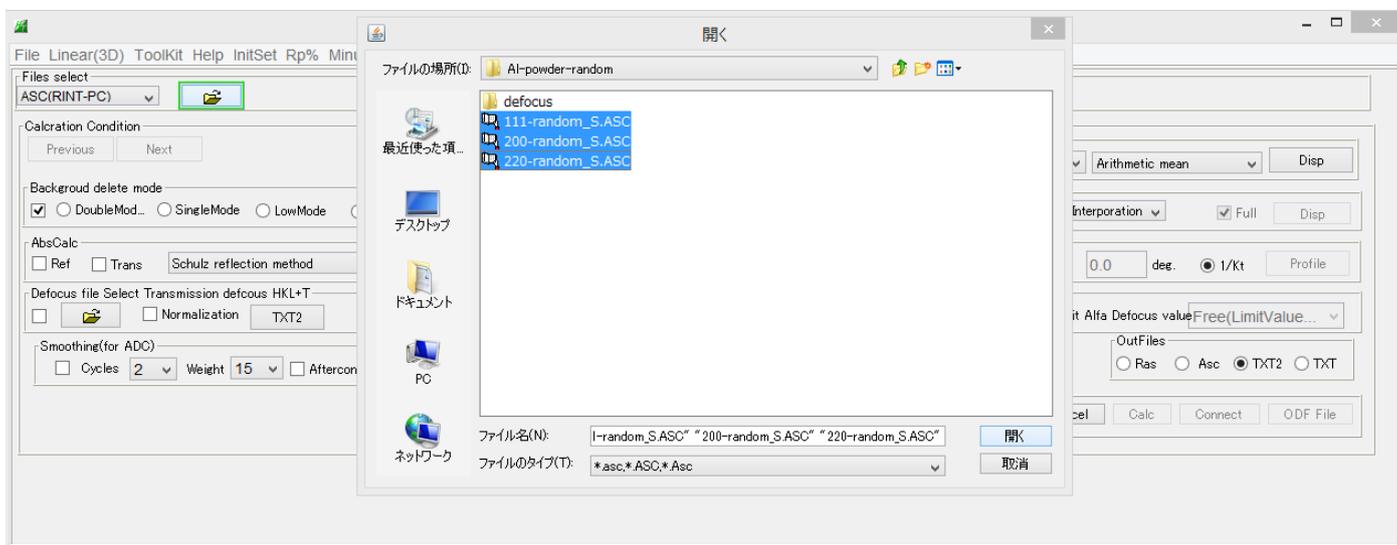


randomデータによるdefocusファイルを作成

使用するデータ C:\¥CTR¥DATA¥Al-powder-random¥のデータ

Win-8 (C:) > CTR > DATA > Al-powder-random

名前	更新日時	種類	サイズ
111-random_S.ASC	2018/10/22 11:45	RINT20007ｽｷ-	22 KB
200-random_S.ASC	2018/10/22 11:45	RINT20007ｽｷ-	22 KB
220-random_S.ASC	2018/10/22 11:45	RINT20007ｽｷ-	22 KB



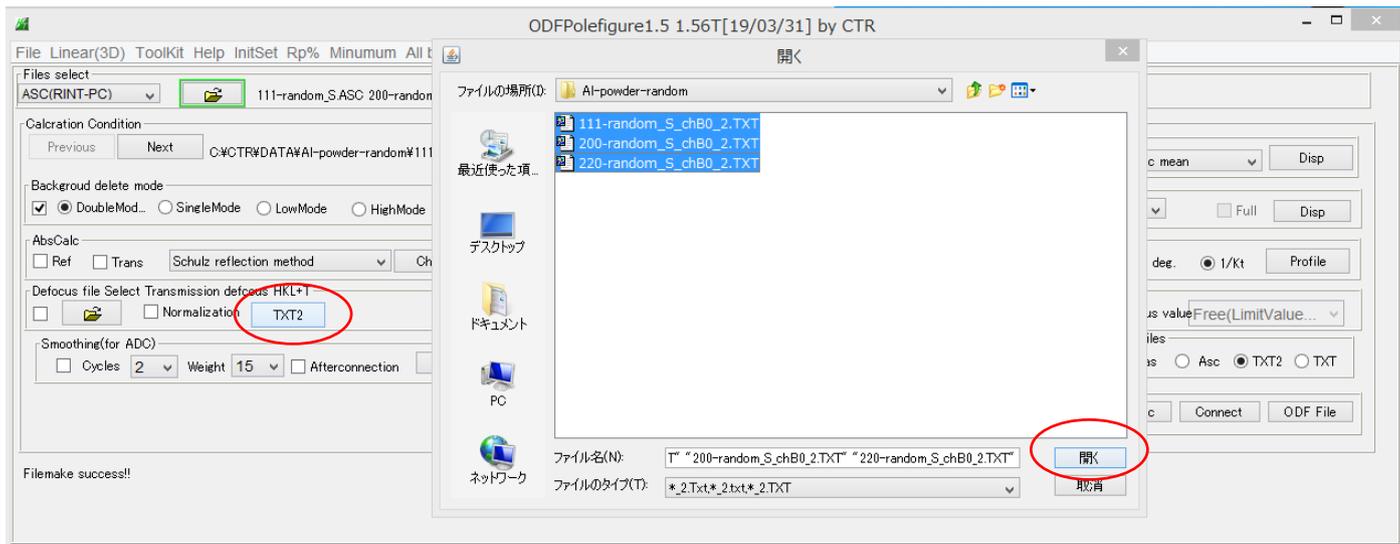
バックグラウンド削除を指定し、Calc

バックグラウンドを削除したTXT2ファイルが作成される。

Win-8 (C:) > CTR > DATA > Al-powder-random

名前	更新日時	種類	サイズ
111-random_S_chB0_2.TXT	2018/11/18 19:46	テキスト文書	29 KB
200-random_S_chB0_2.TXT	2018/11/18 19:46	テキスト文書	29 KB
220-random_S_chB0_2.TXT	2018/11/18 19:46	テキスト文書	29 KB
SLITTTTHETAFILE	2018/11/18 19:46	ファイル	1 KB
111-random_S.ASC	2018/10/22 11:45	RINT20007ｽｷｰ	22 KB
200-random_S.ASC	2018/10/22 11:45	RINT20007ｽｷｰ	22 KB
220-random_S.ASC	2018/10/22 11:45	RINT20007ｽｷｰ	22 KB

TXT2ファイルをdefocusとして登録



defocusファイルが登録されます。



Win-8 (C:) > CTR > DATA > Al-powder-random

名前	更新日時	種類	サイズ
111-random_S_chB0_2.TXT	2018/11/18 19:46	テキスト文書	29 KB
200-random_S_chB0_2.TXT	2018/11/18 19:46	テキスト文書	29 KB
220-random_S_chB0_2.TXT	2018/11/18 19:46	テキスト文書	29 KB
SLITTTTHETAFILE	2018/11/18 19:46	ファイル	1 KB
111-random_S.ASC	2018/10/22 11:45	RINT20007ｽｷｰ	22 KB
200-random_S.ASC	2018/10/22 11:45	RINT20007ｽｷｰ	22 KB
220-random_S.ASC	2018/10/22 11:45	RINT20007ｽｷｰ	22 KB
defocus	2018/11/18 19:49	ファイル フォルダー	

Win-8 (C:) > CTR > DATA > Al-powder-random > defocus

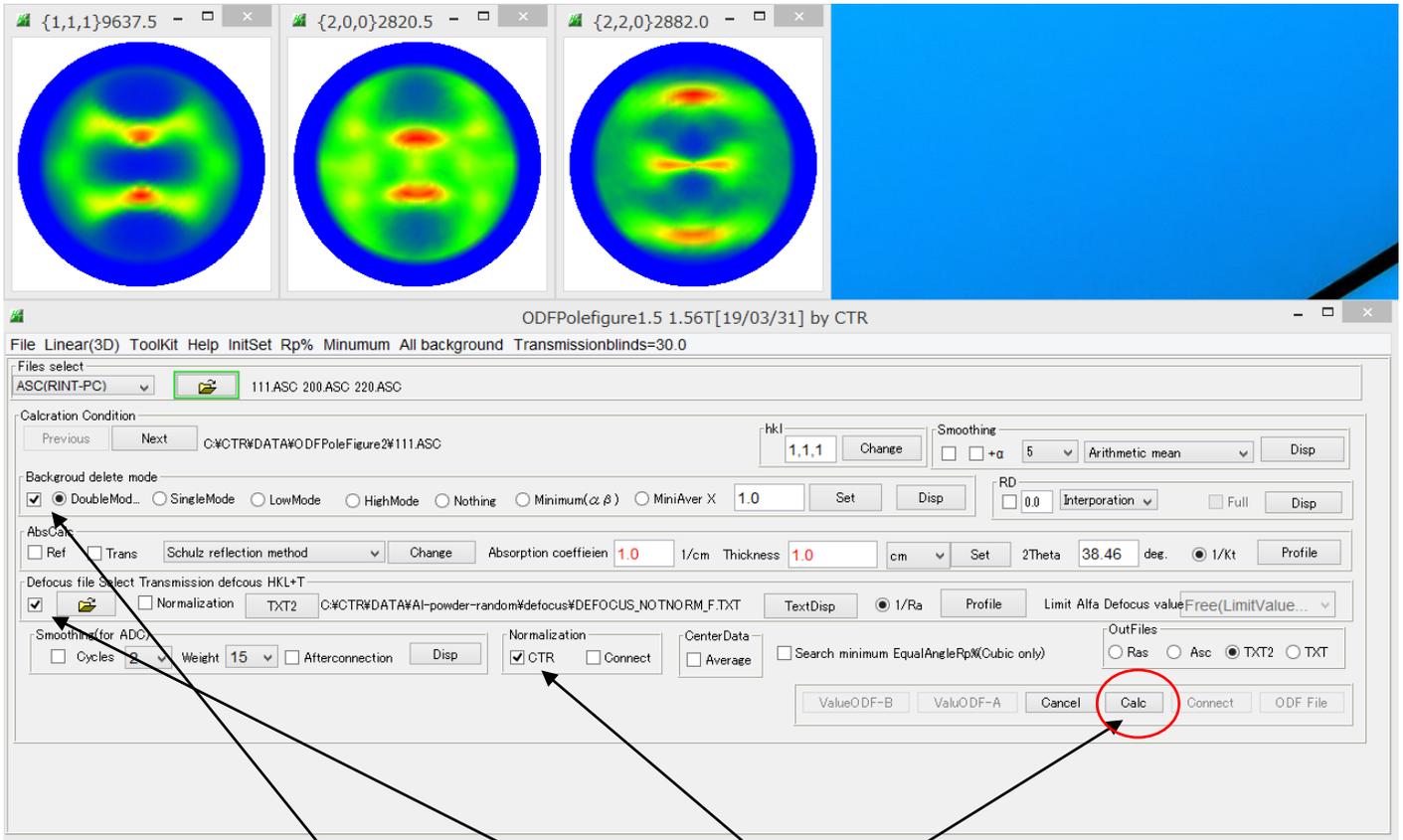
名前	更新日時	種類	サイズ
0_1F.TXT	2018/11/18 19:49	テキスト文書	1 KB
1_1F.TXT	2018/11/18 19:49	テキスト文書	1 KB
2_1F.TXT	2018/11/18 19:49	テキスト文書	1 KB
DEFOCUS_NOTNORM_F.TXT	2018/11/18 19:49	テキスト文書	1 KB
real0_1F.TXT	2018/11/18 19:49	テキスト文書	1 KB
real1_1F.TXT	2018/11/18 19:49	テキスト文書	1 KB
real2_1F.TXT	2018/11/18 19:49	テキスト文書	1 KB

配向試料の極点処理

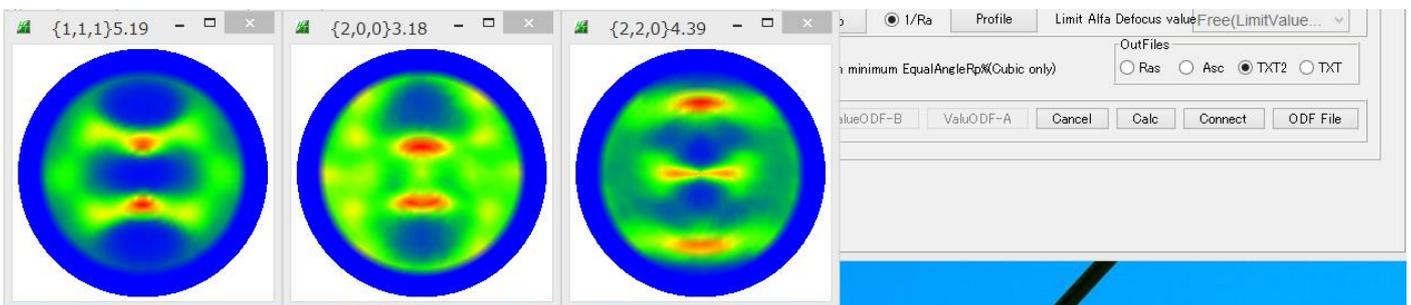
使用するデータ C:\CTR\DATA\ODFPoleFigure2\のデータ

Win-8 (C:) > CTR > DATA > ODFPoleFigure2

名前	更新日時	種類	サイズ
111.ASC	2018/10/22 11:45	RINT20007ｽｷ-	22 KB
200.ASC	2018/10/22 11:45	RINT20007ｽｷ-	22 KB
220.ASC	2018/10/22 11:45	RINT20007ｽｷ-	22 KB
311.ASC	2018/10/22 11:45	RINT20007ｽｷ-	22 KB



極点処理は、バックグラウンド除去、defocus補正、規格化でCalc random試料もバルク材なら規格化なし



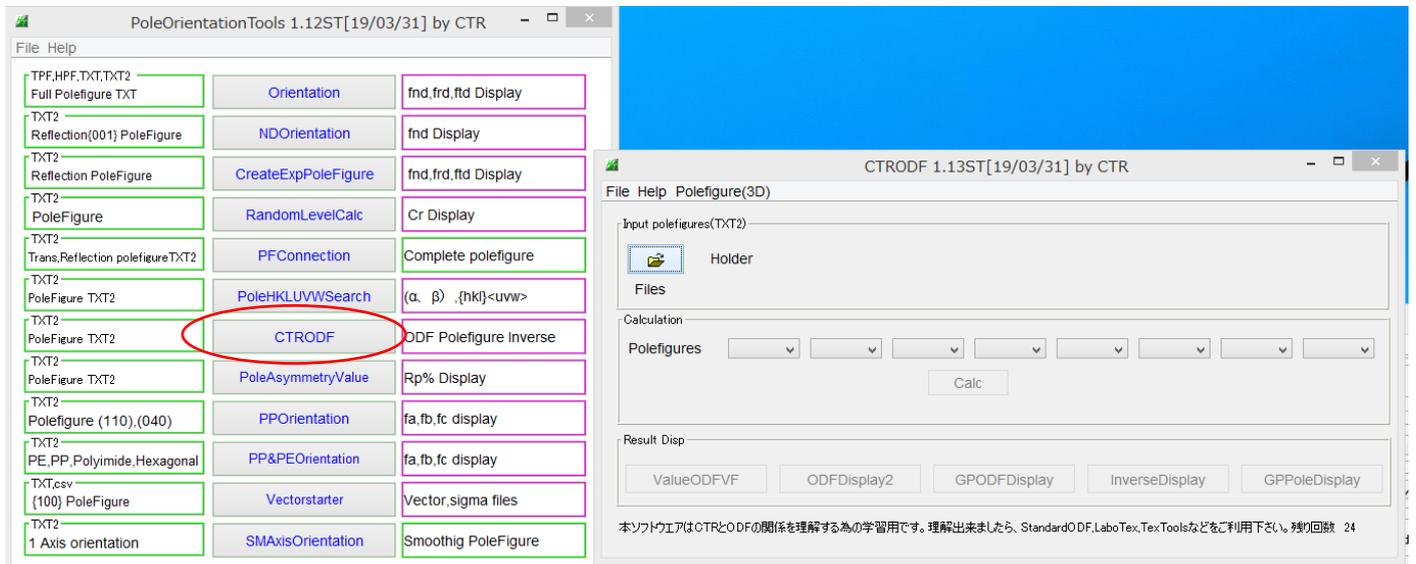
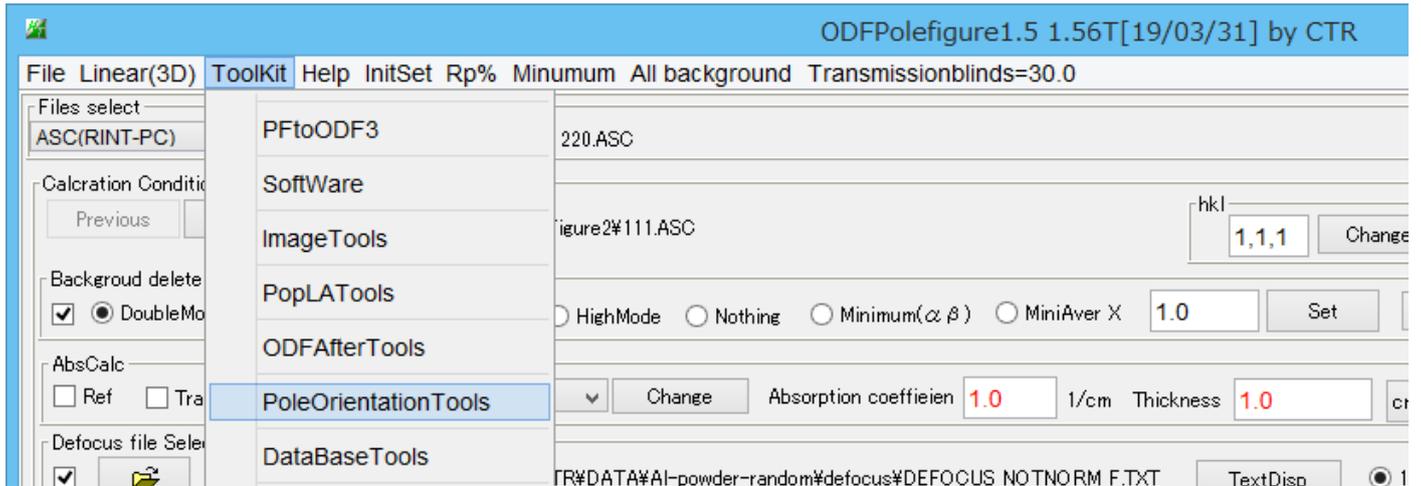
TXT2fファイルが作成され、TXT2がCTRODFの入力データ

Win-8 (C:) > CTR > DATA > ODFPoleFigure2

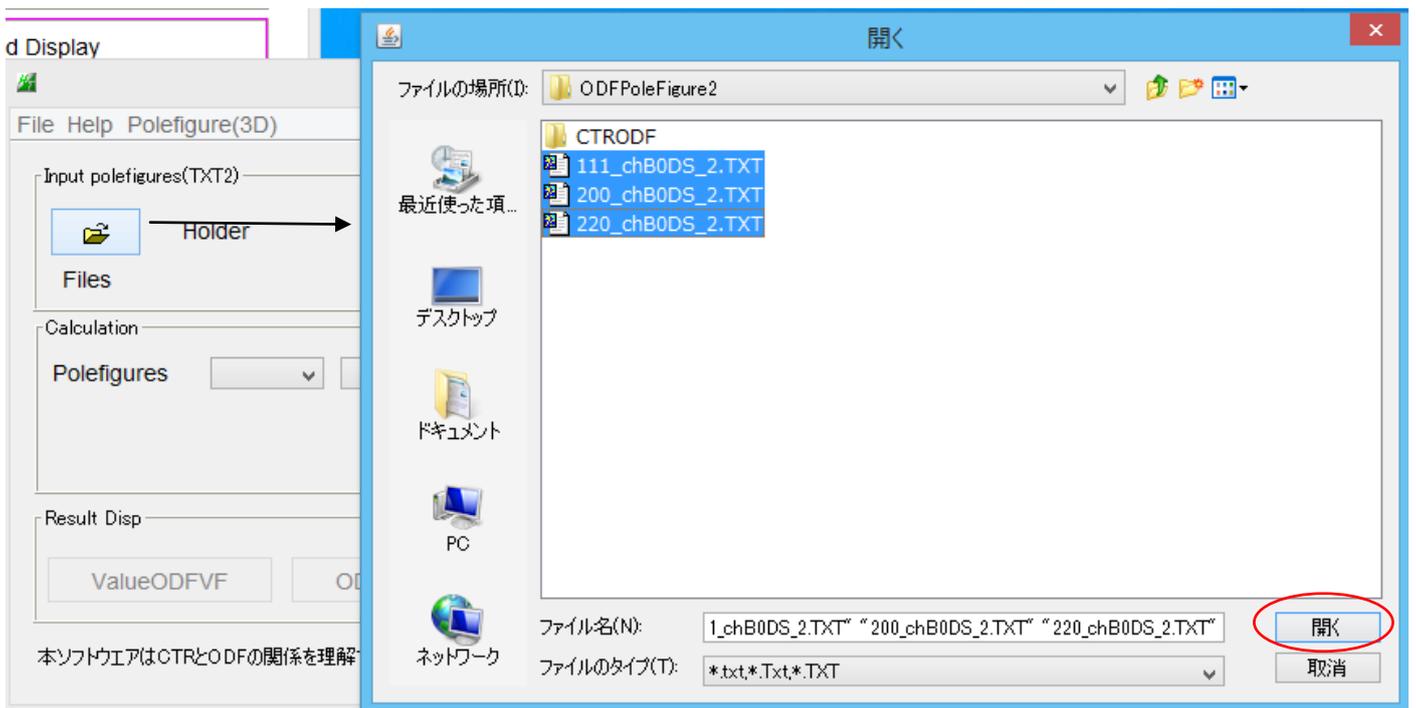
名前	更新日時	種類	サイズ
111_chB0DS_2.TXT	2018/11/18 19:59	テキスト文書	26 KB
200_chB0DS_2.TXT	2018/11/18 19:59	テキスト文書	26 KB
220_chB0DS_2.TXT	2018/11/18 19:59	テキスト文書	26 KB
111.ASC	2018/10/22 11:45	RINT20007ｽｷ-	22 KB
200.ASC	2018/10/22 11:45	RINT20007ｽｷ-	22 KB
220.ASC	2018/10/22 11:45	RINT20007ｽｷ-	22 KB

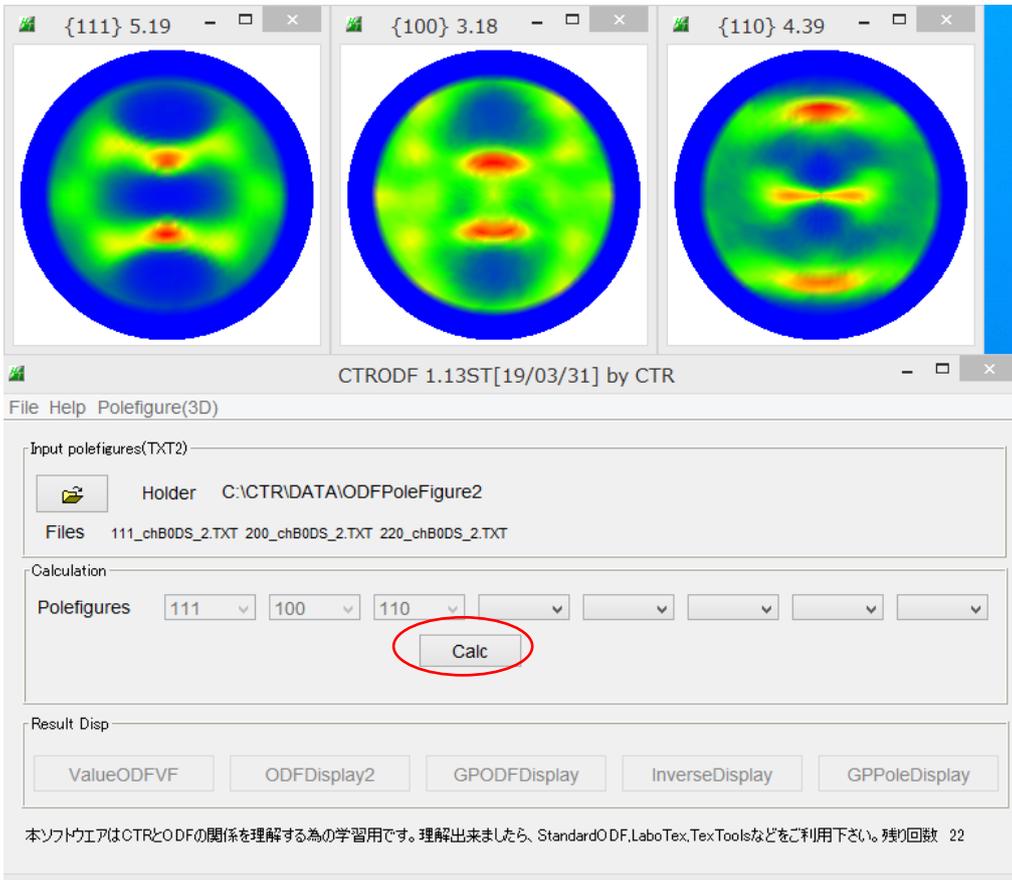
CTRODFソフトウェアを使う。

ODFPoleFigure1_5->Toolkit->PoleOrientation を選択

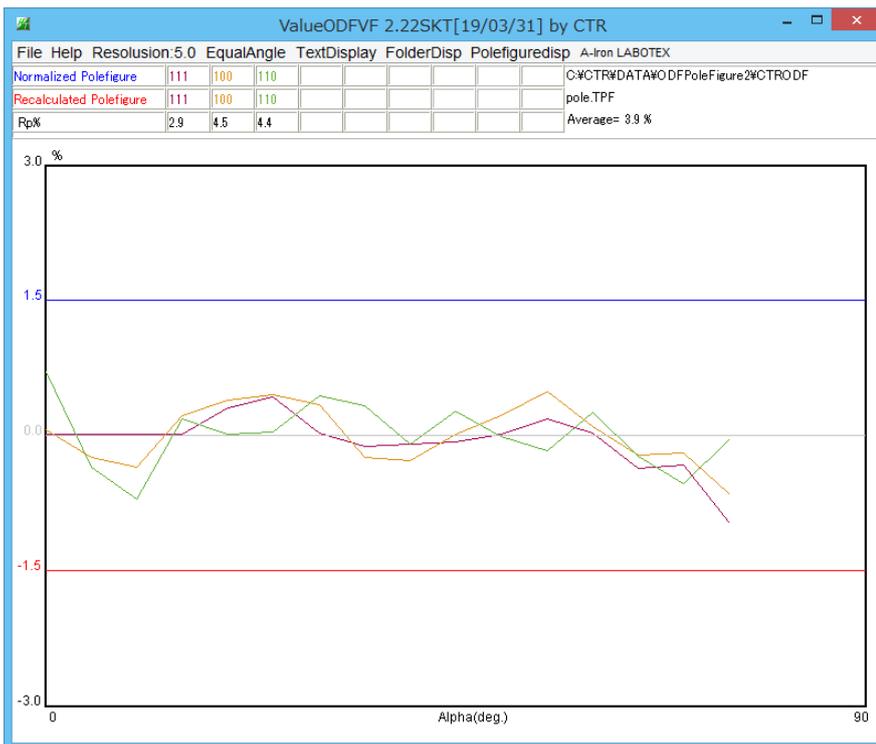
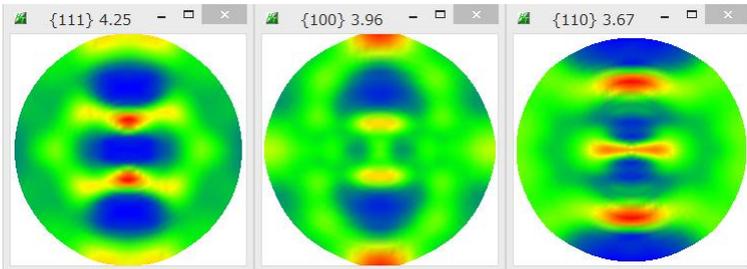


先ほどのTXT2を選択





再計算極点図と入力極点図の Error Rp%が表示される。



Normalized Polefigure	{111}	{100}	{110}
Normalized Polefigure	111	100	110
Recalculated Polefigure	111	100	110
Rp%	2.9	4.5	4.4

C:\CTR\DATA\ODFPoleFigure2\CTRODF
pole.TPF
Average= 3.9 %

各プロファイルが±1.5%以内
平均値が3.9%と
正確に測定、補正されたデータ

解析結果

解析結果

入力データホルダにCTRODFホルダが作成され結果がテキストファイルで作成される。

Win-8 (C:) > CTR > DATA > ODFPoleFigure2 > CTRODF

名前	更新日時	種類	サイズ
100_RCALC_2.TXT	2018/11/18 20:13	テキスト文書	42 KB
110_RCALC_2.TXT	2018/11/18 20:13	テキスト文書	42 KB
111_RCALC_2.TXT	2018/11/18 20:13	テキスト文書	42 KB
ODF.TXT	2018/11/18 20:13	テキスト文書	235 KB
Inverse.TPF	2018/11/18 20:13	TPF ファイル	150 KB
Pole.TPF	2018/11/18 20:13	TPF ファイル	14 KB

再計算極点図、ODF 図、逆極点図、極点図のまとめ

再計算極点図

0.0	0.0	3.9577245712280273↓
0.0	5.0	3.5899815559387207↓
0.0	10.0	2.7353854179382324↓
0.0	15.0	1.8896912336349487↓
0.0	20.0	1.3339238166809082↓
0.0	25.0	1.0221173763275146↓
0.0	30.0	0.8616023659706116↓
0.0	35.0	0.8301683664321899↓
0.0	40.0	0.8436076045036316↓
0.0	45.0	0.8072337508201599↓
0.0	50.0	0.7415353059768677↓
0.0	55.0	0.6741474270820618↓
0.0	60.0	0.5909333229064941↓
0.0	65.0	0.5592942237854004↓
0.0	70.0	0.6669743061065674↓
0.0	75.0	0.9011054635047913↓
0.0	80.0	1.2316802740097046↓
0.0	85.0	1.5914888381958008↓
0.0	90.0	1.761447787284851↓

ODF 図

PHI1	PHI2	PHI	ODF↓
0.0	0.0	0.0	5.060009002685547↓
5.0	0.0	0.0	4.272562026977539↓
10.0	0.0	0.0	2.6057565212249756↓
15.0	0.0	0.0	1.2645498514175415↓
20.0	0.0	0.0	0.653075098991394↓
25.0	0.0	0.0	0.39036476612091064↓
30.0	0.0	0.0	0.16247227787971497↓
35.0	0.0	0.0	0.006380543112754822↓
40.0	0.0	0.0	-0.02081833779811859↓
45.0	0.0	0.0	-0.00673288106918335↓
50.0	0.0	0.0	-0.02081817388534546↓
55.0	0.0	0.0	0.006380394101142883↓
60.0	0.0	0.0	0.1624719500541687↓
65.0	0.0	0.0	0.3903646767139435↓
70.0	0.0	0.0	0.6530752778053284↓
75.0	0.0	0.0	1.264549970626831↓
80.0	0.0	0.0	2.6057565212249756↓
85.0	0.0	0.0	4.2725605964660645↓
90.0	0.0	0.0	5.060009002685547↓
0.0	5.0	0.0	4.272562026977539↓
5.0	5.0	0.0	2.605756998062134↓

逆極点図

INVERSE POLE FIGURE

1.	0.0	1.0	2.0	3.0	4.0	5.0	6.0	7.0
0.0	1.31	1.31	1.31	1.31	1.31	1.31	1.31	1.31
1.0	1.31	1.31	1.31	1.31	1.31	1.31	1.31	1.31
2.0	1.31	1.31	1.31	1.31	1.31	1.31	1.31	1.31
3.0	1.3	1.3	1.3	1.3	1.3	1.3	1.3	1.3
4.0	1.29	1.29	1.29	1.29	1.29	1.29	1.29	1.29
5.0	1.27	1.27	1.27	1.27	1.27	1.27	1.27	1.27
6.0	1.25	1.25	1.25	1.25	1.25	1.25	1.25	1.25
7.0	1.22	1.22	1.22	1.22	1.22	1.22	1.22	1.22
8.0	1.18	1.18	1.18	1.18	1.18	1.18	1.18	1.18
9.0	1.14	1.14	1.14	1.14	1.14	1.14	1.14	1.14
10.0	1.1	1.1	1.1	1.1	1.1	1.1	1.1	1.1

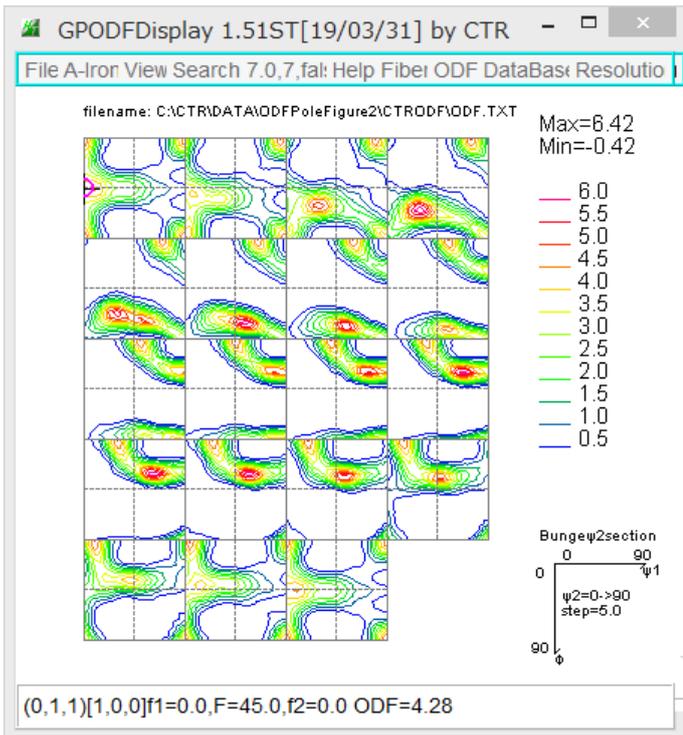
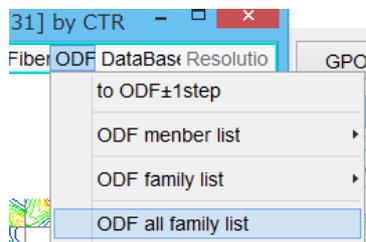
極点図まとめ

EXPERIMENTAL - NORMALIZED POLE FIGURE

111.	0.0	5.0	10.0	15.0	20.0	25.0	30.0	35.0	40.0	45.0
0.0	0.06	0.06	0.06	0.06	0.05	0.06	0.06	0.06	0.06	0.06
5.0	0.05	0.06	0.06	0.06	0.06	0.06	0.06	0.06	0.06	0.06
10.0	0.11	0.12	0.11	0.11	0.1	0.1	0.1	0.1	0.09	0.09
15.0	0.38	0.36	0.34	0.32	0.29	0.25	0.22	0.2	0.17	0.16
20.0	1.58	1.54	1.44	1.27	1.06	0.85	0.67	0.52	0.41	0.31
25.0	4.08	3.97	3.7	3.22	2.7	2.16	1.65	1.26	0.94	0.71
30.0	4.66	4.57	4.33	3.96	3.51	2.96	2.44	1.94	1.52	1.16
35.0	3.02	3.07	3.07	3.08	3.03	2.84	2.59	2.23	1.83	1.41
40.0	1.02	1.08	1.21	1.45	1.77	2.11	2.36	2.38	2.16	1.8
45.0	0.24	0.26	0.3	0.4	0.64	1.06	1.63	2.21	2.43	2.27

ODF 図

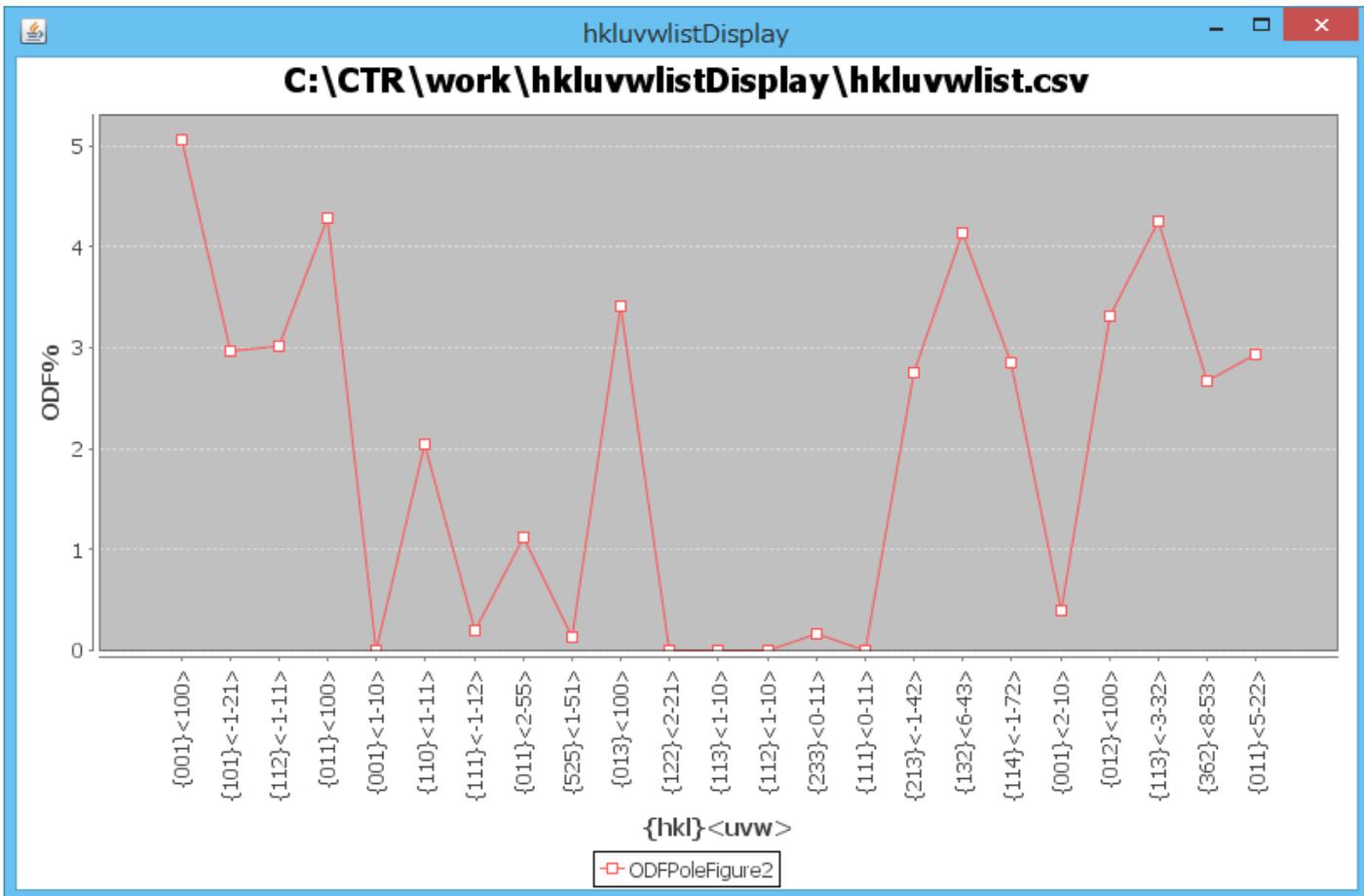
GPODFDisplay



```

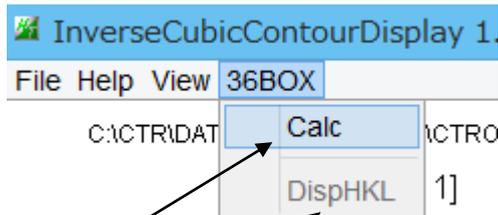
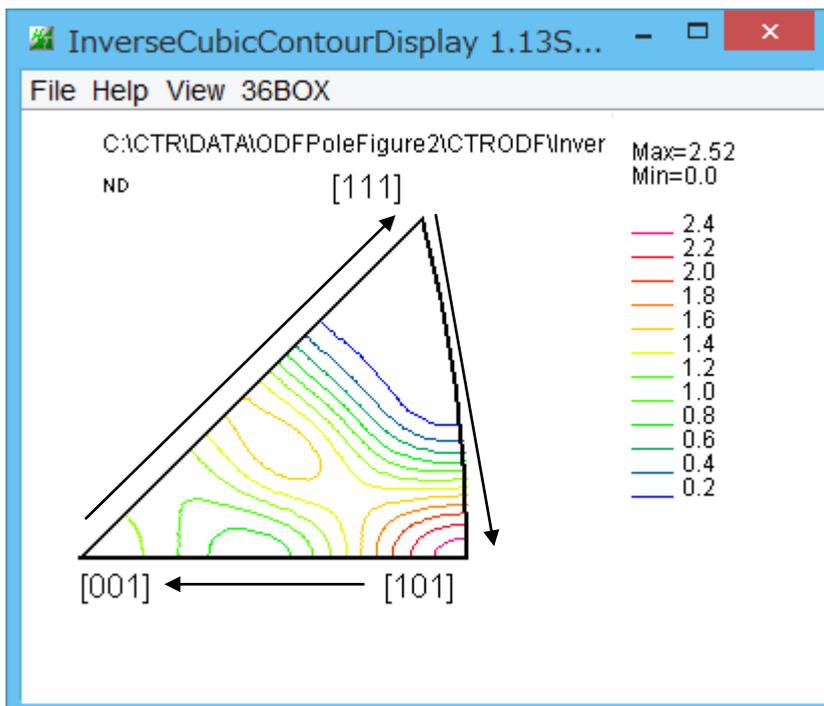
{hkl}<uvw>,labotex
{001}<100>,5.06
{101}<-1-21>,2.96
{112}<-1-11>,3.02
{011}<100>,4.28
{001}<1-10>,0.0
{110}<1-11>,2.04
{111}<-1-12>,0.2
{011}<2-55>,1.12
{525}<1-51>,0.13
{013}<100>,3.41
{122}<2-21>,0.0
{113}<1-10>,0.0
{112}<1-10>,0.0
{233}<0-11>,0.16
{111}<0-11>,0.0
{213}<-1-42>,2.75
{132}<6-43>,4.13
{114}<-1-72>,2.85
{001}<2-10>,0.39
{012}<100>,3.31
{113}<-3-32>,4.25
{362}<8-53>,2.67
{011}<5-22>,2.94
    
```

結晶方位プロファイル表示



逆極点図

InverseDisplay



Calc 後、DispHKL で
HKL プロファイルが表示出来ます。

