

ODF解析比較—StandardODF—TexTools—LaboTex

2020年09月28日

*HelperTex Office*

## 目次

1. 概要
2. 解析
  2. 1 r a n d o m試料が得られない場合
3. 各種ODF向けファイル作成
4. r a n d o m試料が入手できる場合
5. S t a n d a r d O D Fで解析
6. 資料
  6. 1 方位による4 : 2 : 1資料
  6. 2 逆極点図36BOX
7. T e x T o o l s 計算
8. L a b o T e x で解析
9. S t a n d a r d O D F, T e x T o o l s, L a b o T e x の方位密度比較
10. L a b o T e x の V o l u m e F r a c t i o n 計算

## 1. 概要

極点図測定は粒径の影響を考慮してSchulzの反射法で行われる。

この方式の場合、defocusの影響を受けやすいため、defocus補正を行う。

random試料として、sampleと同一の大きさでバルク材が最適であるが得るのが困難な場合があります。入手出来ない場合、粉末試料や粉末試料を固めた代用が行われている。

代用ではパッキングファクタの違いから絶対強度は得られないため、補正後の極点図の最大密度が異なる。

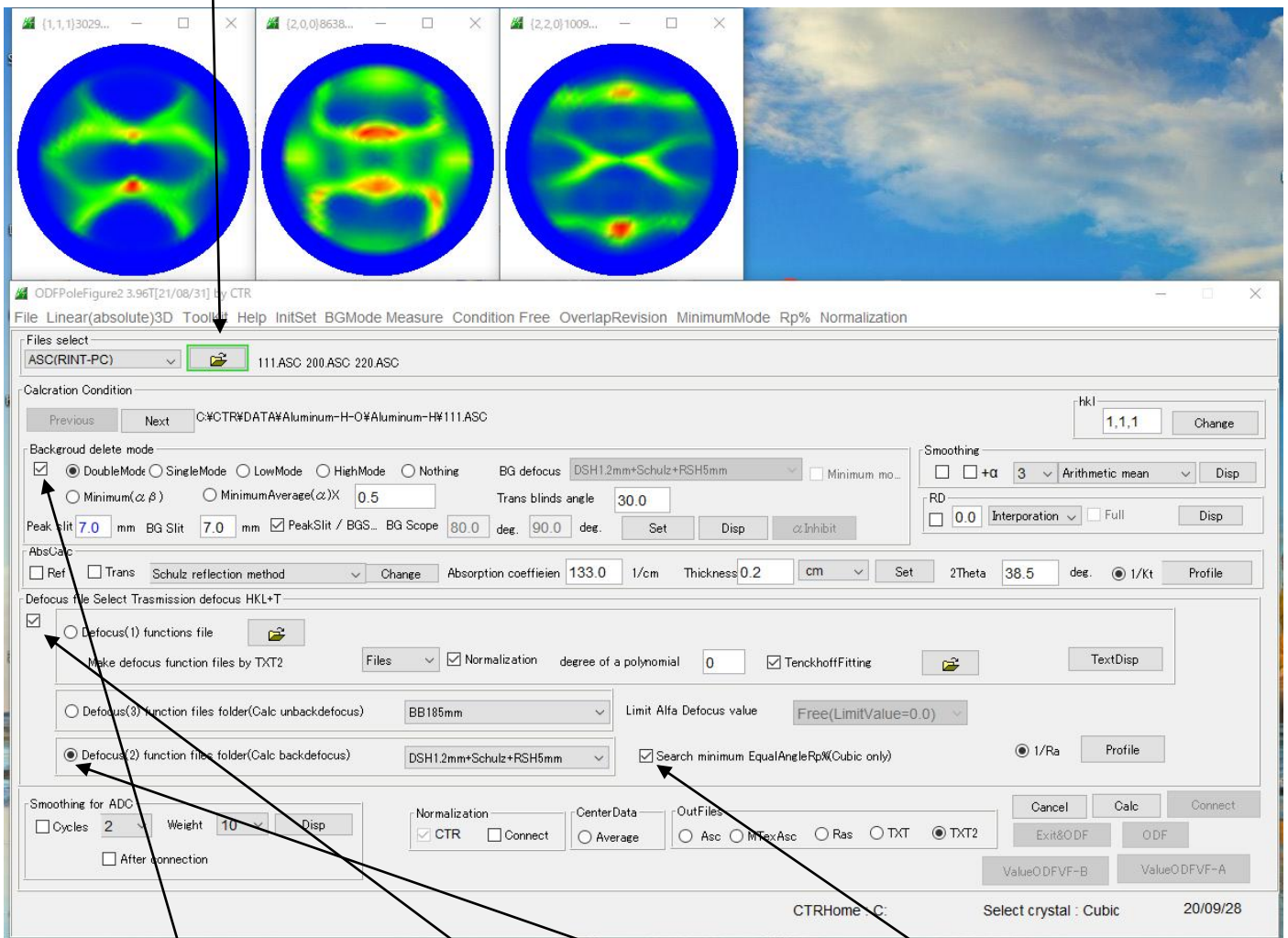
本資料では、defocus補正としてrandomなし、粉末の代用方法を説明し、

各種ODF解析結果の評価法を説明します。

## 2. 解析

### 2.1 random試料が得られない場合

データ選択



バックグラウンド除去

defocus補正 (内部計算)

Rp%の最適化

Rp%とは

$$RP_{\{hkl\}} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left| \frac{\{PF_{exp.}\}_i - \{PF_{calc.}\}_i}{\{PF_{exp.}\}_i} \right| \cdot 100\%$$

where :

$RP_{\{hkl\}}$  - relative error for  $\{hkl\}$  pole figure,

$\{PF_{exp.}\}_i$  - intensity of experimental (corrected and normalized) pole figure in point i,

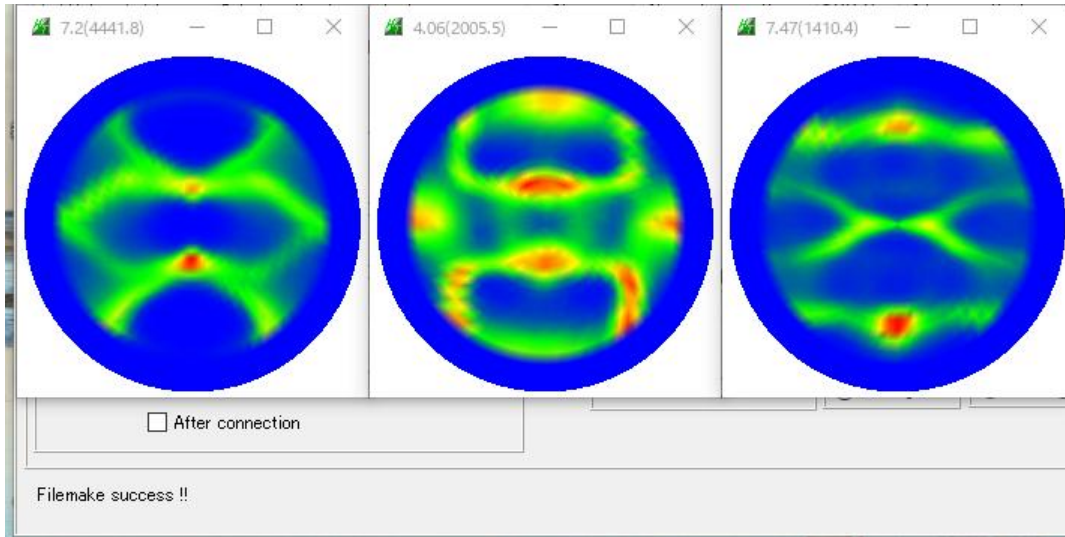
$\{PF_{calc.}\}_i$  - intensity of calculated pole figure in point i,

$N$  - number of measured points on pole figure.

$$RP = \frac{1}{M} \sum_{j=1}^M RP_{\{hkl\}_j}$$

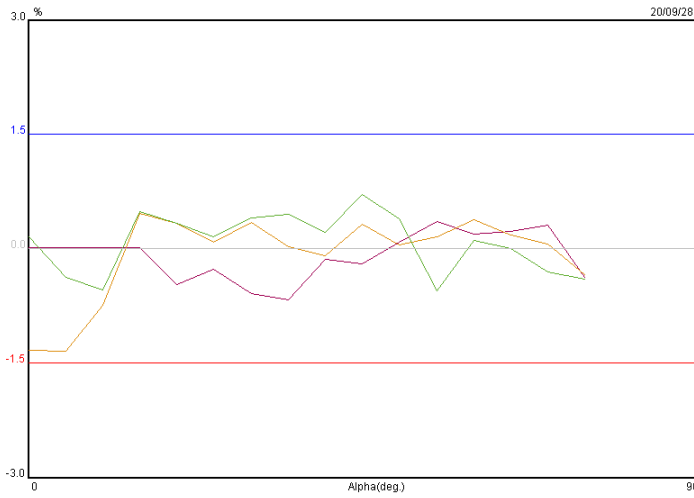
Calc

計算を行う



ValueODFVF-B

Rp%最適化前

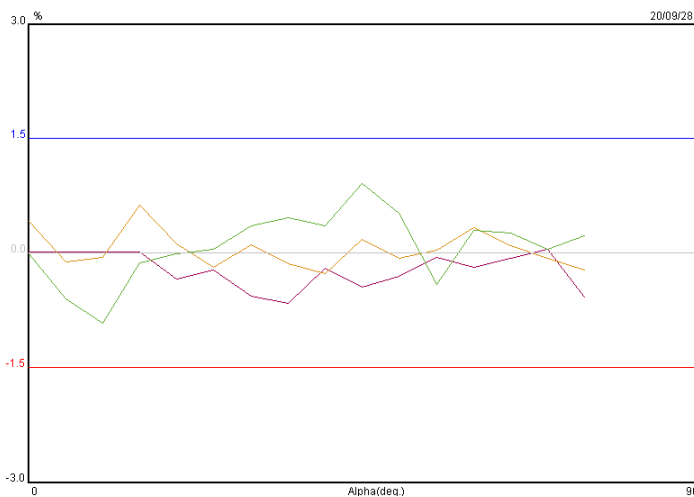


Normalized Polefigure	111	100	110
Recalculated Polefigure	111	100	110
Rp%	3.9	6.2	5.6

Average= 5.2 %

ValueODFVF-A

Rp%最適化後



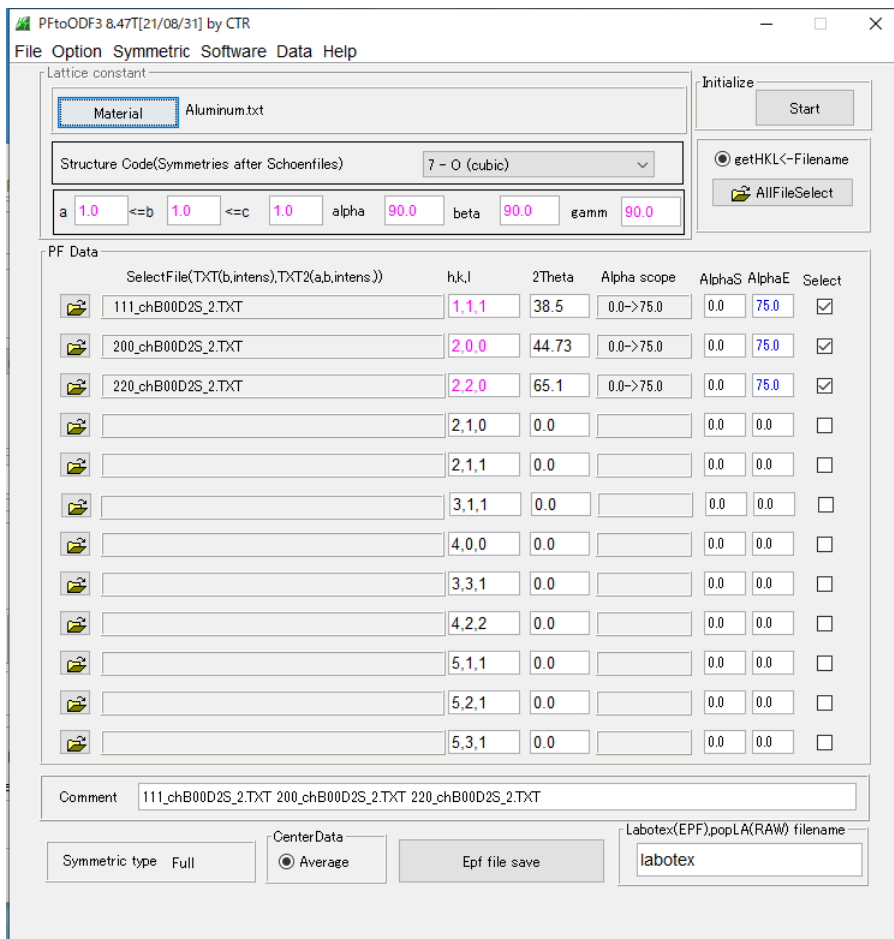
Normalized Polefigure	111	100	110
Recalculated Polefigure	111	100	110
Rp%	3.8	3.0	5.5

Average= 4.1 %

Rp%の最適化で改善があります。改善されない場合、再度 Rp%チェックを外しやり直し

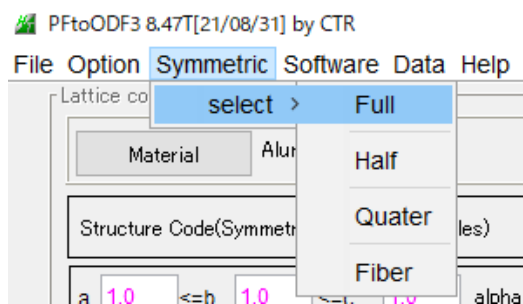
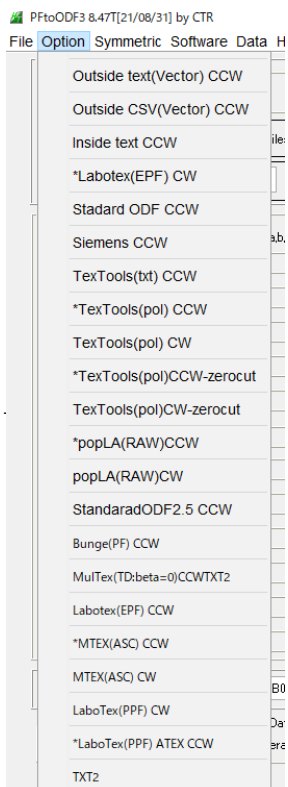
### 3. 各種ODF向けファイル作成

Exit&ODF ODF で ODF 向けファイル作成

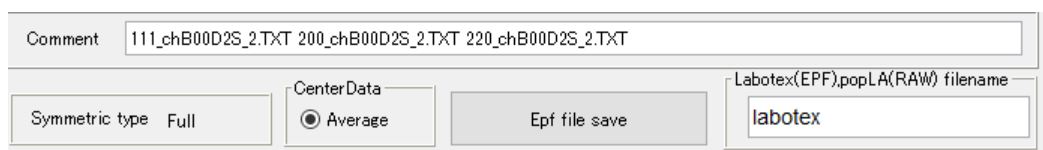


#### ODF の選択

#### 平均化の選択



#### ODF 向けファイル作成

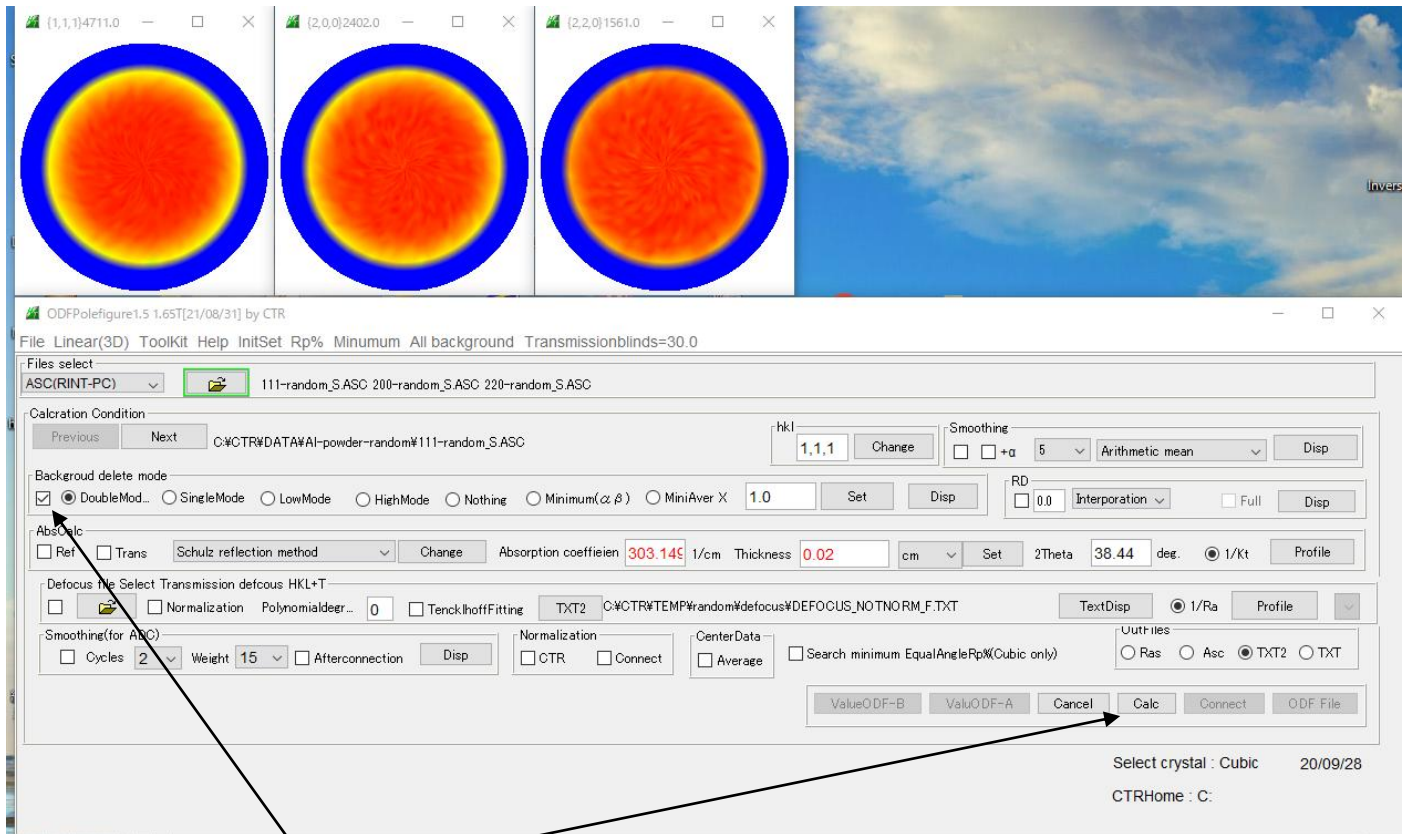


作成されたファイル

> CTR > DATA > Aluminum-H-O > Aluminum-H

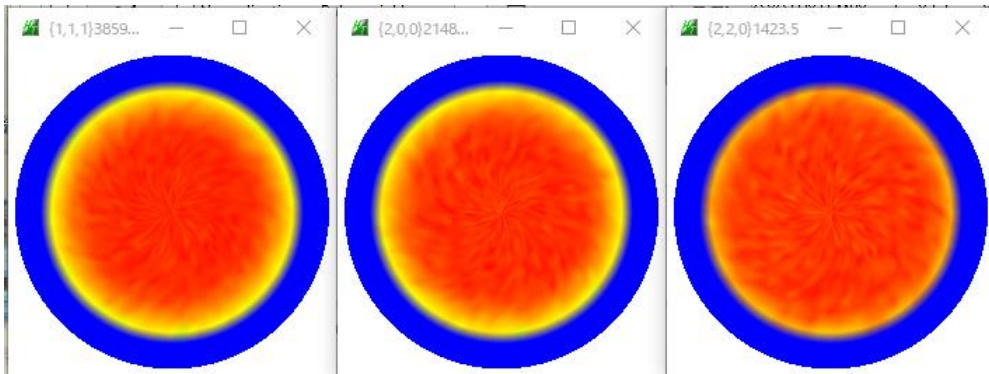
名前	更新日時	種類	サイズ
CTRODF	2020/08/30 1:11	ファイルフォルダー	
LaboTex	2020/08/30 1:11	ファイルフォルダー	
MTEX	2020/08/30 1:11	ファイルフォルダー	
TexTools	2020/08/30 1:11	ファイルフォルダー	
popLA	2020/09/28 6:16	ファイルフォルダー	
StandardODF	2020/09/28 6:16	ファイルフォルダー	
111.ASC	2014/03/15 8:42	RINT20007スキー	22 KB
200.ASC	2014/03/15 8:42	RINT20007スキー	22 KB
220.ASC	2014/03/15 8:42	RINT20007スキー	22 KB
111_chB0DS_2.TXT	2019/02/19 5:03	テキスト文書	26 KB
200_chB0DS_2.TXT	2019/02/19 5:03	テキスト文書	26 KB
220_chB0DS_2.TXT	2019/02/19 5:03	テキスト文書	26 KB
111_chB00D3S_2.TXT	2019/02/19 6:55	テキスト文書	26 KB
200_chB00D3S_2.TXT	2019/02/19 6:55	テキスト文書	26 KB
220_chB00D3S_2.TXT	2019/02/19 6:55	テキスト文書	26 KB
111_chB00D2S_2.TXT	2020/09/28 5:46	テキスト文書	36 KB
200_chB00D2S_2.TXT	2020/09/28 5:46	テキスト文書	36 KB
220_chB00D2S_2.TXT	2020/09/28 5:46	テキスト文書	36 KB

#### 4. random試料が入手できる場合



バックグラウンド削除のみを行う

**Calc** で計算



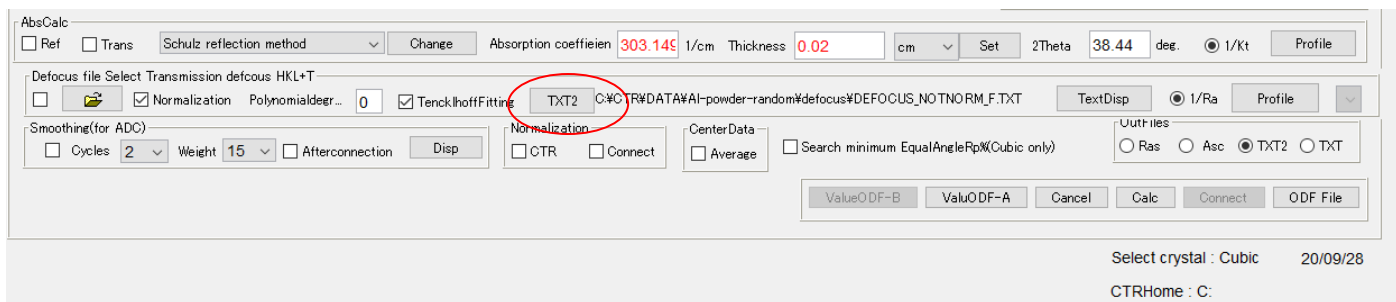
バックグラウンドを削除されたTXT2ファイル

> CTR > DATA > Al-powder-random

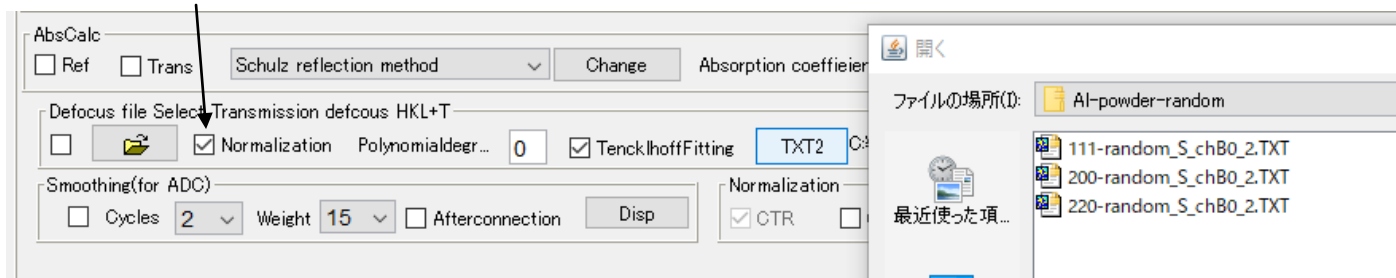
名前	更新日時	種類	サイズ
111-random_S.ASC	2016/02/27 15:05	RINT20007ス...	22 KB
200-random_S.ASC	2016/02/27 15:07	RINT20007ス...	22 KB
220-random_S.ASC	2016/02/27 15:10	RINT20007ス...	22 KB
111-random_S_chB0_2.TXT	2020/09/28 6:22	テキスト文書	29 KB
200-random_S_chB0_2.TXT	2020/09/28 6:22	テキスト文書	29 KB
220-random_S_chB0_2.TXT	2020/09/28 6:22	テキスト文書	29 KB



# TXT2からdefocus曲線作成



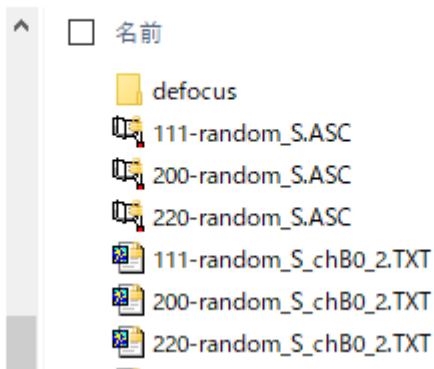
粉末の場合指定（バルクは指定しない）



曲線が登録されます。



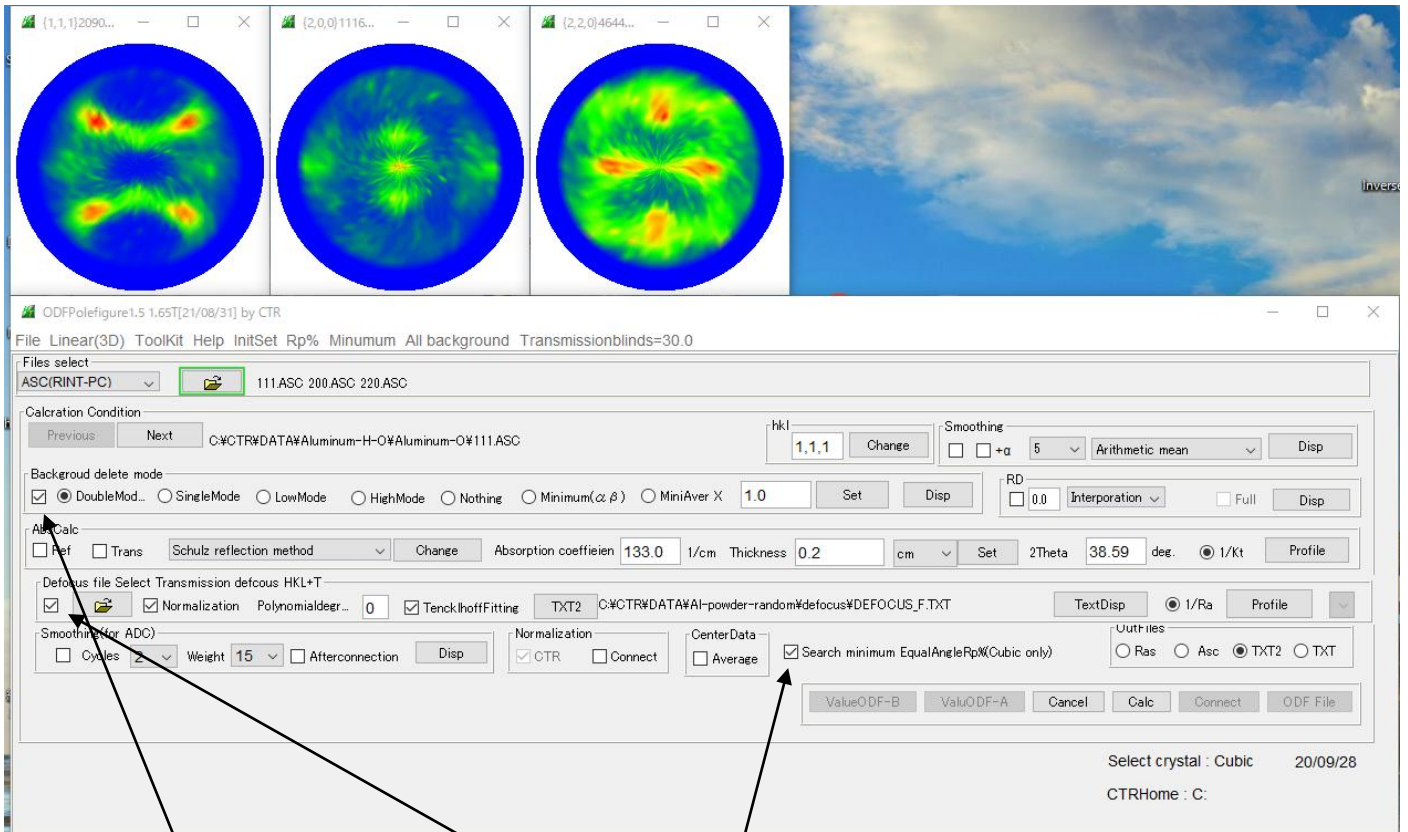
CTR > DATA > AI-powder-random



CTR > DATA > AI-powder-random > defocus

名前	更新日時	種類	サイズ
0_1F.TXT	2020/09/28 6:29	テキスト文書	1 KB
1_1F.TXT	2020/09/28 6:29	テキスト文書	1 KB
2_1F.TXT	2020/09/28 6:29	テキスト文書	1 KB
DEFOCUS_F.TXT	2020/09/28 6:29	テキスト文書	2 KB
real0_1F.TXT	2020/09/28 6:29	テキスト文書	1 KB
real1_1F.TXT	2020/09/28 6:29	テキスト文書	1 KB
real2_1F.TXT	2020/09/28 6:29	テキスト文書	1 KB

random試料を用いた極点処理

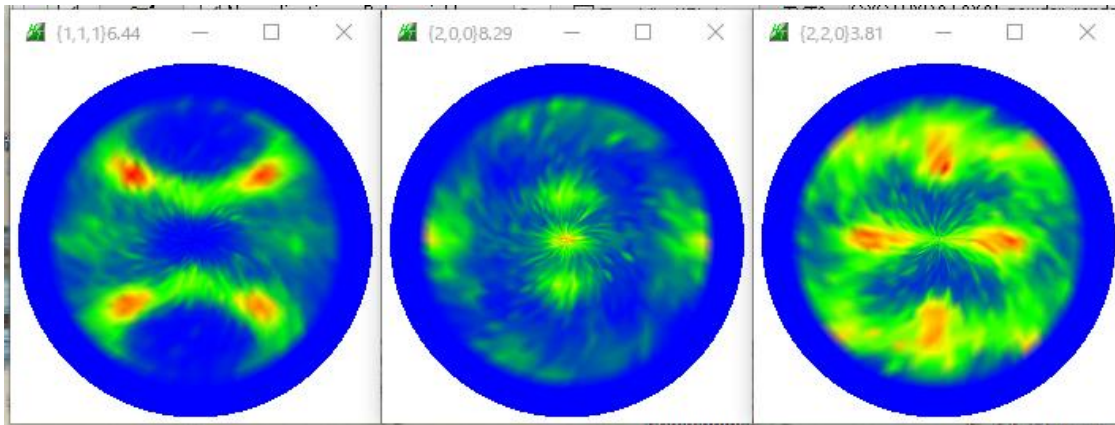


バックグラウンド除去

defocus補正

Rp%の最適化

処理結果

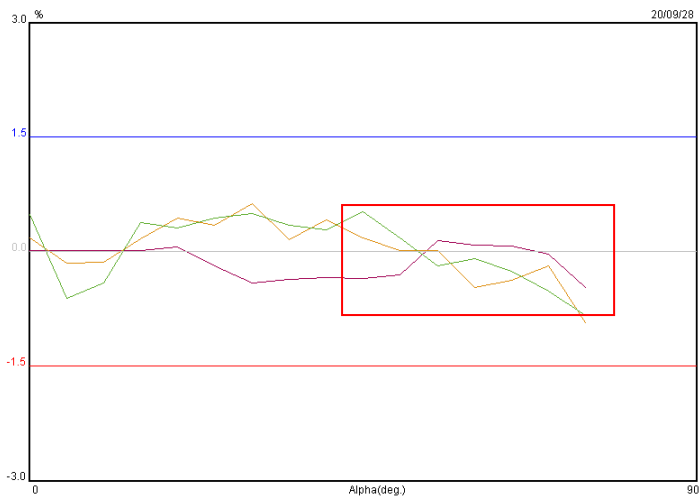


CTR > DATA > Aluminum-H-O > Aluminum-O

更新日時	名前	種類	サイズ
2014/03/...	111.ASC	RINT20007ス...	22 KB
2014/03/...	200.ASC	RINT20007ス...	23 KB
2014/03/...	220.ASC	RINT20007ス...	22 KB
2020/09/...	111_chB0DS_2.TXT	テキスト文書	36 KB
2020/09/...	200_chB0DS_2.TXT	テキスト文書	35 KB
2020/09/...	220_chB0DS_2.TXT	テキスト文書	35 KB

random補正のRp%最適化前確認

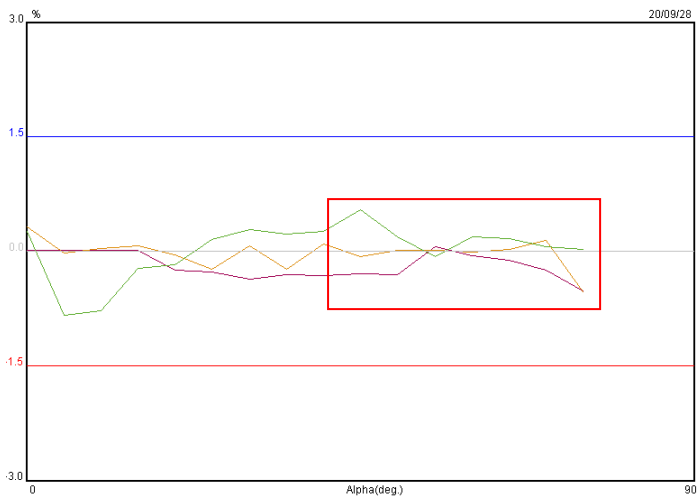
ValueODF-B



Normalized Polefigure	111	100	110
Recalculated Polefigure	111	100	110
Rp%	2.9	4.7	6.3

random補正のRp%最適化後確認

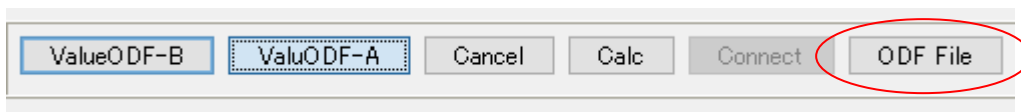
ValueODF-A



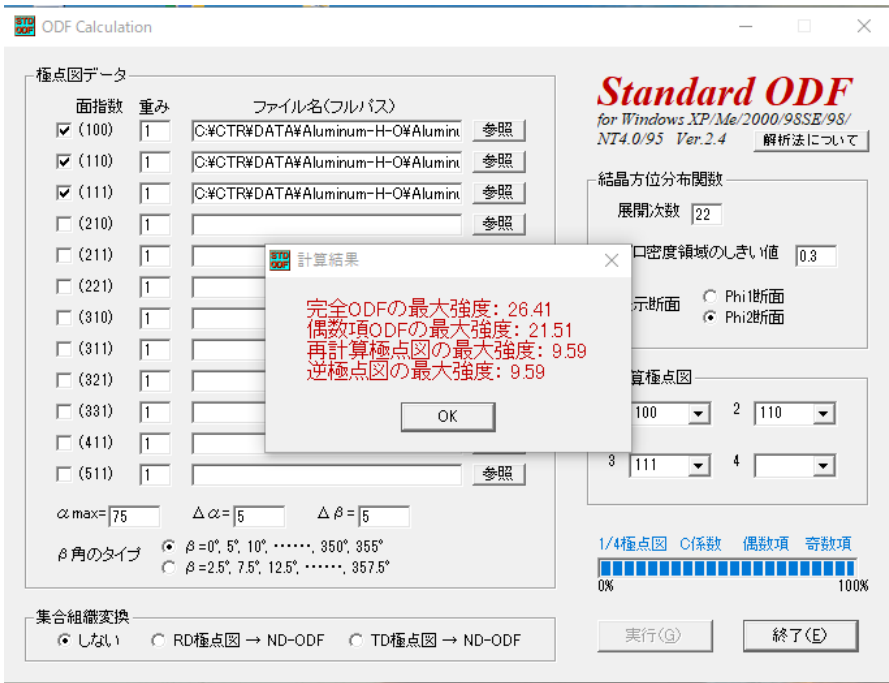
Normalized Polefigure	111	100	110
Recalculated Polefigure	111	100	110
Rp%	3.2	1.9	4.4

最適化により改善されています。

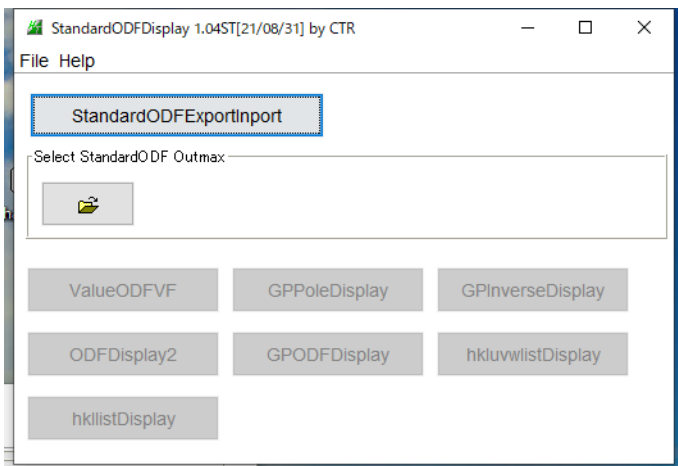
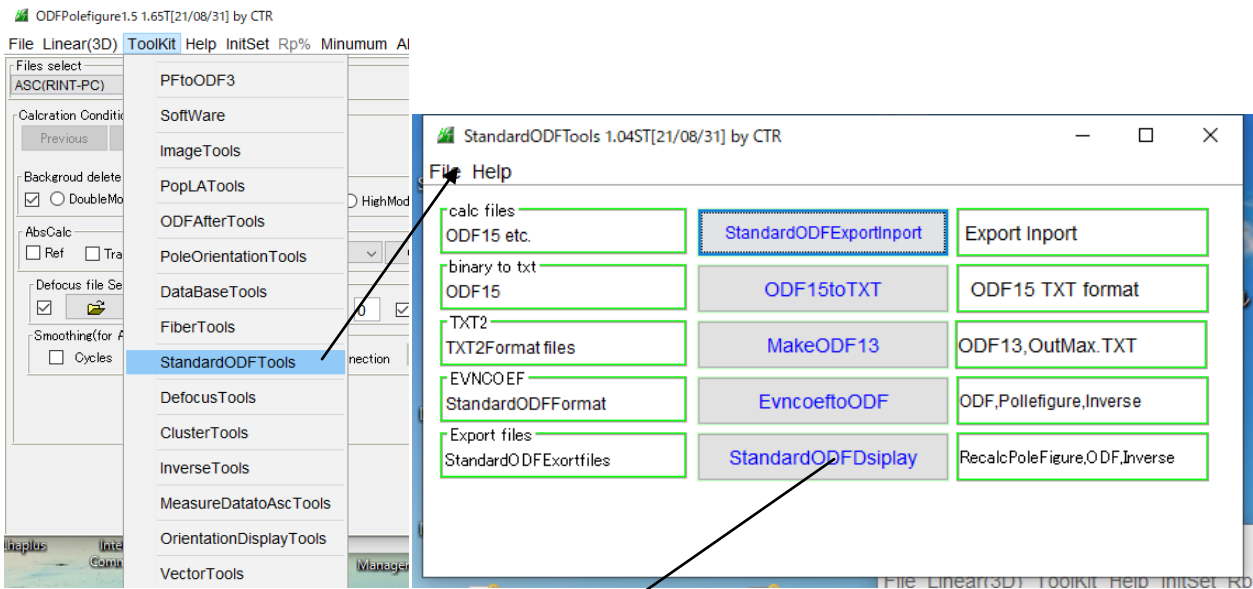
ODF 向けファイルを作成



## 5. StandardODFで解析



解析後、C : ¥ODFから解析データの対比



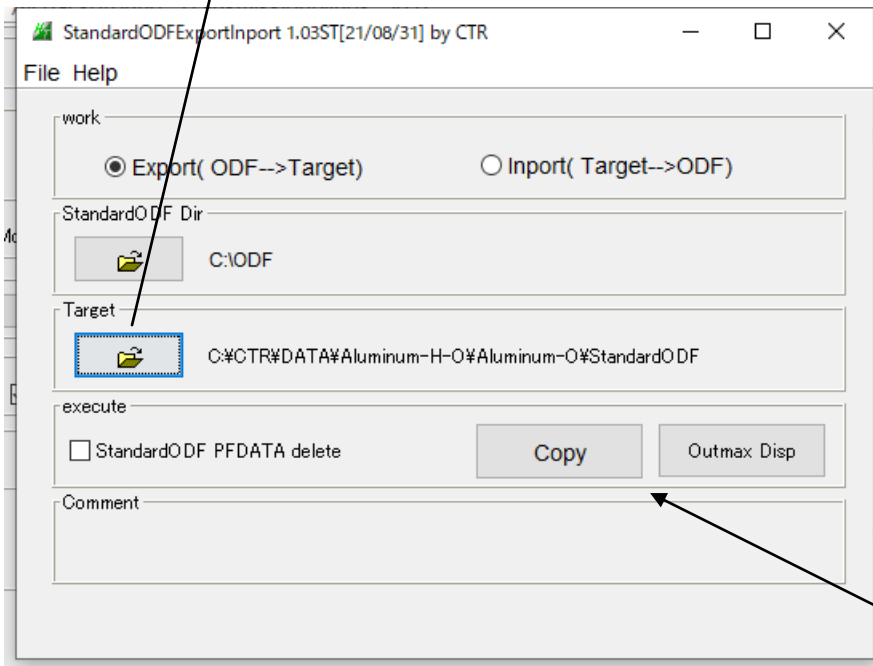
StandardODFExportInport

で退避画面操作

Target

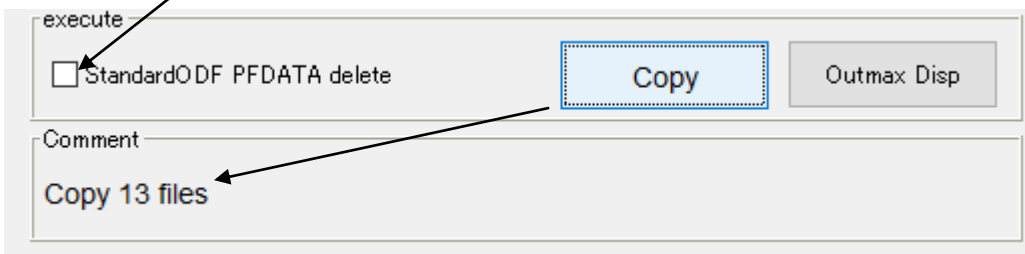


で退避ホルダを選択

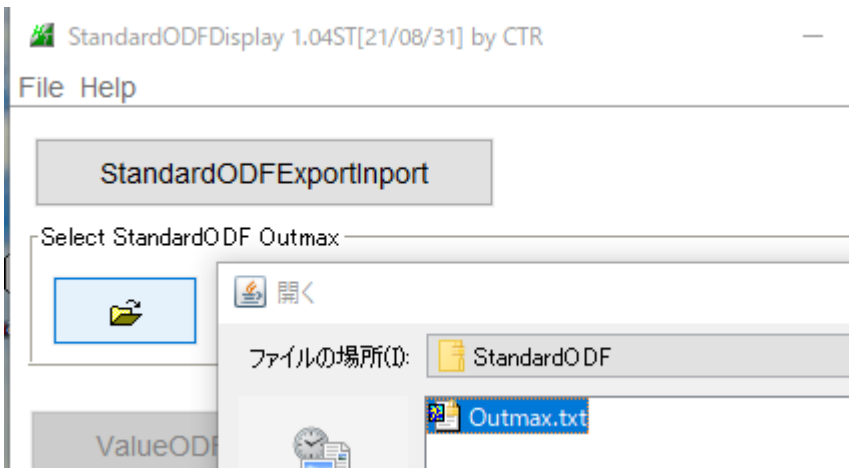


Copy開始

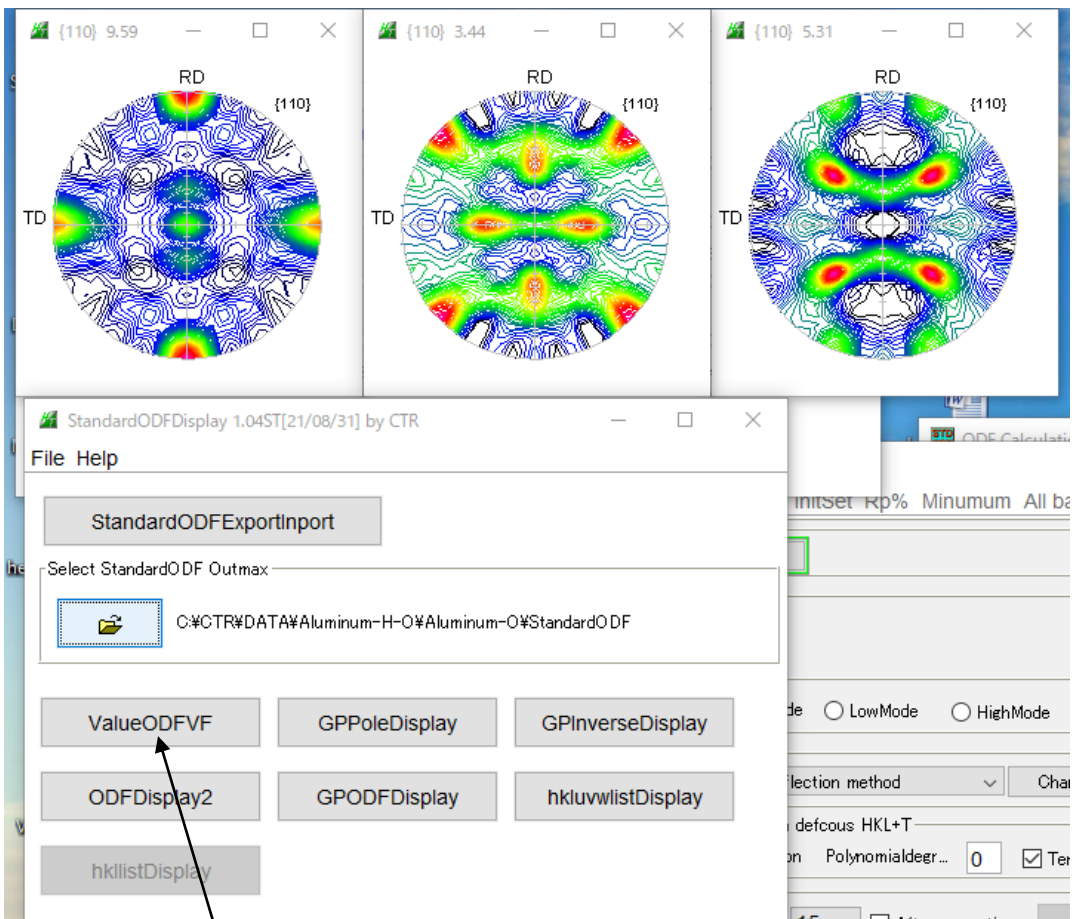
チェックで C:\PDF の退避データ削除



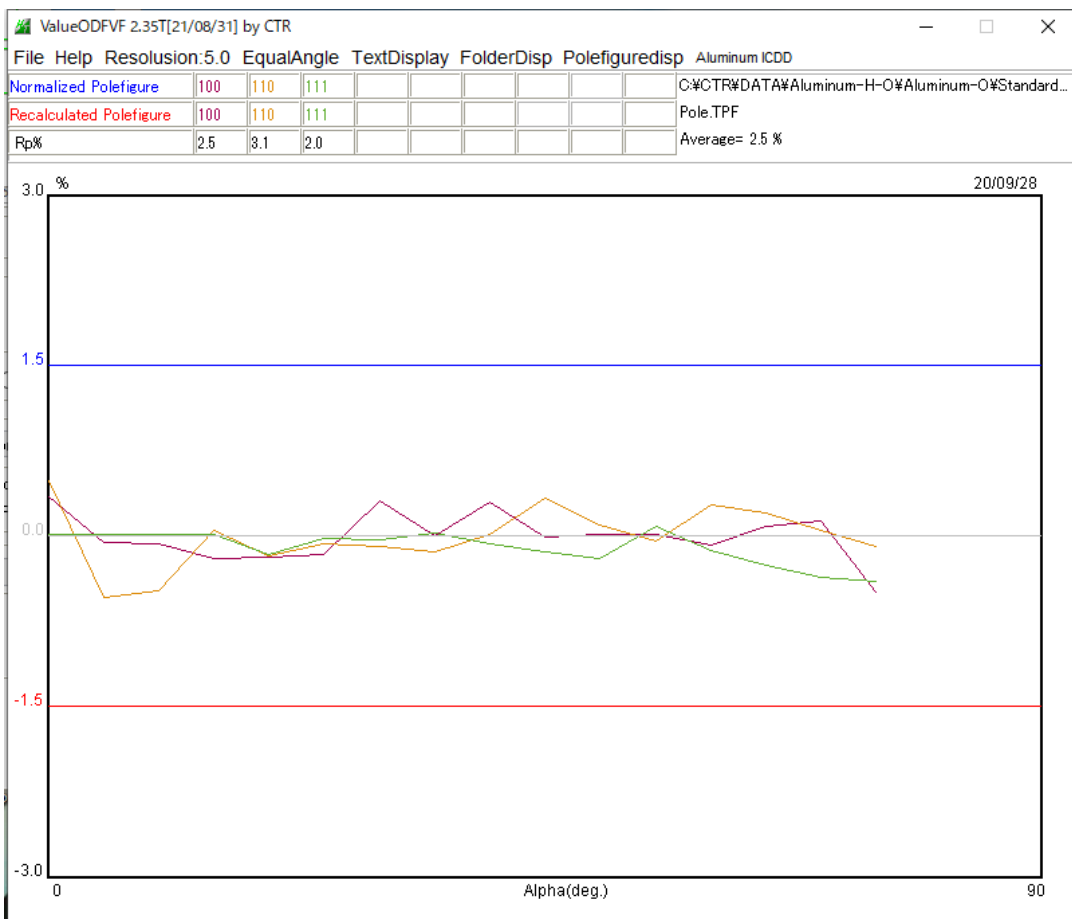
退避後、退避ホルダの Outmax.txt を選択



再計算極点図が表示されます。



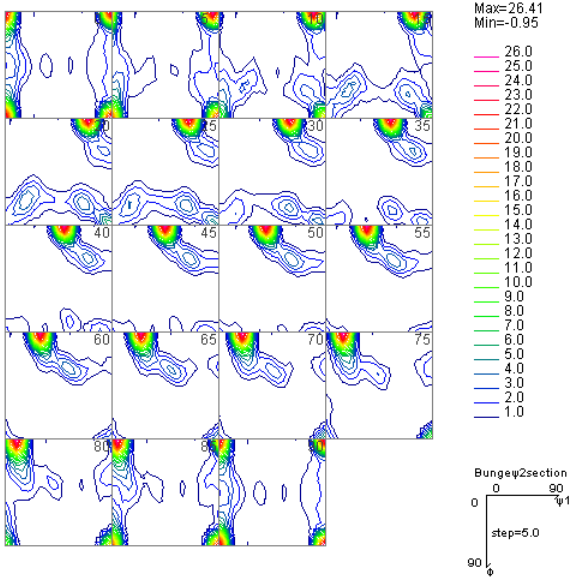
R p %の確認



# GPODFDisplay

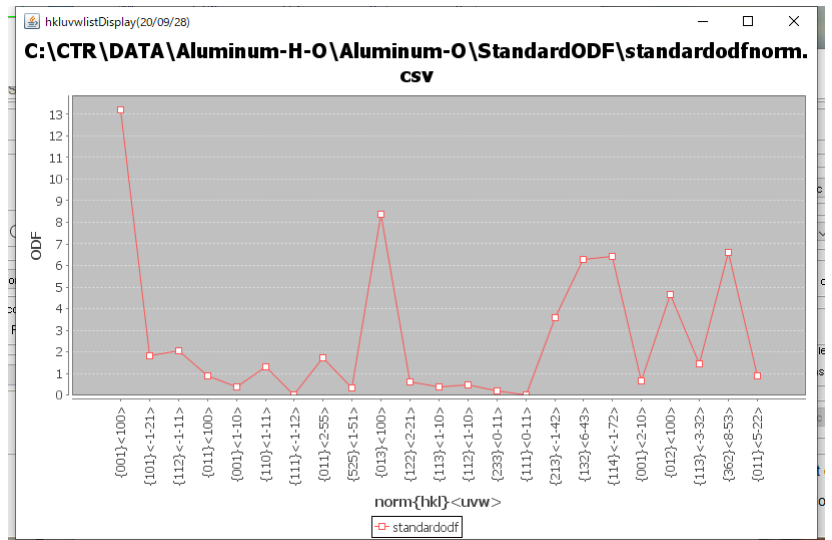
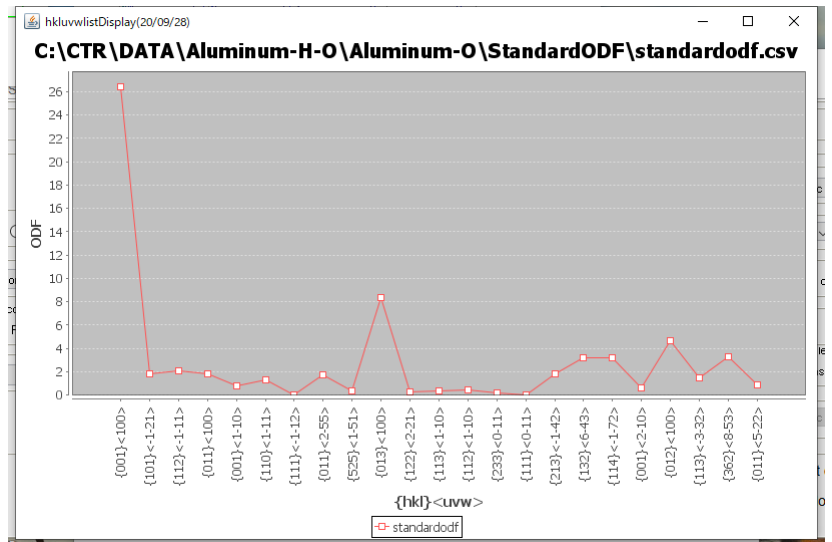
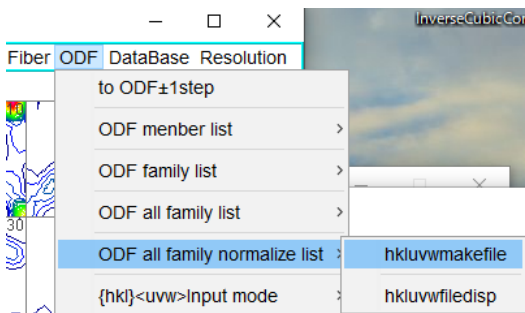
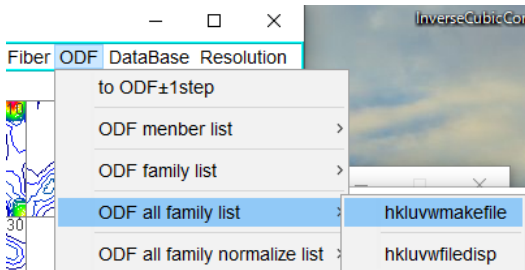
GPODFDisplay(V2) 2.07T[21/08/31] by CTR

File Aluminum View Search 7.0,7,false Help Fiber ODF DataBase Resolution



方位分布図

方位分布の4 : 2 : 1 比率考慮



6. 資料

6. 1 方位による 4 : 2 : 1 資料

# Determination of Volume Fractions of Texture Components with Standard Distributions in Euler Space

JAE-HYUNG CHO, A.D. ROLLETT, and K.H. OH

Table I. Standard Texture of Spherical Components with Gaussian Distribution ( $b = 12.5$  Deg) and Its Multiplicity (Cubic/Orthorhombic) in the  $90 \times 90 \times 90$  Deg Region

Miller Index {hkl}<uvw>	Euler Angles		ODF (Maximum at Exact Position)	Multiplicity (m)
	$\{\varphi_1, \Phi, \varphi_2\}$	$\{\alpha, \beta, \gamma\}$		
Bs, {110}<112>	{35.26 deg, 45 deg, 0 deg}	{54.74 deg, 45 deg, 0 deg}	130.95	2
Copper, {112}<111>	{90 deg, 35.26 deg, 45 deg}	{0 deg, 35.26 deg, 45 deg}	130.95	2
S {123}<634>	{58.98 deg, 36.7 deg, 63.44 deg}	{31.02 deg, 36.7 deg, 26.57 deg}	56.89	1
Goss, {110}<001>	{0 deg, 45 deg, 0 deg}	{90 deg, 45 deg, 0 deg}	262.22	4
Cube, {001}<100>	$\{\varphi_1 + \varphi_2 = 0$ deg, 90 deg, 180 deg, $\Phi = 0$ deg}	$\{\alpha + \gamma = 0$ deg, 90 deg, 180 deg, $\beta = 0$ deg}	262.22	4
Rotated cube, {001}<110>	$\{\varphi_1 + \varphi_2 = 45$ deg, 135 deg, $\Phi = 0$ deg}	$\{\alpha + \gamma = 45$ deg, 135 deg, $\beta = 0$ deg}	262.22	4
Rotated Goss, {110}<011>	{90 deg, 45 deg, 0 deg}	{0 deg, 45 deg, 0 deg}	262.22	4
{111}<112>	{90 deg, 54.75 deg, 45 deg}	{0 deg, 54.74 deg, 45 deg}	130.95	2
{112}<110>	{0 deg, 35.26 deg, 45 deg}	{90 deg, 35.26 deg, 45 deg}	130.95	2

6. 2 逆極点図 3 6 BOX

解説

ベクトル法による集合組織の3次元解析

長嶋晋一\*

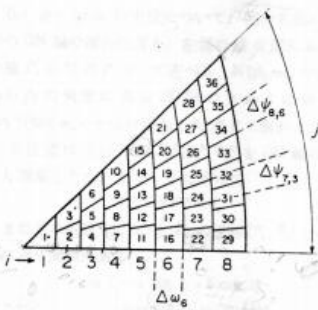


図8 球面三角形  $T_1$  の分割. ボックス  $t_\mu$  ( $\mu=1, \dots, 36$ ) は球面上の面積はいずれも等しい.  
 $\mu = \frac{1}{2}(i-1) \cdot i + j$ .

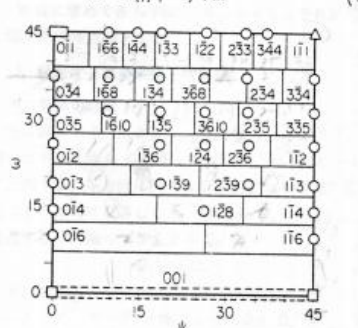


図9  $T_1$  の分割を  $\psi$  および  $\omega$  の直交座標系で示したも. ボックス内の主要な方位を  $\square, \square, \triangle, \circ$  で示す.

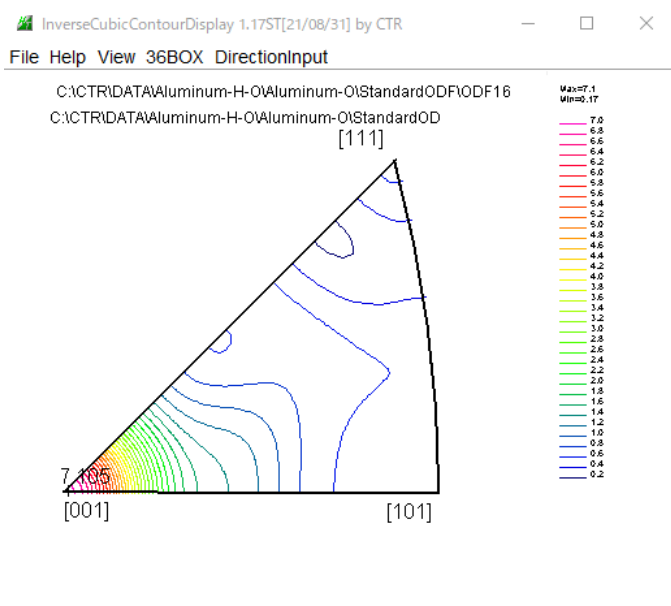
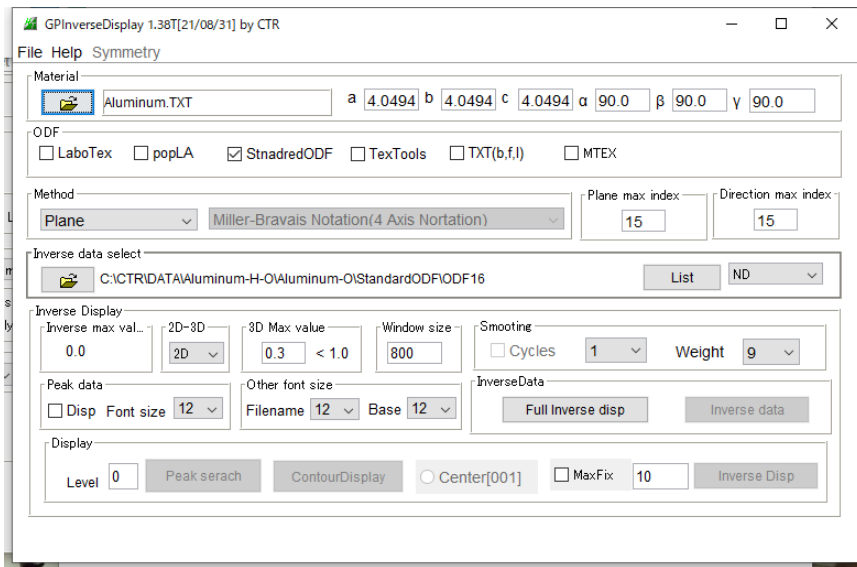
表1 三角形  $T_1$  を 36 分割した各ボックス ( $t_\mu$ ) の角度範囲 (図8参照). 三角形  $T_2$  については  $\omega_i$  は等しく,  $\psi_{ij}$  は等しい数値で符号を負にすればよい.

$\omega_i$	i	j	$\psi_{ij}$										
			0	1	2	3	4	5	6	7	8		
0	0	0											
6.9266	1	0	45										
12.0551	2	0	26.3186	45									
17.1708	3	0	17.9551	33.2204	45								
22.3770	4	0	13.3561	25.6215	36.1923	45							
27.7252	5	0	10.4606	20.4414	29.5995	37.7830	45						
33.2550	6	0	8.4740	16.7295	24.5888	31.9398	38.7389	45					
39.0021	7	0	7.0316	13.9649	20.7140	27.2154	33.4323	39.3551	45				
45	8	0	5.9440	11.8472	17.6725	23.3907	28.9827	34.4415	39.7734	45			

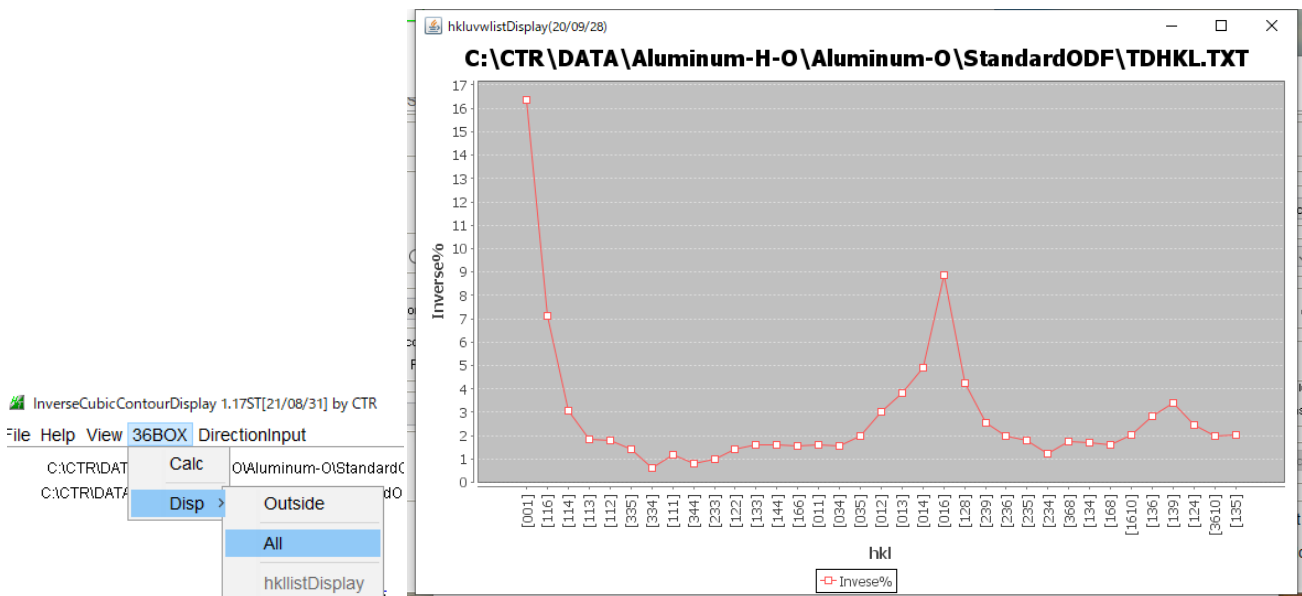


逆極点

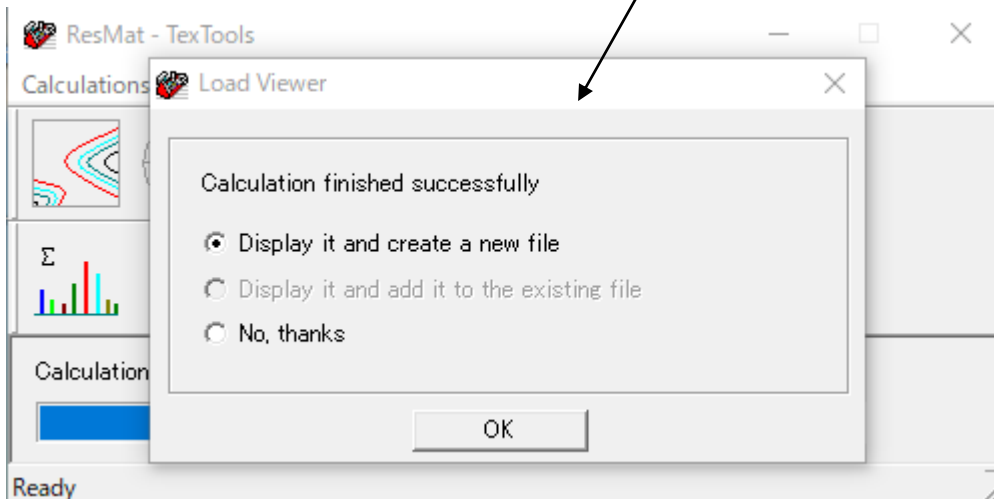
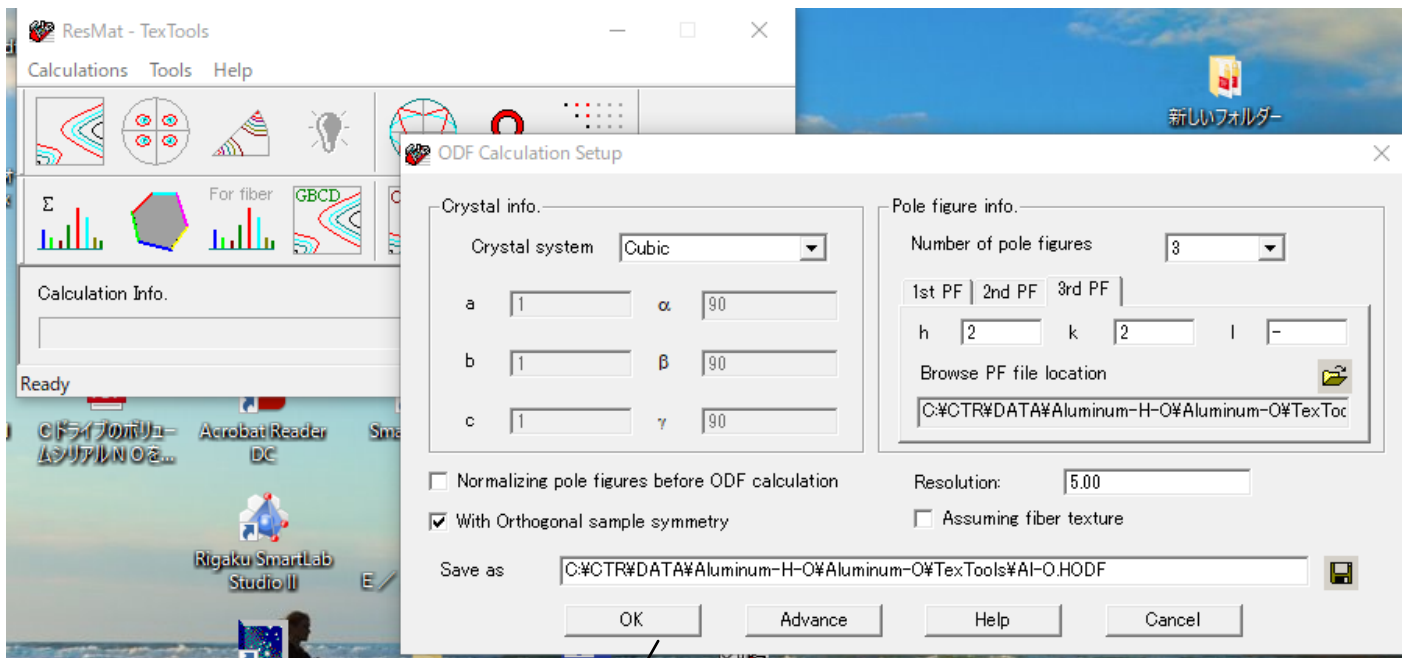
GPInverseDisplay



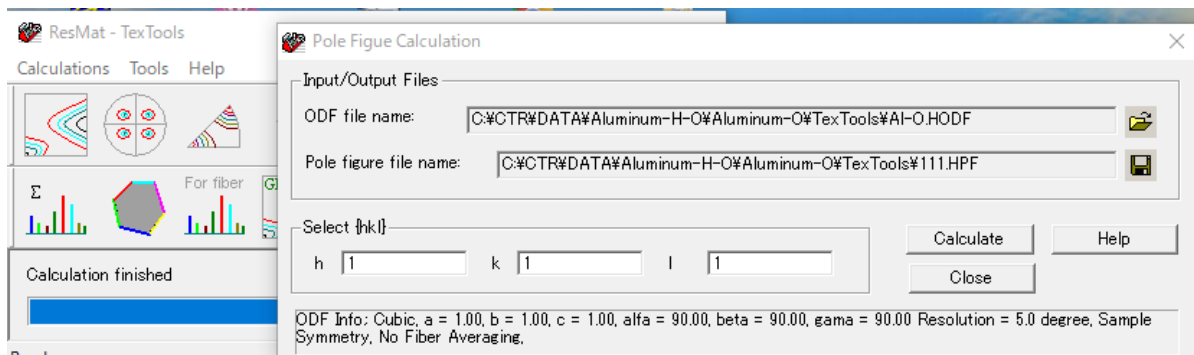
36Box 計算



## 7. TexTools 計算

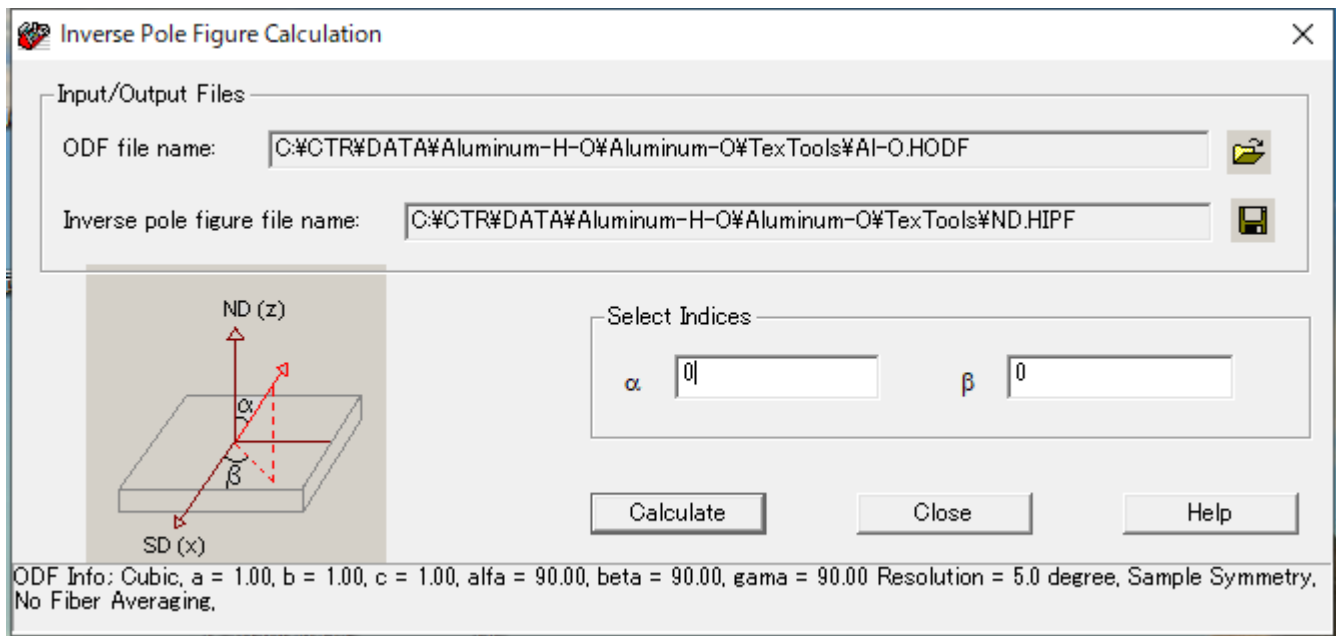


## 再計算極点図計算



同様に、{200}、{220} も作成

## 逆極点図作成



For example,

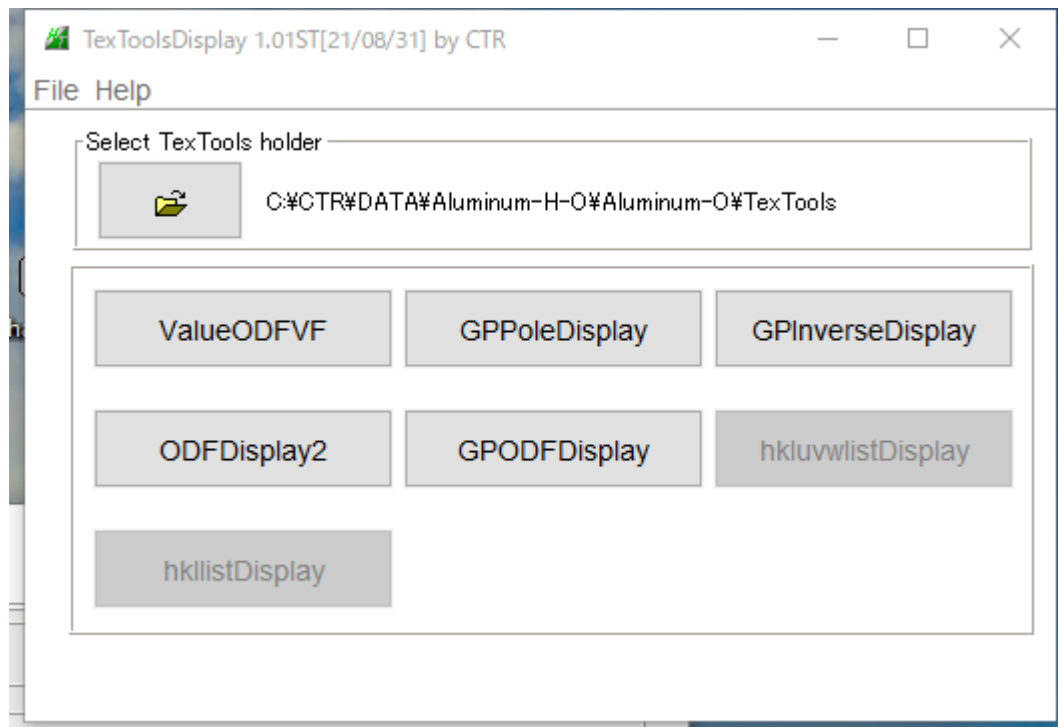
ND inverse pole figure, set  $\alpha = 0$  and  $\beta = \text{any}$ .

SD/RD inverse pole figure, set  $\alpha = 90$  and  $\beta = 0$ .

TD inverse pole figure, set  $\alpha = 90$  and  $\beta = 90$ .

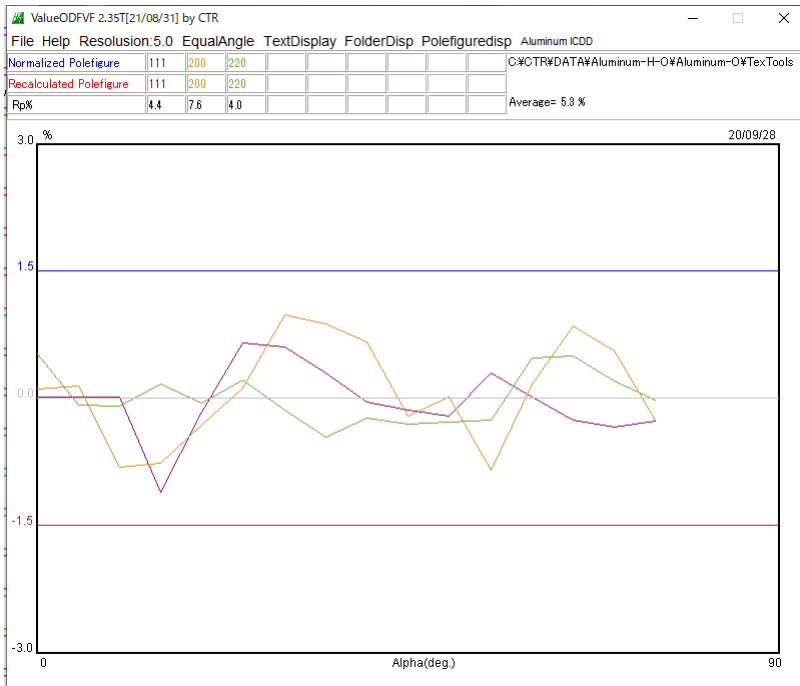
同様に、TD、RDの作成する。

各種処理を行う



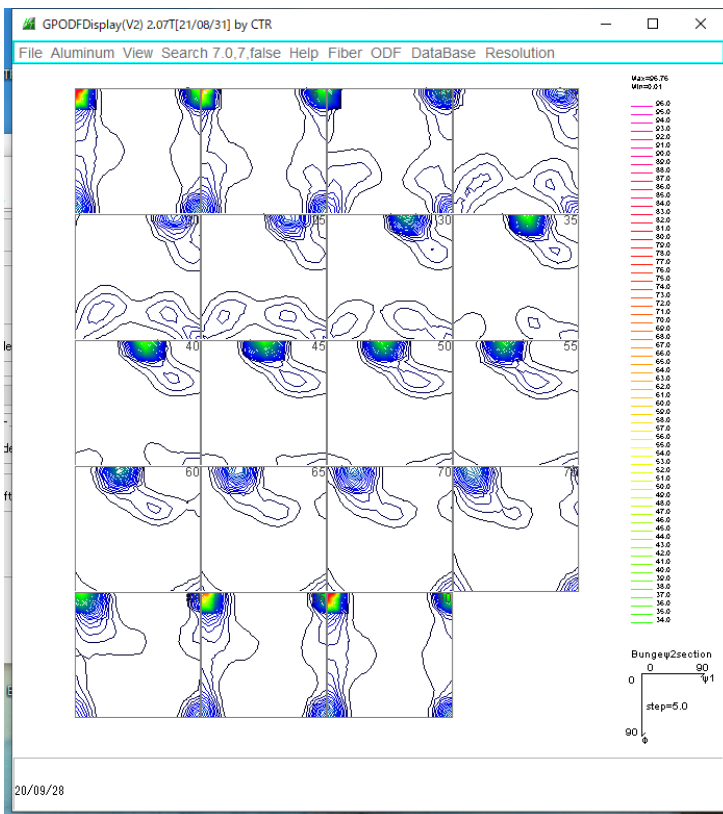
## ValueODFVF

Textool解析のRp%



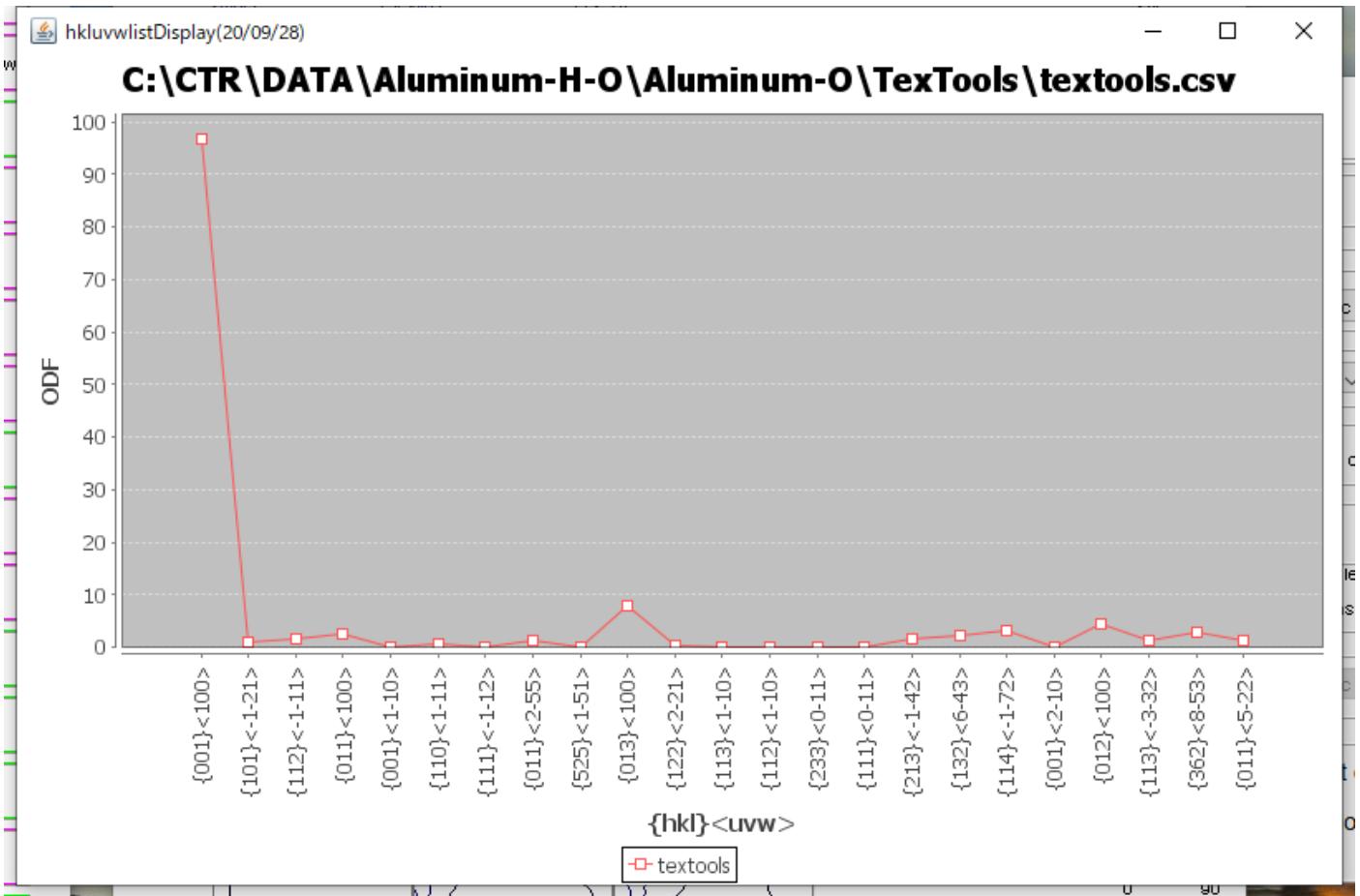
## GPODFDisplay

TextoolsのODF図確認

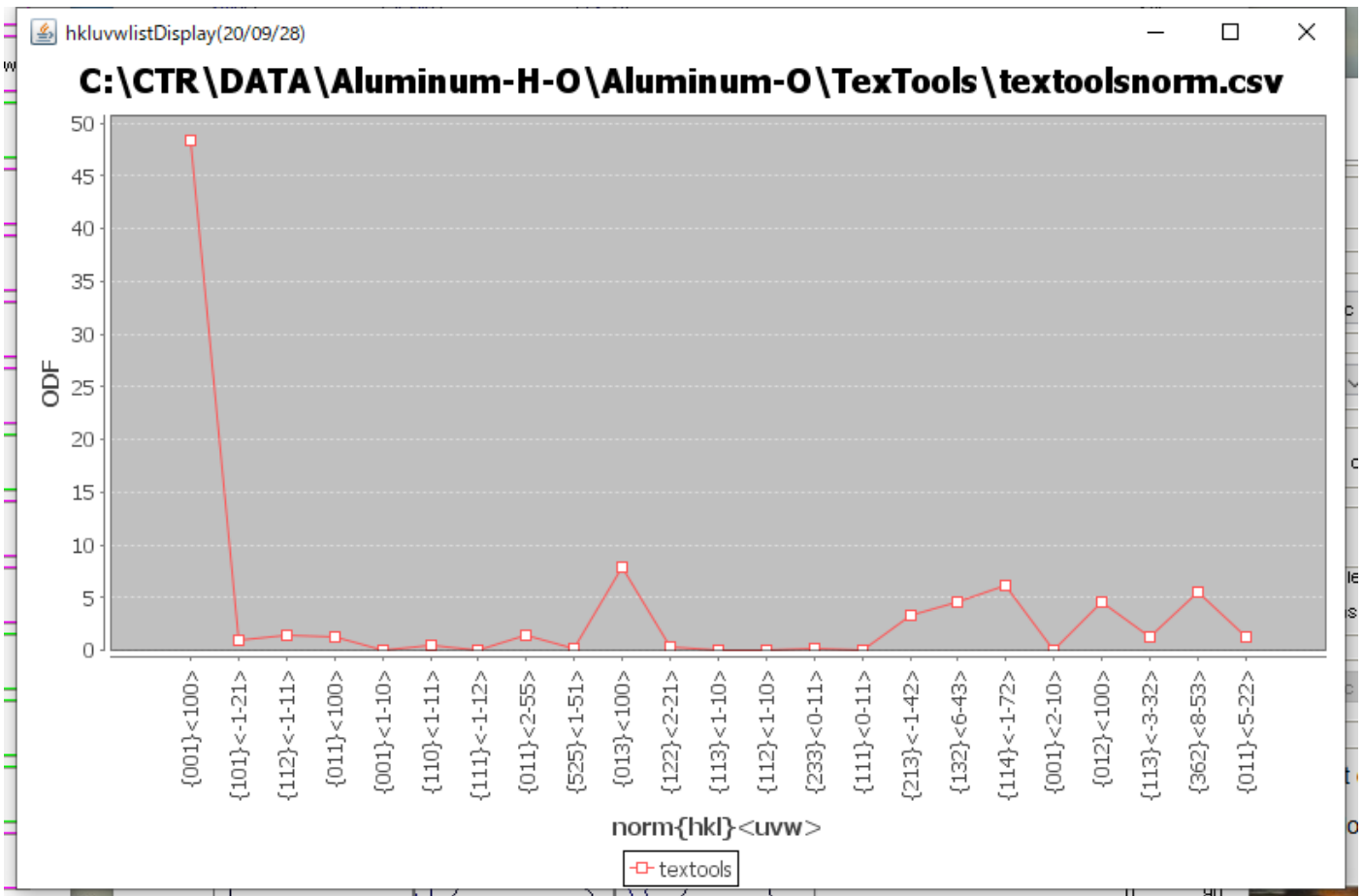


StandardODFのHermonic法よりゴーストの少ない方位密度が計算されます。

4 : 2 : 1に規格化なしの方位プロフィール



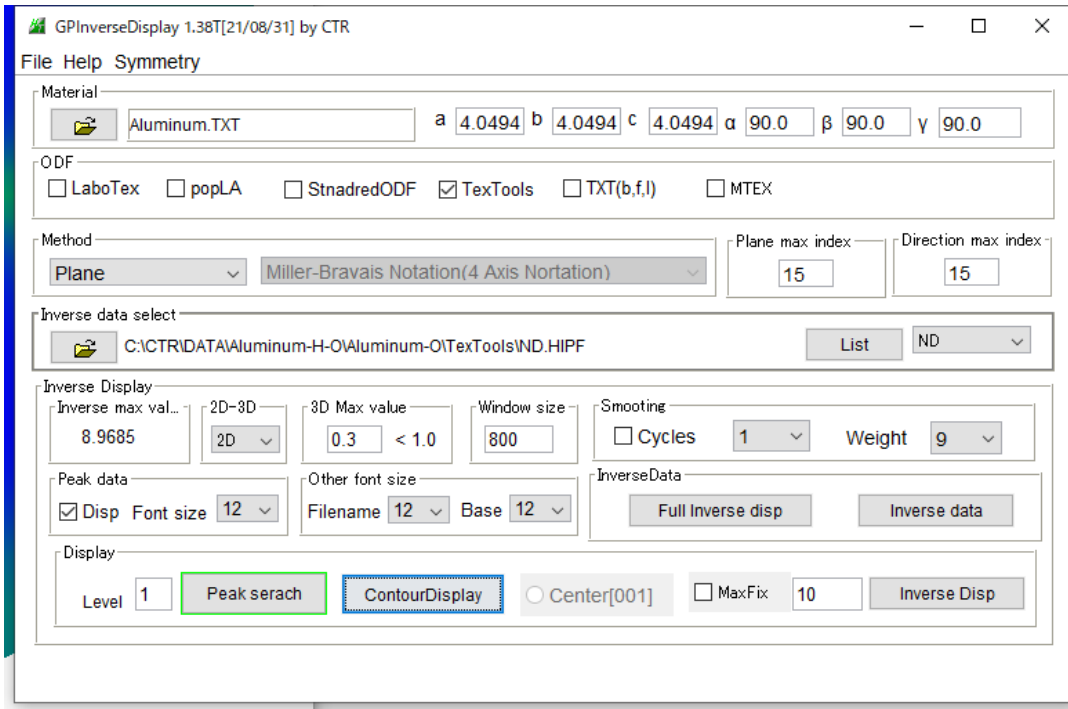
規格化した方位プロファイル



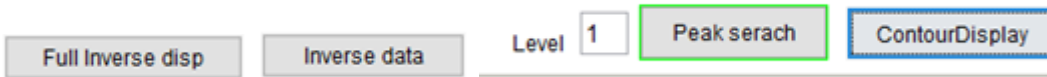
# GPInverseDisplay

TexToolsで計算したND方向の逆極点図

ODFPoleFigure1.5からInverseToolsを選択

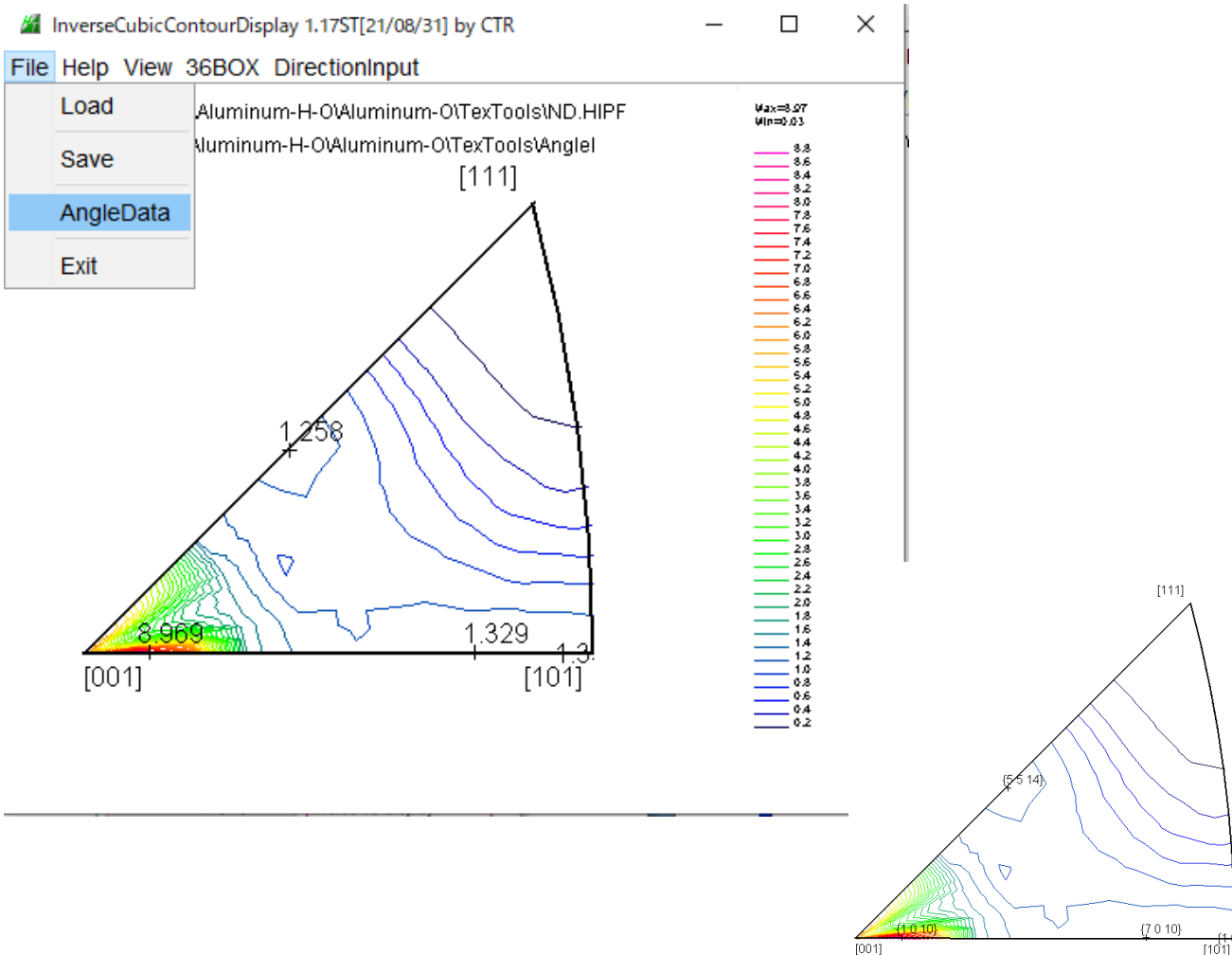


- Display -

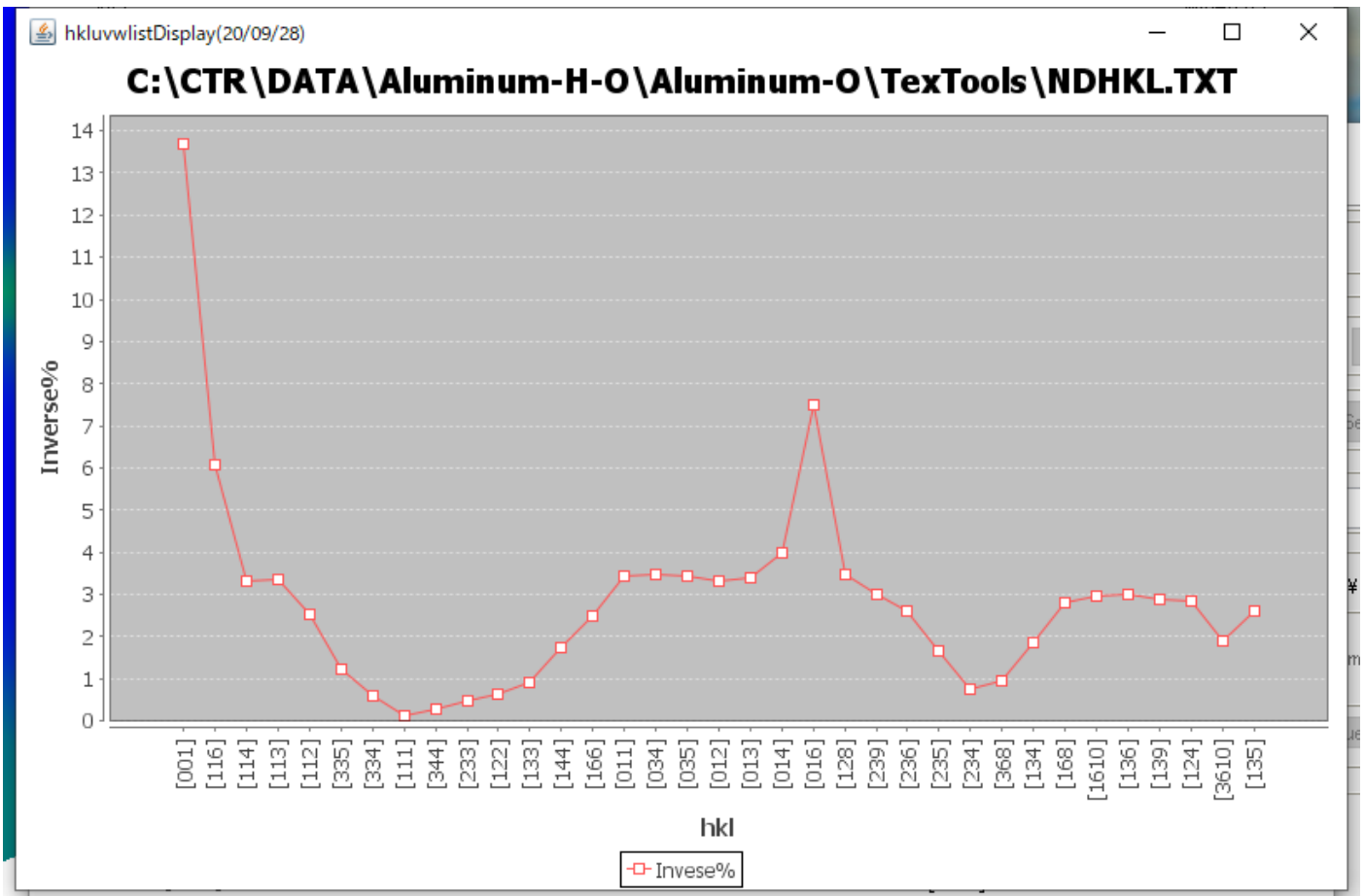


から

等高線上に方位密度（方位）を表示

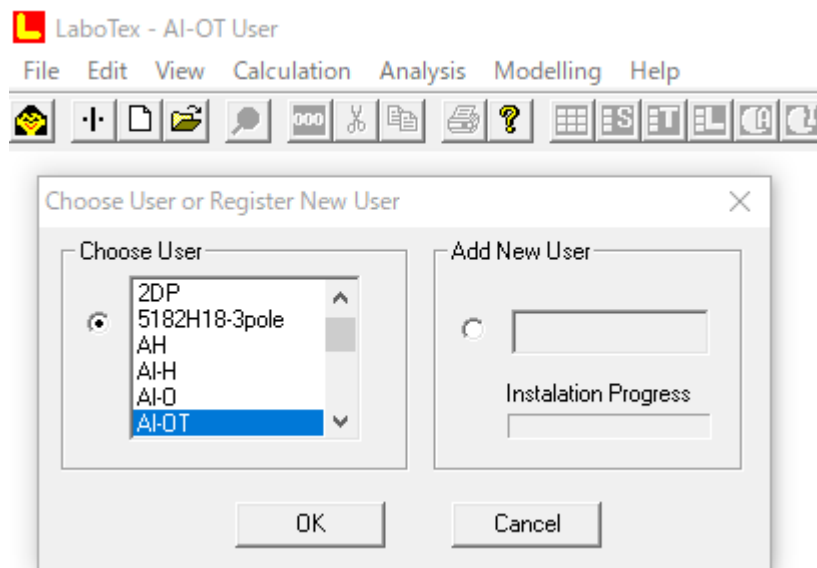


3 6 B o x 表示

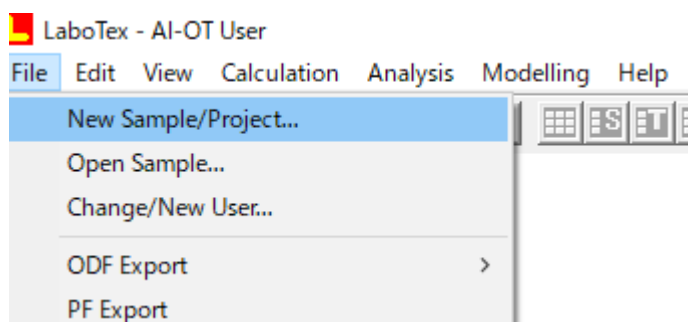


## 8. LaboTexで解析

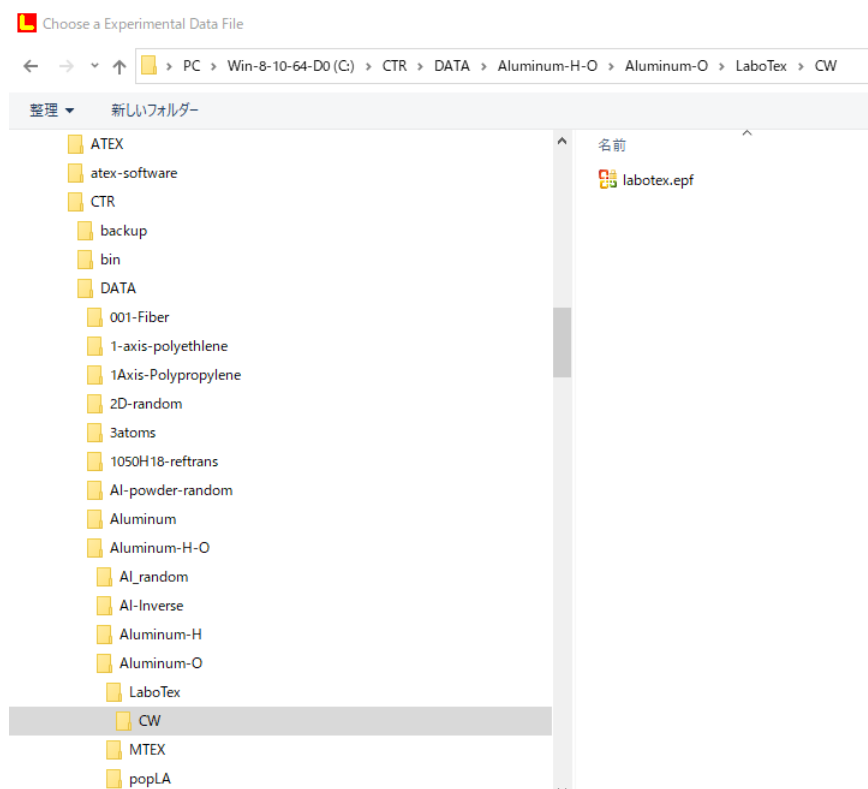
ユーザ選択 (材料選択)



newProject 選択



PF to ODF 3 で作成したデータ 選択





New Sample

Choose Experimental Data (LaboTex Experimental Pole Figure Files)

EPF  PPF  SOR  NJC  NJA  RW1  epf Selected: 1

labotex.epf

Path C:\CTR\DATA\Aluminum-H-O\Aluminum-O\LaboT... labotex.epf

Info 111\_chB0DS\_2.TXT 200\_chB0DS\_2.TXT 220\_chB0DS\_2.TXT

Choose Defocussing Correction

Correction (On/Off)

Correction Data from File  Correction Data from Formula

(COR,POW,DFB,ASC,PPG,NJA,DAT,POL,NJC,COA,RWA,UXD,EXP)

Co(1x1).cor  
Co(5x5).cor

Path C:\LaboTex2\USER\AI-O.T.LAB\COR\

Info

Crystal Symmetry

**O** (Cubic)

Project Name

Demo

Project Name: Demo

Sample Name

**O\_Cubic**  
O\_Cubic\_1x1  
O\_Cubic\_arb  
O\_Cubic\_c2  
O\_Cubic\_d2  
s\_orient

Sample Name: AI-O

Cancel Create of Binary File in LaboTex Format (Corrected Pole Figure(s) (CPF))

外す

sample名を変更

Create

Merge Experimental Files and Conversion to CPF

Project Demo Sample AI-O

Crystal Symmetry O-Cubic

Cell Parameters (Relative)

a 1.00 b 1.00 c 1.00  $\alpha$  90.0  $\beta$  90.0  $\gamma$  90.0

Description

111\_chB0DS\_2.TXT 200\_chB0DS\_2.TXT 220\_chB0DS\_2.TXT

PF Data Files

labotex.epf

hkl  $\Delta\alpha$   $\Delta\beta$

$\alpha_c$   $\alpha_e$

$\beta_t$   $\beta_e$

Adjustment to the LaboTex Registration Convention

Counter-clockwise  Reverse radial direc.

Rotate

None (Start PF Registration from RD)

90 deg (Start PF Registration from TD)

180 deg

Calculations Progress

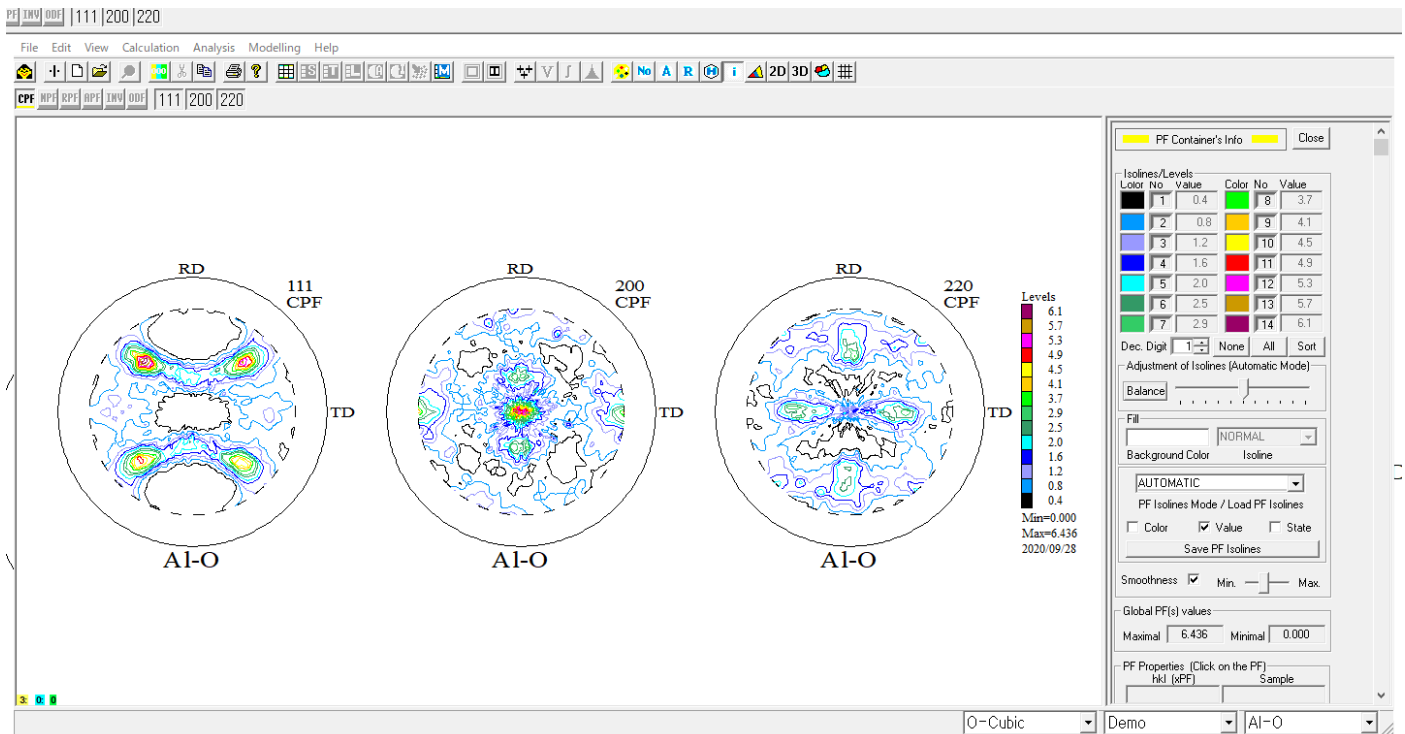
Merge (files) 1

Conversion

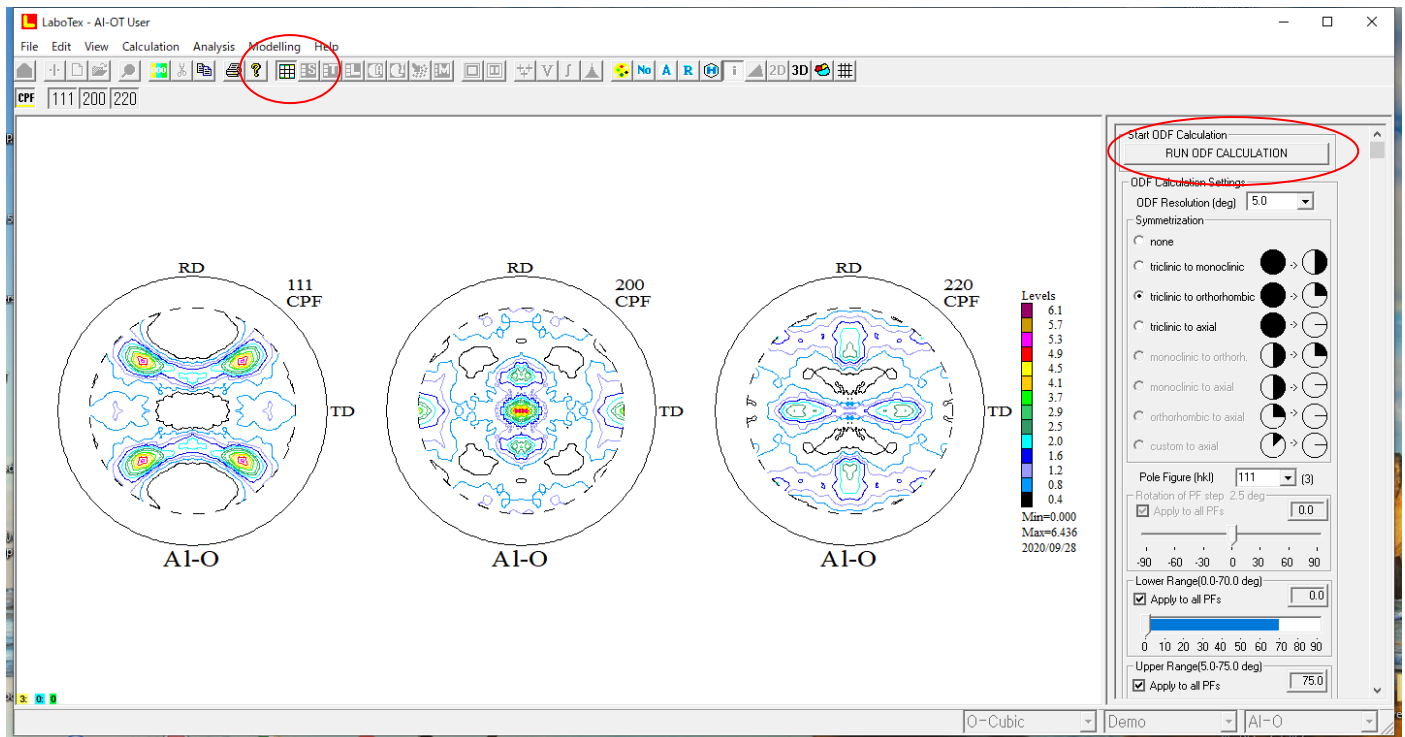
RUN END

確認し、RUN→END

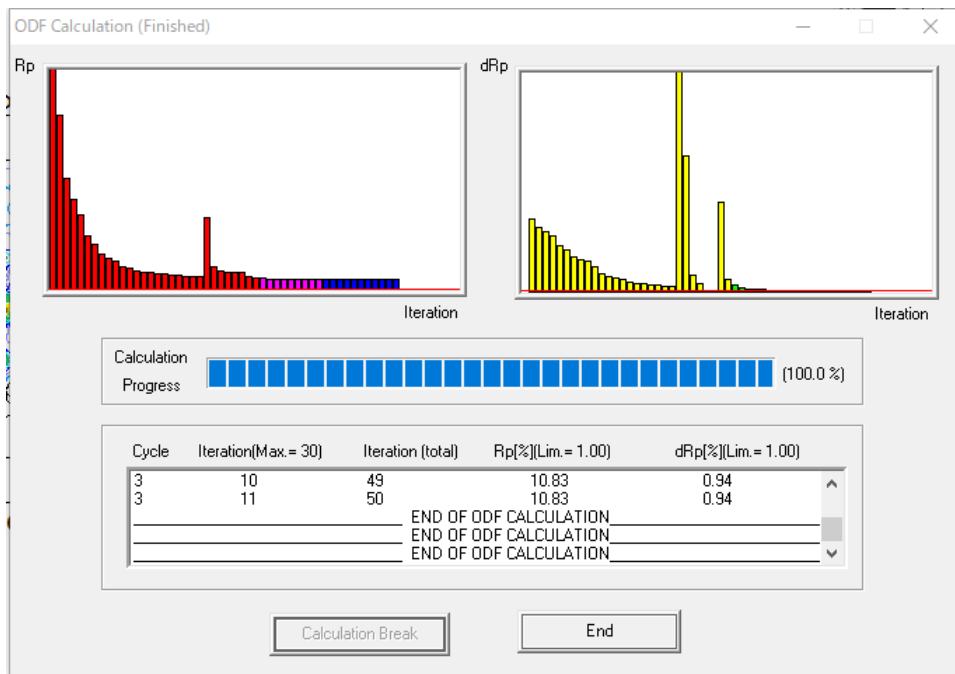
## 入力極点図が表示される



## ODF 解析を行う



R p %が計算される。

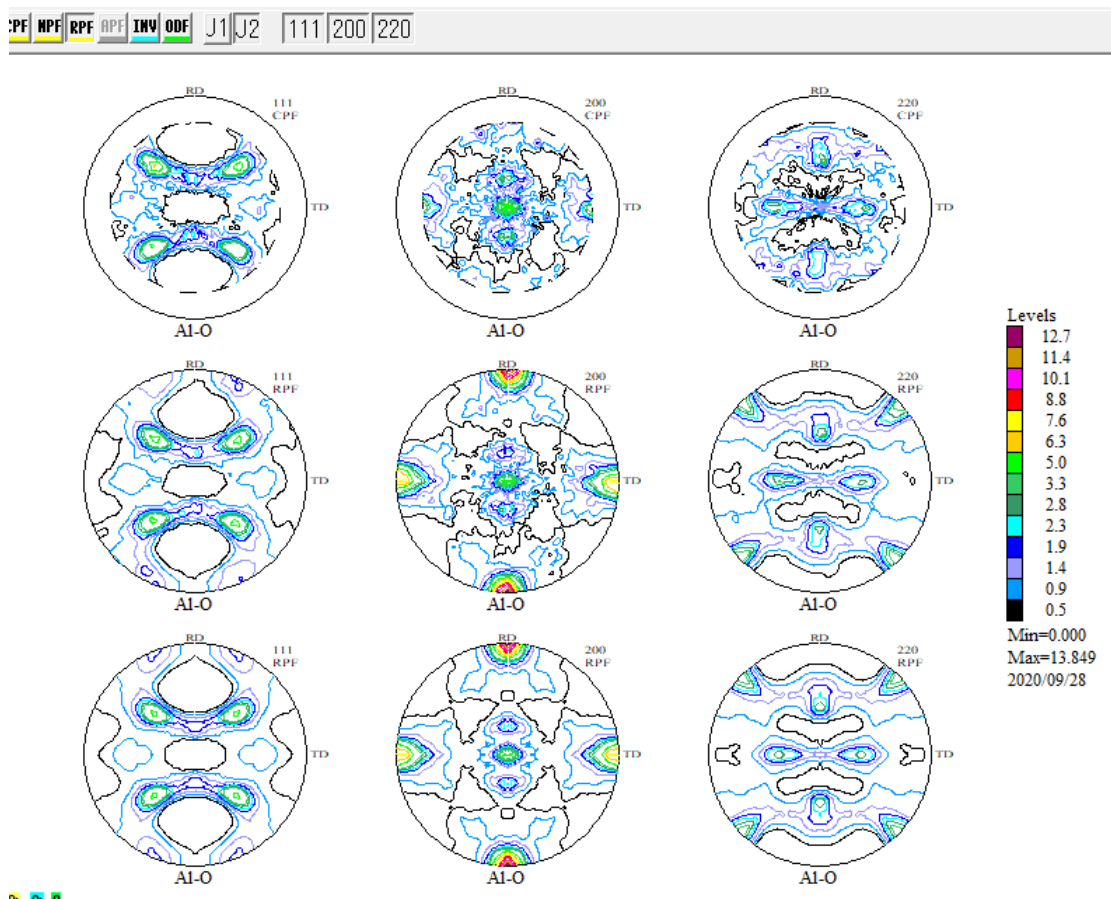


CTRの計算では、方位密度が低い領域を削除し、 $\beta$ 方向は平均値で扱っているため異なります。



既に、ODF図、再計算極点図、逆極点図が計算されています。

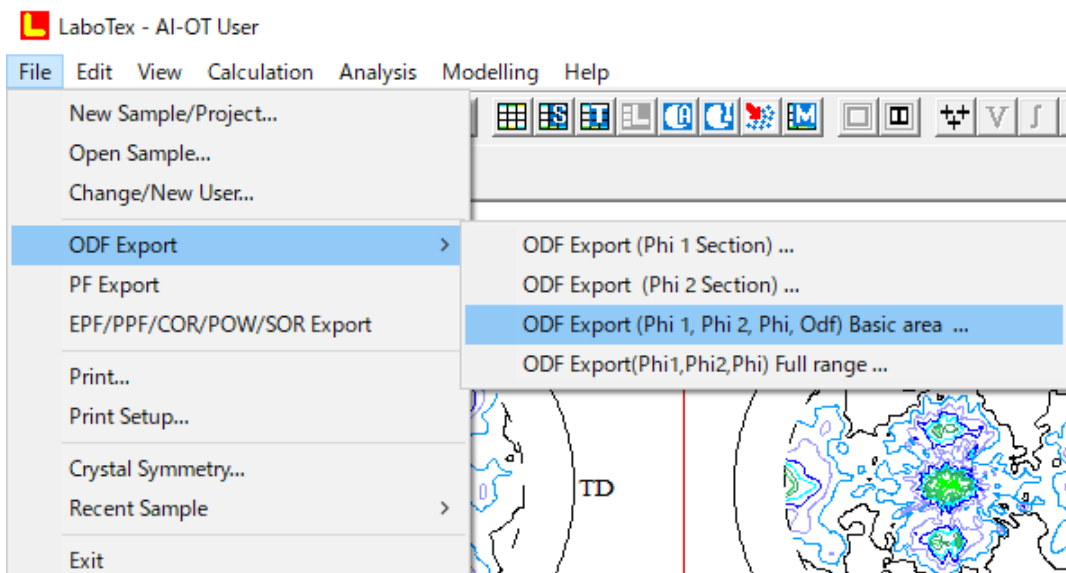
再計算極点図比較



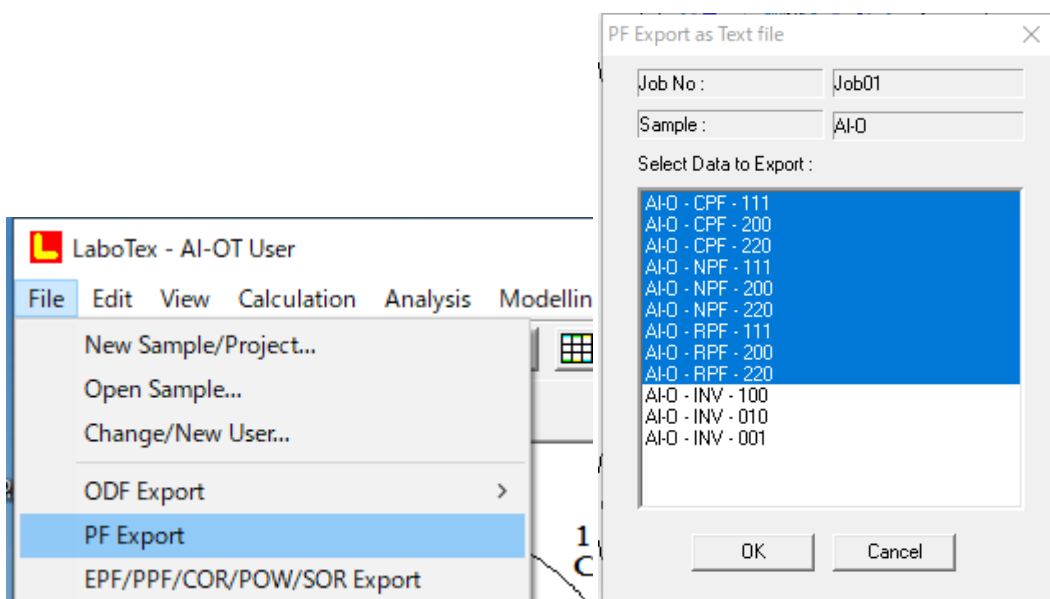
上段：入力極点図、中段：f u l l解析 下段：1 / 4 対称解析

## 各種計算結果のExport

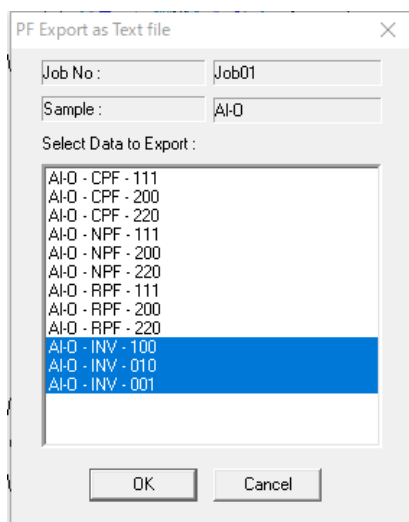
### ODF図



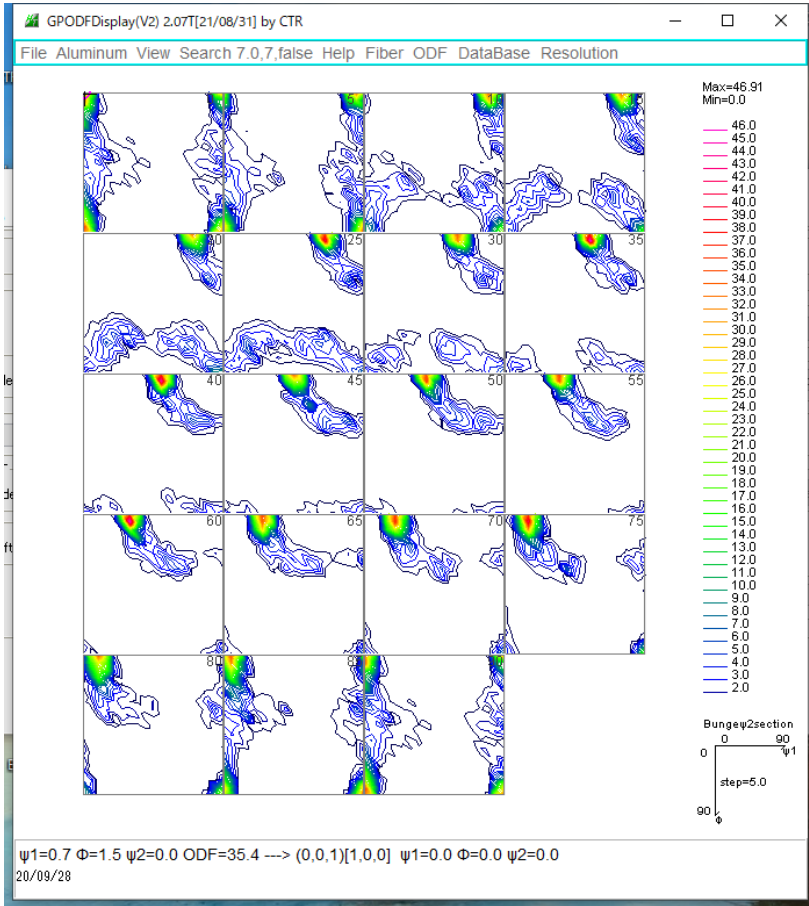
### 極点図



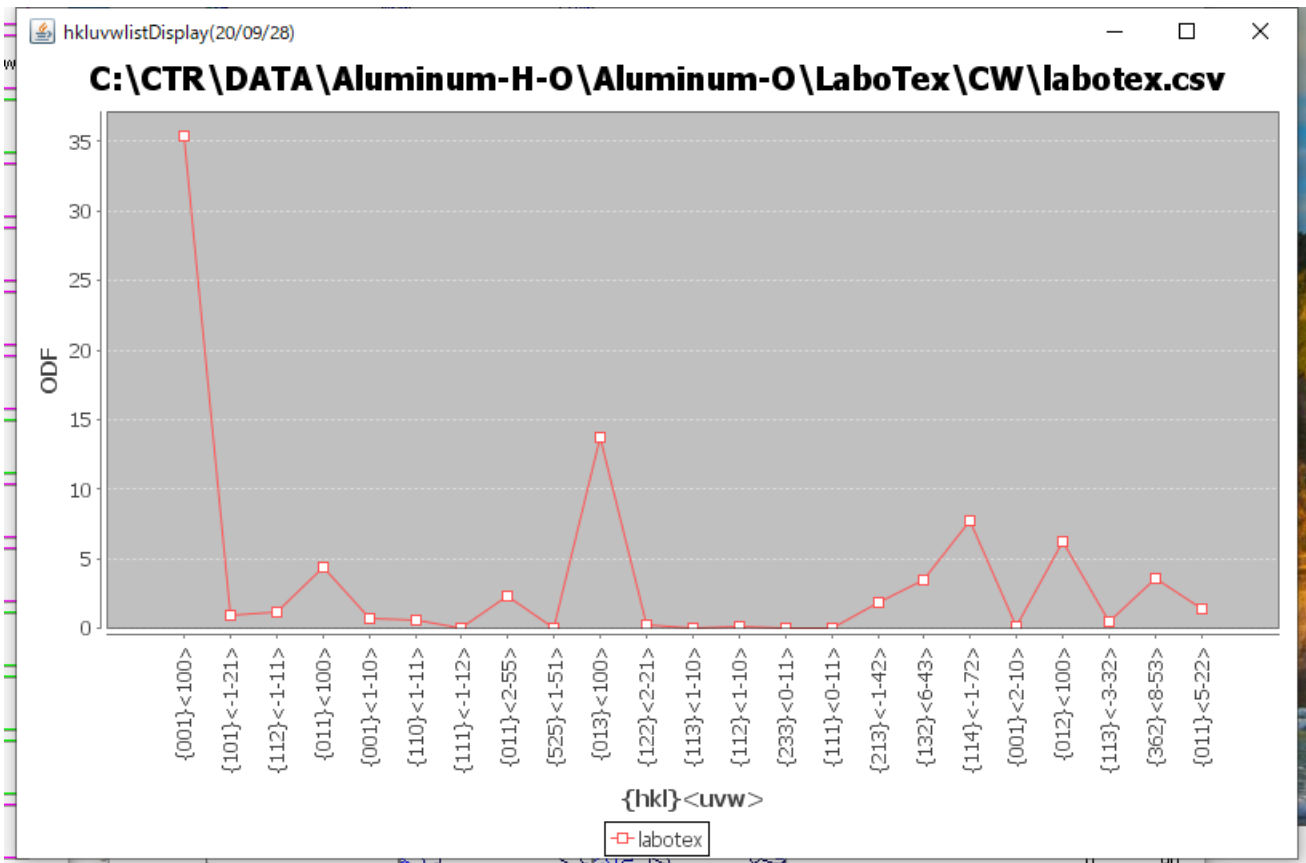
### 逆極点図

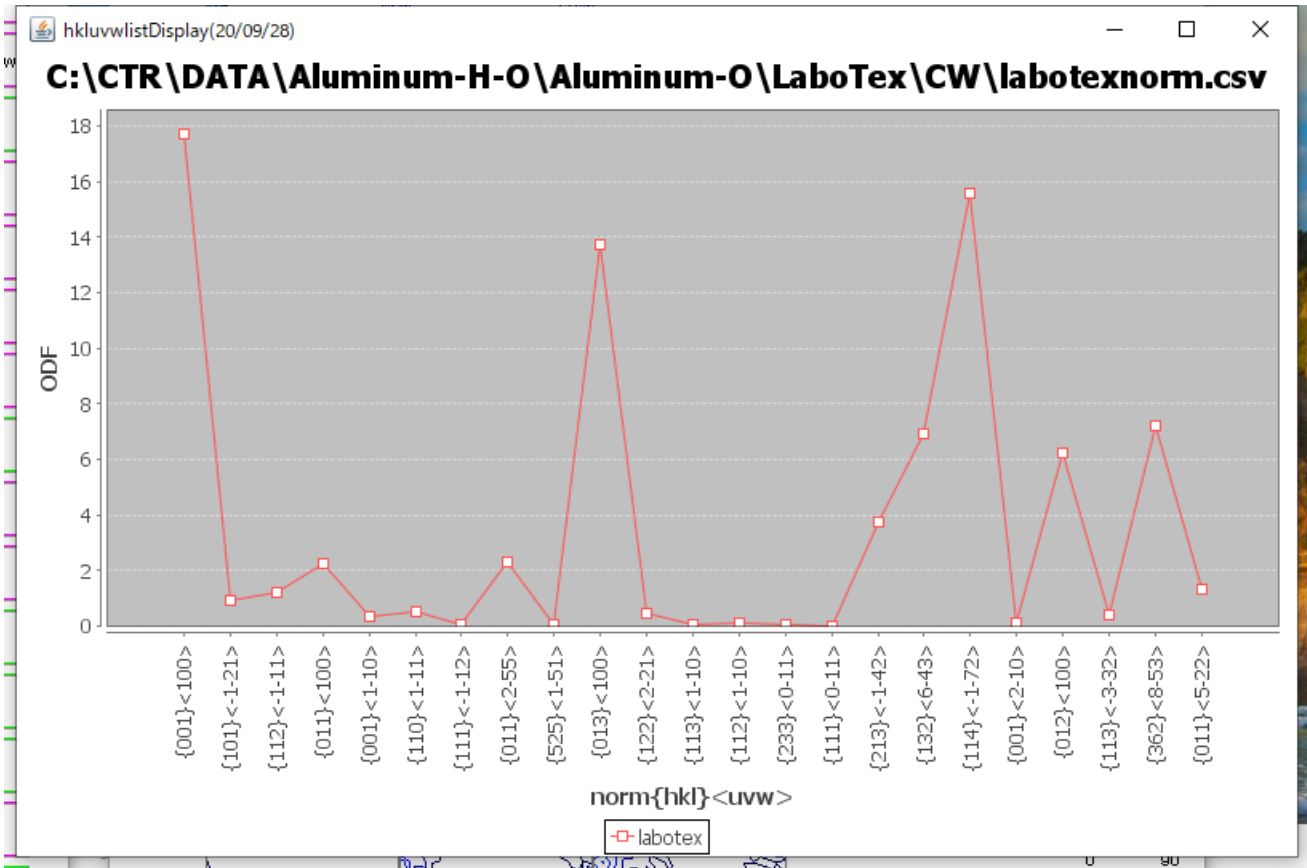




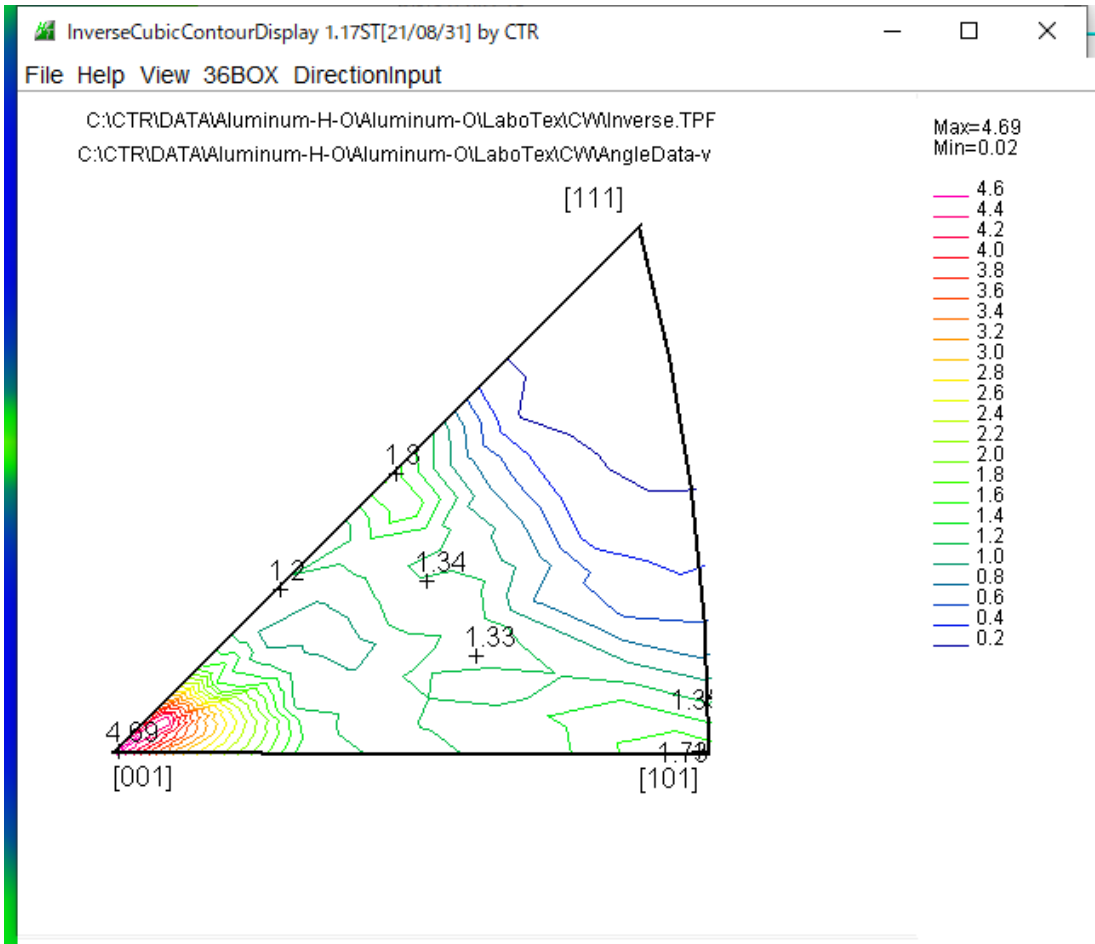


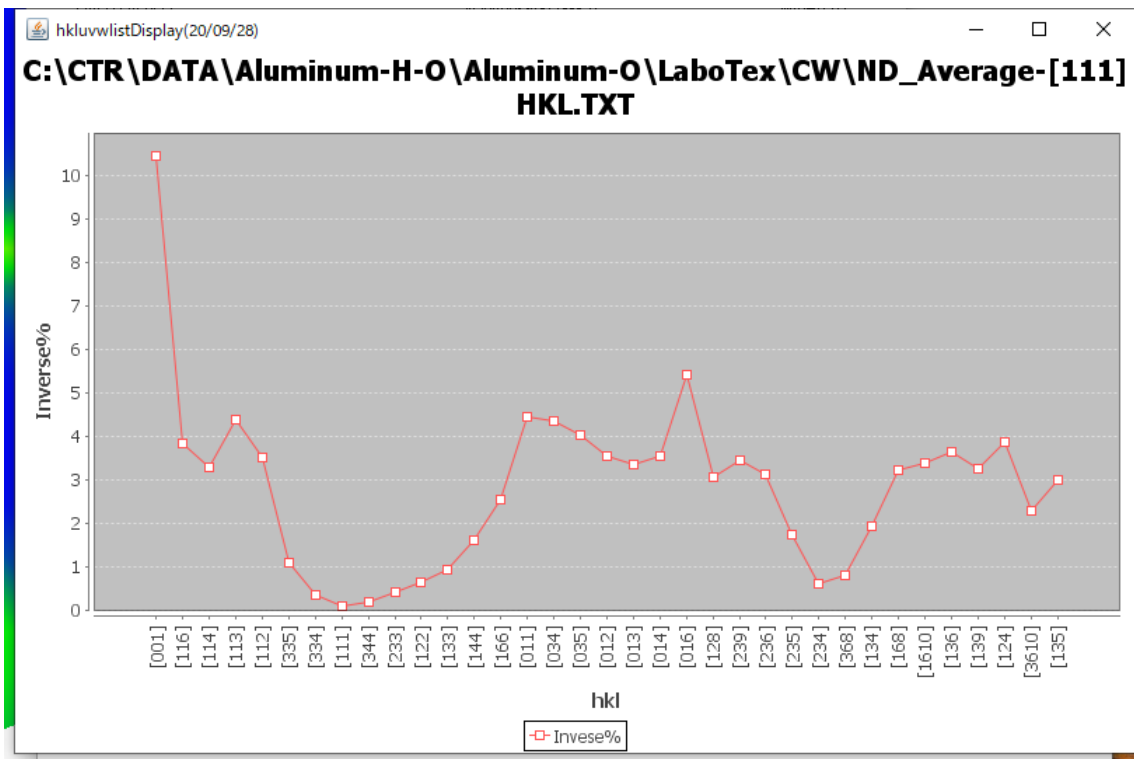
方位プロファイル



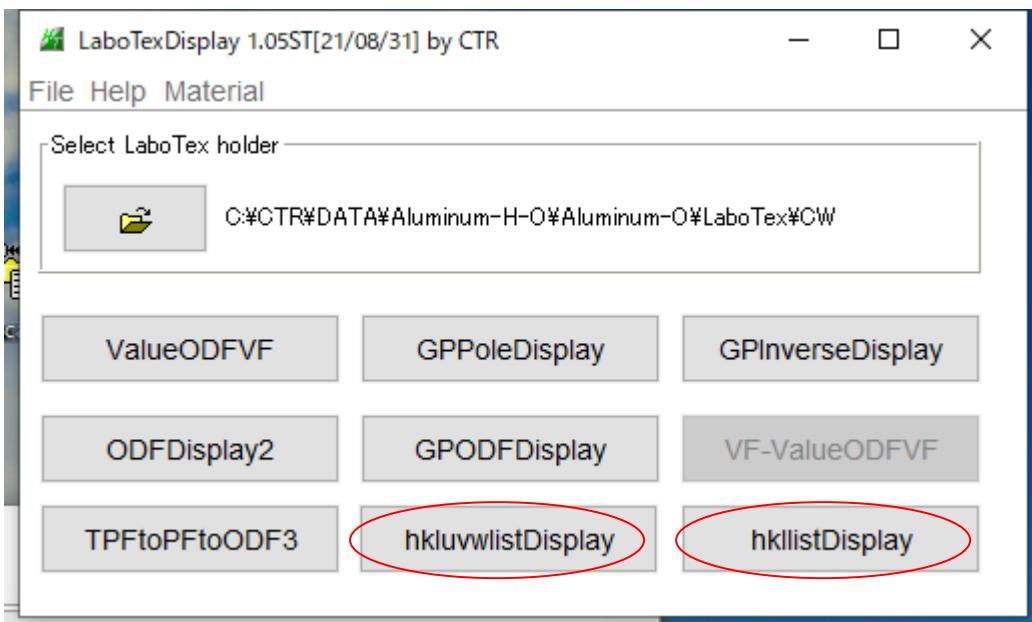


GPIInverseDisplay 逆極点图





9. StandardODF, TexTools、LaboTexの方位密度比較





# hkluvlistDisplay

より ODF 方位密度比較

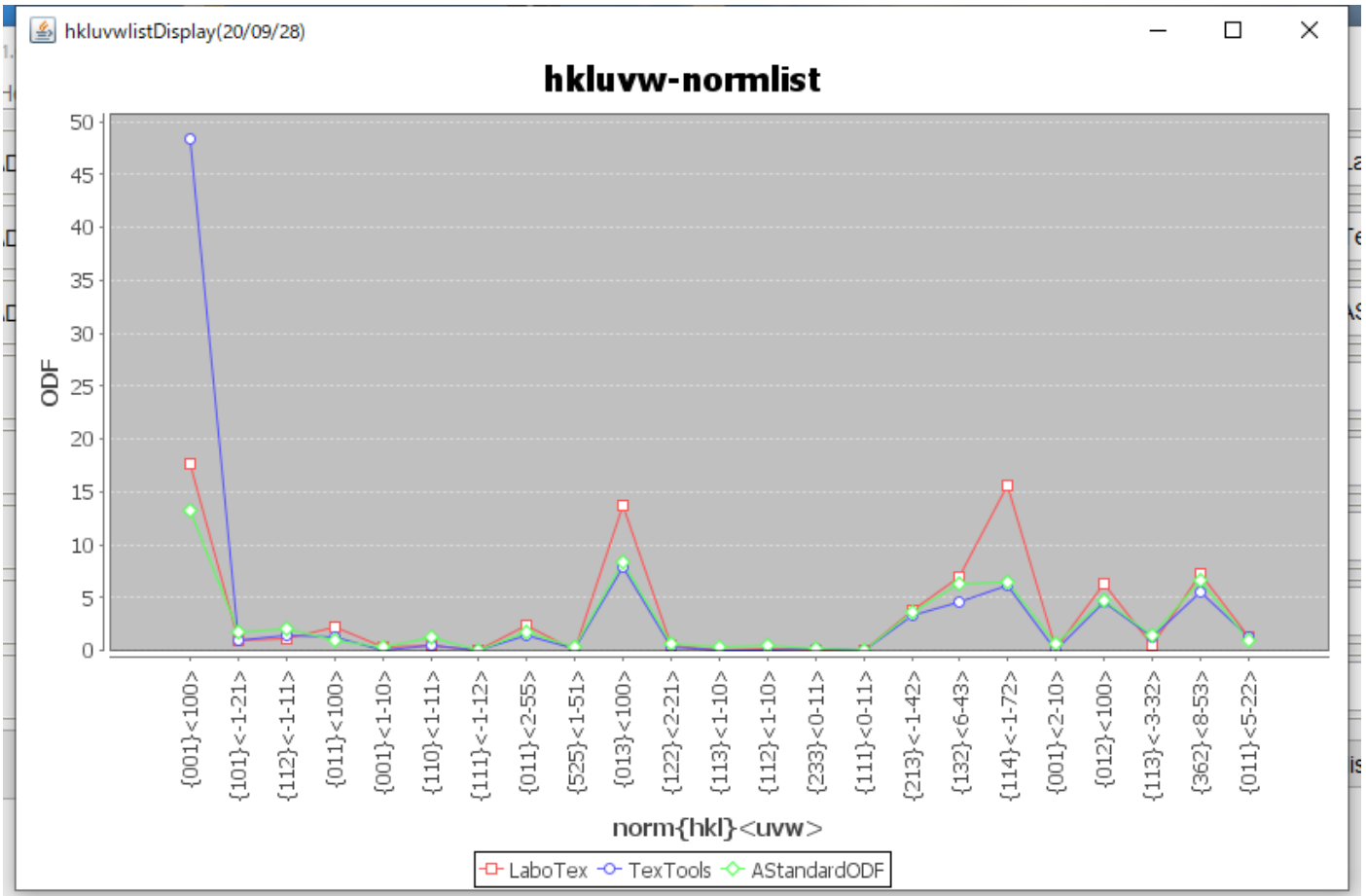
hkluvlistDisplay 1.05T[21/08/31] by CTR

File DISPSample Help

	C:\CTR\DATA\Aluminum-H-O\Aluminum-O\LaboTex\CW\labotexnorm.csv	<input checked="" type="radio"/> Dispselect	<input type="checkbox"/> DispODF	LaboTex
	C:\CTR\DATA\Aluminum-H-O\Aluminum-O\TexTools\textoolsnorm.csv	<input checked="" type="radio"/> Dispselect	<input type="checkbox"/> DispODF	TexTools
	C:\CTR\DATA\Aluminum-H-O\Aluminum-O\StandardODF\standardodfnorm.csv	<input checked="" type="radio"/> Dispselect	<input type="checkbox"/> DispODF	AStandardODF
		<input type="radio"/> Dispselect	<input type="checkbox"/> DispODF	
		<input type="radio"/> Dispselect	<input type="checkbox"/> DispODF	
		<input type="radio"/> Dispselect	<input type="checkbox"/> DispODF	
		<input type="radio"/> Dispselect	<input type="checkbox"/> DispODF	
		<input type="radio"/> Dispselect	<input type="checkbox"/> DispODF	

MakeCSVFile Load C:\CTR\work\hkluvlistDisplay\hkluvlist.csv V-Axis ODF hkluvlistDisplayGraph

Comment hkluv-normlist



# hklistDisplay

より逆極点 36BOX比較

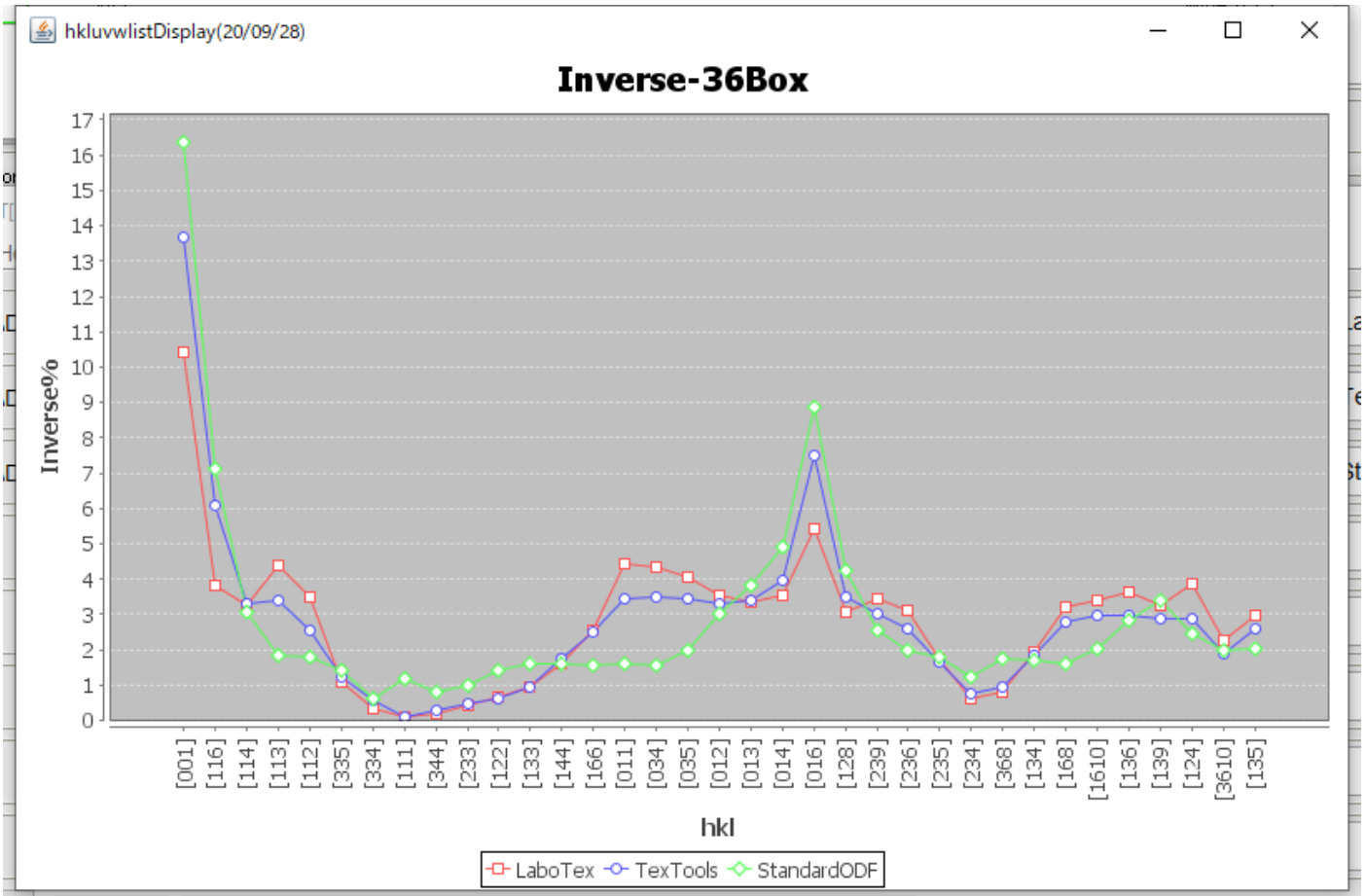
hklistDisplay 1.05T[21/08/31] by CTR

File DISPSample Help

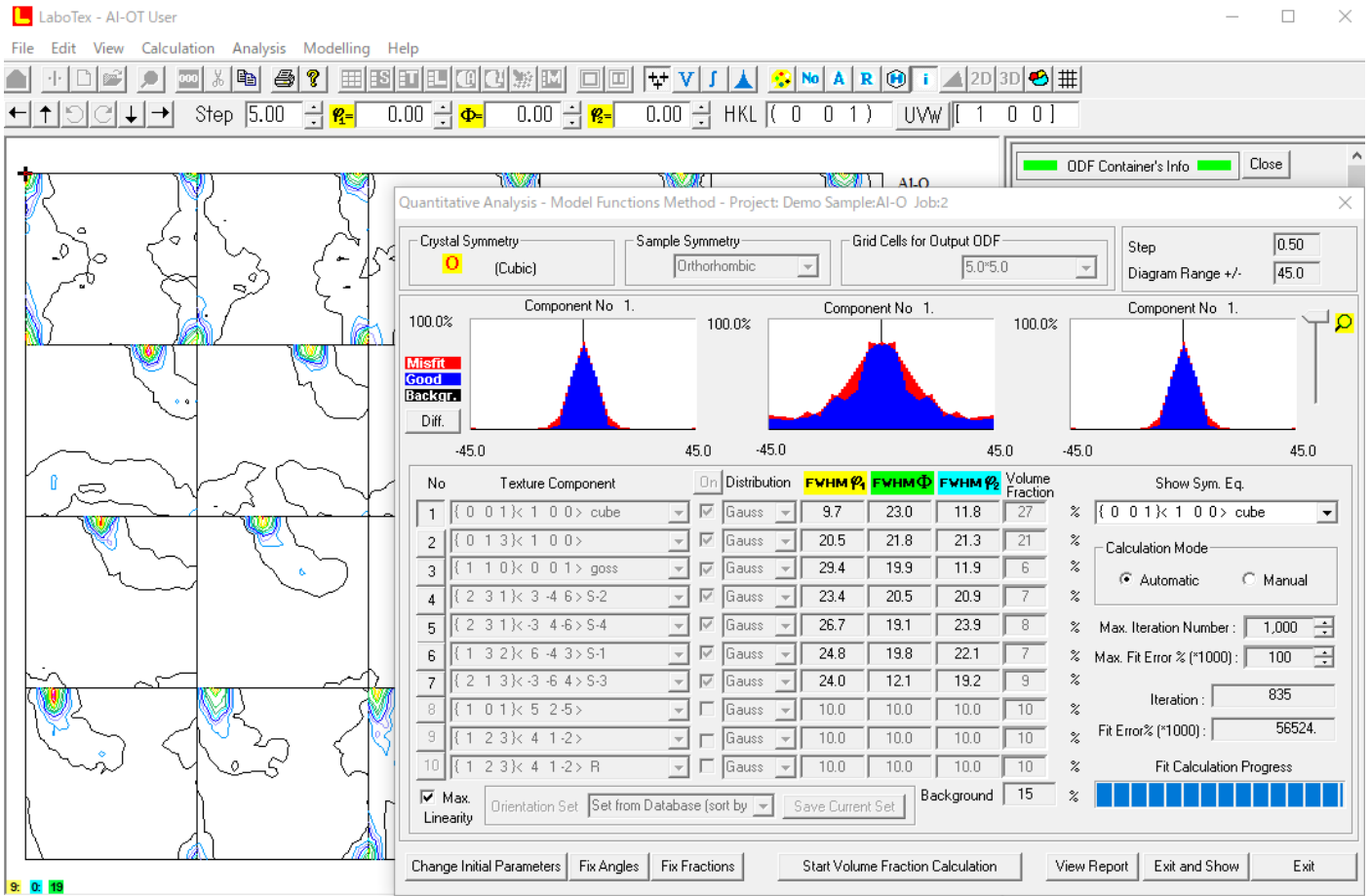
	C:\CTR\DATA\Aluminum-H-O\Aluminum-O\LaboTex\CWWD_Average-[111]HKL.TXT	<input checked="" type="radio"/> Dispselect	<input type="checkbox"/> DispODF	LaboTex
	C:\CTR\DATA\Aluminum-H-O\Aluminum-O\TexTools\NDHKL.TXT	<input checked="" type="radio"/> Dispselect	<input type="checkbox"/> DispODF	TexTools
	C:\CTR\DATA\Aluminum-H-O\Aluminum-O\StandardODF\TDHKL.TXT	<input checked="" type="radio"/> Dispselect	<input type="checkbox"/> DispODF	StandardODF
		<input type="radio"/> Dispselect	<input type="checkbox"/> DispODF	
		<input type="radio"/> Dispselect	<input type="checkbox"/> DispODF	
		<input type="radio"/> Dispselect	<input type="checkbox"/> DispODF	
		<input type="radio"/> Dispselect	<input type="checkbox"/> DispODF	
		<input type="radio"/> Dispselect	<input type="checkbox"/> DispODF	

MakeCSVFile Load C:\CTR\work\hkluvlistDisplay\hkluvlist.csv V-Axis Inverse% hkluvlistDisplayGraph

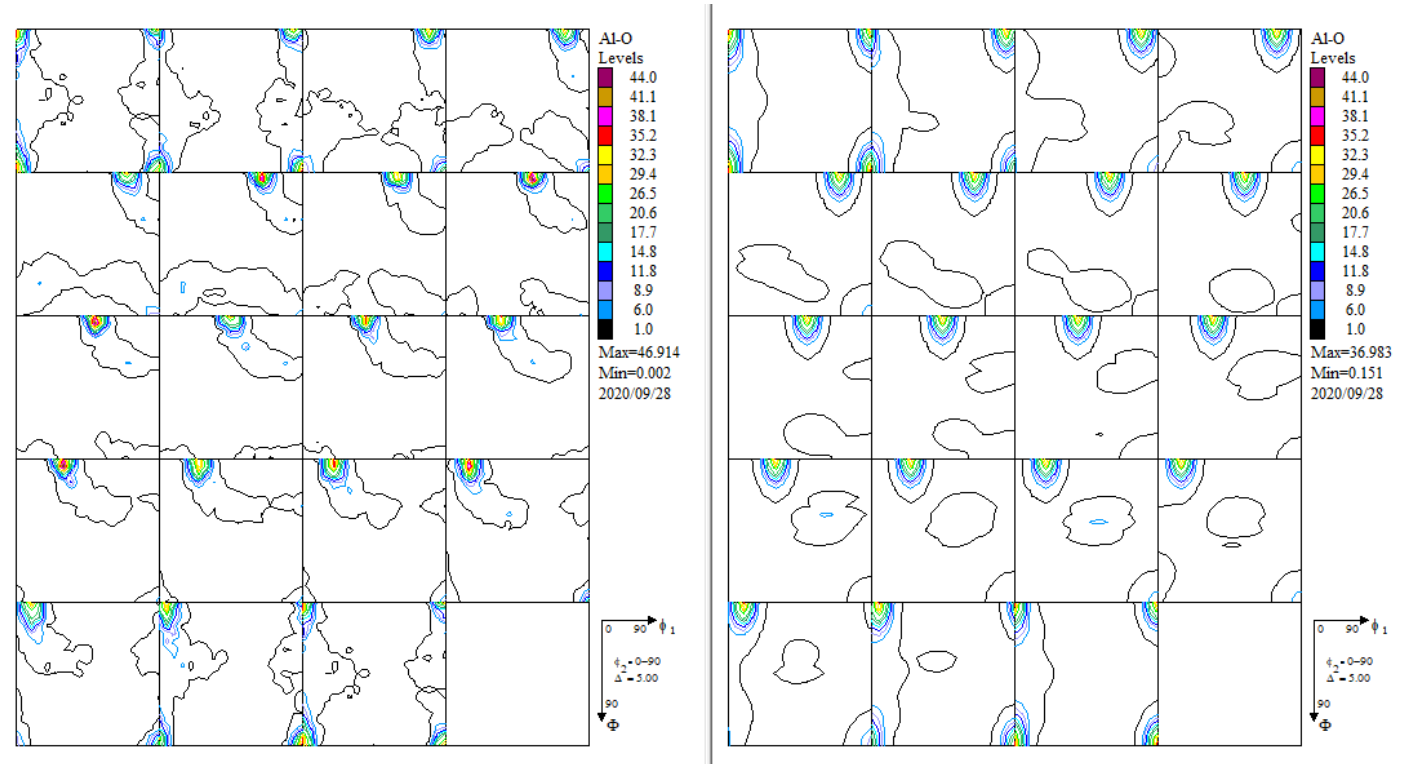
Comment Inverse-36Box



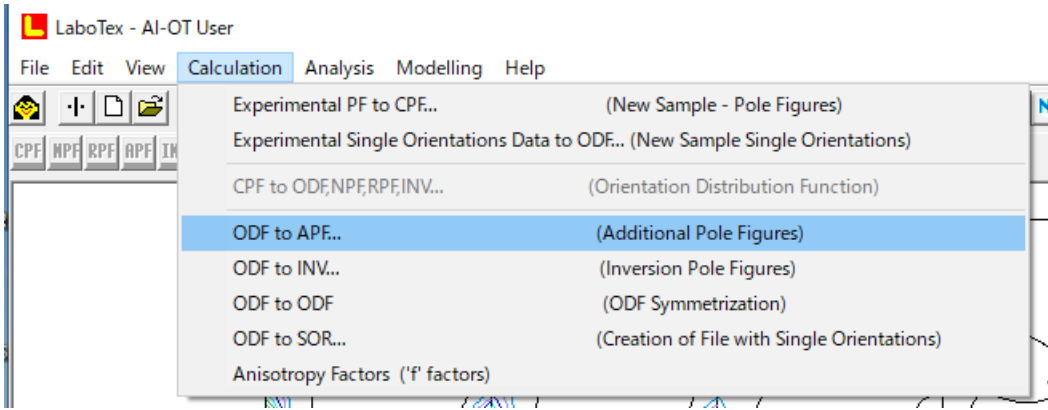
# 10. LaboTexのVolumeFraction計算



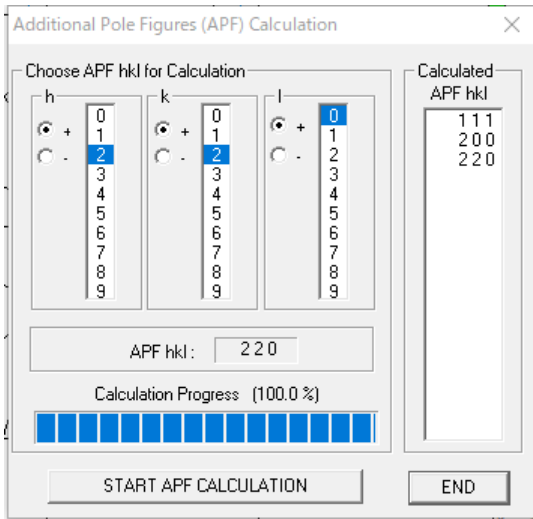
ODF 解析結果と VolumeFraction 解析結果の ODF 図



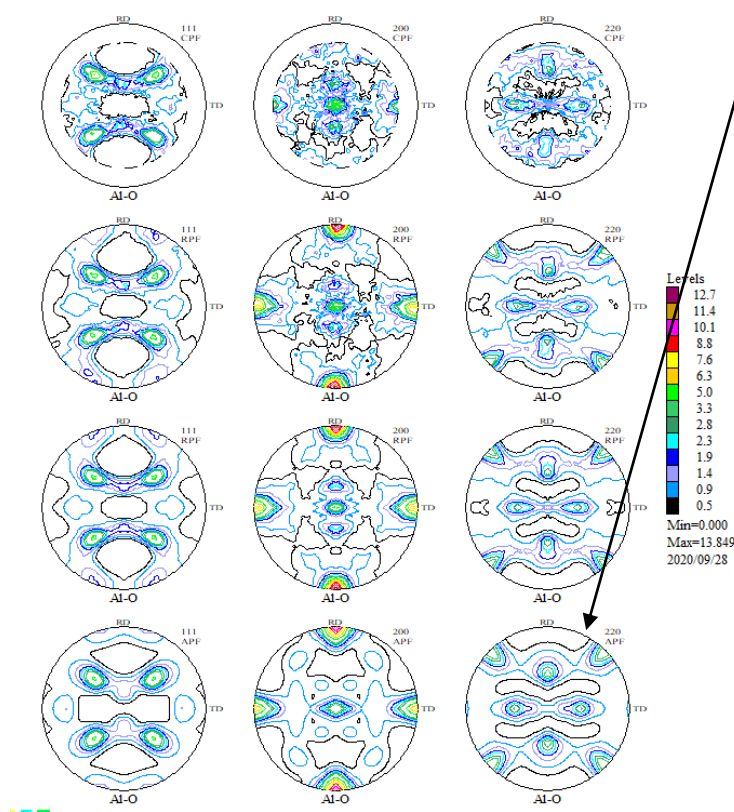
# VolumeFraction 結果から再々計算極点図



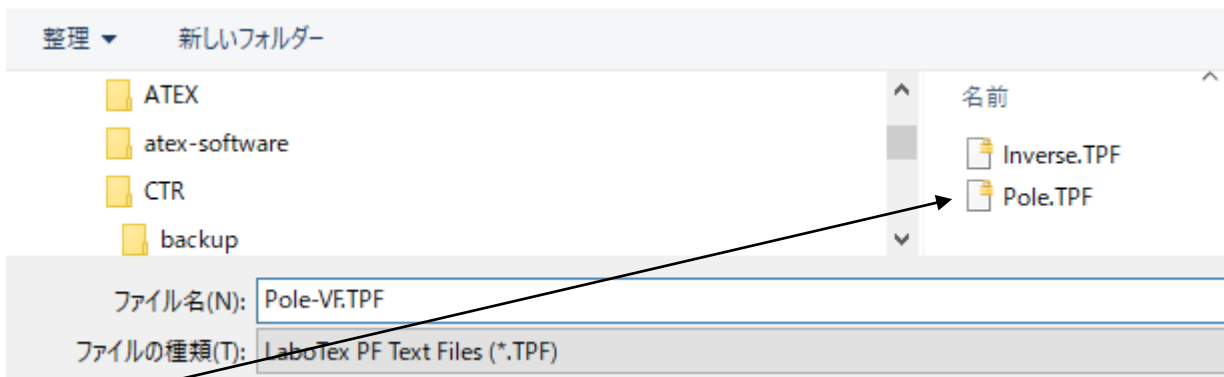
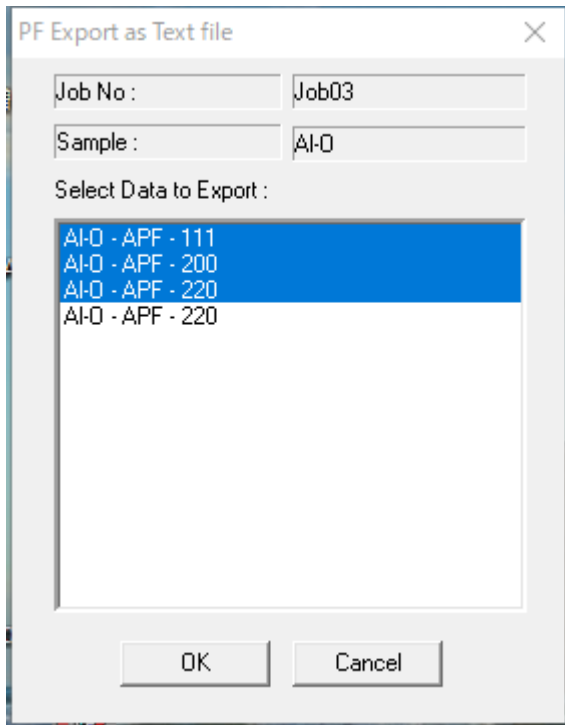
## 極点図作成



## 作成された再々計算極点図

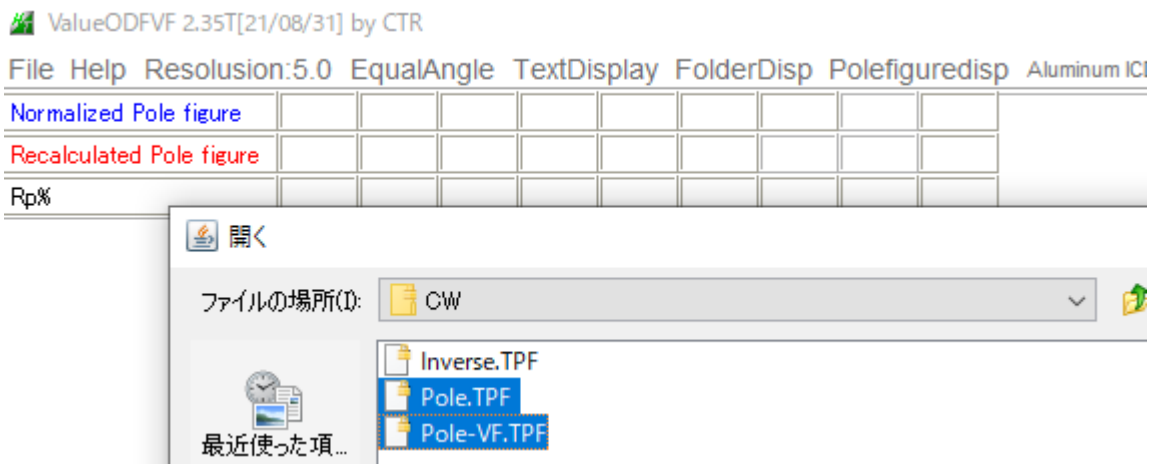


VolumeFraction 結果の極点図を E x p o r t し R p % を計算

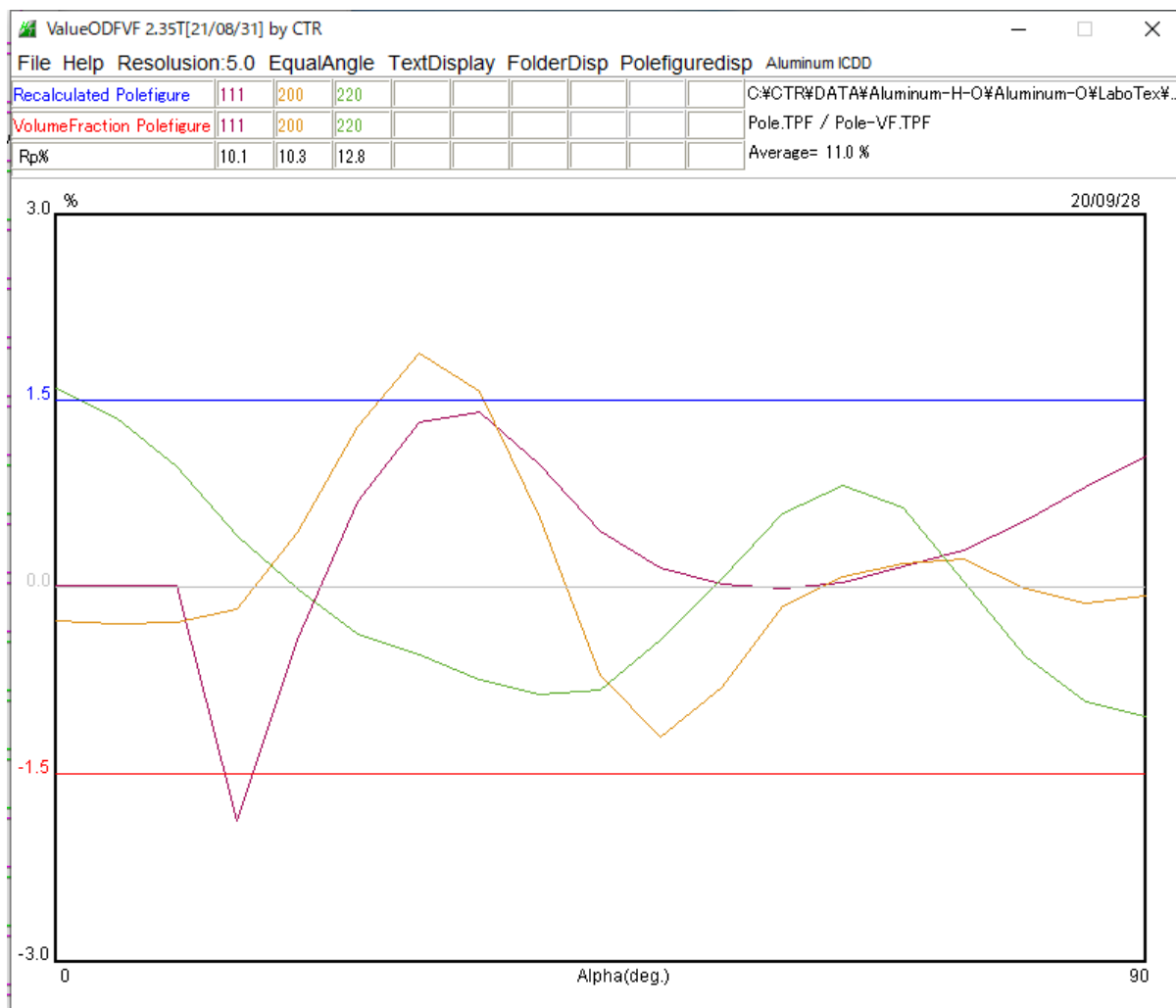


前回 E x p o r t したファイル名より文字数を多くする。

複数選択



再計算極点図と再々計算極点図のR<sub>p</sub>%を計算しました。



# Volume Fraction 結果

(C:) > LaboTex2 > USER > AI-OT.LAB > O-Cubic.LAB > Demo.LAB > AI-O.LAB > Job03

名前	更新日時	種類	サイズ
AI-O.APF	2020/09/28 8:52	APF ファイル	8 KB
AI-O.ODF	2020/09/28 8:48	ODF ファイル	27 KB
<input checked="" type="checkbox"/> AI-O.POD	2020/09/28 8:49	POD ファイル	2 KB

LaboTex - Texture - Quantitative Analysis Report  
 User: AI-OT  
 Project: Demo  
 Sample: AI-O  
 Job: 3  
 Date: 2020/09/28  
 Time: 08:49:14

Volume Fraction	FWHM Phil	FWHM Phi	Phi2	Orientation
Component No 1 28.93	- Distribution :Gauss 9.7	23.0	11.8	{ 0 0 1 } < 1 0 0 > cube
Component No 2 21.18	- Distribution :Gauss 20.5	21.8	21.3	{ 0 1 3 } < 1 0 0 >
Component No 3 8.34	- Distribution :Gauss 29.4	19.9	11.9	{ 1 1 0 } < 0 0 1 > goss
Component No 4 8.77	- Distribution :Gauss 23.4	20.5	20.9	{ 2 3 1 } < 3 -4 6 > S-2
Component No 5 7.96	- Distribution :Gauss 26.7	19.1	23.9	{ 2 3 1 } < -3 4 -6 > S-4
Component No 6 7.16	- Distribution :Gauss 24.8	19.8	22.1	{ 1 3 2 } < 6 -4 3 > S-1
Component No 7 8.57	- Distribution :Gauss 24.0	12.1	19.2	{ 2 1 3 } < -3 -6 4 > S-3

表示は

