

Fe 試料による

## LaboTex, StandardODF 解析比較

同じ入力データでも、ODF解析ソフトウェア（解析方法）が異なれば  
解析結果は異なります。

StandardODFはHermonic法であり、  
直接法である、WIMV, ADC, Vector法に比べ、最大結晶方位密度（ODFのMax）や  
再計算極点図の最大極密度は低い値になります。

2016年12月29日

*HelperTex Office*

1. 概要
2. 入力極点図
3. 極点処理
  3. 1 バックグラウンド
  3. 2 規格化と極点図中心の平均化
  3. 3 Defocus補正 (内部計算モード)
  3. 4 Rp%の自動補正
  3. 5 データ処理後データ(BG,defocus、Rp%)
  3. 6 Error評価 (Rp%処理前)
  3. 7 Error評価 (Rp%処理後)
4. LaboTex,StandardODF 入力データ作成
  4. 1 PFtoODF3 ソフトウェアに TXT2 データが渡される。
  4. 2 LaboTex 入力データ
  4. 3 StandardODF 入力データ
  4. 4 作成されるファイル
5. StandardODF解析
  5. 1 ワークエリアから解析データのExport
  5. 2 StandardODFのError評価 (Rp%)
  5. 3 StandardODFで得られるデータ
  5. 4 StandardODFのODF図表示
  5. 5 再計算極点図表示
  5. 6 極点図表示
6. LaboTex 処理
  6. 1 PFtoODF3 で作成した epf ファイルを選択
  6. 2 入力された極点図
  6. 3 1/4対称 ODF 解析
  6. 4 ODF 図
    6. 4. 1  $\gamma$ -Fiber ( $\phi 2 = 45$ 、 $\Phi = 54.7$ )
  6. 5 入力極点図と再計算極点図 (上段:入力極点図、中段:1/4対称、下段:再計算極点図)
  6. 6 Error評価
  6. 7 逆極点図
  6. 8 定量 (VolumeFraction)
    6. 8. 1 結晶方位の定量 (Integration Method)
    6. 8. 2 結晶方位の定量 (Model Function Method)
    6. 8. 3 VolumeFraction のError評価
7. CTRソフトウェアによる比較
  7. 1 ODFDisplay2 による比較
    7. 1. 1 ODF 密度 1.5以上の結晶方位比較
    7. 1. 2  $\gamma$ -Fiber 比較  $\langle 111 \rangle // ND$  ( $\phi 10 \rightarrow 90$ )
    7. 1. 3  $\eta$ -Fiber  $\langle 110 \rangle // RD$
  7. 2 GPPoleDisplay で再計算極点図比較
  7. 3 逆極点図比較

## 1. 概要

LaboTexとStandardODFでは解析方法が異なるため、解析結果は異なります。アルミニウムの様な高配向材料では大きく異なるが、Fe試料などの低配向材料では大きな違いはありません。本資料では、個々の機能紹介と、各解析結果をCTRソフトウェアで比較を行います。

## 2. 入力極点図

測定システム

rigaku-SmartLab (Co管球使用)

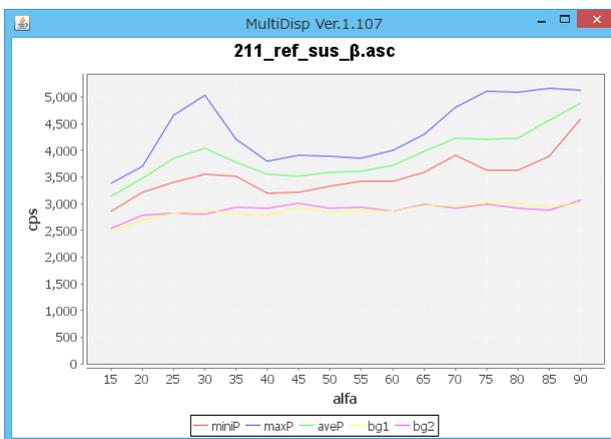
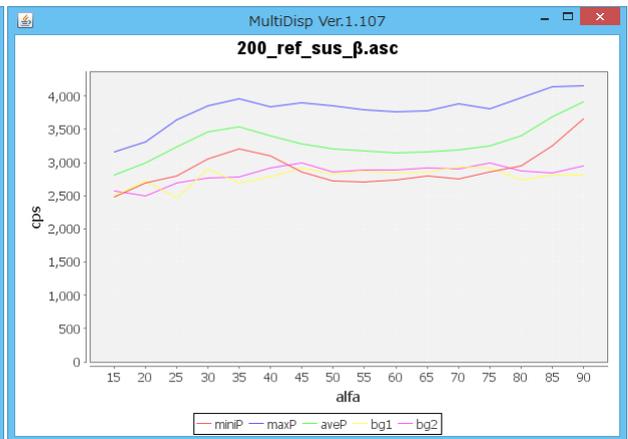
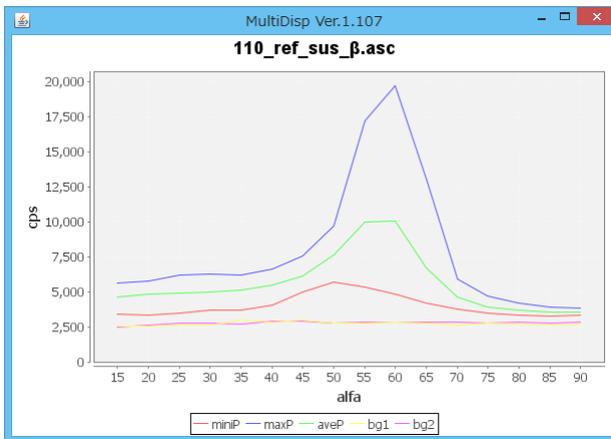
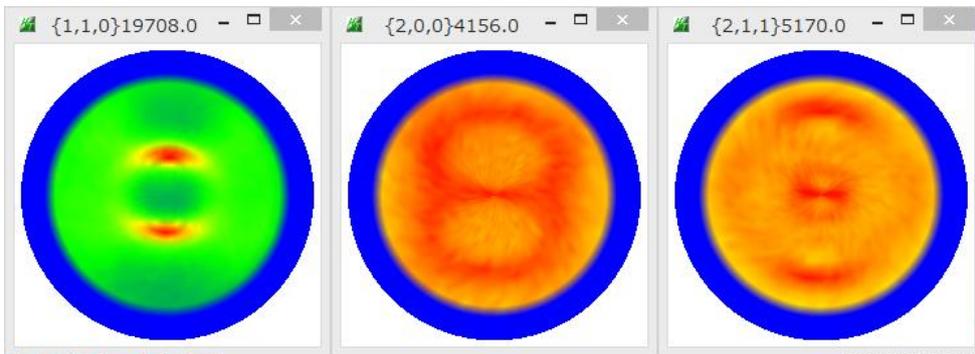
40kV-40mA

スリット DS: 1deg., RS: 10mm, SS: 10mm

$\alpha$ 軸: 15-90度、5deg./step

$\beta$ 軸: 0-360度、5deg./step、speed: 600deg./min.

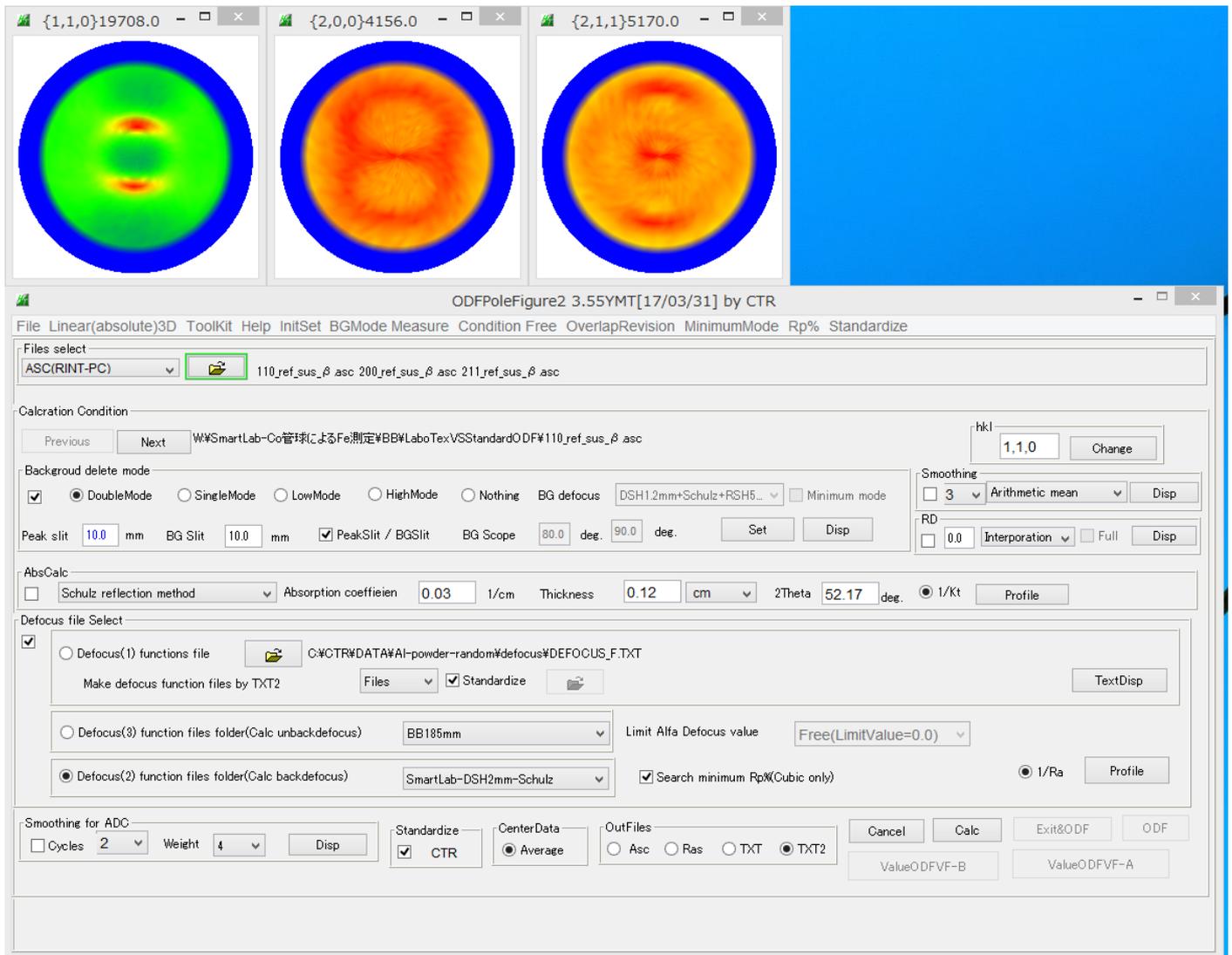
バックグラウンド: 2点測定



極点図バックグラウンドに凸凹がある。  
ODFPoleFigure2 のバックグラウンド平滑化機能を使用する。

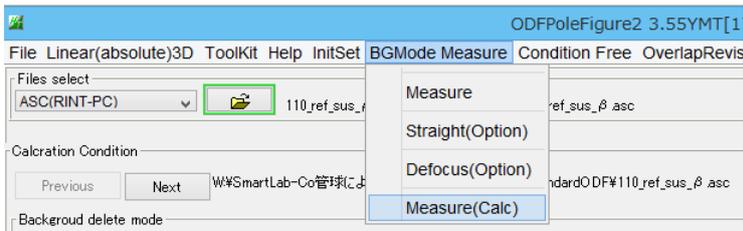
Defocus補正データは、ODFPoleFigure2 ソフトウェアの内部計算機能で補正を行う。

### 3. 極点処理

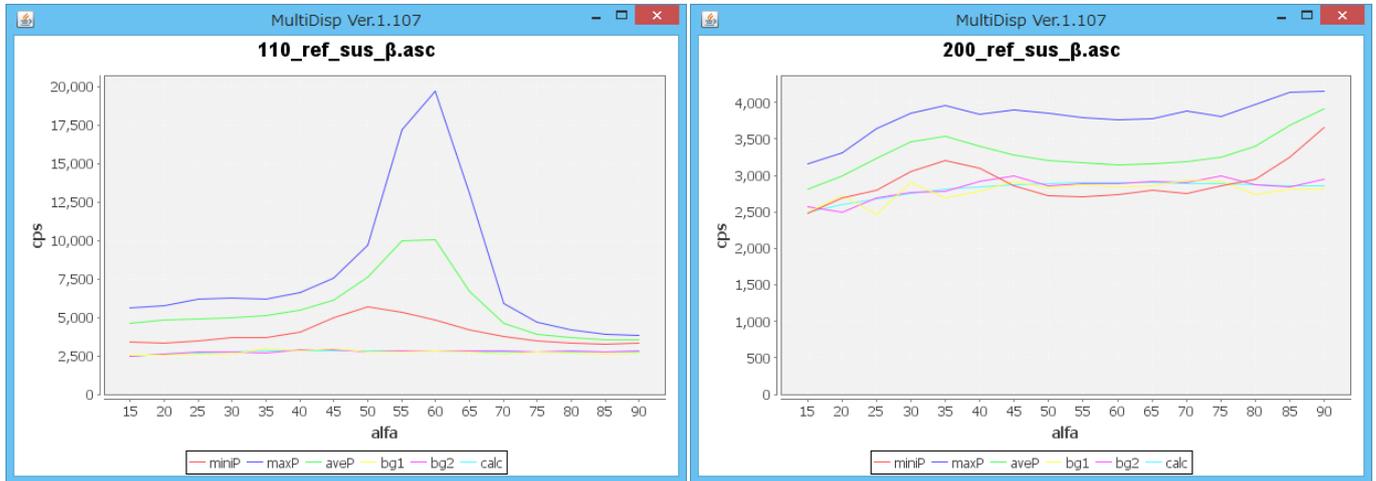


バックグラウンド処理、defocus補正、内部規格化、極点図の中心は平均値Rp%の最適化が選択されています。

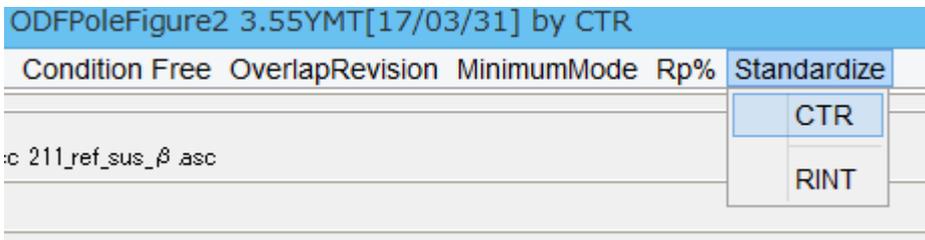
### 3. 1 バックグラウンド



Measure (calc) モードで平滑化



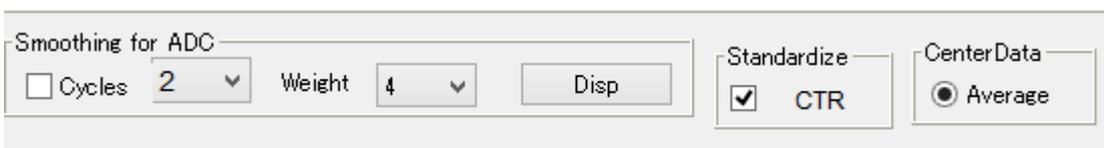
### 3. 2 規格化と極点図中心の平均化



規格化は完全極点図に対して有効であるが、同様の処理を不完全極点図でも行っています。

CTRは、L a b o T e x と同じ処理を行います。

R I N Tは、極点図の  $\alpha$  軸が、0度と90度の場合、評価を1/2としています。



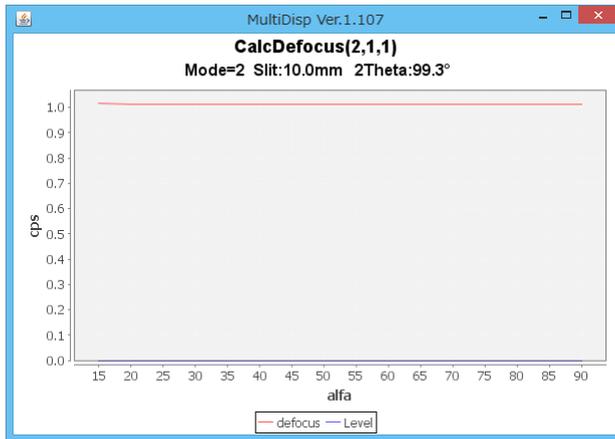
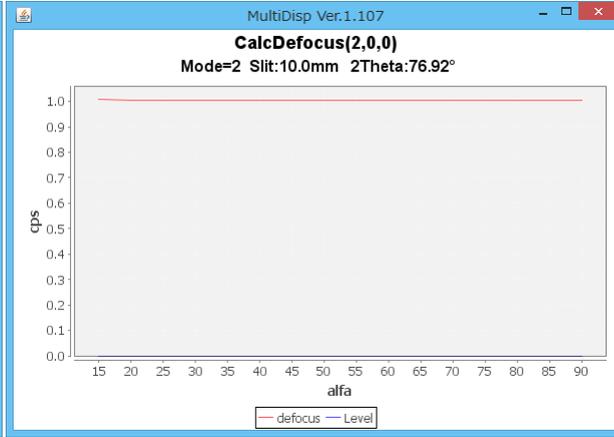
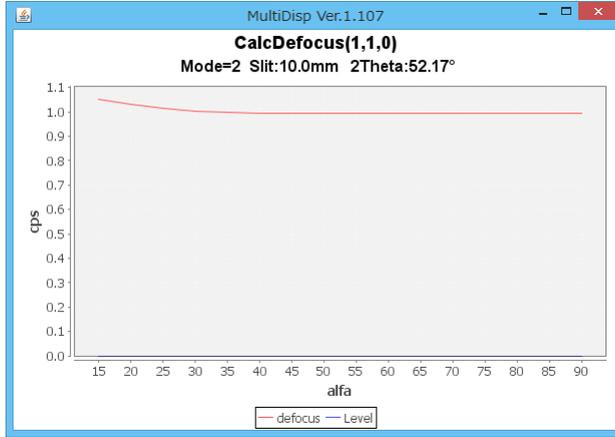
### 3. 3 Defocus補正 (内部計算モード)

Defocus file Select

Defocus(1) functions file  C:\CTR#DATA#AI-powder-random#defocus#DEFOCUS\_F.TXT  
 Make defocus function files by TXT2   Standardize

Defocus(3) function files folder(Calc unbackdefocus) BB185mm Limit Alfa Defocus value Free(LimitValue=0.0)

Defocus(2) function files folder(Calc backdefocus) SmartLab-DSH2mm-Schulz  Search minimum Rp%(Cubic only)  1/Ra



### 3. 4 Rp%の自動補正

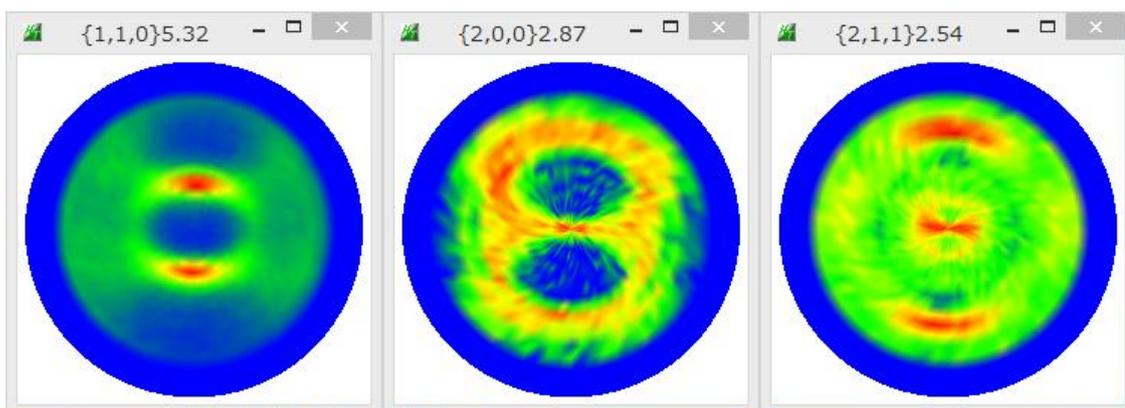
Defocus(3) function files folder(Calc unbackdefocus) BB185mm Limit Alfa Defocus value Free(LimitValue=0.0)

Defocus(2) function files folder(Calc backdefocus) SmartLab-DSH2mm-Schulz  Search minimum Rp%(Cubic only)  1/Ra

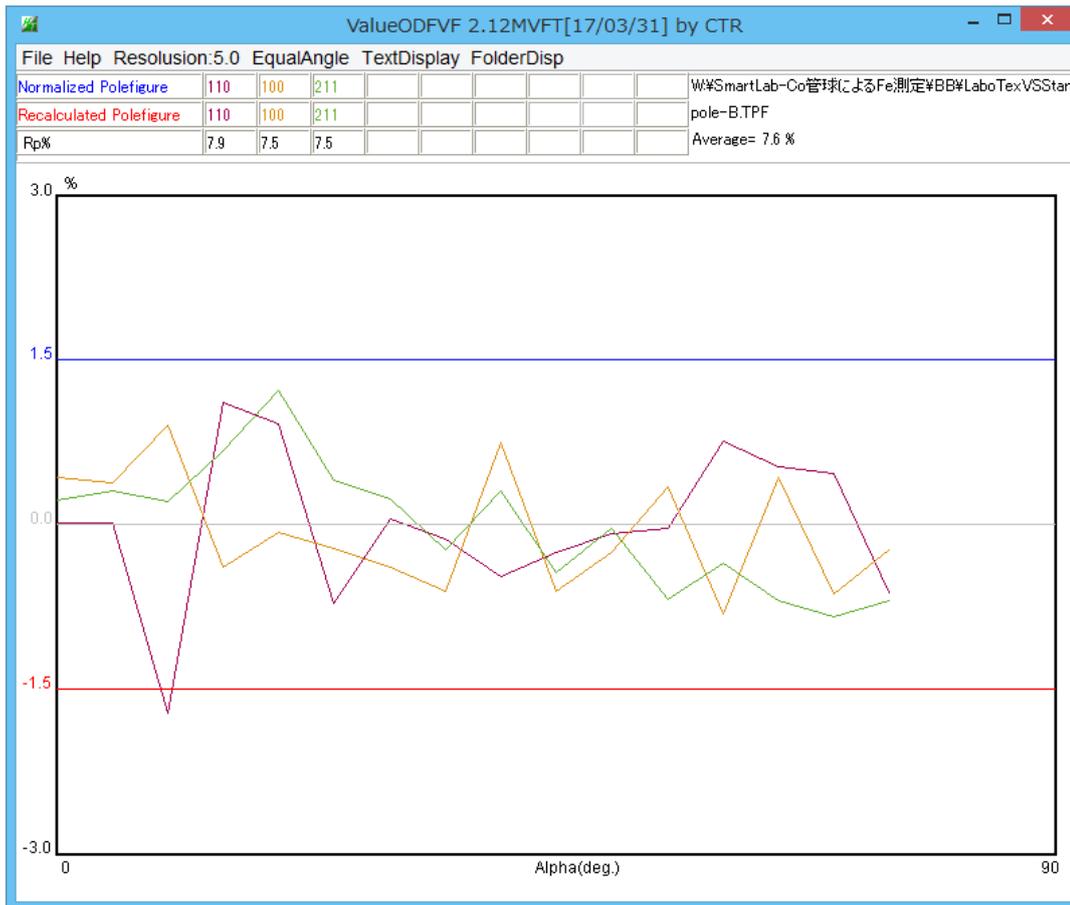
Smoothing for ADC  
 Cycles 2 Weight 4 Disp  Standardize  CenterData  Average  Asc  Ras  TXT  TXT2

Search Rp% (1,1,0) 7.87% -> 8.0% (2,0,0) 7.49% -> 6.95% (2,1,1) 7.55% -> 5.37% Filemake success!!

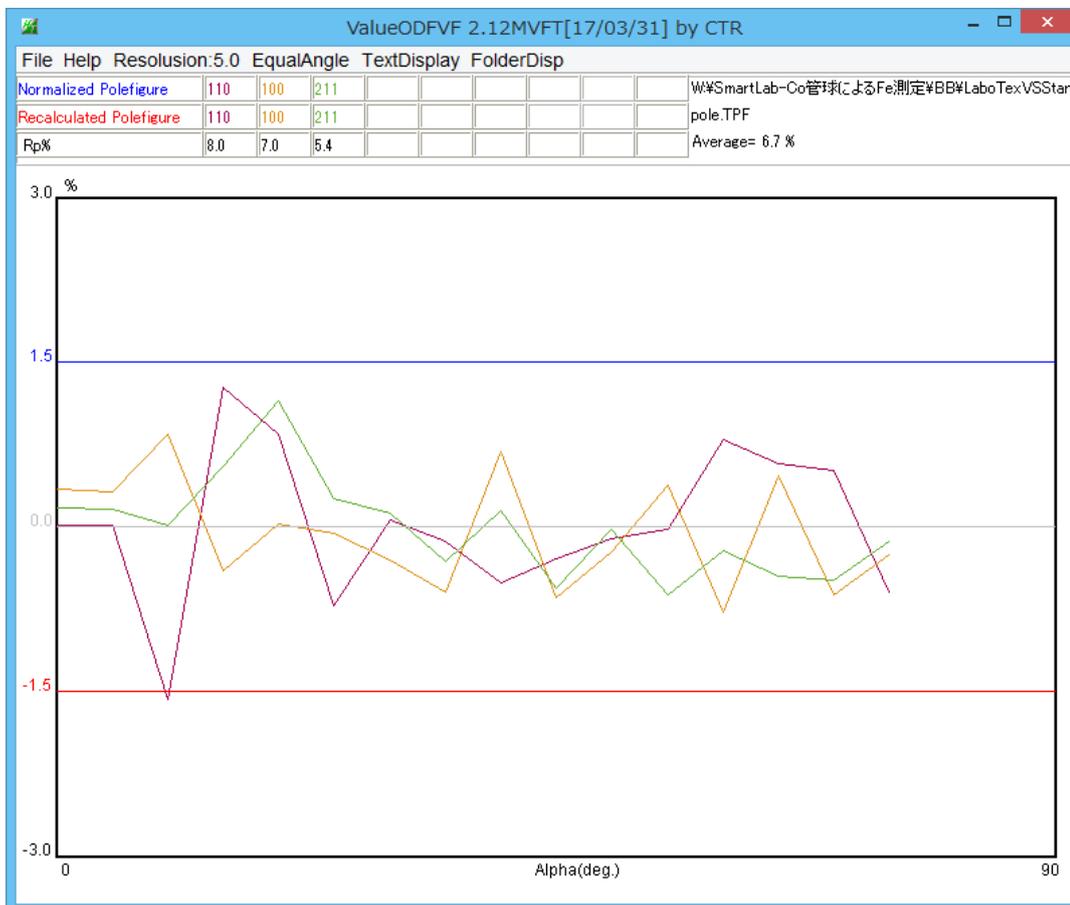
### 3. 5 データ処理後データ(BG,defocus、Rp%)



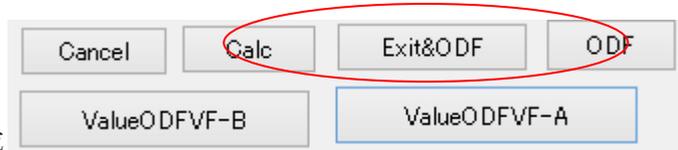
3. 6 Error評価 ValueODFVF-B (Rp%処理前)



3. 7 Error評価 ValueODFVF-A (Rp%処理後)

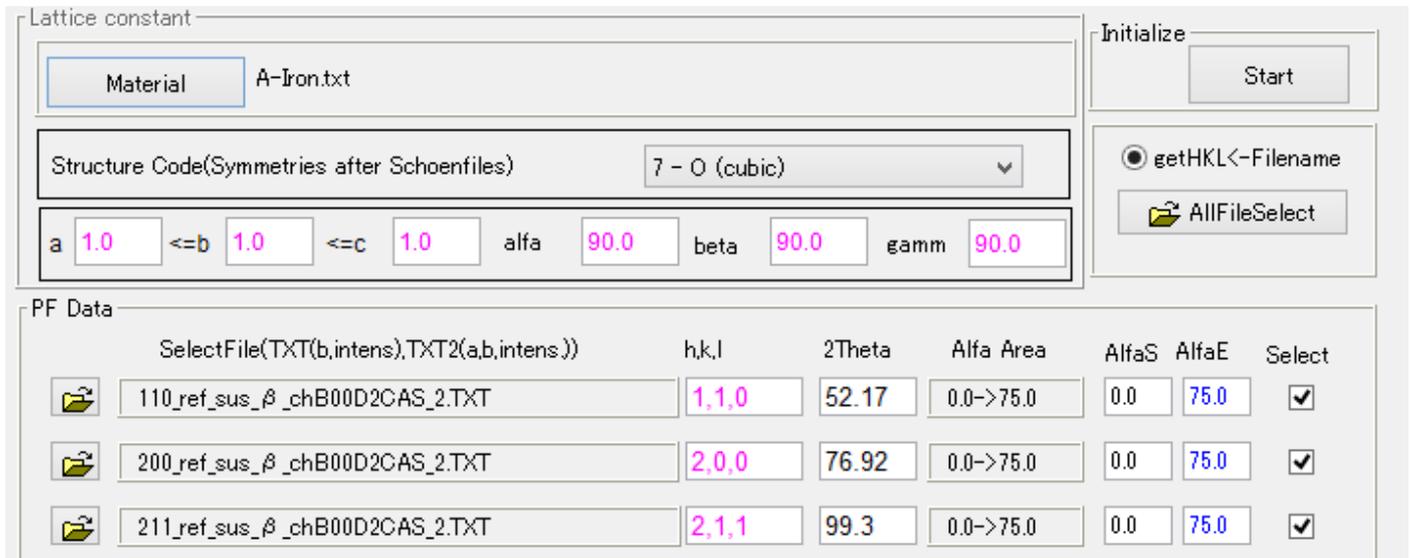


Rp%が±1.5%以内  
測定結果は正常

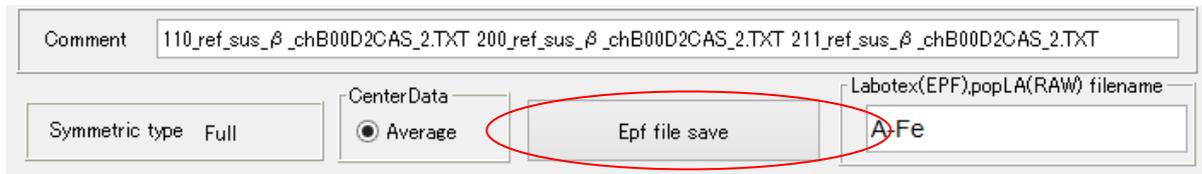


4. LaboTex, StandardODF 入力データ作成

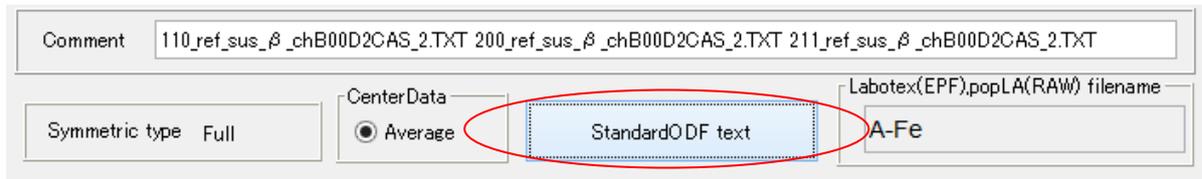
4. 1 PFtoODF3 ソフトウェアに TXT2 データが渡される。



4. 2 LaboTex 入力データ



4. 3 StandardODF 入力データ



4. 4 作成されるファイル StandardODF ホルダ LaboTex ホルダ Rp%計算ホルダ

入力データ	StandardODF ホルダ	LaboTex ホルダ	Rp%計算ホルダ
211_ref_sus_beta	2012/05/22 13:21	RINT20007アキ-	22 KB
200_ref_sus_beta	2012/05/22 12:54	RINT20007アキ-	22 KB
110_ref_sus_beta	2012/05/22 12:18	RINT20007アキ-	22 KB
StandardODF	2016/12/28 17:35	ファイル フォルダ	
LaboTex	2016/12/28 17:33	ファイル フォルダ	
CTRODF	2016/12/28 7:33	ファイル フォルダ	

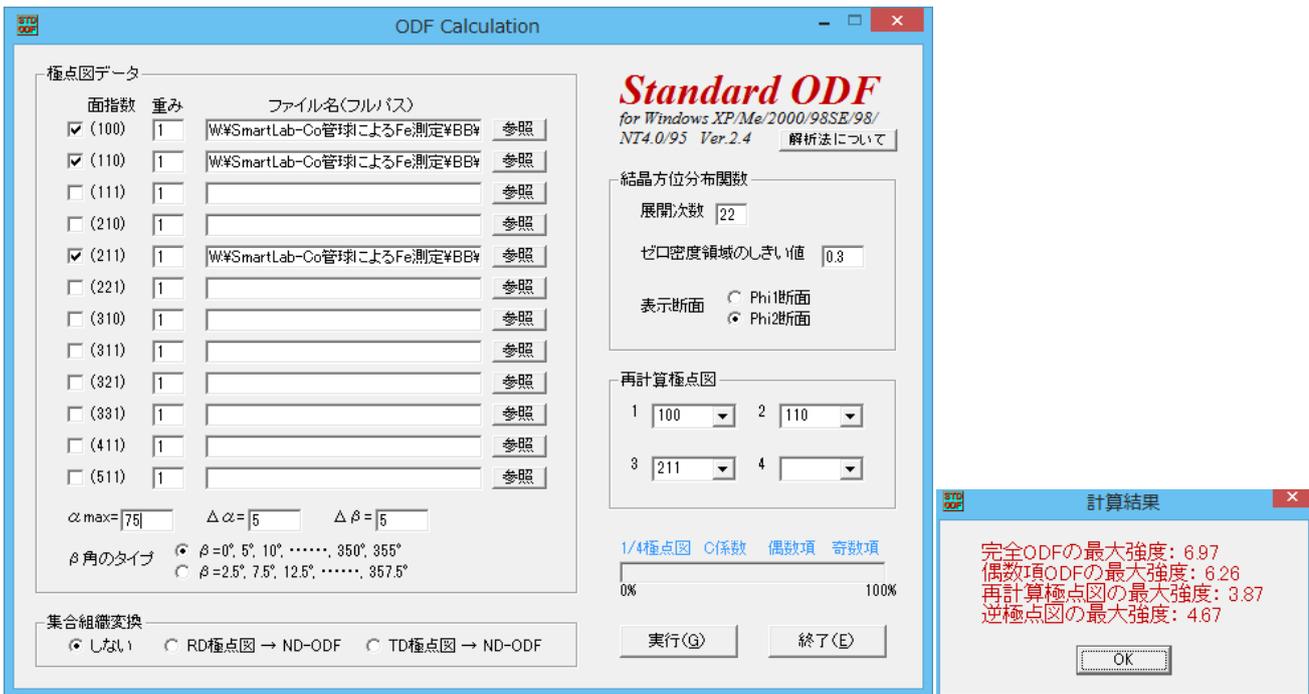
StandardODF ホルダ

名前	更新日時	種類	サイズ
110_ref_sus_beta_chB00D2CAS_2StdODF	2016/12/28 17:35	テキスト文書	11 KB
200_ref_sus_beta_chB00D2CAS_2StdODF	2016/12/28 17:35	テキスト文書	10 KB
211_ref_sus_beta_chB00D2CAS_2StdODF	2016/12/28 17:35	テキスト文書	11 KB

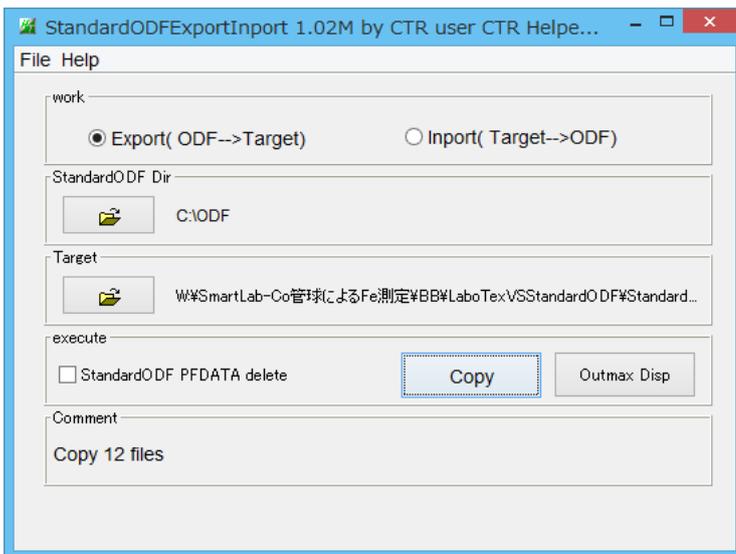
LaboTex ホルダ

名前	更新日時	種類	サイズ
A-Fe	2016/12/28 17:33	Exchange...	35 KB

## 5. StandardODF解析



### 5. 1 ワークエリアから解析データのE x p o r t



StandardODF のワークフォルダは C:\¥ODF で、常に上書きされます。対応はデータのE x p o r t します。E x p o r t データを戻すには、I n p o r t します。

▶ LaboTexVSStandardODF ▶ StandardODF

名前	更新日時	種類	サイズ
110_ref_sus_β_chB00D2CAS_2StdODF	2016/12/28 17:35	テキスト文書	11 KB
200_ref_sus_β_chB00D2CAS_2StdODF	2016/12/28 17:35	テキスト文書	10 KB
211_ref_sus_β_chB00D2CAS_2StdODF	2016/12/28 17:35	テキスト文書	11 KB
Data10	2016/12/28 17:49	テキスト文書	8 KB
Dtcubin1	2016/12/28 17:48	テキスト文書	1 KB
EVNCOEF	2016/12/28 17:50	ファイル	4 KB
ODDCOEF	2016/12/28 17:50	ファイル	3 KB
ODF13	2016/12/28 17:49	ファイル	5 KB
ODF14	2016/12/28 17:49	ファイル	28 KB
ODF15	2016/12/28 17:49	ファイル	28 KB
ODF16	2016/12/28 17:50	ファイル	88 KB
Outmax	2016/12/28 17:49	テキスト文書	1 KB
OUTPUT1	2016/12/28 17:48	テキスト文書	18 KB
OUTPUT2	2016/12/28 17:48	テキスト文書	72 KB
OUTPUT3	2016/12/28 17:49	テキスト文書	49 KB

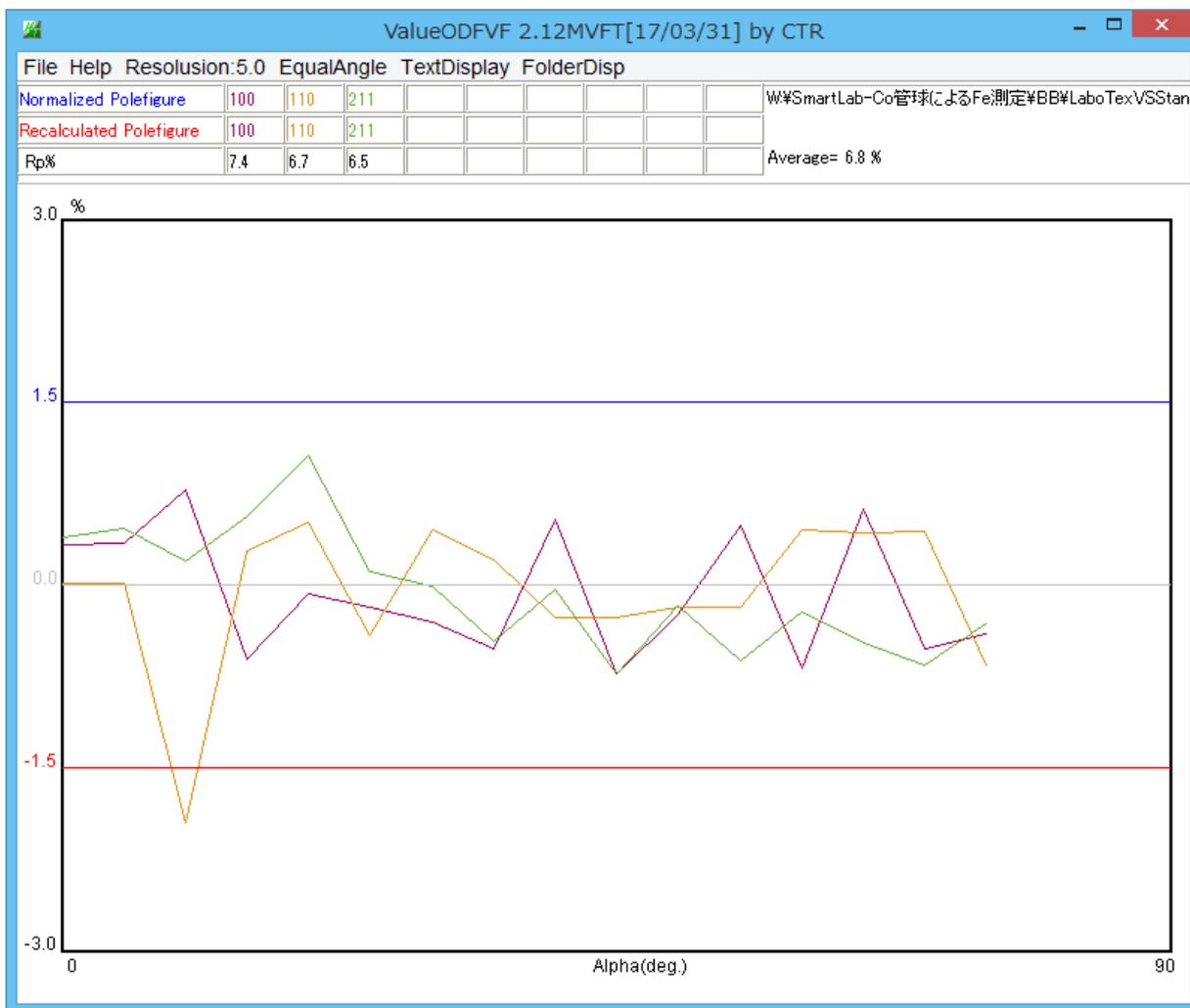
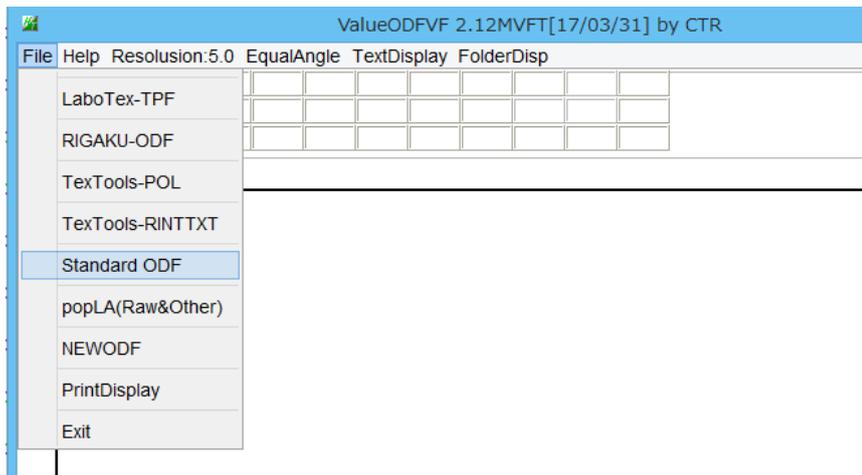
入力データ

再計算極点図

ODF図

逆極点図

## 5. 2 StandardODFのError評価 (Rp%)



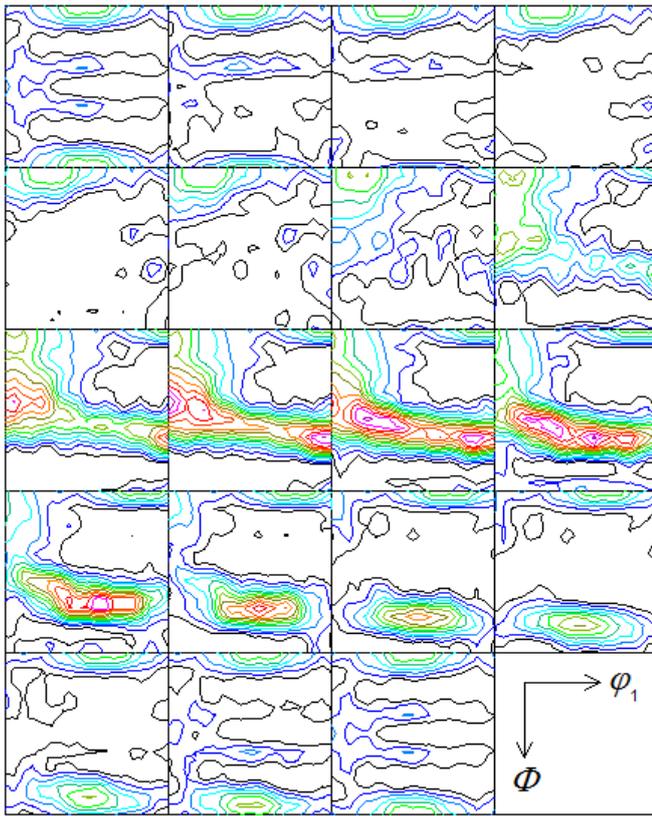
ODFPoleFigure2 で最適化した Rp % とほぼ同一の結果が得られます。

## 5. 3 StandardODFで得られるデータ

解析されたODF図と再計算極点図、逆極点図ファイルと

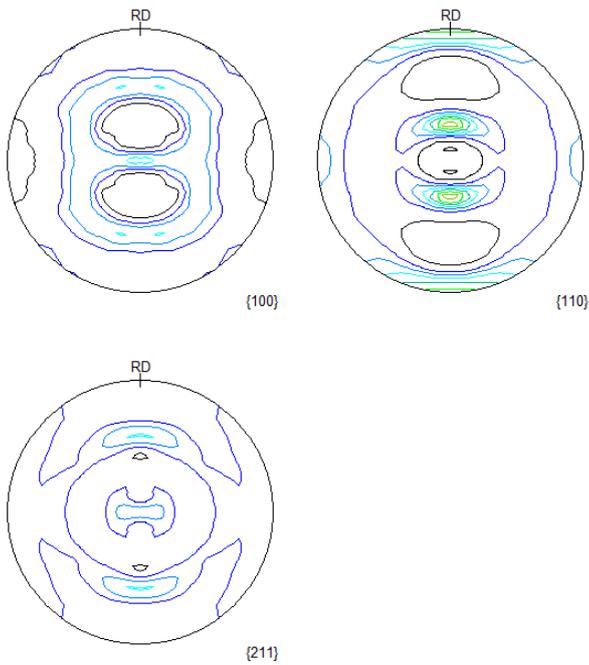
ODF図表示、再計算極点図表示、逆極点図表示

5. 4 Standard ODFのODF図表示



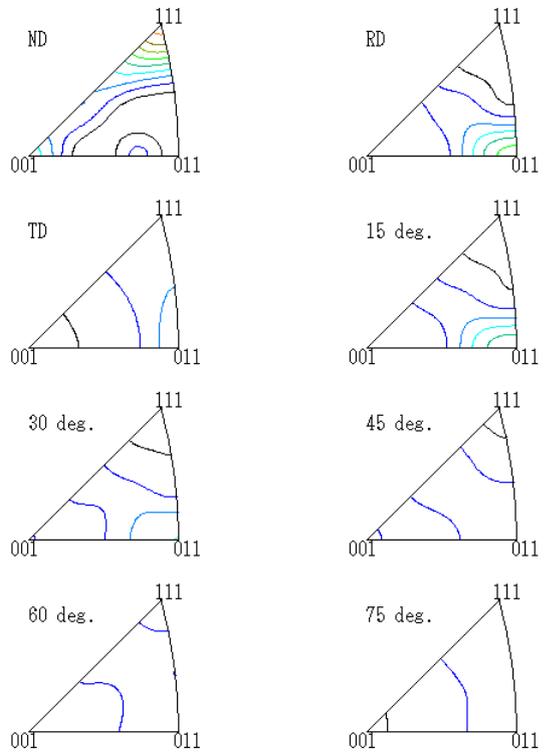
Contour Levels: 0.5 1.0 1.5 2.0 2.5 3.0 3.5 4.0 4.5 5.0 5.5 6.0 6.5

5. 5 再計算極点図表示



Contour Levels: 0.5 1.0 1.5 2.0 2.5 3.0 3.5

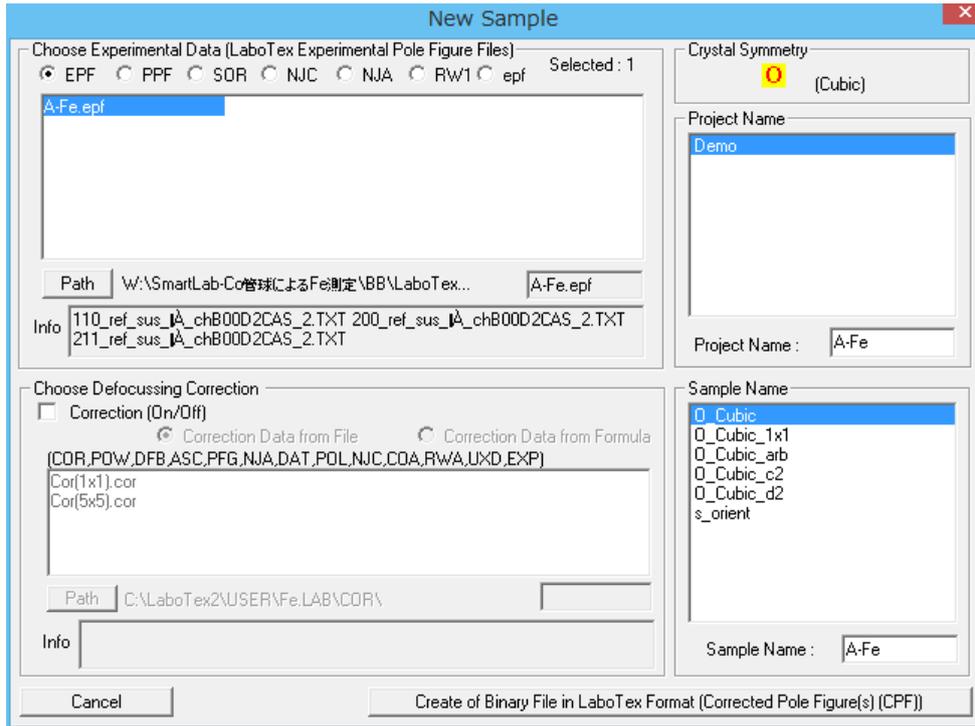
5. 6 極点図表示



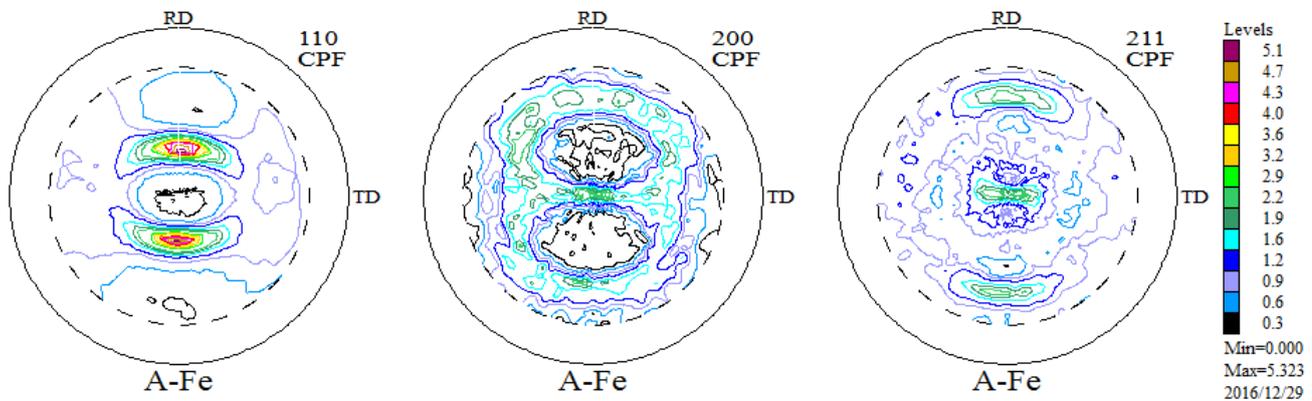
Contour Levels: 0.5 1.0 1.5 2.0 2.5 3.0 3.5 4.0 4.5

## 6. LaboTex 処理

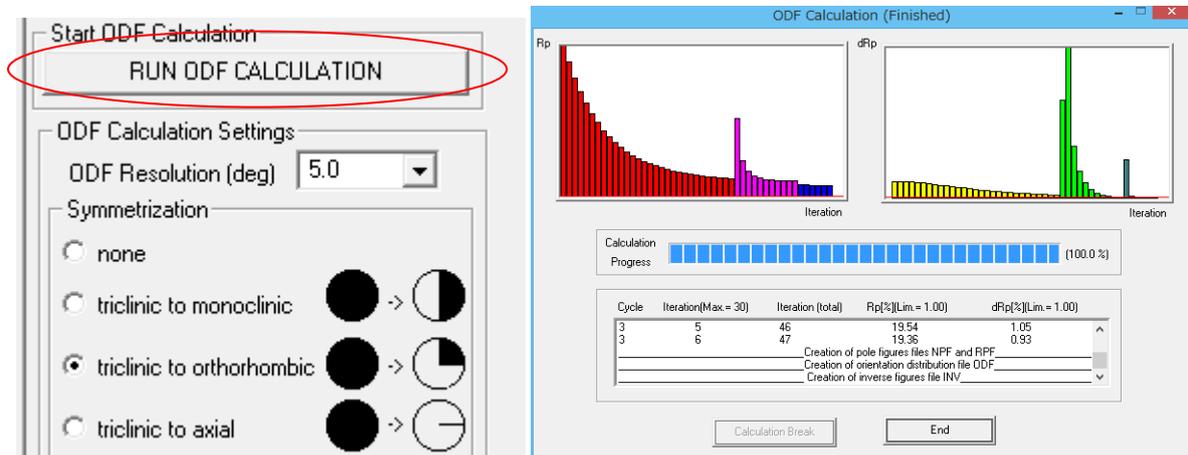
### 6. 1 PFtoODF3 で作成した epf ファイルを選択



### 6. 2 入力された極点図



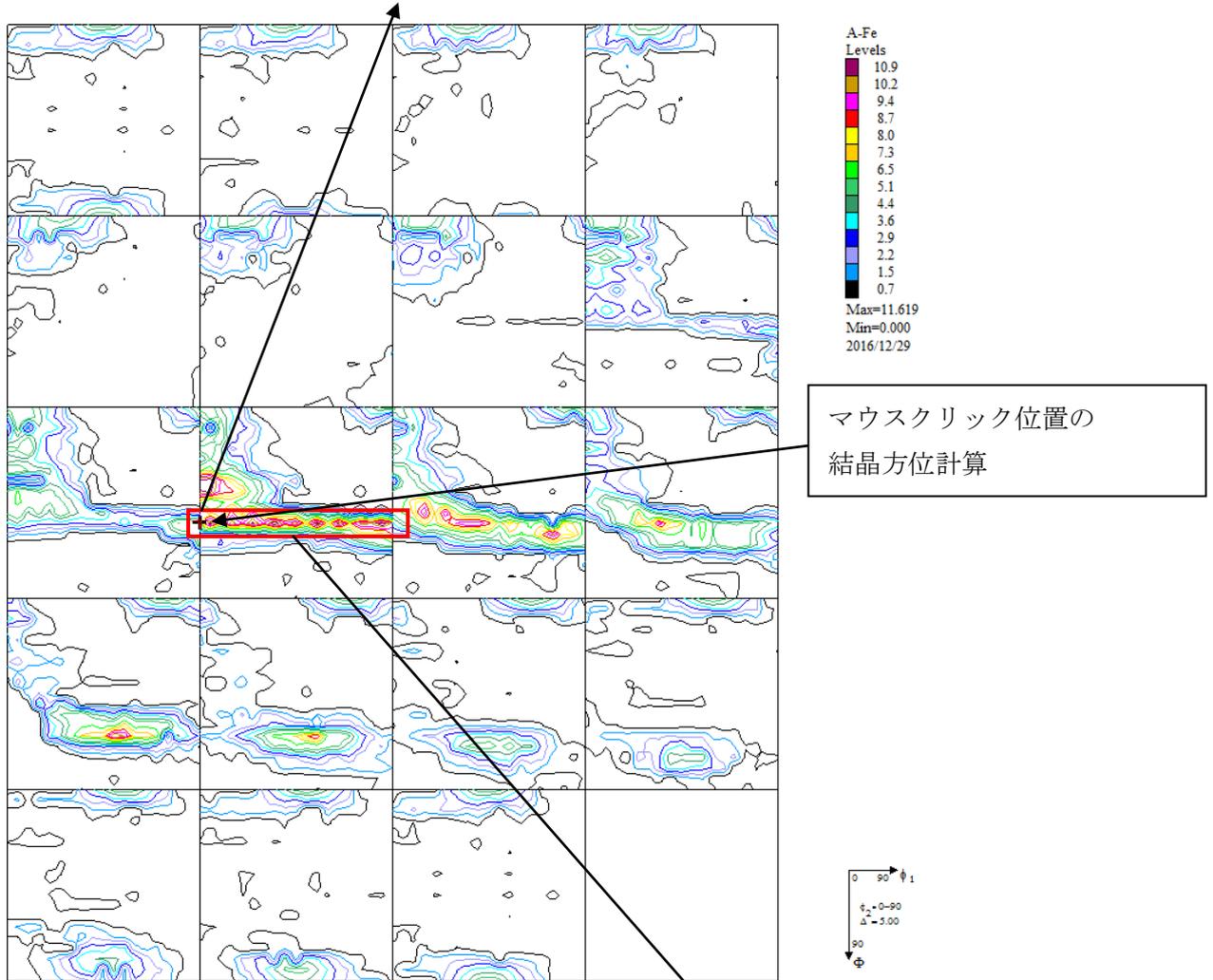
### 6. 3 1/4 対称 ODF 解析



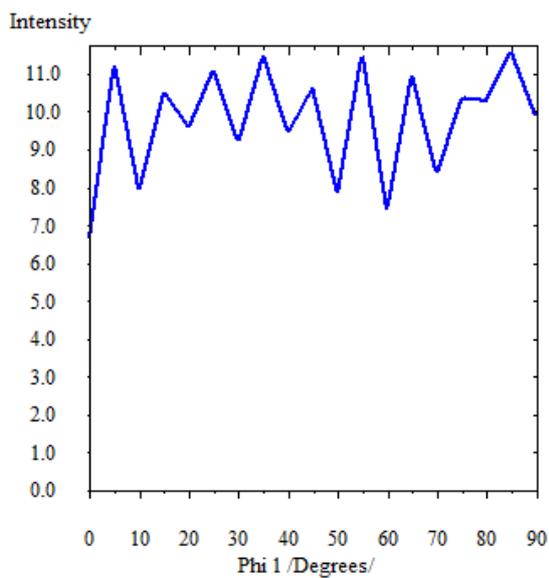
Rp% = 19.36%    dRp% = 0.93%

## 6. 4 ODF 図

Step 5.00  $\phi_2=$  0.00  $\Phi=$  54.74  $\phi_1=$  45.00 HKL [( 1 1 1 )] UYW [[ 1 -1 0 ]]



### 6. 4. 1 $\gamma$ -Fiber ( $\phi_2=45$ 、 $\Phi=54.7$ )



ODF - 2D User Defined Diagrams

Section  Misorientation  Skeleton L.

Section/Diagram Parameters

Start Point  $\phi_1$  0  $\Phi$  55  $\phi_2$  45

End Point  $\phi_1$  90  $\Phi$  55  $\phi_2$  45

Parameters from File

Load Parameters/Samples from File

Save Current Parameters/Samples

Parameters  Samples (2-12)

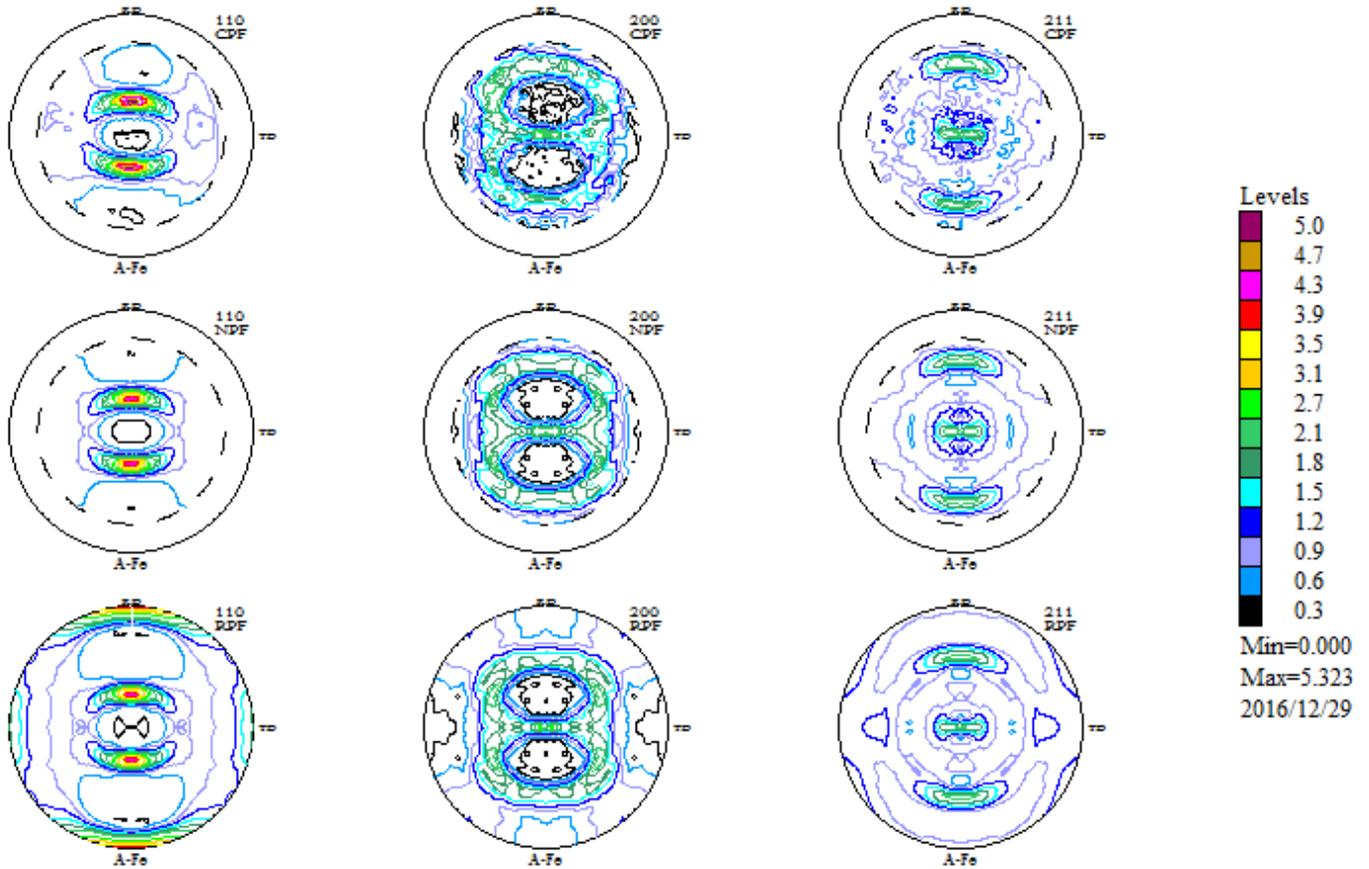
Save Data as TXT file

Save Data : Current Graph

Line Options

複数のODF (最大12) からFiberの比較が可能

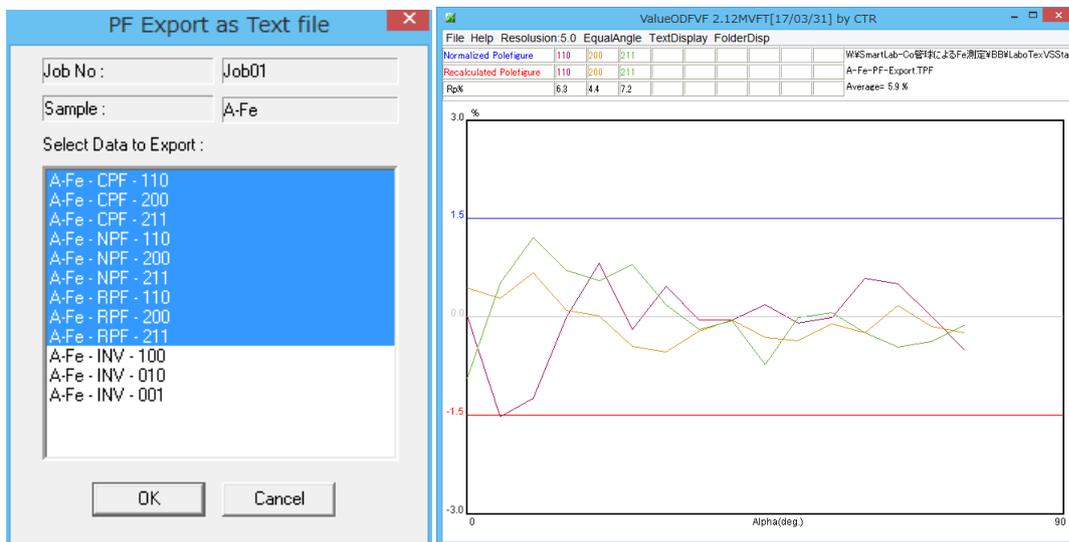
6. 5 入力極点図と再計算極点図（上段：入力極点図、中段：1/4 対称、下段：再計算極点図）



6. 6 Error 評価

極点図の Export

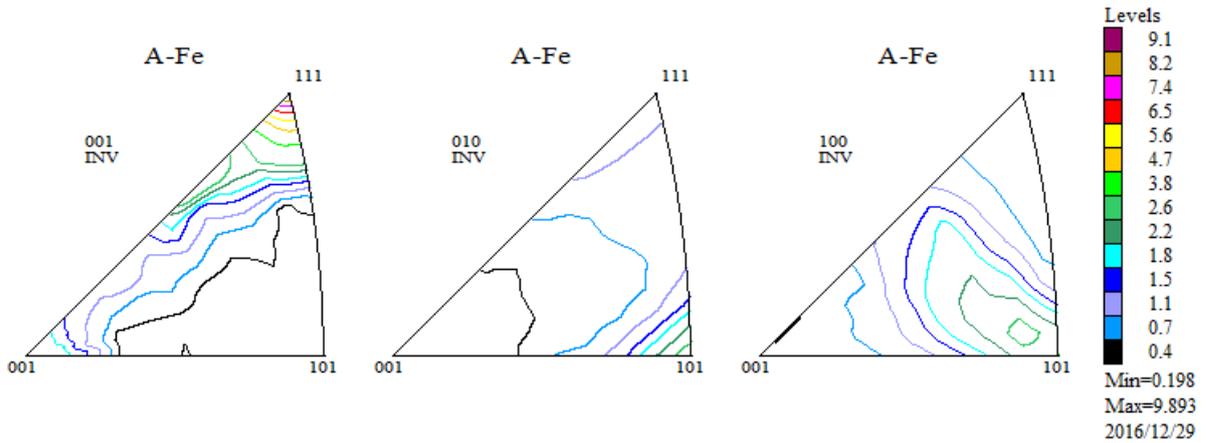
ValueODFVF による Rp%



ValueODFVF 2.12MVFT[17/03/31] by CTR						
File	Help	Resolution:5.0	EqualAngle	TextDisplay	FolderDisp	
Normalized Polefigure	110	200	211			W%SmartLab-Co管球によるFe測定#BB#LaboTexVSStan
Recalculated Polefigure	110	200	211			A-Fe-PF-Export.TPF
Rp%	6.3	4.4	7.2			Average= 5.9 %

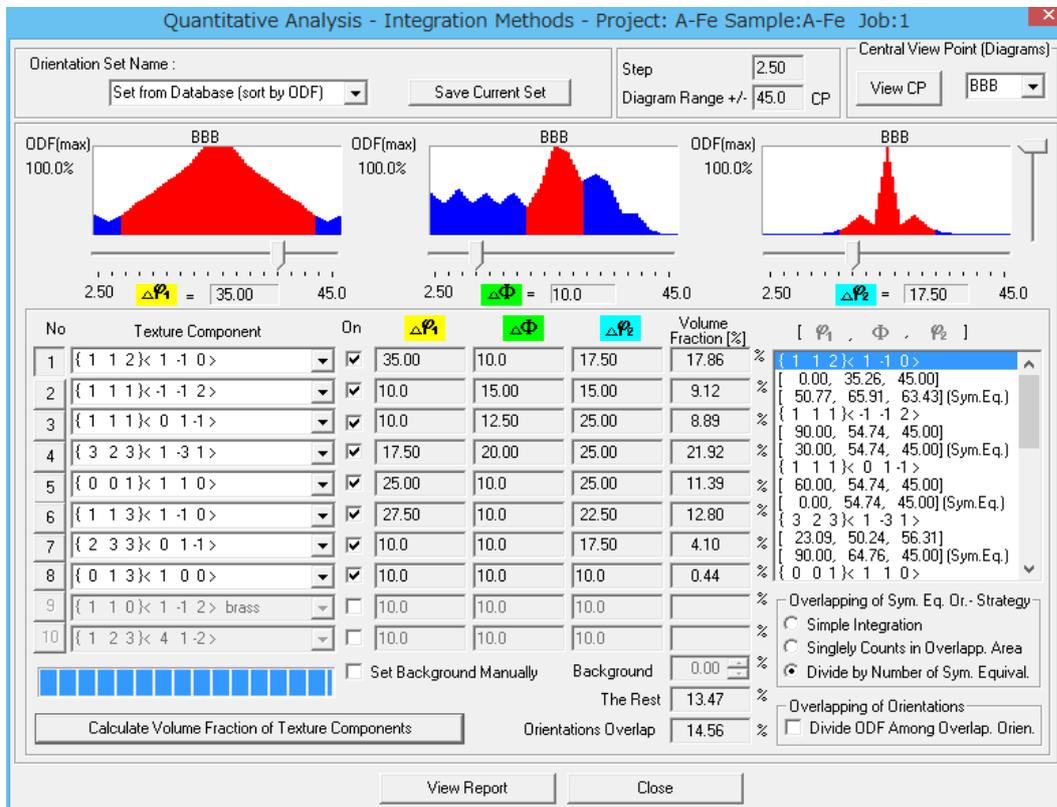
ValueODFVF の Rp%は、 $\beta$  方向の平均値の Rp%であり、LaboTex の Rp%と異なる。

## 6. 7 逆極点図

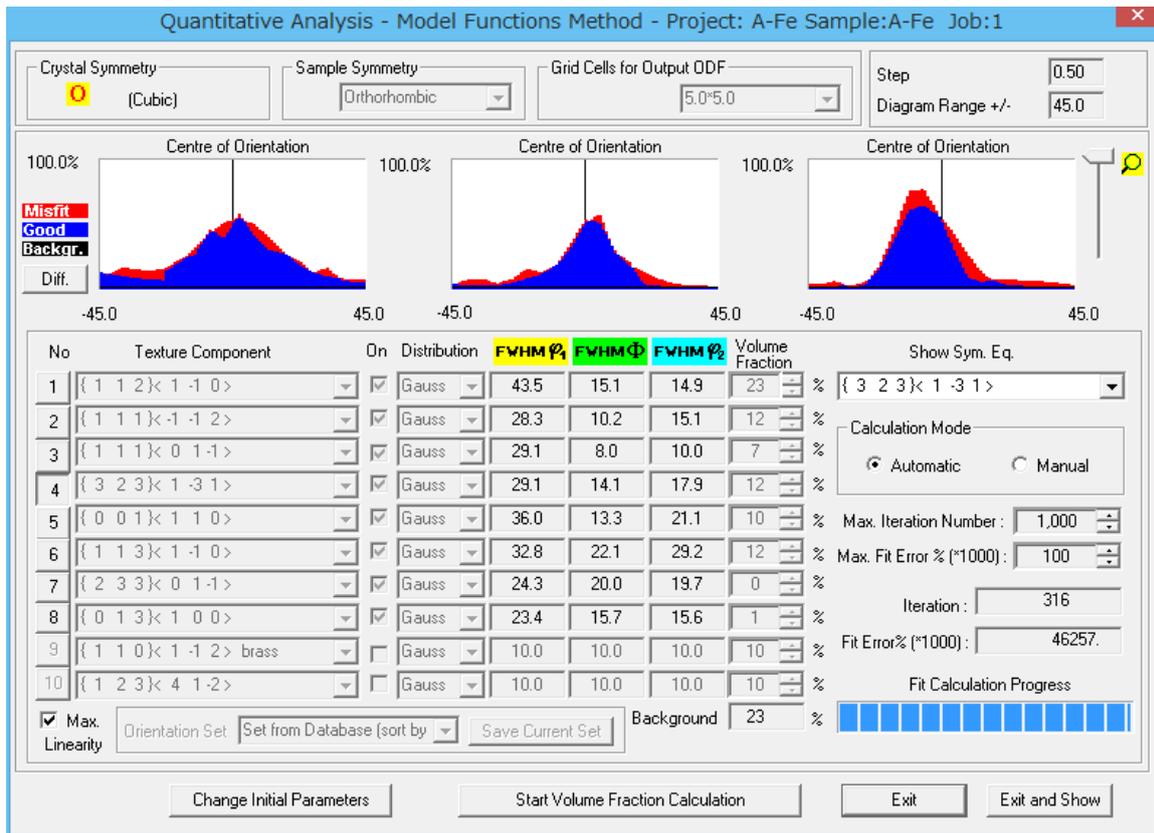


## 6. 8 定量

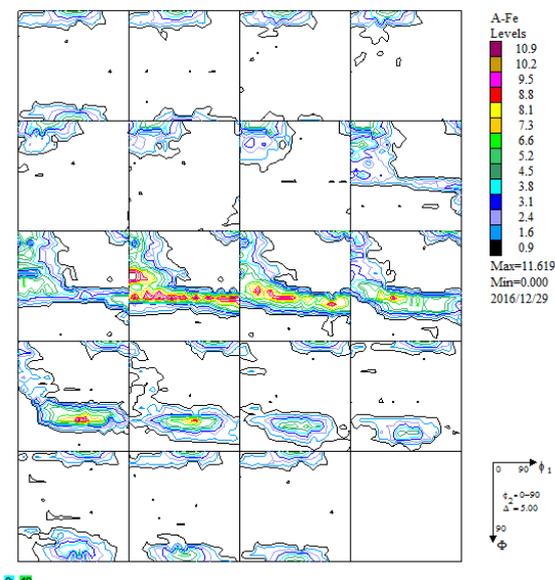
### 6. 8. 1 結晶方位の定量 (Integration Method)



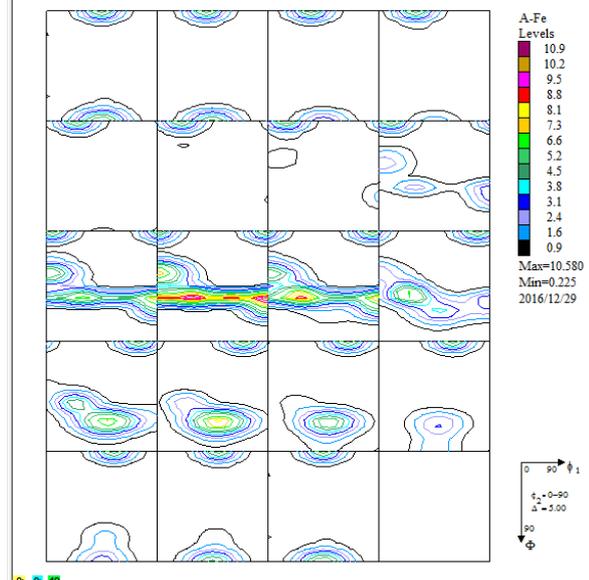
## 6. 8. 2 結晶方位の定量 (Model Function Method)



入力極点図から計算したODF図



VolumeFraction から計算した ODF 図



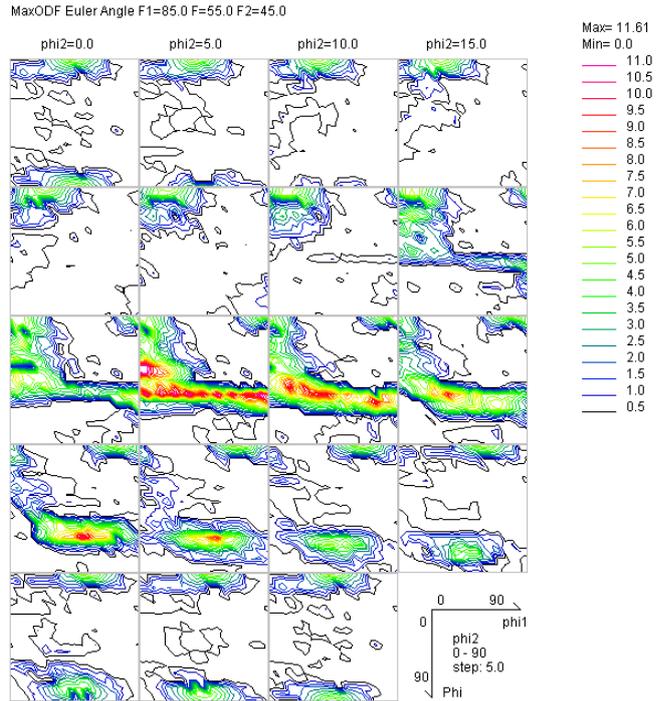
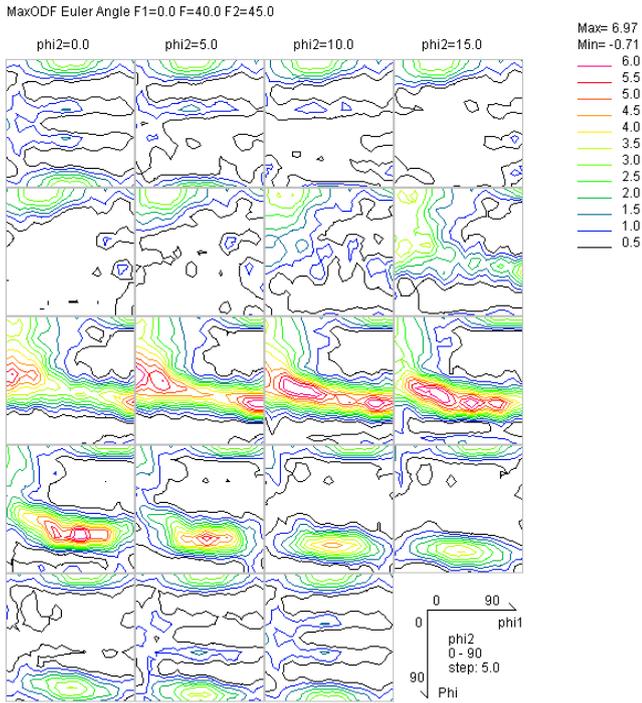


7. CTRソフトウェアによる比較

7. 1 ODFDisplay2(GPODFDisplay)による比較

StandardODF

LaboTex



最大結晶方位密度 StandardODF は、6.97

LaboTex は、11.62

最小結晶方位密度 StandardODF は、-0.72

LaboTex は、0

7. 1. 1 ODF 密度 1.5 以上の結晶方位比較

Orientation	$\phi_1$	$\Phi$	$\phi_2$	ODF
{1 1 1}<-1 -1 2>	90.0	54.74	45.0	4.86
{1 1 1}<0 -1 1>	60.0	54.74	45.0	4.41
{0 0 1}<-1 -1 0> RW(H)	45.0	0.0	0.0	3.32
{0 1 1}<1 0 0> Goss	0.0	45.0	0.0	1.78
{0 0 1}<1 0 0> cube	0.0	0.0	0.0	1.59

MAXODF=6.97      MINIODF=-0.72

Orientation	$\phi_1$	$\Phi$	$\phi_2$	ODF
{1 1 1}<-1 -1 2>	90.0	54.74	45.0	9.87
{1 1 1}<0 -1 1>	60.0	54.74	45.0	7.39
{0 0 1}<-1 -1 0> RW(H)	45.0	0.0	0.0	5.85

MAXODF=11.62      MINIODF=0.0

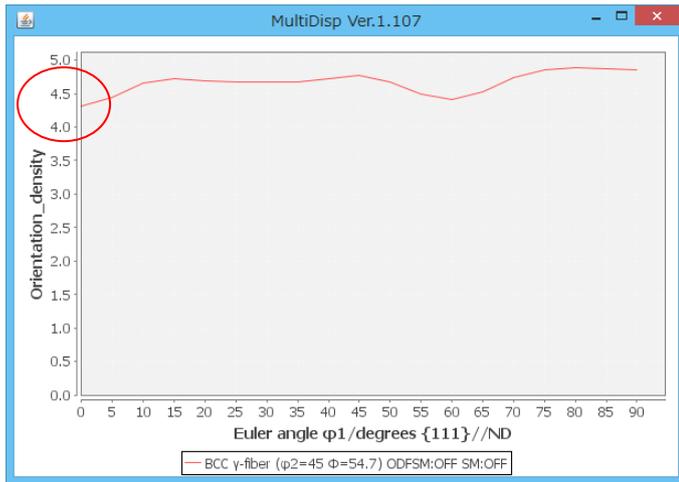
Goss,cube は検出されない。後で  $\eta$ -Fiber で比較  
 ODF の方位密度のピーク密度そのままでは定量値 (VolumeFraction) として扱えません。

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

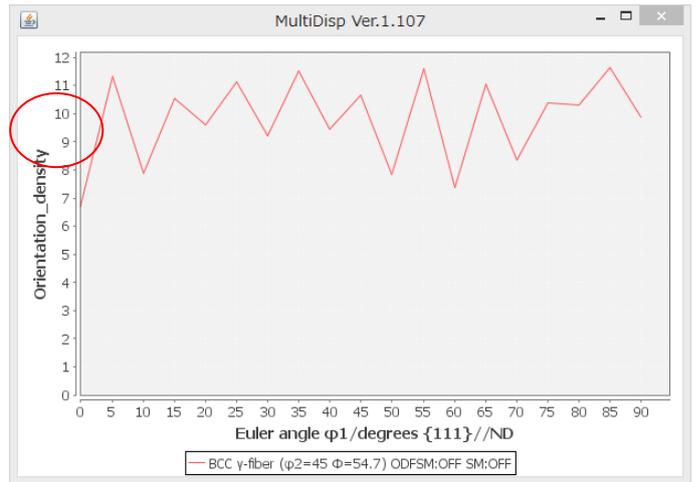
Miller Index {hkl}<uvw>	Euler Angles		ODF (Maximum at Exact Position)	Multiplicity (m)
	$\{\phi_1, \Phi, \phi_2\}$	$\{\alpha, \beta, \gamma\}$		
Bs, {110}<112>	{35.26 deg, 45 deg, 0 deg}	{54.74 deg, 45 deg, 0 deg}	130.95	2
Copper, {112}<111>	{90 deg, 35.26 deg, 45 deg}	{0 deg, 35.26 deg, 45 deg}	130.95	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>	$\{\phi_1 + \phi_2 = 0$ 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>	$\{\phi_1 + \phi_2 = 45$ 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

7. 1. 2  $\gamma$ -Fiber 比較  $\langle 111 \rangle // ND$  ( $\phi 10 \rightarrow 90$ )

StandardODF

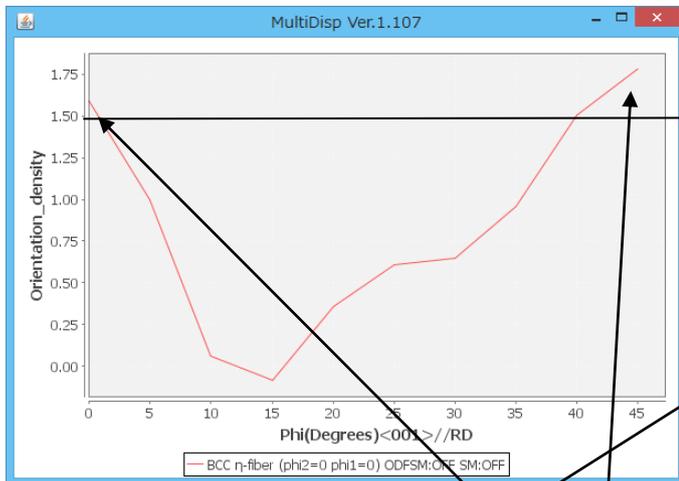


LaboTex

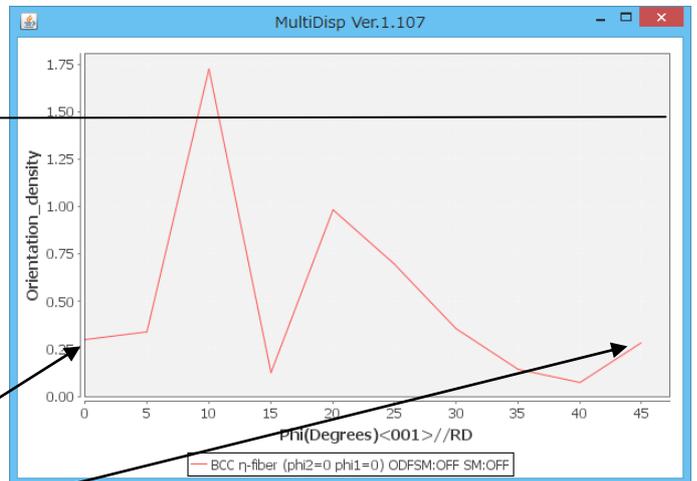


7. 1. 3  $\eta$ -Fiber  $\langle 110 \rangle // RD$

StandardODF



LaboTex



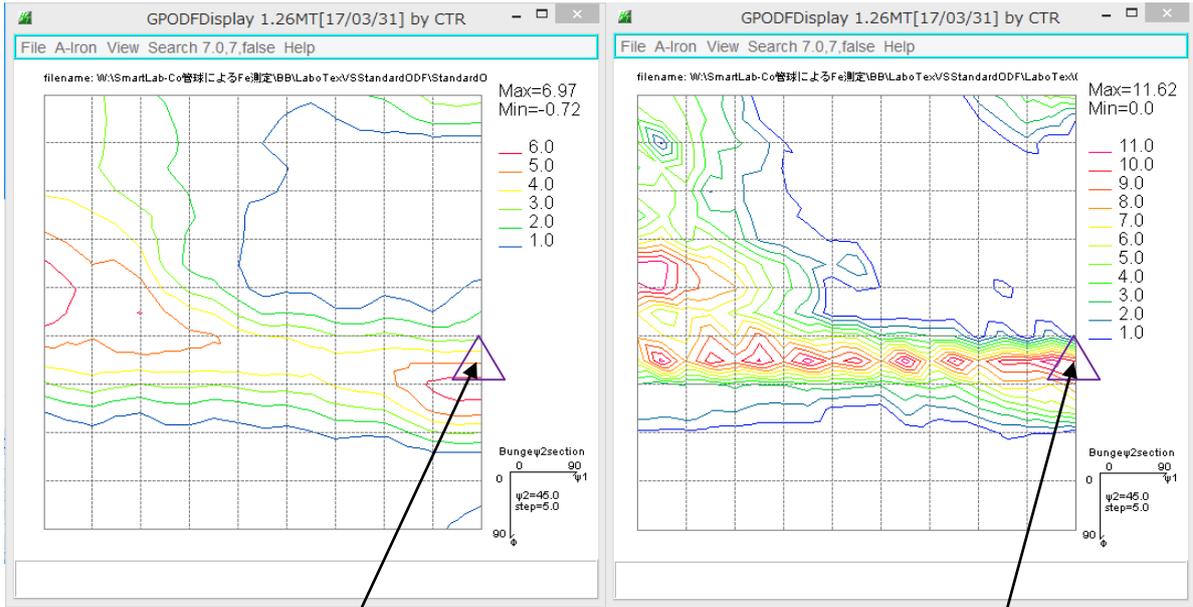
ODF 密度 1.5 レベル Cube Goss

StandardODF では、Goss, cube も 1.5 以上であるが、LaboTex は 1.5 以下

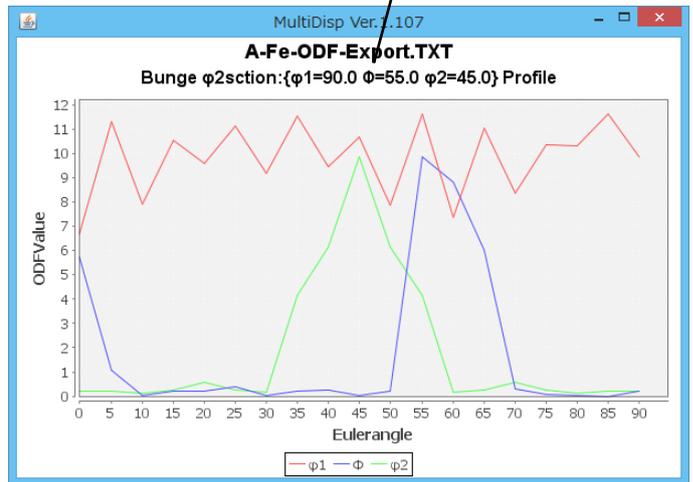
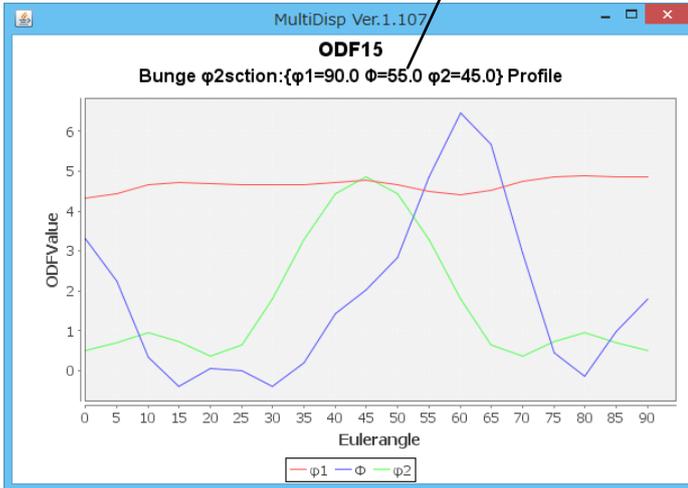
7. 2 GPODFDisplay で  $\phi 2 = 45$  度を比較 ( $\phi 2$  断面拡大モード)

StandardODF

LaboTex



( $\phi 1 = 90$ 、 $\Phi = 55$ 、 $\phi = 45$ ) 位置の Euler 角度 3 方向の結晶方位密度プロファイル

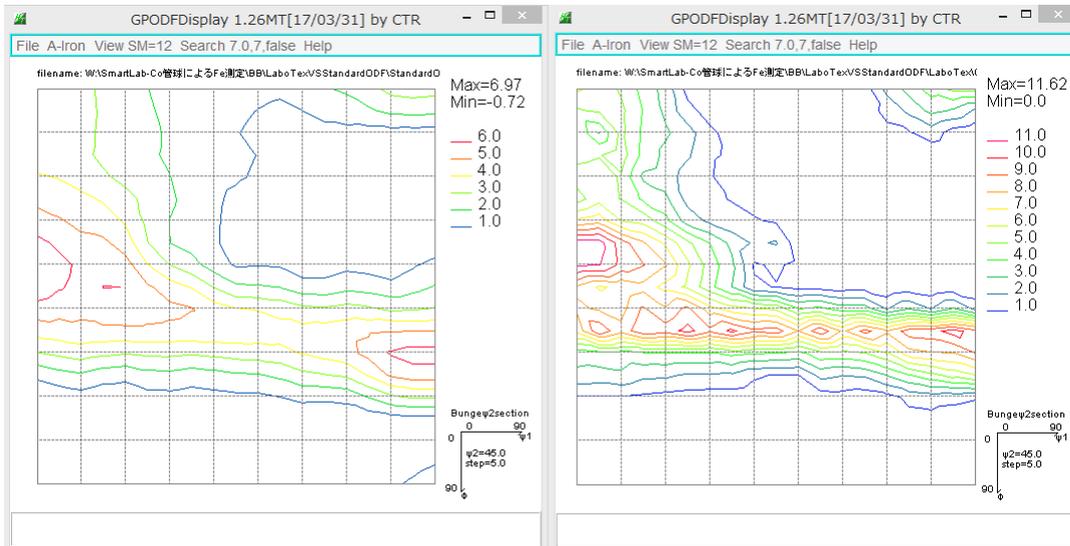


赤 Profile は  $\gamma$ -Fiber を示し、青 Profile は  $\varepsilon$ -Fiber を示す。

$\varepsilon$ -Fiber ピーク幅 ( $\gamma$ -Fiber の幅) に違いがあります。

直接法である ADC 法は Hermonic 法に比べ、分解能が高く、方位密度が高くなる傾向があります。

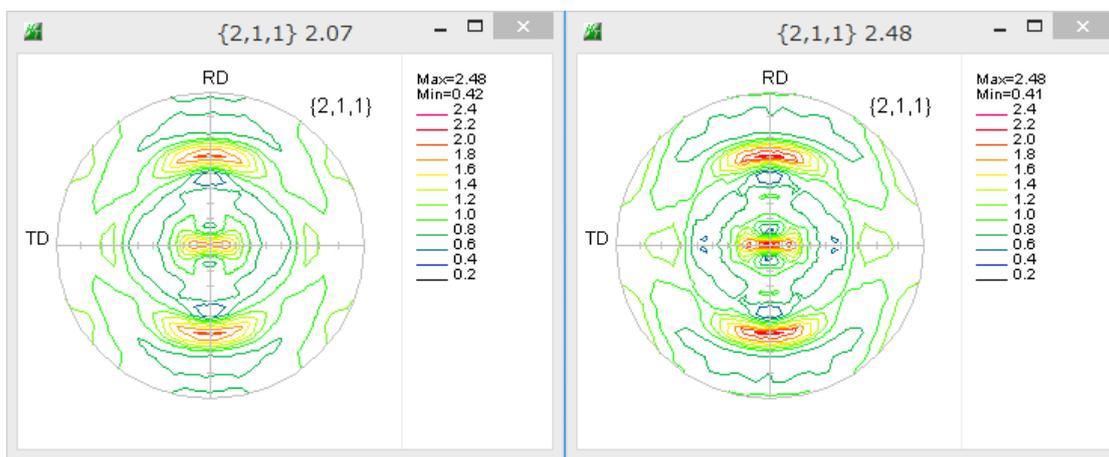
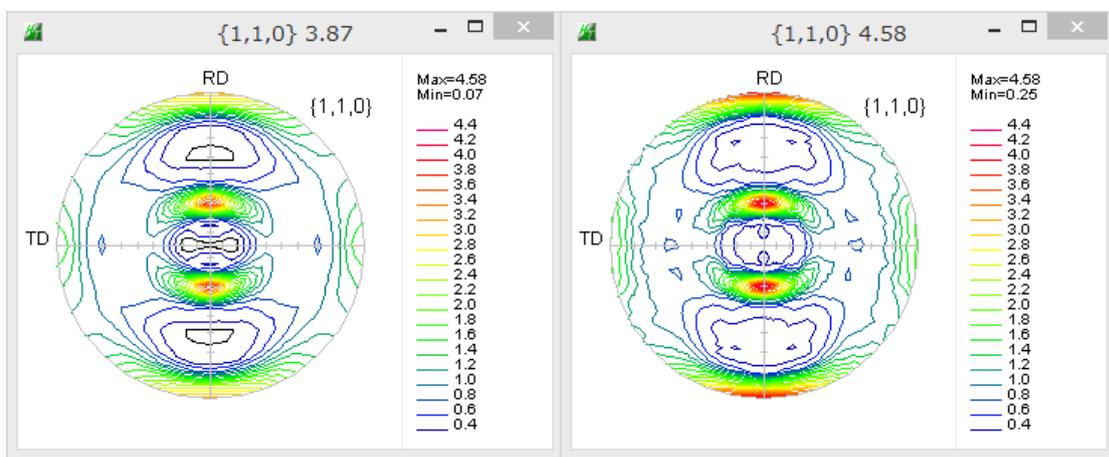
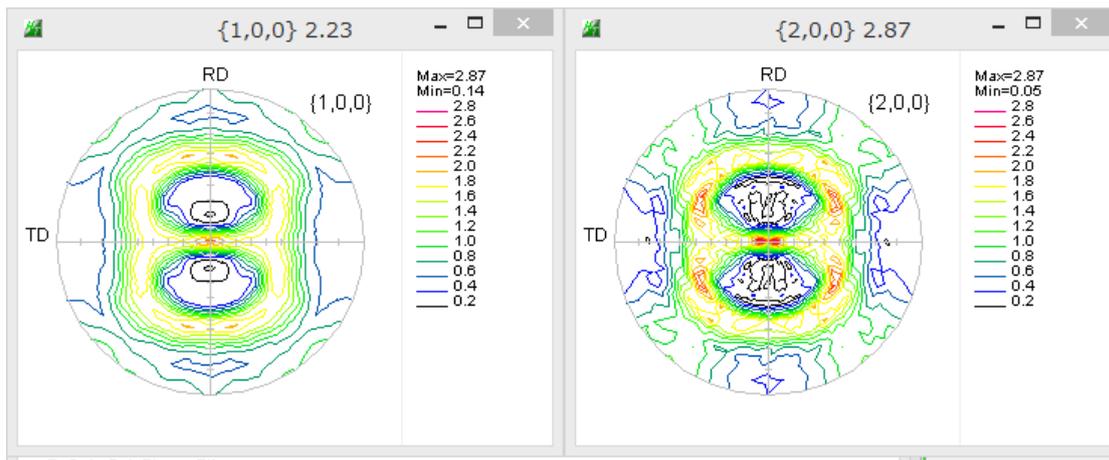
平滑化最大で ODF 図を表示



7. 2 GPPoleDisplay で再計算極点図比較

StandardODF

LaboTex

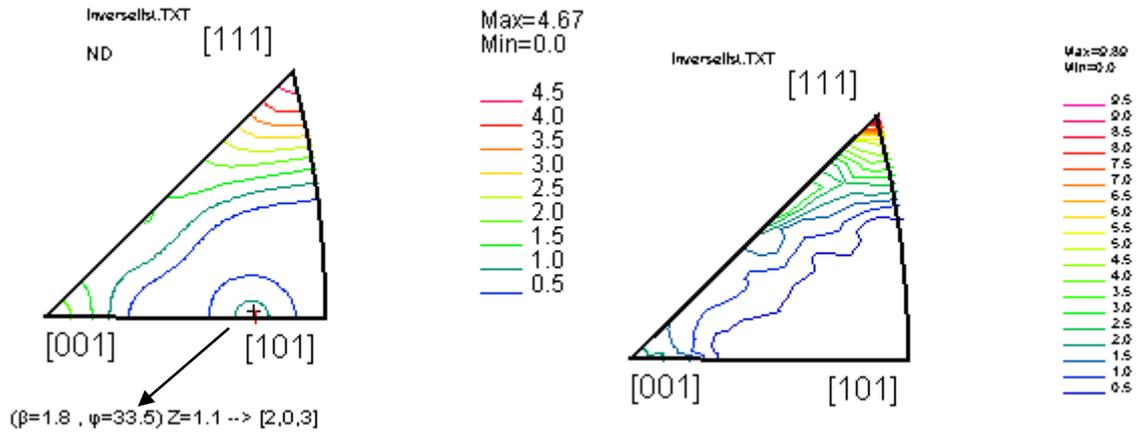


StandardODF と LaboTex の再計算極点図の極密度は LaboTex が大きな極密度を示す。ODF 図の結晶方位密度と同様の結果になります。

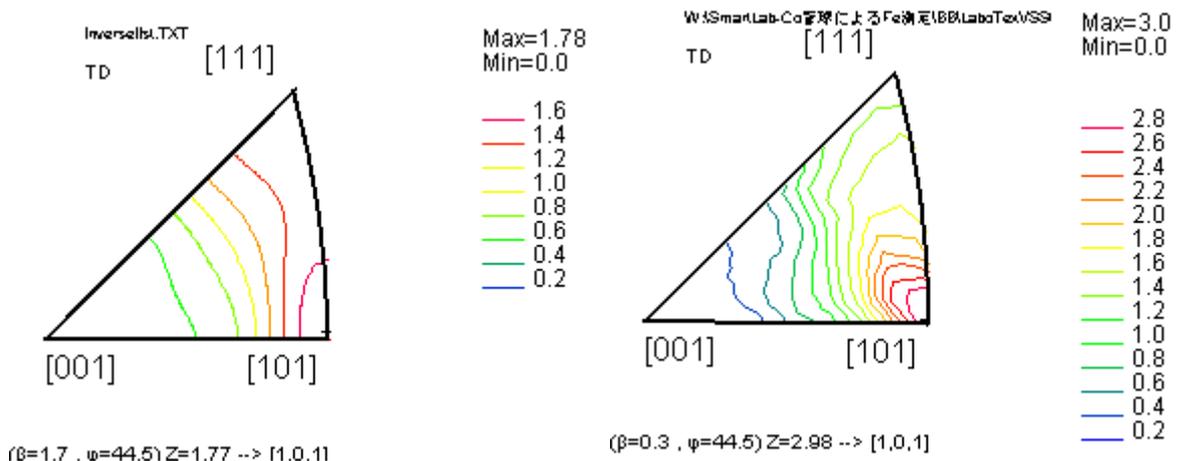
	{200}	{110}	{211}
StandardODF	2.23	3.87	2.07
LaboTex	2.87	4.58	2.48

7. 3. 逆極点図比較

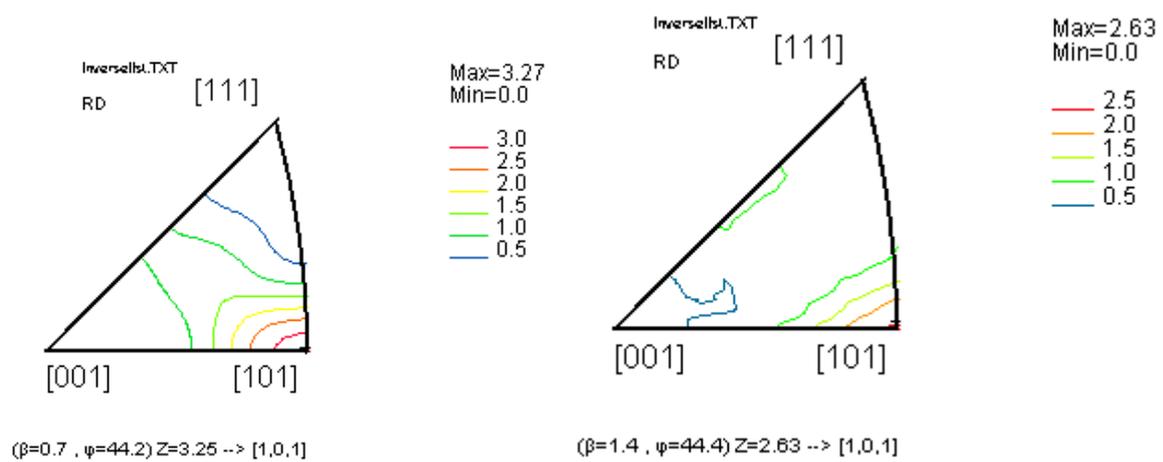
ND StandardODF (Max 4.67) LaboTex (Max 9.86)



TD StandardODF (Max 1.76) LaboTex (Max 3.00)



RD StandardODF (Max 3.27) LaboTex (Max 2.63)



逆極点図は、ND,TD は LaboTex が大きな値になるが、RD は逆転している。

	ND	TD	RD
StandardODF	4.67	1.76	3.27
LaboTex	9.86	3.00	2.63