

最新のXRD極点のデータ処理

2019年09月10日

HelperTex Office

概要

ValueODFVFソフトウェアの再defocus機能の有効性から、XRD極点処理の流れが変わります。極点処理では出来るだけErrorを少なく補正を行い、ODF解析後でもError評価を行い、材料の正確な方位解析を行います。

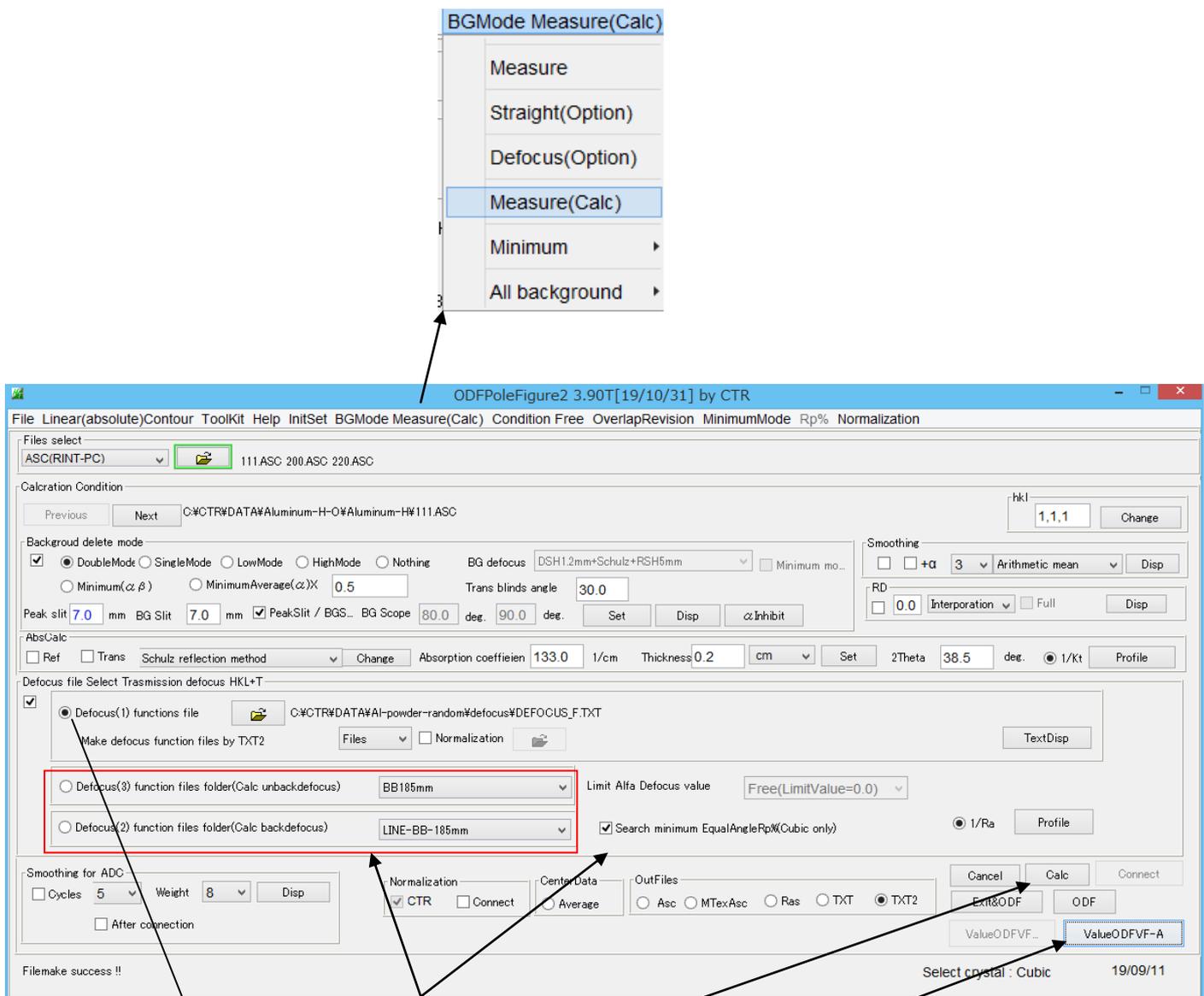
Errorは、光学系のErrorの事で、最適化により軽減されます。

結晶系により2つの流れがあります。

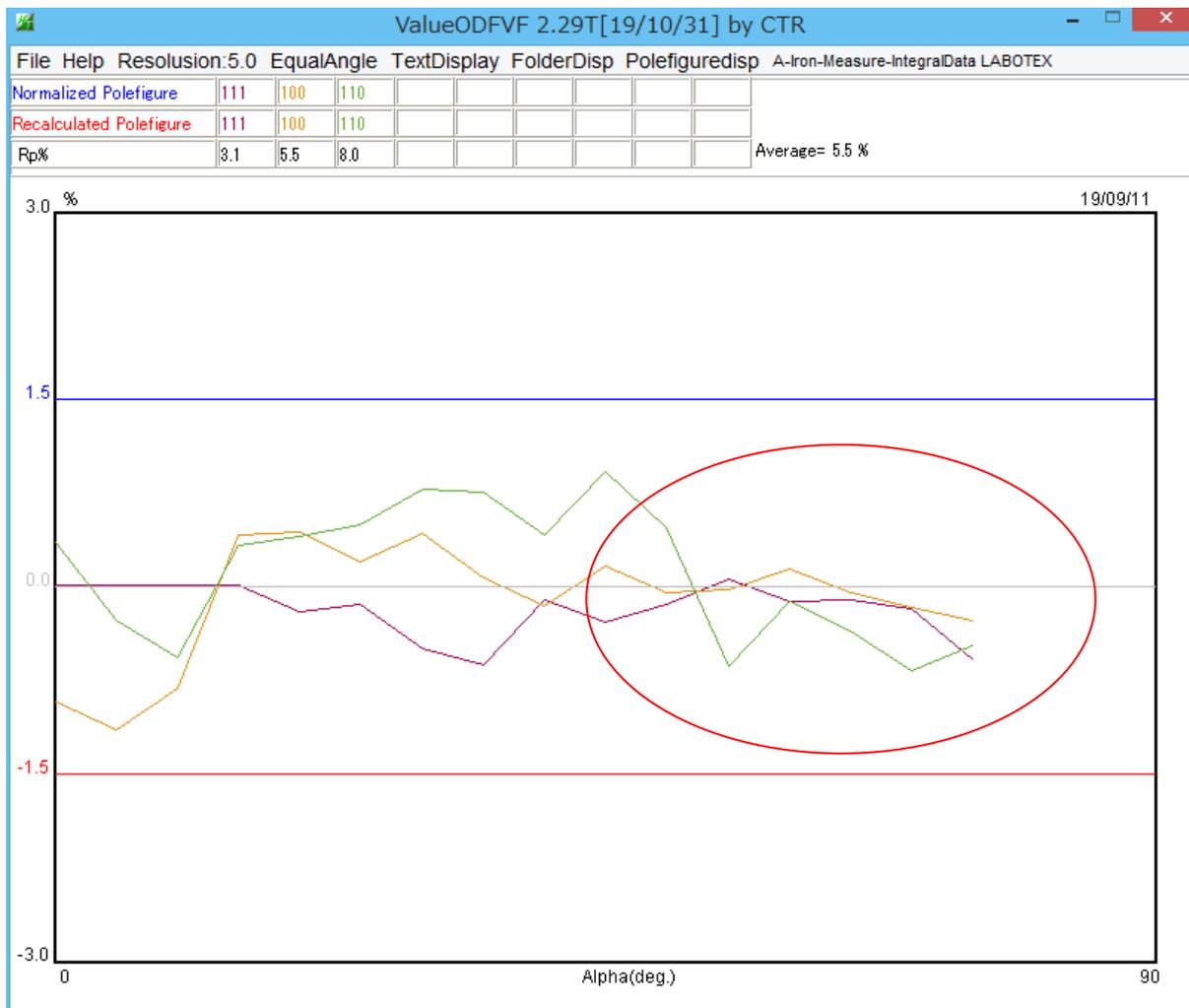
最初にCubicを説明し、次にHexagonalで説明します。

1. Cubicの場合

1) バックグラウンドは出来るだけ平滑化する。凸凹しているとFiberが出現します。



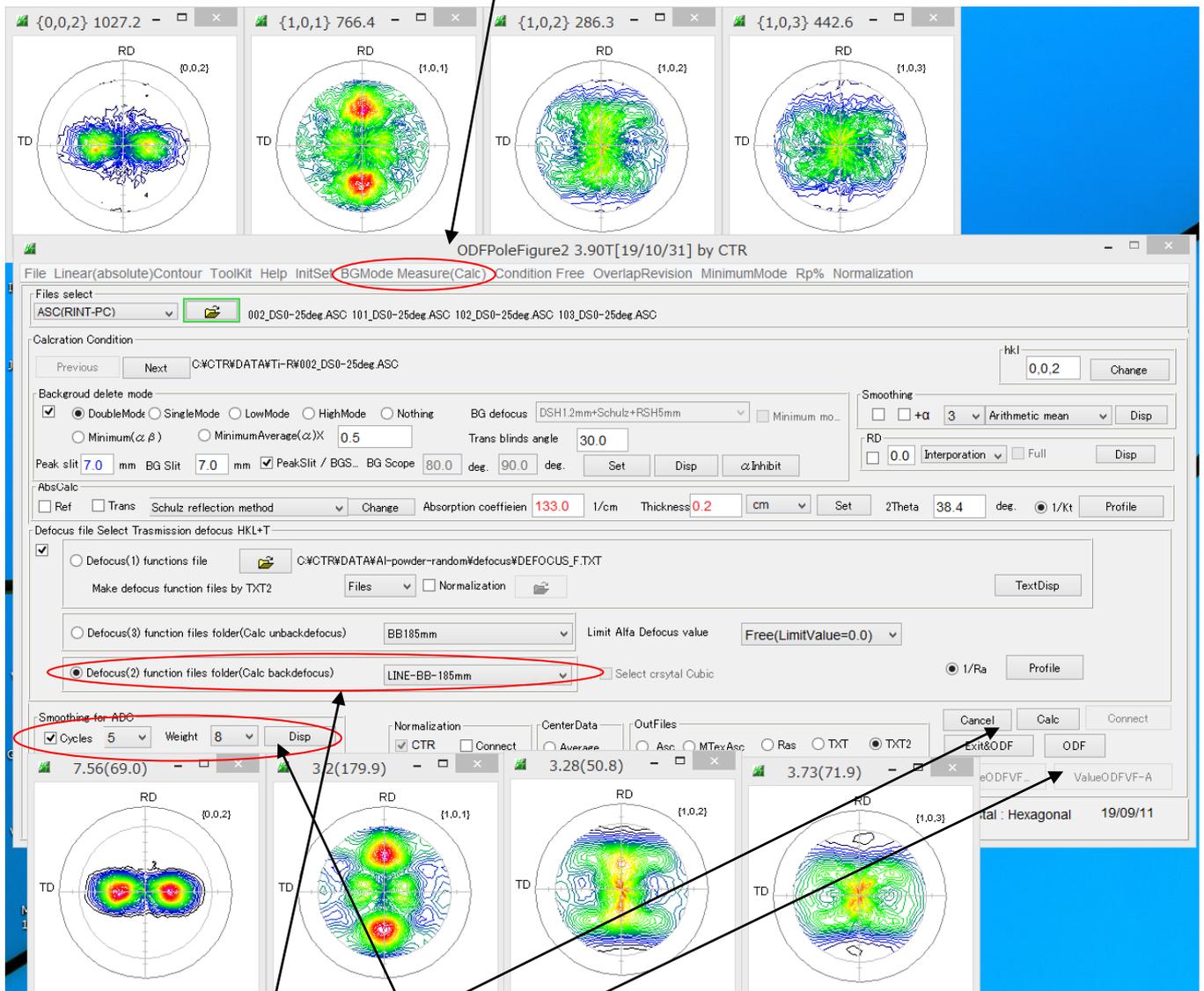
- 2) defocus補正は測定データを用いる。(スリット条件は合わせる)
random試料が入手出来ない場合、計算補正を用いる。
- 3) 再defocus補正を用いる。
- 4) 計算を開始
- 5) Rp%プロファイルの確認



R p %プロファイルの右側で±1.5%をはみ出る場合、測定に問題があります。
光学系、測定幅など検討してください。

2. Cubic以外、例えばHexagonalでrandom試料が入手出来ない場合

1) バックグラウンドは出来るだけ平滑化する。



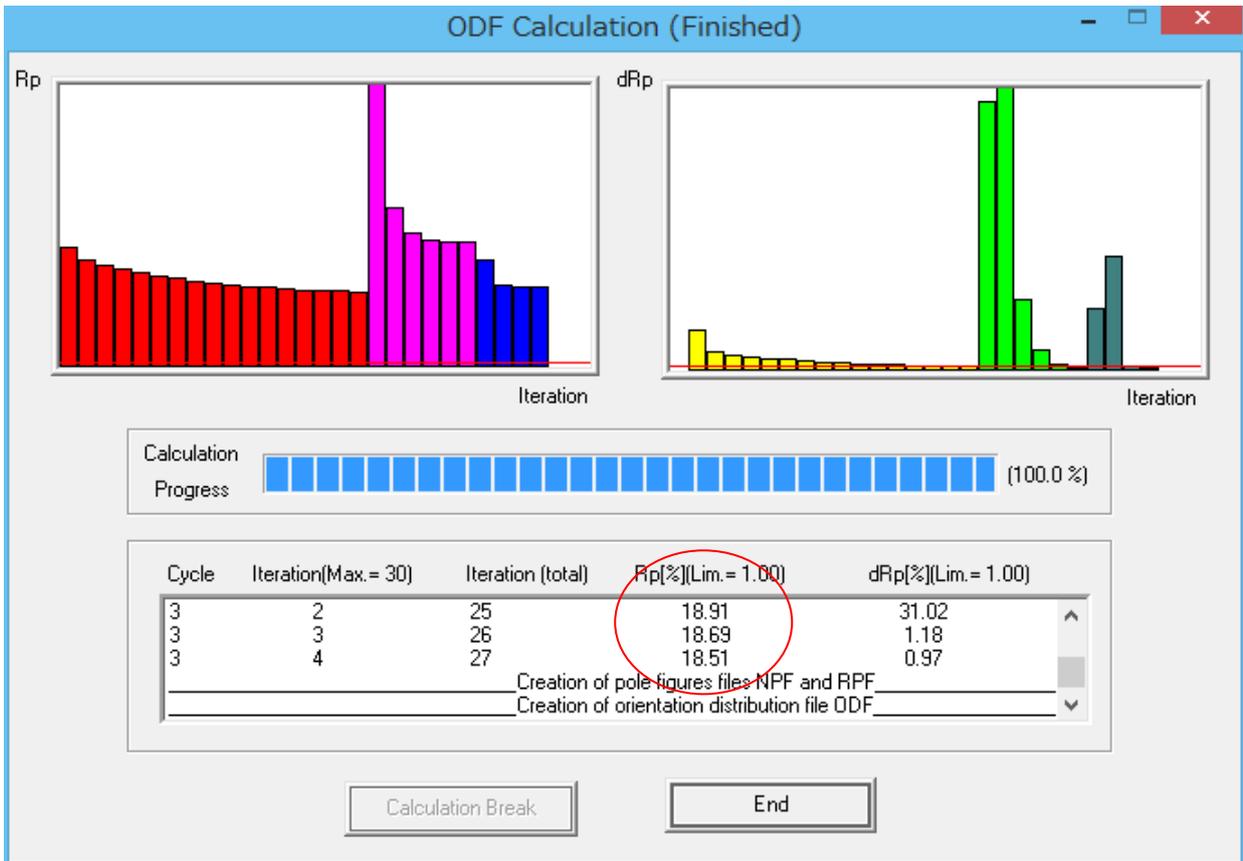
2) 計算 defocus 補正を用いる

3) 極点図に凸凹がある場合、平滑化を行う。

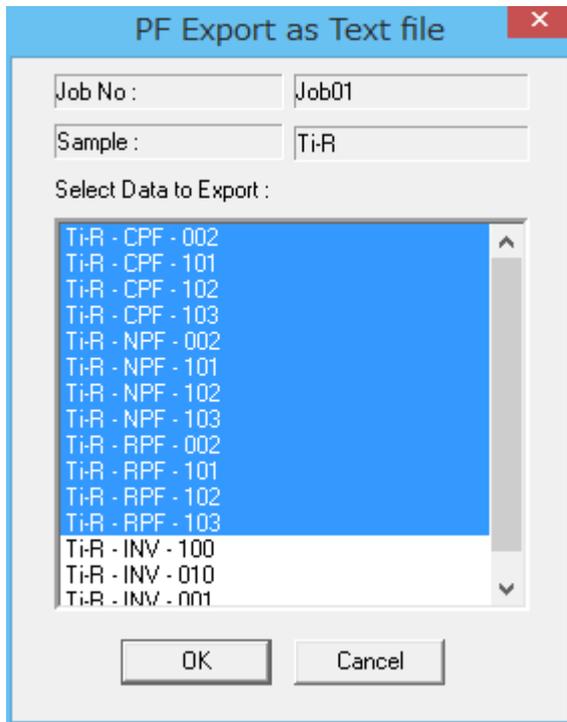
4) 計算を行う。

5) ODFファイルを作成

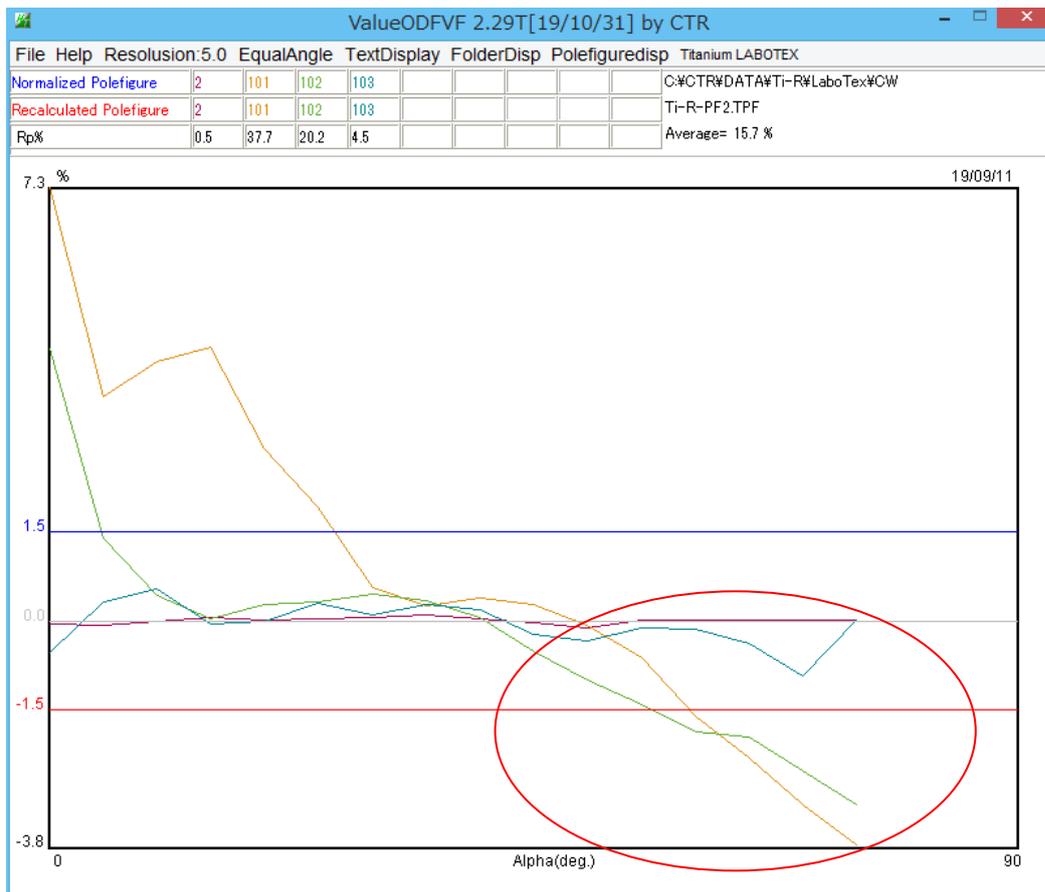
2. 1 L a b o T e x に読み込ませ、ODF を計算



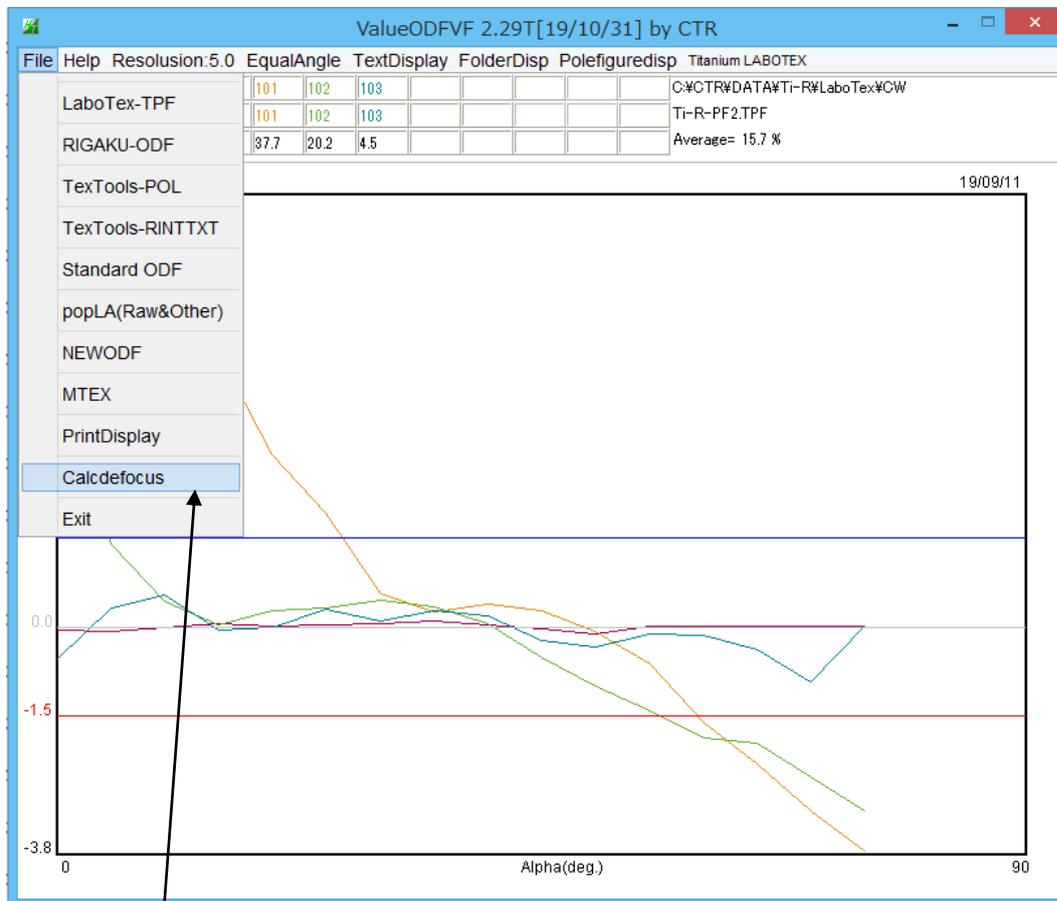
R p %が大きい場合、極点図をE x p o r t しV a l u e O D F V Fで確認



ValueODFVFで確認

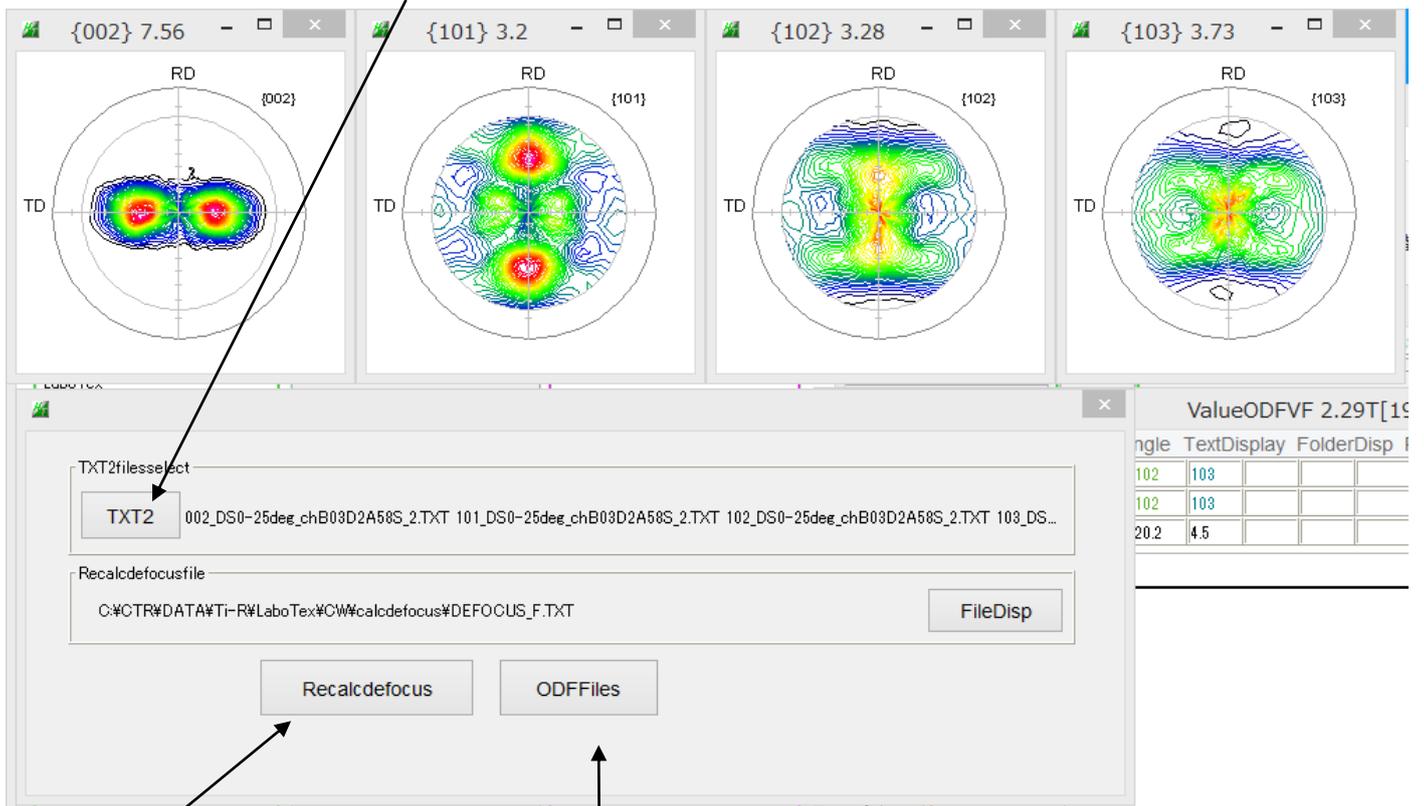


この部分に問題があります。



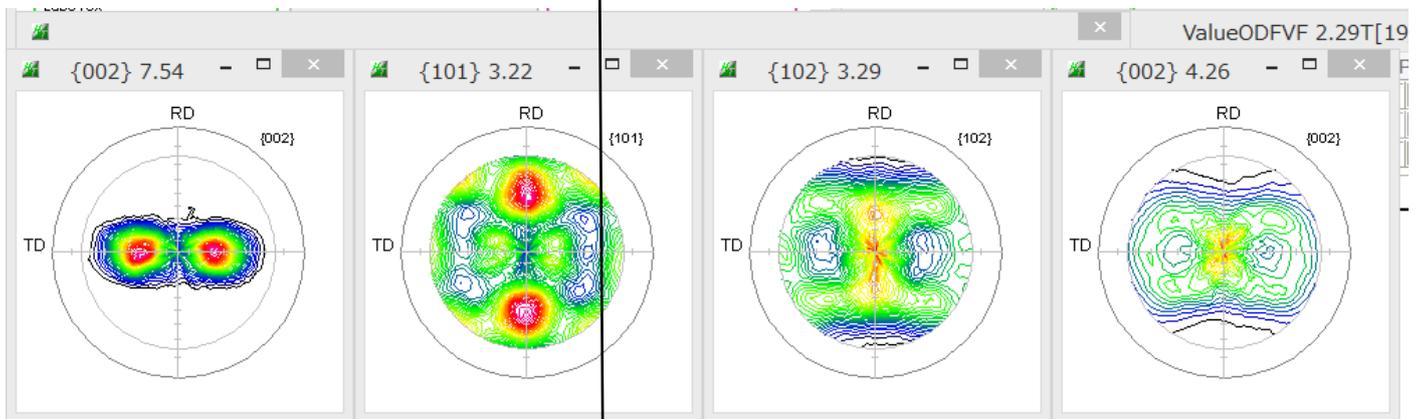
再defocus処理を行う。

ODF入力データのTXT 2を選択

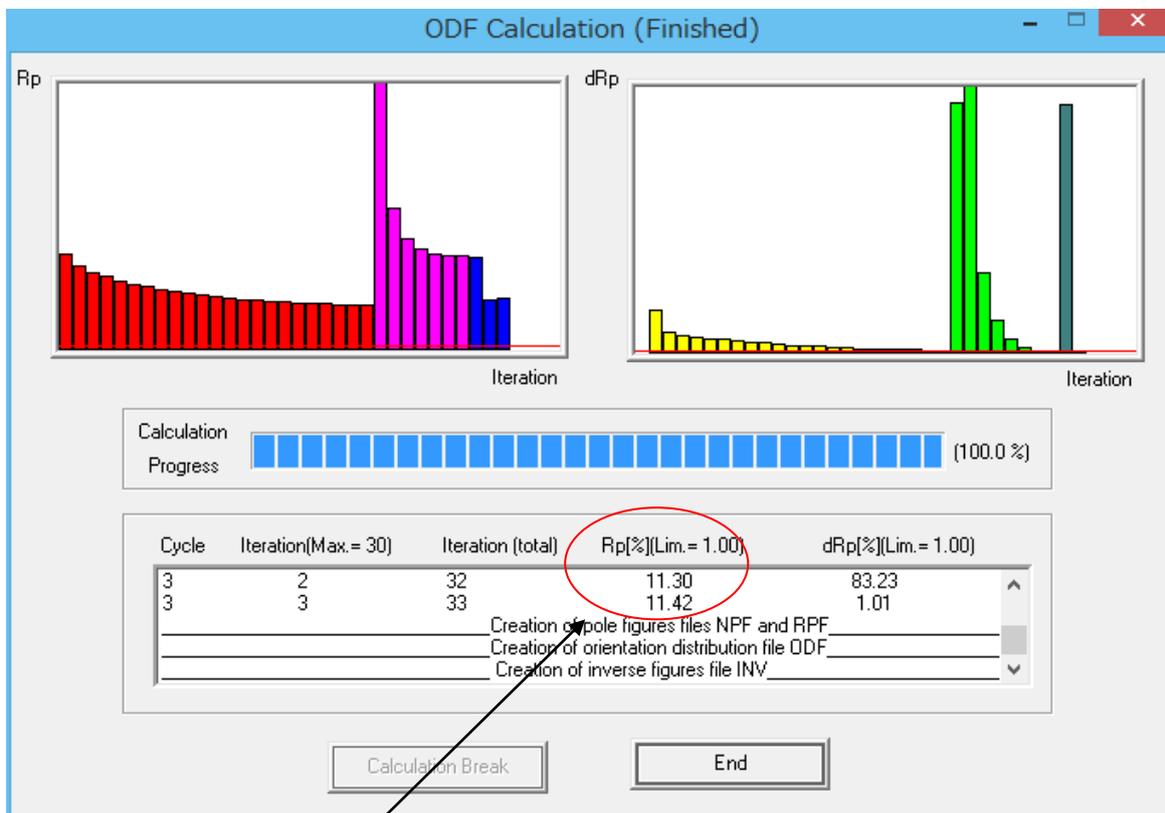


計算を行う。

R p %から再 d e f o c u s 処理を行った極点図



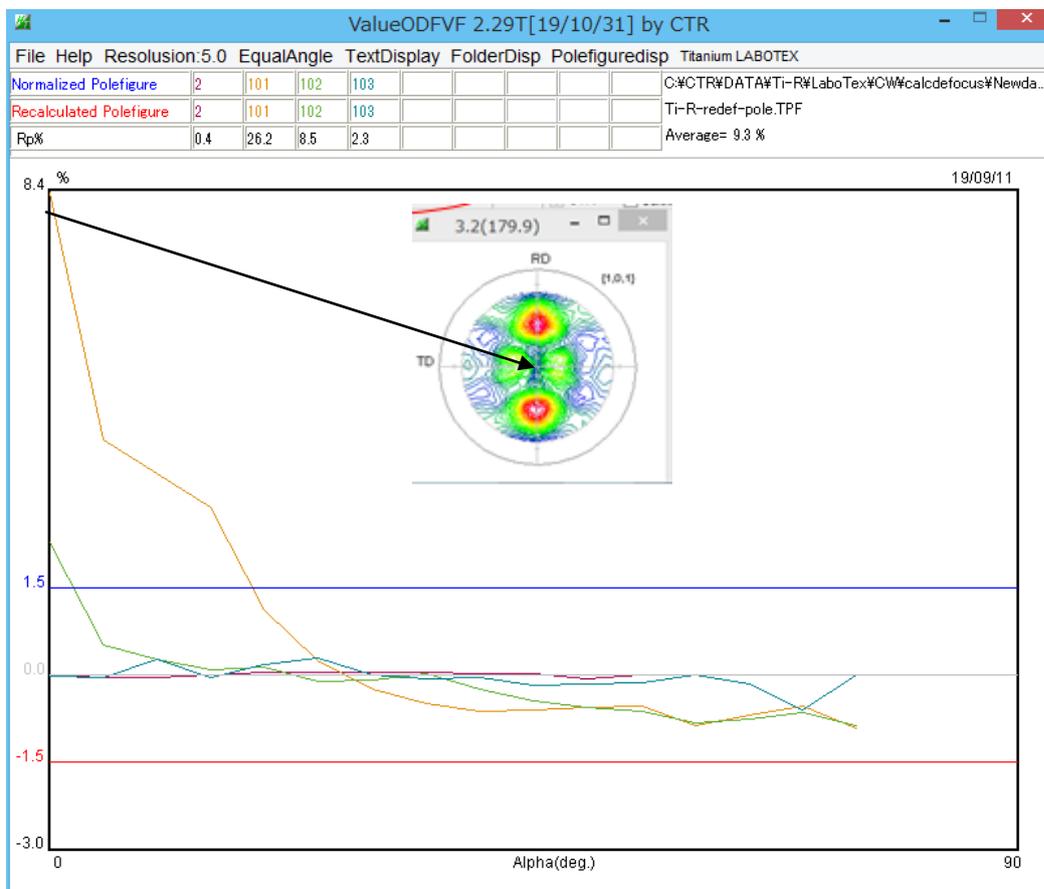
この極点図を再度L a b o T e x に読み込ませる。



R p %が改善されます。

今回はL a b o T e xを使用しましたが、他のODFソフトウェアでも同様に扱えます。

極点図をE x p o r tして確認



R p %プロフィールの右側が基準内に入ります。

右側では、{ 1 0 1 } 極点図が中心で大きくはみ出していますが、r a n d o mレベルの違いで問題ありません。

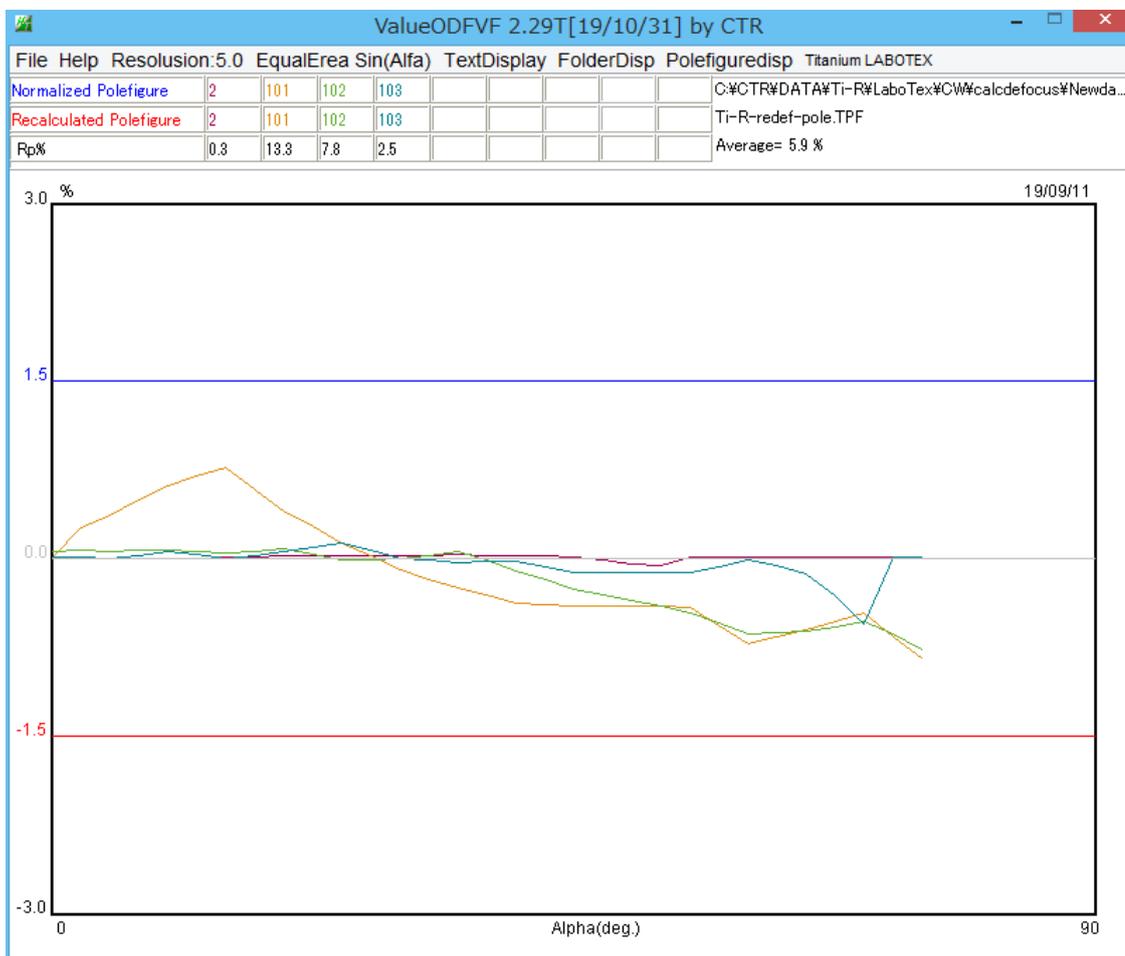
あるいは、等角度評価から等面積評価に変えてみます。

ValueODFVF 2.29T[19/10/31] by CTR

File Help Resolution:5.0 EqualAngle TextDisplay FolderDisp Polefiguredisp Titanium LABOTEX

Normalized Pole figure									
Recalculated Pole figure									
Rp%									

to EqualErea Sin(Alfa)



2. 2 TextToolsの場合

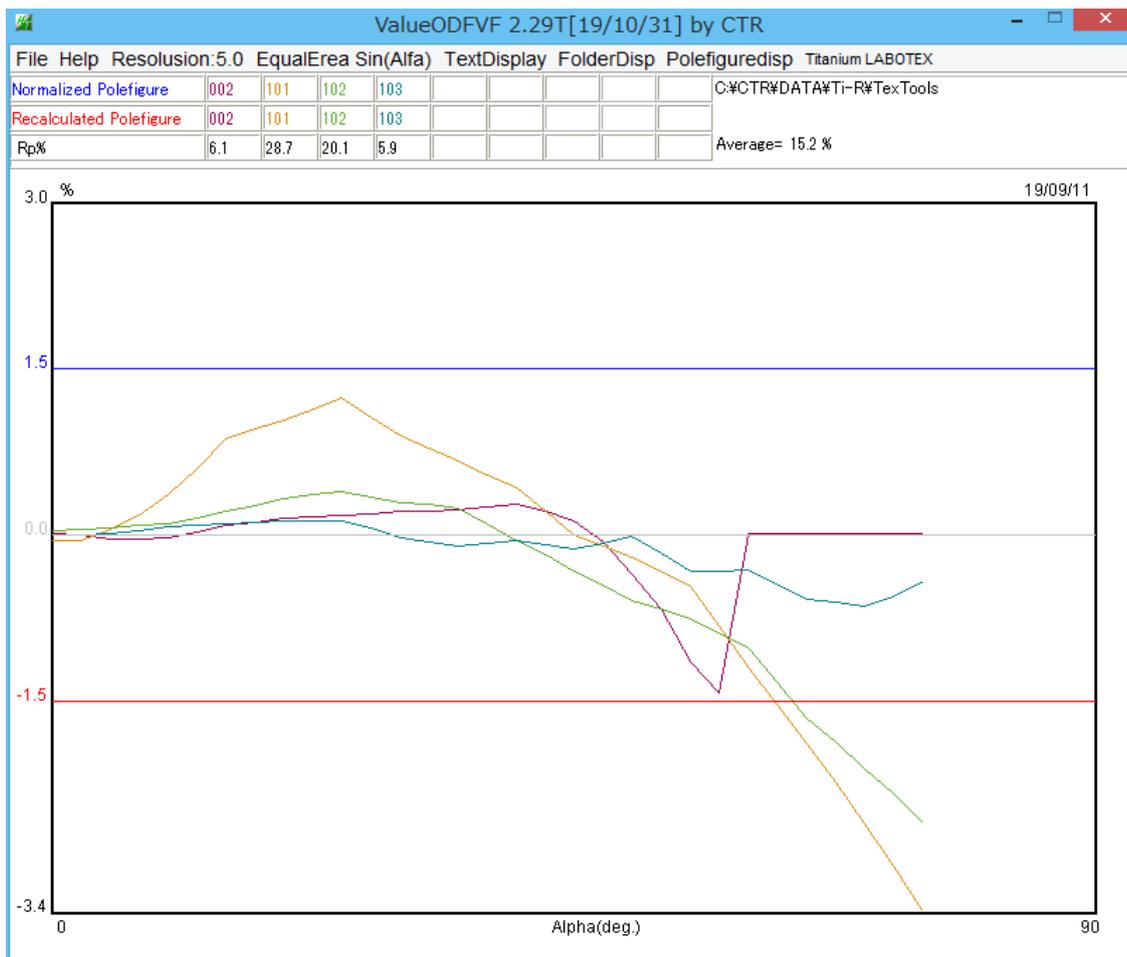
作成したODFファイルにRp%が書き出されています。

```
C:\CTR\DATA\Ti-R\TexTools\texttools002_0.pol ↓
C:\CTR\DATA\Ti-R\TexTools\texttools101_1.pol ↓
C:\CTR\DATA\Ti-R\TexTools\texttools102_2.pol ↓
C:\CTR\DATA\Ti-R\TexTools\texttools103_3.pol ↓
0      0      2      ↓
1      0      1      ↓
1      0      2      ↓
1      0      3      ↓
1 ↓
5.00 ↓
1 ↓
0 ↓
2 ↓
15      15 ↓
0.0100  0.1632 ↓
```

目標 1%が16.4%に計算されています。

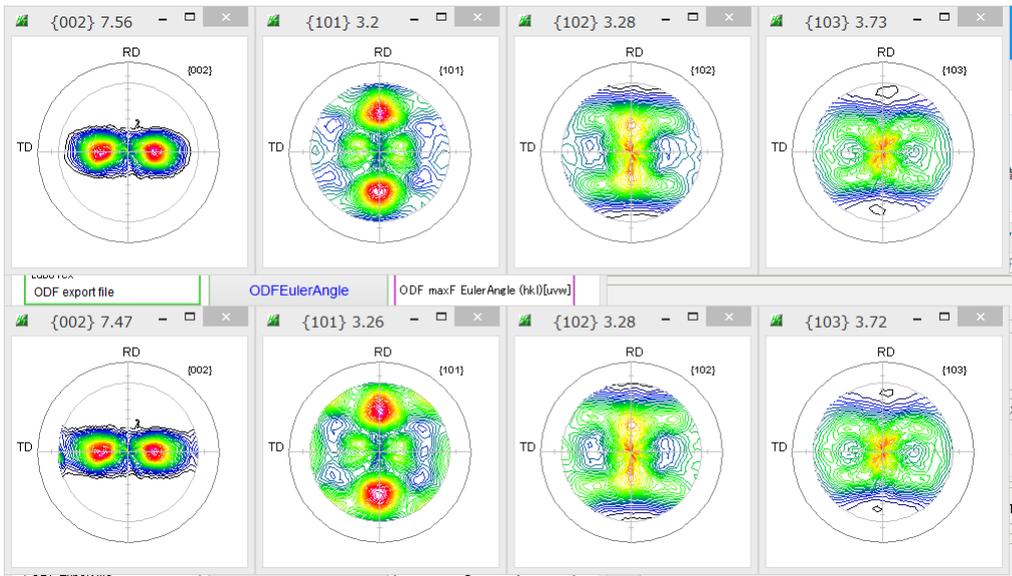
再計算極点図を作成しValueODFVFで確認

当面積で表示



再defocus処理を行い、再度TextToolsに読み込む

上段: TexTools で計算した極点図 下段: 再sdefocus 処理



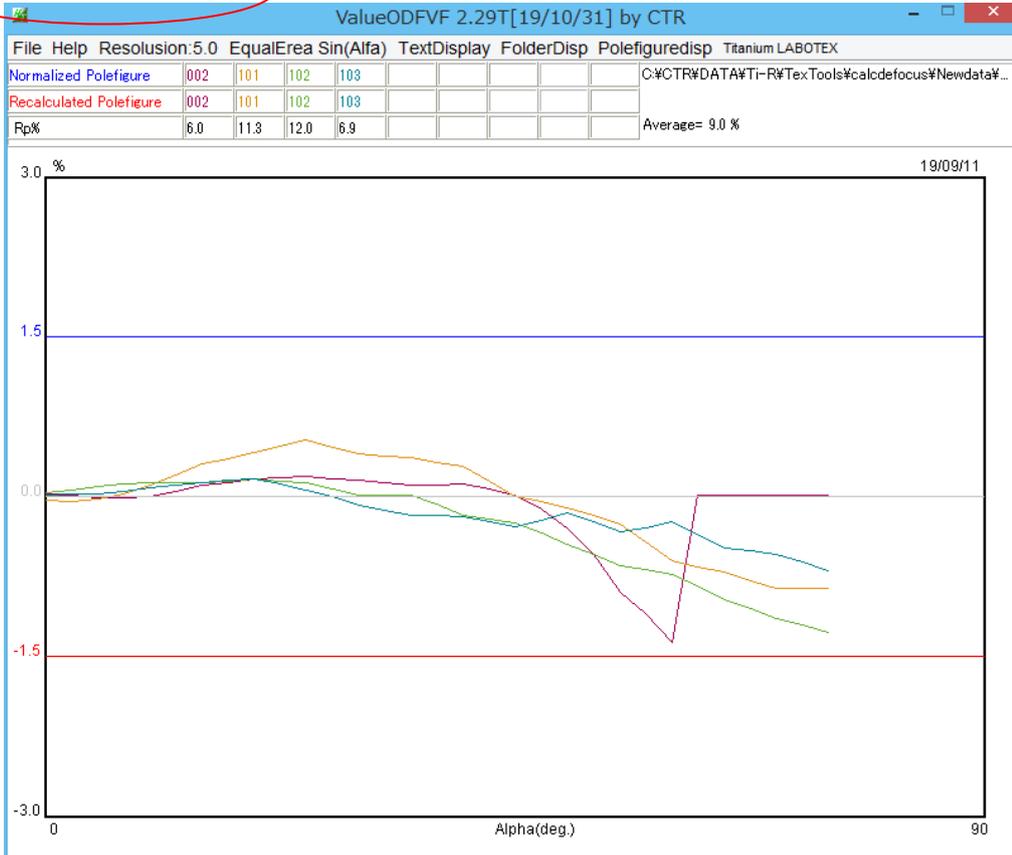
再defocus 極点図を解析

C:\CTR\DATA\TI-R\TexTools\calcdefocus\Newdata\TexTools\textools002_0.pol ↓
 C:\CTR\DATA\TI-R\TexTools\calcdefocus\Newdata\TexTools\textools101_1.pol ↓
 C:\CTR\DATA\TI-R\TexTools\calcdefocus\Newdata\TexTools\textools102_2.pol ↓
 C:\CTR\DATA\TI-R\TexTools\calcdefocus\Newdata\TexTools\textools103_3.pol ↓

0 0 2 ↓
 1 0 1 ↓
 1 0 2 ↓
 1 0 3 ↓

1 ↓
 5.00 ↓
 1 ↓
 0 ↓

2 ↓
 15 15 ↓
 0.0100 0.0991 ↓



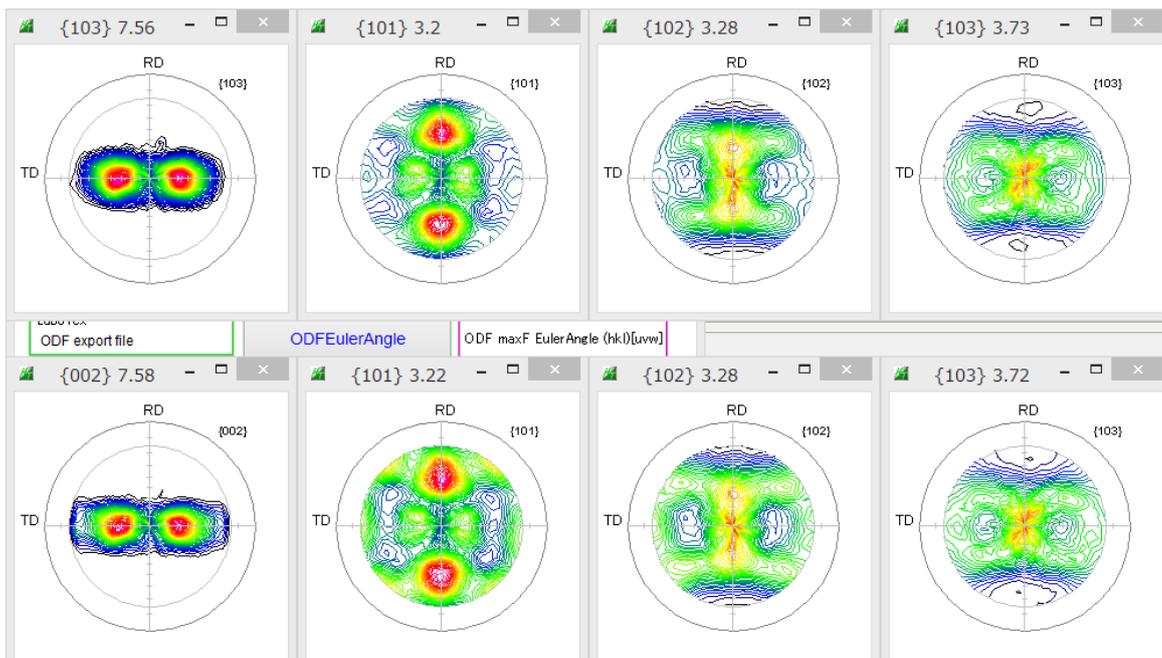
2. 3 MTEXの場合

```
>> odf=calcODF(pf)
```

0		0.98	0.58	0.69	0.74
1		0.54	0.50	0.39	0.27
2		0.28	0.41	0.35	0.23
3		0.19	0.35	0.32	0.20
4		0.15	0.38	0.30	0.17
5		0.14	0.33	0.30	0.17
6		0.12	0.34	0.29	0.16



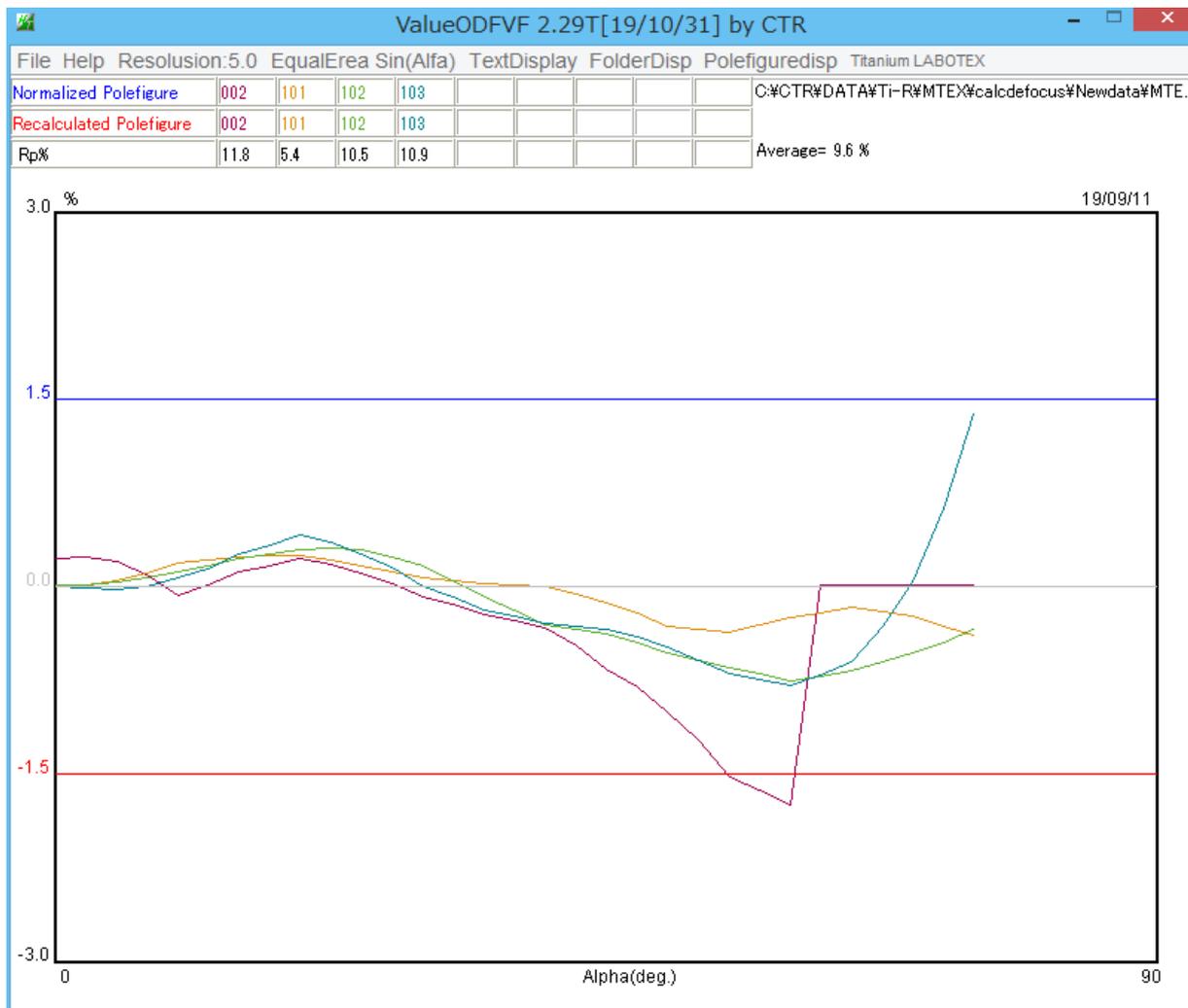
再defocus処理



MTEXで処理できるファイルを作成し、再度ODF解析を行う。

```
>> odf=calcODF(pf)
0 | 0.95 0.45 0.51 0.64
1 | 0.50 0.31 0.27 0.22
2 | 0.26 0.23 0.18 0.17
3 | 0.18 0.15 0.13 0.13
4 | 0.13 0.16 0.13 0.12
5 | 0.13 0.12 0.11 0.12
6 | 0.11 0.13 0.11 0.11
```

改善されています。



問題もありますが、改善されます。

このように常にRp%プロファイルを確認してください。