

ODF解析用簡易極点データ処理

本ソフトウェアは、HelperTexサイトからダウンロード可能ですが、
更に詳細のソフトウェアは、評価版CTRパッケージを請求してください。

2016年04月11日

HelperTex Office

概要

CTRパッケージソフトウェアでは各種X線メーカーの測定データに対応しているが、スタートは、リガクのASCデータである。本資料では、測定データをASCとして説明します。極点解析は、方位密度の正確な測定が必要なため、本来の回折線以外は削除します。この削除の為に、バックグラウンド測定を行っています。又、極点図の外側で、測定強度が低下するdefocus現象があります。極点処理では、このバックグラウンド削除とdefocus補正を必ず行います。

説明に必要なアプリケーションと測定データがパッケージに含まれています。

```
C:\CTR\bin\MultiDisp.jar
C:\CTR\bin\ODFPoleFigure1_5.jar
C:\CTR\bin\PFtoODF2.jar
C:\CTR\bin\PoleDisplayTXT2.jar
C:\CTR\bin\PoleFigureContourDisplayTXT2.jar
C:\CTR\bin\TextDisplay.jar
C:\CTR\DATA\ODFPoleFigure¥111-OSC.ASC
C:\CTR\DATA\ODFPoleFigure¥200-OSC.ASC
C:\CTR\DATA\ODFPoleFigure¥220-OSC.ASC
C:\CTR\DATA\ODFPoleFigure¥random¥111.ASC
C:\CTR\DATA\ODFPoleFigure¥random¥200.ASC
C:\CTR\DATA\ODFPoleFigure¥random¥220.ASC
```

極点データ処理

ODFPoleFigure1_5.jar

極点データ処理本体

PoleDisplayTXT2.jar

3D 極点図表示ドライバー

PoleFigureContourDisplaTXT2.jar

等高線極点図表示ドライバー

TextDisplay.jar

テキストファイルの表示ドライバー

MultiDisplay.jar

プロファイル多重記録ドライバー

測定データ

ODFPoleFigure¥111-OSC.ASC

ODFPoleFigure¥200-OSC.ASC

ODFPoleFigure¥220-OSC.ASC

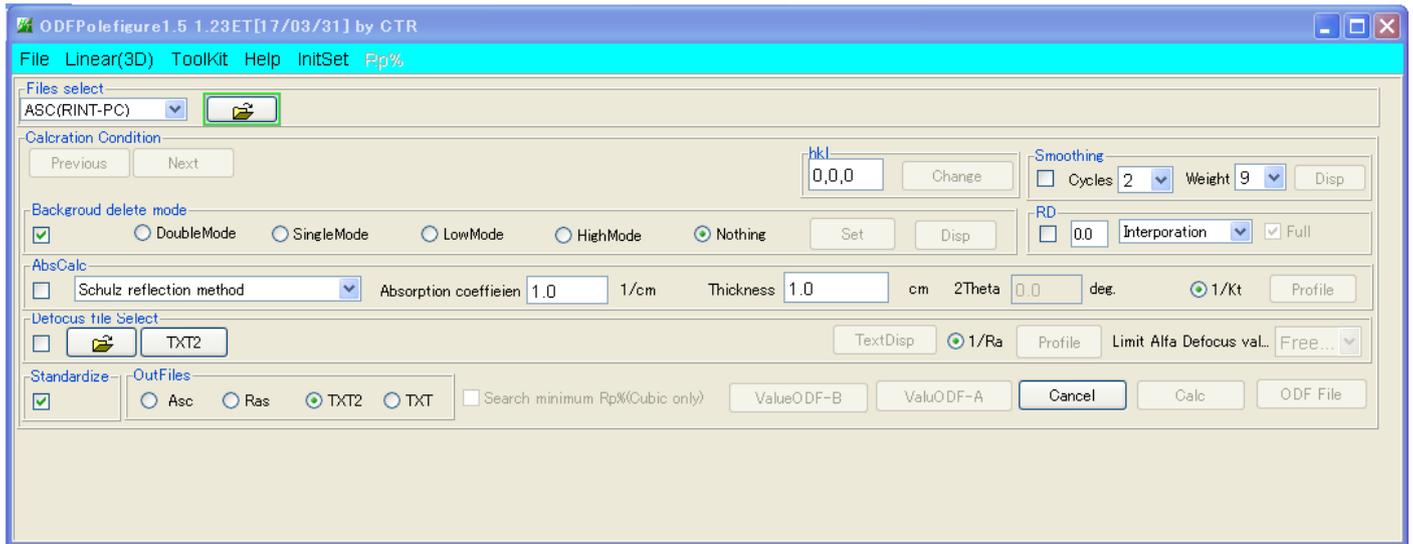
Defocus 補正用 random データ

ODFPoleFigure¥random¥111.ASC

ODFPoleFigure¥random¥200.ASC

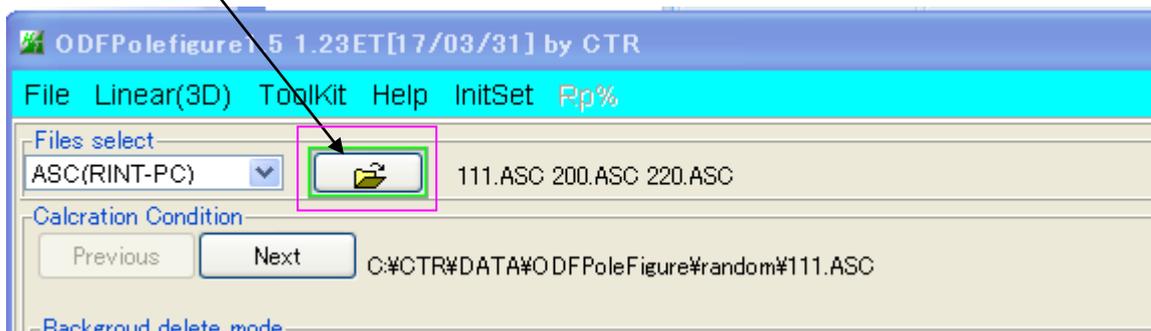
ODFPoleFigure¥random¥220.ASC

デスクトップにショートカットされた ODFPoleFigure1_5.jar をダブルクリック

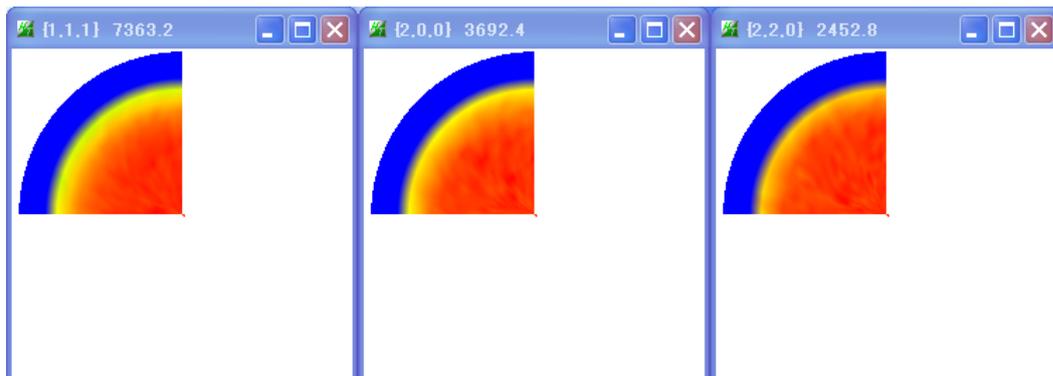


Defocus 補正用ファイルの作成

C:\¥CTR¥DATA¥ODFPoleFigure¥random の aaa.SAC.200.ASC.220.ASC を選択

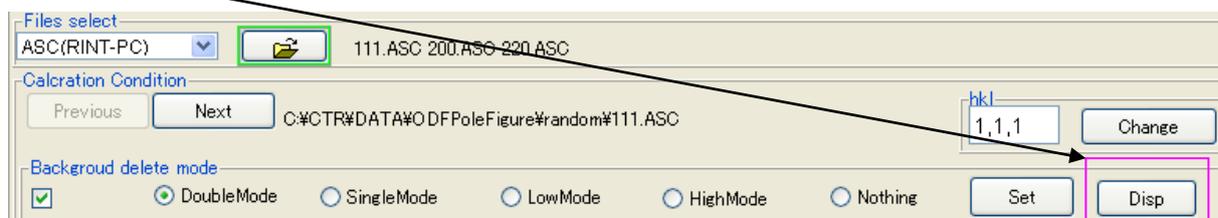


3D 極点図が表示されます。

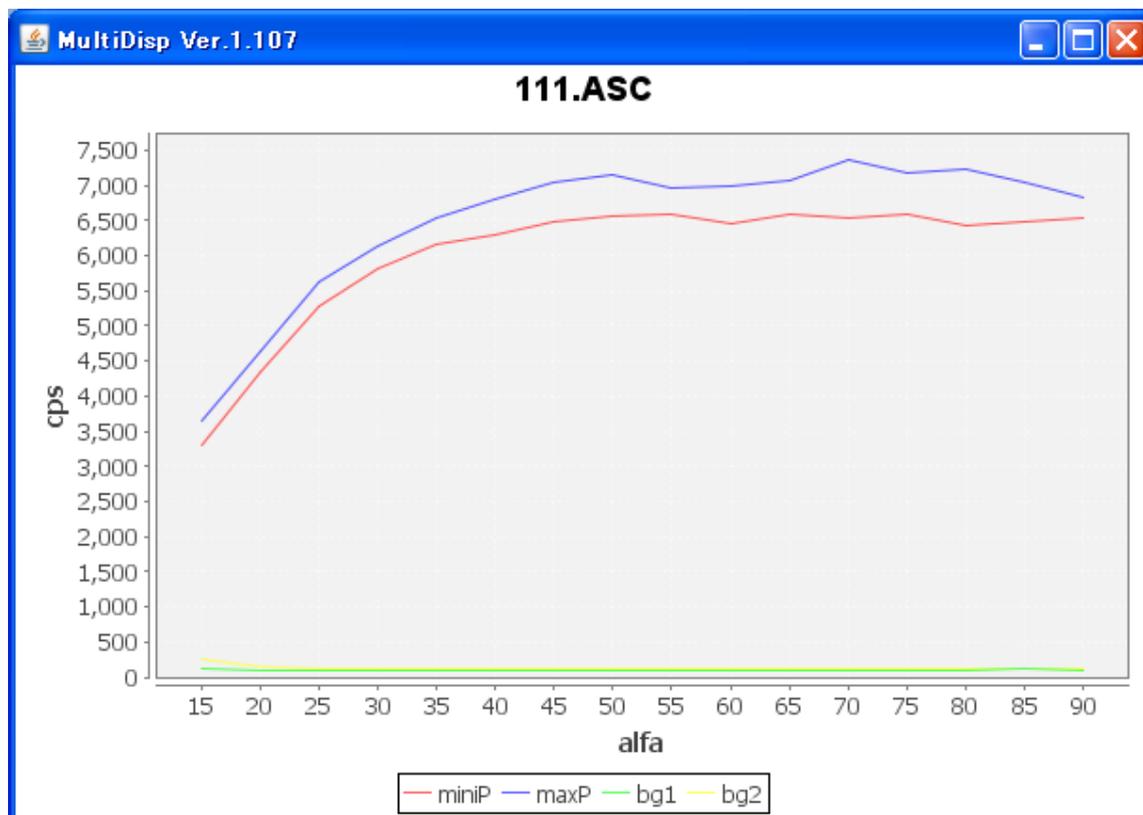


3 個の PoleDisplayTXT2.jar で表示しています。

バックグラウンドの確認



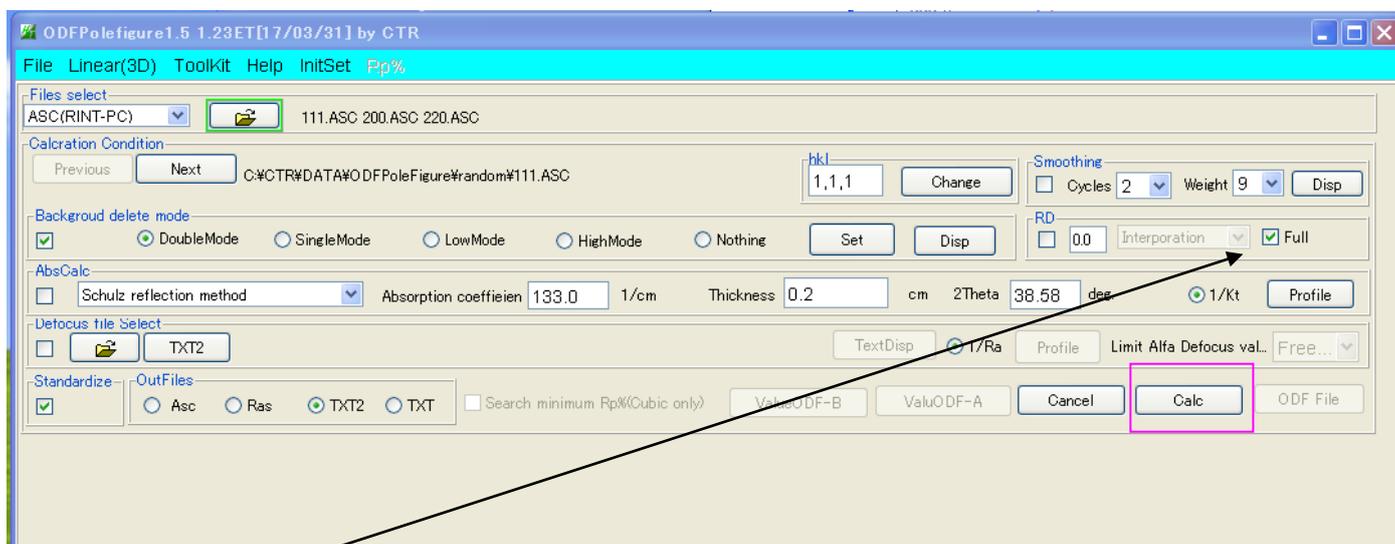
β 方向の最大、最小、平均、バックグラウンドを α 方向にプロットしています。
バックグラウンドにピークの影響を受けていないことが重要です。



MultiDisplay.jar で表示しています。

d e f o c u s 用補正データは、バックグラウンド削除を行って作成します。

C a l c で処理される。



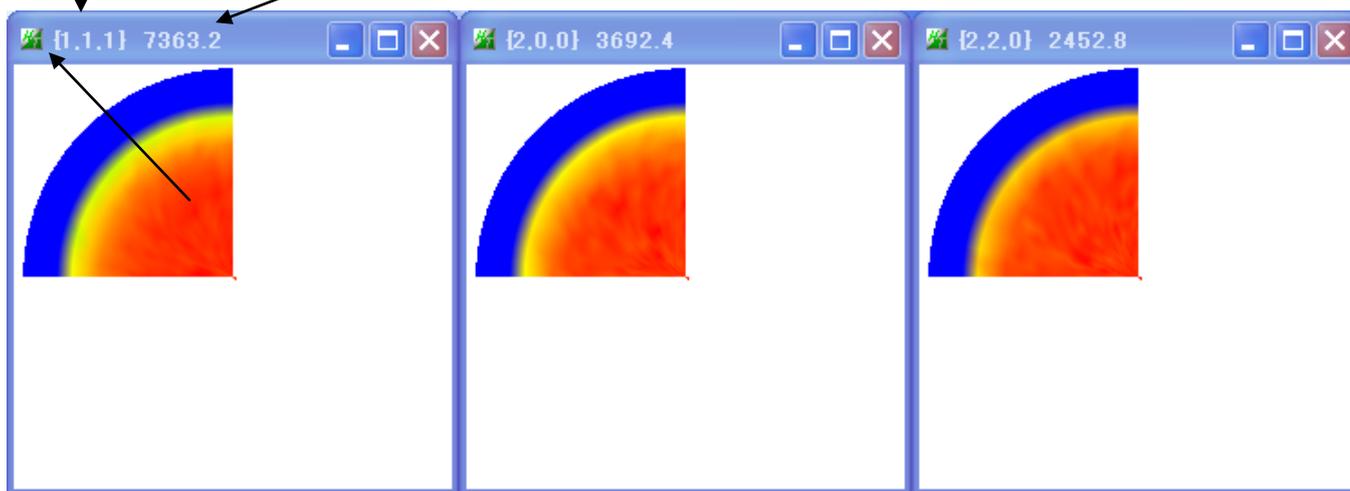
β 方向が $1/4$ の場合、full にチェックが付きます。

処理結果を表示

入力データ

ミラー指数

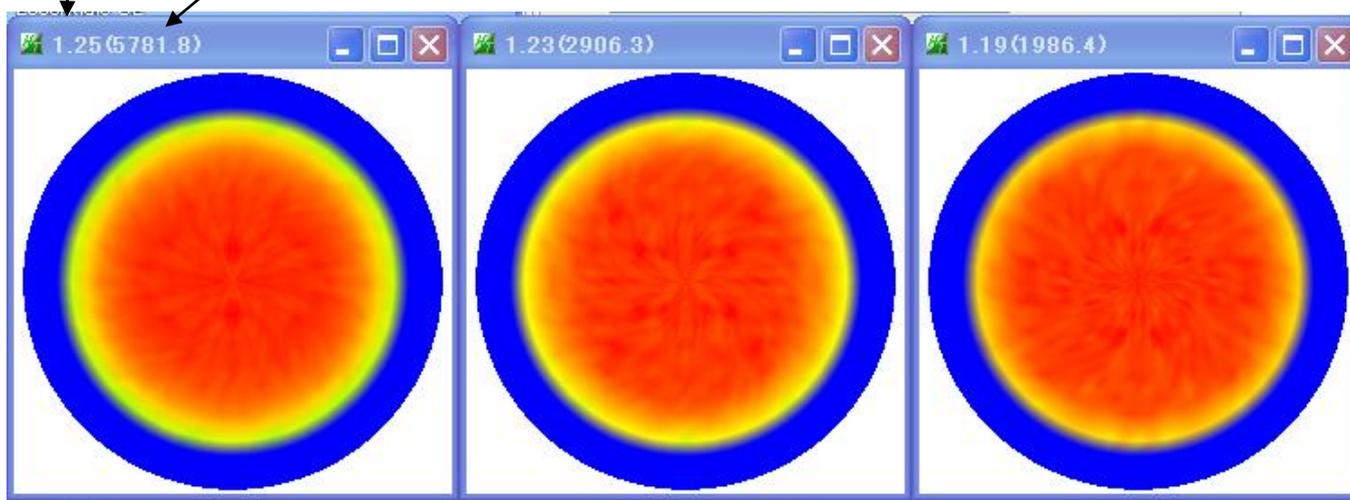
最大強度(cps)



処理結果

規格化密度

規格化値



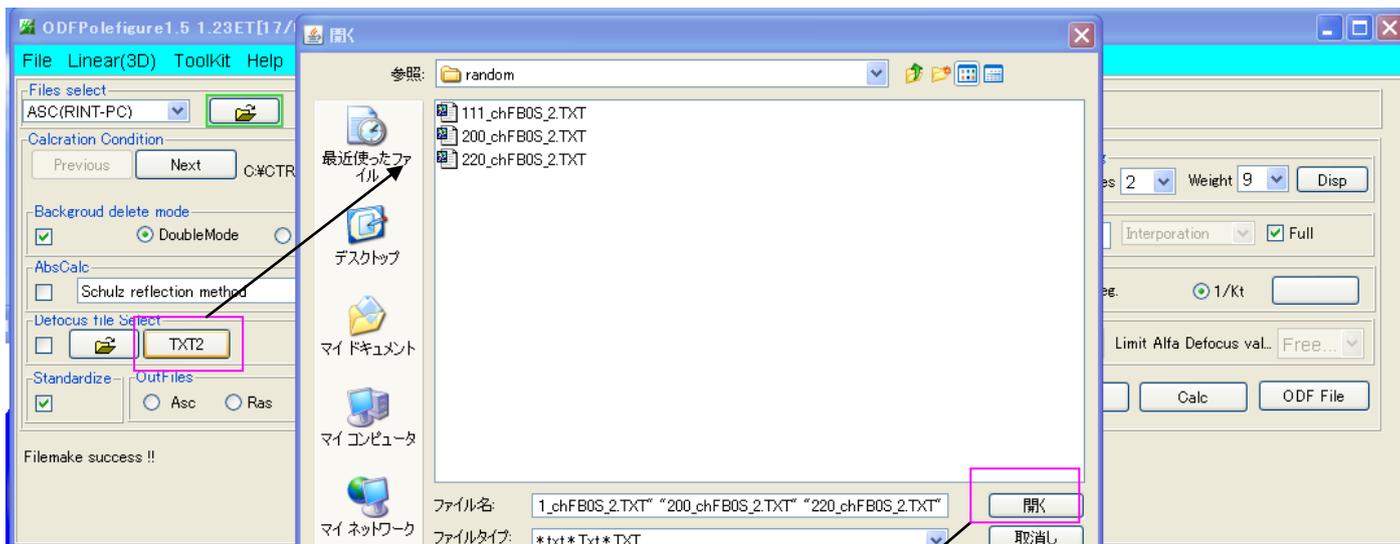
111.ASC	17 KB	RINT2000アスキー	2014/03/13 7:40
200.ASC	17 KB	RINT2000アスキー	2014/03/13 7:40
220.ASC	17 KB	RINT2000アスキー	2014/03/13 7:40
111_chFB0S_2.TXT	22 KB	テキスト文書	2016/04/11 7:52
200_chFB0S_2.TXT	22 KB	テキスト文書	2016/04/11 7:52
220_chFB0S_2.TXT	22 KB	テキスト文書	2016/04/11 7:52
SLITTHETAFILE	1 KB	ファイル	2016/04/11 7:52

入力データ

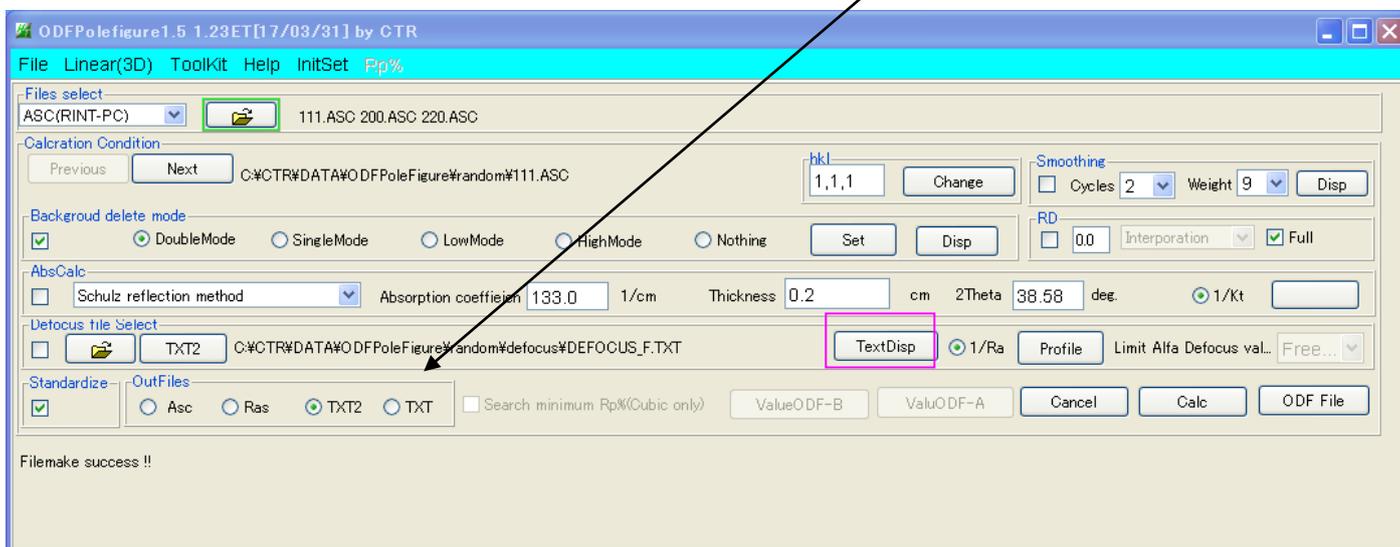
処理結果

内部ファイル

バックグラウンド削除したTXT2ファイルをdefocusファイルに登録

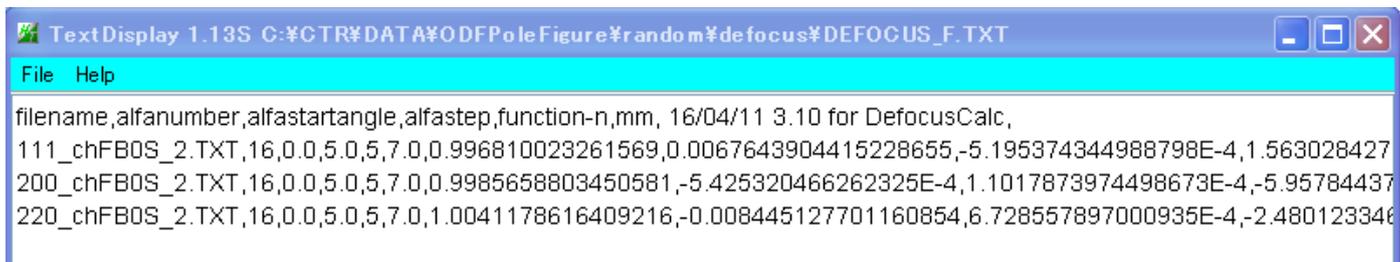


複数のTXT2を選択する。



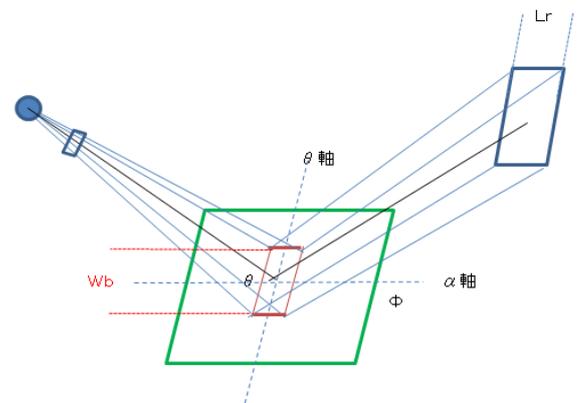
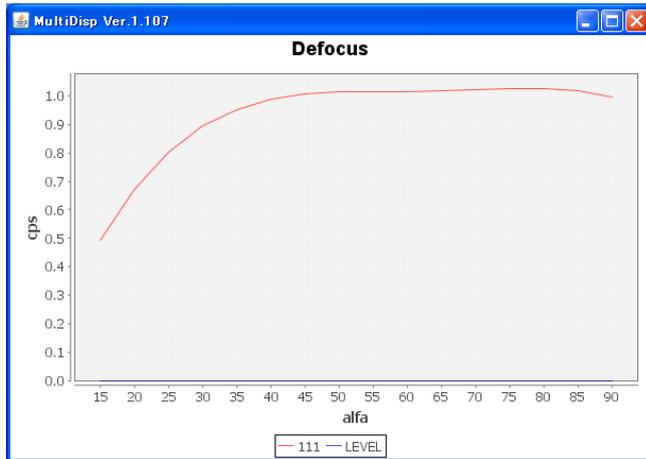
登録されたファイルを確認

Defocusの登録するファイルの先頭はミラー指数でなければなりません。



TXtDisplay.jar で表示しています。

defocus 補正曲線の確認



T e n c k h o f f の計算式に相関する事が重要です。

$$\frac{I_{\Delta}(\Phi, \theta, W_B, L_R)}{I_{\Delta}(\Phi=0, \theta, W_B, L_R)} = 1 - \frac{2}{(2\pi)^{1/2}} \int_{-\infty}^{-L_R/P(W_B \tan \Phi \sin 2\theta / \sin \theta)} \exp(-y^2/2) dy.$$

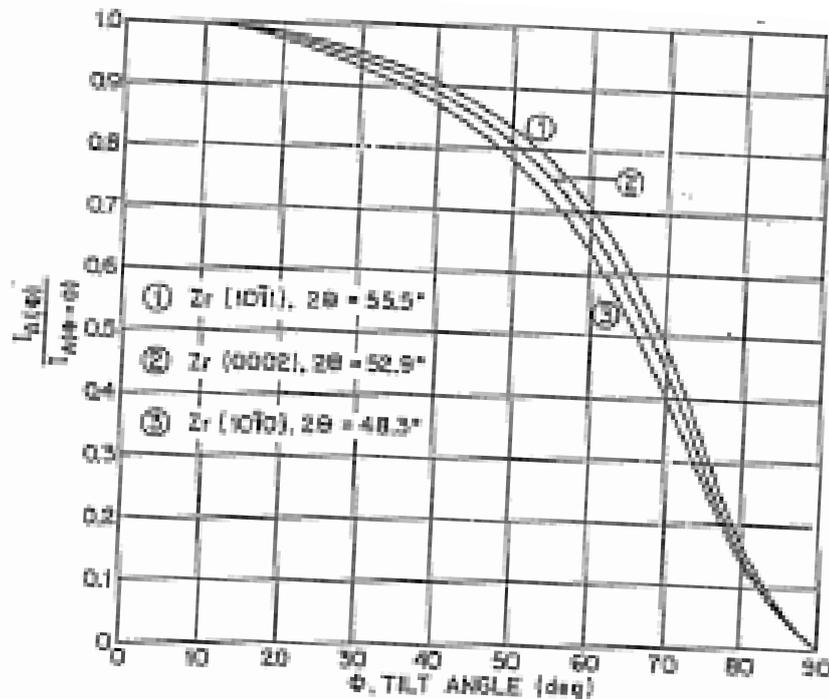
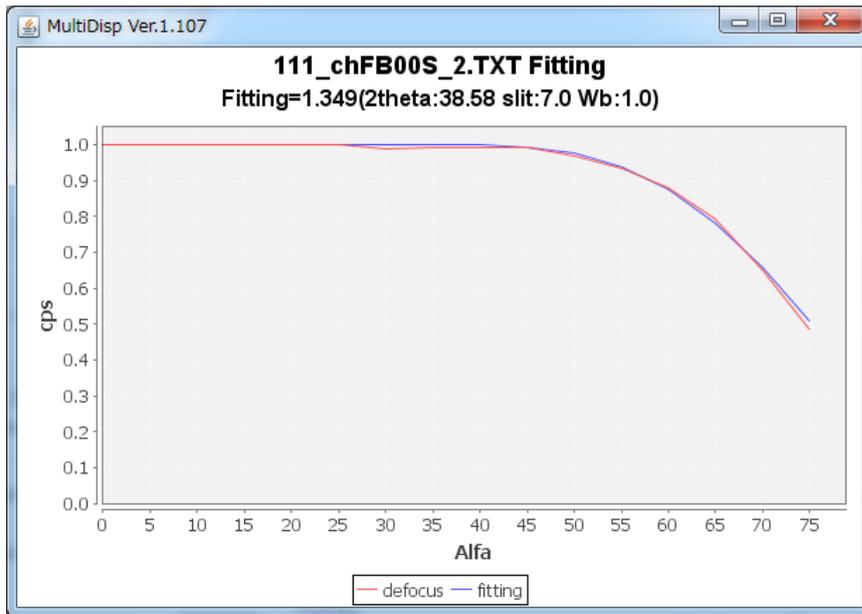
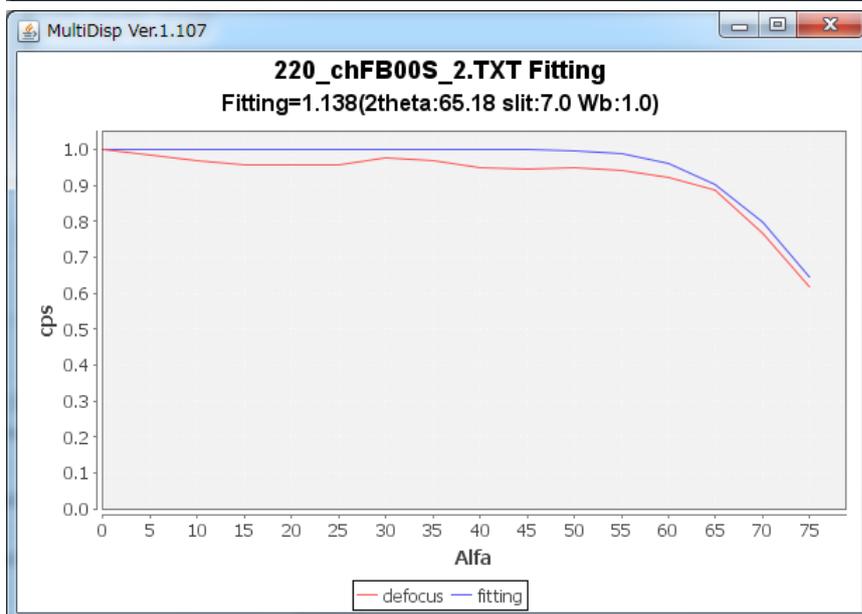
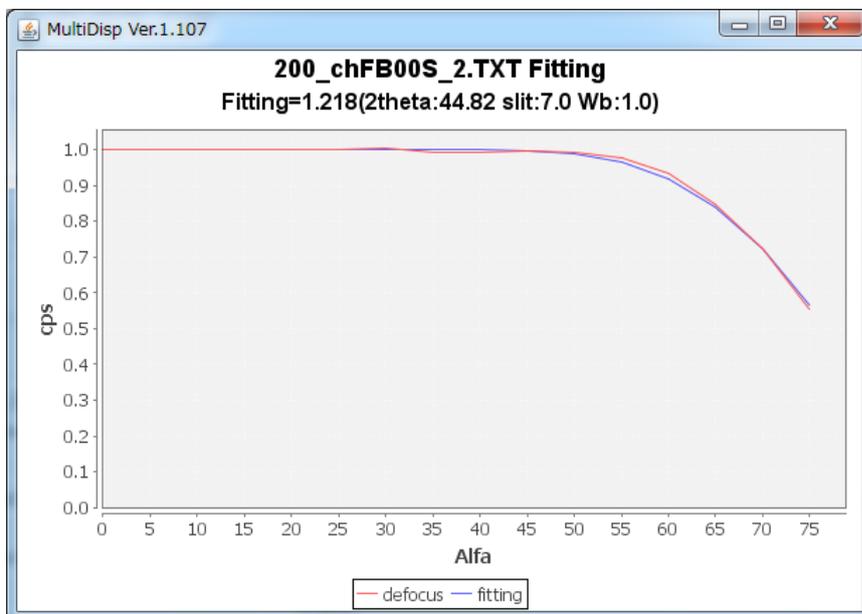


FIG. 2. Decrease in intensity with increasing tilt angle ϕ for different diffracting planes of a zirconium specimen with random orientation.

C T Rパッケージ付属ソフトウェア TenckhoffCalc ソフトウェアで相関状態を確認



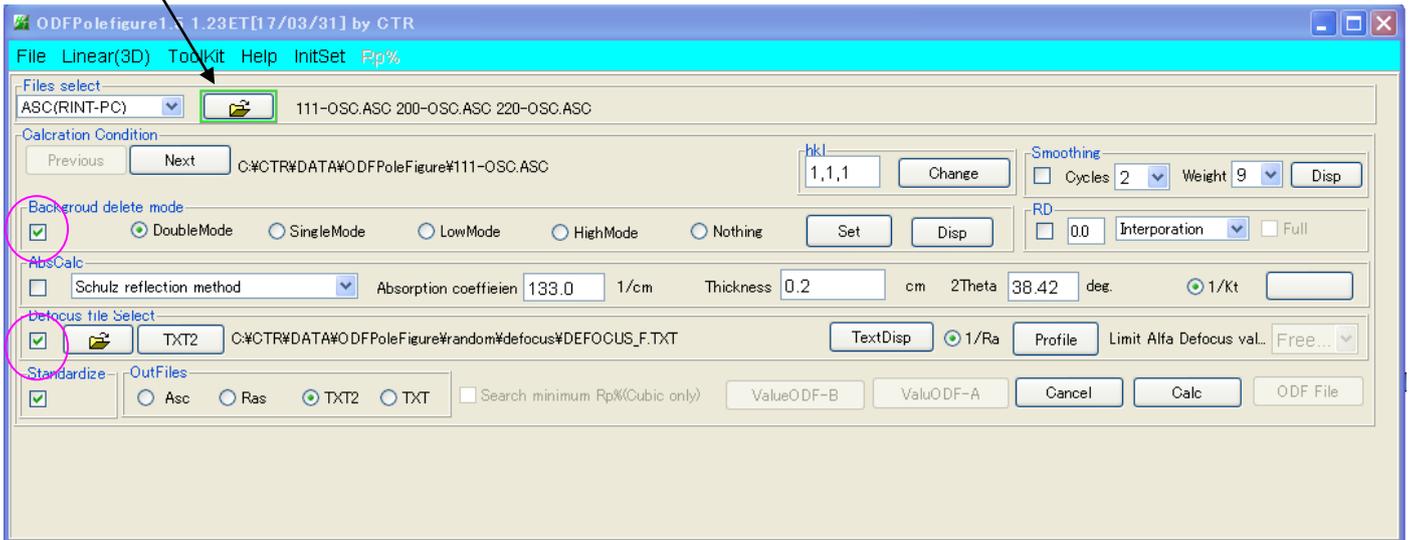
赤が測定データ、青がT e n c k h o f f の計算曲線によく一致している事が分かります。



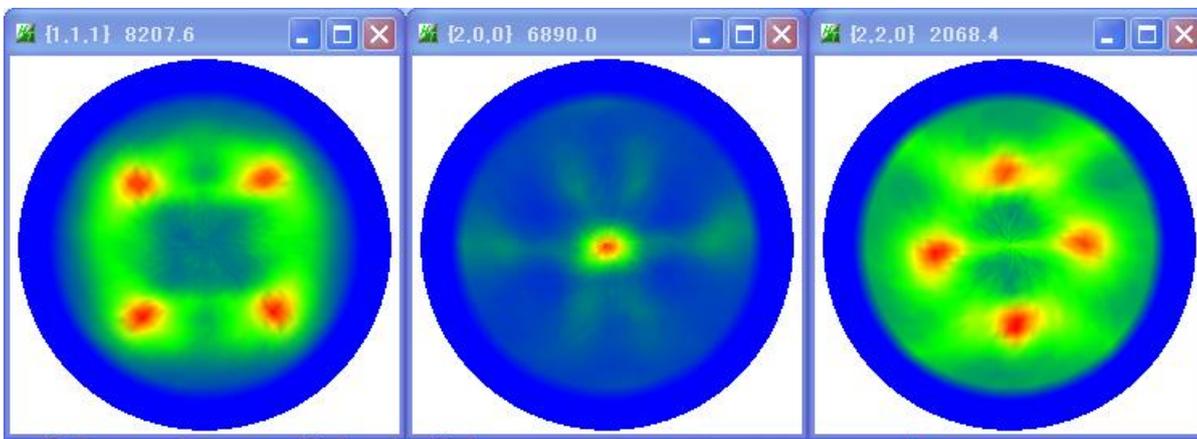
計算結果をd e f o c u s に指定する事もあります

配向試料の極点データ処理

ファイル選択

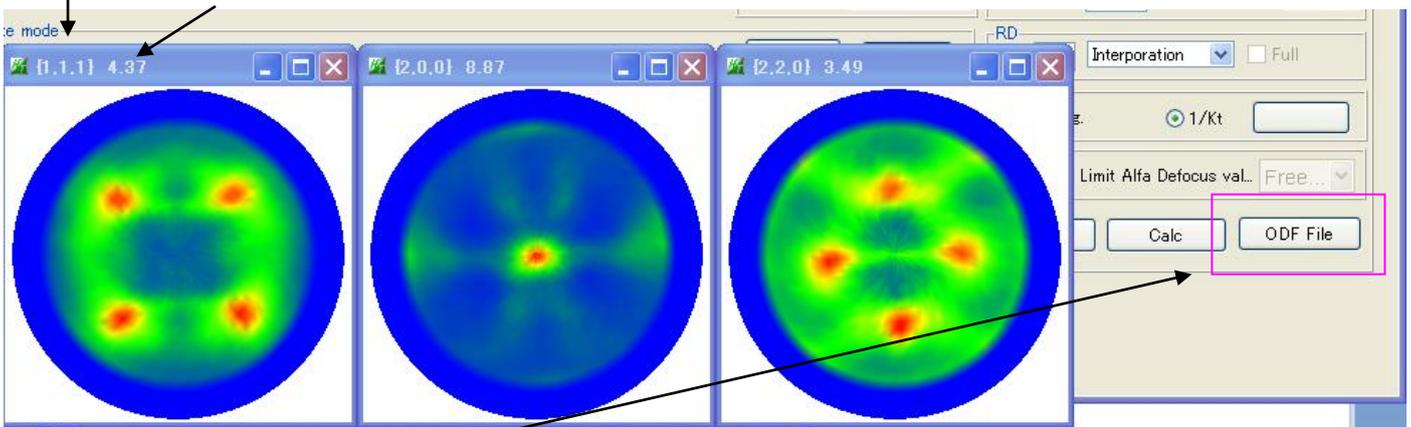


選択したデータが表示される。



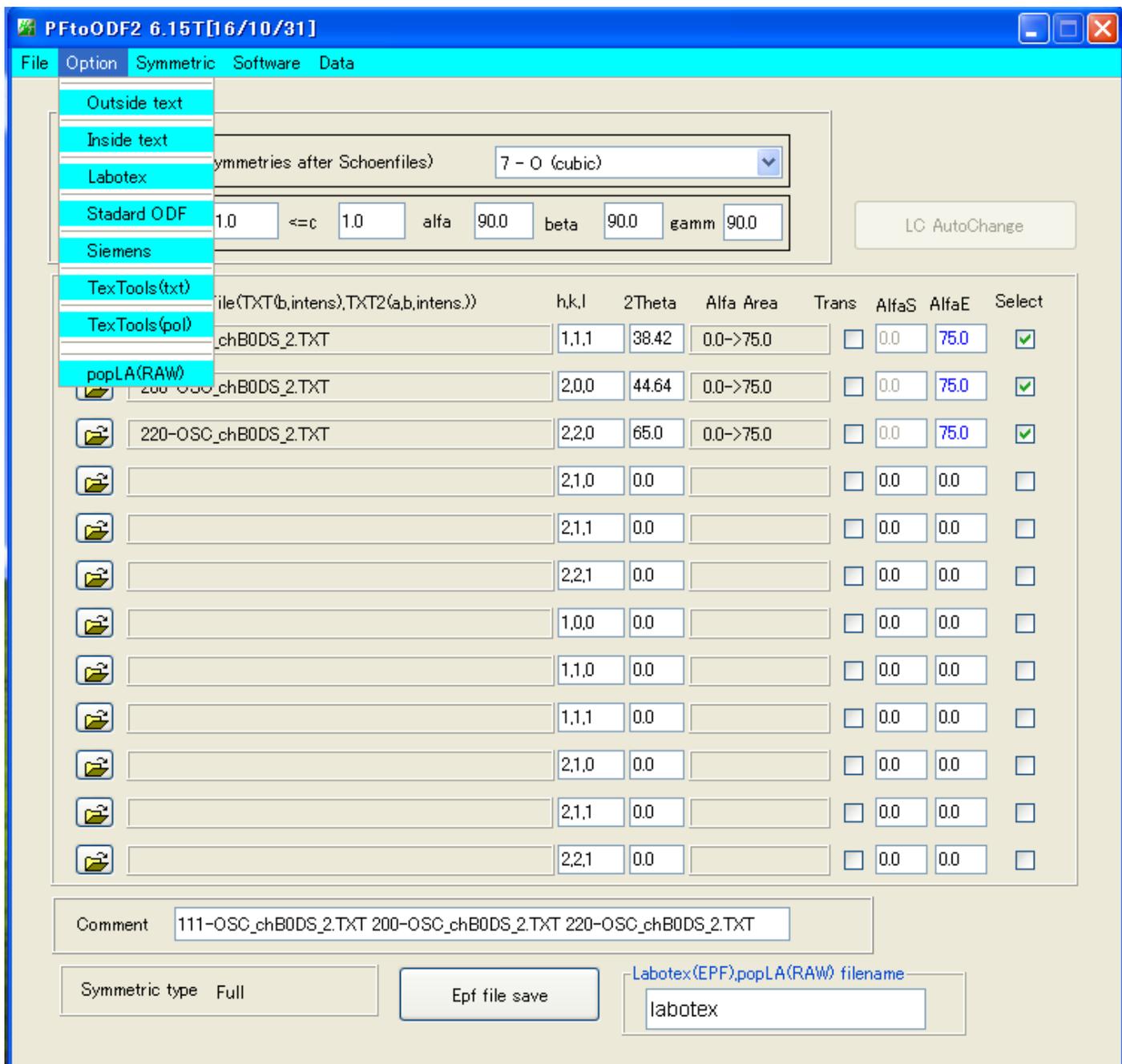
バックグラウンド処理と defocus 補正にチェックして Calc

ミラー指数 規格化密度



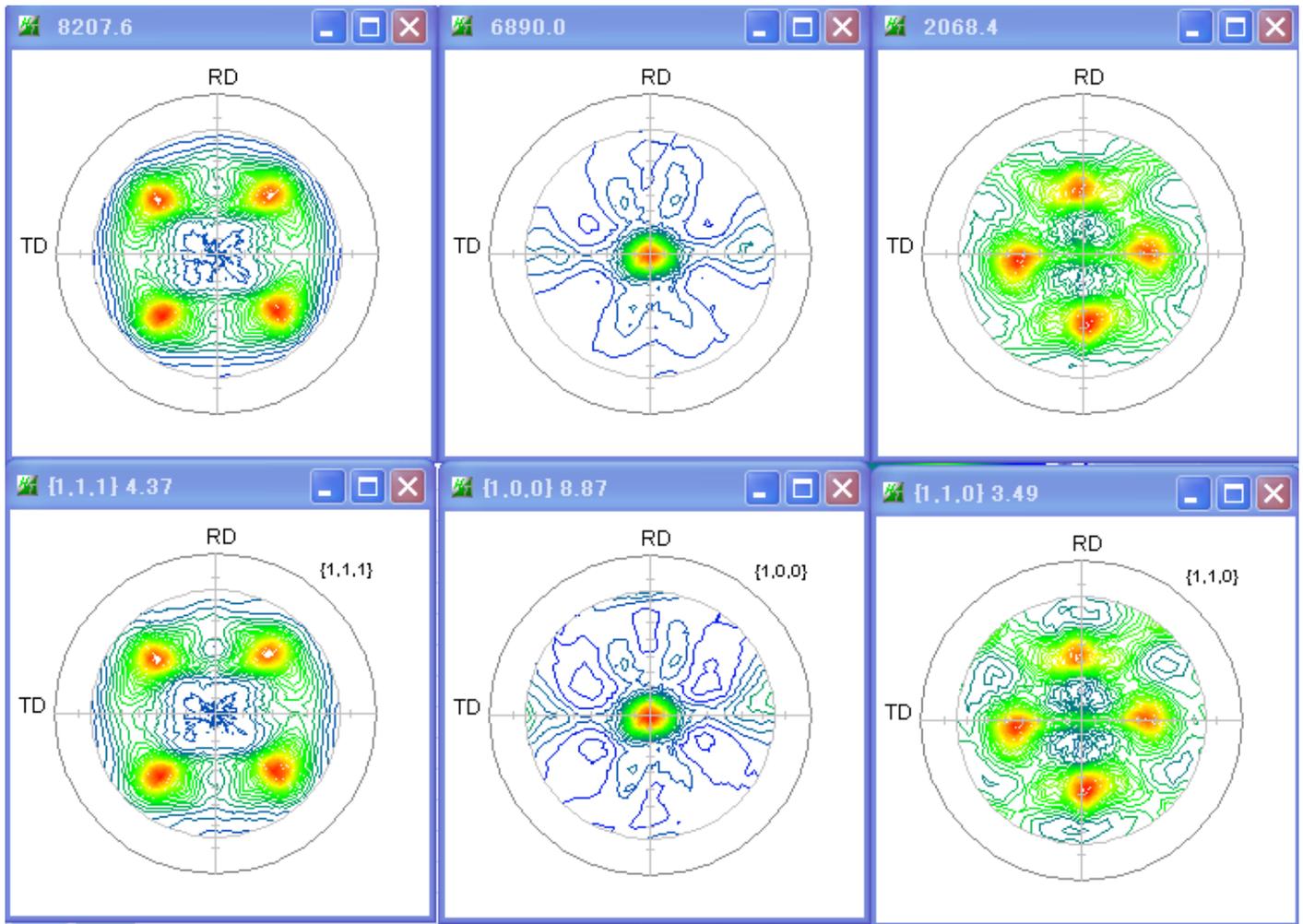
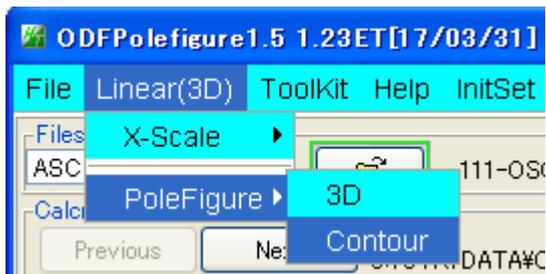
各種ODF向けファイルの作成

作成するODFファイルを指定して

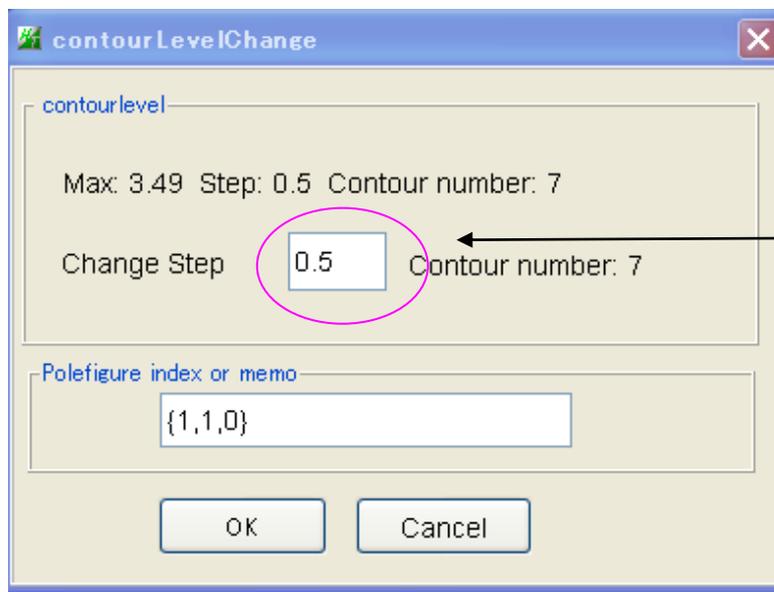


Key を操作すれば各種ODF 向けファイルが作成される。

3D極点図から等高線極点図切り替え

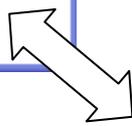
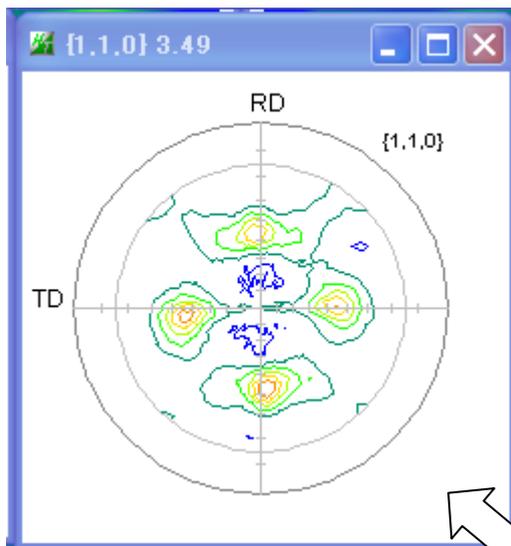


等高線数が40本で表示されているが変更は極点図をマウスクリック

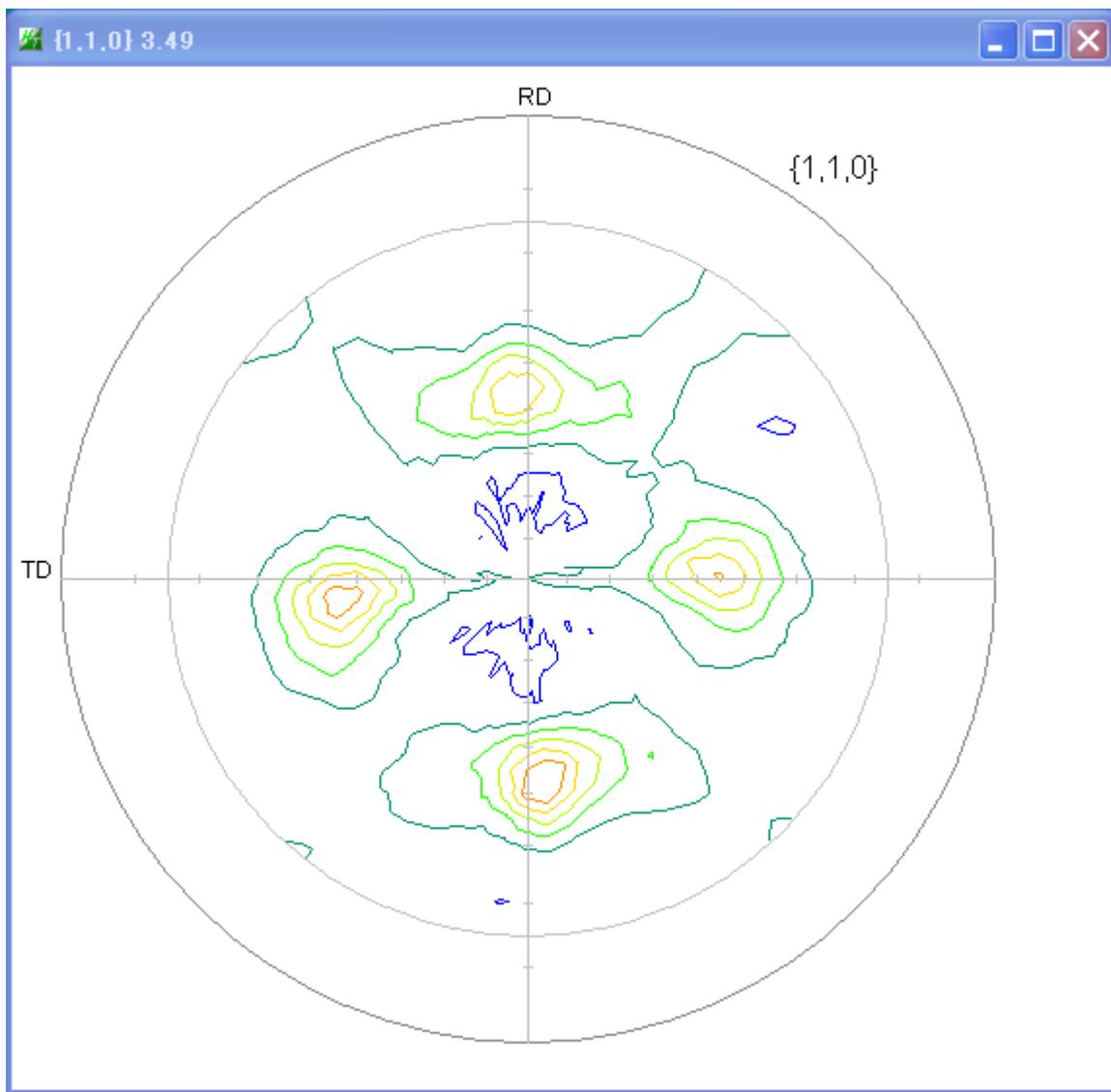


ステップ間隔変更

極点図の拡大

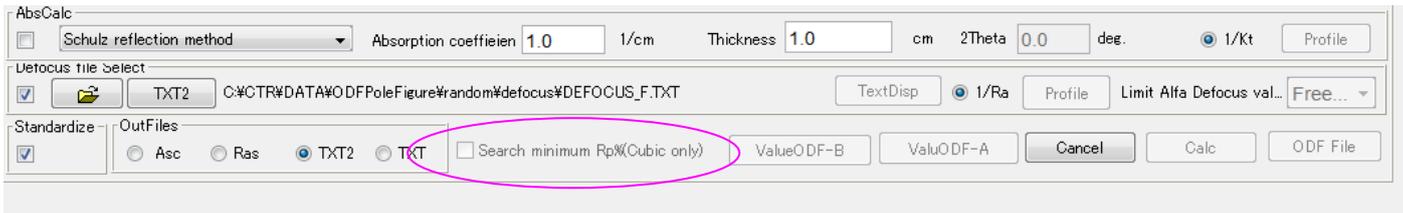


マウスで引っ張る

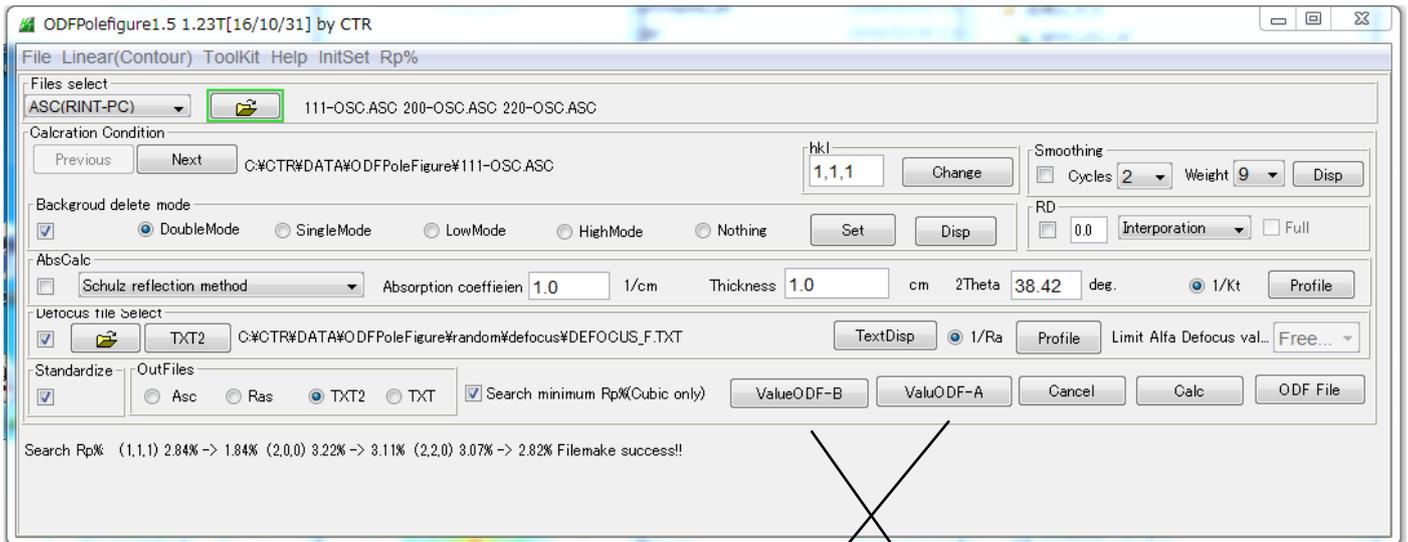


ODF解析結果の再計算極点図と入力極点図から入力極点図のErrorを行う事が出来ます。

ODFPoleFigure1_5,ODFPoleFigure2 ソフトウェアでは最小化Rp%機能がありますが、CTR パッケージソフトウェア（評価版 CTR ソフトウェア）が必要です。

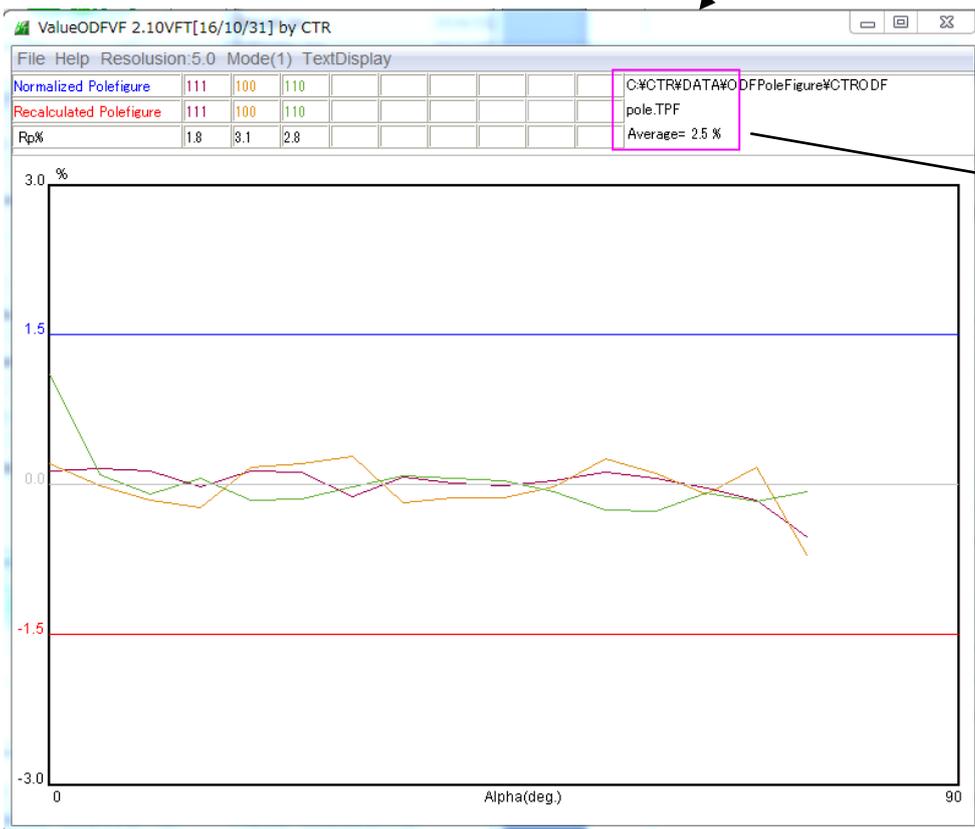


最小化Rp%の効能



Rp%の最小化で個々のRp%が以下の様に改善されます。

Search Rp% (1,1,1) 2.84% -> 1.84% (2,0,0) 3.22% -> 3.11% (2,2,0) 3.07% -> 2.82% Filemake success!!



最小化Rp%前のRp%

C:\CTR#DATA#ODI pole-B.TPF
Average= 3.0 %

改善 3.0% -> 2.5%

更に、配向全般をサポートしているソフトウェア群も CTR パッケージソフトウェアに含まれます。

