

T i t a n i u mの逆極点をC r e a t eしたプロファイルから計算

2020年09月22日

HelperTex Office

概要

逆極点図の[0001],[10-10],[11-20]に方位が存在するODFを考える。

各方位を25%、randomを25%としてODF図を作成し、逆極点図を表示してみます。

回折線が存在する方位なら同様な逆極点図が表示できます。

TitaniumでもCubicと同一処理が出来ます。

使用したソフトウェア

LaboTex (Ver 3. 0. 53)

[0001],[10-10],[11-20]方位のVolumeFraction 25%のODF図計算

逆極点表示

CreateProfile (Ver 1. 05)

回折プロファイル作成

Profile to Division Profile (Ver. 1. 07)

連続ファイルから回折線毎に指数付き分割ファイル作成

InverseAll (Ver. 1. 16)

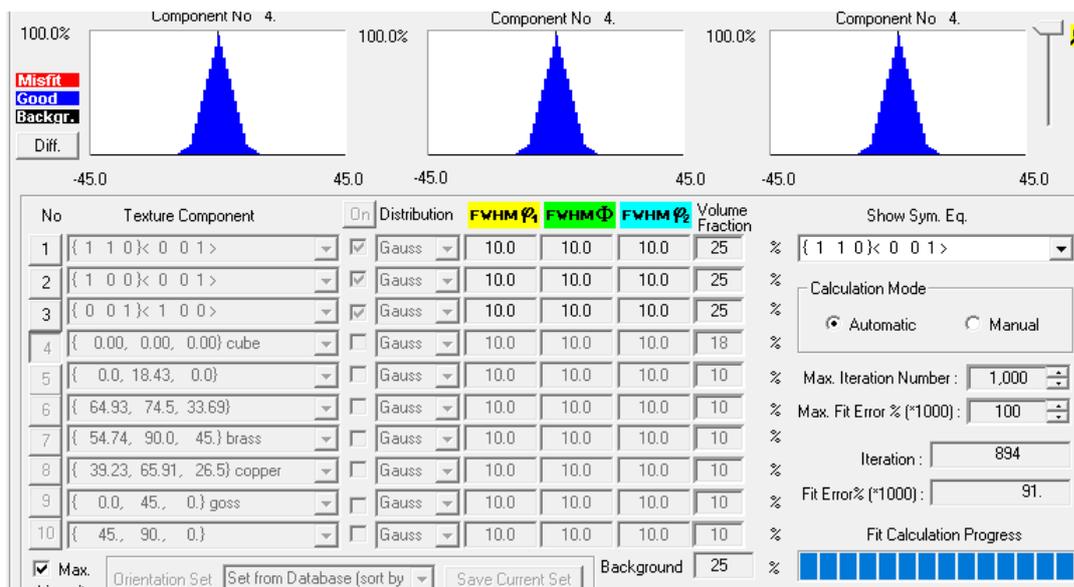
逆極点計算

InverseDisplayHexa (Ver. 1. 17)

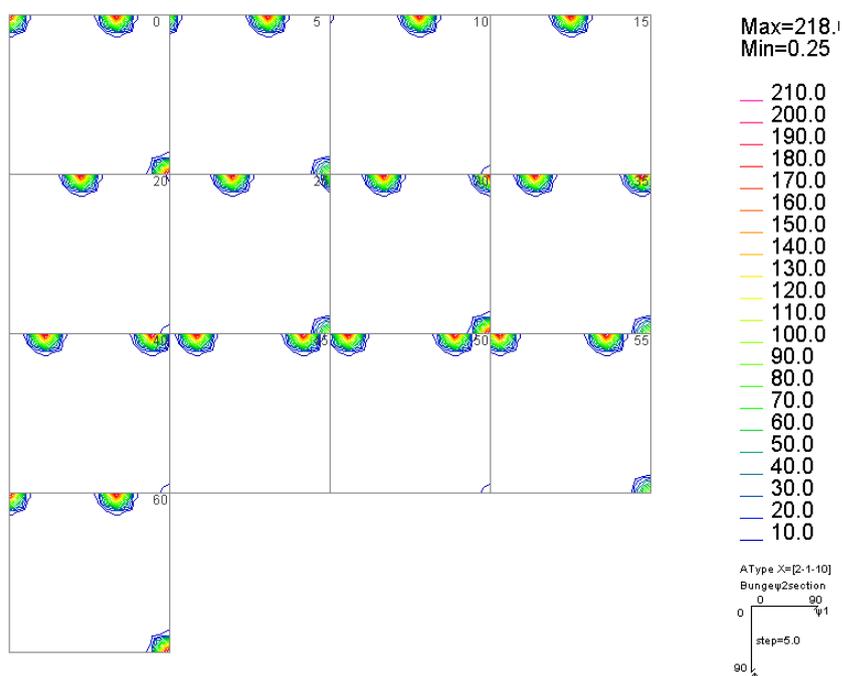
Hexagonal逆極点図データを作成し、3D表示、等高線表示

逆極点図のコーナに方位が現れるODF図を作成

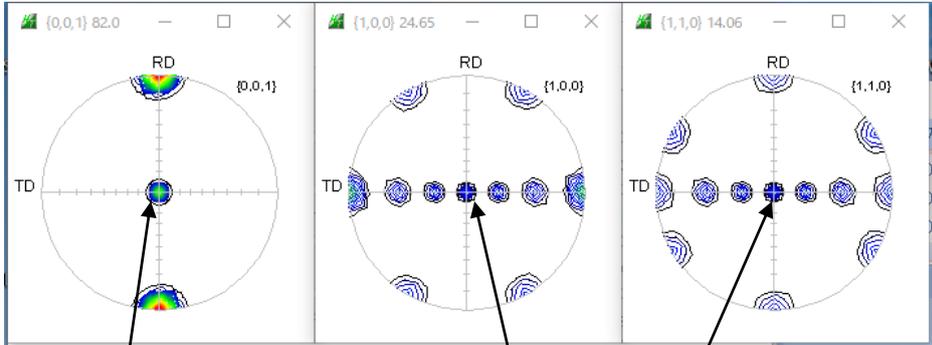
各方位の VolumeFraction を 25% として作成



VolumeFraction の background は random 方位である。

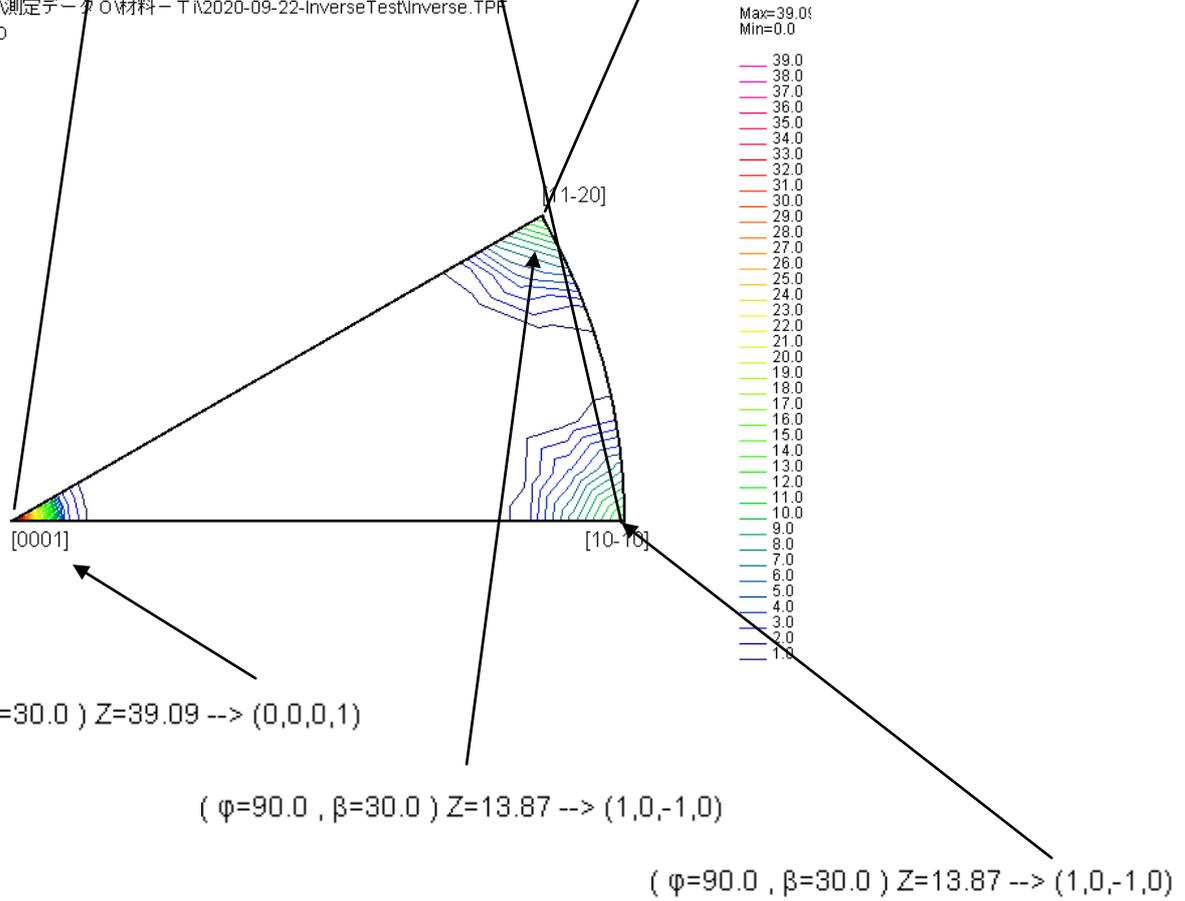


ODF図の min=25 は 25% の background が含まれている事を示しています。



逆極点図

U:\測定データ\O材料-TI\2020-09-22-InverseTest\Inverse.TPF
ND



逆極点図で示すProfileを作成します。

通常のTitaniumのカードはからrandomプロファイル

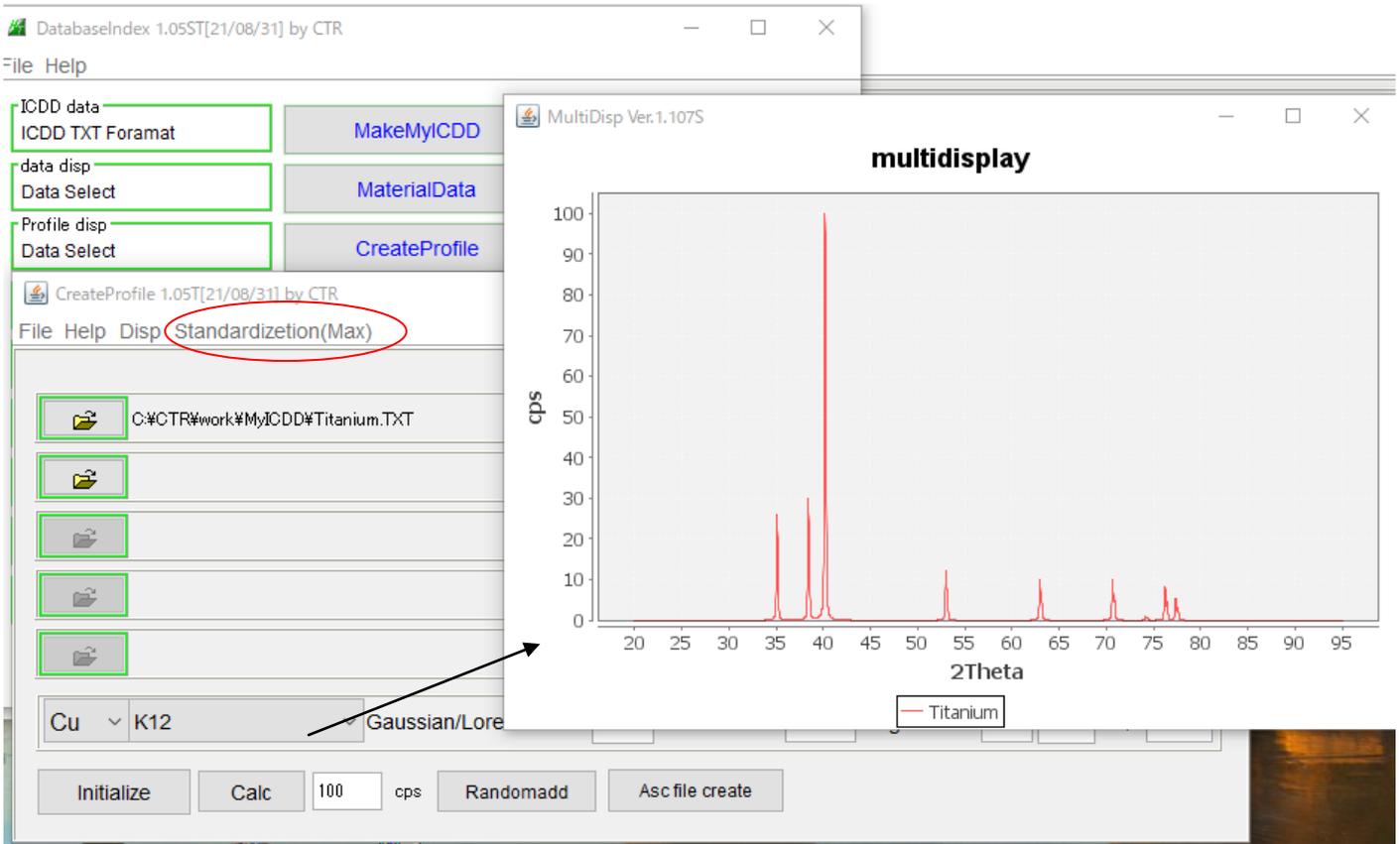
```
Titanium↓
4↓
2.9505↓
2.9505↓
4.6826↓
90.0↓
90.0↓
120.0↓
1.54056↓
9↓
1      0      0      25.0    35.093↓
0      0      2      30.0    38.421↓
1      0      1      100.0   40.170↓
1      0      2      13.0    53.004↓
1      1      0      11.0    62.949↓
1      0      3      11.0    70.660↓
2      0      0      1.0     74.157↓
1      1      2      9.0     76.218↓
2      0      1      6.0     77.368↓
```

新たに以下のカードを作成

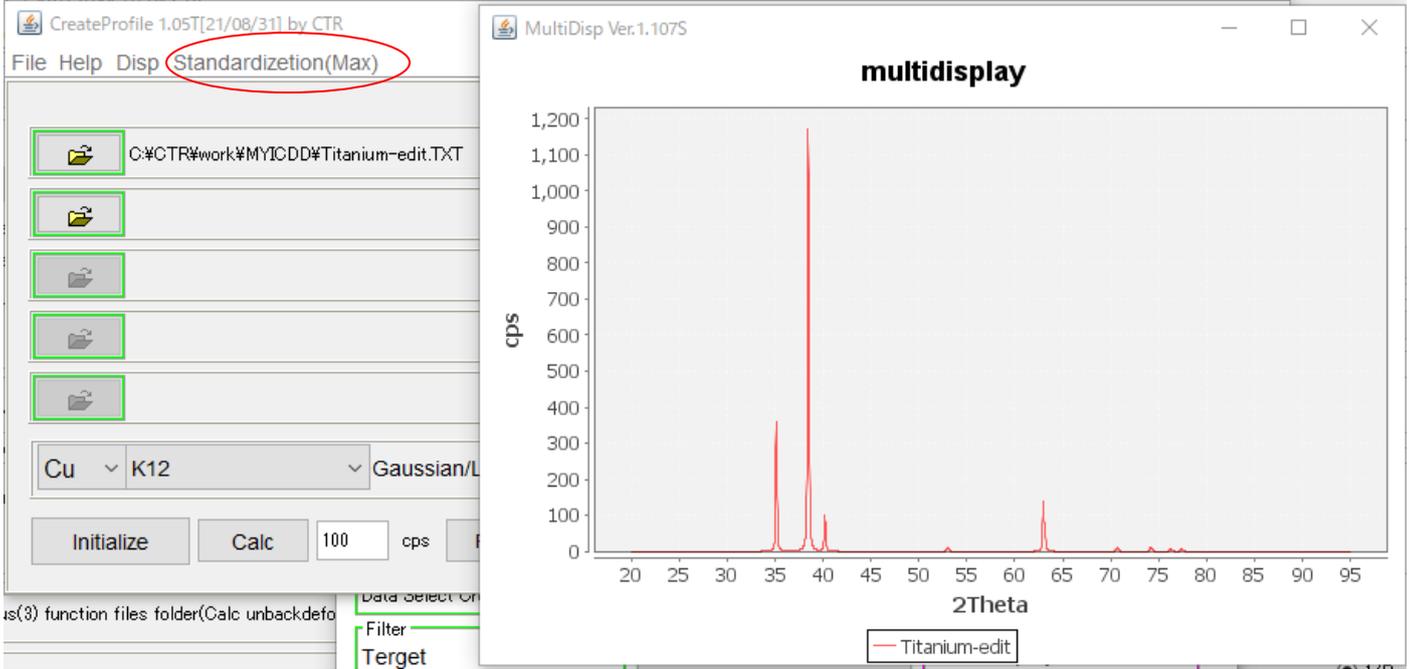
```
Titanium↓
4↓
2.9505↓
2.9505↓
4.6826↓
90.0↓
90.0↓
120.0↓
1.54056↓
9↓
1      0      0      346.75  35.093↓
0      0      2      1172    38.421↓
1      0      1      100.0   40.170↓
1      0      2      13.0    53.004↓
1      1      0      152.57  62.949↓
1      0      3      11.0    70.660↓
2      0      0      13.87   74.157↓
1      1      2      9.0     76.218↓
2      0      1      6.0     77.368↓
```

sampleプロファイル作成

r a n d o m

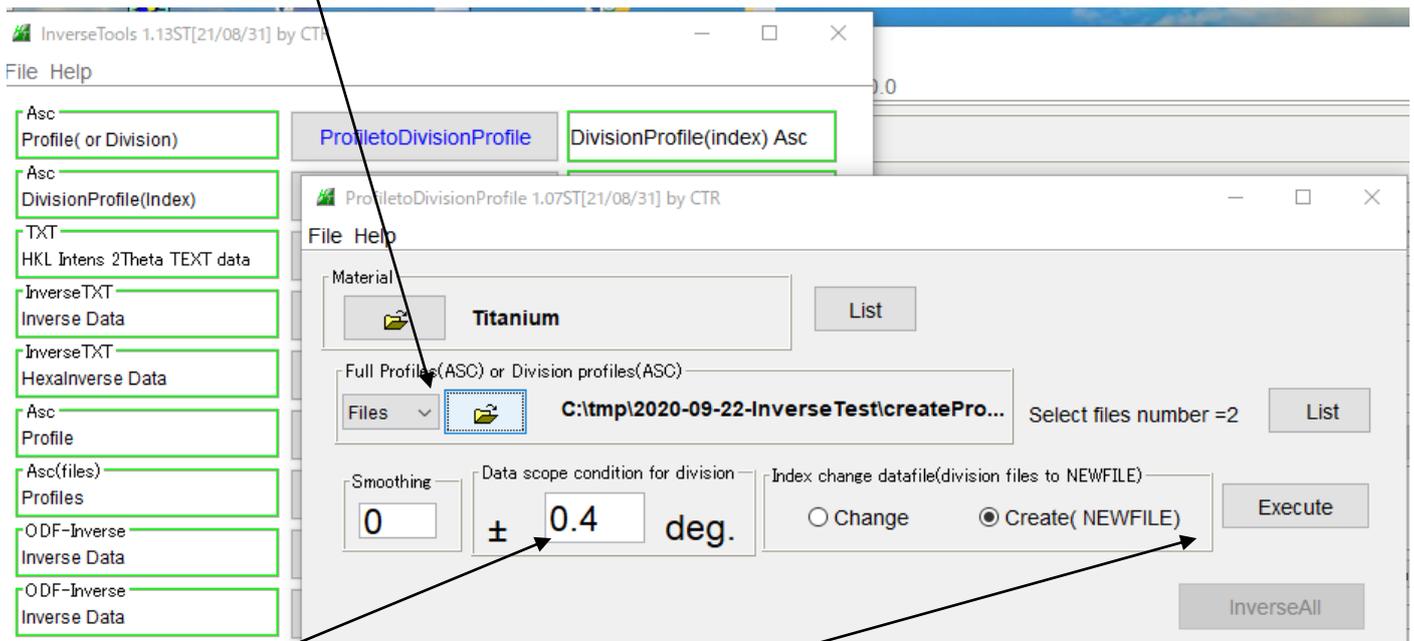


s a m p l e



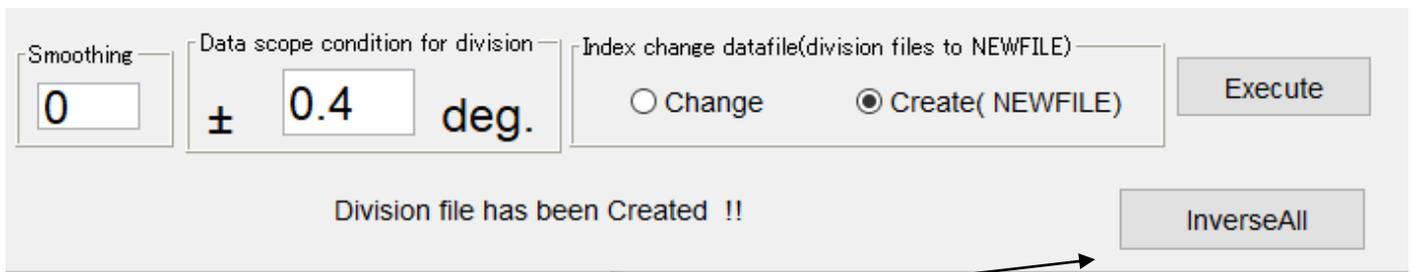
2つの連続プロファイルから反射毎に分割し指数付けを行う。

r a n d o m と s a n p m e を同時選択

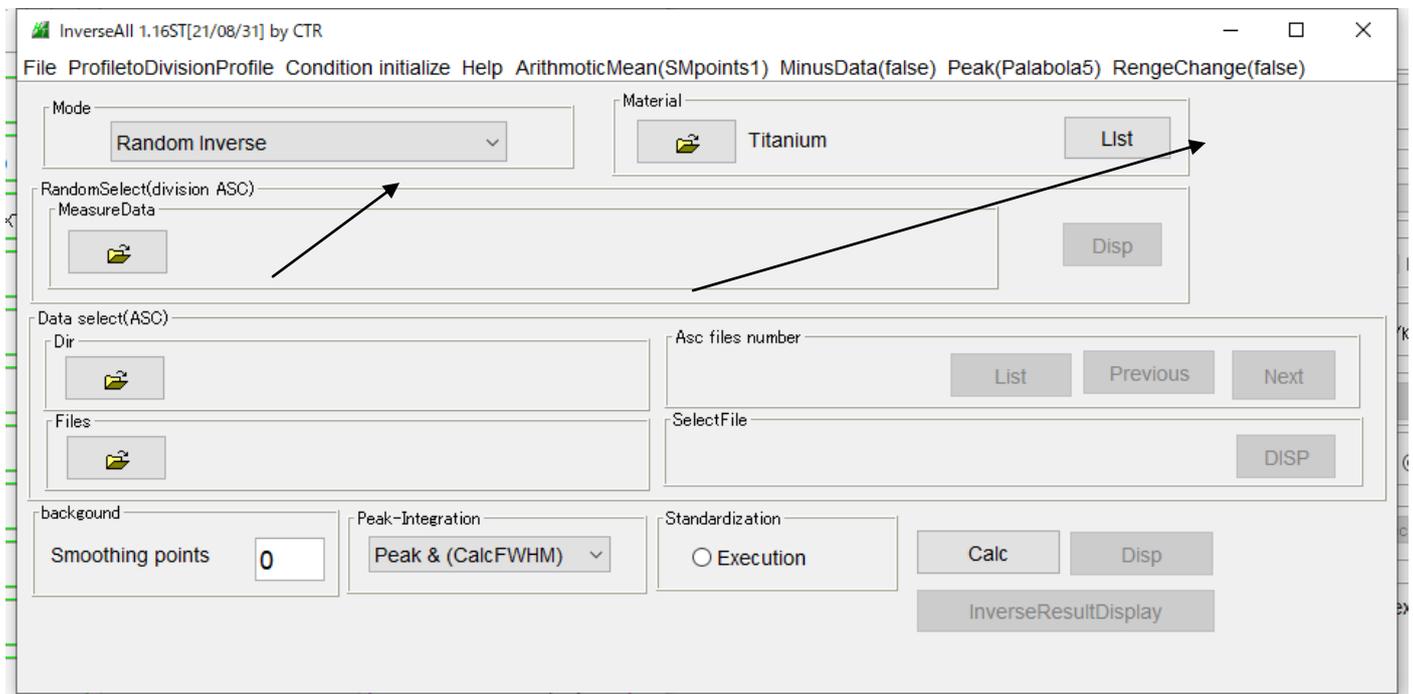


切り出し幅を狭く

切り出しを行う。

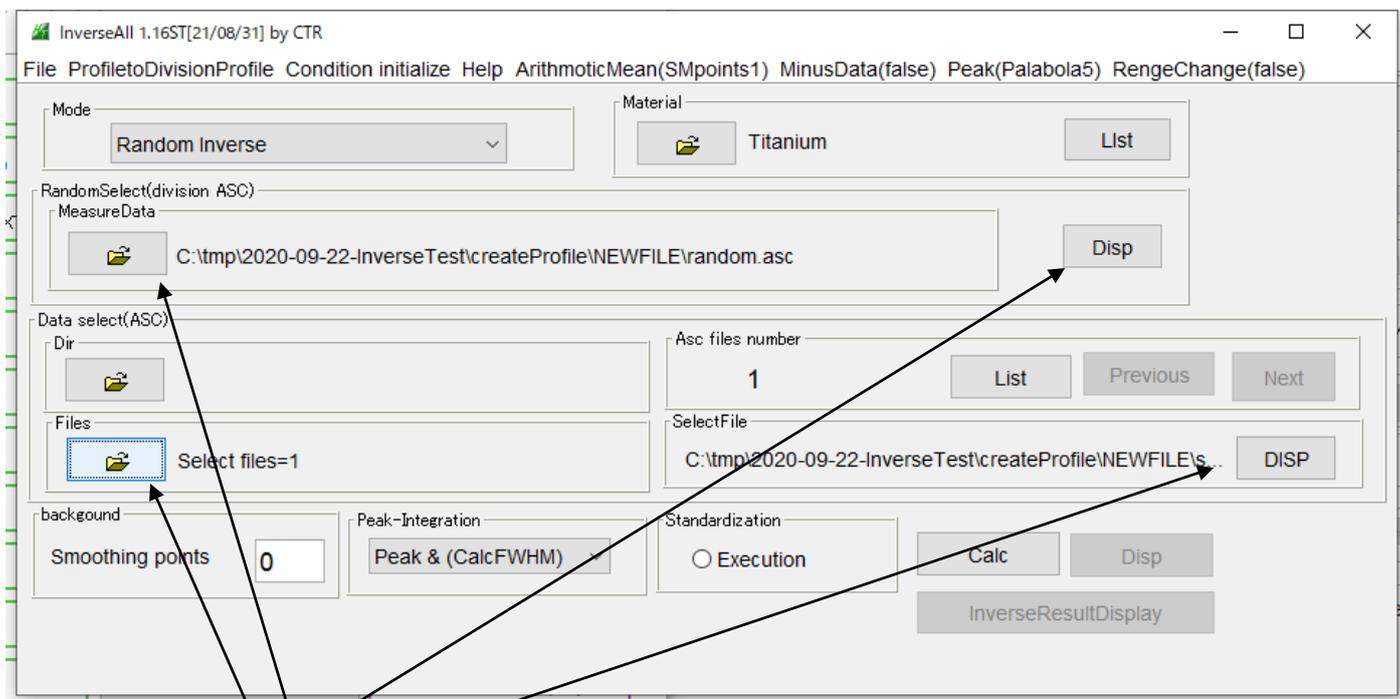


逆極点計算を行う。



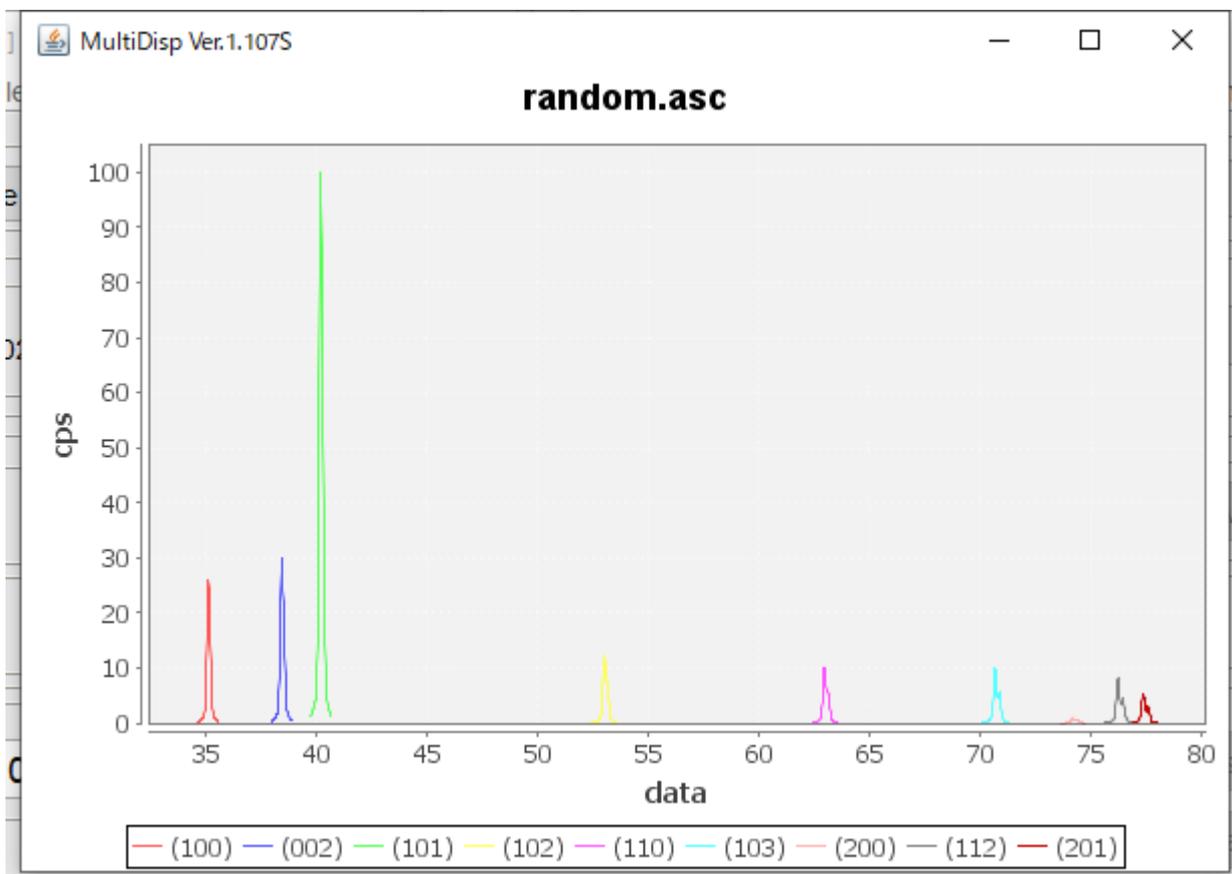
P e a k強度とFWHM=積分 / p e a k強度 * 2 / 3を計算

randomとsample（複数一括指定も可能）を選択

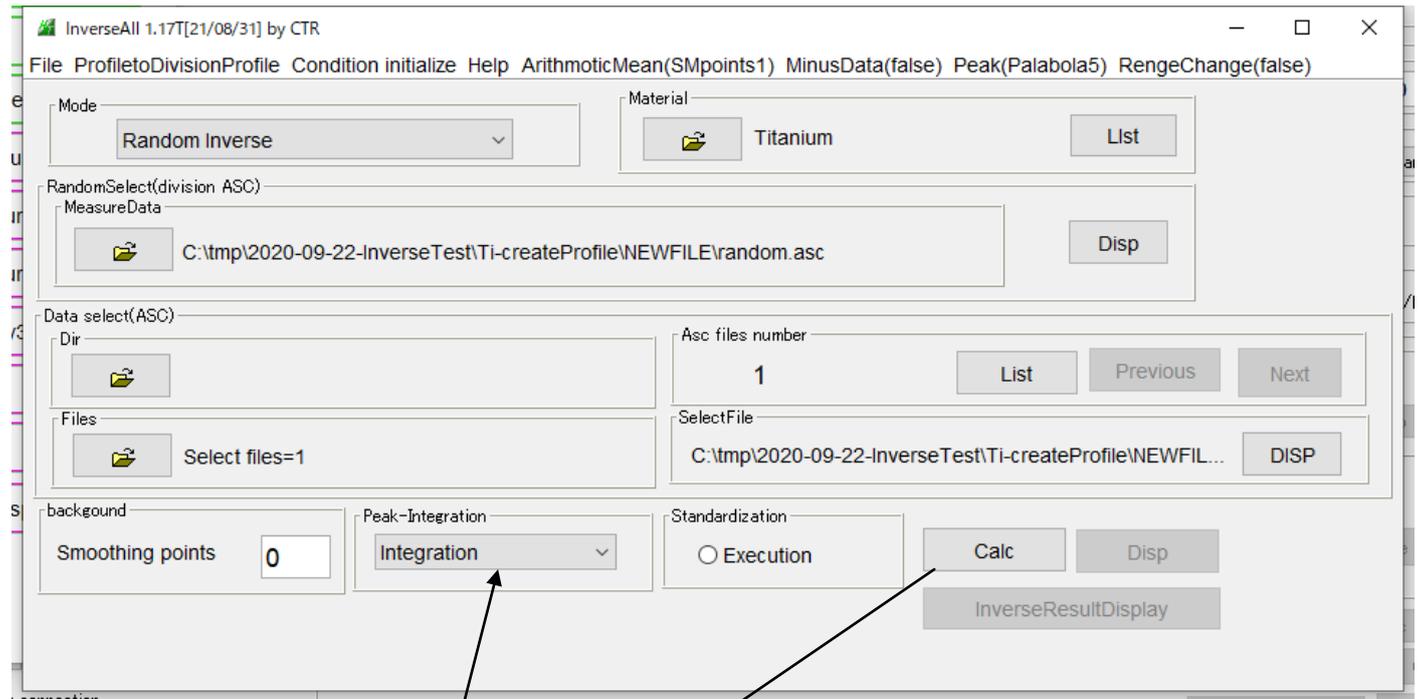


分割データを選択

分割が適切かプロファイルを表示して確認、不適の場合、InverseAllに戻り範囲を変更



積分強度パラメータ



積分強度計算

RengeChange (false) は、InverseAll で切り出した場合、同一範囲であり、false でも計算可能

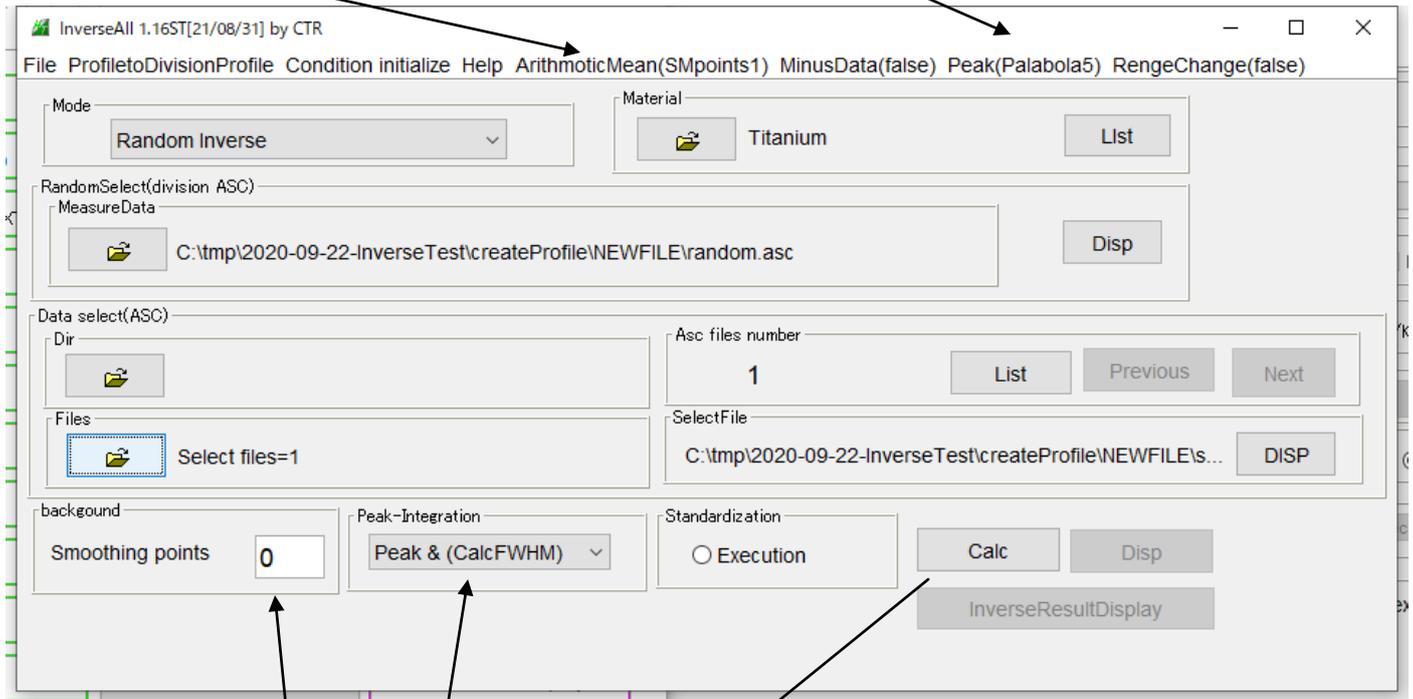
Randommode ArithmeticMean(SMpoints1) BGsmppoints=0 Integration Minusdata-OFF

sample	(100)	(002)	(101)	(102)	(110)	(103)	(200)	(112)	(201)
sample	13.9	38.6	1.0	1.0	13.9	1.0	13.0	1.0	1.0

強度計算計算パラメータ

平滑化 (0は行わない)

ピーク計算方法



バックグラウンド指定 (0は行わない)

Peak強度とFWHM = 積分 / peak強度 * 2 / 3 を計算

RengeChange (false) は、InverseAll で切り出した場合、同一範囲であり、false でも計算可能

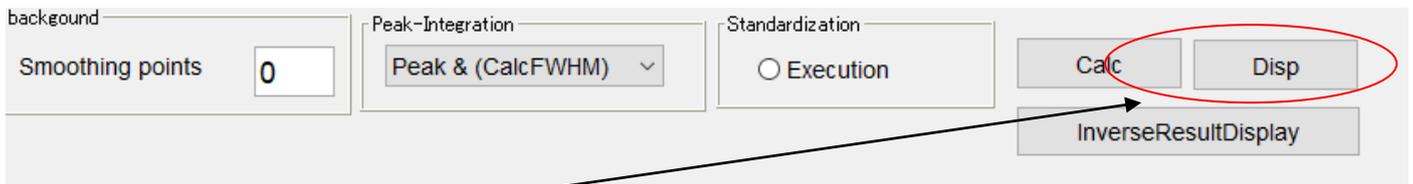
Randommode ArithmeticMean(SMpoints1) BGsmoints=0 PEAK&FWHM peakPalabola5 Minusdata-OFF

sample	(100)	(002)	(101)	(102)	(110)	(103)	(200)	(112)	(201)
sample	13.9	39.1	1.0	1.0	13.9	1.0	13.7	1.0	1.0

FWHM は同一ホルダに FWHM. T X T に登録

sample 6.985 7.294 7.773 8.538 9.116 9.581 10.554 9.948 10.287、
F O C T

計算結果では、randomレベルが1.0fあるが、実際は配向が強いと1以下になるが本データは、試作データのため、1.0になっています。

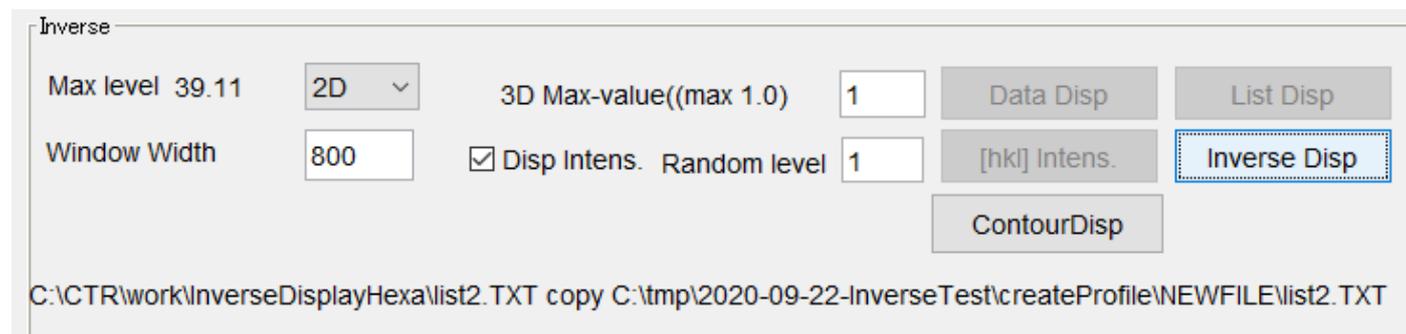
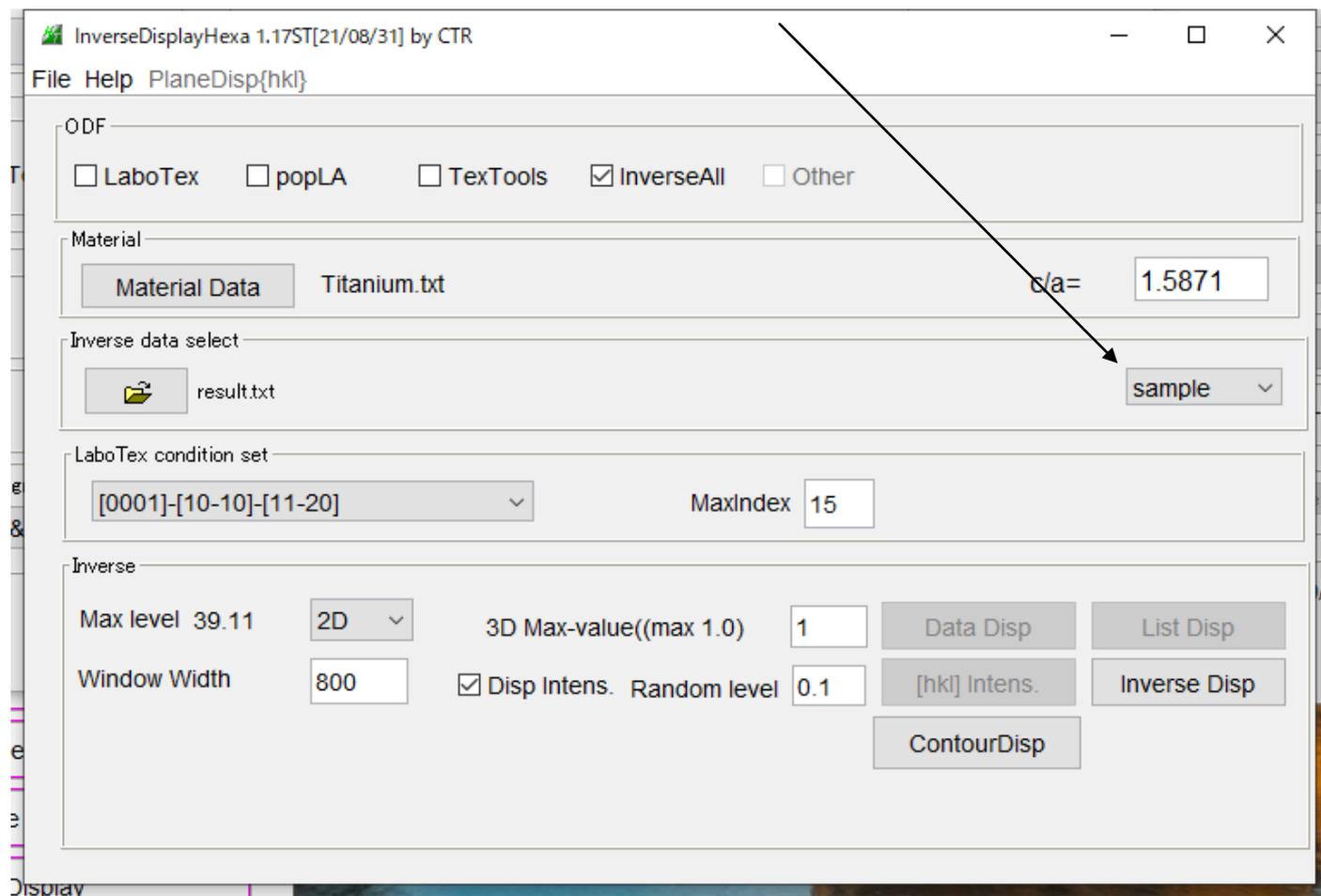


Disp で逆極点図を表示

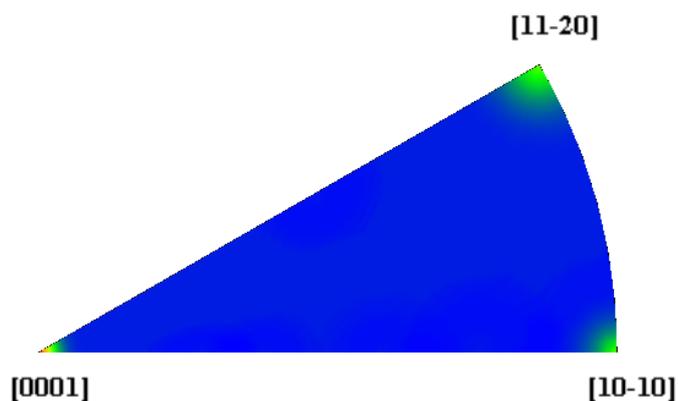
積分値はプロファイルすべてを表現出来ているが、ピーク強度のみではプロファイル表現できていない。以降、ピーク強度と FWHM を使った表現で説明

逆極点図の表示

複数の `sample` を同時処理した場合、`sample` ファイルを選択する。

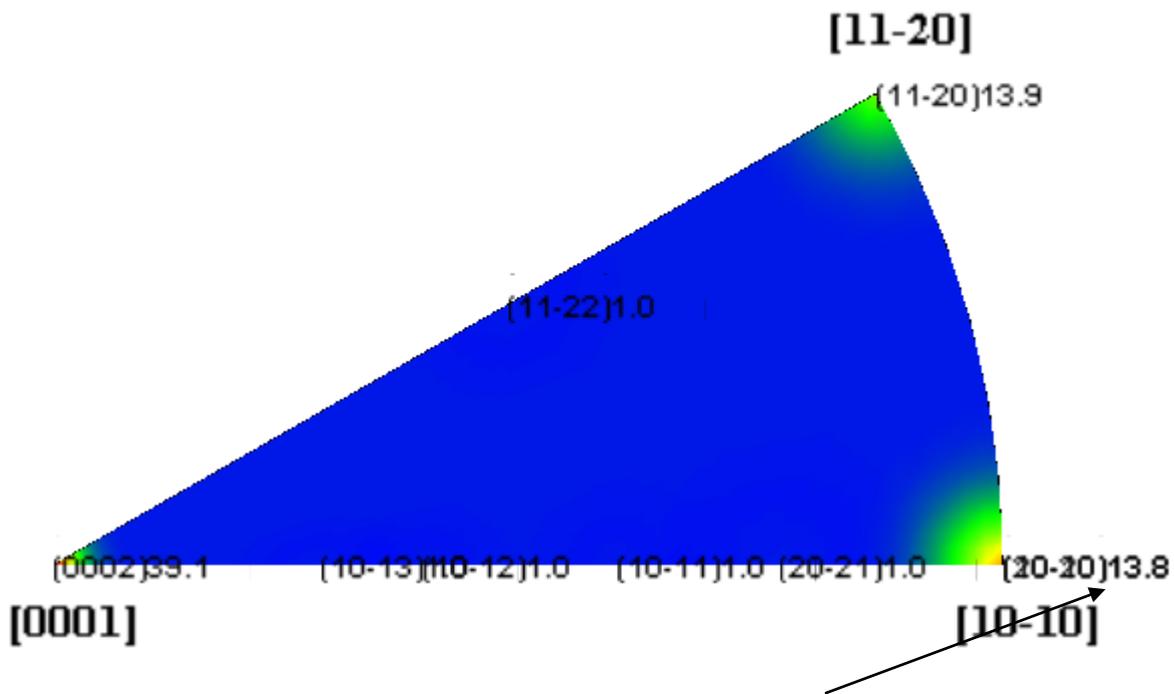


result.txt_null_Max=39.11



解析結果を表示すると、重なりが激しい

result.txt_sample_Max=39.1



[10-10]は、[10-10]と[20-20]の平均値の表示

等高線表示

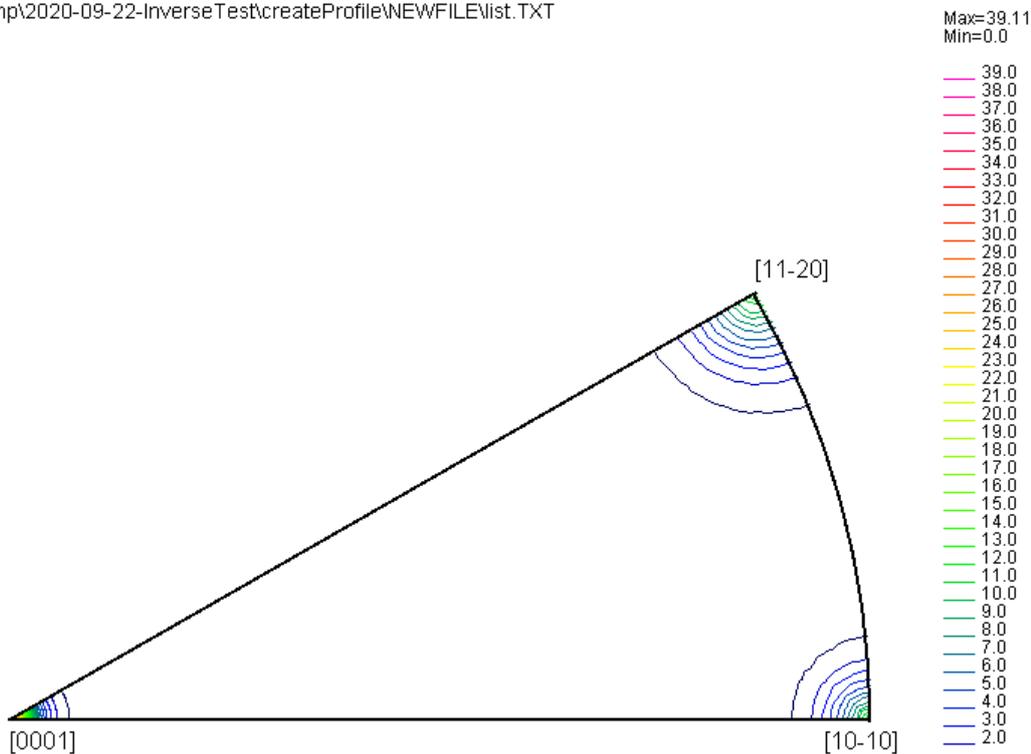
inverse

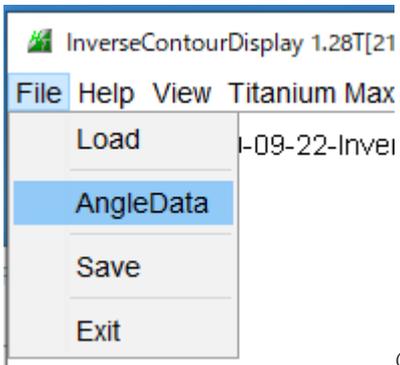
Max level 39.114 2D 3D Max-value((max 1.0) 1 Data Disp List Disp

Window Width 800 Disp Intens. Random level 1.0 [hkl] Intens. Inverse Disp

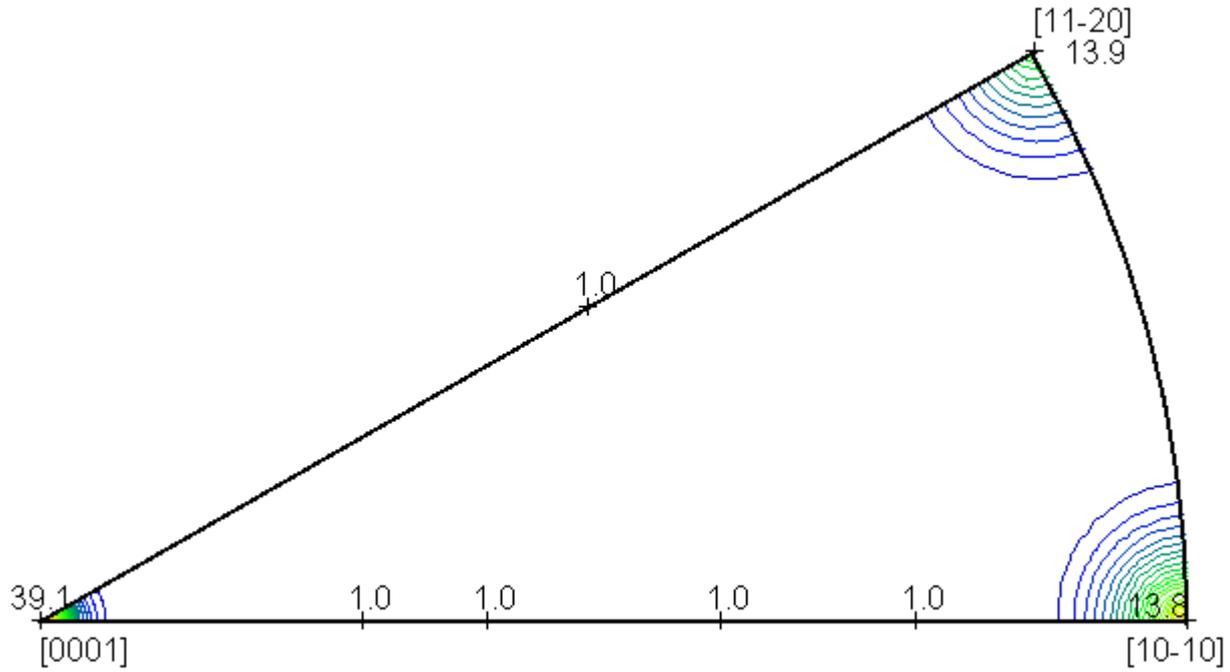
ContourDisp

C:\tmp\2020-09-22-InverseTest\createProfile\NEWFILE\list.TXT

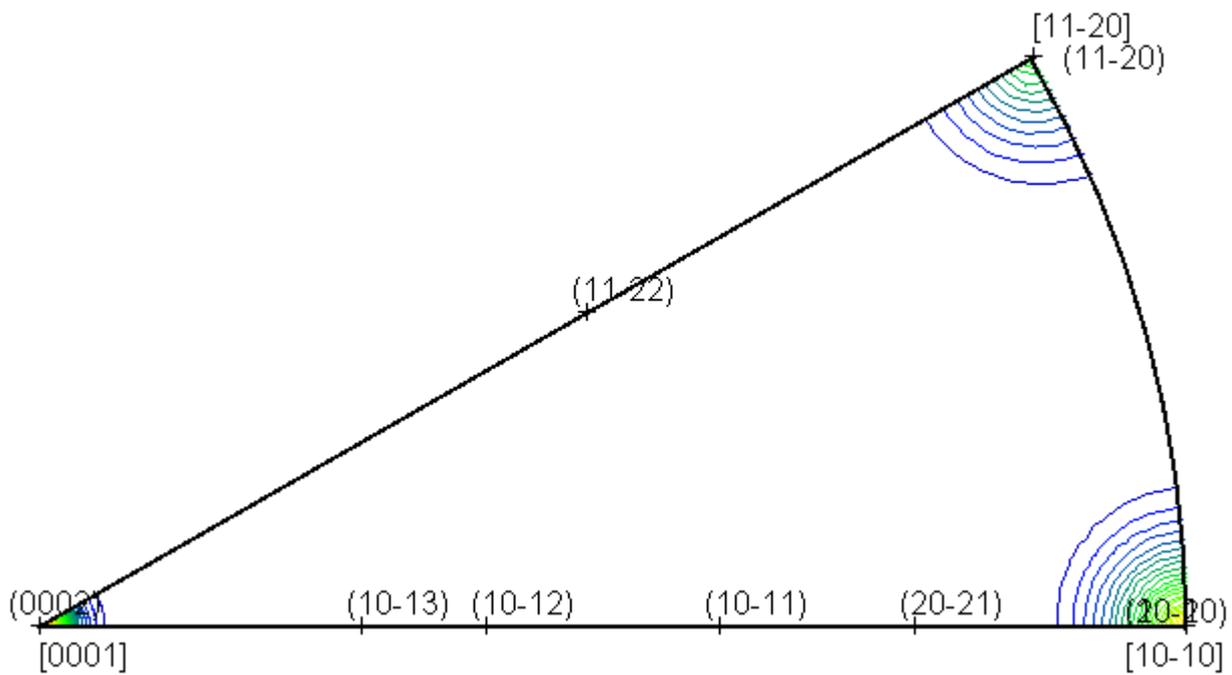




の Value データから



h k l データから



ODF 結果と同じような逆極点図を表示します。