

r a n d o m試料の得られなかったT i t a t i u mの方位解析

計算d e f c o u s補正と更にODF解析結果に対し再d e f o c u s補正を行い  
正解を求めます。

又、r a n d o m補正なしでODF解析結果に対し再d e f o c u s補正と比較します。

2019年09月04日

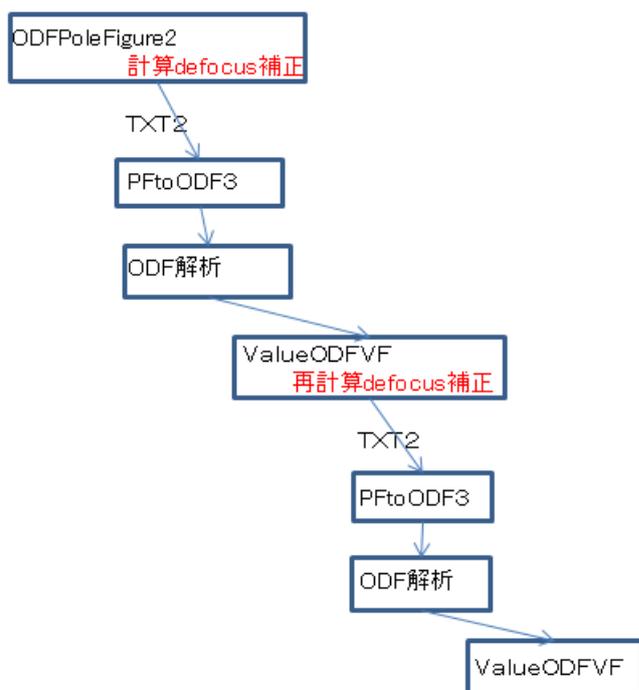
*HekperTex Office*

## 概要

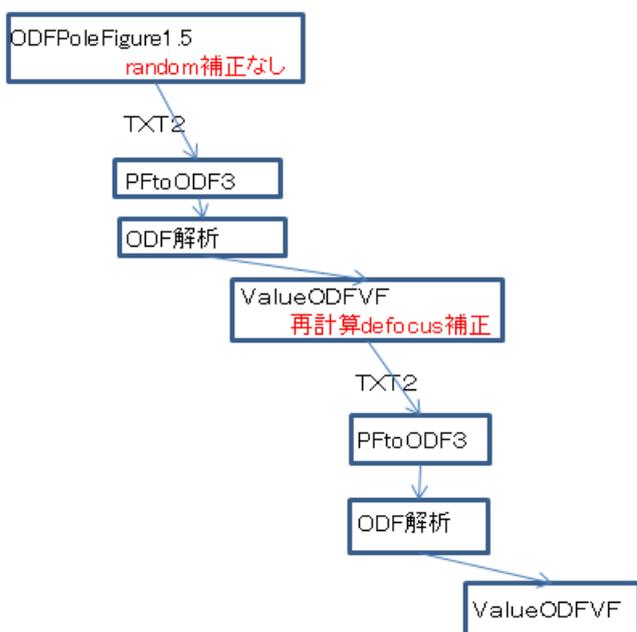
CRD極点解析ではdefocus補正のrandom試料が必要であるが、材料によってはrandom試料入手が困難な場合があります。

このような場合、defocusを計算で求めて補正を行うことがあります。

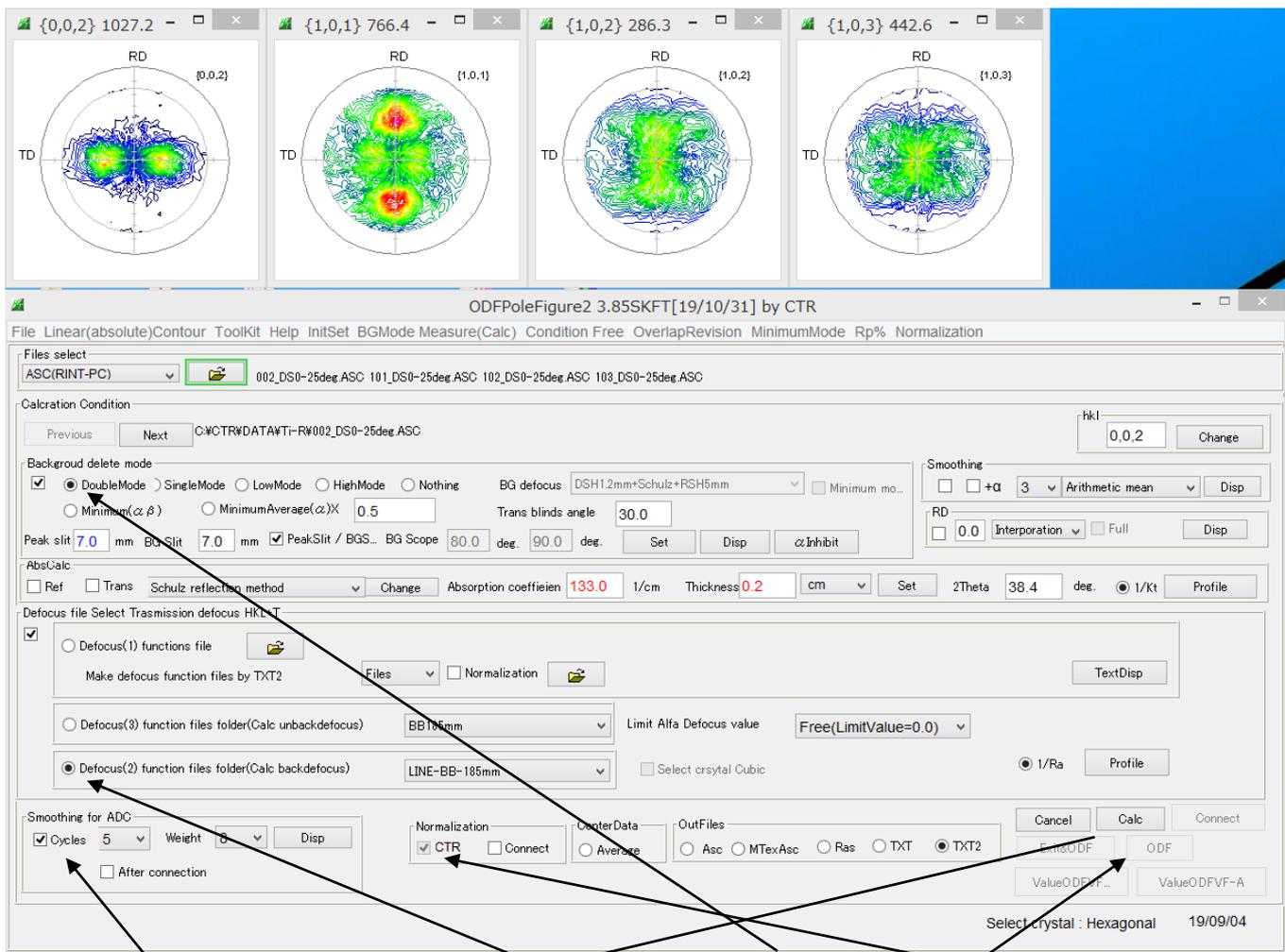
本資料ではODFPoleFigure2ソフトウェアの計算defocus補正を行い、更にODF解析後の入力極点図と再計算極点図からRp%を求め、Rp%が±1.5%をはみ出る極点図の外側部分を更に補正を行い、再度ODF解析を行う手段をValueODFVFソフトウェアで提供致します。



計算defocus機能が無い処理の場合



# Titaniumの計算defocus補正



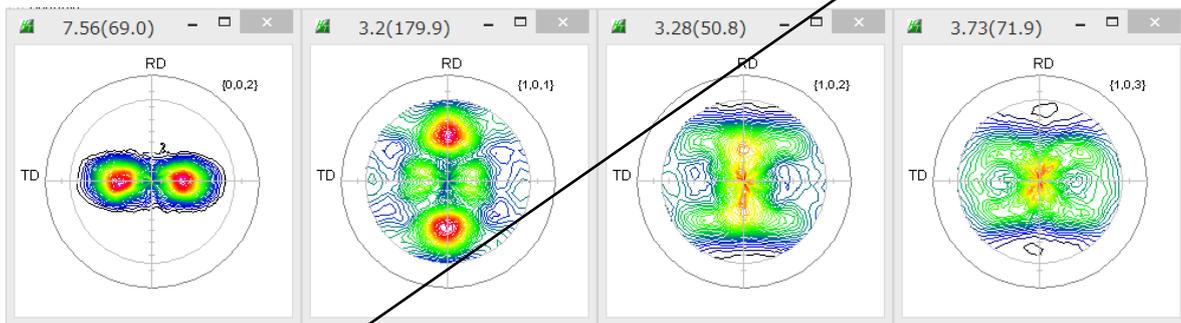
平滑化

defocusの指定

BG削除

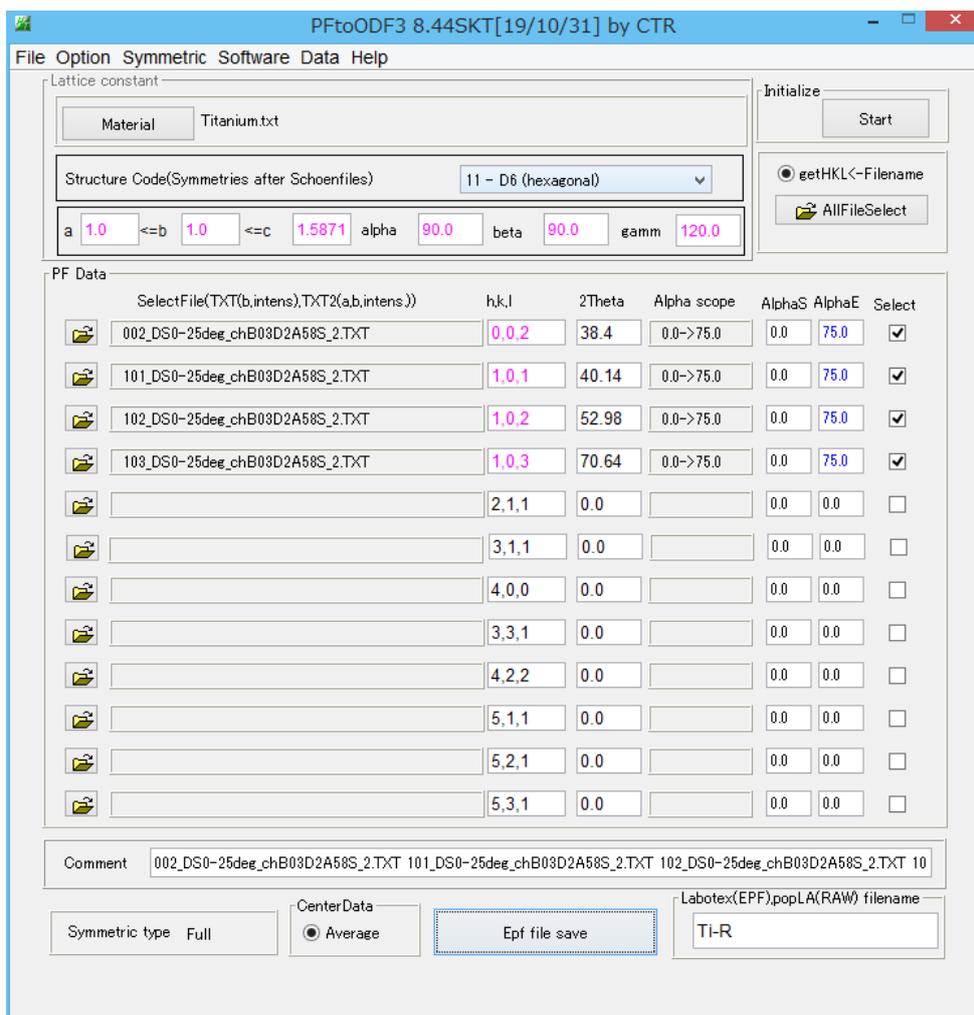
規格化

処理結果

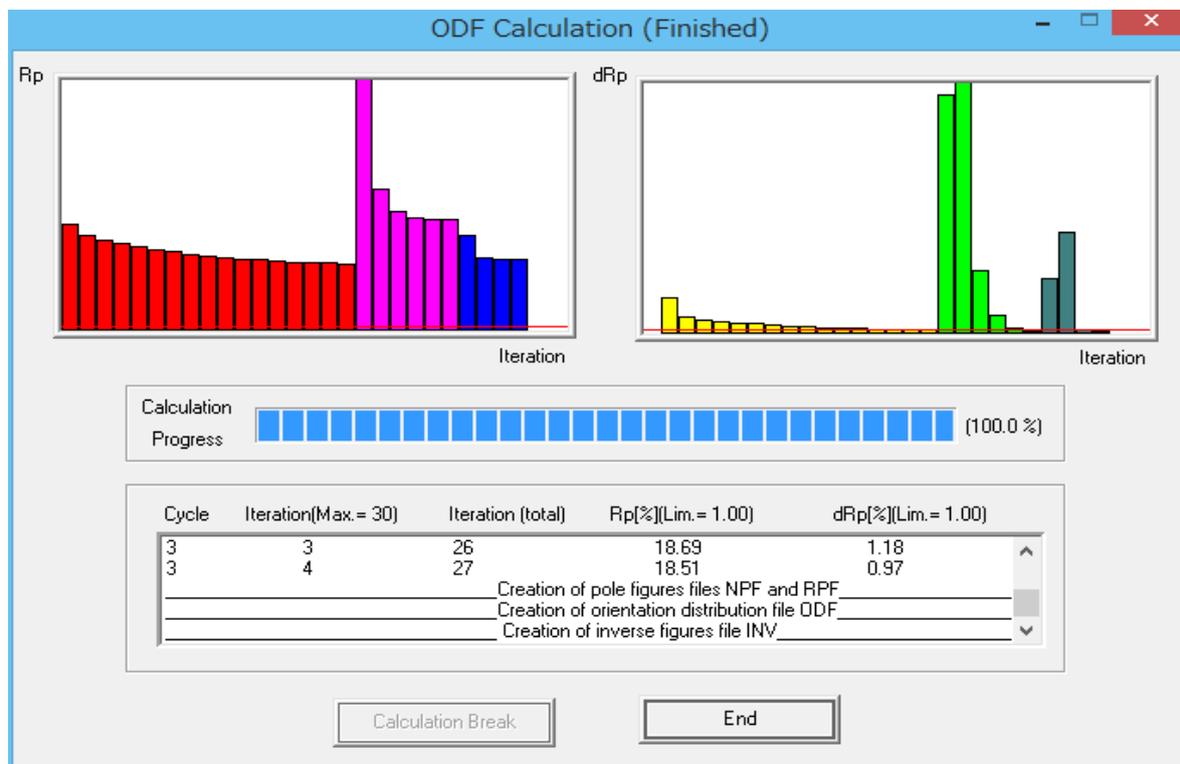


ODF向けデータの作成

各種ODF向けデータを作成する



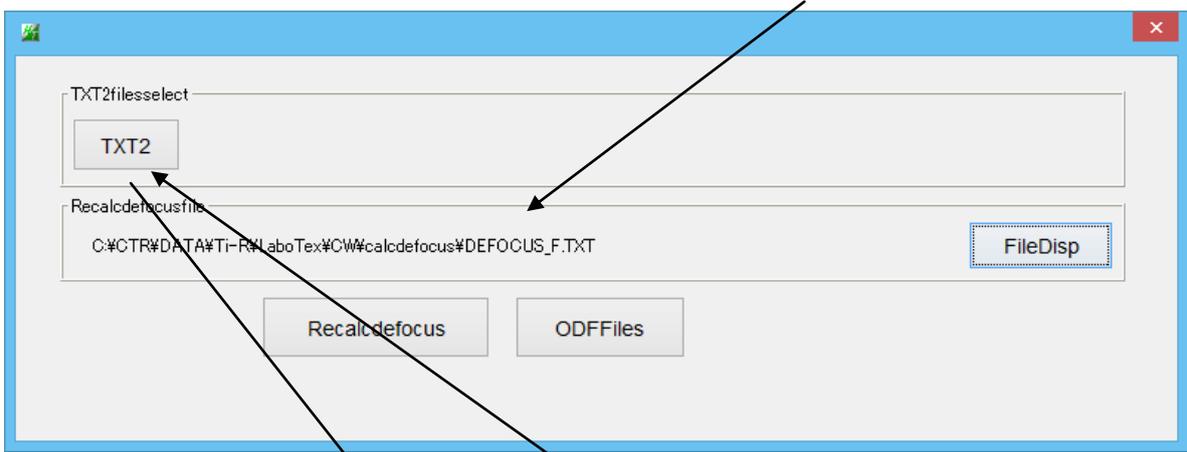
LabotexでODF計算



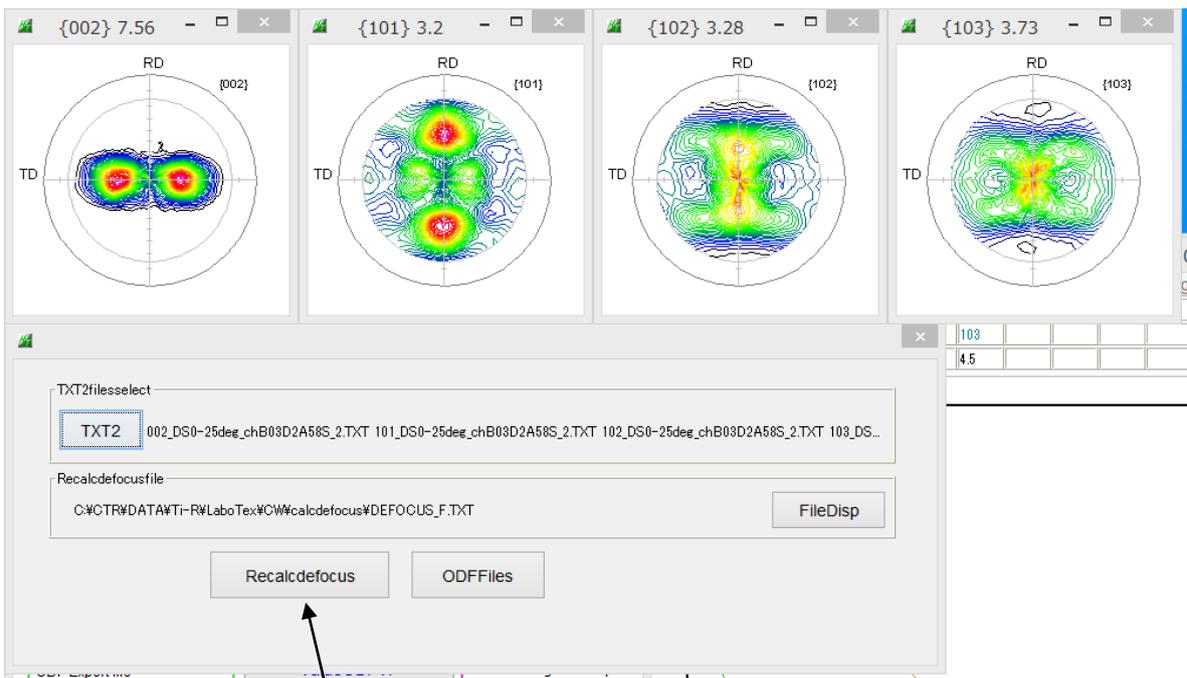
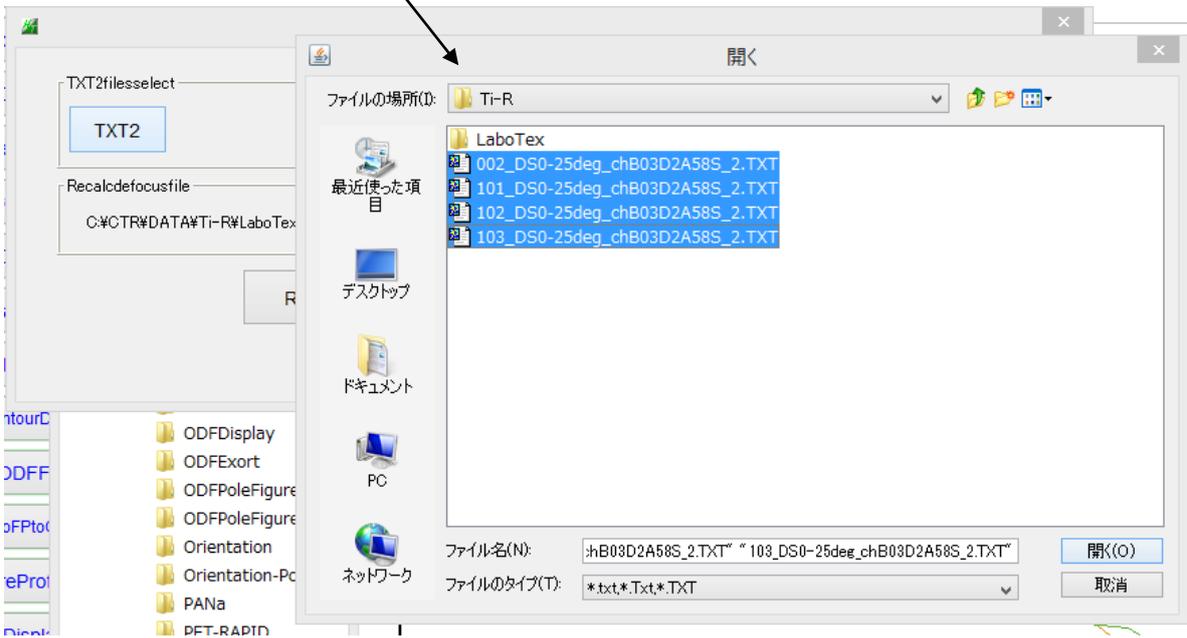
R p %は18.51



ValueODFVFで表示しているdefocusプロファイルが計算されています。

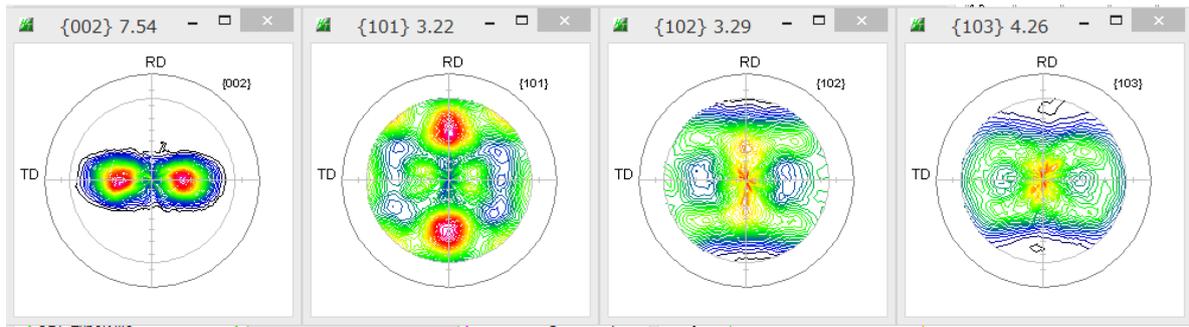


ODFPoleFigure2 ソフトウェアで計算されたファイルを指定



再defocus補正を行う。

再defocus極点図



再度ODF向けデータの作成

PFToODF3 8.44SKT[19/10/31] by CTR

File Option Symmetric Software Data Help

Lattice constant

Material: Titanium.txt

Structure Code(Symmetries after Schoenfiles): 11 - D6 (hexagonal)

a: 1.0, b: 1.0, c: 1.5871, alpha: 90.0, beta: 90.0, gamma: 120.0

Initialize: Start

getHKL<-Filename (selected)

AllFileSelect

PF Data

SelectFile(TXT(b,intens),TXT2(a,b,intens.))	h,k,l	2Theta	Alpha scope	AlphaS	AlphaE	Select
002_DS0-25deg_chB03D2A58S_2.TXT	002	0	0.0->75.0	0.0	75.0	<input checked="" type="checkbox"/>
101_DS0-25deg_chB03D2A58S_2.TXT	101	0	0.0->75.0	0.0	75.0	<input checked="" type="checkbox"/>
102_DS0-25deg_chB03D2A58S_2.TXT	102	0	0.0->75.0	0.0	75.0	<input checked="" type="checkbox"/>
103_DS0-25deg_chB03D2A58S_2.TXT	103	0	0.0->75.0	0.0	75.0	<input checked="" type="checkbox"/>
	2,1,1	0.0		0.0	0.0	<input type="checkbox"/>
	3,1,1	0.0		0.0	0.0	<input type="checkbox"/>
	4,0,0	0.0		0.0	0.0	<input type="checkbox"/>
	3,3,1	0.0		0.0	0.0	<input type="checkbox"/>
	4,2,2	0.0		0.0	0.0	<input type="checkbox"/>
	5,1,1	0.0		0.0	0.0	<input type="checkbox"/>
	5,2,1	0.0		0.0	0.0	<input type="checkbox"/>
	5,3,1	0.0		0.0	0.0	<input type="checkbox"/>

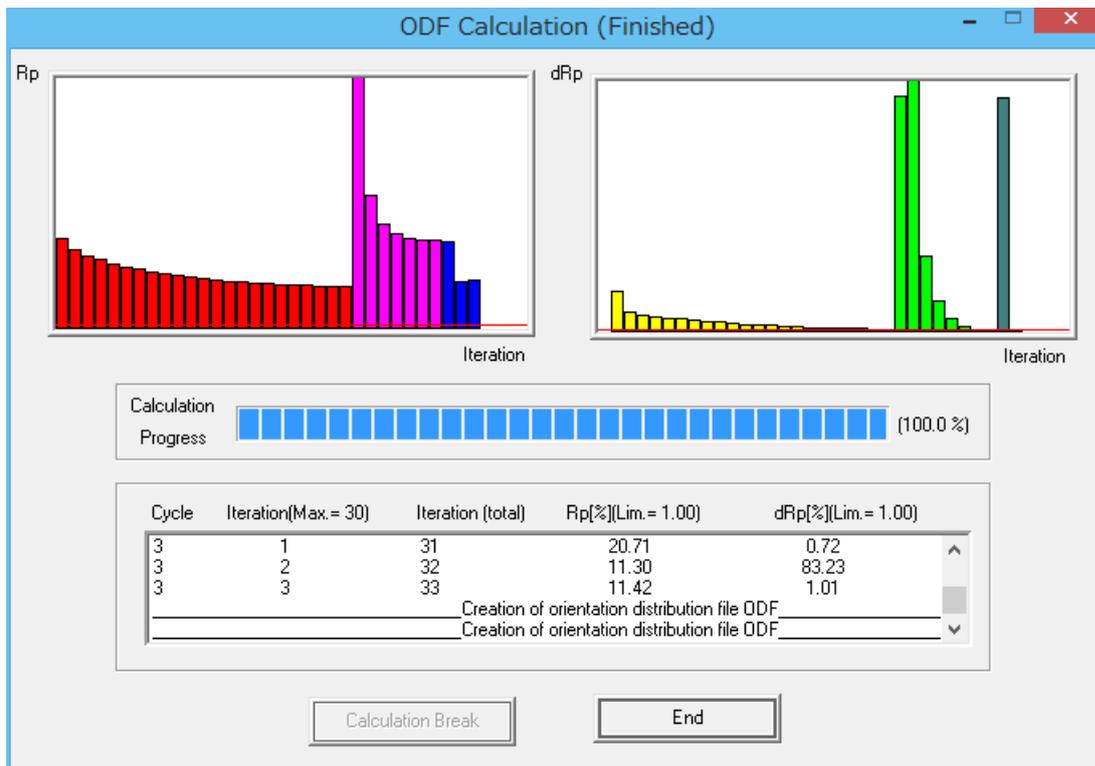
Comment: 002\_DS0-25deg\_chB03D2A58S\_2.TXT 101\_DS0-25deg\_chB03D2A58S\_2.TXT 102\_DS0-25deg\_chB03D2A58S\_2.TXT 10

Symmetric type: Full

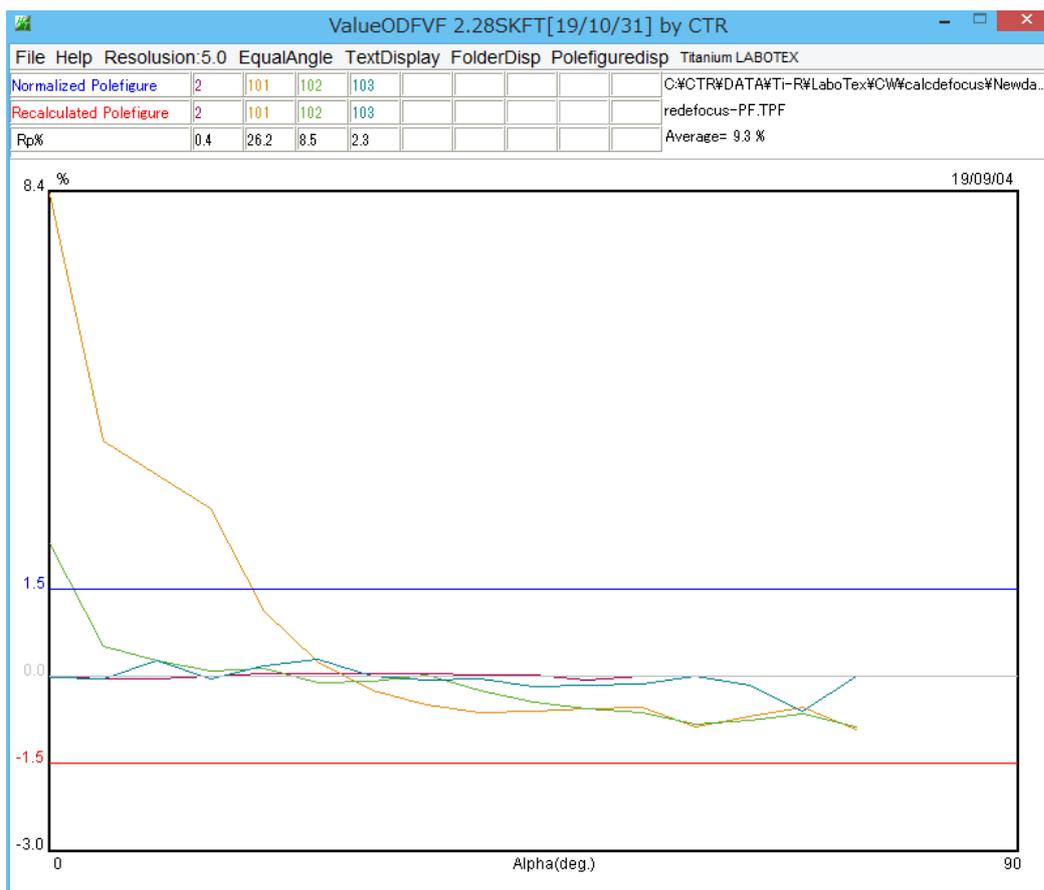
CenterData:  Average

Epf file save

Labotex(EPF),popLA(RAW) filename: redefocus



最初のRp%18.51が11.42と改善されています。



Rp%プロファイルも改善されました。

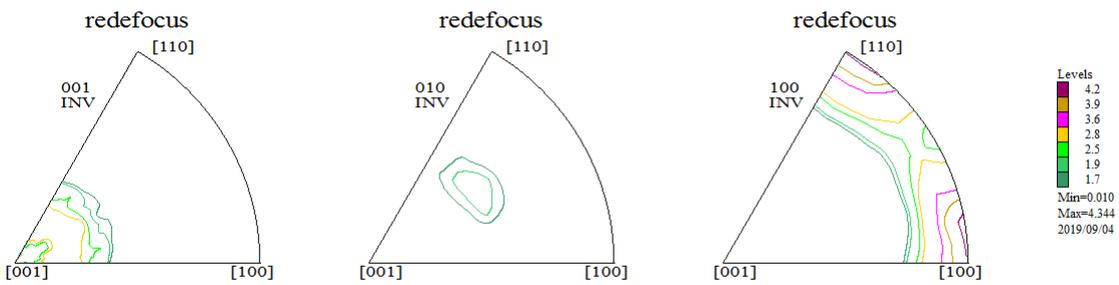
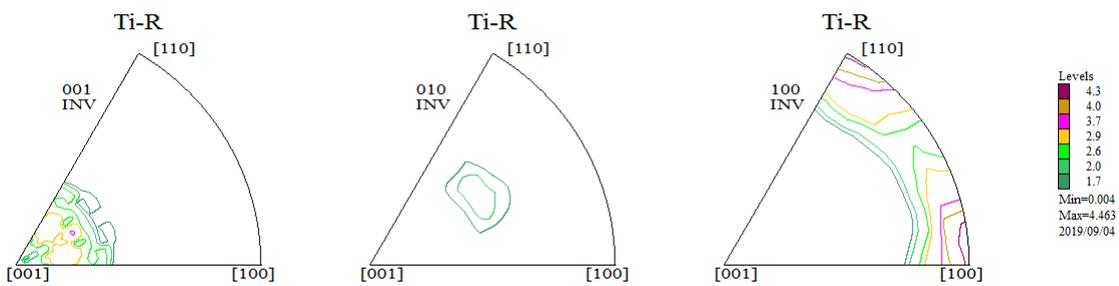
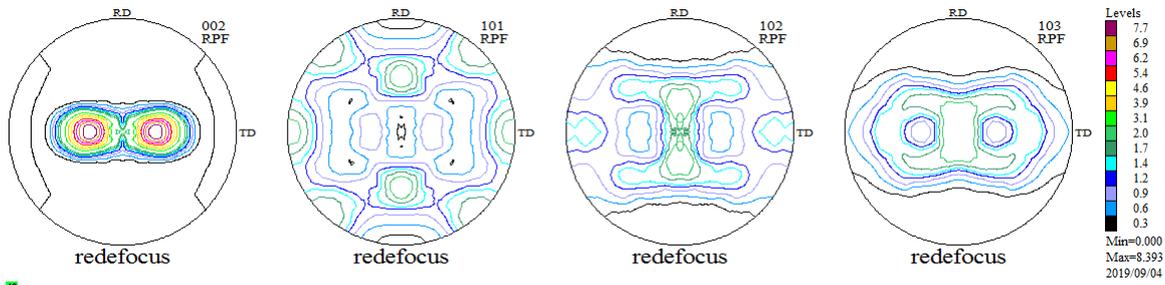
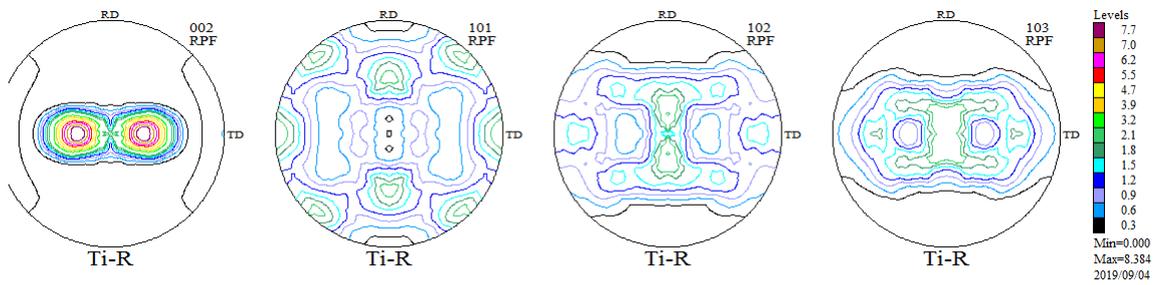
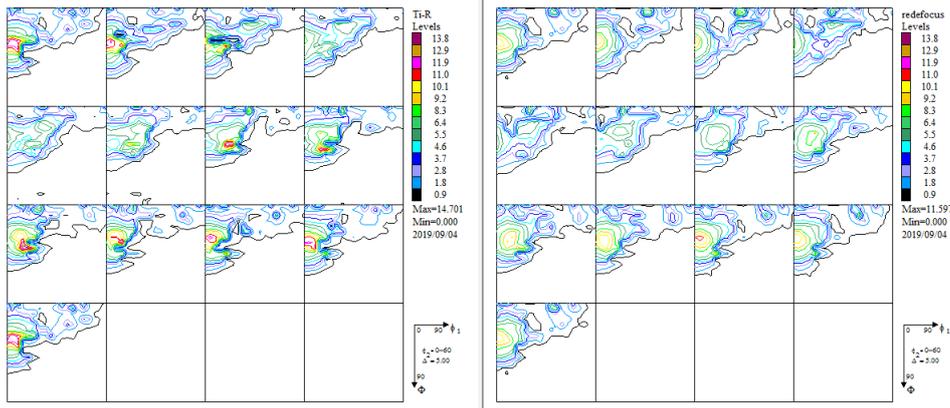
{101} 極点図の中心付近の挙動はdefocusとは関係なく変化はありません。

以下にODF結果を比較

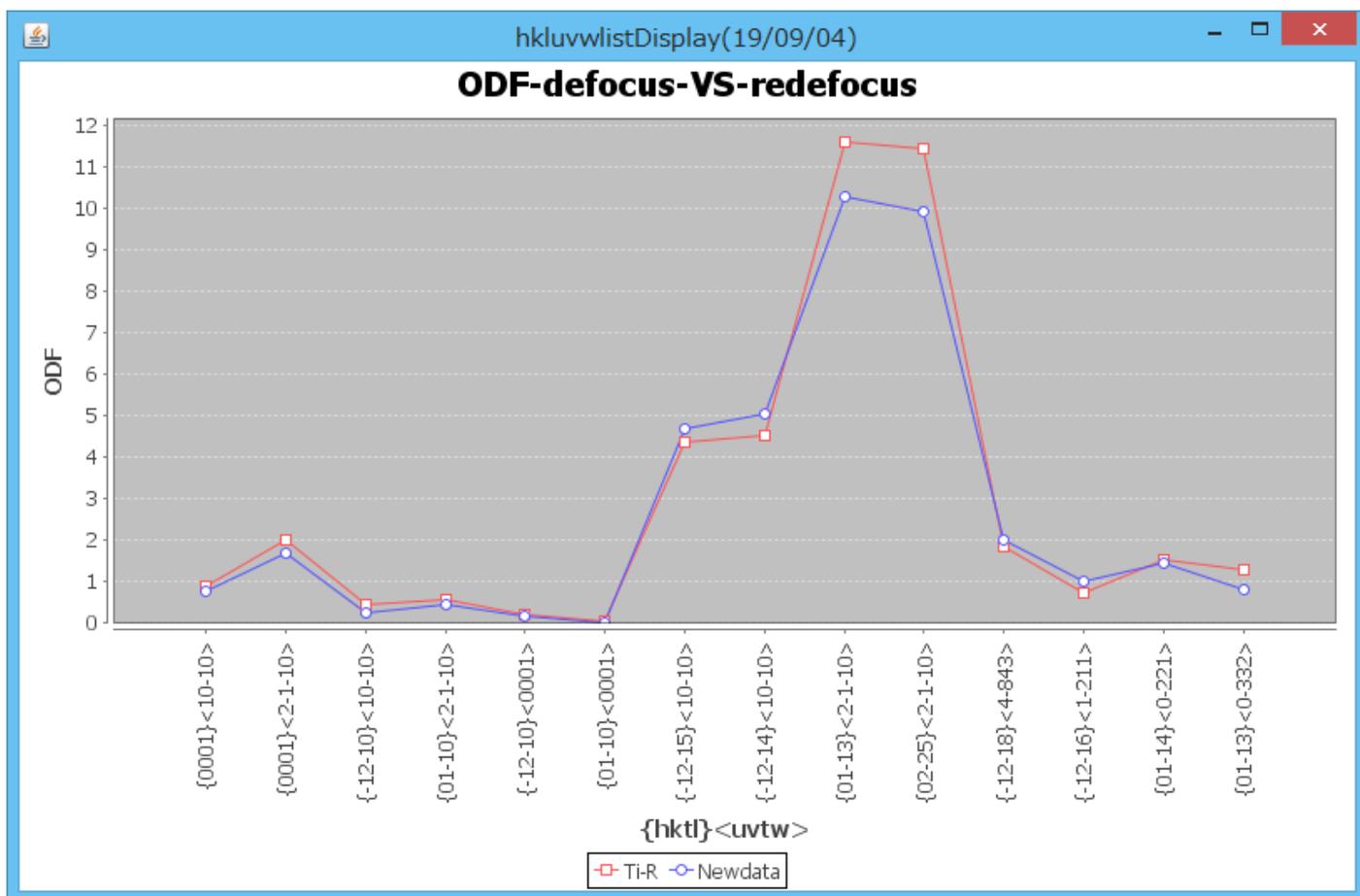
ODF 解析結果を比較

左：最初のODF解析結果(Ti-R)

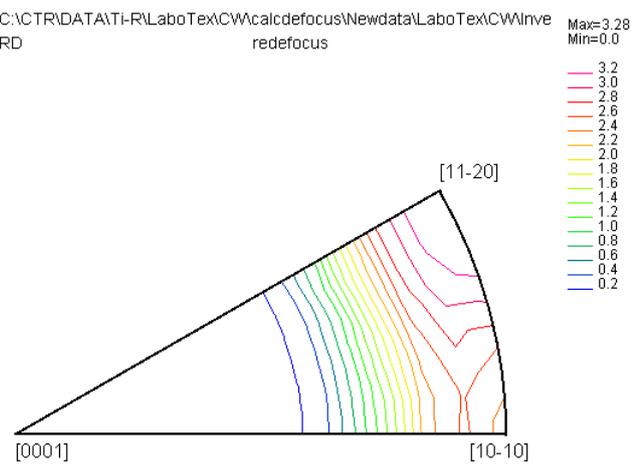
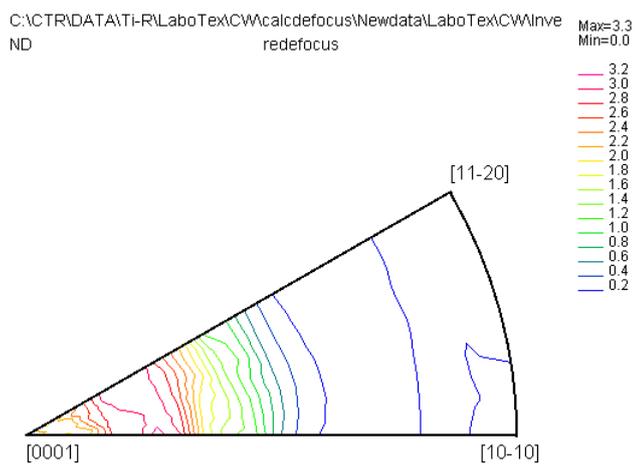
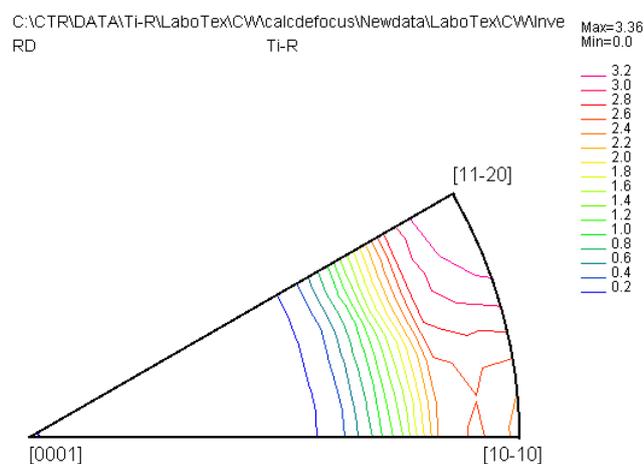
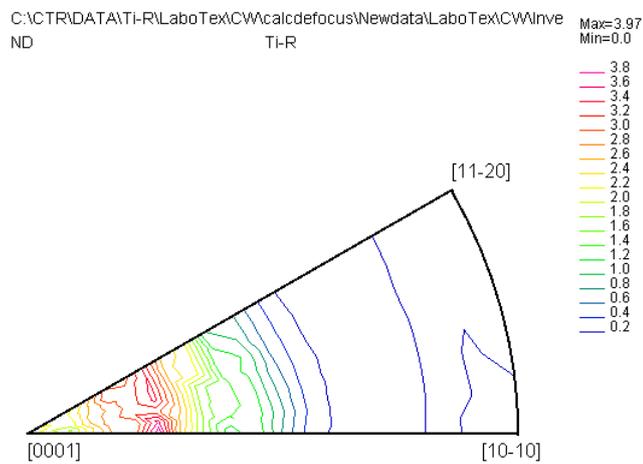
2回目のODF解析結果(dedefocus)



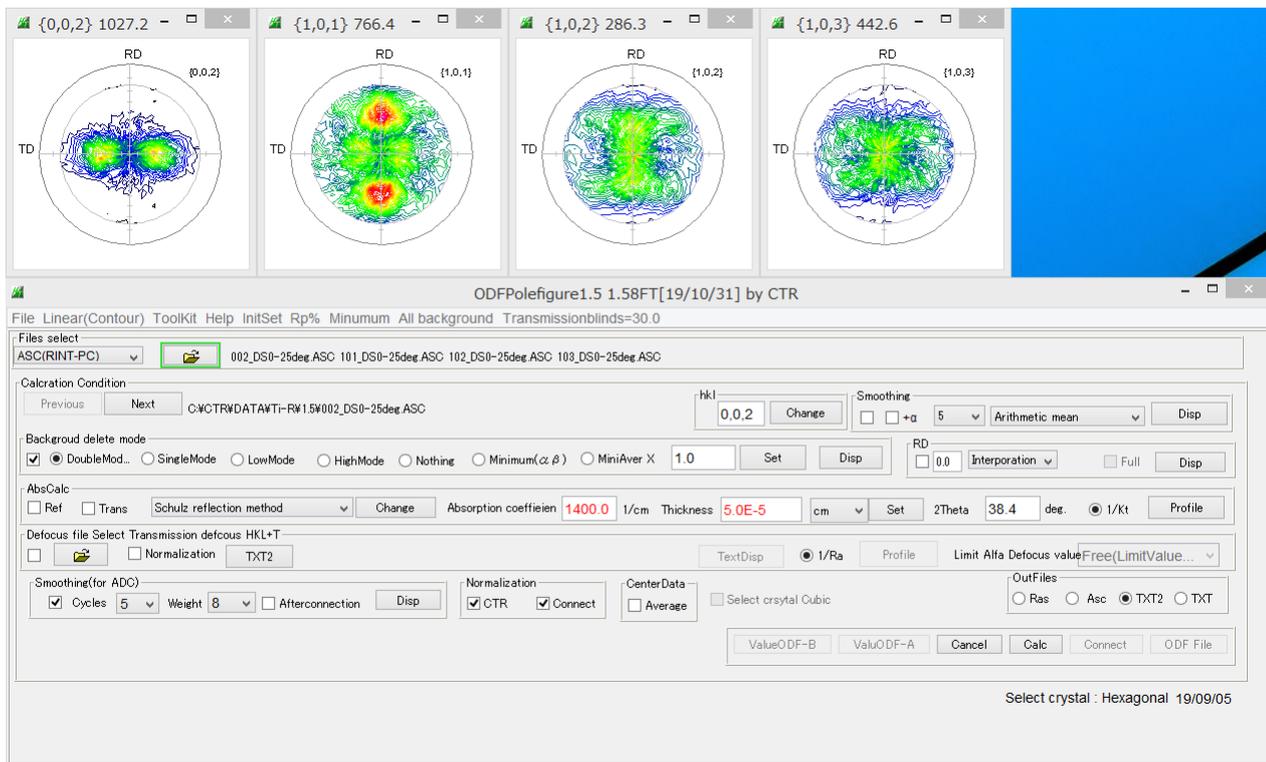
# ODF 方位密度比較



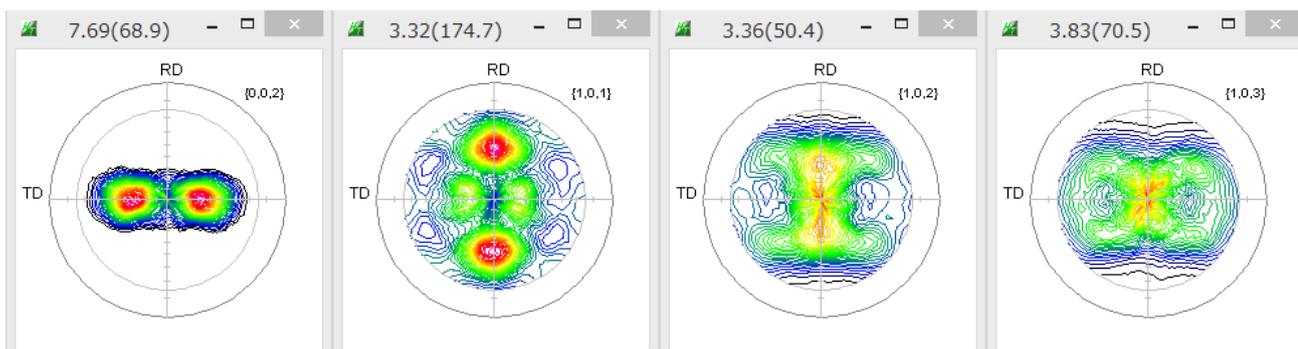
# 逆極点图比較



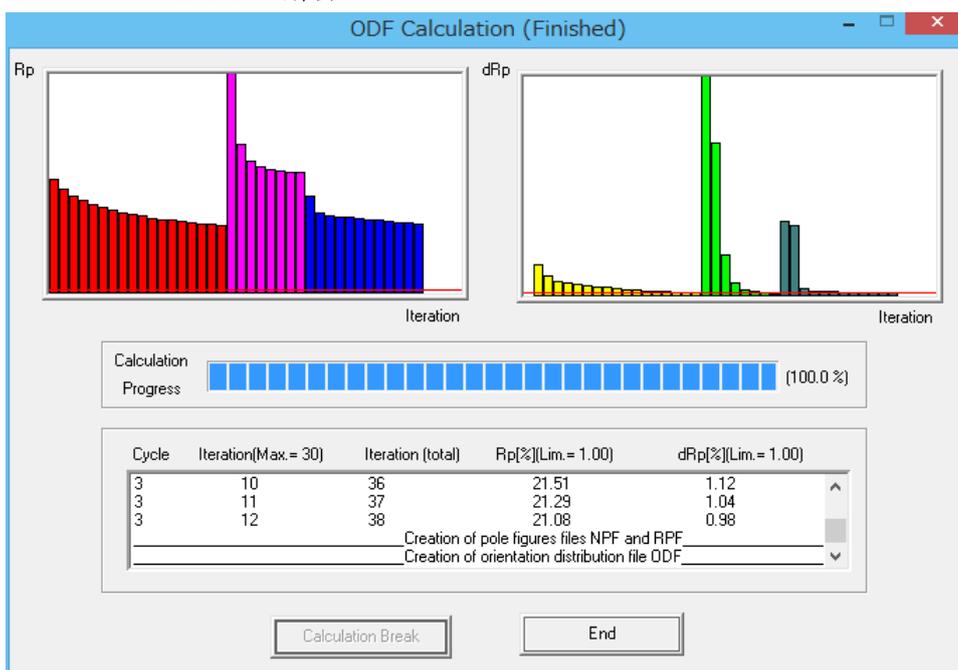
### 計算 defocus 機能がない場合



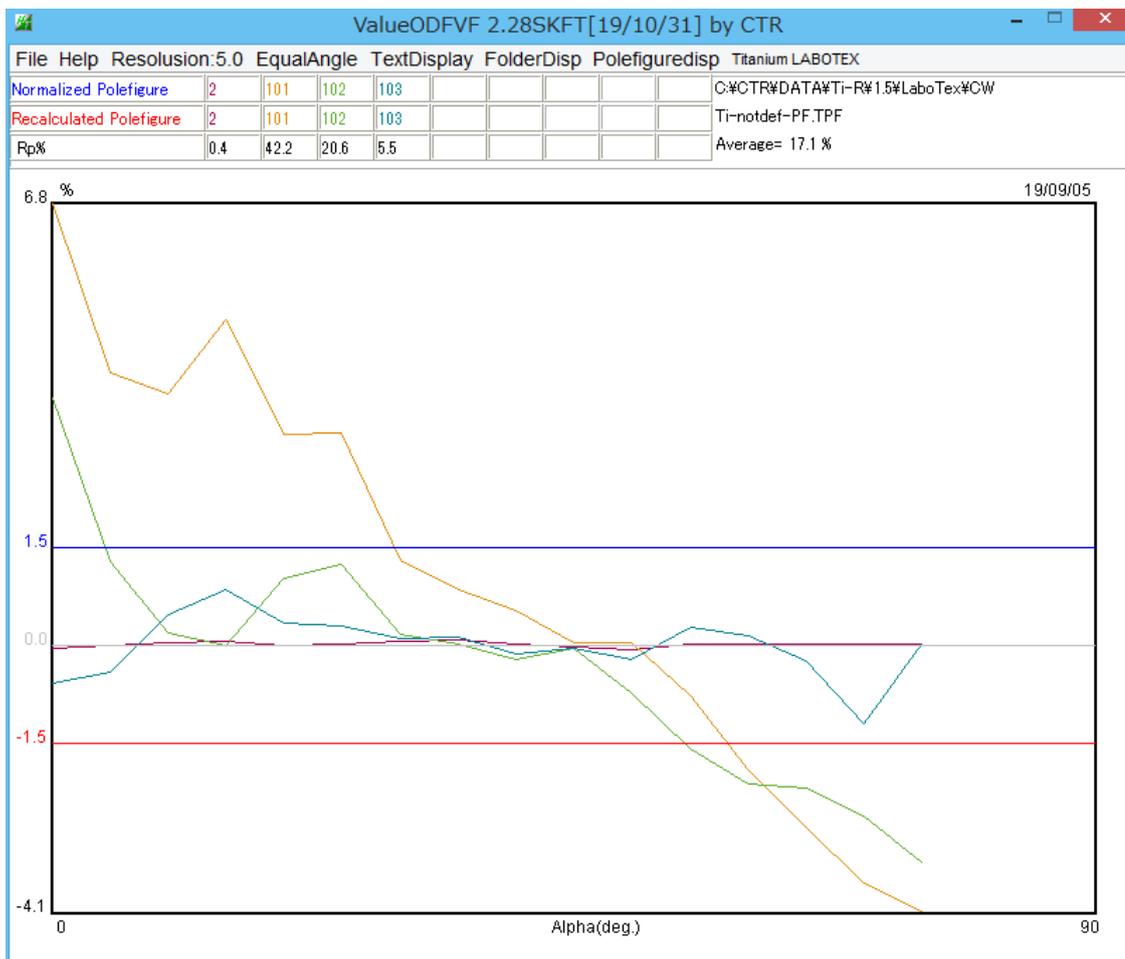
### データ処理結果



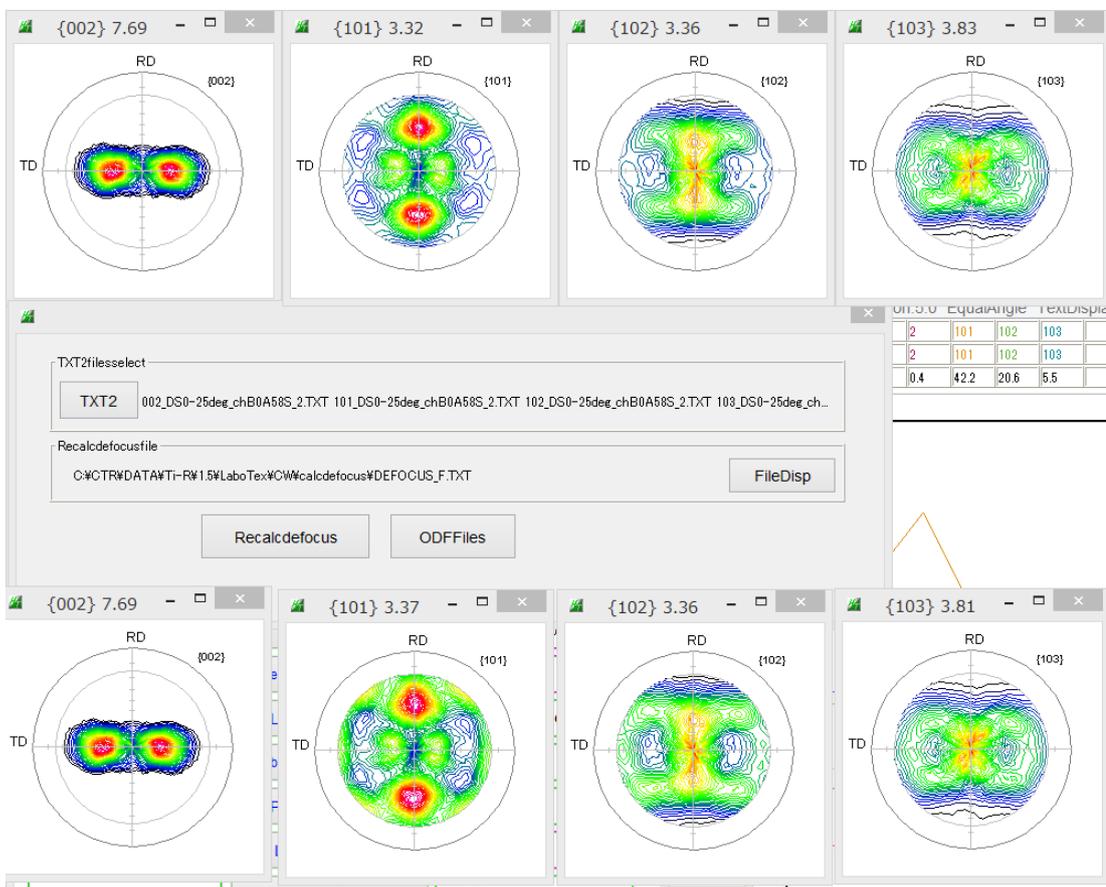
### LaboTex ODF 解析



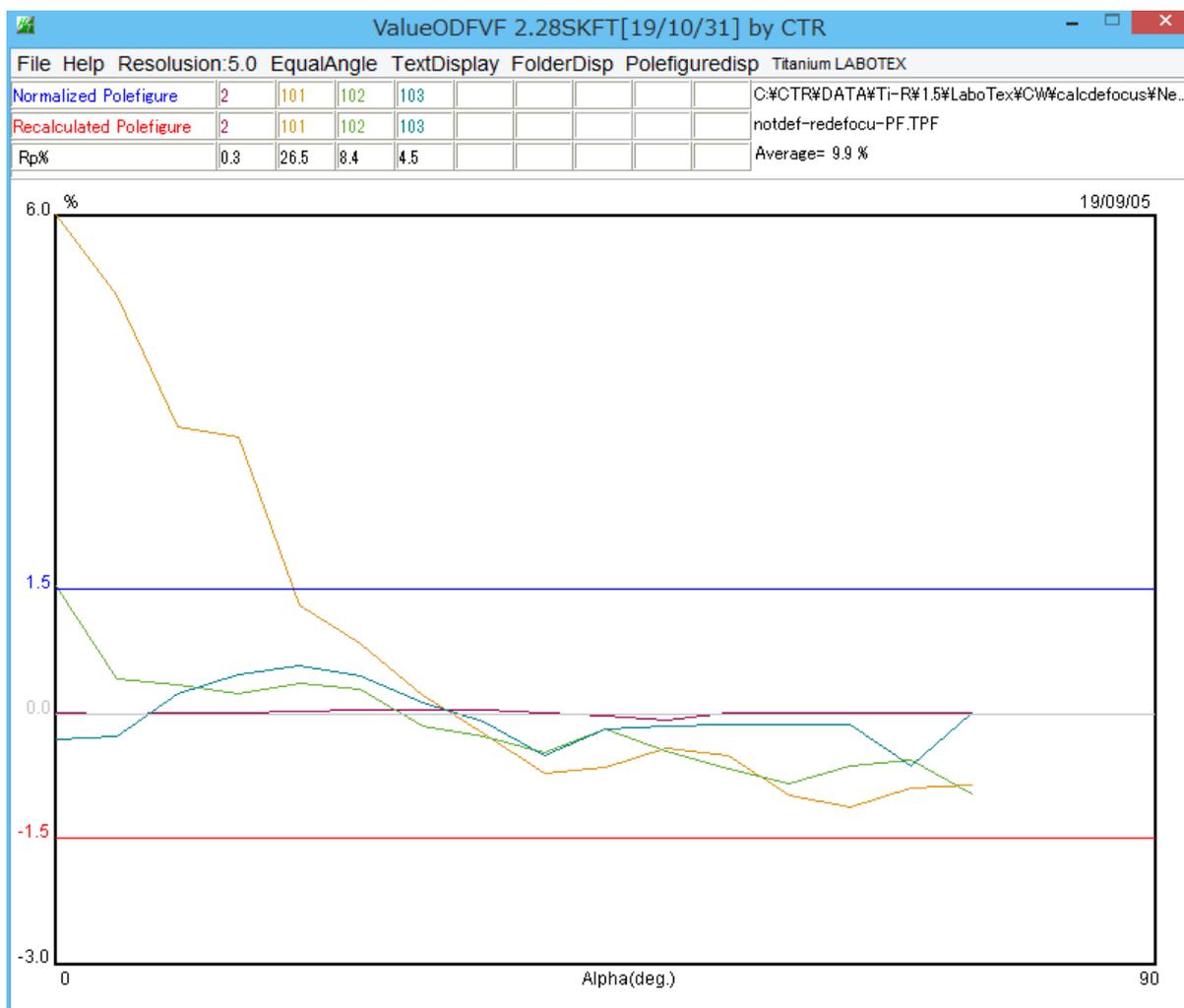
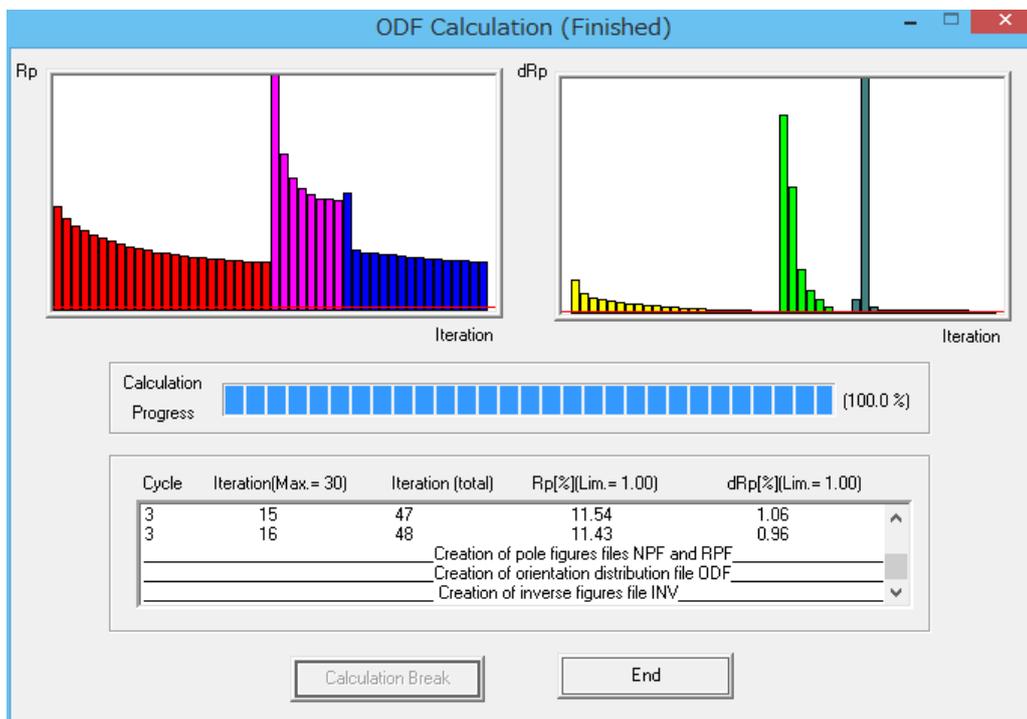
極点図を Export し、ValueODFVFで確認



再defocus計算結果

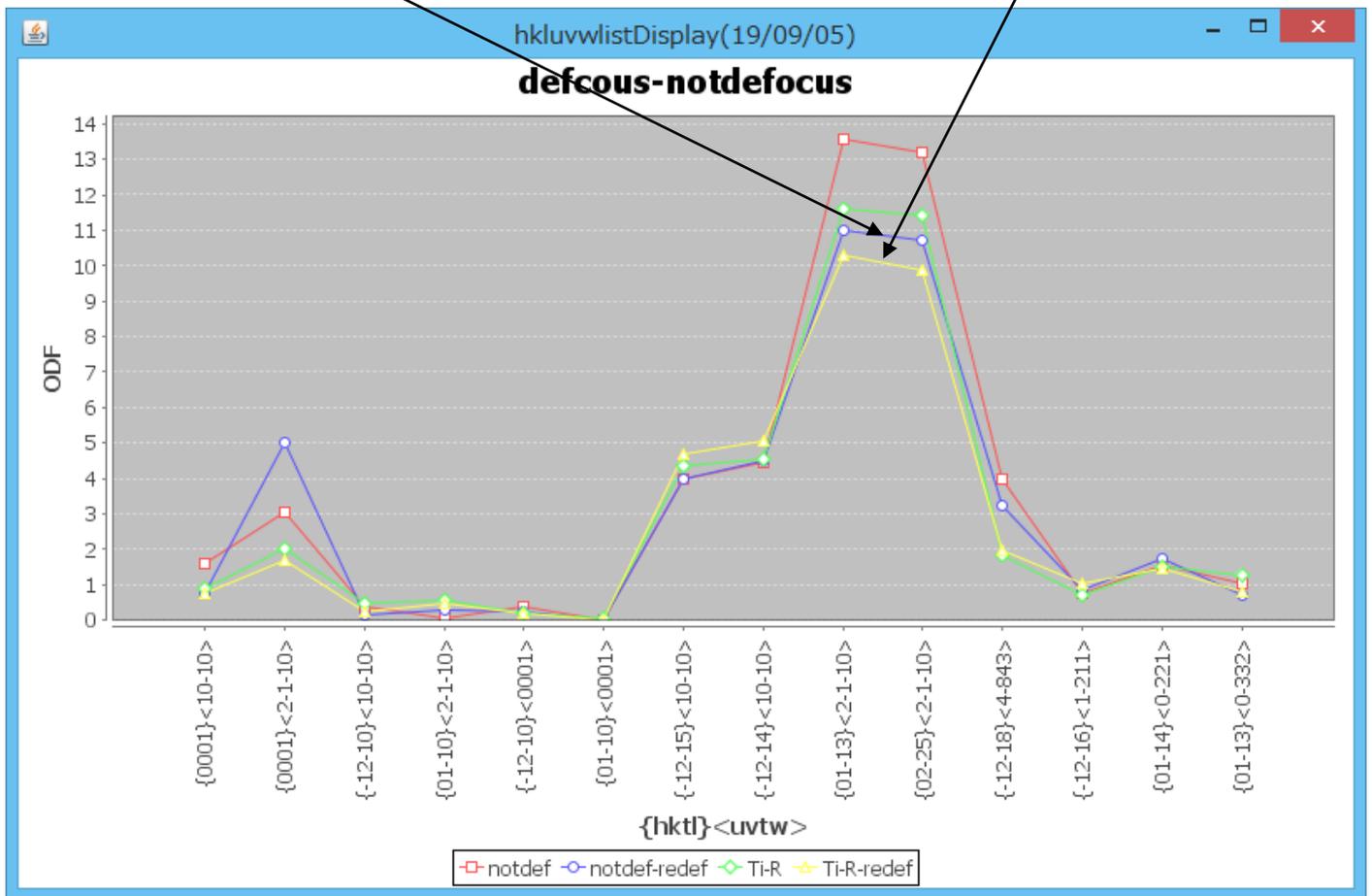
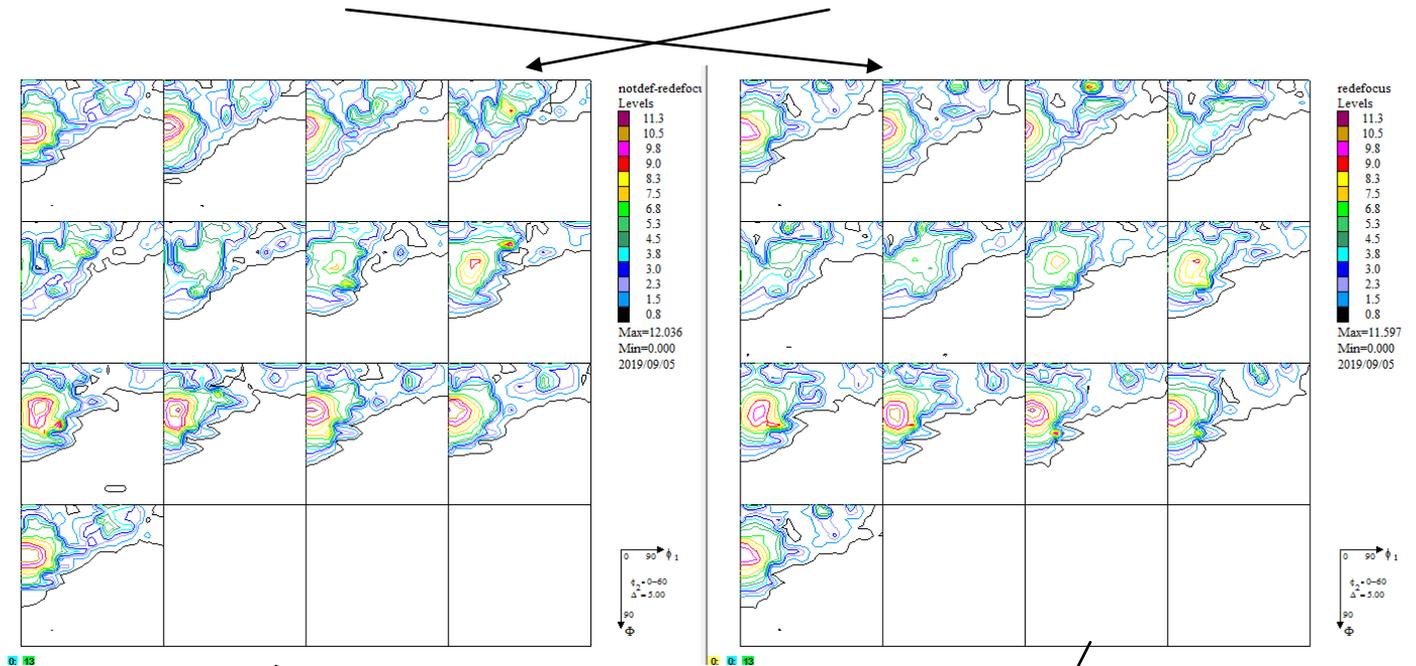


再defocus結果のODDF解析



Rp%がLaboTexで 21.08 → 11.43 CTRで 17.1 → 9.9  
 更に、defocusに依存する、極点図の外周部分が±1.5%以内になります。

random補正あり+再defocusとrandom補正なし+再defocusの比較



random補正有り無しではほぼ同一の方位密度が得られます。