

C u b i c 以外の極点データ処理 (VolumeFraction)

Hexagonal (Trigonal) Al₂O₃で説明

Al₂O₃

MaterialData 1.38T[23/12/31] by CTR

File Help Disp

Search

Hexagonal

LaboTex(a<b<c α<=90 β<=90 γ<=90) Trigonal(to Rhombohedral)

Wave length

1.54056

Select

AluminumOxide.TXT

AluminumOxide
Formula: Al₂O₃
_symmetry_space_group_name_H-M 'R3c'
_symmetry_Int_Tables_number 167
_Symmetry 32

Disp Cancel Return Structure

Chemical formula

Input(e. g. C₂H₄) Al₂O₃ Change

AluminumOxideDISP

Trigonal

4.7588 (1.0)
4.7588 (1.0)
12.992 (2.7301)

90.0
90.0
120.0
1.54056
30

0	1	2	70.0	3.48	25.576
1	0	4	97.0	2.551	35.15
1	1	0	42.0	2.3794	37.777
0	0	6	1.0	2.1653	41.677
1	1	3	100.0	2.0854	43.354
2	0	2	1.0	1.9642	46.179
0	2	4	42.0	1.74	52.552
2	1	1	2.0	1.5466	59.742
1	2	2	5.0	1.5147	61.131

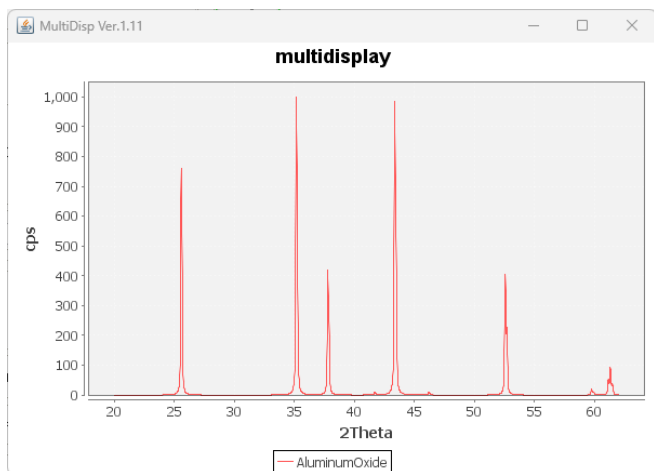
AluminumOxideDISP

Rhombohedral or Trigonal

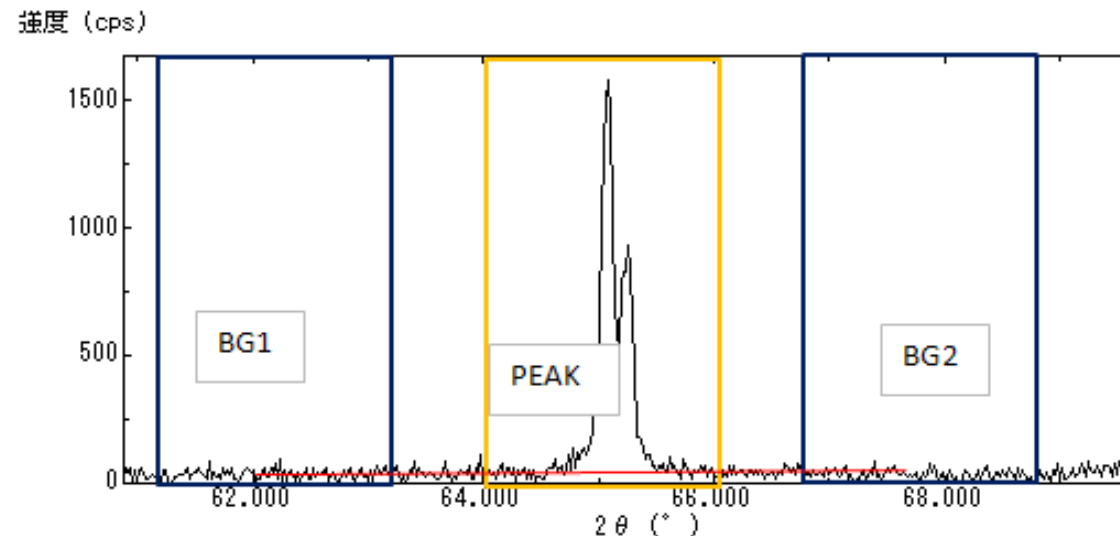
5.1287 (1.0)
5.1287 (1.0)
5.1287 (1.0)

55.2832
55.2832
55.2832
1.54056
30

1	1	0	70.0	3.48	25.576
2	1	1	97.0	2.551	35.15
1	0	-1	42.0	2.3794	37.777
2	2	2	1.0	2.1653	41.677
2	1	0	100.0	2.0854	43.354
2	0	0	1.0	1.9642	46.179
2	2	0	42.0	1.74	52.551
2	0	-1	2.0	1.5466	59.741
2	1	-1	5.0	1.5147	61.131



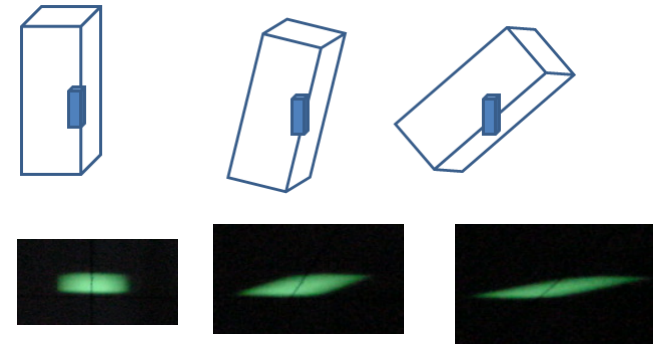
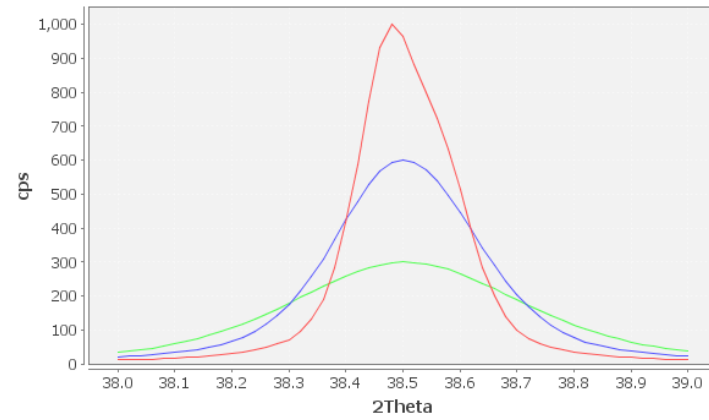
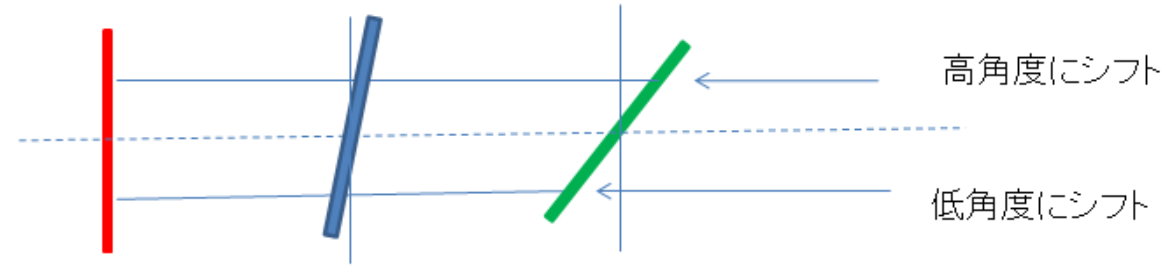
極点測定（積分強度とバックグラウンド）



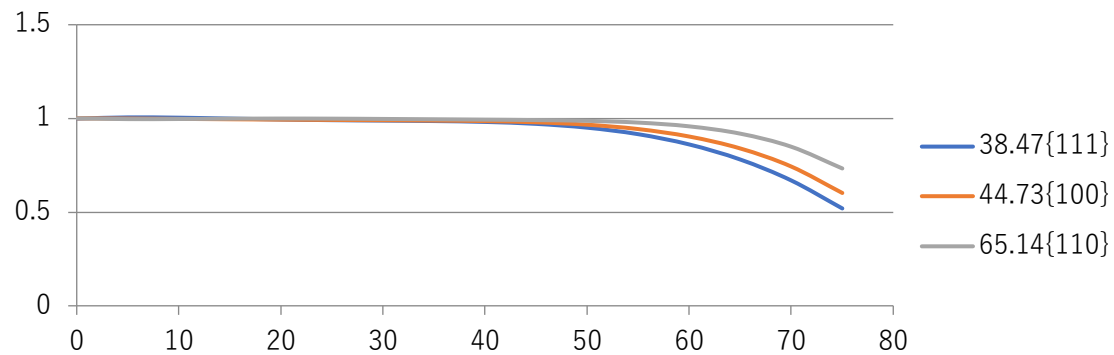
測定は、受光側スリットを十分に拡げて積分測定
ピーク積分測定とバックグラウンド積分測定のスリット幅は同じ
バックグラウンド測定は、 2θ 角度は、 $PEAK \pm 3deg.$ の位置
粒径が小さく、配向が強い場合、 β scanspeed は、Max で測定可能
バックグラウンド測定は1点で、 $peakscanspeed$ の $1/10$ とし、強度変動を抑える。
粒径が大きい場合、試料を揺動し、ビームがはみ出さないDSを使う
スピードは、揺動周期時間、あるいは、 $1/2$ 揺動周期時間の倍数で測定

粒径の確認、 $\theta scan$ によるロッキングカーブ測定
鋭いピークが発生する場合、揺動する。測定されるバックグラウンドプロファイルを確認し、バックグラウンドの修正や平滑化を行う。
本来、バックグラウンドは、ピーク積分強度 β 方向の最小値以下であるが、ピーク積分強度も変動する。

試料を傾けるとプロファイルが広がる (Defocus)



試料位置に蛍光板を置き、水平位置にカメラで撮影



無配向試料の極点測定データの β 方向の平均値を α 軸でプロット、極点図の中心を0.0、極点図の外側で徐々に強度が低下
Defocus曲線は、照射X線ビーム幅、測定 2θ 角度、受光スリット幅に影響されます。通常照射X線ビーム幅は一定

E.TENCKHOFF

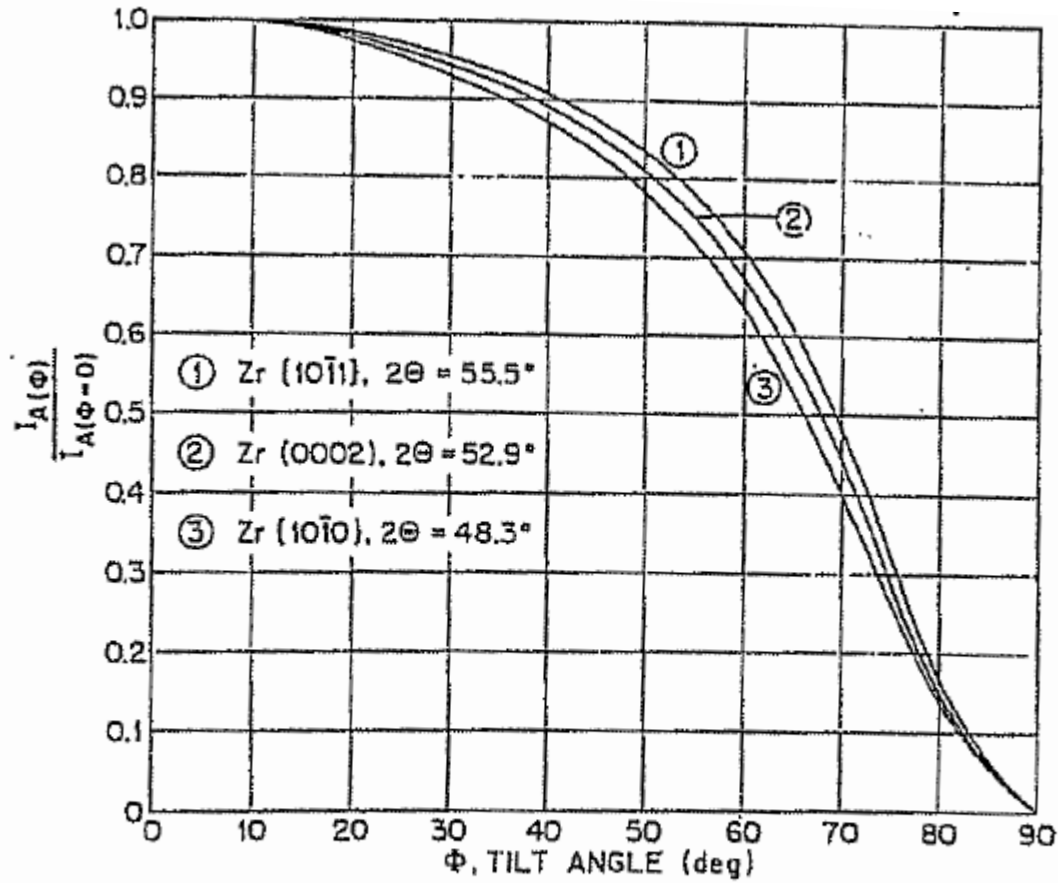
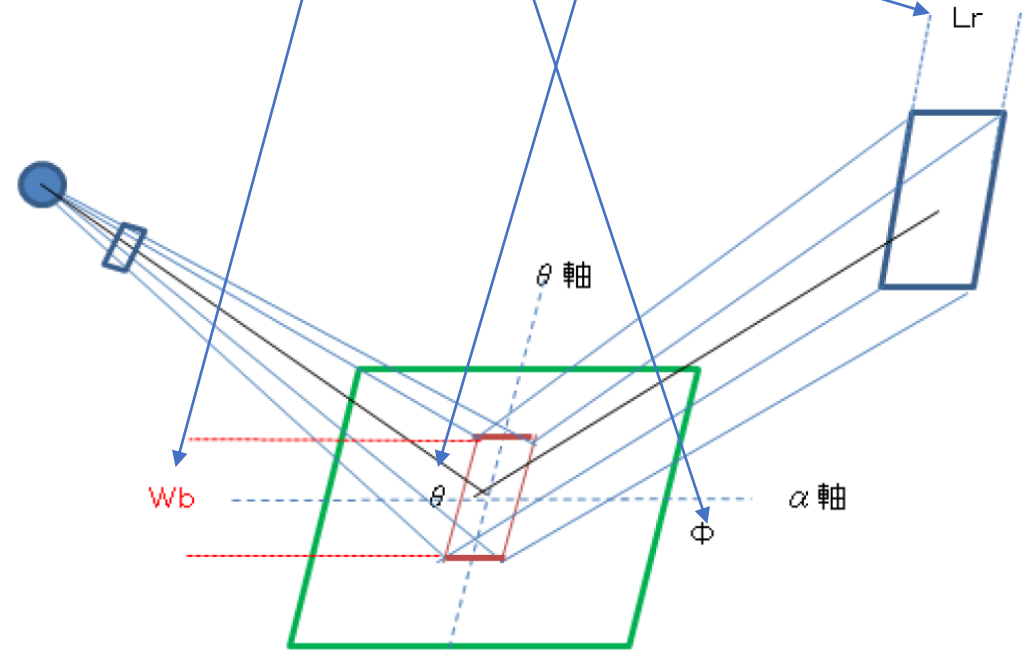


FIG. 2. Decrease in intensity with increasing tilt angle Φ for different diffracting planes of a zirconium specimen with random orientation.


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



極点処理

ODFPoleFigure2 4.03T[23/12/31] by CTR

File Linear(absolute)3D Toolkit Help InitSet BGMode Measure Condition Free OverlapRevision MinimumMode Rp% Normalization



Files select
ASC(RINT-PC)  006_15R.ASC 104_15R.ASC 113_15R.ASC

Calculation Condition
Previous Next M α Al2O β 001-F α 006_15R.ASC hkl 0,0,6 Change

Background delete mode
 DoubleMo... SingleMode LowMode HighMode Nothing BG defocus DSH1.2mm+Schulz+RSH5mm Minimum mo...
 Minimum(α β) MinimumAverage(α)X 0.5 Trans blinds angle 30.0

Peak slit 7.0 mm BG Slit 7.0 mm PeakSlit / BGS... BG Scope 80.0 deg. 90.0 deg. Set SetAll Disp α Inhibit

AbsCalc
 Ref Trans Schulz reflection method Change Absorption coefficient 150.861 1/cm Thickness 0.1 cm Set 2Theta 41.67 deg. 1/Kt Profile

Defocus file Select Transmission defocus HKL+T
 Defocus(1) functions file 
Make defocus function files by TXT2 Files Normalization degree of a polynomial 0 TenckhoffFitting  TextDisp

Defocus(3) function files folder(Calc unbackdefocus) BB285mm-Slit-1mm-7mm Limit Alfa Defocus value Free(LimitValue=0.0)

Defocus(2) function files folder(Calc backdefocus) DSH1.2mm+Schulz+RSH5mm Select crsytal Cubic 1/Ra Profile

Smoothing for ADC
 Cycles 2 Weight 10 Disp After connection

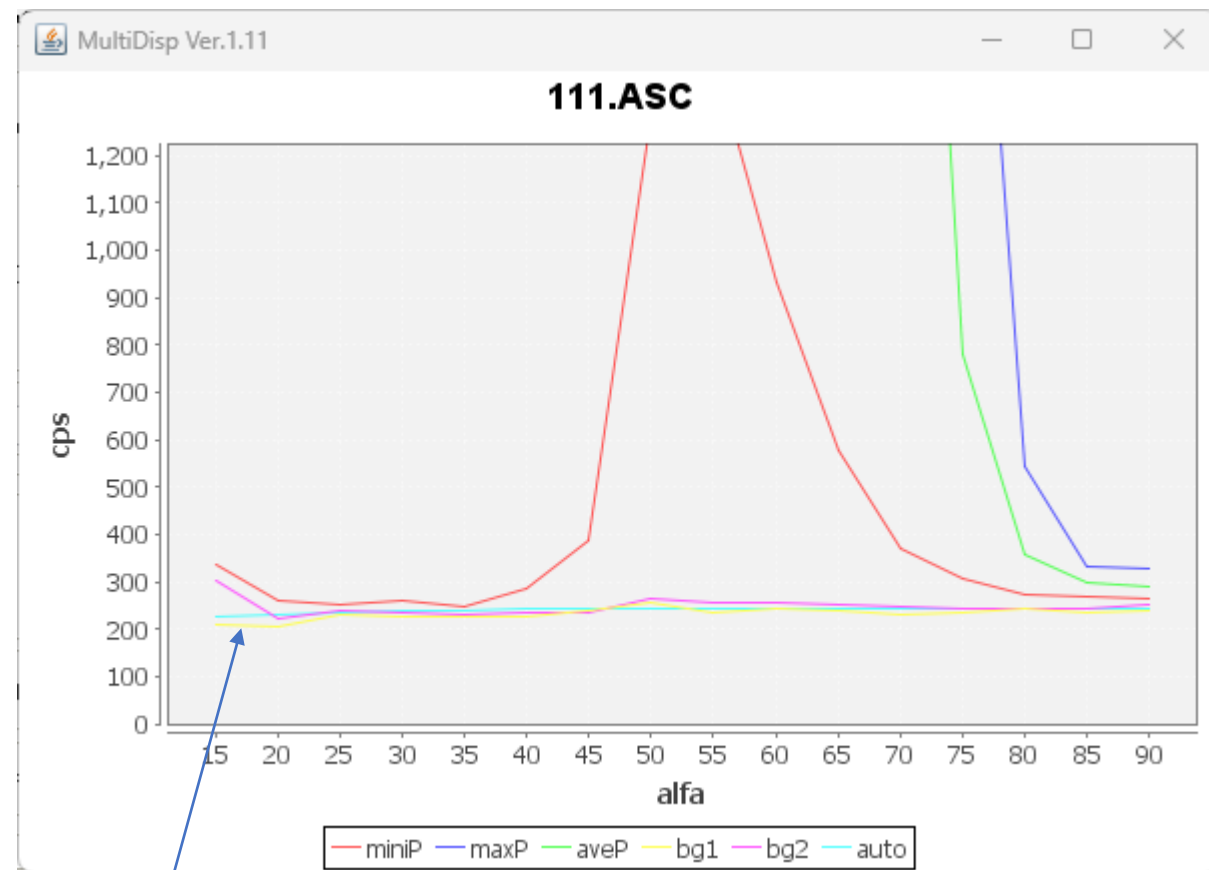
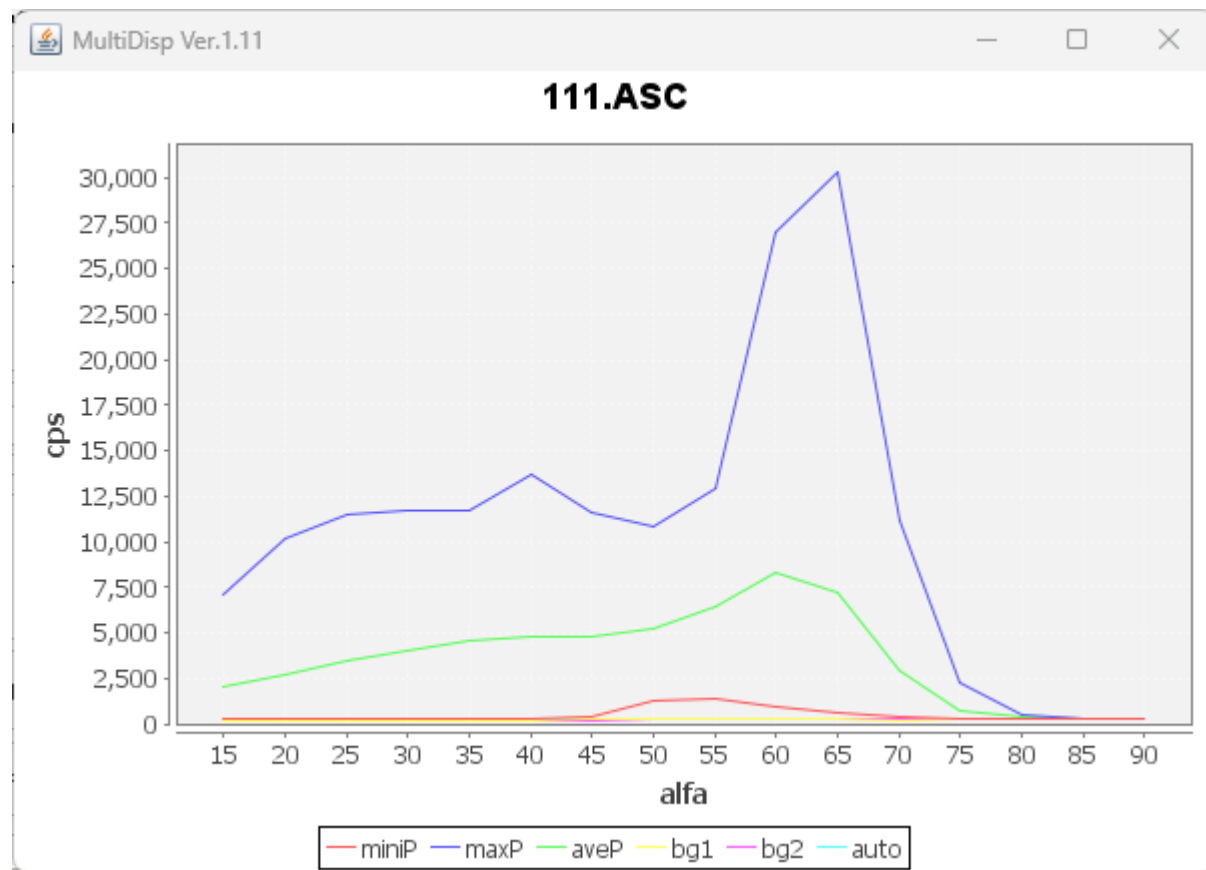
Normalization CTR Connect CenterData Average OutFiles Asc MTexAsc Ras TXT TXT2

Cancel Calc Connect
Exit&ODF ODF
ValueODFVF-B ValueODFVF-A

CTRHome : C: Select crystal : Hexagonal 23/03/25

バックグラウンド、吸収補正、defocus補正を行う(BG-defocusモードも確認)
Defocus補正を内部計算でも可能

バックグラウンド確認

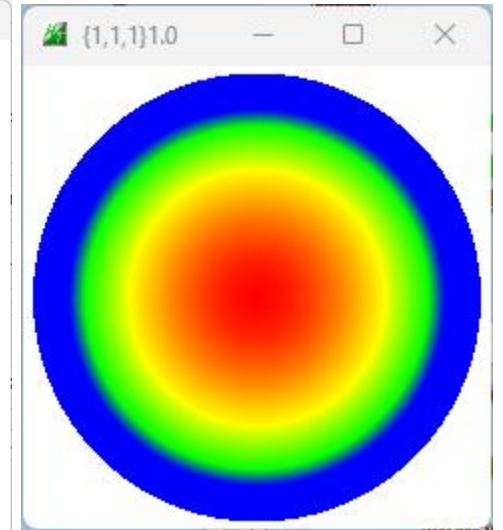
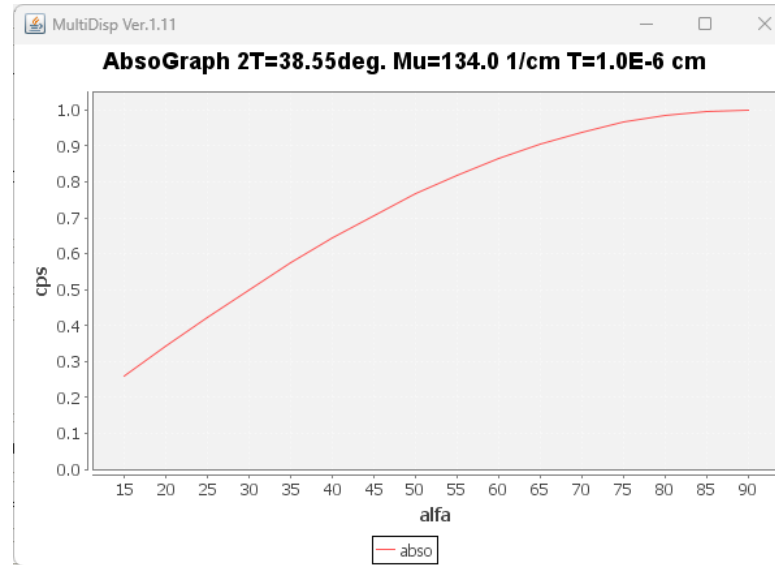
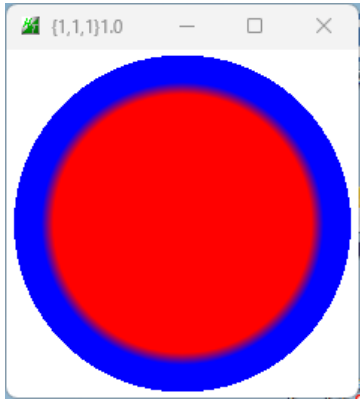


水色は補正曲線

吸収、defocus

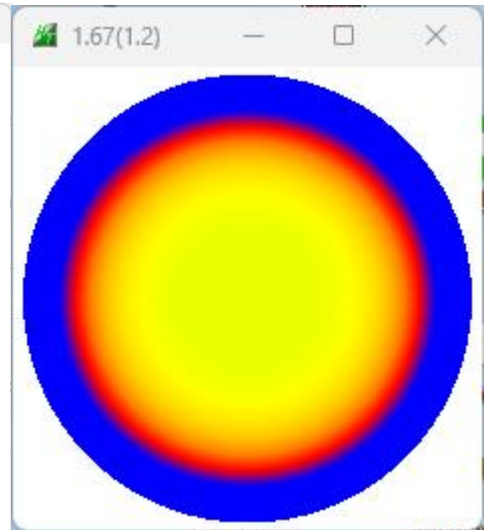
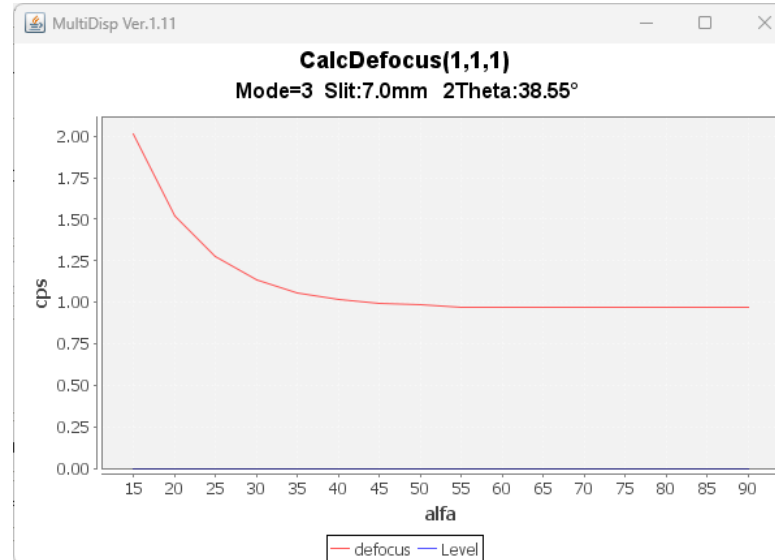
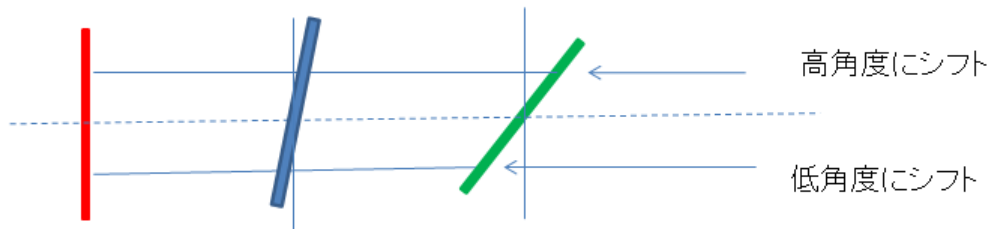
吸収補正

回折に寄与する体積補正
極点図中心：少ない
極点図外周：多い

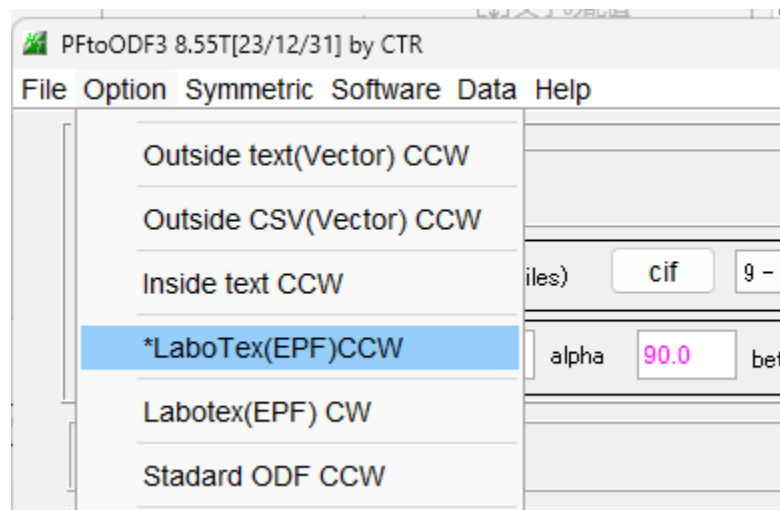
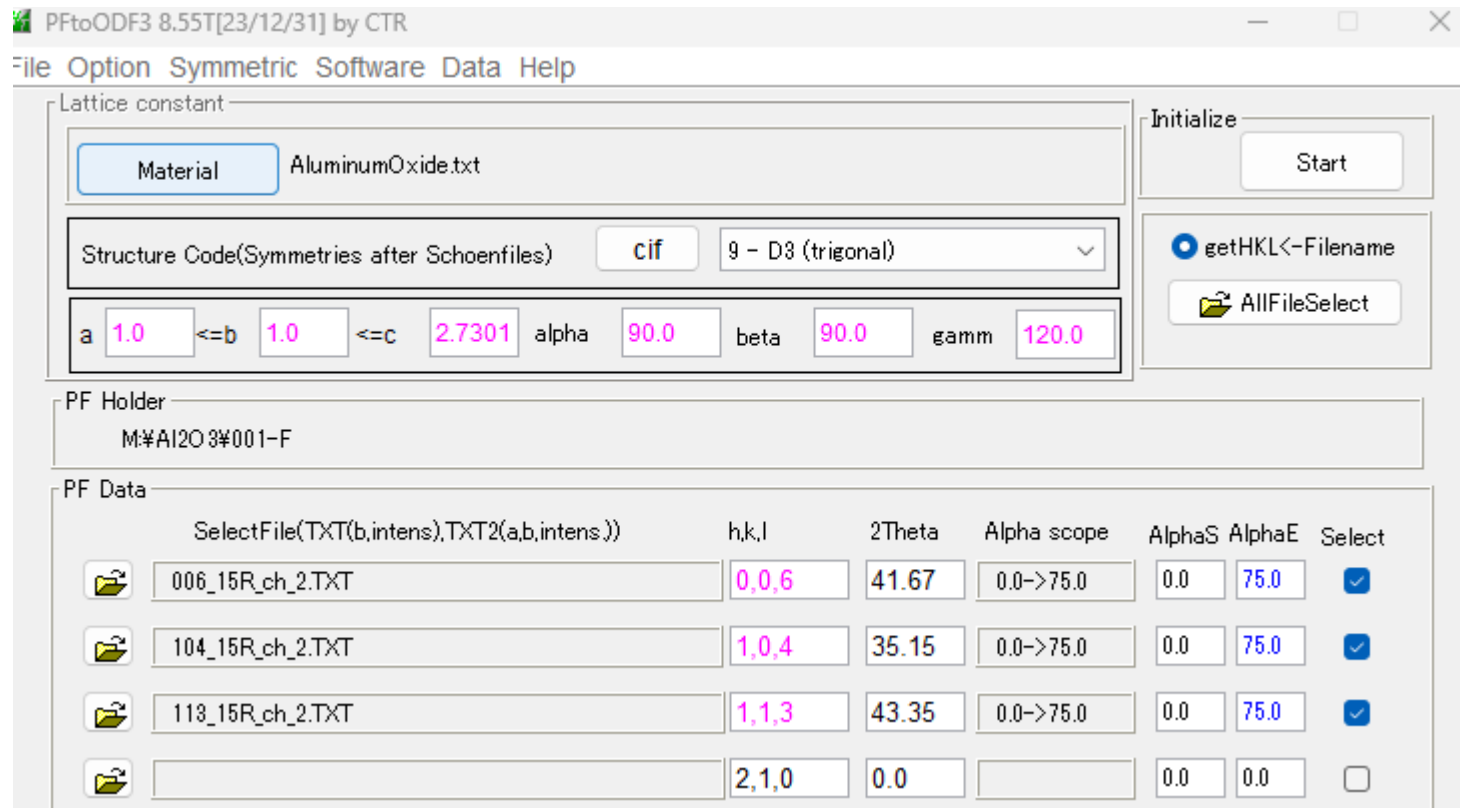


Defocus補正

受光側回折の広がり補正

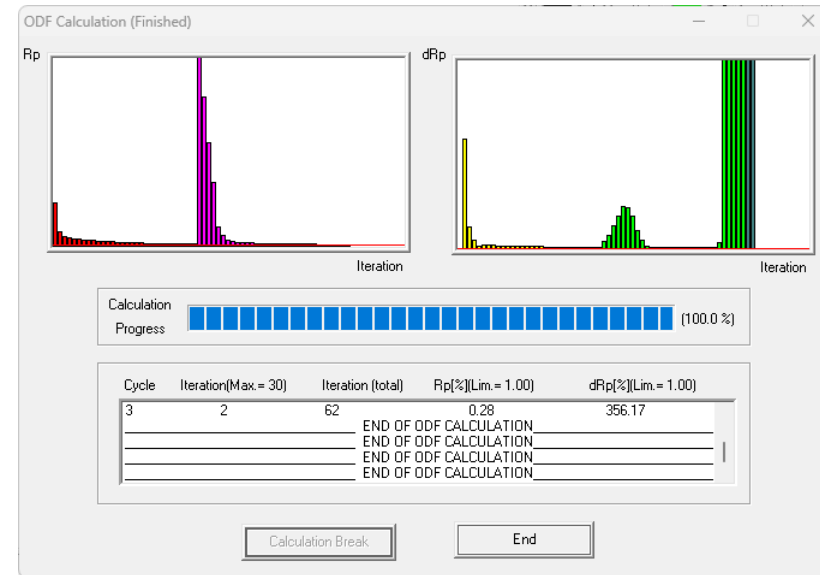
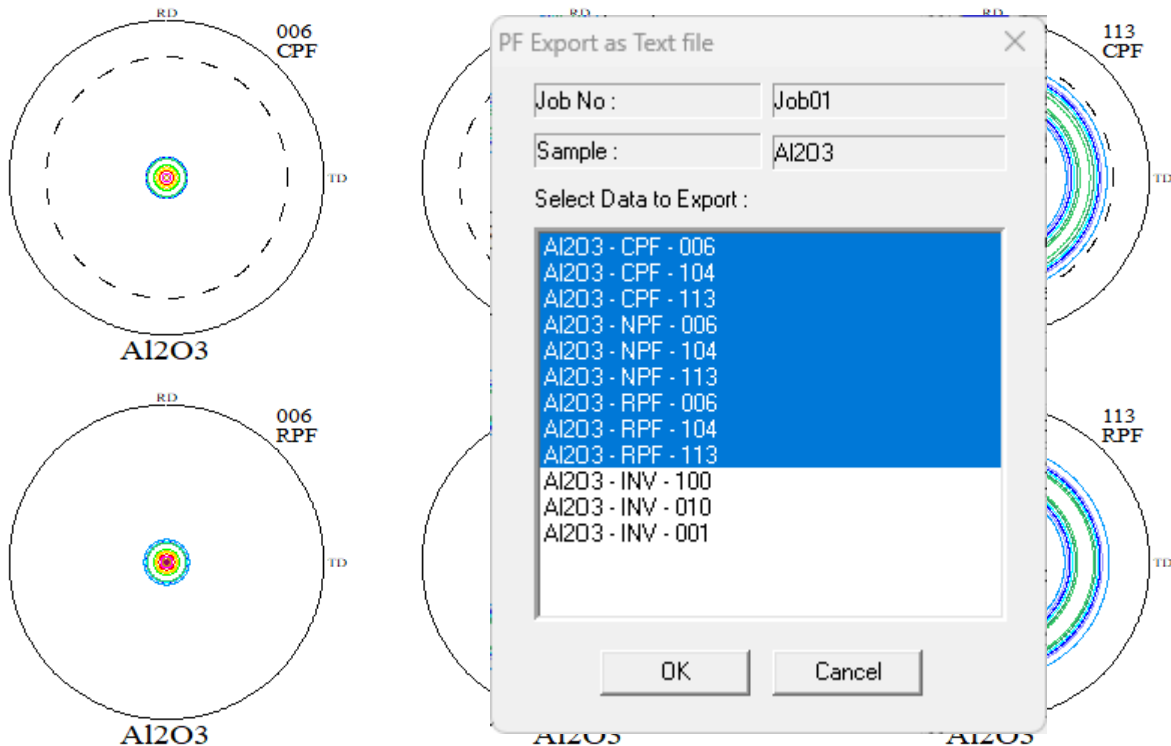
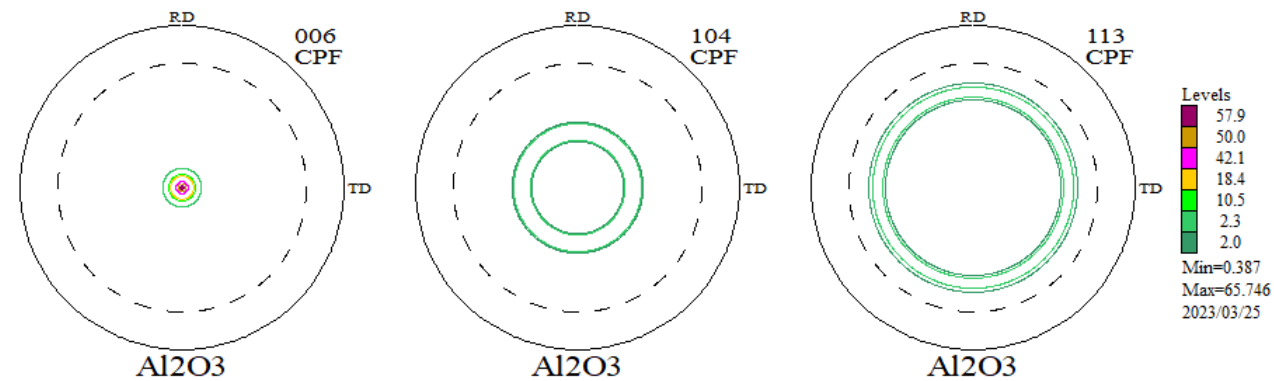


ODF向けファイル作成

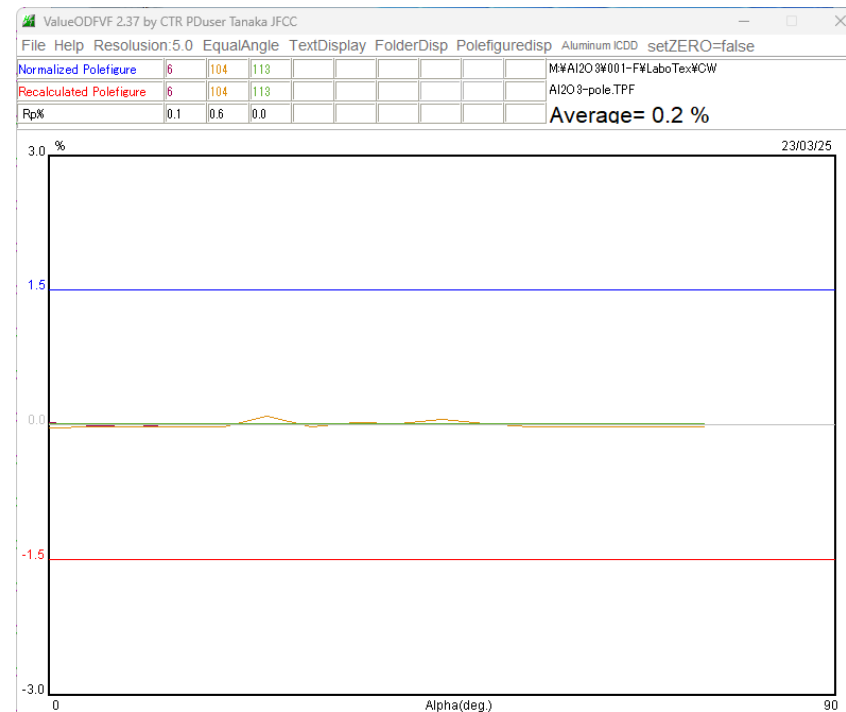


ODF解析を非対称で行う場合、
CCWでは、極点図の左右が逆表示
CWでは、他のODFとODF図が一致

LaboTex解析



Export極点図からRp%確認 右下がりにはdefocusが不十分

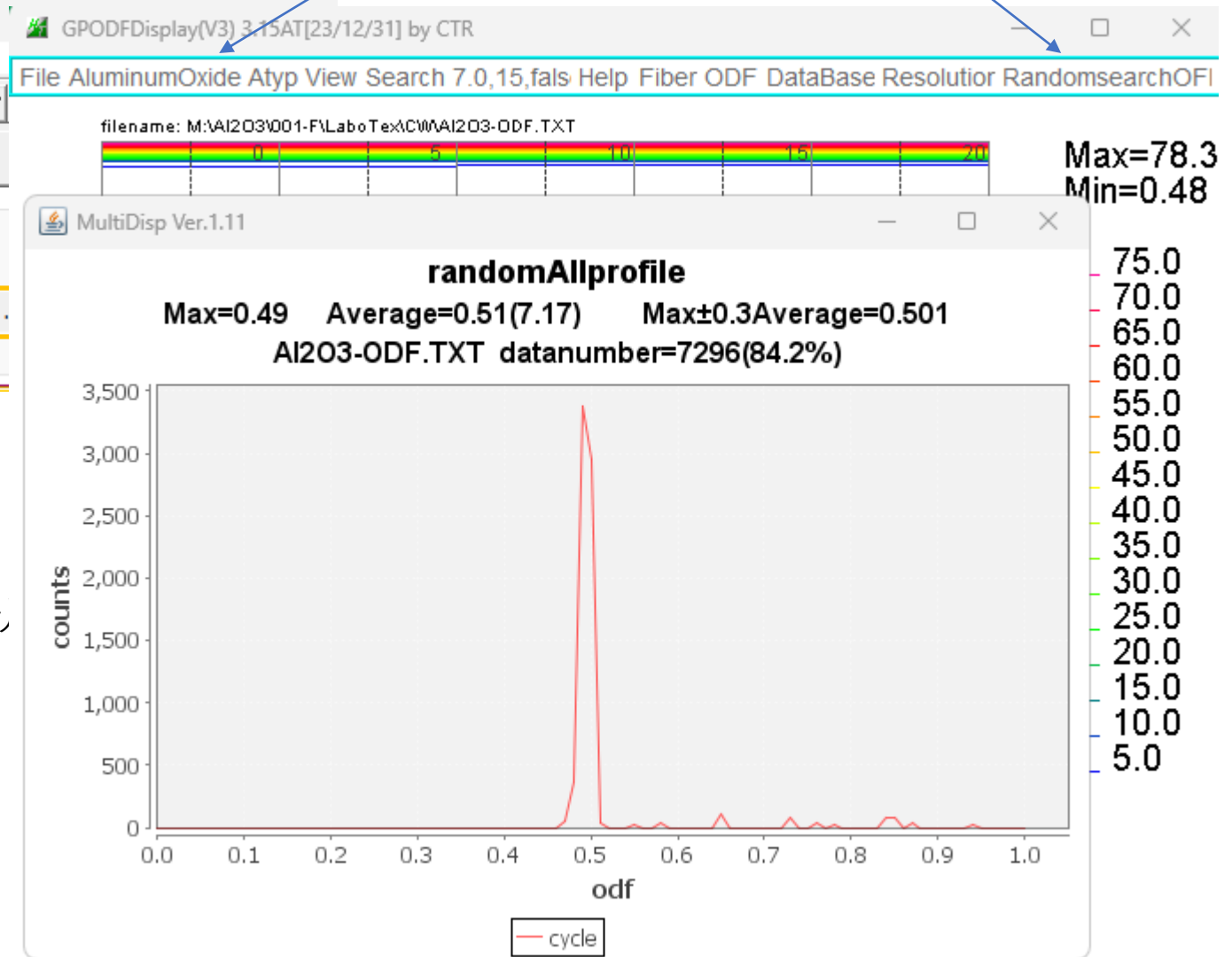
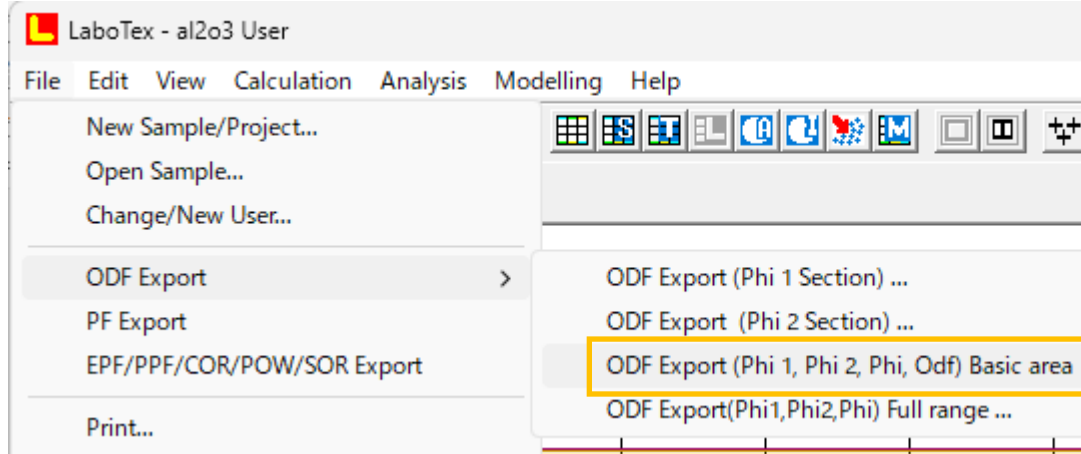


Random定量 (VolumeFractionのbackground目標値)

ODF図をExportし、GPODFDisplayで解析

Al2O3

random評価



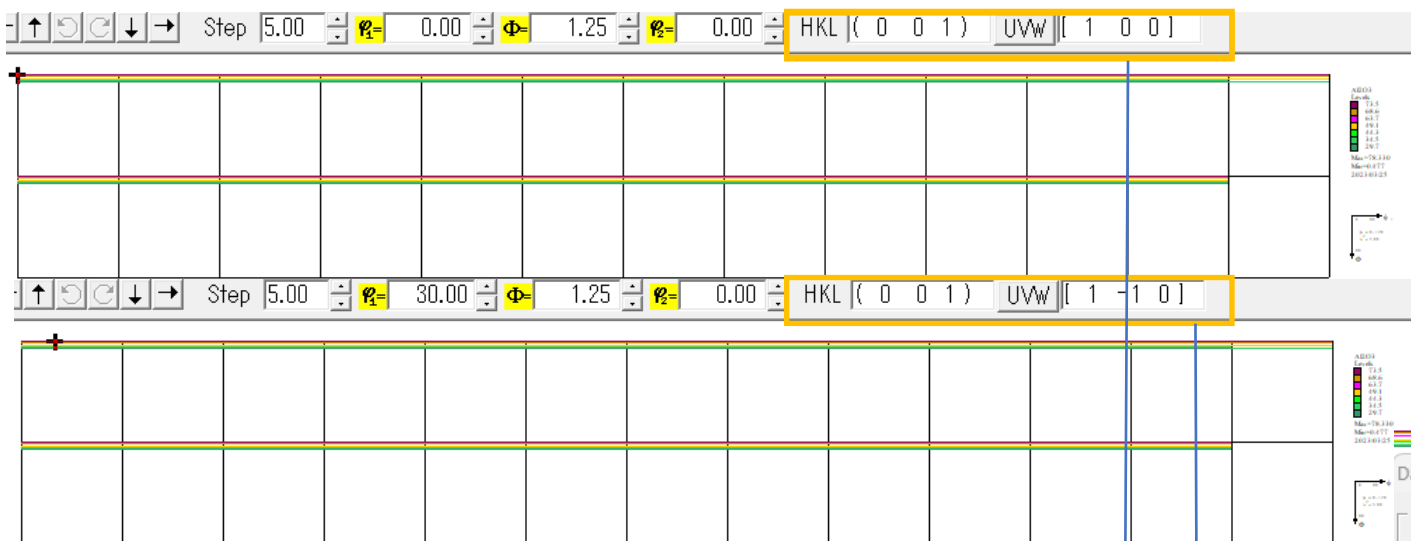
ODF図をExportし、GPODFDisplayで
Random定量 (Box100を使用)

Boxは、方位密度1.0以下を100の密度Boxに区切り
格子点密度によりBoxに加算する

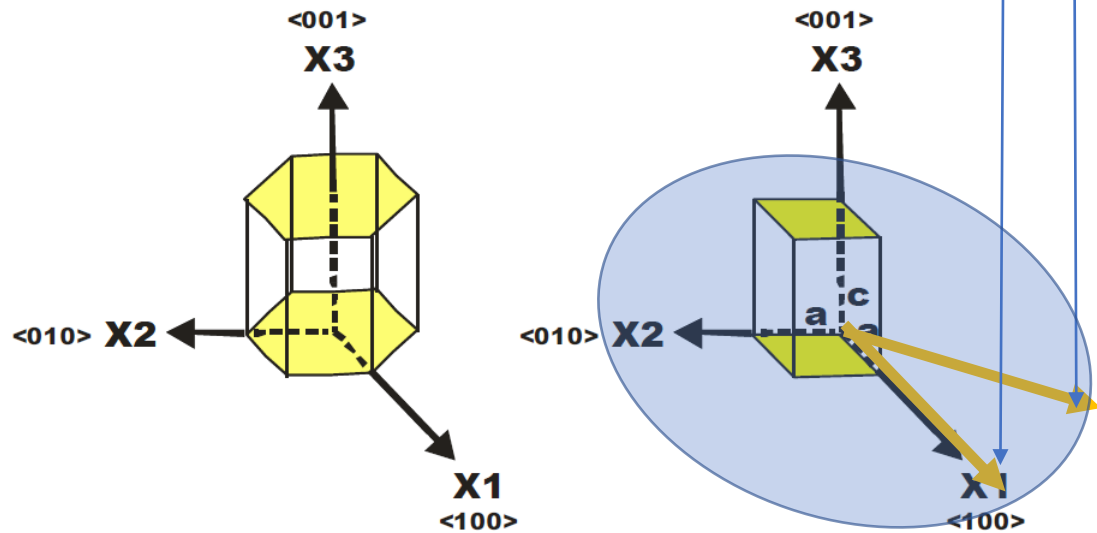
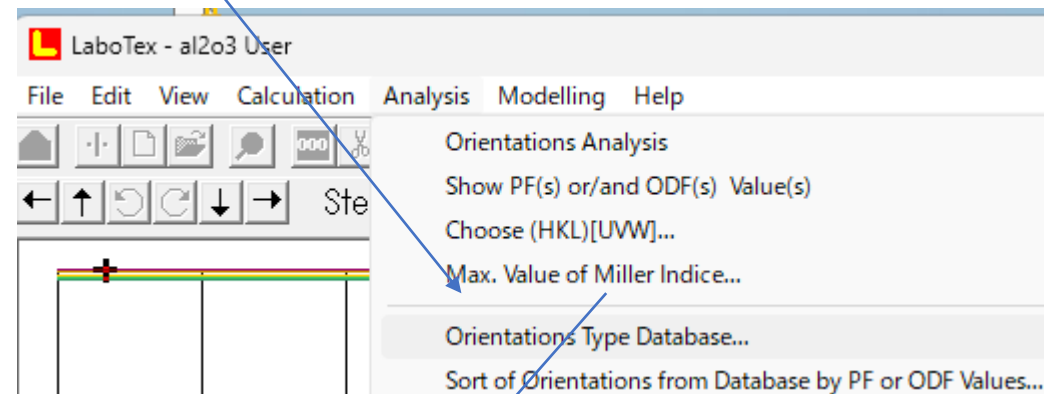
右図では、1.0以下は7296個 (全体の84.2%)
 $19 \times 19 \times 24 = 8664$ $7296 / 8664 = 0.842$

最大位置がrandom値 0.49=49%がrandomVF

VolumeFractionを求める



DataBaseに登録



Database - Add (HKL)<UVW> - Symmetry Trigonal

Choose (HKL) [UVW]

H	K	L	U	V	W
0	0	0	0	0	0
1	1	1	1	1	1
2	2	2	2	2	2
3	3	3	3	3	3
4	4	4	4	4	4
5	5	5	5	5	5
6	6	6	6	6	6
7	7	7	7	7	7
8	8	8	8	8	8
9	9	9	9	9	9
10	10	10	10	10	10
11	11	11	11	11	11
12	12	12	12	12	12
13	13	13	13	13	13
14	14	14	14	14	14
15	15	15	15	15	15

<HKL>: < 0 0 1 > [UVW]: fiber

Fiber <HKL>fiber < 0 0 1 > fiber

Database

Orientation Type Name ϕ_1 Φ ϕ_2

< 0 0 1 > fiber Depend. on Cell Param.

Add to Database

Close

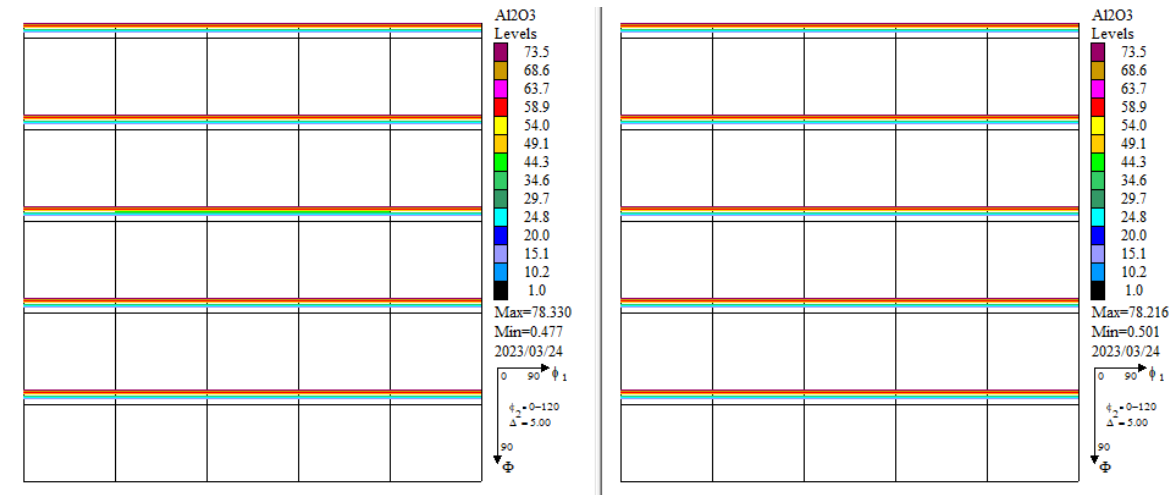
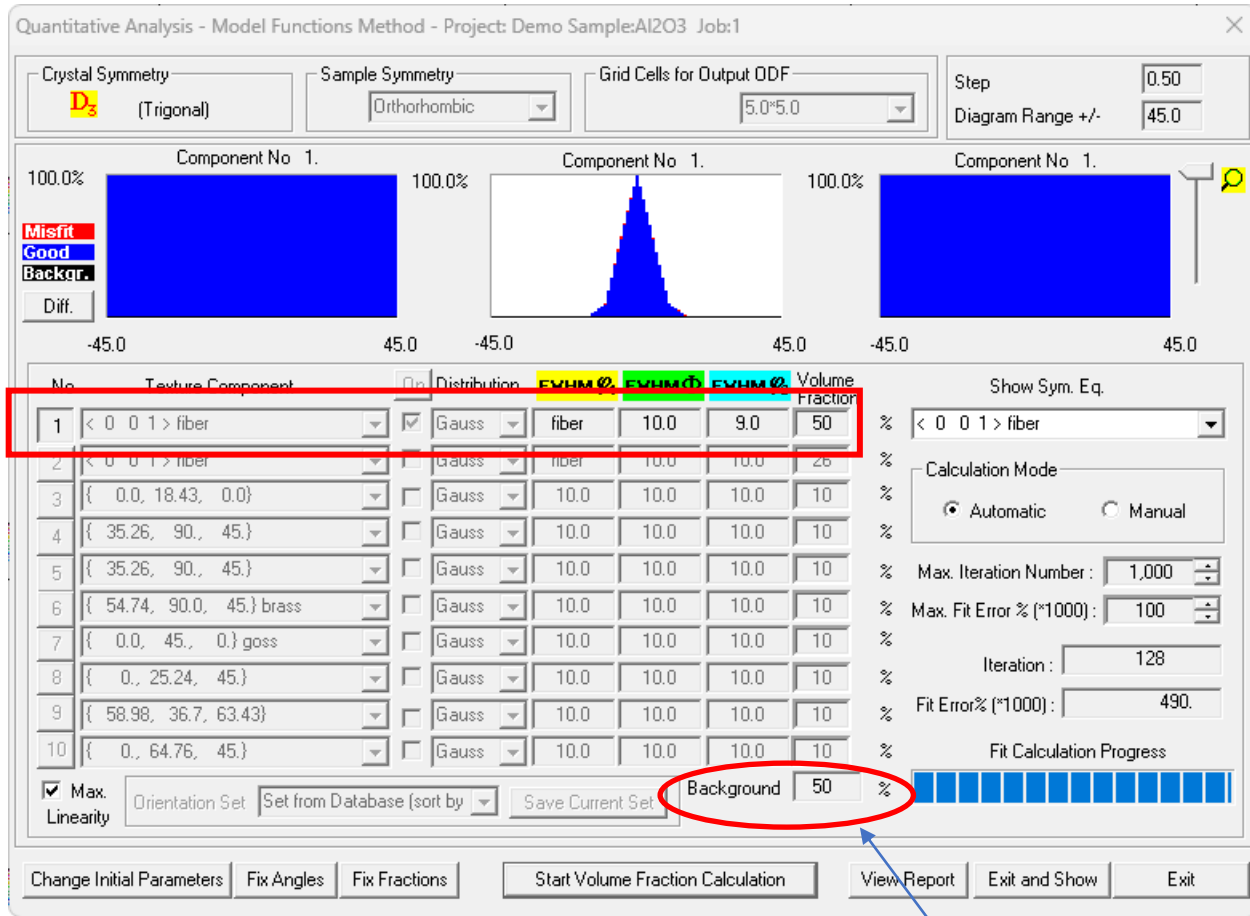
Number of Orientations: 23

Φ	ϕ_2
0.00	0.00
90.00	45.00
65.91	26.50
45.00	0.00
90.00	0.00
90.00	45.00
90.00	45.00
54.74	45.00
45.00	90.00

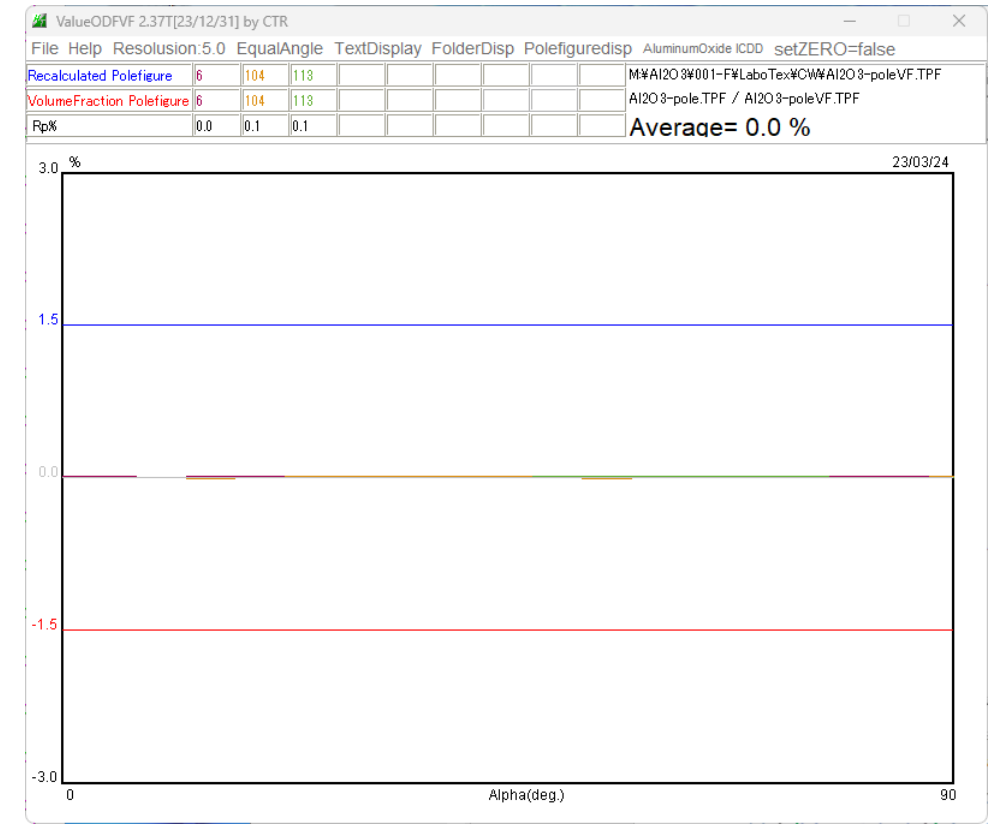
New (HKL)<UVW>

(-180 - 180) (-360 - 360)

VolumeFraction



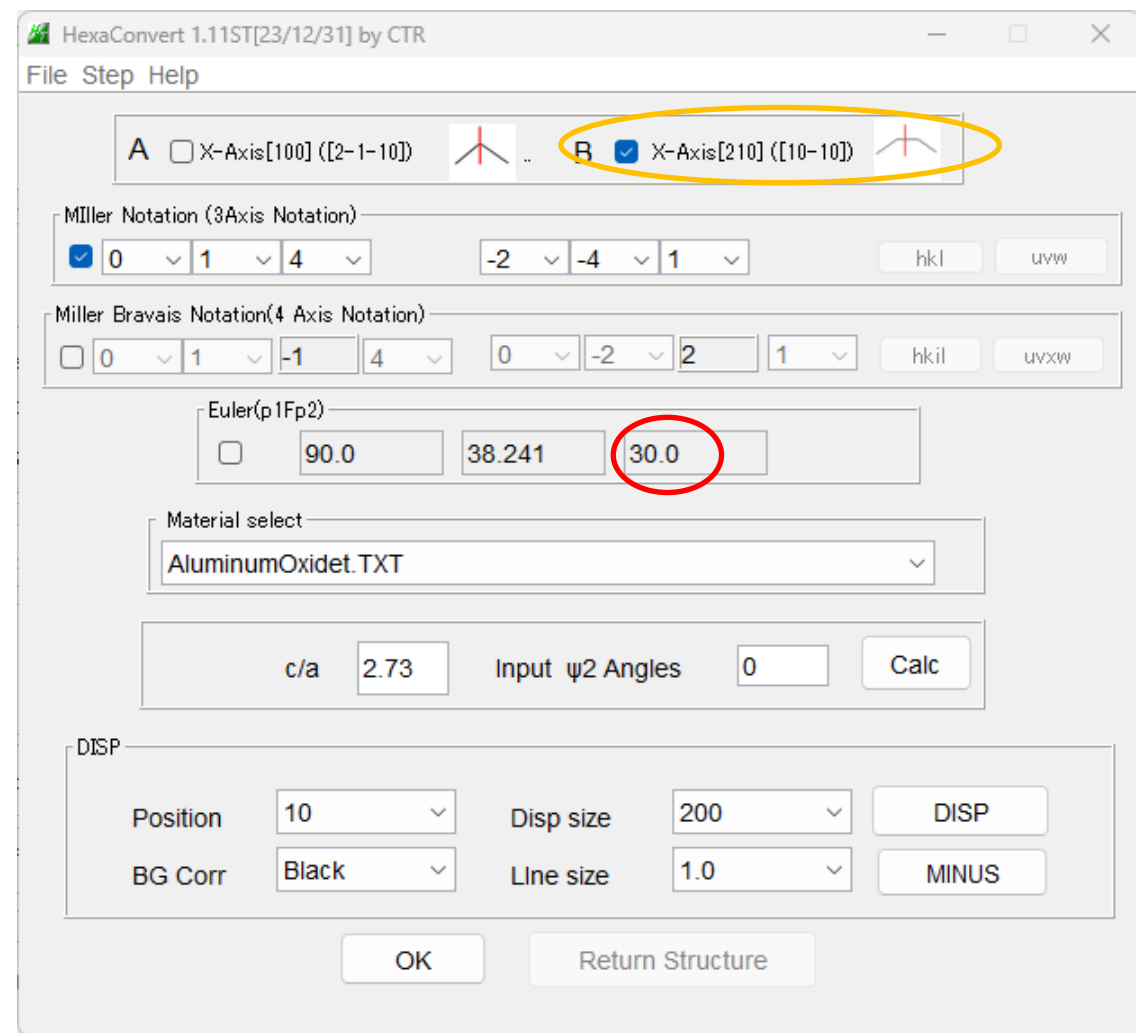
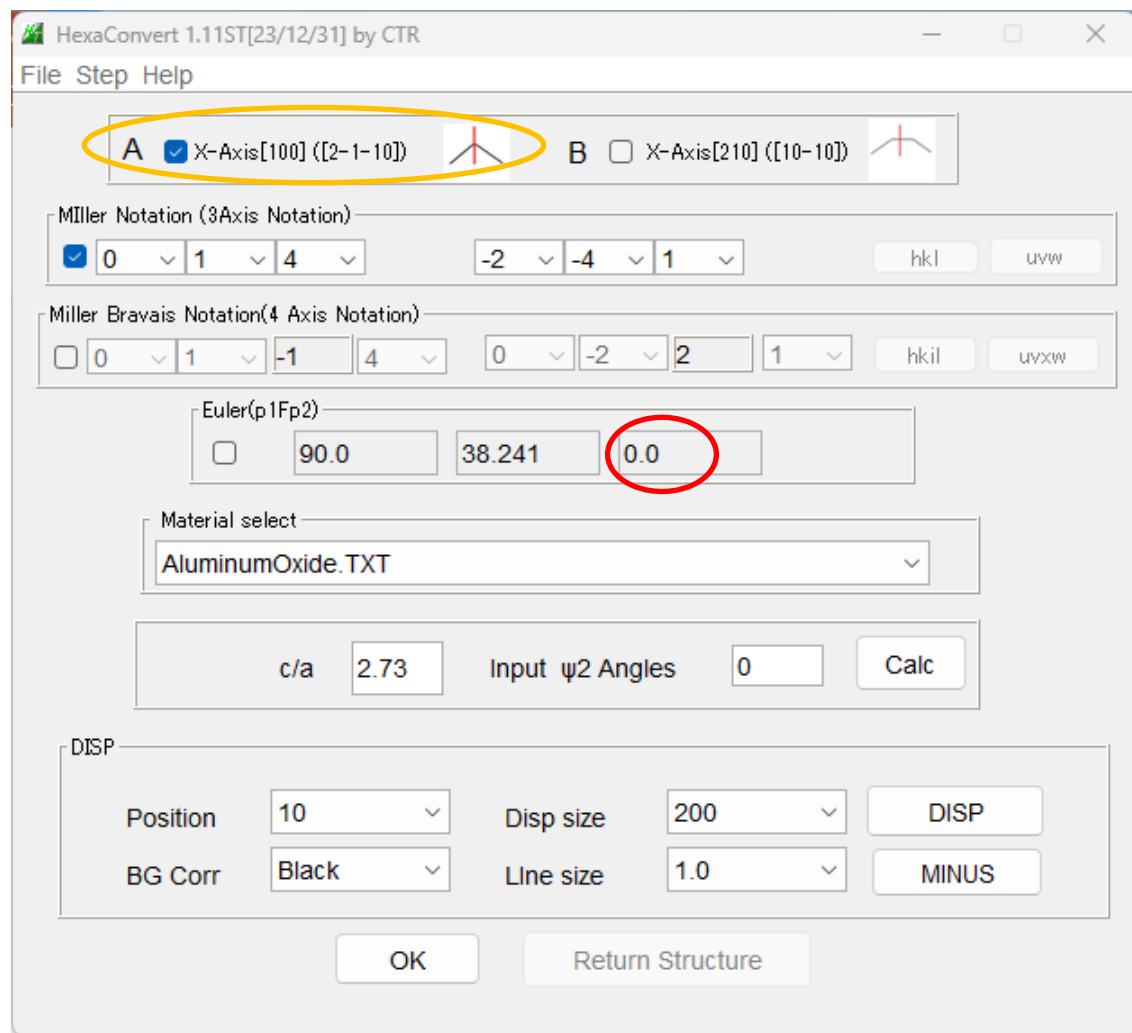
再計算極点図、VF%の極点図からRp%確認



VF結果とrandom定量値を見比べ random定量 + その他 ODF図の比較

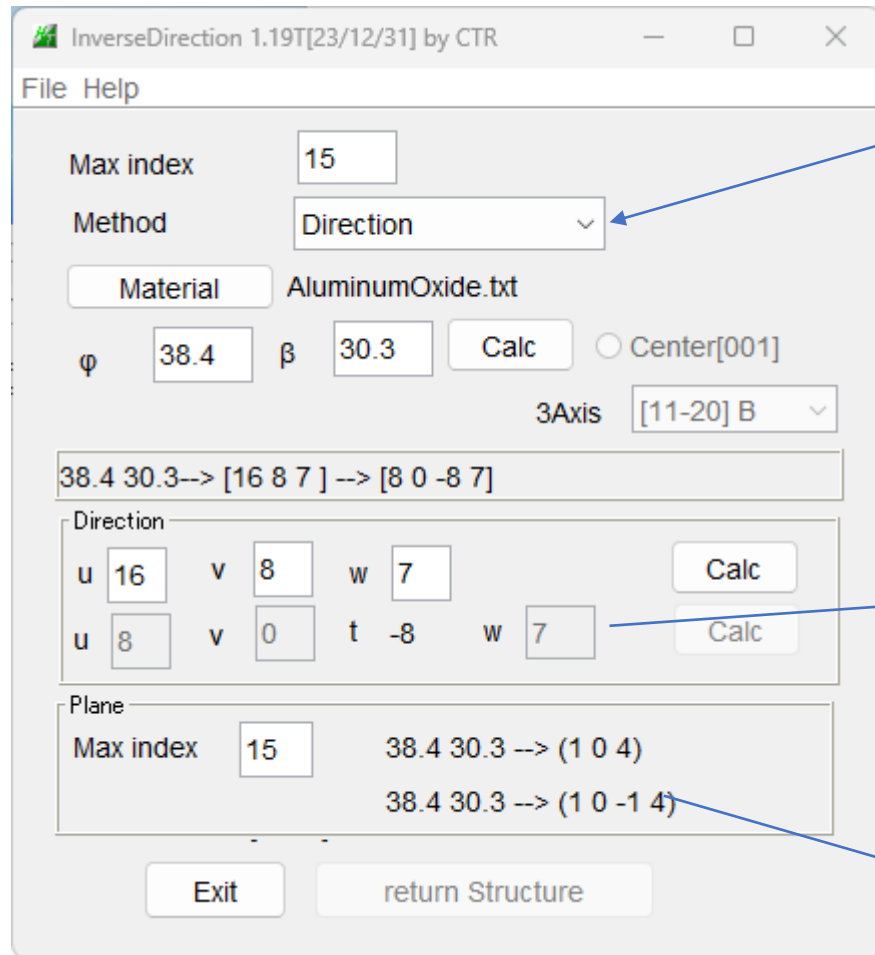
VF%結果の極点図をExportし、Rp%を確認

Hexagonal X軸により $\phi 2$ が 30 度シフト

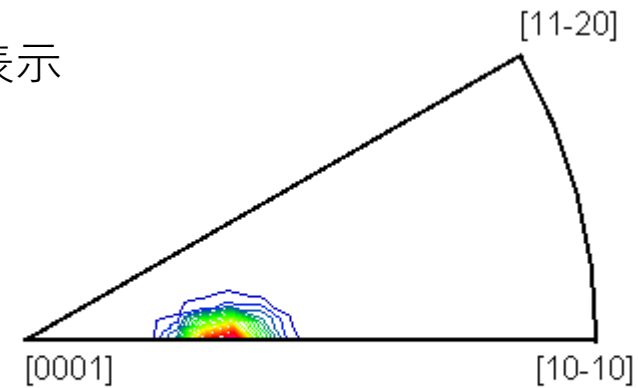


Hexagonal Inverse

逆極点図は方位分布図であるがND方向は面表示が分かりやすい

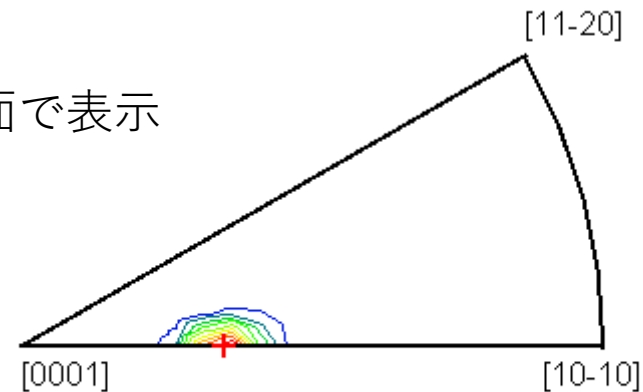


ND方向で表示



$\phi=38.4, \beta=30.3, Z=20.85 \rightarrow [8,0,-8,7]$

ND方向に垂直面で表示



$\phi=38.4, \beta=30.3, Z=20.85 \rightarrow (1,0,-1,4)$