ODF 解析における粒径の粗い材料の扱い

2025年05月07日 *HelperTex Office* 概要

アルミニウムO材のような粒径の粗い材料では正確な方位解析は難しい。 粒径の影響を軽減する方法としては、測定材料表面を広くし、平均値測定を行う必要があります。 大きな試料の揺動測定、入射エリアの拡大、Phi(β)軸のstep測定より連続測定、 複数の試料を測定し平均化などが考えられます。 光学系の変更ができない場合、**複数試料の平均化**が容易に出来る方法です。 以下に、平均化手法を説明します。 CTR ソフトウエアは、試料毎にホルダを作成し、ファイル名の先頭に指数を配置したASCの 極点処理が行われます。 以下ではbrass, copper, cube, gossホルダに 111_R.ASC 200_R.ASC 220_R.ASC と同一ファイル名を配置します。

ファイル名が異なる場合、rename操作が必要になります。

測定データ

C:¥tmp2¥Plus¥brass¥111_R.ASC C:¥tmp2¥Plus¥brass¥200_R.ASC C:¥tmp2¥Plus¥brass¥220_R.ASC C:¥tmp2¥Plus¥copper¥111_R.ASC C:¥tmp2¥Plus¥copper¥200_R.ASC C:¥tmp2¥Plus¥copper¥220_R.ASC C:¥tmp2¥Plus¥cube¥111_R.ASC C:¥tmp2¥Plus¥cube¥200_R.ASC C:¥tmp2¥Plus¥cube¥220_R.ASC C:¥tmp2¥Plus¥goss¥111_R.ASC C:¥tmp2¥Plus¥goss¥200_R.ASC C:¥tmp2¥Plus¥goss¥200_R.ASC

極点処理

バックグランド除去

(生成極点図のため、バックグランドは登録されていません)

defocus補正

必ず処理してください。

最適化Rp%

必須ではありません。

極点図の平均化

同一ファイル名の平均極点図を生成する。

🕌 ODFPoleFigure.jar	Executable Jar F	132 KB	2022/1/31 4:46
🕌 ODFPoleFigure1_5.jar	Executable Jar F	215 KB	2024/2/18 7:31
🕌 ODFPoleFigure1_5S.jar	Executable Jar F	225 KB	2024/2/18 7:05
🕌 ODFPoleFigure2.jar	Executable Jar F	280 KB	2024/2/18 7:32
🕌 ODFPoleFigure2S.jar	Executable Jar F	289 KB	2024/2/18 7:32

平均化を行うODFPoleFigureは ODFPoleFigure1.5S ODFPoleFigure2S で行います。

ODFPoleFigure2Sでは

ODFPoleFigure1.5Sに各種補正が追加されています。

ODFPoleFigure1. 5Sによる平均化

処理ファイル名の指定

M ODFPolefigure1.5S 2.08 by CTR PDuser CTR	R CTR			- 🗆 X
File Linear(Contour) ToolKit Help Ip#9	Set Do% Minumum All back/ 劉開く	around Tranemiceion blinde=20	×	
ASC(RINT-PC)	7>イルの場所の ま近使った項 デスクトップ ドキュメント PC	~	p 🗈	othing + a 5 Arithmetic mean Disp RD 0.0 Interporation Full Disp Set 2Theta 0.0 des. 0 1/Kt Profile Tartfilion 0 1/Ba Profile
Smoothine(for ADC) Cycles 1 V Weight 9	アァイル名(N): ネッバラーク ファイルのタイプ(T):	"111_RASO" "200_RASO" "220_RASO" *asc.*ASC.*Asc ValueODF-B ValuODF-A	■ 開入 取消 Cancel Calc Con	p((Cubic only)) Ultriles nect Average ODF File AllODFFiles Select crystal : Cubic 25/05/07 CTRHome : C:

指定されたファイル名が表示される

🌌 {1,1,1} 19.8 — 🗆 🛛 🛛	🛿 {2,0,0} 26.9 — 🗆 🛛	4 {2,2,0} 27.7	- D X	100						
RD MAN	RD	RE		∃ 5 ° ৫	÷					粒径の料
(3.1.9) TD	TD (2.0.9)			1и ћ-ц	挿入描画	ਸਿੱਖਿਨ ਦਾ ਦਾ ਦਾ ਦਾ ਦਾ	レイアウト	参考資料	差し込み文書	校閱
M ODFPolefigure1.5S 2.08 by CTR PDus	er CTR CTR								- 0	×
File Linear(Contour) ToolKit Help	InitSet Rp% Minumum All backgr	ound Transmission bl	inds=30							
ASC(RINT-PC)	11 RASC 200_RASC 220_RASC	$\overline{}$								
Holder										
Holder										
Rename										
Rename_delete										
Previous Center C¥tmp2	¥Plus¥brass¥111_RASC		h	ଧ 1,1,1 ଜ	nange Smooth	nine]+α 5	 ✓ Arithmeti 	ic mean	↓ Disp	
Backgroud delete mode	🔿 Low Mode 🔿 Nothing	O Minimum(αβ) Ο	MiniAver X 1.0	Set	Disp	RD 0.0	Interporation		Full Disp	
AbsCalc										
Ref Trans Schulz reflect	ion method v Change A	bsorption coefficien 1.0	1/cm Thicknes	s 1.0	cm ~ 8	iet 2Thet	a 0.0	deg. 🔾 1	/Kt Profile	
Defocus file Select Transmission def	cous HKL+T Polynomia degr 0 🛛 Innck lhoff Fitt	ing TXT2 C¥tmp2¥A	l_random¥defocus¥DE	FOCUS_NOTNO	RM_F.TXT		TextDisp	0 1/Ra	Profile	
Smoothing(for ADC)	Aterconnection Disp	Normalization	CenterData -	Search minim	um EqualAngleRp%	(Cubic only)	OutF O Ra	iles as () ASC	○ TXT2 () TX	т
		ValueODF-B	ValuO DF-A	Cancel Ca	IC Connect	Avera	ge OD	F File	AllODFFiles	
-							Select CTRH0	crystal : Cu ome : C:	bic 25/(05/07

選択したホルダ+ファイル名

平均化するホルダの指定

C:¥tmp2¥Plus	¥brass¥111_R.ASC
C:¥tmp2¥Plus	¥brass¥200_R.ASC
C:¥tmp2¥Plus	¥brass¥220_R.ASC
C:¥tmp2¥Plus	¥copper¥111_R.ASC
C:¥tmp2¥Plus	¥copper¥200_R.ASC
C:¥tmp2¥Plus	¥copper¥220_R.ASC
C:¥tmp2¥Plus	¥cube¥111_R.ASC
C:¥tmp2¥Plus	¥cube¥200_R.ASC
C:¥tmp2¥Plus	¥cube¥220_R.ASC
C:¥tmp2¥Plus	¥goss¥111_R.ASC
C:¥tmp2¥Plus	¥goss¥200_R.ASC
C:¥tmp2¥Plus	¥goss¥220_R.ASC

C: ¥tmp2¥Plusを指定する。

File Linear(Contour) ToolKit He	IP InitSet Rp% Minumum All	background Transmission blinds=30		- U X
Holder Holder Rename delete Calcration Condition Previous Next Cx4tr	● ■< ファイルの場所(0) ● Plus 最近使った項 ● cube ● goss		×	Smoothing
Backgroud delete mode DoubleMod SingleMode AbsCalc Ref Trans Schulz refle _Defocus file Select Transmission (→ + a 5 ✓ Arithmetic mean ✓ Disp sp RD 0.0 Interporation ✓ Full Disp ✓ Set 2Theta 0.0 deg. 1/Kt Profile
Provide a constraint of the second seco	PC アオルダ右(N):	C.¥tmp2¥Plus	關	TextDisp 1/Ra Profile VurtPiles VartPileRpX(Cubic only) Ras ASC TXT2 Connect Average ODF File
	ネットワーク ファイルのタイプ(T):	すべてのファイル		Select crystal : Cubic 25/05/07 CTRHome : C:

ファイルを指定したホルダは表示されています



一括データ処理を行う。

M ODFPolefigure 1.5S 2.08 by CTR PDuser CTR CTR	_	
File Linear(Contour) ToolKit Help InitSet Rp% Minumum All background Transmission blinds=30		
Files select ASC(RINT-PC) I11_RASC 200_RASC 220_RASC		
Holder Holder Rename Rename_delete		
Calcration Condition Previous Next Citytmp2¥Plus¥brass¥111_RASC Mkl Smoothing Backgroud delete mode	J Di	ISP
🔲 🗋 DoubleMod SingleMode 🔷 LowMode 🕘 HighMode Ο Nothing Ο Minimum(αβ) Ο MiniAver X 1.0 Set Disp 🗍 🗓 🕕 Interporation 🗸 🔤 F	ull Di	isp
AbsCalc	Prot	file
Defocus file Select Transmission defocus HKL+T	Profile	
Smoothing(for ADC) Normalization CenterData Outh riles Cycles 1 v Weight Afterconnection Disp CTR Connect Average Search minimum EqualAngleRpt(Cubic only) Ras	TXT2 🔿	тхт
ValueODF-B ValuODF-A Cancel Calc Connect Average ODF File A	\IIODFFiles	
Select crystal : Cubic CTRHome : C:	2	25/05/07
Filemake success!!		

平均化を行う。

M ODFPolefigure 1.5S 2.08 by CTR PDuser CTR CTR	-		×
File Linear(Contour) ToolKit Help InitSet Rp% Minumum All background Transmission blinds=30			
Files select ASC(RINT-PC) I11_RASC 200_RASC 220_RASC			
Holder			
Holder C:¥tmp2¥Plus¥copper			
Rename C:¥t mp2¥P lus¥goss			
Rename_delete			
Calcration Condition Previous Next C¥tmp2¥Plus¥brass¥111_RASC Declared delta as d	~	Disp	
Backgroud delete mode DaubleMod. SingleMode LowMode HighMode Nothing Minimum(α,β) MiniAver X 1.0 Set Disp	Full	Disp	
AbsCalc	/Kt P	rofile	Ī
Defocus file Select Transmission defcous HKL+T	Profile		
Smoothing(for ADC) Cycles 1 Weight 9 Afterconnection Disp CTR Connect Search minimum EqualAngleRp%(Cubic only) Ras ASC	O TXT2 () ТХТ	
ValueODF-B ValuODF-A Cancel Calc Connect Average ODF File	AllODFFile	es	
Filemake success!! Select crystal : Cu CTRHome : C:	bic	25/05/	07



ExitでODFPoleFigure1.5Sに戻る。

M ODFPolefigure 1.5S 2.08 by CTR PDuser CTR CTR -
File Linear(Contour) ToolKit Help InitSet Rp% Minumum All background Transmission blinds=30
Files select
Holer
Holder C:¥tmp2¥Plus¥cube
Rename C:¥tmp2¥Plus¥goss
Rename_delete
Calcration Condition
Previous Next C¥tmp2¥Plus¥brass¥111_RASC 1,1,1 Change □ +α 5 ✓ Arithmetic mean ✓ Disp
Backgroud delete mode
C DoubleMod SingleMode CowMode HighMode Nothing Minimum(αβ) MiniAver X 1.0 Set Disp
AbsCalc
Ref Trans Schulz reflection method V Change Absorption coefficien 1.0 1/cm Thickness 1.0 cm V Set 2Theta 0.0 deg. O 1/Kt Profile
Defocus file Select Transmission defocus HKL+T
Kormalization Polynomialdegr O TencklhoffFitting TXT2 C+timp2#Al_random#defocus#DEFUCUS_NOTINORM_F.1XT1 IextUsp Ut lead IextUsp Ut lead
Smoothine(for AUC) CenterData Cen
ValueODF-B ValuODF-A Cancel Calc Connect Average ODF File AllODFFiles
Select crystal : Cubic 25/05/07
Filemake success!! CTRHome : C:
ODFFileから各種 ODF 向けファイル作成画面
File Option Symmetric Software Data Help
Lattice constant Initialize
Material A-Iron-Measure-IntegralData.txt Start
Structure Code(Symmetries after Schoenfiles) Cif 7 - O (cubic) 🛛 O getHKL<-Filena
\square Center α =0
a 1.0 <=b 1.0 <=c 1.0 alpha 90.0 beta 90.0 gamm 90.0

h,k,l

1,1,1

2,0,0

2,2,0

2,1,0

2,1,1

3,1,1

4,0,0

3,3,1

4,2,2

Epf file save

2Theta

0.0

0.0

0.0

0.0

0.0

0.0

0.0

0.0

0.0

Alpha scope

0.0->75.0

0.0->75.0

0.0->75.0

AlphaS AlphaE Select

75.0

75.0

75.0

0.0

0.0

0.0

0.0

0.0

0.0

 \sim

 \sim

 \sim

 \Box

 \Box

 \Box

 \Box

 \Box

 \Box

0.0

0.0

0.0

0.0

0.0

0.0

0.0

0.0

0.0

Labotex(EPF),popLA(RAW) filename

labotexCCW

chU_4Averageは4ファイルの平均値を表しています。

PF Holder

PF Data-

2

2 2

2

2

2

2

2

Comment

Symmetric type Full

C:¥tmp2¥Plus¥brass

111_R_chU_4Average_2.TXT

200_R_chU_4Average_2.TXT

220_R_chU_4Average_2.TXT

SelectFile(TXT(b,intens),TXT2(a,b,intens.))

CenterData

🗿 Average

一括ODF処理

平均化でではなく、指定したホルダデータからODF向けファイル作成は

ODFPoleFigure1.5S (2S)、Averageではなく、ALLODFFiles で作成する。

ODFPoleFigure1.5S

ValueODF-B ValuODF-A	Cancel Calc Connect	Average ODF File	AllODFFiles
ODFPoleFigure2S			
Normalization CenterData Ou CTR Connect Average	tFiles ASC () MTexAsc () Ras () TXT ()	Cancel	Calc Connect
ValueO DFVF-B	ValueODFVF-A	Exit&ODF ODF	ALLODFFiles
	CTRHome : C:	Select crystal : Cubic	25/05/07

事前に ODF の選択を行って置く

PF to StandardODF by CTR PF	toODF3 9.00 by CTR PDuse	er CTR CTR			-	
Condition save	tware Data Help				Initialize	+-++
Exit metric	-Measure-IntegralData.txt	cif 7 - 0 (cu	ubic)	~	o gotHKI/-	Filena
a 1.0 b 1.0	c 1.0 alpha	90.0 beta	90.0 gai	mm 90.0		rnena :=0
PF Holder					AllFlie	eSel
Ph Data	h intene) TVT9(2 h intene)))Thota			
	u,intens), I A I 2(d,u,intens))	1,0,0	0.0		Alphas AlphaE	Select
		1,1,0	0.0		0.0 0.0	
		2,0,0	0.0		0.0 0.0	
		2,1,0	0.0			
		2,1,1	0.0			
		3,1,1	0.0			
		3.3.1	0.0			
		4,2,2	0.0			
Comment						
	CenterData			Labotex(E	PF),popLA(RAW) 1	filename –
Symmetric typeFull	• Average	StandardO	DF text	labote	xCCW	