random成分が含まれないサンプルのVolumeFraction解析1

202年02月03日 *HelperTex Office*

- 1. 概要
- 2. 解析に使用する極点データ
- 3. 極点処理
 - 3.1 バックグランドデータの修正を行う
 - 3.2 defocus補正
 - 3.3 処理結果
 - 3.4 予測Rp%
- 4. 各種ODFソフト向けデータ作成
- 5. ODF 解析
 - 5. 1 LaboTexでrandom%計算
 - 5. 2 MTEXでrandom%を求める
 - 5.3 newODF (WIMV) でrandom%を求める
- 6. 基本的な方位
 - 6. 1 LaboTexのDataBase管理
- 7. LaboTexによるVolumeFraction計算
 - 7.1.1方位のズレ修正
 - 7. 1. 2 再度VolumeFractionを求める
 - 7.1.3 Rp%確認
 - 7. 1. 4 random%の確認
 - 7. 1. 5 解析されたVolumeFraction

1. 概要

極点図の解析において方位の定量(VolumeFraction(VF%))も重要な解析手段である が、報告例は少ない。本資料は実サンプルを例に手法の説明を行う。 解析手法は、正確なバックグランド測定を行い、バックグランド除去とdefocus補正を 行い、ODF解析を行う。VF%の打ち切りは解析したODFから予めrandom%を計算し、 VF%の残差(backgroud)がrandom%と一致したら終了

VF%の評価は

ODF解析による再計算極点図の一致度Rp%評価
 VF%より計算されたrandom%の一致
 極点図から計算したODF図とVF%で計算したODF図の一致
 により評価します。

copperが1% (VF%=1%)、他はreandom



ODF 図表示の等高線部分



randomlprofileで表示する (GPODFDisplayの機能)













3. 極点処理

3.1 バックグランドデータの修正を行う

本データの場合、defocusモードと相性が良い



defocusモードは通常、極点図の中心付近データを一致致させるがバラツク場合変更する。



3.2 defocus補正







3.3 処理結果





3.4 予測Rp%



d e f o c u s 補正が不足するとこの部分が外側に向けて低下する。 上のデータは極点図の中心から外側に向け、ほぼフラット 判断基準の±1.5%以内であり、良いデータと判断される

4. 各種ODFソフト向けデータ作成

Material Aluminum.txt				Initialize	Start
Structure Code(Symmetries after Schoenfiles) Cif	7 - 0 (cubic	.) .0 ga		o geti	HKL<-Filename AllFileSelect
Holder L¥DATA¥test¥data2¥Aluminum-H					
Data SelectFile(TXT(b,intens),TXT2(a,b,intens.))	h,k,l	2Theta	Alpha scope	AlphaS A	IphaE Select
2 111_chB02D1S_2.TXT	1,1,1	38.5	0.0->75.0	0.0	75.0 🔽
200_chB02D1S_2.TXT	2,0,0	44.73	0.0->75.0	0.0	75.0 🔽
220_chB02D1S_2.TXT	2,2,0	65.1	0.0->75.0	0.0	75.0 🔽
	2,1,0	0.0]	0.0	0.0
	2,1,1	0.0		0.0	0.0
2	3,1,1	0.0		0.0	0.0
	4,0,0	0.0]	0.0	0.0
2	3,3,1	0.0		0.0	0.0
	4,2,2	0.0]	0.0	0.0
2	5,1,1	0.0		0.0	0.0
	5,2,1	0.0]	0.0	0.0
2	5,3,1	0.0		0.0	0.0
Comment					
CenterData			Labotex(E	PF),popLA(I	RAW) filename

111_chB02D1S_2.TXT	1,1,1	38.5 0.0->75.0
200_chB02D1S_2.TXT	2,0,0	44.73 0.0->75.0
220_chB02D1S_2.TXT	2,2,0	65.1 0.0->75.0

B:バックグランド処理、D:defocus処理、S:規格化、 $2:(\alpha 、 \beta 、 I)$ データ

名前	~ 更新日時	種類	サイズ
LaboTex	2023/02/02 5:17	ファイル フォルダー	
StandardODF	2023/02/02 5:17	ファイル フォルダー	
TexTools	2023/02/02 5:18	ファイル フォルダー	
popLA	2023/02/02 5:18	ファイル フォルダー	
MTEX	2023/02/02 5:18	ファイル フォルダー	
newODF	2023/02/02 5:18	ファイル フォルダー	
111.ASC	2014/03/15 8:42	ASC ファイル	22 KB
200.ASC	2014/03/15 8:42	ASC ファイル	22 KB
220.ASC	2014/03/15 8:42	ASC ファイル	22 KB
Multi.txt	2023/02/02 4:59	テキスト ドキュメント	1 KB
DefocusMulti.txt	2023/02/02 5:02	テキスト ドキュメント	1 KB
111_chB02D1S_2.TXT	2023/02/02 5:07	テキスト ドキュメント	36 KB
200_chB02D1S_2.TXT	2023/02/02 5:07	テキスト ドキュメント	36 KB
220_chB02D1S_2.TXT	2023/02/02 5:07	テキストドキュメント	35 KB

測定データホルダに各種 ODF 向けデータ作成

5. ODF 解析



Rp%は2. 6%で基準内、random%=1%、ほぼ含まれていないと考えます。 ODFの状態は β – f i b e r であるが c o p p e r はシフトしている。









R p %に乱れがあるが、ほぼ±1.5% r a n d o m % = 2%

RP因子=17.54 ステータス:十分な数の測定極点図から計算



Rp%も基準内、random%=0%



6. 1 LaboTexのDataBase管理

LaboTexでは、方位のDataBaseの設定があり、VolumeFrcationを求める 場合、DataBaseに登録されている方位が対象になります。 User別に管理されます。

1/4対称でVF%を求める場合、複数登録されているS方位とR方位の削除を行います。

L	aboT	ex - tes	t10 L	lser												
File	Edi	t Viev	N C	alcul	ation	Analy	ysis N	/odellir	ig	Help						
۱	·ŀ		۲.				Orient	tations /	Ana	alysis						
	_				_		Show	PF(s) or	r/ar	nd ODF((s) Va	ue(s)			
							Choos	e (HKL)	[U\	vw]						
							Max.	Value of	Mi	iller Indi	ice					
							.		-							
							Orient	tations	lyp	e Datab	ase			 		
Orie	ntatio	ns Type	Datal	oase			N.	h (O - i				×				
	rystar : Fr	ymmetry Yubio	syste	ms				ber or Un	enta	adons						
	J.	JUDIC			-				22							
_ □ D	ataba	se										1				
	No	Orienta	ation T	уре N	ame		φ.	h 9	þ	φ ₂						
	14	{ 2 3 ;	3 }< 0	1-1	>		-113.09	9 50.2	4	33.69						
	15	$\{1,1\}$	1 X U フレ 1	1-1 -1-0	>		-120.00	J 54.7 35.2	4 6	45.00 45.00						
	17	<u>{ 1 2 :</u>	3 k 4	1-2	>		-46.91	36.7	ō	26.57						
	18	$\{1 2; 1 2; 1 2; 1 2; 1 2; 1 2; 1 2; 1 2;$	3)< 4	1-2	> R		-46.91	36.7	0	26.57						
	20	$\frac{1}{2}$	2 /K B 1 k 3	-4 3	> 5-1 > S-2		52.87	74.5	9 0	33.69						
	21	{21:	3 (x - 3	-64	> S-3		58.98	36.7	ō	63.43						
	22	{23	1 k -3	4 -6	> S-4		-127.13	3 74.5	٥	33.69						
	[Delete		E	dit		New	Ne	w {ŀ	HKL} <uv< th=""><th>W></th><th></th><th></th><th></th><th></th><th></th></uv<>	W>					
	Irientat	ion Euler	Anale	s								1				
Ē	Fibe	r Osianti					ρ_1		Φ	1	P2					
		Urienta Angle Pa	ation i art	уре ім	ame Name	 • (-360 - 36	: (-180	- 18	0) (-360 -	360)					
R	(0.0	, 0.0,	0.0}		riani				10		500)					
				Add/	'Change		Car	icel								
						Close										
				-												

新しく、

 $\{\,0\ 1\ 2\,\}\ <1\ 0\ 0>Q\ 1\,,\ \{\,0\ 1\ 3\,\}\ <0-3\ 1>,\ \{\,1\ 1\ 4\,\}\ <-1-7\ 2>,$

{4411} <-11-118>を追加

必要により、方位を追加します。

16 { 17 { 18 { 19 { 20 { 21 { 22 {	1 1 2 1 2 3 1 2 3 1 3 2 0 1 2 0 1 2 0 1 3 1 1 4 4 4 11 *	1 -1 0> 4 1-2> R 6 -4 3> S-1 1 0 0> 0 -3 1> -1 -7 2> (-11 -11 8> Taylor	0.00 -46.91 27.03 0.00 90.00 54.74 90.00	35.26 36.70 57.69 26.57 18.43 19.47 27.21	45.00 26.57 18.43 0.00 0.00 45.00 45.00	
De	lete	Edit	New	New {	HKL} <uvw></uvw>	

- 7. LaboTexによるVolumeFraction計算
- 7.1.1方位のズレ修正

LaboTex - N	EWT User														
File Edit View	w Calcul	ation A	nalysis	Modellin	ng Hel	р							\frown		
			1 /	? 🗉		T E		i in d		v	J 👗	*	N A R 🕦 i ⊿	1 2D 3D 🥰)#
← †bc	↓→	Step	5.00	: <mark>%</mark> =	0.0	00	: <mark>Ф=</mark>	0.00	∴ <mark>%</mark> 2=	0.00	HKL	(0		[100]
	Quantitat	ive Analy	rsis - Moo	del Functi	ions Met	thod	- Project	: Demo S	ample:AIH0	0 Job:1			/		×
		Symmetry			Sample S) ymme	etry		Grid Cells	for Output OI	DF	/	Step	0.50	
		(Cut	nc)		Jui	rthorn	ombic	<u> </u>		J5.0	"0.U		Diagram Range +/	45.0	
	100.0%		Compone	entNo 1.		10	0.0%	С		- 1.	100.0)%	Component No 1	·	, <mark>q</mark> t
															-
			<u> </u>			-	-	—Ţ			-	_		/	
4	0	.50 <mark>F</mark>	NHM 🔑 :	10.0	4	1 5.0	0.5	O <mark>fw</mark>	н <mark>мФ</mark> = 1	0.0	45.0	0.5	0 <mark>F¥HM 🖗</mark> = 10.0	45.0	
	No	Tex	dure Com	oonent		On	Distributi	on <mark>FWH</mark>	M 🚧 FWHM	<mark>IФ</mark> F¥HM	<mark>%</mark> Volume Fractio	e n	Show Sym. E	q.	
	1 {	0 1 3}	0-31:	>	~	\square	Gauss	- 10.0	10.0	10.0	17	%	{013}<0-31>	•	- -
	2 {	4 4 11 }	<-11-11	8 > Taylor	~	\square	Gauss	- 10.0	10.0	10.0	16	%	- Calculation Mode		_ [[
	3 {	1 1 0 }	(1-1-2)	> brass	~	\square	Gauss	- 10.0	10.0	10.0	14	%	Automatic	C Manual	
	4	1 3 2 }	6 -4 3	> S-1	-	\square	Gauss	- 10.0	10.0	10.0	12	%	*S Automatic		
	5 {	0 1 2 }	(1 0 0)	>	-	\square	Gauss	- 10.0	10.0	10.0	10	%	Max. Iteration Number :	1,000	3
	6 {	1 1 4 }	(-1 -7 2)	>	~	\square	Gauss	- 10.0	10.0	10.0	9	%	Max. Fit Error % (*1000)	100	3 ²
1 Jac	7 {	013}	<100	>	-	\square	Gauss	- 10.0	10.0	10.0	9	%			-
	8 {	1 2 3 }	(4 1-2)	> R	Ψ.	\square	Gauss	- 10.0	10.0	10.0	4	%	Iteration :		- 11
	9 {	1 1 0 }	0 0 1:	> goss	~	\square	Gauss	- 10.0	10.0	10.0	3	%	Fit Error% (*1000) :		
	10 {	1 1 2 }	(1.1-1)	> copper	Ŧ	${\bf \boxtimes}$	Gauss	- 10.0	10.0	10.0	2	%	Fit Calculation	Progress	
										Packgroup	4 6	~			
	I Ma Lineari	x. ity Orier	itation Set	Set from	r Databa	se (su	rt by 💌	Save (Current Set	Backgroun	a 4	~			

VolumeFraction選択で可能性の高い方位順に表示される。最大10本であり、とりあえず、計算を行う

一度計算したら、確認のため、 ExitShow

S 方位とcopper方位はズレ易い

copper

Quanti	Quantitative Analysis - Model Functions Method - Project: Demo Sample:AIH00 Job:1													
Crys	al Symmetry Sam O (Cubic)	ple Symm Orthori	netry nombic	Gr	id Cells for (Dutput ODF	0	-	Step Diagram Range +	0.50 /- 45.0				
100.09 Misfit Good Backo Diff.	Component No 10.	1	00.0%	Component No 10. 100.0%					Component No 11	<u>.</u> 				
	-45.0	45.0	-45.0			45	.0	-45.0	I	45.0				
No	Texture Component	On	Distribution	n <mark>FWHM (2</mark> 4	г₩нмФ	FWHM 🖗	Volume Fraction		Show Sym. E	iq.				
1	{013}<0-31>	–	Gauss 🕞	19.6	20.3	19.9	14	%	{1 1 2}< 1 1.1>	copper 💌				
2	{ 4 411}<-11-118>Taylor	–	Gauss 🚽	20.2	19.6	19.8	10	%	Calculation Mode					
3	{ 1 1 0 }< 1 -1 2 > brass	▼ √	Gauss 📼	19.8	19.8	19.8	12	%	Automatic	C Manual				
4	{ 1 3 2 }< 6 -4 3 > S-1	–	Gauss 🕞	19.9	19.7	19.8	14	%						
5	{012}<100>	- V	Gauss 🕞	20.0	19.9	19.9	3	%	Max. Iteration Number	: 1,000 🕂				
6	{ 1 1 4 }< -1 -7 2 >	- V	Gauss 🔄	19.8	19.9	19.9	13	%	Max. Fit Error % (*1000)	: 100 🛨				
7	{013}<100>	- IV	Gauss 🕞	19.9	20.0	19.9	10	%		1001				
8	{ 1 2 3}< 4 1-2> R	- V	Gauss 🔄	19.9	19.9	19.9	10	%	Iteration :	1001				
9	{110}<001> goss	-	Gauss 🦷	20.2	20.1	20.0	10	%	Fit Error% (*1000) :	84473.				
10	{ 1 1 2 }< 1 1 ·1 > copper	- IV	Gauss 🦷	20.0	19.9	20.0	3	%	Fit Calculatio	n Progress				
I I Line	Aax. Orientation Set Set from Data	tabase (s	ort by 👻	Save Currer	it Set	ackground	1	%						
Chang	e Initial Parameters Fix Angles I	Fix Fracti	ons	Start Volun	ne Fraction	Calculation		View F	Report Exit and Sho	w Exit				

Copper方位



修正方位



7. 1. 2 再度VolumeFractionを求める

Errorが安定し、backgroundが予め計算したrandom%になったら終了

Quantitative Analysis - Model Fun	actions Method - Project: Demo	o Sample:AIH00	Job:1	·		×
Crystal Symmetry	Sample Symmetry	Grid Cells fo	r Output ODF		Step	0.50
O (Cubic)			5.0×5.0	_	Diagram Range +/-	45.0
Component No	1. 100.0%	Component No	1. 100.03	2	Component No 1.	— 🖵 o
	100.0%		100.04	•	1	_ ~
Good						
Backgr.		- A				'
-45.0	45.0 -45.0		45.0	-45.0		45.0
No Texture Component	On Distribution F	whm <mark>窄</mark> Fwhm《	D FWHM # 2 Volume Eraction	,	Show Sym. Eq.	
1 { 2 2 5 }< -5 -5 4 >	👻 🗹 Gauss 👻	33.0 8.0	14.8 16	% {2	2 2 5 }< -5 -5 4 >	•
2 {0 1 3}<0 -3 1>	👻 🗹 Gauss 👻	15.2 29.9	19.7 15	[%] _ C	alculation Mode	
3 { 4 4 11 }<-11 -11 8 > Tay	lor 🖵 🔽 Gauss 🚽	27.5 22.5	24.5 2	%	 Automatic O 	Manual
$\frac{4}{1} \{1 1 0 < 1 -1 2 > brass$	s 🚽 M Gauss 🚽	19.5 17.5	18.4 13	%		1 000
5 (0 1 2 × 1 0 0 ×		18.8 20.7	17.6 10	% Ма % М	x. Iteration Number : v. Eit Error % (×1000) - □	100 -
7 {1 1 4}<-1 -7 2>	Gauss V	16.1 21.3	18.0 17	% (Ma) %		
8 {013}<100>	🚽 🗹 Gauss 🖵	23.9 26.7	24.7 1	%	Iteration :	283
9 {1 2 3}< 4 1-2> R	👻 🔽 Gauss 👻	22.8 21.2	20.7 8	% ^{Fit}	Error% (*1000) :	72270.
10 { 1 1 0 }< 0 0 1 > goss	🚽 🗹 Gauss 🚽	27.1 24.8	16.5 4	*	Fit Calculation Pro	ogress
Max. Orientation Set Set f	rom Database (sort by 💌 🛛 Sav	e Current Set	Background 0	%		
Change Initial Parameters Fix Ang	gles Fix Fractions Sta	art Volume Fractio	n Calculation	View Repo	ort Exit and Show	Exit
LaboTex - NEWT User	1.02 11.1					– 🗆 X
			😵 🔤 A 🛛 R 😥 i 🖌	2D 3D 🧐	#	
CPF HPF RPF APF INV ODF J1 J2 J3 P1	P2	CPF NPF	RPF APF INY ODF J1J2J	3 191 19	φ	
	Al Le	1H00 evels	(b	16	24	AlH00 Levels
		20.3		- SL		20.3 18.9 17.6
		16.2 14.9				16.2
		13.5 12.2 9.5	 	2		13.5 12.2 9.5
		8.1 6.8				8.1 6.8
		5.4 4.1 2.7			<u>s</u>	2.4 4.1 2.7
		1.0 [ax=21.611		Ľ,		1.0 Max=12.714
	M 20	lin=0.001)23/02/03		9		Min=0.006 2023/02/03
				1		
	<u> </u>			2) `	7년 19	
		l h				Λ
	.) <u> </u>	90 [•] •1	2 67	(6		0 90 [►] ∳ 1
N IN 199	>>>>>>>>>>>>>>>>>>>>>>>>>>>>>>>>>>>>>>>	¢0-90 Δ-5.00	0 10		X	¢2=0-90 Δ=5.00
		°₽		_IPI	(((•0 ₩ ₽0
	ubic 🔹 Demo 🔹 AIHOO	0: 0: 19		0-Cub	nic 🔹 Demo 💌	

VF%から作成される極点図、ODF図をEXportし、Rp%, random%の確認

7.1.3 Rp%確認



7. 1. 4 random%の確認



Rp%は基準内、random%=0%で問題ありません。

7. 1. 5 解析されたVolumeFraction

LaboTe	ex2 > USER > NEWT.LAB > O-Cubic.LAB >	Demo.LAB > AIH00.LAB >	> Job03	~ C Joba
	名前 ^	更新日時	種類	サイズ
	AIH00.APF	2023/02/03 8:27	APF ファイル	6 KB
	AIH00.ODF	2023/02/03 8:24	ODF ファイル	27 KB
	AIH00.POD	2023/02/03 8:26	POD ファイル	2 KB

LaboTex - Texture - Quantitative Analysis Report User: NEWT Project: Demo Sample: AlHOO Job: 3 Date:2023/02/03 Time:08:26:48

Volume Fraction		F₩	HM Phi1	FWHM Phi	F۱	MHM Phi2			0	rien	tat	ior	1		
Component 16.01	No	1	- Distr 33 <u>.</u> 0	ibution : 8.0	Gauss	14.8	{	2	2	5	}<	-5	-5	4 >	
Component 14.93	No	2	- Distr 15.2	ibution: 29.9	Gauss	19.7	{	0	1	3	}<	0	-3	1 >	
Component 2.06	No No	3	- Distr 27.5	22.5	Gauss	24.5	{	4	4	11	}<-	11	-11	8 >	Taylo
12.94	No No	4 ह	- Distr 19.5	17.5	Gauss	18.4	{	1	1	0	}<	1	-1	2 >	brass
13.95	No	U A	- Distr 17.2	11.5 ibution	Gauss	14.5	{	1	3	2	}<	6	-4	3 >	S-1
9.94 Component	No	7	18.8 - Distr	20.7	Gauss	17.6	{	0	1	2	}<	1	0	0 >	
17.04	No	8	16.1 - Distr	21.3	Gauss	18.0	{	1	1	4	}<	-1	-7	2 >	
1.02 Component	No	9	23.9 - Distr	26.7 ibution :	Gauss	24.7	{	0	1	3	}<	1	0	0 >	
7.99 Component	No	10	22.8 - Distr	21.2 ibution:	Gauss	20.7	{	1	2	3	}<	4	1	-2 >	R
3.50		_	27.1	24.8		16.5	{	1	1	0	}<	0	0	1>	goss

