

簡易配向度評価ソフトウェア

NDOrientationソフトウェア

Ver.1.13

2024年10月31日



HelperTex Office

<http://www.geocities.jp/helpertex2>

ご質問は hepertex@yahoo.co.jp まで

* <p>タイトル: 簡易配向度計算</p>

* <p>説明: 「粉末および粉末冶金」第50巻第1号2003年1月高木氏らによる手法</p>

* <p>著作権: Copyright (c) 2011</p>

* <p>会社名: HelperTex</p>

* @version 1.004

* Version 1.001 j Builder9 の java1.4 では log10 が計算出来ないので計算エンジン ExpCalc を使う。

* Version 1.002 2011-02-06 Fittingcalc ON-OFF

* Version 1.003 2011-02-09 randomcheck 追加

* Version 1.004 2011-02-10 内部計算では,step を 1/100。ファイル名を MultiDFisplay に表示

*Version 1.005 2011-02-14 結果渡しの余裕を見て sleep 時間を変更

* Version 1.006 2011-06-17 計算式の分子を配向度関数と同じに出来るように変更

*Version 1.03X 2012-11-23 ドーナツ極点の中心部分を放物線で外挿

*Version 1.05M 2016/10/10 Kearns Method のサポート

*version 1.06M 2017/07/06 P%のまるめ

最小二乗に $\alpha=90$ データの選択

*Version 1.08 2023/01/01 NDOrientation,cos*cos 共に KearnsMethod で計算

*Version 1.10 2023/01/03 計算結果プロファイル表示

*Version 1.11 2023/04/03 入力データ切り出し追加

*Version1.13 2024/10/31 極点図 3D 表示から等高線表示に変更、ZERO 対策

概要

立方晶以外でC軸配向材料の簡易配向度評価ソフトウェアの提供を致します。

{001} 極点図の中心近くに極があり、極点図の周辺では指数関数的に強度が低減する材料に適用
例えば、六方晶のMgなど評価として使えます。

本ソフトウェアの計算ではrandom試料の場合50%で完全配向の場合は100%です。

極点処理などで計算しているF値ではrandomの場合Fa=0.3333になります。

極点図表示上の問題でWindowsXPは測定間隔は2.0度まで、Windows7では測定間隔1.0度は表示可能です。

指数関数に指定された範囲は、測定データと計算データを合成します。

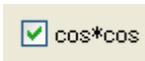
計算上、 $\alpha = 0$ では結果は0.0に評価されます。内部step拡張により計算可能になります。

計算式

従来（高木氏の論文）

$$\sum I_c(\alpha) * \cos(\alpha) * \sin(\alpha) / \sum I_c(\alpha) * \sin(\alpha)$$

配向度関数と同じ



$$\sum I_c(\alpha) * \cos^2(\alpha) * \sin(\alpha) / \sum I_c(\alpha) * \sin(\alpha)$$

どちらでも計算出来ます。

cos*cosの計算式を使うとrandomは33.33%になる。

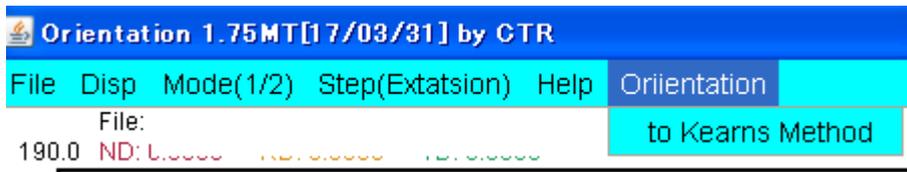
この値は、従来の配向関数Fa=0.333と符合する。

Kearns Method への切り換え

Orientation ソフトウェアの切り換えに従い、計算が行われる。

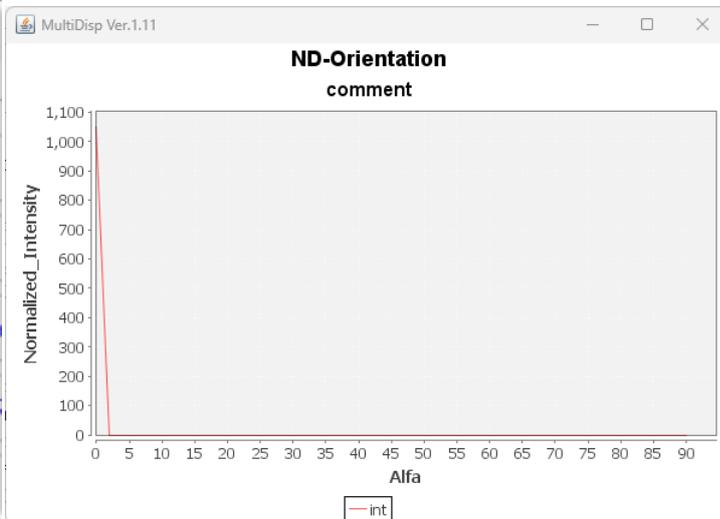
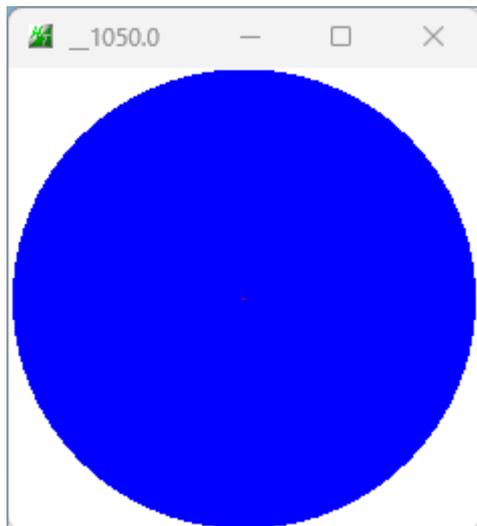
Orientation ソフトウェアによる Kearns Method への切り換え

メニューの Orientation 部分を Kearns Method に切り替える。



単結晶テスト

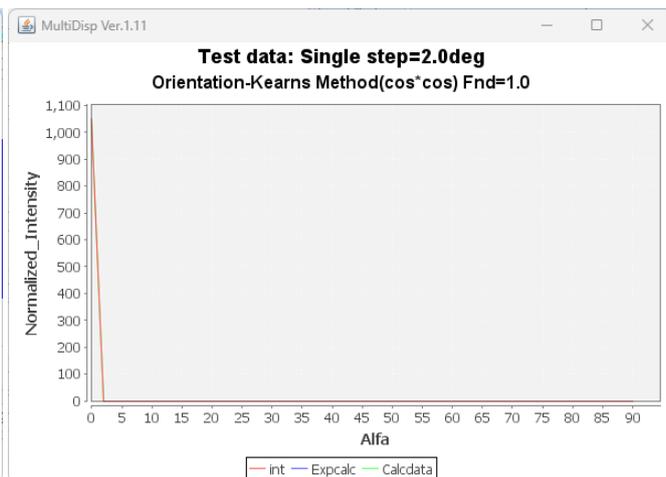
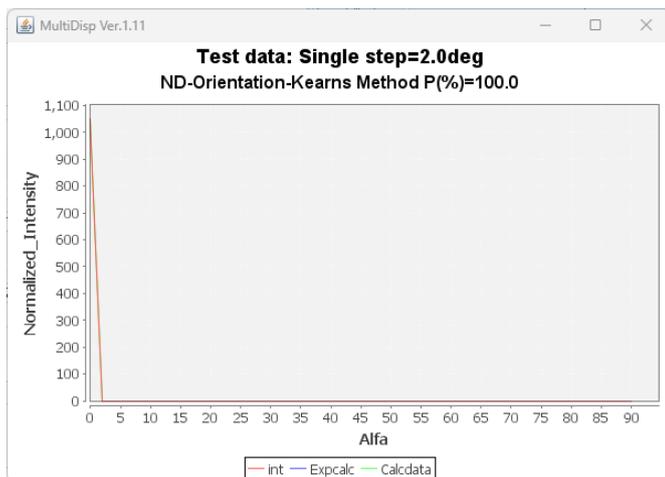
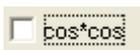
測定ステップ 2.0deg で $\alpha = 0$ が 1.0 の場合



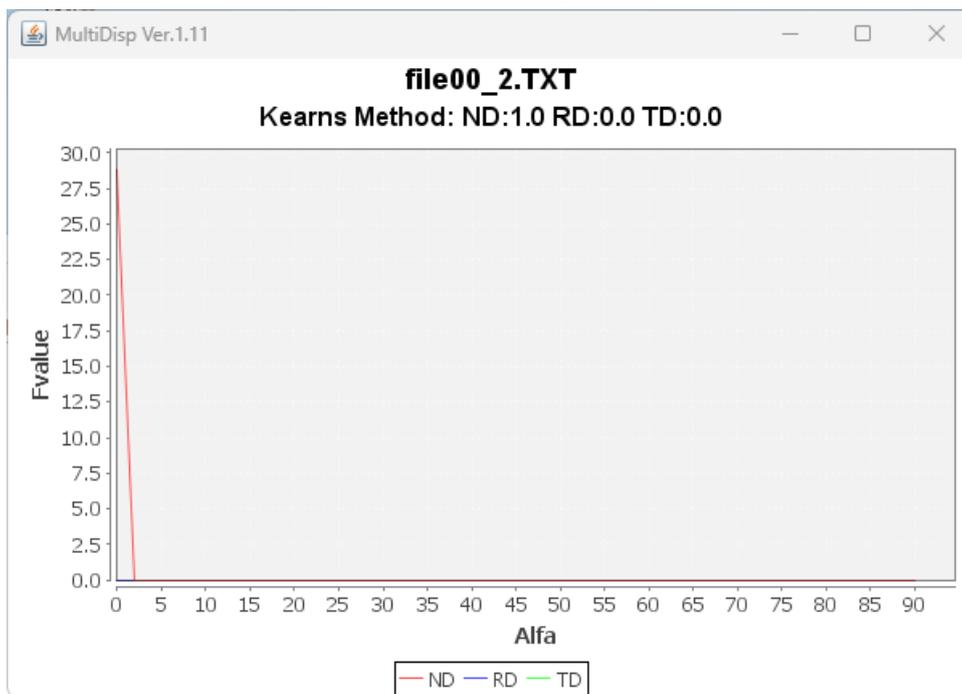
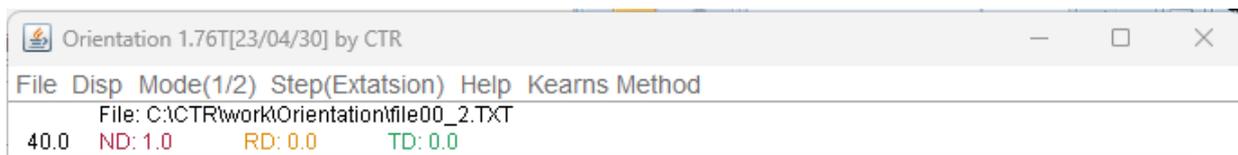
データが 0.0 から 90.0 までであるので、指数関数計算しないで C a l c

Fitting scope (Exp)

Fitting Calc start stop Include $\alpha=90$ data cos*cos Calc Orientation



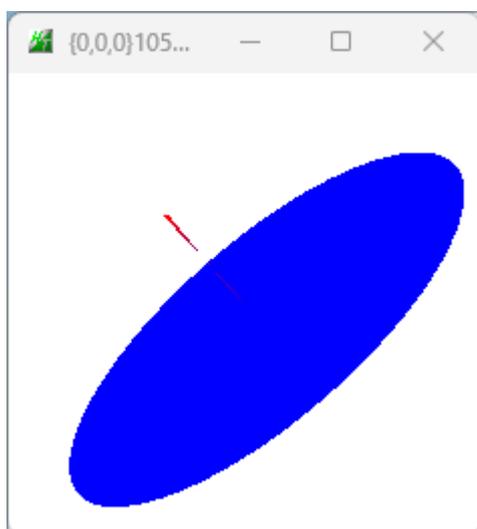
配向関数を計算するOrientationでは



配向関数の α に対する値が表示されています。

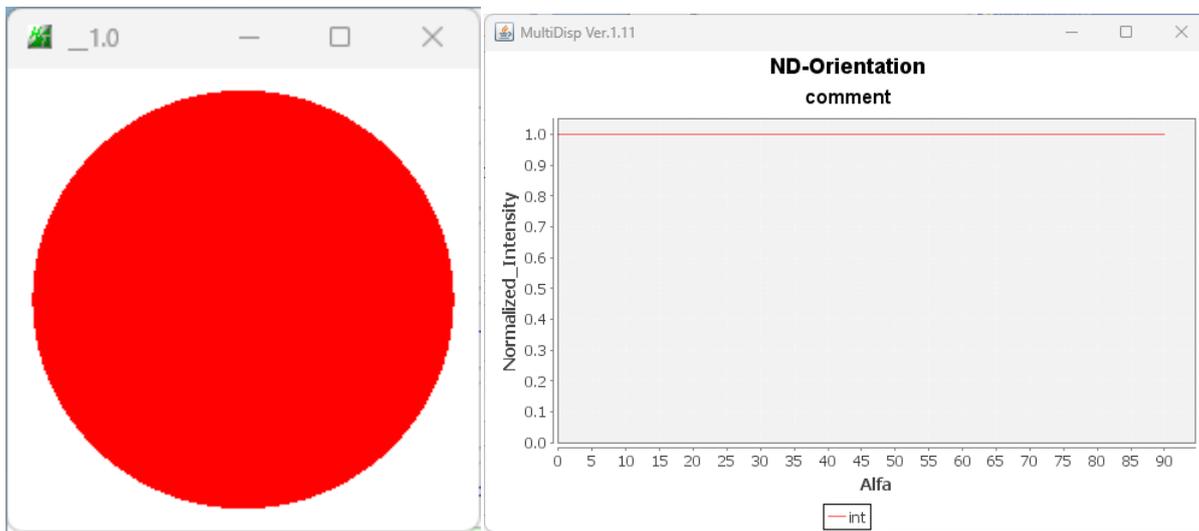


表示しているファイルを GPPoleDisplay で表示



でMax強度と NDOrientationMax が一致している。

random評価



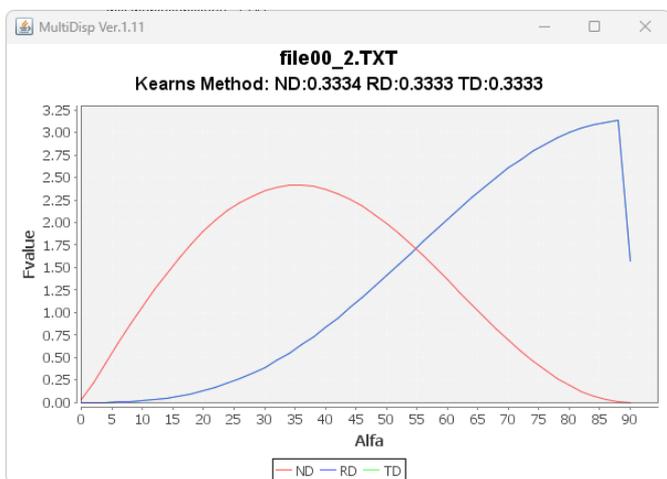
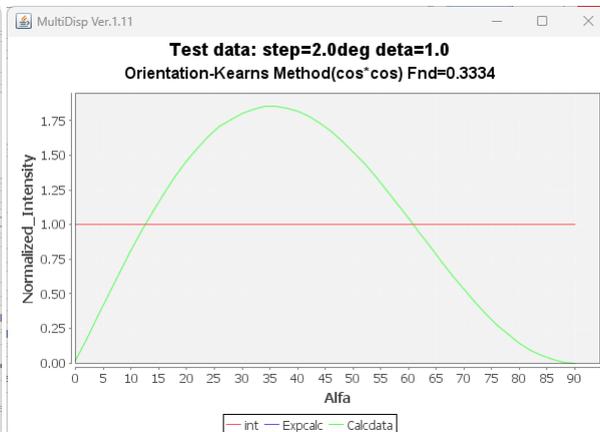
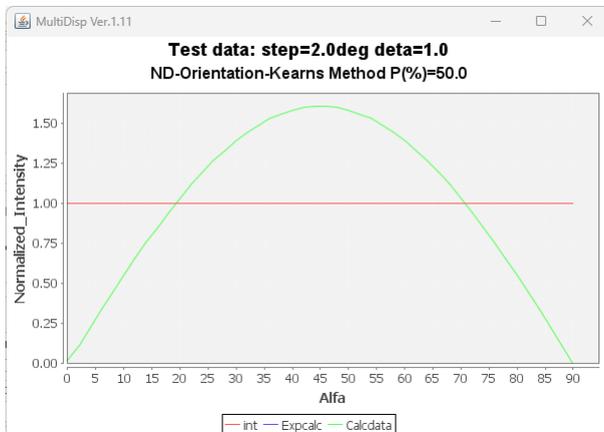
データが0.0から90.0までであるので、指数関数計算しないでCalc

Fitting scope (Exp)

Fitting Calc start stop Include $\alpha=90$ data cos*cos Calc Orientation

cos*cos

cos*cos



以上で単結晶の場合 簡易配向度では100% 配向関数では1.0
 random試料の場合 簡易配向度で50% 配向関数では0.333 (33.33%)
 と計算されることが分かります。

実際の試料 (MG)

データ処理

The screenshot shows the ODF PoleFigure 2S 4.07 software interface. The window title is "ODF PoleFigure 2S 4.07 [23/04/30] by CTR". The menu bar includes "File", "Linear(absolute)3D", "ToolKit", "Help", "InitSet", "BGMode", "Measure", "Condition", "Free", "OverlapRevision", "MinimumMode", "Rp%", and "Normalization".

Files select: ASC(RINT-PC) | 002.ASC

Holder: Holder, Rename, Renamw-delete

Calculation Condition: L*Measure-Data*測定データ*材料-Mg*ND*Orientation#002.ASC | hkl: 0,0,2

Background delete mode: DoubleMo... SingleMode LowMode HighMode Nothing | BG defocus: DSH1.2mm*Schulz+RSH5mm

Smoothing: +α -α | 3 | Arithmetic mean | Disp

RD: 0.0 | Interpolation | Full | Disp

Peak slit: 7.0 mm | BG Slit: 7.0 mm | PeakSlit / BGS... | BG Scope: 80.0 deg, 90.0 deg | Set, SetAll, Disp, αInhibit

AbsCalc: Ref Trans | Schulz reflection method | Change | Absorption coefficient: 131.22 1/cm | Thickness: 0.08 cm | Set | 2Theta: 34.398 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 backdefocus): BB185mm | Limit Alfa Defocus value: Free(LimitValue=0.0)

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

Smoothing for ADC: Cycles: 2 | Weight: 10 | Disp

Normalization: CTR Connect | Average

OutFiles: Asc MTextAsc Ras TXT TXT2

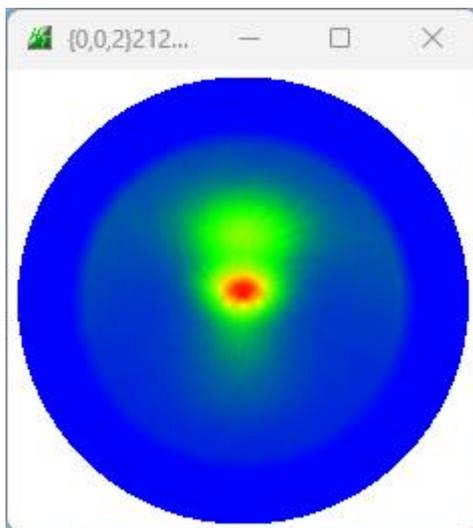
Buttons: Cancel, Calc, Connect

ValueODFVF-B, ValueODFVF-A, Average, Exr&ODF, ODF, ALLODFfiles

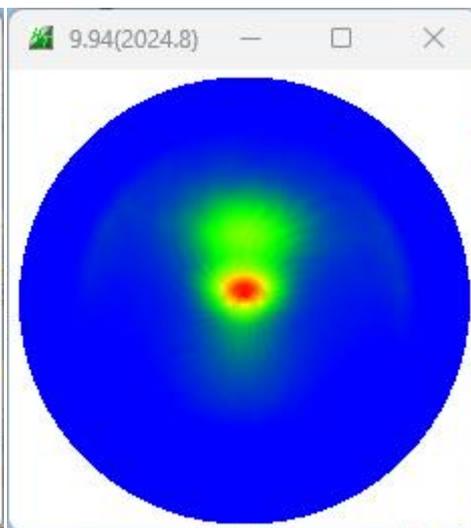
CTRHome : C: | Select crystal : Hexagonal | 23/01/03

処理前

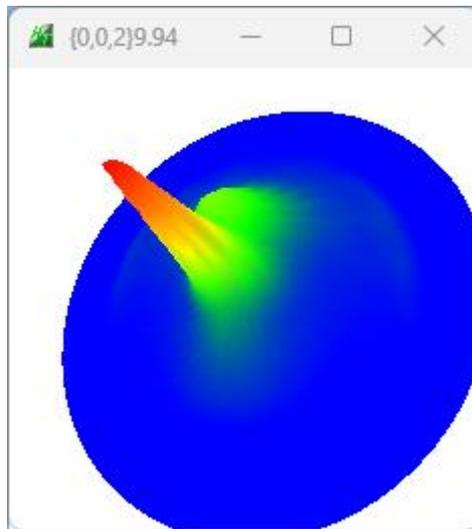
処理後



ASCファイル



TXT2ファイル



NDOrientation

NDOrientation 1.10T[23/04/30] by CTR

File Help

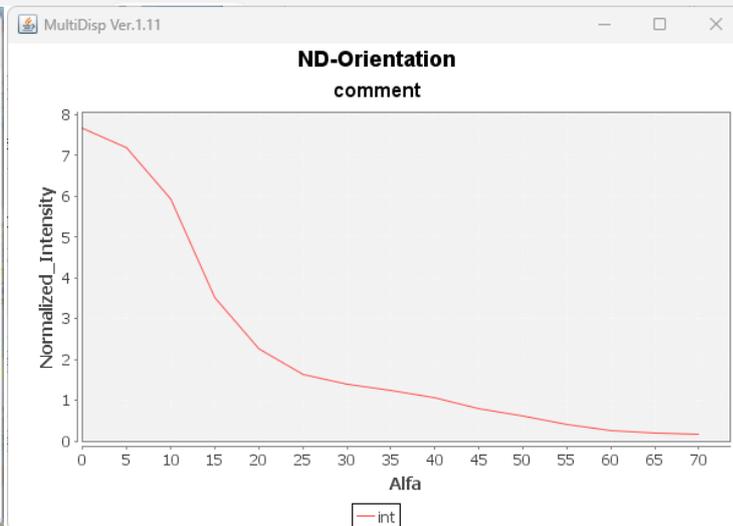
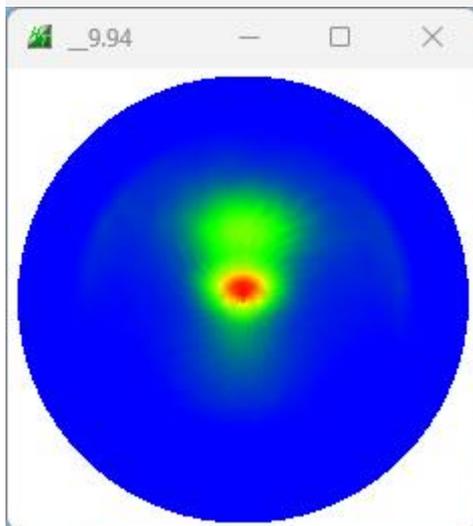
InputPoleFigureFile[TXT2 (alfa, beta, Intensity)]

L:\Measure-Data\測定データ\材料 - Mg\NDOrientation\002_chB20D2S_2.TXT

Fitting scope (Exp)

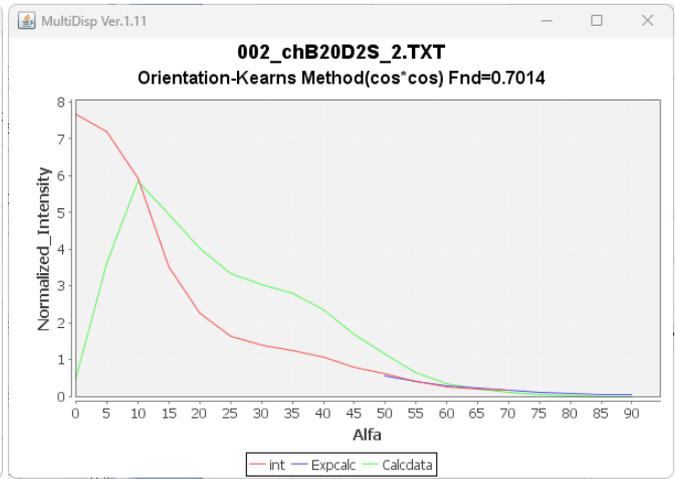
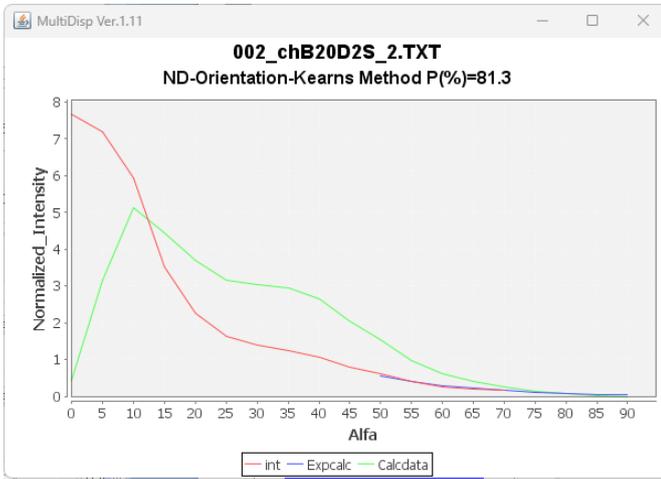
Fitting Calc start 50.0 stop 70.0 Include $\alpha=90$ data 890407 cos*cos Calc Orientation

かな オフ



cos*cos

cos*cos

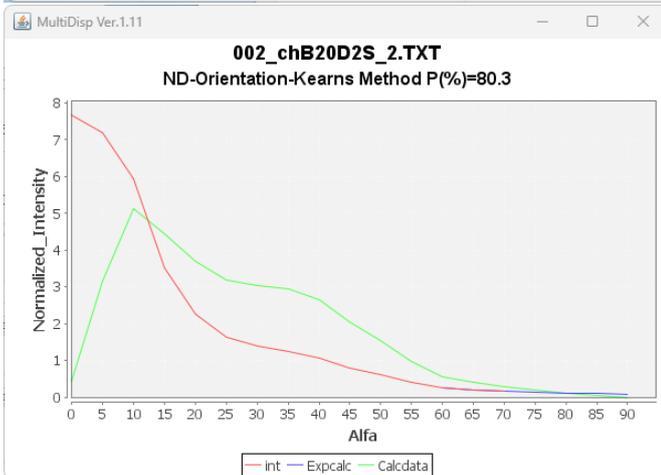


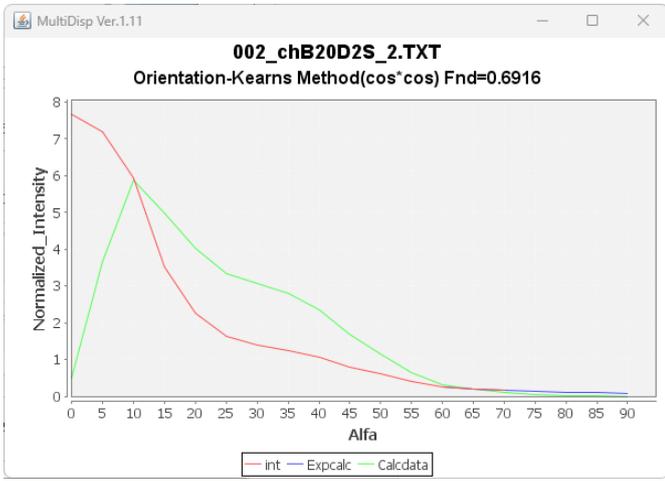
Calcddataは、入力で一たに規格化して表示しています。

データ接続の考え方

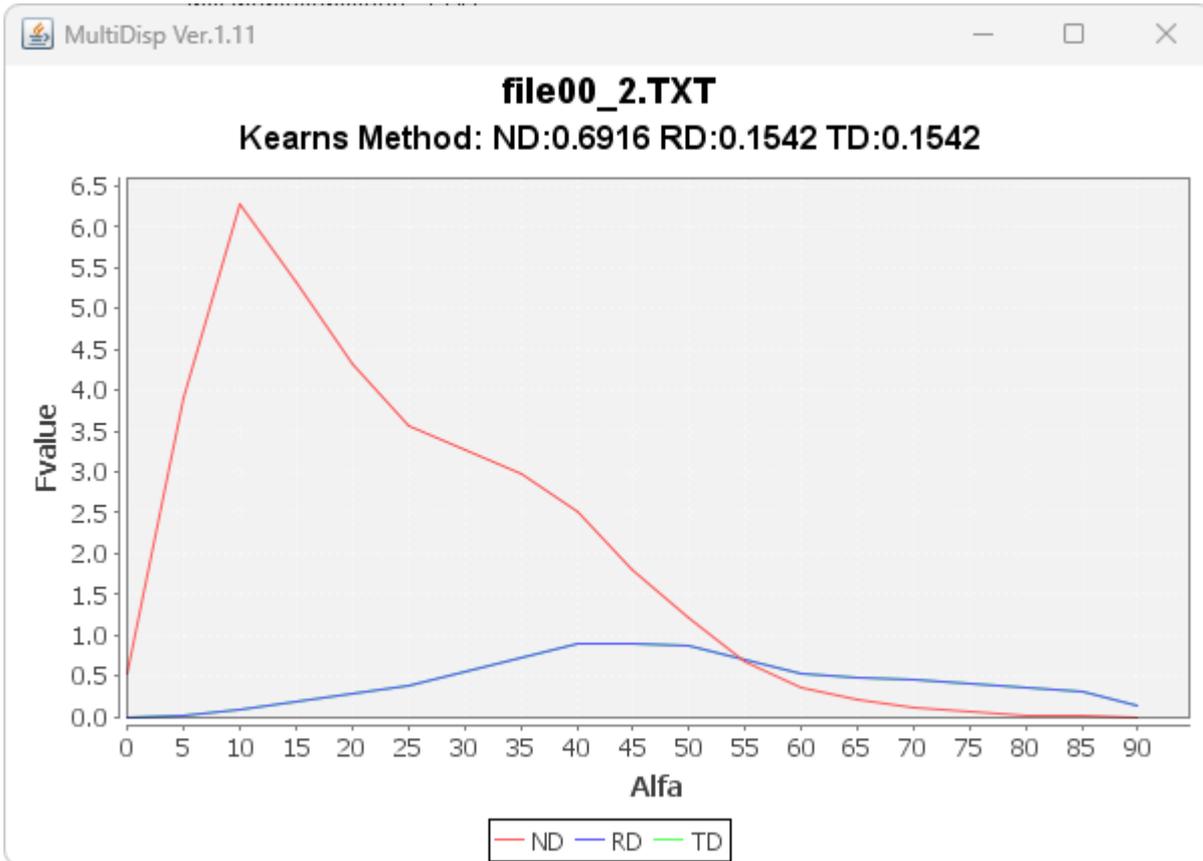
指数関数に適合出来る領域を探し、以下の手法でデータの合成を行っている。

測定領域0→70に対し60→70で処理した場合

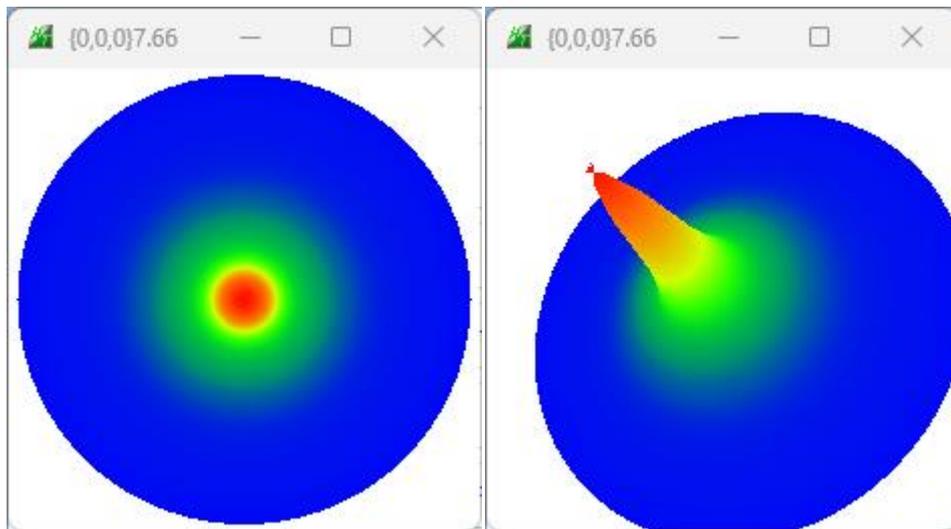




Orientation評価

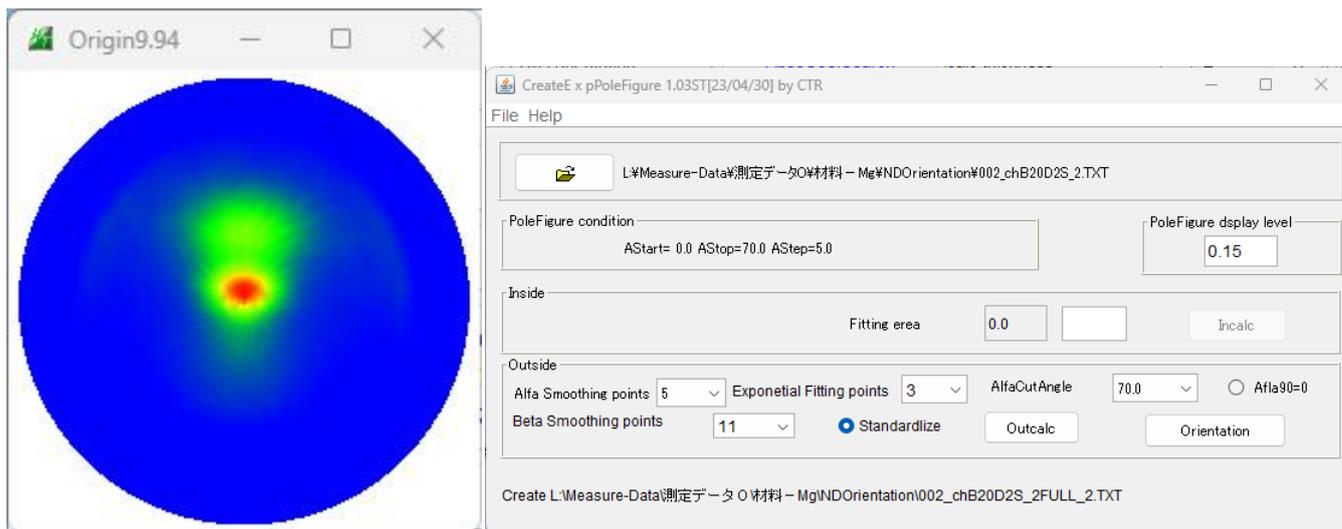


GPPoleDisplayで表示すると

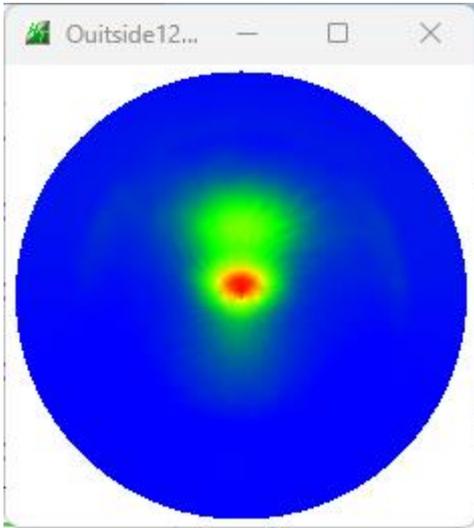


元データは中心から離れたデータであったが、 β 方向を平均化した為、極点図が中心位置になる。

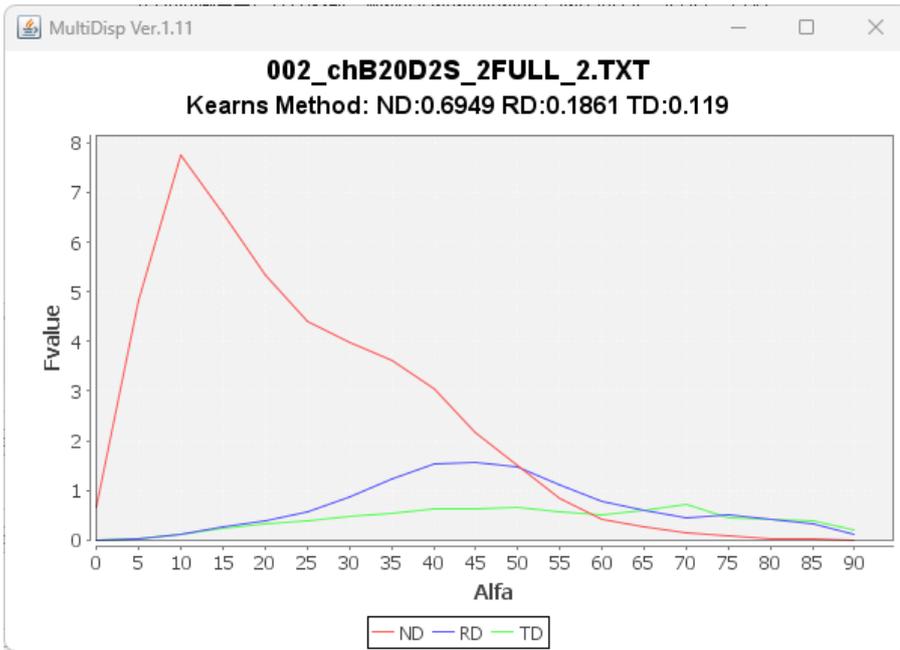
CreateExpPoleFigureで評価



極点図の外側を外挿すると



配向度関数を調べると



ND, TD, RDが計算される。

Ver 1.11による入力データの切り出し

NDOrientation 1.11T[23/12/31] by CTR

File Help

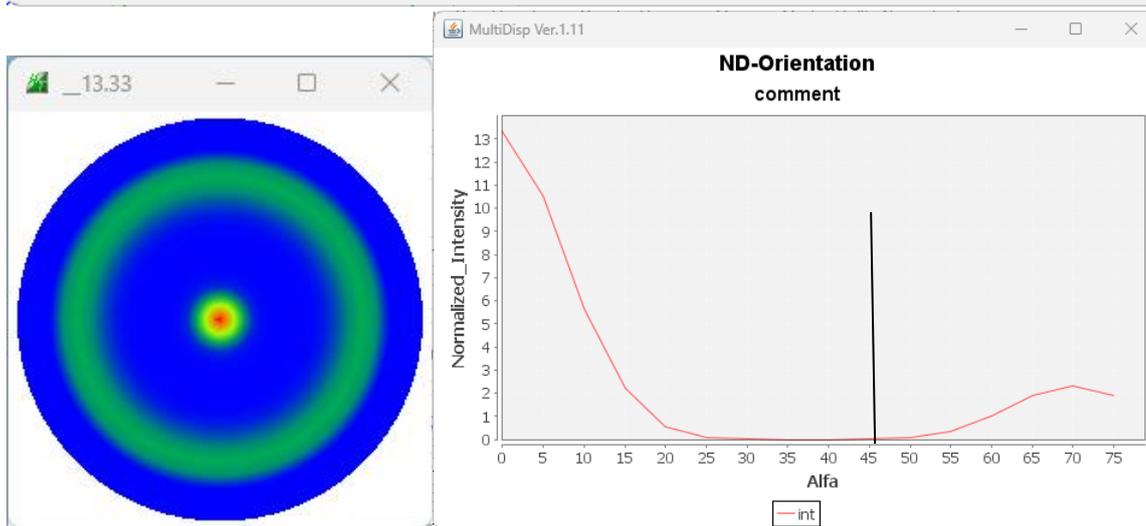
InputPoleFigureFile[TXT2 (alfa, beta, Intensity)]

 L:\DATA\CuFeS2薄膜#nonrandom#薄膜#112_F_2.TXT

DataArea start 0.0 stop 75.0

Fitting scope (Exp)

Fitting Calc start 55.0 stop 75.0 Include $\alpha=90$ data 999992 cos*cos



NDOrientation 1.11T[23/12/31] by CTR

File Help

InputPoleFigureFile[TXT2 (alfa, beta, Intensity)]

 C:\CTR\work\NDOrientation\cutfile.txt

DataArea start 0.0 stop 40.0

Fitting scope (Exp)

Fitting Calc start 20.0 stop 40.0 Include $\alpha=90$ data 0.0 cos*cos

