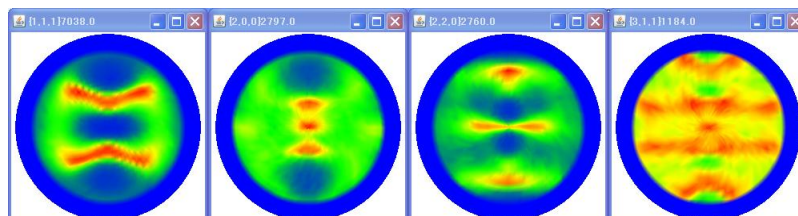


数多い試料から結晶方位の近いgroup化を行うために極点図をプロフィールに変換する

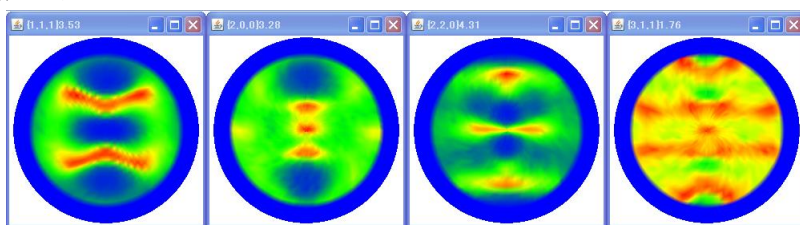
PoleFigure to Profileソフトウェア

Ver1.01M

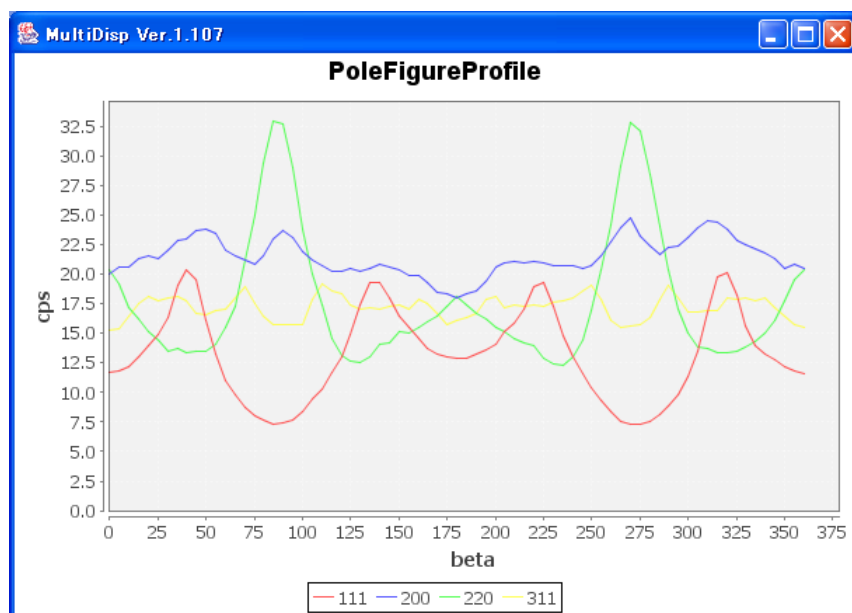
測定データ



データ処理データ



プロフィール加工



2016年09月22日



HelperTex Office

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

操作上、不都合がありましたら helpertex@yahoo.co.jp へ連絡下さい。修正版は mail で送付致します。

概要

大量なデータの整理や、蓄積したデータベースから、今測定したプロファイルと同じデータを検索するのにC l u s t e r 解析が行われている。

この手法を極点図に適用する目的で、データ処理済みの極点図からC l u s t e r 解析で扱えるフォーマットに変換するソフトウェアである。

データは、 β 軸に対し、 α 軸方向の平均値のプロファイルに加工する。

入力データは、極点データ処理であるODFP o l e F i g u r e 2 ソフトウェアが作成するT X T 2 フォーマットとする。

入力データ (T X T 2)

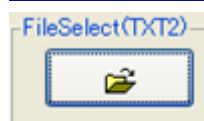
15.0	0.0	0.4267↓
15.0	5.0	0.4878↓
15.0	10.0	0.8341↓
15.0	15.0	1.5368↓
15.0	20.0	1.9951↓
15.0	25.0	1.4675↓
15.0	30.0	1.0887↓
15.0	35.0	0.9828↓
15.0	40.0	0.828↓
15.0	45.0	0.8504↓
15.0	50.0	0.7343↓
15.0	55.0	0.8361↓
15.0	60.0	0.9054↓
15.0	65.0	1.2496↓
15.0	70.0	1.5005↓

複数の極点図の場合、全ての極点図で条件が一致していること

α 軸の s t a r t , s t i p , s t e p

β 軸の s t a r t , s t o p , s t e p

更にC l u s t e r で検索する場合、全ての試料でも上記測定条件が一致させなければならない



同一 s a m p l e の複数の極点図を指定できる。
指定するファイルの先頭は指数であること

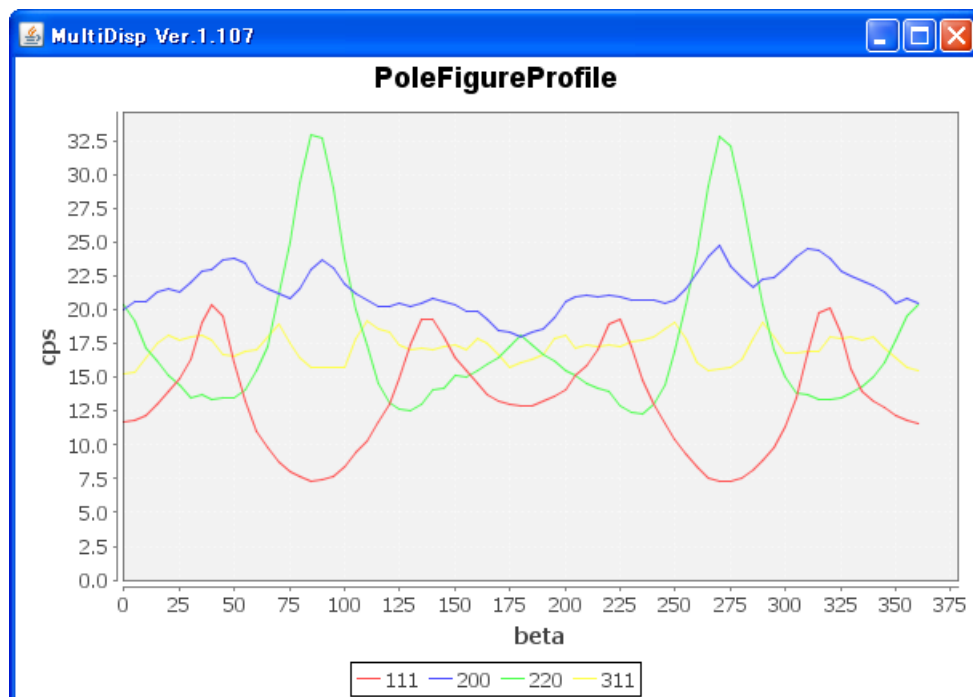
プロファイルを作成するディレクトリとファイルを指定

S t a r t, S t e p は入力データから表示される。

プロファイルの確認

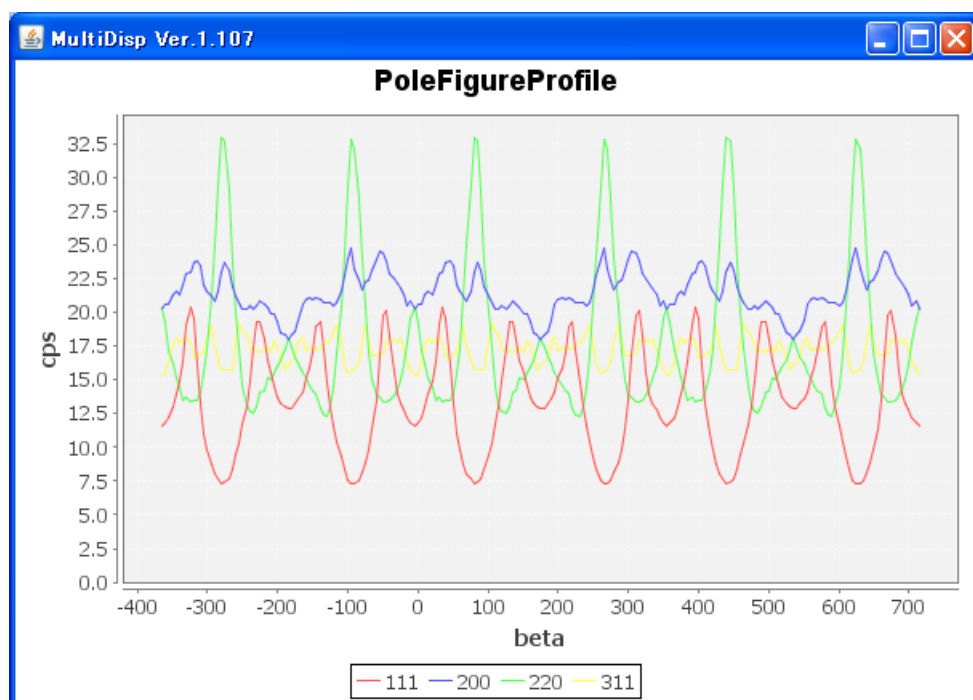
Separate		Connection	
☐ Standard	☐ Data Extension	☐ Standard	☐ Data Extension
Disp	Disp	Disp	Disp

Separate Standard Disp



各々の極点図で、 α 方向の積算を β 方向にプロファイルを作成

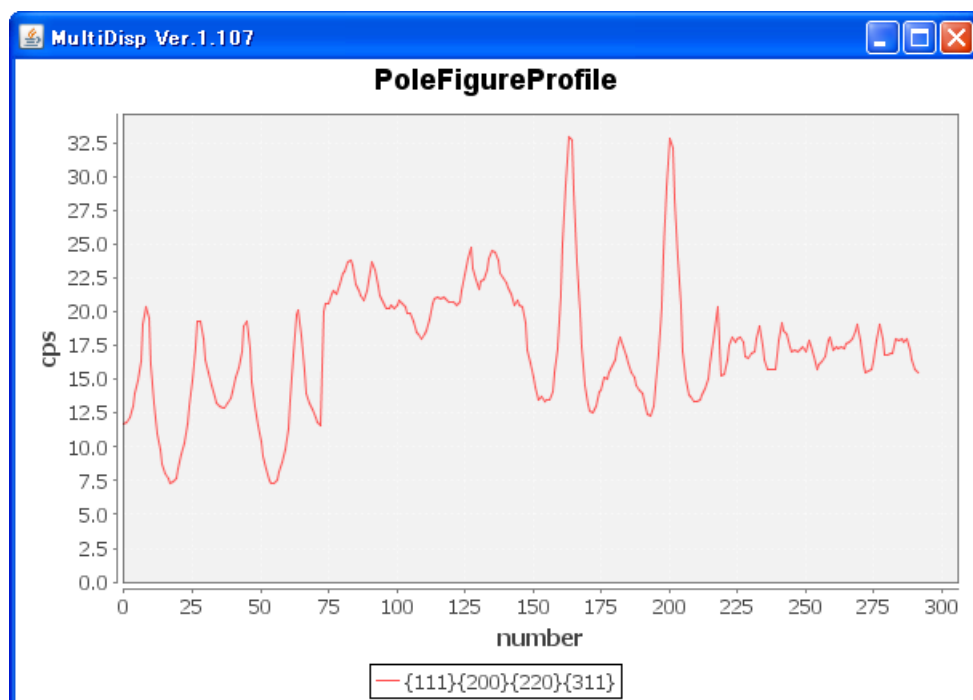
Separate DataExtension Disp



各々の極点図で、 α 方向の積算を β 方向にプロファイルを作成し、左右に1ブロック c o p y する。

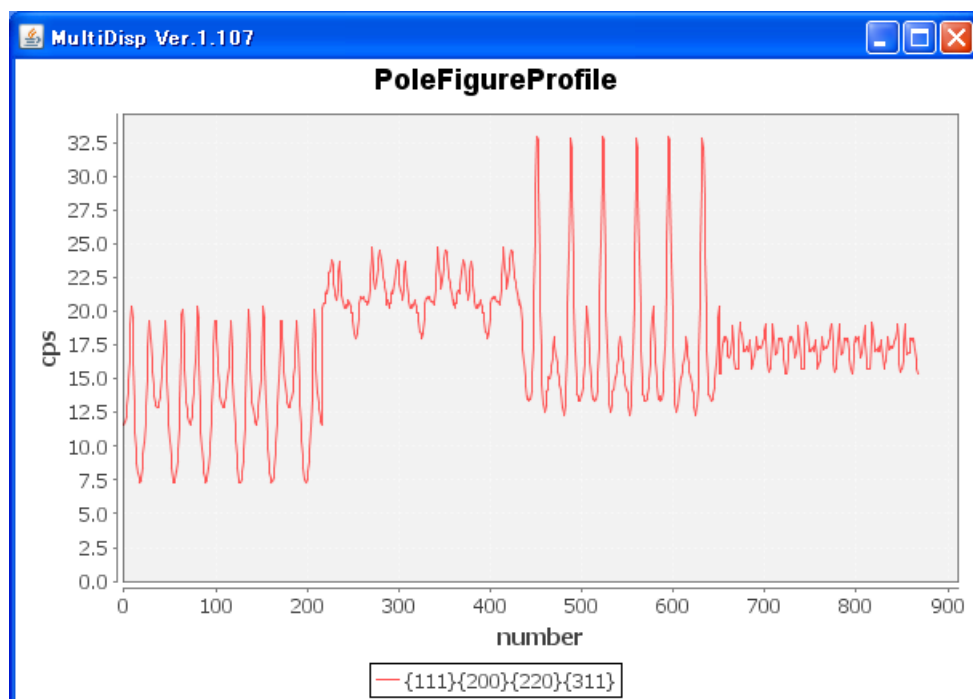
C l u s t e r のシフト検索に対応

Connection Standard Disp



α 方向の積算値の複数のプロファイルのつなぎ合わせたプロファイル横軸は number である。

Connection DataExtansion Disp



シフト検索用連結プロファイル

ファイル作成

Separate

☒ Standard

☒ Data Extension

Disp

Disp

Connection

☒ Standard

☒ Data Extension

Disp

Disp

File Create

File Create

で以下の構造でファイルが作成される。

	111	ファイル フォルダ	2011/10/23 7:18
	111EXT	ファイル フォルダ	2011/10/23 7:18
	200	ファイル フォルダ	2011/10/23 7:18
	200EXT	ファイル フォルダ	2011/10/23 7:18
	220	ファイル フォルダ	2011/10/23 7:18
	220EXT	ファイル フォルダ	2011/10/23 7:18
	311	ファイル フォルダ	2011/10/23 7:18
	311EXT	ファイル フォルダ	2011/10/23 7:18
	ALL	ファイル フォルダ	2011/10/23 7:18
	ALLEXT	ファイル フォルダ	2011/10/23 7:18

C:\%AI-Cluster%\111\5052.TXT
C:\%AI-Cluster%\111EXT\5052.TXT
C:\%AI-Cluster%\200\5052.TXT
C:\%AI-Cluster%\200EXT\5052.TXT
C:\%AI-Cluster%\220\5052.TXT
C:\%AI-Cluster%\220EXT\5052.TXT
C:\%AI-Cluster%\311\5052.TXT
C:\%AI-Cluster%\311EXT\5052.TXT
C:\%AI-Cluster%\ALL\5052.TXT
C:\%AI-Cluster%\ALLEXT\5052.TXT

複数の試料も同じように検索ファイルを作成する。

テストの為にアルミニウム1100と5052試料でCluster用ファイルを作成し検索してみる。
各々、極点図を0, 10, 20、45度の回転したファイルも作成する。
極点処理条件は以下とする。

ODFPoleFigure2 2.023MLGS by CTR user:CTR HelperTex

File Linear ToolKit Help InitSet BGMode Defocus Condition Free OverlapRevision

Files select
ASC(RINT-PC) 111-NO001.ASC 200-NO001.ASC 220-NO001.ASC 311-NO001.ASC

Calculation Condition
Previous Next C:\AI-Cluster\5052\111-NO001.ASC hkl 1,1,1 Change

Background delete mode
☒ DoubleM ☐ SingleM ☐ LowM ☐ HighM ☐ Nothing Background defocus LINE-BB185mm Smoothing 3 Arithmetic mean Disp

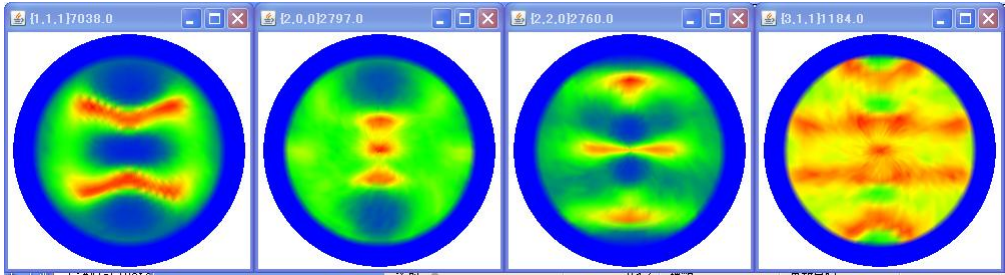
Peak slit 7.0 mm BG Slit 7.0 mm ☒ Background level revision(BGlevel=BGlevel * PeakSlit / BGSlit) Set Disp RD 0.0 Interpolation Full Disp

AbsCalc
☐ Schulz reflection method Absorption coefficient 0.067 1/cm Penetration depth 1.0 cm 2Theta 38.36 deg. 1/Kt Profile

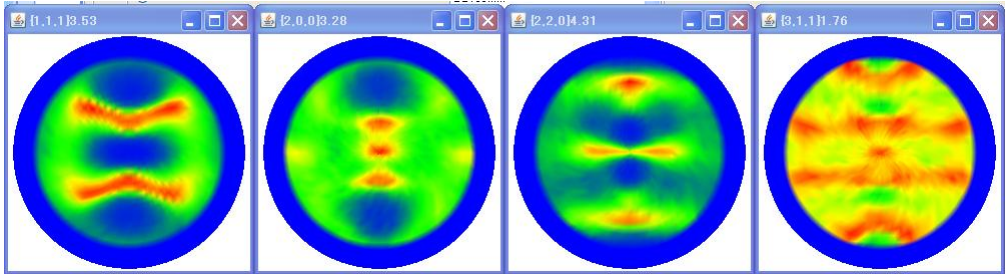
Defocus file Select
☒ Defocus functions file TextDisp
☐ Defocus function files dir(Calc unbackdefocus) BB185mm
☒ Defocus function files dir(Calc backdefocus) LINE-BB-185mm Limit Alfa Defocus value Free(LimitValue=0.0) 1/Ra Profile

Smoothing for ADC
☐ Cycle 3 Points 5 Disp Standardize ☒ OutFiles
☐ TXT(Pole) ☐ Asc(Pole) ☒ TXT2(Pole) Cancel Calc ODF File

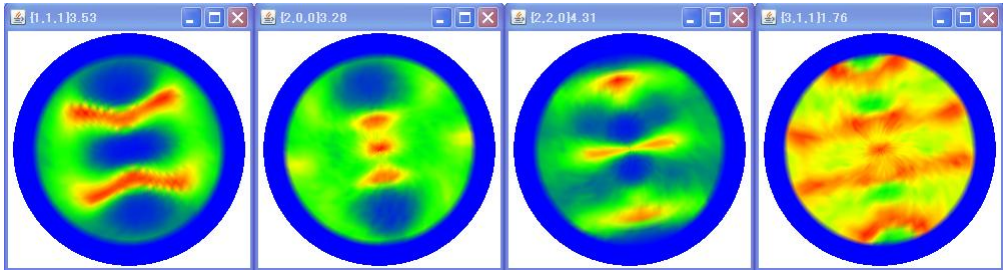
5 0 5 0 入力データ



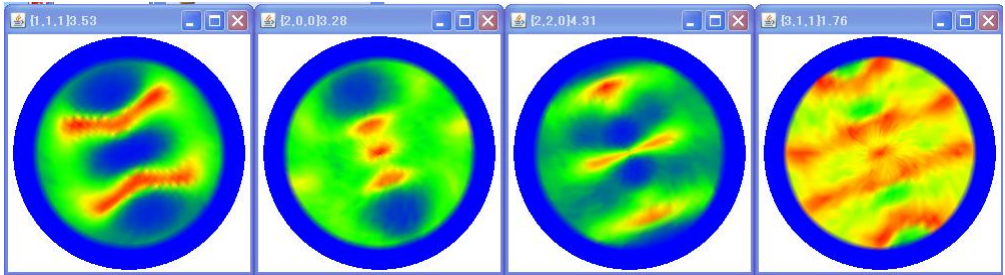
RD = 0 度処理結果



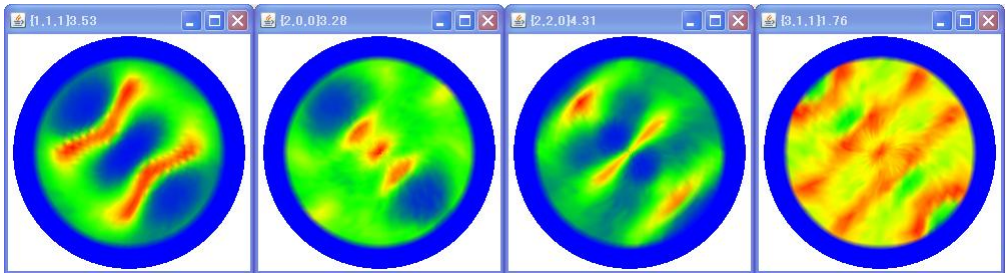
RD = 1 0 度処理結果



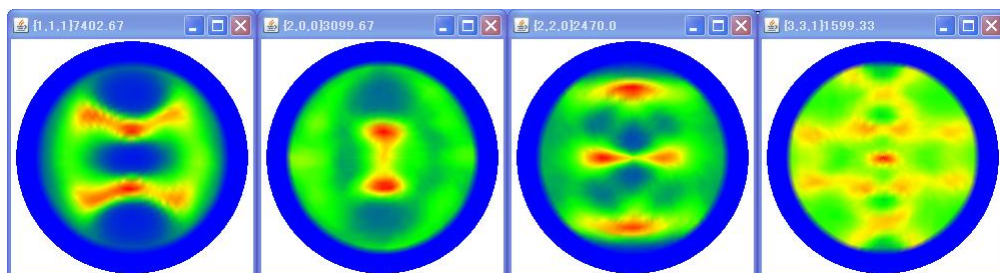
RD = 2 0 度処理結果



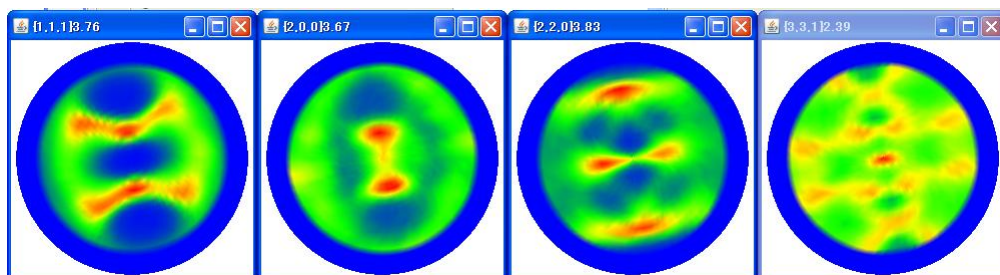
RD = 4 5 度処理結果



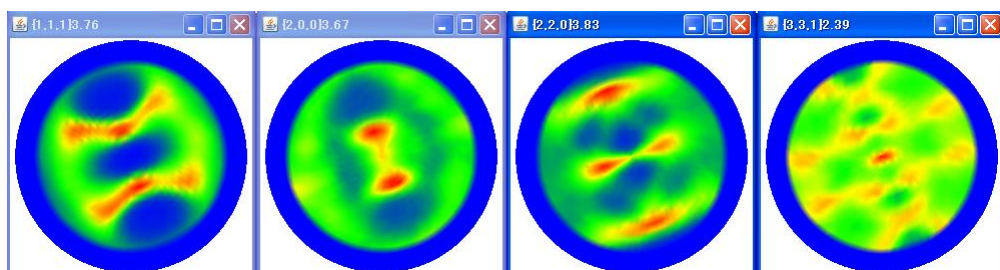
A 1 1 0 0 入力データ



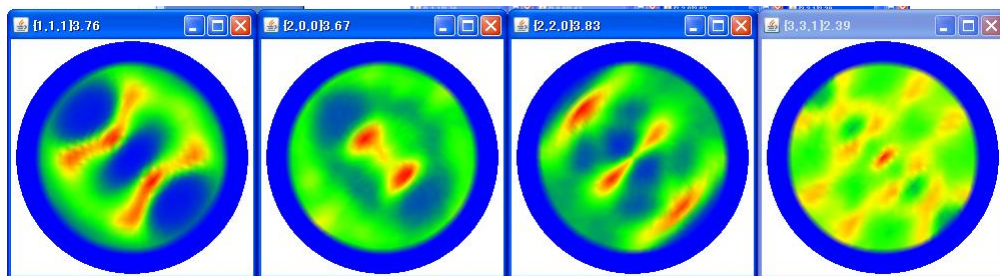
R D = 0 度処理結果



R D = 1 0 度処理結果



R D = 4 5 度処理結果



本ソフトウェアで、C l u s t e r 用ファイルを作成する。

PoleFiguretoProfile 1.000GS by CTR user:CTR HelperTex

File Help

FileSelect(TXT2)

 Path C:\AI-Cluster\5052\RD00

File name 111-NO001_chB02D2S_2.TXT 200-NO001_chB02D2S_2.TXT 220-NO001_chB02D2S_2.TXT 311-NO001_chB02D2S_2.TXT

CreateFilePath

 C:\AI-Cluster

Start 0 Step 5.0 Filename 5050-RD00

Separate

☒ Standard ☒ Data Extension

Disp Disp

Connection

☒ Standard ☒ Data Extension

Disp Disp

File Create

File Create Create C:\AI-Cluster\ALLEXT\5050-RD00.TXT

で作成完了

で作成完了

同じように全てのデータをCluster用に変換
Clusterソフトウェア (Ver2.141以降)

Cluster 2.141GS by CTR user:CTR HelperTex

File Option Condition Help

Object profile(File)

Database1(Directory)

Database2(Directory)

Database3(Directory)

Comment

File type
General(*.txt)

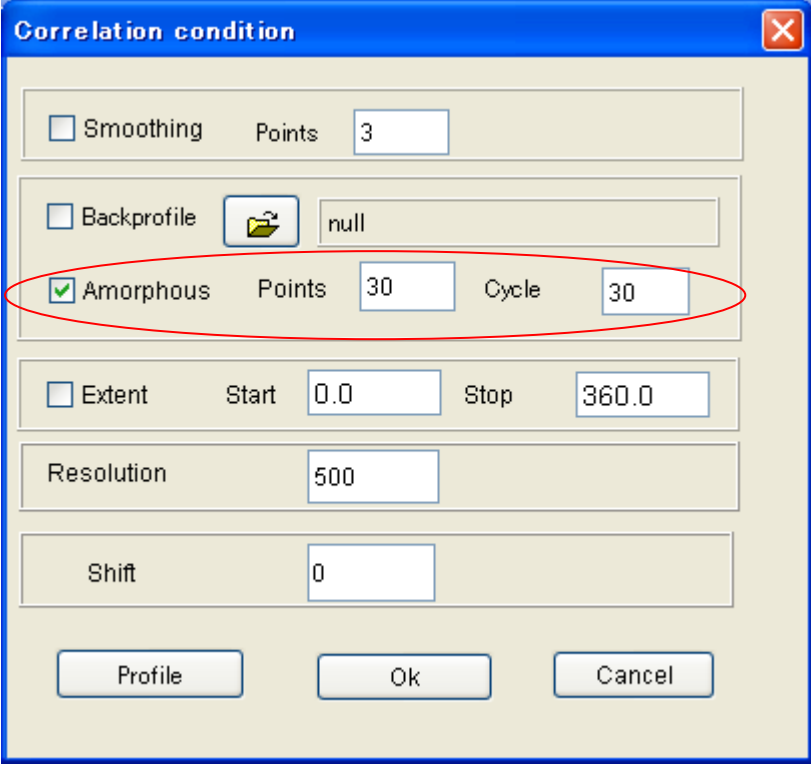
Database search

Calculate

Result

Start Stop Start Stop Corr

処理条件の編集



Correlation condition

☐ Smoothing Points

☐ Backprofile 

☒ Amorphous Points Cycle

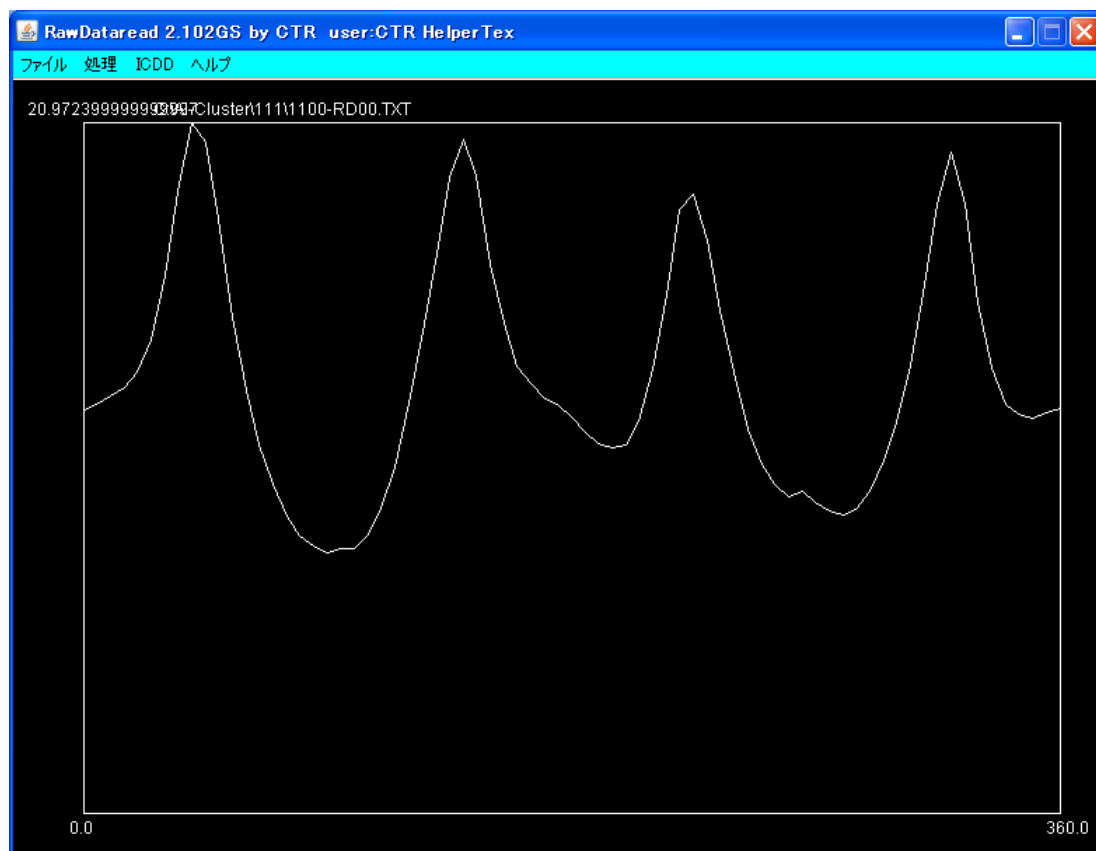
☐ Extent Start Stop

Resolution

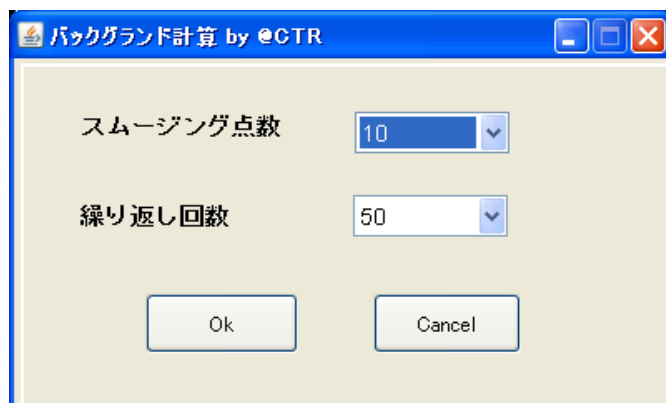
Shift

r a n d o mレベルの高い極点図の場合、A m o r p h o u s の決定が重要なので、
R a w D a t a r e a d プログラム(Ver.2.102 以降)でチェックを行う。

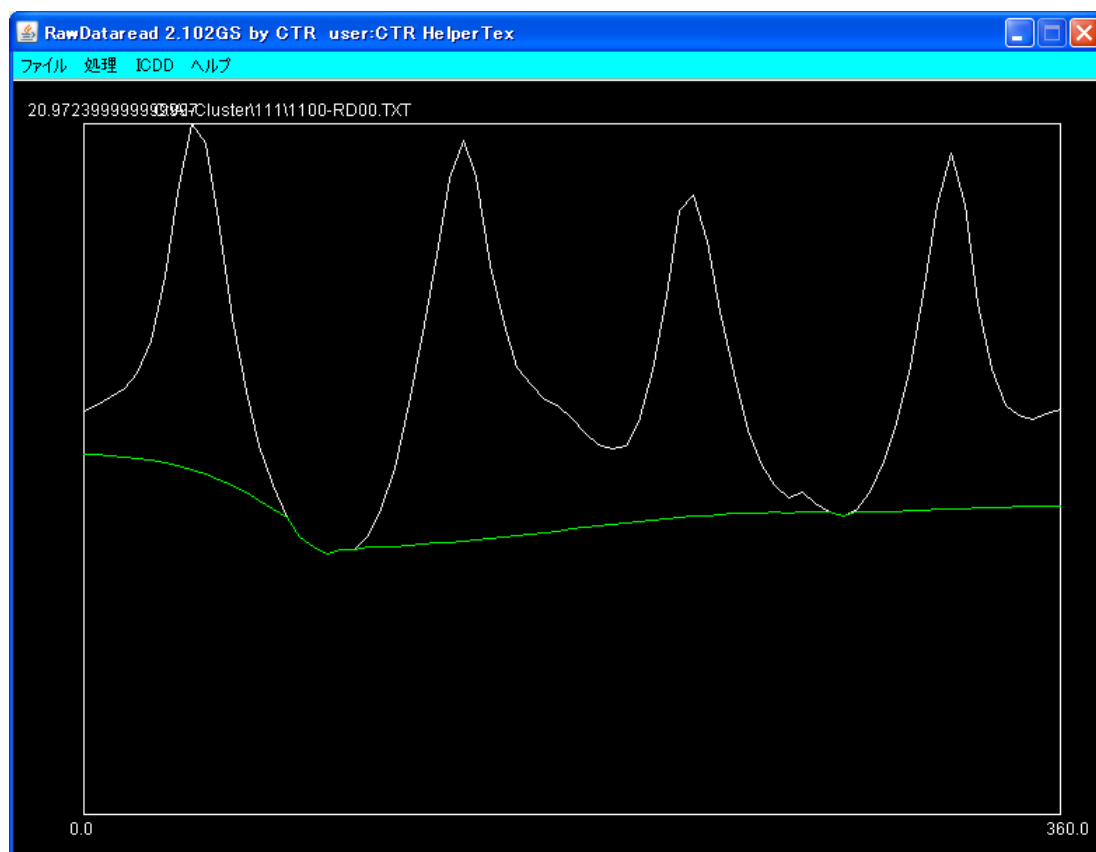
データは g e n e r a l T e x t フォーマットで作成した C l u s t e r 検索データをロード



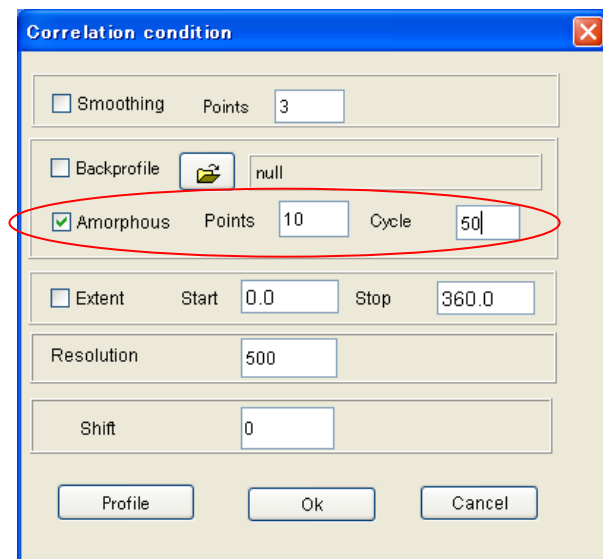
処理→バックグラウンド



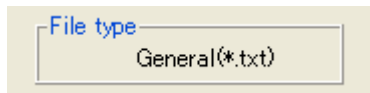
適当な点数、繰り返しを入力



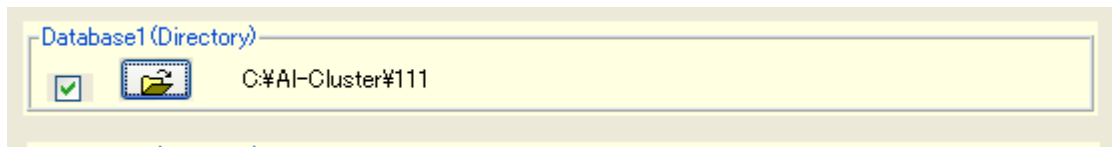
繰り返しして、ほぼピークの裾野を捉えたパラメータをCluster条件に入力



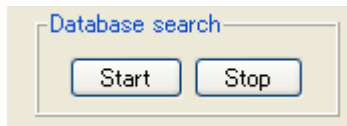
PoleFigureProfile データを検索の為、F i l e → F i l e T y p e → G e n e r a l を選択



が表示される。



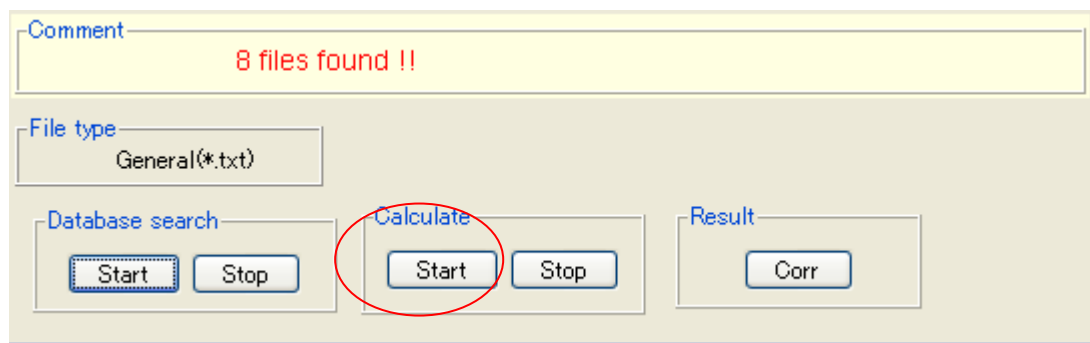
検索する、ディレクトリを選択



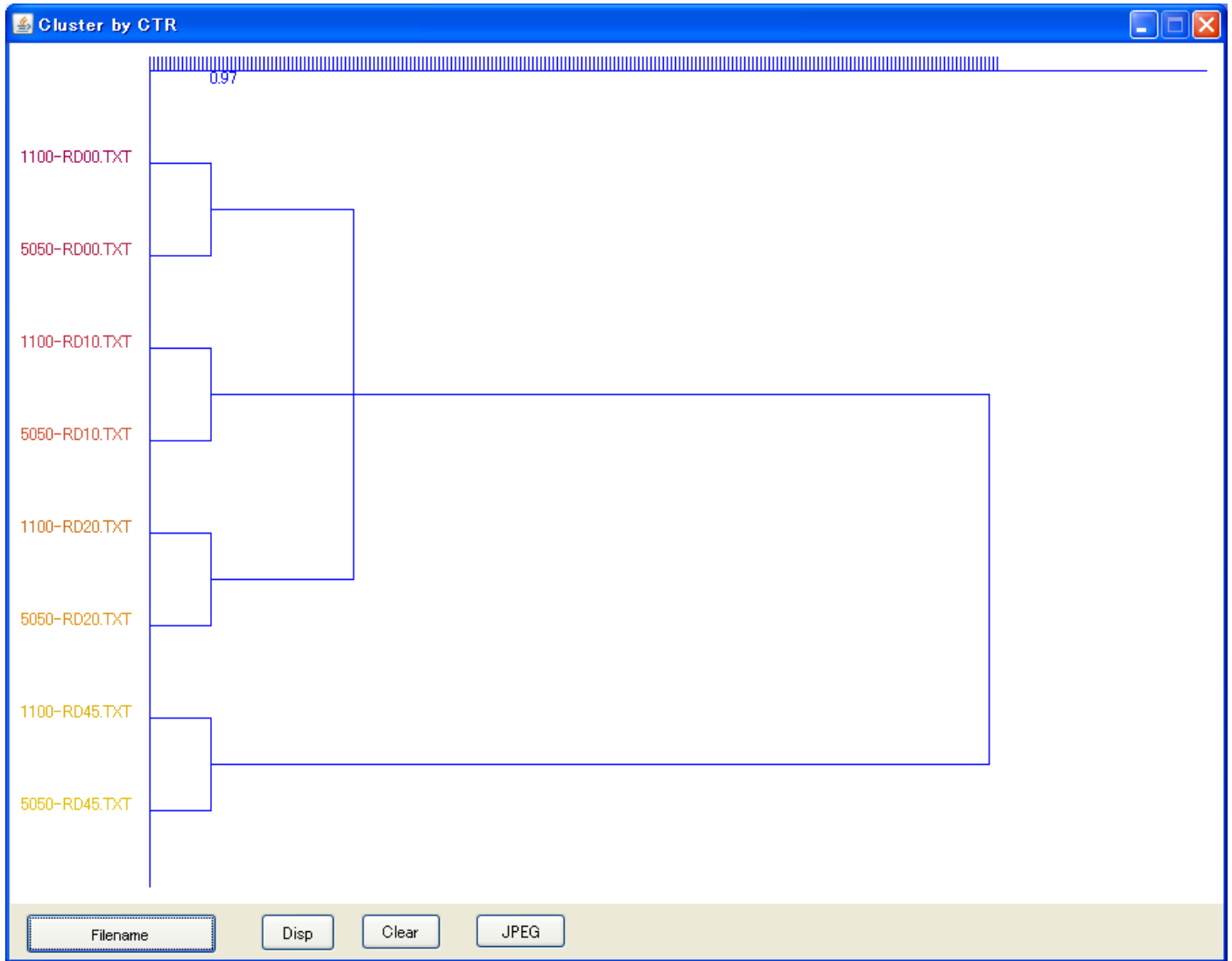
で検索テーブルを作成



表示されているデータから検索しないデータは削除出来る。

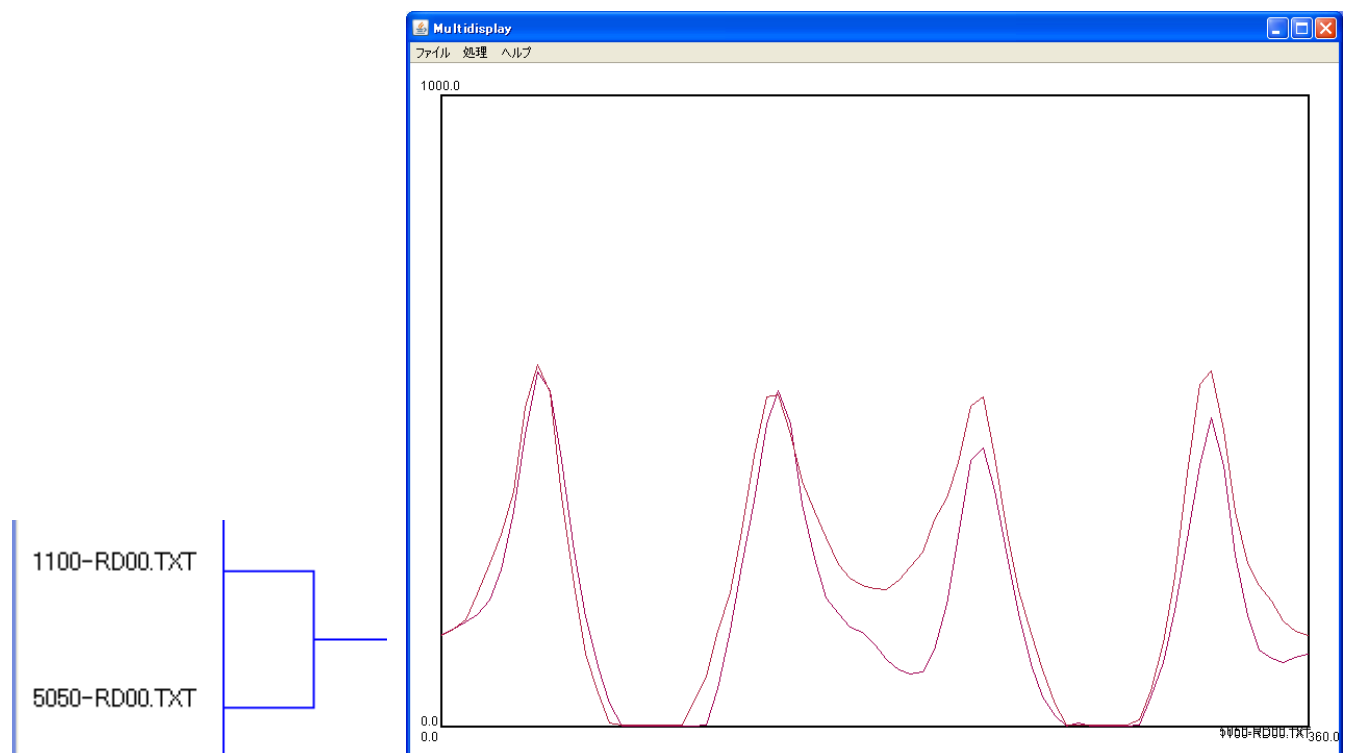


検索が開始される。



1100 と 5052 の{111}極点図の相関係数は 0.97 である。

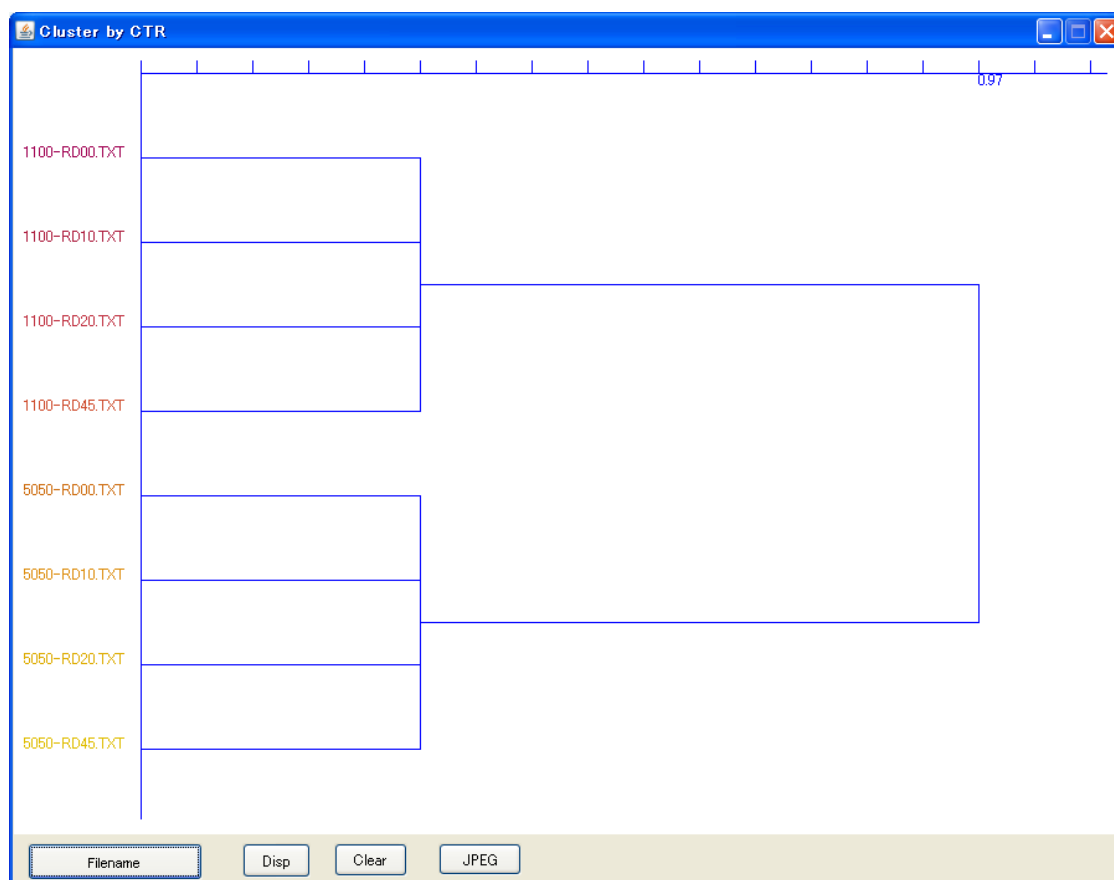
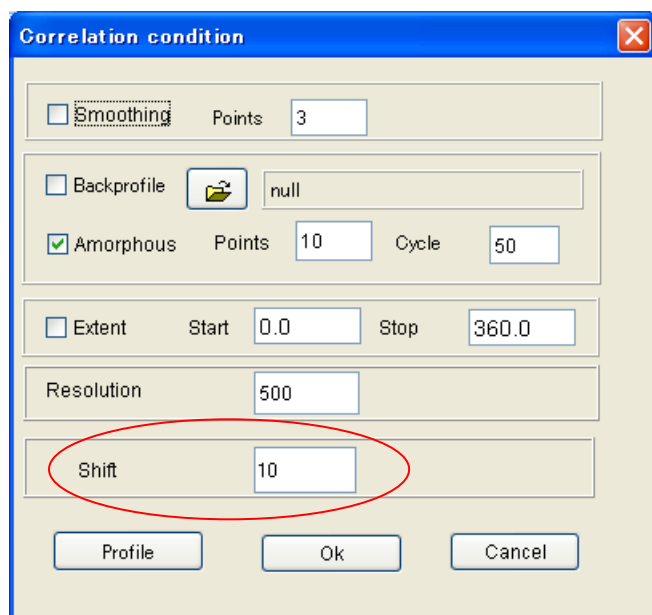
表示しているファイル名をクリックして黒に変えてD i s p でプロファイルの確認が出来る。



シフト検索の場合、拡張したデータを指定



RD=45 度を考え



アルミニウム 1 1 0 0 と 5 0 5 2 が RD がずれていても、分離出来る事がわかります。