

極点図のピークサーチと方位決定を行う

P o l e H K L U V W S e a r c h ソフトウェア

Ver. 2.05M

2020年07月23日



HelperTex Office

* @version 1.0

* 2013/07/16 Step=1.0 では (90, 0) にピークがあると、その周辺に乱れがある修正

* 2013/07/17 Ver1.01X peaksearch 結果から除外項目追加

* 2013/07/18 Ver1.02X HKLUVW 決定追加

* 2013/07/21 Ver1.03X SimulationFCC,BCC 追加

* 2013/07/22 Ver1.04X HKLUVW 評価に検出比率追加(**Result**)

* 2013/07/25 Ver1.05X Result 結果から合成極点図を表示

* 2013/07/30 Ver1.06X 合成極点図に Euler1.0degStep1deg,Euler12.5degStep5deg,Euler20degStep5deg

* 2013/08/04 Ver2.00X

* 2013/08/05 Ver2.01X 拡張子 *.TXT も読み込む(stdlib の TXT2Select0修正)

* 2013/08/06 Ver2.02X Titanium,Magnesium のサポート

* 2013/08/11 Ver2.03X 複数の極点図で相対強度をサポート

* 2020/07/23 Ver2.04 Windows10 極点図間の隙間対策

* 2021/08/31 Ver2.05 database{120}<2-10>追加、結果極点指数を入力指数と一致させる

概要

極点図から結晶方位{hkl}<uvw>の決定では、ピーク角度 (α 、 β) を調べ標準ステレオ投影図や、面間隔数表 (R.M.Bozorth;Phys.Rev.26,390(1925))を用いて行っていた。

しかし、この方法では複数の結晶方位が存在すると、決定は難しい。

ODF 解析を行えば、含まれる複数の結晶方位は簡単な操作で決定が可能になる。

本ソフトウェアは、複数の反射極点図を用いて、複数の結晶方位の決定を行う事を目的に作成された。

結晶方位の決定方法を手動モード、自動モードの2方法を提供する。

解析可能な極点図は、立方晶の{100},{110},{111},{211},{310},{311}とします。

六方晶の場合(Ti と Mg)、{100},{001},{101},{102},{110},{103}とします。

入力極点図は、ODFPoleFigure2 ソフトウェアの各種補正後のTXT2ファイルです。

TXT2ファイルのファイル名は、極点指数で始まり、_2.TXTで終了するファイルです。

手動モード

複数の極点図から (α 、 β) のピークサーチを行い、ピーク角度からデータベースに登録されている結晶方位と比較し、結晶方位の決定を行う。

自動モード

各種結晶方位のピーク位置 (α 、 β) は既知であり、データベースのピーク位置に対する入力極点図の強度を調べ、結晶方位が存在するか評価を行う。

結晶方位により、ピーク強度がそれぞれ異なる事から判断基準の強度レベルがパラメータになる。

必要なソフトウェア

PoleHKLUVWSearch(Ver1.06X以降)ソフトウェア

本ソフトウェア

TextDisplay ソフトウェア(CTR パッケージソフトウェアに含まれる)

計算結果のTEXTデータを表示

PoleDisplayTXT2 ソフトウェア (CTR パッケージソフトウェアに含まれる)

入力極点図や合成極点図を表示

ODFPoleFigure2 ソフトウェア (CTR パッケージソフトウェアに含まれる)

測定極点図の各種補正を行い、PoleHKLUVWSearch ソフトウェアの入力データTXT2ファイルを作成

必要なデータベース

CTR¥work¥PoleHKLUVWSearch 以下のデータ

Cubic,Titanium,Magnesium に対して

各結晶方位の極点図別ピークサーチ (1degStep) (必須)

Euler12.5deg-5.0degStep

Euler20.0deg-5.0degStep

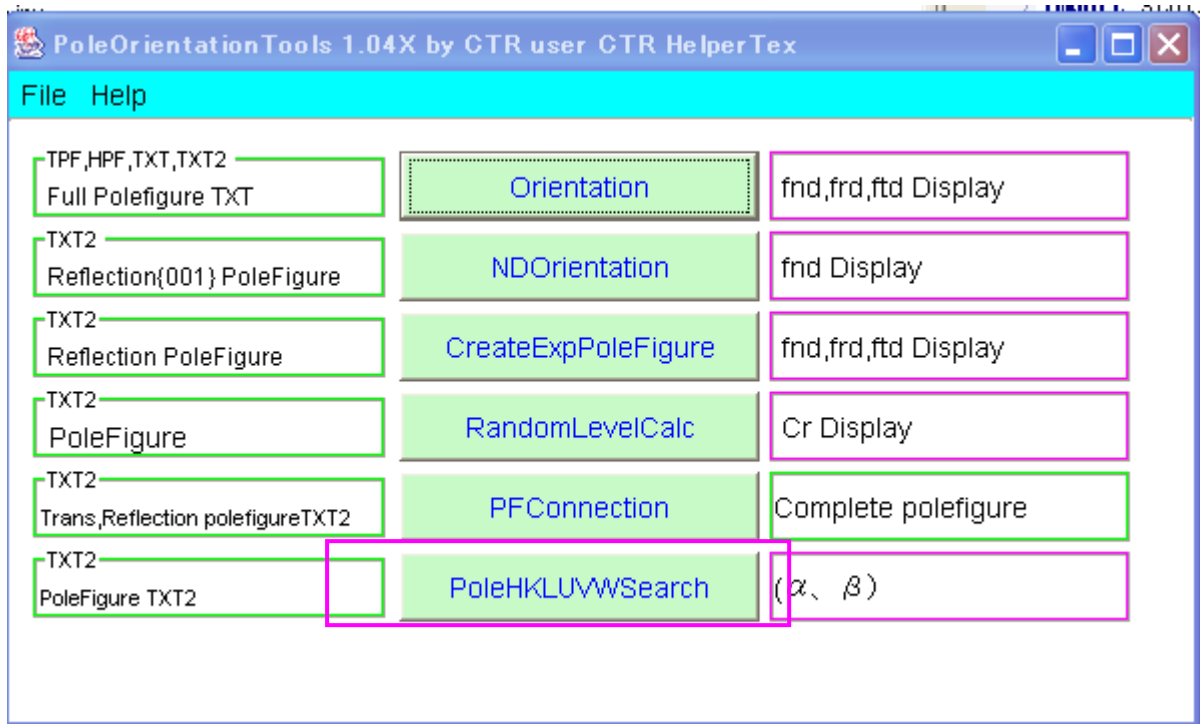
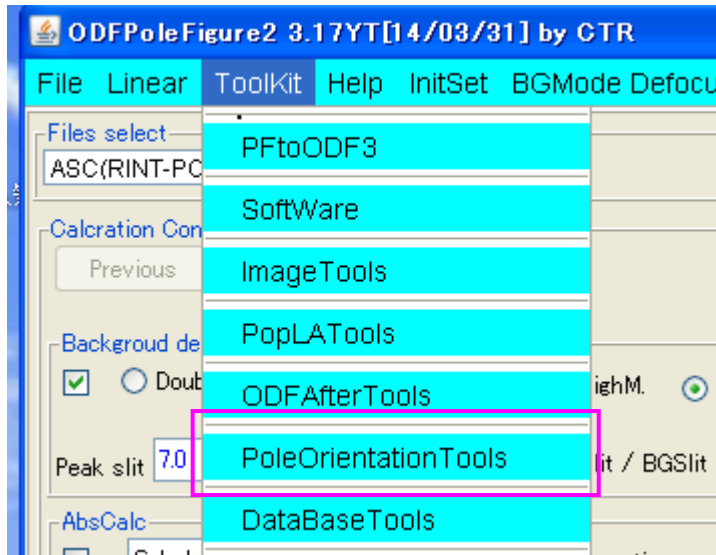
Euler10.0deg-1.0degStep

Euler 角度別データは最低1個あれば機能は実現出来ます。

ソフトウェアの起動

C:\¥CTR¥bin¥PoleHKLUVWSearch.jar をダブルクリックする。

ODFPoleFigure2->Toolkit->POleOrientationTools



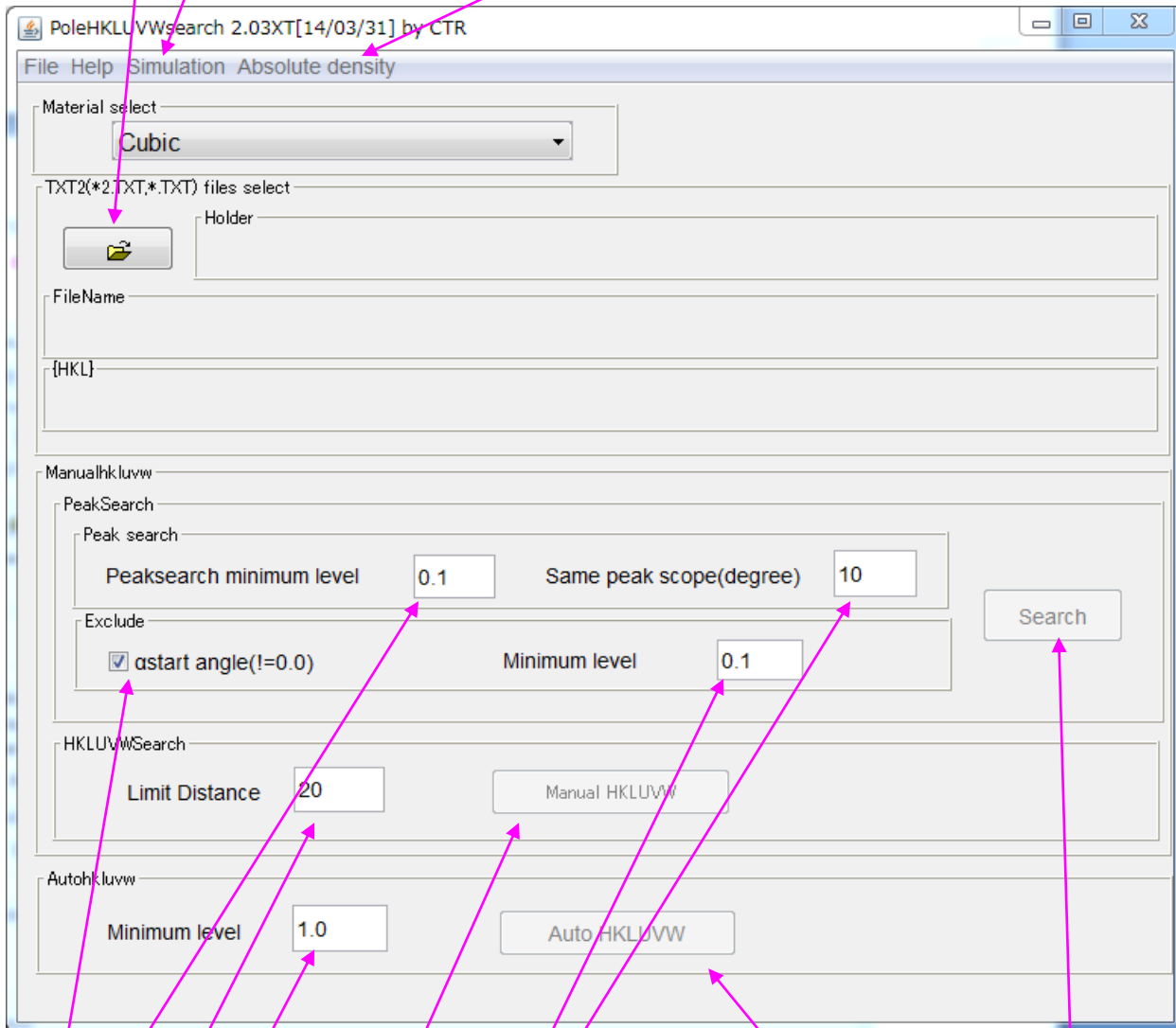
ソフトウェアの使い方

複数の極点図 (TXT2) を選択

選択により、Holder、Filename、HKLが表示される

- ODFEuler 角度選択
- PDF 表示
- 合成極点図表示

個別最大強度、共通最大強度の選択



- ピークサーチから指定密度以下を除く
- ピークサーチから同一エリアデータを削除
- ピークサーチを行う
- 個別極点図の最低レベル (*maxn/MAX)
- 自動{hkl}<uvw>の決定
- 複数の予測される極点図位置の密度が指定値より高ければ{hkl}<uvw>が存在する可能性が高い
- 結晶方位 euler 角度の制限 {hkl}<uvw>の決定
- 終端データの扱い

Material 部



Cubic,Ti,Mg の選択を行う。

Manualhkluvw

Searchにより、計算されたピーク位置が表示される。

Peaksearch minimum level は、隣接する極密度比較で level 以上を peak とする

同時に複数の極点図処理の場合、全ての極点図の最大値 MAX,個々の極点図の最大値 maxn とした場合、入力の値 A は (maxn/MAX) で規格化される。

Same peak scope(angle)は、範囲内を同一 peak と認識する。

検出された peak の除外

α Start angle(!=0.0) は、0.0 度以外の α スタート角度に検出された peak を除外する

Minimum level は、指定された peak 強度以下を除外する。

HKLUVWSearch 部

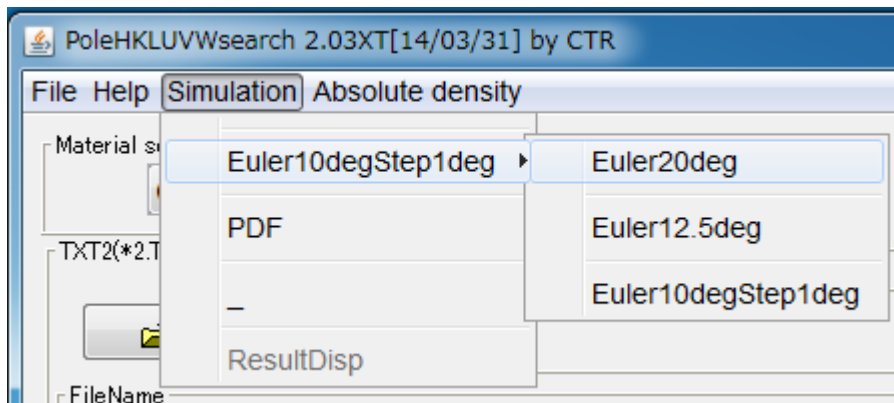
Limit Distance は検出されたピークの広がり、結晶方位と比較する。

Autohkluvw

Minimum level level 以上をピークとする。

予測される全てピークを満足する結晶方位が選択される。

Simulation

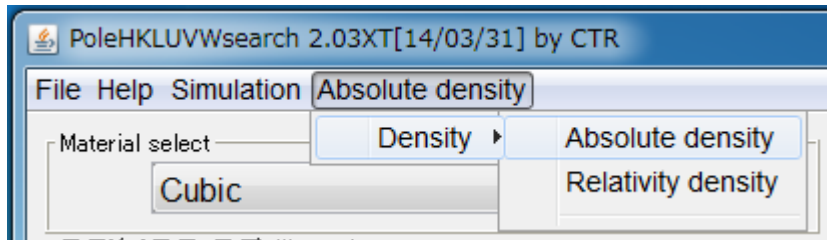


結晶方位の広がりを選択し、その広がりに対する極点図を表示する。

Cubicの場合、FCCとBCCの極点図表示、および、検索結果の合成極点図を表示PDFを表示するので、Acrobatの設定がある。

結果は、C:\CTR\Doc\Acroexist.txt に登録、間違って登録した場合、このファイルを削除すれば、再登録モードとなる。

Density



Absolute density

複数の極点図の Max 密度が極点図毎に異なる。

Relativity density

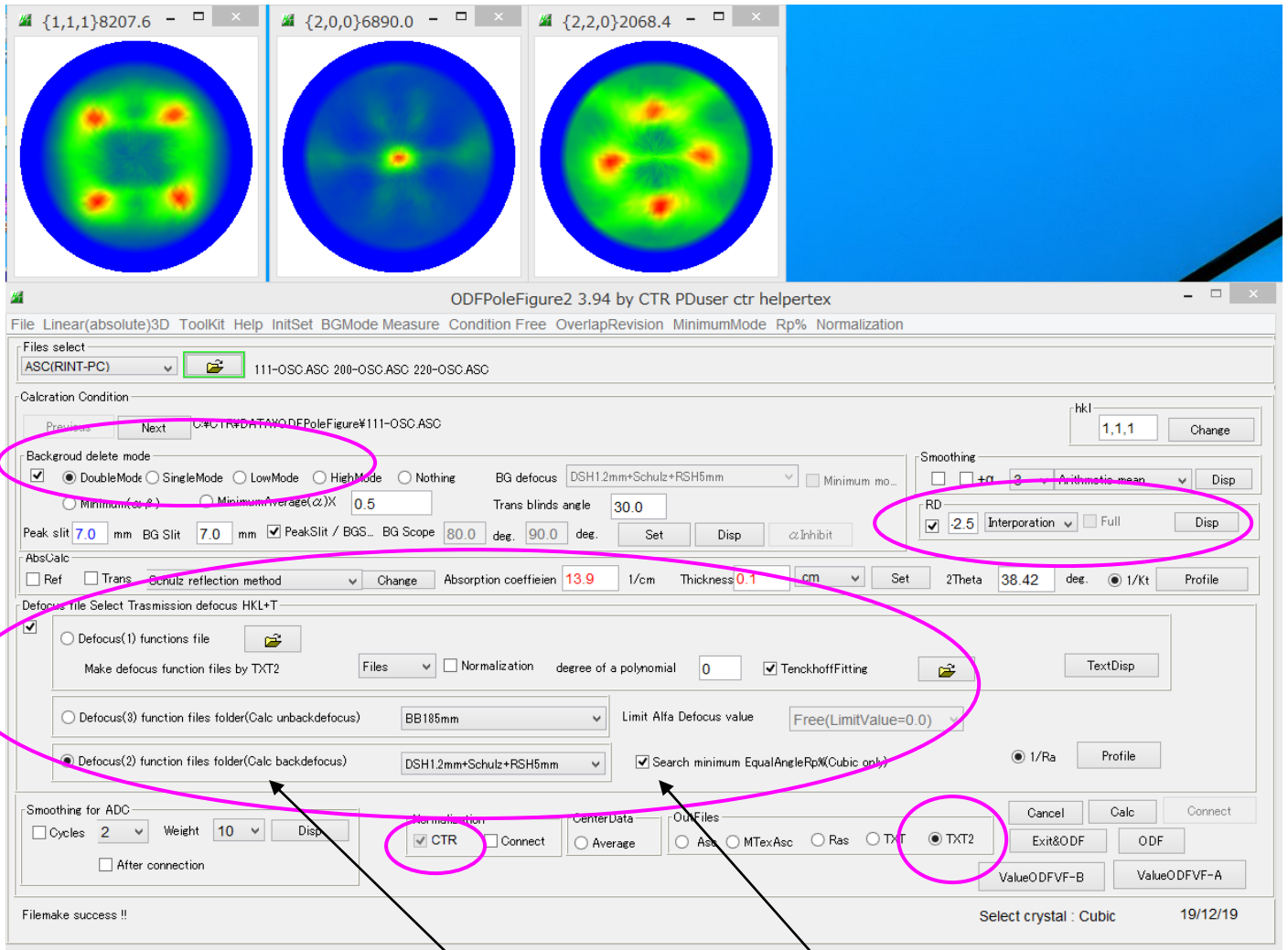
複数の極点図の Max 密度が共通

実測定データ処理の流れ

ODFPoleFigure2 ソフトウェアでデータ処理を行う。

特に、BG 処理と RD 処理、defocus 処理、極密度の規格化が重要
T X T 2 ファイルを作成

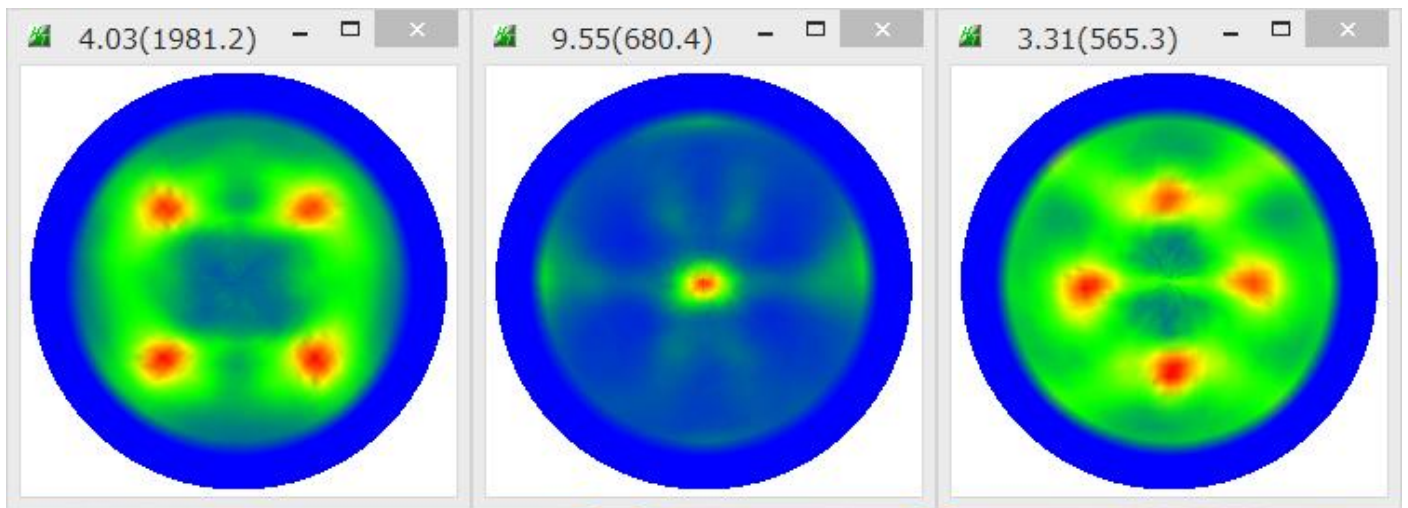
PoleHKLUVWSearch ソフトウェアで表示している極のピークが検出出来るように、
Peak minimum level、same peak scope を調整する



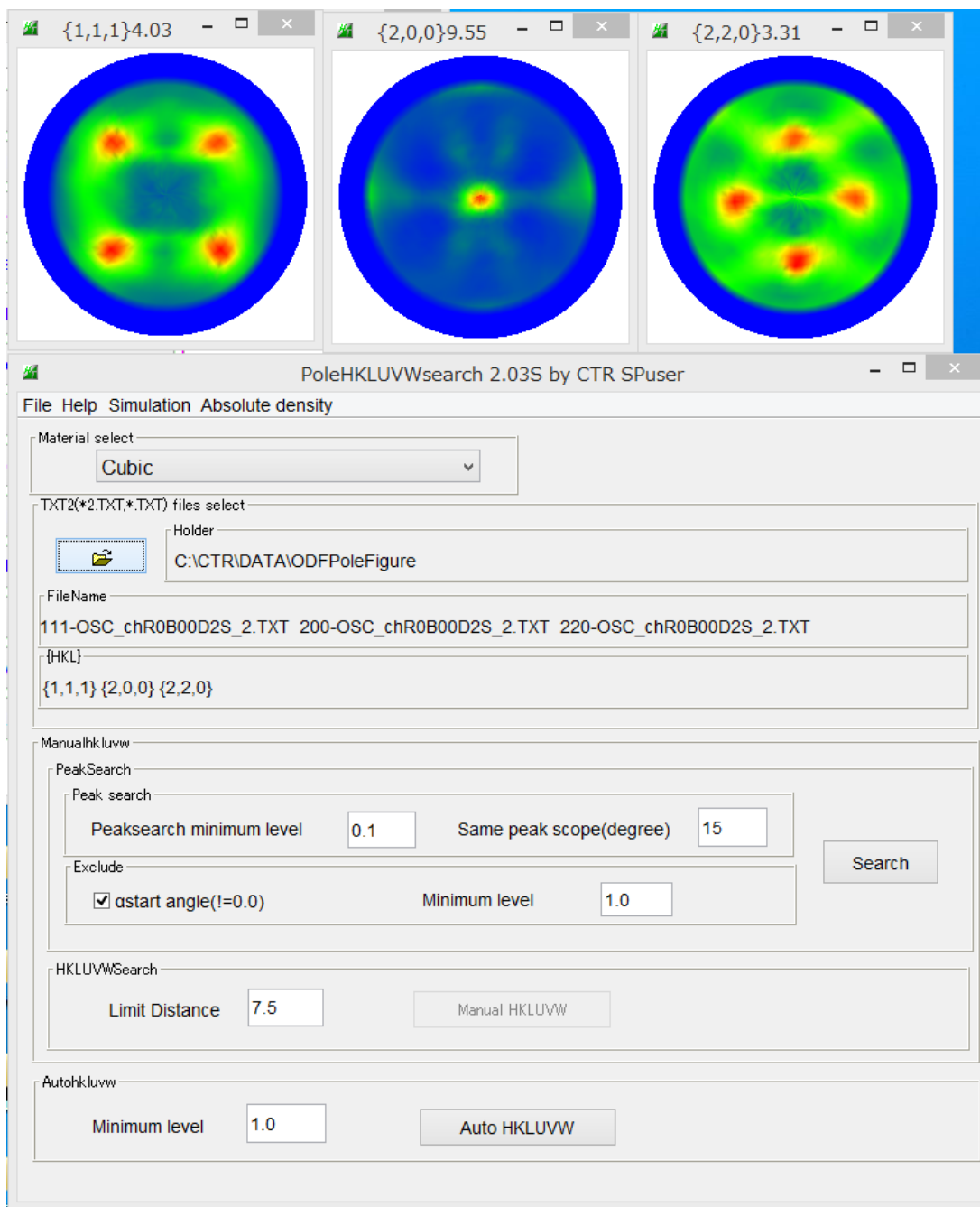
The screenshot displays the ODFPoleFigure2 software interface. At the top, three pole figure plots are shown for different hkl values: {1,1,1}8207.6, {2,0,0}6890.0, and {2,2,0}2068.4. The main control panel includes the following settings:

- Files select:** ASC(RINT-PC), 111-OSC.ASC 200-OSC.ASC 220-OSC.ASC
- Calculation Condition:** C:\CTR\DATA\ODFPoleFigure\111-OSC.ASC
- Background delete mode:** DoubleMode (circled in pink)
- BG defocus:** DSH1.2mm+Schulz+RSH5mm
- Smoothing:** Arithmetic mean (circled in pink)
- RD:** 2.5 (circled in pink)
- Peak slit:** 7.0 mm
- BG Slit:** 7.0 mm
- PeakSlit / BGS:** 80.0 deg. 90.0 deg.
- AbsCalc:** Trans, Schulz reflection method, Absorption coefficient 13.9 1/cm, Thickness 0.1 cm, 2Theta 38.42 deg., 1/Kt
- Defocus file Select:** Defocus(2) function files folder(Calc backdefocus) DSH1.2mm+Schulz+RSH5mm (circled in pink)
- Search minimum EqualAngleRp%(Cubic only):** Checked (circled in pink)
- Smoothing for ADC:** Cycles 2, Weight 10
- Normalization:** CTR (circled in pink)
- Output Files:** TXT2 (circled in pink)

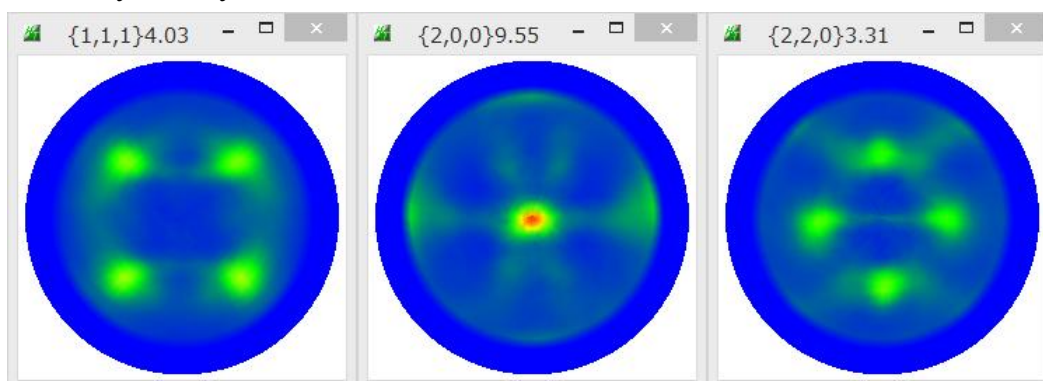
defocus は内部計算 defocus 曲線で補正し、更に最小Rp%化を行った。



本ソフトウェア



Relativity density で表示すると、相対方位密度を表示する。



PeakSearch 結果

TextDisplay 1.13S C:\¥NewCTR¥CTR¥				
File Help				
1,1,1	aangle	bangle	Polelevel	
0	35.0	45.0	3.69	
1	35.0	135.0	4.0	
2	35.0	225.0	4.03	
3	35.0	315.0	3.51	
4	55.0	20.0	1.13	
2,0,0	aangle	bangle	Polelevel	
0	90.0	0.0	8.7	
1	50.0	25.0	1.16	
2	50.0	160.0	1.15	
3	50.0	330.0	1.18	
2,2,0	aangle	bangle	Polelevel	
0	40.0	150.0	1.34	
1	40.0	180.0	3.31	
2	40.0	330.0	1.45	
3	45.0	0.0	2.79	
4	45.0	95.0	3.24	
5	45.0	270.0	2.84	
6	80.0	265.0	1.18	

Manualhkluvw の決定

TextDisplay 1.13S C:\¥NewCTR¥CTR¥work¥PoleHKLUVWSearch¥RESULT.TXT							
File Help							
1,1,1	aangle	bangle	Polelevel				
0	35.0	45.0	3.69	{001}<100>(0.0)	{122}<2-21>(0.0)	{132}<6-43>	
1	35.0	135.0	4.0	{001}<100>(0.0)	{122}<2-21>(0.0)	{132}<6-43>	
2	35.0	225.0	4.03	{001}<100>(0.0)	{122}<2-21>(0.0)	{132}<6-43>	
3	35.0	315.0	3.51	{001}<100>(0.0)	{122}<2-21>(0.0)	{132}<6-43>	
4	55.0	20.0	1.13				
1,0,0	aangle	bangle	Polelevel				
0	90.0	0.0	8.7	{001}<100>(0.0)	{001}<110>(0.0)		
1	50.0	25.0	1.16	{132}<6-43>(6.7)			
2	50.0	160.0	1.15	{101}<52-5>(6.4)			
3	50.0	330.0	1.18	{110}<1-11>(7.0)	{132}<6-43>(3.1)		
1,1,0	aangle	bangle	Polelevel				
0	40.0	150.0	1.34				
1	40.0	180.0	3.31	{001}<100>(5.0)	{112}<11-1>(5.0)	{122}<2-21>	
2	40.0	330.0	1.45				
3	45.0	0.0	2.79	{001}<100>(0.0)	{122}<2-21>(1.0)		
4	45.0	95.0	3.24	{001}<100>(5.0)	{122}<2-21>(5.0)		
5	45.0	270.0	2.84	{001}<100>(0.0)	{122}<2-21>(1.0)		
6	80.0	265.0	1.18				
Result							
	{001}<100>	{001}<110>	{101}<52-5>	{110}<1-11>	{112}<11-1>	{122}<2-21>	{132}<6-43>
1,1,1	1.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.5	0.4
1,0,0	1.0	1.0	0.25	0.25	0.0	0.0	0.16
1,1,0	1.0	0.0	0.0	0.0	0.12	0.5	0.0

全てのピークが、{001}<100>で説明出来るので、{001}<100> Cube 方位であることが分かります。

結果表示の () 内は、

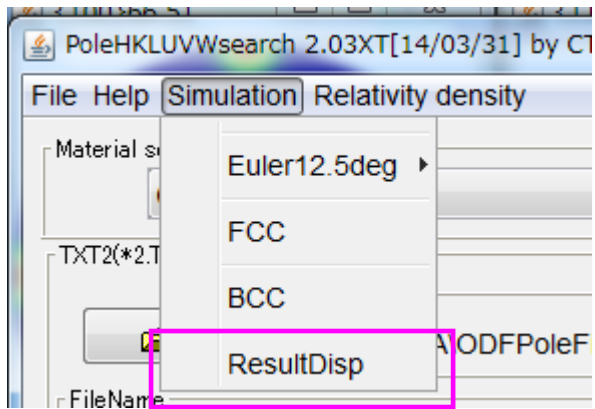
ピークサーチした角度 (α 、 β) とデータベースの (α b、 β b) の距離を表します。

5度間隔で測定した場合、最大5度異なっても同一データです。

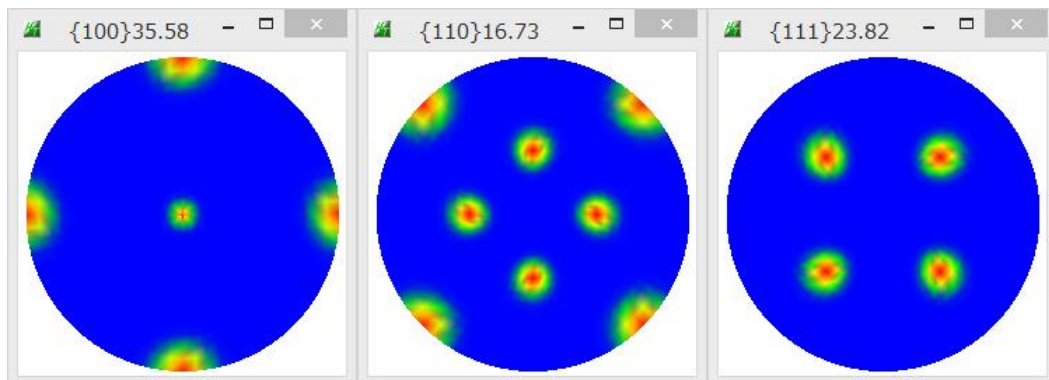
****Result****

測定範囲内に出現すべきピーク本数と実際にピークサーチした比率を表します。

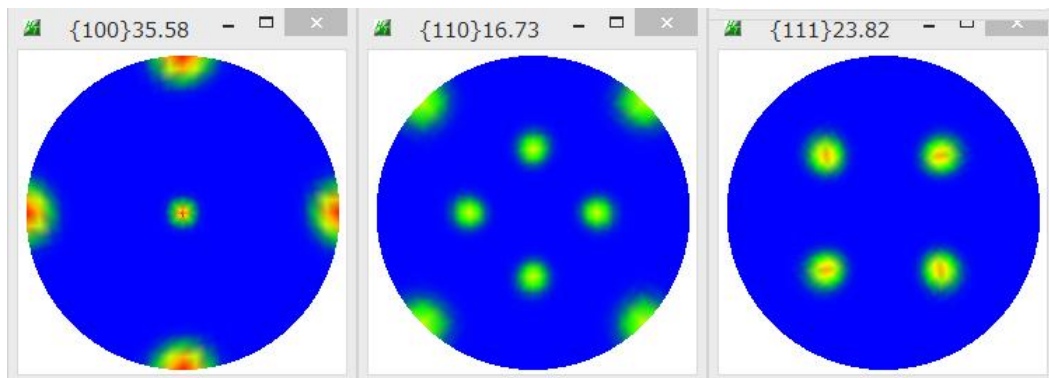
{001}<100>は全ての極点図で 0.0 以外で、{122}<2-21>は{1,0,0}極点図が 0.0 で満足していない評価値が 0.0 以上が結晶方位が存在している事を表す。



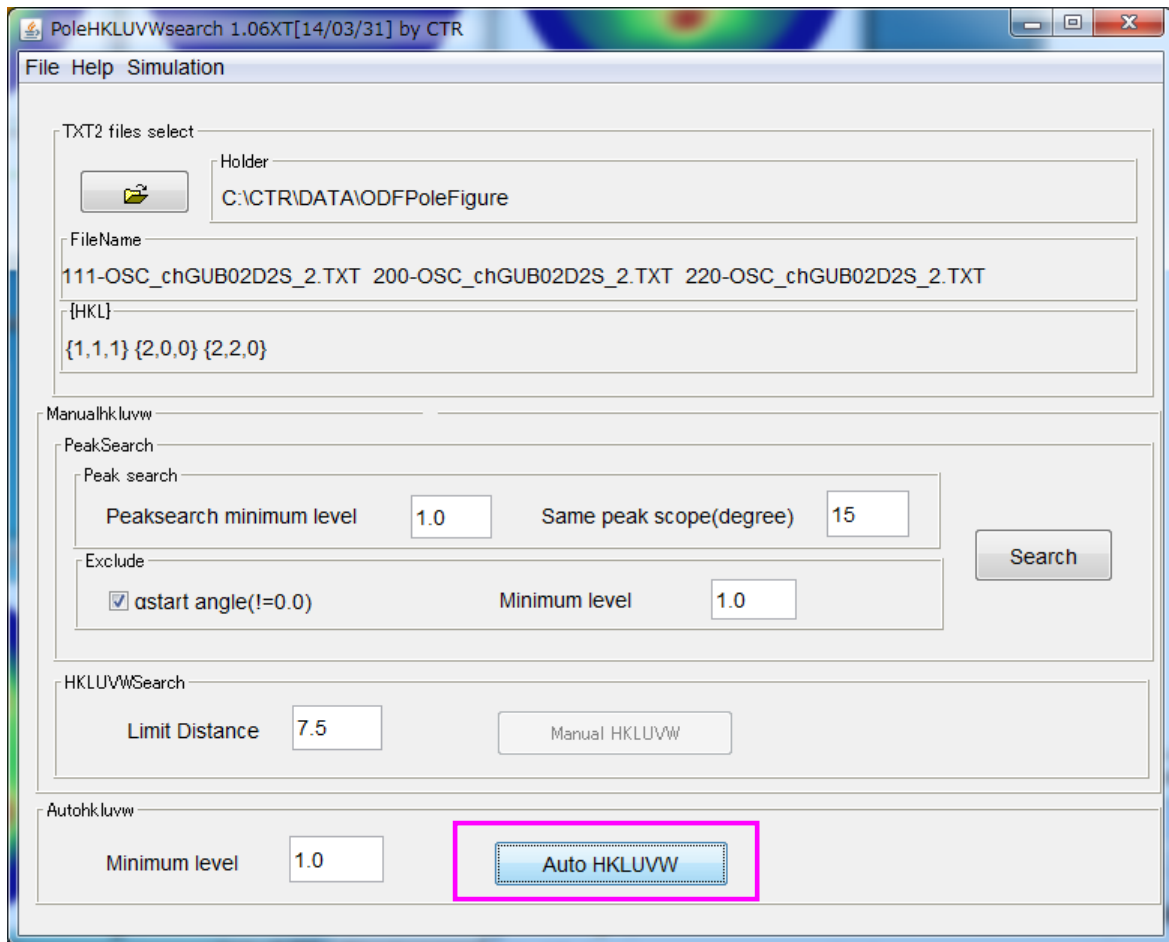
結晶方位が検出された場合、合成極点図が表示される。



Relativity density で表示すると

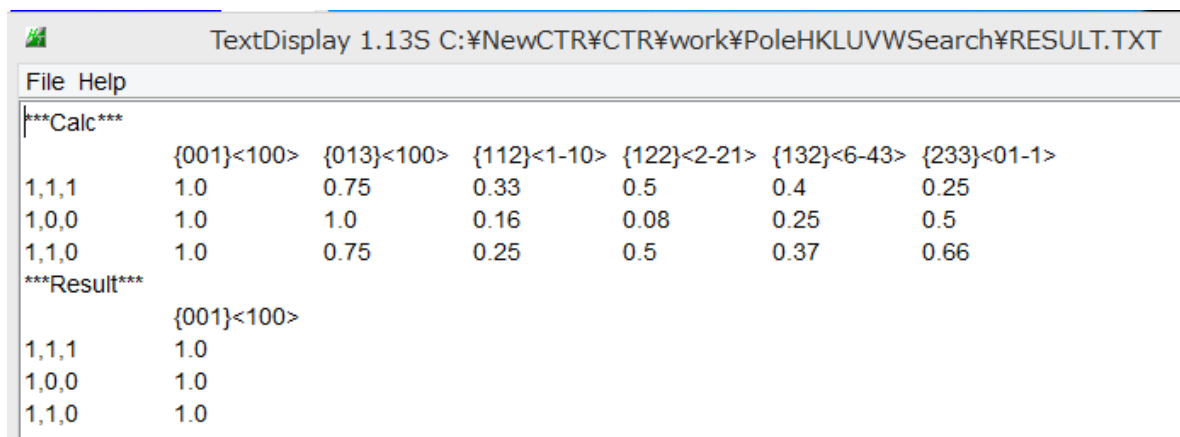


Autohkluvw の決定



AutoHKLUVW で評価が表示される。

この場合、Minimum level を調整しながら評価を行う。



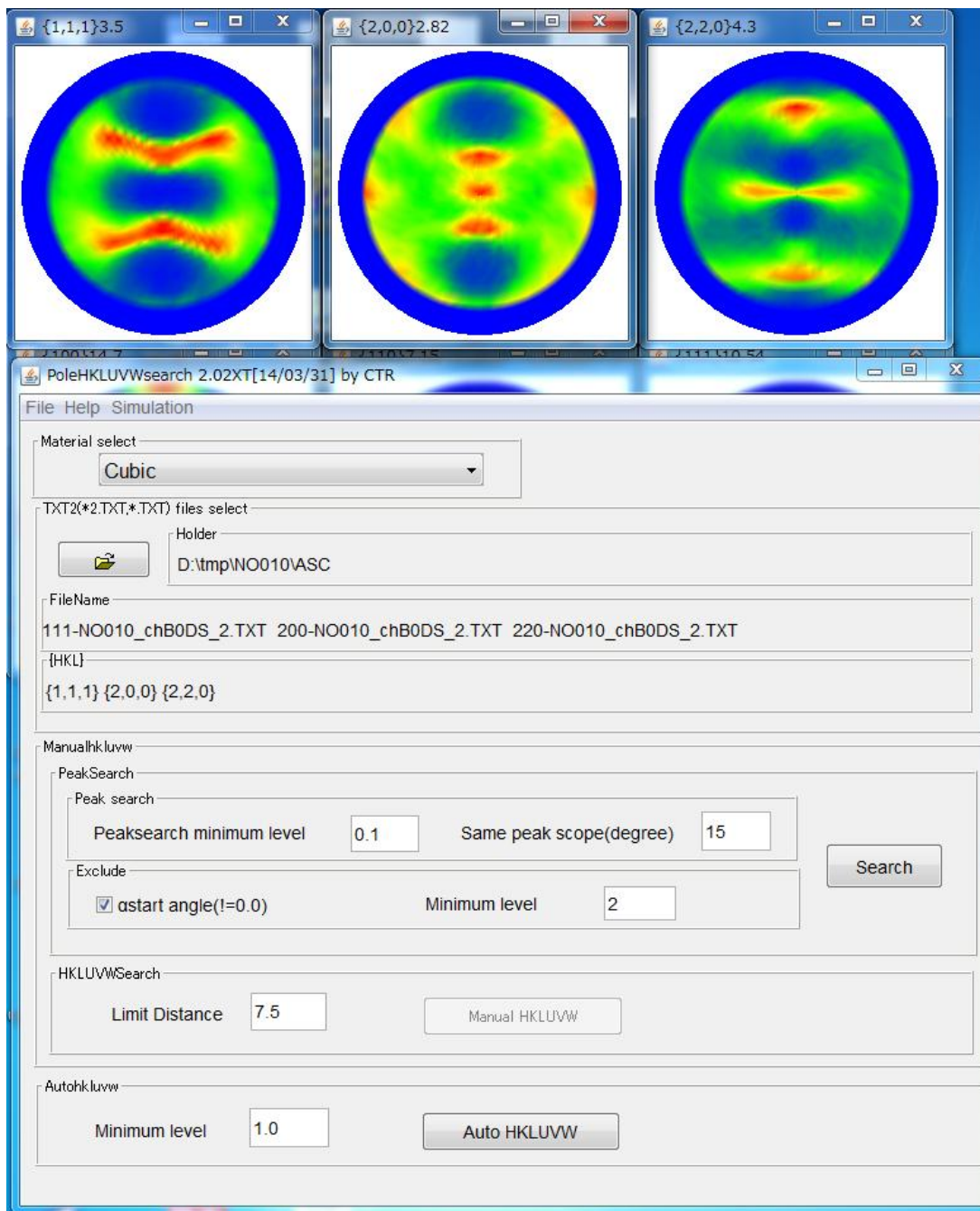
Calc で出現すべきピーク数と level 以上の比率を計算し、

全て検出された結晶方位を Result としている。(評価値が 1.0)

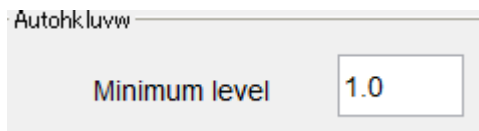
Simulation → ResultDisp で合成極点図を表示する。

複数の結晶方位が存在する場合の合成極点図では全ての結晶方位を同一で扱う。

複数の結晶方位が含まれている極点図では



Autohkluvw



```

***Calc***
      {001}<100>  {013}<100>  {110}<1-12>  {112}<11-1>  {122}<2-21>  {132}<6-43>  {213}<-1-42>  {233}<01-1>
1,1,1  1.0      1.0      1.0      0.83      0.5      0.6      0.7      0.25
1,0,0  1.0      1.0      1.0      1.0      0.33     0.75     0.66     0.33
1,1,0  1.0      0.5      0.42     0.75     0.5      0.75     0.28     0.33
***Result***
      {001}<100>
1,1,1  1.0
1,0,0  1.0
1,1,0  1.0
    
```

Cube 方位のみ検出 Mimimumlevel を下げて検索

Autohkluvw

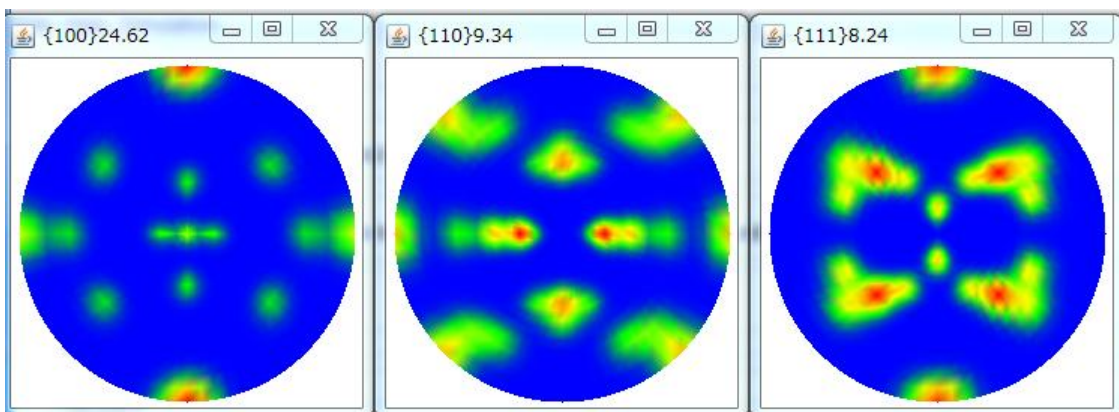
Minimum level

```

***Calc***
      {001}<100>  {013}<100>  {110}<1-11>  {110}<1-12>  {111}<01-1>  {112}<11-1>  {122}<2-21>  {132}<6-43>
1,1,1  1.0      1.0      0.25      1.0      0.14      1.0      0.5      0.8
1,0,0  1.0      1.0      0.25      1.0      0.33      1.0      0.66     1.0
1,1,0  1.0      1.0      1.0      0.42     0.33      1.0      0.5      0.75
***Result***
      {001}<100>  {013}<100>  {112}<11-1>
1,1,1  1.0      1.0      1.0
1,0,0  1.0      1.0      1.0
1,1,0  1.0      1.0      1.0

```

Resultdisp で合成極点図を表示 (Euler12.5deg)



Autohkluvw

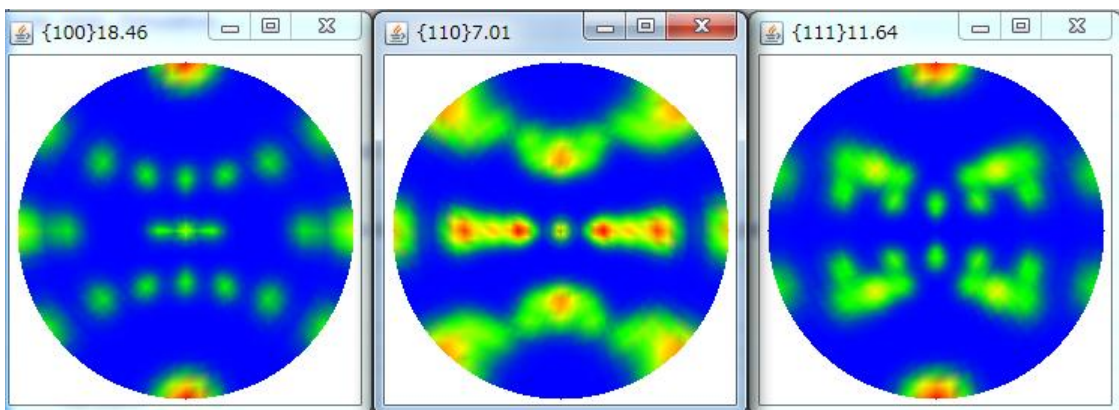
Minimum level

```

***Calc***
      {001}<100>  {013}<100>  {110}<001>  {110}<1-11>  {110}<1-12>  {111}<-1-12>  {111}<01-1>  {112}<11-1>
1,1,1  1.0      1.0      1.0      1.0      1.0      0.57     0.28     1.0
1,0,0  1.0      1.0      0.5      1.0      1.0      0.66     0.33     1.0
1,1,0  1.0      1.0      1.0      1.0      0.85     0.16     0.33     1.0
***Result***
      {001}<100>  {013}<100>  {110}<1-11>  {112}<11-1>
1,1,1  1.0      1.0      1.0      1.0
1,0,0  1.0      1.0      1.0      1.0
1,1,0  1.0      1.0      1.0      1.0

```

Resultdisp で合成極点図を表示(Euler12.5deg)

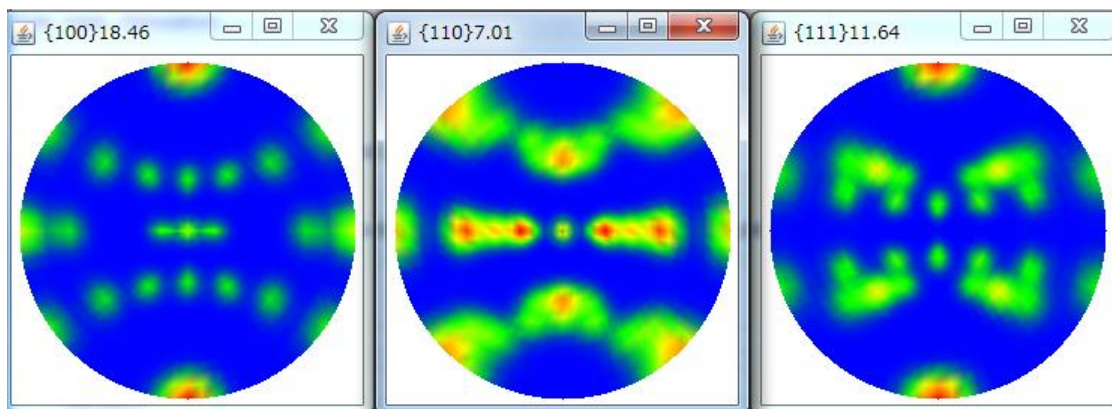


方位に含有量を加味していないので、合成極点図は異なるが、入力データに近い形状が確認出来ます。
 {200}と{100}を比較すると、{100}の外周の極に影響されて、中心部分の極密度が下がっている。

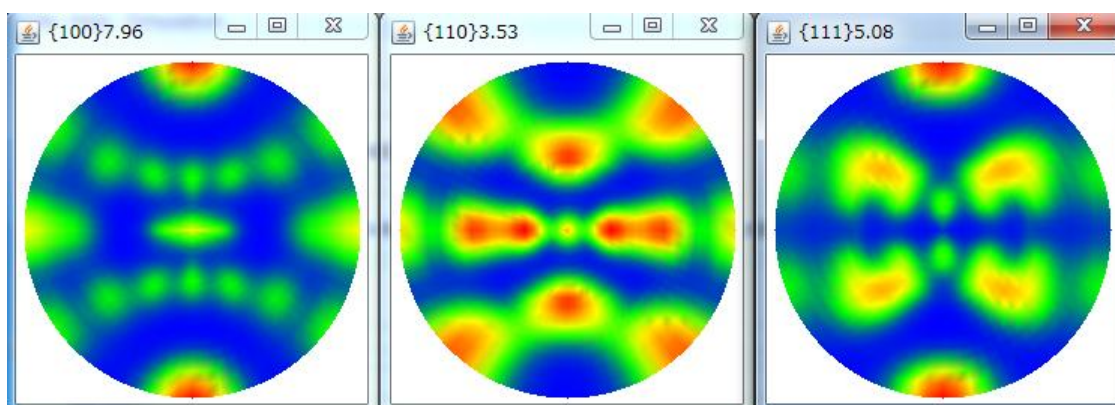
{100}を不完全極点図として、疑似規格化を行えば、{100}の中心部分の極密度も上がる。

Euler 角度 12.5deg と 20deg の比較

Euler12.5deg



Euler20deg



実際の結晶方位では、Euler 空間 ($\phi 1$ 、 Φ 、 $\phi 2$) において、各方向に非対称を持つと考えられるし、各結晶方位に関しても、異なっていると考えられる。

上記シュミレーションは、各結晶方位に関して、Euler 空間の広がりをも同一としています。

極点図では、全ての結晶方位が同量含まれていても、各方位を代表する極密度強度は異なっています。又、測定における (α 、 β) の測定間隔にも左右されていて、同一の minimumlevel で検出している事にも無理があるのかも知れません。

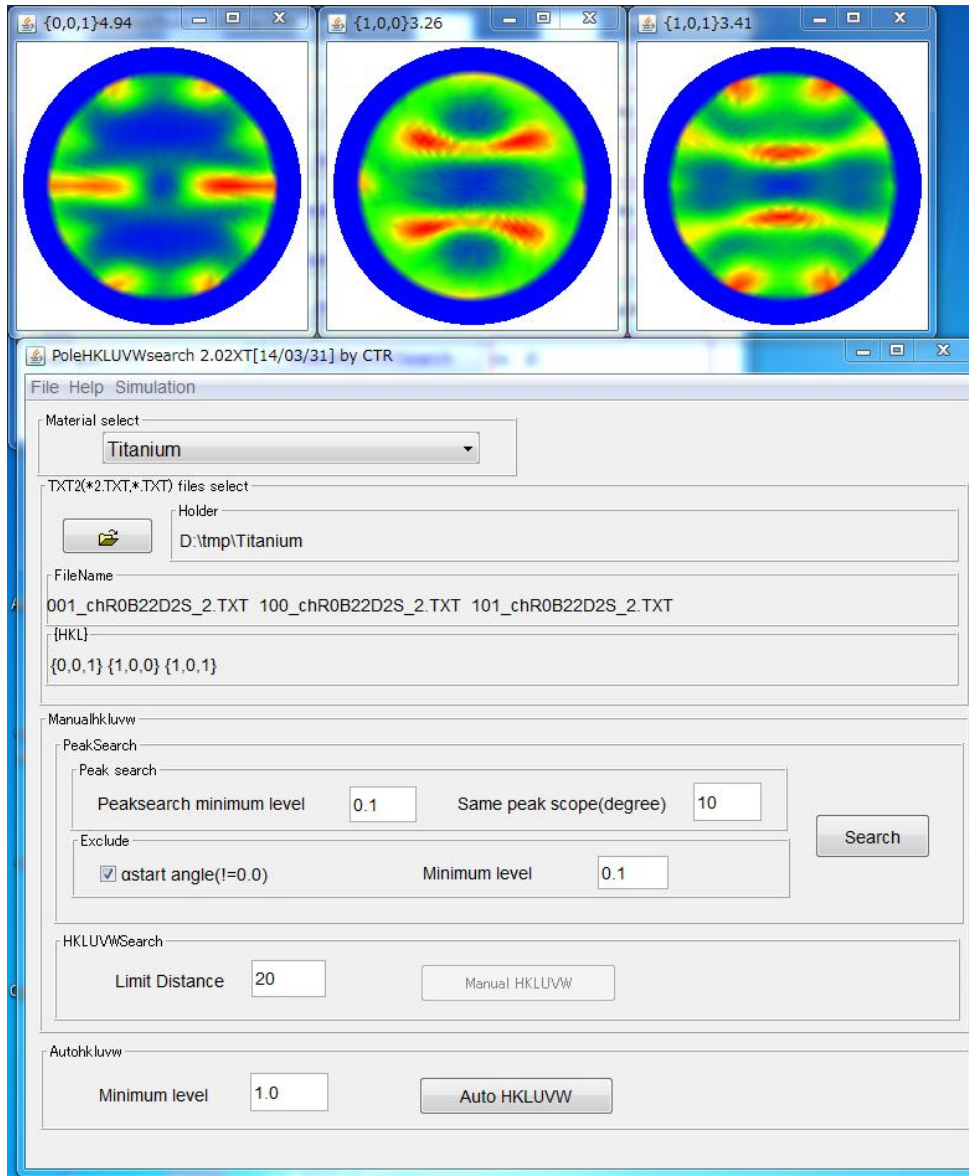
まだまだ改良の余地がありますが、極点図から簡易的に結晶方位の決定に用いることは可能と思われる。

Titaniumの場合

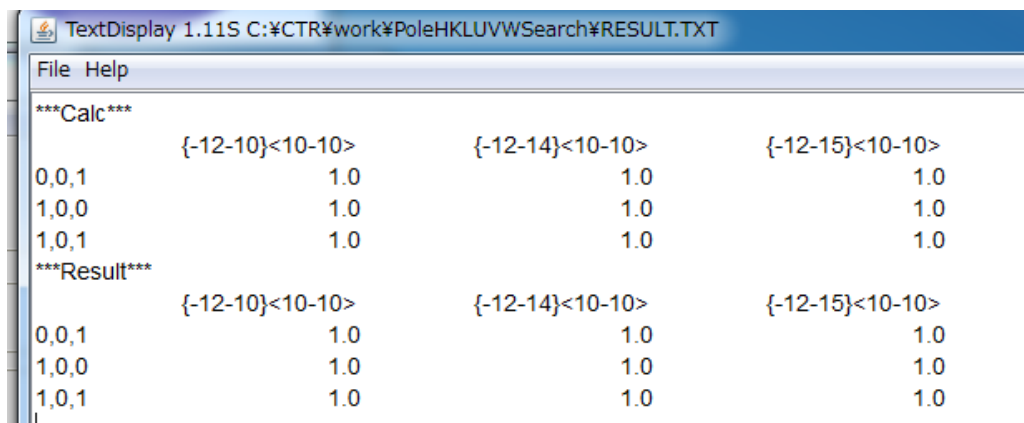
MaterialでTitaniumを選択



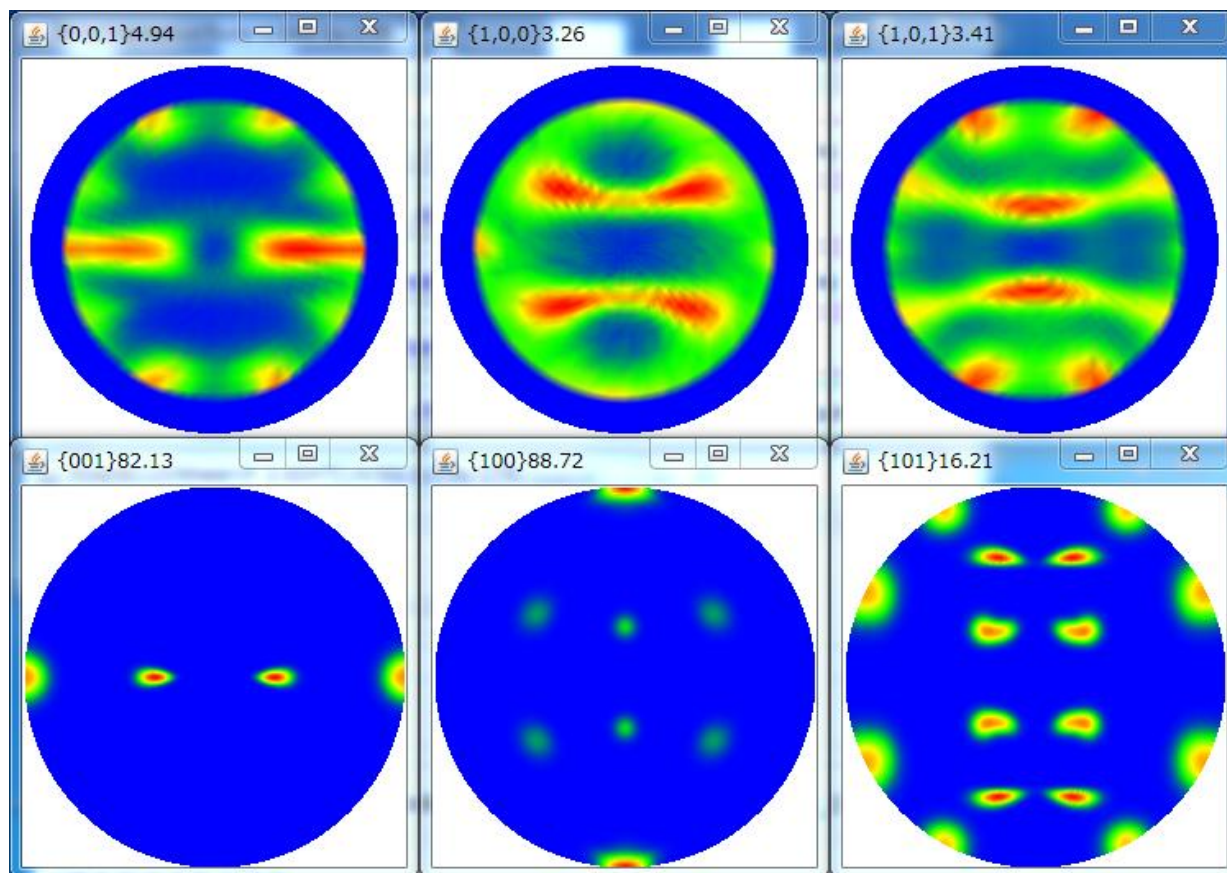
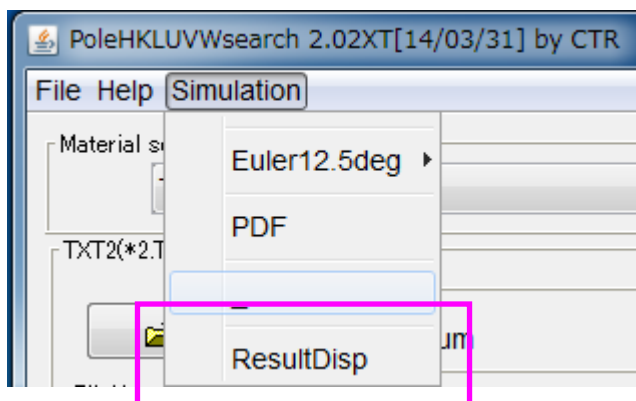
試料の選択



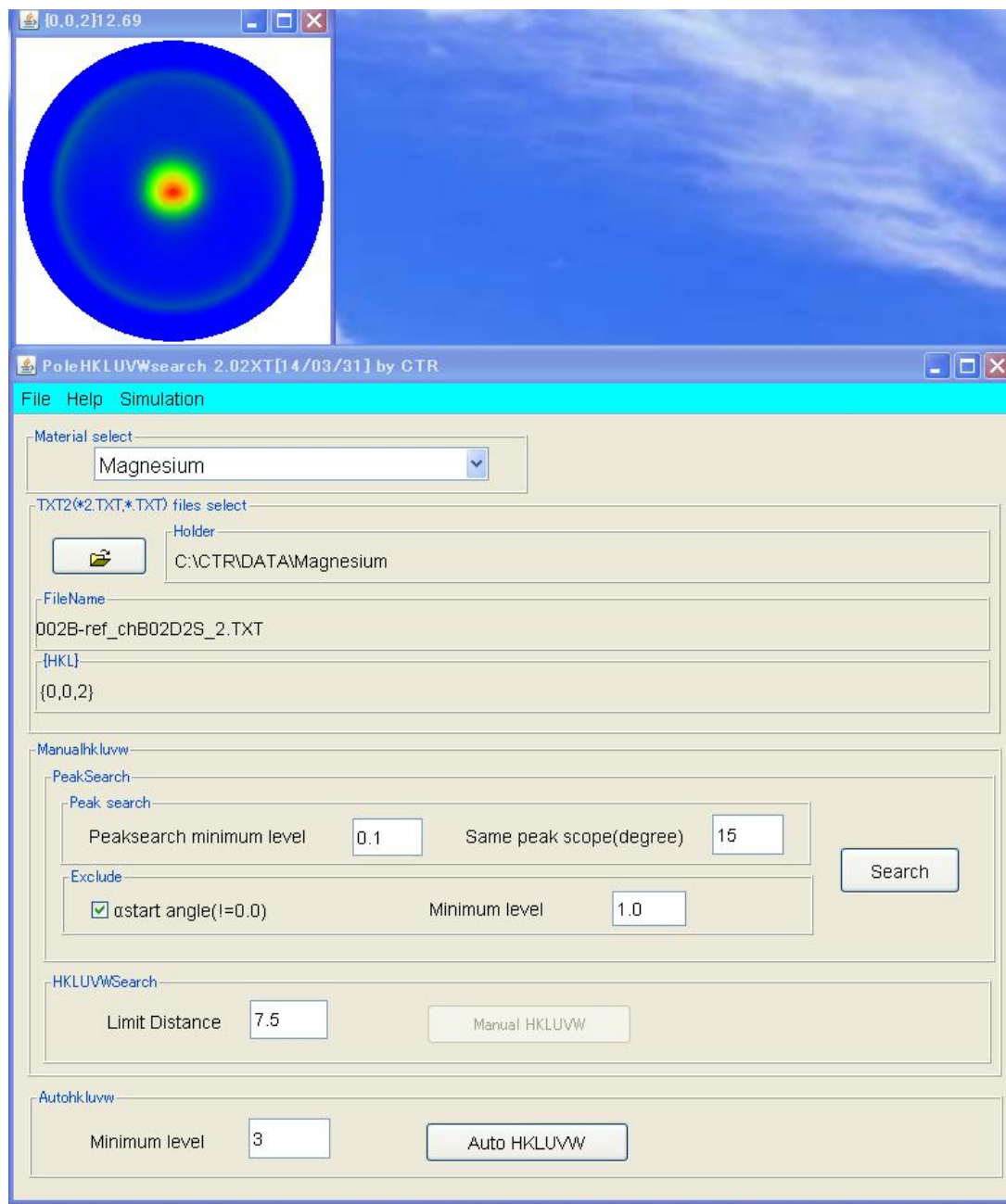
Autohkluvwで検索



Simulation で結果表示



Magnesiumの場合



{0001}極点図の中心の極がある場合、Autohkluvw モードで検索する場合、Minimum level=3 では

```

***Result***
0,0,1      {0001}<10-10>      {0001}<2-1-10>
           1.0             1.0
    
```

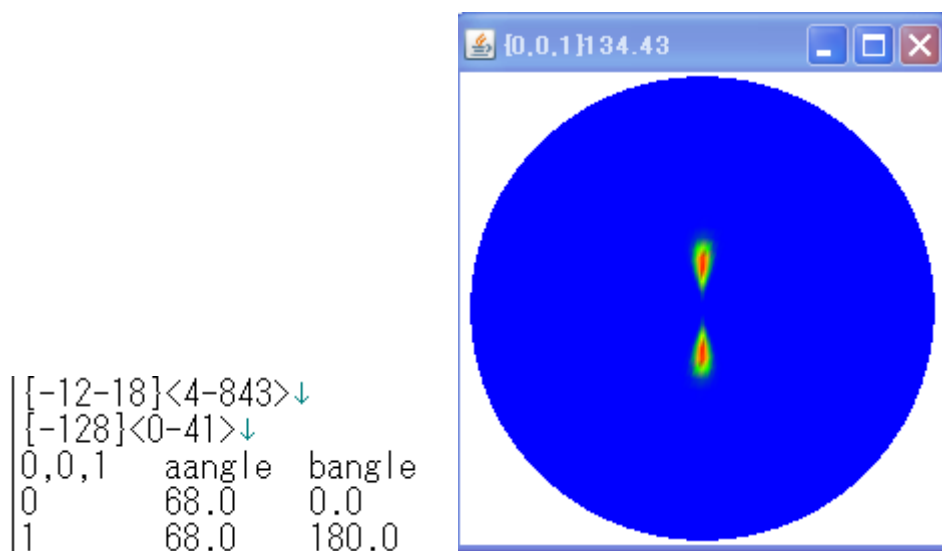
Minimum level=2 では

```

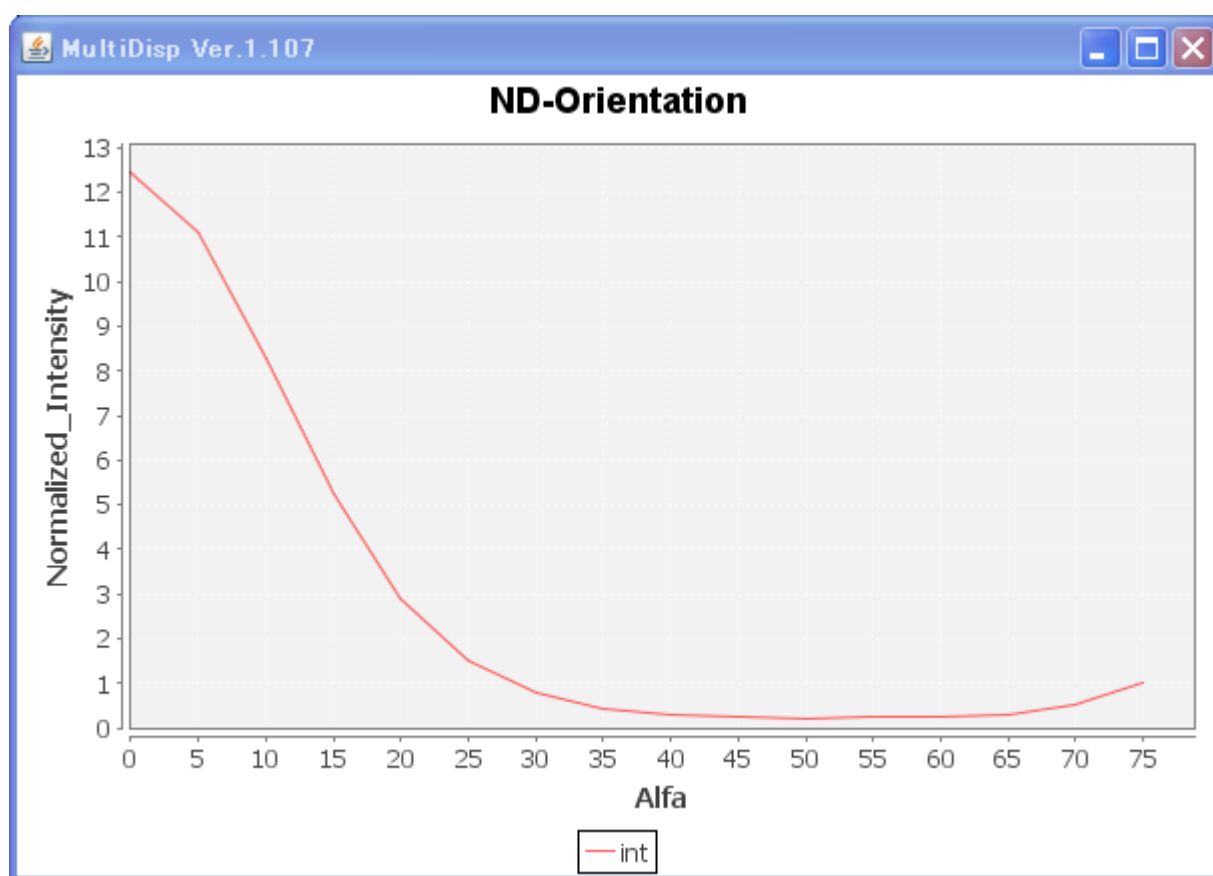
***Result***
0,0,1      {-12-18}<4-843>      {0001}<10-10>      {0001}<2-1-10>
           1.0             1.0             1.0
    
```

{-12-18}<4-843>が加わった結果になる。

$\{-12-18\} \langle 4-843 \rangle$ では α 角度68度に極がある。



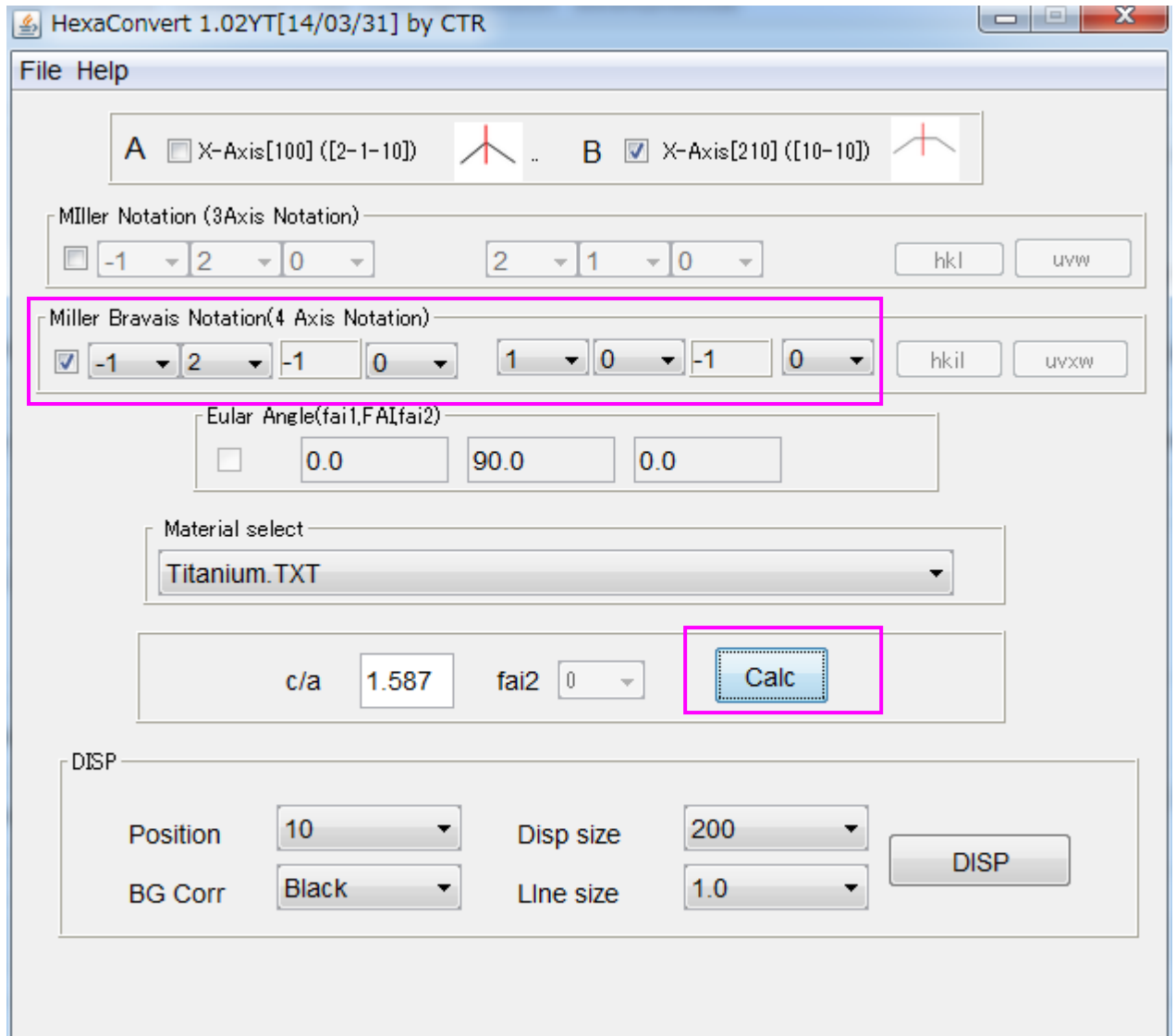
入力極点図の α 方向のプロファイル（極点図の中心は0.0）



$\alpha = 68$ 度の極密度が、2.0以上の為、検出されます。

しかし、複数の極点図を入力すると、他の極点図で不一致になるため、 $\{-12-18\} \langle 4-843 \rangle$ は検出されません。

4 指数 $\langle \text{---} \rangle$ 3 指数の変換はHexaConvertソフトウェアで確認出来ます。



4 指数部分を入力し、Calcで3 指数変換

3 指数部分を入力してCalcで4 指数変換も可能