極点図のピークサーチと方位決定を行う

PoleHKLUVWSearchソフトウエア Ver. 2.05M

2020年07月23日 *HelperTex Office*



*	@version	1.0
	Sverbion	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
- * 2013/08/06 Ver2.02X
- *2013/08/11 Ver2.03X
- *2020/07/23 Ver2.04 W
- *2021/08/31 Ver2.05
- 拡張子 *.TXT も読み込む(stdlibの TXT2Select()修正)
- Titanium,Magnesium のサポート
- 複数の極点図で相対強度をサポート
- Windows10 極点図間の隙間対策
 - 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。 本ソフトウエアは、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、ODFPoleFigurte2 ソフトウエアの各種補正後の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。

必要なソフトウエア

PoleHKLUVWSearch(Ver1.06X 以降)ソフトウエア

本ソフトウエア

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

計算結果のTEXTデータを表示

PoleDisplayTXT2 ソフトウエア (CTR パッケージソフトウエアに含まれる) 入力極点図や合成極点図を表示

ODFPoleFigure2 ソフトウエア(CTR パッケージソフトウエアに含まれる) 測定極点図の各種補正を行い、PoleHKLUVWSearch ソフトウエアの入力データ 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。 C:\CTr\bin\PoleHKLUVWSearch.jar をダブルクリックする。

ODFPoleFigure2->Tookit->POleOrientationTools



- **-** × 👺 PoleOrientationTools 1.04X by CTR user CTR HelperTex File Help TPF, HPF, TXT, TXT2 fnd,frd,ftd Display Orientation Full Polefigure TXT TXT2 NDOrientation fnd Display Reflection(001) PoleFigure TXT2 fnd,frd,ftd Display CreateExpPoleFigure **Reflection PoleFigure** TXT2 RandomLevelCalc Cr Display PoleFigure TXT2 PFConnection Complete polefigure Trans,Reflection polefigureTXT2 TXT2 (α, β) PoleHKLUVWSearch PoleFigure TXT2

ソフトウエアの使い方

複数の極点図(TXT2)を選択	
選択により、Holder, Filename、HKLが表示される	
ODPEuler 角度選択	
PDF 表示	
合成極点図表示	
PoleHKI J VWgearch 2 03XT[14/03/31] by CTR	
File Help Simulation Absolute density	
Material select	
Cubic 👻	
TXT2(*2,TXT,*.TXT) files select	
Holder	
C FileName	
I ∩ Manualhk luvw	
PeakSearch	
Peak search	
Peaksearch minimum level 0.1 Same peak scope(degree) 10	Soarsh
Exclude	
HKLUVWSearch	
Limit Distance 20 Manual HKLUW	
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ズデータを削除	
終端データの扱い 個別極点図の最低レベル(*maxn/MAX ピー	 クサーチを行う
結晶方位 euler 角度の制限 {hkl} <uvw>の決定</uvw>	

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 自動{hkl}<uvw>の決定

Material 部

Material :	select	1
	Cubic 👻	

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 p e a k 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で、結晶方位と比較する。

Autohkluvw

Mimimum 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

PoleHKLUVWsearch 2.03XT[14/03/31] by CTR							
File Help Simulation Absolute density							
Material s	Euler10degStep1deg		Euler20deg				
TXT2(*2.T	PDF		Euler12.5deg				
	-		Euler10degStep1deg				
- File Name	ResultDisp						

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

PoleHKLUVWsearch 2.03XT[14/03/31] by CTR							
File Help Simulation Absolute density							
Material select	Density 🕨	Absolute density					
Cubic		Relativity 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

ODFPoleFigure2 ソフトウエ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

TXT2ファイルを作成

PoleHKLUVWSearch ソフトウエ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

✓ {1,1,1}8207.6 - □ × ✓ {2,2,0}6890.0 - □ × ✓ {2,2,0}20	
DDFPoleFigure2 3.94 by	CTR PDuser ctr helpertex – 🗆 🗙
File Linear(absolute)3D ToolKit Help InitSet BGMode Measure Condition Free OverlapRevi	sion MinimumMode Rp% Normalization
Files select ASC(RINT-PC) III-OSC ASC 200-OSC ASC 220-OSC ASC	
Calcration Condition	_hkl
Previous Next U+UTN+D+TAHODEPoleFigure¥111-OSC.ASC	1,1,1 Change
Backgroud delete mode	Smoothing
O DoubleMode ○ SingleMode ○ LowMode ○ HighMode ○ Nothing BG defocus DSH1.2mm+3	ichulz+RSH5mm
(Minimum(co.6) Denovement verage(a) X 0.5 Trans blinds angle 30.	RD
Peak Slit 7.0 mm BG Slit 7.0 mm ✔ PeakSlit / BGS BG Scope 80.0 deg. 90.0 deg.	Set Disp @Inhibit
AbsUalc	rcm Thickness0 1 cm v Set 2Theta 38.42 deg. ● 1/Kt Profile
Defocus Tile Select Trasmission defocus HKL+T	
Defocus(1) functions file Make defocus function files by TXT2 Files Normalization degree of a pol	onomial 0 TenckhoffFitting
Defocus(2) function files folder(Calc backdefocus) DSH12mm+Schulz+RSH5mm	✓ Search minimum EqualAngleRp%(Cubic only) ● 1/Ra Profile
Smoothing for ADC	OuFiles Cancel Calc Connect
Cycles 2 Vivelent 10 V Disp CTR Connect Average	As MTexAsc Ras TXT OTXT2 Exit&ODF ODF
	ValueODFVF-B ValueODFVF-A
Filemake success !!	Select crystal : Cubic 19/12/19
d e f o c u s は内部計算 d e f o c u s 曲線で補正し	、 更に 最小R p % 化を 行った。
4.03(1981.2) - □ × 4.03(1981.2)	.) - • × 🛛 3.31(565.3) - • ×

本ソフトウエア

{1,1,1}4.03 -	× 🛛 {2,0,0}9.55 - 🗆 × 🖓 {2,2,0}3.31 - 🗆 ×
	PoleHKLUVWsearch 2.03S by CTR SPuser – 🗖
le Help Simulation Absolute d	Jensity
Material select	
Cubic	· · · · · · · · · · · · · · · · · · ·
TXT2(*2.TXT,*.TXT) files select	
	NODEDaloEigura
	A\ODFPoleFigure
FileName	
FileName 111-OSC_chR0B00D2S_2.TXT	A\ODFPoleFigure T 200-OSC_chR0B00D2S_2.TXT 220-OSC_chR0B00D2S_2.TXT
FileName (Holder C:\CTR\DATA C:\CTR\DATA C:\CTR\DATA (HKL) (1,1,1) {2,0,0} {2,2,0}	A\ODFPoleFigure T 200-OSC_chR0B00D2S_2.TXT 220-OSC_chR0B00D2S_2.TXT
FileName 111-OSC_chR0B00D2S_2.TXT {HKL} {1,1,1} {2,0,0} {2,2,0}	AVODFPoleFigure T 200-OSC_chR0B00D2S_2.TXT 220-OSC_chR0B00D2S_2.TXT
FileName C:\CTR\DATA 111-OSC_chR0B00D2S_2.TXT [HkL] {1,1,1} {2,0,0} {2,2,0} [Manualhk luvw	AVODFPoleFigure T 200-OSC_chR0B00D2S_2.TXT 220-OSC_chR0B00D2S_2.TXT
FileName C:\CTR\DATA 111-OSC_chR0B00D2S_2.TXT [HKL] {1,1,1} {2,0,0} {2,2,0} [Manualhkluvw PeakSearch	AVODFPoleFigure T 200-OSC_chR0B00D2S_2.TXT 220-OSC_chR0B00D2S_2.TXT
FileName C:\CTR\DATA C:\CTR\DATA C:\CTR\DATA [HKL] {1,1,1} {2,0,0} {2,2,0} Manualhkluvw PeakSearch Peak search Peak search Peaksearch minimum lev	AVODFPoleFigure T 200-OSC_chR0B00D2S_2.TXT 220-OSC_chR0B00D2S_2.TXT vel 0.1 Same peak scope/degree) 15
FileName C:\CTR\DATA FileName 111-OSC_chR0B00D2S_2.TXT {HKL} {1,1,1} {2,0,0} {2,2,0} Manualhkluvw PeakSearch Peaksearch Peaksearch minimum lev FileName	AVODFPoleFigure T 200-OSC_chR0B00D2S_2.TXT 220-OSC_chR0B00D2S_2.TXT vel 0.1 Same peak scope(degree) 15
FileName 111-OSC_chR0B00D2S_2.TXT {HkL} {1,1,1} {2,0,0} {2,2,0} Manualhkluvw PeakSearch PeakSearch Peaksearch Peaksearch Exclude Exclude	AVODFPoleFigure T 200-OSC_chR0B00D2S_2.TXT 220-OSC_chR0B00D2S_2.TXT vel 0.1 Same peak scope(degree) 15 Search
FileName C:\CTR\DATA C:\CTR\DATA C:\CTR\DATA C:\CTR\DATA C:\CTR\DATA (HKL) {1,1,1} {2,0,0} {2,2,0} Manualhkluvw PeakSearch PeakSearch PeakSearch PeakSearch minimum lev Exclude C:\CTR\DATA	AVODFPoleFigure T 200-OSC_chR0B00D2S_2.TXT 220-OSC_chR0B00D2S_2.TXT vel 0.1 Same peak scope(degree) 15 Minimum level 1.0 Search
FileName C:\CTR\DATA FileName 111-OSC_chR0B00D2S_2.TXT {HKL} {1,1,1} {2,0,0} {2,2,0} Manualhkluvw PeakSearch PeakSearch PeakSearch Peaksearch minimum lev Exclude ☑ ɑstart angle(!=0.0) HKLUM/Search	AVODFPoleFigure T 200-OSC_chR0B00D2S_2.TXT 220-OSC_chR0B00D2S_2.TXT vel 0.1 Same peak scope(degree) 15 Minimum level 1.0 Search
Holder C:\CTR\DATA FileName 111-OSC_chR0B00D2S_2.TXT [HKL] {1,1,1} {2,0,0} {2,2,0} Manualhk luvw PeakSearch PeakSearch Peaksearch Peaksearch Peaksearch Exclude ☑ ɑstart angle(!=0.0)	AVODFPoleFigure T 200-OSC_chR0B00D2S_2.TXT 220-OSC_chR0B00D2S_2.TXT vel 0.1 Same peak scope(degree) 15 Minimum level 1.0
FileName 111-OSC_chR0B00D2S_2.TXT {HKL} {1.1,1} {2,0,0} {2,2,0} Manualhkluvw PeakSearch PeakSearch PeakSearch PeakSearch Peaksearch Exclude ☑ ɑstart angle(!=0.0) HKLUVWSearch Limit Distance 7.5	AVODFPoleFigure T 200-OSC_chR0B00D2S_2.TXT 220-OSC_chR0B00D2S_2.TXT vel 0.1 Same peak scope(degree) 15 Vel 0.1 Same peak scope(degree) 15 Minimum level 1.0 Manual HKLUVW
FileName 111-OSC_chR0B00D2S_2.TXT {HKL} {1,1,1} {2,0,0} {2,2,0} Manualhkluvw PeakSearch Peaksearch Peaksearch Peaksearch Exclude Imit Distance 7.5	AVODFPoleFigure T 200-OSC_chR0B00D2S_2.TXT 220-OSC_chR0B00D2S_2.TXT vel 0.1 Same peak scope(degree) 15 Vel 0.1 Same peak scope(degree) 15 Minimum level 1.0 Manual HKLUVW
FileName 111-OSC_chR0B00D2S_2.TXT {HKL} {1,1,1} {2,0,0} {2,2,0} Manualhkluvw PeakSearch PeakSearch PeakSearch PeakSearch Exclude ☑ αstart angle(!=0.0) HKLUVWSearch Limit Distance 7.5	AVODFPoleFigure T 200-OSC_chR0B00D2S_2.TXT 220-OSC_chR0B00D2S_2.TXT vel 0.1 Same peak scope(degree) 15 Vel 0.1 Same peak scope(degree) 15 Minimum level 1.0 Auto HKLUVW

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



PeakSearch 結果

	<u>144</u>	TextDis	play 1.13S (:¥NewCTR¥CTR
E	File Help			
v	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
J.	0	90.0	0.0	8.7
-	1	50.0	25.0	1.16
	2	50.0	160.0	1.15
r	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

#	TextDisp	lay 1.13S C	¥NewCTR¥	CTR¥work¥P	oleHKLUVW	Search¥RES	ULT.TXT -	- 🗆 🛛 🗡
File Help								
1,1,1	aangle	bangle	Polelevel					
0	35.0	45.0	3.69	{001}<100>(0	0.0)	{122}<2-21>	(0.0)	{132}<6-43>
1	35.0	135.0	4.0	{001}<100>(0	0.0)	{122}<2-21>	(0.0)	{132}<6-43>
2	35.0	225.0	4.03	{001}<100>(0	0.0)	{122}<2-21>	(0.0)	{132}<6-43>
3	35.0	315.0	3.51	{001}<100>(0	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	0.0)	{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	0.0)	{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	0.0)	{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 $(\alpha \mathbf{b}, \beta \mathbf{b})$ の距離を表します。

5度間隔で測定した場合、最大5度異なってい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。



Autohkluvw の決定

TXT2 files select Holder C:\CTR\DATA\ODFPoleFigure FileName
TXT2 files select Holder C:\CTR\DATA\ODFPoleFigure FileName
FileName
111-OSC_chGUB02D2S_2.TXT_200-OSC_chGUB02D2S_2.TXT_220-OSC_chGUB02D2S_2.TXT [HKL]
{1,1,1} {2,0,0} {2,2,0}
Manualhkluvw PeakSearch Peak search Peaksearch minimum level 1.0 Same peak scope(degree) 15
Exclude Search
HKLUVWSearch Limit Distance 7.5 Manual HKLUVW
Autohkluvw Minimum level 1.0 Auto HKLUVW

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。

<u>#</u>	TextDisp	olay 1.13S C	:¥NewCTR¥(CTR¥work¥P	oleHKLUVW	Search¥RESULT.TXT
File Help						
Calc						
	{001}<100>	{013}<100>	{112}<1-10>	{122}<2-21>	{132}<6-43>	{233}<01-1>
1,1,1	1.0	0.75	0.33	0.5	0.4	0.25
1,0,0	1.0	1.0	0.16	0.08	0.25	0.5
1,1,0	1.0	0.75	0.25	0.5	0.37	0.66
Result						
	{001}<100>					
1,1,1	1.0					
1,0,0	1.0					
1,1,0	1.0					
1,0,0 1,1,0	1.0 1.0					

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

≝ {1,1,1}3.5 🗖 🗖 🗶 🖌	<u>≰</u> {2,0,0}2.82		≝ {2,2,0}4.3	- • ×	
PoleHKLUVWsearch 2.02XT[14/03/3]	[] by CTR				X
File Help Simulation					
Material select					
Holder D:\tmp\NO010\ASC FileName 111-NO010_chB0DS_2.TXT_200-N {HKL} {1,1,1} {2,0,0} {2,2,0}	0010_chB0DS_2.	TXT 220-NO010_ch	B0DS_2.TXT		
Manualhkluvw					
Peaksearch Peaksearch Peaksearch minimum level	0.1 S	ame peak scope(de	gree) 15	Search	
I αstart angle(!=0.0)	Minim	um level 2			
HKLUVWSearch Limit Distance 7.5		Manual HKLUVW			
Autohkluvw					
Minimum level 1.0		Auto HKLUVW			

Autohkluvw

Autohkluvv	ψ							
Mi	nimum leve	1.0						
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	ı ————							
Mir	nimum leve	8.0						
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

1.0

Resultdisp で合成極点図を表示(Euler12.5deg)

1.0

1.0

1.0 1.0

1,0,0

1,1,0



Autohkluvw

0.65 Minimum level

Calc

_ 1									
		{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				
	1								

Resultdisp で合成極点図を表示(Euler12.5deg)



方位にが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(ϕ 1、 Φ 、 ϕ 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 minimum level 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 思われます。

Titaniumの場合

Material で Ritanium を選択

Material s	select	
	Titanium 👻	
	· · · · · · · · · · · · · · · · · · ·	

試料の選択

{0,0,1}4.94						
SoleHKLUVWsearch 2.02XT[14/03/31] by CTR File Help Simulation						
Material select						
Titanium						
TXT2(*2.TXT,*.TXT) files select						
D:\tmp\Titanium						
- FileName						
001_chR0B22D2S_2.TXT 100_chR0B22D2S_2.TXT 101_chR0B22D2S_2.TXT						
(HKL)						
{0,0,1} {1,0,0} {1,0,1}						
Manualhkluvw						
PeakSearch						
Peaksearch minimum level 0.1 Same peak scope(degree) 10						
Exclude Search						
αstart angle(!=0.0) Minimum level 0.1						
HKLUVWSearch						
Limit Distance 20 Manual HKLUVW						
Autohkluvw						
Minimum level 1.0 Auto HKLUVW						

Autohkluvw で検索

File Help			
Calc			
	{-12-10}<10-10>	{-12-14}< 1 0-10>	{-12-15}<10-10>
0,0,1	1.0	1.0	1.0
1,0,0	1.0	1.0	1.0
1,0,1	1.0	1.0	1.0
Result			
	{-12-10}<10-10>	{-12-14}<10-10>	{-12-15}<10-10>
0,0,1	1.0	1.0	1.0
1,0,0	1.0	1.0	1.0
1,0,1	1.0	1.0	1.0

PoleHKLUVWsearch 2.02XT[14/03/31] by CTR				
File Help Simulation				
- Material s	Euler12.5deg >			
TXT2(*2.T	PDF			
	ResultDisp	m		



Magunesiumの場合

PoleHKLUVWsearch 2.02XT[14/03/31] by File Help Simulation	CTR 🗖 🗖 🗙
Material select Magnesium TXT2(#2.TXT,#.TXT) files select Holder	
-FileName 002B-ref_chB02D2S_2.TXT -{HKL} {0,0,2} Manualhkluvw	
PeakSearch Peak search Peaksearch minimum level 0.1	Same peak scope(degree) 15
Exclude	Minimum level 1.0
HKLUVWSearch Limit Distance 7.5	Manual HKLUVW
Autohkluvw-	Auto HKLUVW

{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	{0001}<10-10>	{0001}<2-1-10>	
0,0,1	1.0	1.0	
m level=2 では			

Minimu

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

{-12-18}<4-843>が加わった結果になる。

{-12-18} < 4-843>では α 角度 68度に極がある。



{-12-18}<4-843>↓ {-128}<0-41>↓ 0,0,1 aangle bangle 0 68.0 0.0 1 68.0 180.0

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)



α=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}<4-843>は検出されません。

A HexaConvert 1.02YT[14/03/31] by CTR
File Help
A 🔤 X-Axis[100] ([2-1-10]) 🗼 B 🗹 X-Axis[210] ([10-10])
MIller Notation (3Axis Notation)
Miller Bravais Notation(4 Axis Notation)
Eular Angle(fai1,FAI,fai2) 0.0 90.0
Material select Titanium.TXT
c/a 1.587 fai2 0 - Calc
[DISP
Position10Disp size200DispBG CorrBlackLine size1.0Disp

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