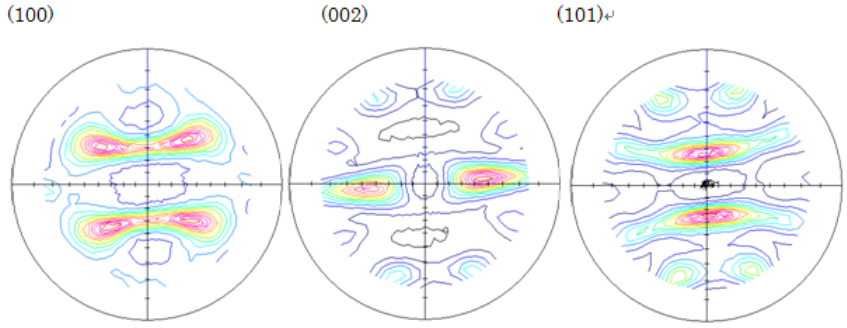
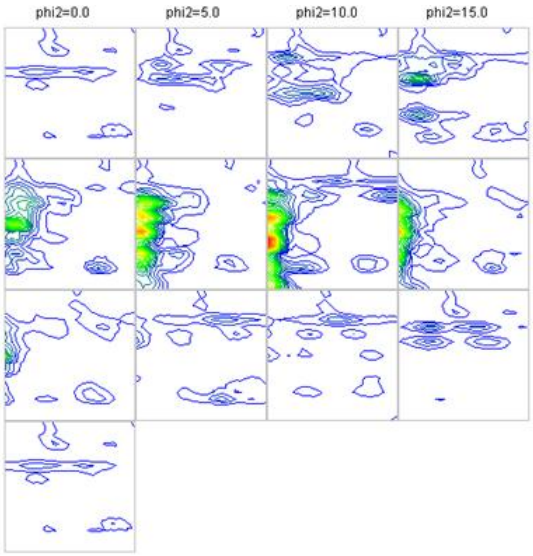
# ｐｏｐＬＡによる六方晶Ｔｉの ＯＤＦ解析と再計算極点図

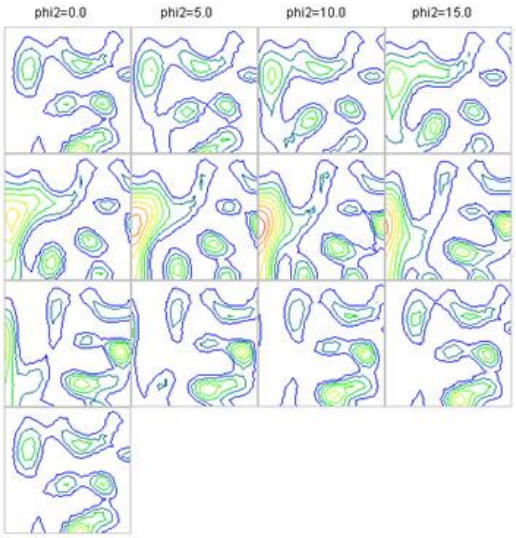
入力データ



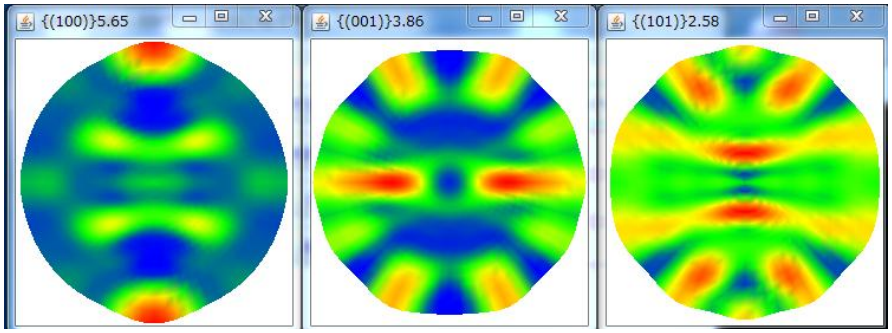

WIMV




Harmonic




Harmonic 再計算極点図




２０１３年０４月０５日

*ＨｅｌｐｅｒＴｅｘ　Ｏｆｆｉｃｅ*

１．概要

ｐｏｐＬＡソフトウエアは、Ｌｏｓｓ　Ａｌａｍｏｓで作成されたＯＤＦでＨａｒｍｏｎｉｃとＷＩＭＶ法がサポートされているＯＤＦ解析ソフトウエアであり、Ｄｏｓベースで動作する。

（WIMV は開発者の名前で、Williams method ,Imhof method を Matthies と Vinel が結合）

リガクＲＩＮＴ２０００で測定したＴｉ（六方晶）の解析を行ってみる。

PFtoODF3 ソフトウエア Ver8.11）は、C:¥CTR¥work¥PFtoODF3¥popla80.txt ファイルが存在するとα領域を 1 点外挿する機能が働きます。（α0->75 のデータを 0->80 に拡張する）

２．入力データ

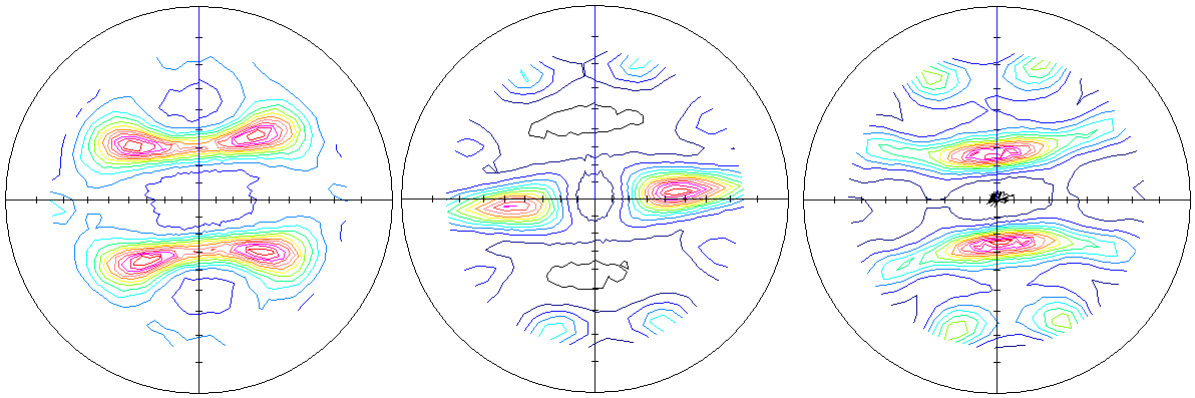
測定装置　リガク製ＲＩＮＴ２２００＋多目的試料台

測定試料　Ｔｉ材

３．測定極点図

| | | | |
|---|---|---|---|
| Ti(100).raw | 28 KB | 生ﾃﾞｰﾀ | 2007/01/26 12:53 |
| Ti(101).raw | 28 KB | 生ﾃﾞｰﾀ | 2007/01/26 14:22 |
| Ti(002).raw | 28 KB | 生ﾃﾞｰﾀ | 2007/01/26 13:37 |

(100)　　(002)　　(101)

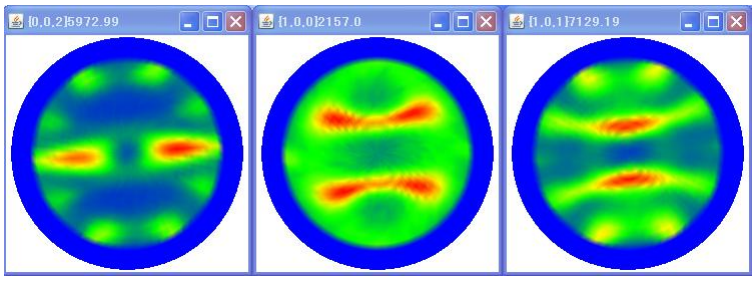


４．ＡＳＣデータに変換する。

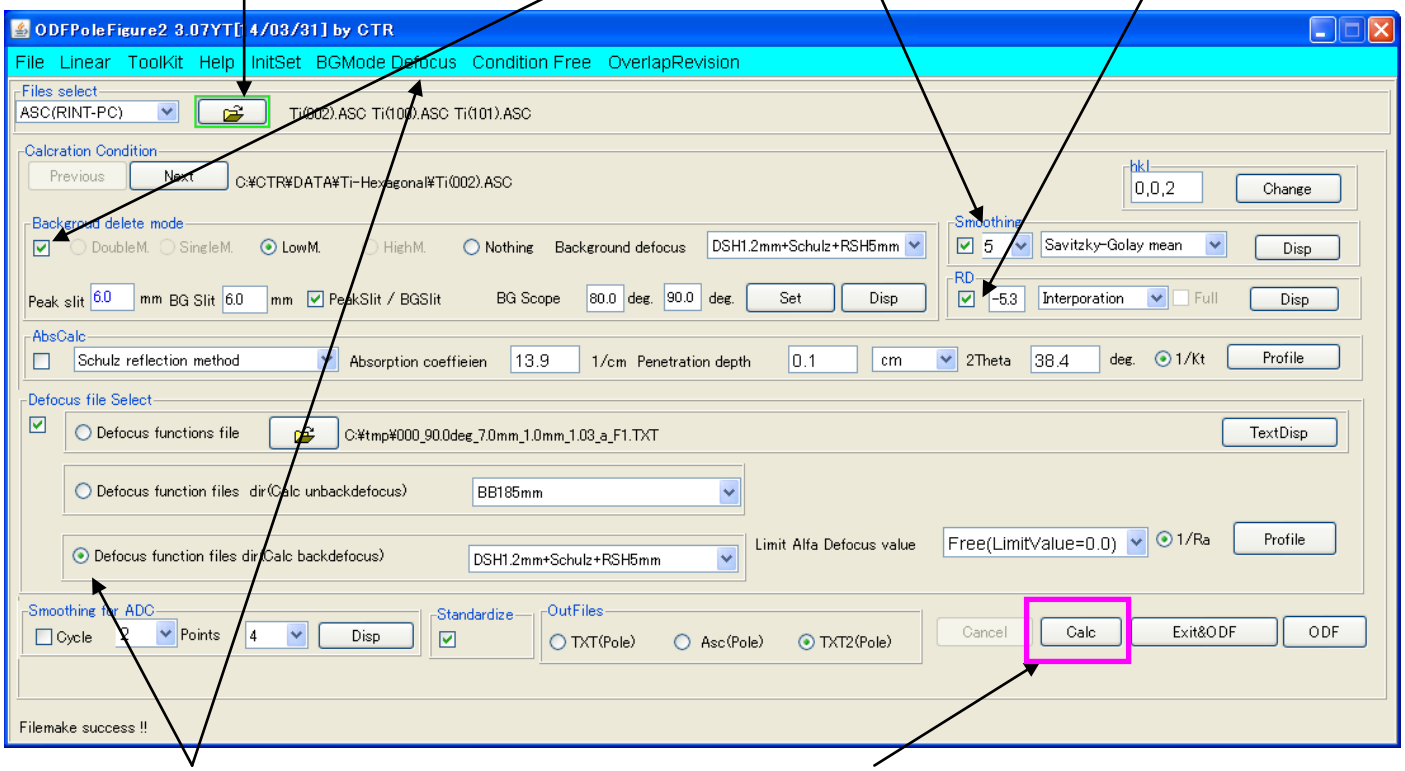
バイナリーデータ(raw)をテキストデータ(ASC)に RINT2000 付属のバイナリ->ASCII 変換


| | | | |
|---|---|---|---|
| Ti(002).ASC | 22 KB | RINT2000ｱｽｷｰ | 2013/04/05 6:59 |
| Ti(100).ASC | 22 KB | RINT2000ｱｽｷｰ | 2013/04/05 6:59 |
| Ti(101).ASC | 22 KB | RINT2000ｱｽｷｰ | 2013/04/05 6:59 |

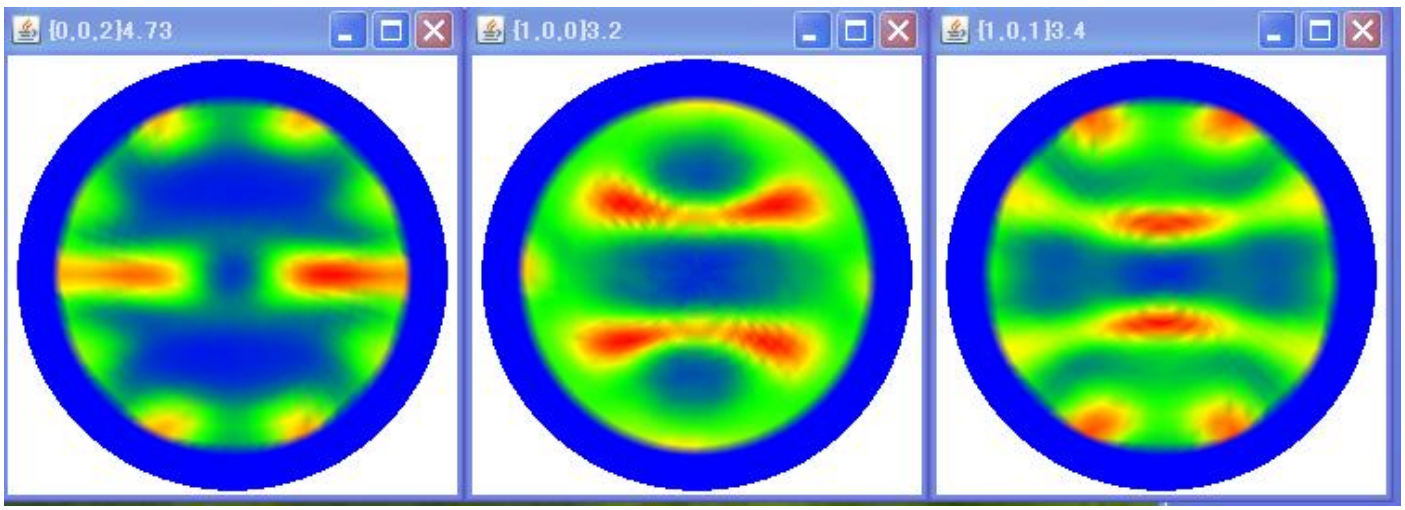
5．ODFPoleFigure2 ソフトウエア（CTR ﾊﾟｯｹｰｼﾞｿﾌﾄｳｪｱ）で正極点データ処理




複数のファイルを選択　　バックグランド補正　　平滑化　　RD 補正




Defocus（BG-defocus-mode）を指定　　補正計算開始

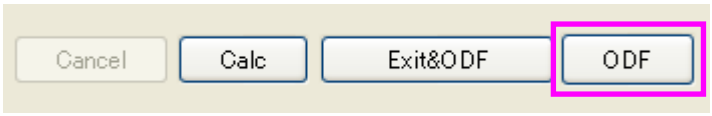



計算結果ファイル（TXT2）

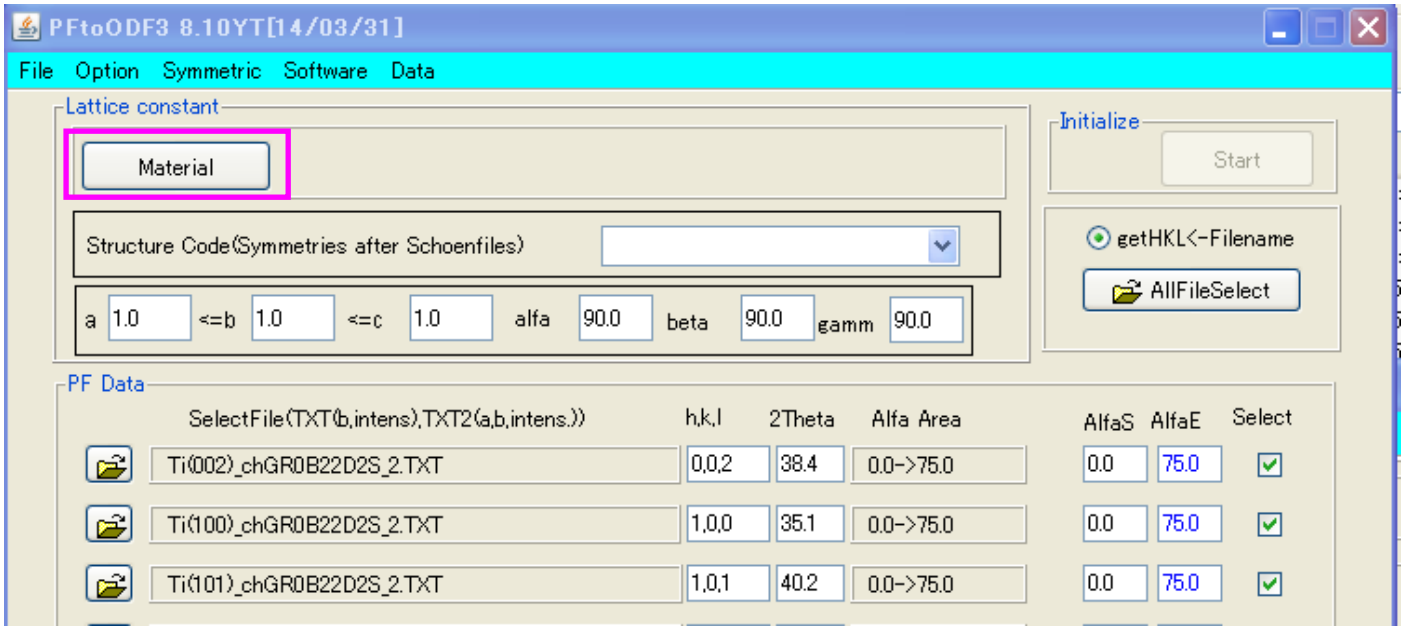
| | | | |
|---|---|---|---|
| Ti(002)_chGR0B22D2S_2.TXT | 22 KB | テキスト文書 | 2013/04/05 7:11 |
| Ti(100)_chGR0B22D2S_2.TXT | 22 KB | テキスト文書 | 2013/04/05 7:11 |
| Ti(101)_chGR0B22D2S_2.TXT | 22 KB | テキスト文書 | 2013/04/05 7:11 |

Ｃａｌｃで正極点処理が終了

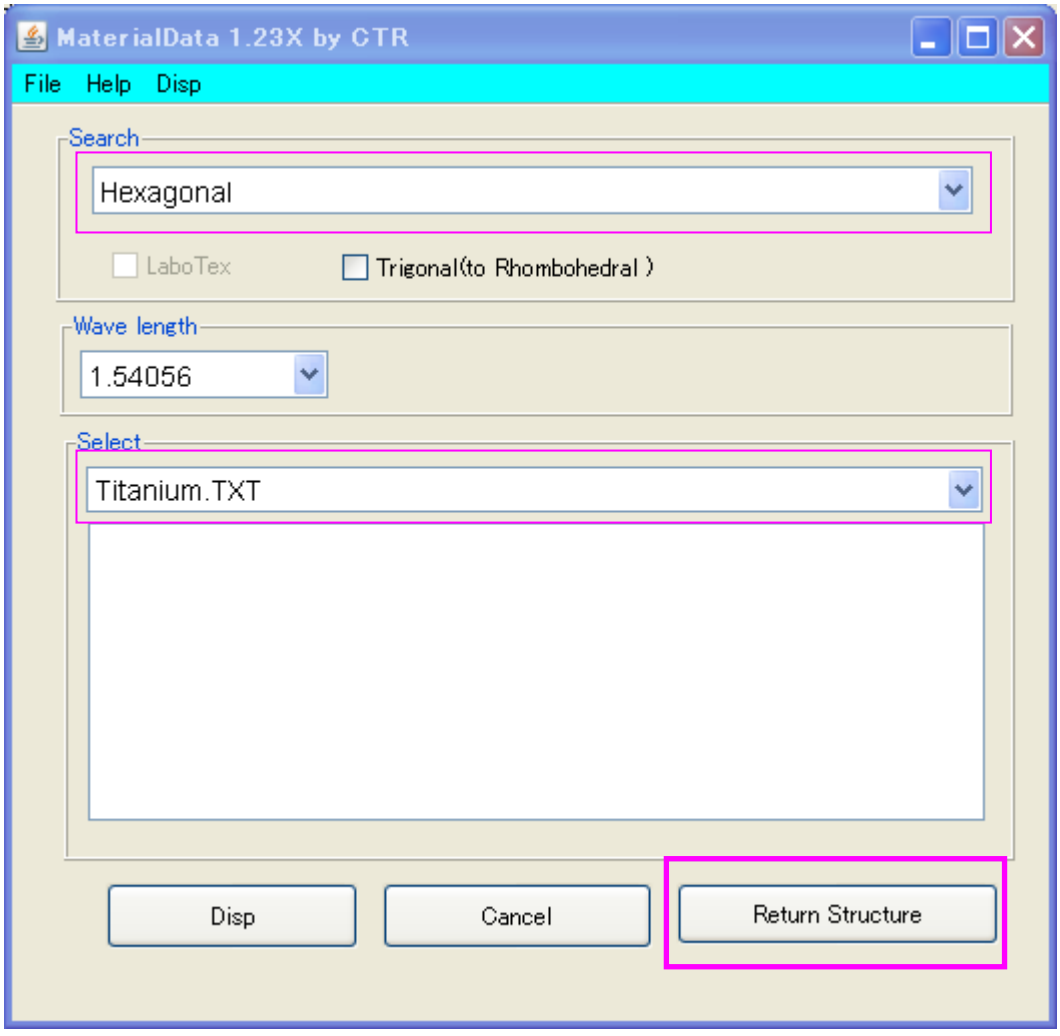
６．ｐｏｐＬＡ入力ファイルの作成




ＯＤＦをマウスクリックする。

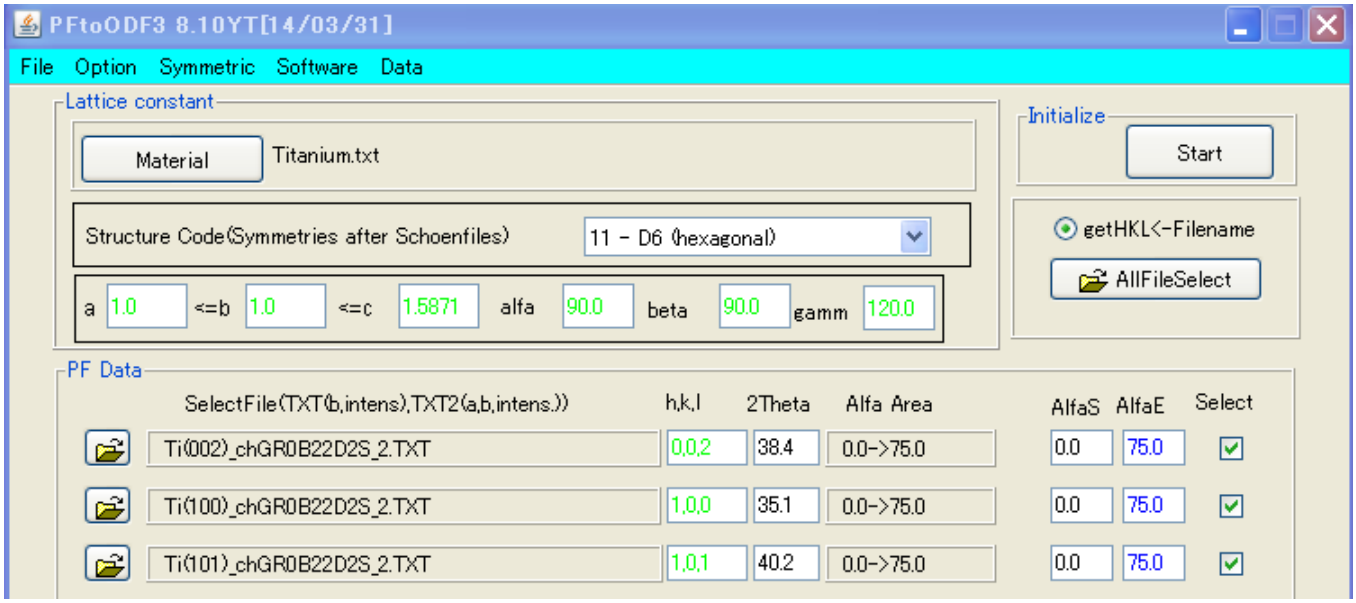



Material をマウスクリック

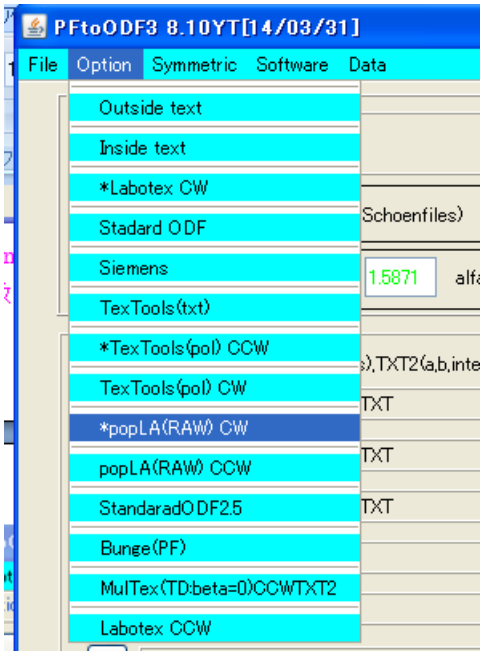



Hexagonal－＞Titanium を選択して ReturnStructure をマウスクリック

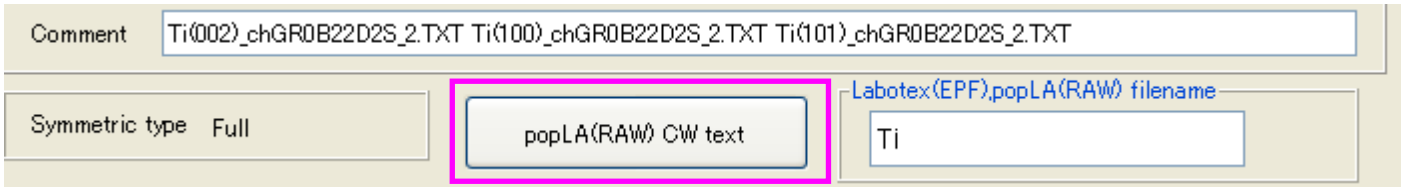
格子定数と軸比が表示され、極点図の指数チェックが行われる。

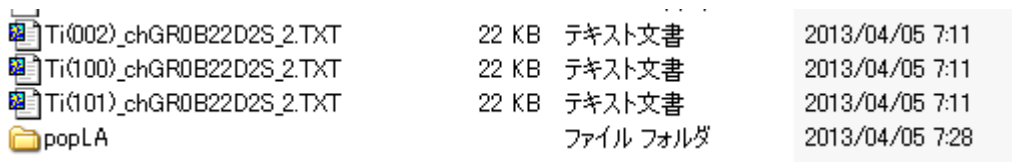


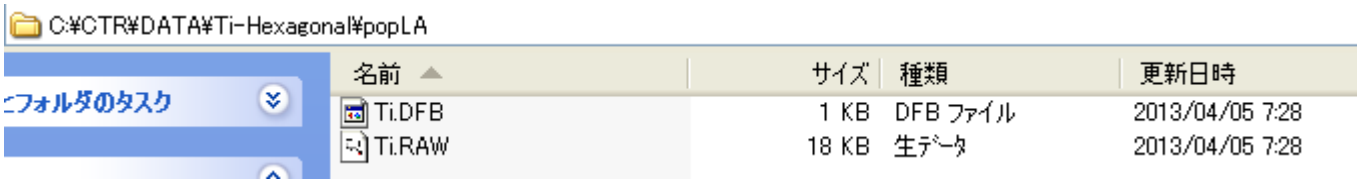

ｐｏｐＬＡ－ＯＤＦを選択




ファイル名をＴｉとしてｐｏｐＬＡ入力ファイルを作成




ｐｏｐＬＡ用入力データ作成完了

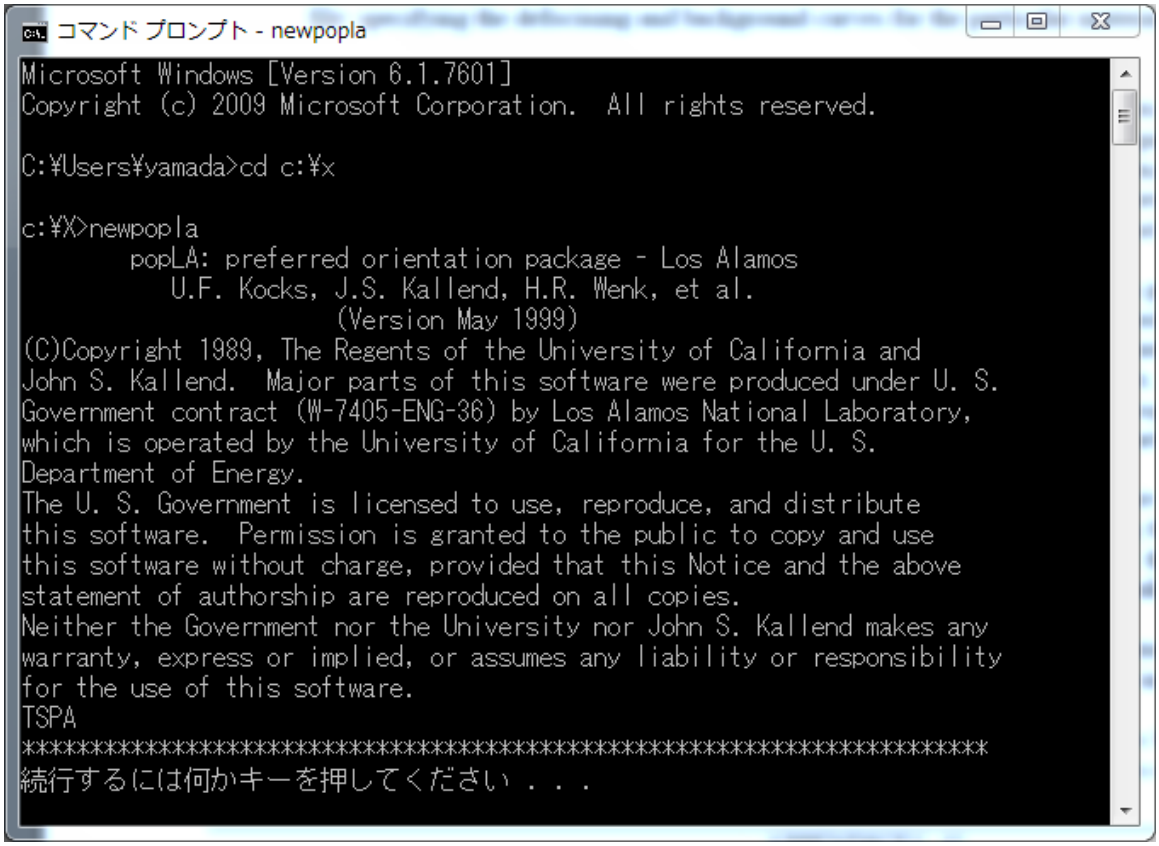
７．ｐｏｐＬＡ解析

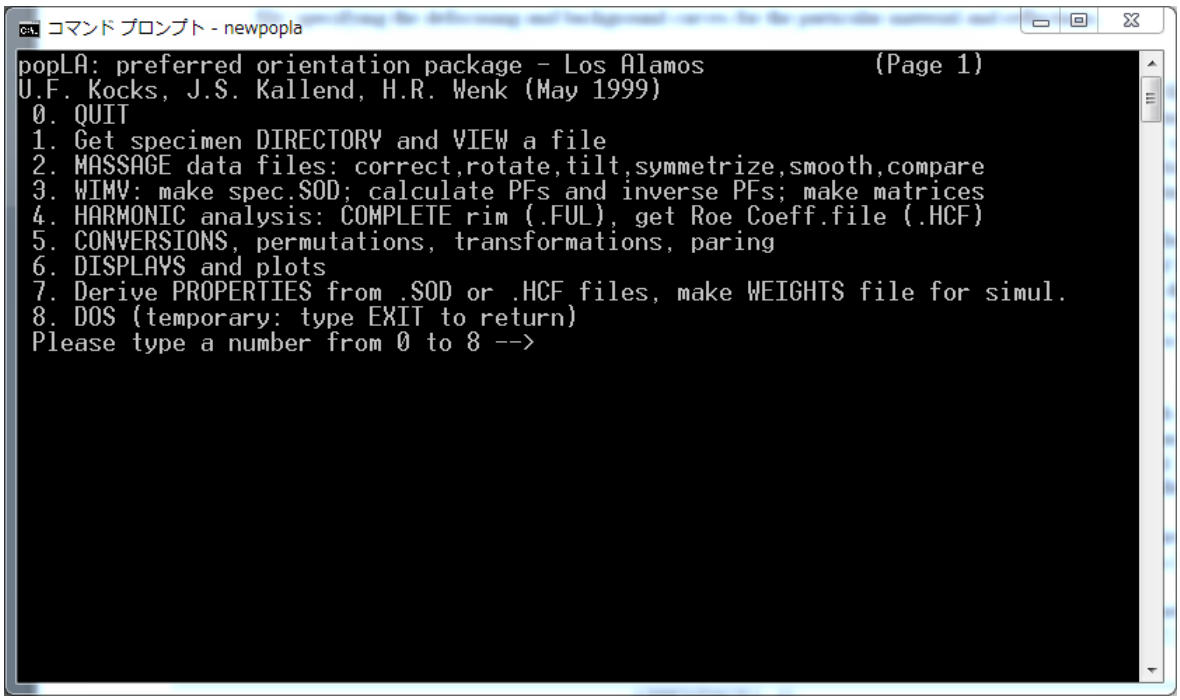
popLA は Dos ベースのソフトウエアであるため、Windows-7(32Bit)のＤｏｓモードを使う。

popLA は C:¥X にインストールされている。

解析を行うデータは、C:¥X にＣｏｐｙする。

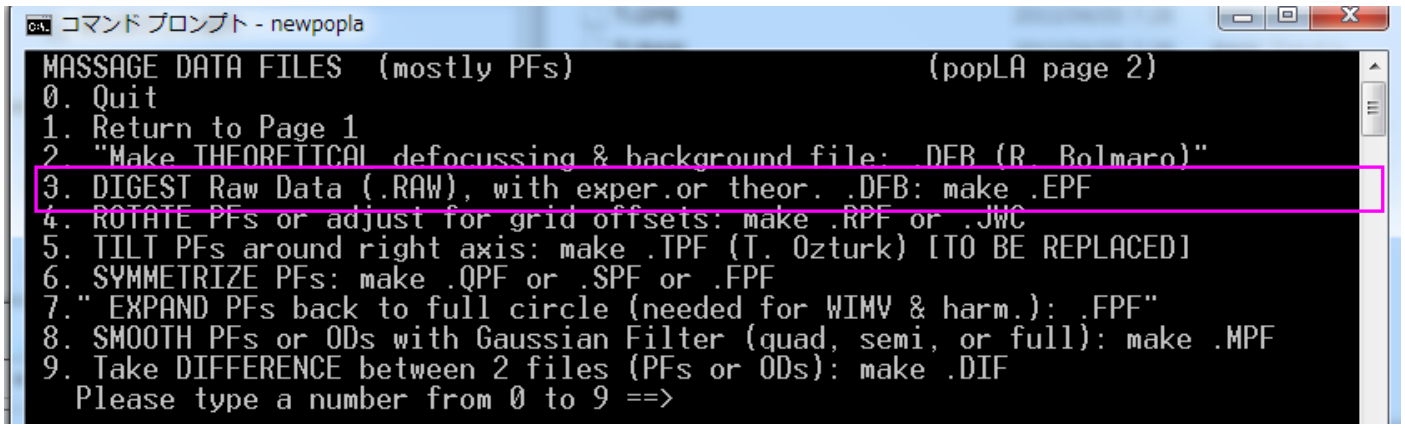
７．１　ｐｏｐＬＡを立ち上げ

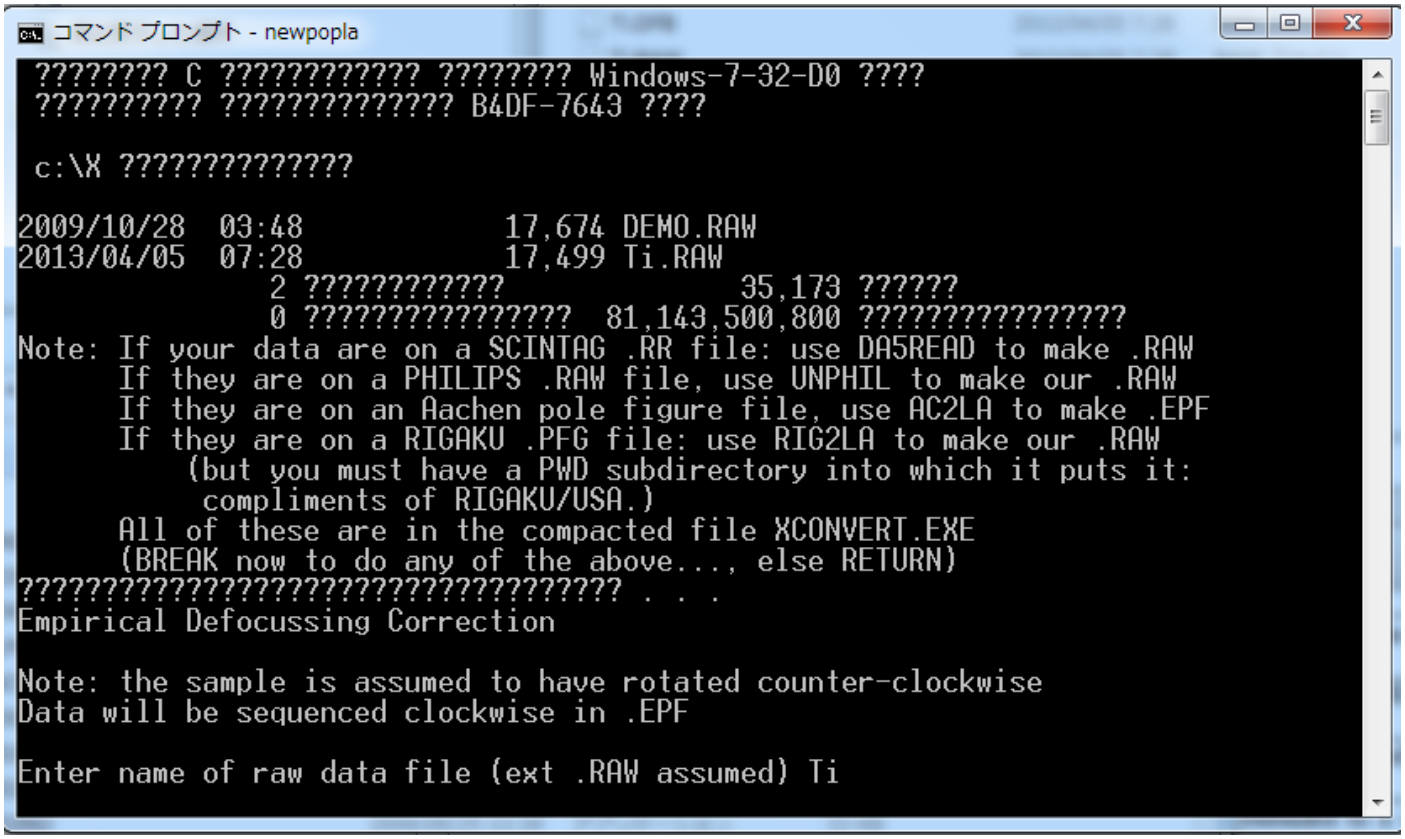



７．２　入力データをｐｏｐＬＡ補正データに変換

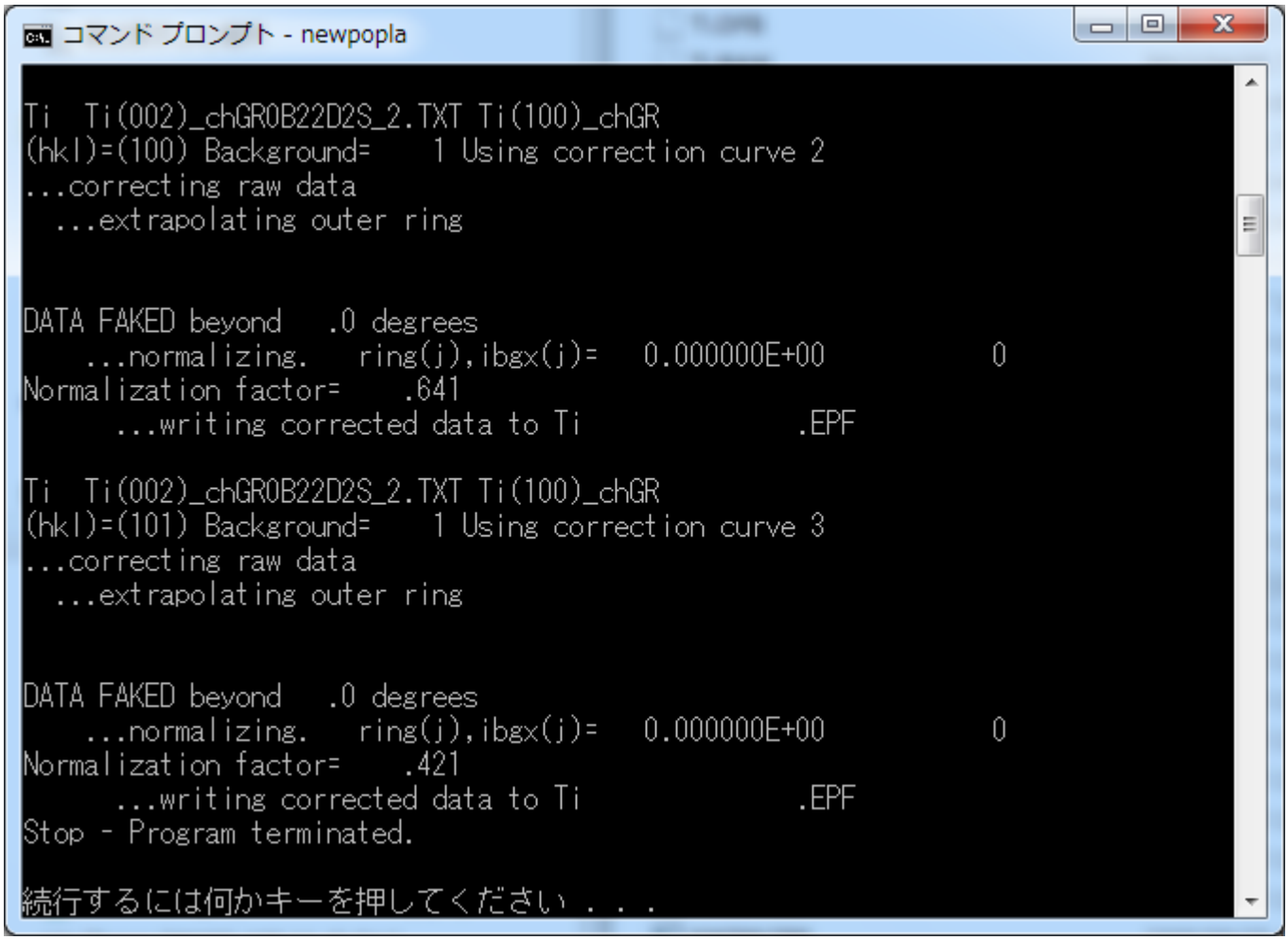
ｐｏｐＬＡは極点図の中心α＝０とした場合、０－＞８０の入力データを仮定している。


コマンド プロンプト - newpopla
MASSAGE DATA FILES (mostly PFs) (popLA page 2)
0. Quit
1. Return to Page 1
2. "Make THEORETICAL defocussing & background file: .DFB (R. Bolmaro)"
3. DIGEST Raw Data (.RAW), with exper.or theor. .DFB: make .EPF
4. ROTATE PFs or adjust for grid offsets: make .RPF or .JWC
5. TILT PFs around right axis: make .TPF (T. Ozturk) [TO BE REPLACED]
6. SYMMETRIZE PFs: make .QPF or .SPF or .FPF
7." EXPAND PFs back to full circle (needed for WIMV & harm.): .FPF"
8. SMOOTH PFs or ODs with Gaussian Filter (quad, semi, or full): make .MPF
9. Take DIFFERENCE between 2 files (PFs or ODs): make .DIF
Please type a number from 0 to 9 ==>

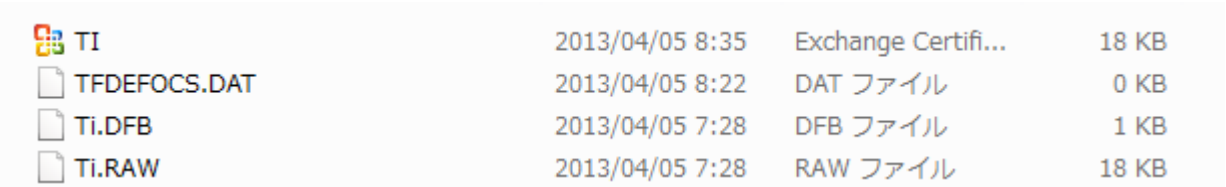

コマンド プロンプト - newpopla
???????? C ???????????? ???????? Windows-7-32-D0 ????
?????????? ????????????? B4DF-7643 ????
c:\X ?????????????
2009/10/28 03:48 17,674 DEMO.RAW
2013/04/05 07:28 17,499 Ti.RAW
2 ???????????? 35,173 ??????
0 ???????????????? 81,143,500,800 ????????????????
Note: If your data are on a SCINTAG .RR file: use DA5READ to make .RAW
If they are on a PHILIPS .RAW file, use UNPHIL to make our .RAW
If they are on an Aachen pole figure file, use AC2LA to make .EPF
If they are on a RIGAKU .PFG file: use RIG2LA to make our .RAW
(but you must have a PWD subdirectory into which it puts it:
compliments of RIGAKU/USA.)
All of these are in the compacted file XCONVERT.EXE
(BREAK now to do any of the above..., else RETURN)
???????????????????????????????????? . . .
Empirical Defocussing Correction
Note: the sample is assumed to have rotated counter-clockwise
Data will be sequenced clockwise in .EPF
Enter name of raw data file (ext .RAW assumed) Ti

Ｔｉを指定

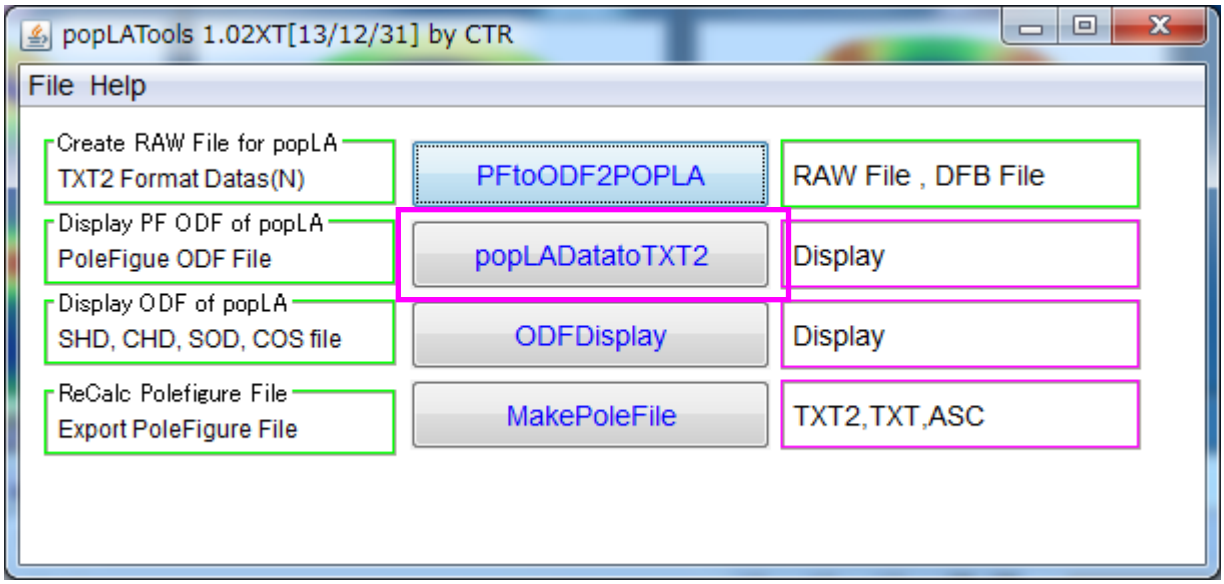

Enter name of raw data file (ext .RAW assumed) Ti
Enter name of correction file (ext .DFB assumed)Ti

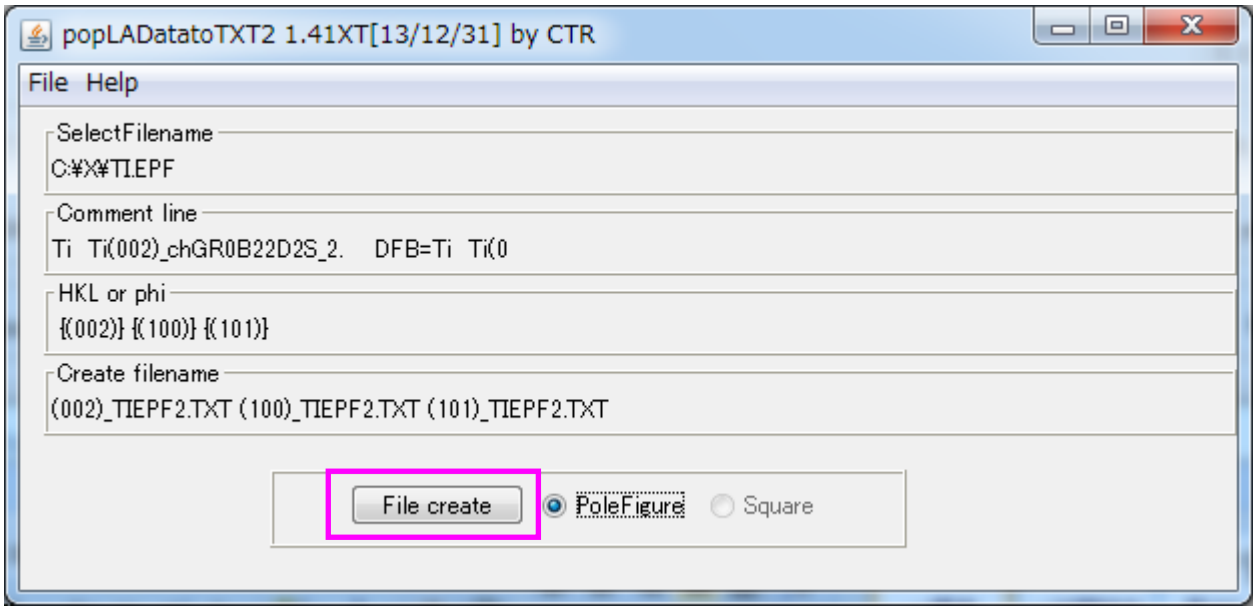


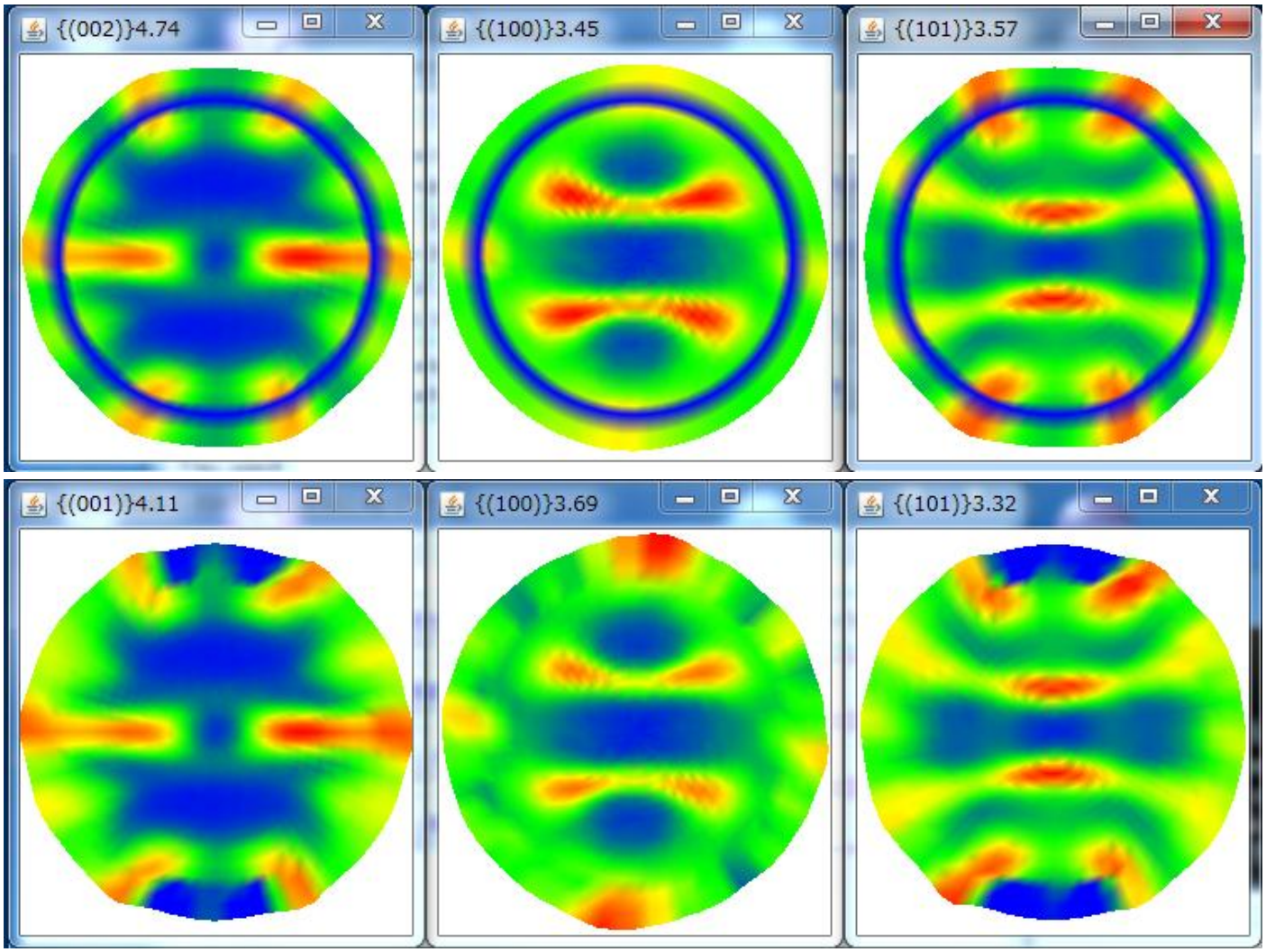

ＴＩ．ＥＰＦファイルが作成される。




Ｔｉ．ＥＰＦファイルを表示（ｐｏｐＬＡＴｏｏｌｓの popLADATAtoTXT2 ソフトウエア）





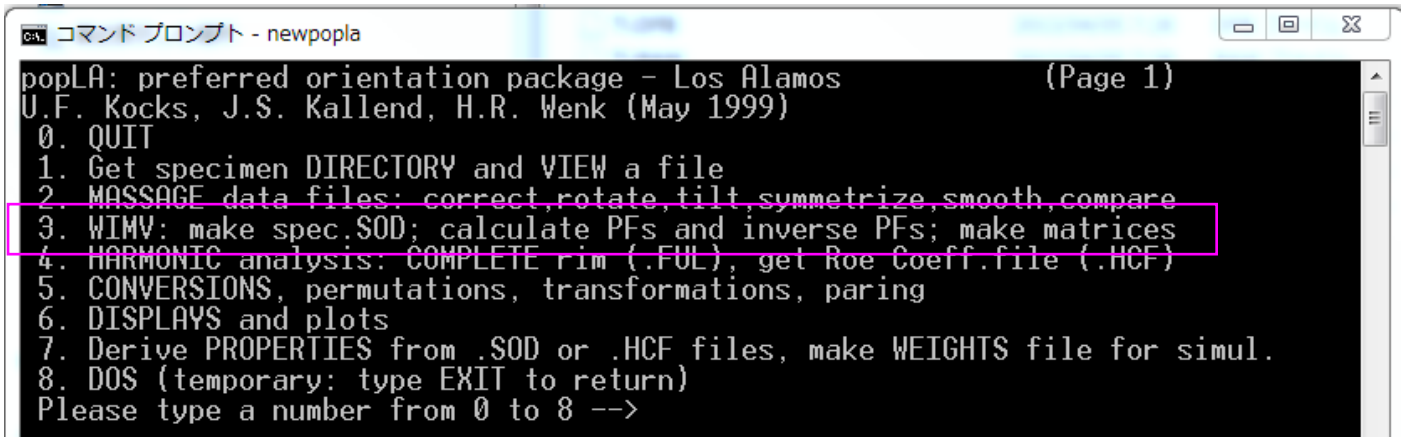




上段：０－＞７５のデータから８０－＞９０のデータがＣｒｅａｔｅされている。

下段：８０のデータを外挿した場合、

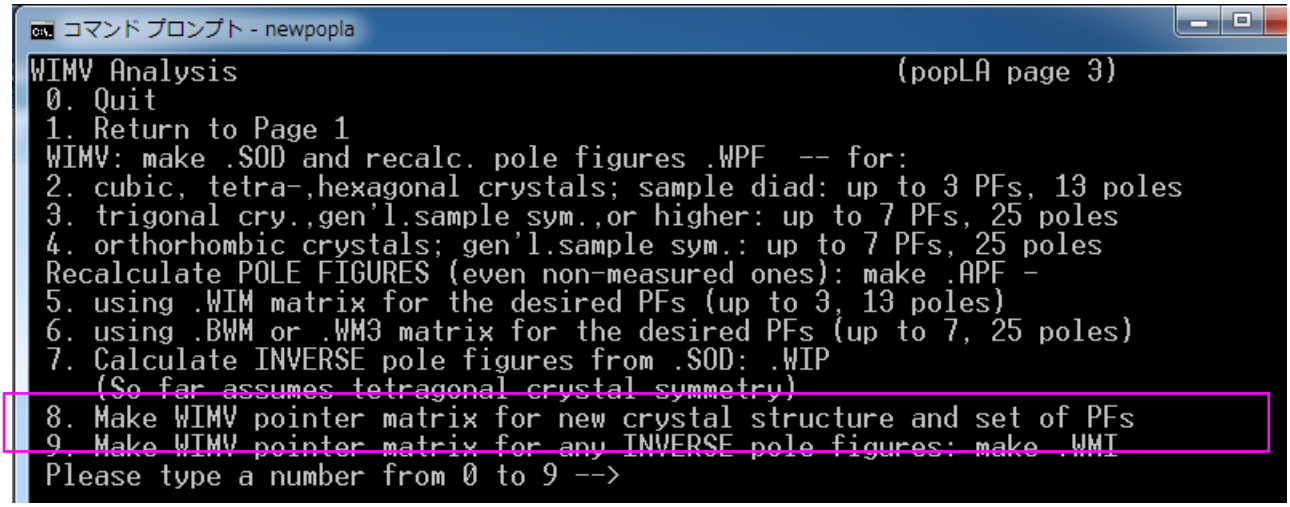
本来、ｄｅｆｏｃｕｓ補正を行う処理が含まれているが、既に、ODFPoleFigure2 ソフトウエアで処理しているので、ｄｅｆｏｃｕｓ補正データはすべて１．０として処理を行った。

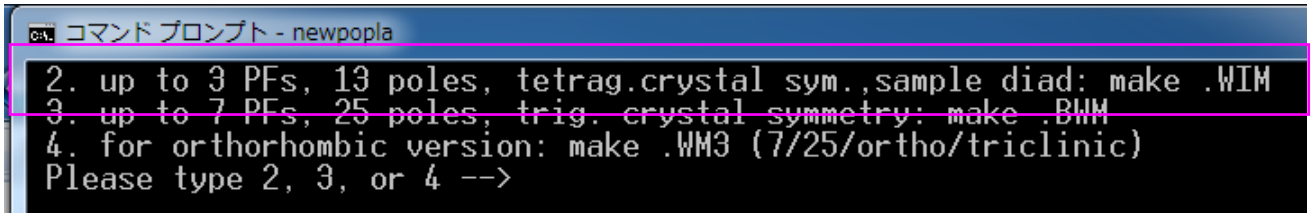
７．３　ＷＩＭＶ法の準備

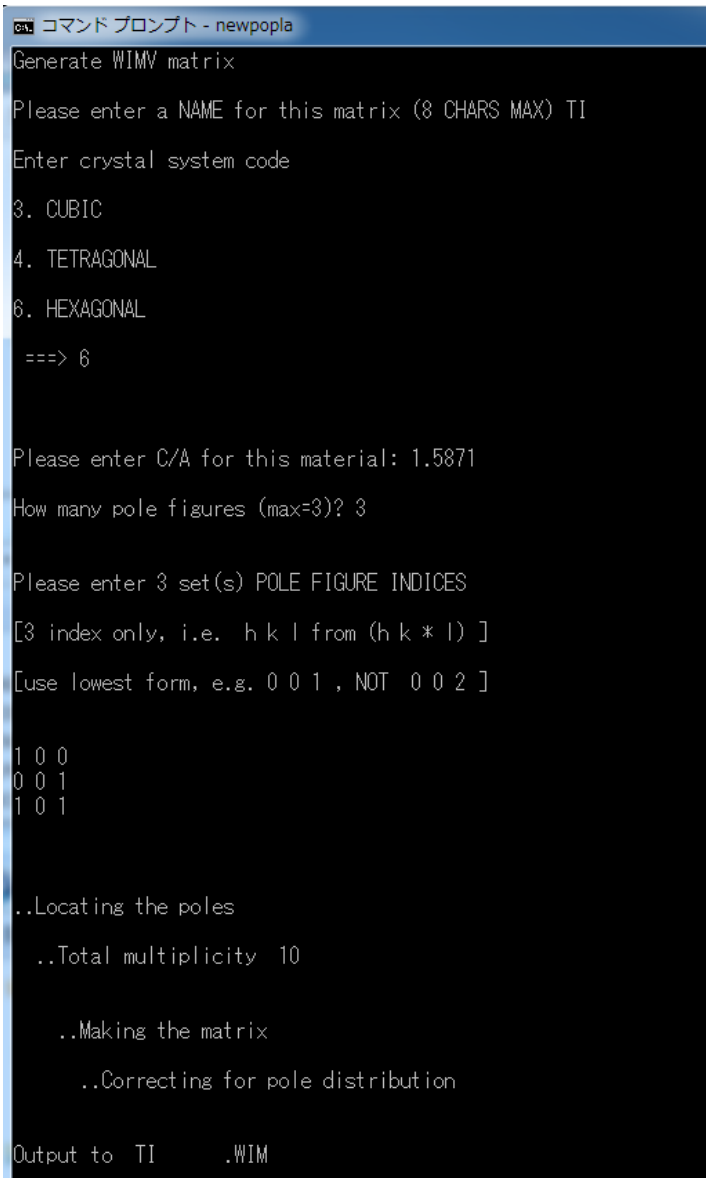


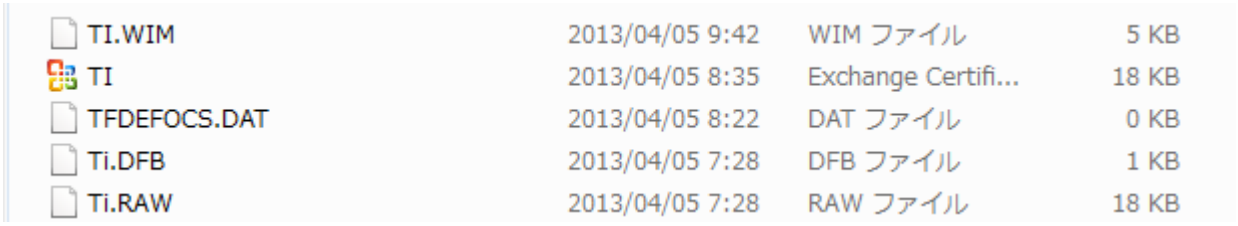

７．４　六方晶、Ｔｉのパラメータファイル（ＷＩＭ）の作成

一度作成すれば、後からＴｉ解析時に使用可能

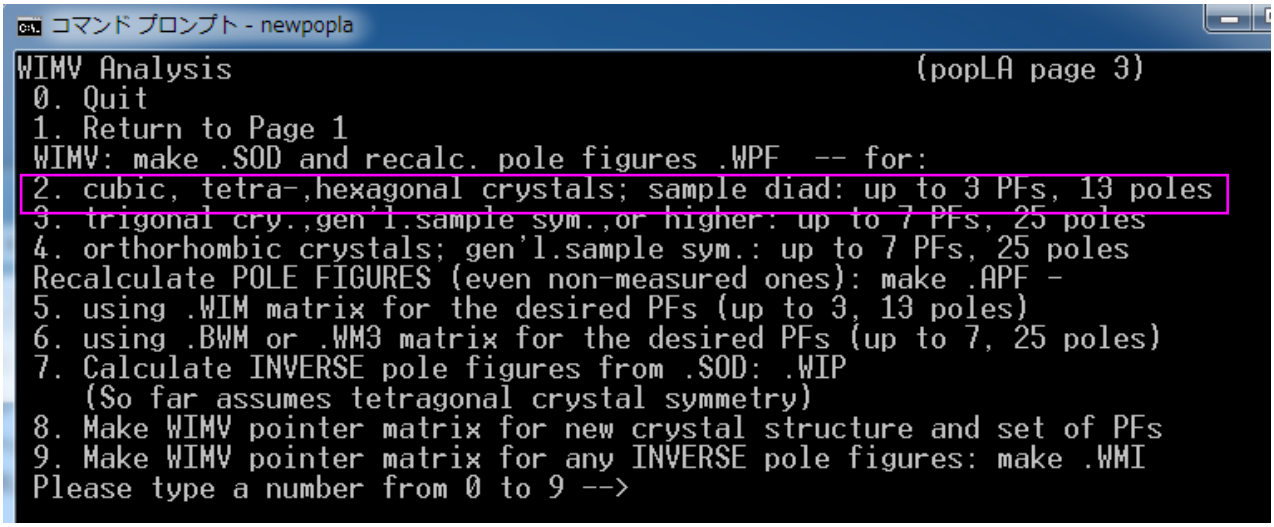


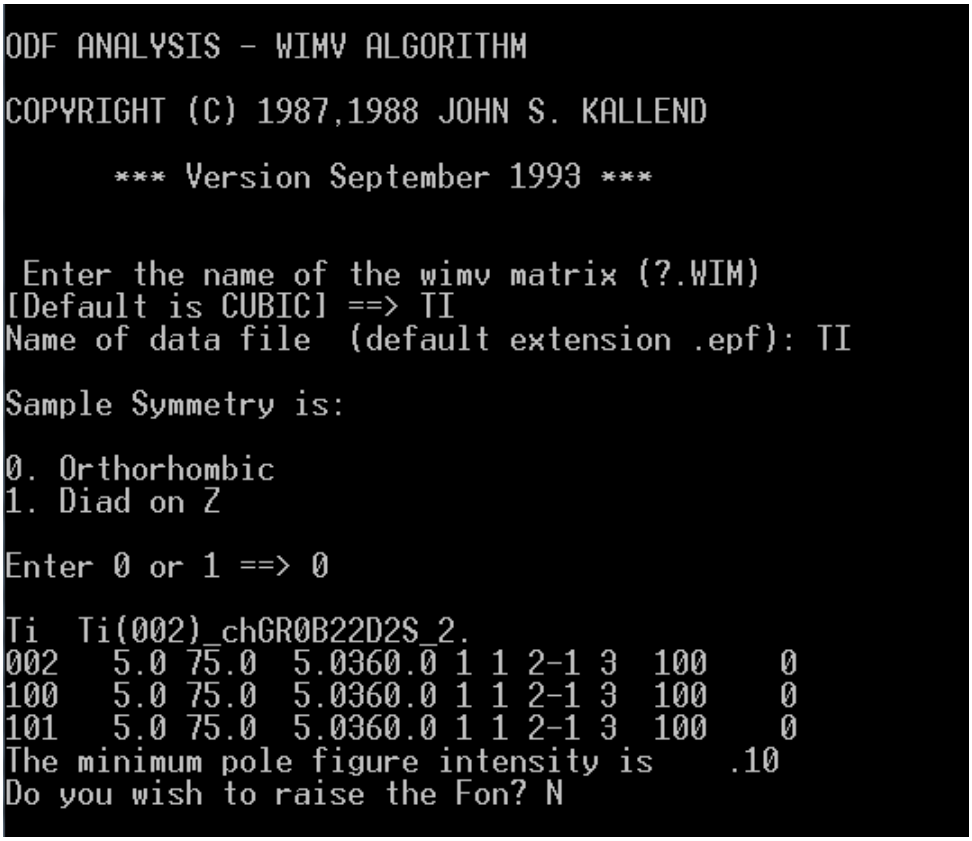



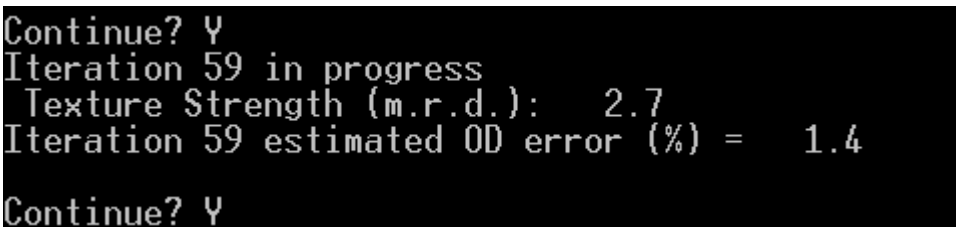

コマンド プロンプト - newpopla
Generate WIMV matrix
Please enter a NAME for this matrix (8 CHARS MAX) TI
Enter crystal system code
3. CUBIC
4. TETRAGONAL
6. HEXAGONAL
===> 6
Please enter C/A for this material: 1.5871
How many pole figures (max=3)? 3
Please enter 3 set(s) POLE FIGURE INDICES
[3 index only, i.e. h k l from (h k * l) ]
[use lowest form, e.g. 0 0 1 , NOT 0 0 2 ]
1 0 0
0 0 1
1 0 1
..Locating the poles
..Total multiplicity 10
..Making the matrix
..Correcting for pole distribution
Output to TI .WIM


TI.WIM 2013/04/05 9:42 WIM ファイル 5 KB
TI 2013/04/05 8:35 Exchange Certifi... 18 KB
TFDEFOCS.DAT 2013/04/05 8:22 DAT ファイル 0 KB
Ti.DFB 2013/04/05 7:28 DFB ファイル 1 KB
Ti.RAW 2013/04/05 7:28 RAW ファイル 18 KB

７．５　ＷＩＭＶ法解析




Ｃｏｎｔｉｎｕｅ？　Ｎで打ち切る

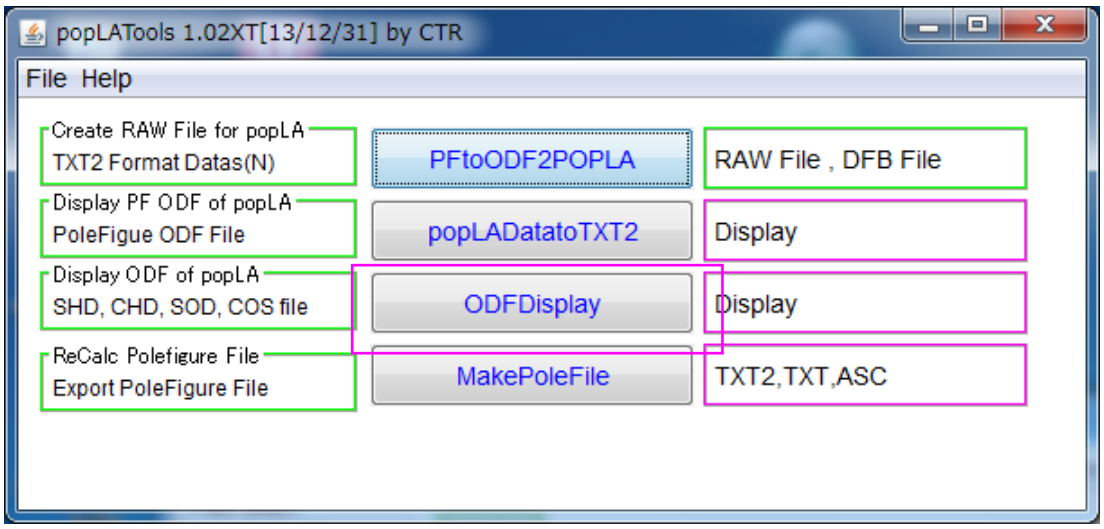
```
Continue? Y
Iteration 59 in progress
 Texture Strength (m.r.d.):   2.7
Iteration 59 estimated OD error (%) =   1.4

Continue? n

Normalization factor:  1.04

In output file, angles increase from 0 in nomenclature of
 1. Kocks (need this one for WEIGHTS)
 2. Roe/Matthies
 3. Bunge (rotates plot +90 deg.)

Enter 1,2, or 3 ==> 3
Making file  TI       .SOD
Recalculated PF file name:  TI       .WPF
続行するには何かキーを押してください . . .
```

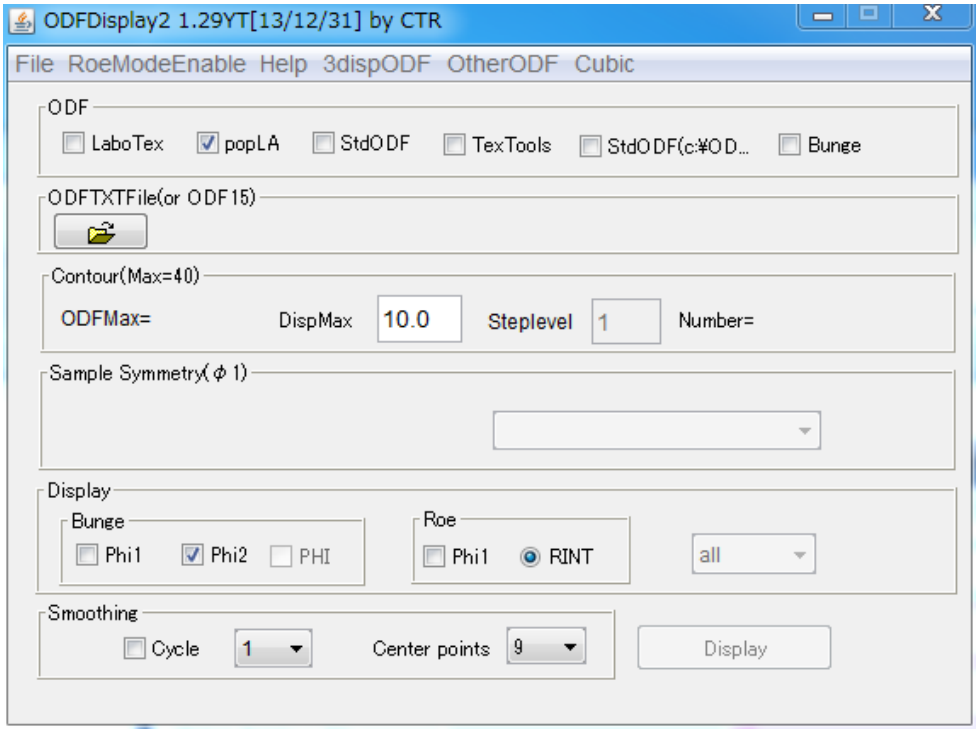
| | |
|---|---|
| **.SOD** | "Sample Orientation Distribution" – Distribution of sample orientations with respect to crystal axes. |
| **.WPF** | "WIMV Pole Figure" – Pole figure recalculated from WIMV-derived orientation distribution. |

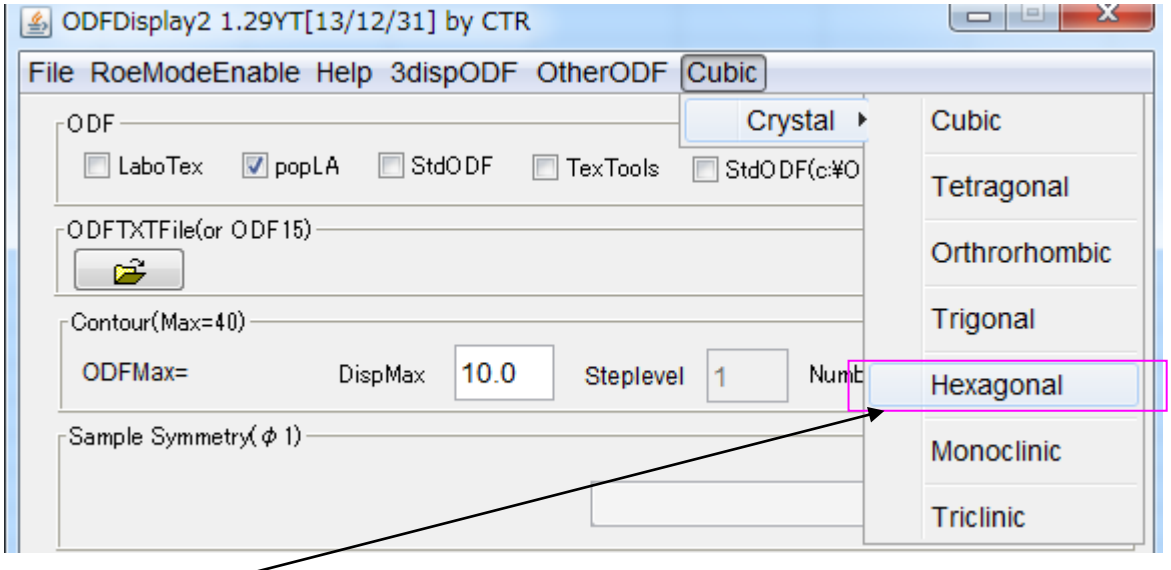
ＯＤＦ計算と再計算極点図が計算されている。

| | | | |
|---|---|---|---|
| TI.SOD | 2013/04/05 9:54 | SOD ファイル | 33 KB |
| TI.WPF | 2013/04/05 9:54 | WPF ファイル | 5 KB |
| TI.WIM | 2013/04/05 9:42 | WIM ファイル | 5 KB |
| TI | 2013/04/05 8:35 | Exchange Certifi... | 18 KB |
| TFDEFOCS.DAT | 2013/04/05 8:22 | DAT ファイル | 0 KB |
| Ti.DFB | 2013/04/05 7:28 | DFB ファイル | 1 KB |
| Ti.RAW | 2013/04/05 7:28 | RAW ファイル | 18 KB |

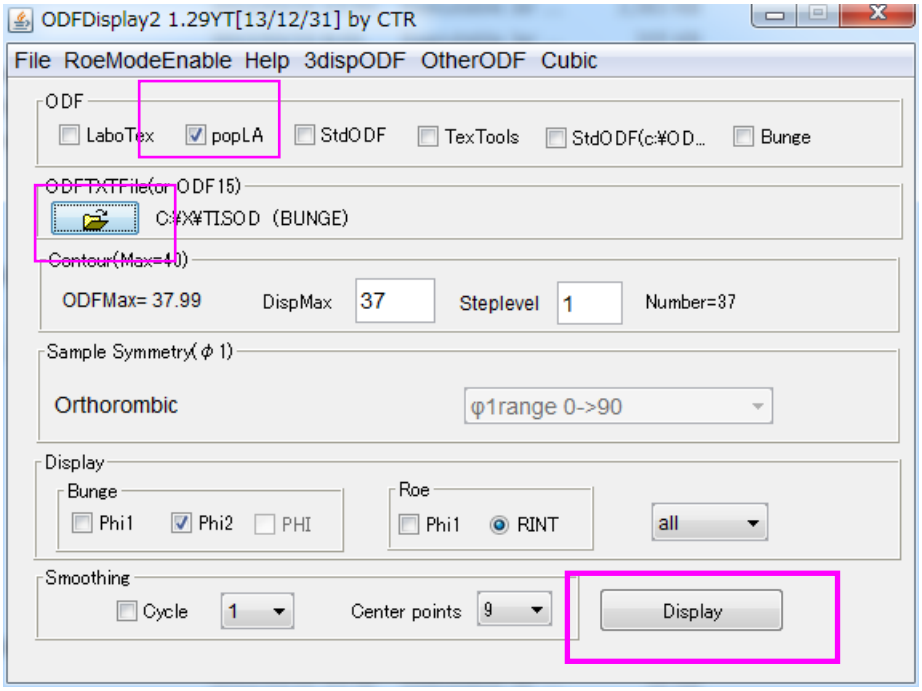
7．6　ＯＤＦ図の表示　ODFDisplay2 ソフトウエア（CTR パッケージ）



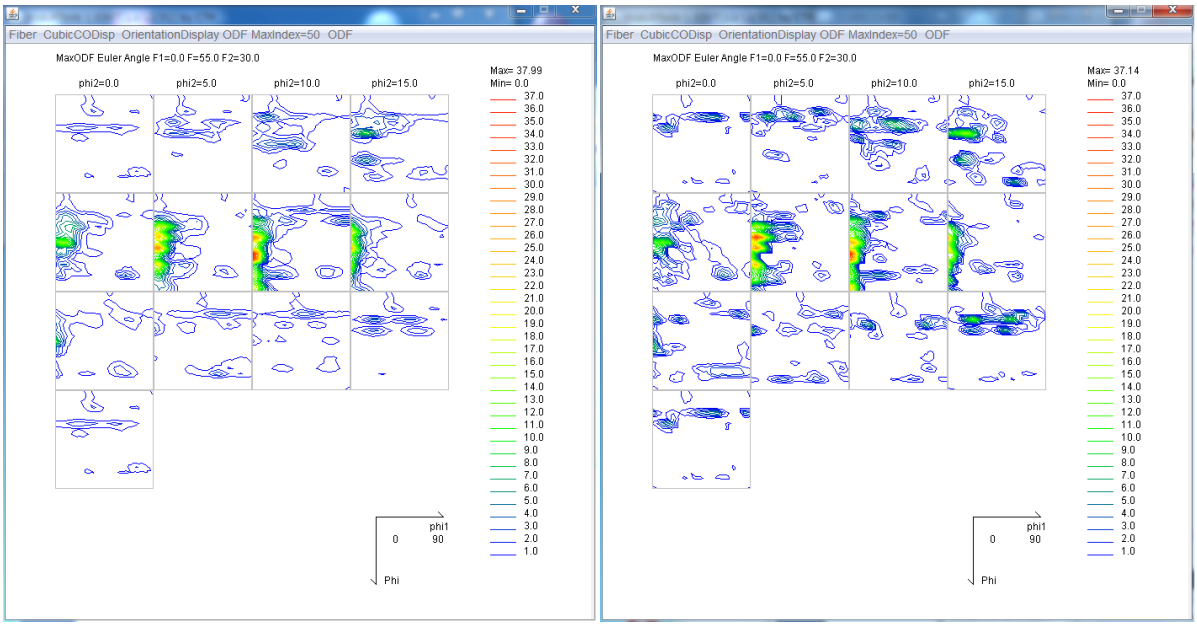




Hexagonal;を指定



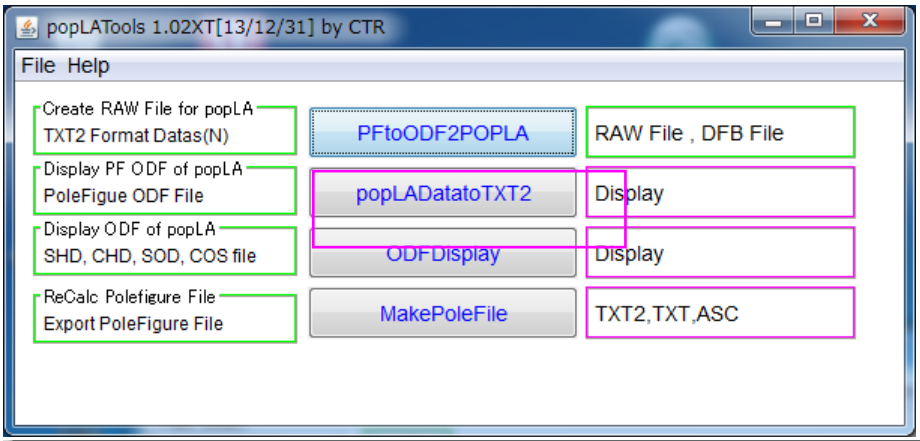

popLA で、Ti.SOD を選択で、ODFMax=37.99 を示す。Disp でＯＤＦ図が表示

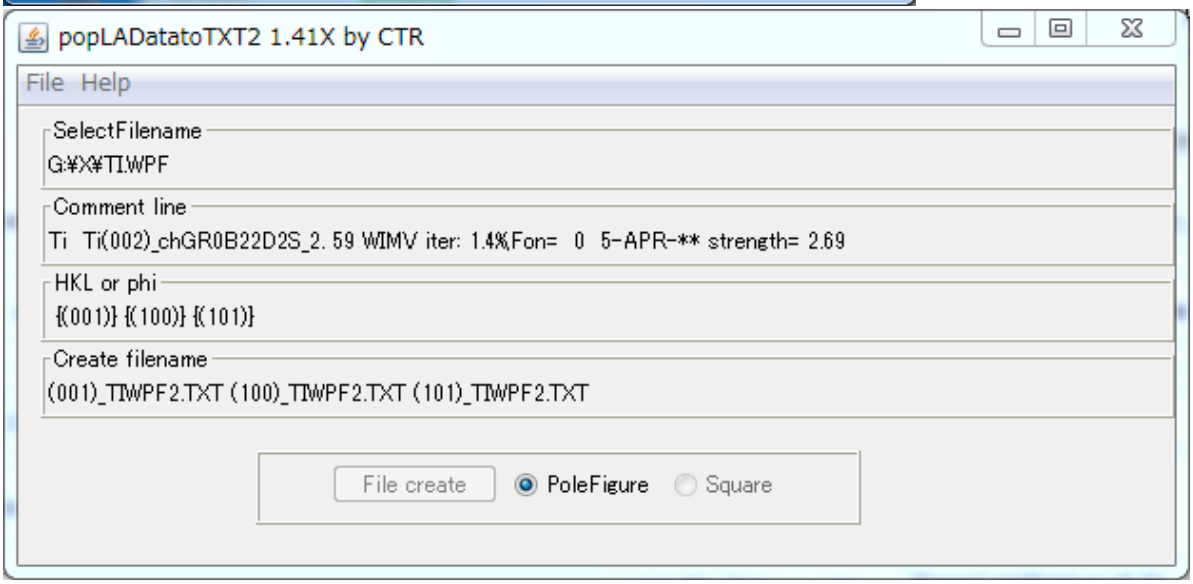


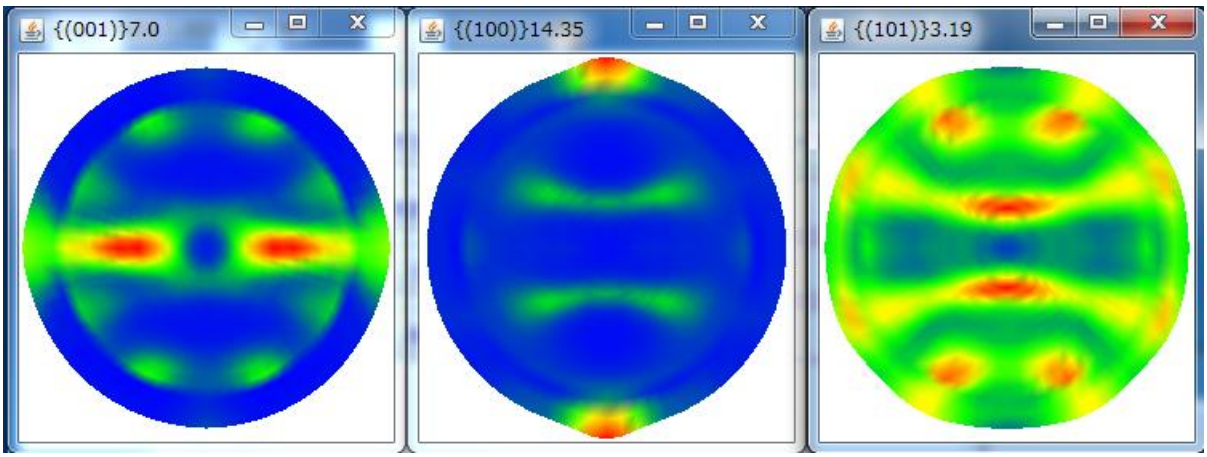

α=80 データを外挿した場合

ＯＤＦ結晶方位密度の最大値は、φ１＝０、Φ＝５５、φ２＝３０と表示

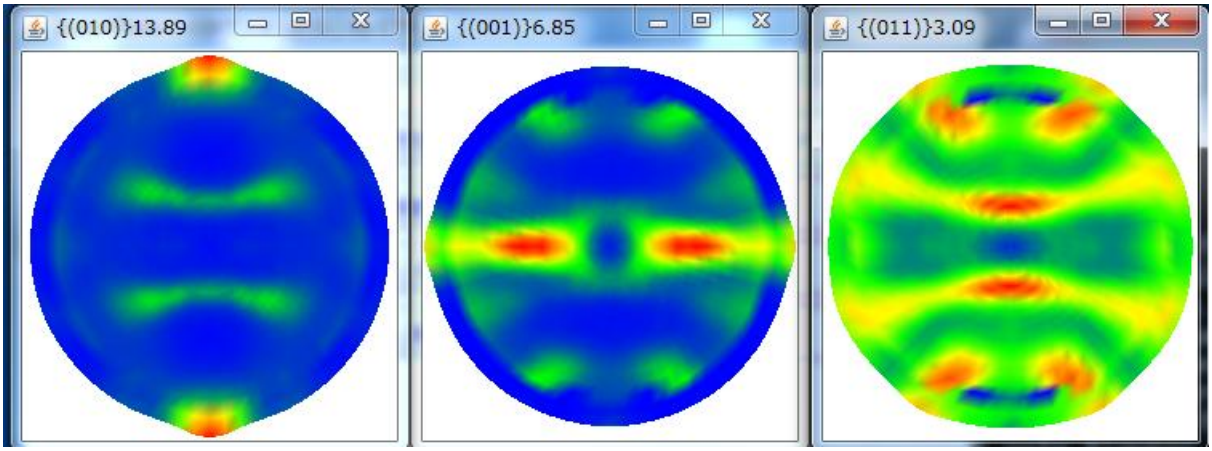
## ７．７　再計算極点図の表示



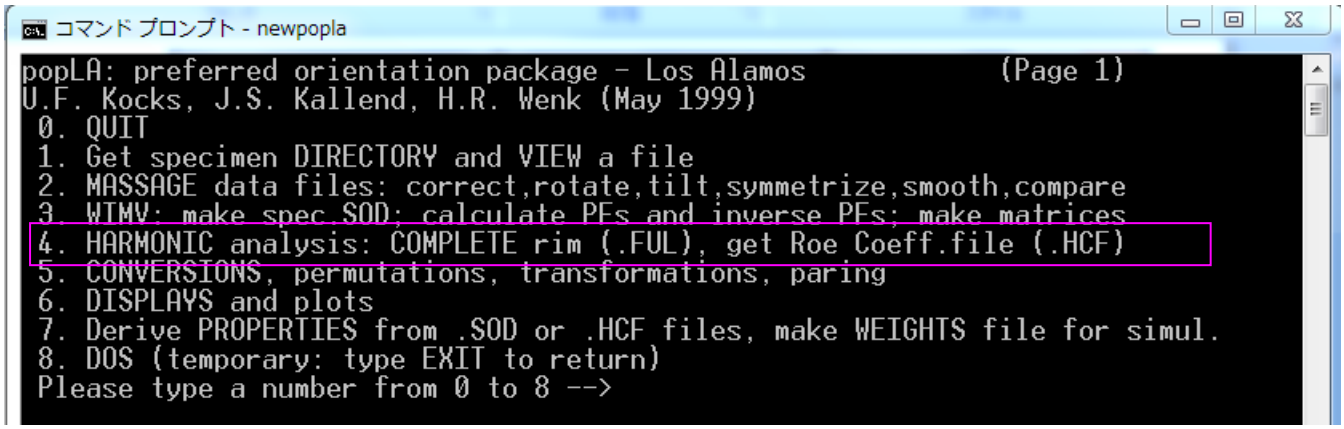



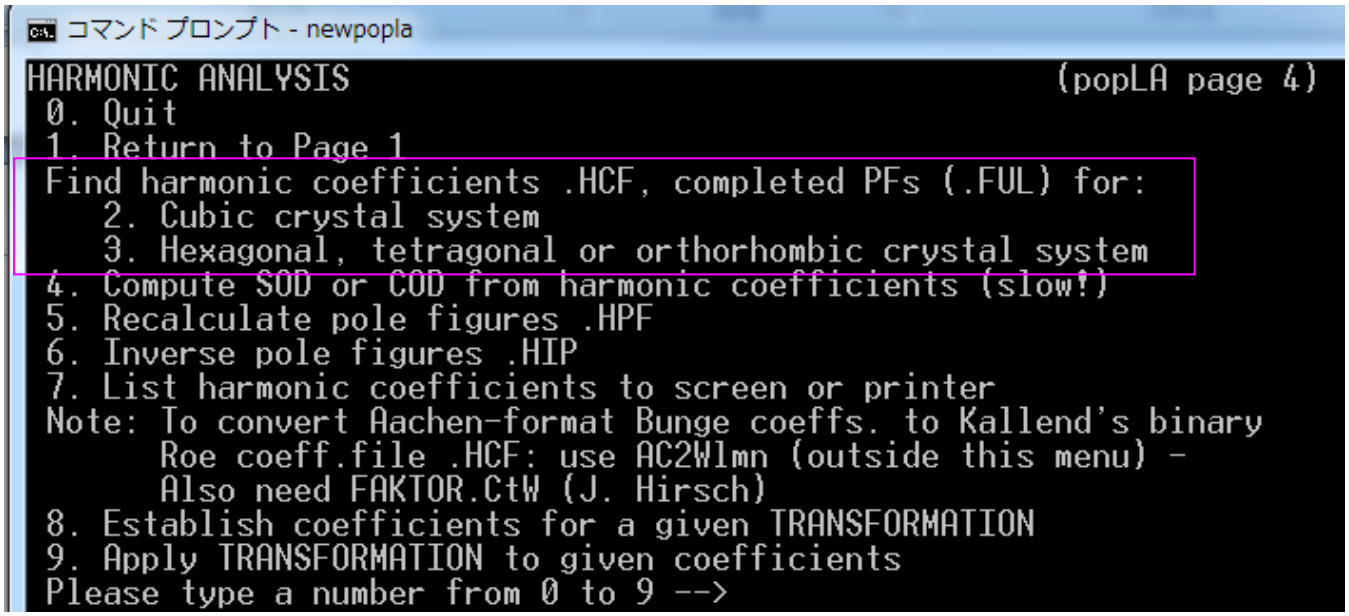

α＝８０を外挿した場合



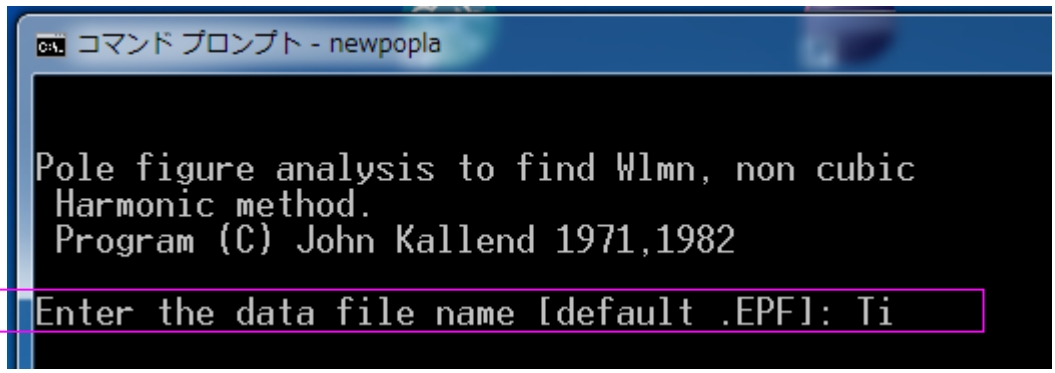
７．８　Ｈａｒｍｏｎｉｃ解析



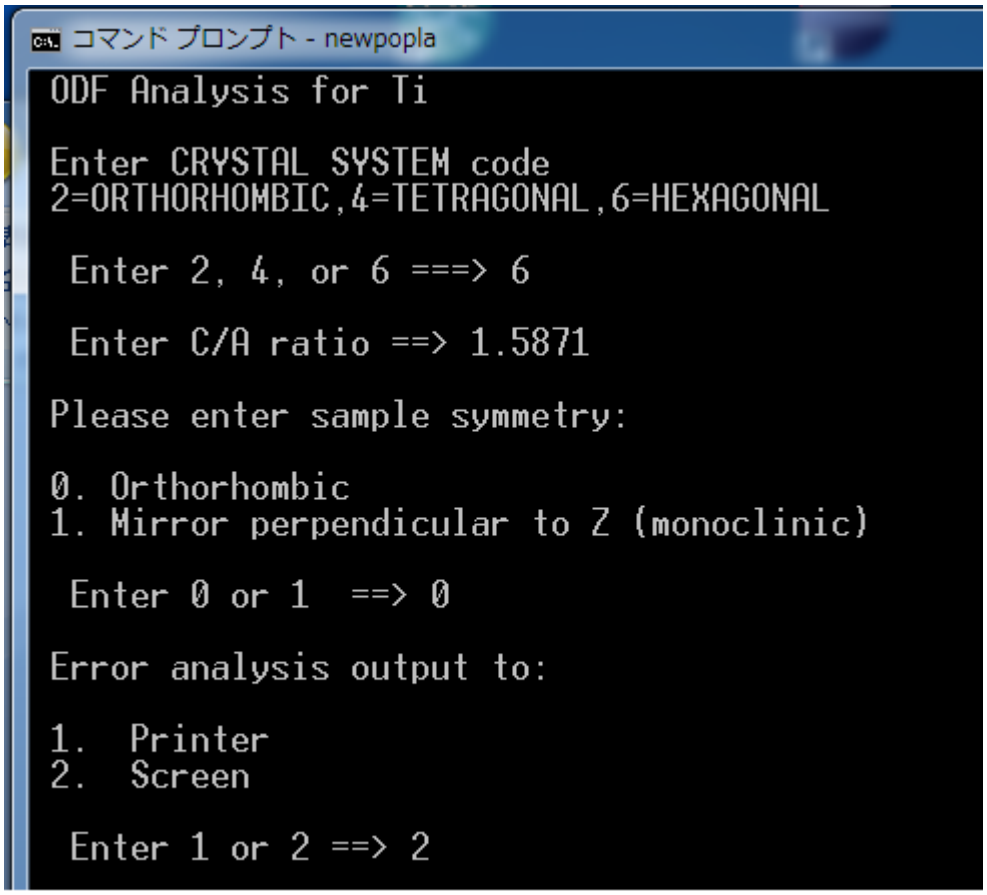

７．９　六方晶の指定、展開係数の計算



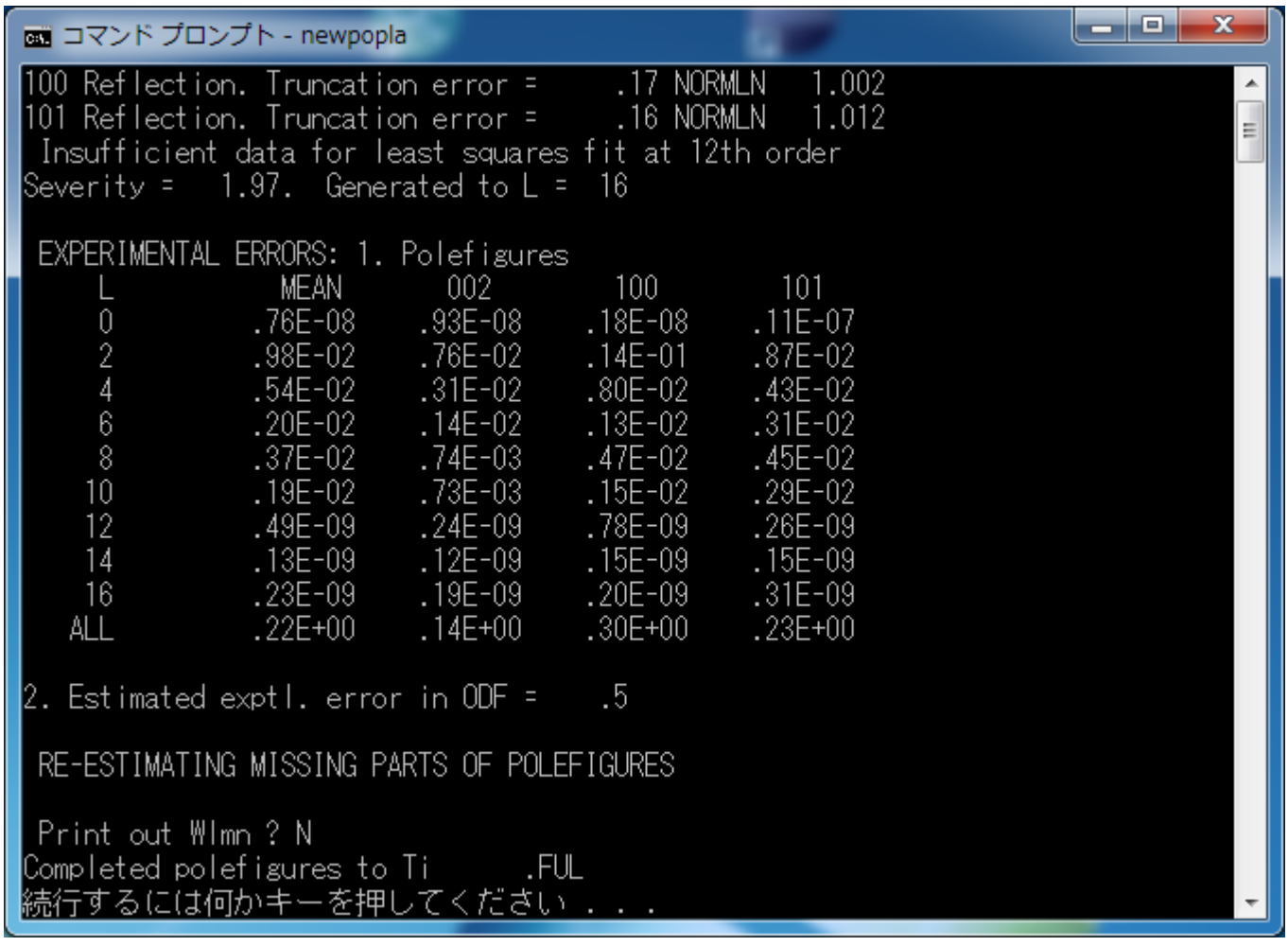

入力ファイルの指定



パラメータ指定




結果が表示される。

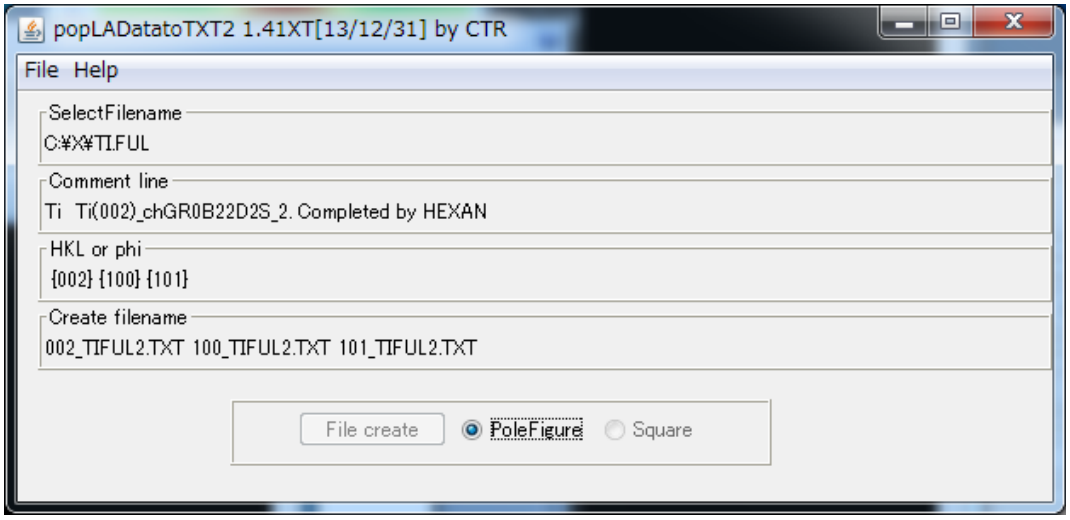


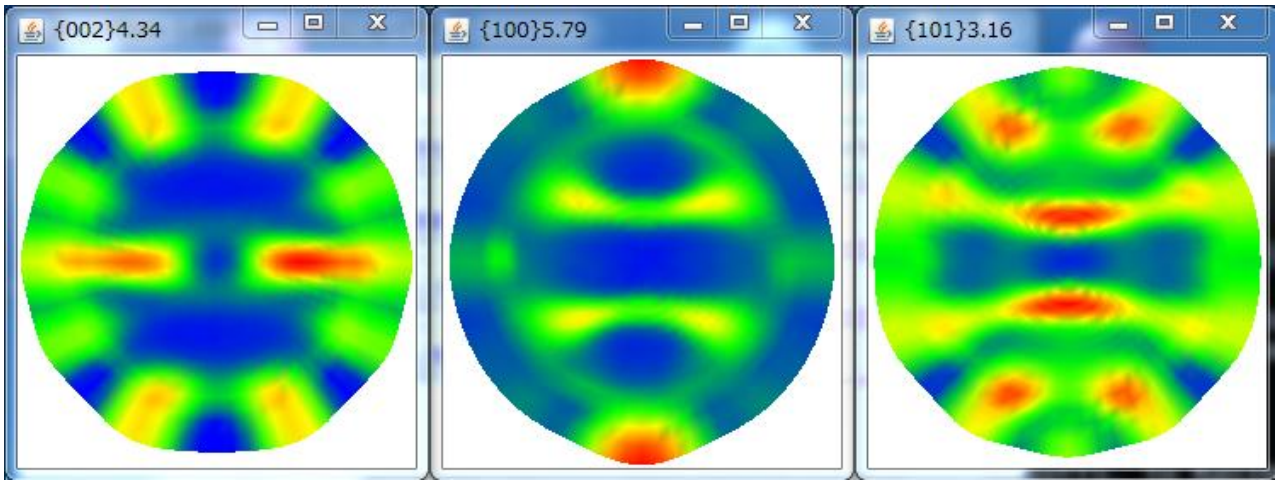
計算された極点図

| | | | |
|---|---|---|---|
| TI.FUL | 2013/04/05 14:36 | FUL ファイル | 17 KB |
| TI.HCF | 2013/04/05 14:36 | HCF ファイル | 1 KB |

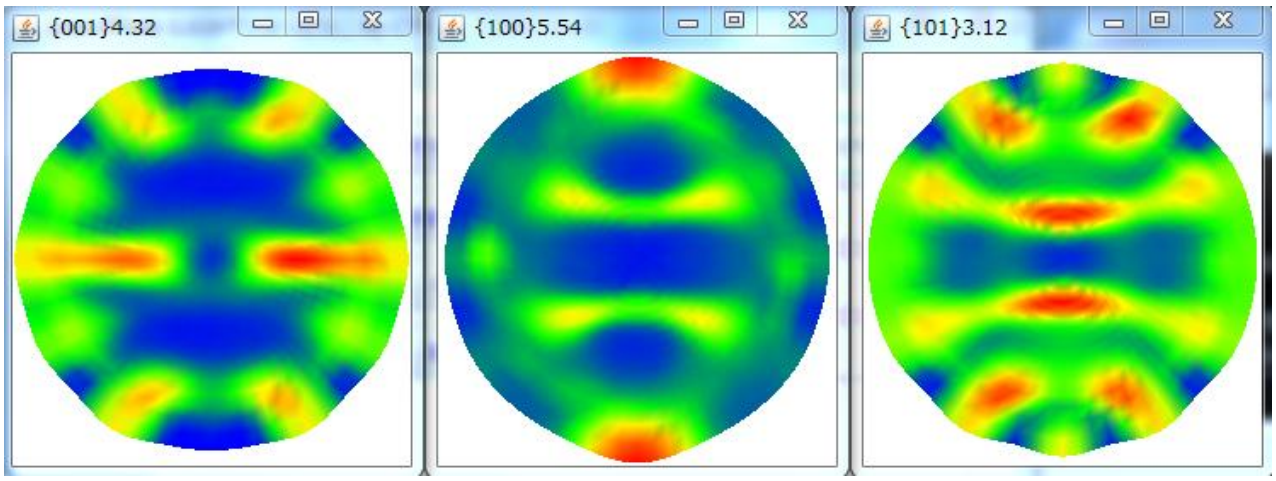
| | |
|---|---|
| .FUL | "Full Pole Figure" – Complete pole figure, with high angle intensities, as determined by harmonic analysis; renormalized. |
| .HCF | "Harmonic Coefficients File" – A list of coefficient for the harmonic series expansion of the Orientation Distribution Function (ODF) according to Roe. Not a density file for plotting. |

表示




α＝８０を外挿した場合



## ７．１０　Ｈａｒｍｏｎｉｃ法によるＯＤＦ図の計算

```
コマンド プロンプト - newpopla
HARMONIC ANALYSIS                                        (popLA page 4)
 0. Quit
 1. Return to Page 1
 Find harmonic coefficients .HCF, completed PFs (.FUL) for:
    2. Cubic crystal system
    3. Hexagonal, tetragonal or orthorhombic crystal system
 4. Compute SOD or COD from harmonic coefficients (slow!)
 5. Recalculate pole figures .HPF
 6. Inverse pole figures .HIP
 7. List harmonic coefficients to screen or printer
 Note: To convert Aachen-format Bunge coeffs. to Kallend's binary
       Roe coeff.file .HCF: use AC2Wlmn (outside this menu) -
       Also need FAKTOR.CtW (J. Hirsch)
 8. Establish coefficients for a given TRANSFORMATION
 9. Apply TRANSFORMATION to given coefficients

 Please type a number from 0 to 9 -->
```

```
Calculate ODF from Harmonic Coefficients
  Program by John Kallend (c) 1968 - 1988


What is the specimen name (.HCF Assumed)? Ti

ENTER OUTPUT FORMAT REQUIRED

1. COD sections every 10 degrees, ROE angles only
2. SOD or COD every 5 degrees

 ==> 2
```

```
 Average values of Wlmn for different orders of l

          l          Avg. Wlmn

          2            .28E-02
          4            .26E-02
          6            .30E-02
          8            .21E-02
         10            .86E-03
         12            .17E-02
         14            .34E-03
         16            .14E-02

 Default = CALCULATE TO L = 16, OK ? Y
```

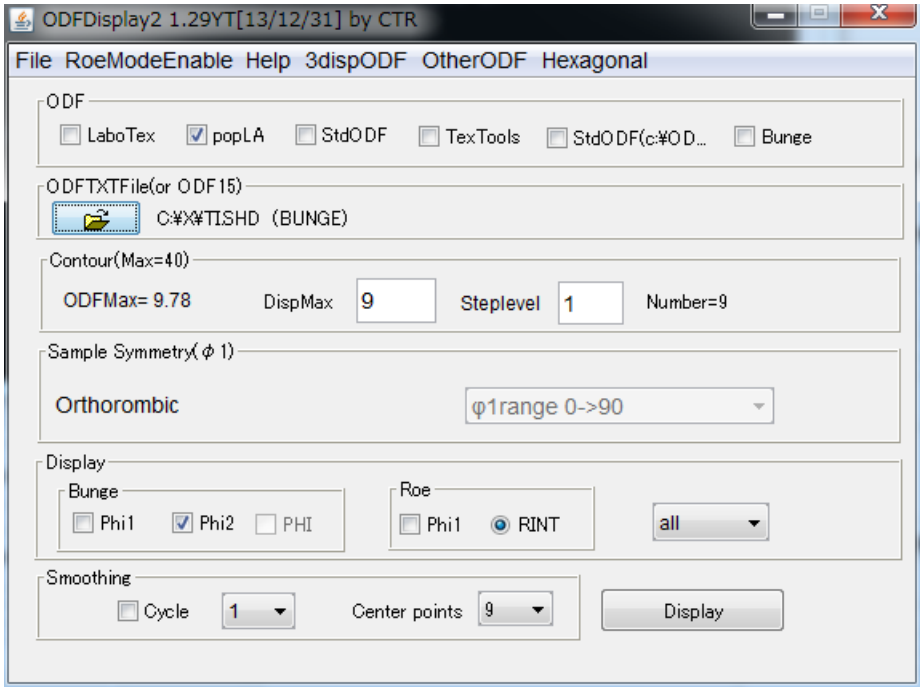
```
CALCULATIONS FINISHED

MAX. VALUE =  9.78 MIN. VALUE =  -5.71

Choose output format:

 1. as SOD (will be called .SHD)

 2. as COD (will be called .CHD)

 Enter 1 or 2 ==> 1
In output file, angles increase from 0 in nomenclature of
 1. Kocks
 2. Roe/Matthies
 3. Bunge

Enter 1,2, or 3 ==> 3
```

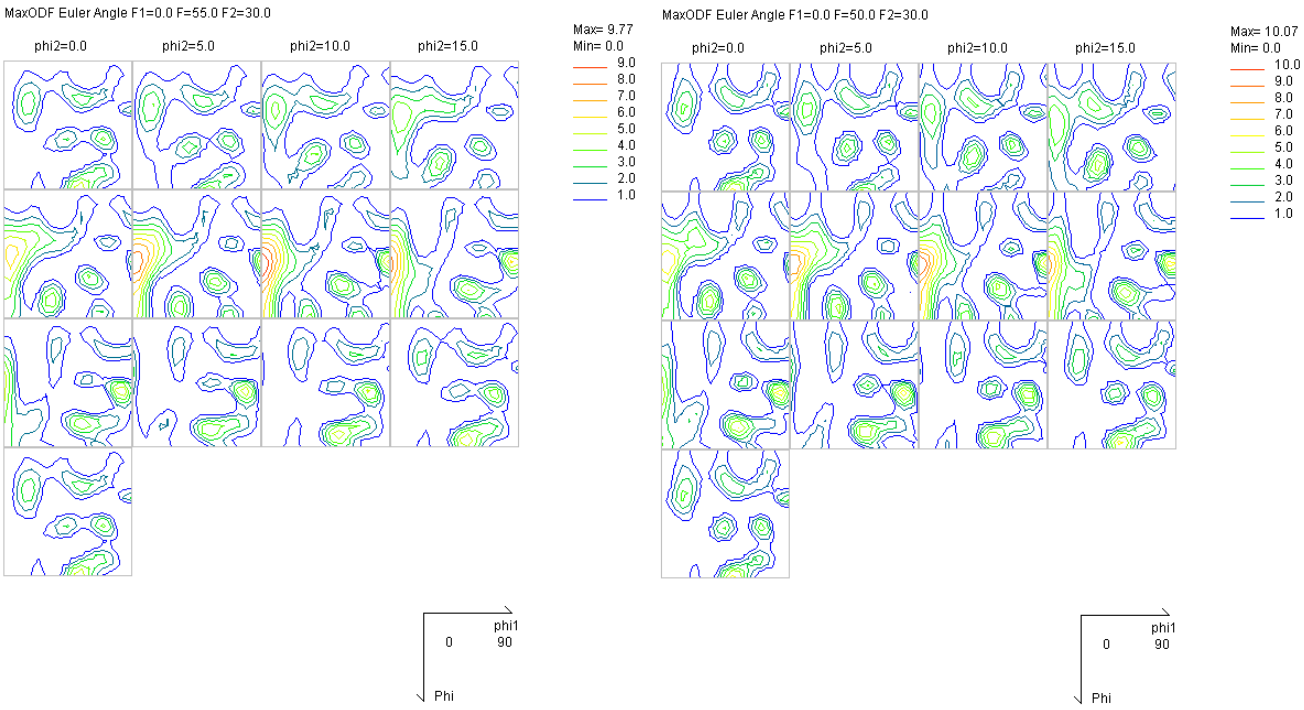
```
Enter 1,2, or 3 ==> 3
Making file  Ti      .SHD
続行するには何かキーを押してください . . .
```

| | | | |
|---|---|---|---|
| TI.SHD | 2013/04/05 14:52 | SHD ファイル | 32 KB |
| TI.FUL | 2013/04/05 14:36 | FUL ファイル | 17 KB |
| TI.HCF | 2013/04/05 14:36 | HCF ファイル | 1 KB |

| | |
|---|---|
| .SHD | .SOD derived from harmonic analysis. |

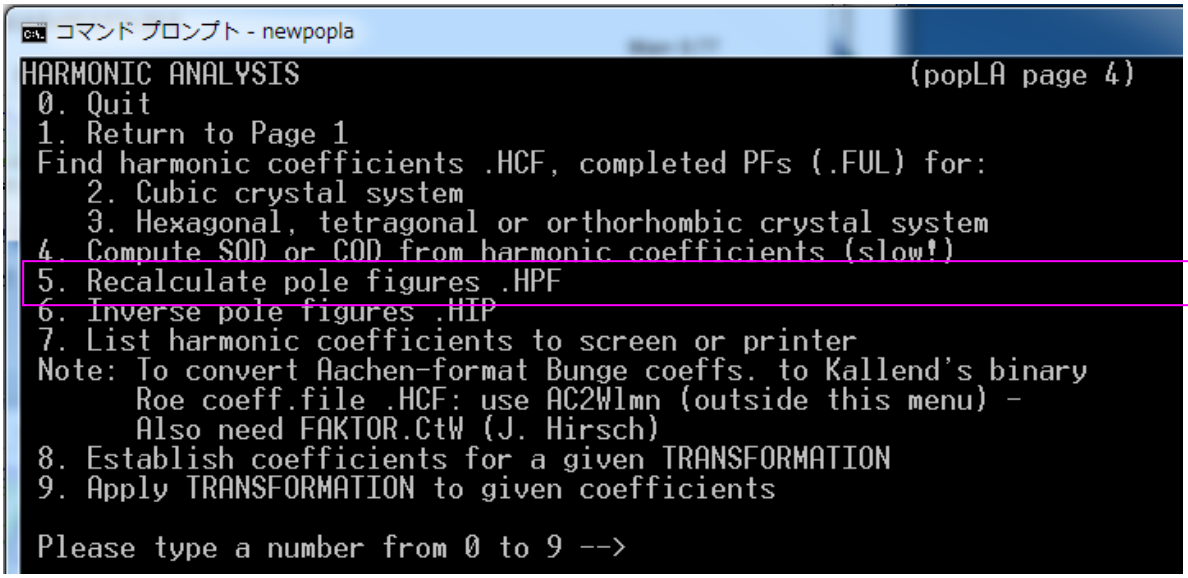
7．１１　ODFDisplay2 ソフトウエアでＯＤＦ図の表示

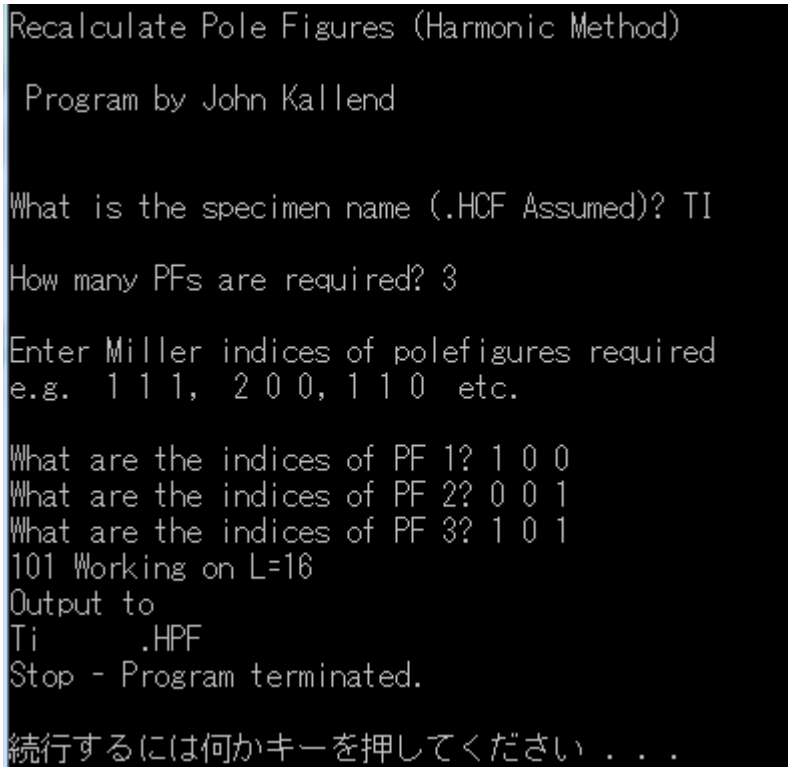


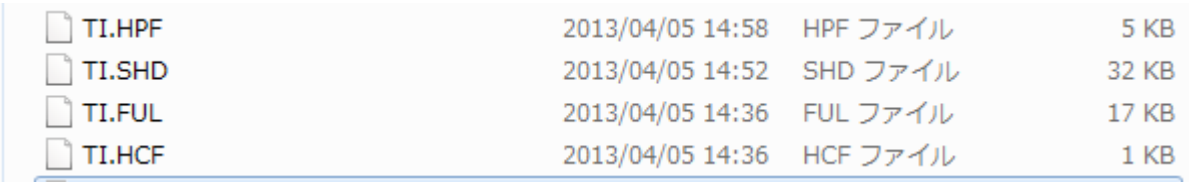




α＝８０を外挿した場合

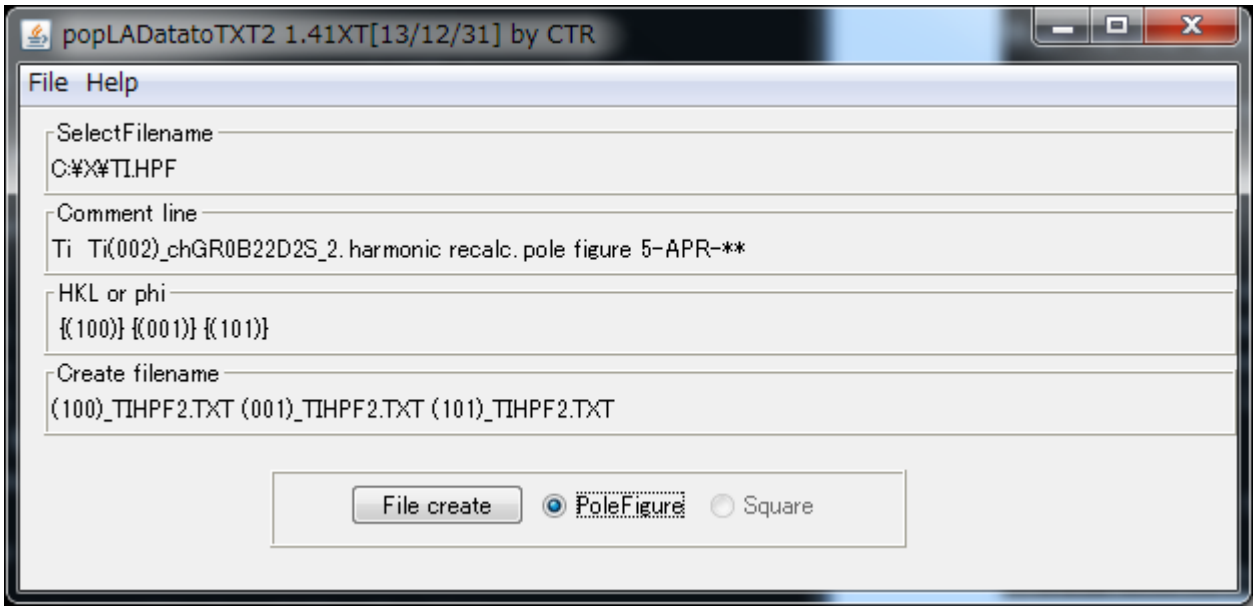
７．１２　再計算極点図

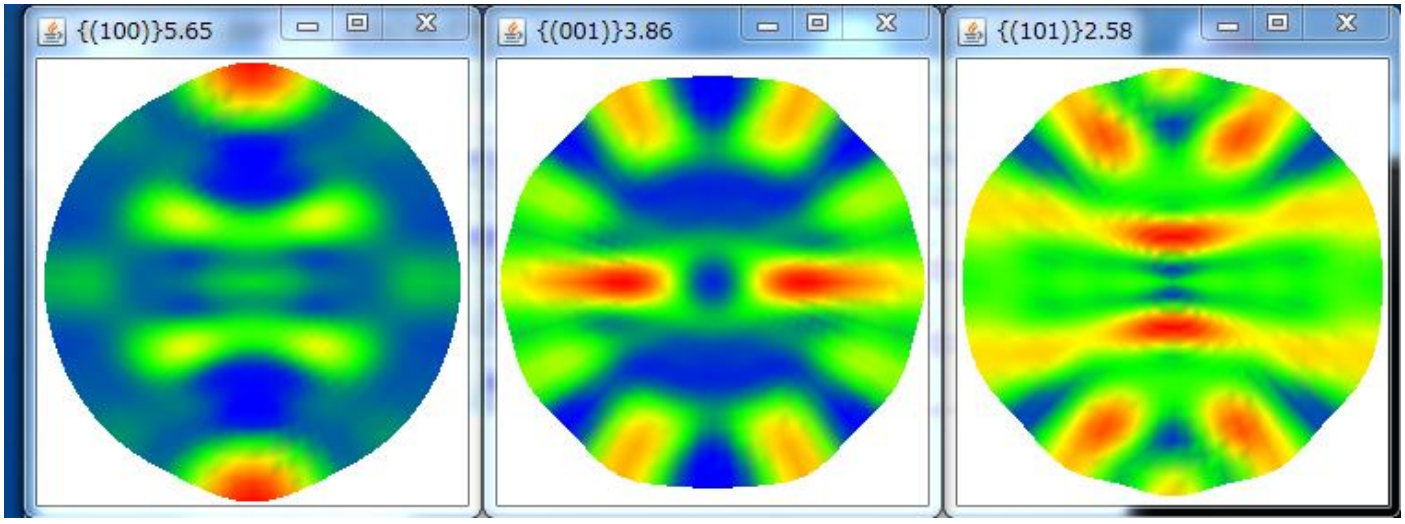


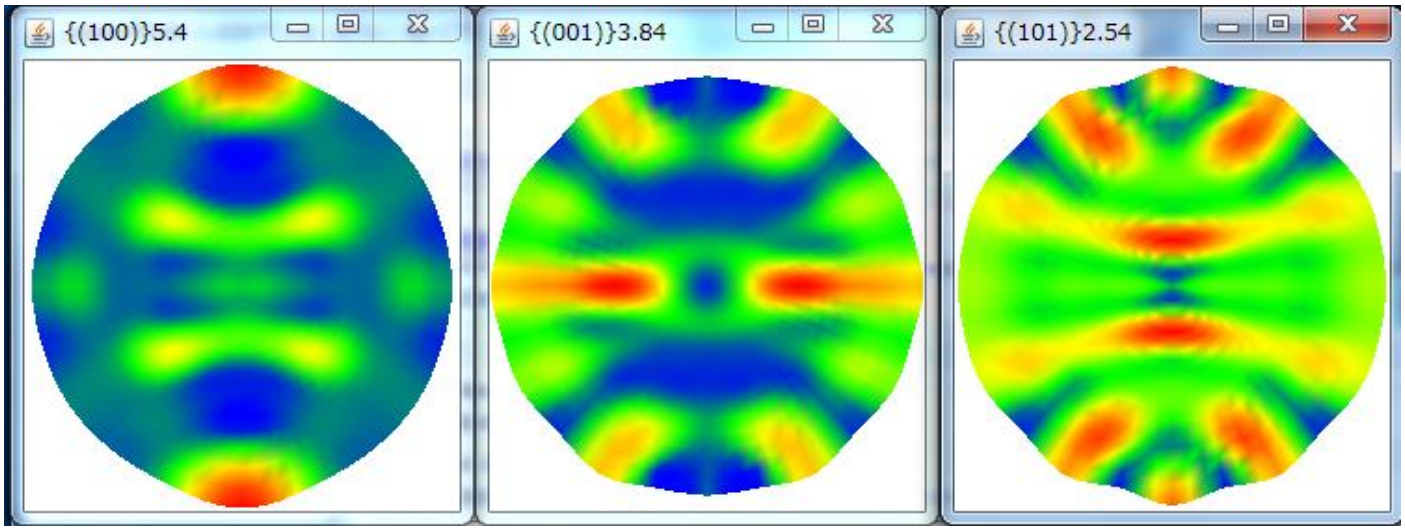




| | |
|---|---|
| .HPF | "Harmonic Pole Figure" – Pole figure recalculated from harmonic coefficients. |


popLADatatoTXT2 1.41XT[13/12/31] by CTR
File Help
SelectFilename
C:¥X¥TI.HPF
Comment line
Ti Ti(002)_chGR0B22D2S_2. harmonic recalc. pole figure 5-APR-**
HKL or phi
{(100)} {(001)} {(101)}
Create filename
(100)_TIHPF2.TXT (001)_TIHPF2.TXT (101)_TIHPF2.TXT
File create
PoleFigure
Square


{(100)}5.65
{(001)}3.86
{(101)}2.58

α＝８０を外挿した場合


{(100)}5.4
{(001)}3.84
{(101)}2.54