

汎用極点図データ処理

ODFPoleFigure2ソフトウェア

Ver.3.06Y

2012年12月30日

HelperTex Office

目次

1. 概要
2. 特徴
3. データの流れ
4. プログラムの使い方
5. 主な機能
6. 配向評価総合パッケージ CTR ソフトウェアとの連動
7. デモデータによる動作確認
 7. 1 処理データ選択
 7. 2 測定データ評価
 7. 3 測定バックグラウンド強度の修正
 7. 4 平滑化
 7. 5 RD補正
 7. 6 吸収補正
 7. 7 D e f o c u s 補正
 7. 8 一括データ処理を行う。
8. U x d フォーマットの読み込み
 8. 1 予め、U x d フォーマットから A S C フォーマットに変換する方法
 8. 2 直接変換方法
 8. 3 M u l T e x データの場合
9. P A N a l y t i c a l データの読み込み
 9. 1 予め、t x t、x r d m l フォーマットから A S C フォーマットに変換する方法
 9. 2 直接変換方法

特徴

1. 概要

本ソフトウェアは、当社で開発した配向評価総合パッケージ CTR ソフトウェアの中核となるソフトウェアであり、国内外 X 線メーカーの測定データに各種補正を行い、世界で最もポピュラーな ODF 解析ソフトウェアを手軽に使えるよう配慮してあります。

2. 特徴

すべてのプログラムが java で記述されている。(Windows のどの OS 上でも動作)

サポートされていない測定データでも簡単に取り込める (簡単に追加可能)

複数の測定データを一括データ処理

データ処理

バックグラウンド削除、バックグラウンド修正、平滑化、RD 補正、吸収補正、defocus 補正、規格化
処理のビジュアル化

バックグラウンドプロファイルの確認と修正バックグラウンドの確認

平滑化処理画面を参考に適切値を選択

RD 補正処理画面を参考に適切値を選択

吸収補正量画面を表示

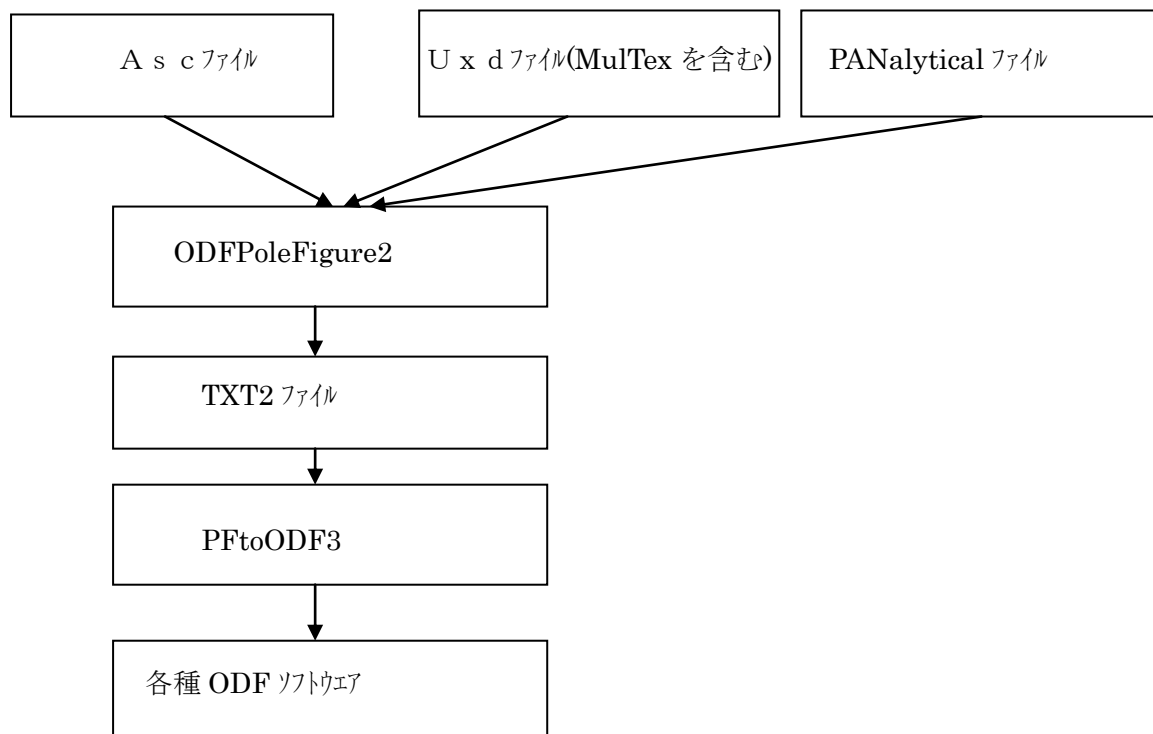
Defocus 補正量を表示

入力極点図と処理後の極点図を同時表示

処理条件を lock により、常に同一条件による処理を可能にする。

利用目的が品質管理用なら、ファイル選択、一括処理で、ODF 入力データ作成は 10 秒以内で終了

3. データの流れ



4. プログラムの使い方

C:\¥CTR¥bin¥ODFPoleFigure2.jar ファイルをマウスでクリック

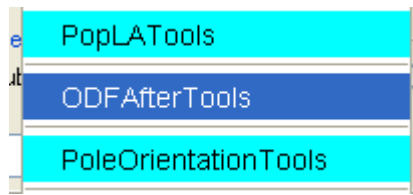
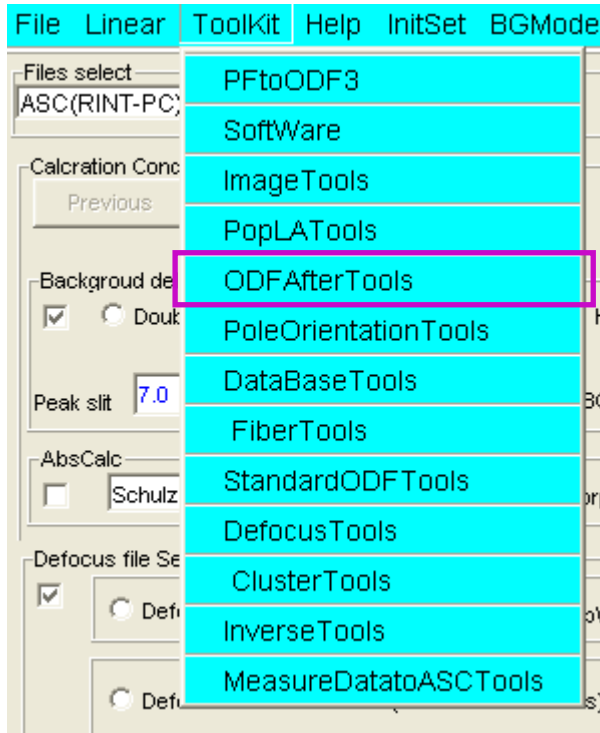
5. 主な機能

The screenshot shows the ODFPoleFigure2 software interface with several callouts pointing to specific features:

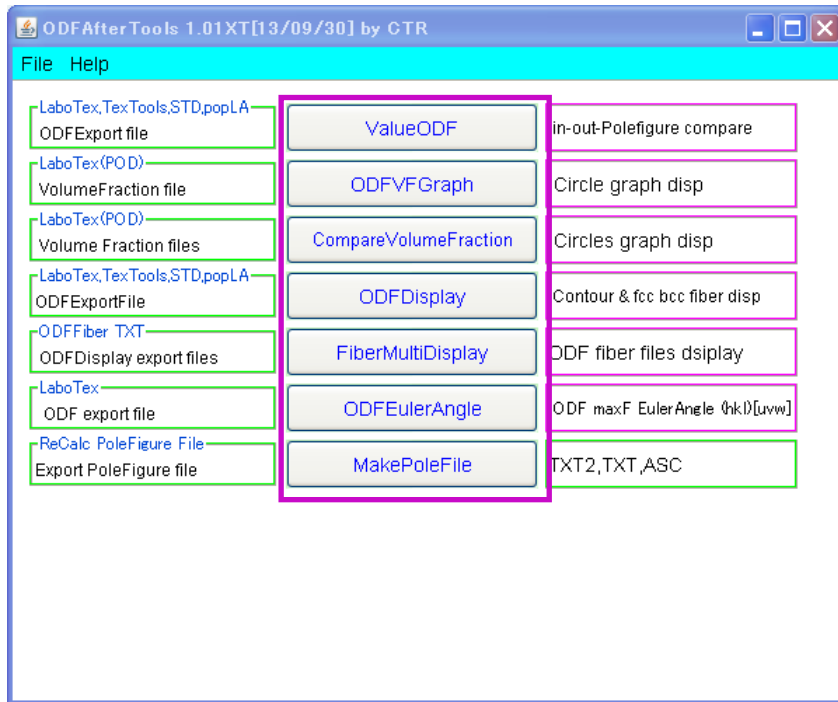
- メニュー切り替え:** Points to the menu bar (InitSet, BGMode Measure, Condition Free).
- バックグラウンドモード切り替え:** Points to the Background delete mode options (DoubleM, SingleM, LowM, HighM, Nothing).
- 処理条件 lock-free 切り替え:** Points to the Condition Free menu and the Limit Alfa Defocus value dropdown.
- バックグラウンド選択と修正:** Points to the Background defocus dropdown menu.
- 入力、表示データ選択:** Points to the Files select dropdown and the Calcration Condition buttons.
- 平滑化モード切り替え:** Points to the Smoothing dropdown menu.
- RD 補正モード切り替え:** Points to the RD dropdown menu.
- 吸収補正指定:** Points to the AbsCalc section, specifically the Absorption coefficient and Penetration depth fields.
- defocus 指定:** Points to the Defocus file Select section, specifically the Defocus functions file and Defocus function files dropdowns.
- 平滑化指定:** Points to the Smoothing for ADC section, specifically the Cycle and Points dropdowns.
- 作成データ指定:** Points to the OutFiles section, specifically the TXT2(Pole) radio button.
- 計算実行:** Points to the Calc button.

6. 配向評価総合パッケージ CTR ソフトウェアとの連動

メニューの ToolKit から以下のカテゴリのサブメニューを表示、選択で別の画面が表示される。



たとえば、ODFAfterTools では

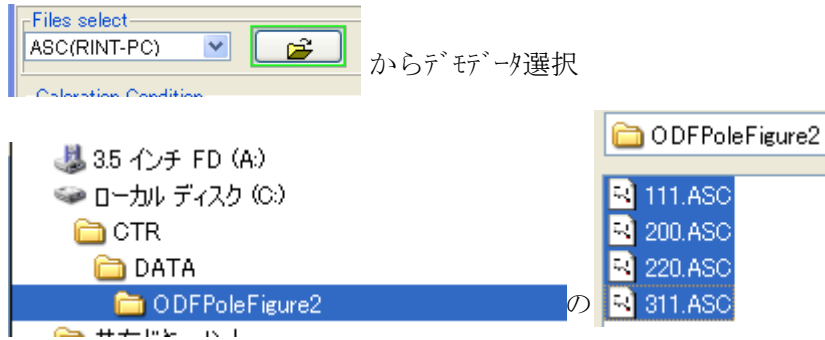


が表示され

更に中央のアプリケーション名を選択すると、各種ソフトウェアが動作します。

7. デモデータによる動作確認

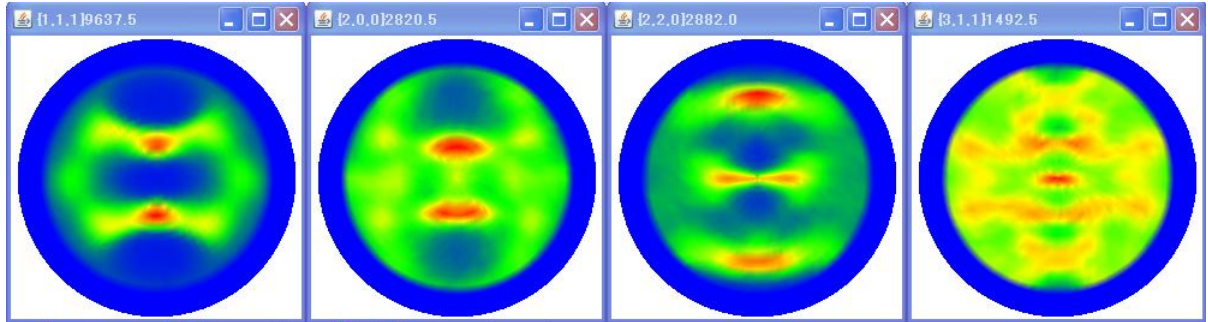
7. 1 処理データ選択



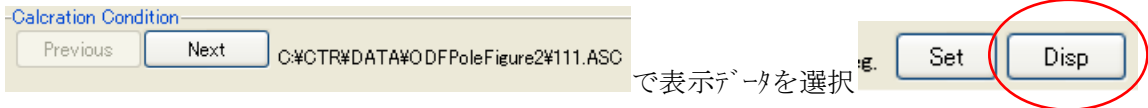
からデータ選択

を複数選択する。

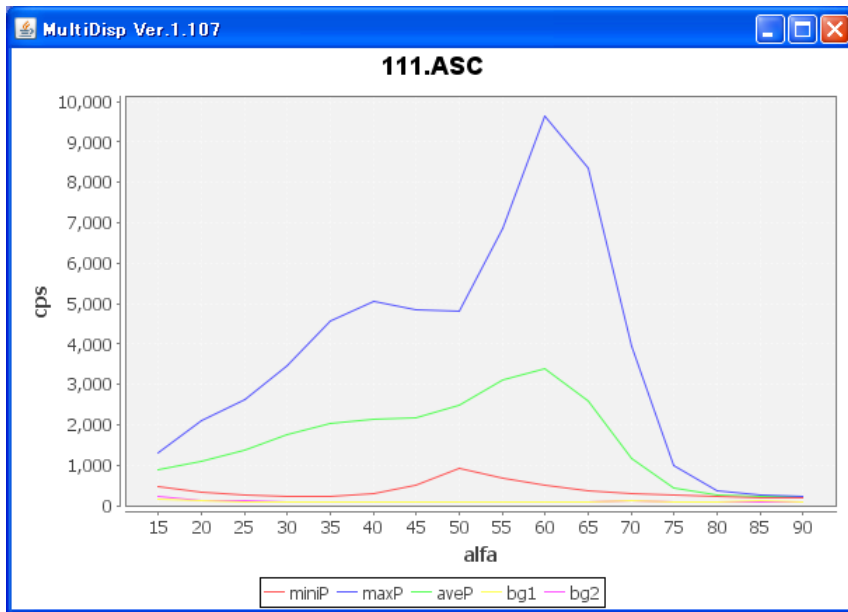
選択した測定データを表示します。指数と最大強度が表示



7. 2 測定データ評価



で表示データを選択

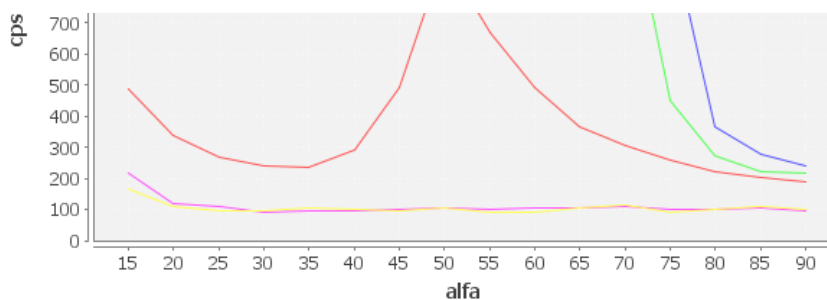


横軸は α 軸
 β 方向の平均値を表示
 赤：ピークの最小強度
 青：ピークの最大強度
 緑：ピークの平均値
 黄：バックグラウンド low
 赤：バックグラウンド high

評価はバックグラウンドに着目
 拡大すると
 バックグラウンドが左側で
 ピークと同じ動きを示す。

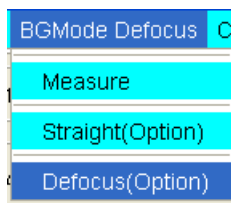
バックグラウンド測定 2θ 角度が
 ピーク角度に近い為
 修正の必要がある。

拡大

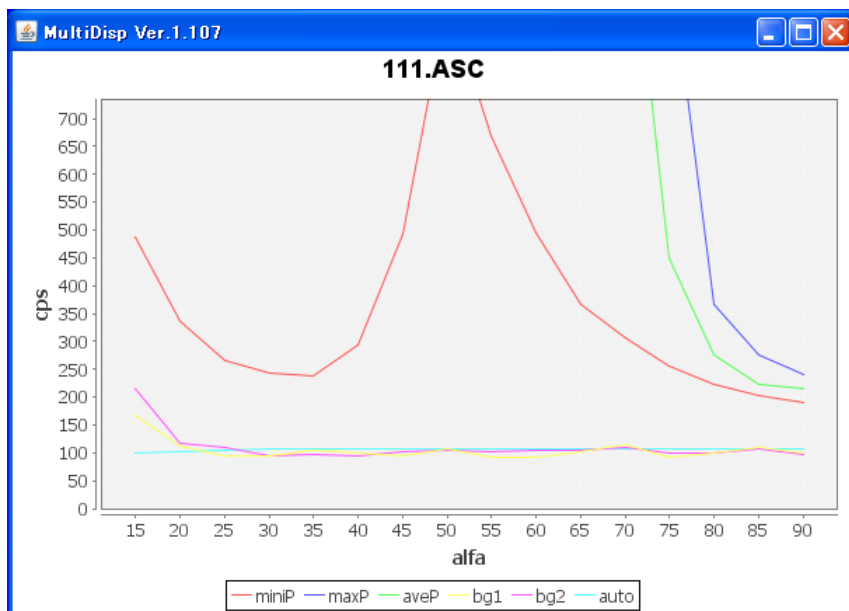


7. 3 測定バックグラウンド強度の修正

α 軸に対するバックグラウンド強度プロファイルは、defocus 曲線と同じような傾向があり、通常極点図の外側になるに従って、強度が減衰します。メニューの BGMMode から defocus を選択



defocus を選択後、再度 DISP から拡大する。

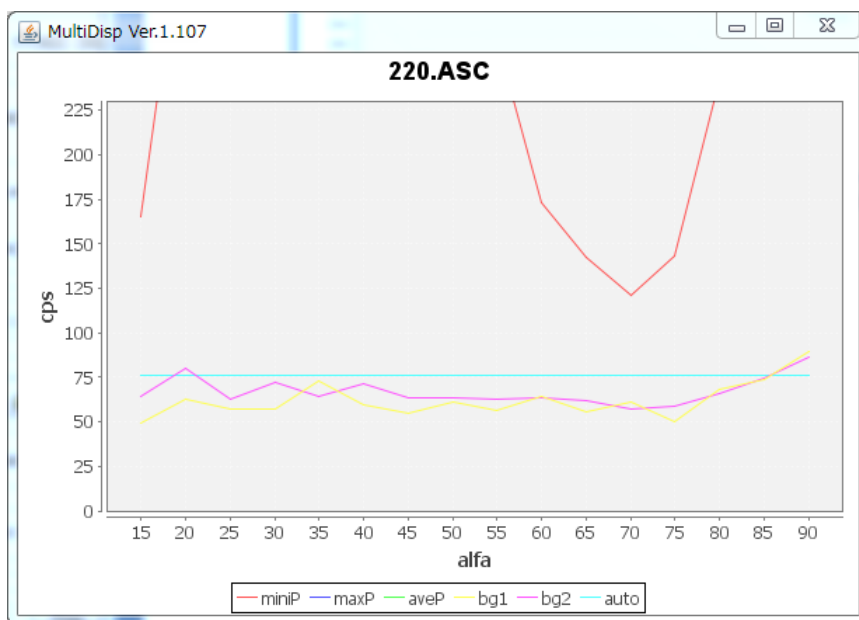


Auto 曲線は極点図の中心付近の3点の平均値から計算されます。

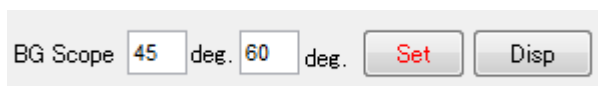
水色:Auto 曲線が表示される。この曲線をバックグラウンド強度として修正されます。

Auto 曲線の変更

{220}極点図を拡大すると

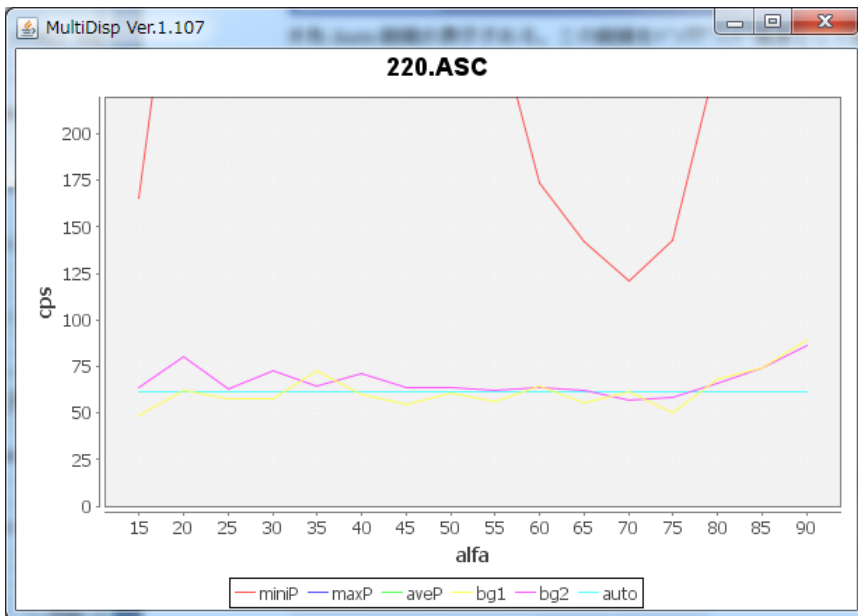


α 軸で平均値を計算する範囲を指定する。
45 度から 60 度が最適とした場合



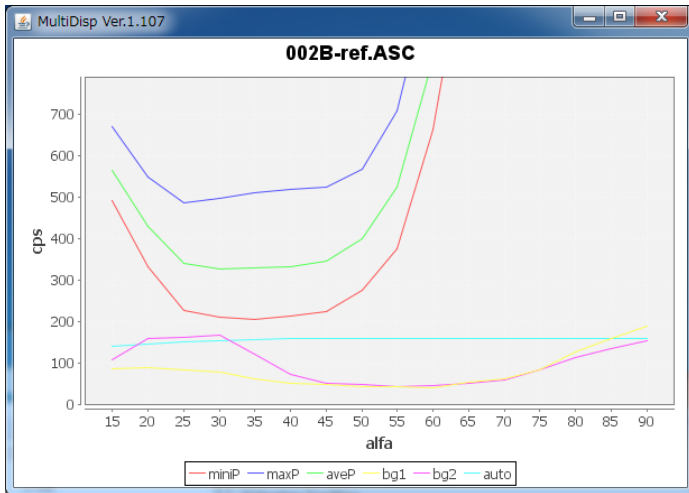
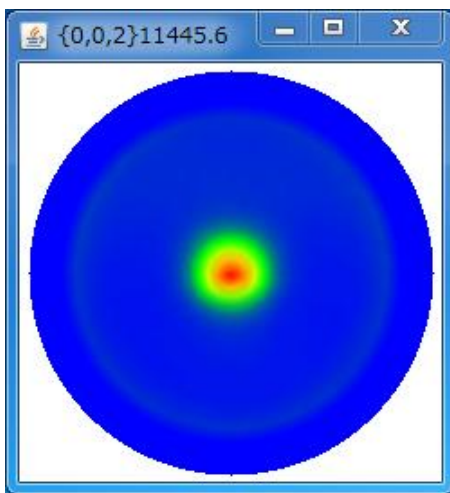
45 度から 60 度を入力し Set する。

再度 DISP と拡大で



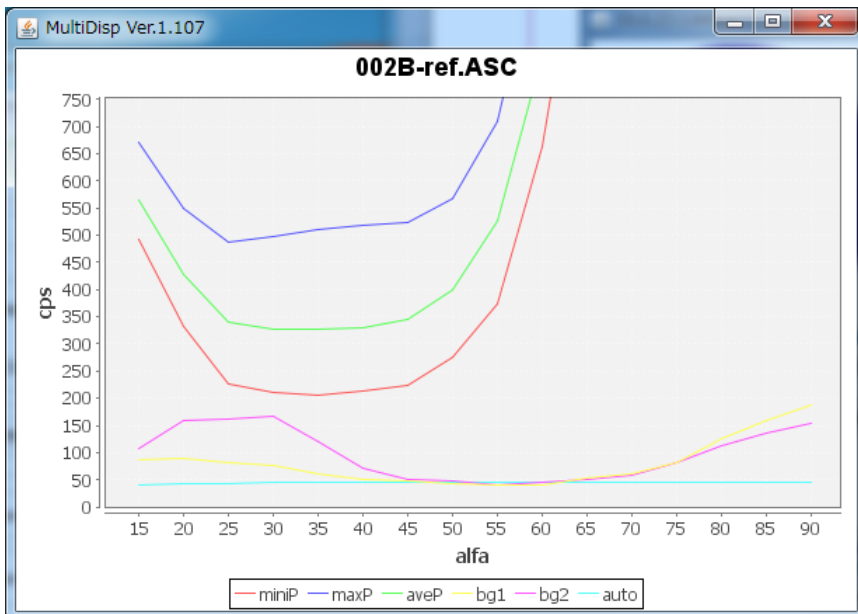
修正は可能ですが、測定時のバックグラウンド測定 2θ 角度をピーク角度から 3 度位離して測定すると良い結果が得られる。

この修正機能は、マグネシウムなどに見られる極点図の中心付近のバックグラウンド対策に有効になります。



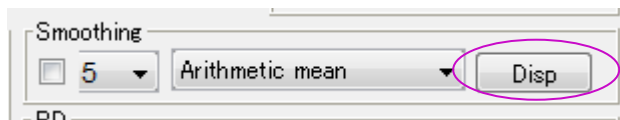
α 軸 50 度から 65 度で平均値を算出

BG Scope deg. deg.

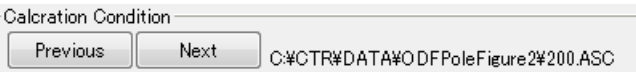


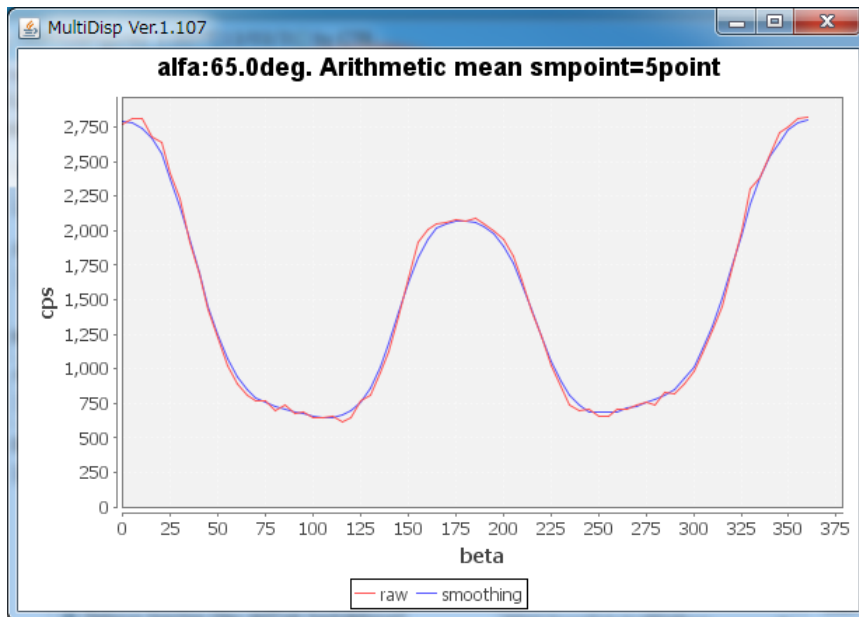
7. 4 平滑化

結晶粒が荒い場合、測定データに一粒毎のピークが現れます。大きなピークが残ると、ODFなどの解析結果に影響します。平滑化の手法と平滑化点数を選び、最適化を行う。



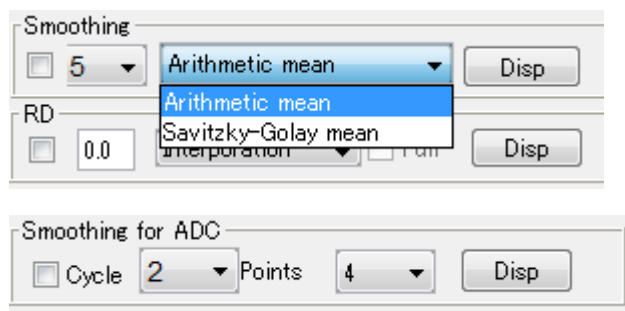
Disp では選択されているデータの最大強度が存在する α 軸位置の β 軸方向のプロファイルと、平滑化を行ったプロファイルが表示される。平滑化方向は α 軸と β 軸双方に平滑化を行っている。

例えば、{200}極点図を選択  で DISP



平滑化パラメータは全ての極点図で共通です。

平滑化の手法は



Arithmetic

指定した点数の移動平均

Savitzky-Golay

重み付き移動平均

Smoothing for ADC

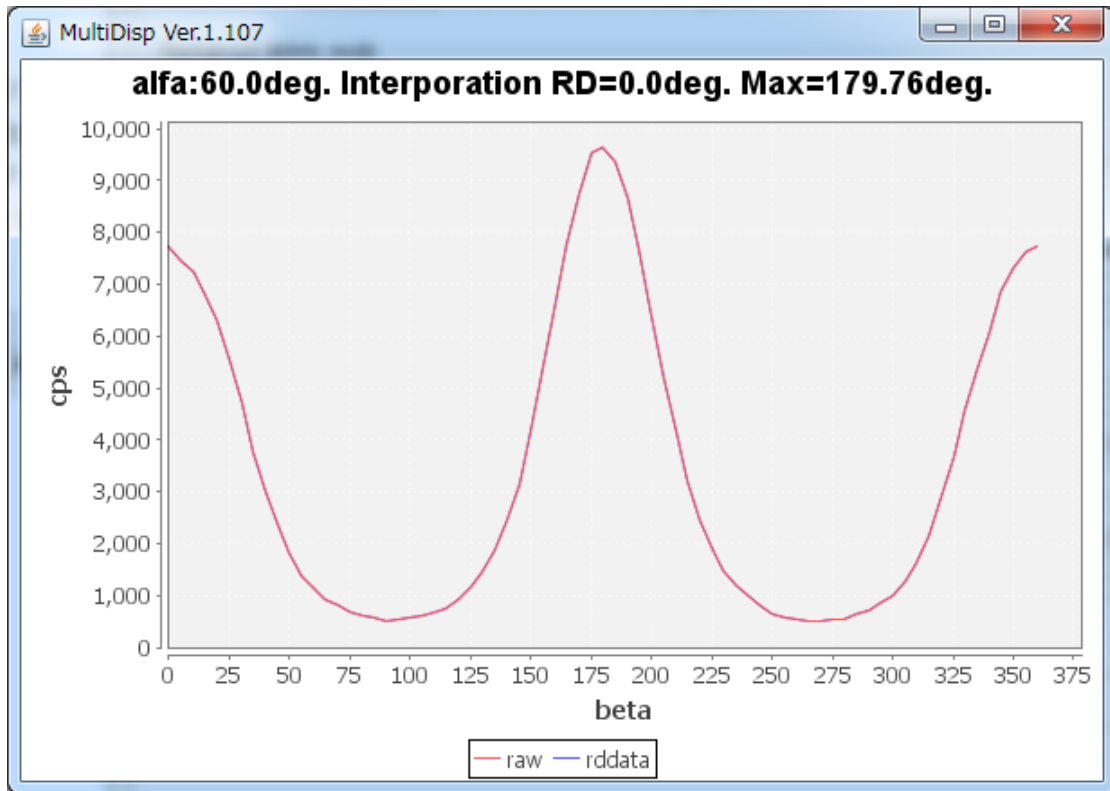
Savitzky の負の重みつけがない手法、

大きな平滑化が行えるが、最大強度が下がります。

7. 5 RD補正

RD (Rolling Direction) は圧延された材料がはき出される方向であるが、その方向を極点図測定時にシステムで決まった方向に取り付ける。しかし、この取り付けが曲がっていると、回転した極点図として測定される。RD-マイナスRDラインに対し、回転により対称極点図にする機能である。

RD-DISP は、選択されている極点図の最大強度の α 軸角度における β 軸方向のプロファイルを表示する。例えば、{111}極点図を選択し DISP では



ピークプロファイルがシャープな極点図を選択し、最大強度の β 角度を確認
最大強度角度が、0、45、90のよう角度を示す極点図で決定する。

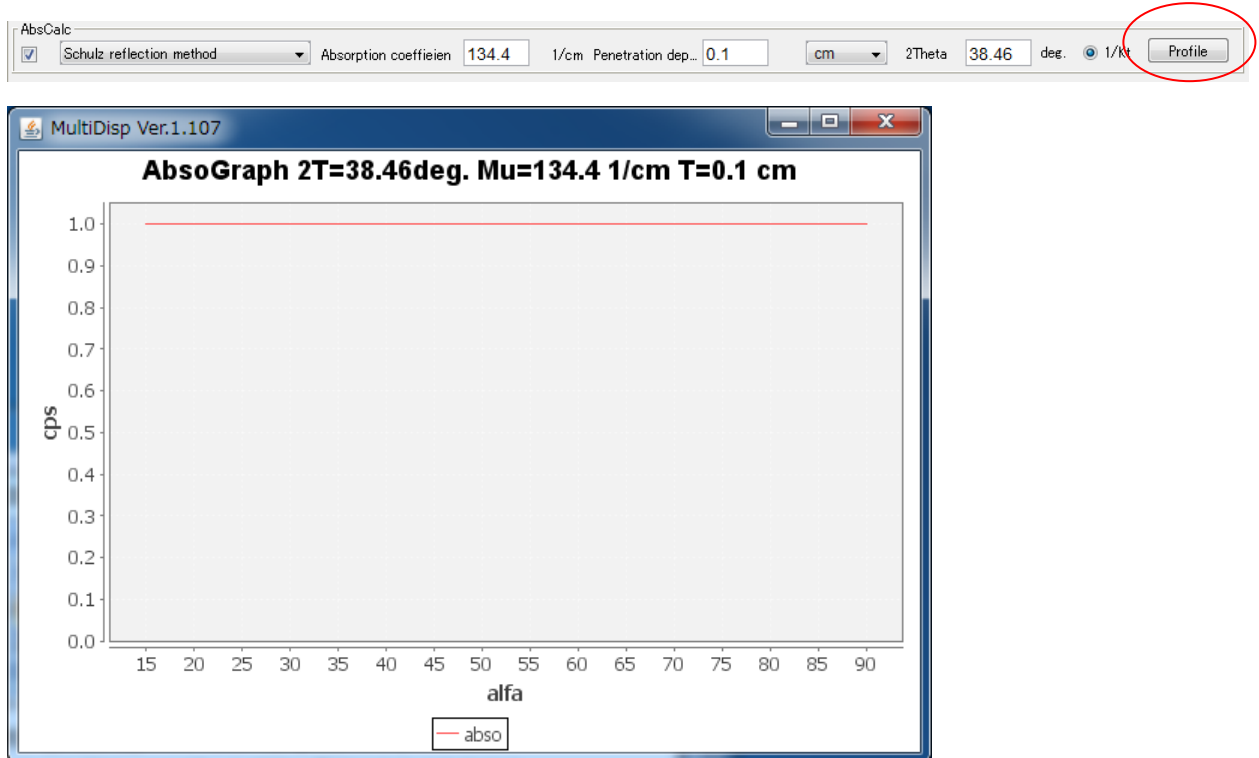
このパラメータも全ての極点図に対して共通に使われる。

7. 6 吸収補正

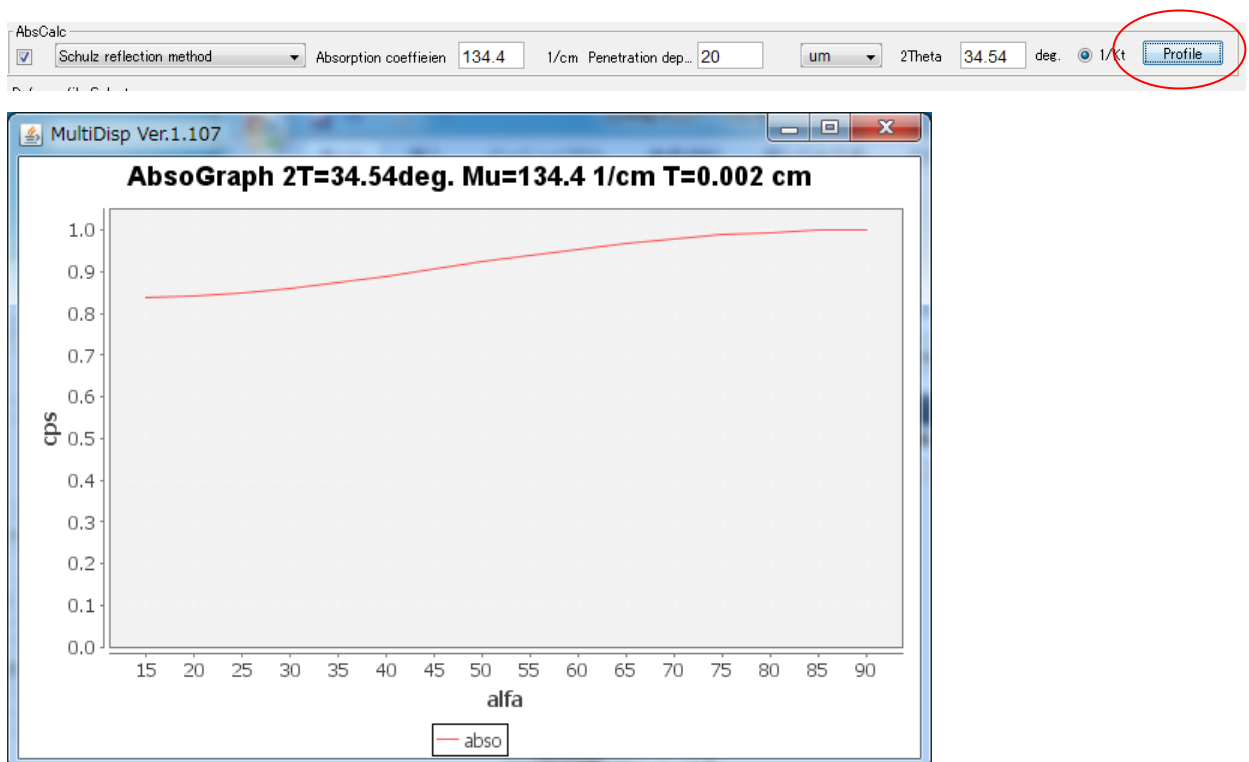
XRD による方位測定では EBSD に比べ、若干深さ方向の方位も測定されていると言われています。吸収が少ない材料では、より深い位置からの反射があり、この影響は Defocus と区別がし難くなります。しかし吸収の大きな試料における反射法極点図測定では、吸収の影響は少ない。

透過法では、吸収係数と試料厚さを掛け合わせた値が 1.0 に近いと吸収の影響は少なくなります。

アルミニウム 1mm を Cu 管球で測定した吸収補正曲線



厚さを $20 \mu\text{m}$ とした場合

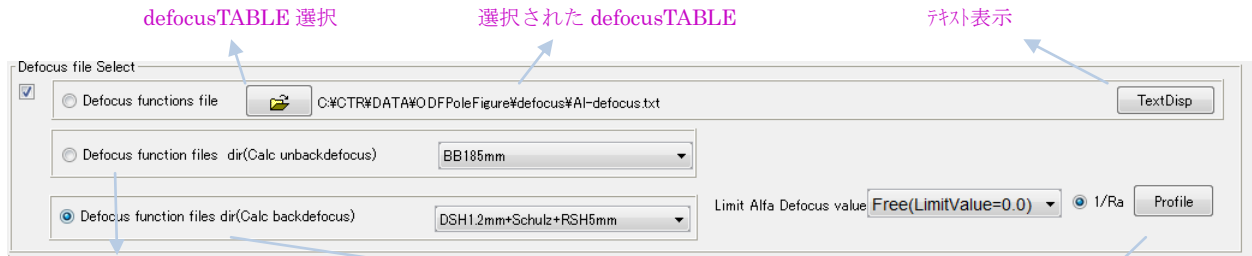


このプロファイルは補正量であり、表示している係数を測定した極点図に掛け合わせます。

7. Defocus 補正

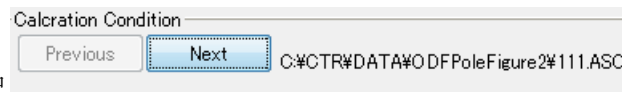
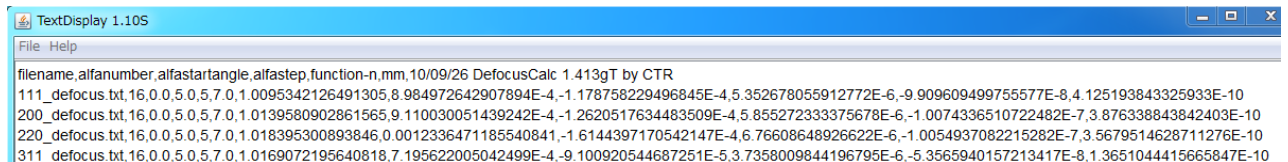
反射法極点図測定では、X線ビームに対し、試料を煽って測定を行う。煽り方向には Schulz スリットで制限しているが、多少の広がりがある。この為、この広がりが試料を煽ることで、回折線も広がり有限な受光スリットからはみ出し、回折強度の低下が生じる。この現象が Defocus であり、測定 2θ 角度が低角度、受光スリットが狭い場合、大きく落ち込み、補正量が大きくなる。

補正曲線は、測定試料と同じ材質の無配向試料を測定して補正する。被検試料測定時、受光スリット幅は無配向試料測定と同一でなければならない。無配向試料が得られない場合、計算で求める。



全ての角度、全てのスリット幅に対応 TABLE1 全ての角度、全てのスリット幅に対応 TABLE2 プロファイル表示

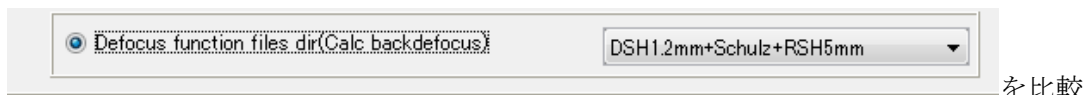
テキスト表示は、選択された TABLE を表示、各反射が多項式で示される。



{111}極点図を選択



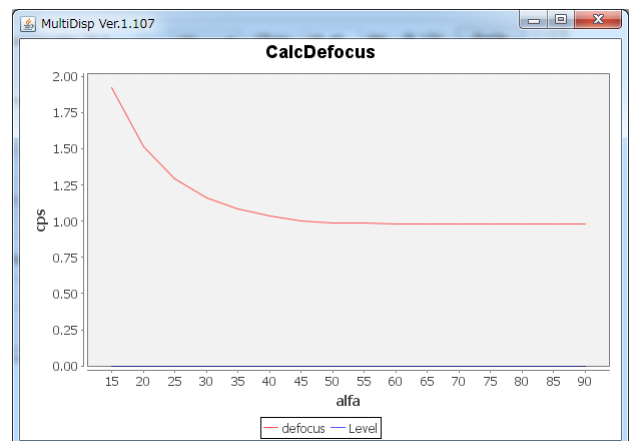
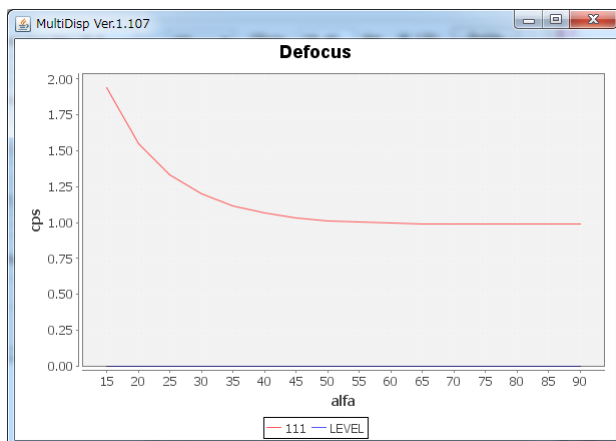
多項式近似を選択



を比較

多項式

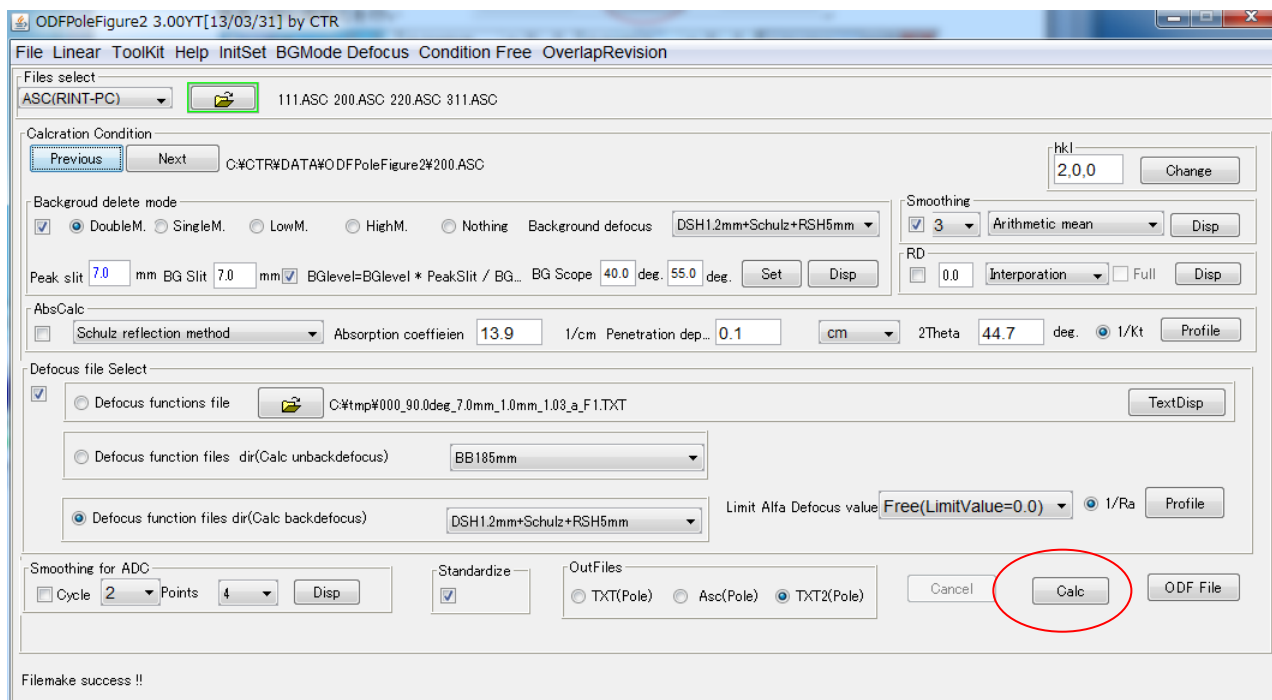
計算



ほぼ同一の補正曲線が得られる。

測定 2θ が高角度になれば、補正量が少なくなる。

7. 8一括データ処理を行う。

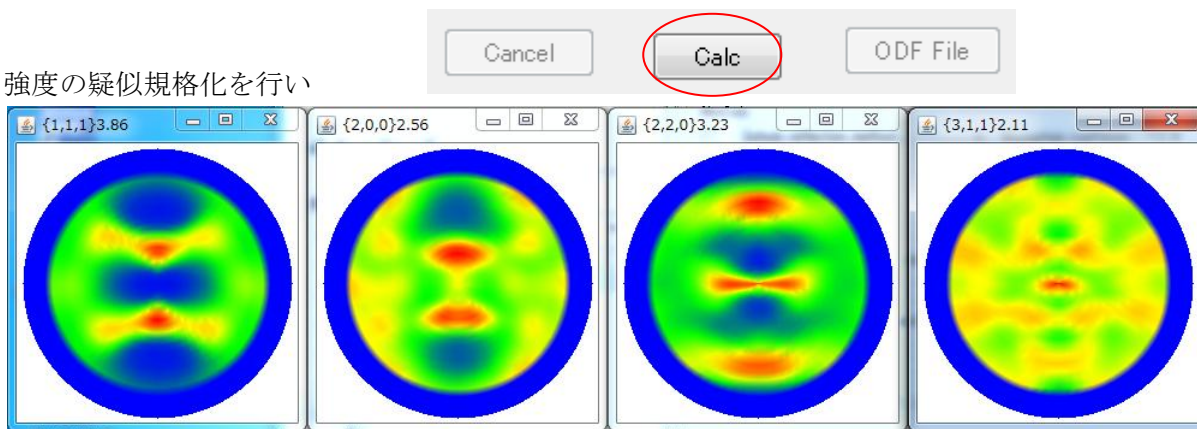


バックグラウンドは、{200}のみ、 α 軸 40 度から 55 度でバックグラウンドを計算

平滑化は移動平均 3 点

Defocus は計算による方法を選択

強度の疑似規格化を行い



処理結果を描画、強度が規格化極密度に変わり

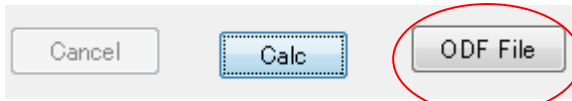


ODFFile ボタンが押せる状態に変化

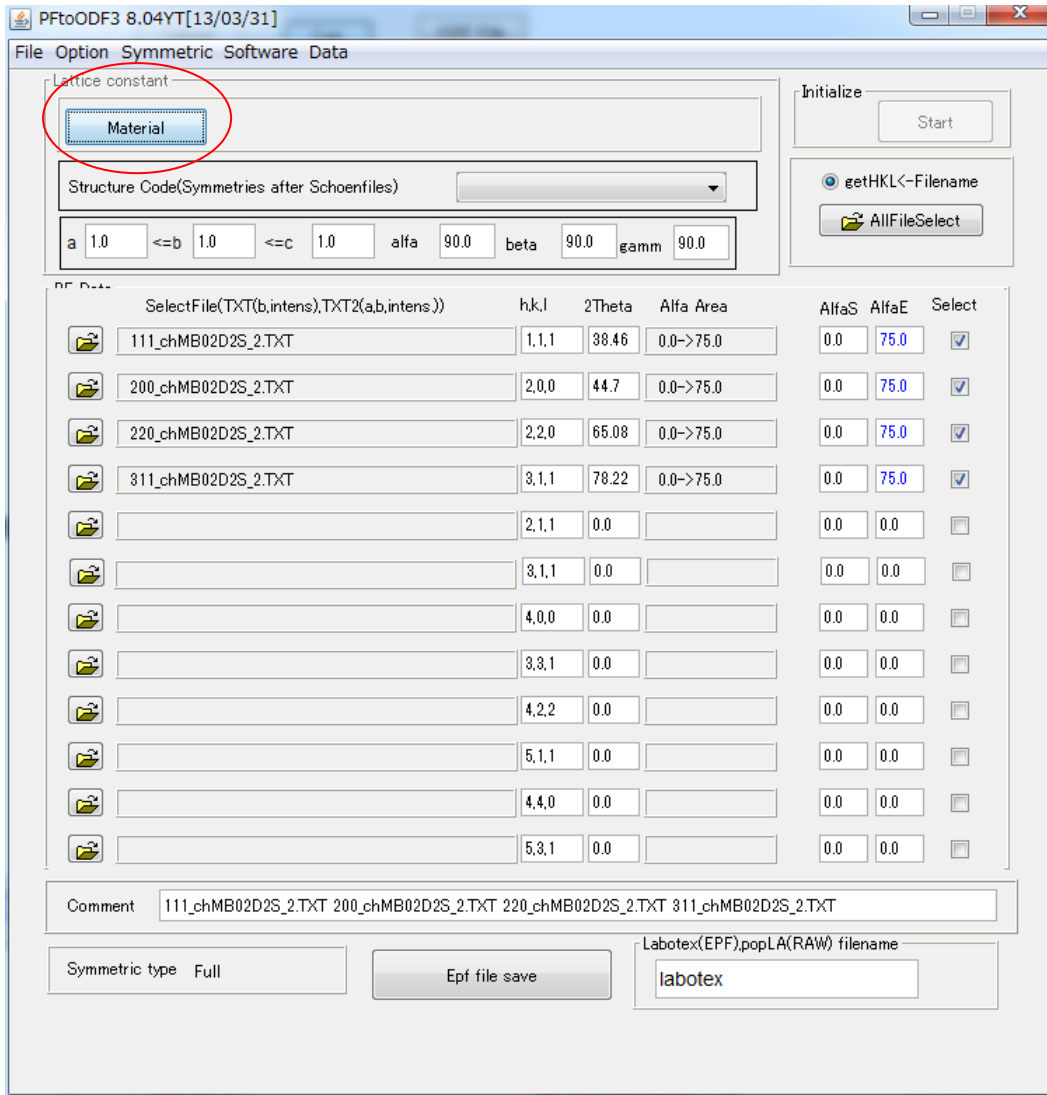
一方測定データのディレクトリを覗くと

200.ASC	2012/07/25 10:15	ASC ファイル	22 KB
220.ASC	2012/07/25 10:15	ASC ファイル	22 KB
311.ASC	2012/07/25 10:15	ASC ファイル	22 KB
111.ASC	2012/07/25 10:15	ASC ファイル	22 KB
111_chMB02D2S_2	2012/09/19 18:27	テキスト文書	22 KB
200_chMB02D2S_2	2012/09/19 18:27	テキスト文書	22 KB
220_chMB02D2S_2	2012/09/19 18:27	テキスト文書	22 KB
311_chMB02D2S_2	2012/09/19 18:27	テキスト文書	22 KB

処理結果の _ch 以降の英数字はデータ処理の内容を表示しています。

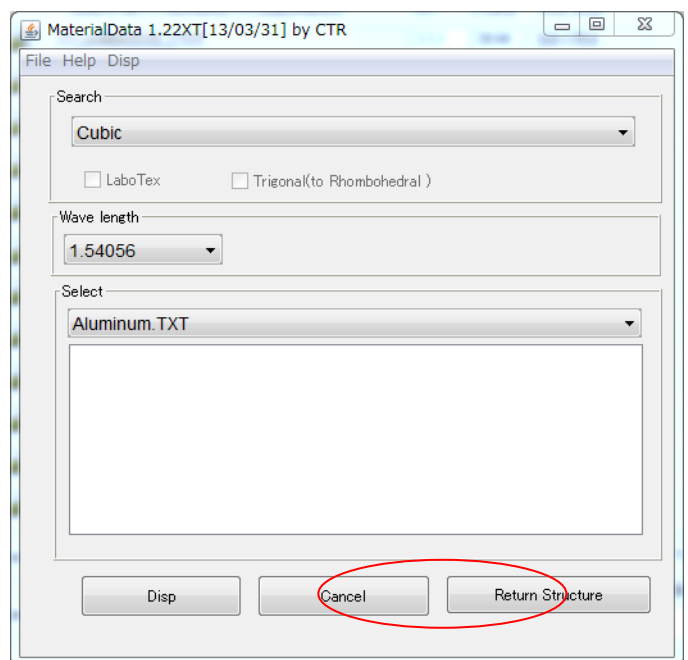
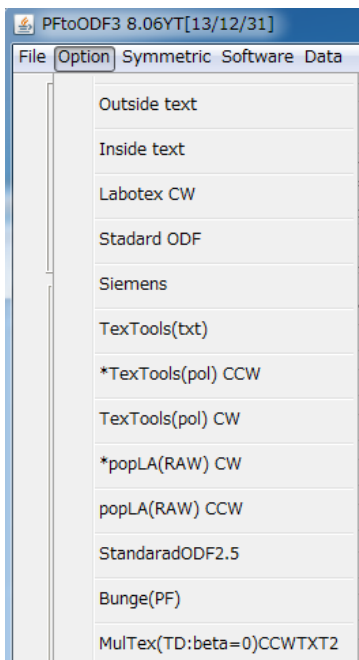


ODFFile を押すと P F t o O D F 3 にデータを引き継ぐ



Option から ODF を選択

Material から材料選択



Structure Code(Symmetries after Schoenfiles) 7 - O (cubic)

a 1.0 <=b 1.0 <=c 1.0 alfa 90.0 beta 90.0 gamm 90.0

LaboTex のパラメータを取得

PfToODF3 8.04YT[13/03/31]

File Option Symmetric Software Data

Lattice constant

Material Aluminum.txt

Structure Code(Symmetries after Schoenfiles) 7 - O (cubic)

a 1.0 <=b 1.0 <=c 1.0 alfa 90.0 beta 90.0 gamm 90.0

Initialize

Start

getHKL-Filename

AllFileSelect

SelectFile(TXT(b,intens),TXT2(ab,intens))	h,k,l	2Theta	Alfa Area	AlfaS	AlfaE	Select
111_chMB02D2S_2.TXT	1,1,1	38.46	0.0->75.0	0.0	75.0	<input checked="" type="checkbox"/>
200_chMB02D2S_2.TXT	2,0,0	44.7	0.0->75.0	0.0	75.0	<input checked="" type="checkbox"/>
220_chMB02D2S_2.TXT	2,2,0	65.08	0.0->75.0	0.0	75.0	<input checked="" type="checkbox"/>
311_chMB02D2S_2.TXT	3,1,1	78.22	0.0->75.0	0.0	75.0	<input checked="" type="checkbox"/>
	2,1,1	0.0		0.0	0.0	<input type="checkbox"/>
	3,1,1	0.0		0.0	0.0	<input type="checkbox"/>
	4,0,0	0.0		0.0	0.0	<input type="checkbox"/>
	3,3,1	0.0		0.0	0.0	<input type="checkbox"/>
	4,2,2	0.0		0.0	0.0	<input type="checkbox"/>
	5,1,1	0.0		0.0	0.0	<input type="checkbox"/>
	4,4,0	0.0		0.0	0.0	<input type="checkbox"/>
	5,3,1	0.0		0.0	0.0	<input type="checkbox"/>

Comment 111_chMB02D2S_2.TXT 200_chMB02D2S_2.TXT 220_chMB02D2S_2.TXT 311_chMB02D2S_2.TXT

Symmetric type Full

Epffile save

Labotex(EPF),popLA(RAW) filename labotex

111_chMB02D2S_2.TXT	1,1,1	38.46	0.0->75.0	0.0	75.0	<input checked="" type="checkbox"/>
200_chMB02D2S_2.TXT	2,0,0	44.7	0.0->75.0	0.0	75.0	<input checked="" type="checkbox"/>
220_chMB02D2S_2.TXT	2,2,0	65.08	0.0->75.0	0.0	75.0	<input checked="" type="checkbox"/>
311_chMB02D2S_2.TXT	3,1,1	78.22	0.0->75.0	0.0	75.0	<input checked="" type="checkbox"/>

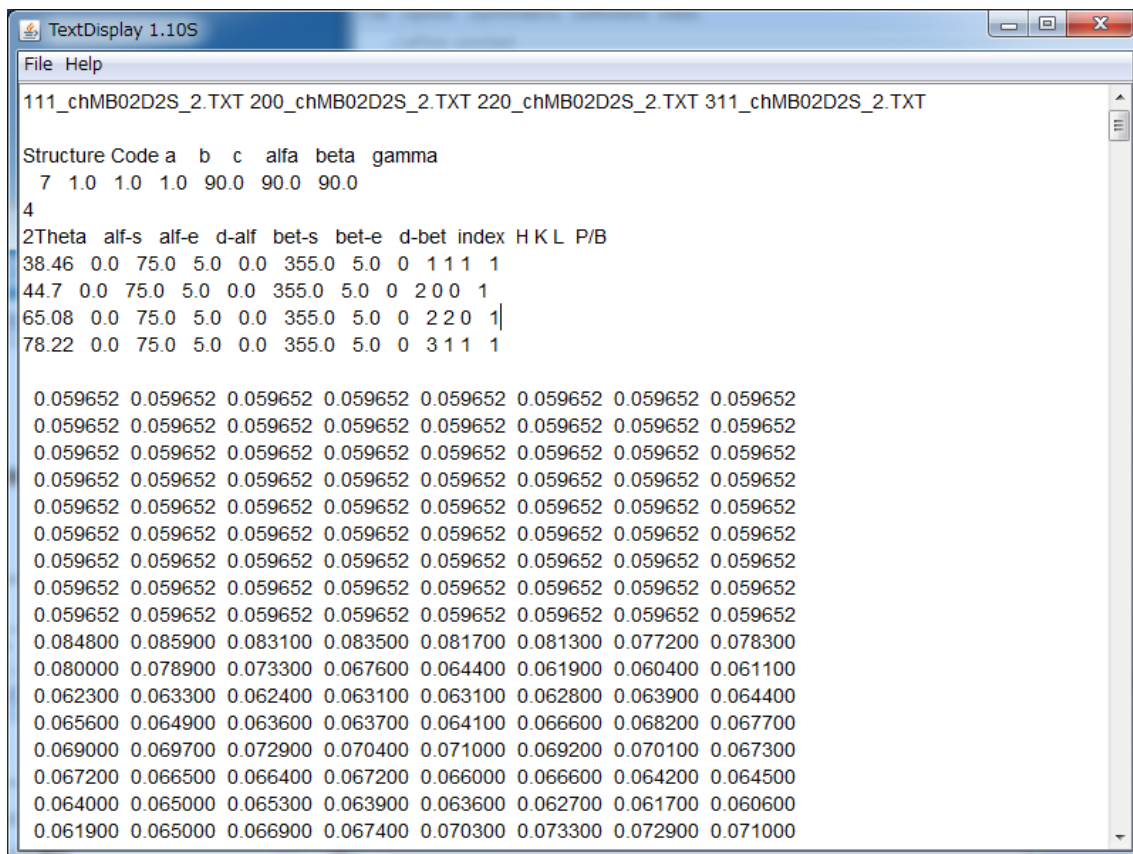
極点図の指数チェックを行い、正常であることを表す。

Epffile save

Labotex(EPF),popLA(RAW) filename labotex

ファイル名を入力して Epffilesave を行えば、ODF 向けファイルが作成できる。

作成されたファイルを表示



```
TextDisplay 1.10S
File Help
111_chMB02D2S_2.TXT 200_chMB02D2S_2.TXT 220_chMB02D2S_2.TXT 311_chMB02D2S_2.TXT

Structure Code a b c alfa beta gamma
7 1.0 1.0 1.0 90.0 90.0 90.0
4
2Theta alf-s alf-e d-alf bet-s bet-e d-bet index HKL P/B
38.46 0.0 75.0 5.0 0.0 355.0 5.0 0 1 1 1 1
44.7 0.0 75.0 5.0 0.0 355.0 5.0 0 2 0 0 1
65.08 0.0 75.0 5.0 0.0 355.0 5.0 0 2 2 0 1
78.22 0.0 75.0 5.0 0.0 355.0 5.0 0 3 1 1 1

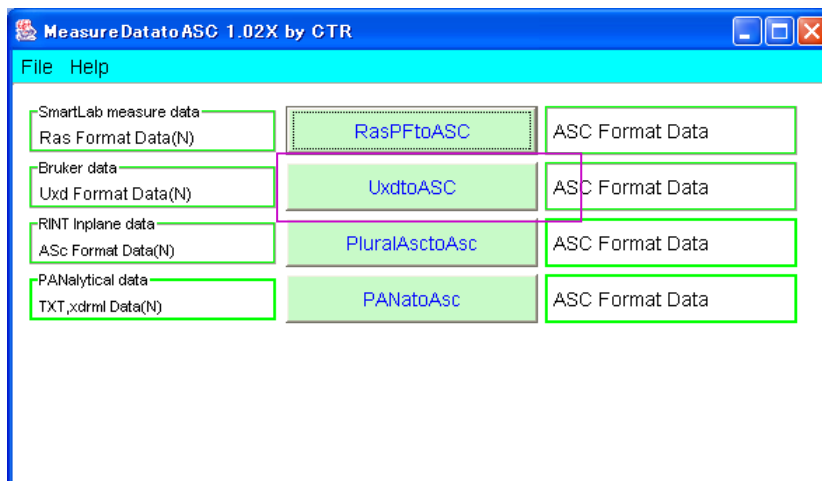
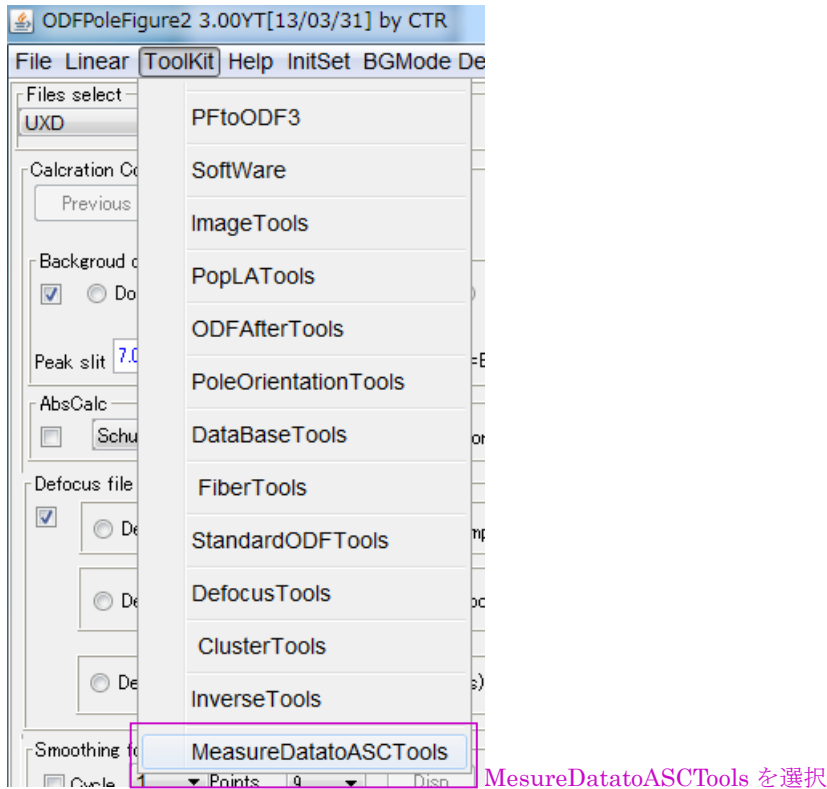
0.059652 0.059652 0.059652 0.059652 0.059652 0.059652 0.059652 0.059652
0.059652 0.059652 0.059652 0.059652 0.059652 0.059652 0.059652 0.059652
0.059652 0.059652 0.059652 0.059652 0.059652 0.059652 0.059652 0.059652
0.059652 0.059652 0.059652 0.059652 0.059652 0.059652 0.059652 0.059652
0.059652 0.059652 0.059652 0.059652 0.059652 0.059652 0.059652 0.059652
0.059652 0.059652 0.059652 0.059652 0.059652 0.059652 0.059652 0.059652
0.059652 0.059652 0.059652 0.059652 0.059652 0.059652 0.059652 0.059652
0.059652 0.059652 0.059652 0.059652 0.059652 0.059652 0.059652 0.059652
0.084800 0.085900 0.083100 0.083500 0.081700 0.081300 0.077200 0.078300
0.080000 0.078900 0.073300 0.067600 0.064400 0.061900 0.060400 0.061100
0.062300 0.063300 0.062400 0.063100 0.063100 0.062800 0.063900 0.064400
0.065600 0.064900 0.063600 0.063700 0.064100 0.066600 0.068200 0.067700
0.069000 0.069700 0.072900 0.070400 0.071000 0.069200 0.070100 0.067300
0.067200 0.066500 0.066400 0.067200 0.066000 0.066600 0.064200 0.064500
0.064000 0.065000 0.065300 0.063900 0.063600 0.062700 0.061700 0.060600
0.061900 0.065000 0.066900 0.067400 0.070300 0.073300 0.072900 0.071000
```

ODF 別のディレクトリの下にファイルが作成される。

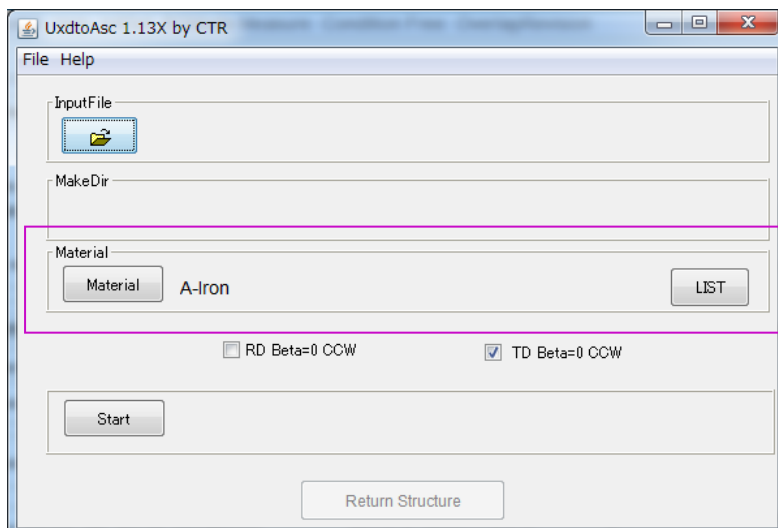
ファイル名	作成日時	ファイルタイプ	サイズ
LaboTex	2012/09/19 18:45	ファイル フォル...	
200.ASC	2012/07/25 10:15	ASC ファイル	22 KB
220.ASC	2012/07/25 10:15	ASC ファイル	22 KB
311.ASC	2012/07/25 10:15	ASC ファイル	22 KB
111.ASC	2012/07/25 10:15	ASC ファイル	22 KB
111_chMB02D2S_2	2012/09/19 18:27	テキスト文書	22 KB
200_chMB02D2S_2	2012/09/19 18:27	テキスト文書	22 KB
220_chMB02D2S_2	2012/09/19 18:27	テキスト文書	22 KB
311_chMB02D2S_2	2012/09/19 18:27	テキスト文書	22 KB

8. U x dフォーマットの読み込み

8. 1 予め、UxdフォーマットからASCフォーマットに変換する方法



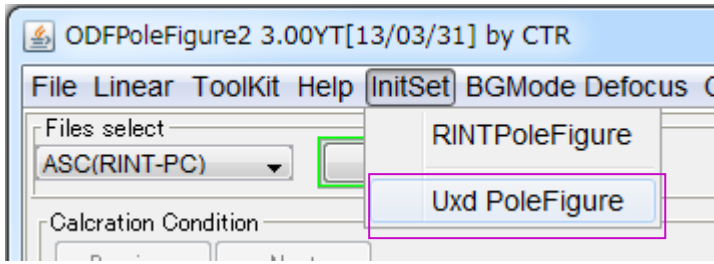
UxdtoASC を選択



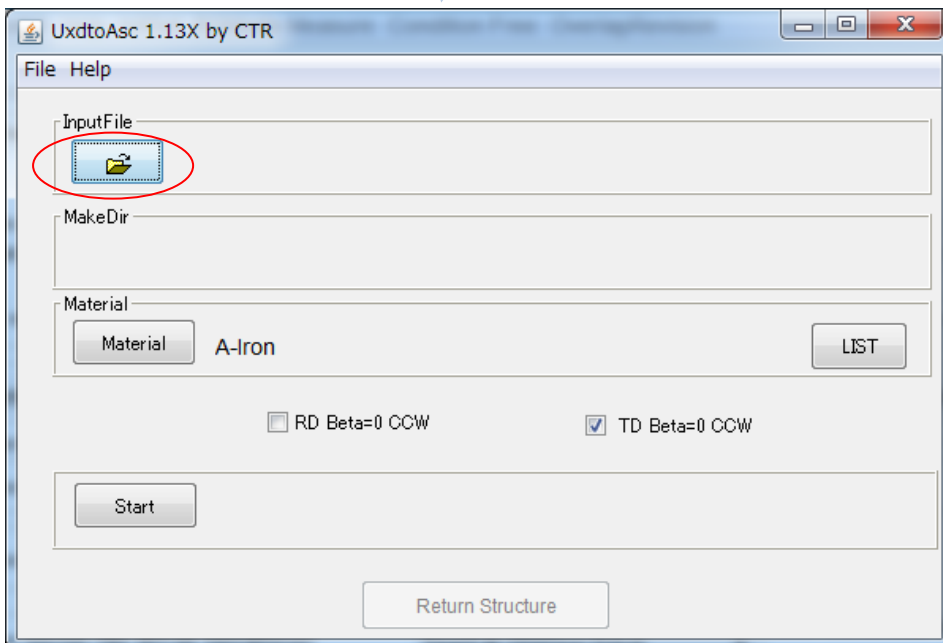
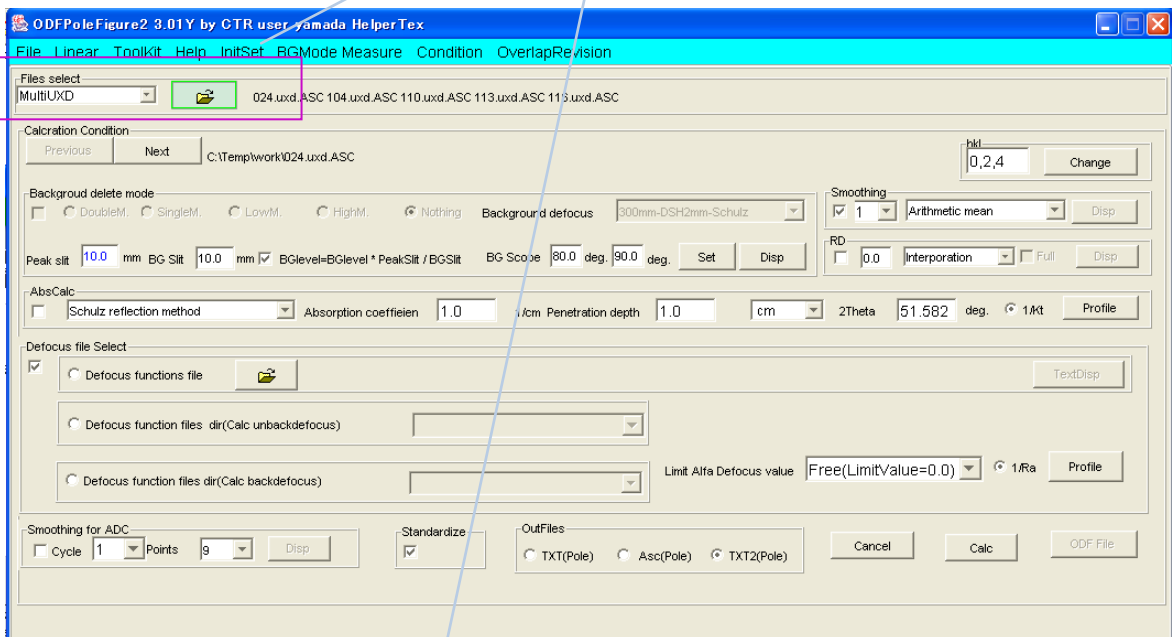
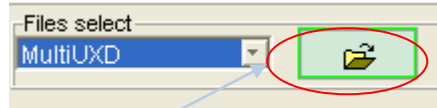
入力U x dファイルに指数が登録されていません。
A s cファイルでは指数の項目があります。自動指数付けを行う上で材料を明確にして下さい。

U x dファイル選択、
Start で Asc ファイルに変換します。

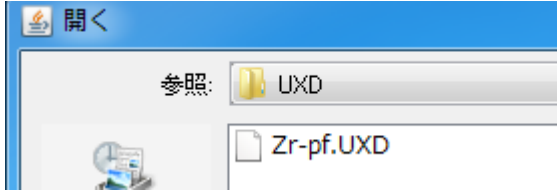
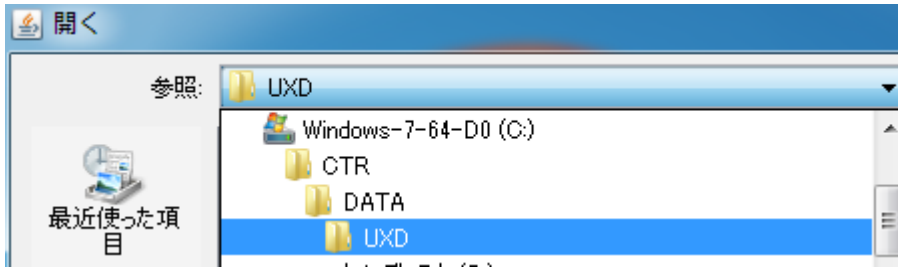
8. 2 直接変換方法



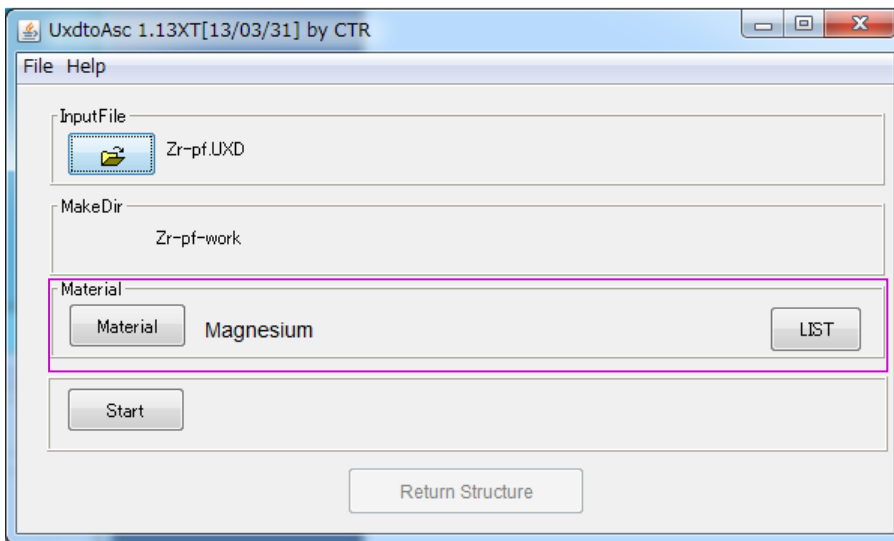
InitSet->Uxd PoleFigure を選択



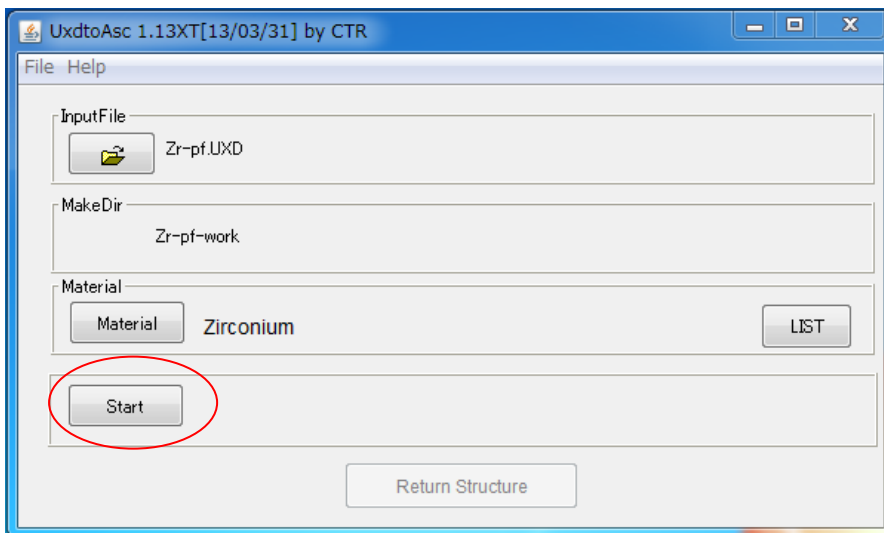
U x d ファイルを選択



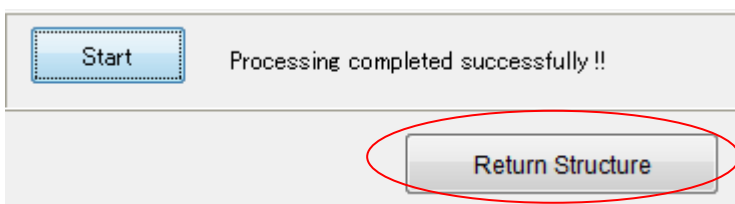
CTR¥DATA¥UXD¥ZR-pf.UXD ファイルを選択



Material を Zirconium に変える。



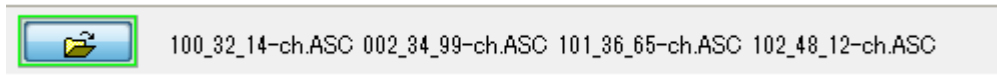
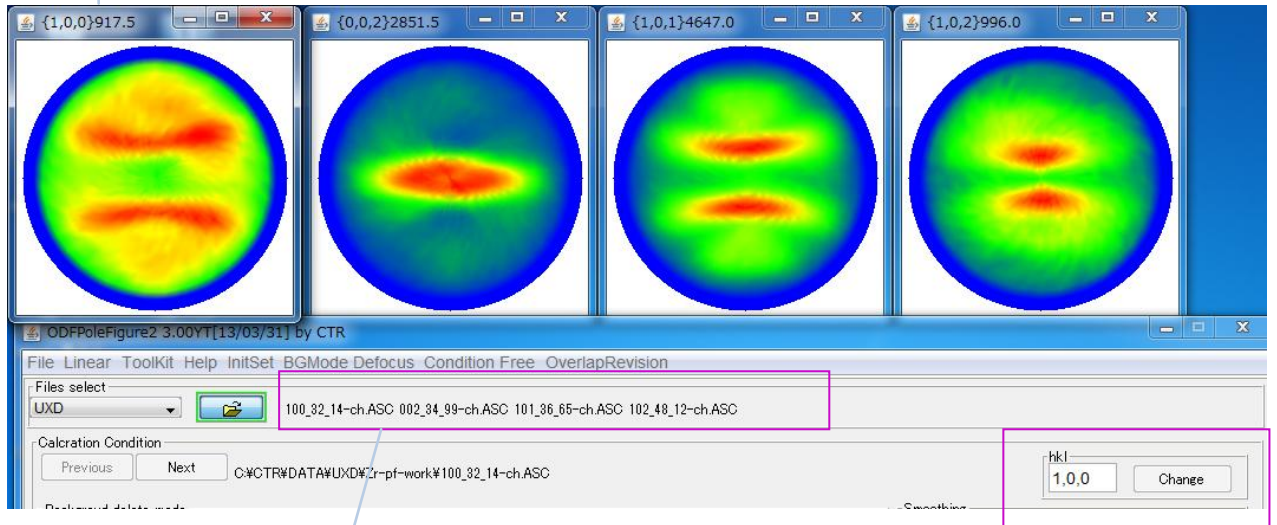
Start で Asc ファイル変換開始



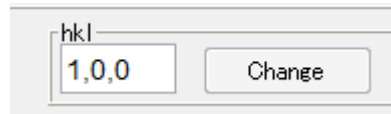
変換終了したら、ReturnStructure で終了



各極点図のタイトルに指数と最大強度を表示しています。指数の確認してください。指数が間違っている場合、前の画面で Material の指定を確認してください。



選択した Uxd ファイルから、複数の Asc ファイルが作成されています。ファイル名は指数+測定 2θ 角度を表しています。

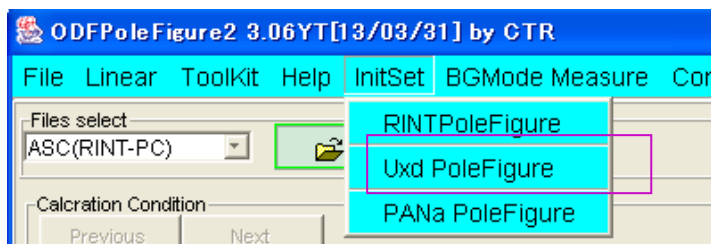


Asc ファイル内の指数が登録されている部分を表示しています。
この部分は、defocus 多項式近似式のサチに用いられる重要な情報です。

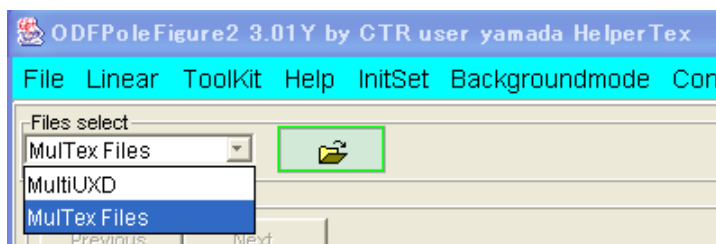
以降は A s c ファイルの操作と同じ

8. 3 Mu l T e x データの場合

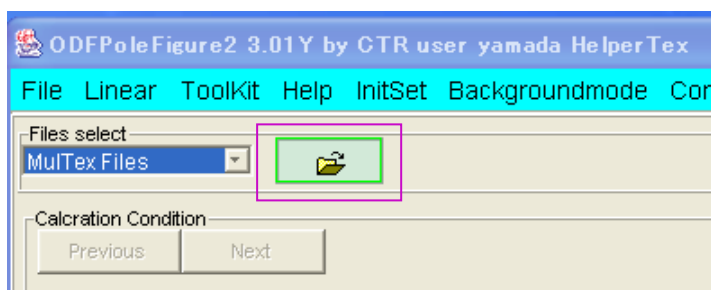
Mu l T e x データの場合、ファイルは極点図毎に別々で、既にバックグラウンドは削除されている。ファイルの選択は



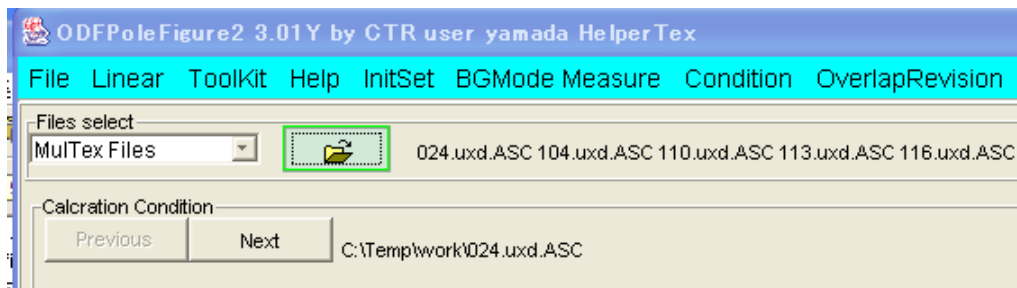
UxdPoleFigure を選択



MultiTex Files を選択



Uxd ファイルを複数選択



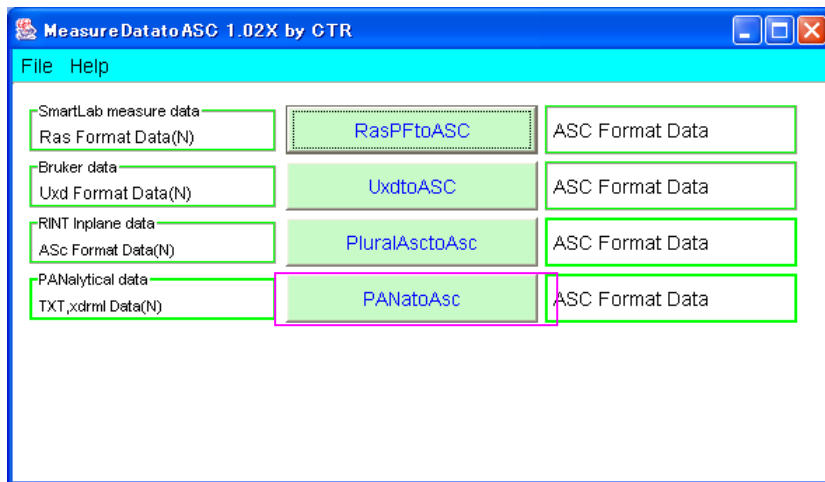
選択したファイルから ASC 変換したファイル名が表示、ASC ファイルは、選択した Uxd デレクトリに work デレクトリが作成され、そのディレクトリに作成される。極点図で表示している反射指数はファイル名から取得している。

名前	サイズ	種類	更新日時
024.uxd.ASC	14 KB	RINT2000アスキー	2012/10/08 7:18
104.uxd.ASC	14 KB	RINT2000アスキー	2012/10/08 7:18
110.uxd.ASC	13 KB	RINT2000アスキー	2012/10/08 7:18
113.uxd.ASC	14 KB	RINT2000アスキー	2012/10/08 7:18
116.uxd.ASC	15 KB	RINT2000アスキー	2012/10/08 7:18

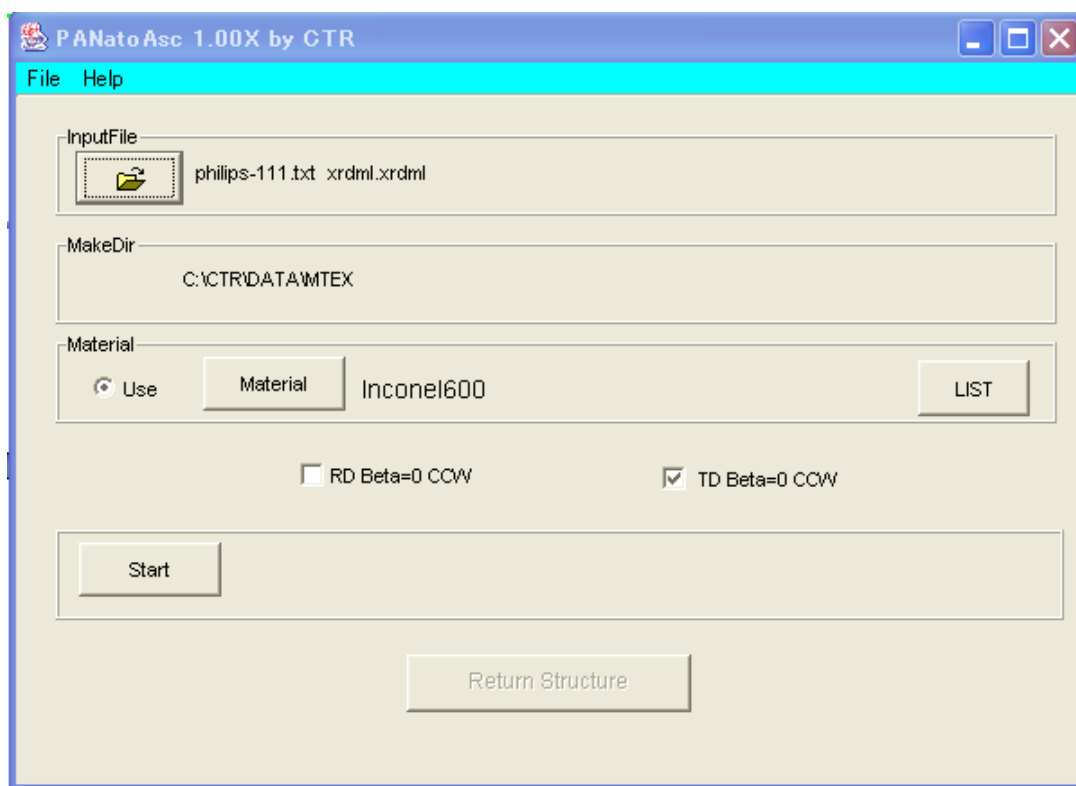
後は、ASC ファイル選択と同様の処理を行う。

9. PANAlyticalデータの読み込み

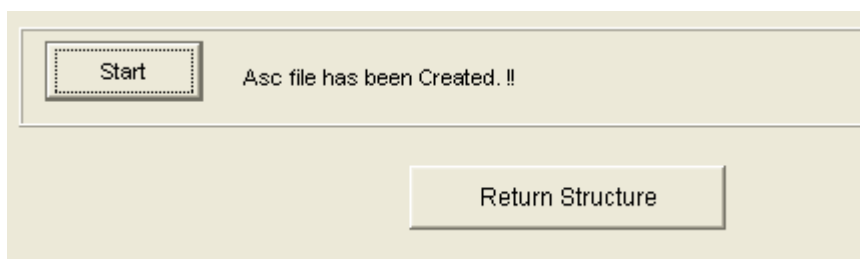
9.1 予め、txt、xrxmlフォーマットからASCフォーマットに変換する方法



PoleFigure2->ToolKits->MeasureDatatoASC->PANatoAsc

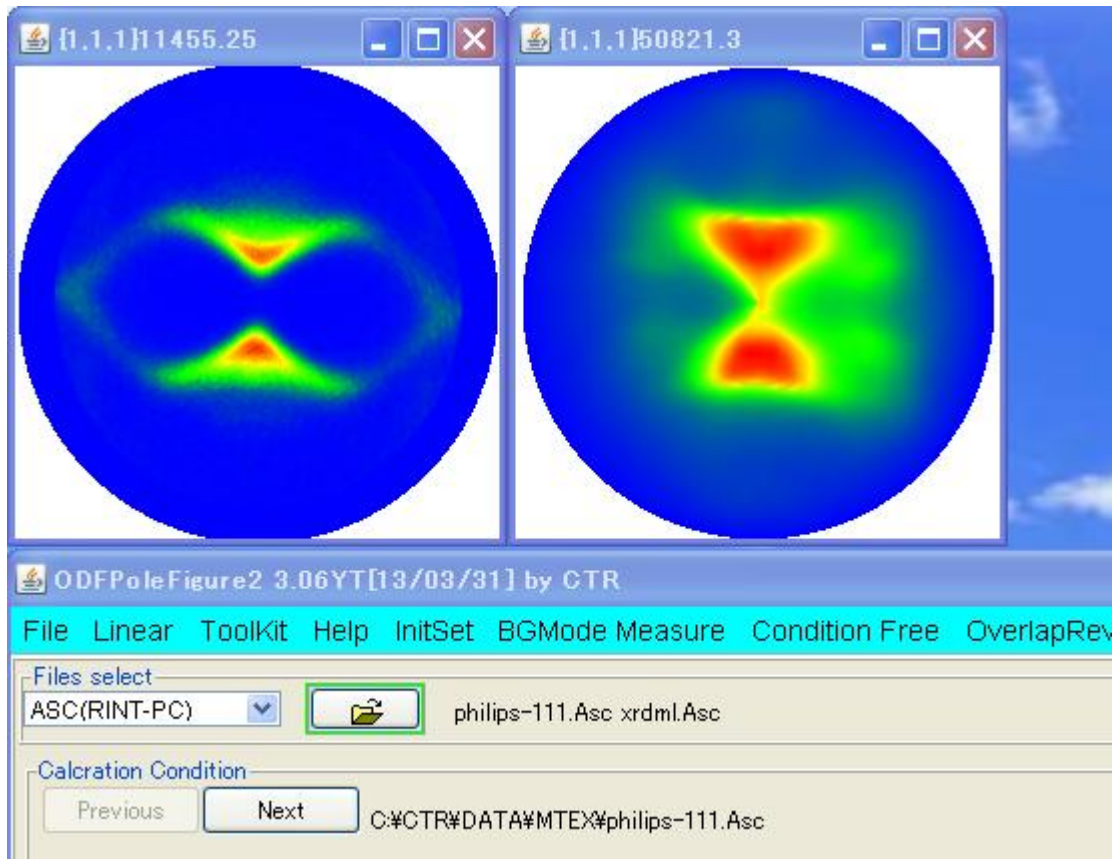


複数のTXT, xrxmlファイルを選択し、

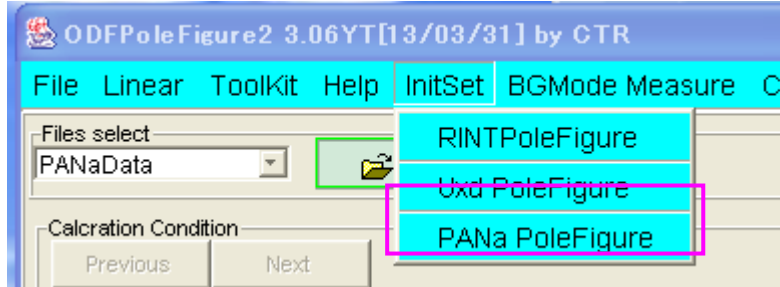


StartでAscファイルを作成

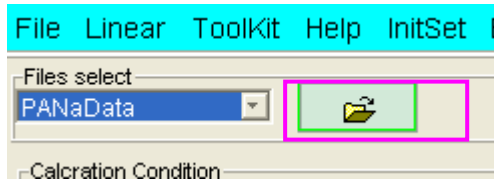
ODFPoleFigure2 ソフトウェアでA S Cとして読み込む



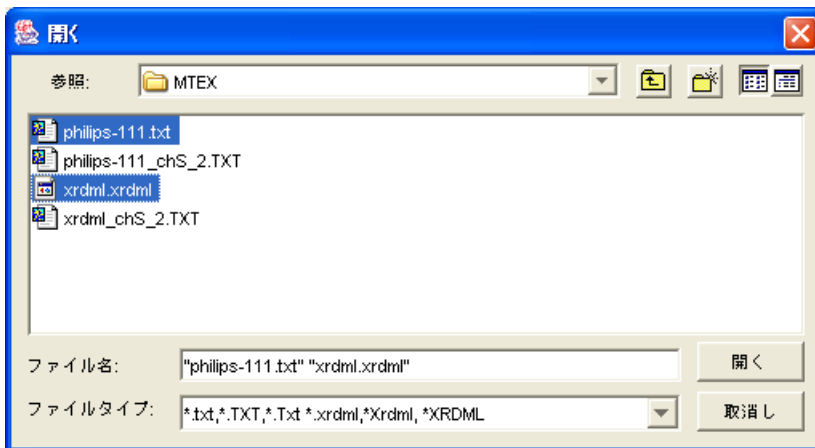
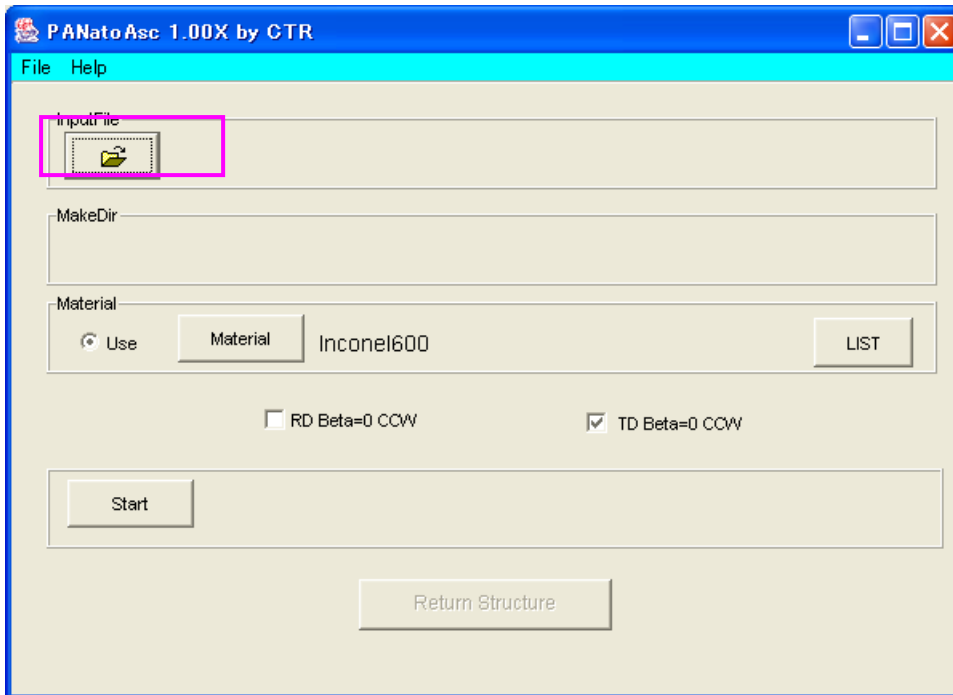
9. 1 直接読み込む



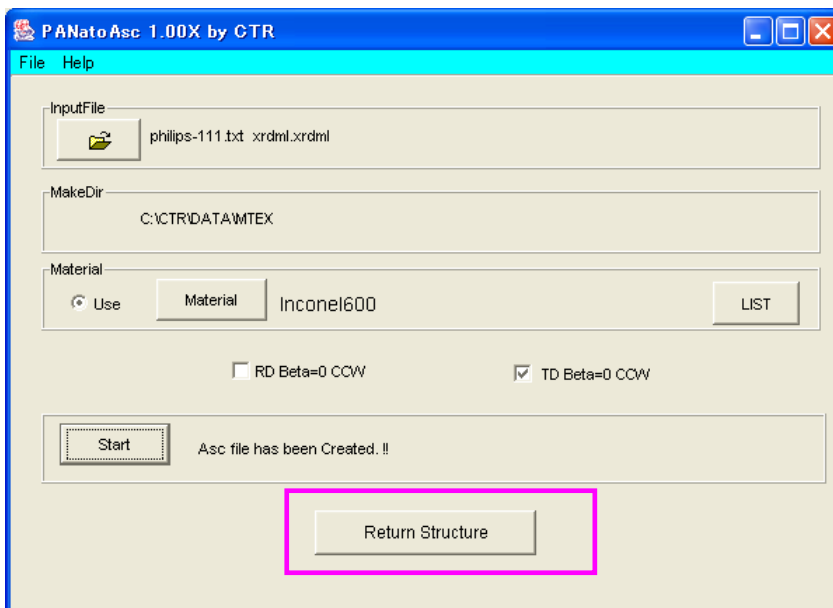
InitSet で PANaalytical を選択



ファイルを選択 (PANatoAsc が立ち上がる)



T X T と xrdml ファイルを選択



Start で Asc ファイルに変換、Return Structure

ASCファイルがloadされる。

