

## 配向評価総合パッケージCTRソフトウェア

XRDによる結晶方位解析は、正確な測定、正確な補正が重要です。

この目的を目指して日々進化しているODFPoleFigure2ソフトウェアを中心に  
各種有益なソフトウェア群をサポートしています。

更に測定解析システムに基準レベルの考えを取り入れた評価が行えるソフトウェアの提供を行います。

2019年02月25日



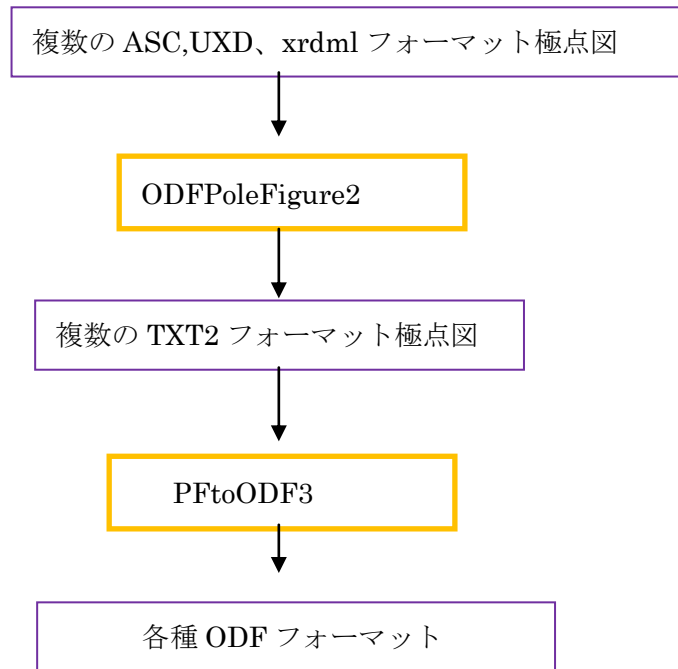
*HelperTex Office*

[odftex@ybb.ne.jp](mailto:odftex@ybb.ne.jp)

担当 山田

## 概要

CTRソフトウェアは、材料の配向評価が行える各種ソフトウェアの集合体で、過去各種材料評価を行う上で必要と考えられる技術が蓄積しています。



中心となるソフトウェアは、正極点処理を行う ODFPoleFigure2 で入力データ (ASC) から処理結果 (TXT2) を作成、TXT2 から PFtoODF3 により ODF 向けデータを作成します。

主な周辺技術としては、

複数の材料の配向状態をプロファイルのまま比較する **Cluster**

試料 ND 方向に分布する、結晶方位の分布を評価する **ProfiletoDivisionProfile**, **InverseAll**

ODF 解析後の逆極点図や、試料 ND 方向の分布を 2D,3D 逆極点図表示 **InverseDisplay**

六方晶の ODF 解析後の逆極点ファイルから逆極点図を表示する **InverseDisplayHexa**

Random 試料の極点測定データから defocus 曲線を作成する **DefocusMakeTABLE**

defocus 曲線と Schulz 法の反射極点理論値の整合性チェックする **TenckhoffCalc**

格子定数や指数を TABLE 化し、波長別の  $2\theta$  計算や、複合材のプロファイルの重なり具合をチェックする。TABLE 化は **MakeMyICDD**, 波長別  $2\theta$  計算は **MaterialData**、重なり具合は **CreateProfile**

各種 (StandardODF, TexTools, LaboTex, popLA, Bunge) で解析した結晶方位図 (ODF) の Exportdata から最大 40 レベルの等高線を表示する **ODFDisplay**、BCC, FCC のファイバー表示、結晶方位計算

各種ODF解析結果から、 $\{hkl\}\langle uvw \rangle$ を決定する汎用ODF表示ソフトウェア **GPODFDisplay**  
結晶方位密度分布計算

材料別のファバー曲線を最大6ファイル多重記録する **FiberMultiDisplay**

各種補正を行った極点図の平均化を行う **AddingPole**

各種 (StandardODF, TexTools, LaboTex, popLA, Bunge) で解析した結晶方位図 (ODF) や random データから、 $\beta$ 方向の平均値を $\alpha$ 方向にプロットし、多項式近似を行い、極点図ASCファイルを作成する、**PoleFigureAsctoSMAAsc(2013/06/11 追加)**

透過、反射極点図が1ファイルに含まれる極点図データから透過極点図と反射極点図に分離したファイルを作成する、**PFTRSEparate(2013/05/29 追加)**

複数の極点図を使って、極点図のピーク位置を計算し、ピーク位置から結晶方位 $\{hkl\}\langle uvw \rangle$ を計算する **PoleHKLUVWSearch(2013/07/18 追加)**

ODF, TexTools と LaboTex では再計算逆極点図が異なるケースがある。この問題を探求するための Tool として作成した **ODFInverseChecker(2013/06/18 追加)**

MaterialData などでは使っている内部データベースでは、データベースフォーマットが間違っているデータが登録されると、全てのデータベースの機能に障害が発生する。この障害を解消する為の Tool として、**DataBaseGurad(2013/06/22 追加)**

ODF解析再計算極点図のExportから、ODF入力極点図と再計算極点図を比較しODF解析の妥当性を評価(Rp%)する **ValueODF**

ODF解析再計算極点図のExportから、ODF入力極点図と再計算極点図を比較しODF解析の妥当性を評価する ValueODF の改良版で、LaboTex の VolumeFraction 結果の Error 評価 **ValueODFVF**

LaboTex は VolumeFraction (体積分率) を計算し表示、ファイル化が出来ますが印刷は出来ません。この VolumeFraction を円グラフに表示する **ODFVFGraph**、又、複数の材料の VolumeFraction を比較する **CompareVolumeFraction**

各種 (StandardODF, TexTools, LaboTex, popLA, Bunge, MulTex) で計算した再計算極点図を Export した各種フォーマットをTXT2, 或いはASCフォーマットに変換する **MakePoleFile**

完全極点図のTXT2データをRD, TD, ND軸に対し回転を行う **PFRotation(2014/11/09 追加)**

完全極点図から配向度関数を計算する **Orientation**

Nd-Fe-Bの磁性特性評価の応用できる反射極点図から配向度を計算する **NDOrientation**

不完全極点図から極点図を外挿する [CreateExpPoleFigure](#)

高分子の配向評価の為にビームストップの影がある Image データから影のない  $\beta$ -I プロファイルを得る [ZigzagFiber](#)

高分子材料の  $\beta$ -I プロファイルに隣の反射が重なっているデータのピーク分離を行う [FiberPeakSeparate](#)

Z 軸に対する高分子結晶軸の平行、垂直度合いを評価する [FiberSimpleOrientation](#)

StandardODF は c:YODF がワークディレクトリで解析結果の全てが展開されていて、次の解析は上書きしてしまう。解析結果の Export-Import を行う [StandardODFExportImport](#)

popLA は DOS 画面で操作するプログラムで Windows では解析結果の描画が難しい。  
popLA の Harmonic、WIMV 双方の ODF 図の表示 [ODFDisplay](#)、極点図の表示 [popLADatatoTXT2](#)

六方晶 3 指数  $\langle - \rangle$  4 指数変換、X 軸  $\langle 10-10 \rangle$  或いは  $\langle 210 \rangle$  と  $\langle 2-1-10 \rangle$  或いは  $\langle 100 \rangle$  の切り替えを行い、結晶方位図を表示する [HexaConvert](#)

体心正方晶から面心正方晶への変換ツール [TetragonalBtoF\(2013/10/04 追加\)](#)

Cubic の結晶方位(hkl)[uvw] $\leftrightarrow$ Euler 角度変換と結晶方位図を表示する [NewCubicCODisp](#)

全結晶系の結晶方位(hkl)[uvw]入力から結晶方位図を表示する [OrientationDisplay](#)

EBSD 測定データを LaboTex の入力データに変換する [EBSDtoLaboTex](#)

Lotgering 手法を実現する [Lotgering](#)

繊維配向評価を行う [PreferredOrientation\(2015/01/15 追加\)](#)

立方晶の ODF 解析を行う [CTRODF \(2015/09/25 追加\)](#)

極点図の等高線描画を行う [PoleContourDisplay\(2016/02/01 追加\)](#)

逆極点図の等高線描画を行う [InverseCubicContourDisplay\(2016/03/25 追加\)](#)

Cubic 以外の逆極点図等高線描画を行う [InverseContourDisplay\(2016/03/25 追加\)](#)

手入力 Material データベースを作成する [MaterialDataManual\(2016/03/29 追加\)](#)

極点図の非対称性評価を行う [PoleAsymmetryValue\(2016/06/06 追加\)](#)

PP の配向性評価を行う [PPOrientation\(2016/06/09 追加\)](#)

極点図データを Windows 形式から [PCAsctoUNIXAsc\(2016/06/15 追加\)](#)

StandardODF の解析結果を描画する [StandardODFDisplay\(2017/03/21 追加\)](#)

LaboTex の解析結果を描画する [LaboTexDisplay\(2017/03/24 追加\)](#)

2つの極点図を比較する [PoleFigureDifference\(2017/07/11 追加\)](#)

Random 試料の管理を行う [PoleNormalizer\(2017/11/18 追加\)](#)

結晶方位密度のグラフ化を行う [hkluvwlistDisplay\(2018/06/13\)](#)

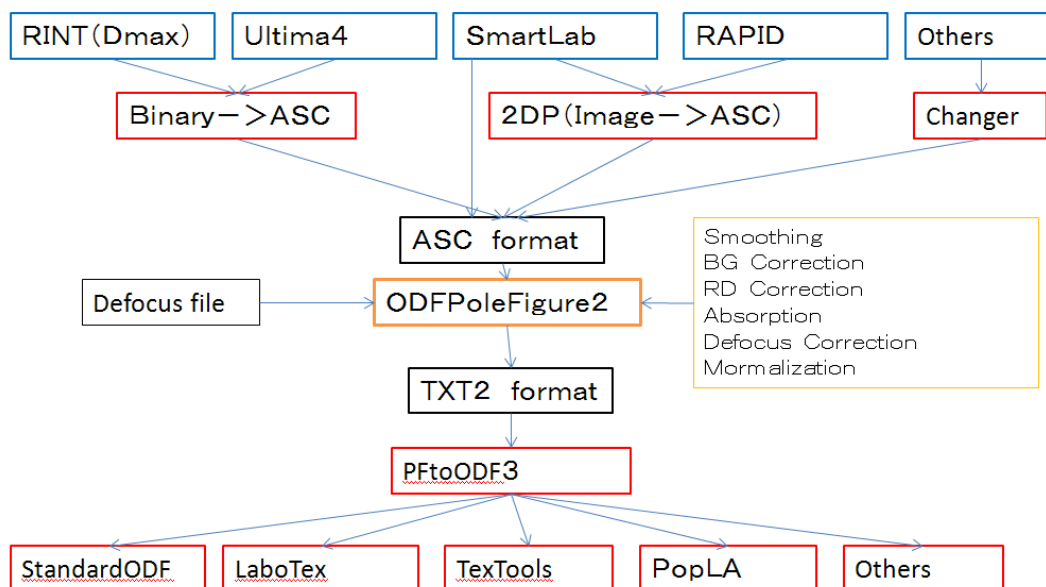
TexTools の解析結果の描画を行う [TexToolsDisplay\(2018/07/24 追加\)](#)

MTEX の解析結果描画を行う [MTEXDisplay\(2018/07/28 追加\)](#)

結晶方位の軸回転を行う [CrystalRotation\(2018/08/27 追加\)](#)

軸配向極点図の平滑化を行う [SMAxisOrientation\(2018/09/17 追加\)](#)

## ODF 関係



各種測定データを ASC フォーマットに変換し、ODFPoleFigure2 ソフトウェアでデータ処理を行い、TXT2 フォーマットを出力、`rigaku`、`Brucker`、`PANalytical` 社テキストデータに対応  
TXT2 フォーマットデータは、`PFGtoODF3` ソフトウェアにて各種 ODF で読み込める特有データに変換

## ODFPoleFigure2 の特徴

複数の極点図を同時読み込み、同時データ処理を行い、PFtoODF3 に処理結果を渡す。  
個々の極点図の測定強度とバックグラウンド強度の関係を  $\alpha$ -I プロファイルで確認出来る。  
平滑化前と平滑化後の比較が出来る。

RD 補正の処理前、処理後が多重書きで比較出来る。

吸収補正曲線の確認、defocus 補正量の確認が出来る。

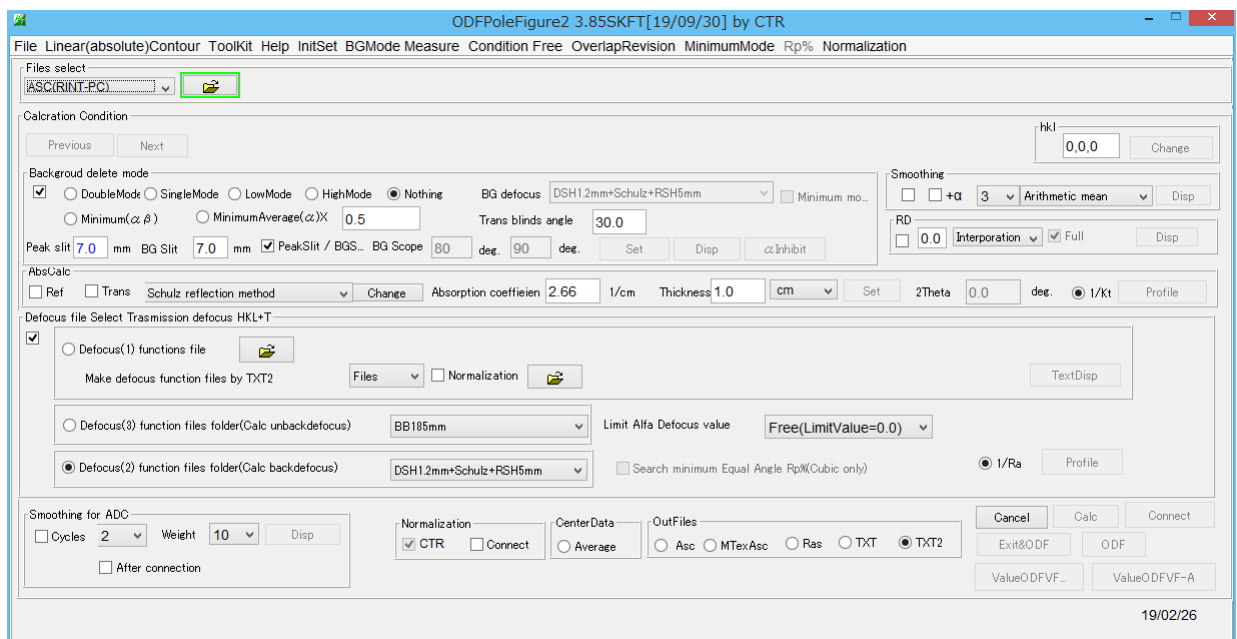
極点図の測定方法、指数変更が出来る。

Defocus 補正量を自動計算 (Schulz の反射法 185mm、285mm、300mm)

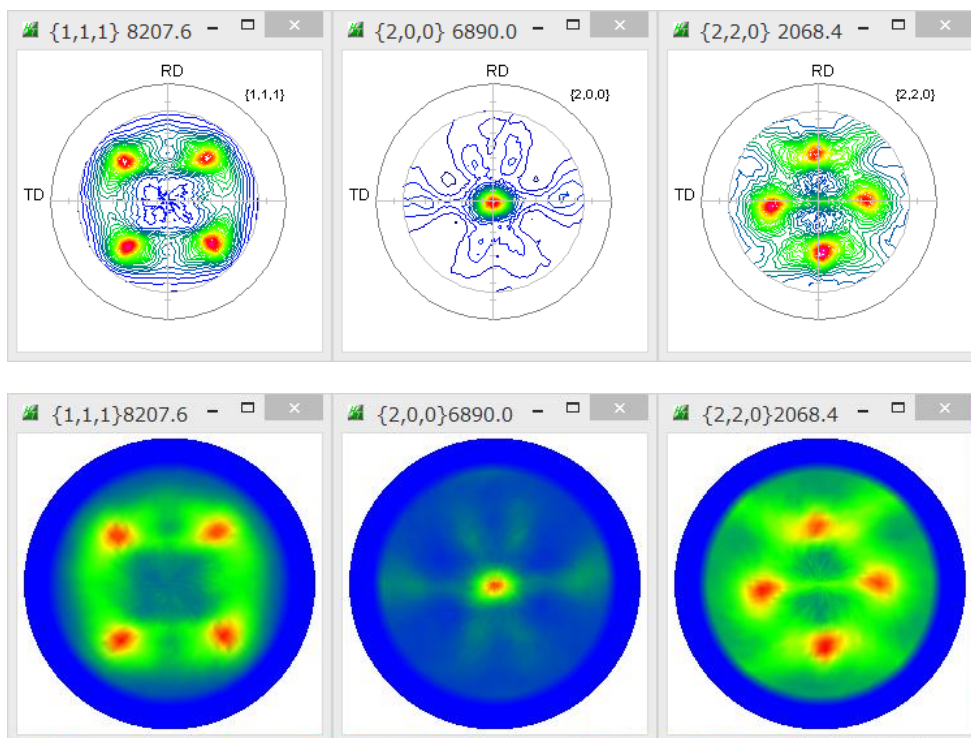
バックグラウンドデータベースによる測定バックグラウンドの修正

最小化 Rp% 計算

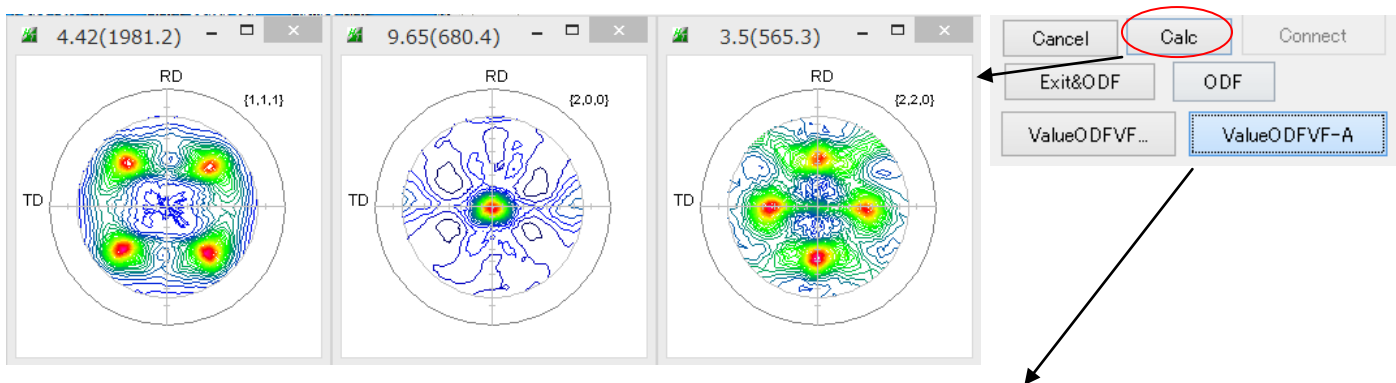
Random 試料がない場合でも、計算  $d e f o c u s$  補正をサポートし、Rp%Error 計算を行う。



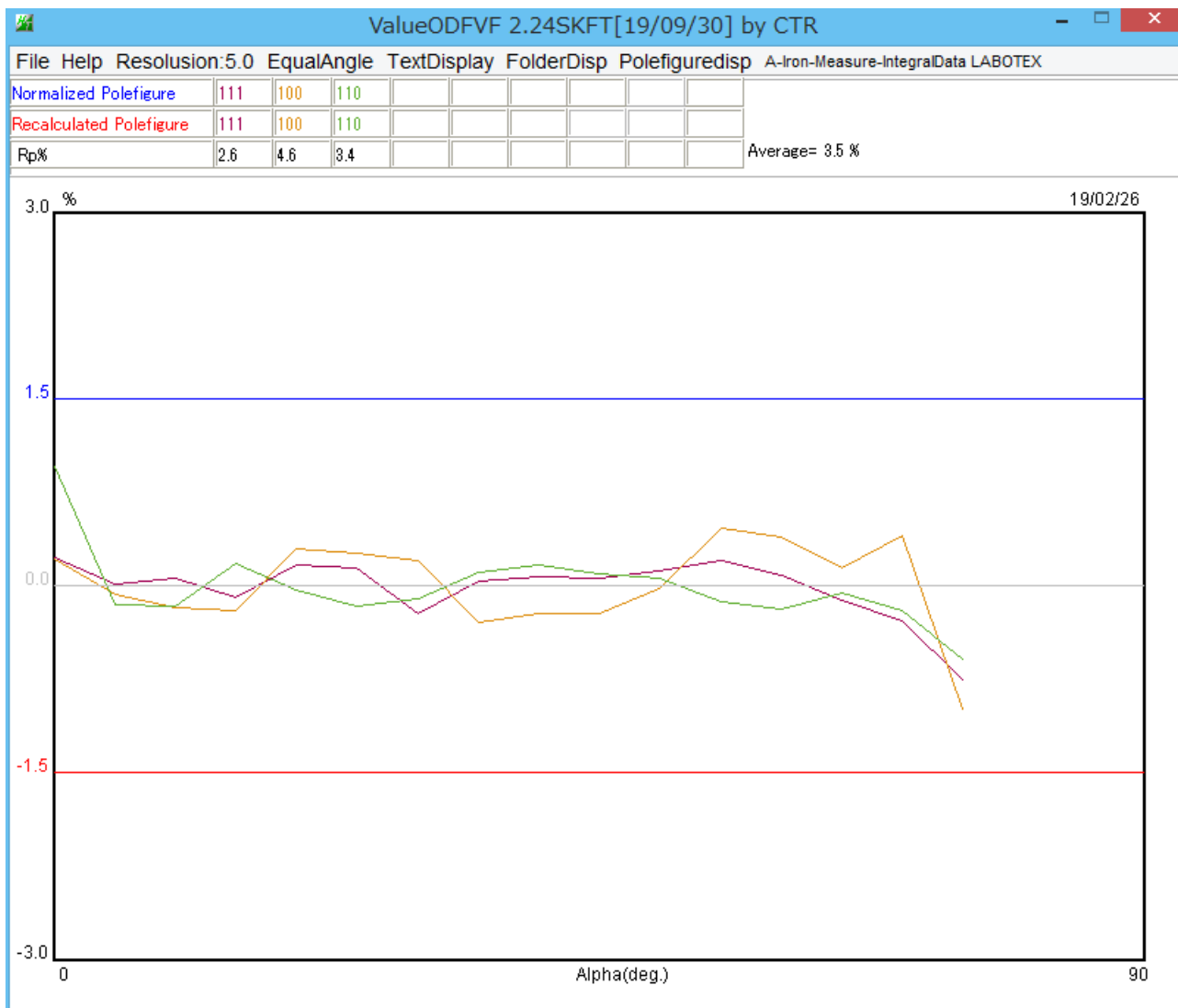
読み込んだ極点図は 3D 表示



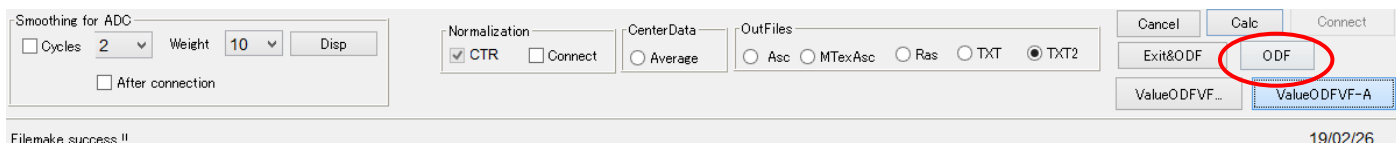
RD 補正(-5deg)+計算 defocus 補正+規格化

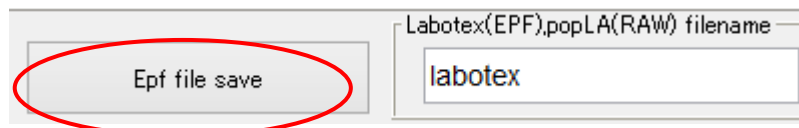
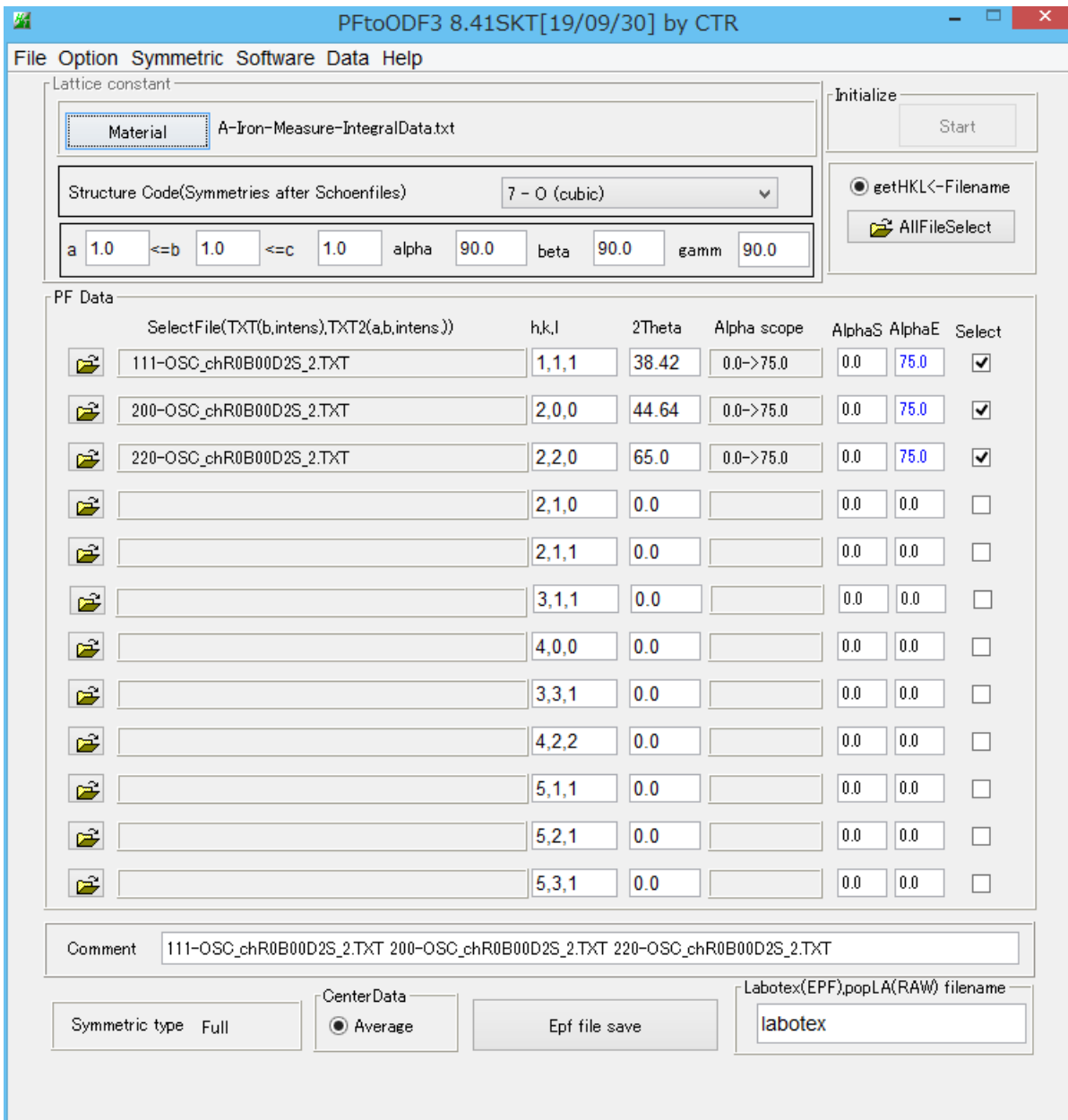


Rp%Error 評価



PFtoODF3 を起動

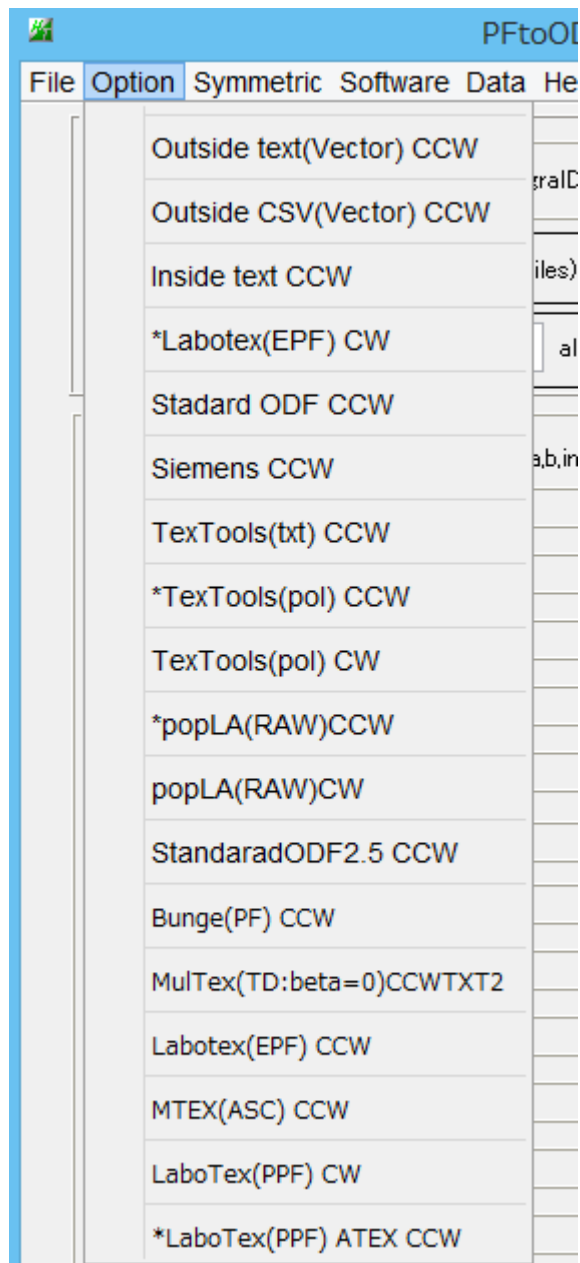




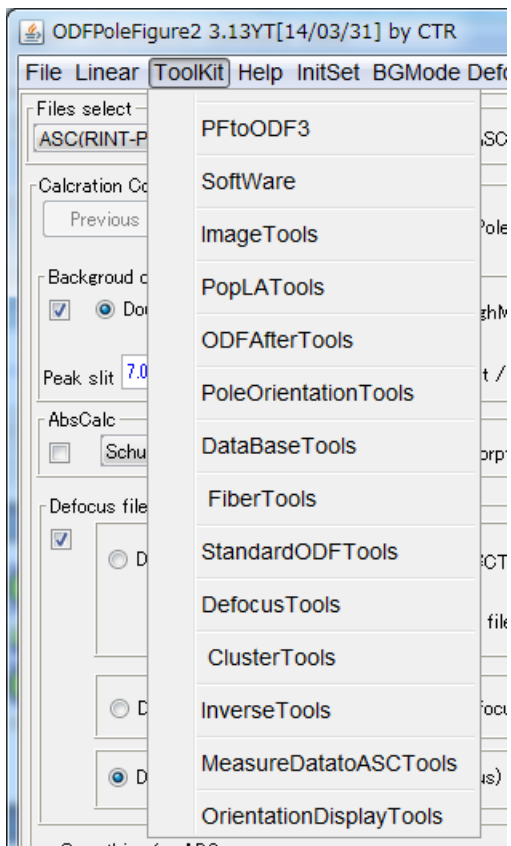
LaboTex 向けデータなら、  
他の ODF なら、

で

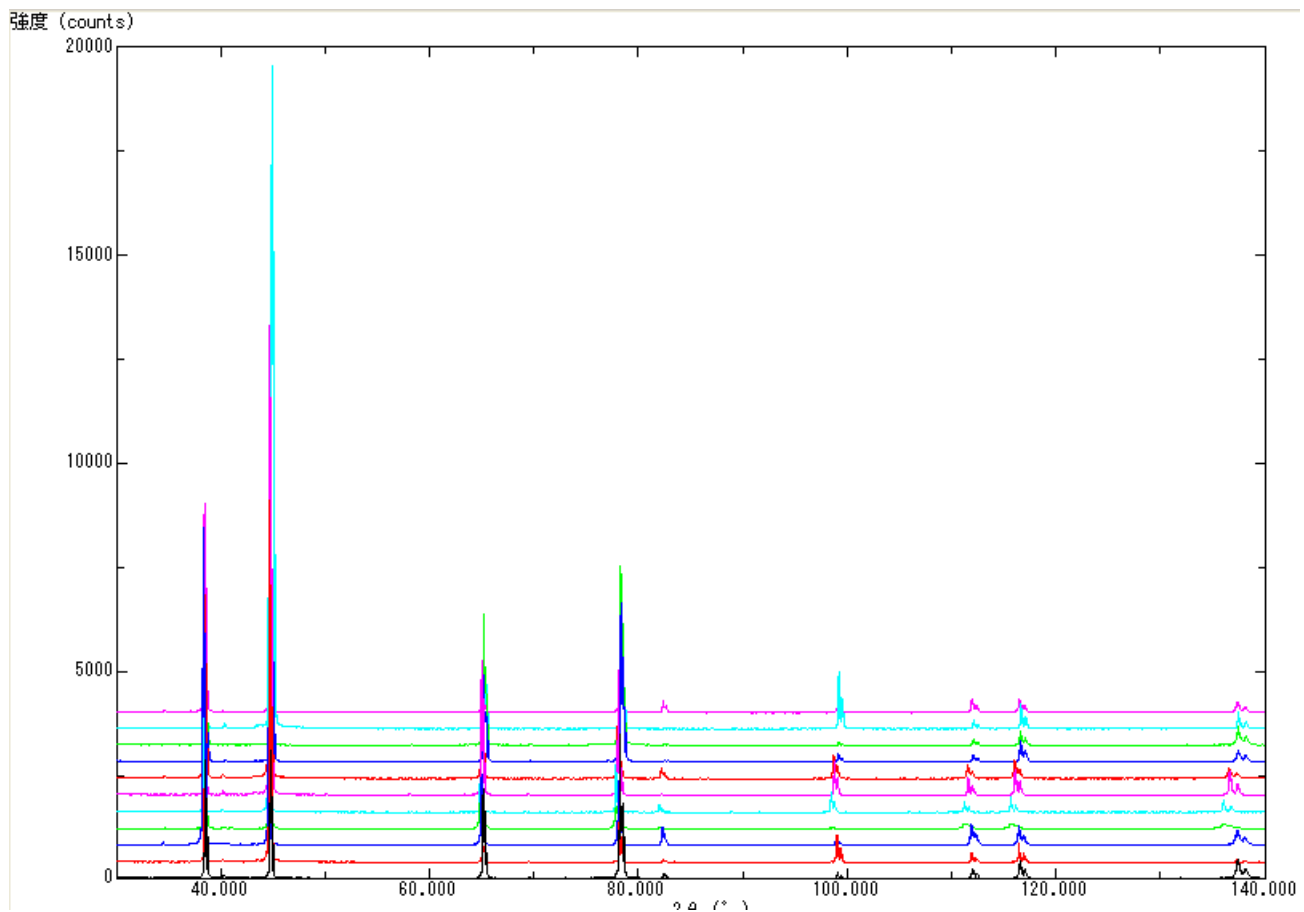




周辺ソフトウェアは、ODF Pole Figure 2 から起動できます。



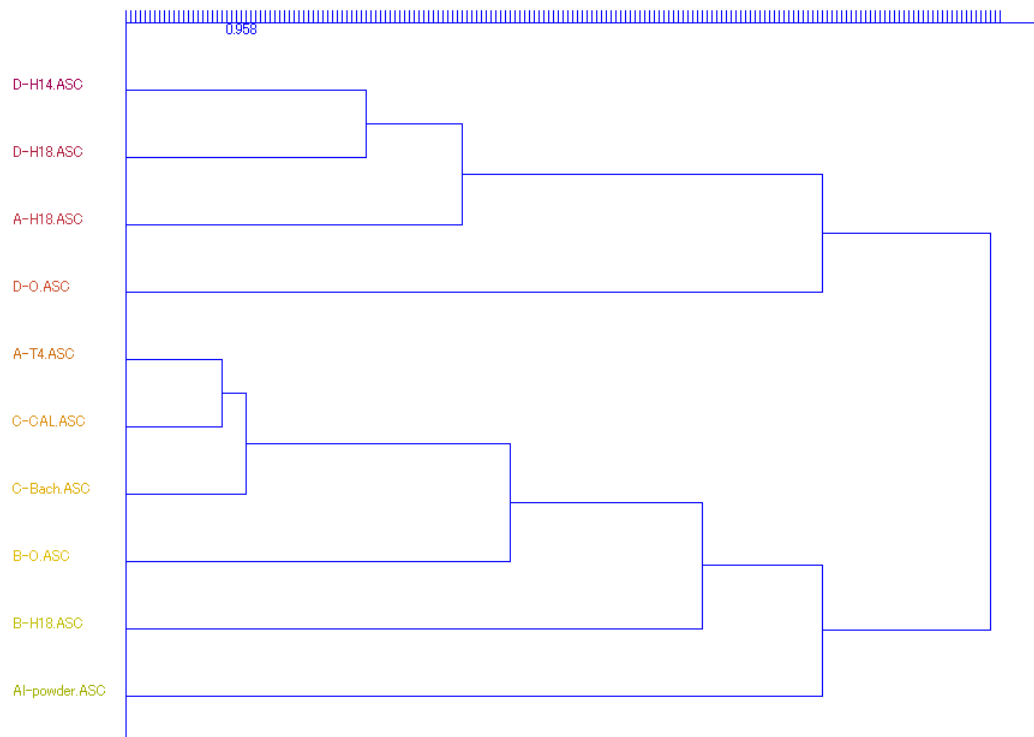
## 複数の合金状態、圧延状態の異なるプロファイルの多重記録



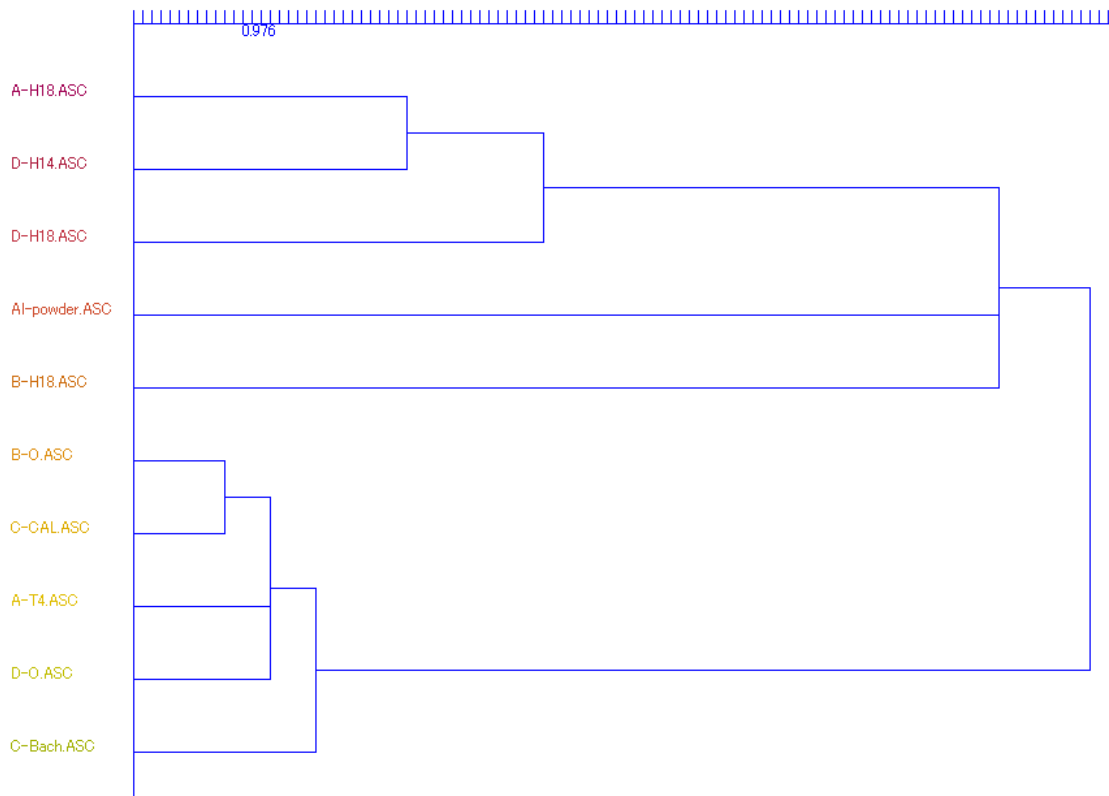
アルミニウム合金材料の多重記録、添加金属や割合によって、ピークシフト、あるいは圧延方法の違いによりピーク強度の比率が異なる。

## 複数の材料の配向状態をプロファイルのまま比較する Cluster

各プロファイル間の相関係数を計算することで、各アルミ材のプロファイルの一致度で並び替え



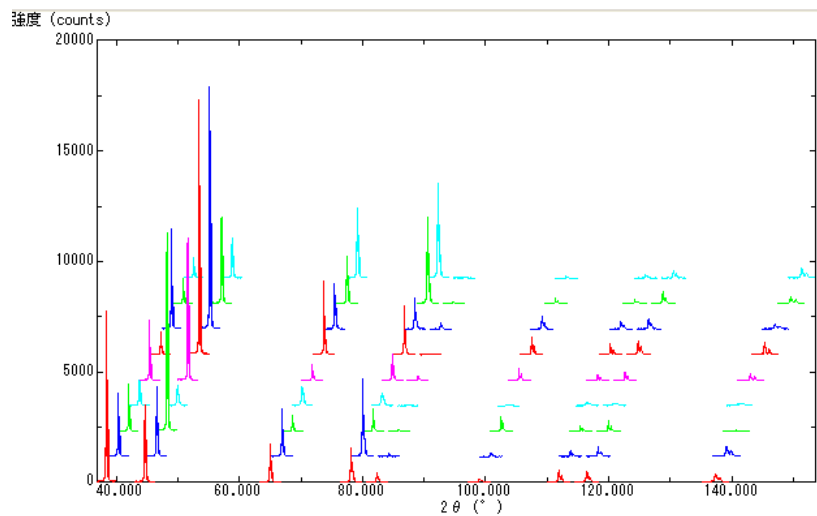
ピークシフトを考慮して並び変え（プロファイルの類似性で並び変え）



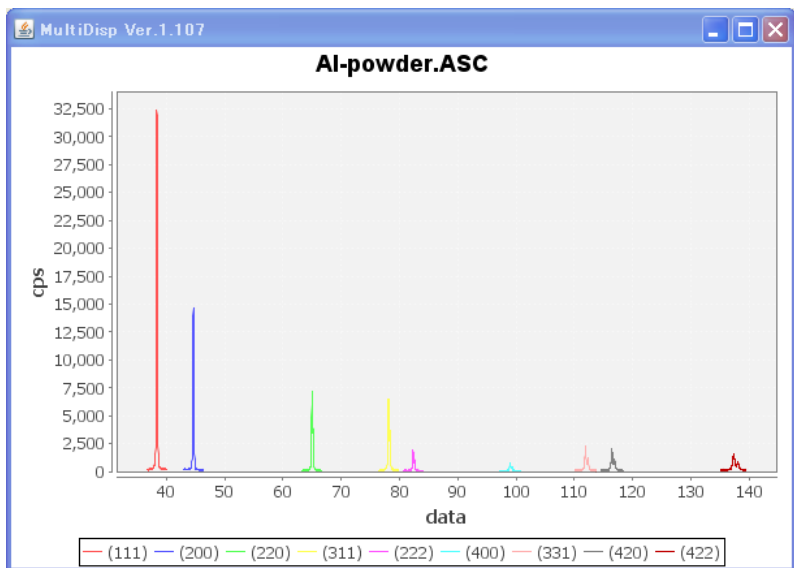
H材とその他で分類される。

# 試料 ND 方向に分布する、結晶方位の分布を評価する

## Profile to Division Profile で上記プロファイルの自動指数付き分割データ化



**InverseAll** により、random データに対する強度比のリスト化を行う。(Excel で扱える)  
 Random プロファイルの指数付き分割データ



リスト化データを表示

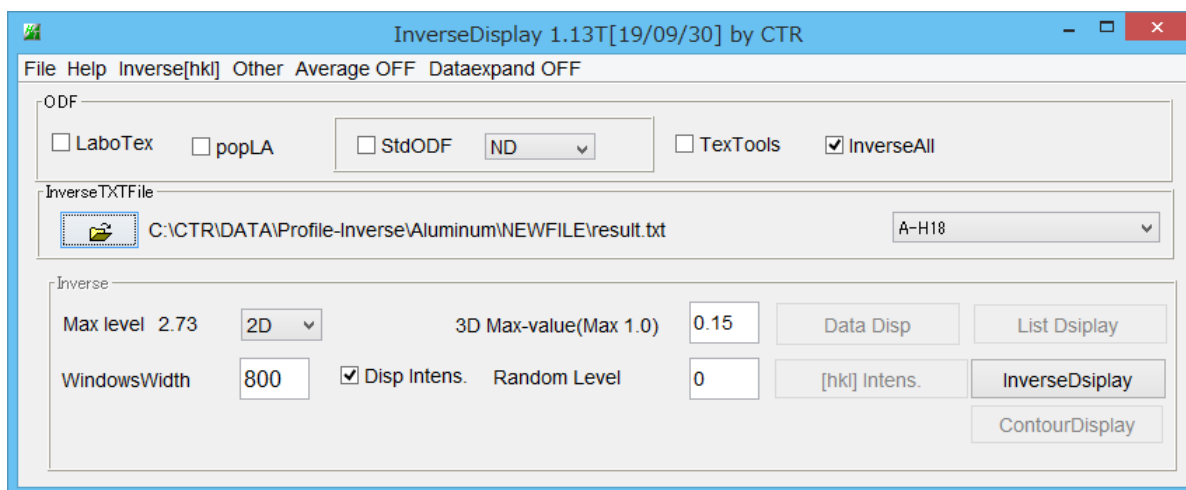
	[111]	[200]	[220]	[311]	[222]	[400]	[331]	[420]	[422]
A-H18	0.435	1.053	1.446	2.532	0.234	0.811	0.519	0.965	1.65
A-T4	0.356	3.261	0.468	0.643	0.188	4.457	0.48	0.836	0.162
B-H18	0.52	0.968	1.942	1.545	0.572	0.781	1.289	1.1	1.321
B-O	0.5	2.535	0.589	0.879	0.512	3.445	0.592	0.768	0.811
C-Bach	0.111	2.835	1.427	0.953	0.0070	3.455	0.562	0.891	0.9
C-CAL	0.458	2.648	0.962	0.695	0.456	2.987	0.568	0.832	0.491
D-H14	0.184	1.438	1.489	2.911	0.014	1.428	0.43	1.303	0.99
D-H18	0.173	0.715	2.325	3.48	0.068	0.32	0.258	0.791	1.456
D-O	0.0040	3.922	0.594	0.752	-0.0090	4.753	0.23	0.587	0.485

Excel で表示

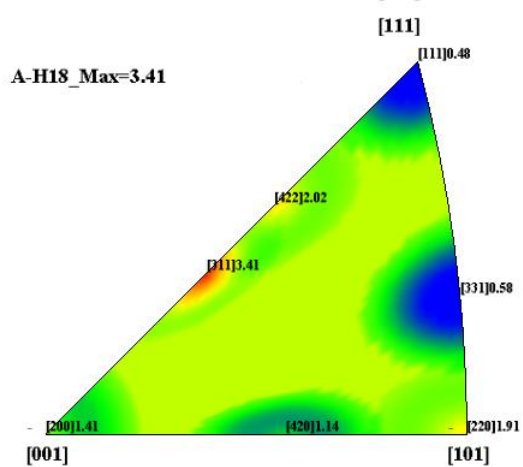
	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J
1	Randommode Standardization Integration									
2		[111]	[200]	[220]	[311]	[222]	[400]	[331]	[420]	[422]
3	A-H18	0.435	1.053	1.446	2.532	0.234	0.811	0.519	0.965	1.65
4	A-T4	0.356	3.261	0.468	0.643	0.188	4.457	0.48	0.836	0.162
5	B-H18	0.52	0.968	1.942	1.545	0.572	0.781	1.289	1.1	1.321
6	B-O	0.5	2.535	0.589	0.879	0.512	3.445	0.592	0.768	0.811
7	C-Bach	0.111	2.835	1.427	0.953	0.007	3.455	0.562	0.891	0.9
8	C-CAL	0.458	2.648	0.962	0.695	0.456	2.987	0.568	0.832	0.491
9	D-H14	0.184	1.438	1.489	2.911	0.014	1.428	0.43	1.303	0.99
10	D-H18	0.173	0.715	2.325	3.48	0.068	0.32	0.258	0.791	1.456
11	D-O	0.004	3.922	0.594	0.752	-0.009	4.753	0.23	0.587	0.485



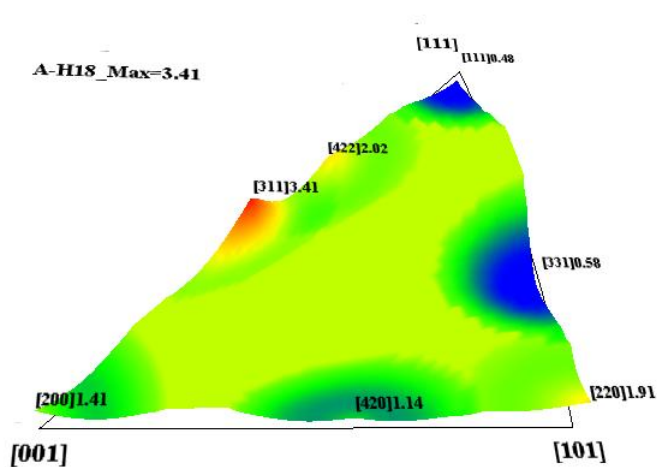
ODF 解析後の逆極点図や、試料ND方向の分布を 2D,3D 逆極点図表示 **InverseDisplay**



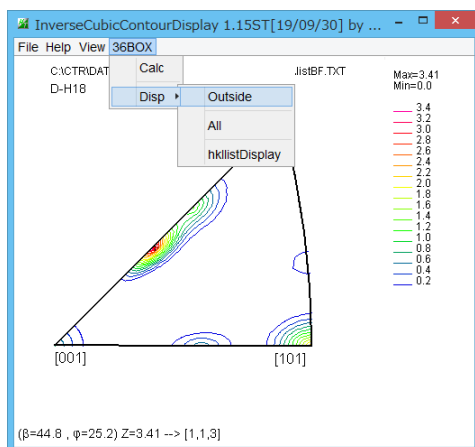
2D 表示



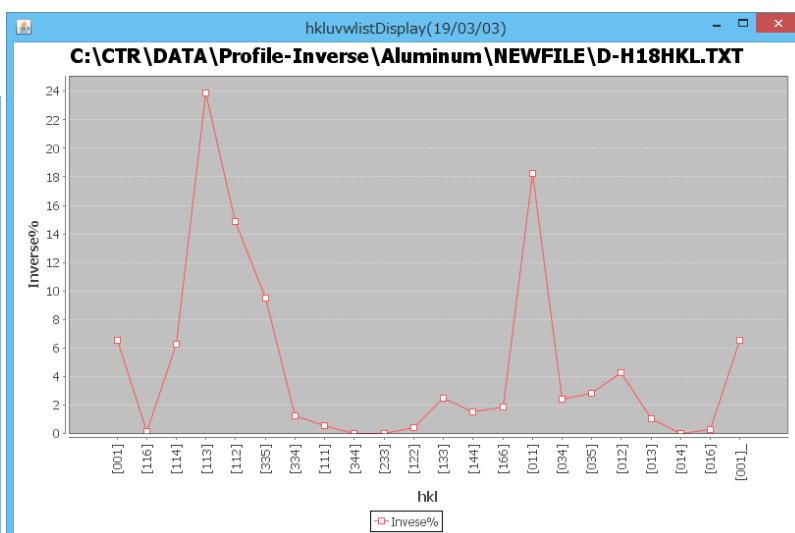
3D 表示



等高線表示

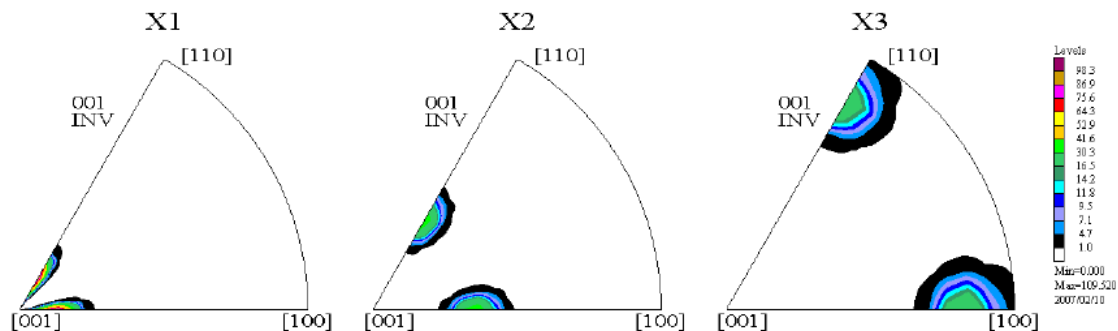


逆極点図 OutsidelistDisplay

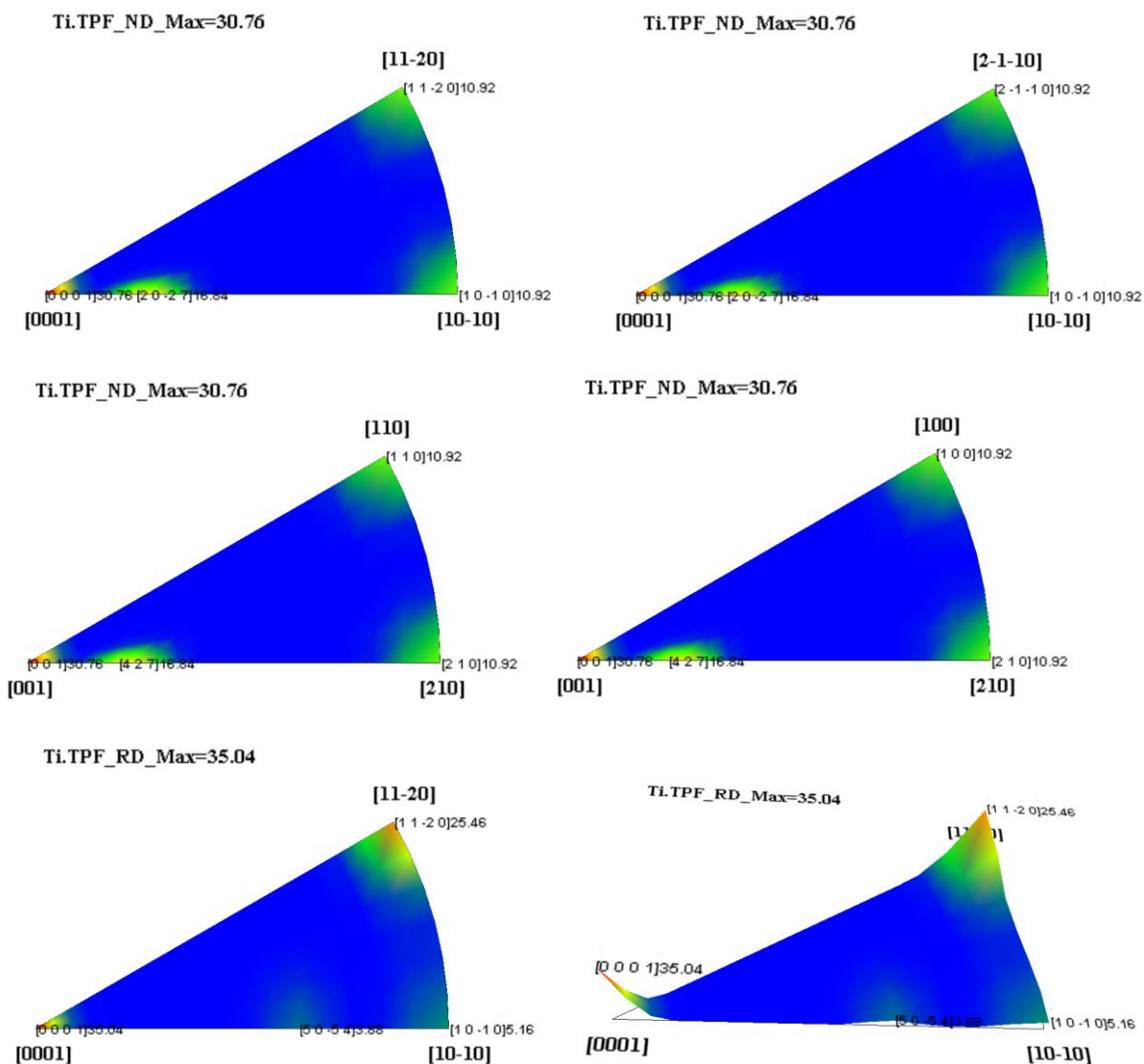


# 六方晶 ODF 解析後の逆極点ファイルから逆極点図を表示する InverseDisplayHexa

LaTeXの逆極点図は、 $\beta$ が $0 \rightarrow 60$ 度の表示であり、一般的ではない。



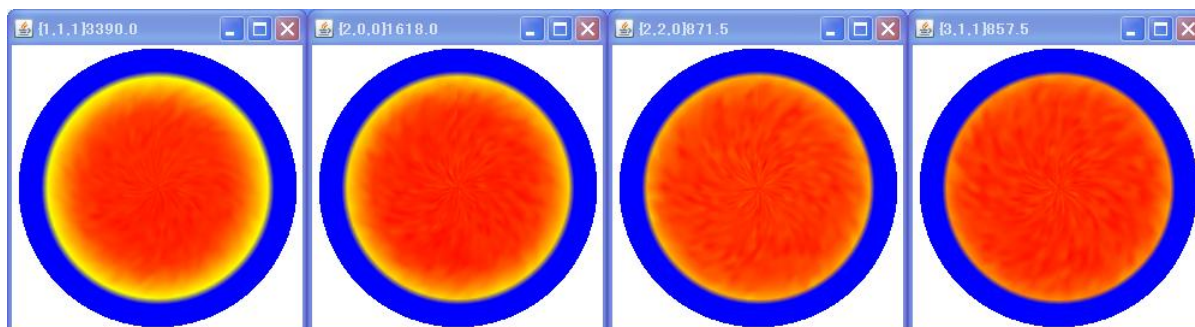
この逆極点データを  $\beta 0 \rightarrow 30$  度で表示する。



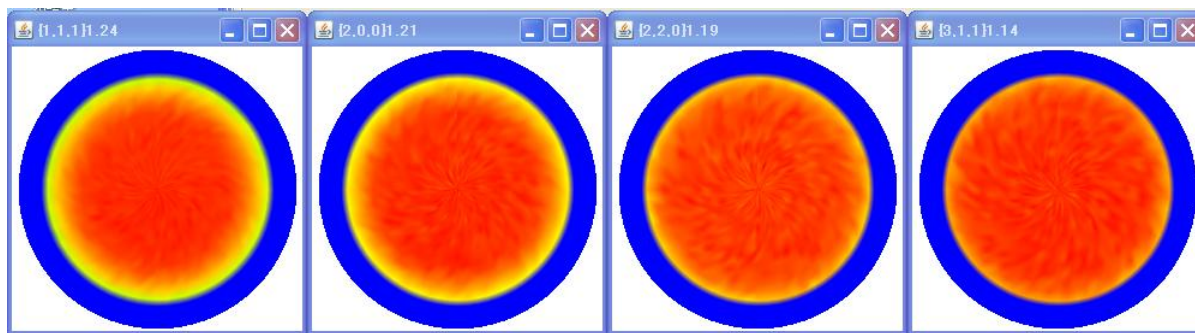
多彩な表現方法をサポートします。

# Random 試料の極点測定データから defocus 曲線を作成する DefocusMakeTABLE

アルミニウム材の無配向試料を測定



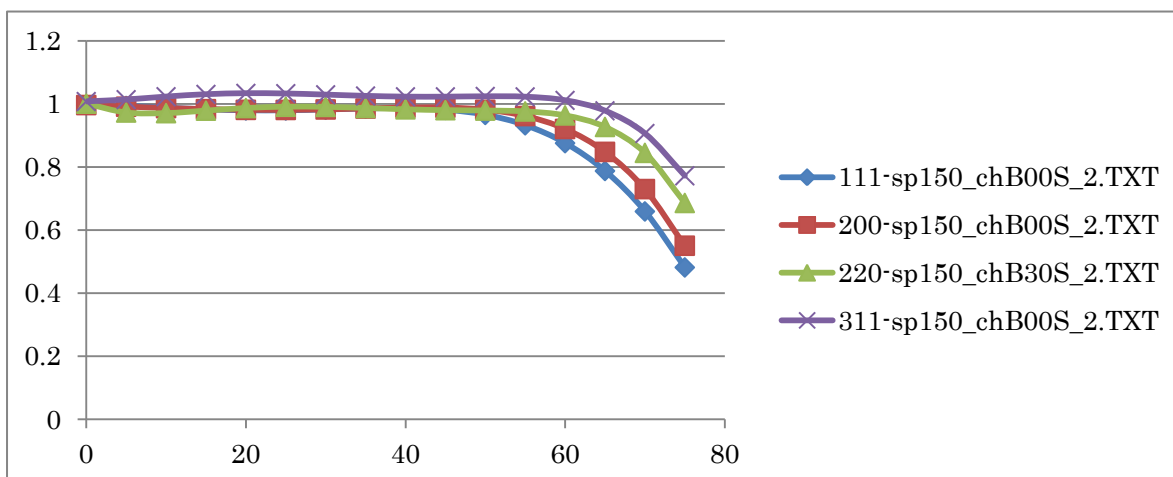
ODFPoleFigure2 ソフトウェアでバックグラウンドを除去し TXT2 ファイルを作成



TXT2 から DefocusMakeTABLE ソフトウェアで多項式近似ファイルを作成

```
Filename-4F - ワードパッド
ファイル(F) 編集(E) 表示(V) 挿入(I) 書式(O) ヘルプ(H)
[Icons]
filename,alfanumber,alfastartangle,alfastep,function-n,mm, 12/06/26 DefocusmakeTABLE 3.21X by CTR user HelperTex CTR for DefocusCalc,
220-sp150_chB00S_2.TXT,16,0.0,5.0,5.1.0,1.0026999895898205,-0.01520550225174112,0.0015180485404508327,-5.895104240719329E-5,9.6822815
111-sp150_chB00D3S_2.TXT,16,0.0,5.0,5.2.0,0.998474434124382,-0.0018060994277417897,1.212347203702795E-4,-5.83487077278693E-6,1.500010
200-sp150_chB00D3S_2.TXT,16,0.0,5.0,5.3.0,0.9984390865533681,-0.002978909301400402,2.89685536154695E-4,-1.3589148555000515E-5,2.82388
311-sp150_chB00D3S_2.TXT,16,0.0,5.0,5.4.0,1.0094494031377552,-0.001216357824651881,4.476933749762321E-4,-2.3988588134277192E-5,4.5922
```

Excel で描画

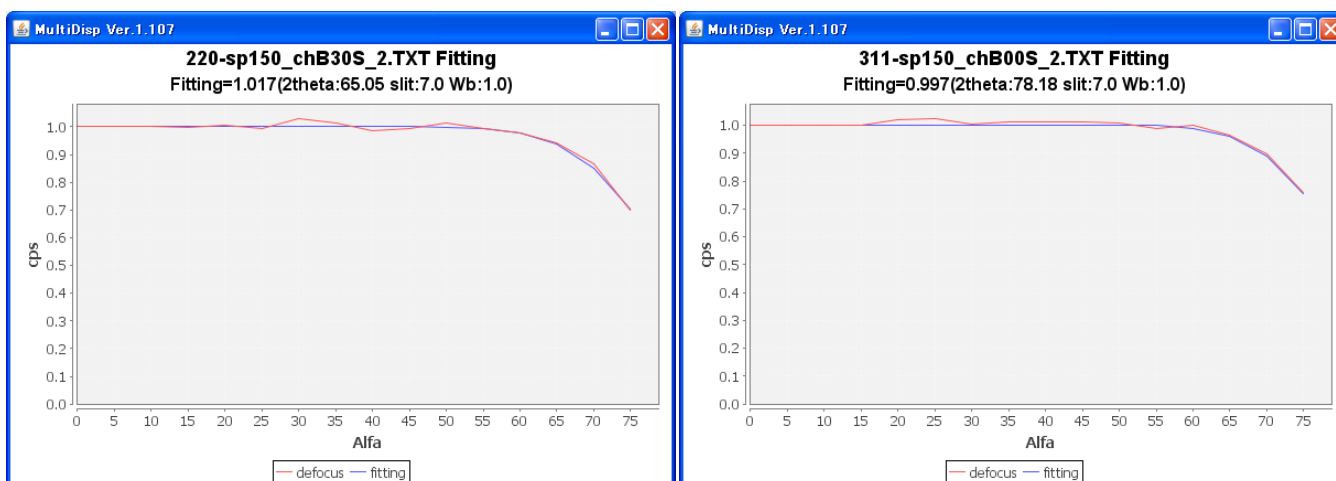
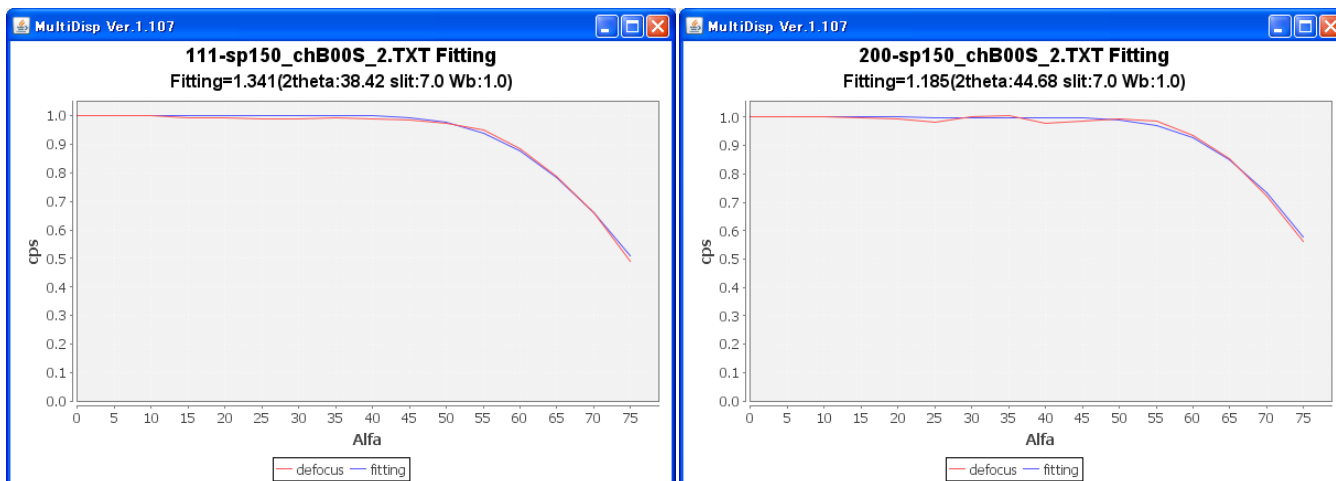


この多項式近似ファイルを ODFPoleFigure2 ソフトウェアの defocus ファイルとして指定しておけばアルミニウム材の defocus 補正が自動的に行える。

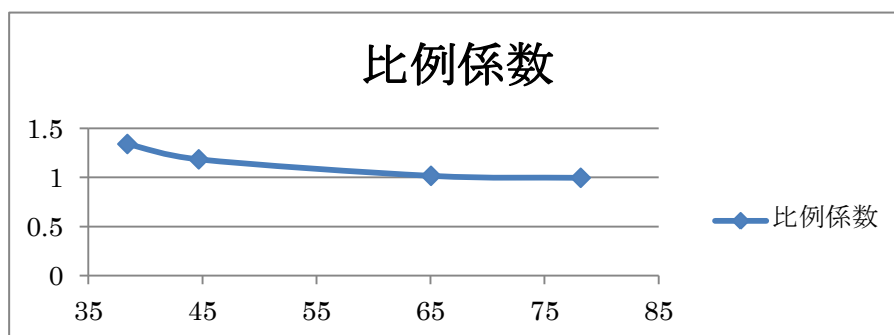


## defocus 曲線と Schulz 法の反射極点理論値の整合性チェックする TenckhoffCalc

Schulz の反射法による defocus 曲線には理論式があって、測定する  $2\theta$  角度と受光スリット幅で決定出来る。この理論式と如何に一致しているかで random 試料の評価、あるいは光学系の評価が行える。上記 random 試料測定の評価を行い、ほぼ一致している事が確認出来ます。



$2\theta$ 角度	比例係数
38.42	1.341
44.68	1.185
65.05	1.017
78.18	0.997



本来比例係数は一定であるが、Schulz スリットの配置と形状により  $2\theta$  角度を変えた時、一定であるべき、X線照射方向に対する試料位置の高さ方向の幅が減少するため、変化する。

格子定数や指数を TABLE 化し、波長別の 2θ 計算や、複合材のプロファイルの重なり具合をチェックする。TABLE 化は **MakeMyICDD**, 波長別 2θ 計算は

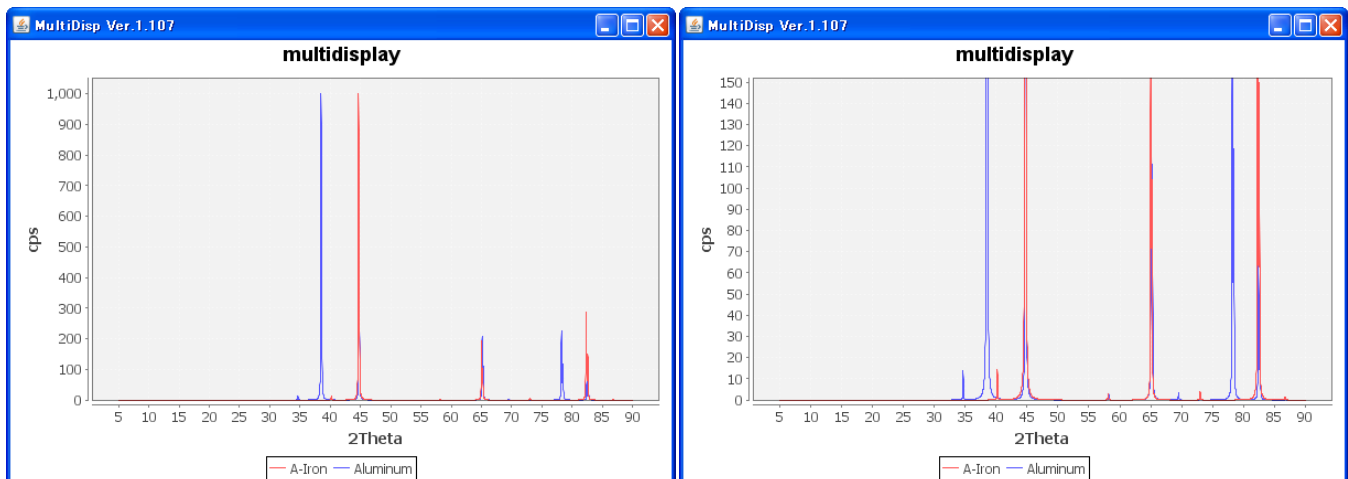
### MaterialData、重なり具合は CreateProfile

**MakeMyICDD** ソフトウェアは、ICDD から CTR ソフトウェアのデータベースに変換します。

**MaterialData** は登録されているデータの確認、たとえば、α-Fe とアルミニウムデータを比較すると

AluminumDISP				A-IronDISP					
Cubic				Cubic					
4.0494	(1.0)			2.8664	(1.0)				
4.0494	(1.0)			2.8664	(1.0)				
4.0494	(1.0)			2.8664	(1.0)				
90.0				90.0					
90.0				90.0					
90.0				90.0					
1.54056				90.0					
9				90.0					
1	1	1	100.0	38.473	90.0				
2	0	0	47.0	44.722	1.54056				
2	2	0	22.0	65.099	6				
3	1	1	24.0	78.232	1	1	0	100.0	44.672
2	2	2	7.0	82.439	2	0	0	20.0	65.021
4	0	0	2.0	99.084	2	1	1	30.0	82.332
3	3	1	8.0	112.024	2	2	0	10.0	98.942
4	2	0	8.0	116.574	3	1	0	12.0	116.378
4	2	2	8.0	137.462	2	2	2	6.0	137.151

**CreateProfile** ソフトウェアはプロファイルで比較できます。拡大して Kβ 位置の確認しバックグラウンド測定角度を決定



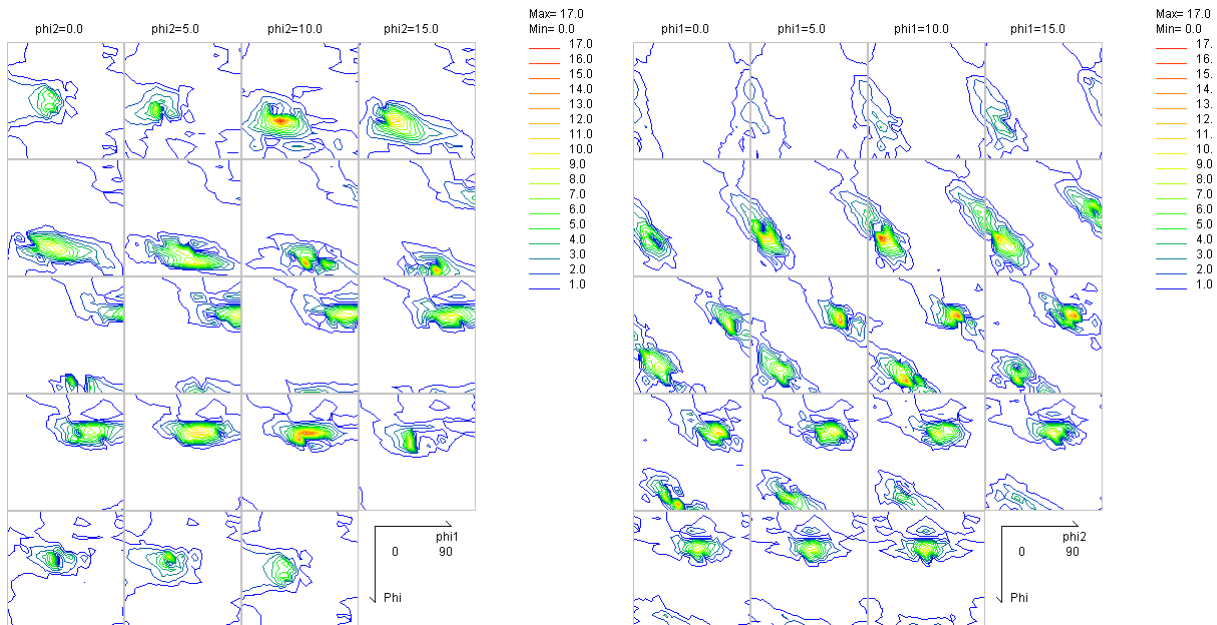
あるいは配向が強くてプロファイル測定では確認出来ない、2θ 位置を調べて極点測定に反映させます。

各種 (StandardODF, TexTools, LaboTex, popLA, Bunge) で解析した結晶方位図

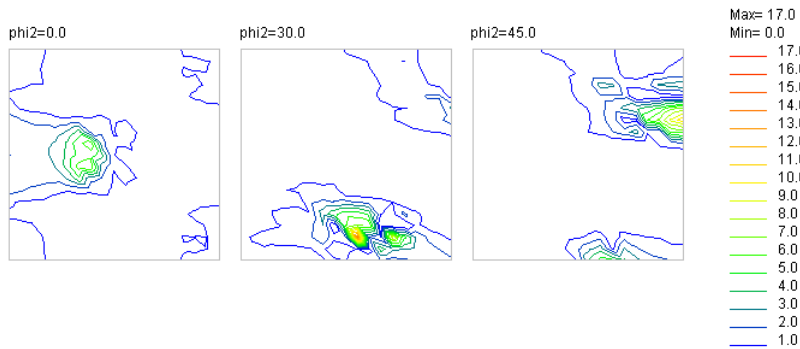
(ODF) の Export から最大 40 レベルの等高線を表示する ODFDisplay、

φ 2 断面

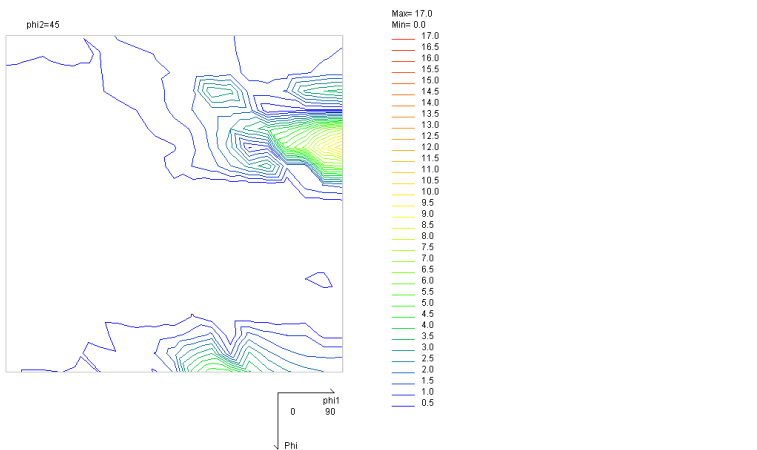
φ 1 断面



3 面表示



1 面表示



# BCC,FCC のファイバー表示 (ODFDisplay)

Fiber CubicCODisp

Smoothing-OFF

BCC  $\alpha$ -fiber  $\langle 110 \rangle // RD$

FCC  $\alpha$ -fiber (0->55)

$\gamma$ -fiber  $\langle 111 \rangle // ND$

$\gamma$ -fiber (0->90)

$\eta$ -fiber  $\langle 001 \rangle // RD$

$\zeta$ -fiber  $\langle 011 \rangle // ND$

$\epsilon$ -fiber  $\langle 001 \rangle // TD$

$\theta$ -fiber  $\langle 001 \rangle // ND$

Fiber CubicCODisp

Smoothing-OFF

BCC

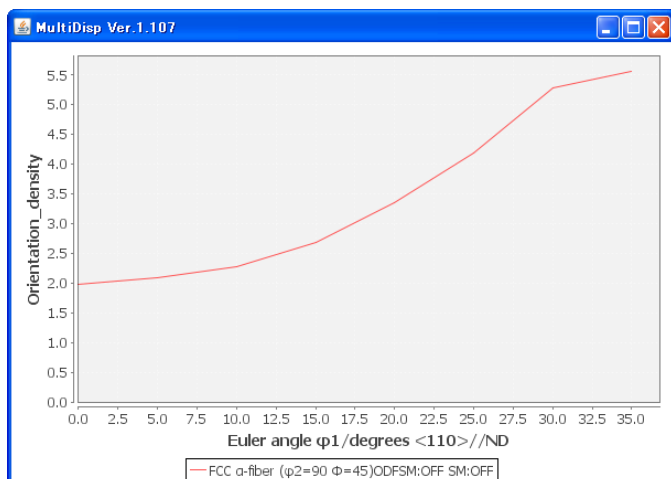
FCC  $\alpha$ -fiber  $\langle 011 \rangle // ND$

$\beta$ -skeleton

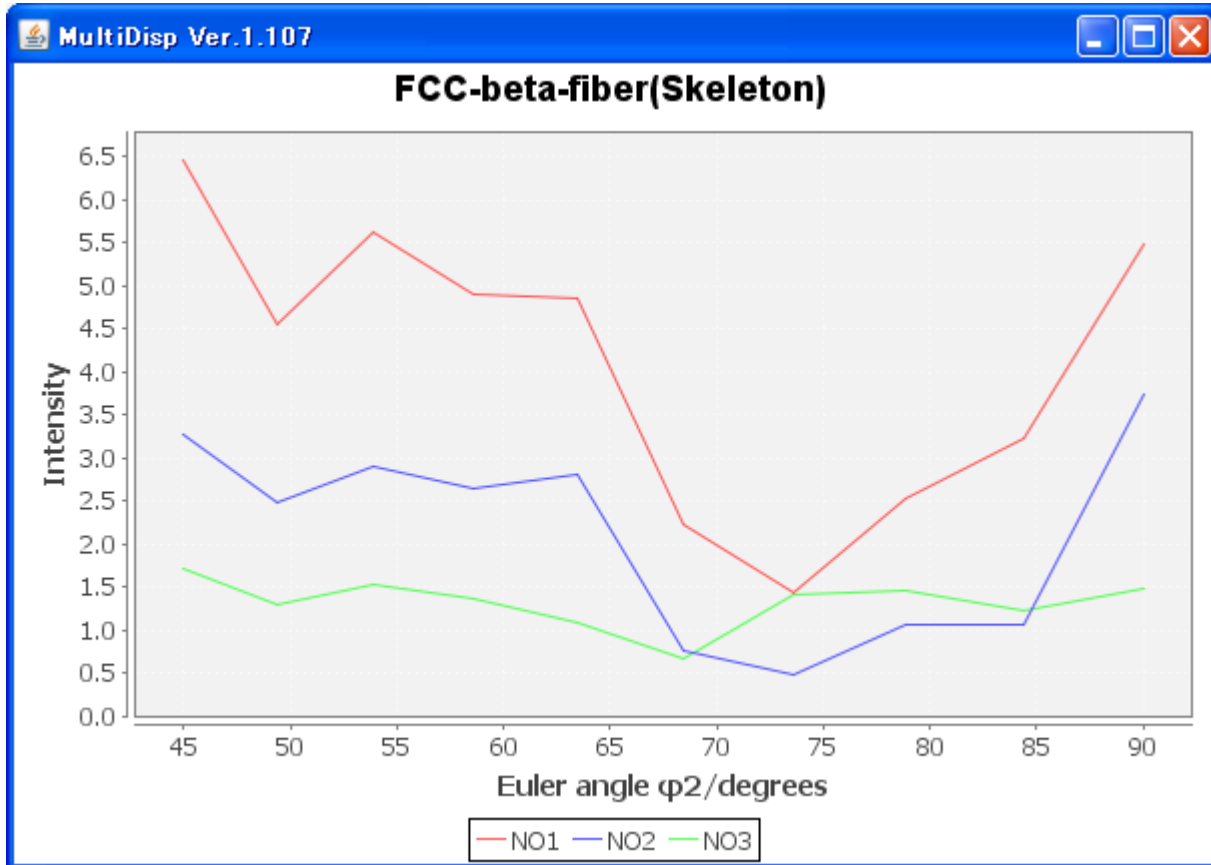
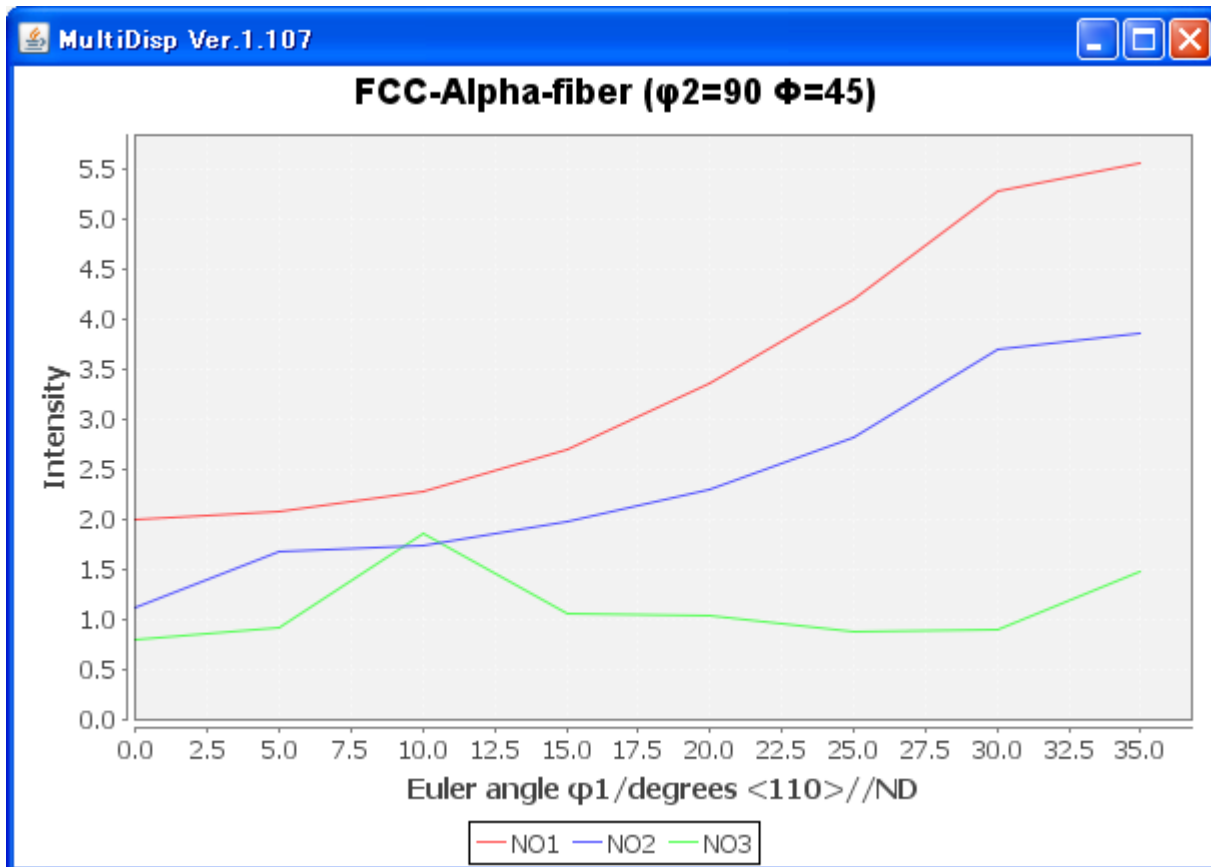
phi2=5.0

FCC- $\alpha$ -Fiber

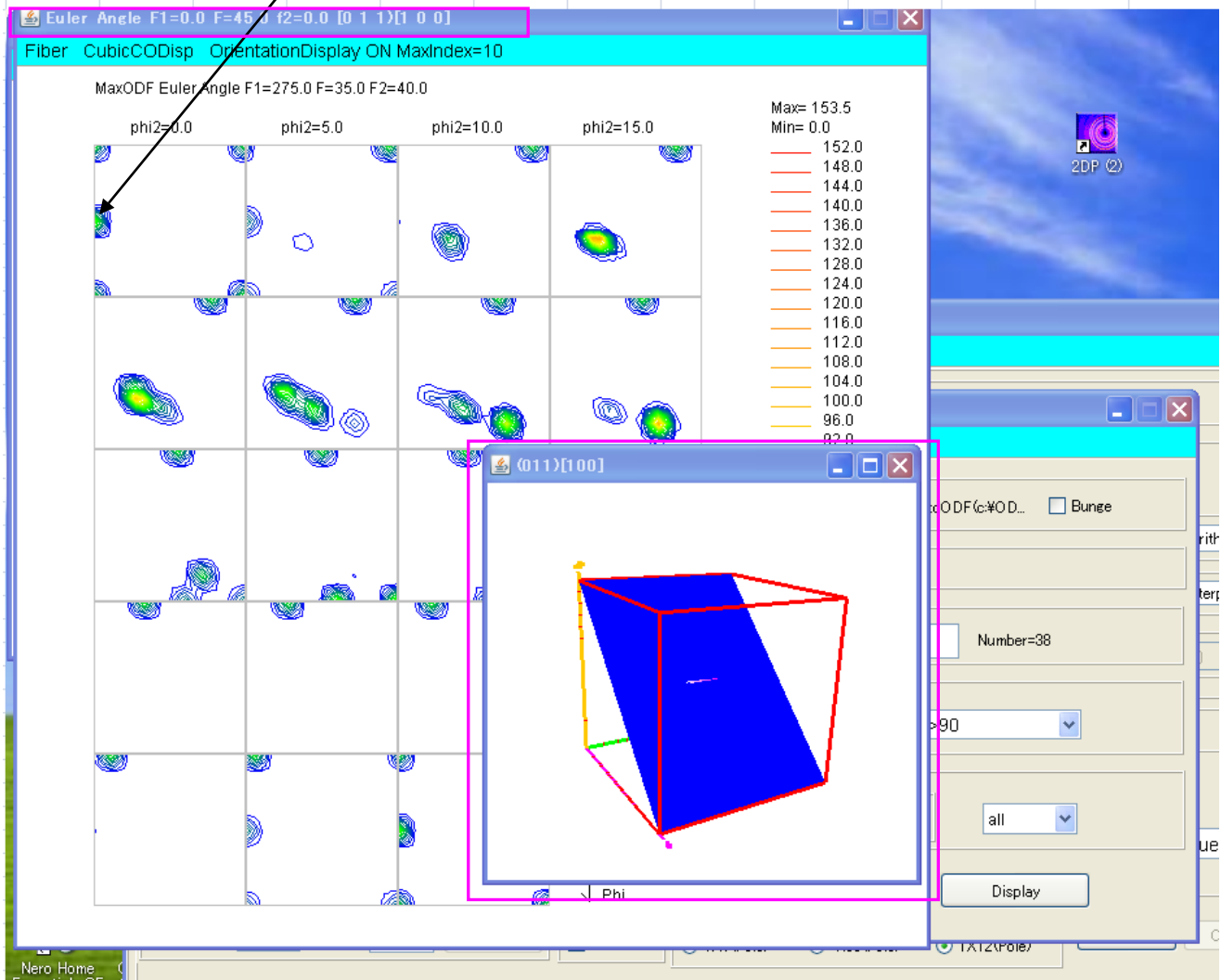
FCC- $\beta$ -Skeleton



材料別のファイバー曲線を最大6ファイル多重記録する **FiberMultiDisplay**

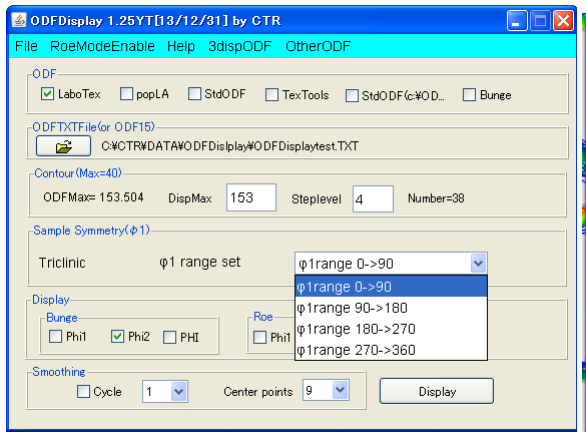


ODF 図上をマウスクリックすることで、結晶方位計算と結晶方位図を描画する。



Cubicの非対称ODF図もサポート

ODF方位密度の高いListを作成



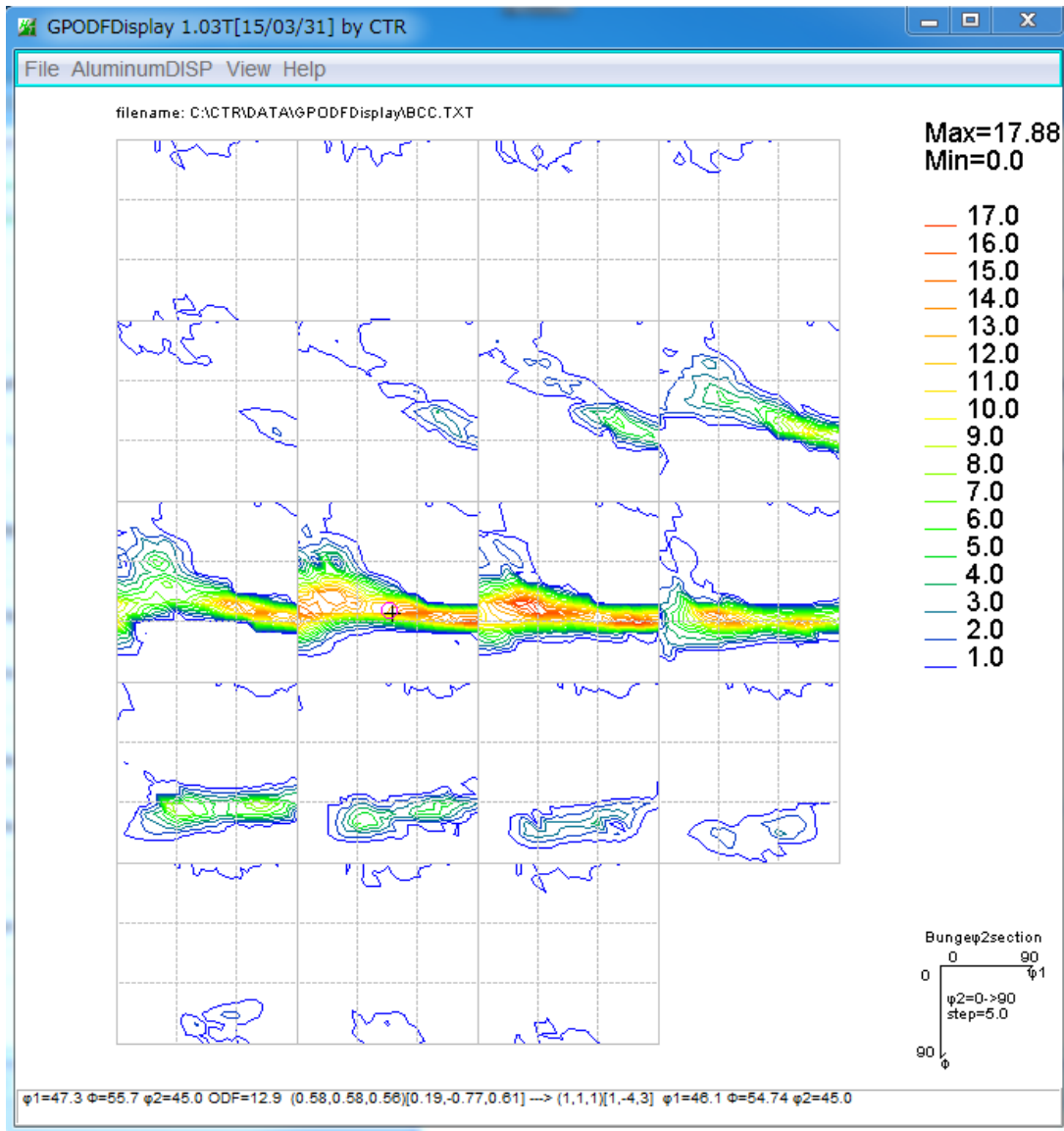
The screenshot shows a 'TextDisplay' window with a list of orientations and their ODF values. The table is as follows:

Orientation	$\phi_1$	$\Phi$	$\phi_2$	ODF
{1 1 0}<0 0 1> goss	90.0	90.0	45.0	54.16
{0 0 1}<1 -1 0> RW	45.0	0.0	0.0	42.67
{0 0 1}<1 0 0> cube	0.0	0.0	0.0	42.62
{1 1 2}<-1 -1 1> copper	90.0	35.26	45.0	27.12
{1 1 0}<-1 -1 2> brass	54.9	90.0	45.0	26.99
{1 1 0}<-1 -1 1> P	35.26	90.0	45.0	26.98
{5 2 5}<-1 -5 1>	15.23	47.12	68.2	26.67
{1 1 1}<-1 -1 2>	90.0	54.74	45.0	26.6
{2 1 3}<-1 -4 2> R	46.91	36.7	63.43	9.8
{1 3 2}<6 -4 3> S	27.03	57.69	18.43	8.92

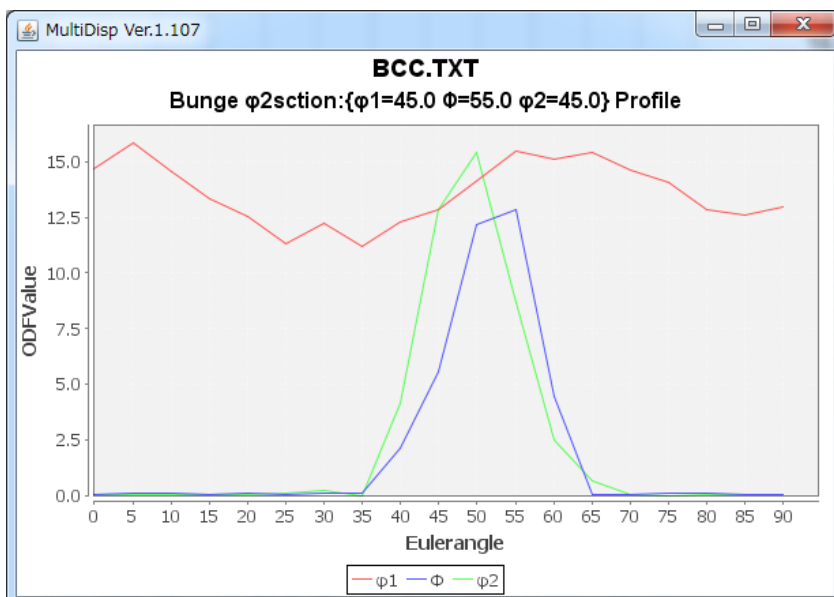
各種ODF解析結果から、 $\{hkl\}\langle uvw \rangle$ を決定する汎用 ODF 表示ソフトウェア

## GPODFDisplay

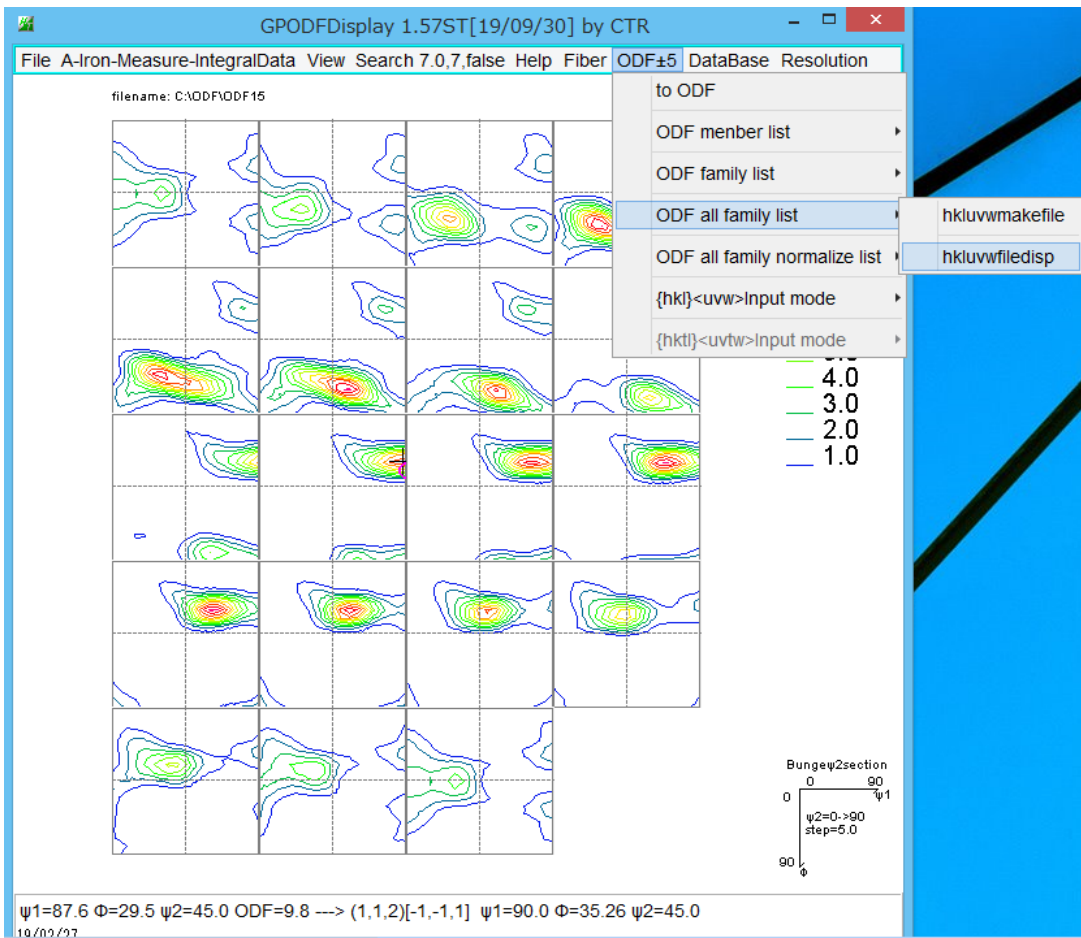
ODF 図上をマウス左クリックで“+”を表示と再計算した Euler 角度位置を“O”で表示



マウス右クリックで、 $\phi_1$ 、 $\Phi$ 、 $\phi_2$  プロファイルを表示、 $\Phi$ 、 $\phi_2$  方向は等方、 $\phi_1$  方向は Fiber

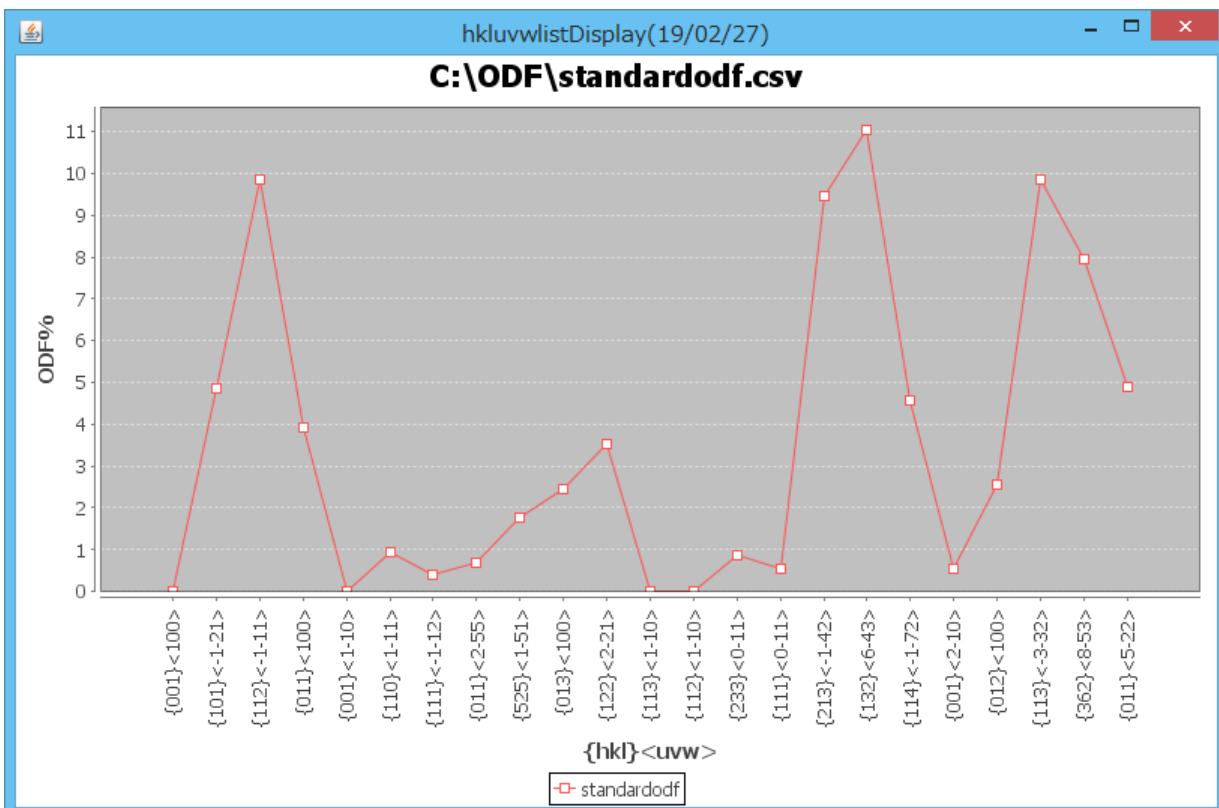


各種 ODF 解析結果の E x p o r t データから {hkl}<uvw> プロファイルを表示



Copper の方位位置が若干シフトしています。マウスクリック位置は+、計算される copper は○

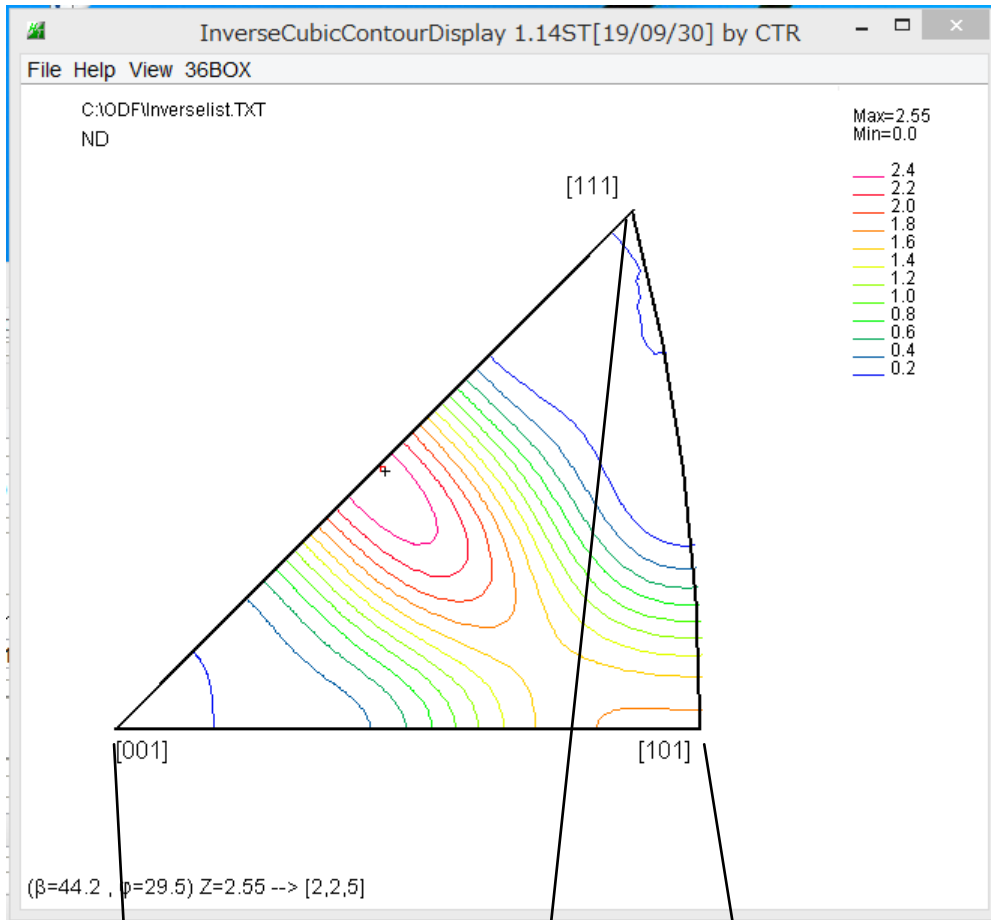
予め登録されている結晶方位位置の方位密度をプロット



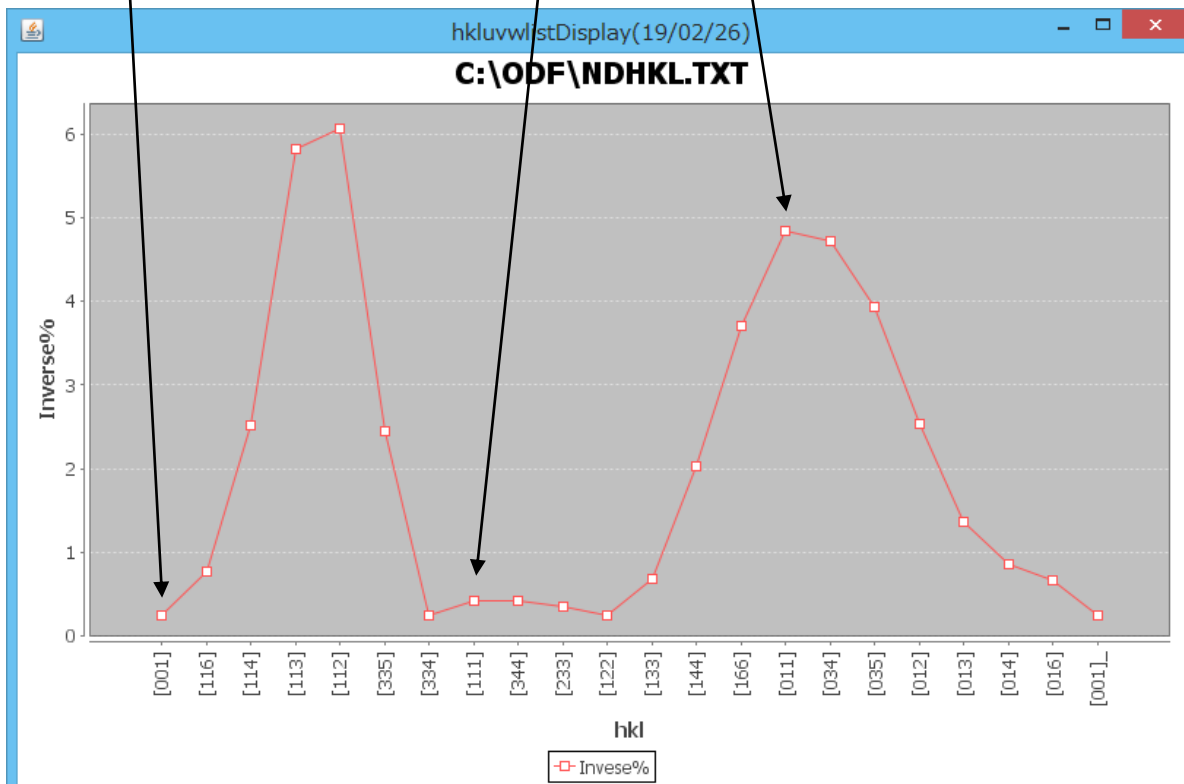
toODF±1step で結晶方位の 9.8 が得られる。



各種 ODF 解析結果の逆極点 E x p o r t データから <hkl> プロファイルを表示



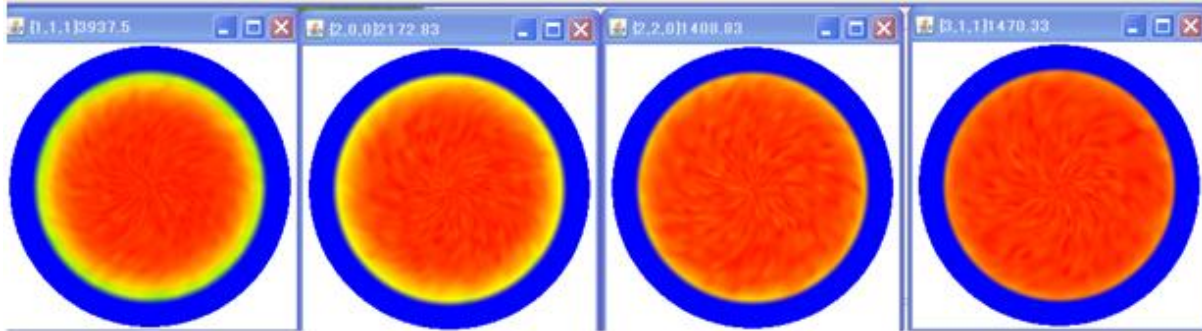
逆極点図を 36Box に分け、外周を [001] から [111],[101],[001] と % でプロット



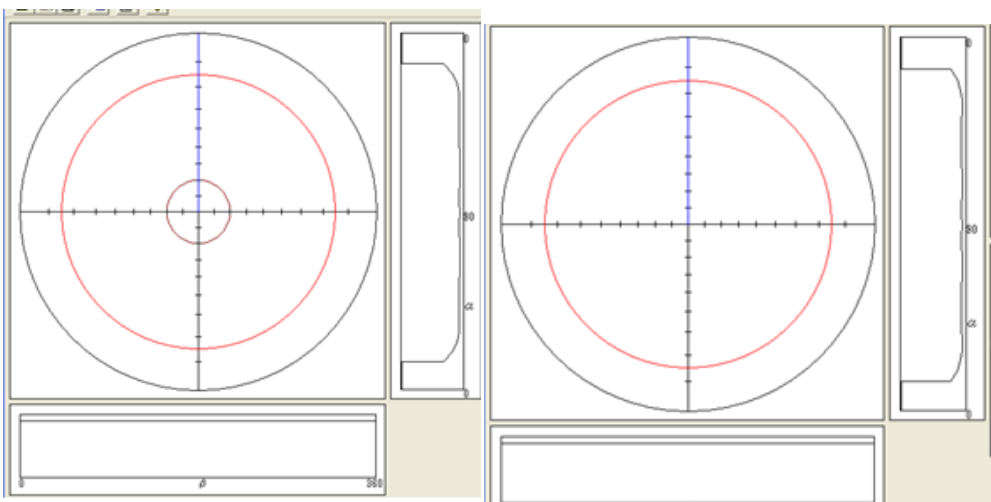
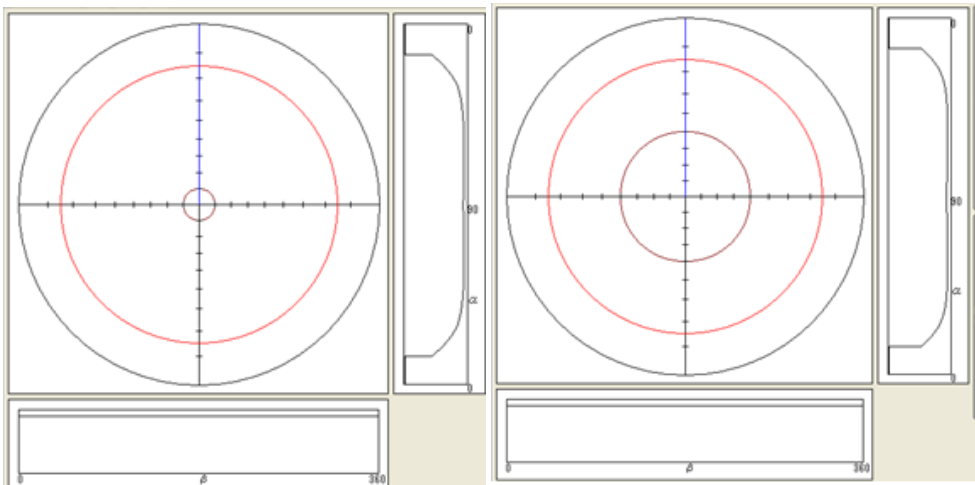
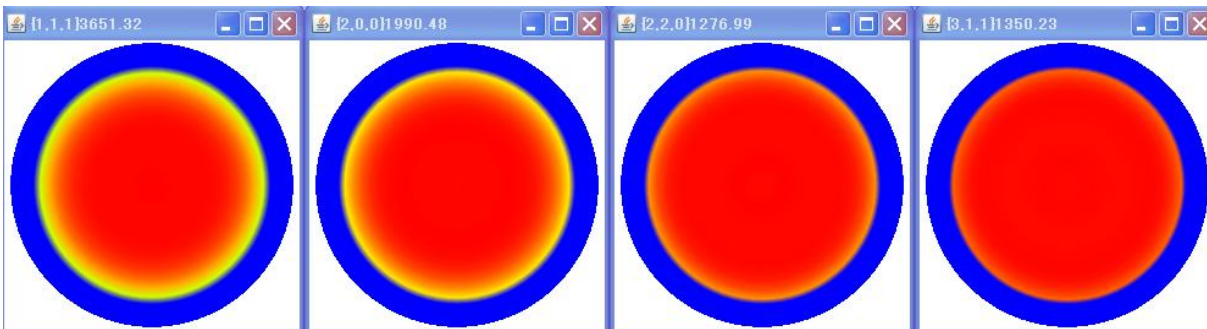
random データから、 $\beta$  方向の平均値を  $\alpha$  方向にプロットし、多項式近似を行い、

極点図 ASC ファイルを作成する、**PoleFigureAsctoSMAsc**

測定データ

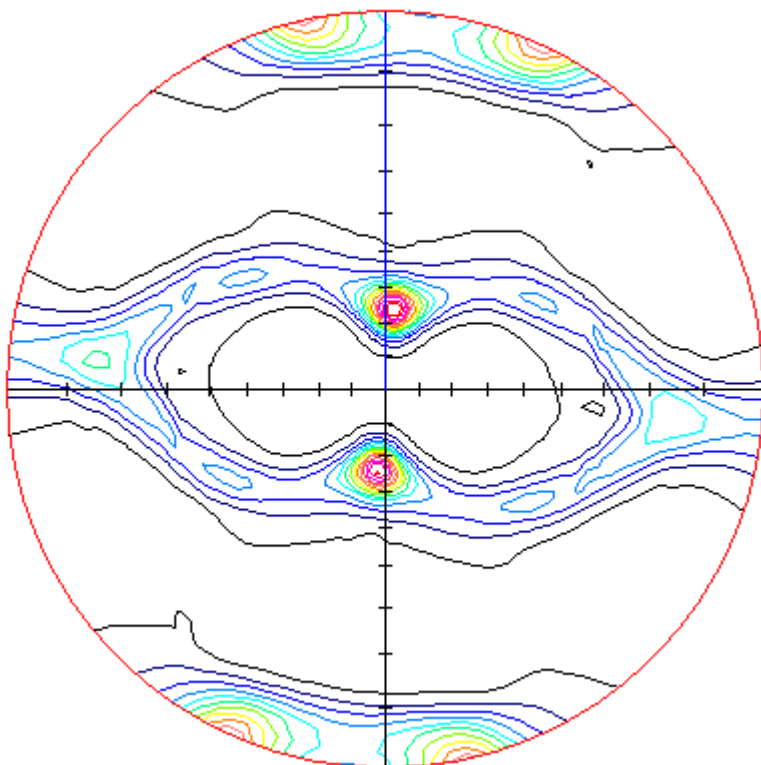


バックグラウンドを削除し、平均化を行ったASCデータ

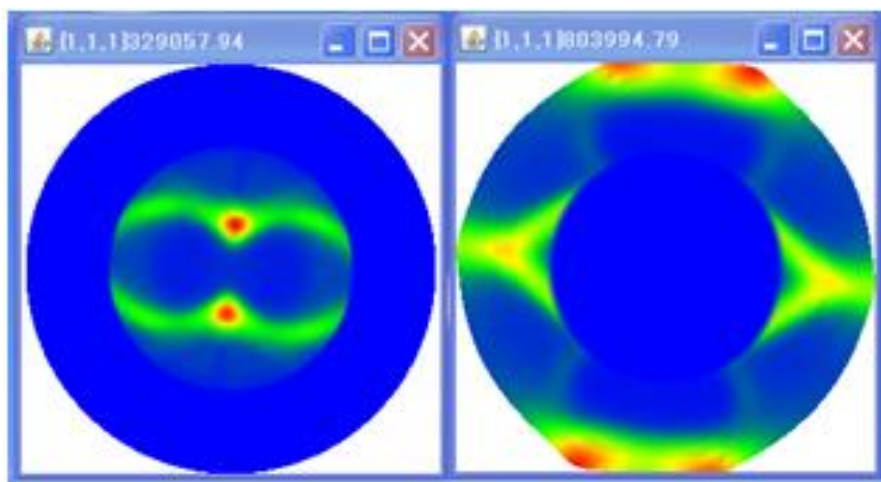


透過、反射極点図は1ファイルに含まれる極点図データから透過極点図と反射極点図に分離したファイルを作成する、**PFTRSEparate**

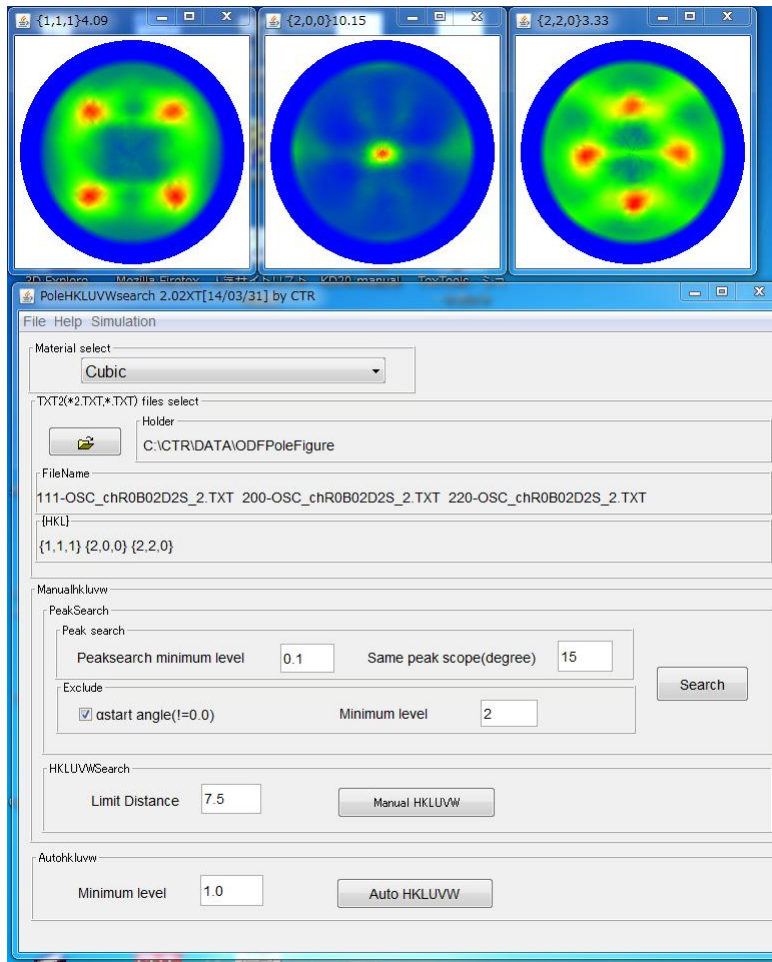
透過、反射データが1つのファイルに含まれている。



データ分離後のデータ



複数の極点図を使って、極点図のピーク位置を計算し、ピーク位置から結晶方位  $\{hkl\}\langle uvw \rangle$  を計算する



ピークサーチおよび HKLUVW の決定

The image shows the TextDisplay software window displaying the results of a peak search. The table below is a transcription of the data shown in the screenshot. A pink box highlights the 'Result' section of the table.

hkl	aangle	bangle	Polelevel	{001}<100>(0.0)	{122}<-2-21>(0.0)	{132}<-6-43>(5.0)
1,1,1	35.0	45.0	3.74	{001}<100>(0.0)	{122}<-2-21>(0.0)	{132}<-6-43>(5.0)
0	35.0	135.0	4.06	{001}<100>(0.0)	{122}<-2-21>(0.0)	{132}<-6-43>(5.0)
1	35.0	225.0	4.08	{001}<100>(0.0)	{122}<-2-21>(0.0)	{132}<-6-43>(5.0)
2	35.0	315.0	3.55	{001}<100>(0.0)	{122}<-2-21>(0.0)	{132}<-6-43>(5.0)
3	35.0	315.0	3.55	{001}<100>(0.0)	{122}<-2-21>(0.0)	{132}<-6-43>(5.0)
1,0,0	90.0	0.0	9.25	{001}<100>(0.0)	{001}<-110>(0.0)	
0	90.0	0.0	9.25	{001}<100>(0.0)	{001}<-110>(0.0)	
1,1,0	40.0	180.0	3.33	{001}<100>(5.0)	{112}<-1-11>(5.0)	{122}<-2-21>(6.0)
0	40.0	180.0	3.33	{001}<100>(5.0)	{112}<-1-11>(5.0)	{122}<-2-21>(6.0)
1	45.0	0.0	2.85	{001}<100>(0.0)	{122}<-2-21>(1.0)	
2	45.0	95.0	3.28	{001}<100>(5.0)	{122}<-2-21>(5.0)	
3	45.0	270.0	2.88	{001}<100>(0.0)	{122}<-2-21>(1.0)	
<b>**Result**</b>						
	{001}<100>	{001}<110>	{112}<-1-11>	{122}<-2-21>	{132}<-6-43>	
1,1,1	1.0	0.0	0.0	0.5	0.4	
1,0,0	1.0	1.0	0.0	0.0	0.0	
1,1,0	1.0	0.0	0.12	0.5	0.0	

全てのピークが、 $\{001\}\langle 100 \rangle$ で説明出来るので、 $\{001\}\langle 100 \rangle$  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 ( $\alpha$ ,  $\beta$ ) とデータベースの ( $\alpha_b$ ,  $\beta_b$ ) 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。

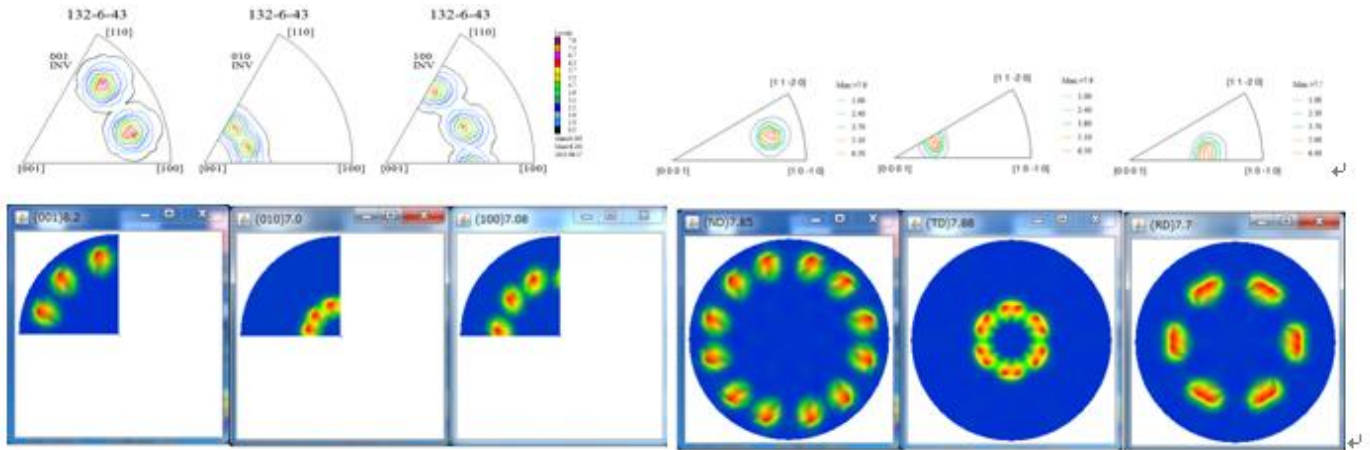
$\{001\}\langle 100 \rangle$ は全ての極点図で 0.0 以外で、 $\{122\}\langle -2-21 \rangle$ は $\{1,0,0\}$ 極点図が 0.0 で満足していない

ODF, TexTools と LaboTex では再計算逆極点図が異なるケースがある。この問題を

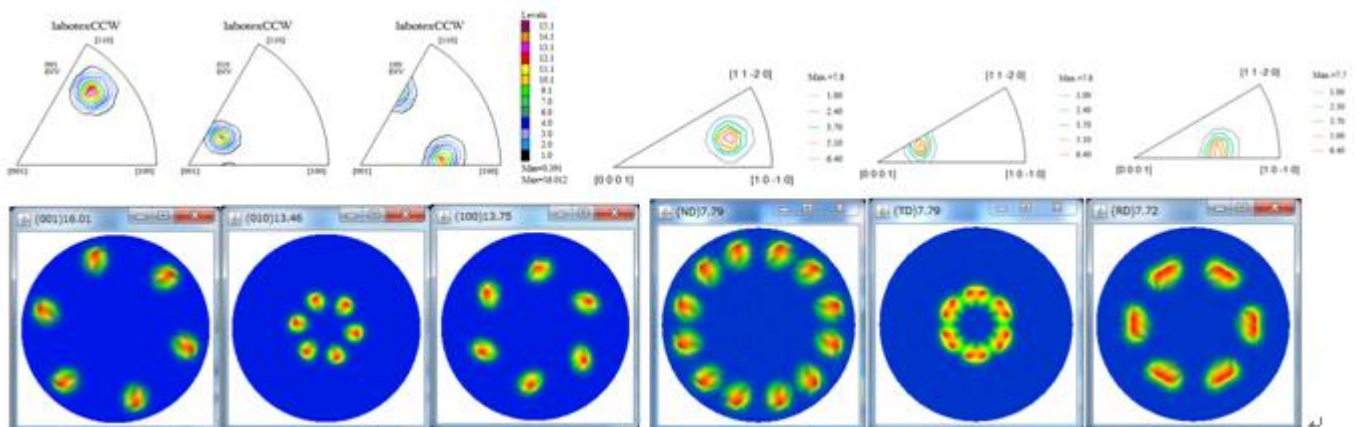
## 探求するための Tool として作成した ODFInverseChecker

六方晶 Mg で  $\{1\ 3\ 2\} \langle 6\ -4\ 3 \rangle$  を比較する

対称の場合

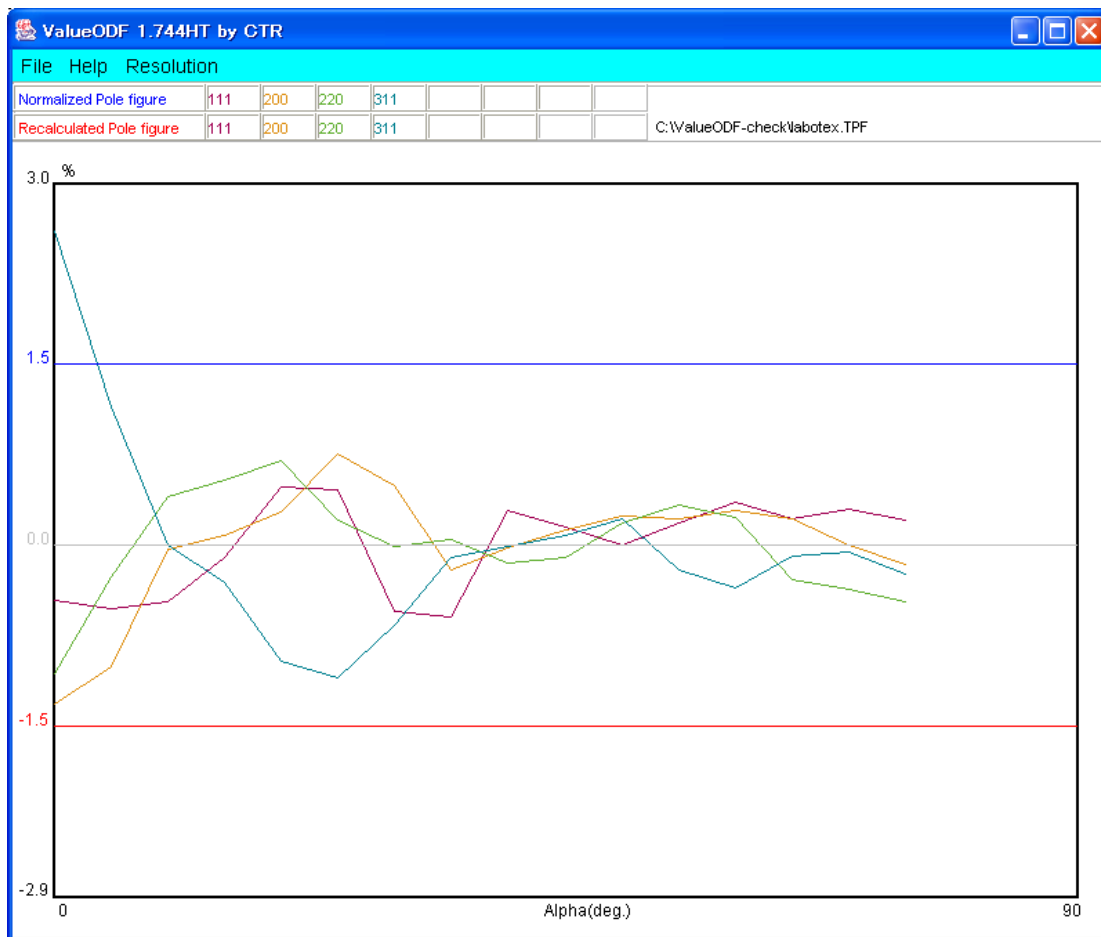


非対称の場合



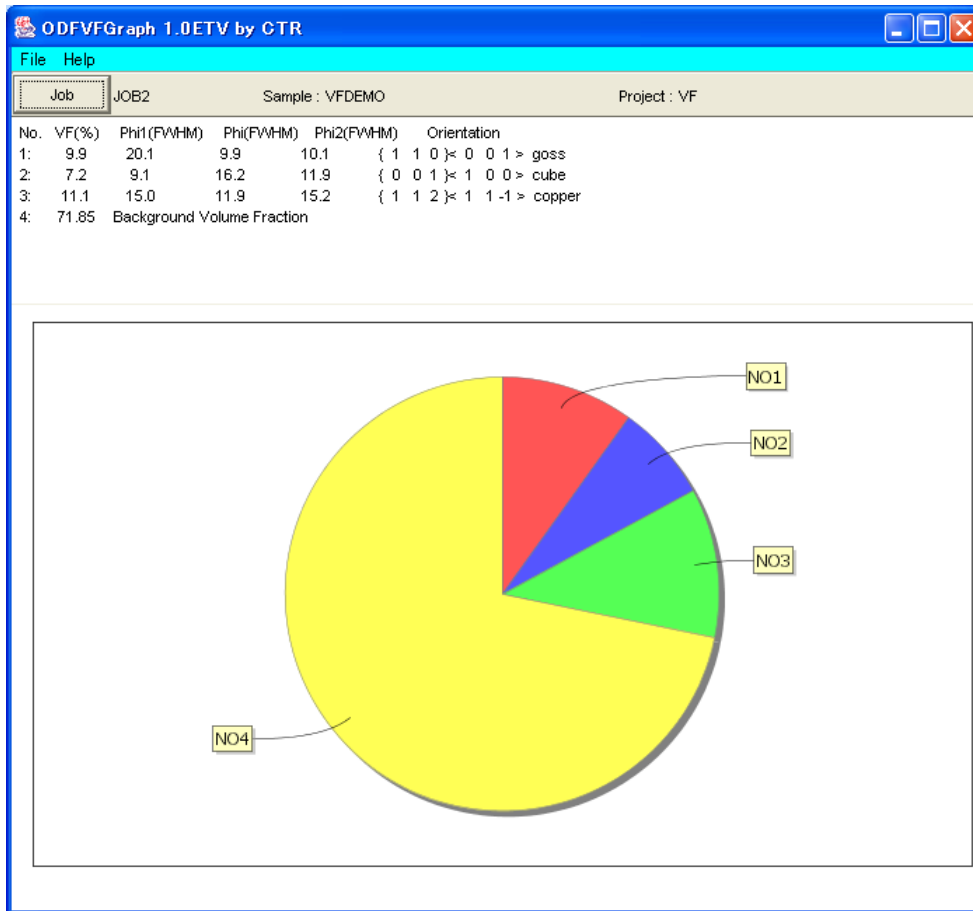


各種 (StandardODF, TexTools, LaboTex, popLA, Bunge) で解析した結晶方位図 (ODF) から計算した極点図の **Export** から、ODF 入力極点図と再計算極点図を比較し ODF 解析の妥当性を評価する **ValueODF**



±1.5%に入れば問題ないが、この枠を外れる場合、例えば右下がりの場合、defocusの見直しが必要などの判断に使えます。

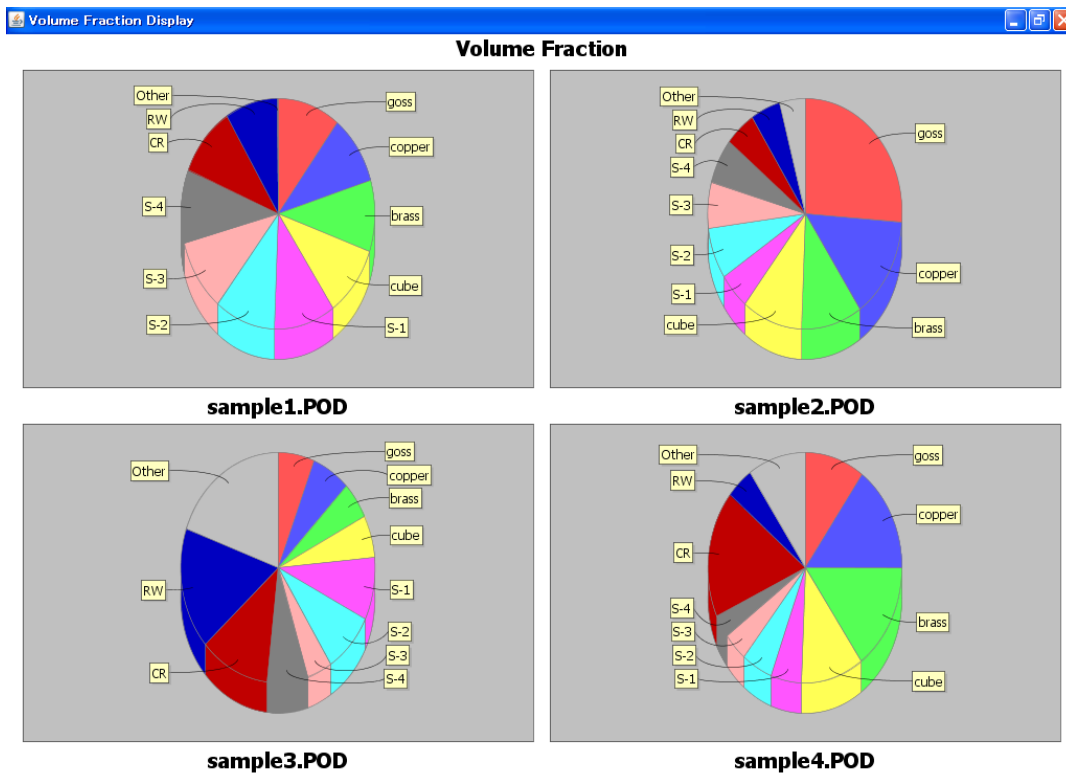
LaboTex は VolumeFraction (体積分率) を計算し表示、ファイル化が出来ますが印刷が出来ません。この VolumeFraction を円グラフに表示する **ODFVFGraph**、





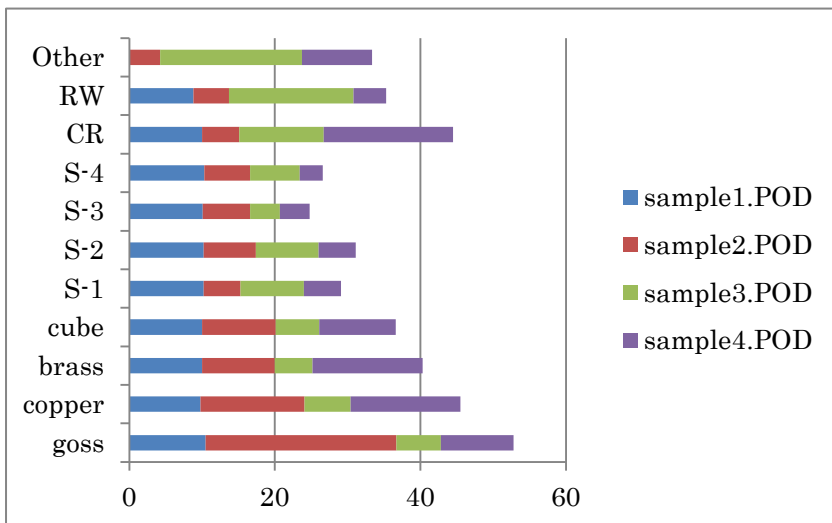
# 複数の材料の VolumeFraction を比較する CompareVolumeFraction

同一方位群で複数材料の VolumeFraction を計算し多重書き



Sample name	goss	copper	brass	cube	S-1	S-2	S-3	S-4
sample1.POD	10.5	9.8	10.0	10.0	10.2	10.2	10.1	10.3
sample2.POD	26.2	14.3	10.0	10.1	5.1	7.2	6.5	6.3
sample3.POD	6.1	6.3	5.2	6.0	8.7	8.6	4.1	6.8
sample4.POD	10.0	15.1	15.1	10.5	5.1	5.1	4.1	3.2

ファイル作成でExcel表示



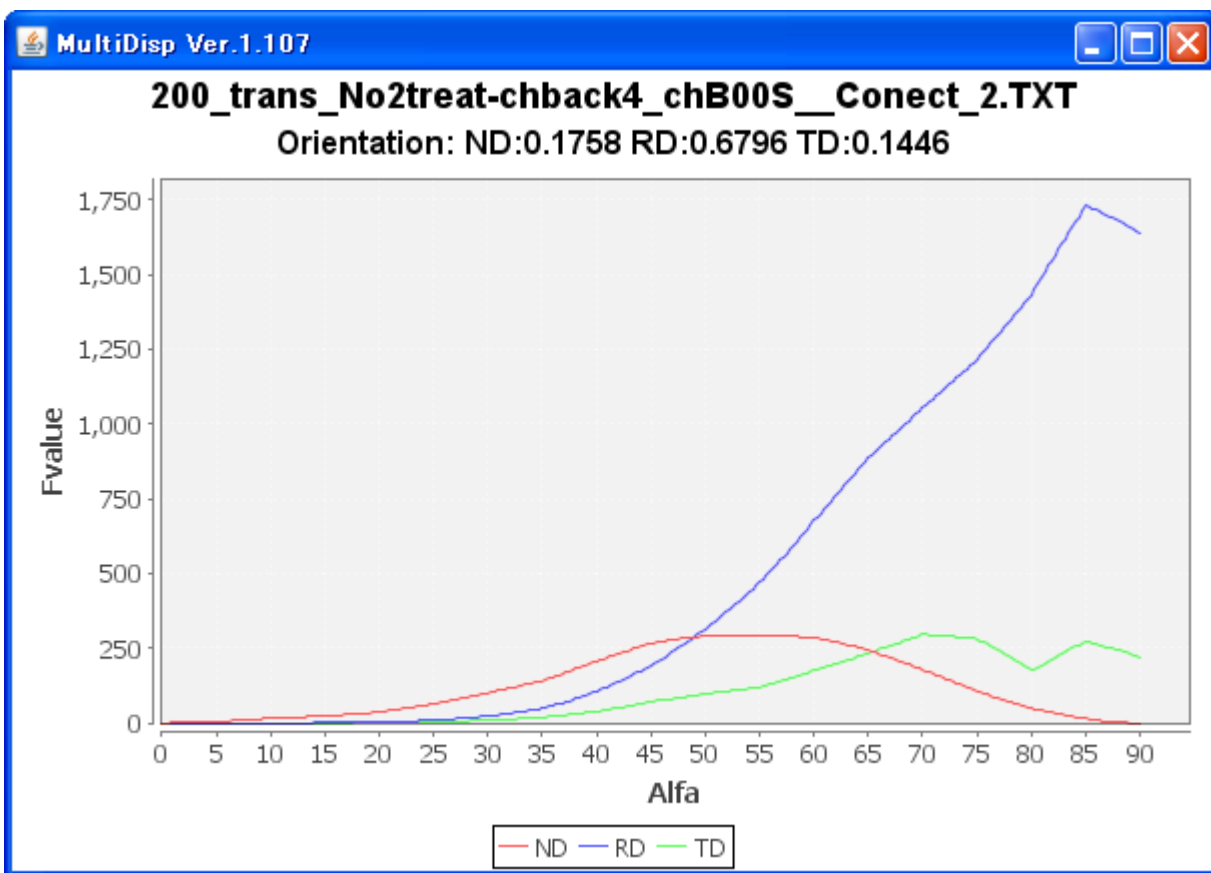
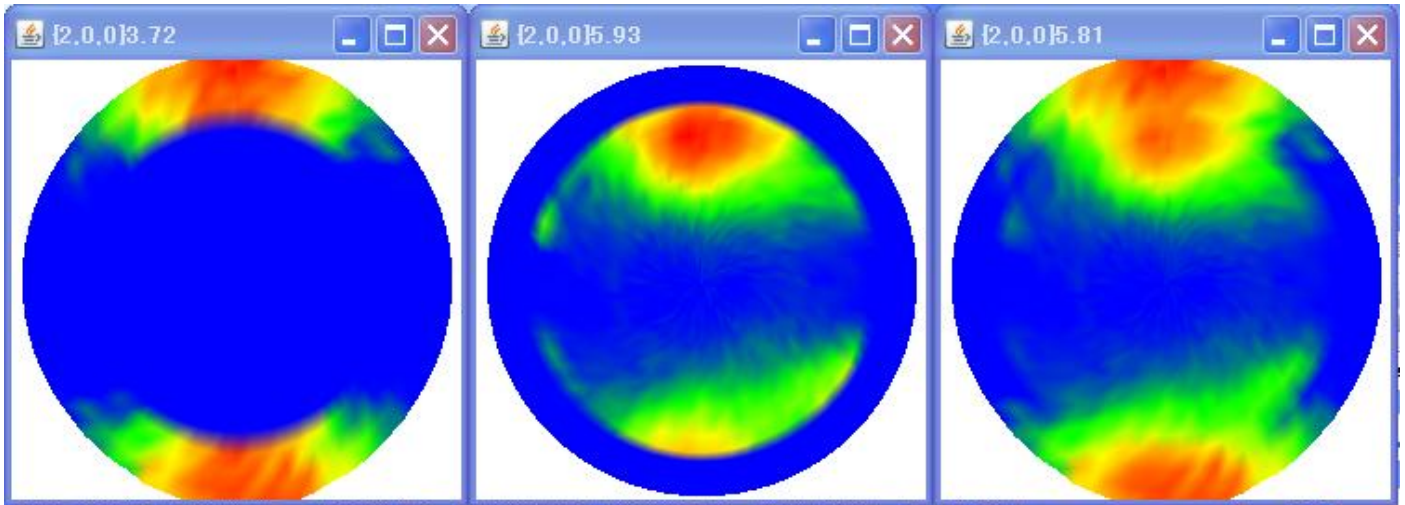
## 完全極点図から配向度関数を計算する **Orientation**

透過反射極点図を **ODFPoleFigure2** ソフトウェアで各種補正を行い、**Pfconnection** ソフトウェアで接続し **Orientation** ソフトウェアで配向度関数を評価する。

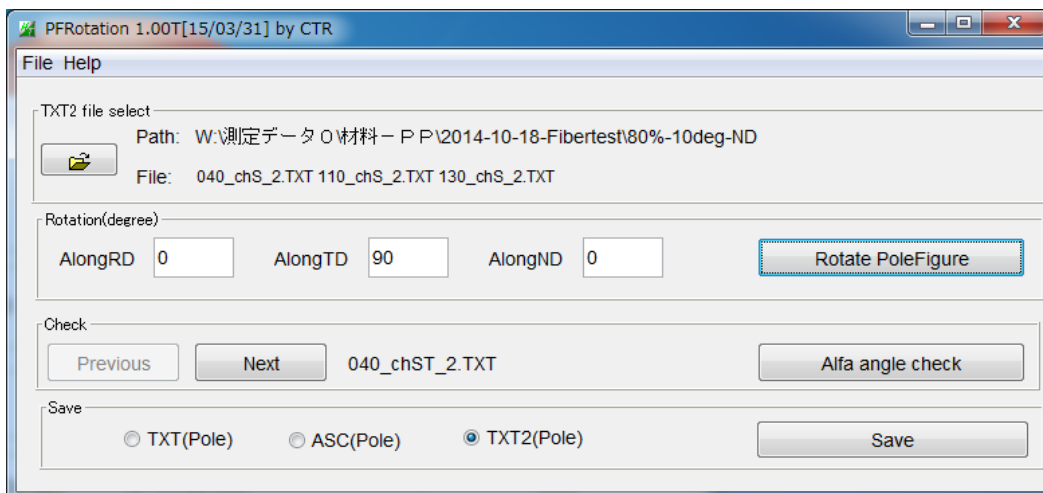
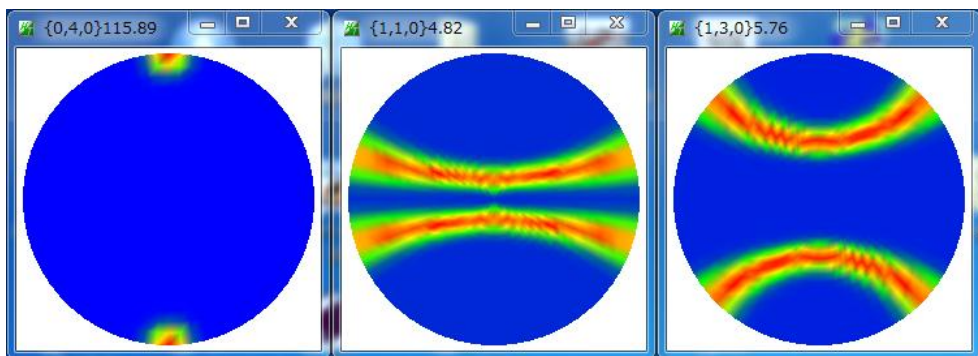
反射

透過

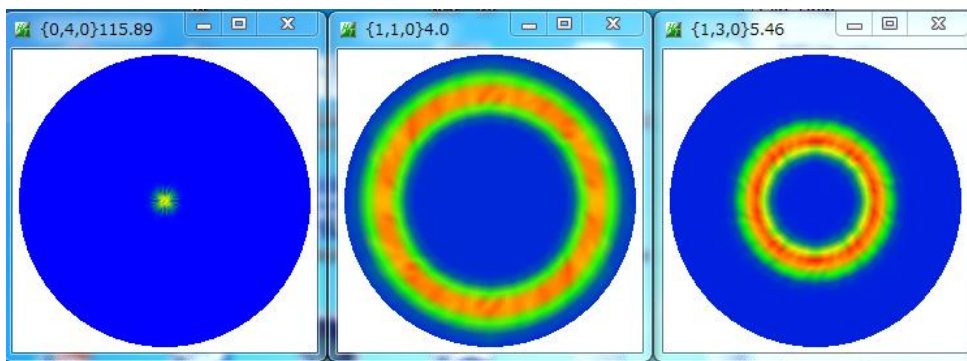
connection



完全極点図の **TXT2** データを RD, TD, ND 軸に対し回転を行う **PFRotation**  
高分子材料の軸配を面配向に変換する



TD 軸に対し、90 度回転を行うと面配向に変換出来ます。

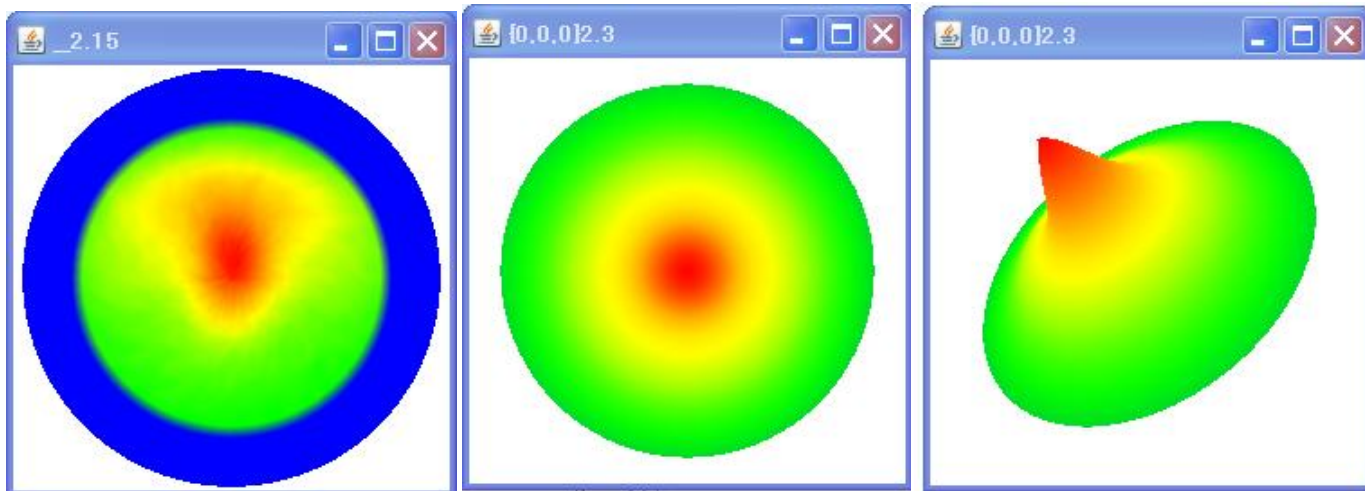


Nd-Fe-B の磁性特性評価の応用できる反射極点図から配向度を計算する

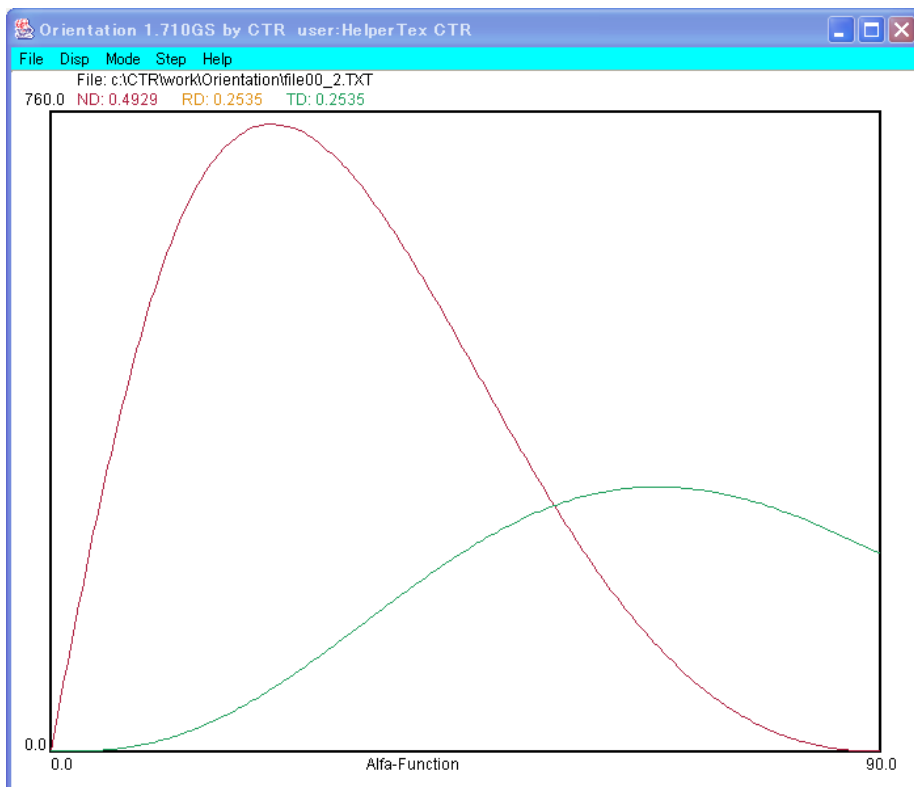
## NDOrientation

ODFPoleFigure2 で各種補正

$\beta$  方向を平均し測定されていない部分外挿し、



配向度関数を計算

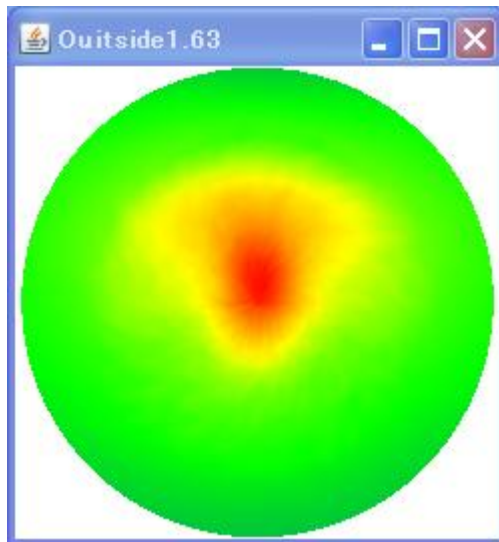
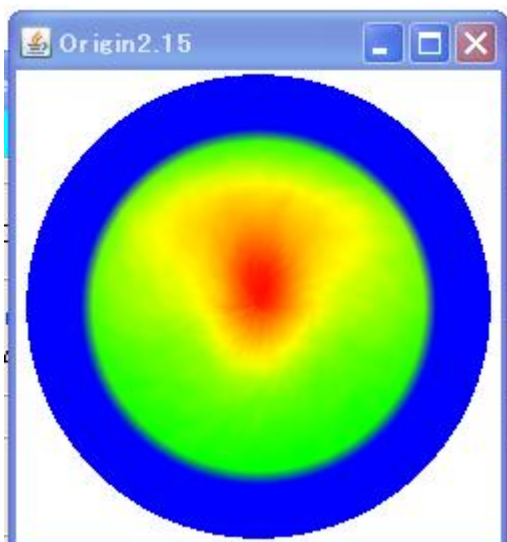


測定領域は、0 → 75.0 外挿に 90.0 までのデータで配向度関数を計算

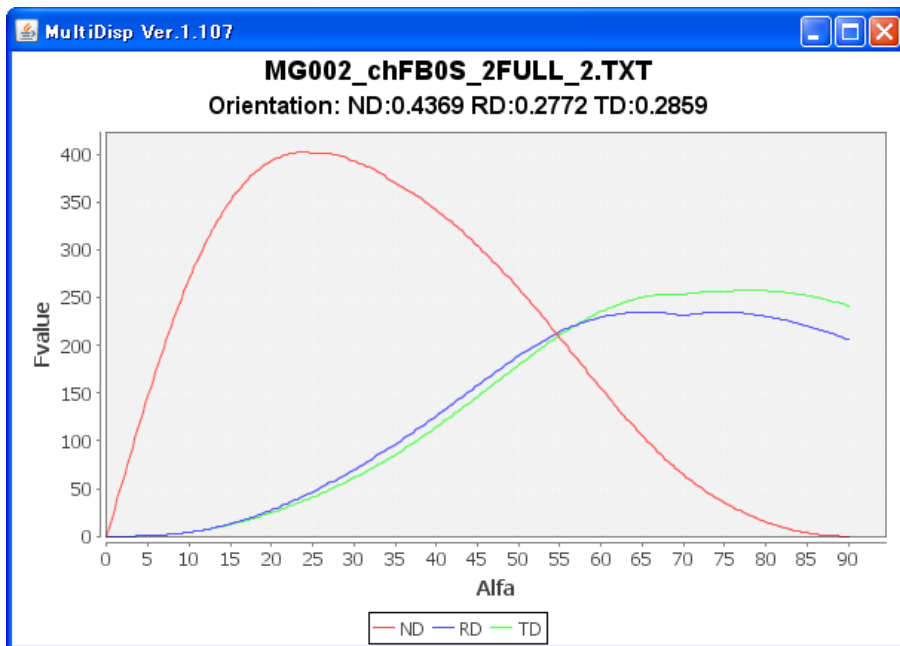
## 不完全極点図から極点図を外挿する **CreateExpPoleFigure**

ODFPoleFigure2 で各種補正

CreateExpPOleFigure で測定していない部分を外挿



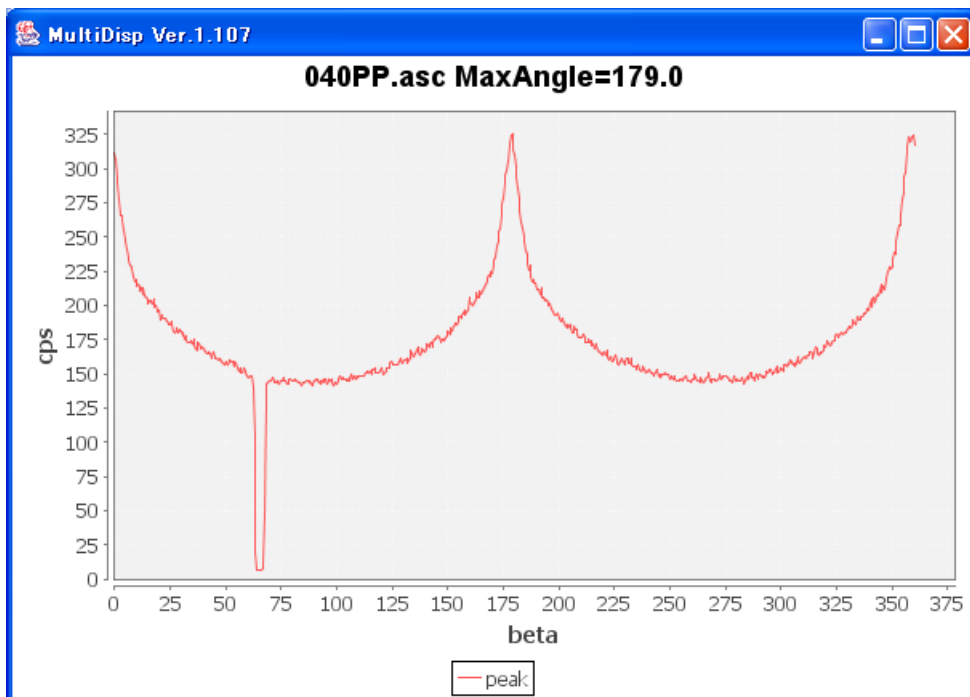
配向度関数の計算



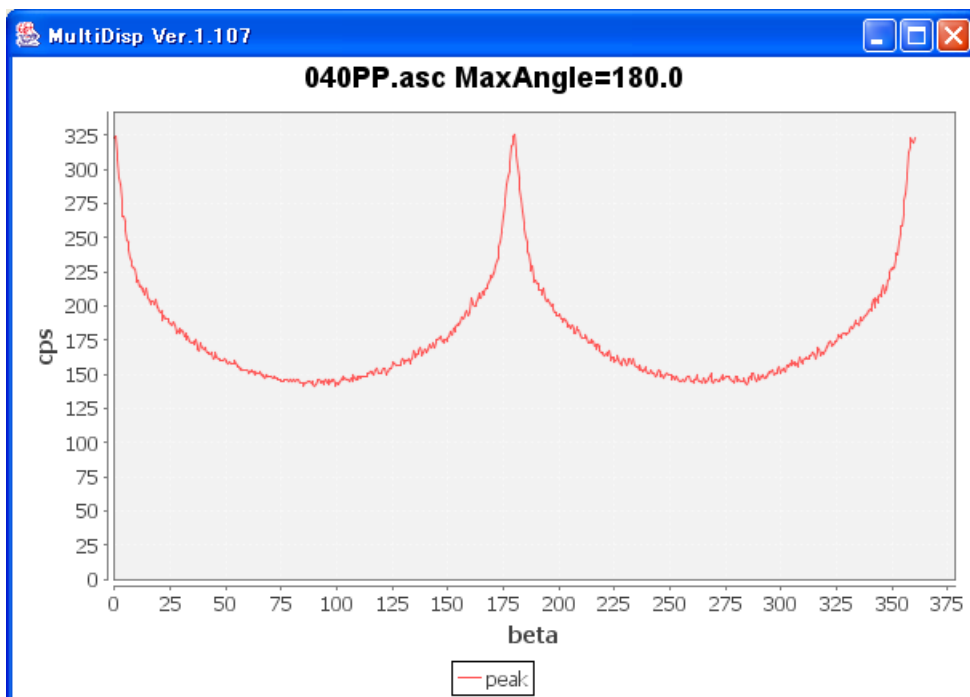
高分子の配向評価の為にビームストップの影がある Image データから影のない

$\beta$ -I プロファイルを得る ZigzagFiber

測定データ



対称操作で影の部分復活

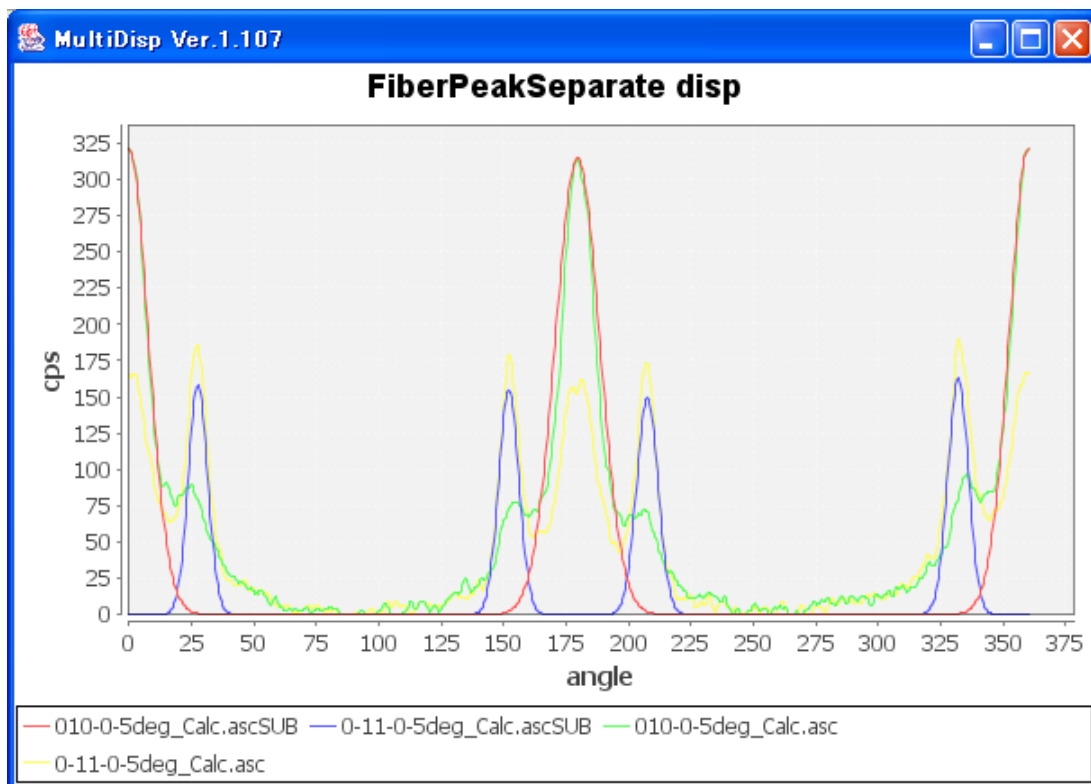
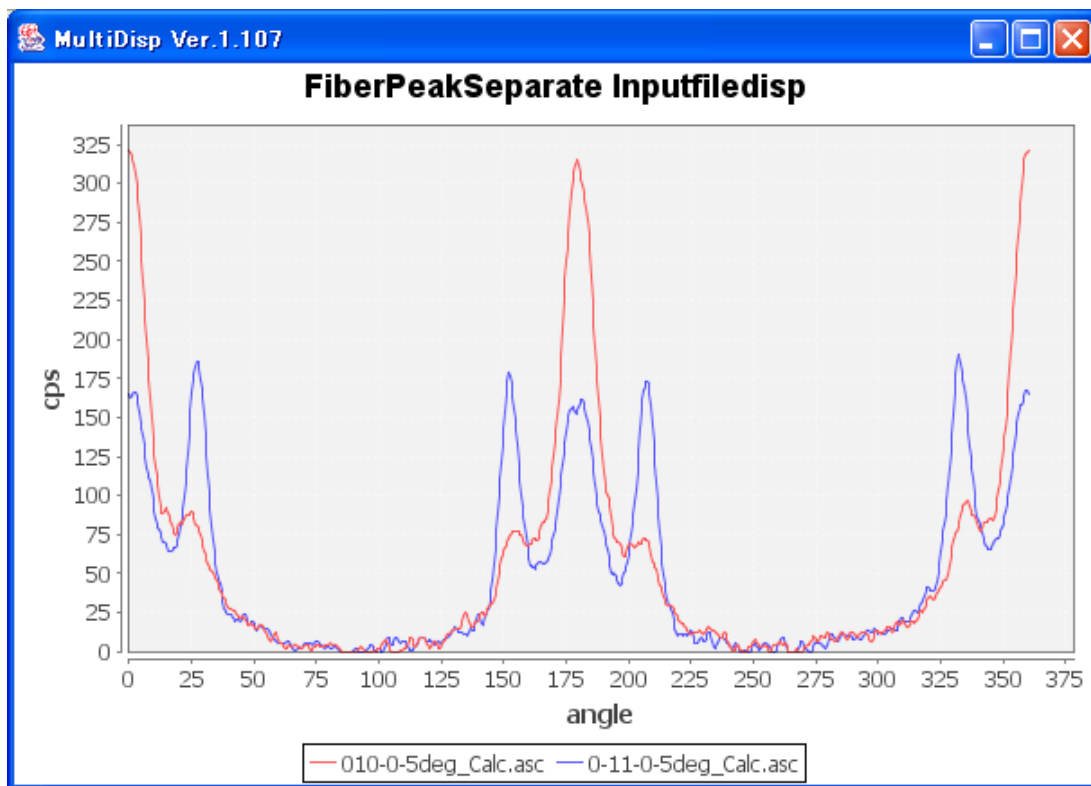


基本的なデータ処理、プロファイルシフト、平滑化、バックグラウンド除去、プロファイル分離を含む

高分子材料の  $\beta$ -I プロファイルに隣の反射が重なっているデータのピーク分離を行

## う FiberPeakSeparate

ZigzagFiber から起動され分離ファイルを作成する。



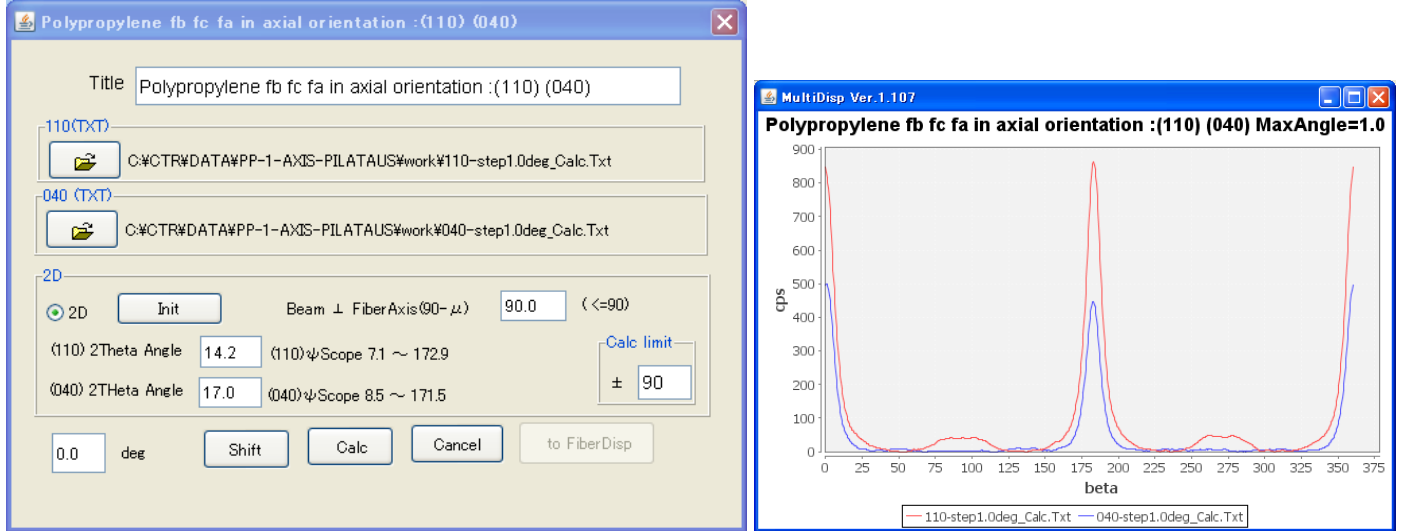
分離後のプロファイルデータファイルの作成

## Z 軸に対する高分子結晶軸の平行、垂直度合いを評価する **FiberSimpleOrientation**

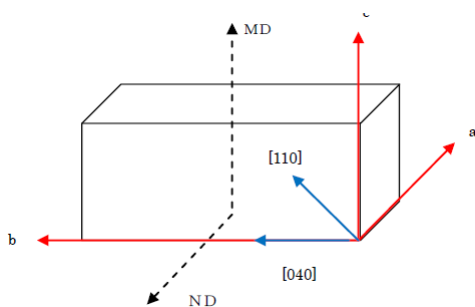
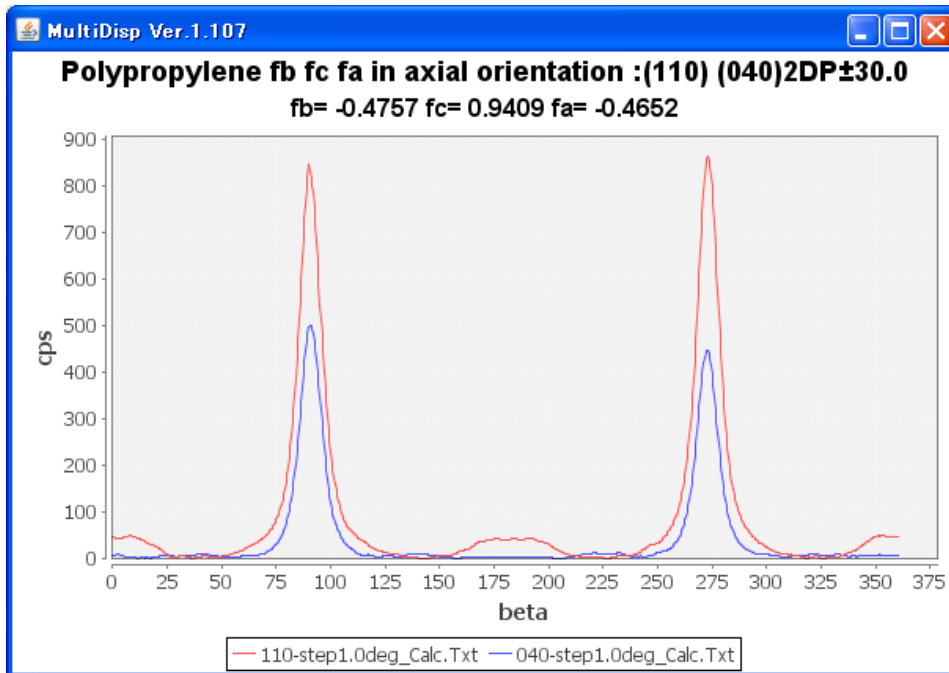
Stain 法による軸配向している高分子材料の簡易的な評価法（透過対称配置、透過垂直配置）

扱う材料により、測定反射が 2 点決められている。例えば、Polypropylene なら、(1 1 0)、(0 4 0) である。

予め ZigzagFiber でデータ処理した結果から



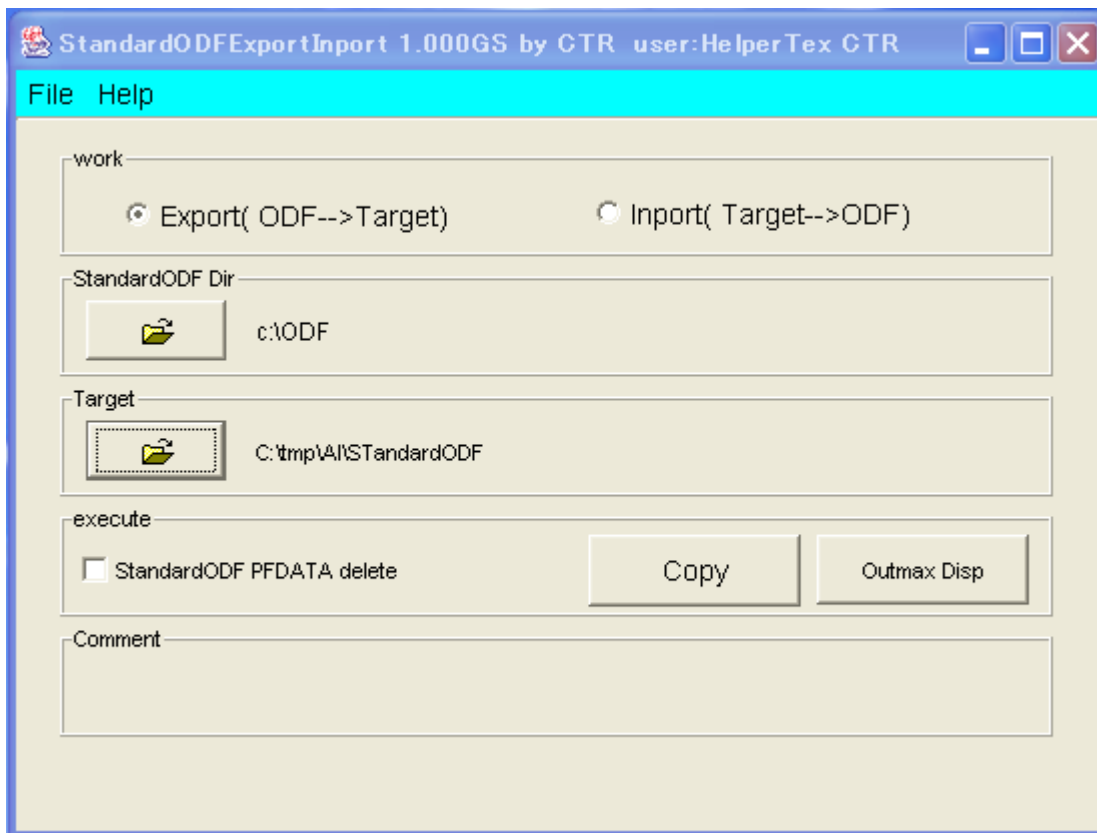
データ処理後（極点図の RD 方向で描画するが、繊維試料台 MT 方向でも表示出来る（90度シフト））



MD 方向に C 軸が並行で、a, b 軸は MD 軸に垂直に近いことが理解できます。もし完全に並行なら、 $f_c = 1.0$ 、 $f_b = -0.5$  である。



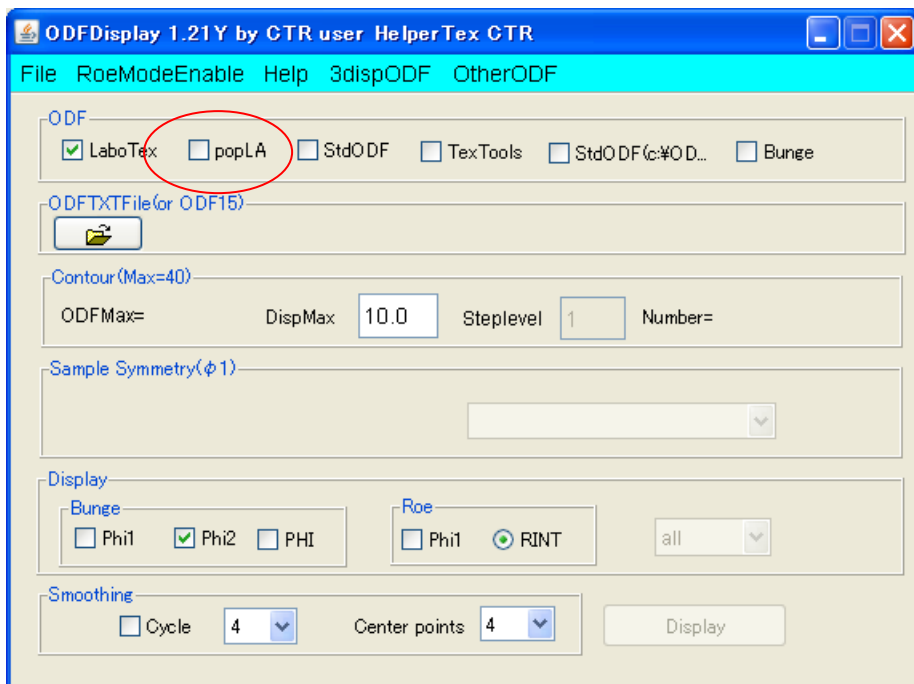
StandardODF は c:\¥ODF がワークディレクトリで解析結果の全てが展開されていて、  
 次の解析は上書きしてしまう。解析結果の Export-Inport を行う **StandardODFExportInport**



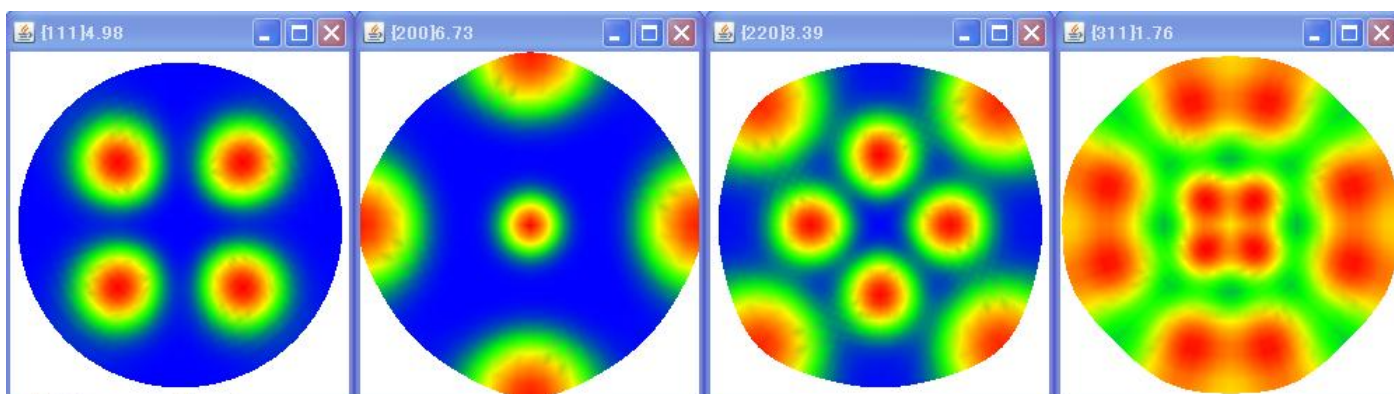
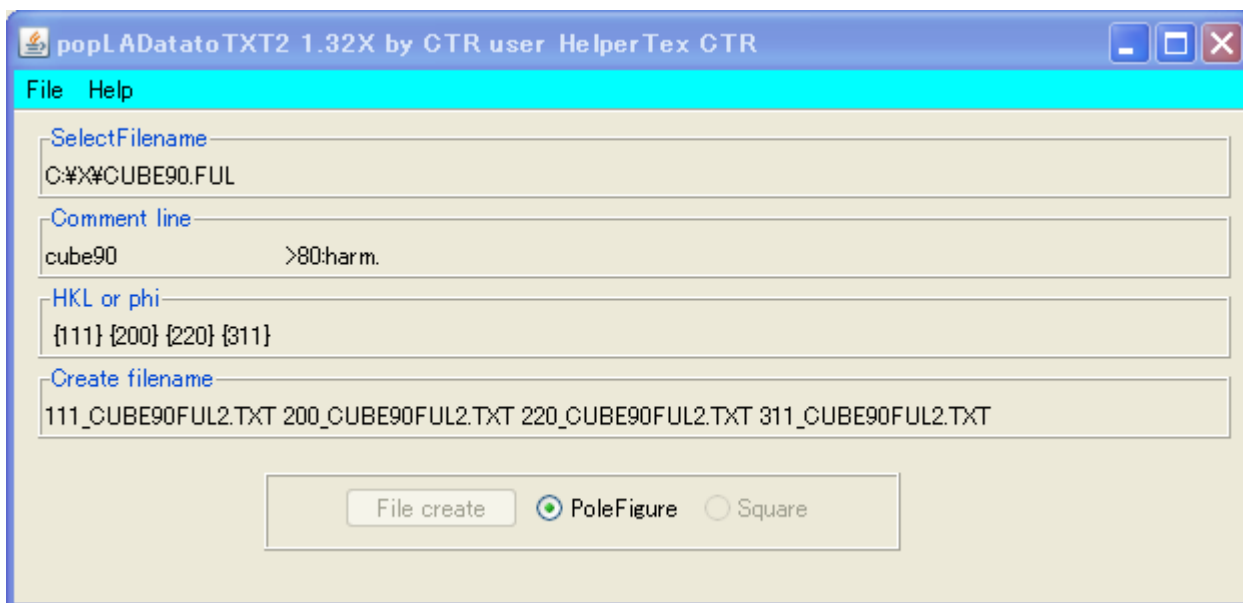
#### 標準退避ファイル

- "OUTPUT1.TXT", 1/4 極点図データ、偶数項の係数 C、極点図の誤差など
- "OUTPUT2.TXT", 再計算極点図の値、偶数項 ODF の値、逆極点図の値など
- "OUTPUT3.TXT", 奇数項の係数 C、奇数項を含む完全 ODF の値など
- "Outmax.txt", 完全 ODF および偶数項 ODF の最大強度、再計算極点図の最大強度・個数・面指数
- "ODF13", 再計算極点図のデータ
- "ODF14", 偶数項 ODF のデータ
- "OUT15", 完全 ODF のデータ
- "ODF16", 逆極点図のデータ
- "EVNCOEF", 偶数項の展開係数
- "ODDCOEF" 奇数項
- Dtcubin1.txt ValueODF 対策
- Output10.txt ValueODF 対策

popLA の Harmonic、WIMV 双方の ODF 図の表示 **ODFDisplay**、

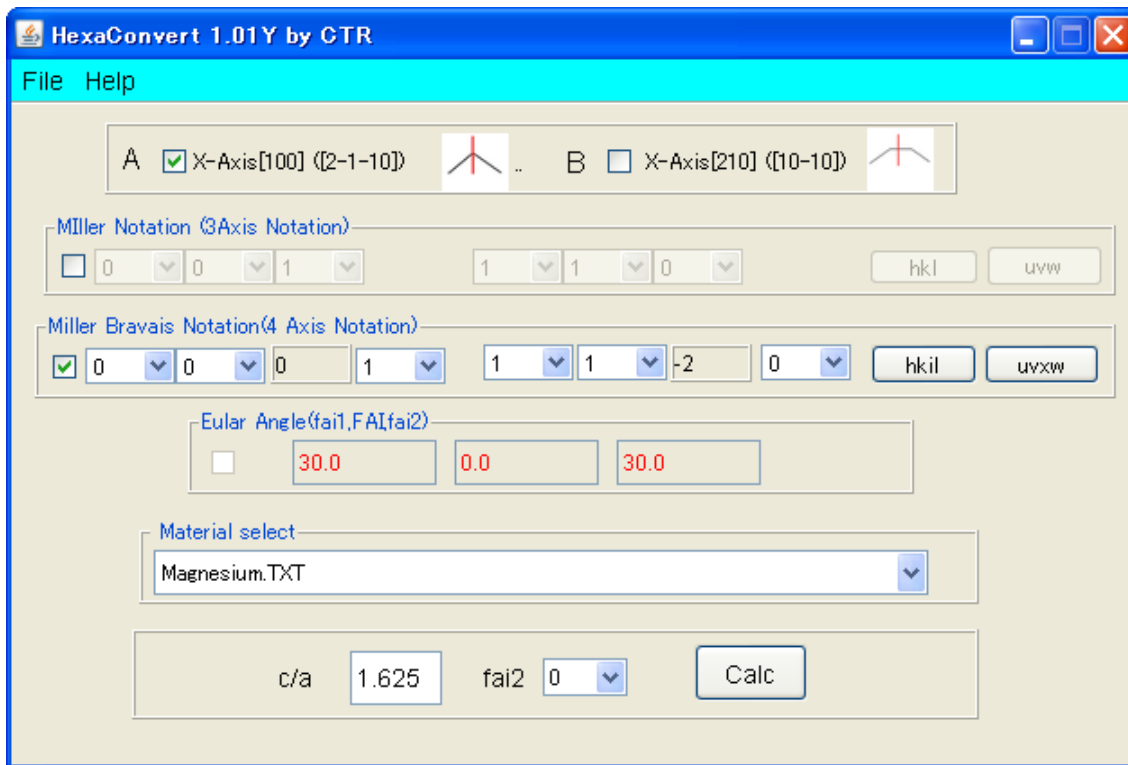


極点図の表示 **popLADatatoTXT2**



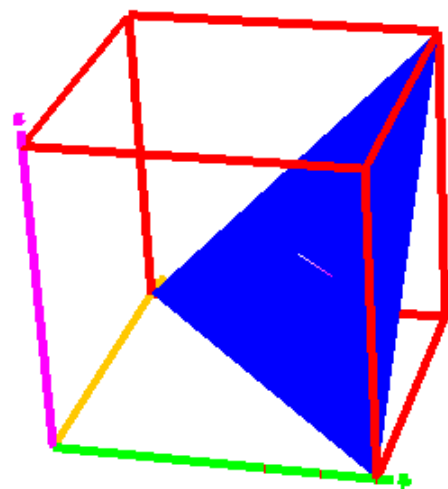
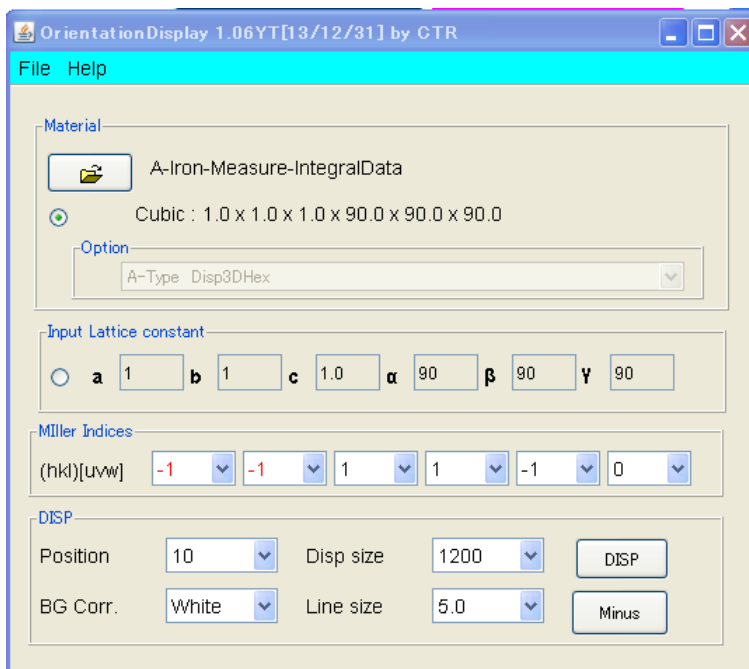
六方晶 3 指数  $\langle \cdot \cdot \cdot \rangle$   $\leftrightarrow$  4 指数変換、X 軸  $\langle 10\bar{1}0 \rangle$

或いは  $\langle 210 \rangle$  と  $\langle 2\bar{1}\bar{1}0 \rangle$  或いは  $\langle 100 \rangle$  の切り替えを行う **HexaConvert**



4 指数  $\{0001\}\langle 11\bar{2}0 \rangle$  を X 軸  $\langle 2\bar{1}\bar{1}0 \rangle$  で 3 指数変換、及び ODF の Euler 角度計算、結晶方位図描画

全結晶系の結晶方位図を表示



# 体心正方晶から面心正方晶への変換ツール TetragonalBtoA

The screenshot displays the 'TetragonalBtoF Ver1.00' application window. It features two main input sections:

- Select Tetragonal Body center:** Contains a 'Material' button, the text 'zirconialow-01-070-7302DISP', and a 'Disp' button. Below this, the lattice parameters are listed: 3.5781 3.5781 5.1623 90.0 90.0 90.0.
- to Face Center Tetragonal:** Contains a 'Calc' button and the resulting lattice parameters: 5.0602 5.0602 5.1623 90.0 90.0 90.0.

Below the application window, two 'TextDisplay' windows show the output data:

zirconialow-01-070-7302DISP  
Tetragonal

```

3.5781 (1.0)
3.5781 (1.0)
5.1623 (1.4427)
90.0
90.0
90.0
1.54056
42
1 0 1 100.0 30.369
0 0 2 28.8 34.726
1 1 0 13.3 35.45
1 0 2 1.3 43.181
1 1 2 12.0 50.468
2 0 0 17.8 51.005
2 0 1 0.1 54.217
1 0 3 12.3 59.565
2 1 1 23.2 60.526
2 0 2 14.9 63.184
2 1 2 0.3 68.995
0 0 4 1.8 73.289
2 2 0 4.3 75.019
1 0 4 0.2 78.764
2 1 3 8.3 82.195
3 0 1 4.0 83.034
1 1 4 3.3 84.136

```

zirconialow-01-070-7302DISP  
Tetragonal

```

5.0602 (1.0)
5.0602 (1.0)
5.1623 (1.0202)
90.0
90.0
90.0
1.54056
42
1 1 1 100.0 30.369 2.941
0 0 2 28.8 34.726 2.581
2 0 0 13.3 35.45 2.53
1 1 2 1.3 43.181 2.093
2 0 2 12.0 50.468 1.807
2 2 0 17.8 51.005 1.789
2 2 1 0.1 54.217 1.69
1 1 3 12.3 59.565 1.551
3 1 1 23.2 60.526 1.528
2 2 2 14.9 63.184 1.47
3 1 2 0.3 68.995 1.36
0 0 4 1.8 73.289 1.291
4 0 0 4.3 75.019 1.265
1 1 4 0.2 78.764 1.214
3 1 3 8.3 82.195 1.172
3 3 1 4.0 83.034 1.162
2 0 4 3.3 84.136 1.15

```

## EBSD 測定データを LaboTex の入力データに変換する EBSDtoLaboTex

EBSDtoLaboTex 1.01X by CTR user HelperTex CTR

File Help

Lattice constant

Structure Code(symmetries after Schoenflies) 7 - O (cubic)

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

Step for output ODF 5.0 Weight for data 1-present Angle Unit 0-deg Angle Convention 0-Bunge

Input data format

Check data Line 10 Select file 4 Select ID 1

No of data Line

Out data Line 6 P1 11 F 13 P2 12

Comment

Start

OxFord,OIM (TSL) に対応しています。

## Lotgering手法を実現するLotgeringソフトウェア

材料表面の面分布としては、昔から逆極点手法が用いられていますが、計算方法が若干異なるLotgering法も用いられている。本ソフトウェアは連続測定データから簡単な操作でExcelで読み込めるリスト表示を行います。

