市販ソフトウエアを用いて極点図の等高線描画

# MakeODF13ソフトウエア

Ver.1.00M



2016年09月12日



http://www.geocities.jp/helpertex2

極点図の等高線描画は、X線回折装置メーカから販売されている極点データ処理を用いる事が 一般的であるが、測定装置付属のコンピュータから離れると、描画出来ません。 このような状況でも、極点図の等高線描画が出来ないか、検討してみました。 思い付くのは、ODF処理の極点図描画機能を用いる事です。

持ち帰るデータ

リガクの場合ASCデータ、



バックグランド削除、defocus 補正、規格化を行う。

CTRパッケージの ODFPoleFigure2 ソフトウエアを用いる。



上記データ用いて等高線極点図を表示する。

ODF

StandardODFでODF解析せずに、ODFPLOTソフトウエアで描画 TexToolsでODF解析せずに、極点図の描画 LaboTexでODF解析せずに、極点図の等高線描画

注意: ODF解析を行えば、完全極点図の等高線表示が可能になります。

#### StandardODFでODF解析せずに、ODFPLOTソフトウエアで描画

## MakeODF13ソフトウエアでC:¥ODF¥ODF13ファイルを作成

MakeODF13 1.00T[15/10/31] by CTR	
File Help	
Path C:\CTR\DATA\ODFPol	eFigure S_2.TXT_200-OSC_chR0B00D1S_2.TXT_220-OSC_chR0B00D1S_2.T
Out PoleFigure	
Miller Index 1,1,1 2,0,0 2,2	0 3,1,1 ODF13Create
Max PoleFigure 9.45	
第二章 等高線描画 ODFPLOT を用いて等高線描画	
RD	RD
{111}	{200}
RD (Q) (Q) (Q) (Q) (Q) (Q) (Q) (Q) (Q) (Q)	
{220}	{311}

Contour Levels: 0.5 1.0 1.5 2.0 2.5 3.0 3.5 4.0 4.5 5.0 5.5 6.0 6.5 7.0 7.5

#### 表示は、1/4対称で表示される。

完全極点図として表示されるので、測定されていない領域と測定されている境界が不自然

TexToolsでODF解析せずに、極点図の描画

Τοοι	sの Rotate Pole Figure を用いる
1001	

💞 ResMat - TexTools	Rotate Pole Figure		X
Calculation Info.			Rotation Options       (Degree)       Along X (RD)       0       Along Y (TD)       0       Along Z (ND)       0
Defocus file Selec			Rotate Pole Figure
P-D0 (C:) ● Defocus			Save As
ント ント	Max. = 0	Max. = 0	Close

Load Pole Figure File で表示データを選択

Max. = 3.51



Min. = 0.00

Max. = 2.22

(TOD)

Min. = 0.00

LaboTexでODF解析せずに、極点図の等高線描画

LaboTexでODF解析の為にデータを読み込み、入力極点図を表示

RD 111 CPF TD





8.0 7.2 6.3 5.5 4.7 3.8 3.0 1.9 1.6 1.4 1.1 0.8 0.5 0.3 Min=0.313 Max=8.729 2015/02/01

1/4対称操作を行った場合







A14

RD



## MakeODF13ソフトウエアの使い方

# ASCデータからTXT2ファイルの作成

# ODFPoleFigure2、ODFPOleFigure1.5 ソフトウエアでバックグランド除去、defocus 補正を行う

📓 (1,1,1)8207.6 🔹 🗖 🗙 📓 (2,0,0)6890.0 📮 🗖 🗙 📓 (2,2,0)2068.4 📮 🗖 🗙 📓 (3,1,1)1445.4 💽 🗙
M ODFPoleFigure2 3.36YT115/10/31] by CTR
File Linear(absolute) ToolKit Help InitSet BGMode Measure Condition Free OverlapRevision MinimumMode
ASC(RINT-PC) V 111-OSC ASC 200-OSC ASC 211-OSC ASC
Calcration Condition Previous Next CXOTR¥DATA¥O DFPoleFigure¥111-OSC.ASC Backgroud delete mode @ O DoubleMode O SingleMo ClowMode O HighMode O Nothing BG defocus DSH12mm+Schulz+RSH5mm V Minimum mo. Peak slit 70 mm BG Slit 70 mm V PeakSlit / BGSlit BG Scope 800 deg. 900 deg. Set Disp V -5 Interporation V Full Disp
Absorption coefficien 13.9 1/cm Thickness 0.1 cm 🕑 2Theta 38.42 deg.   1/Kt Profile
Defocus file Select         Image: Comparison of the comparison
O Defocus (3) function files folder (Calc unbackdefocu. BB185mm
Uerocus 2/ function files folder value backdetocus/ DSH12mm+Schulz+RSH5mm
Standardize OutFiles Cycles 2 V Weight 4 Disp V OAsc O Ras O TXT O TXT2 Cancel Calc Exit&ODF ODF

### CalcでTXT2ファイルが作成される。

#### ToolKitからStandardODFToolsからMakeODF3を選択

StandardODFTools 1.02XT[15/10/31] by CTR			
File Help			
Calc files ODF15 etc.	StandardODFExportInport	Export Inport	
ODF15	ODF15toTXT	ODF15 TXT format	
TXT2- TXT2Format files	MakeODF13	DDF13,OutMax.TXT	

MakeODF13 1.00T[15/10/31] by CTR	
File Help	
TXT2 Select	
FileName	
Cout PoleFigure	
Miller Index ODF13Create	
Max PoleFigure 0.0	
<u> </u>	

#### TXT2ファイルを選択する。

MakeODF13 1.00T[15/10/31] by CTR
File Help
TXT2 Select         Path       C:\CTR\DATA\ODFPoleFigure         FileName       111-OSC_chR0B00D1S_2.TXT         200-OSC_chR0B00D1S_2.TXT       220-OSC_chR0B00D1S_2.TXT
Out PoleFigure           Miller Index         1,1,1         2,0,0         2,2,0         3,1,1         ODF13Create           Max PoleFigure         9,45

最大極密度が表示されます。ODF13CreateKeyで、準備が完了します。

MakeODF13 1.00T[15/10/31] by CTR	×
File Help	
Path       C:\CTR\DATA\ODFPoleFigure         FileName       111-OSC_chR0B00D1S_2.TXT       200-OSC_chR0B00D1S_2.TXT       220-OSC_chR0B00D1S_2.TXT       311-OSC	
Out PoleFigure           Miller Index         1,1,1         2,0,0         2,2,0         3,1,1         ODF13Create           Max PoleFigure         9,45	
ODF13 and OutMax.TXT files create !!	

C:¥ODF ホルダーの ODF13, Outmax.txt データが書き換えられています。

このファイルから極点図描画は、StandardODF 付属の ODFPLOT を使用します。



ODF 解析の場合は、PFtoODF3 ソフトウエアを介して ODFCALC を用います。

ODF/PF Plotting       Contour         ODF/PF       1. Complete ODF with odd term         2. Even term ODF       3. Recalculated pole figures         4. Inverse pole figures       ODF         5. Measured pole figures       © Phil Section
Levels
Number 9 Interval 1
Level 1 1.0 Level 2 2.0 Level 3 3.0 Level 4 4.0 Level 5 5.0
Level 6 6.0 Level 7 7.0 Level 8 8.0 Level 9 9.0 Level 10
Level 11 Level 12 Level 13 Level 14 Level 15
Figure Normal Drawing OK Cancel

Number と Interval は、MakeODF13 ソフトウエアが表示している最大極密度を参考にします。





Contour Levels: 1.0 2.0 3.0 4.0 5.0 6.0 7.0 8.0 9.0