

ODF 解析結果の評価を行う

V a l u e O D F V F ソフトウェア

Ver.2.36

2020年07月10日



HelperTex Office

変更履歴

* 2007/08/15

- * Ver1.72 2008-12-05 GetHomeDir()対応
- * Ver1.730 2009-03-12 HELP
- * Ver1.740 2009-10-30 StandardODF dir set
- * Ver1.742 2010-01-06 コメントを外す。
- * Ver1.743 2010/06/28 gc()
- * Ver1.744 2010/09/13 PrintDisplay のサポート
- * Ver1.745 2010/09/17 日時不正使用防止策
- * Ver1.746 2010/09/26 日時不正使用防止策設定ミス修正
- * Ver1.747 2011/01/23 repaint()
- * Ver1.80X 2013/03/16 権限変更 limit は 13/03/31
- * Ver1.82X 2013/06/15 TExTools の表示で比較データがずれてしまう。
- * Ver1.83X 2014/04/01 Rp%追加
- * Ver1.84X 2014/04/23 LaboTex 以外の R p %の規格値を indata->outdata に変更
- * Ver1.85X 2014/04/23 NewODF のサポート
- * Ver1.86X 2014/04/29 LaboTex TPF ファイルのデータ繋がり対策
- * Ver1.86X 2014/04/29 NEWODF Rp%見直し
- * Ver1.87X 2014/07/03 LaboTex, TexTools step 1.0 2.5 5.0 に対応
- * Ver1.88X 2014/10/23 LaboTex step 2.0 に対応
- * Ver1.88VF 2014/11/26 RecalcPoleFigure/VFPoleFigure をサポート
- * Ver2.00VF 2014/12/03 Ver2.00VF で計算方法統一、データ点数 2 点に規格化
- * Ver2.01VF 2014/12/30 NEWODF で等面積追加
- * Ver2.02VF 2015/03/16 入力ファイルのタイムスタンプ check
- * Ver2.03VF 2015/05/02 LaboTex の極密度 3 ケタ対応
- * Ver2.04VF 2015/08/22 getVFdata()の計算修正
- * Ver2.05VF 2015/08/25 RD->ND のように軸変換した ODF 図と VolumeFraction の Error 評価
- * Ver2.06V 2015/09/29 LaboTex TPF ファイルによる外部起動の実現 (CTRODF より)
- * Ver2.07VF 2015/10/11 外部起動以外 error、入力データ 8 -> 9 で 2 D P 対応
- * 2015/10/19 Rp%の Average を表示
- * Ver2.08VF 2015/10/22 LaboTex の TPF ファイル 2 つ選択の場合、
zero 判断を limit が片側で valueODFCalc.setTwin()
- * Ver2.09VF 2016/01/27 popLA のサポート
- * Ver2.10VF 2016/02/28 外部起動時,resultb.EPF 追加
- * Ver2.11VF 2016/05/05 VF 時 2 つのファイル名表示とホルダ表示の ON-OFF
- * Ver2.12VF 2016/12/23 RigakuODF を StandardODF 計算処理を流用
- * Ver2.13VF 2017/01/21 VolumeFraction 評価時、index の並び不良修正
- * Ver2.14VF 2017/02/22 入力極点図、再計算極点図、残差極点図を表示 (LaboTex, TexTools, StandardODF)
- * Ver2.15VF 2017/03/24 外部起動から LaboTex の VF モードサポート (Step=5.0 のみ)
- * Ver2.15VF 2016/03/26 TexTools 時、極点図の中心データ表示されない修正
- * Ver2.16VF 2017/03/26 TexTools 完全極点で極点図の中心評価がされていない修正
- * 2017/03/27 LaboTexIndex 対策 L+aboTexTpfRead().checkm()

- * 2017/03/29 LaboTex Monoclinic などの指数対策
- *Ver2.18 2017/10/12 等面積の場合、極点図の中心は1点の比較,Expand 修正
- *Ver2.19 2017/11/16 TexTools ホルダ名変更、再計算極点関数が多いに対応
- *Ver2.20 2018/01/29 MTEX データに対応
- *Ver2.22 2018/09/14 {200}{020}の区別のため、指数を得る関数内の gcd0 を外す。
- *Ver2.23 2019/02/07 画面サイズ変更なし、日時表示
- *Ver2.34 2019/02/11 MTEX Hexagonal 再計算極点図ファイル名が4指数対策 _(hkil)
- *Ver2.35 2019/03/08 MTEX ステップ間隔 2.5deg に対応
- *Ver2.26 2019/07/03 MTEX ASC データを反転して読み込む
- *Ver2.27 2019/07/29 TexToolsCW 対策
- *Ver2.28 2019/09/03 追加 defocus 処理による TXT2 作成
LaboTex, TexTools, StandardODF, MTEX に対応、必要な場合追加します。
- *Ver2.28 2019/09/10 MTEXR p % プロファイル修正
- *ver2.30 2019/09/24 再計算 Defocus+吸収補正
- *Ver2.31 2019/10/10 TXT2 をサポート
- *Ver2.33 2019/12/09 MTEX の stdNorm を外す
- *Ver.2.34 2019/12/29 再 defocus 計算の次数を5から auto に変更
- *ver2.35 2020/07/10 MTEX3deg に対応
- *ver2.36 2022/04/06 NEWODF(SmartLab)対応

目次

1. 概要
2. Rp%の計算方法
3. ソフトウェアの起動
4. ソフトウェアの使い方
5. LaboTexの場合
6. TexToolsの場合
7. StandardODFの場合
8. LaboTexのVolumeFraction解析の場合
9. NEWODFの場合
10. RD→ND変換のND変換したODF図とそのVolumeFraction結果
11. LaboTexのTPFファイルによる外部起動
12. 2次元検出器を用いた極点測定をLaboTexでODF解析した場合のRp%
 - 12.1 Rigakuの2DPでFEを解析する場合
 - 12.2 random試料からdefocusファイルの作成
 - 12.3 配向試料のdefocus補正
 - 12.4 LaboTex向けEPFファイルを作成
 - 12.5 LaboTexで読み込み
 - 12.6 極点図をExportしてRp%の細部を確認
13. 外部起動
14. popLAの場合
15. 入力極点図、再計算極点図、残差極点図の表示
16. LaboTexのMonoclinicなどの指数変換
17. MTEXODFの場合
18. 再計算defocus処理
 - 18.1 吸収を含まない場合
 - 18.2 吸収を含む場合
19. TXT2の場合

1. 概要

極点処理やODF解析はブラックボックス的で解析結果の評価が難しい。

このため、複数のODF解析を比較する為にValueODFソフトウェアを作成していたが機能追加を機会に、評価方法を変更して、新しいソフト名に変更しました。

極点図測定には各種errorが存在しています。

例えば非晶質などのバックグラウンド、近接する他の回折線、試料取り付け、光学系の調整不良、試料の厚さによる回折に寄与する試料体積の変化、試料を煽って測定するために発生するdefocusなどが考えられます。

ODF解析では、解析手法によるerrorが考えられます。

このような問題がある状態で、極点処理結果や、ODF解析結果のerrorを評価しないで利用する事は危険です。

本ソフトウェアは、

ODF解析した結果の再計算極点図と入力極点図の比較

VolumeFraction解析した結果の再計算極点図とODF解析結果の再計算極点図の比較

を行い、ODF解析結果のerrorと見比べる事で、最終解析結果の信頼性を再評価出来ます。

2. Rp%の計算方法

極点図比較は極点図の β 方向の平均値を算出し、 α 方向のプロファイルを作成する

このプロファイルの比較方法として2種類の計算方法を採用している。

等角度極点図

測定極点図 (α 、 β) を一律に扱う

等面積極点図

測定間隔を $1/2$ としデータを拡張し、極点図の中心と外側 ($\alpha = 0, 90$) を $1/2$ の重みとし、且つ、 $\sin(\alpha)$ の重みを付けて計算

比較する場合、入力極点図は完全極点図ではない為、比較する範囲で極密度の規格化を行う。

極点図では若干の位置ずれを伴う為、計算結果は絶対値ではなく単純の加算を行う。

又極密度の低い部分の影響を避けるため、計算に用いるデータには計算限界を行う。

極点図の β 方向の平均値プロファイルを $d10$ 、 $d20$ とした場合

計算限界 $limit = (\Sigma d1 + \Sigma d2) / 2 / n / 3$ とし

この値より β 方向の平均値が低い場合、信頼性を考え最小値を $\Sigma Rp\%$ に加算する。

$m = d1 / d2$ (規格化を行わない場合、 $m = 1$)

$\Sigma Rp\% = \Sigma (d1() - d2() * m) / d1 * 100$

$Rp\% = \Sigma Rp\% / n$

ただし n : 平均化データ点数

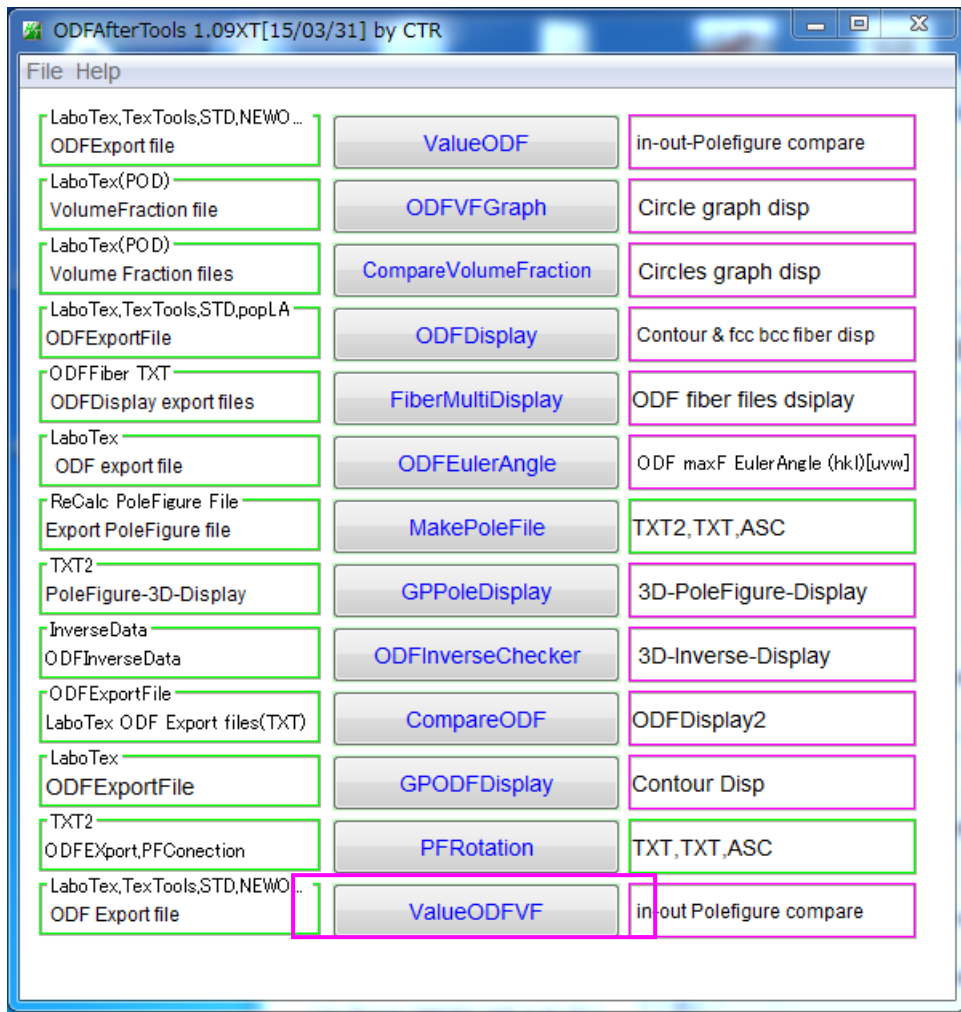
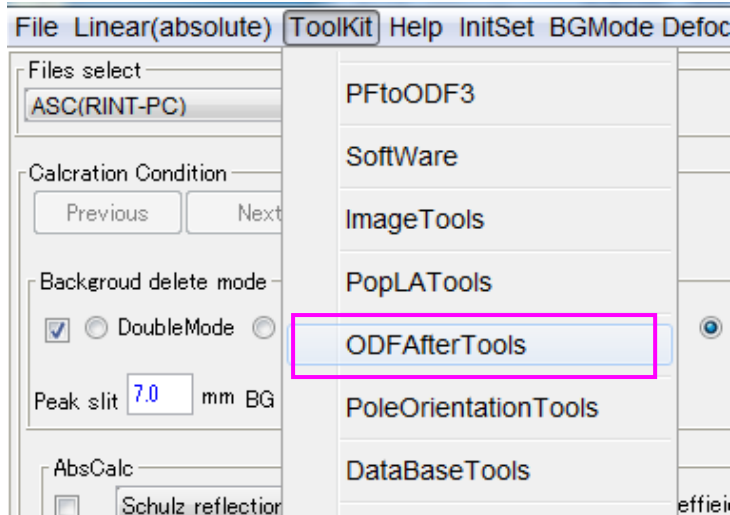
VolumeFractionのRp%では、特定されていない方位はrandomになるため、

ベースラインが上がる可能性がある為、 $d1()$ 、 $d2()$ の片側が計算限界以下で最小値とする。

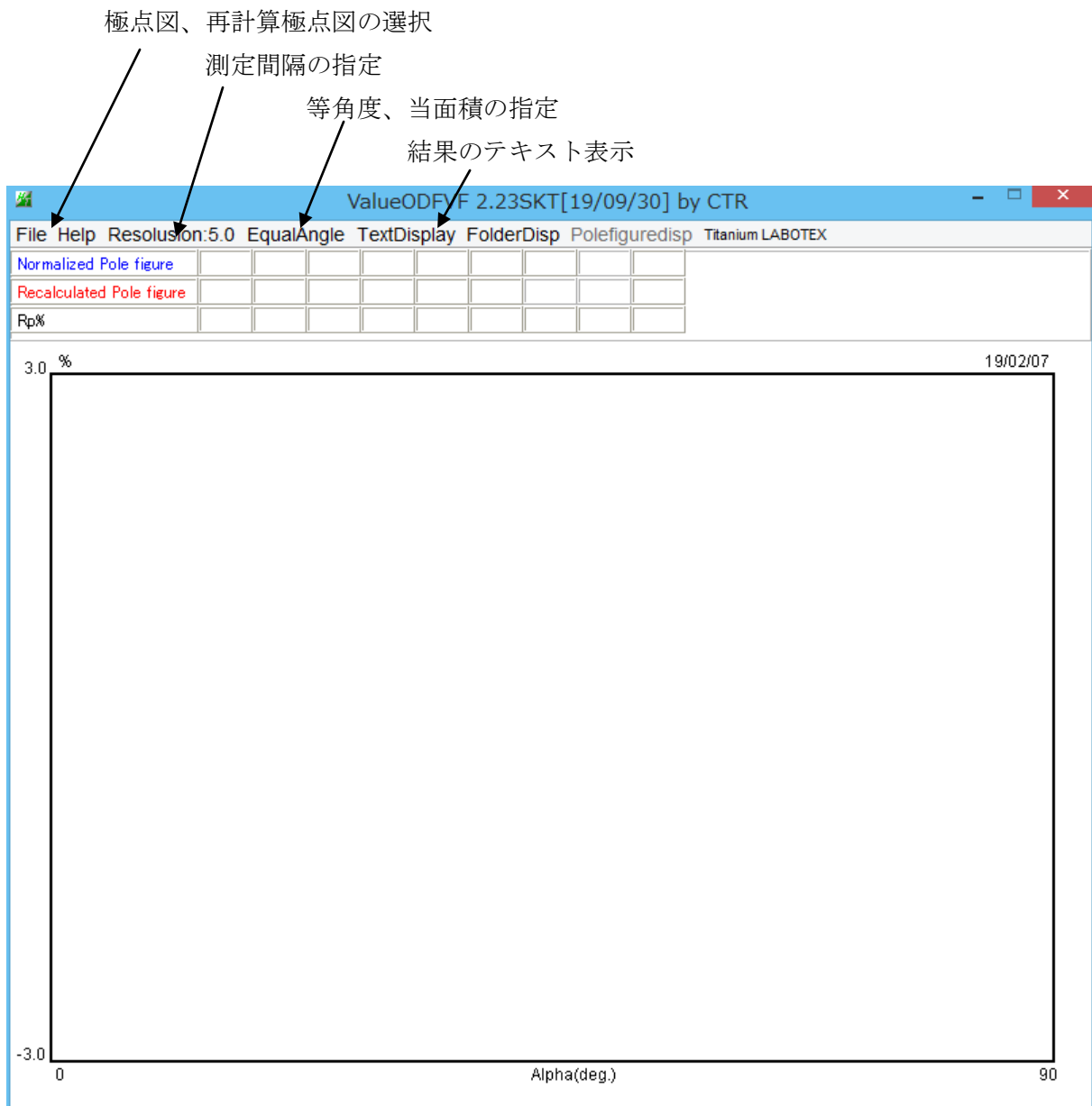
3. ソフトウェアの起動

以下の2方法

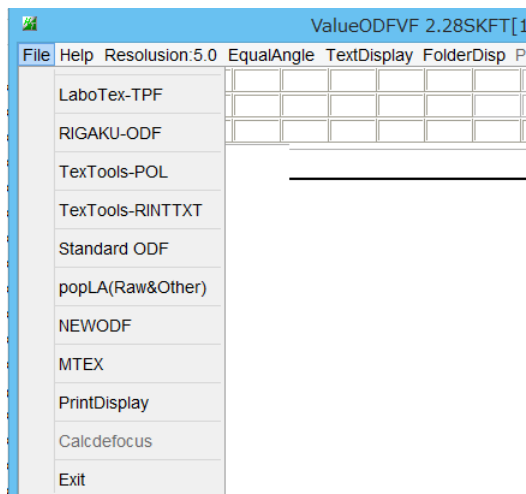
- 1) C:\¥CTR¥bin¥ValueODFVF.jar のダブルクリック
- 2) ODFPoleFigure2(Toolkit)->ODFAfterTools->ValueODFVF を選択



4. ソフトウェアの使い方



File で ODF 別ファイルを選択



LaboTex PFExport ファイル指定
VF の場合、2つの Export ファイル指定

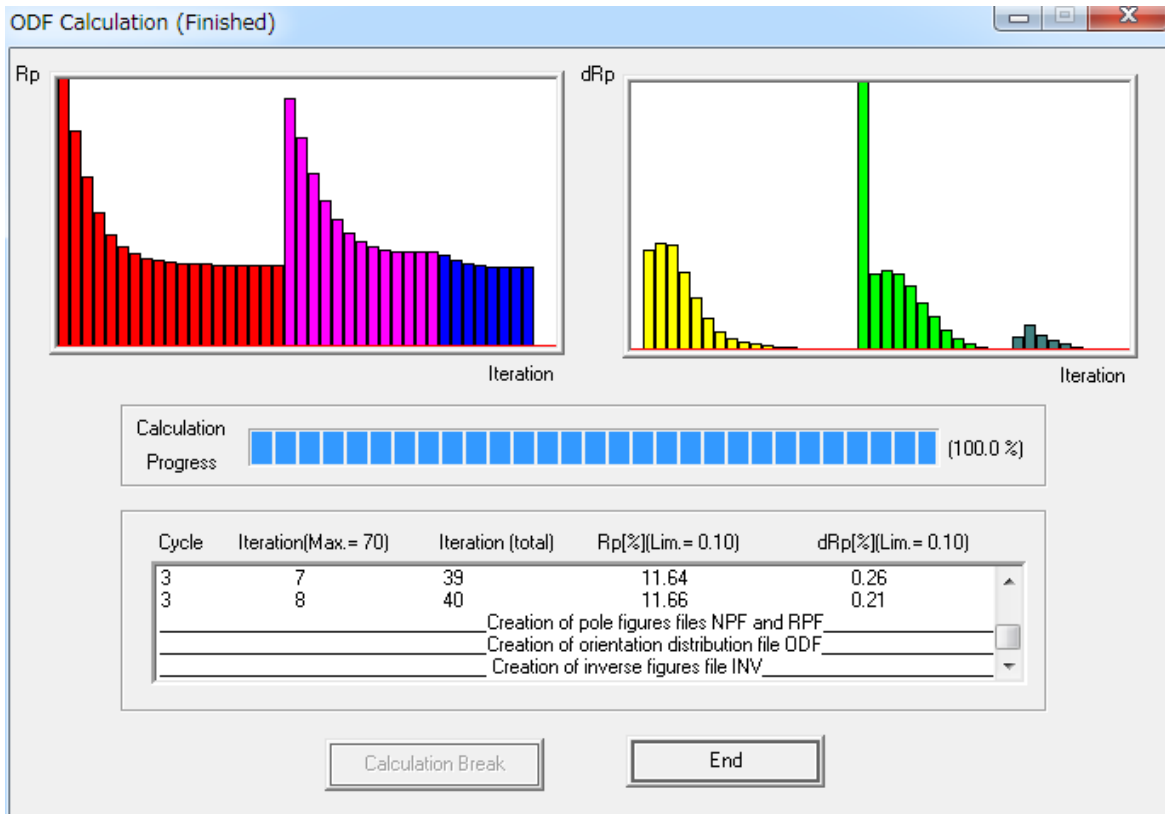
TexTools 作業ホルダ指定

StandardODF 作業ホルダ指定
Rigaku-NEWODF

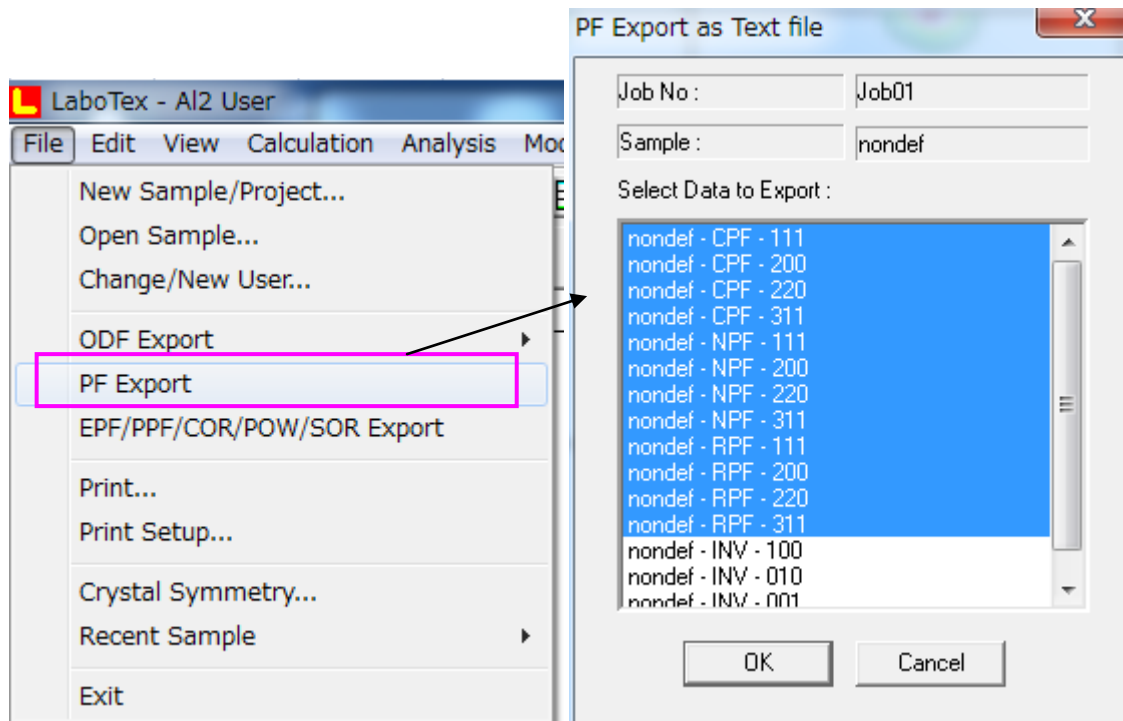
C:\¥CTR¥DATA¥ODFPoleFigure データを用いた場合

5. LaboTex の場合

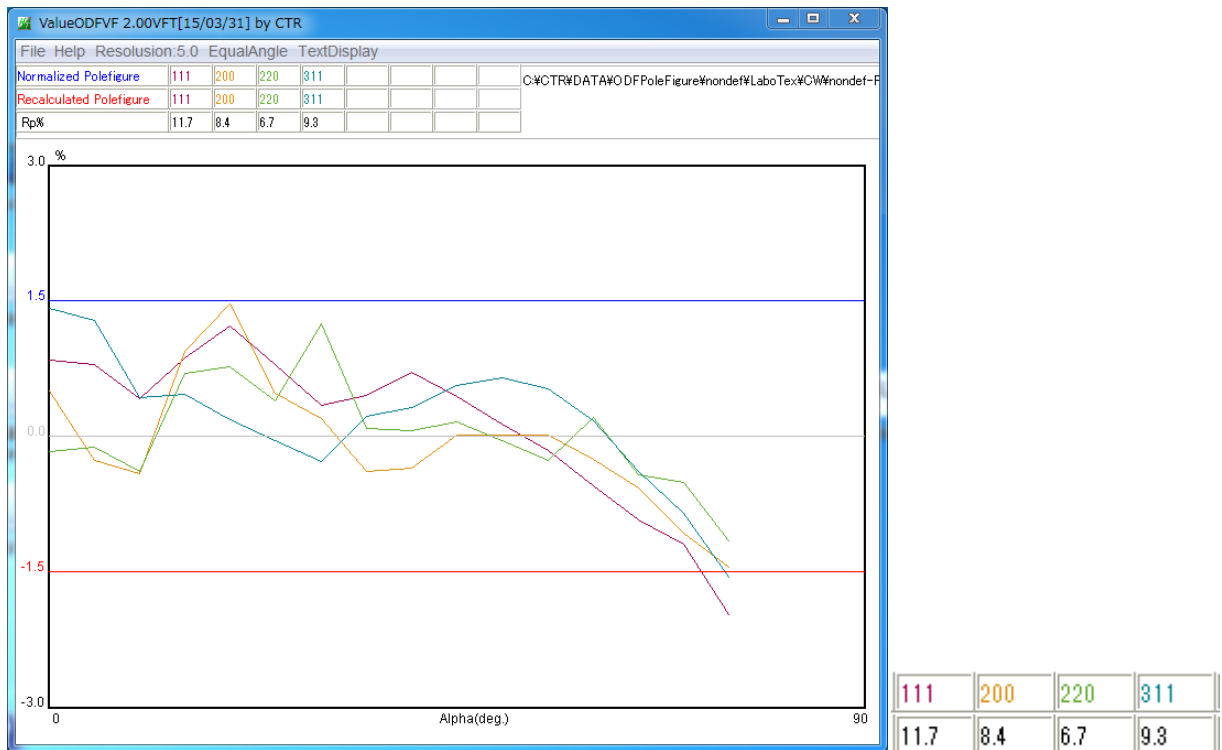
Defocus 補正なし



Rp %が大きい値を示すが、このままでは理由が分からない。
極点図のExportを行う。



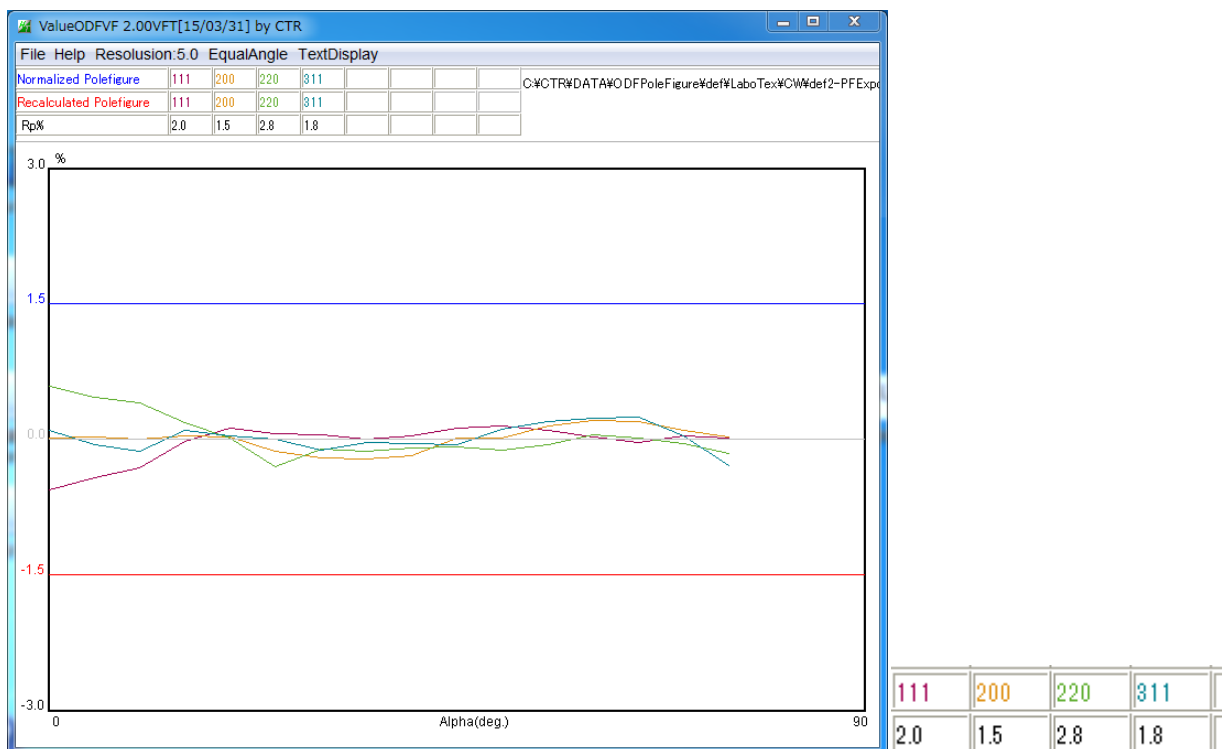
ValueODFVF で表示



Defocus 補正を行った場合

Cycle	Iteration(Max. = 70)	Iteration (total)	Rp[%](Lim. = 0.10)	dRp[%](Lim. = 0.10)
3	51	119	3.57	0.11
3	52	120	3.56	0.10
3	53	121	3.56	0.10

Creation of pole figures files NPF and RPF
Creation of orientation distribution file ODF



Defocus 補正が不十分の場合、極点図の外周部分で入力極点図の極密度が低い事が分かります。Defocus が不十分な場合、ODFPoleFigure2 ソフトウェア (Ver3.35 以降) で補正量の調整が行えます。

6. TexTools の場合

ODF 解析の Error は ODF 解析出力ファイルに登録される。

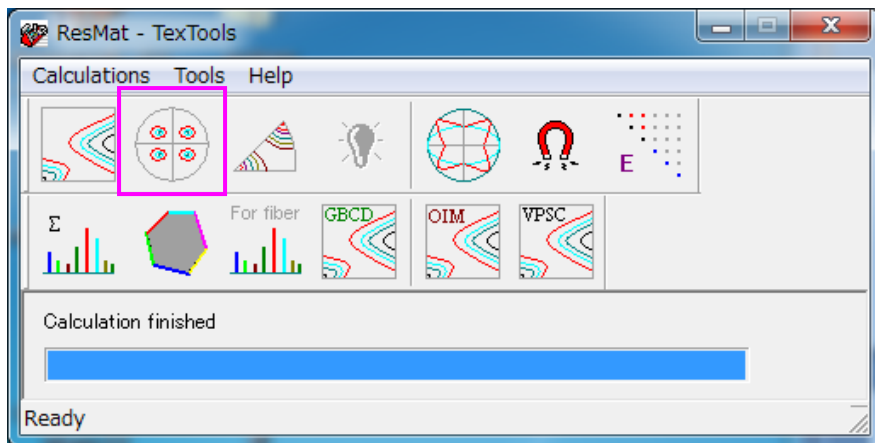
```

Text Format of ODF File (Arbitrary Resolution) xxxxxxx (by ResMat)↓
19      19      19↓
0↓
1.00    1.00    1.00    90.00  90.00  90.00↓
4↓
C:\CTR\DATA\ODFPoleFigure\nondef\TexTools\textools111_0.pol↓
C:\CTR\DATA\ODFPoleFigure\nondef\TexTools\textools200_1.pol↓
C:\CTR\DATA\ODFPoleFigure\nondef\TexTools\textools220_2.pol↓
C:\CTR\DATA\ODFPoleFigure\nondef\TexTools\textools311_3.pol↓
1      1      1      ↓
2      0      0      ↓
2      2      0      ↓
3      1      1      ↓
1↓
5.00↓
1↓
0↓
2↓
3      3↓
0.0100 0.1683↓
0.0↓
15.4325 13.5821 9.7437 6.4157 4.4804 3.5254 3.0184 2.6665 2.4458 2.3737
2.4856 2.7258 3.0760 3.5288 4.3995 6.2312 9.3845 13.0053 14.7545 ↓
13.6164 12.0188 8.7816 5.8948 4.1551 3.2764 2.7961 2.4894 2.3023 2.2591
2.3637 2.5825 2.8678 3.2628 3.9729 5.4615 7.9519 10.7949 12.1790 ↓

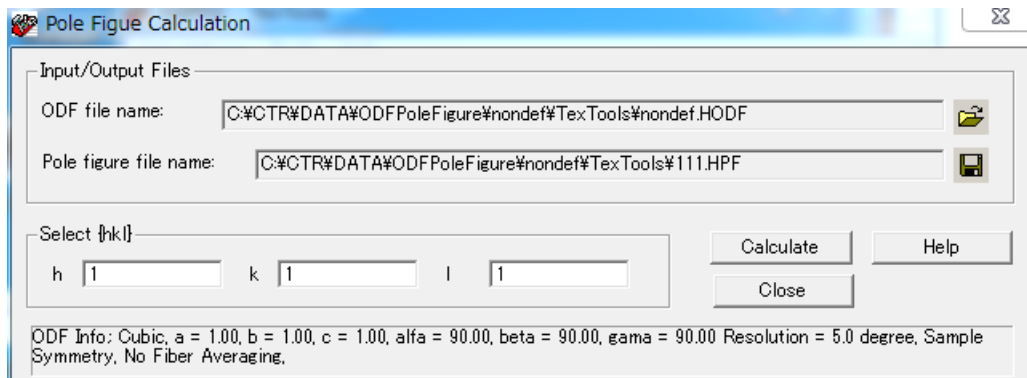
```

目標 error が 0.01 に対し、0.1683 で有った事が登録されています。

ODF 解析後、入力極点図と同一の再極点図を予め作成する。



入力極点図と同一指数で極点図を作成する



textools111_0.pol	2014/12/03 16
textools200_1.pol	2014/12/03 16
textools220_2.pol	2014/12/03 16
textools311_3.pol	2014/12/03 16
nondef.HODF	2014/12/04 8:5
111.HPF	2014/12/04 8:5
200.HPF	2014/12/04 8:5
220.HPF	2014/12/04 8:5
311.HPF	2014/12/04 8:5

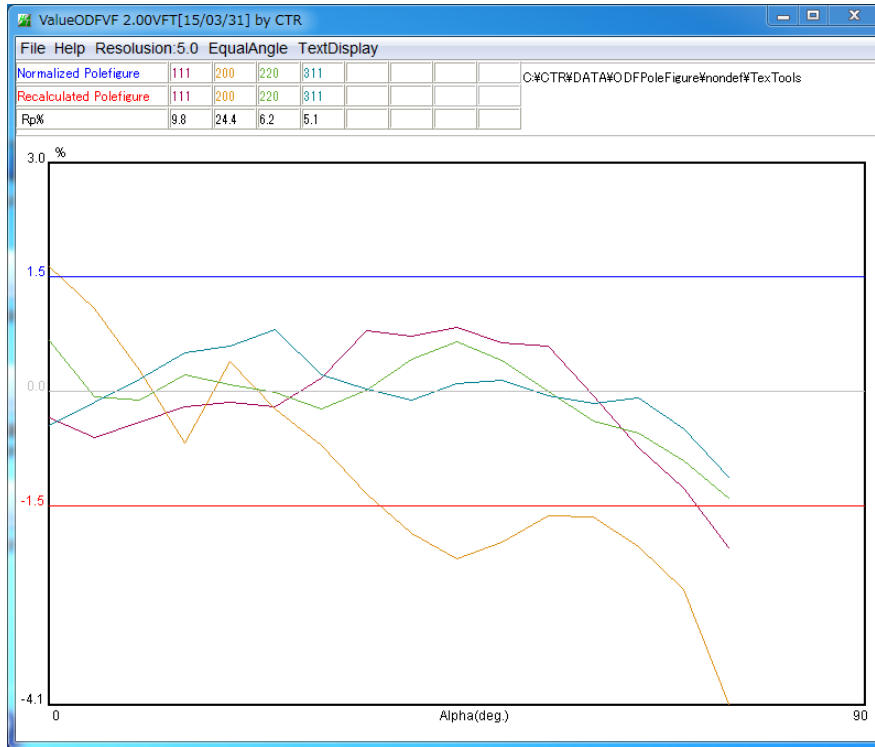
入力極点図は
111,200,220,311
再計算極点図は
111,200,2220,311
で同一にしています。

Pol ファイルと HPF ファイルは対になっていなければなりません。

TextTools の比較(作業ホルダを選択する)

Defocus 補正なし

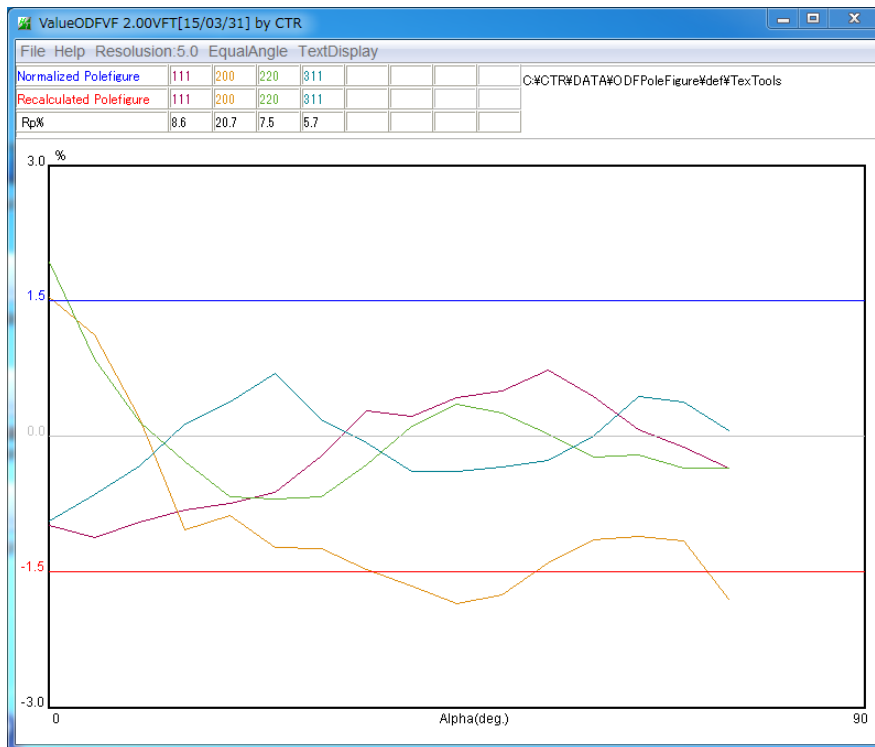
$\bar{0}.0100$ $\bar{0}.1683\downarrow$



111	200	220	311
9.8	24.4	6.2	5.1

Defocus 補正あり

0.0100 $0.1296\downarrow$

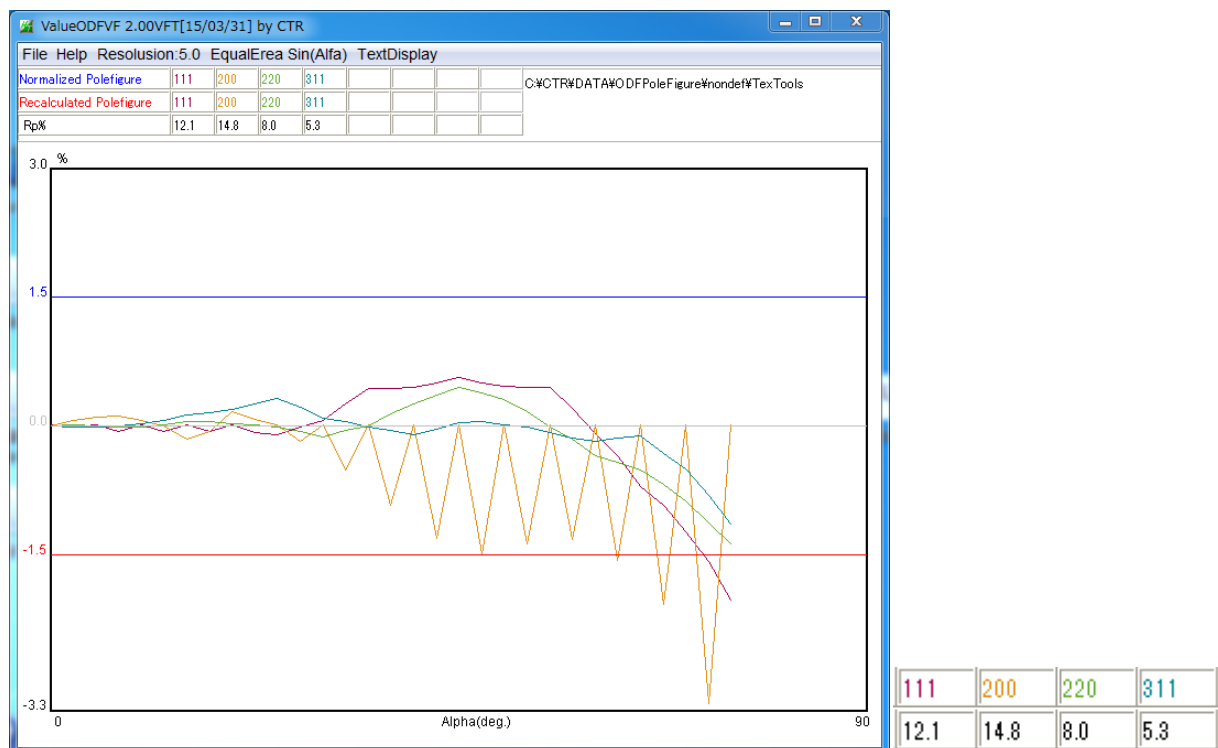


111	200	220	311
8.6	20.7	7.5	5.7

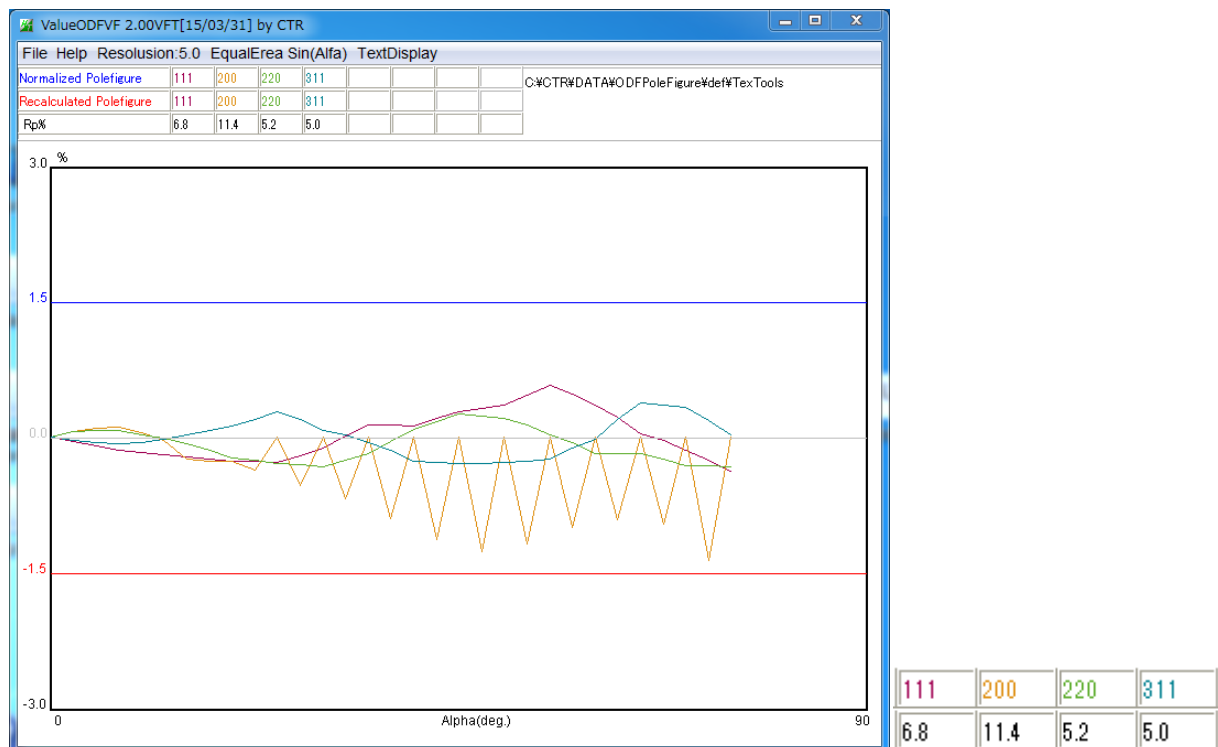
{200} 極点図に大きな違いが計算されているが、Cube 方位が高い場合、{200} 極点図の他の方位位置が、相対的に低くなるので、sinの重みで計算する等面積で計算する。

Textools を等面積で比較

Defocus 補正なし



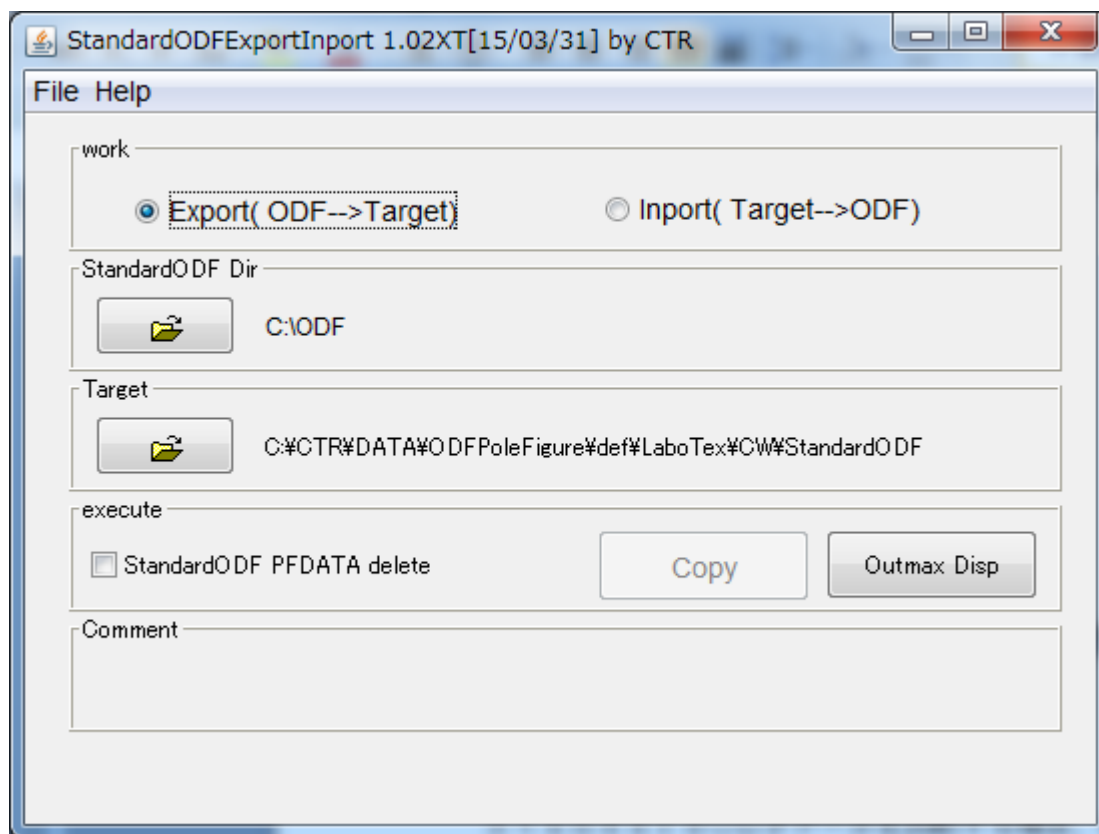
Defocus 補正あり



極点図の中心を外すと計算限界の値が{200}極点図に交互に出現している事が分かります。

7. StandardODFの場合

StandardODFデータを比較する場合、C:\¥ODFホルダが共通の為、解析結果が上書きされます。StandardODFExportInport ソフトウェアで作業領域を対して比較します。



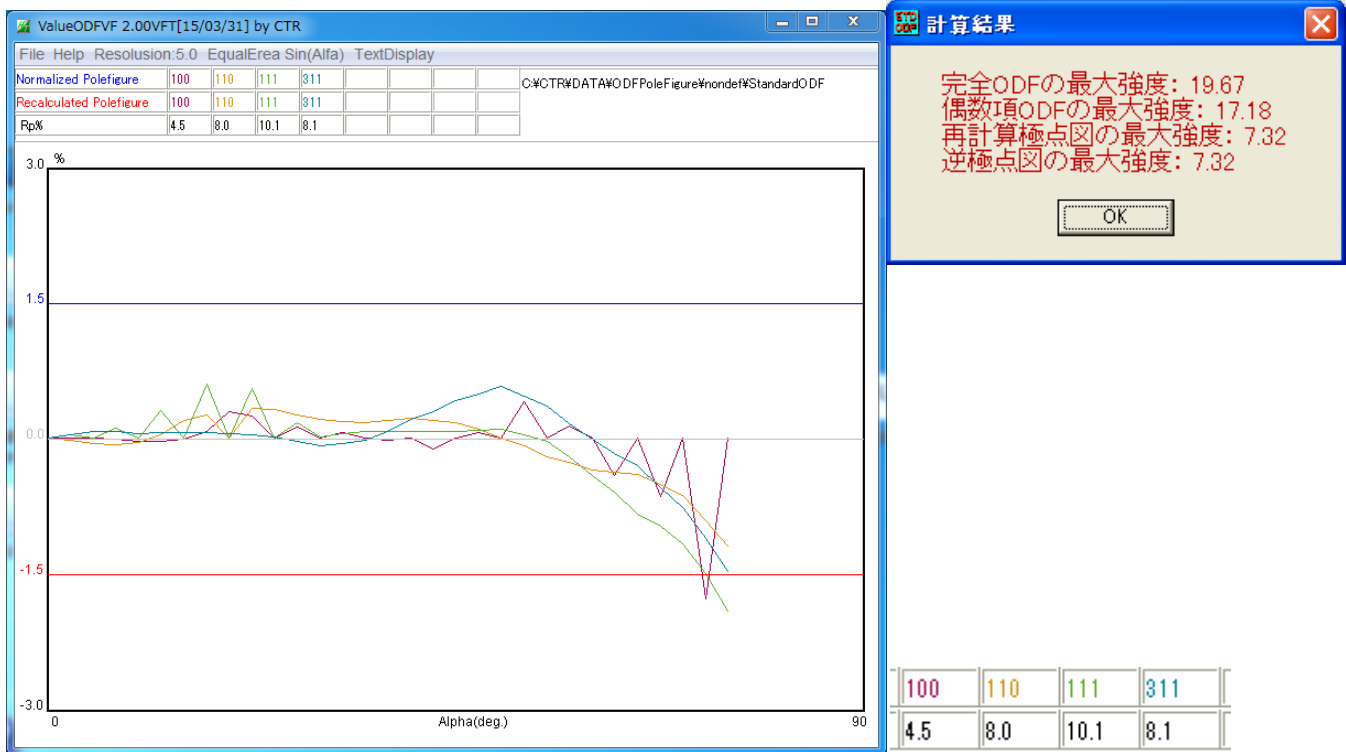
ODF 解析時の Error は OUTPUT1 ファイルに記録があります。

```
} | 90.0 6.71 5.71 3.79 2.46 1.85 1.41 1.16 1.12 1.04 1.00 1.21 1.45
} | 1.57 1.76 1.96 2.12 2.71 3.87 4.52↓
} | ↓
} | ERROR = 1.29%↓
} | ↓
} | ↓
} | ↓
} | RECALCULATED POLE FIGURE (110)↓
} | ↓
```

ValueODFVF は作業ホルダを指定する。

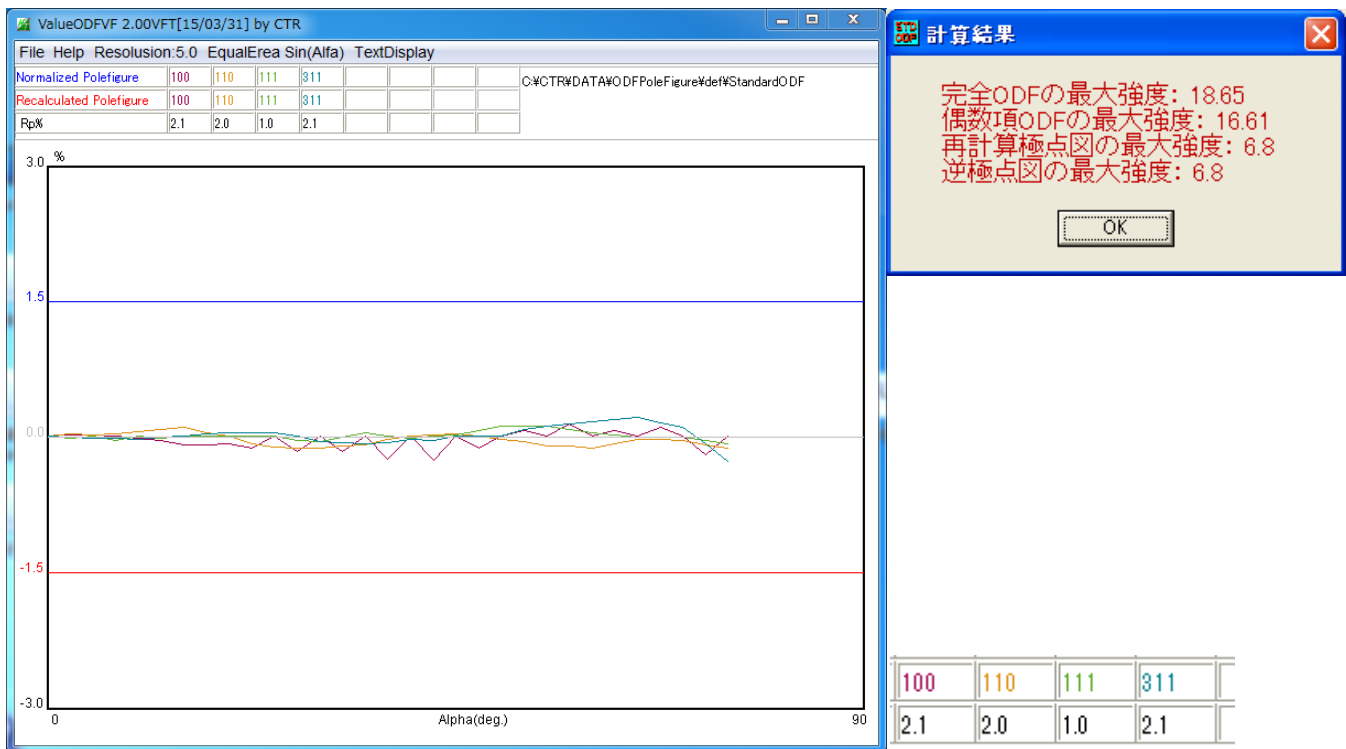
Defocus なしの場合

{100}: 1.29%↓ {110}: 0.85%↓ {111}: 1.28% {311}: 1.81%↓



Defocus 補正ありの場合

{100}: 0.26%↓ {110}: 0.24% {111}: 0.13%↓ {311}: 0.26%↓



Defocus の補正量は ODF 解析結果に影響します。

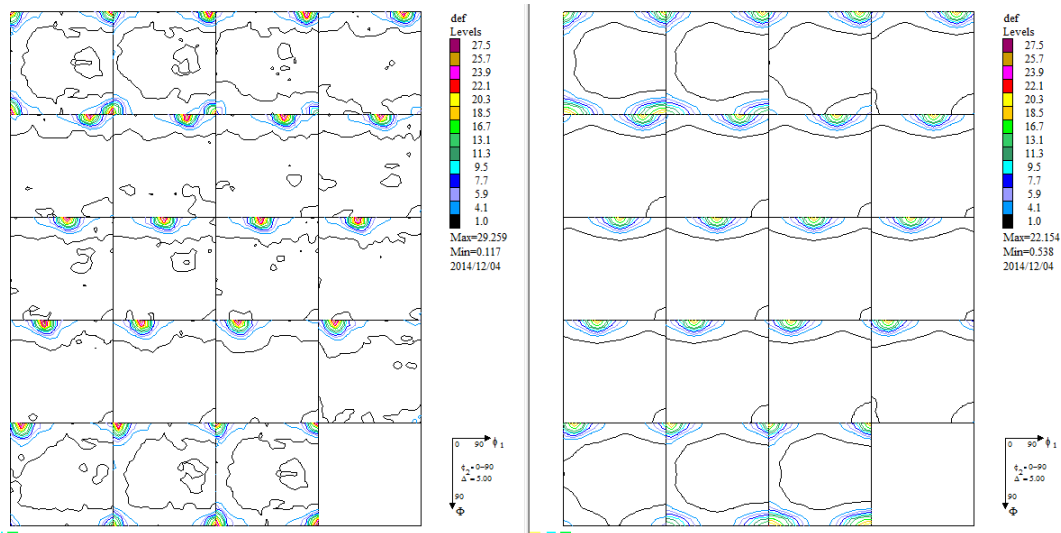
StandardODF が計算している Error では、入力データの質は判断できないが、描画する事でハッキリします。

8. LaboTexのVolume Fraction解析の場合

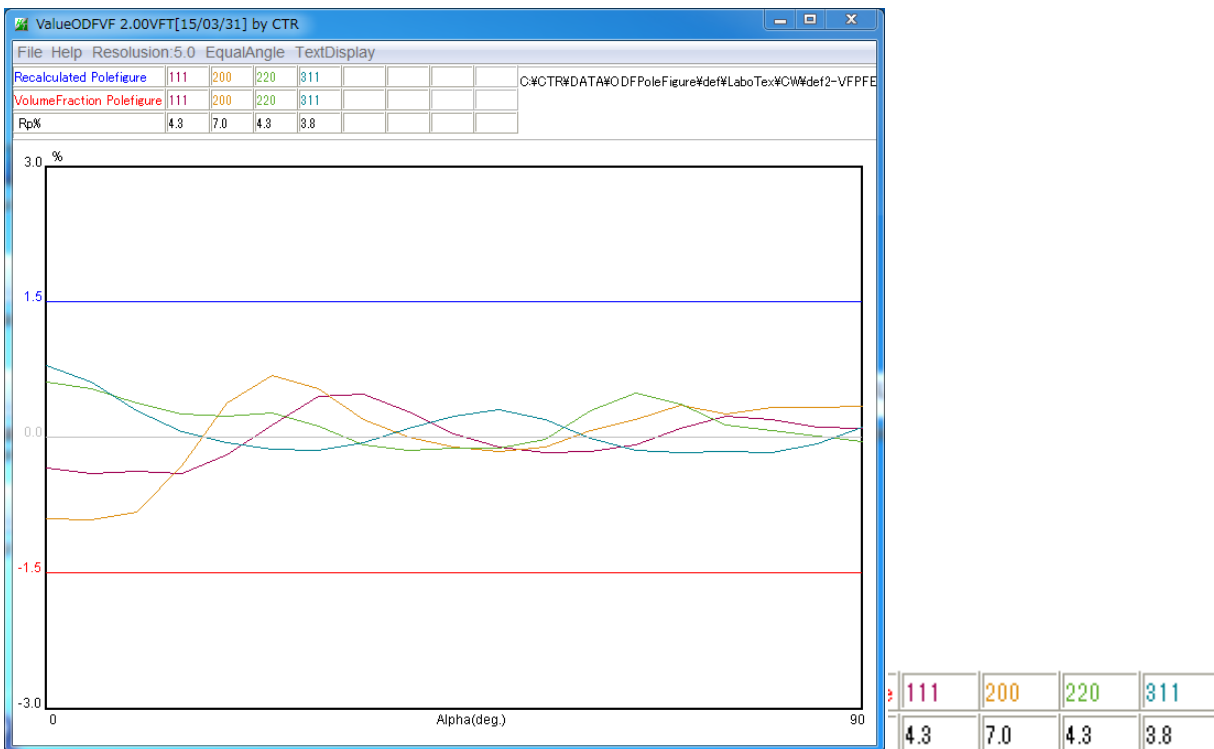
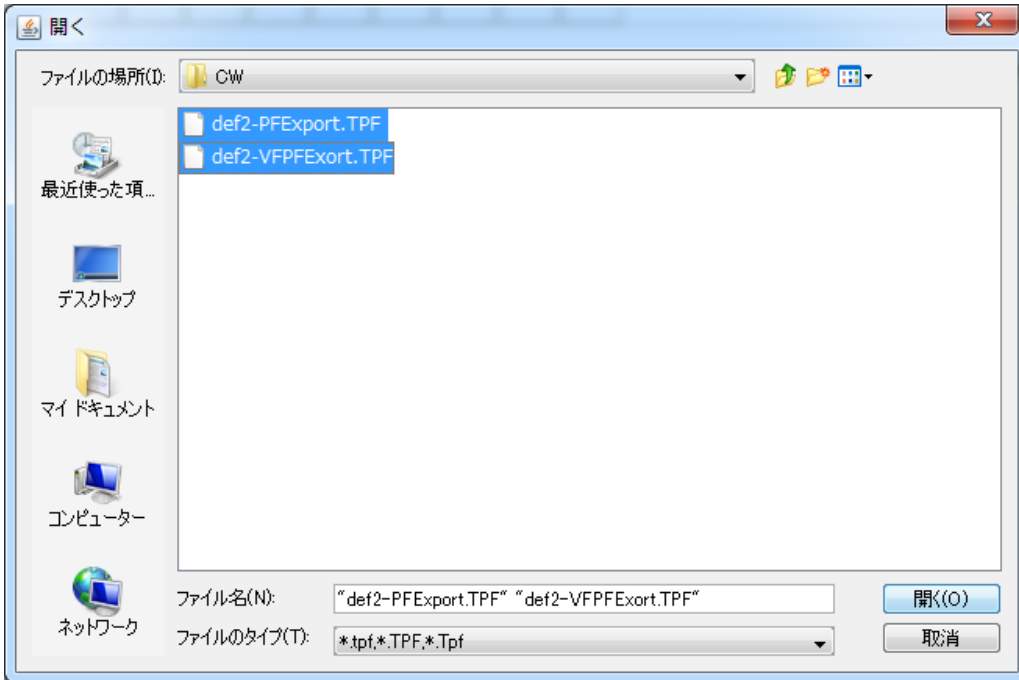
Ver2.03 は不具合があり、Ver2.04 以降にアップして下さい。

No	Texture Component	On	Distribution	FWHM ϕ_1	FWHM ϕ_2	FWHM ϕ_3	Volume Fraction
1	{ 0 0 1 } < 1 0 0 > cube	<input checked="" type="checkbox"/>	Gauss	43.7	17.1	12.2	38 %
2	{ 0 1 3 } < 1 0 0 >	<input checked="" type="checkbox"/>	Gauss	19.1	19.7	18.0	7 %
3	{ 1 1 0 } < 0 0 1 > goss	<input checked="" type="checkbox"/>	Gauss	14.1	15.2	13.0	1 %
4	{ 1 0 1 } < 5 2 -5 >	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	10 %
5	{ 1 1 0 } < 1 -1 -1 >	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	10 %
6	{ 1 1 1 } < 0 1 -1 >	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	10 %
7	{ 2 3 3 } < 0 1 -1 >	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	10 %
8	{ 0 0 1 } < 1 1 0 >	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	10 %
9	{ 1 1 2 } < 1 1 -1 > copper	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	10 %
10	{ 1 1 3 } < 1 -1 -0 >	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	10 %

VolumeFraction から計算した ODF 図も得られます。

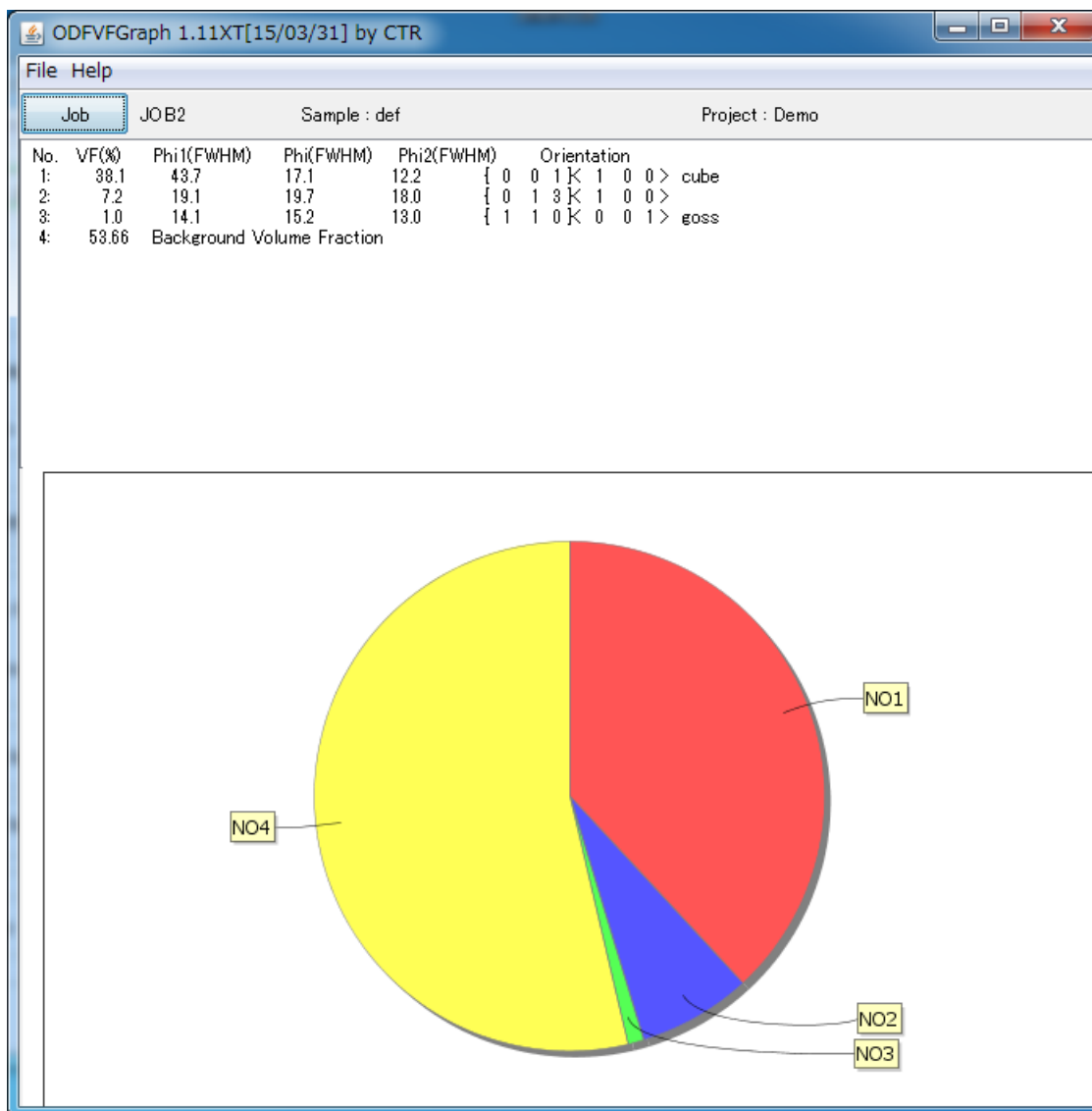


2つの ODF 図から計算した再計算極点図を E x p o r t して比較します。VF のファイル名は長くする



ほぼ定量されている事が分かります。

Volume Fraction結果は、

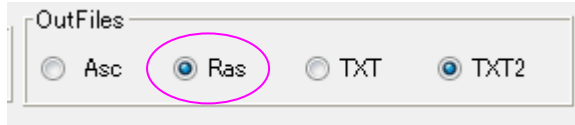


の解釈は、Cubeが38.1%、{013} <100>が7.2%、Gossが1%であるが、Atherとして53.6%あり、random方位と他に決まっていない方位が存在している事を示しています。

9. NEWODFの場合

NEWODF 解析では、ODFPoleFigure2 ソフトウェアで解析結果を Ras ファイルで作成し NEWODF で ODF 解析を行い、再計算極点図を Export すれば評価が可能になります。

ODFPoleFigure2 ソフトウェアを極点処理結果を Ras ファイルに出力



処理結果の Ras ファイルを直接 NEWODF で読み込みます。

Defocus 無しの場合

ODF計算

算定方式: WIMVモデル

試料の対称性: 斜方晶系

φ: ステップ (deg.): 5.00

Φ: ステップ (deg.): 5.00

パラメーター法

結晶相: Al

最大繰り返し回数: 10

イプシロン: 0.01

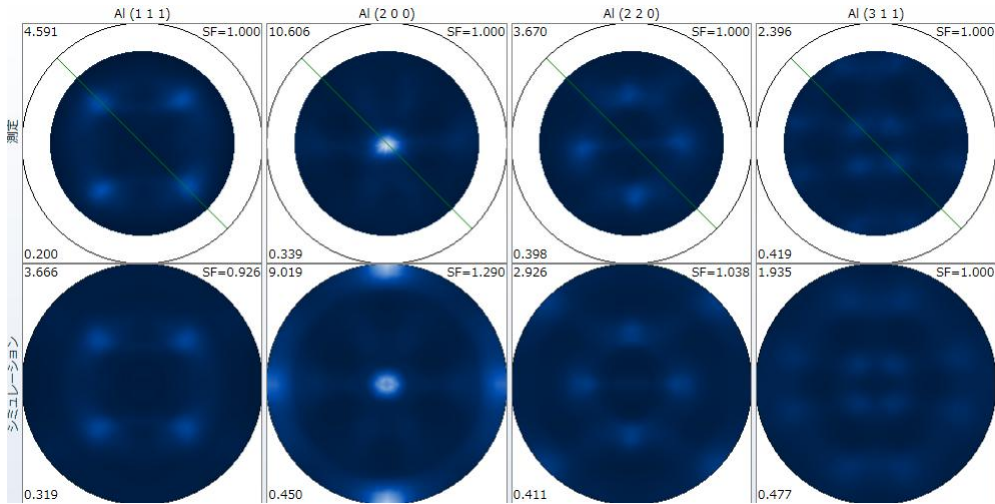
バックグラウンドをフィット:

RP因子 = 16.00

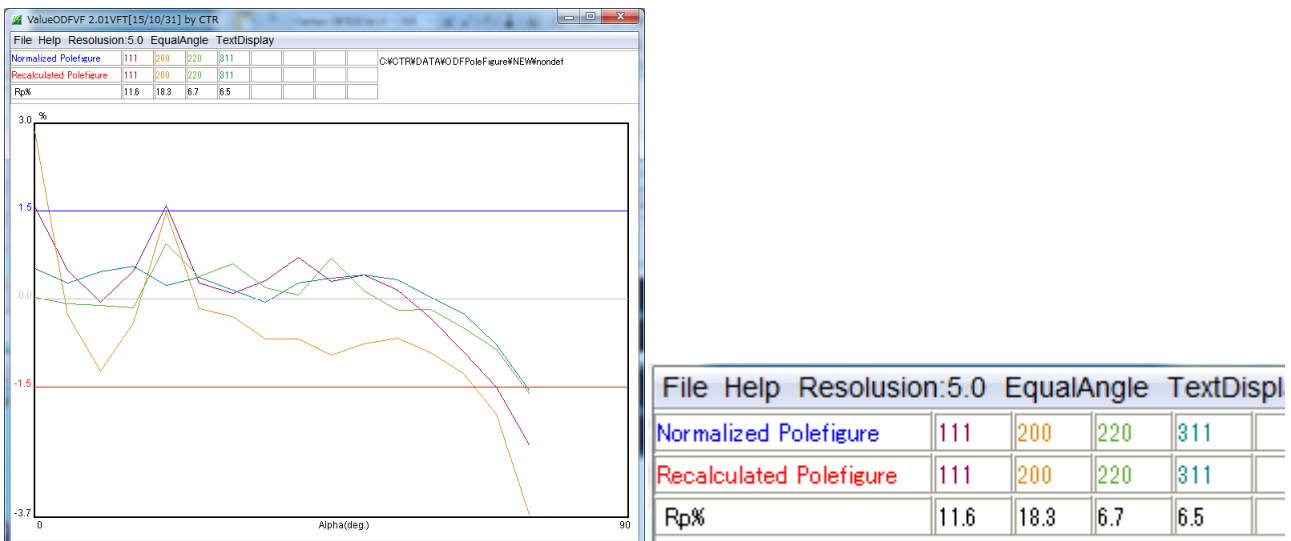
結晶相定義

材料	結晶対称		
Al	立方晶		
HKL		極点	
1	1	1	111-OSC_chB00S_2
2	0	0	200-OSC_chB00S_2
2	2	0	220-OSC_chB00S_2
3	1	1	311-OSC_chB00S_2

入力極点図と再計算極点図



再計算極点図を Export



右下がりなので、defocus が足りない事が分かります。

Defocus 補正ありの場合

ODF計算 **パラメーター法**

算定方式: WIMVモデル

結晶相: Al

最大繰り返し数: 10

試料の対称性: 斜方晶系

バックグラウンドをフィット

イプシロン: 0.01

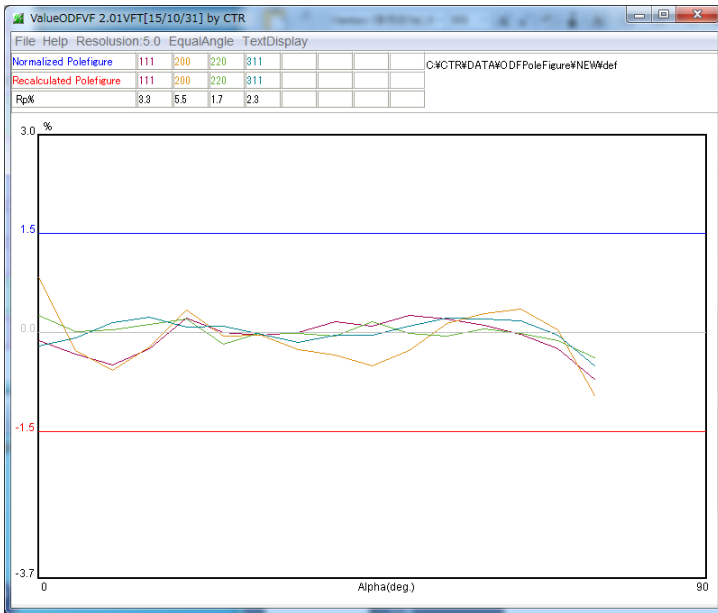
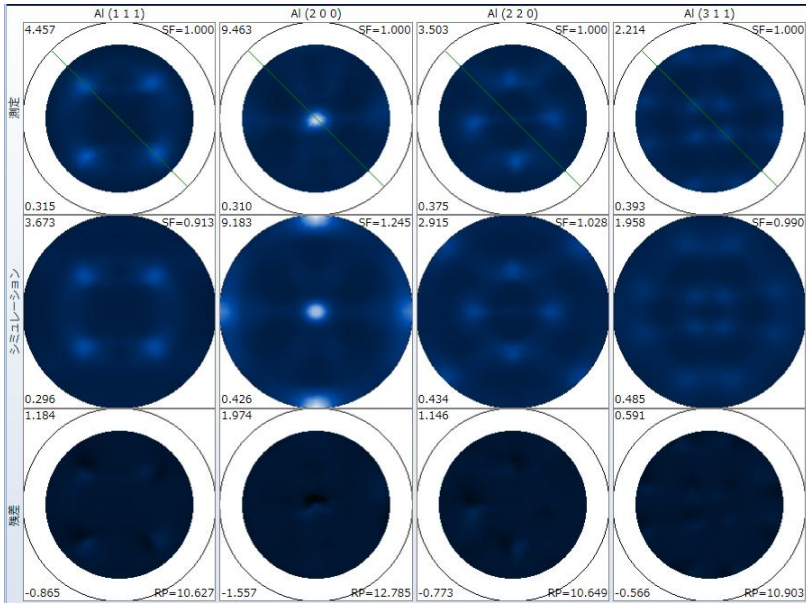
RP因子 = 11.23

Φ₁ ステップ (deg.): 5.00

Φ ステップ (deg.): 5.00

結晶相定義

材料	結晶対称	極点	2θb
Al	立方晶		
	HKL		
1	1 1 1	111-OSC_chB00D3S_2	38.400
2	0 0 0	200-OSC_chB00D3S_2	44.700
2	2 0 0	220-OSC_chB00D3S_2	65.000
3	1 1 1	311-OSC_chB00D3S_2	78.200



Normalized Polefigure	111	200	220	311
Recalculated Polefigure	111	200	220	311
Rp%	3.3	5.5	1.7	2.3

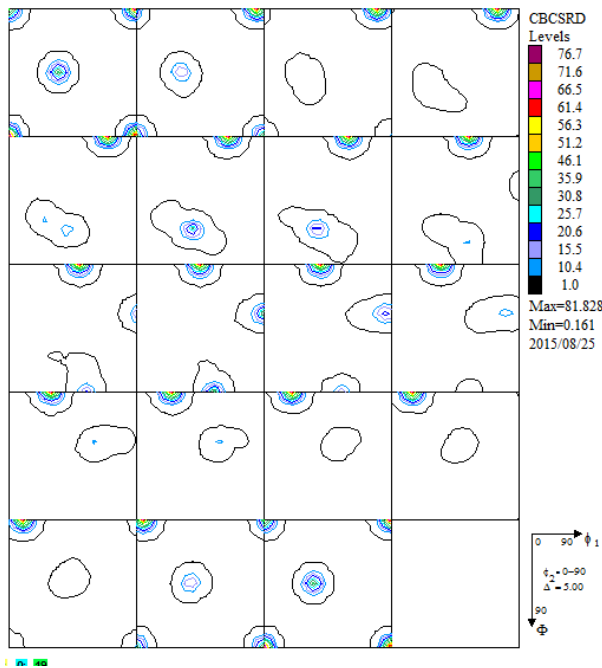
± 1.5%以内の範囲に収まる。

NEWODFで表示しているRP因子のグラフ化で原因が特定出来ます。

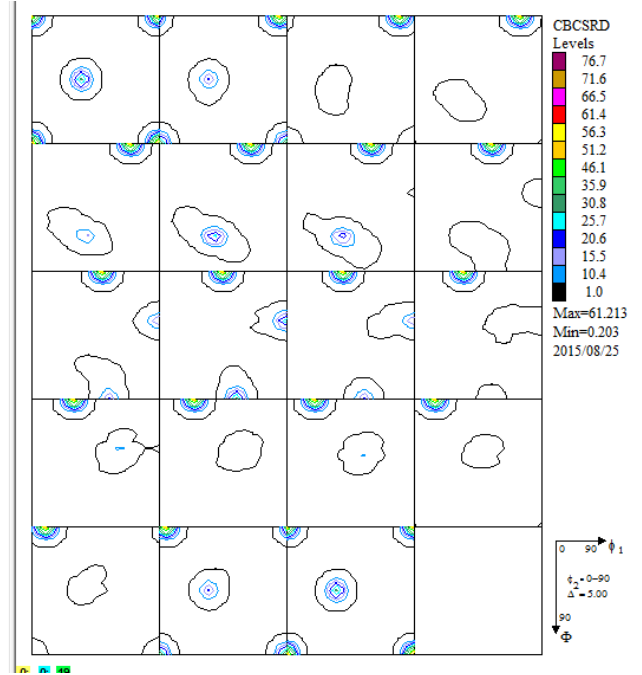
10. RD→ND変換のND変換したODF図とその VolumeFraction 結果

RD→ND 変換後の ODF 図から VolumeFraction を計算する。

RD→ND 変換 ODF 図

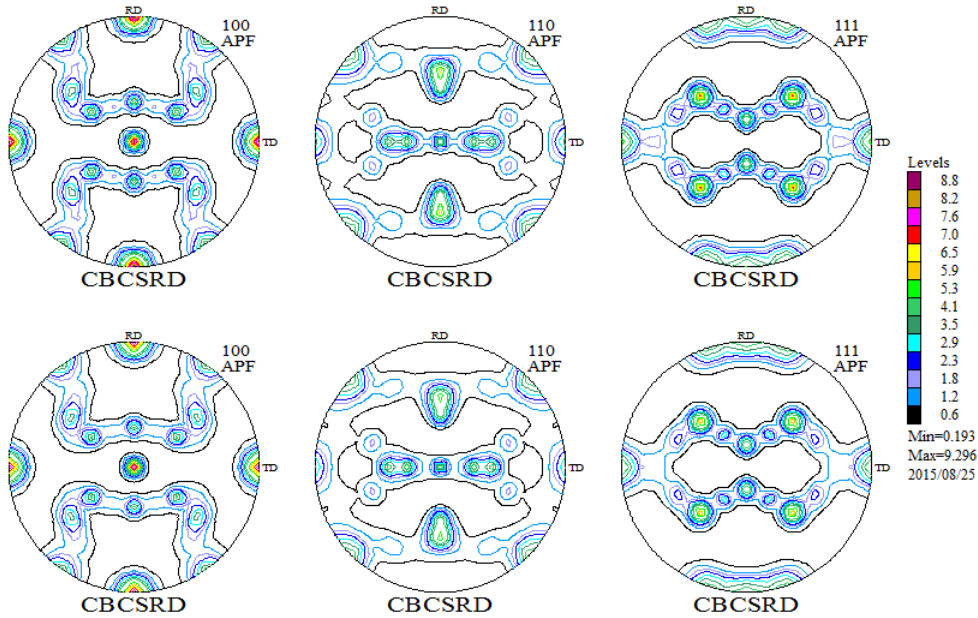


VolumeFractionODF 図

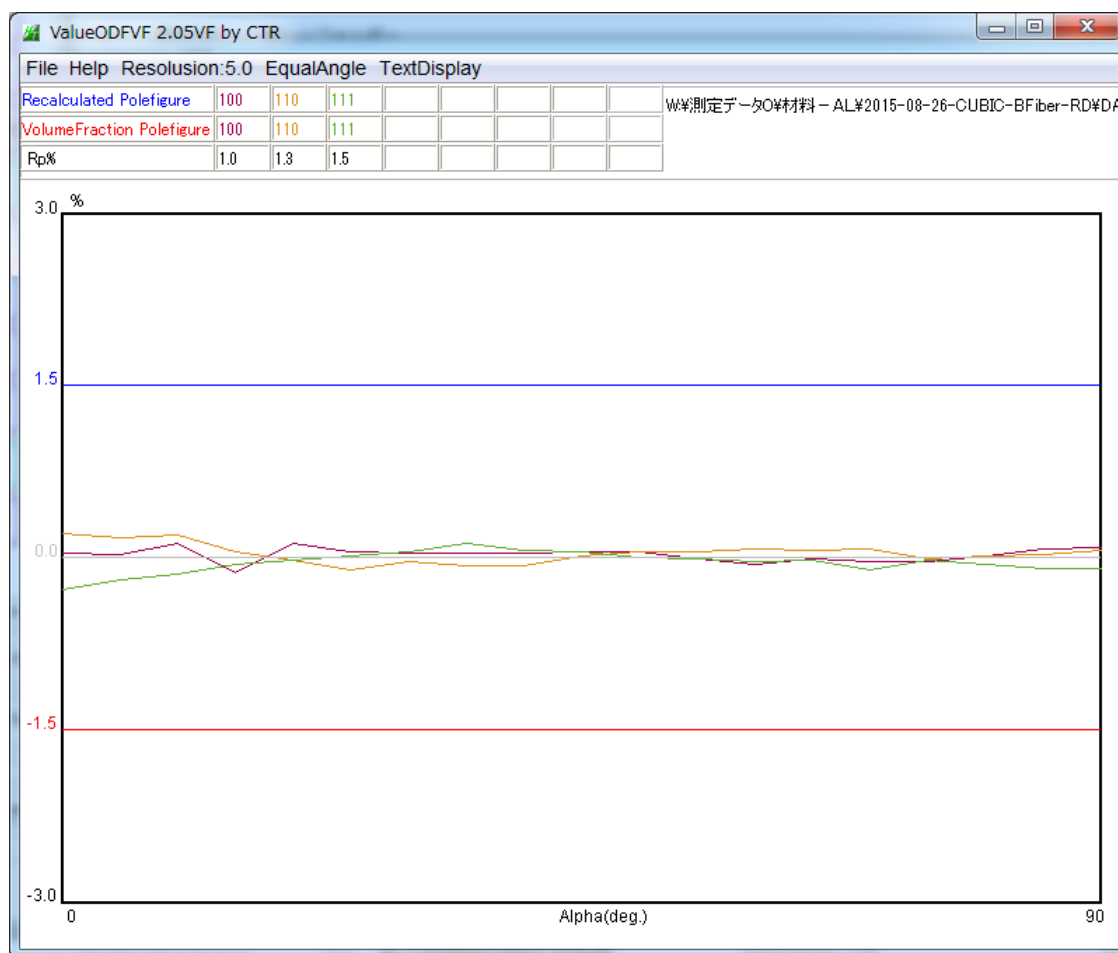


双方の ODF 図から極点図を作成し、Exportする。

Exportするファイル名の文字数に関して,VolumeFractionの極点図ファイル名を多くする。



ValueODFVF(Ver2.05以降)で2つの極点図を読み込む



Error の大きさから、VolumeFraction が完了している事が確認出来ます。

11. LaboTexの TPF ファイルによる外部起動

Ver2.06以降で実現

CTRODF 向けの変更でオプション `-TPF filename`

1 2. 2次元検出器を用いた極点測定をL a b o T e xでODF解析した場合のR p %

2次元検出器を用いた極点測定の場合、極点データのd e f o c u s補正、データの繋ぎなど複雑な操作になりますが、特にデータの繋ぎではデータ繋ぎに極がない場合、上手接続出来ません。このような場合、以下の手順が最適な操作方法と思われます。

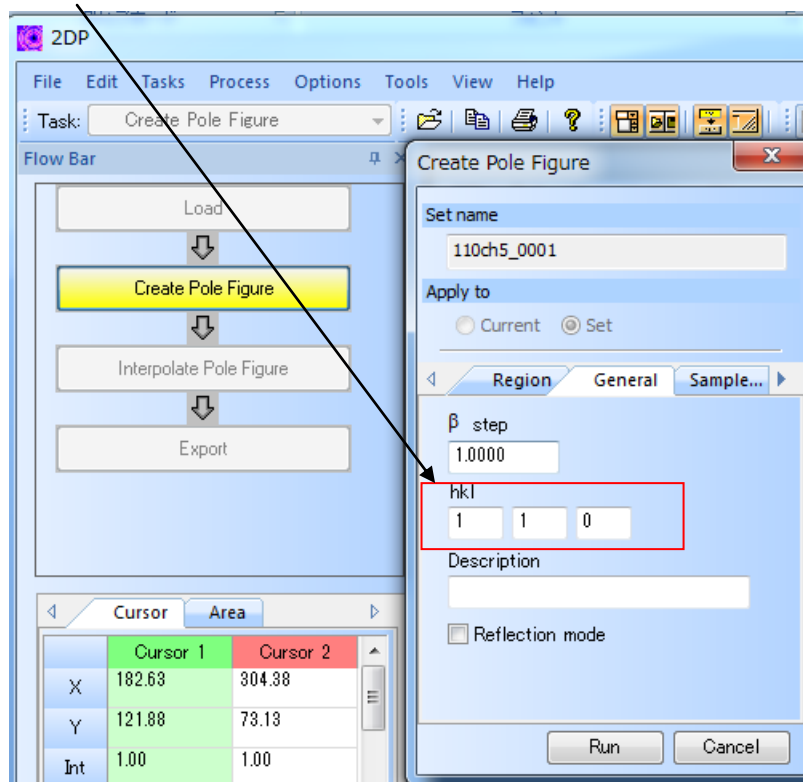
1 2. 1 Rigaku の 2DP で FE を解析する場合

極点図は(110),(200),(211)で、各イメージデータ測定を0,5,25で測定した場合のファイル名を

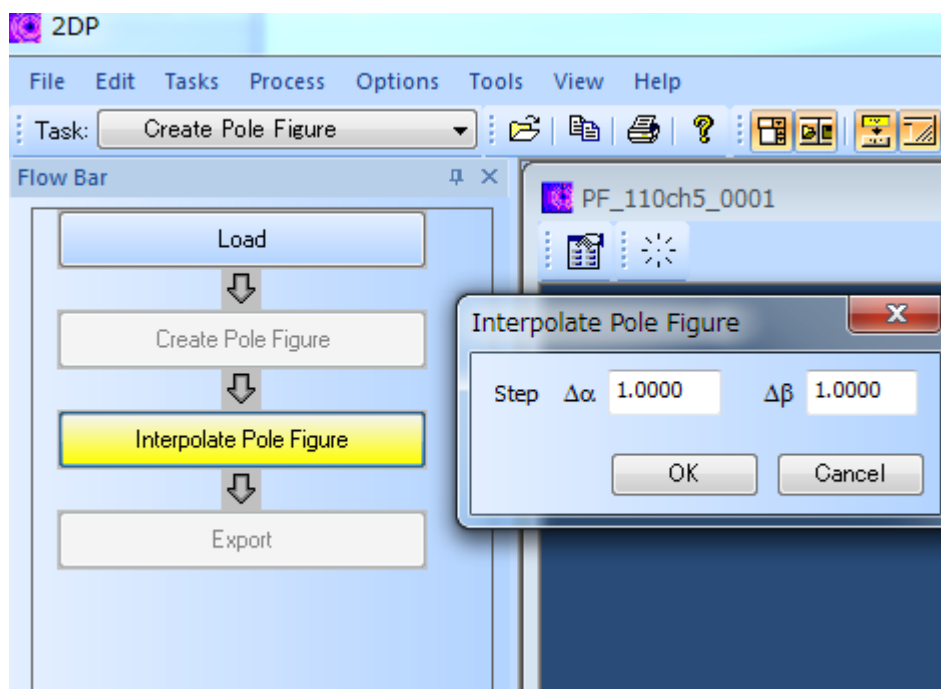
極点図	あおり角度	作成指数	ファイル名
(110)	5	110	110-XXXX
(110)	25	220	220-XXXX
(110)	35	330	330-XXXX
(200)	0	200	200-XXXX
(200)	25	400	400-XXXX
(200)	35	600	600-XXXX
(211)	5	211	211-XXXX
(211)	25	422	422-XXXX
(211)	35	633	633-XXXX

とします。

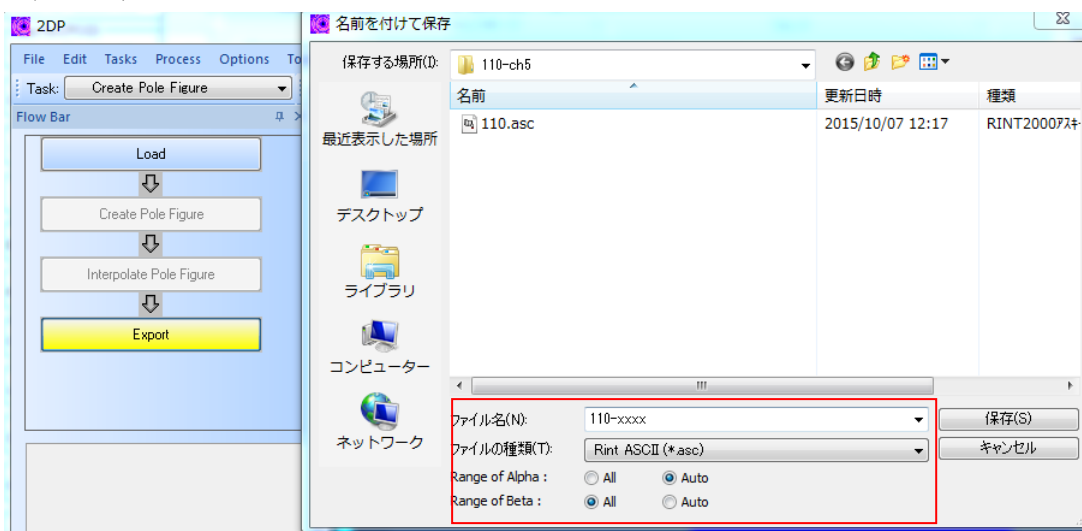
作成指数とは



極点図の間隔は1degで行います。



作成するファイル名とは



上記で行います。

全ての極点図ファイルは (-XXXX は省きます)

ファイル名	更新日時	種類	サイズ
110.asc	2015/10/07 12:17	RINT20007+	53 KB
220.asc	2015/10/07 12:24	RINT20007+	77 KB
330.asc	2015/10/07 12:29	RINT20007+	79 KB
200.asc	2015/10/07 12:40	RINT20007+	41 KB
400.asc	2015/10/07 12:49	RINT20007+	55 KB
600.asc	2015/10/07 12:55	RINT20007+	55 KB
211.asc	2015/10/07 13:02	RINT20007+	36 KB
422.asc	2015/10/07 13:07	RINT20007+	46 KB
633.asc	2015/10/07 13:13	RINT20007+	46 KB

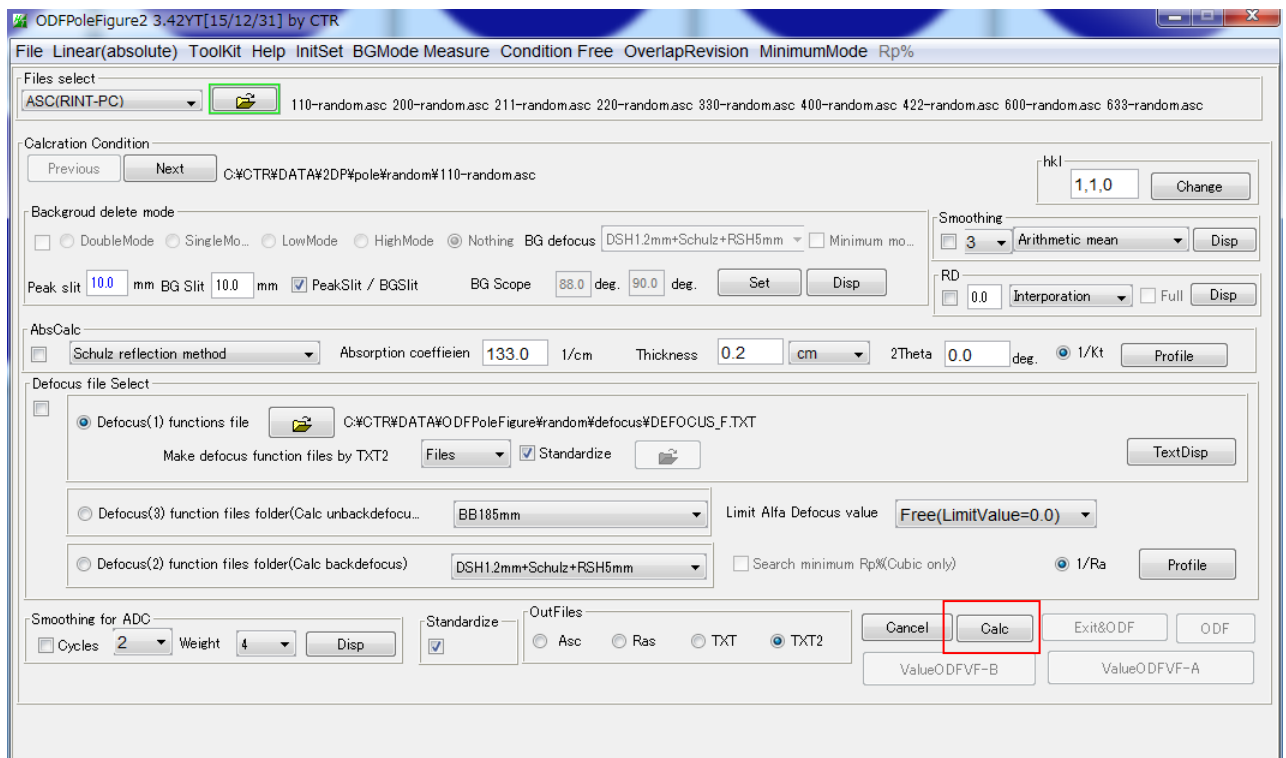
9個のファイルが作成されます。

1 2. 2 random 試料から defocus ファイルの作成

Random 試料でも同一操作で同一名のファイルを作成します

110-random.asc	2015/10/07 12:17	RINT20007ｽｷｰ	53 KB
220-random.asc	2015/10/07 12:24	RINT20007ｽｷｰ	77 KB
330-random.asc	2015/10/07 12:29	RINT20007ｽｷｰ	79 KB
200-random.asc	2015/10/07 12:40	RINT20007ｽｷｰ	41 KB
400-random.asc	2015/10/07 12:49	RINT20007ｽｷｰ	55 KB
600-random.asc	2015/10/07 12:55	RINT20007ｽｷｰ	55 KB
211-random.asc	2015/10/07 13:02	RINT20007ｽｷｰ	36 KB
422-random.asc	2015/10/07 13:07	RINT20007ｽｷｰ	46 KB
633-random.asc	2015/10/07 13:13	RINT20007ｽｷｰ	46 KB

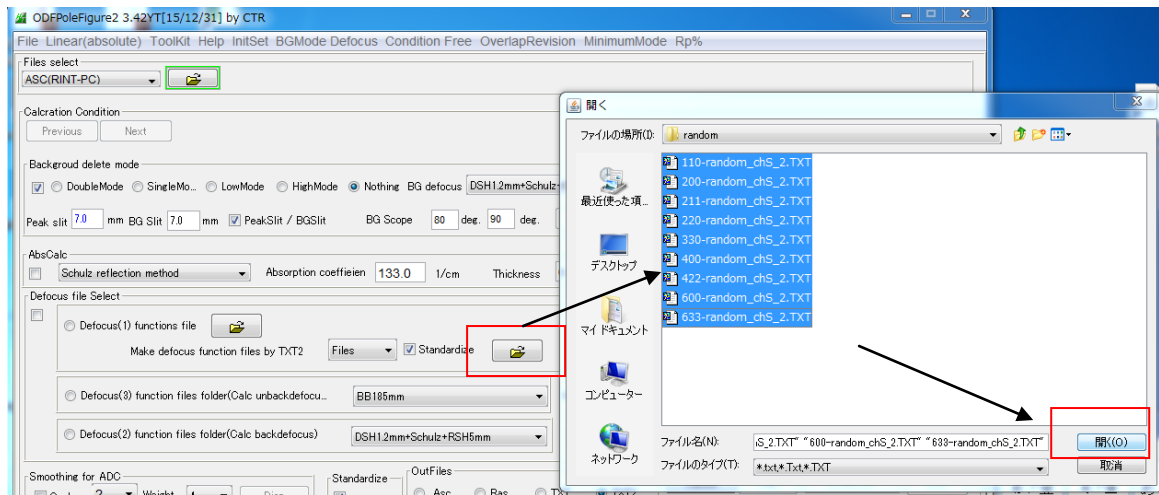
ODFPoleFigure2 ソフトウェアで ASC->TXT2 変換を行い



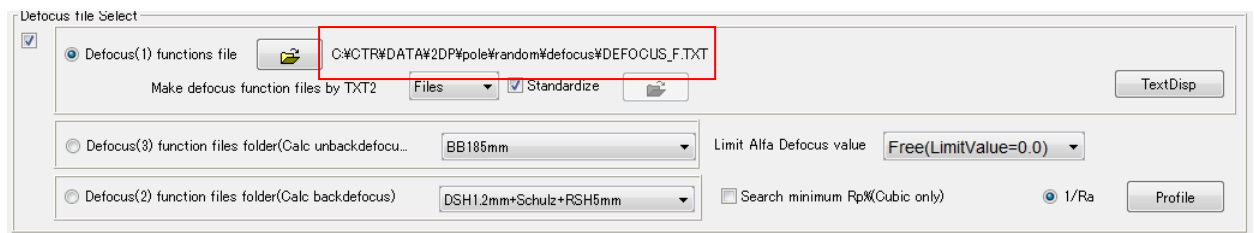
作成される TXT2 データ

110-random_chS_2.TXT	2015/10/11 8:34	テキスト文書	145 KB
200-random_chS_2.TXT	2015/10/11 8:34	テキスト文書	112 KB
211-random_chS_2.TXT	2015/10/11 8:34	テキスト文書	99 KB
220-random_chS_2.TXT	2015/10/11 8:34	テキスト文書	210 KB
330-random_chS_2.TXT	2015/10/11 8:34	テキスト文書	217 KB
400-random_chS_2.TXT	2015/10/11 8:34	テキスト文書	153 KB
422-random_chS_2.TXT	2015/10/11 8:34	テキスト文書	125 KB
600-random_chS_2.TXT	2015/10/11 8:34	テキスト文書	152 KB
633-random_chS_2.TXT	2015/10/11 8:34	テキスト文書	124 KB

Defocus として登録

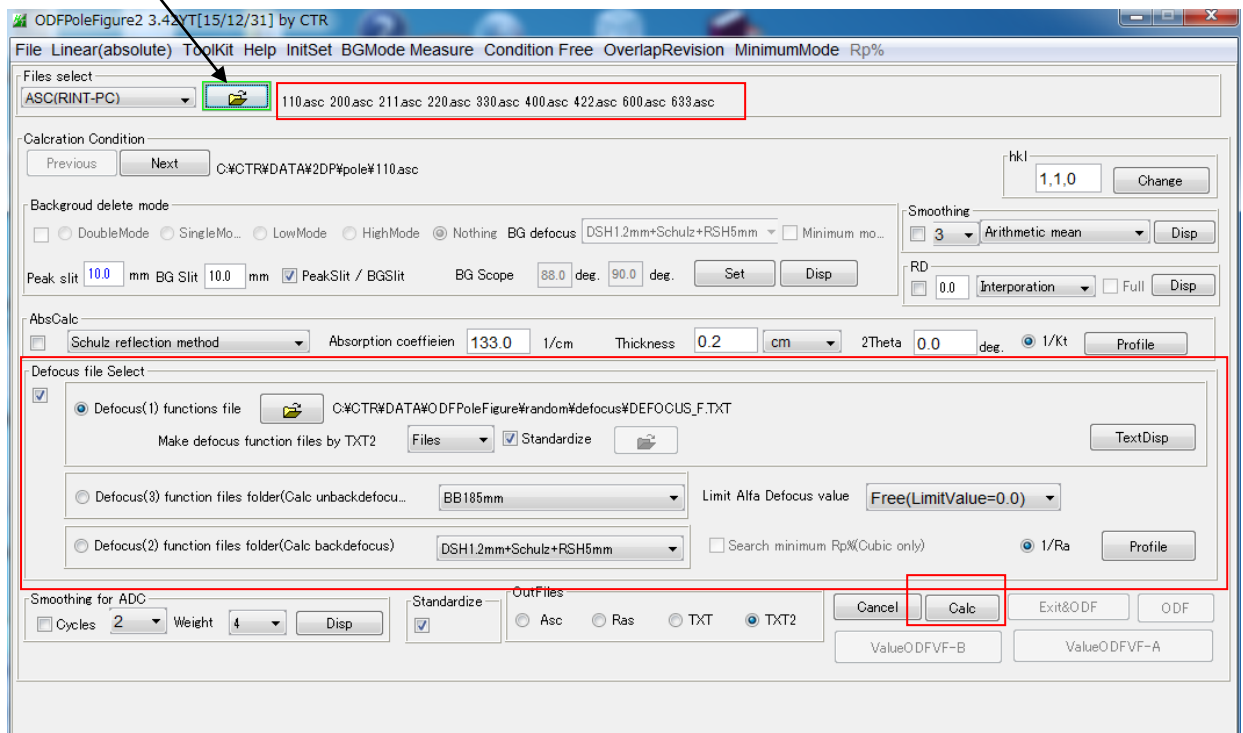


DEFOCUS ファイルが登録されます。



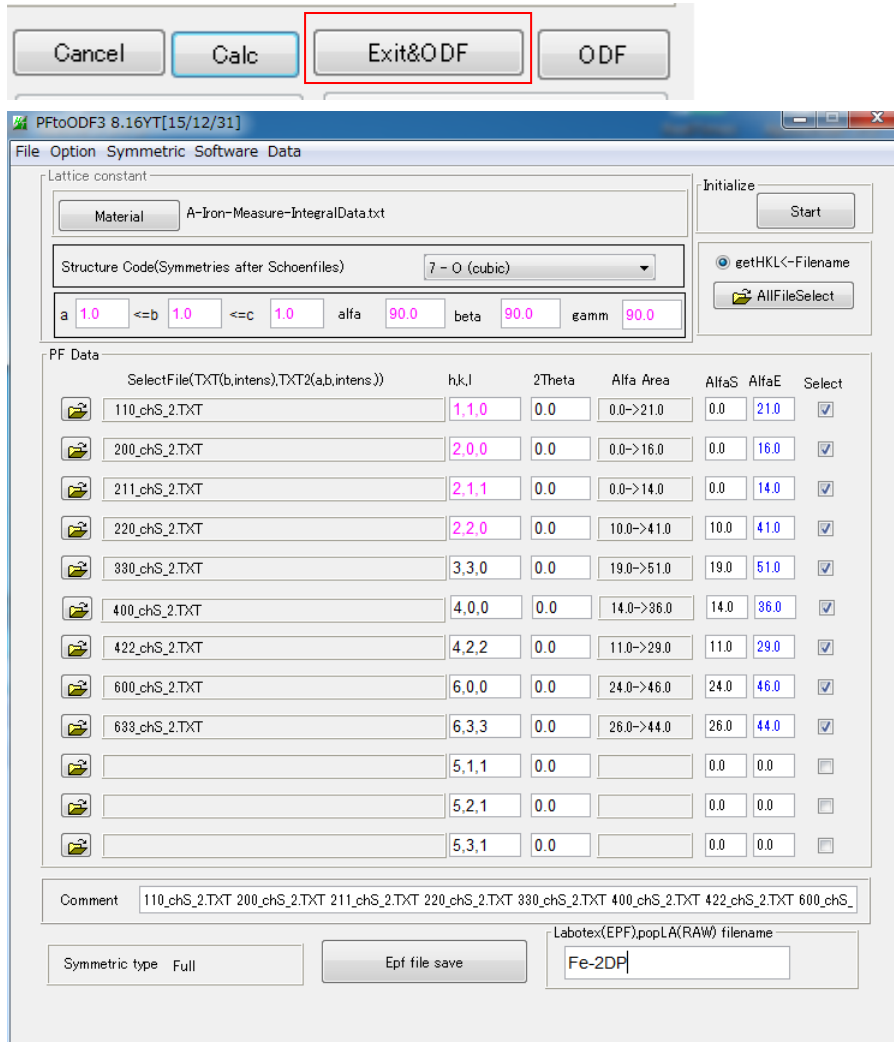
1 2 . 3 配向試料の defocus 補正

配向試料を選択 → 選択されたファイルが表示される。



Defocus 補正を設定して計算を行います。

12.4 LaboTex向けEPFファイルを作成



今回は Random 補正なしで解析してみます。

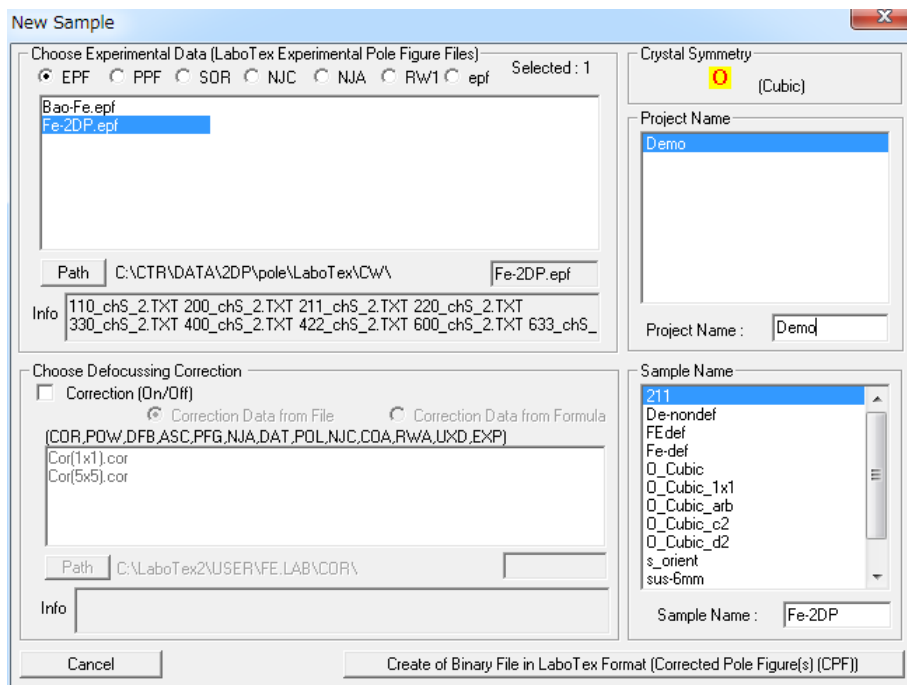
```

TextDisplay 1.12S C:\CTR\DATA\2DP\pole\LaboTex\CW\Fe-2DP.epf
File Help
110_chS_2.TXT 200_chS_2.TXT 211_chS_2.TXT 220_chS_2.TXT 330_chS_2.TXT 400_
Structure Code a b c alfa beta gamma
7 1.0 1.0 1.0 90.0 90.0 90.0
9
2Theta alf-s alf-e d-alf bet-s bet-e d-bet index H K L P/B
0.0 0.0 21.0 1.0 0.0 359.0 1.0 0 1 1 0 1
0.0 0.0 16.0 1.0 0.0 359.0 1.0 0 2 0 0 1
0.0 0.0 14.0 1.0 0.0 359.0 1.0 0 2 1 1 1
0.0 10.0 41.0 1.0 0.0 359.0 1.0 0 2 2 0 1
0.0 19.0 51.0 1.0 0.0 359.0 1.0 0 3 3 0 1
0.0 14.0 36.0 1.0 0.0 359.0 1.0 0 4 0 0 1
0.0 11.0 29.0 1.0 0.0 359.0 1.0 0 4 2 2 1
0.0 24.0 46.0 1.0 0.0 359.0 1.0 0 6 0 0 1
0.0 26.0 44.0 1.0 0.0 359.0 1.0 0 6 3 3 1

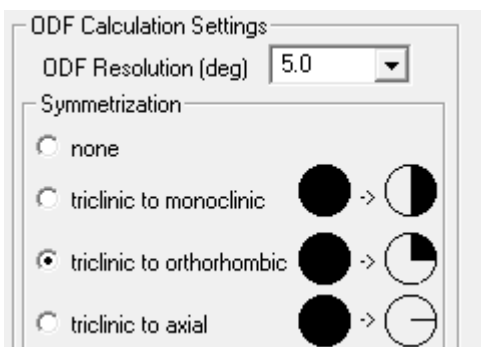
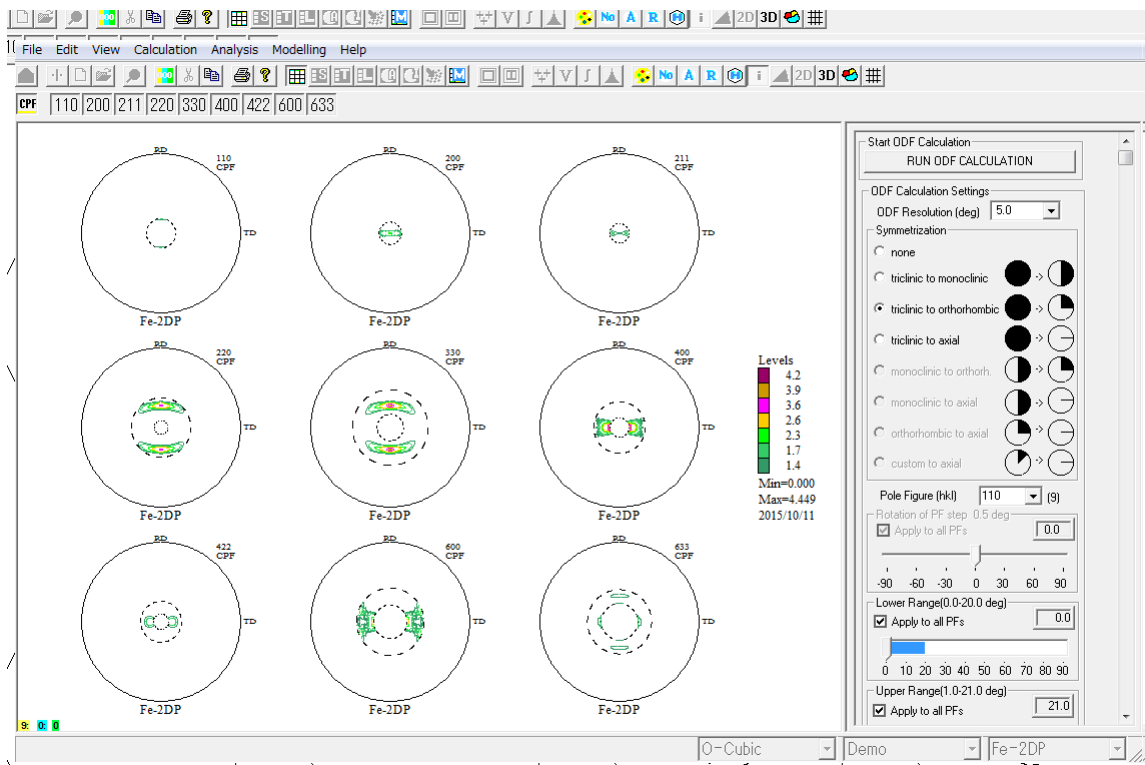
0.768400 0.768400 0.768400 0.768400 0.768400 0.768400 0.768400 0.768400
0.768400 0.768400 0.768400 0.768400 0.768400 0.768400 0.768400 0.768400
0.768400 0.768400 0.768400 0.768400 0.768400 0.768400 0.768400 0.768400
0.768400 0.768400 0.768400 0.768400 0.768400 0.768400 0.768400 0.768400

```

12.5 LaboTexで読み込み



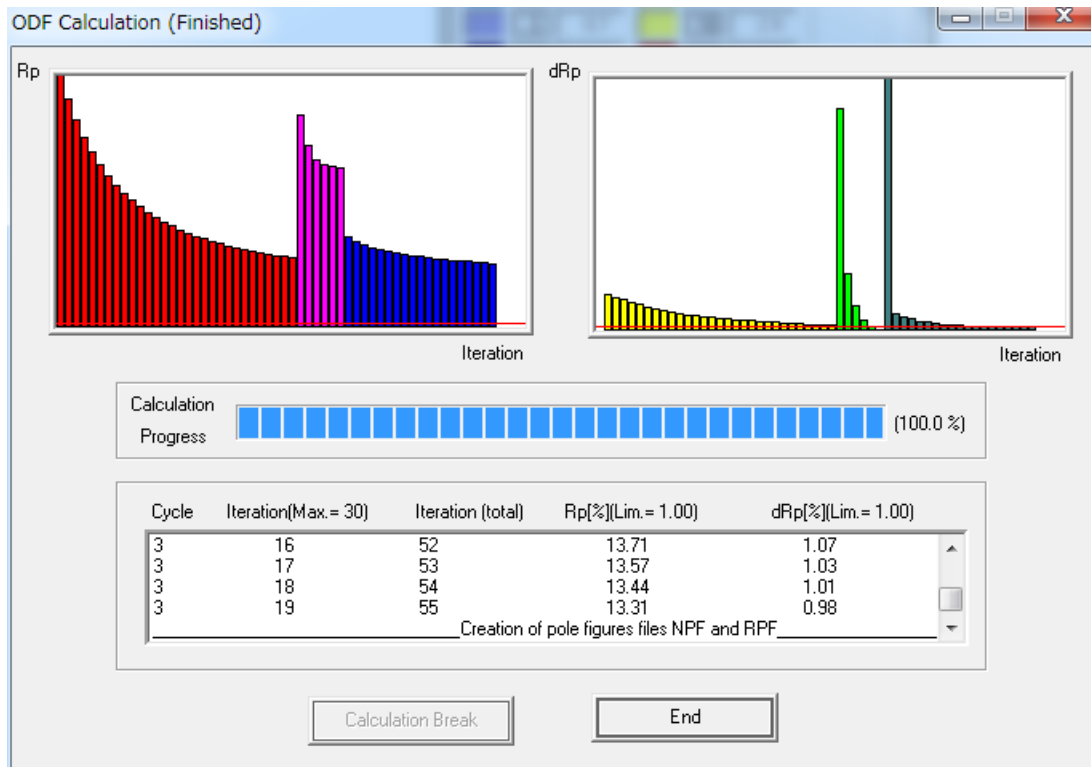
測定間隔 1deg->5deg で 1/4 対称 ODF 解析



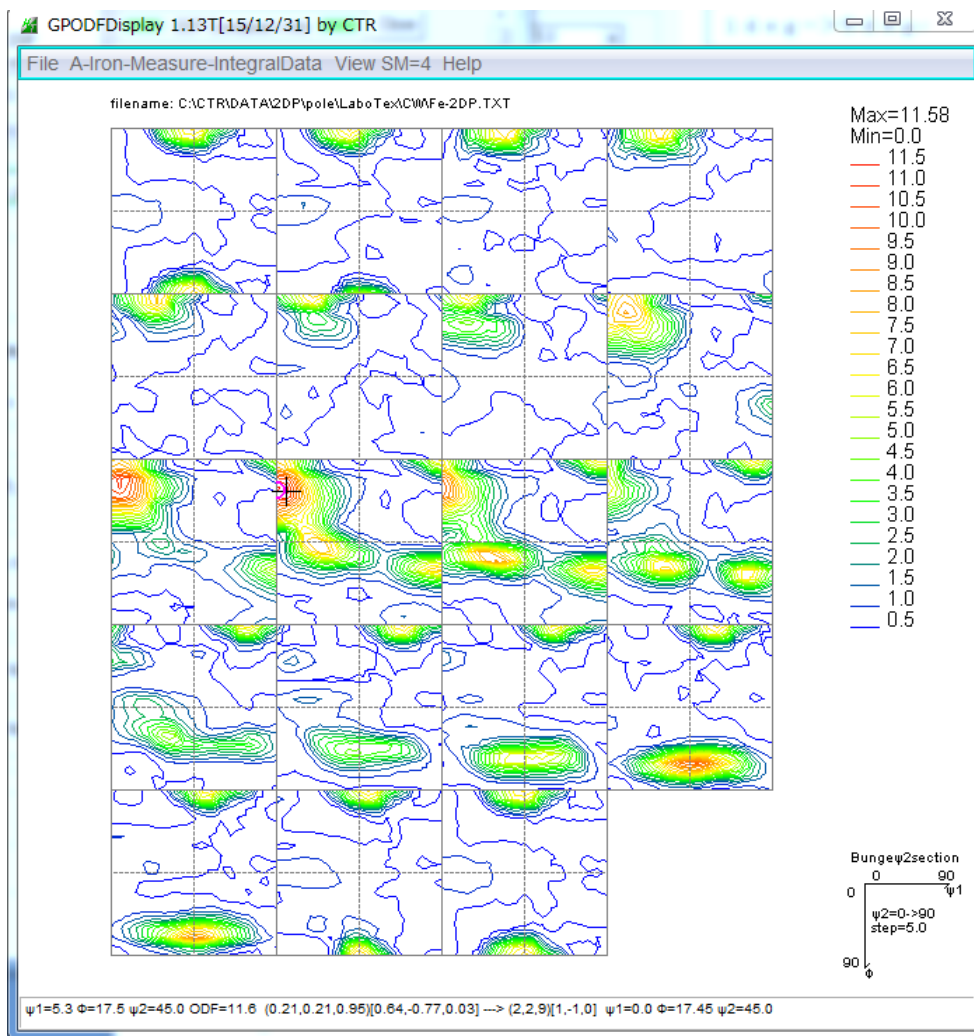
1 deg → 5 deg

1/4 対称

ODF 解析における解析 Error Rp%



ODF 図 (ODF を Export して GPODFDisplay で表示)



1 2. 6 極点図を Export して Rp% の細部を確認

入力極点図のデータ間隔が 1 deg のため、間隔を 5 deg とした後ファイル選択してください
Ver2.07 以降、解析可能です。



各極点図に error 要因があるようなので、defocus 補正が必要である事が分かります。

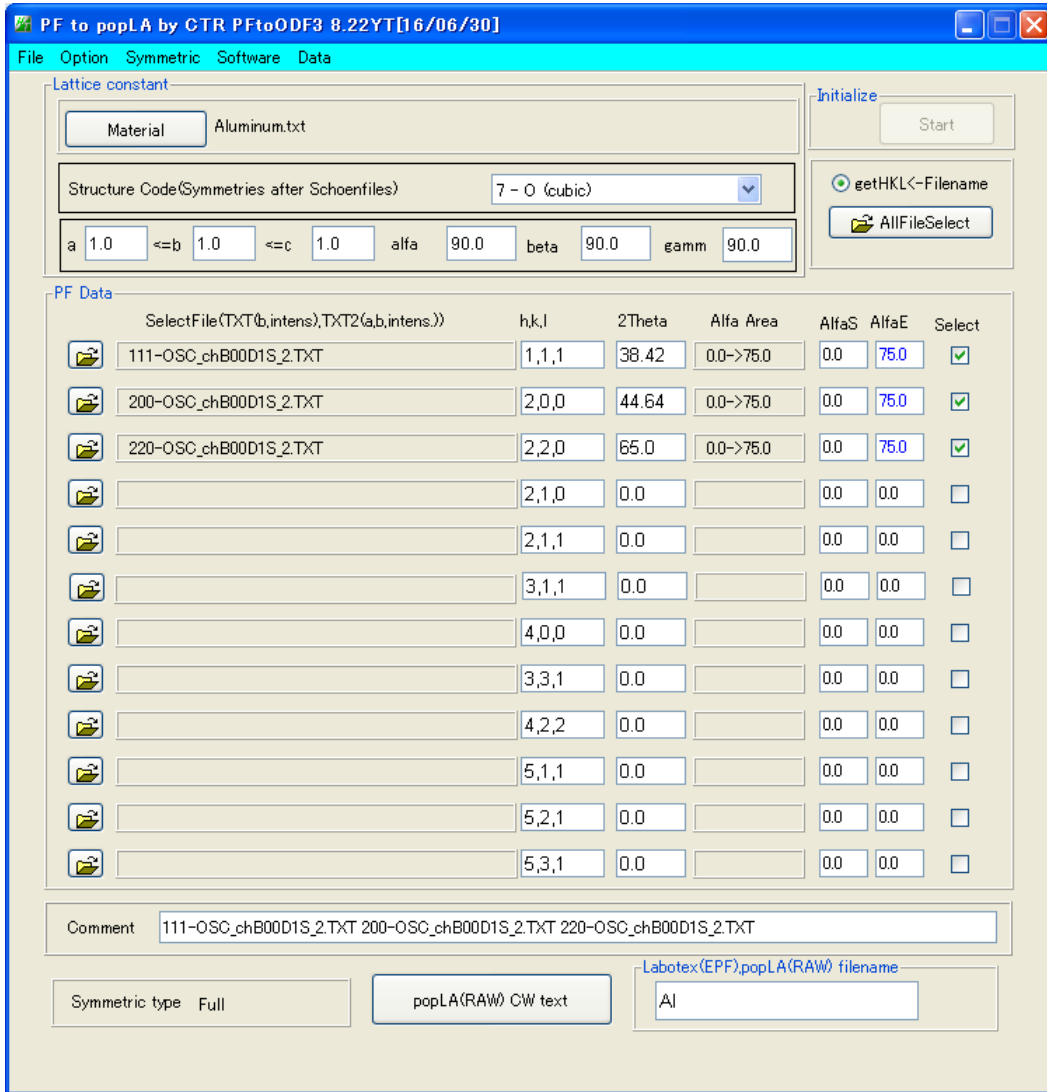
1 3. 外部起動

LaboTex の極点図を Export したファイル (TPF) ファイルから Rp% を計算表示するために使用

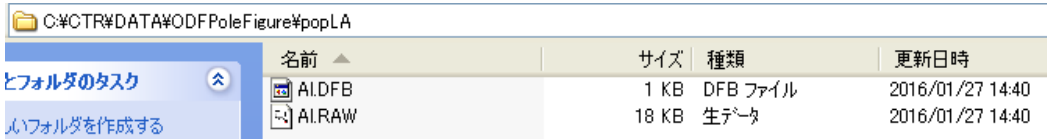
```
java -jar C:\CTR\bin\ValueODFVF.jar -TPF ABSTPFFILE STEP
```

STEP が指定されない場合、STEP="5.0" と見なされます。

14. popLAの場合



popLA向けファイルを作成



PF to ODF 3 のバージョン 8.22 以降

PF to ODF 2 のバージョン 6.15 以降

2つのファイルを popLAホルダの C:\YX にコピーする。

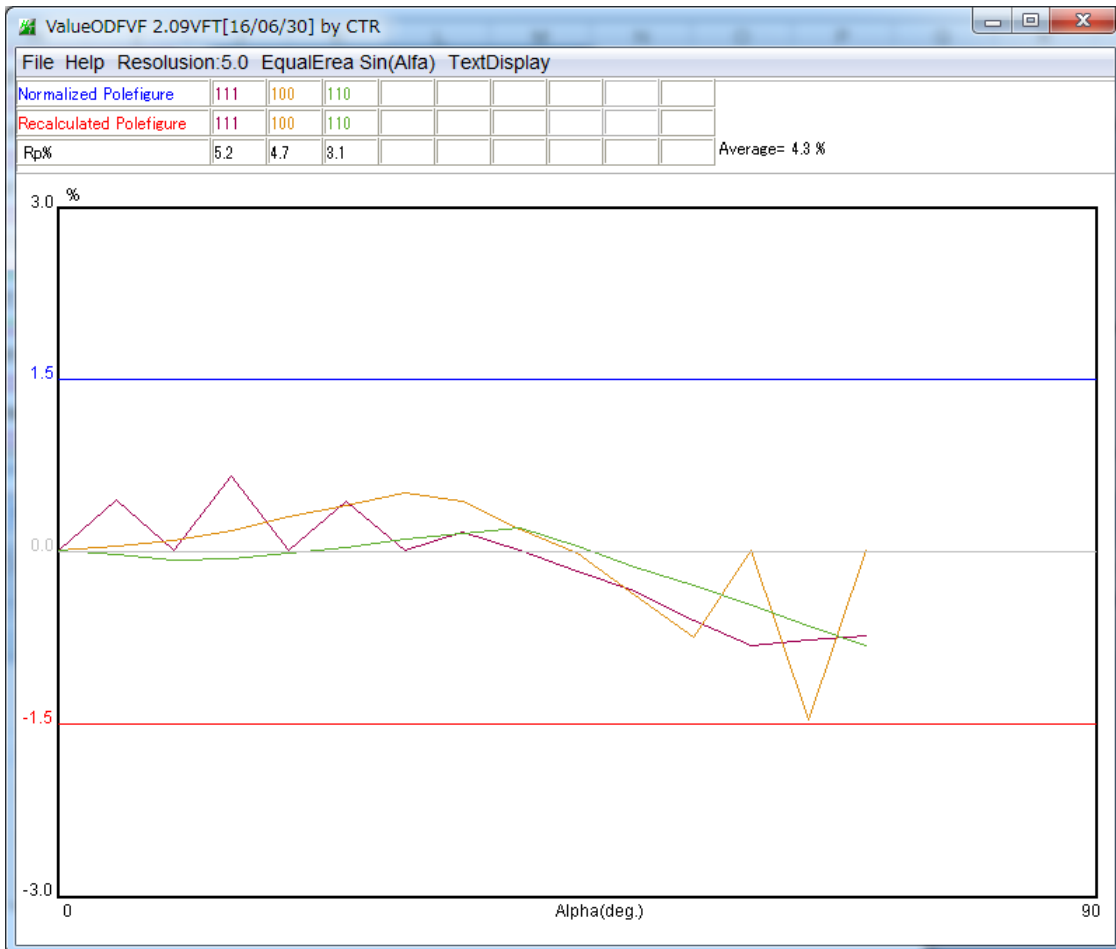
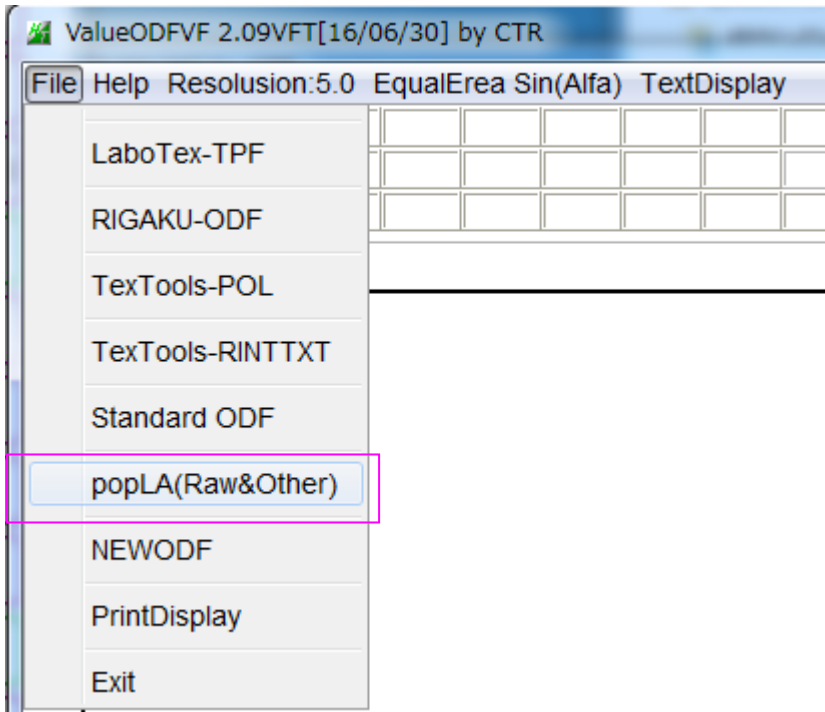
WIMV 法では、.WPF ファイルが作成される。

Hermonic 法では、.FUL ファイルが作成される。

入力データ派、RAW ファイルなので、

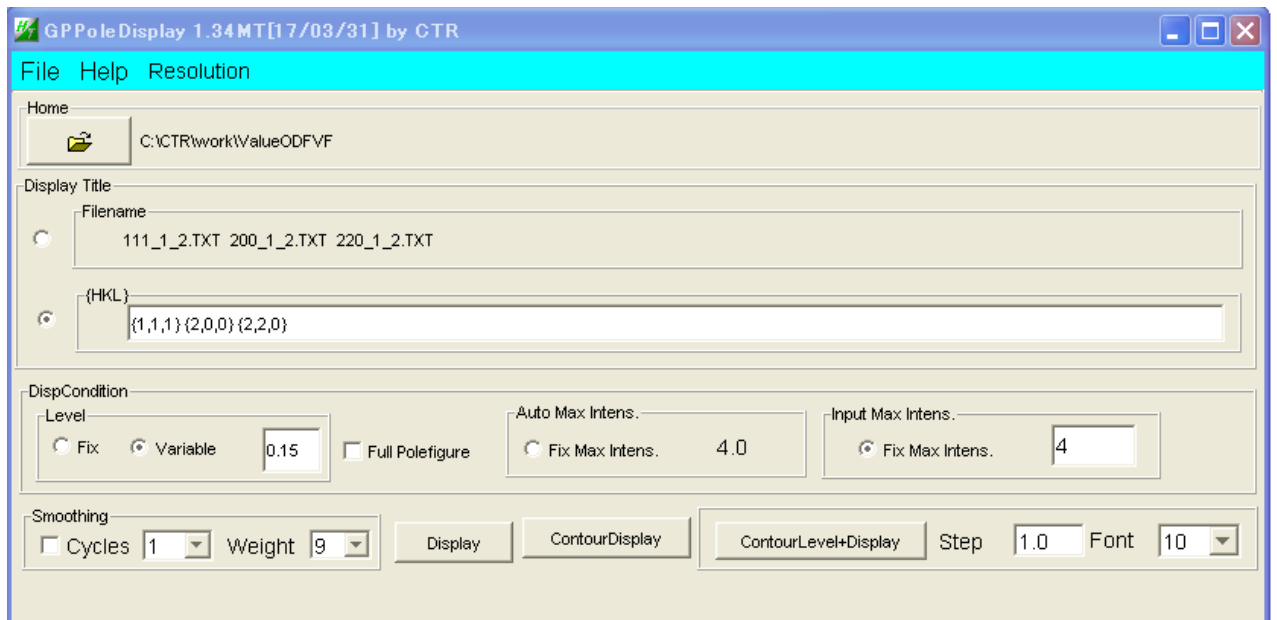
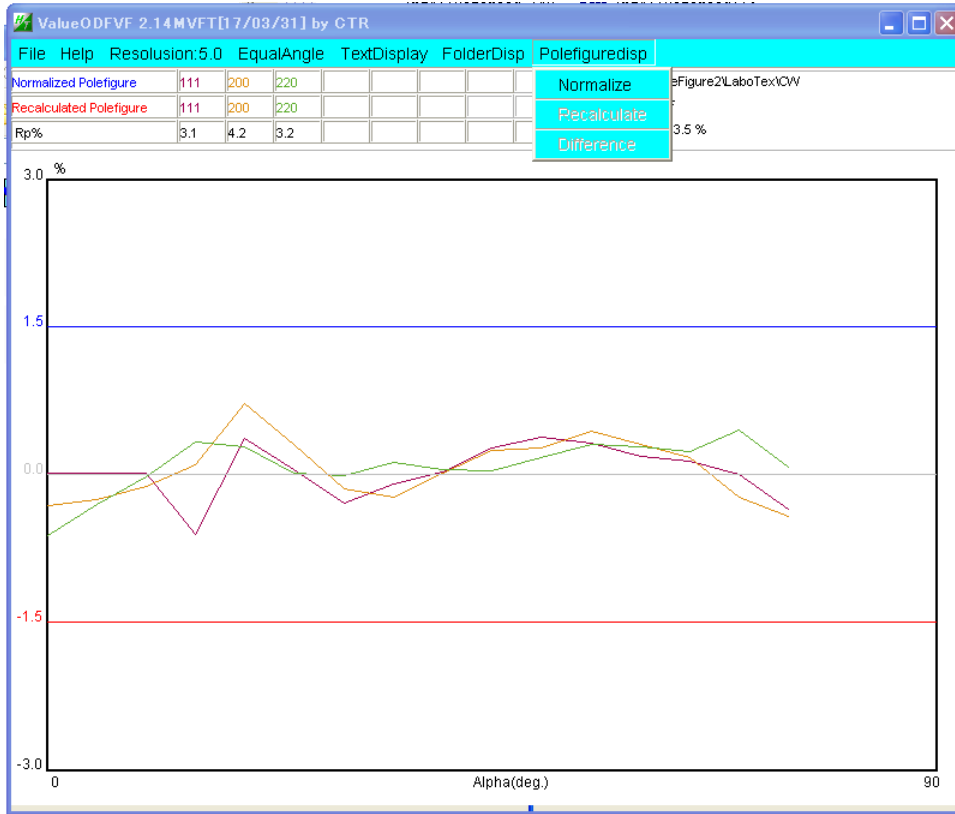
WIMV の場合、.RAW ファイルと.WPF ファイル

Hermonic 法の場合、.RAW ファイルと.FUL ファイルを同時に選択する。



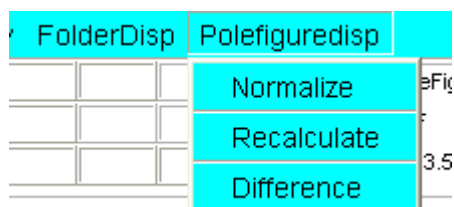
1.5. 入力極点図、再計算極点図、残差極点図の表示

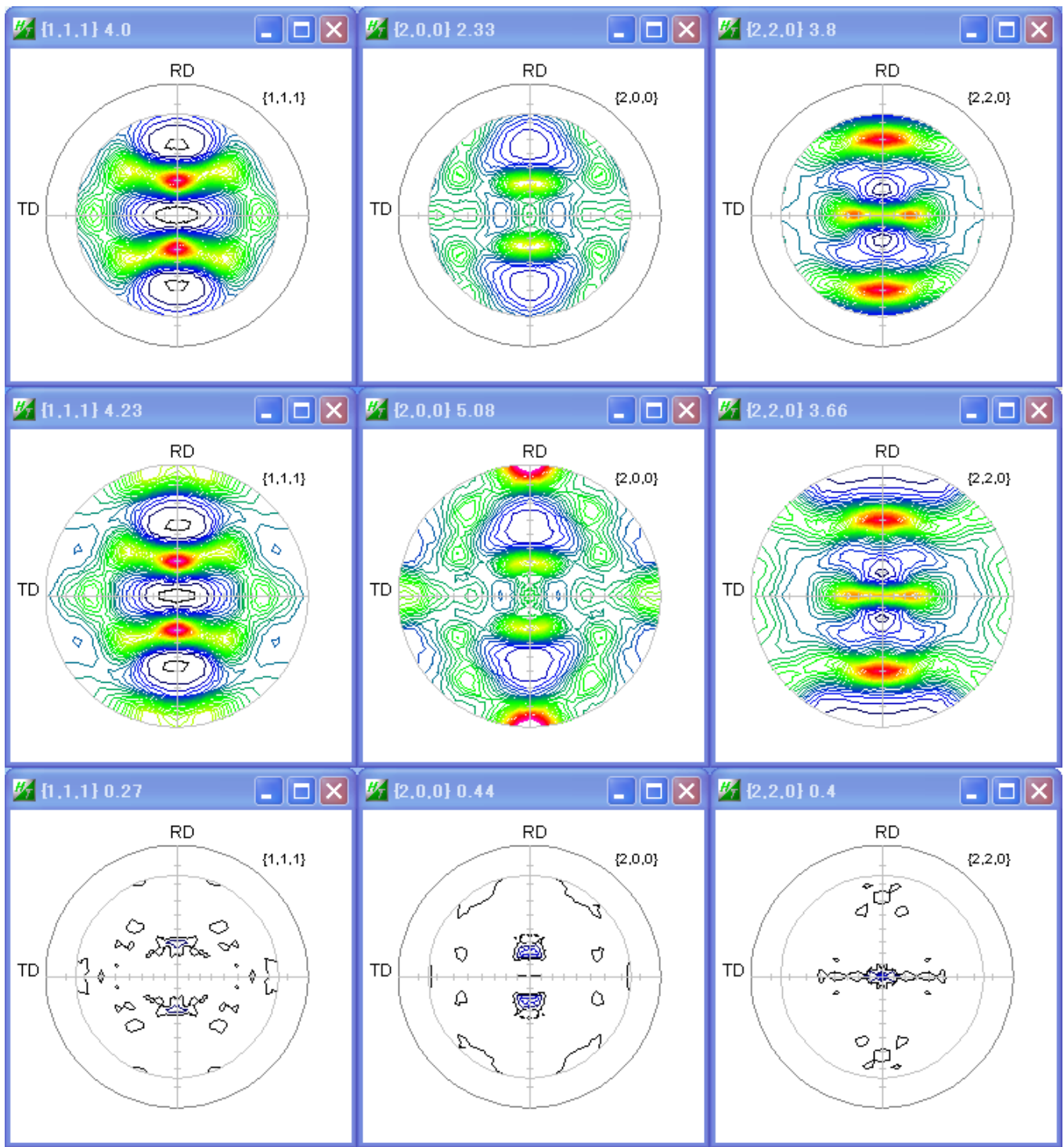
PoleFigureDisp により極点図を表示



最大値を Input Max Intens に登録し、CounterDisplay

同様に、 Recalculate, Difference を表示





残差は入力極点図と再計算極点図の差の絶対値として表示しています。

ValueODFVFを終了しても、ODFDisplayの画面は残ります。
各々個別に終了してください。

16. LaboTexのMonoclinicなどの指数変換

LaboTexの場合、PFtoODF3ソフトウェアで指数変換が行われる。

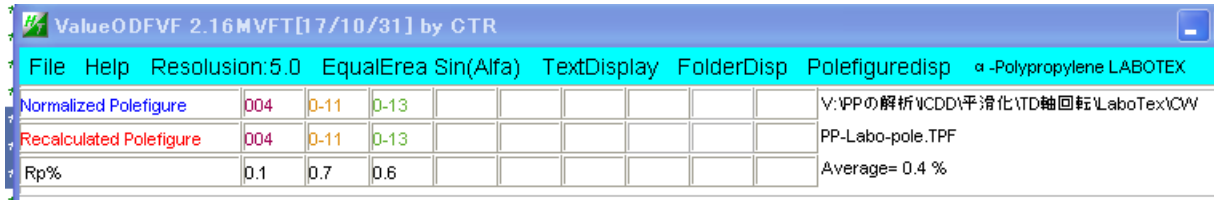
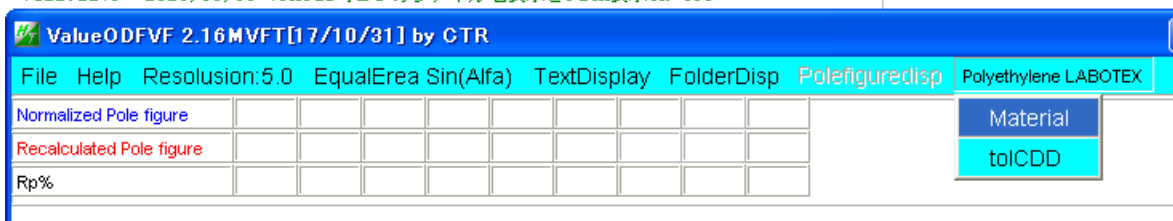
ICDD

LaboTex

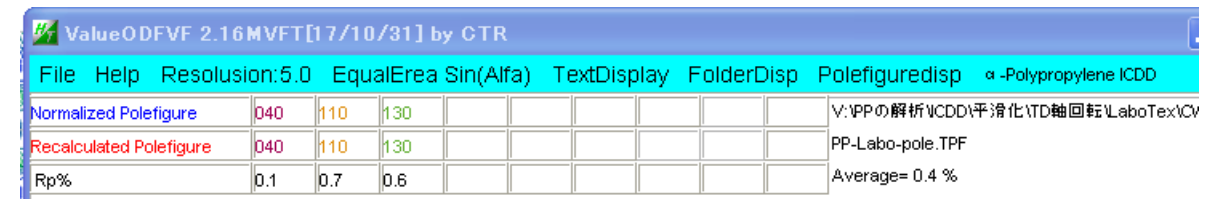
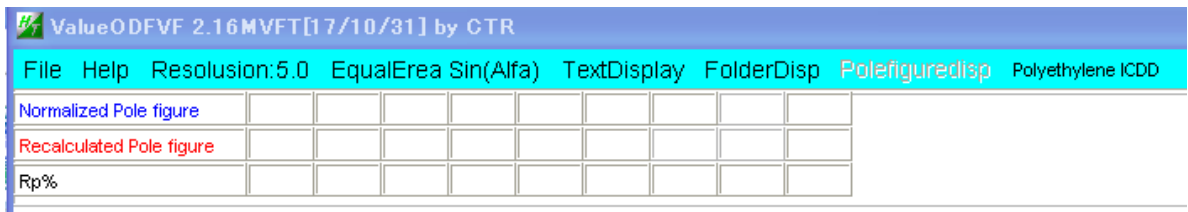
0	2	0	0	0	2
1	0	0	0	-1	0
1	1	0	0	-1	1
0	4	0	0	0	4
1	3	0	0	-1	3
-1	2	1	1	1	2
1	1	1	1	-1	1
-1	3	1	1	1	3
1	2	1	1	-1	2
1	3	1	1	-1	3

LaboTexから出力されるTPFファイルは、LaboTex表示で扱われる・この極点図指数表示をICDD表示でおこなう場合以下の機能を使う。

材料を選択し



toICDDを選択する。

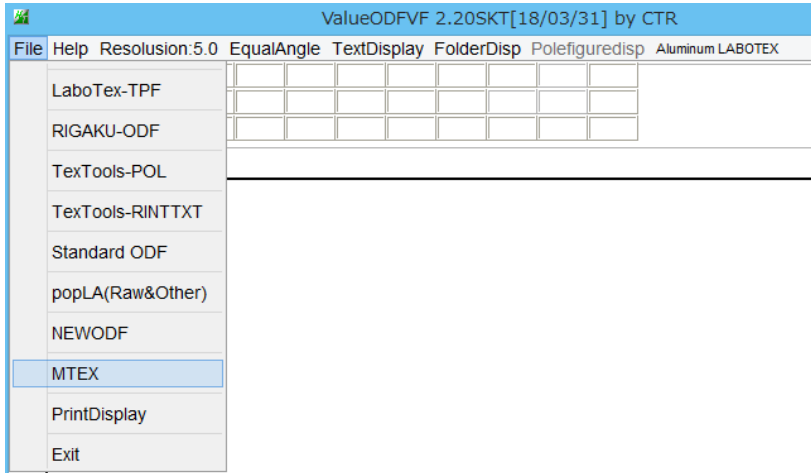


17. MTEXODFの場合

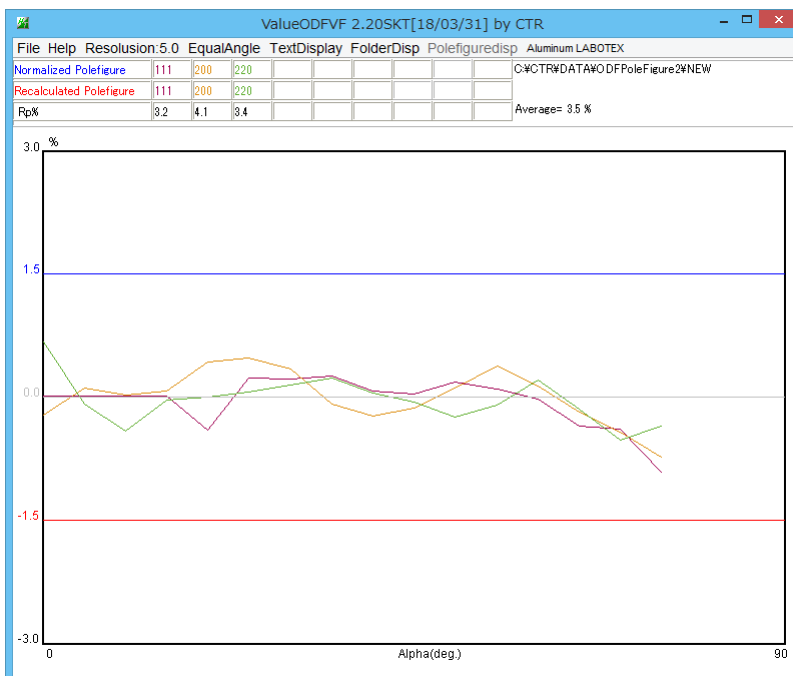
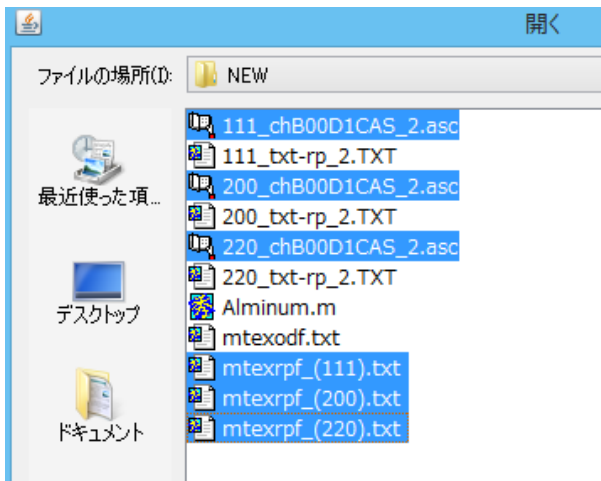
MTEXでは再計算極点図をExportするには

>> export(pdf, 'mtexrpf.txt') 極点図毎のファイルが作成される

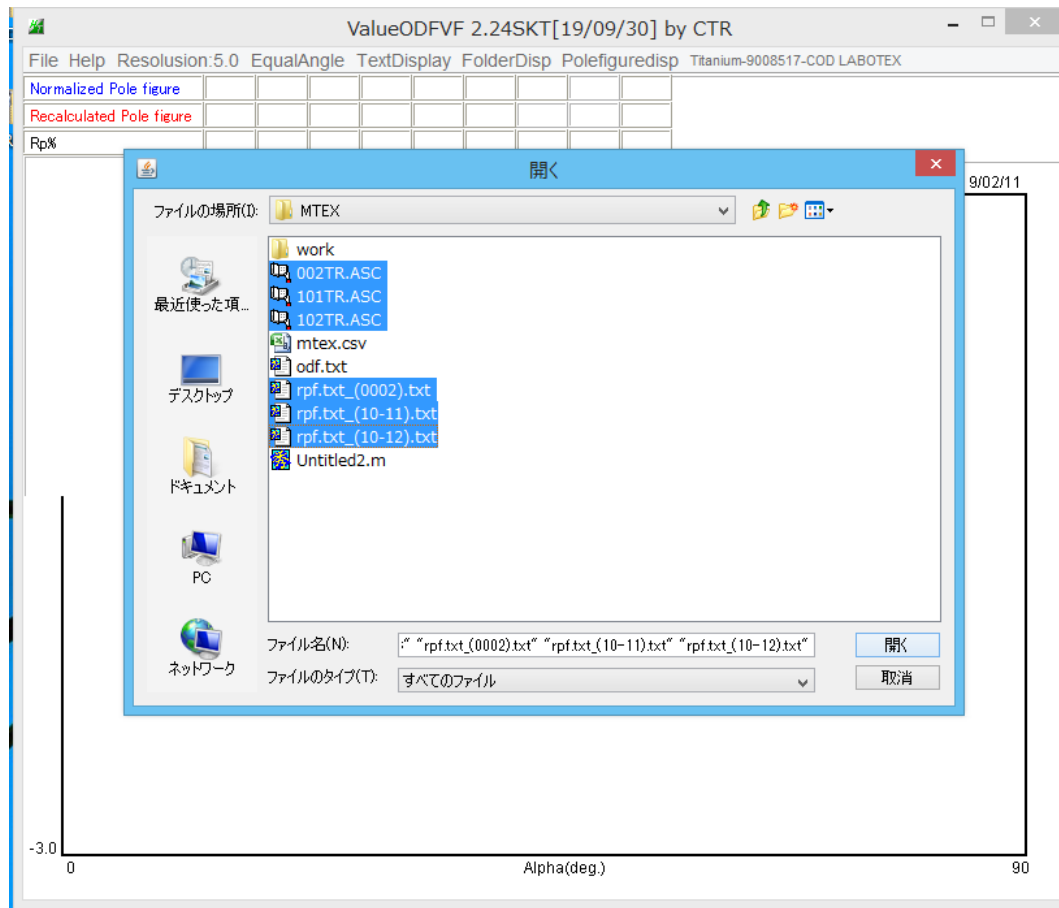
mtexrpf.txt_(111).txt	2018/01/29 5:17	テキスト文書	67 Ki
mtexrpf.txt_(200).txt	2018/01/29 5:17	テキスト文書	67 Ki
mtexrpf.txt_(220).txt	2018/01/29 5:17	テキスト文書	67 Ki



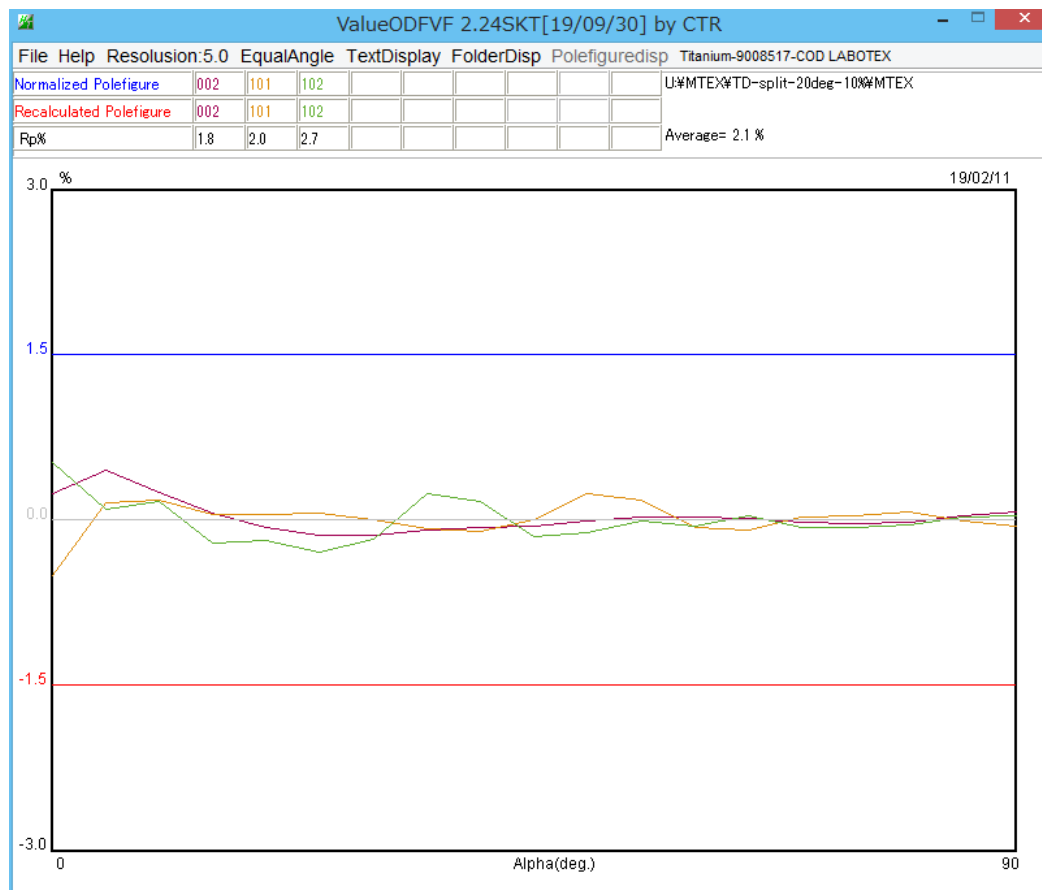
複数ファイル指定により Rp %が計算される。



4 指数の場合

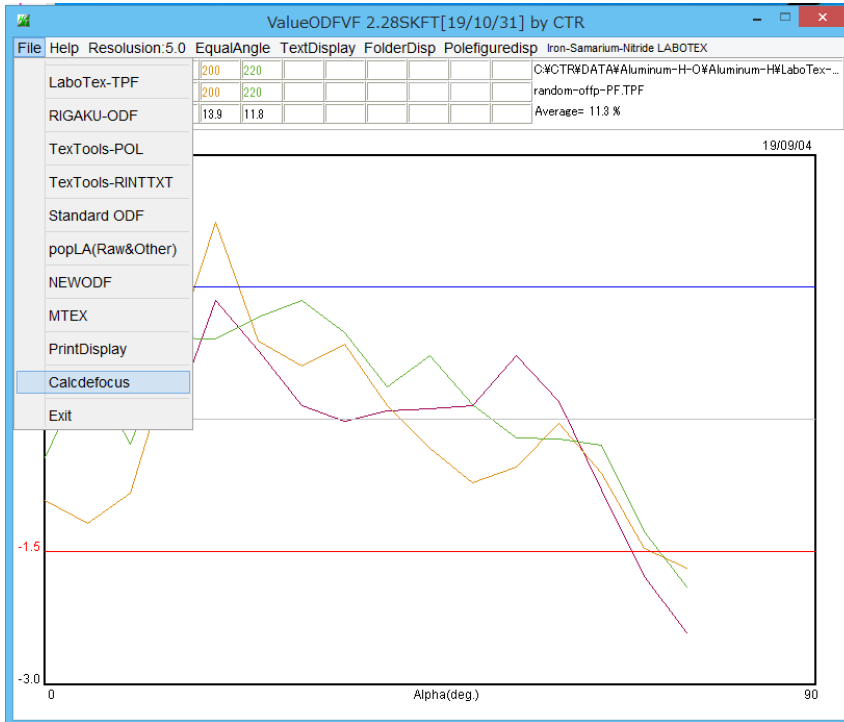


3 指数として扱う

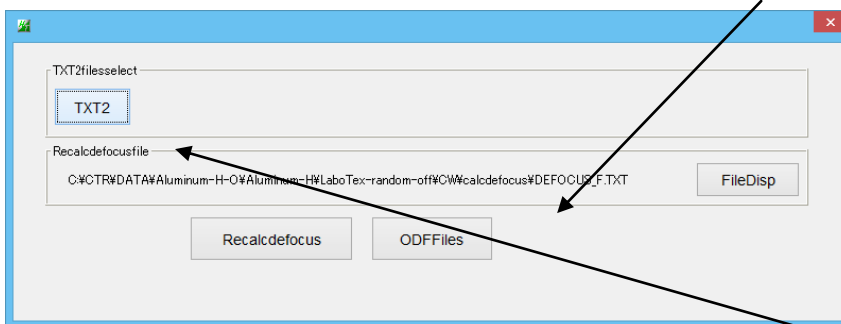


18. 再計算 defocus 処理

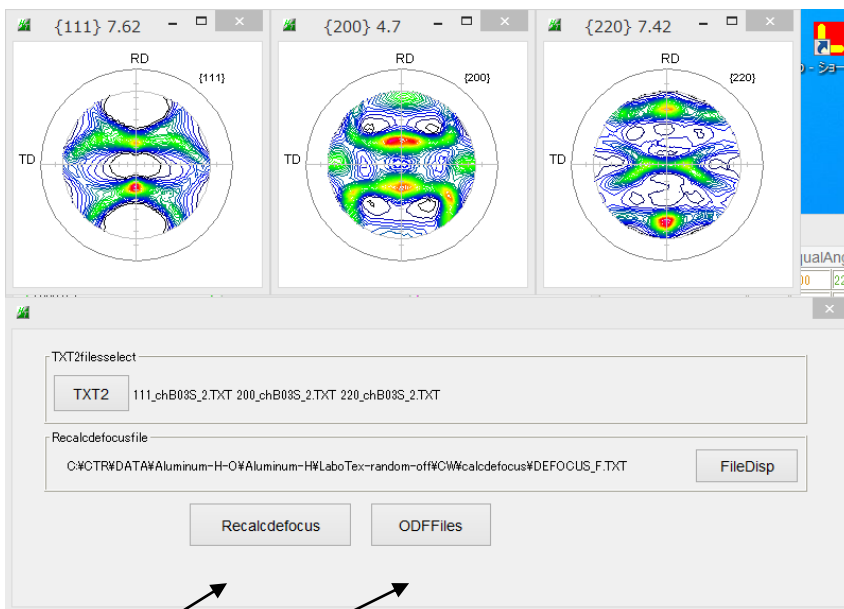
18.1 吸収を含まない場合



選択されたデータからデ計算に使用する defocus 曲線が計算される



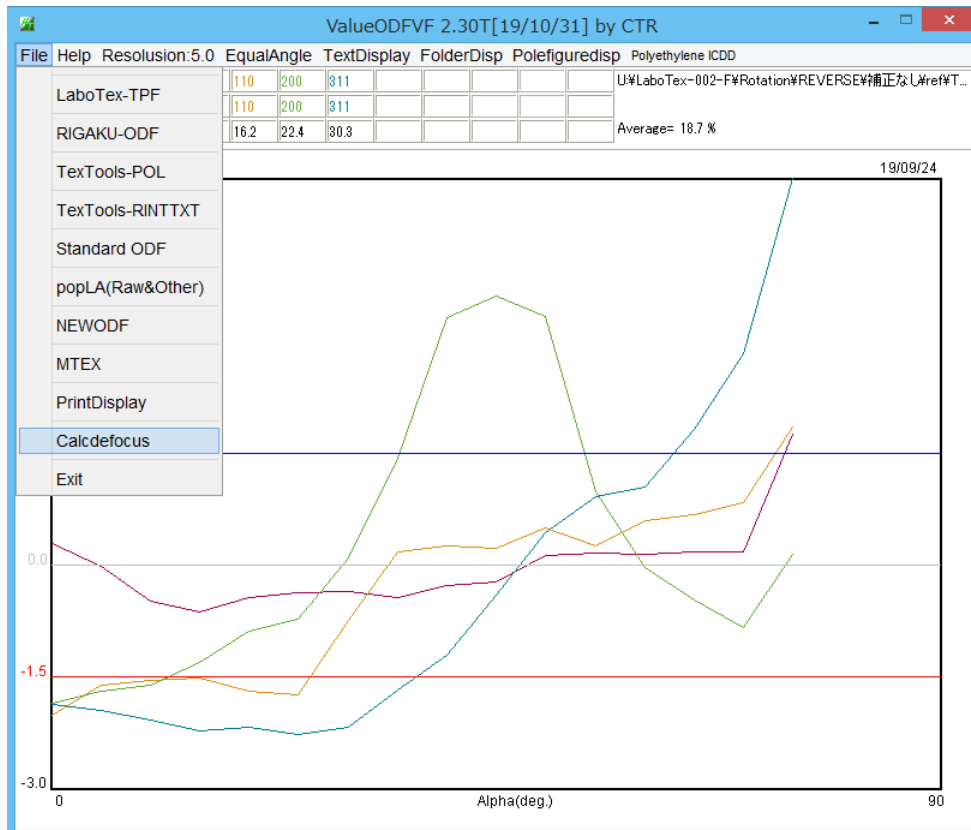
ODF 解析に使用した TXT 2 データ (PFtoODF3 への入力データ) を選択



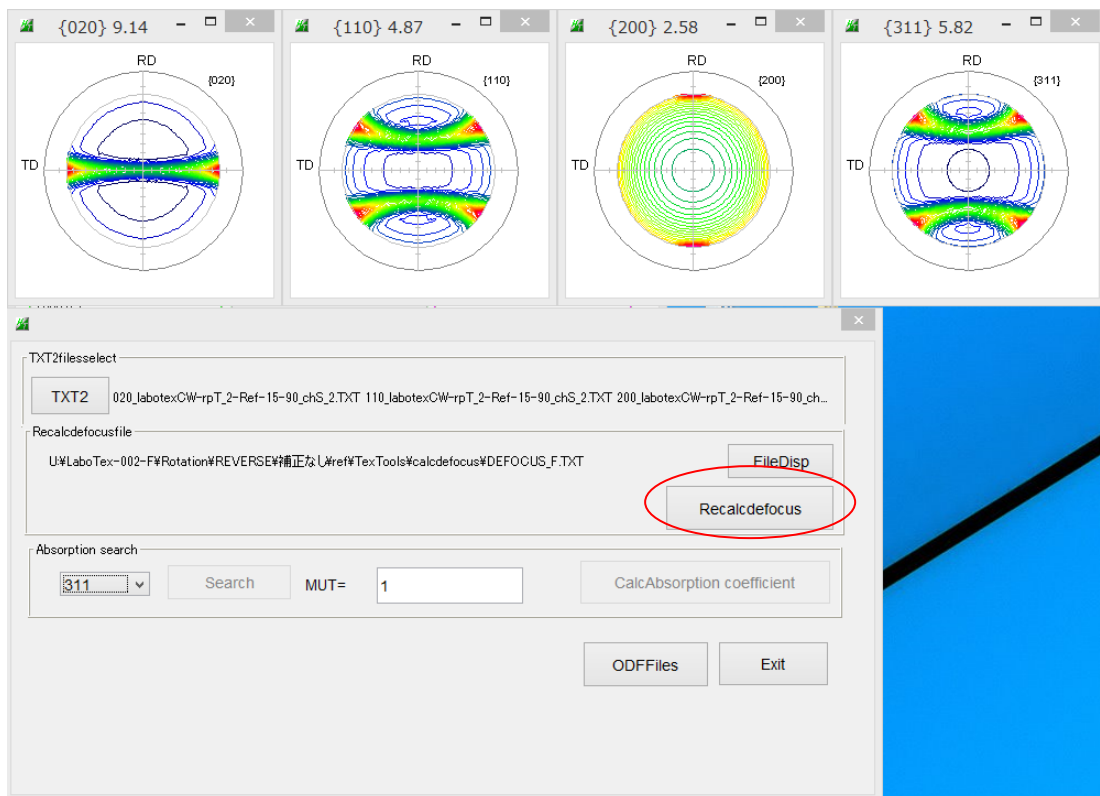
再計算し、ODFFiles で PFtoODF3 ソフトウェアにデータが渡される。
ODF 計算する。

1 8 . 2 吸収を含む場合

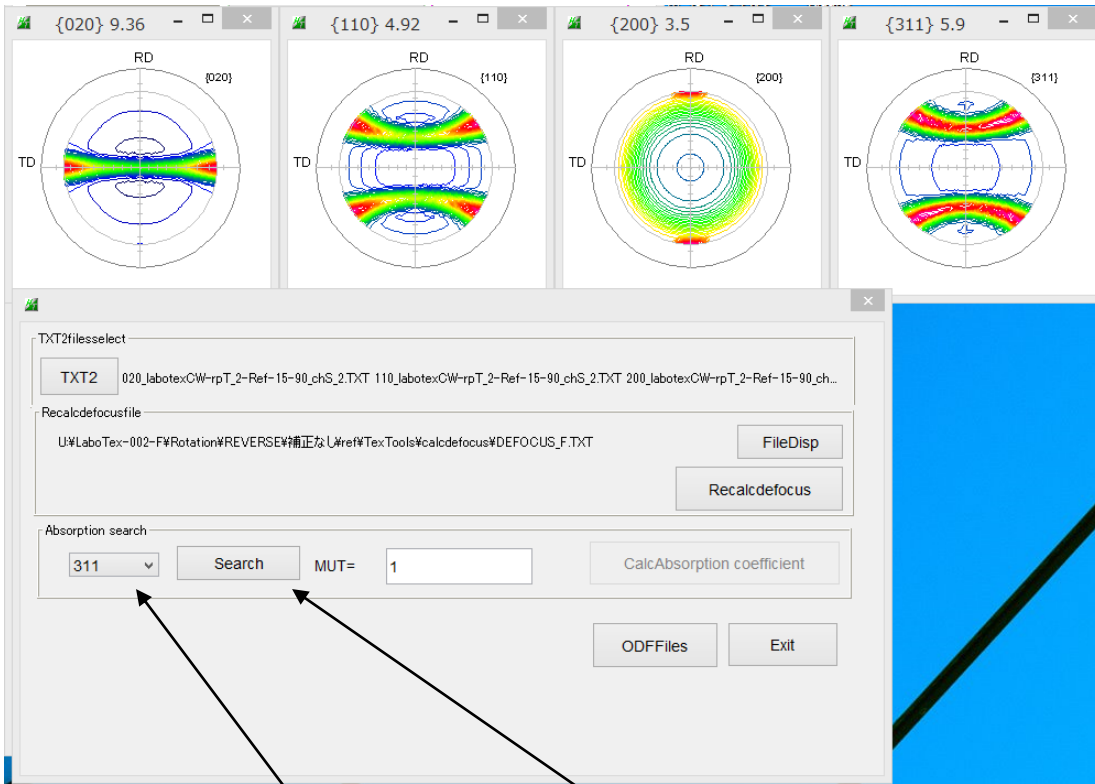
高分子材料などでは、極点図の外側で密度がアップすることがあります。



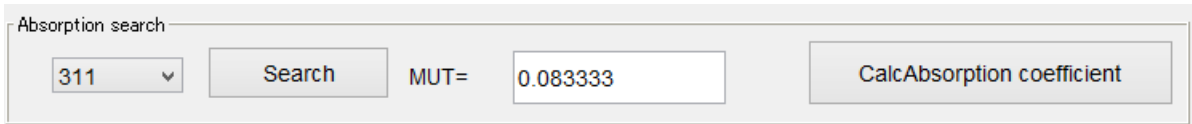
このような場合、defocus計算から補正吸収係数を計算し補正を行う。



ODF入力TXT2ファイルを選択し、再defocus補正を行う。

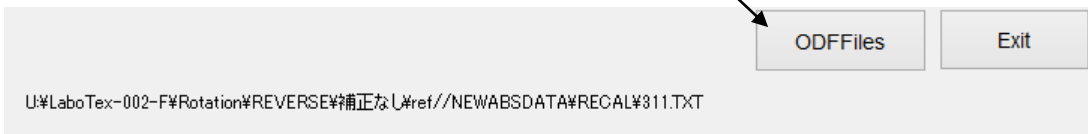


変化の大きい極点図から $\mu u * t$ を計算



$\mu u * t$ から極点図の吸収補正を行う。







再度ODF計算をおこなうため、PF t o ODF 3 にデータを渡す。



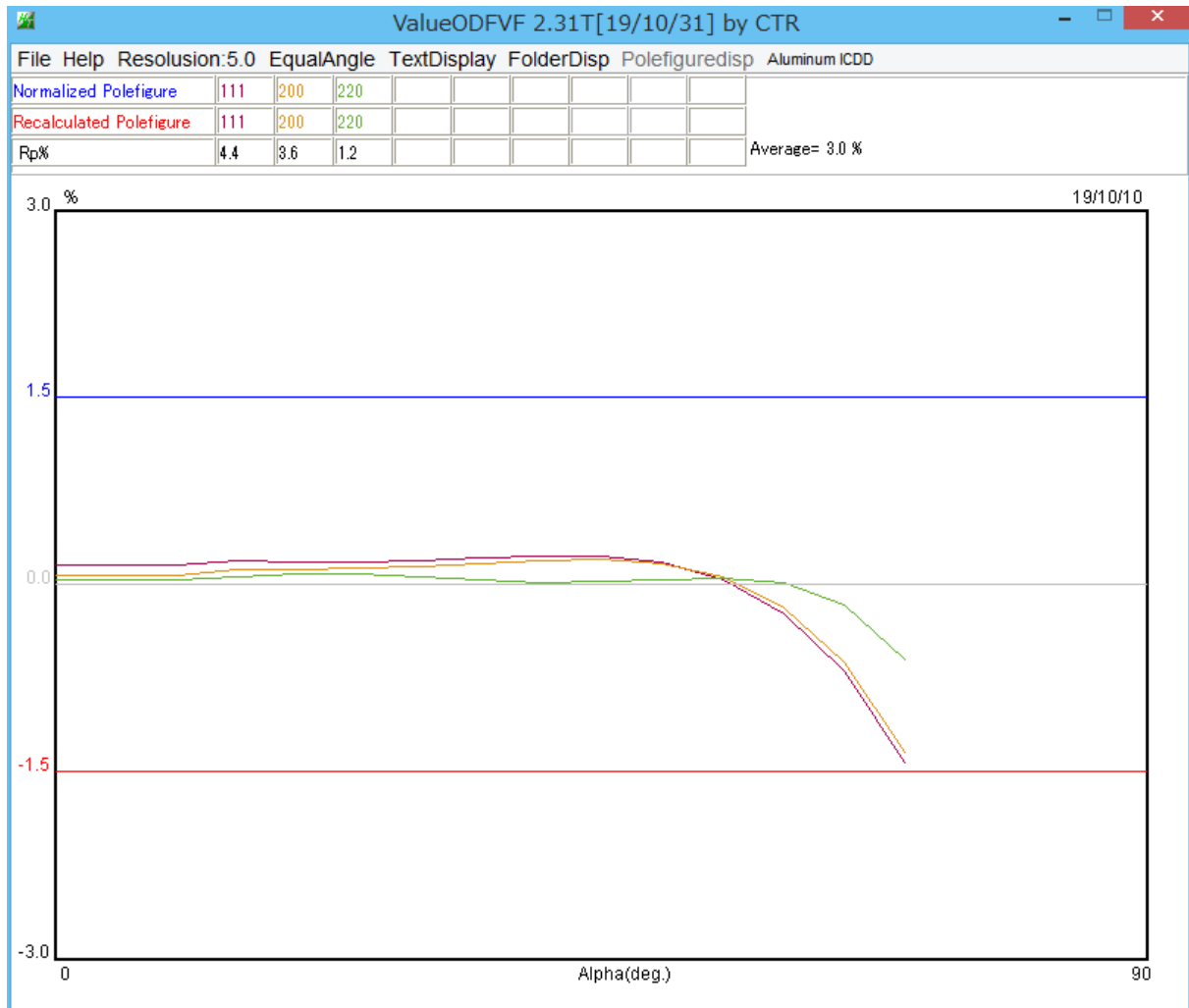
9. TXT2の場合

本機能は、シュミレーションなどの確認の為に作成した。

以下はpopLAソフトウェアの確認を行った。

 111_75_rp_2.TXT	2019/10/10 8:21	テキスト文書	22 KB
 200_75-rp_2.TXT	2019/10/10 8:21	テキスト文書	22 KB
 220_75-rp_2.TXT	2019/10/10 8:21	テキスト文書	22 KB
 200_in75-rp_2.TXT	2019/10/10 8:17	テキスト文書	19 KB
 220_in75-rp_2.TXT	2019/10/10 8:16	テキスト文書	19 KB
 111_in75_rp_2.TXT	2019/10/10 8:14	テキスト文書	19 KB

inから逆defocusを行った。



TXT2の場合、ファイル名の長いデータを RecalculatedPoleFigure, 短いデータを normalizedPoleFoigure