TexToolsソフトウエアと周辺ソフトウエアの使い方 (Rigaku, Bruker, PANalyticalデータに対応)



Soft¥TexTools¥TexTools ソフトウエアと周辺ソフトウエアの使い方

- 1. 概要
- 2. 入力データ
- 3. 極点図データ補正
 - 3.1 測定データの選択
 - 3.2 データ処理条件を設定
 - 3.3 一括正極点図データ処理
 - 3. 4 TexTools用入力データの作成
 - 3. 5 PFtoODF3プログラムにTXT2
- 4. TexToolsで読み込む
 - 4.1 TexTools計算結果ODF図、極点図を表示
- 5. 配向評価総合パッケージCTRソフトウエア
 - 5.1 ValueODF で入力極点図と再計算極点図の比較を行う。
 - 5, 2 ODFDisplay
 - 5.3 MakePoleで極点図表示
 - 5.4 Fiberを表示
 - 5.5 結晶方位密度List表示
 - 5. 6 ODF図から結晶方位{hkl}<uvw>の決定
 - 5,7 GPODFDisplayの活用
 - 5.8 再計算極点図の活用
 - 5.9 再計算極点図の等高線表示



1. 概要

TexToolsソフトウエアは、カナダResMat社によるODFソフトウエアであり、ADC法が採用されているが、内部に級数展開法的な動作も認められるソフトウエアである。

R i g a k u A S C データ形式を入力、

Bruker社 (Uxd), PANalytical (TXT, xrdml)はASC変換ソフトウエアで 対応しています。

今回、配向評価総合パッケージCTRソフトウエア(2014/05/25)との関連で、操作方法の 説明を行います。

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 A1材

- 3. 極点図データ補正
 - 3. 1 ODFPoleFigure2 ソフトウエア

(詳しくは、<u>http://www.geocities.jp/helpertex2</u>)

ODFPoleFigure2 ソフトウエアを起動

M ODFPoleFigure2 3.46YT[16/06/30] by CTR
File Linear(absolute)3D ToolKit Help InitSet BGMode Measure(Calc) Condition Free OverlapRevision MinimumMode Rp%
Files select
Calcration Condition Previous Next Backgroud delete mode DoubleMode SingleMo. LowMode HighMode Nothing BG defocus DSH12mm+Schulz+RSH5mm Minimum mo. Peak slit 7.0 mm BG Slit 7.0 mm PeakSlit / BGSlit BG Scope 80 deg. 90 deg. Set Disp B0 Interporation Peak slit 7.0 mm PeakSlit / BGSlit BG Scope 80 deg. 90 deg. Set Disp B0 Interporation Peak slit 7.0 mm PeakSlit / BGSlit BG Scope 80 deg. 90 deg. Set Disp B0 Interporation PeakSlit / BGSlit BG Scope 80 deg. 91 deg. Set Disp B0 Interporation PeakSlit / Profile B0 Interporation PeakSlit / BGSlit BG Scope 80 deg. 91 deg. Set Disp B0 Interporation PeakSlit / BGSlit BG Scope 80 deg. 91 deg. Set Disp B0 Interporation PeakSlit / Profile B0 Interporation PeakSlit / BGSlit BG Scope 80 deg. 91 deg. Set Disp B0 Interporation PeakSlit / Profile B0 Interporation PeakSlit / Profile B0 Interporation PeakSlit / BGSlit BG Scope 80 deg. 91 deg. Set Disp B0 Interporation PeakSlit / BGSlit BG Scope 80 deg. 91 deg. Set Disp B0 Interporation PeakSlit / BGSlit BG Scope 80 deg. 91 deg. Set Disp B0 Interporation PeakSlit / BGSlit BG Scope 80 deg. 91 deg. Set Disp B0 Interporation PeakSlit / BGSlit BG Scope 80 deg. 91 deg. Set Disp B0 Interporation PeakSlit / BGSlit BG Scope 80 deg. 91 deg. Set Disp B0 Interporation PeakSlit / BGSlit BG Scope 80 deg. 91 deg. Set Disp B0 Interporation PeakSlit / BGSlit BG Scope 80 deg. 91 deg. Set Disp B0 Interporation PeakSlit / BGSlit BG Scope 80 deg. 91 deg. Set Disp B0 Interporation PeakSlit / BGSlit BG Scope 80 deg. 91 deg. Set Disp B0 Interporation PeakSlit / BGSlit BG Scope 80 deg. 91 deg. Set Disp B0 Interporation PeakSlit / BGSlit BG Scope 80 deg. 91 deg. Set Disp B0 Interporation PeakSlit / BGSlit BG Scope 80 deg. 91 deg. Set Disp B0 Interporation PeakSlit / BGSlit BG Scope 80 deg. 91 d
Defocus(1) functions file Make defocus function files by TXT2 Files TextDisp
Defocus(3) function files folder(Calc unbackdefocus) BB185mm Limit Alfa Defocus value Free(LimitValue=0.0)
Defocus(2) function files folder(Calc backdefocus) DSH12mm+Schulz+RSH5mm Search minimum RpM(Cubic only) O 1/Ra Profile
Smoothing for ADC Cycles 2 Weight 4 Disp JUFFles Asc Ras TXT © TXT2 ValueODFVF-B ValueODFVF-A

3.1 測定データの選択



3.2 データ処理条件を設定する。

バックグランドは計算で補正する。

ODFPoleFigure2 3.46YT[16/06/30] by CTR 🗸
le Linear(absolute)3D ToolKit Help InitSet BGMode Measure(Calc) Condition Free OverlapRevision MinimumMode Rp%
SC(RINT-PC) VILLE 111.ASC 200.ASC 220.ASC
hkl
Backgroud delete mode
🛛 💿 DoubleMode 🔘 SingleMo 🔘 LowMode 🔘 HighMode 🔘 Nothing BG defocus DSH1.2mm+Schulz+RSH5mm 💌 🗌 Minimum mo
eak slit 7.0 mm BG Slit 7.0 mm 🗹 PeakSlit / BGSlit BG Scope 80.0 deg. 90.0 deg. Set Disp
uscular Schulz reflection method → Absorption coefficien 13.9 1/cm Thickness 0.1 cm → 2Theta 38.46 deg. © 1/Kt Profile Defocus file Select
Make defocus function files by TXT2 Files V Standardize
Defocus(3) function files folder(Calc unbackdefocus) BB185mm Limit Alfa Defocus value Free(LimitValue=0.0)
Defocus(2) function files folder(Calc backdefocus) DSH1.2mm+Schulz+RSH5mm Search minimum Rp%(Cubic only) 1/Ra Profile
Smoothing for ADC
Cycles 2 Weight 4 Disp
defocusはデータベースから計算 処理結果はTXT2データ Rp%の最適化
3 3 一任正極占図データ処理
Image: Constraint of the second
R p %の最適化で、極点図が最適かが行われます。
Search Rp% (1,1,1) 2.27% -> 2.29% (2,0,0) 4.4% -> 4.18% (2,2,0) 5.34% -> 4.89% Filemake success!!
Cancel Calc ODF File ODF File ODF File がアクティブとなる。
テキストデータも作成されている。
111_chGB02D2S_2 2012/09/23 9:14 テキスト文書 22 KB
1 200_chGB02D25_2 2012/09/23 9:14 テキスト文書 22 KB
■ 220_CRGE02D2S_2 2012/09/23 9:14 デギスト文書 22 KB
2012/07/25 10:15 ASC ファイル 22 KB
2012/07/25 10:15 ASC ファイル 22 KB

3. 4 TexTools用入力データの作成

Cancel	

ODF File

ODF File を押す。

3.5 PFtoODF3プログラムにTXT2データが引き継がれる。

Calc

Material Aluminum.txt			Initialize	Start
Structure Code(Symmetries after Schoenfiles)	7 - 0 (cubic)	•	i getHK	.<-Filenam
a 1.0 <=b 1.0 <=c 1.0 alfa 9	10.0 beta 9	0.0 gamm 90.0	All	FileSelect
PF Data			_	
SelectFile(TXT(b,intens),TXT2(a,b,intens.))	h,k,l	2Theta Alfa Area	AlfaS Alfa	E Select
2 111_chB02D2S_2.TXT	1,1,1	38.46 0.0->75.0	0.0 75.	
200_chB02D2S_2.TXT	2,0,0	44.7 0.0->75.0	0.0 75.	
220_chB02D2S_2.TXT	2,2,0	65.08 0.0->75.0	0.0 75.	
	2,1,0	0.0	0.0 0.0	
	2,1,1	0.0	0.0 0.0	
	3,1,1	0.0	0.0 0.0	
	4,0,0	0.0	0.0 0.0	
	3,3,1	0.0	0.0 0.0	
	4,2,2	0.0	0.0 0.0	
	5,1,1	0.0	0.0 0.0	
	5,2,1	0.0	0.0 0.0	
	5,3,1	0.0	0.0 0.0	
Comment 111_chB02D2S_2.TXT 200_chB02D2S_2.TX	(T 220_chB02D2S_2	.TXT		
		Labotex(EPF),popLA(RAW) filename	
Symmetric type Full Er	pf file save	labotex		

メニュー OptionからTexToolsを選択



Symmetric type Full	TexTools(pol) text	Labotex(EPF),popLA(RAW) filename labotex

TexTools (pol)を押す。

処理を行ったディレクトリに TexTools ディレクトイが作られる。

1220_chGB02D2S_2.TXT	22 KB	テキスト文書	2012/09/23 9:47
1200_chGB02D2S_2.TXT	22 KB	テキスト文書	2012/09/23 9:47
111_chGB02D2S_2.TXT	22 KB	テキスト文書	2012/09/23 9:47
न्ध्रि111.ASC	22 KB	RINT2000アスキー	2012/07/25 10:15
्र 311.ASC	22 KB	RINT2000アスキー	2012/07/25 10:15
220.ASC	22 KB	RINT2000アスキー	2012/07/25 10:15
200.ASC	22 KB	RINT2000アスキー	2012/07/25 10:15
TexTools		ファイル フォルダ	2012/09/24 13:30
_			

TexTools ディレクトリに作成されるデータ

	- · · · · ·	
📷 textools111_0.pol	38 KB POL ファイル	2012/09/24 13:30
🖻 textools200_1.pol	38 KB POL ファイル	2012/09/24 13:30
📷 textools220_2.pol	38 KB POL ファイル	2012/09/24 13:30

以上でTexTools向けデータ作成が完了

4. TexToolsでデータの読み込み

🐲 ResMat - TexT	ools		
<u>C</u> alculations <u>T</u> ools	<u>H</u> elp		
	<u> </u>	Ω Ε	
	For fiber		
Calculation Info.			
			_
Ready		Γ	NUM
ODF Calculation Set	up		
Crystal info.		Pole figure info.	
Crystal system 🛛 🖸	Jbic 💌	Number of pole figures 3	•
a 1	a 90	1st PF 2nd PF 3rd PF	
b fi	ß []]	h 2 k 2	0
		Browse PF file location	ols¥textools2:
c ji	γ 90		
✓ Normalizing pole figure:	s before ODF calculation	Resolution: 5.00	
🔽 With Orthogonal sample	symmetry	🦳 Assuming fiber texture	
Save as C:¥CTR¥E)ATA¥ODFPoleFigure2¥Tex1	Fools¥AI.HODF	

計算実行 (OK) する。

作成したデータ指定と結果ファイルを指定して



4.1 TexTools計算結果ODF図、極点図を表示



e r r o r は、C:\CTR\DATA\ODFPoleFigure2\TexTools\Al.HODF

15 15↓ 0.0100 0.0630↓ _{1%の目標が6.3%}
再計算極点図
ODF 解析結果ファイルを指定 再計算極点図ファイル名を指定
👺 ResMat - TexTools 🁺 Pole Figue Calculation
Qalculations Lools Helt Input/Output Files ODF file name: C:#CTR#DATA#ODFPoleFigure2#TexTools#ALHODF Pole figure file name: C:#CTR#DATA#ODFPoleFigure2#TexTools#ALHODF
Σ For 1 Lull Lul Select thkl) Calculation finished h 1 k 1 1
ODF Info: Cubic, a = 1.00, b = 1.00, c = 1.00, alfa = 90.00, beta = 90.00, gama = 90.00 Resolution = 5.0 degree, Sample Symmetry, No Fiber Averaging,
計算する反射指数を入力
calculate



5. 配向評価総合パッケージCTRソフトウエア

	🛃 ODFAfter Tools 1.01XT[13	/09/30] by CTR	🗖 🗖 🔀
_	File Help		
SOFFoleFigure2 3.00YT[13/09/30] by CTR File Linear ToolKit Help InitSet BGMode [LaboTex,TexTools,STD,popLA ODFExport file	ValueODF	in-out-Polefigure compare
Files select PFtoODF3	LaboTex(POD) VolumeFraction file	ODFVFGraph	Circle graph disp
Calcration Cor SoftWare	LaboTex(fOD) Volume Fraction files	CompareVolumeFraction	Circles graph disp
Previous ImageTools	ODFExportFile	ODFDisplay	Contour & fcc bcc fiber disp
Backgroud de PopLATools	ODFDisplay export files	FiberMultiDisplay	ODF fiber files dsiplay
ODFAfterTools	ODF export file	ODFEulerAngle	ODF maxF EulerAngle (hkl)[uvw]
Peak slit 7.0 PoleOrientationTools I=BG	Export PoleFigure file	MakePoleFile	TXT2,TXT,ASC

5.1 ValueODF で入力極点図と再計算極点図の比較を行う。





入力極点図と再計算極点図との差が1.5%を若干超えている。入力データと再計算極点図に違いがある。

若し、補正量などが不良な場合、ODFPoleFigure2 ソフトウエア説明書

「7.7.3 登録 defocus 曲線を変更する」により修正する事が可能

5. 2 ODFDisplayでTexToolsのODF解析結果を指定

🛃 ODFDisplay 1.21YT[13/09/30] by CTR
File RoeModeEnable Help 3dispODF OtherODF
ODF
ODFTXTFile(or ODF15) C:#CTR#DATA#ODFPoleFigure2#TexTools#ALHODF
Contour (Max=40) ODFMax= 8.009 DispMax 8 Steplevel 0.25 Number=32
Sample Symmetry(\$\$\phi1)
Orthorombic φ1range 0->90
Display- Bunge- □ Phi1 ♥ Phi2 □ PHI □ Phi1
Smoothing Cycle 4 V Center points 4 V Display

最大方位密度は 8.009 である。Steplevel を 0.25 として表示



3 面表示



1 面表示



5.3 MakePoleで極点図表示



5.4 Fiberを表示



α -fiber







解析結果のファイルが作成される。

アドレス 🛈 🛅 C:¥CTR¥DATA¥ODFP	oleFigure2¥TexTools
---------------------------	---------------------

ŀ	アドレス(D) 🛅 C.¥CTR¥DATA¥ODFPoleFigure2¥TexTools 🛛 💽 🄁					
			名前 🔺	サイズ	種類	更新日時
	ファイルとフォルダのタスク	۲	🛅 FIBER		ファイル フォルダ	2012/09/24 14:51
	🖂 新しいフォルガを作成する		📷 111.HPF	10 KB	HPF ファイル	2012/09/24 13:45
	 ※100.03795 21 FAX 9 80 ※ このフォルダを Web (ご公開する) ※ このフォルダを共有する 		🖬 200.HPF	10 KB	HPF ファイル	2012/09/24 13:46
		>	🖬 220.HPF	10 KB	HPF ファイル	2012/09/24 13:48
			🖻 AI.HODF	49 KB	HODF ファイル	2012/09/24 13:36
			📷 textools111_0.pol	38 KB	POL ファイル	2012/09/24 13:30
	7.0%		🖬 textools200_1.pol	38 KB	POL ファイル	2012/09/24 13:30
	€012	0	🖬 textools220_2.pol	38 KB	POL ファイル	2012/09/24 13:30

アドレス(1) 🛅 C:¥CTR¥DATA¥ODFPoleFigure2¥TexTools¥FIBER				💙 ラ 移動	
			名前 🔺	サイズ 種類	更新日時
	ファイルとフォルダのタスク	۲	ECC-Alpha-fiber35-ODFSMOFF-SMOFF.TXT	1 KB テキスト文書	2012/09/24

この Fiber 解析した結果の表示が FIberMultiDisplay である。

5.5 結晶方位密度List表示

データベースに選択されている結晶方位密度1 i s t を表示する。



ĺ	🛓 TextDisplay 1.11S C:¥CT	「R¥work¥ODI	FDisplay¥ODF.tx	t	-
	File Help				
	Orientation	φ1	Φ	φ2	ODF
	{0 0 1}<1 0 0> cube	0.0	0.0	0.0	8.52
	{0 1 1}<1 0 0> Goss	0.0	45.0	0.0	4.92
	{1 3 2}<6 -4 3> S	27.03	57.69	18.43	4.73
	{1 1 3}<-3 -3 2> Q2	90.0	25.24	45.0	4.61
ł	{0 1 3}<1 0 0>	0.0	18.43	0.0	3.34
ł	{0 1 2}<1 0 0> Q1	0.0	26.57	0.0	3.34
I	{1 1 2}<-1 -1 1> copper	90.0	35.26	45.0	2.95
ļ	{1 0 1}<-1 -2 1> Brass	35.26	45.0	90.0	2.78
	{0 1 1}<5 -2 2> L	29.5	45.0	0.0	2.75
	{1 1 4}<-1 -7 2>	54.74	19.47	45.0	2.67
	{2 1 3}<-1 -4 2> R	46.91	36.7	63.43	2.61
	{1 1 0}<1 -1 1> P	35.26	90.0	45.0	1.54

5. 6 ODF図から結晶方位{hkl}<uvw>の決定

OrientationDisplay が選択されている時、ODF]図上をマウスクリックで結晶方位を計算する。

マウスクリックで 計算された Euker 角度から計算された{hkl},uvw>を表示



計算された{hkl}<uvw>から結晶方位図が表示されます。

LaboTex,TexTools,STD,popLA ODFExportFile	ODFDisplay	Contour & fcc bcc fiber disp	
ODFFiber TXT ODFDisplay export files	FiberMultiDisplay	ODF fiber files dsiplay	
ODF export file	ODFEulerAngle	ODF maxF EulerAngle (hkl)[uvw]	
-ReCalc PoleFigure File Export PoleFigure file	MakePoleFile	TXT2,TXT,ASC	

5,7 GPODFDisplayの活用

GPODFDisplayソフトウエアは、各種ODF解析結果を表示するソフトウエアで、 ODFDisplayソフトウエアが、Cubicに限定されていましたが、全ての結晶系に 対応しています。特に、CubicとHexagonalで機能を発揮します。 TexToolsで{hkl}<uvw>を決定する場合、Densitometerに表示されますが 整数化した{hkl},uvw>のEuler角度表示が有りません。又、整数化した {hkl} <uvw>が 直交していない場合があります。





クリックしたEuler角度位置と計算された方位からのEuler角度が分からない



直交していない

以下にGPODFDisplayの表示例を示します。



5.8 再計算極点図の活用

ODF 計算が終了していれば、再計算極点図の計算が可能になります。

PesMat - TexTools	jure2 3.31YT[15/03/31]
Calculations Tools Help	absolute) ToolKit Help
See 10 10 10 10 10 10 10 10 10 10 10 10 10	
	ndition Next
Pole Figue Calculation	<u> </u>
_Input/Output Files	
ODF file name: C:¥CTR¥DATA¥ODFPoleFigure2¥TexTools¥sync.HODF	2
Pole figure file name: C:¥CTR¥DATA¥ODFPoleFigure2¥TexTools¥111.HPF	
Select {hkl} Galcula h 1 k 1 1 Calcula	e Help
ODF Info; Cubic, a = 1.00, b = 1.00, c = 1.00, alfa = 90.00, beta = 90.00, gama = 90.00 Resolution Symmetry, No Fiber Averaging,	n = 5.0 degree, Sample

再計算された極点図

111.HPF	2014/08/10 7:02	HPF ファイル
200.HPF	2014/05/29 7:09	HPF ファイル
220.HPF	2014/05/29 7:10	HPF ファイル

この再計算極点図からASCファイルやTXT2ファイルに変更出来れば、各種処理が可能になります。 ASCに変更すれば、RINT正極点処理で描画出来ます。

TXT2に変更すれば、配向関数で処理が可能になります。

HPFファイルの読み込みは、ODFPoleFigure2->ToolKit->ODFAfterTools->MakePoleFile

MakePoleFile	e TXT2,TXT,ASC	;	and the family of the second sec		
GPPoleDispla	ay 3D-PoleFigure	e-Display	Defense Condition Fore Operation Minim		
ODFInverseChe	cker 3D-Inverse-Dis	File Help	e 1.63YT[15/03/31] by CTR		
CompareODI	F ODFDisplay2	File	LaboTex(Recalc or Additional Pole Figure(*.TPF))		
GPODEDispla	Contour Disp	Exit	TexTools(*.HPF)]	
	ooniour prop	Step Ang	TEXT(*.TXT)		
		Out Filer	TEXT2(*2.TXT Alfa,Beta,Intens: *Polecenter=90)		
Peak slit	7.0 mm BG Slit 7.0 mm	PoleFigur	StnadrdODF(OutMax.txt->ODF13)	ame HKL.TXT	
AbsCalc			popLA(*.RAW)		
	Schulz reflection method Defocus file Select N	0	Bunge(*.PF)		
Defocus f		N	Bruker uxd format (*.uxd β =0 : TD)		
SD EX			GADDS popLARAW(*.RAW β=0: TD)		

MakePole	File 1.63YT[15/03/31] by CTR	
File Help		
File I	LaboTex(Recalc or Additional Pole Figure(*.TPF))	
Exit	TexTools(*.HPF)	
_Step Ane		

📓 {111}3.17 🛛 🖂 🕅	MakePoleFile 1.63YT[15/03/31] by CTR
	File Help
	- SelectFile
	C:\CTR\DATA\ODFPoleFigure2\TexTools\111.HPF
	Step Angles
	textools
	Put Filename
	PoleFigureCenter : 90 💿 TXT2 💿 TXT 💿 Asc 💿 TXT2 filename HKL.TXT
	C:\CTR\DATA\ODFPoleFigure2\TexTools\111_textools-rp_2.TXT
	C:\CTR\DATA\ODFPoleFigure2\TexTools\111_textools-rp_2.TXT File make Success !!
	NextSelect

ASCやTXT2を選択してOKで変換します。

5.9 再計算極点図の等高線表示

5.8で再計算極点図をTXT2に変換してあれば等高線表示も可能になります。

