

TexToolsソフトウェアと周辺ソフトウェアの使い方

(Rigaku, Bruker, PANalyticalデータに対応)

2015年06月01日



HelperTex Office

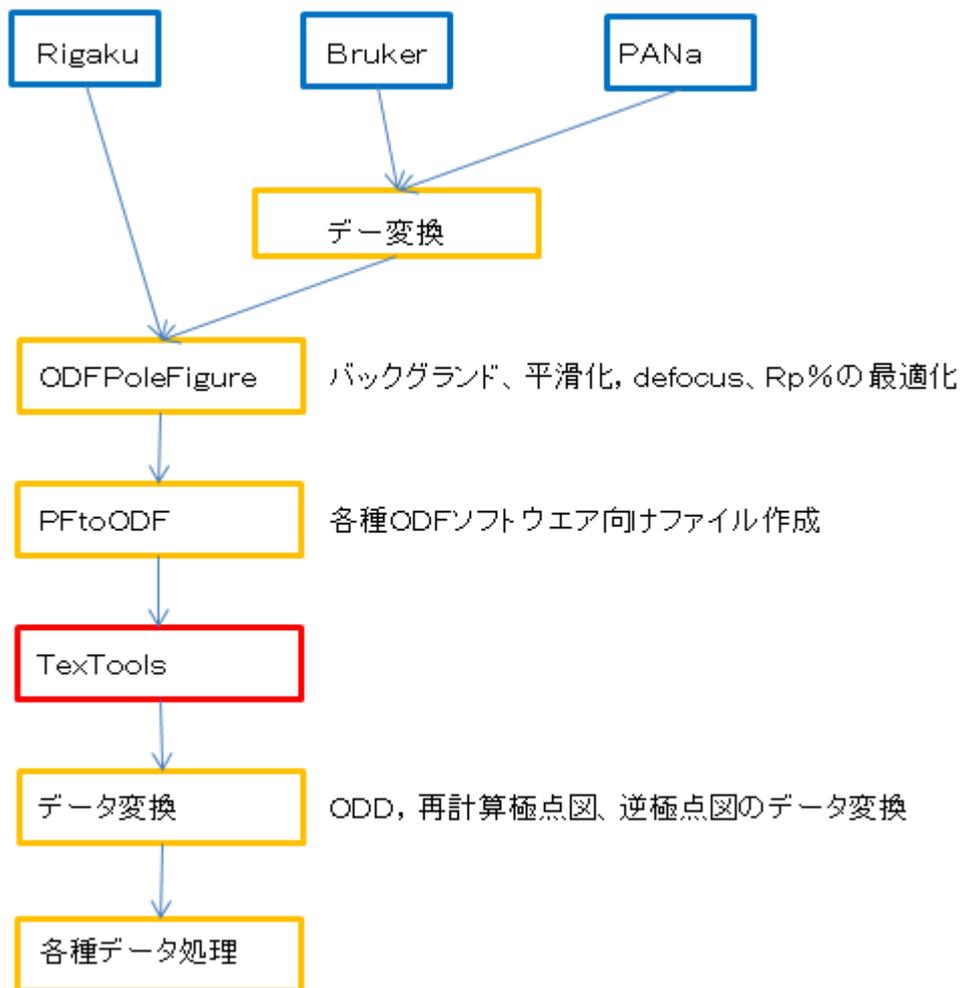
山田 義行

odftex@ybb.ne.jp

目次

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 TextTools用入力データの作成
 3. 5 PFDtoODF3プログラムにTXT2
4. TextToolsで読み込む
 4. 1 TextTools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ソフトウェア
 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

データフロー



1. 概要

TextToolsソフトウェアは、カナダResMat社によるODFソフトウェアであり、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ェアである。

RigakuASCデータ形式を入力、

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

今回、配向評価総合パッケージCTRソフトウェア(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

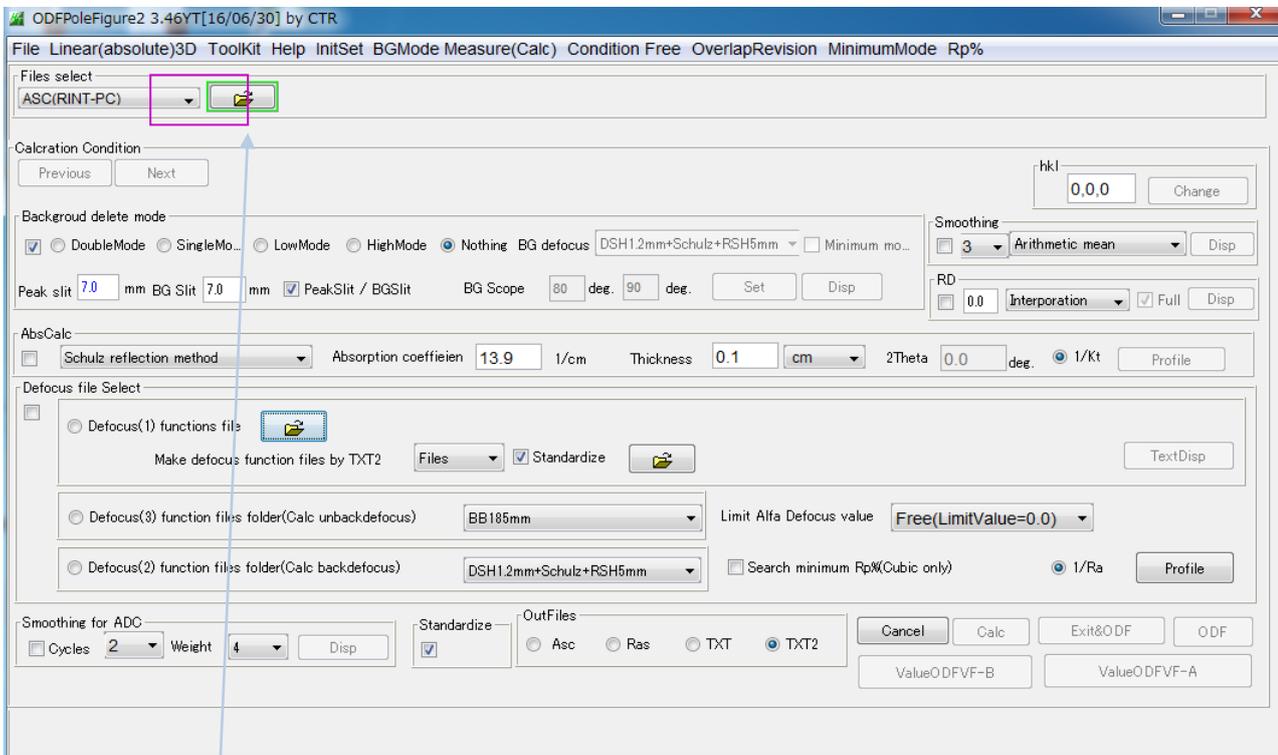
測定試料 Al材

3. 極点図データ補正

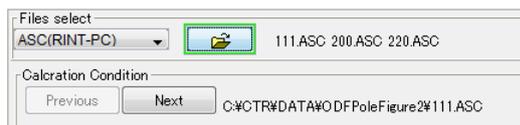
3. 1 ODFPoleFigure2 ソフトウェア

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

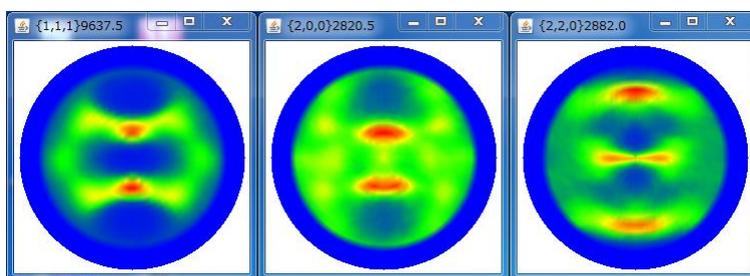
ODFPoleFigure2 ソフトウェアを起動



3. 1 測定データの選択

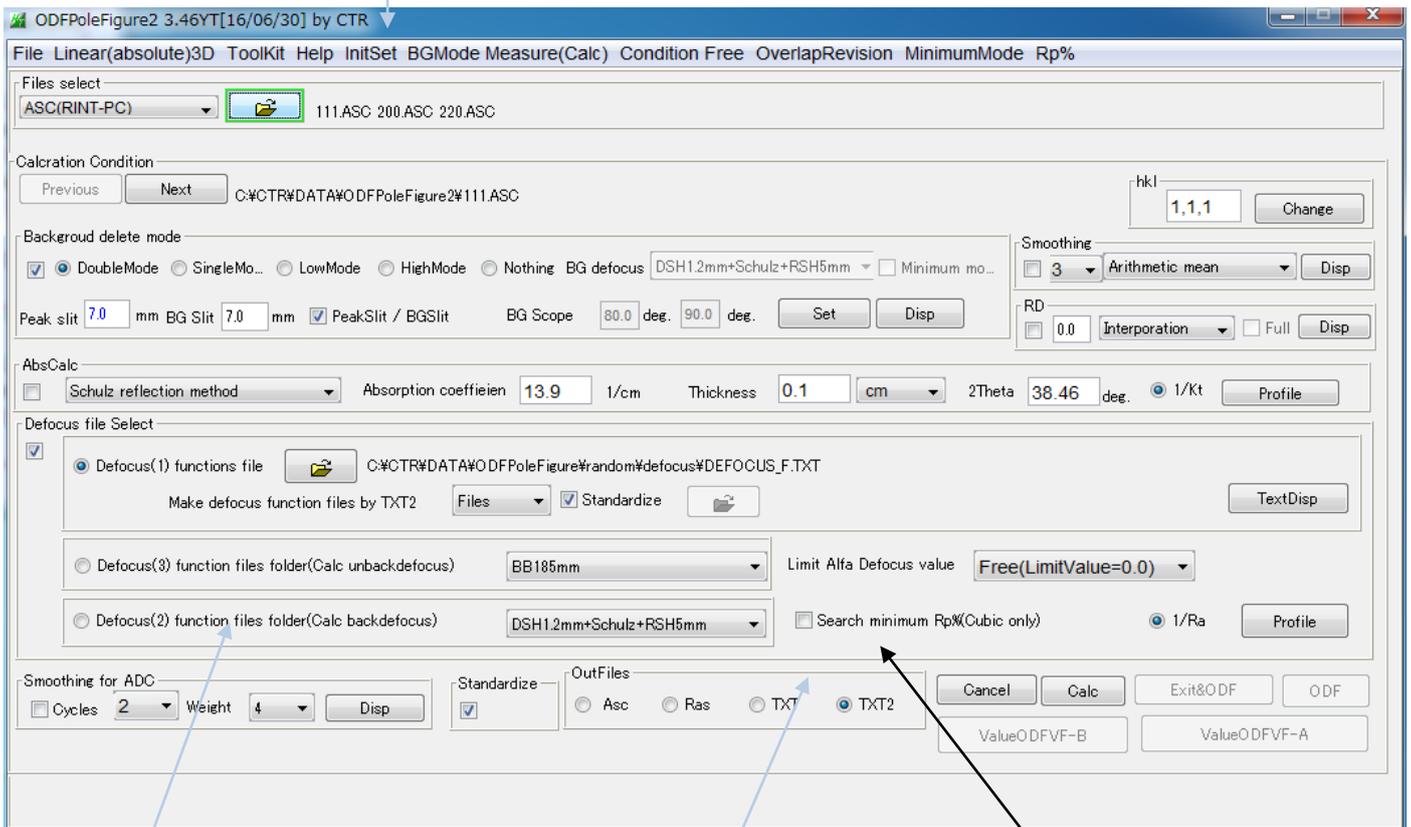


選択したファイルと極点図が表示される。



3. 2 データ処理条件を設定する。

バックグラウンドは計算で補正する。

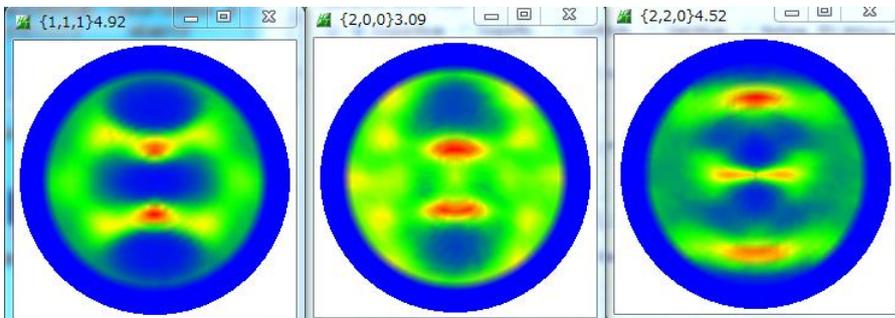


defocusはデータベースから計算

処理結果はTXT2データ

Rp%の最適化

3. 3 一括正極点図データ処理



処理された極点図が表示され、

Rp%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!!



テキストデータも作成されている。

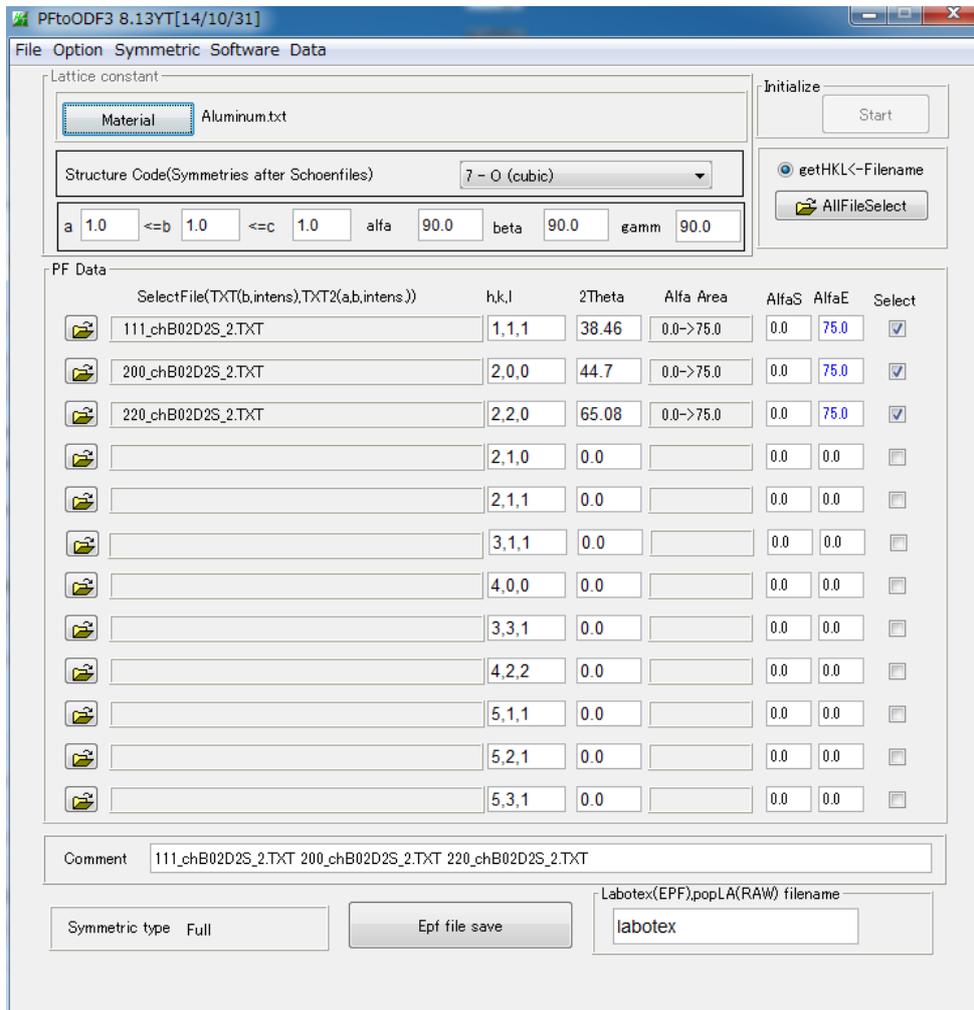
111_chGB02D2S_2	2012/09/23 9:14	テキスト文書	22 KB
200_chGB02D2S_2	2012/09/23 9:14	テキスト文書	22 KB
220_chGB02D2S_2	2012/09/23 9:14	テキスト文書	22 KB
111.ASC	2012/07/25 10:15	ASC ファイル	22 KB
200.ASC	2012/07/25 10:15	ASC ファイル	22 KB
220.ASC	2012/07/25 10:15	ASC ファイル	22 KB

3. 4 TextTools用入力データの作成

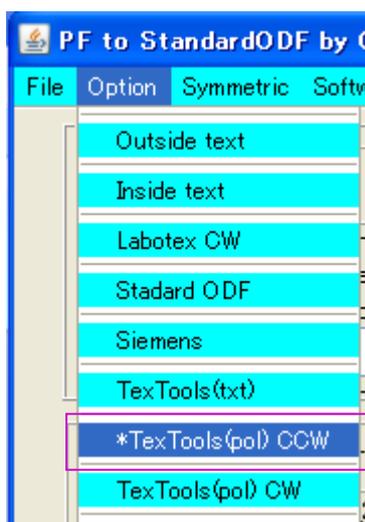


ODF File を押す。

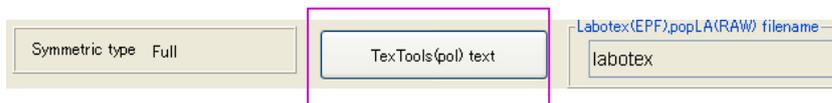
3. 5 PftoODF3プログラムにTXT2データが引き継がれる。



メニュー OptionからTextToolsを選択



TextTools(pol)txtに変化する。File から ConditionSave を行えばこの作業は不要



TextTools (pol) を押す。

処理を行ったディレクトリに TexTools ディレクトリが作られる。

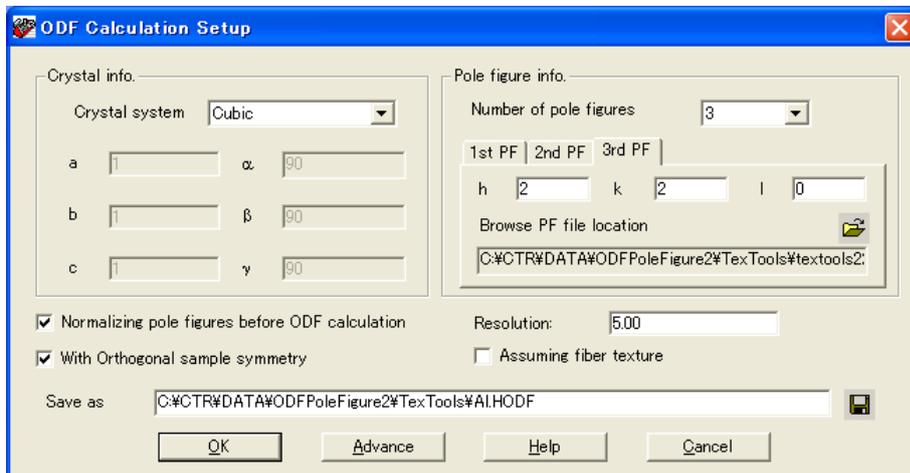
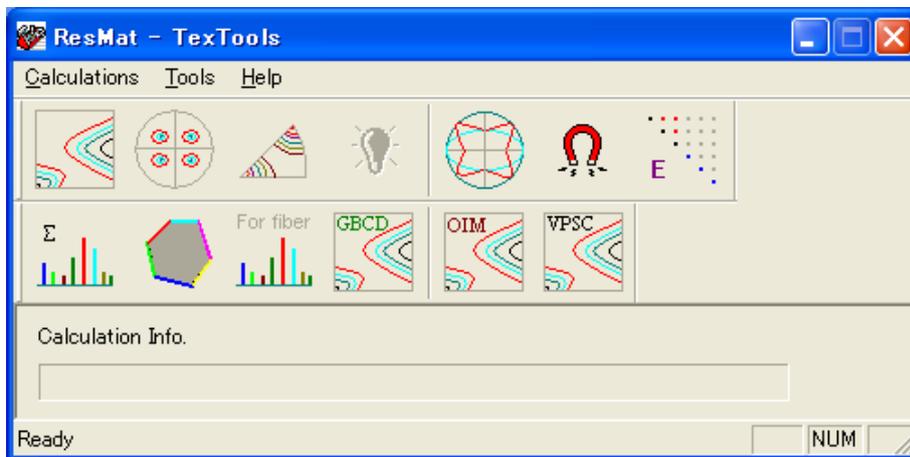
220_chGB02D2S_2.TXT	22 KB	テキスト文書	2012/09/23 9:47
200_chGB02D2S_2.TXT	22 KB	テキスト文書	2012/09/23 9:47
111_chGB02D2S_2.TXT	22 KB	テキスト文書	2012/09/23 9:47
111.ASC	22 KB	RINT2000アスキー	2012/07/25 10:15
311.ASC	22 KB	RINT2000アスキー	2012/07/25 10:15
220.ASC	22 KB	RINT2000アスキー	2012/07/25 10:15
200.ASC	22 KB	RINT2000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

texttools111_0.pol	38 KB	POL ファイル	2012/09/24 13:30
texttools200_1.pol	38 KB	POL ファイル	2012/09/24 13:30
texttools220_2.pol	38 KB	POL ファイル	2012/09/24 13:30

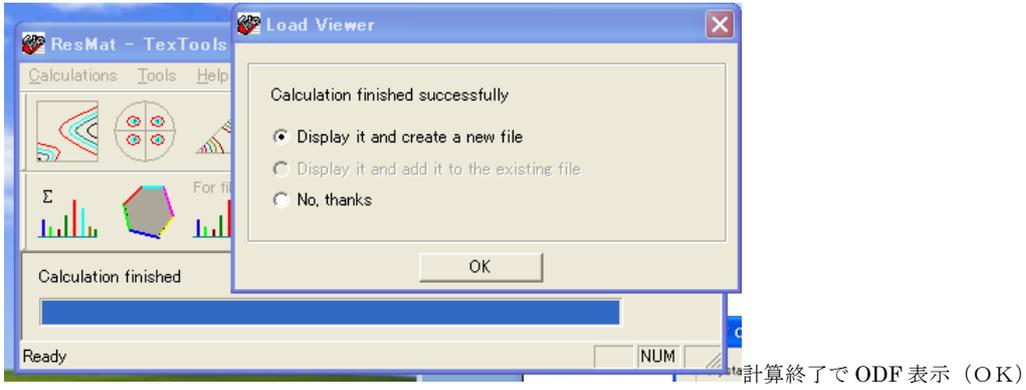
以上で TexTools 向けデータ作成が完了

4. TexTools でデータの読み込み



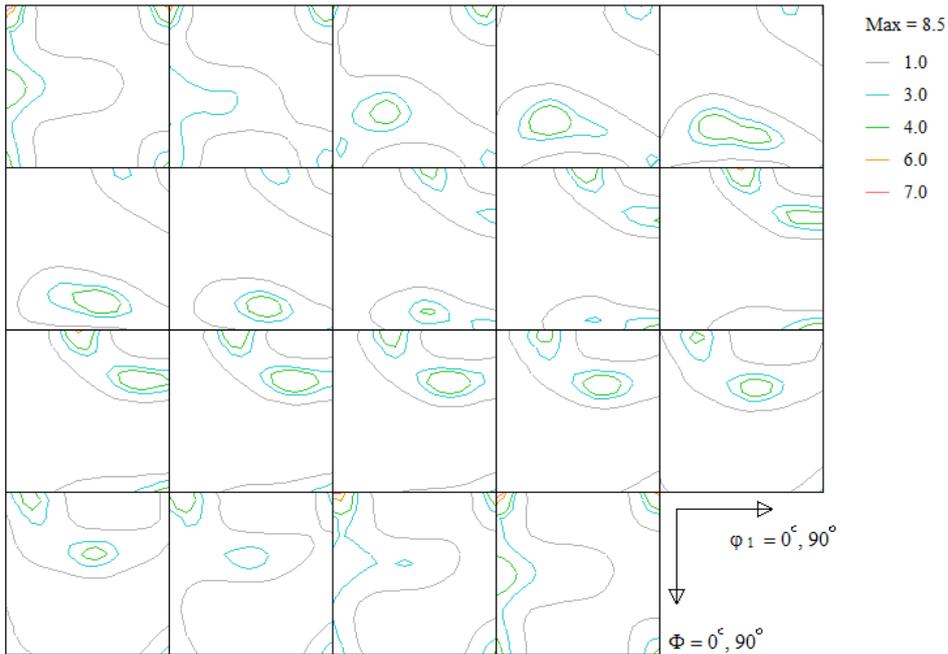
作成したデータ指定と結果ファイルを指定して

計算実行 (OK) する。



計算終了でODF表示 (OK)

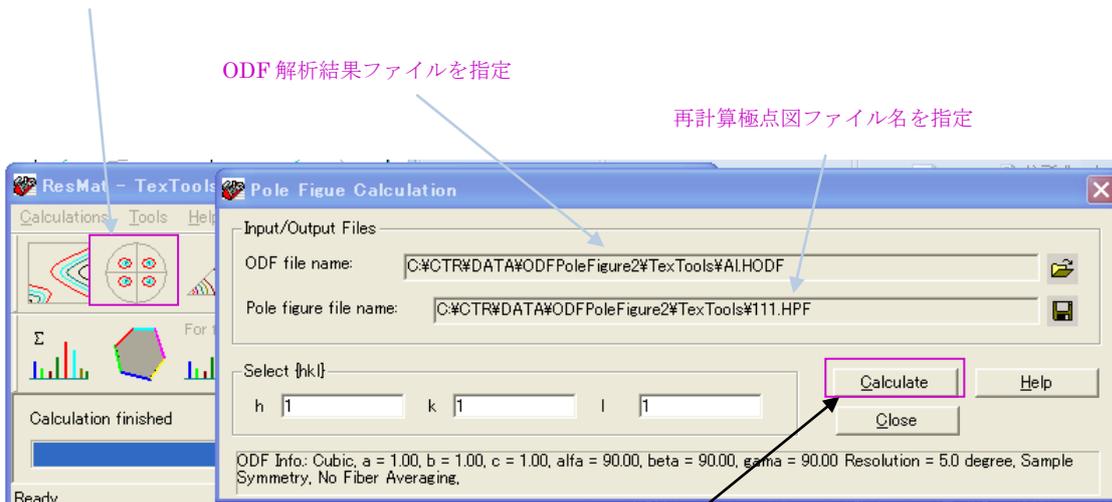
4. 1 TexTools 計算結果ODF図、極点図を表示



errorは、C:\CTR\DATA\ODFPoleFigure2\TexTools\AL.HODF

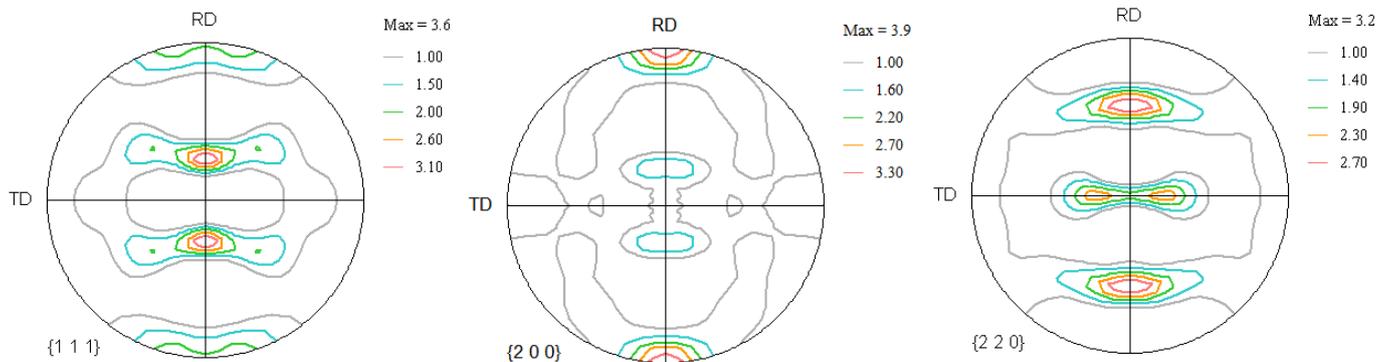
15 15↓
 0.0100 0.0630↓ 1%の目標が6.3%

再計算極点図



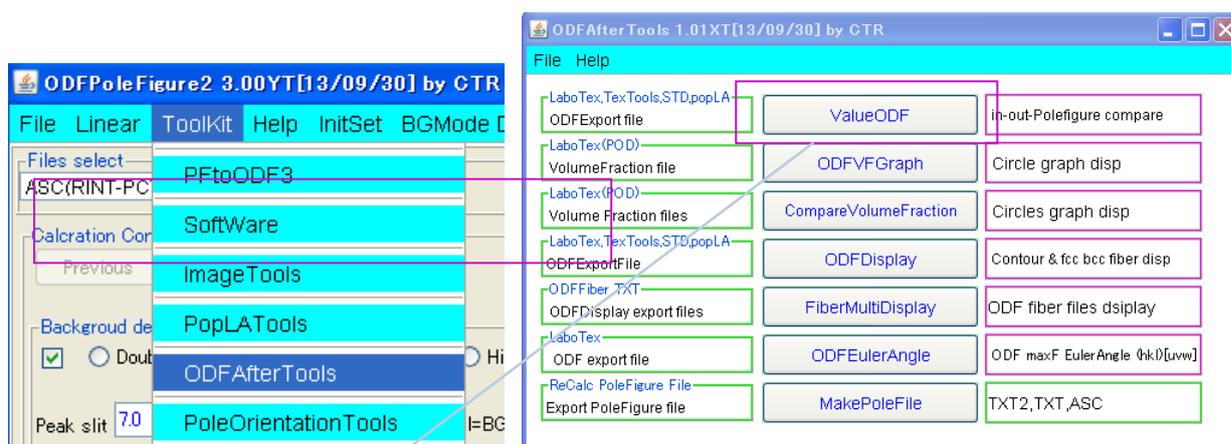
計算する反射指数を入力

calculate



同様に {200}、{220} を計算

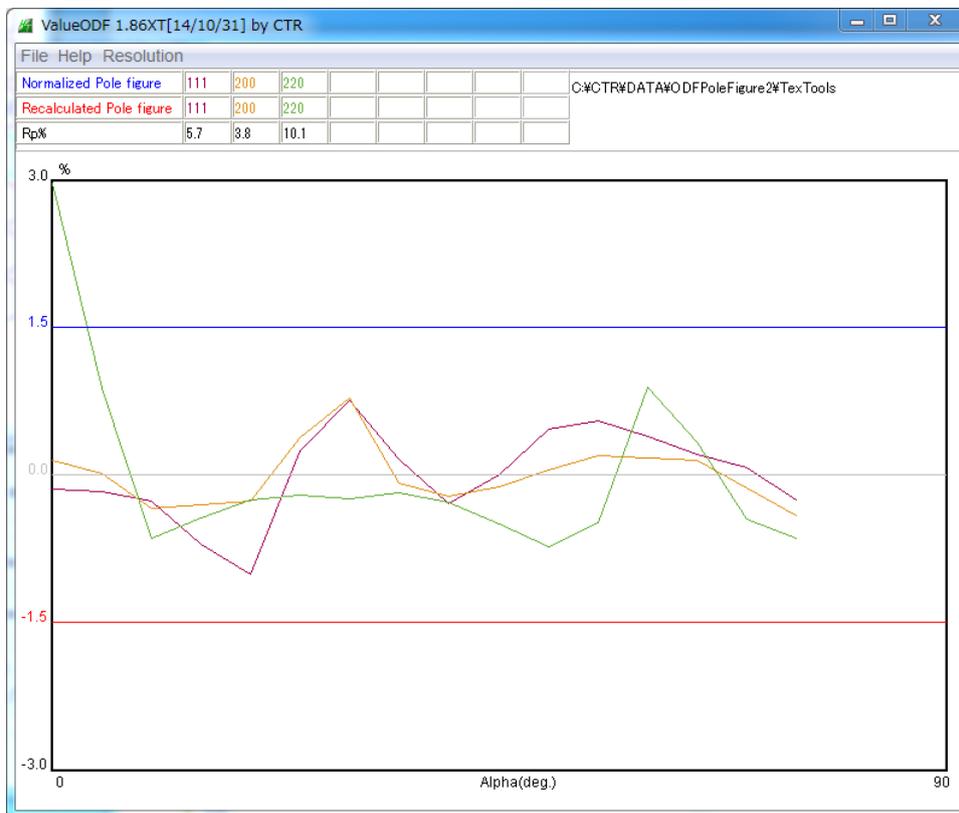
5. 配向評価総合パッケージCTRソフトウェア



5. 1 ValueODF で入力極点図と再計算極点図の比較を行う。



ValueODF で TexTools 作業ディレクトリを選択

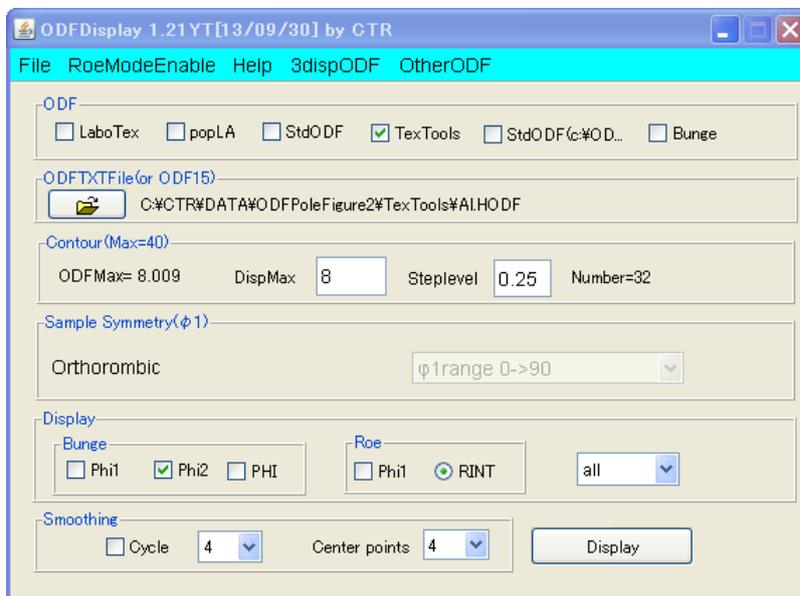


入力極点図と再計算極点図との差が 1.5%を若干超えている。入力データと再計算極点図に違いがある。

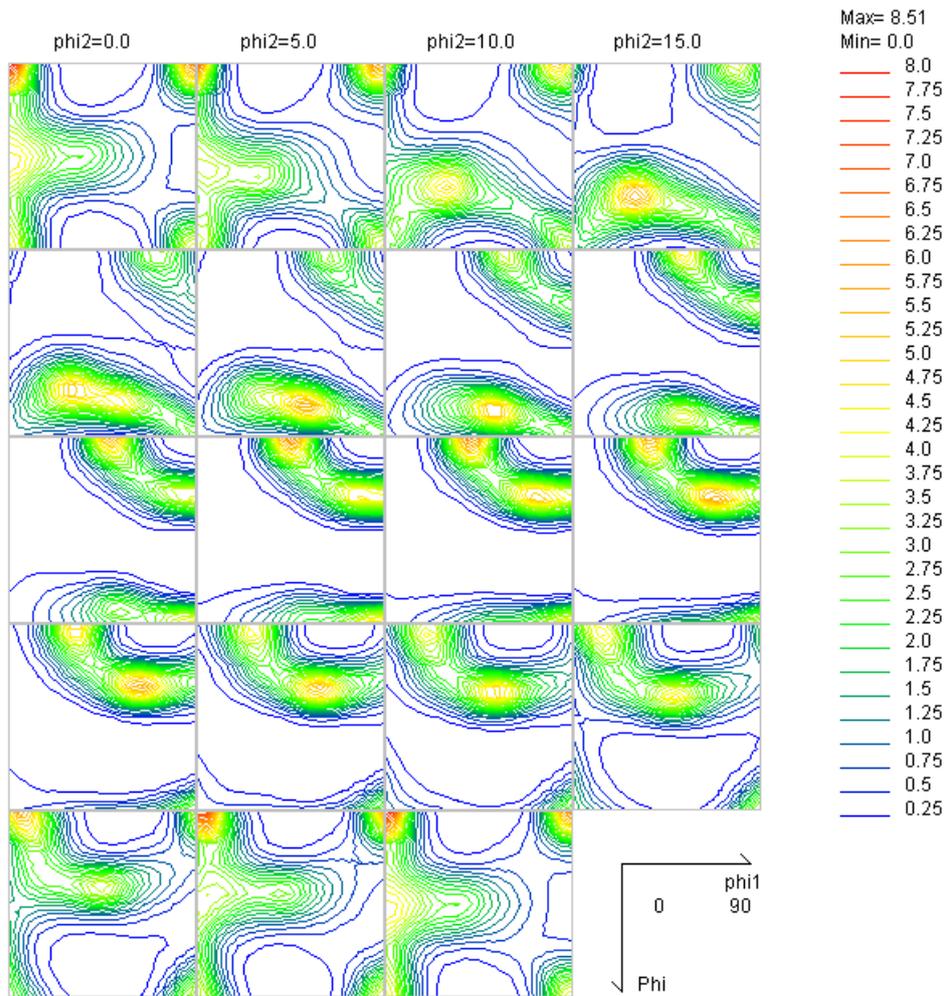
若し、補正量などが不良な場合、ODFPoleFigure2 ソフトウェア説明書

「7. 7. 3 登録 defocus 曲線を変更する」により修正する事が可能

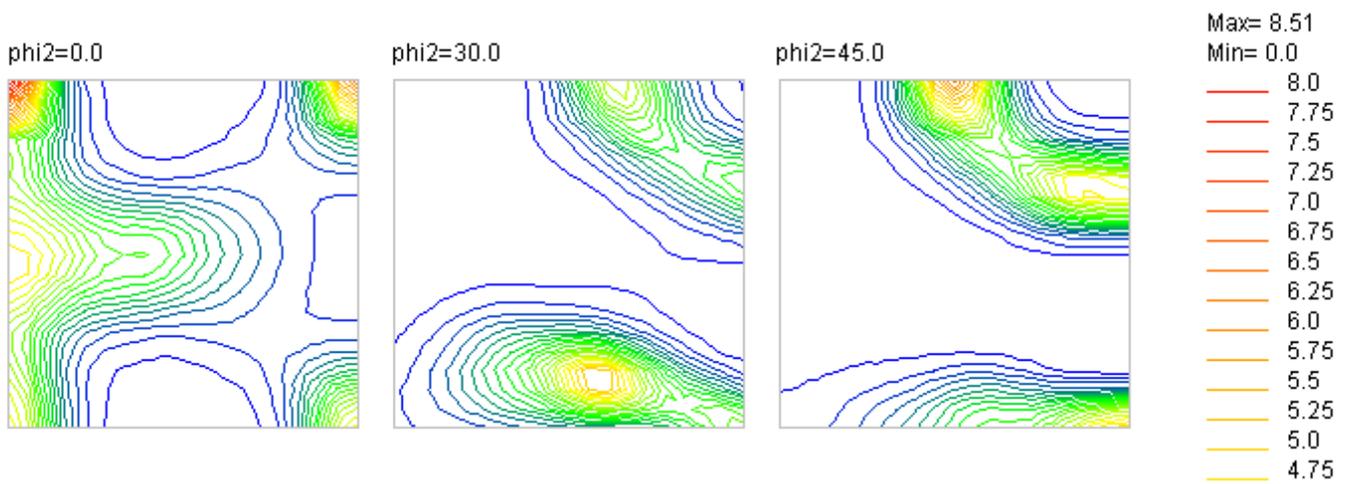
5. 2 ODFDisplay で TexTools の ODF 解析結果を指定



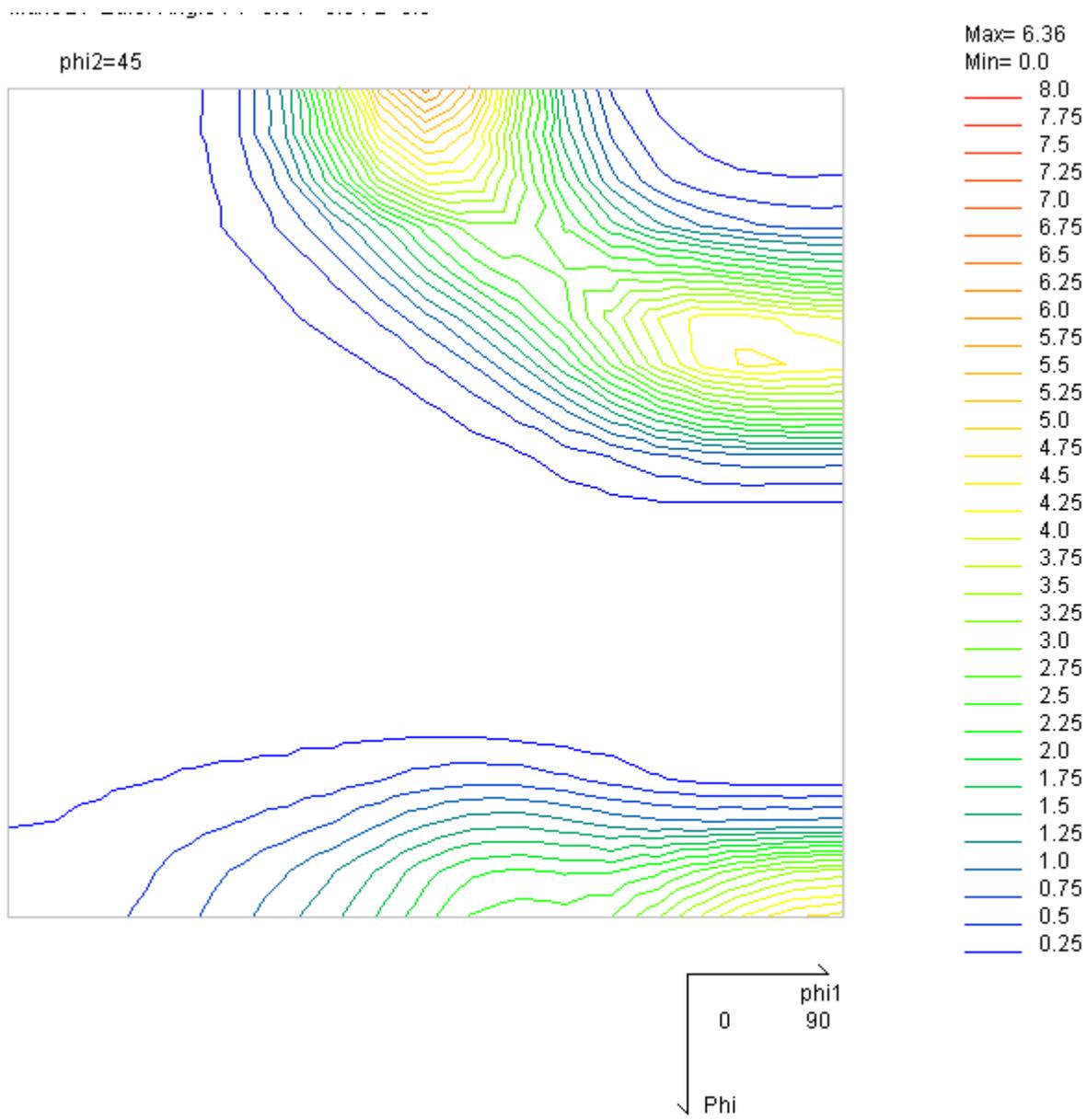
最大方位密度は 8.009 である。Steplevel を 0.25 として表示



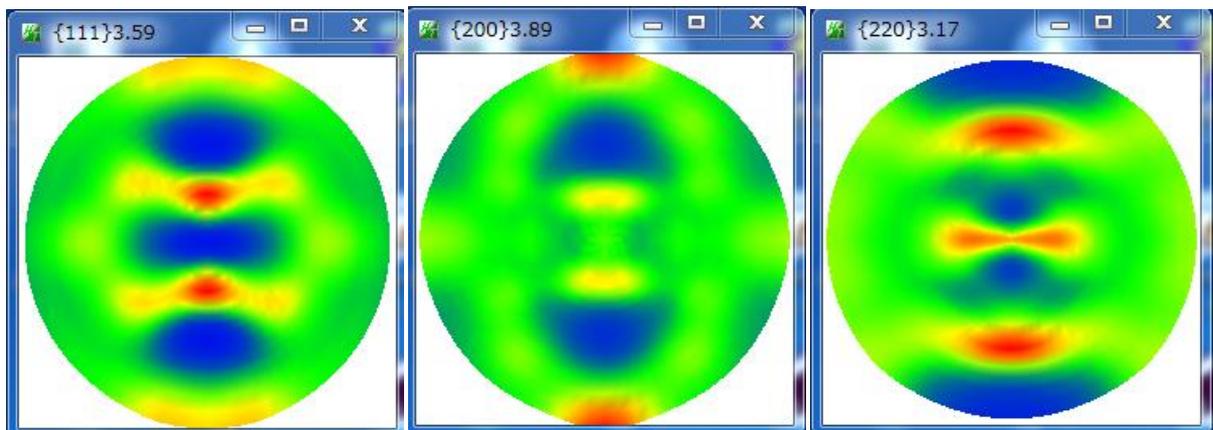
3 面表示



1面表示

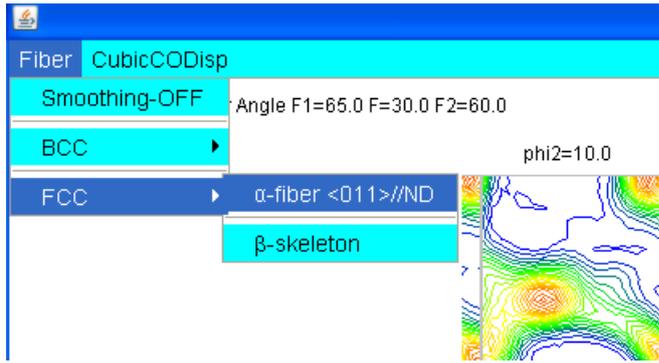


5.3 Make Pole で極点図表示

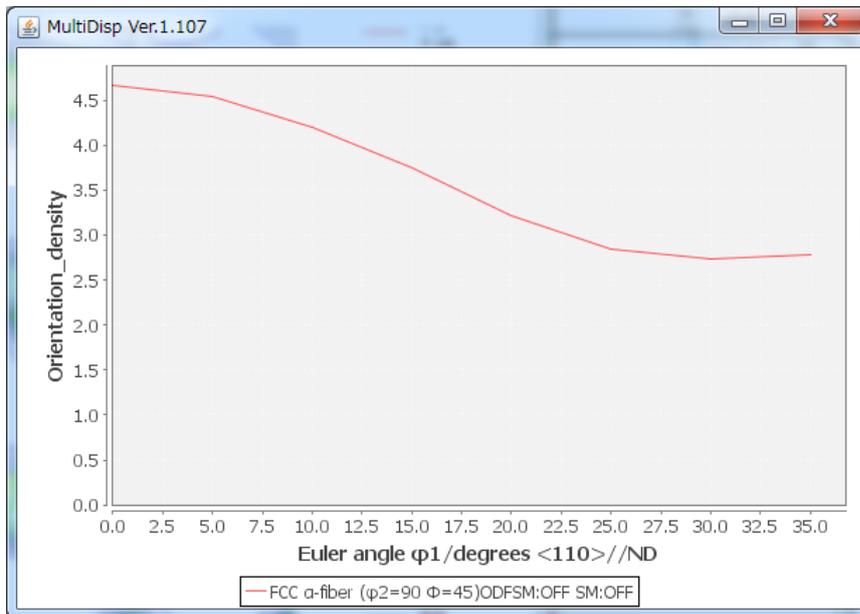


5. 4 Fiberを表示

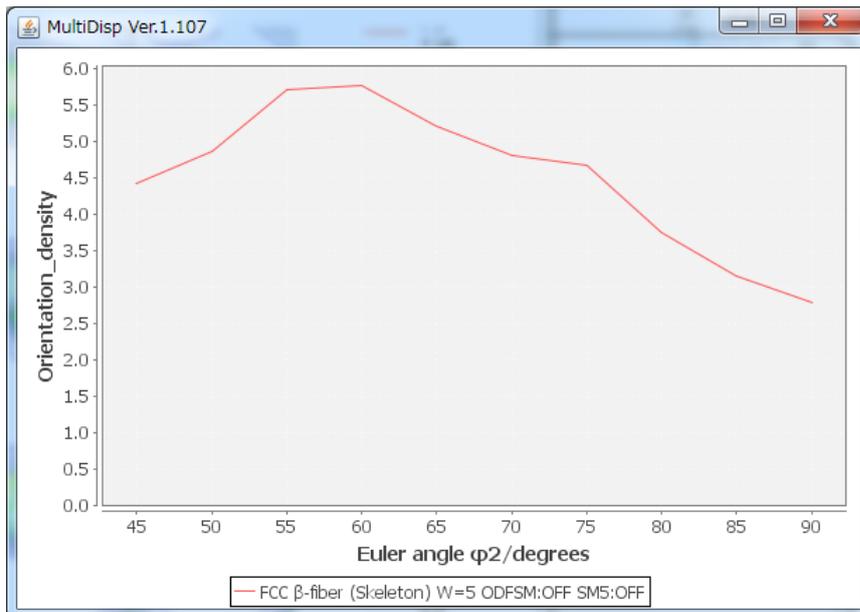
ϕ 2 断面 5 度間隔で 0 → 90 度表示画面から



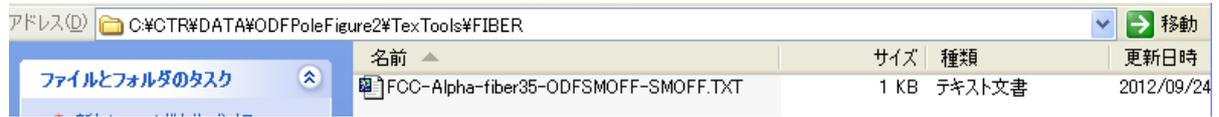
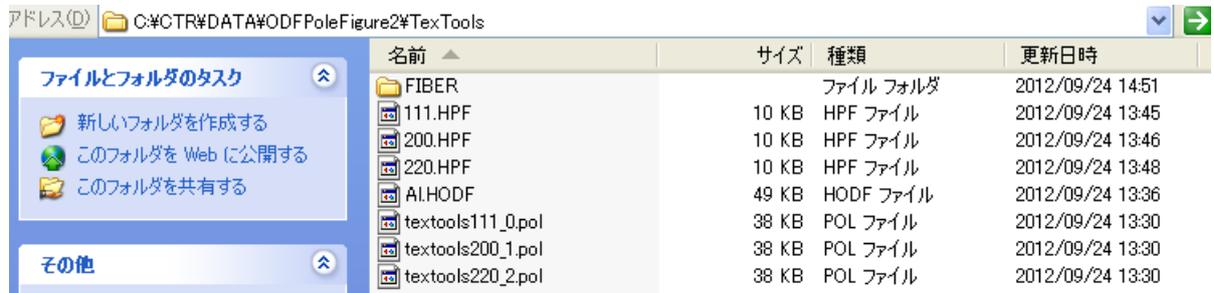
α -fiber



β -fiber



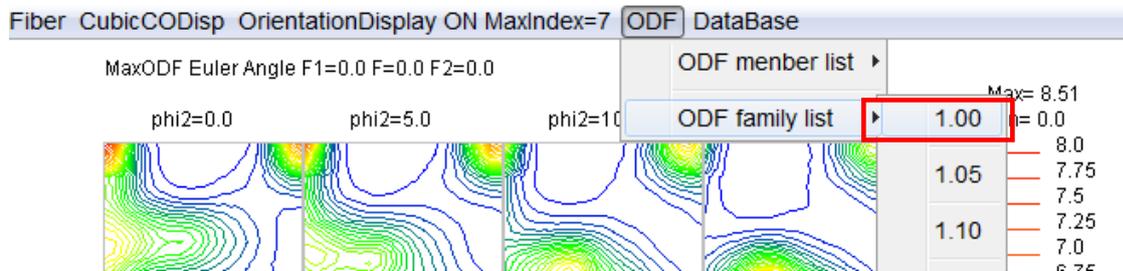
解析結果のファイルが作成される。



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 list を表示する。



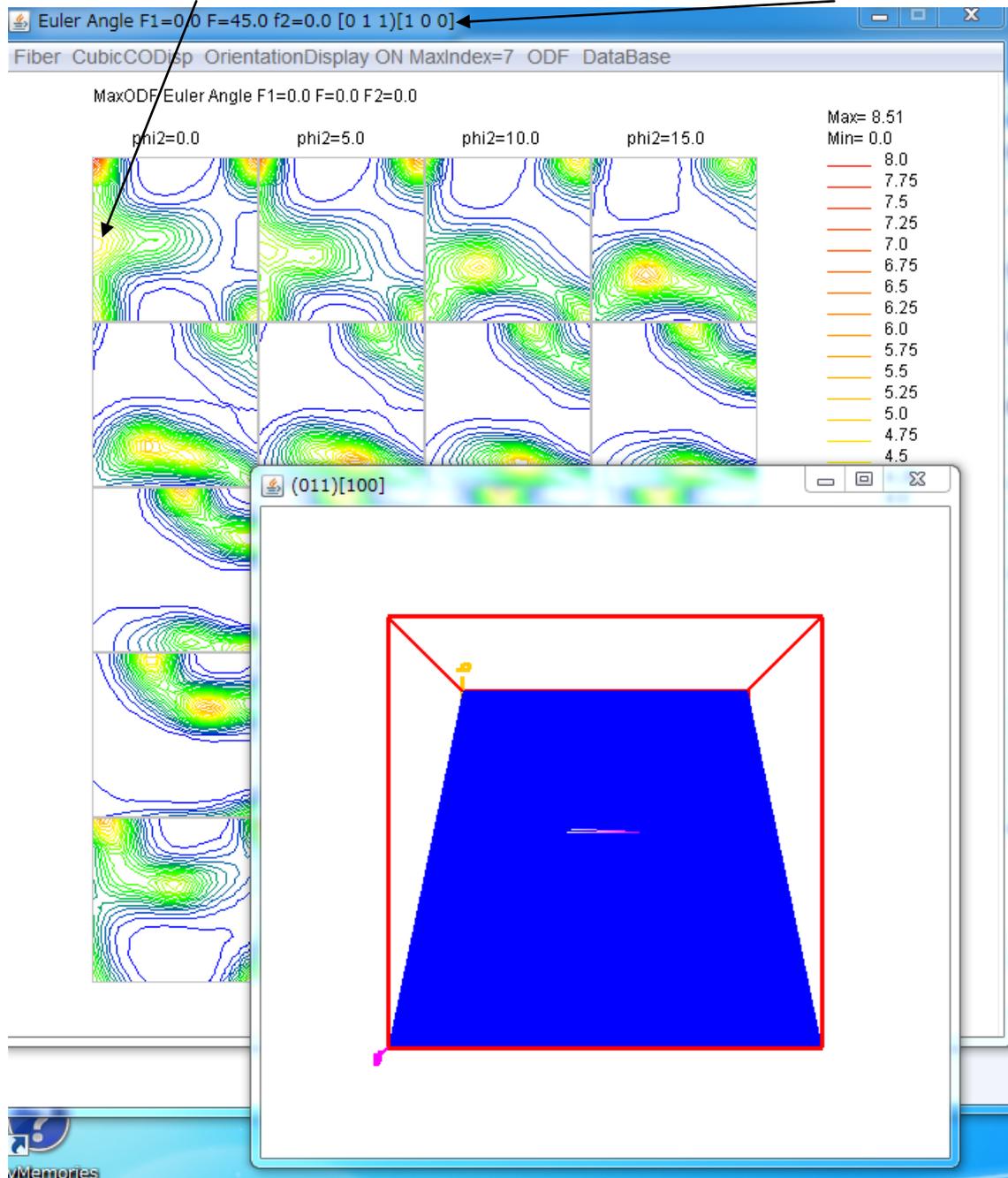
TextDisplay 1.11S C:\CTR\work\ODFDisplay\ODF.txt

Orientation	ϕ_1	Φ	ϕ_2	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
{0 1 3}<1 0 0>	0.0	18.43	0.0	3.34
{0 1 2}<1 0 0> Q1	0.0	26.57	0.0	3.34
{1 1 2}<-1 -1 1> copper	90.0	35.26	45.0	2.95
{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 $\{hkl\}\langle uvw \rangle$ 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 Euler 角度から計算された $\{hkl\}, \langle uvw \rangle$ を表示



計算された $\{hkl\}\langle uvw \rangle$ 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 display
LaboTex ODF export file	ODFEulerAngle	ODF maxF EulerAngle $\{hkl\}\langle uvw \rangle$
ReCalc PoleFigure File Export PoleFigure file	MakePoleFile	TXT2, TXT, ASC

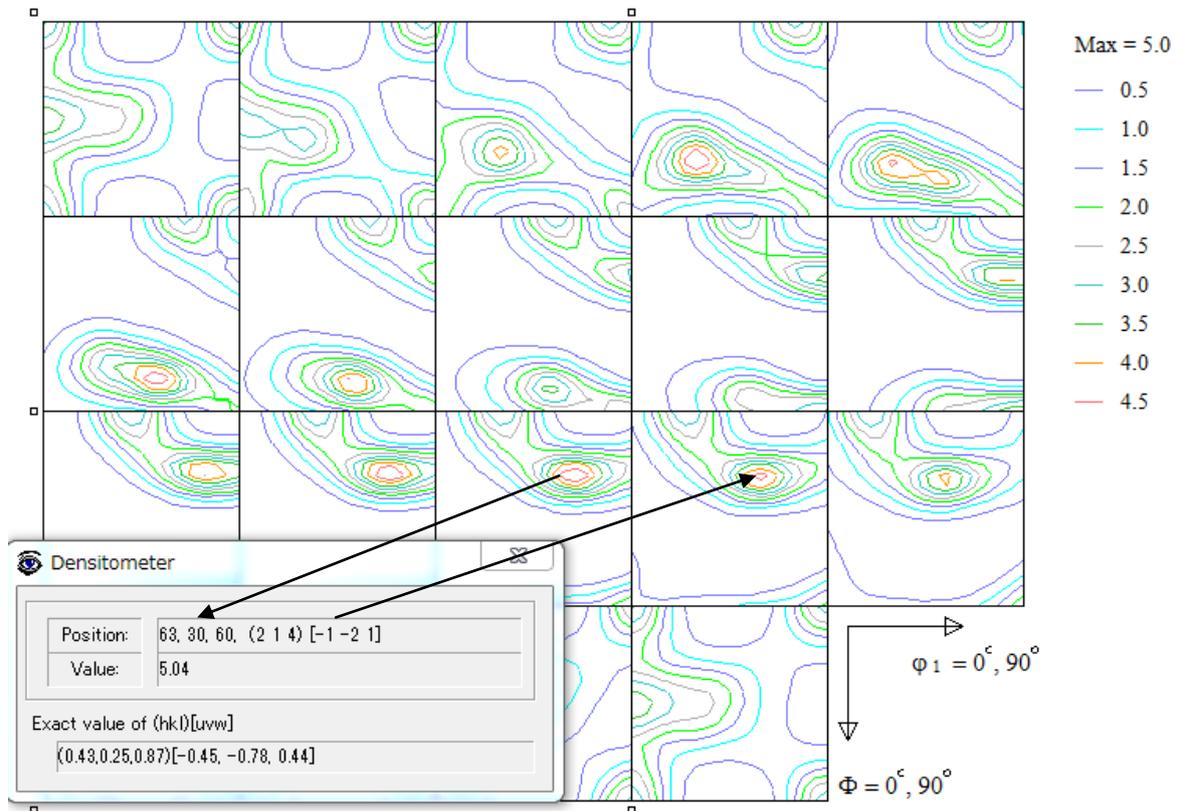
他にも ODF をサポートするソフトウェアを数多く取り揃えてあります。

5, 7 GPODFDisplayの活用

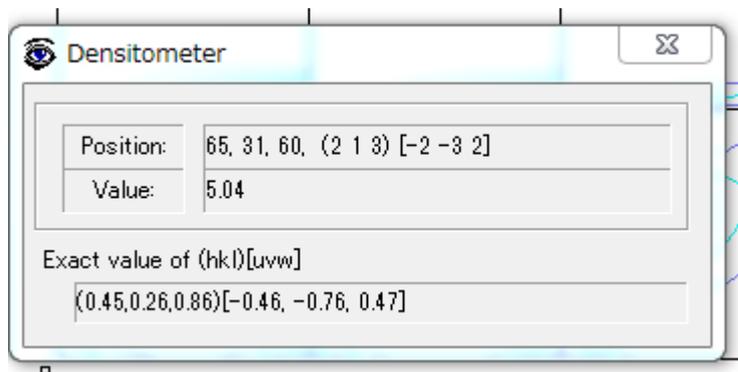
GPODFDisplayソフトウェアは、各種ODF解析結果を表示するソフトウェアで、ODFDisplayソフトウェアが、Cubicに限定されていましたが、全ての結晶系に対応しています。特に、CubicとHexagonalで機能を発揮します。

TextToolsで $\{hkl\}\langle uvw \rangle$ 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 $\{hkl\}\langle uvw \rangle$ が直交していない場合があります。

(等高線を増やす場合、等高線レベル領域を右マウスクリック)



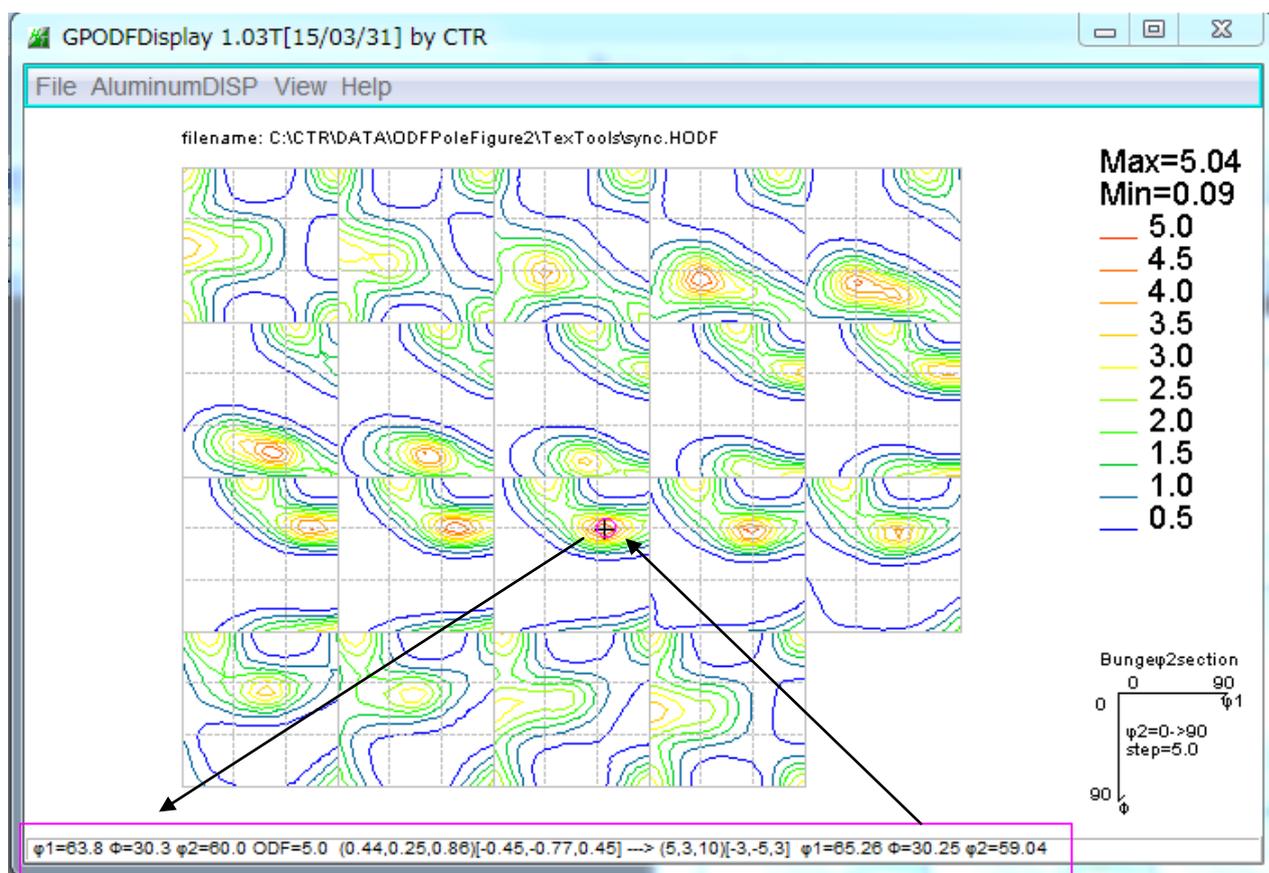
クリックしたEuler角度位置と計算された方位からのEuler角度が分からない



直交していない

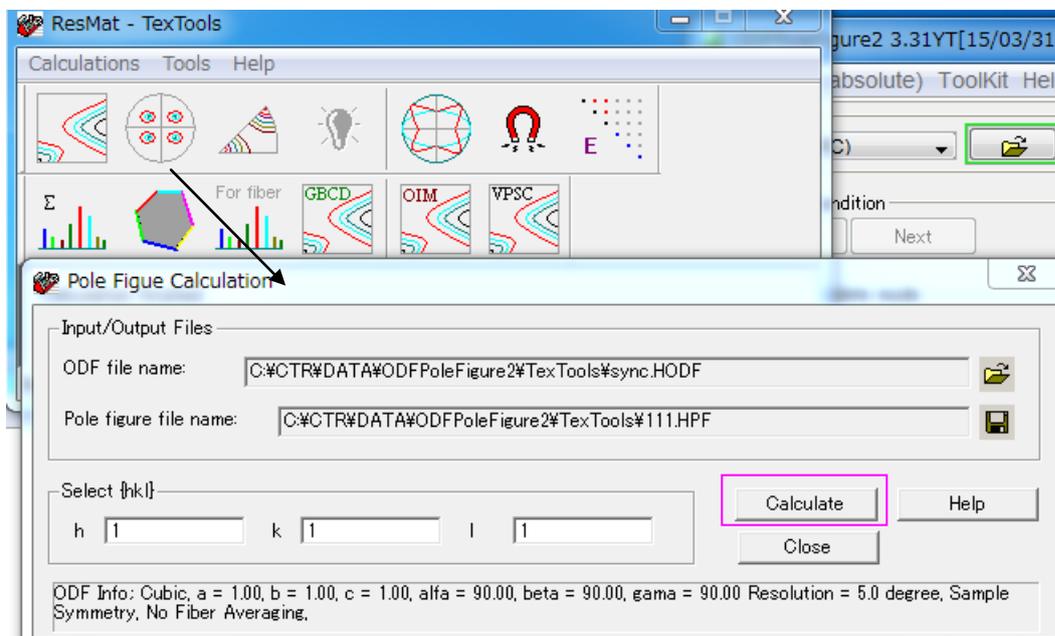
以下にGPODFDisplayの表示例を示します。

マウスクリックした場所が“+”で示され、再計算された Euler 角度位置が“O”示されます。



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。



再計算された極点図

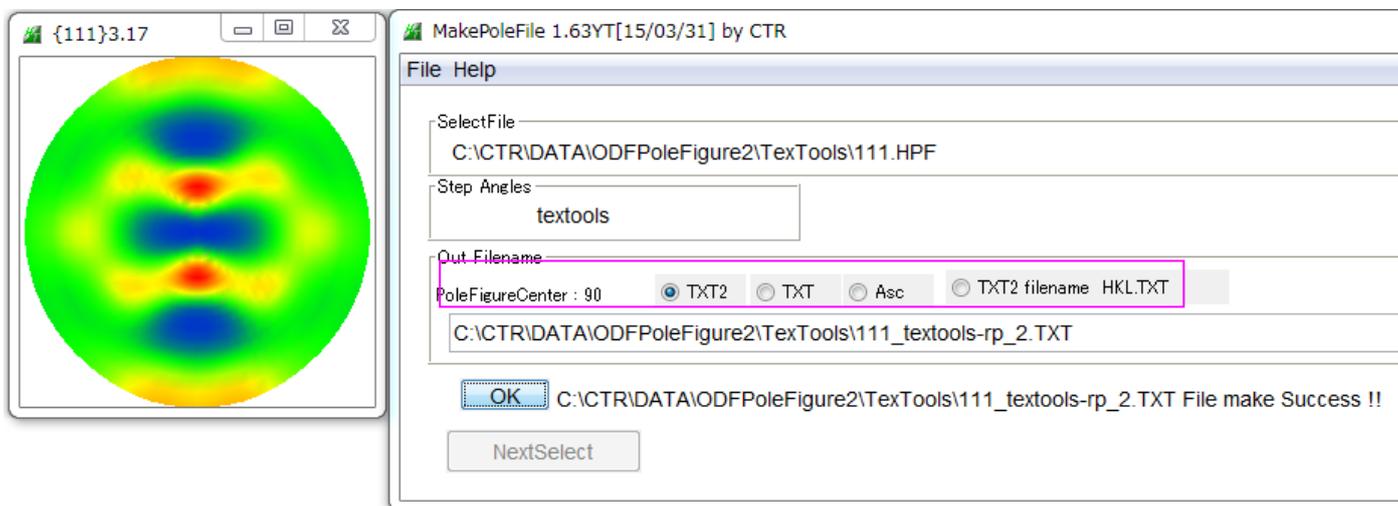
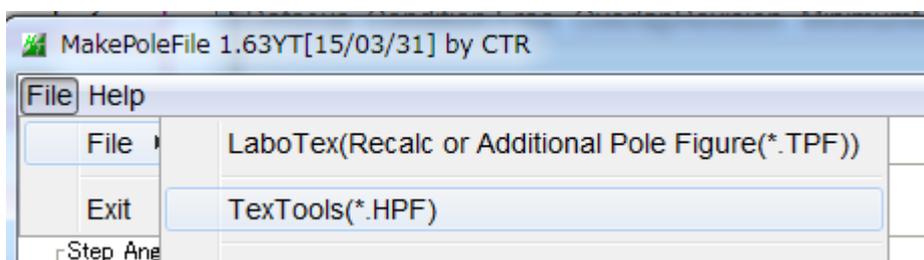
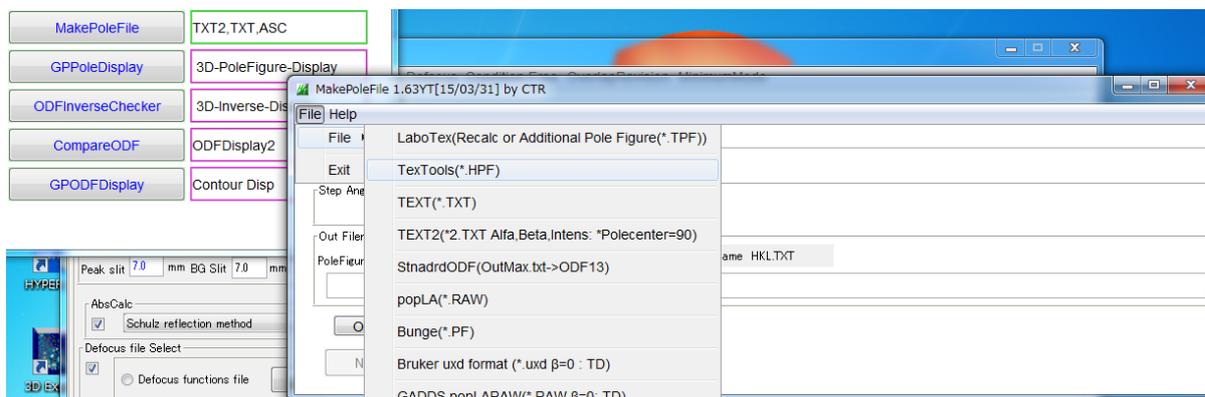
111.HPF	2014/08/10 7:02	HPF ファイル
200.HPF	2014/05/29 7:09	HPF ファイル
220.HPF	2014/05/29 7:10	HPF ファイル

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



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 T X T 2 に変換してあれば等高線表示も可能になります。

