CTRソフトウエアによる極点図の表示

2025年01月05日 HelperTex Office

- 1. 概要
- 2. 測定データ表示
 - 2.1 rigaku-rasファイルをascに変換し極点図表示
 - 2. 2 Pana-xrdmlファイルをascに変換し極点図表示
 - 2.3 Bulker-uxdファイルをascに変換し極点図表示
- 3. 極点図の詳細表示
 - 3. 1 PoleFigureContourDisplayY7トウエア
 - 3. 2 等高線黒一色表示
 - 3.3 極点図の平均化
 - 3. 4 極点図軸表示
- 4. ODF解析結果のExport 極点図の表示
 - 4.1 StandardODF
 - 4.2 LaboTex
 - 4.3 MTEX
 - 4.4 NewODF
 - 4.5 TexTools
 - 4.6 popLA
- 5. 極点図のcreate
 - 5. 1 CrystalOrientationDソフトウエア
 - 5. 2 NewCubicCODispソフトウエア
 - 5. 3 NTEXソフトウエア
 - 5. 4 CrystalOrientationDispによるTetragonal
 - 5. 5 CrystalOrientationDispによるOrthorhombic
 - 5. 6 HexaConvertによるHexagonal
- 6. 結晶軸回転、座標軸回転による極点図の回転

CTRソフトウエアによる極点図表示は、極点図測定結果のデータ処理において処理前後の表示 各種ODF解析結果の再計算極点図Exportの表示と極点図の回転などのデータ処理にて表示 これらは、測定データやデータ処理結果の極点図表示であったが、最近、結晶方位から極点図を createするソフトウエアを作成している。この経緯を説明します。

単結晶の方位測定による極点図の表示CrystalOrientationDソフトウエアに よる極点図のcreate (Cubic)

NewCubicCODispソフトウエアに極点図create機能を追加(Cubic) CrystalOrientationDispソフトウエアにcreateを追加

(Cubic, Tetragonal, Orthorhombic)
 Hexaconvertに極点図create機能を追加
 を行っています。表示方法はpolarnet表示で行っています。
 極点処理を行うとtxt2(α、β、極度)に変換が行われ各種ソフトウエアで表示処理されます。

測定データ表示

各メーカX線測定装置で測定した極点図をascデータに変換し極点図表示を行う

| MeasureDatatoASC 1.08T[25/1 | - 🗆 X | |
|---|----------------------|----------------------------|
| File Help | | |
| SmartLab measure data Ras Format Data(N) | RasPFtoASC | ASC Format Data |
| Bruker data Uxd Format Data(N) | UxdtoASC | ASC Format Data |
| RINT Inplane ,other data Asc Format Data(N) | PluralAsctoAsc | ASC Format Data |
| PANalytical pole figure data TXT,xdrml Data(N) | PANatoAsc | ASC Format Data |
| FullPoleFigure Asc Format(Trans-Ref) | PFTRSeparate | TransPF,ReflectPF ASC data |
| β smAsc Asc Format (N) | PoleFigureAsctoSMAsc | ASC Format Data |
| PANalytical data CSV format (N) | PANaCSVtoASC | ASC Format Data |
| RigakuOldData Asc format(N) | Rad2050HpFilter | ASC Format Data |
| PANalytical T/T data xrdml Data(N) | PANaTTDatatoAsc | ASC Format Data |
| PCAsc Asc format(N) | PCAsctoUNIXAsc | UNIXAsc Format |
| Asc Asc format(N) | AscThicknessMUEditor | ASC Format Data |
| | | |

2.1 rigaku-rasファイルをascに変換し極点図表示

| n 110_ref_sus.ras | 2012/05/22 12:18 | RAS ファイル | 245 KB |
|-------------------|------------------|---------------|--------|
| 🛃 200_ref_sus.ras | 2012/05/22 12:54 | RAS ファイル | 245 KB |
| 🛃 211_ref_sus.ras | 2012/05/22 13:21 | RAS ファイル | 245 KB |
| 🛱 200_ref_sus.asc | 2025/01/04 7:09 | RINT2000774- | 16 KB |
| 🖳 211_ref_sus.asc | 2025/01/04 7:09 | RINT2000774- | 16 KB |
| 🖳 110_ref_sus.asc | 2025/01/04 7:10 | RINT20007,2+- | 16 KB |

| *RAS_DATA_START *RAS_HEADER_START *DISP_FHX_X^*%.0f" *DISP_FHT_Y_%.0f" *DISP_FHT_Y_6705.60000000000" *DISP_LINE_COLOR_"255.00000000000" | *TYPE = Raw *CLASS = Pol *SAMPLE = *COMMENT | efig = |
|--|--|---|
| *DISP_LINE_SIYLE 0.0000000000 *DISP_LINE_WIDTH "0.2500000000" *DISP_NOTE "測定データ-1" | *FNAME = *DATE - | |
| *DISP_OFFSET_Y ^{**} 0.0000000000 *DISP_PEAKSEARCH_UNIT_Y ^{**} cps ^{***} | *DHIL - | |
| *DISP_RANGE_BOTTOM "0.0000000000" *DISP_RANGE_LEFT "0.0000000000" *DISP_RANGE_LOGCUTOEF "0.010000000" | *GROUP_COUNT *THICKNESS | = 1 = 0, 1.0 |
| *DISP_RANGE_RIGHT "360.0000000000" *DISP_RANGE_TOP "6705.6000000000" | *MU ∗MEAS MODE | = 0, 0.0 |
| *DISP_SCALE_MODE_Y "0.000000000" *DISP_TAB_NAME "3" *DISP_TAB_NAME "3" | *SPEED_DIM | = sec./step |
| *DISF_IIILE_I 9913 *DISP_UNIT_Y "cps" *DISP_WINDOW_NAME "MSG_MACROENGINE" | ∗YUNIT ∗PF METHOD | = counts = 1. Schulz reflection method |
| *FILE_3DE_VERSION "1.100" *FILE_COMMENT "" | *PF_PCOUNT | = 1,16 |
| *FILE_UATA_IYPE KAS_3DE_POLEFIG" *FILE_MD5 "" *FILE_MD5 "" | *PF_ASTART *PF_ASTOP | = 1,10.0 |
| *FILE_OPERATOR "Administrator" *FILE_SAMPLE "" *FILE_SAMPLE "" | *PF_ASTEP *PF_2THANGLE | = 1,5.0 = 1,52.17 |

一括変換

| RasPFtoAsc 2.44ST[25/12/31] by CTR | - 🗆 🗙 |
|--|--------------|
| File Help | |
| BackgroundMode Vision Single File Mode Vision Visio | |
| RasPoleTXtFiles select 110_ref_susras 200_ref_susras 211_ref_susras | |
| Abs Calc Absorption coefficient 0.0 1/cm Thickness 1.0 cm | |
| Alfa-profile & Index(h,k,l) Alfa-profile & Index(h,k,l) File1 File2 File3 File4 File5 File6 1,1,0 2,0,0 2,1,1 0,0,0 0,0,0 0,0,0 | check before |
| BackdeleteMode DoubleModeSingleModeLowModeHighModeNothingFree | e after |
| Created files name | |
| ОК | |

極点処理ソフト(ODFPoleFigure2)で一括表示



2.2Pana-xrdmlファイルをascに変換し極点図表示

Mtex5.1.1¥Data¥PoleFigure¥xrdml.xrdml ファイルをascに変換し極点図表示

| 🛃 xrdml.xrdml | 2020/10/15 5:49 | XRDML ファイル | 71 KB |
|---------------|-----------------|--------------|-------|
| 🖳 xrdml.ASC | 2025/01/04 8:18 | RINT200077+- | 35 KB |

Xrdml ファイル



変換後、極点処理ソフトウエア(ODFPOleFigurte2)で極点図表示



2. 3 Bulker-uxdファイルをascに変換し極点図表示

Mtex5.1.1¥Data¥PoleFigure¥bruker.UXD ファイルを a s c に変換し極点図表示

| bruker.UXD | 2020/10/1 | 5 5:49 UXD 7 | アイル | 131 KB |
|---|-----------------------------------|--|--|--------------------|
|) (C:) > mtex-5.1.1 > data > | PoleFigure > UXD_v | work | | |
| ∿ 並べ替え ~ □ 表示 ~ … | | | | |
| 名前 ^ | 更新日時 | 種類 | サイズ | |
| 🖳 0_47.8.ASC | 2025/01/04 8:31 | RINT2000774- | 15 KB | |
| 🖳 1_31.0.ASC | 2025/01/04 8:31 | RINT2000774- | 15 KB | |
| 🖳 2_36.45.ASC | 2025/01/04 8:31 | RINT2000774- | 15 KB | |
| 🕼 3_34.4.ASC | 2025/01/04 8:31 | RINT2000774- | 15 KB | |
| ; E:¥data¥texture¥Zhangxinming _FILEVERSION=2 _SITE='China' _USER='Administrator' _GONIOMETER_CODE=3349 ; D8 Theta/Theta; Special _SAMPLE_CHANGER_CODE=0 _ATTACHMENTS_CODE=0 _GONIOMETER_RADIUS=250.0000000 _FIXED_DIVSLIT=0.600000 _FIXED_DIVSLIT=0.000000 _FIXED_DETSLIT=0.100000 _MONOCHROMATOR=0 | ¥lili¥Deepdrawing1_R. | *TYPE = Raw *CLASS = Polet *SAMPLE = *COMMENT *FNAME = *DATE = *GROUP_COUNT *THICKNESS *MU *WU *WEAS_MODE *SPEED_DIM *YNNT | V1.01 file) con ig = = 0, 0.0 = 0.0.0 = continuous Scanning = sec./step = counts | verted by XCH V1.O |
| uxdからascに変換 | | *SEC_CUUNI *PF_METHOD *PF_PCOUNT *PF_ASTART *PF_ASTOP *PF_ASTEP *PF_2THANGLE | = 1/ = 1, Schulz reflection m = 1,17 = 1,10.0 = 1,90.0 = 1,50.0 = 1,47.8 | iethod |
| File Help | LIST Beta=0 CCW | | | |
| 変換した極点図を、極点処理ン | ノフトウエア(ODFPG | DleFigurte2)で極 | 瓦回表示 | |
| # (0,0,0) 670 • × # (0,0,1) RD TD (0,0,0) TD (0,0,0) TD (0,0,0) TD (0,0,0) TD (0,0,0) TD (0,0,0) TD (0,0,0) TD (0,0,0) TD (0,0,0) TD (0,0,0) TD (0,0,0) (0 | | (0,0,2) 140 – C | (0.0.2) TD | RD (0.0.3) |
| ODFPoleFigure2 4.04T[25/12/31] by CTR File Linear(absolute)Contour ToolKit Help I Files select ASC(RINT-PC) 0_478ASC | nitSet BGMode Measure Cor | dition Free OverlapRev | ision MinimumMode R | p% Normalization |
| Calcration Condition Previous Next C:¥mtex-5.1.1¥data¥Pt | pleFigure¥UXD_work¥0_47.8.ASC | | | |

3. 極点図の詳細表示

極点処理(バックグランド除去、defcous補正など)した結果や、各種ODF解析し Exportされた再計算極点図をTXT2に変換し、以下のソフトウエアなどで 極点図表示が可能になります。

3. 1 PoleFigureContourDisplayソフトウエア

等高線 0.05deg 間隔



3.3 極点図の平滑化



3. 4 極点図軸表示



4. ODF解析結果のExport極点図の表示

Export されたデータをTXT2に変換し表示が行われる

4.1 StandardODF



Export極点図をステップ0.1度間隔で表示(最大極点図値で規格化表示)

4.2 LaboTex

StandardODFで解析した入力データを対称操作なしで解析

Exportデータ

Exportデータの表示をステップ0.1degで表示(最大極点図値で規格化表示)

4.3 MTEX

MTEXで解析し、再極点図の表示とExport

export(rpf,'mtex')

Exportしたデータの極点図の表示(最大極点図値で規格化表示)

4.4 NewODF

SmartLabで解析し、再極点図の表示とExport

Exportデータ(最大極点図値で規格化表示)

4.5 TexTools

TexToolsで解析し、再極点図の表示とExport

Exportした極点図を表示(最大極点図値で規格化表示)

4.6 popLA

popLAはDos画面で動作するODF解析ソフトウエアでWIMV, Hermonicが サポートされているが解析結果の表現が貧弱なためCTRソフトウエアでサポートしています。 以下はPFtoODF3にて、RAW,DFBファイルを作成し、popLAで解析した結果ファイル FULからMakePolefileでTXT2を作成

| 📳 310_FUL-rp_2.TXT | 2025/01/05 8:13 | テキスト文書 | 23 KB |
|--------------------|-----------------|----------|-------|
| 📳 211_FUL-rp_2.TXT | 2025/01/05 8:13 | テキスト文書 | 23 KB |
| 📳 200_FUL-rp_2.TXT | 2025/01/05 8:13 | テキスト文書 | 23 KB |
| 📳 110_FUL-rp_2.TXT | 2025/01/05 8:13 | テキスト文書 | 23 KB |
| POPLA.SHD | 2025/01/05 8:09 | SHD ファイル | 32 KB |
| POPLA.FUL | 2025/01/05 8:08 | FUL ファイル | 23 KB |
| POPLA.HCF | 2025/01/05 8:08 | HCF ファイル | з КВ |
| POPLA.EPF | 2025/01/05 8:07 | EPF ファイル | 23 KB |
| Dipopla.DFB | 2025/01/05 7:46 | DFB ファイル | 1 KB |
| popla.RAW | 2025/01/05 7:46 | RAW ファイル | 23 KB |

popLA解析結果の再計算極点図(最大極点図値で規格化表示)

5. 極点図のcreate

結晶方位 {112} <-1-11>copperを指定して極点図の作成

5.1 CrystalOrientationDソフトウエア 結晶方位を指定する事で、あらゆる極点図の描画可能になります。 本来このソフトウエアの目的は、単結晶極点図から方位の決定を行っています。

| 🛃 CrystalOrientati | ionD 2.14T[25/12/31] b | y CTR | | | | - 0 |
|--|---------------------------------|------------------------------------|------------------------------------|-------------------|---|----------------------|
| File Help Blind- | 10 CreatePFStep:1 | 1.0 hkldisp=true o | x0->90 X-Axis:South | | | |
| PoleFigure Select file | Center of gravity | PoleFigure(TXT2) | RD input mode is South. | Maxindex | 20 ExtentAngle | 3.0 |
| Data input ae Alpha(center= | ra 0) Xaxis(South 0 90 | h: Beta=0)(RD: Beta=1) 0 180 | ⁸⁰⁾ hki 112 -1-11 | to Stack Stack | Calculate Index CalcPoleFigure -2 -1 1 -1 -2 1 | 112 V Clear |
| Caluclation ND rotate #klKuvw> calc{hkl | 0.0 degree | calc U-matrix | CalcPoleFigure | FWHM 1 degree | -1 -1 2 -2 -1 -1 -1 -2 -1 -1 -1 -2 | Set Append All |

{112}極点図

(112) ステレオ投影図

5. 2 NewCubicCODispソフトウエア

結晶方位を指定する事で、あらゆる極点図の描画可能になります。

ステレオ投影図は描画していません。

5. 3 NTEXソフトウエア

NTEXはMTEXに似せたコマンドソフトウエアです。

>setCopper

>plot(Copper:[1 1 2]) _{で表示できます。}

Orthorhombic 表示は

>plot(Copper:[1 1 2]ORTHO)

>

5. 4 CrystalOrientationDispによるTetragonal

| 🔏 CrystalOrientationDisp 2.08ST[25/12/31] by CTR — 🗆 🗙 | | |
|---|--|--|
| File Help Symmetry Special Index | | |
| Material Material Tetragonal (Li,La)TiO3 1.0 1.0 1.999 90.0 90.0 90.0 | | |
| Miller Indices (hkl)[uvw] 1 1 2 -1 -1 1 Calc | C:\CTR\work\NewCubicCODisp\112_dsp_2.TXT - File Help View | |
| Euler Angle (p1 P p2) <=90 80.272 35.2417 50.9273 Calc | RD {1,1,2} | Max=768.78 Min=0.0 |
| Present Condition Euler Angle Double Miller Indices DISP Position 10 ~ Disp size BG color Black ~ Line size OK Return Structure Polefigure FWHM 1 degree Polefigure FWHM 1 degree Polefigure Image: Polefigure Image: Polefigure Return Structure | TD 01-12 0112 | 768.0 766.0 766.0 766.0 765.0 761.0 761.0 759.0 758.0 755.0 755.0 755.0 755.0 755.0 755.0 755.0 751.0 751.0 751.0 751.0 751.0 749.0 749.0 749.0 749.0 749.0 749.0 749.0 741.0 740.0 |

Triclinic->Orthorhombic

5. 5 CrystalOrientationDispによるOrthorhombic

| CrystalOrientationDisp 2.08ST[25/12/31] by CTR – 🗆 🗙 | |
|---|---|
| File Help Symmetry Special Index | |
| Material Orthorbombic SeifertiteSiO2 | |
| 1.0 1.232 1.097 90.0 90.0 90.0 | |
| Miller Indices (hkl)[uvw] 1 1 2 -1 -1 V Calc | |
| Euler Angle (p1 P p2) <= 90 | |
| Present Condition Euler Angle | CACTR\work\NewCubicCODisp\112_dsp_2.TXT - X File Help View |
| Double Miller Indices DISP Position 10 BG color Black V Line size 2.0 V Minus | RD {1,1,2} |
| OK Return Structure Polefigure FWHM 1 degree Polefigure 1 0 | TD TD TD TD TD TD TD TD TD TS200 7510 7510 7510 7490 7490 7480 7440 7420 7390 7380 7380 7380 7370 7380 7370 7380 7370 7380 7370 7380 7370 7380 |

Triclinic->Orthorhombic

5. 6 HexaConvertによるHexagonal

| File Step Help | 🚪 HexaConvert 1.12ST[25/12/31] by CTR - 🗆 🗙 | |
|--|---|--|
| A X-Axis[100] (2-1-10) B B X-Axis[210] (10-10) Miler Notation (9 Xis Notation) I I I I I I I I I I I I I I I I I I I | File Step Help | |
| Miller Notation) I I I I I I I I I I I I I I I I I I I | A 🗆 X-Axis[100] ([2-1-10]) 🗼 B 🕑 X-Axis[210] ([10-10]) 🕂 | |
| I | Miller Notation (3Axis Notation) | |
| Miler Bravais Notation(4 Axis Notation) I </th <th>☑ 1 ∨ 1 ∨ 2 ∨ -1 ∨ -1 ∨ 1 ∨ hkl uvw</th> <th></th> | ☑ 1 ∨ 1 ∨ 2 ∨ -1 ∨ -1 ∨ 1 ∨ hkl uvw | |
| I | Miller Bravais Notation(4 Axis Notation) | |
| Euler(p1Fp2) 90.0 57.8 60.0 Material select Itanium-alpha.TXT c/a 1.588 input ψ2 Angles 0 Calc DEP Position 10 Disp size 200 DISP BG Corr Black Line size 1.0 MINUS FWHM 1 degree Polefigure 1.1.2 Orthorhombic Disp OK Return Structure 0 000.0 500.0 500.0 500.0 498.0 498.0 498.0 498.0 498.0 498.0 | | |
| 90.0 57.8 60.0 Material select Image: Close of the select Image: Close o | Euler(p1Fp2) | |
| Material select Titanium-alpha.TXT c/a 1.588 DSP Position 10 DSP BG Corr Black Line size 1.0 MINUS OK Return Structure | 90.0 57.8 60.0 | C:\CTR\work\NewCubicCODisp\112_ds − □ × |
| Titanium-alpha.TXT Image: Titani | Material select | File Help View |
| C/a 1.588 Input ψ2 Angles O Calc DSP Position 10 Disp size 200 O Disp BG Corr Black Line size 1.0 MiNUS S08.0 507.0 Polefigure T 0 MiNUS S08.0 507.0 506.0 505.0 WHM 1 degree Polefigure 1.1.2 Orthorhombic Disp S08.0 502.0 504.0 504.0 502.0 504.0 502.0 504.0 502.0 501.0 502.0 504.0 502.0 501.0 502.0 501.0 502.0 501.0 502.0 501.0 502.0 501.0 502.0 501.0 502.0 501.0 502.0 501.0 502.0 501.0 502.0 501.0 502.0 501.0 502.0 501.0 502.0 501.0 502.0 501.0 502.0 501.0 502.0 501.0 502.0 501.0 502.0 502.0 501.0 502.0 501.0 502.0 502.0 502.0 502.0 502.0 502.0 502.0 50 | Titanium-alpha.TXT ~ | |
| c/a 1.588 Input #2 Angles 0 Calc DISP Position 10 Disp size 200 DISP BG Corr Black Line size 1.0 MINUS Polefigure 1.1.2 Orthorhombic Disp FWHM 1 degree Polefigure 1.1.2 Orthorhombic Disp OK Return Structure 0 498.0 498.0 | | RD Max=511.98 |
| DISP Position 10 V Disp size 200 DISP BG Corr Black Line size 1.0 MINUS Polefigure FWHM 1 degree Polefigure 1.1.2 Orthorhombic Disp OK Return Structure TU V Return Structure OK Return Structure | c/a 1.588 Input w2 Angles 0 Calc | {1,1,2} 511.0 |
| DSP Position 10 Disp size 200 DISP BG Corr Black Line size 1.0 MINUS Polefigure 1.1.2 Orthorhombic Disp OK Return Structure Q2-1-1-2 11-2-2 12-1-2 OK Return Structure Q2-1-1-2 11-2-2 12-1-2 Q49.0 499.0 499.0 Q495.0 499.0 499.0 Q495.0 499.0 499.0 Q493.0 493.0 493.0 | | |
| Position 10 Disp size 200 DISP BG Corr Black Line size 1.0 MINUS Polefigure 1.1.2 Orthorhombic Disp OK Return Structure 02-1-12 11-2-2 12-12 000000000000000000000000000000000000 | DISP | |
| BG Corr Black Line size 1.0 MINUS Polefigure FWHM 1 degree Polefigure 1.1.2 Orthorhombic Disp OK Return Structure 0/2-1-1-2 0/1-2-12 505.0 500.0 502.0 501.0 502.0 500.0 0/499.0 499.0 499.0 499.0 499.0 499.0 499.0 499.0 499.0 499.0 499.0 499.0 499.0 499.0 499.0 499.0 499.0 | Position 10 · Disp size 200 · DISP | |
| Polefigure Polefigure 1.1.2 Orthorhombic Disp OK Return Structure 000000000000000000000000000000000000 | BG Corr Black V Line size 1.0 V MINUS | $1 = \begin{cases} 0^{2-1-12} \\ 11-22 \\ 1$ |
| FWHM 1 degree Polefigure 1,1,2 Orthorhombic Disp 501.0 | Palatin va | |
| OK Return Structure \$2-1-1-2 \$11-2-2 \$499.0 99.0 499.0 499.0 499.0 499.0 499.0 499.0 499.0 499.0 499.0 499.0 499.0 | FWHM 1 degree Polefigure 112 Orthorhombic Disp | |
| OK Return Structure | | |
| 497.0 496.0 495.0 494.0 494.0 493.0 | OK Return Structure | |
| | | |
| 493.0 | | 495.0 |
| | | 493.0 |

Triclinic->Orthorhombic

6. 結晶軸回転、座標軸回転による極点図の回転

Goss