

CTRソフトウェ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 r i g a k u - r a s ファイルを a s c に変換し極点図表示
 2. 2 P a n a - x r d m l ファイルを a s c に変換し極点図表示
 2. 3 B u l k e r - u x d ファイルを a s c に変換し極点図表示
3. 極点図の詳細表示
 3. 1 P o l e F i g u r e C o n t o u r D i s p l a y ソフトウェア
 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 E x p o r t 極点図の表示
 4. 1 S t a n d a r d O D F
 4. 2 L a b o T e x
 4. 3 M T E X
 4. 4 N e w O D F
 4. 5 T e x T o o l s
 4. 6 p o p L A
5. 極点図の c r e a t e
 5. 1 C r y s t a l O r i e n t a t i o n D ソフトウェア
 5. 2 N e w C u b i c C O D i s p ソフトウェア
 5. 3 N T E X ソフトウェア
 5. 4 C r y s t a l O r i e n t a t i o n D i s p による T e t r a g o n a l
 5. 5 C r y s t a l O r i e n t a t i o n D i s p による O r t h o r h o m b i c
 5. 6 H e x a C o n v e r t による H e x a g o n a l
6. 結晶軸回転、座標軸回転による極点図の回転

1. 概要

CTRソフトウェ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するソフトウェアを作成している。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ソフトウェアによる極点図のcreate (Cubic)

NewCubicCODispソフトウェアに極点図create機能を追加 (Cubic)

CrystalOrientationDispソフトウェアにcreateを追加

(Cubic, Tetragonal, Orthorhombic)

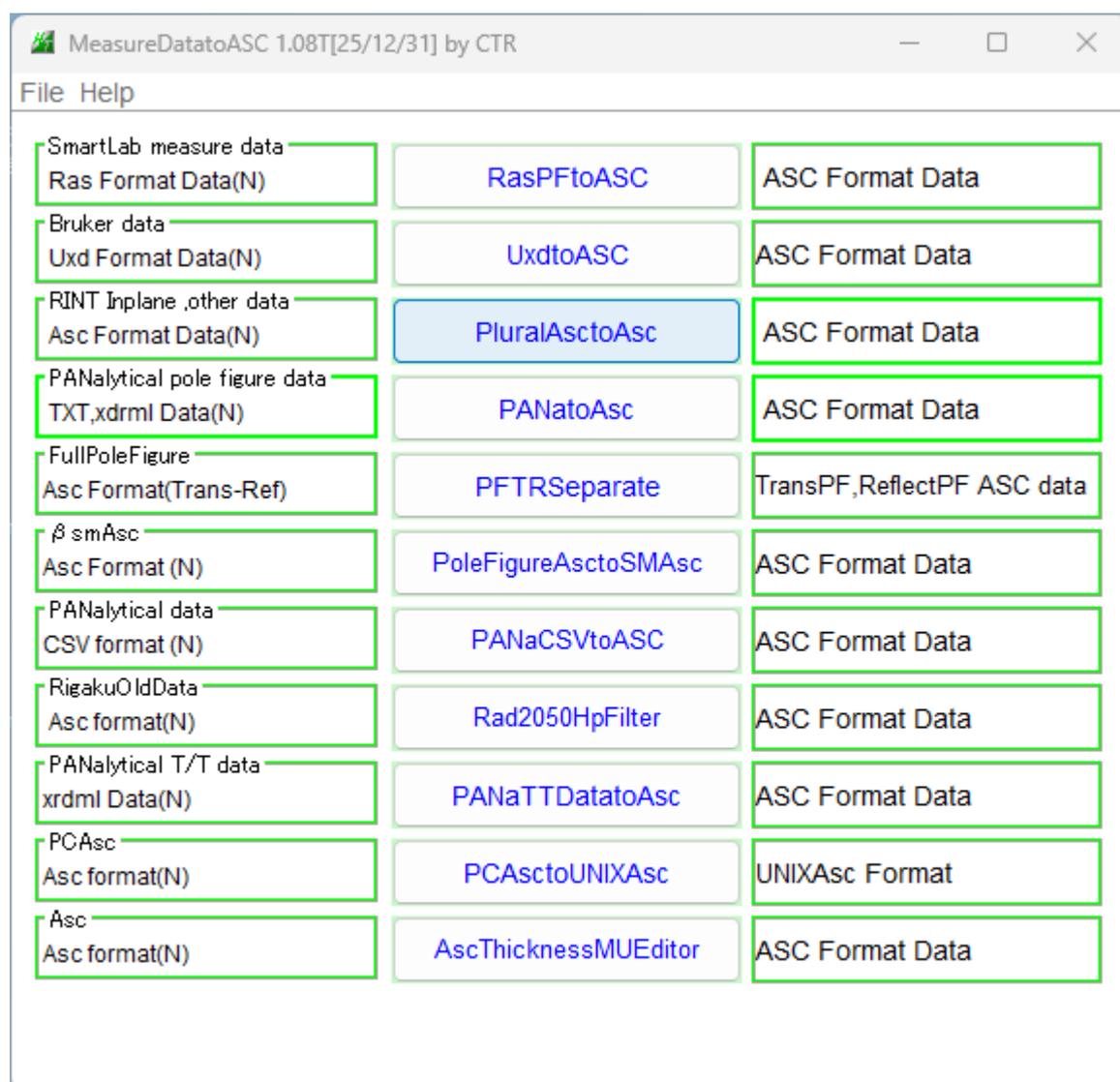
Hexaconvertに極点図create機能を追加

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ェアで表示処理されます。

2. 測定データ表示

各メーカー X線測定装置で測定した極点図を a s c データに変換し極点図表示を行う



2. 1 r i g a k u - r a s ファイルを a s c に変換し極点図表示

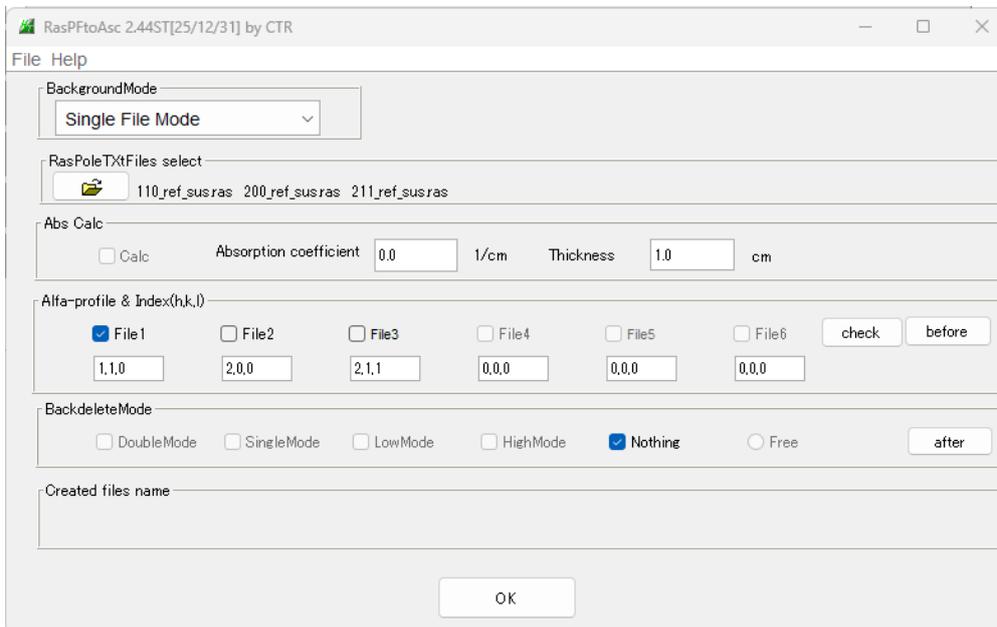
 110_ref_sus.ras	2012/05/22 12:18	RAS ファイル	245 KB
 200_ref_sus.ras	2012/05/22 12:54	RAS ファイル	245 KB
 211_ref_sus.ras	2012/05/22 13:21	RAS ファイル	245 KB
 200_ref_sus.asc	2025/01/04 7:09	RINT20007スキー	16 KB
 211_ref_sus.asc	2025/01/04 7:09	RINT20007スキー	16 KB
 110_ref_sus.asc	2025/01/04 7:10	RINT20007スキー	16 KB

```
*RAS_DATA_START
*RAS_HEADER_START
*DISP_FMT_X "%.0f"
*DISP_FMT_Y "%.0f"
*DISP_FULLSCALE "6705.8000000000"
*DISP_LINE_COLOR "255.0000000000"
*DISP_LINE_STYLE "0.0000000000"
*DISP_LINE_WIDTH "0.2500000000"
*DISP_NOTE "測定データ1"
*DISP_OFFSET_Y "0.0000000000"
*DISP_PEAKSEARCH_UNIT_Y "cps"
*DISP_RANGE_BOTTOM "0.0000000000"
*DISP_RANGE_LEFT "0.0000000000"
*DISP_RANGE_LOGCUTOFF "0.0100000000"
*DISP_RANGE_RIGHT "380.0000000000"
*DISP_RANGE_TOP "6705.8000000000"
*DISP_SCALE_MODE_Y "0.0000000000"
*DISP_TAB_NAME "β"
*DISP_TITLE_Y "強度"
*DISP_UNIT_Y "cps"
*DISP_WINDOW_NAME "MSG_MACROENGINE"
*FILE_3DE_VERSION "1.100"
*FILE_COMMENT
*FILE_DATA_TYPE "RAS_3DE_POLEFIG"
*FILE_MDS ""
*FILE_MEMO ""
*FILE_OPERATOR "Administrator"
*FILE_SAMPLE ""
*FILE_TYPE "RAS RAW"

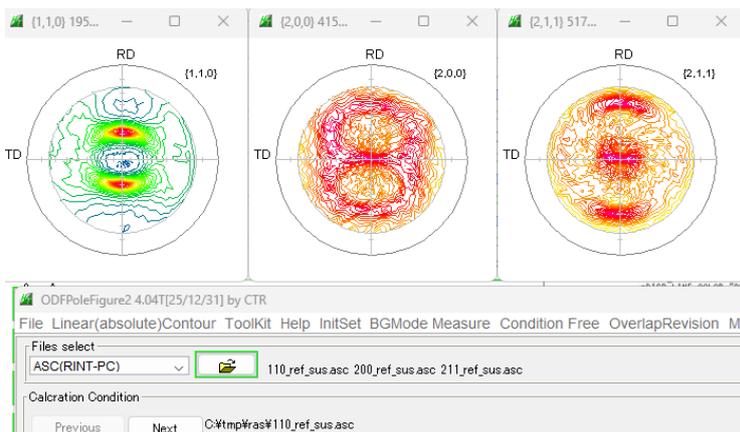
*TYPE = Raw
*CLASS = Polefig
*SAMPLE =
*COMMENT =
*FNAME =
*DATE =

*GROUP_COUNT = 1
*THICKNESS = 0, 1.0
*MU = 0, 0.0
*MEAS_MODE = Continuous Scanning
*SPEED_DIM = sec./step
*YUNIT = counts
*PF_METHOD = 1, Schulz reflection method
*PF_PCOUNT = 1,16
*PF_ASTART = 1,15.0
*PF_ASTOP = 1,90.0
*PF_ATEST = 1,5.0
*PF_2THANGLE = 1,52.17
```

一括変換



極点処理ソフト(ODFPoleFigure2)で一括表示



2. 2 P a n a - x r d m l ファイルを a s c に変換し極点図表示

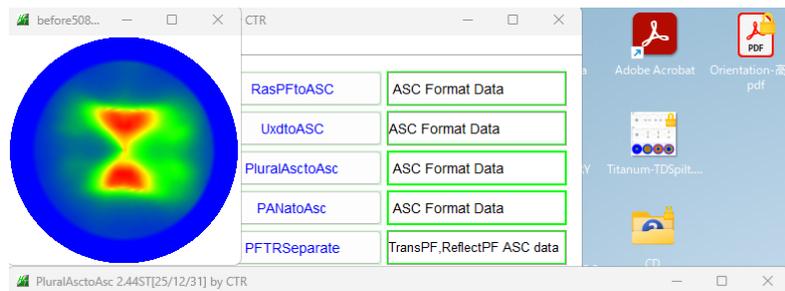
Mtex5.1.1¥Data¥PoleFigure¥xrdml.xrdml ファイルを a s c に変換し極点図表示

 xrdml.xrdml	2020/10/15 5:49	XRDML ファイル	71 KB
 xrdml.ASC	2025/01/04 8:18	RINT20007スケー	35 KB

Xrdml ファイル

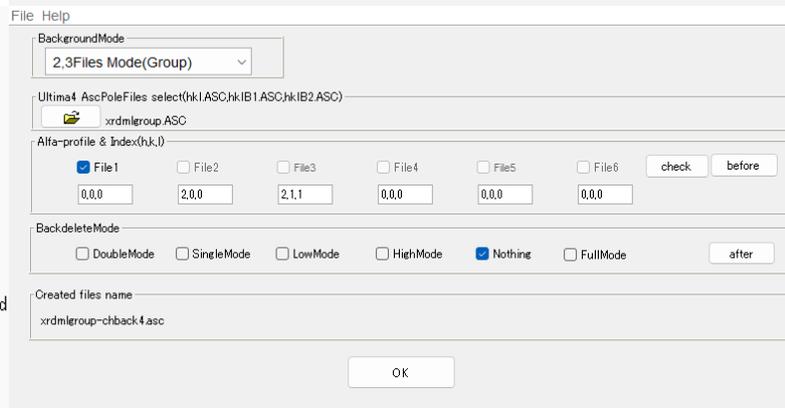
```
<?xml version="1.0" encoding="UTF-8"?>
<xrdMeasurements xmlns="http://www.xrdml.com/XRDMeasurement/1.2" xmlns:xsi="http://www.w3.org/2001/XMLSchema-instance" xsi:schemaLocation="http://www.xrdml.com/XRDMeasurement/1.2 http://www.xrdml.com/XRDMeasurement/1.2/XRDMeasurement.xsd" status="Completed">
  <comment>
    <entry><Configuration=MRD SW - All Optics, Owner=User-1, Creation date=9/5/2005 1:49:22 PM</entry>
    <entry><Goniometer=PW3050/85 (Theta/2Theta); Minimum step size 2Theta:0.001; Minimum step size Omega:0.001</entry>
    <entry><Sample stage=MRD Cradle; Minimum step size Phi:0.01; Minimum step size Psi:0.01; Minimum step size X:0.01; Minimum step size Y:0.01; Minimum step size Z:0.001</entry>
    <entry><Diffractometer system=XPERT-PRO</entry>
    <entry><Measurement program=Cu-111 Standard Tex-Pol-C 3degree, Owner=User-1, Creation date=9/16/2005 2:29:49 PM</entry>
  </comment>
  <sample type="To be analyzed">
    <id>Copper</id>
    <name>Cu Texture Standard</name>
    <preparedBy>PANalytical BV</preparedBy>
  </sample>
</xrdMeasurements>
```

x r d m l 表示

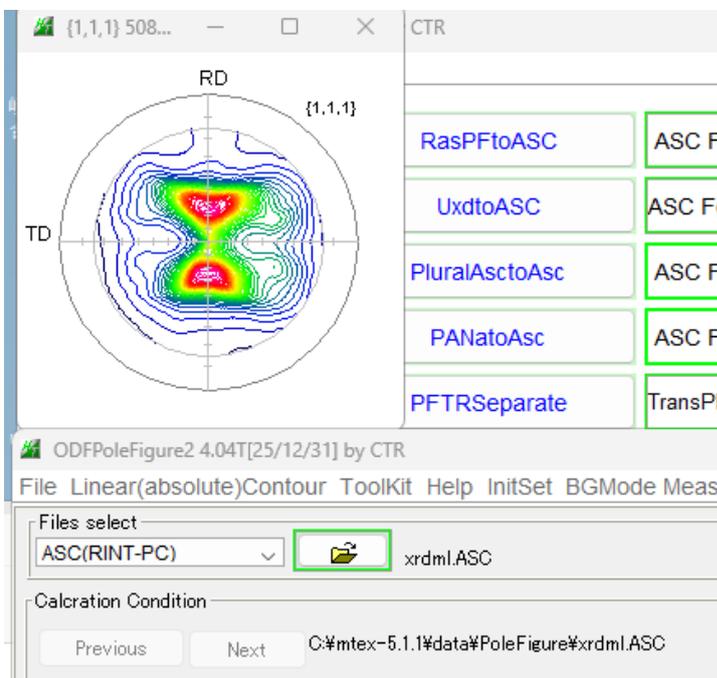


```
*TYPE = Raw
*CLASS = Polefig
*SAMPLE =
*COMMENT =
*FNAME =
*DATE =

*GROUP_COUNT = 1
*THICKNESS = 0, 0.0
*MU = 0, 0.0
*MEAS_MODE = Continuous Scanning
*SPEED_DIM = sec./step
*YUNIT = counts
*SEC_COUNT = 26
*PF_METHOD = 1, Schulz reflection method
*PF_PCOUNT = 1,28
*PF_ASTART = 1,15.0
*PF_ASTOP = 1,90.0
*PF_ASTEP = 1,3.0
*PF_2THANGLE = 1,43.249
```



変換後、極点処理ソフトウェア(ODFPoleFigure2)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ascに変換し極点図表示

bruker.UXD 2020/10/15 5:49 UXDファイル 131 KB

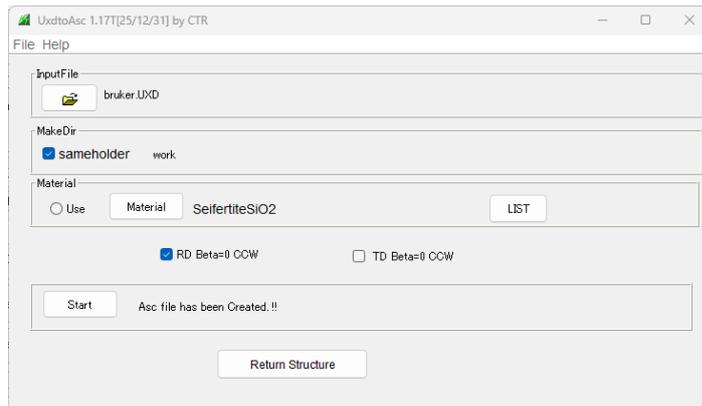
(C:) > mtex-5.1.1 > data > PoleFigure > UXD_work

並べ替え 表示 ...

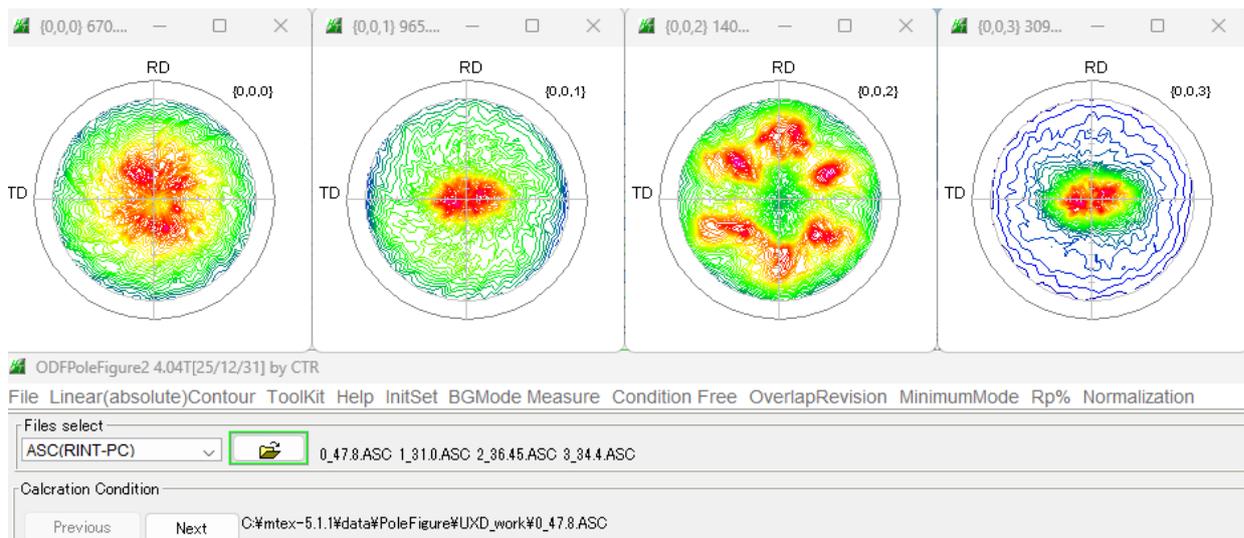
名前	更新日時	種類	サイズ
0_47.8.ASC	2025/01/04 8:31	RINT20007ｽｷｰ	15 KB
1_31.0.ASC	2025/01/04 8:31	RINT20007ｽｷｰ	15 KB
2_36.45.ASC	2025/01/04 8:31	RINT20007ｽｷｰ	15 KB
3_34.4.ASC	2025/01/04 8:31	RINT20007ｽｷｰ	15 KB

```
; E:%data%texture%Zhangxinming%lili%Deepdrawing1_R.raw(Diffrac Plus V1.01 file) converted by XCH V1.0
_FILEVERSION=2
_SITE='China'
_USER='Administrator'
_GONIOMETER_CODE=3349
; D8 Theta/Theta; Special
_SAMPLE_CHANGER_CODE=0
_ATTACHMENTS_CODE=0
_GONIOMETER_RADIUS=250.000000
_FIXED_DIVSLIT=0.800000
_FIXED_SAMPLESLIT=0.000000
_FIXED_DETSLIT=0.100000
_MONOCHROMATOR=0
*TYPE = Raw
*CLASS = Polefig
*SAMPLE =
*COMMENT =
*FNAME =
*DATE =
*GROUP_COUNT = 1
*THICKNESS = 0, 0, 0
*MU = 0, 0, 0
*MEAS_MODE = Continuous Scanning
*SPEED_DIM = sec./step
*YUNIT = counts
*SEC_COUNT = 17
*PF_METHOD = 1, Schulz reflection method
*PF_PCOUNT = 1, 17
*PF_ASTART = 1, 10, 0
*PF_ASTOP = 1, 90, 0
*PF_ASTEP = 1, 5, 0
*PF_2THANGLE = 1, 47.8
```

uxdからascに変換



変換した極点図を、極点処理ソフトウェア(ODFPoleFigure2)で極点図表示

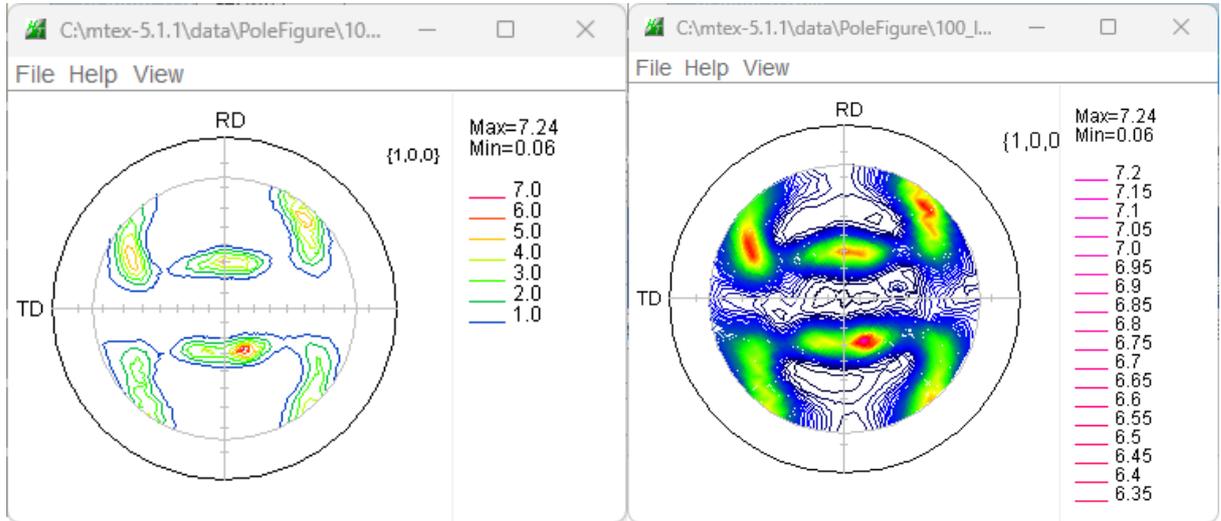


3. 極点図の詳細表示

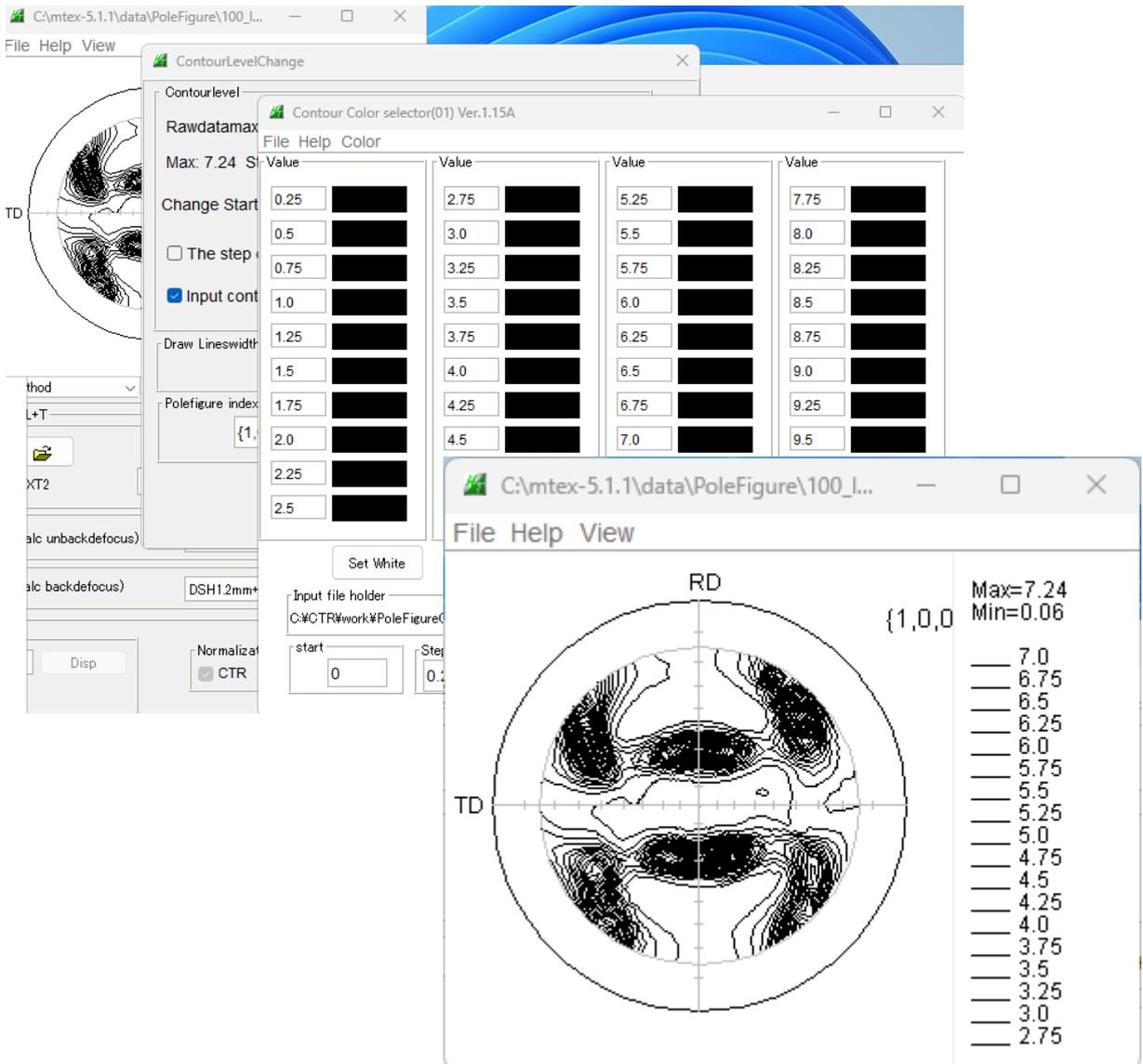
極点処理（バックグラウンド除去、defocus補正など）した結果や、各種ODF解析しExportされた再計算極点図をTXT2に変換し、以下のソフトウェアなどで極点図表示が可能になります。

3. 1 PoleFigureContourDisplayソフトウェア

等高線 0.05deg 間隔



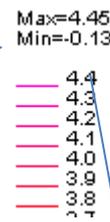
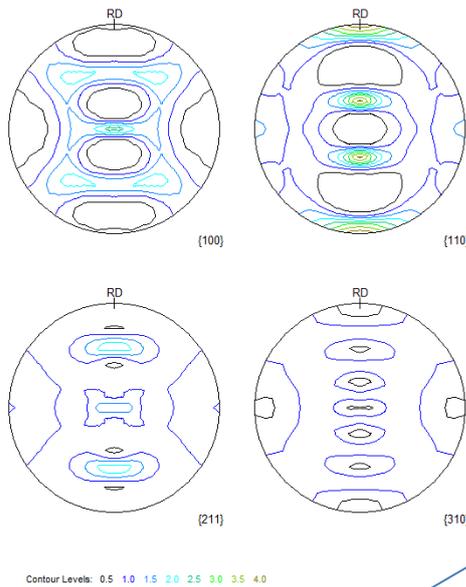
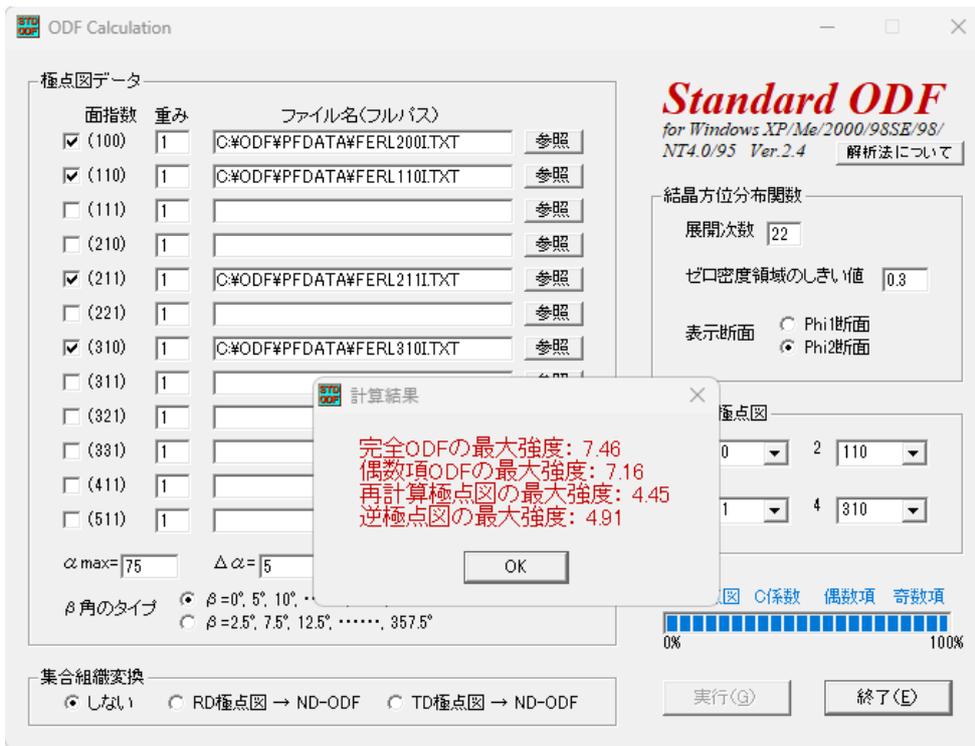
3. 2 等高線黒一色表示



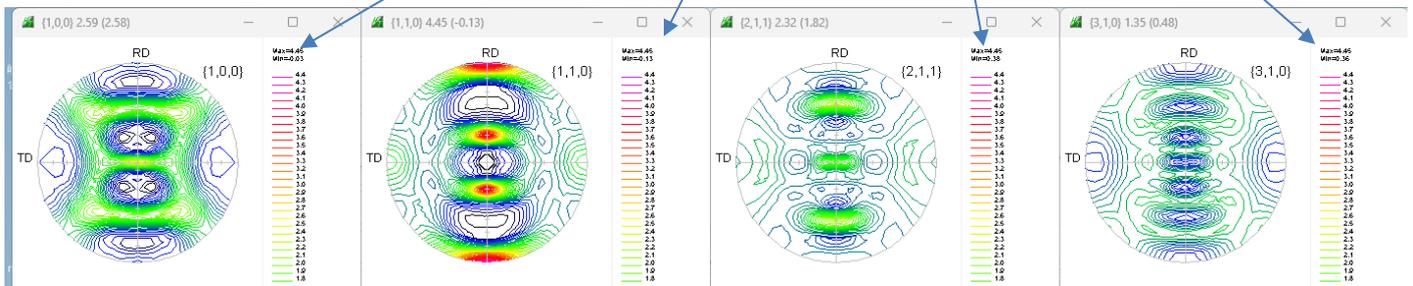
4. ODF解析結果のExport極点図の表示

ExportされたデータをTXT2に変換し表示が行われる

4.1 Standard ODF

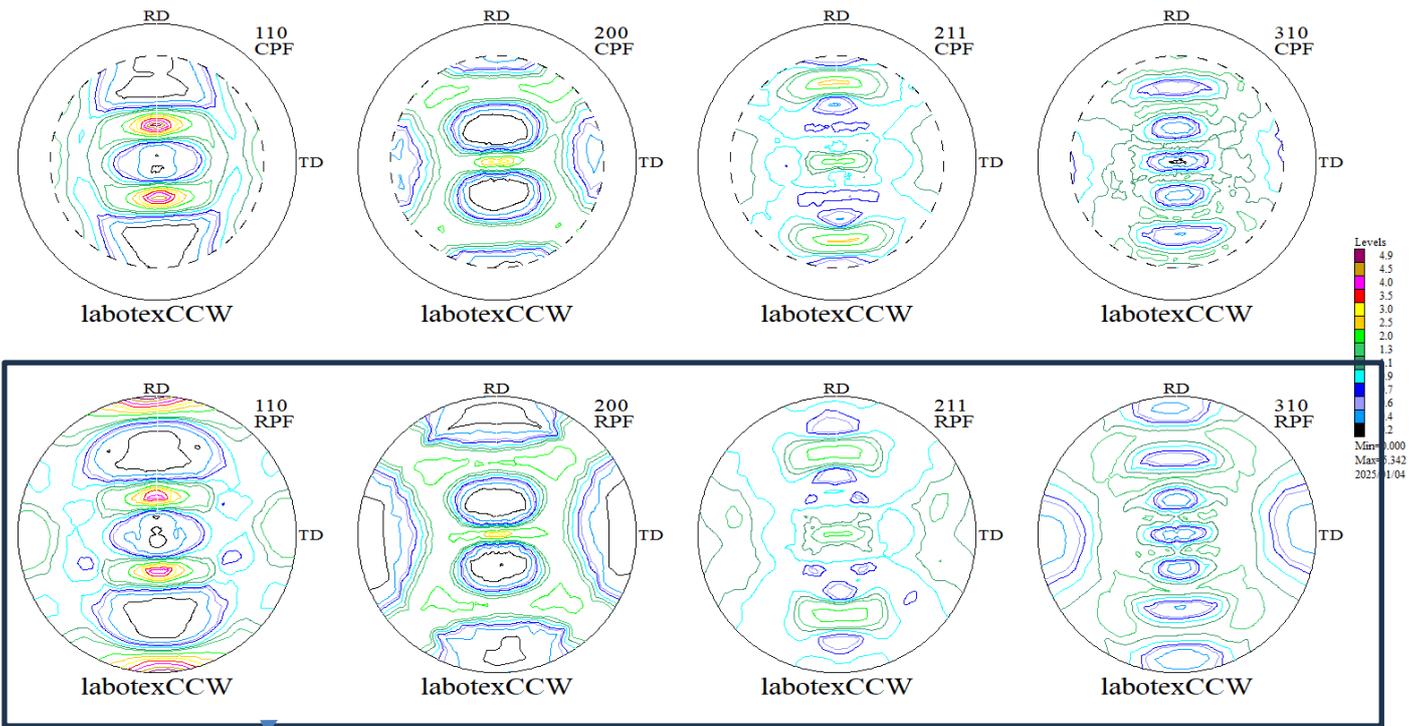


Export極点図をステップ0.1度間隔で表示 (最大極点図値で規格化表示)



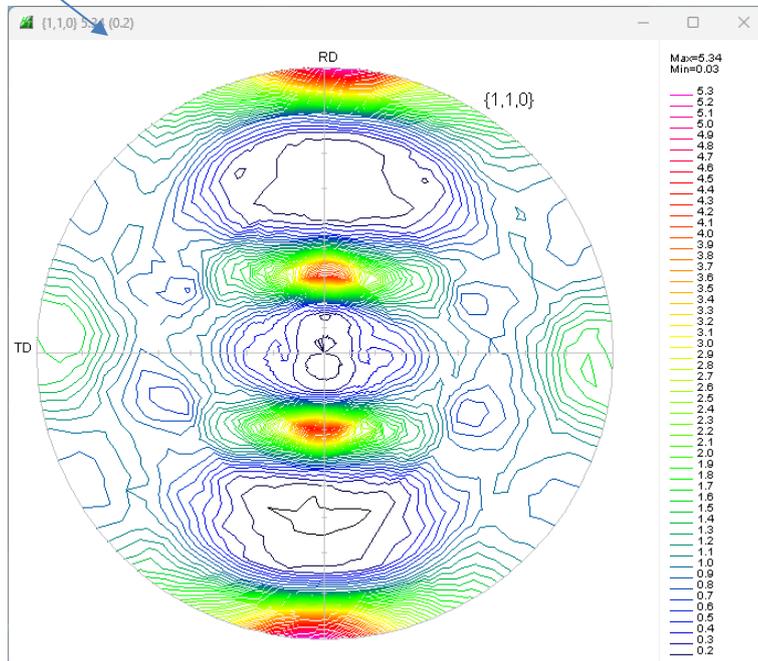
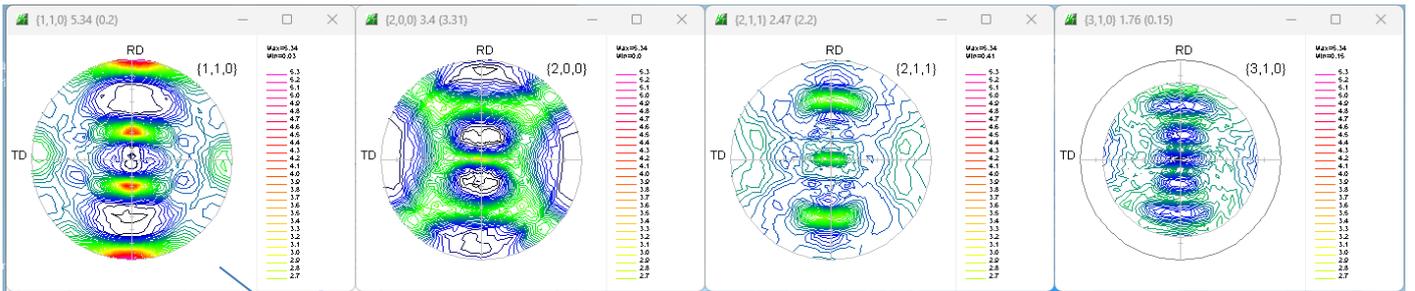
4. 2 LaboTex

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

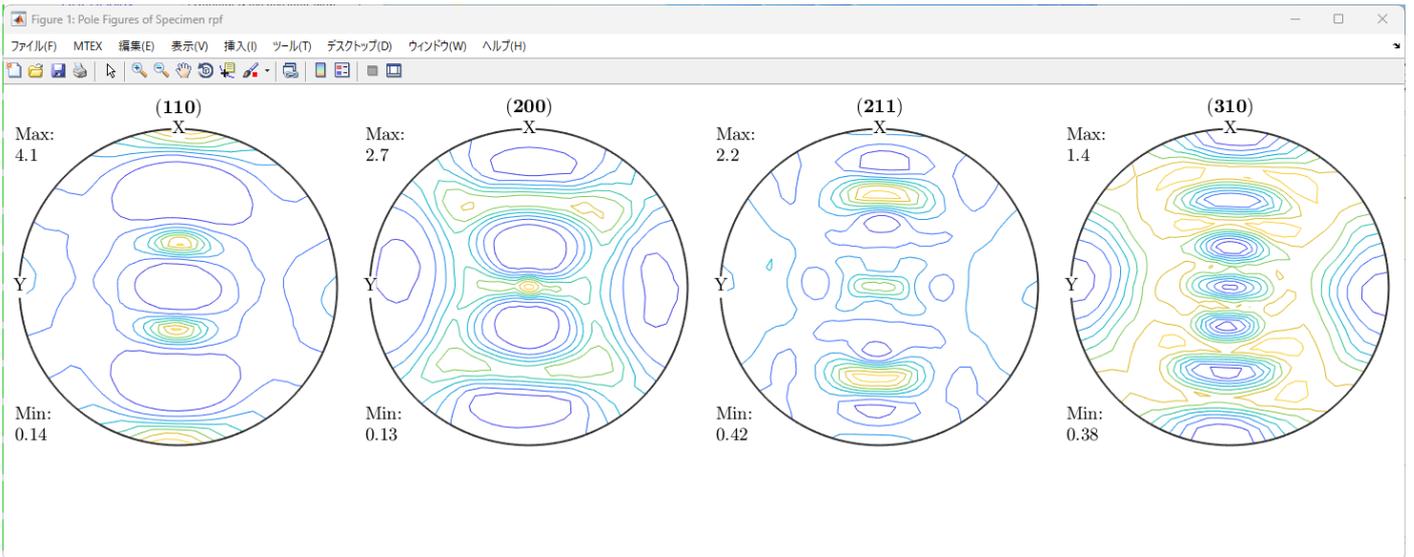
Exportデータの表示をステップ0.1degで表示（最大極点図値で規格化表示）



4. 3 MTEX

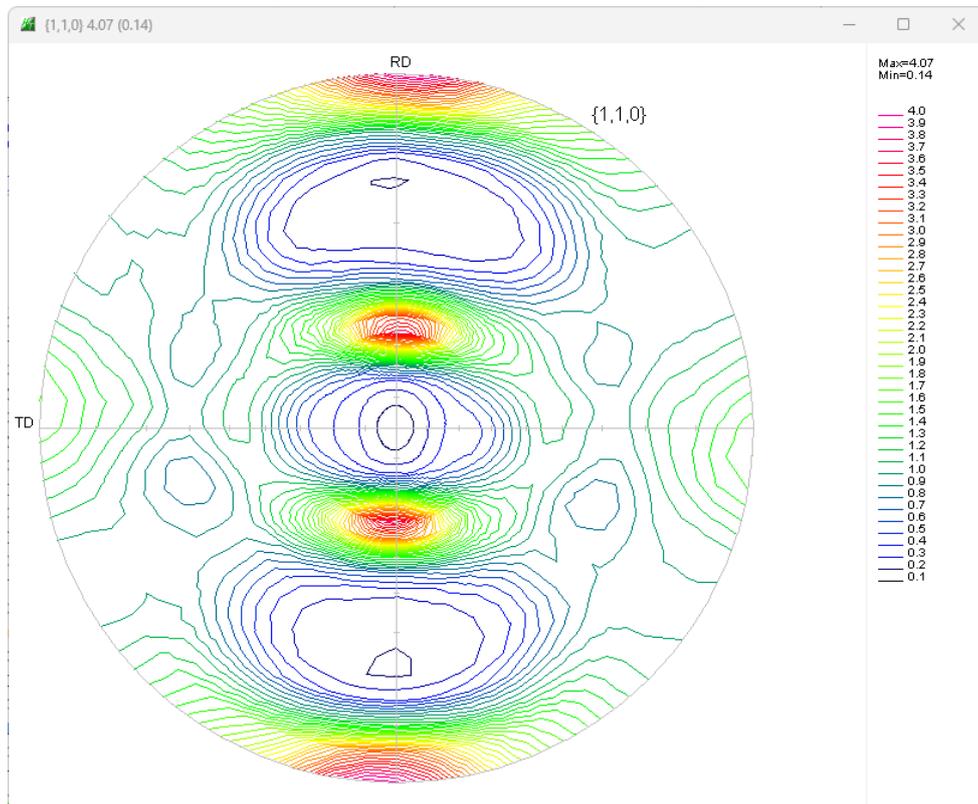
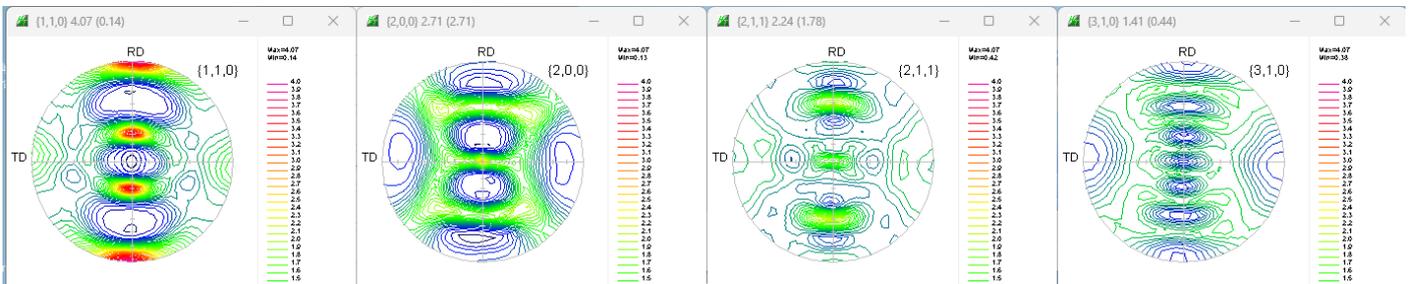
MTEXで解析し、再極点図の表示とExport

`plot(rpf,'contour','projection','eangle')`



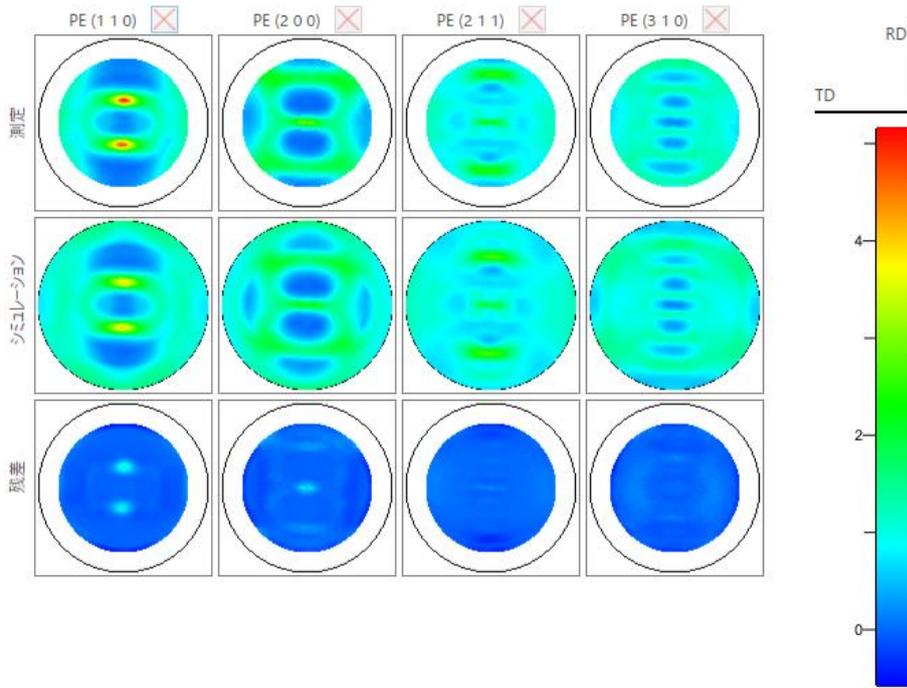
`export(rpf,'mtx')`

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)

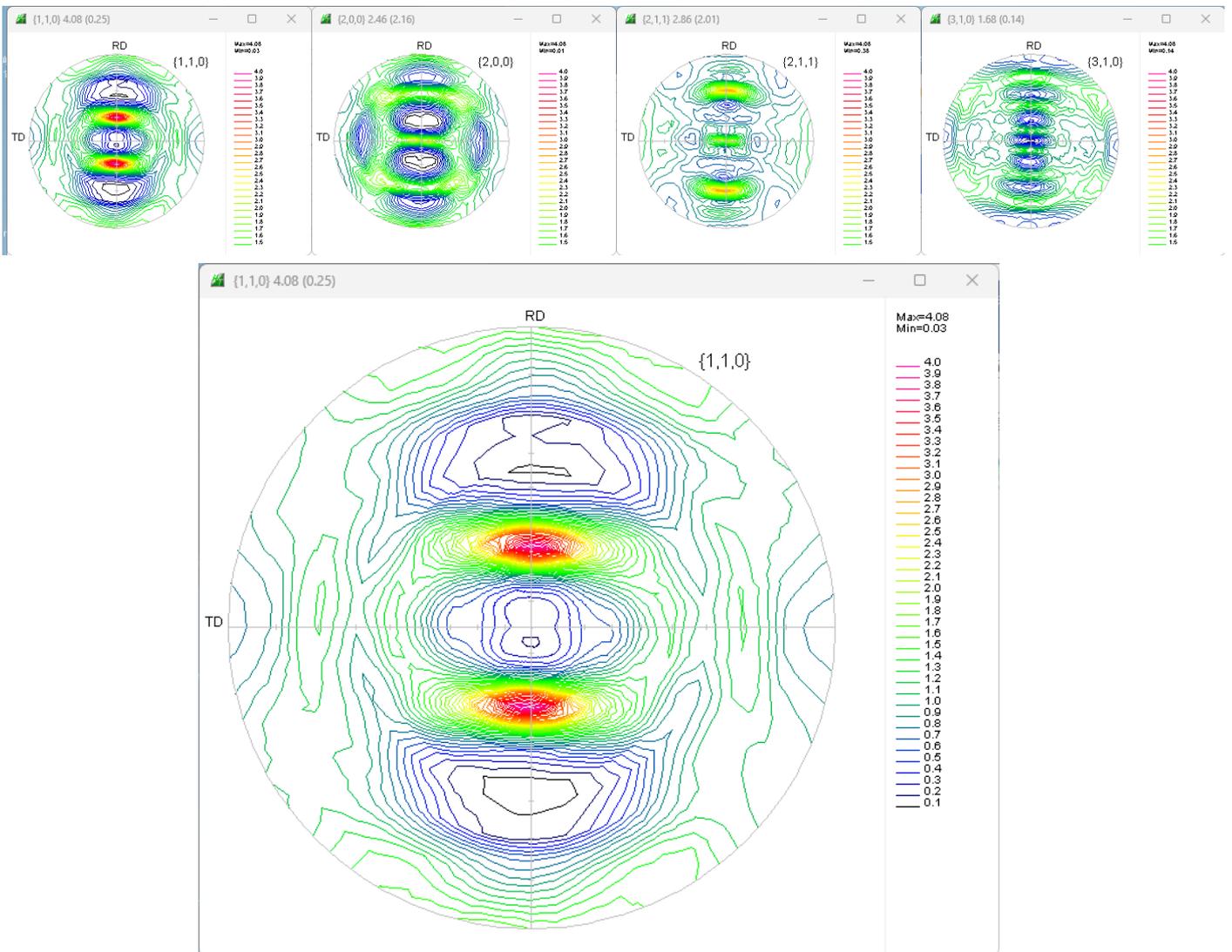


4. 4 NewODF

SmartLabで解析し、再極点図の表示とExport

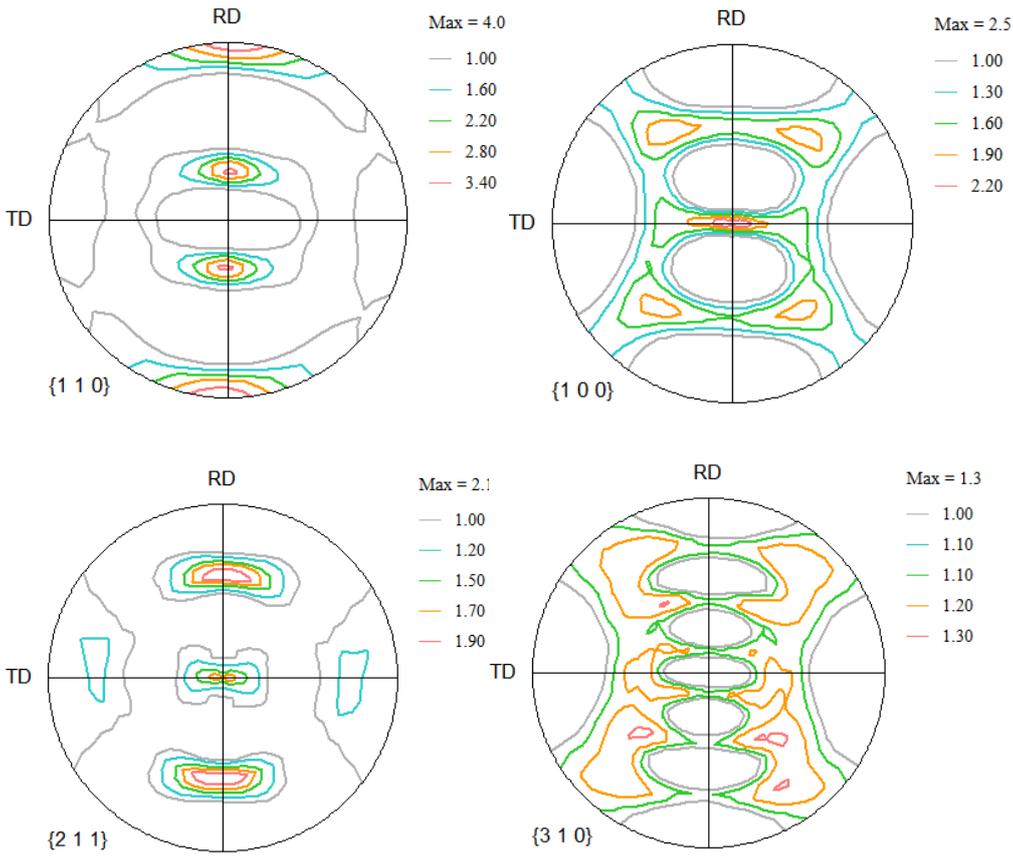


Exportデータ (最大極点図値で規格化表示)

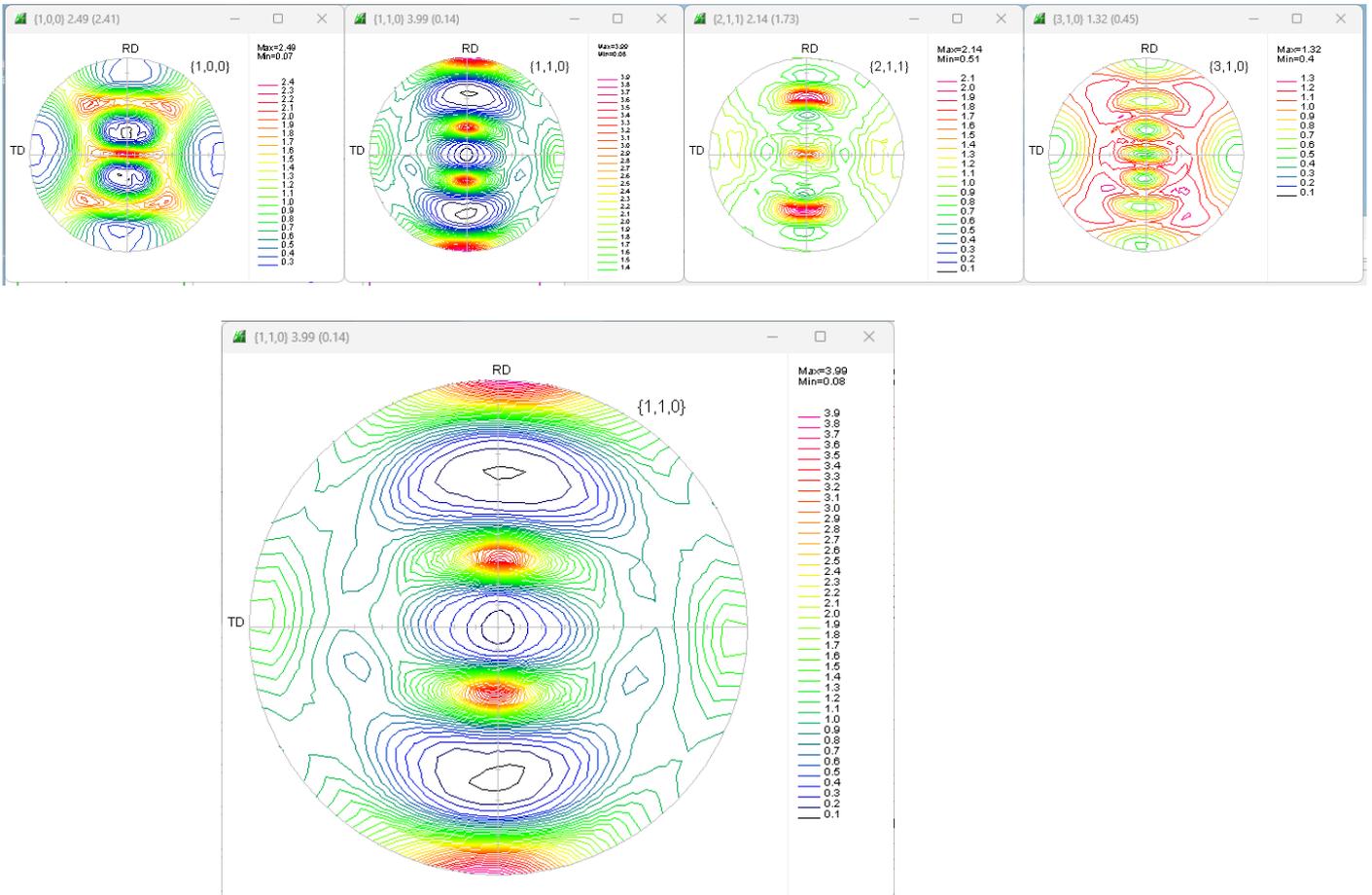


4.5 TexTools

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）

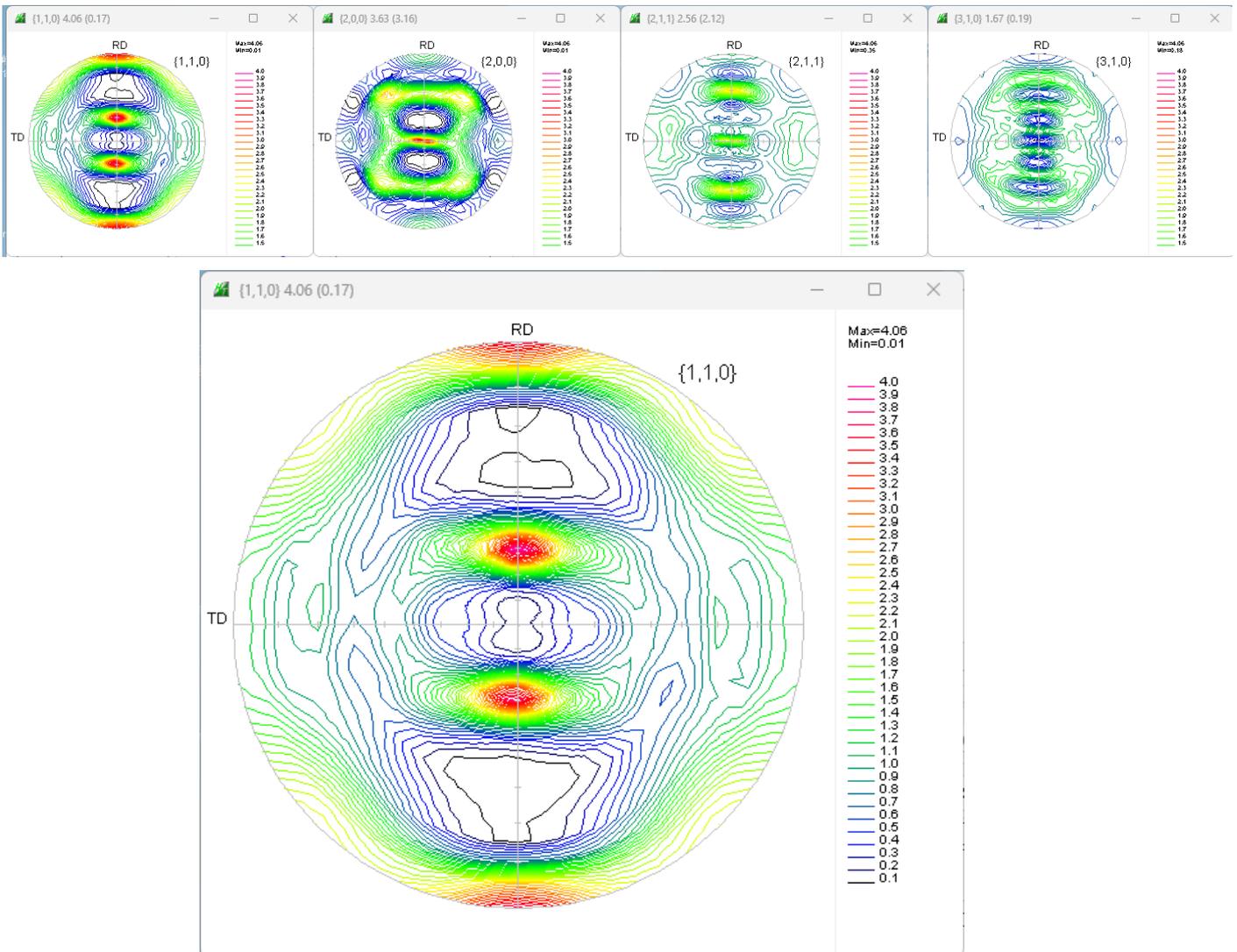


4. 6 p o p L A

p o p L AはD o s画面で動作するODF解析ソフトウェアでW I M V, H e r m o n i cがサポートされているが解析結果の表現が貧弱なためC T Rソフトウェアでサポートしています。以下はP F t o O D F 3にて、R A W, D F B ファイルを作成し、p o p L Aで解析した結果ファイルF U LからM a k e P o l e f i l eでT X T 2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	3 KB
POPLA.EPF	2025/01/05 8:07	EPF ファイル	23 KB
popla.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

p o p L A解析結果の再計算極点図（最大極点図値で規格化表示）



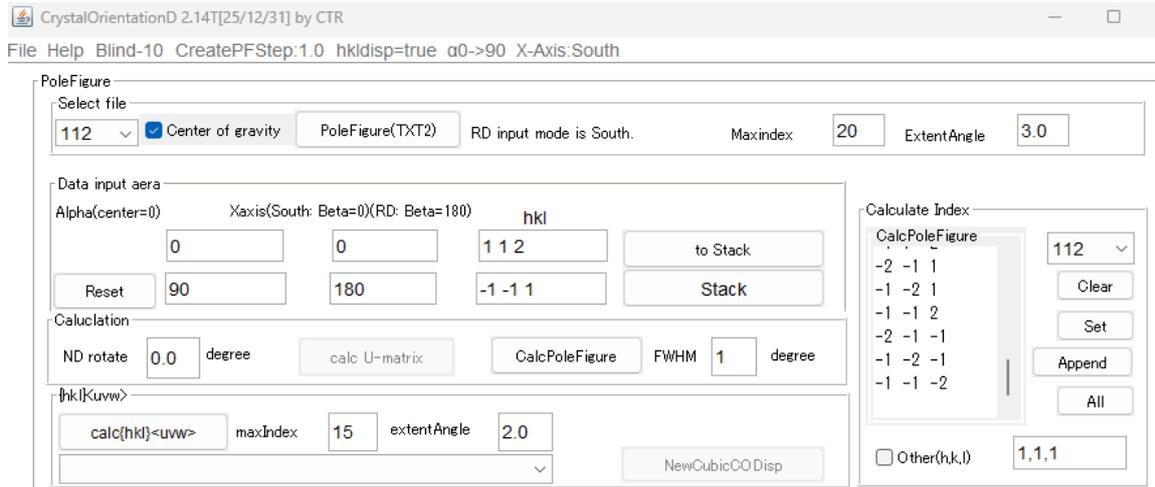
5. 極点図の create

結晶方位 $\{112\} \langle -1-11 \rangle$ copper を指定して極点図の作成

5.1 CrystalOrientationDソフトウェア

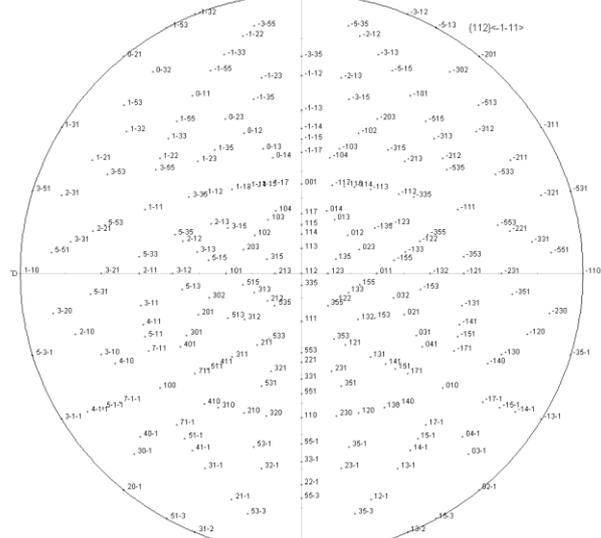
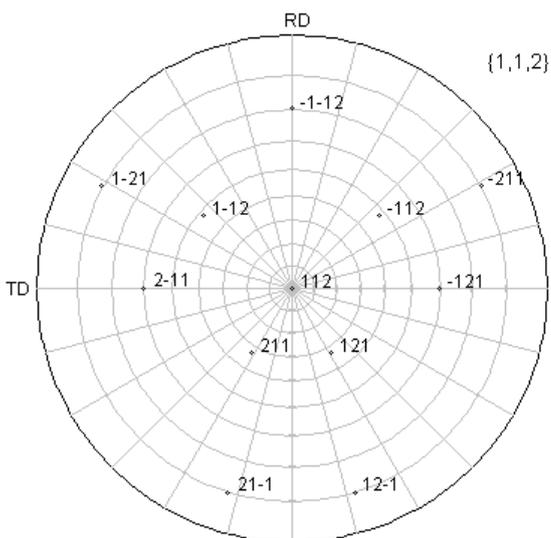
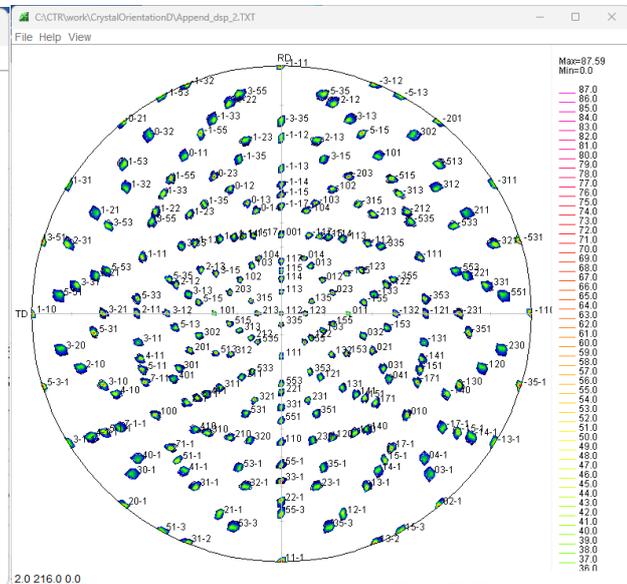
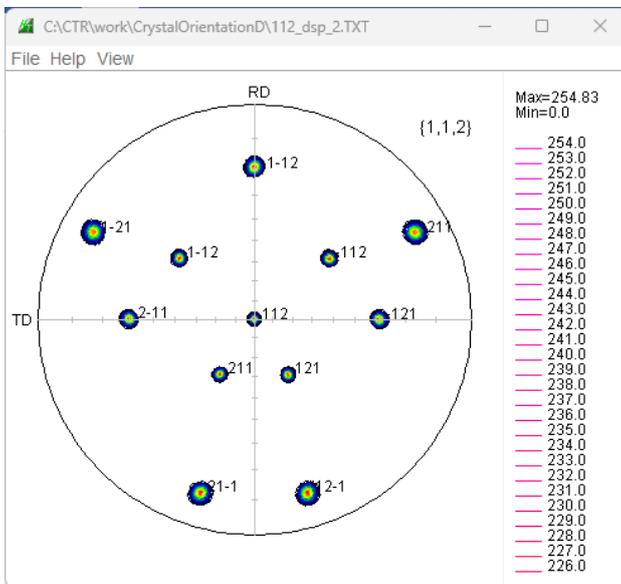
結晶方位を指定する事で、あらゆる極点図の描画可能になります。

本来このソフトウェアの目的は、単結晶極点図から方位の決定を行っています。



$\{112\}$ 極点図

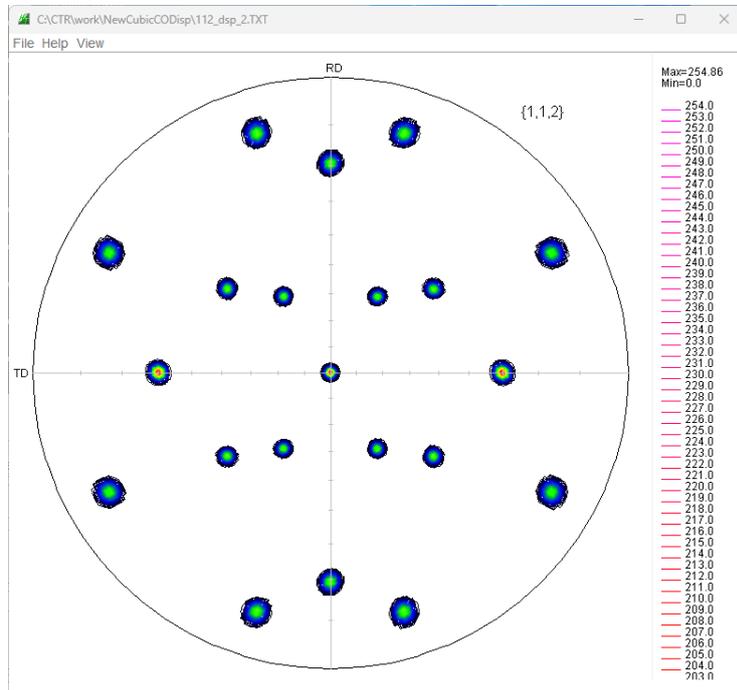
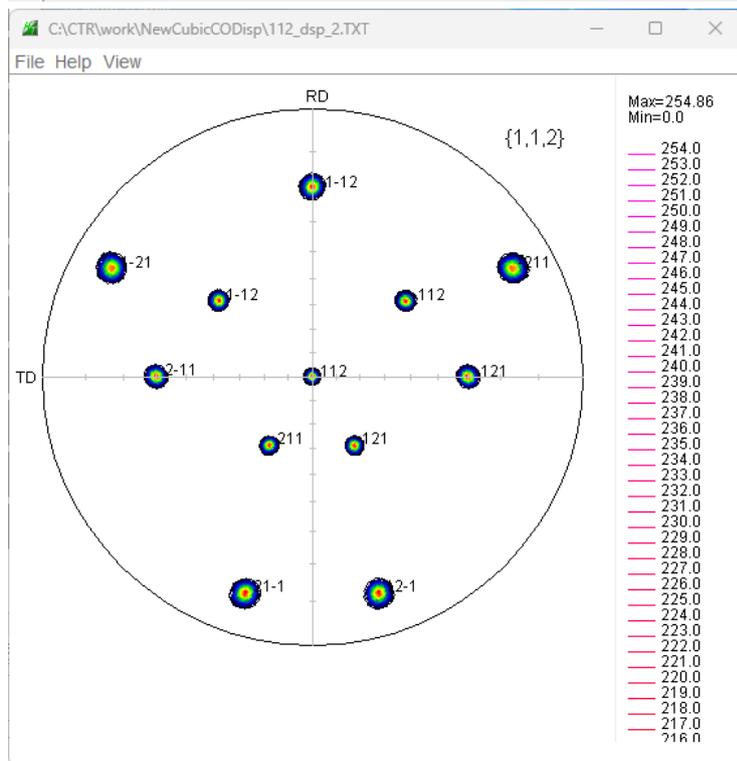
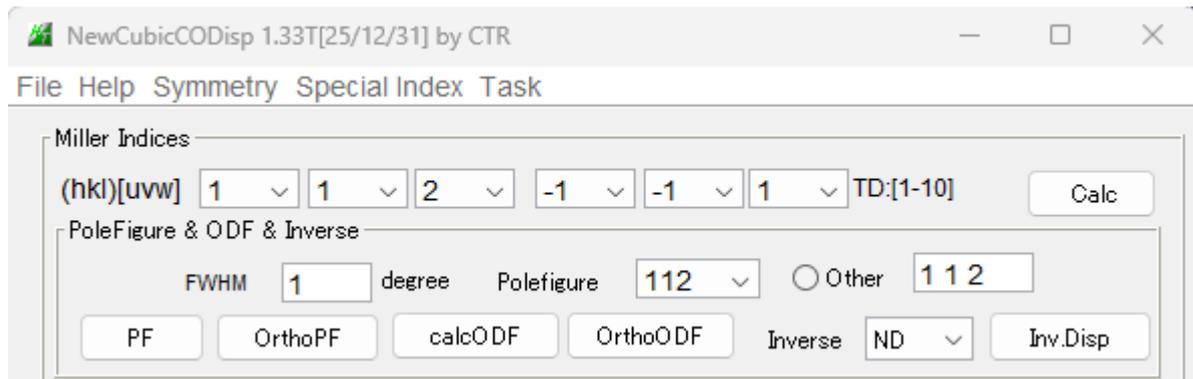
(112) ステレオ投影図



5. 2 NewCubicCODispソフトウェア

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。

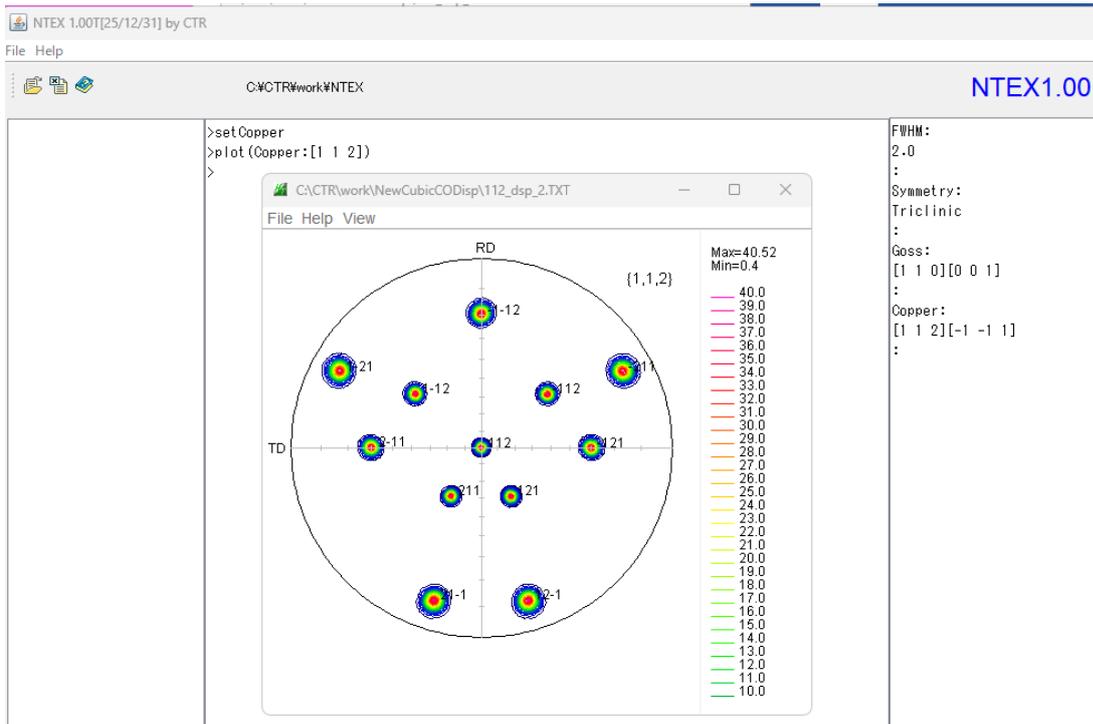


5. 3 NTEXソフトウェア

NTEXはMTEXに似せたコマンドソフトウェアです。

```
>setCopper
```

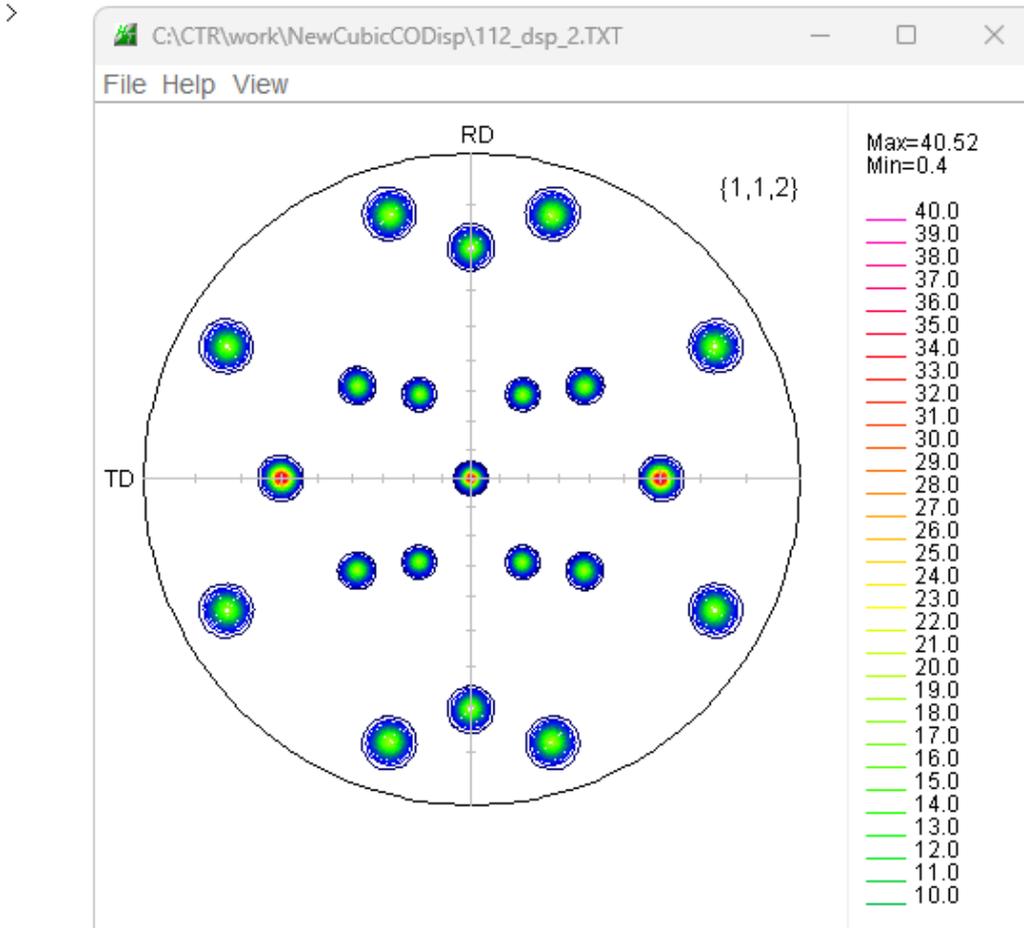
```
>plot(Copper:[1 1 2])
```

で表示できます。

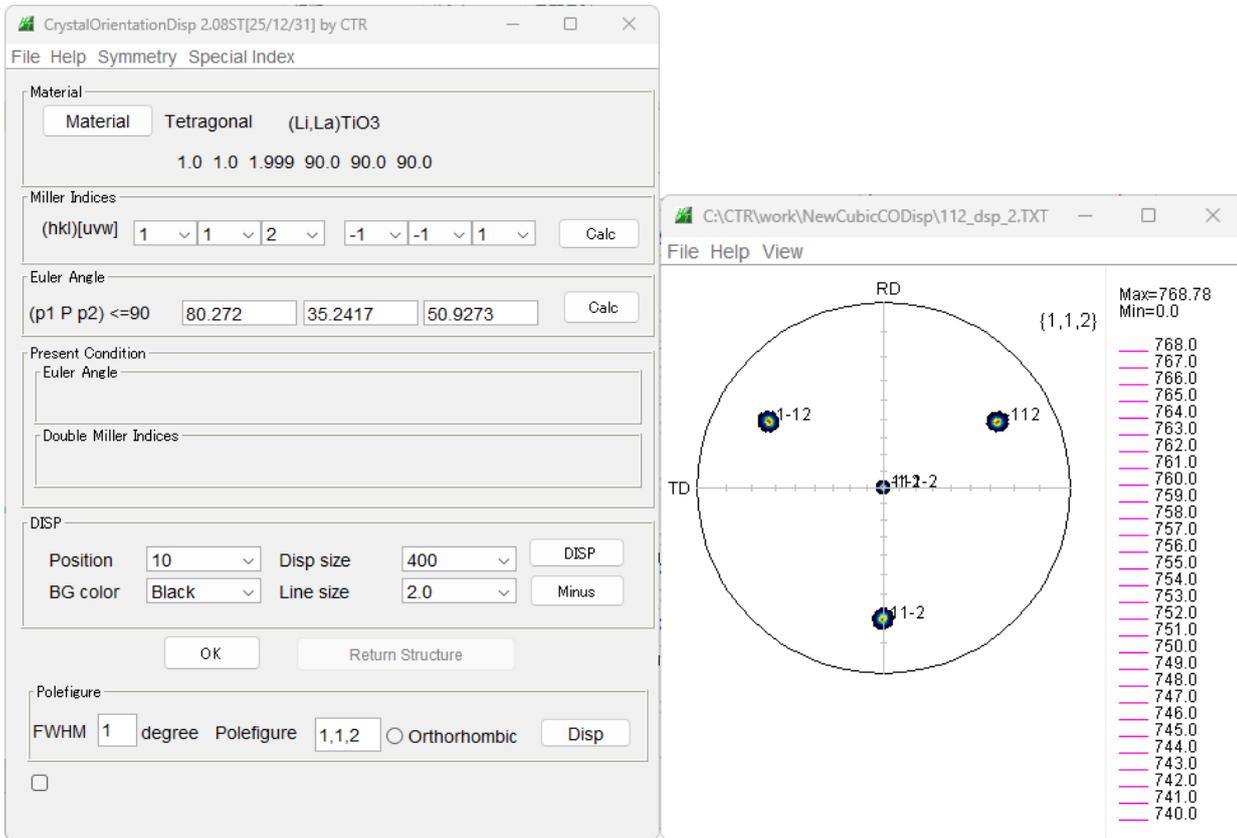
Orthorhombic表示は

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

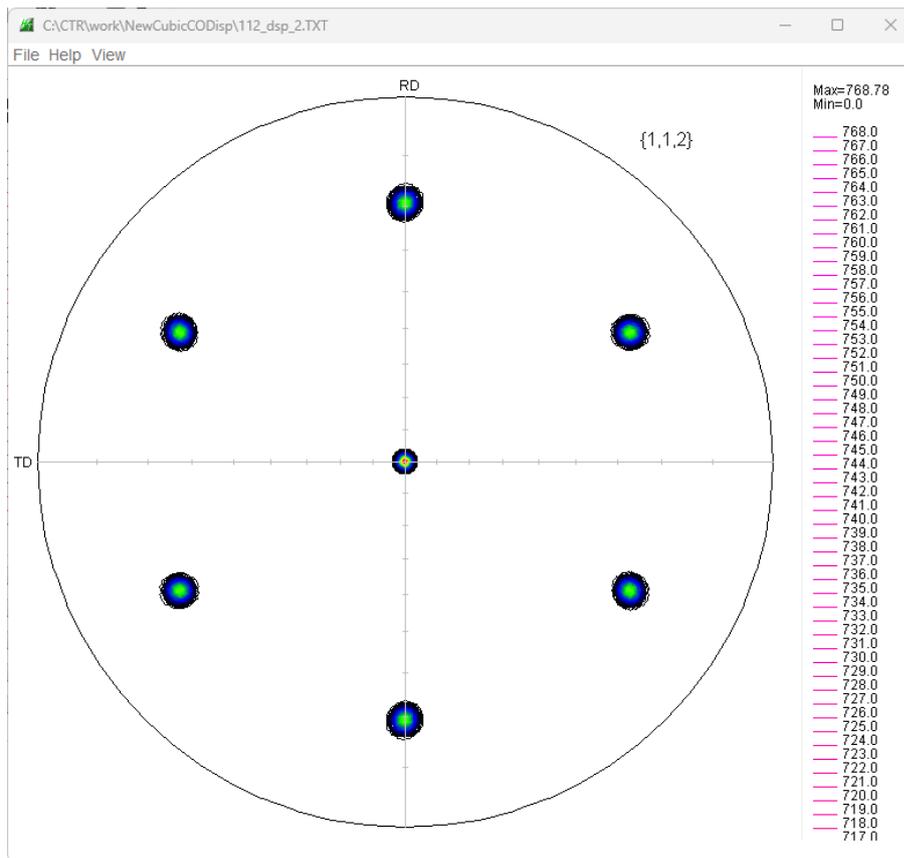
```
>
```



5. 4 CrystalOrientationDispによるTetragonal



Triclinic -> Orthorhombic



5.5 CrystalOrientationDispによるOrthorhombic

CrystalOrientationDisp 2.08ST[25/12/31] by CTR

File Help Symmetry Special Index

Material: Orthorhombic SeifertiteSiO2
1.0 1.232 1.097 90.0 90.0 90.0

Miller Indices: (hkl)[uvw] 1 1 2 -1 -1 1 Calc

Euler Angle: (p1 P p2) <=90 80.272 35.2417 50.9273 Calc

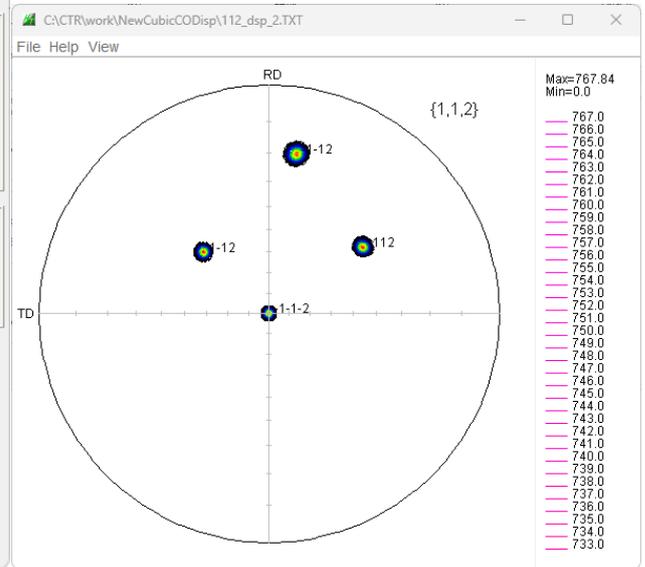
Present Condition: Euler Angle

Double Miller Indices

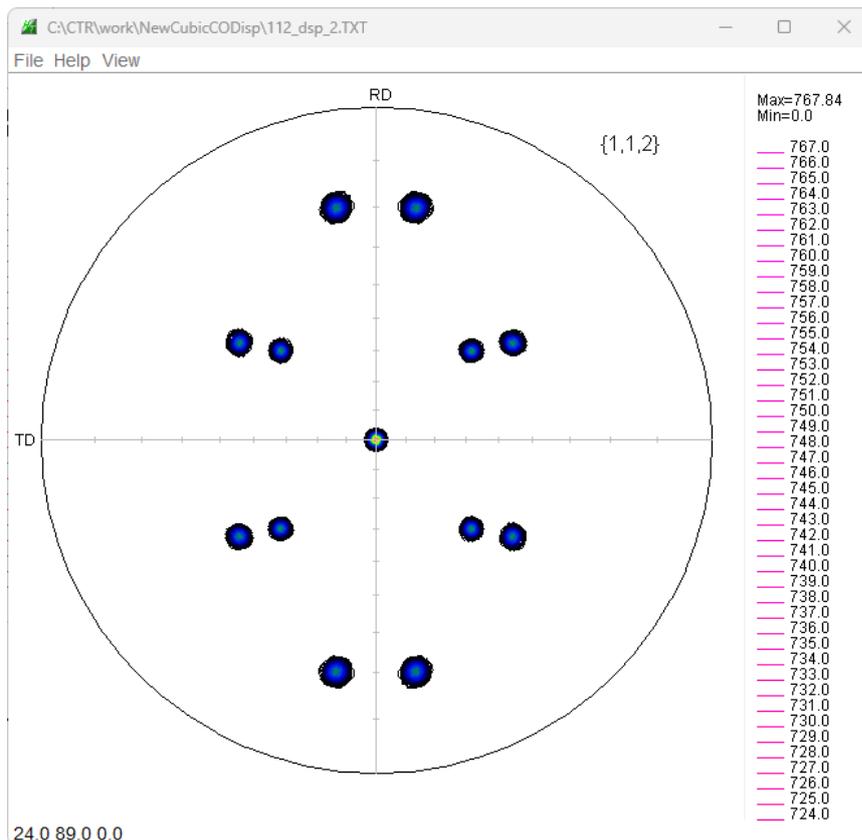
DISP: Position 10 Disp size 400 DISP
BG color Black Line size 2.0 Minus

OK Return Structure

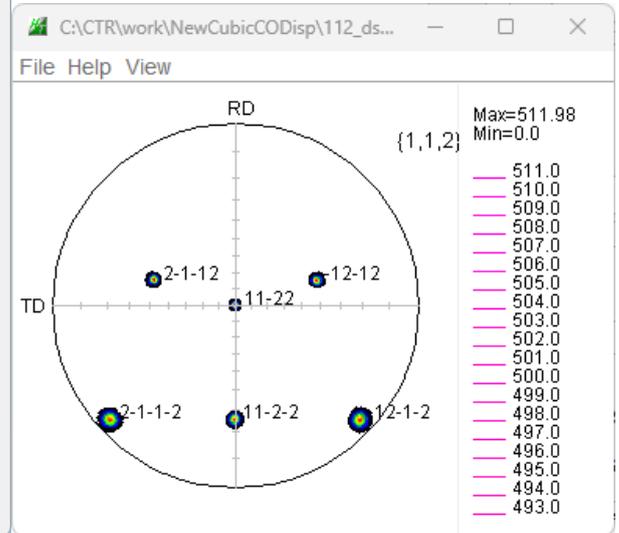
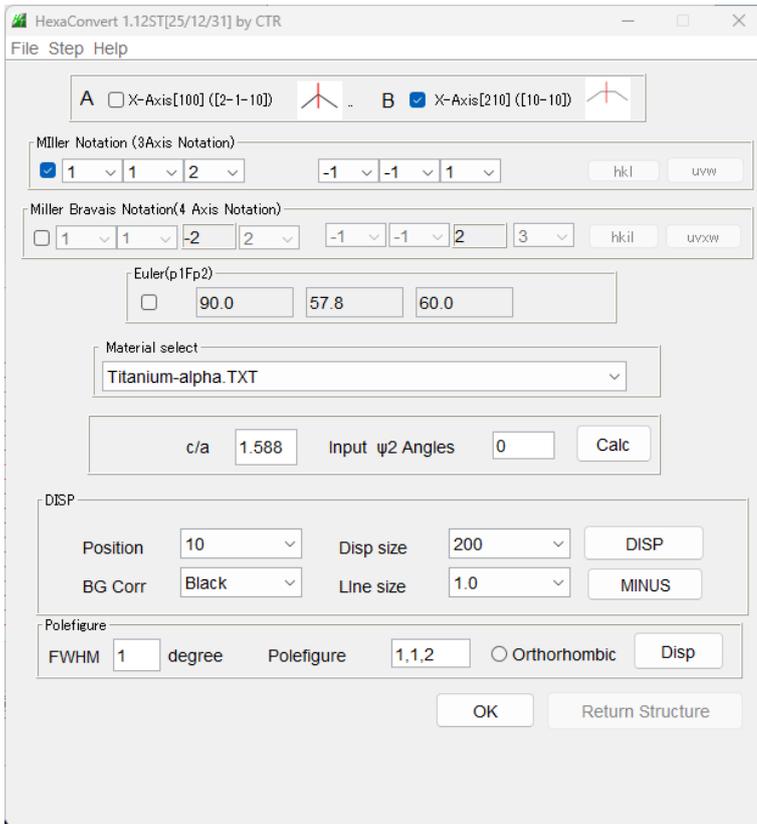
Polefigure: FWHM 1 degree Polefigure 1,1,2 Orthorhombic Disp



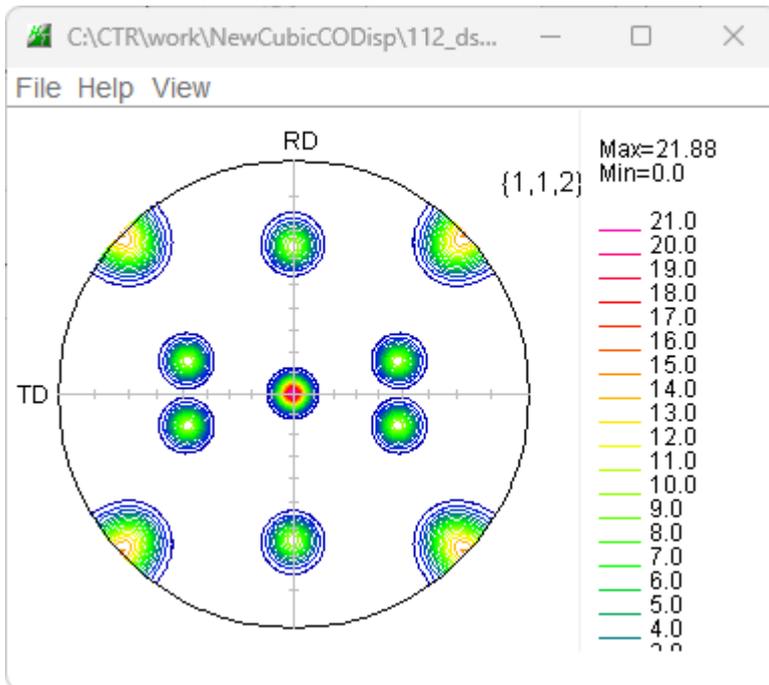
Triclinic -> Orthorhombic



5.6 HexaConvertによるHexagonal

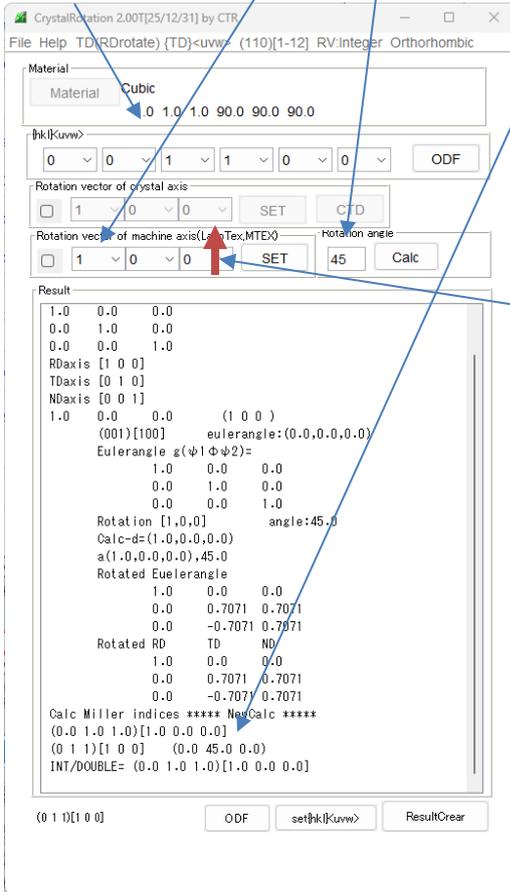


Triclinic \rightarrow Orthorhombic



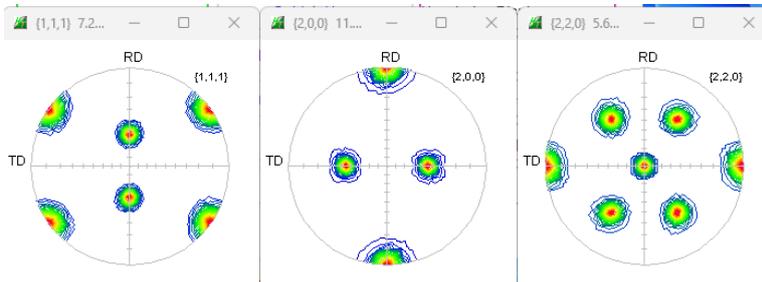
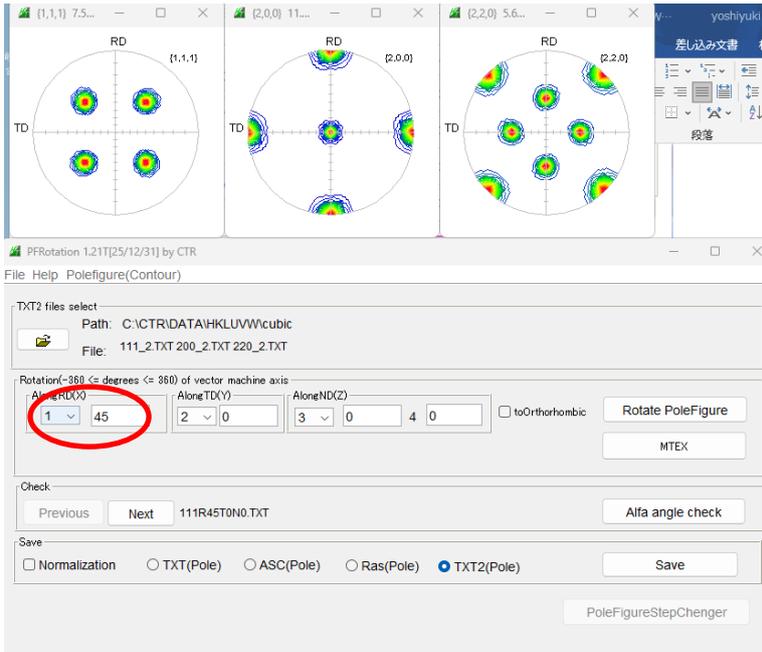
6. 結晶軸回転、座標軸回転による極点図の回転

C u b e 方位をRD軸に45度回転でG o s s 方位が得られる



機械軸を結晶軸に変換し結晶軸で回転

Calc Miller indices ***** NewCalc *****
 (0.0 1.0 1.0)[1.0 0.0 0.0]
 (0 1 1)[1 0 0] (0.0 45.0 0.0)
 C u b e



G o s s