LaboTexODF 解析結果を表示解析する

LaboTexDisplayソフトウエア

Ver1.05

2019年06月23日 HelperTex Office あらゆる材料のODF解析にLaboTexが利用されている。 LaboTexでは、ODF解析後の各種解析ツールが用意されている。 CTRソフトウエアでは、LaboTex解析結果をODFAFterToolsとして提供している。 解析結果のError評価に、ValueODFVF 極点図描画は、MakePoleFileを介してGPPoleDisplay 逆極点図の描画解析に、GPInverseDisplay ODF図の解析に、ODFDisplay2,GPODFDisplay この複数のソフトウエアを1つのソフトウエアから起動出来るようにしました。

🞽 🛛 LaboTexDisplay 1.05ST[19/09/30] by CTR 🚽 🗖 🗙						
File Help Material	File Help Material					
_[Select LaboTex holder						
ValueODFVF	GPPoleDisplay	GPInverseDisplay				
ODFDisplay2	GPODFDisplay	VF-ValueODFVF				
TPFtoPFtoODF3	hkluvwlistDisplay	hkllistDisplay				

LaboTexで解析後、ODF解析結果、再計算極点図解析結果、逆極点解析結果を Exportし、LaboTexを解析したホルダを指定します。 Exportするファイル名は以下とします。



説明書は、全てのソフトウエアで、

4	🌇 La	boTex	Display	1.00T[17/10/3
	File	Help		
Ĩ	_Sel∈	Ve	rsion	L
e N		Ма	nual 🕨	Acrobat
1				Manual

Help->Manual->Manual で参照出来ます。

C:¥CTR¥bin¥LaboTexDisplay.jar を直接

$ODFPoleFigure 2 (ODFPoleFigure 1.5) \verb+> TooKit \verb+> ODFA fterTools \verb+> LaboTexDisplay Intertools + State 1.5) + State 1.5 + S$

M ODFAfterTools 1.14M by CTR			
File Help			
-LaboTex,TexTools,STD,NEWODF- ODFExport file	ValueODF	in-out-Polefigure compare]
Polefigure All polefigure	PoleFigureProfile	TXT2	
LaboTex workholder Export files	LaboTexDisplay	ContourDisplay	

LaboTex の workholder を選択(通常、holder の最後に"CW")					
🔏 LaboTexDisplay	1.05ST[19/09/30] by	y CTR – 🗆 🗙			
File Help Material					
Select LaboTex holder					
ValueODFVF	GPPoleDisplay	GPInverseDisplay			
ODFDisplay2	GPODFDisplay	VF-ValueODFVF			
TPFtoPFtoODF3	hkluvwlistDisplay	hkllistDisplay			

各種解析を選択する。

実施例

$CTR \verb"¥DATA \verb"¥ODFPoleFigure2"$ DATA: $Random: CTR \verb"``EDATA \verb"``Al-powder-random"$

Random ファイル TABLRE を作成

<u>#</u>	{1,1,1}4711.0 - • × # {2,0,0}2402.0 - • × # {2,2,0}1561.0 - • ×	
#	ODFPolefigure1.5 1.35MT[17/03/31] by CTR	1 ×
File	Linear(3D) ToolKit Help InitSet Rp%	
File	select (RINT-PC) v 😰 111-random_S ASC 200-random_S ASC 220-random_S ASC	
Cal	ation Condition	
	revious Next C:#CTR#DATA#AI-powder-random#111-random_SASC 1.1.1 Change Cycles 2 V Weight 15 V Disp	p
Ba	kgroud delete mode	
	DoubleMode SingleMode LowMode HighMode Nothing Set Disp	,
Ab	Calc	
	ene (ile Schert	
	Image: Select TextDisp 1/Ra Profile Limit Alfa Defocus value Free.	v
No		
	ValueODF-B ValuODF-A Cance Calc ODF	File

TXT2で作成されたTXT2ファイルを同時選択

Defocus file Select	🍝 ファイルの場所(I): 🌗 Al-powder-random
Normalizat CenterData - CenterData - CTR	الله defocus الله 111-random_S_chB0S_2 الله درية الله 200-random S chB0S_2
Filemake success !!	最近使う定項 ■ 220-random_S_chB0S_2

r a n d o mファイル TABLE が作成される

ſ	Defo	cus file Se	lect		-
		2	TXT2	C:¥CTR¥DATA¥AI-powder-random¥defocus¥DEFOCUS_F.TXT	
÷	••				

ODFPoleFigure2 ファイルを極点処理

解析を行う極点図を複数選択

<pre>4 {1,1,1}9637.5 - □ × # {2,2,0}:</pre>						
M ODFPolefigure1.5 1.35MT	[17/03/31] by CTR – 🗆 🗙					
File InitSet Rp% Files select InitAsc 200.Asc 220.Asc Asc(RINT-PC) InitAsc 200.Asc 220.Asc Calcration Condition Previous Next C+CTR#DATA#O DFPoleFigure 2#111.Asc	hkl 1,1,1 Change Smoothing(for ADC) Cycles 2 v Weight 15 v Disp					
Backgroud delete mode						
AbsCalc - Schulz reflection method v Absorption coefficien 1.0 1/cm	Thickness 1.0 cm 2Theta 38.46 deg. I/Kt					
Defocus file Select Image: Carrier of the select of	Dialog – 🗆 × Defocus value Free v					
Normalizat CenterData OutFiles CTR Average Asc Ras TXT2 TXT Search minimum Rp%(Cubic	c only) The Rp% is calculated.					

Rp%の最小化を指定して、計算

最適化されたRp%による補正が完了する。

Defocus file Select Image: Circle C	TextDisp 1/Ra Profile Limit Alfa Defocus value Free			
Ownerlizat1 CenterData - OutFiles Image: Crassing of the state o	ValueODF-B ValuODF-A Cancel Calc ODF File			
Search Rp% (1,1,1) 3.75% -> 3.43% (2,0,0) 4.31% -> 4.36% (2,2,0) 5.22% -> 4.41% Filemake success!				

Rp%が5.22%から4.42%へ改善さ<u>れている。</u>

StandardODFの入力ファイルを作成

Material で Aluminum を選択

Material Aluminum.txt		Initialize Start
Structure Code(Symmetries after Schoenfiles)	7 - 0 (cubic) v	● getHKL<-Filename
a 1.0 <=b 1.0 <=c 1.0 alfa 90.	0 beta 90.0 gamm 90.0	AllFileSelect
F Data		
SelectFile(TXT(b,intens),TXT2(a,b,intens,))	h,k,I 2Theta Alfa Are	AlfaS AlfaE Select
200_chB0DS_2.TXT) 0.0 75.0 🗸
220_chB0DS_2.TXT	2,2,0 0.0 0.0->75.0) 0.0 75.0 🗸
	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	
	521 00	
	5.2.1 0.0	
	5,3,1 0.0	
Comment 111_chB0DS_2.TXT 200_chB0DS_2.TXT 220_	shB0DS_2.TXT	
CenterData	Labot	ex(EPF),popLA(RAW) filename
Symmetric type Full O Average	Epf file save lab	ootex

LaboTex を指定 常時 LaboTex を使う場合、Condition save を行う。



File	Option Symmetr	ic Soft		
	Condition save			
	Exit	Aluminu		
	Structure Code(Symmetries			

Comment 111_chB0	2.TXT 200_chB0DS_2.TXT 220_chB0DS_2.TXT]
Symmetric type Full	CenterData Labotex(EPF),popLA(RAW) filename -	

LaboTexで先ほど作成したEPFファイルを選択する。



入力された極点図



ODF解析



ODF解析が終了するとError表示がされる。



ODFPoleFigure2 ソフトウエアで予測計算した Rp%=4.4%に対し 5.56%が計算される。

計算された ODF 図



計算された再計算極点図







フォルダーの非表示

保存(S)

再計算極点図、逆極点図の Export

L								
File	Edit	View	Calculation	Analysis	Modelli			
	New 9							
	Open Sample							
	Change/New User							
	ODF E	xport			•			
	PF Exp	oort						
	EPF/P	PF/COR	/POW/SOR Ex	xport	\sim			

PF Expor	t as Text file 🛛 💌	PF Exp	ort as Text file 💦 💌
lob No :	ЈоБО1	Job No :	ЈоБО1
Gample :	LaboTex	Sample :	LaboTex
Select Data to Export :		Select Data to Expo	ort :
LaboTex - CPF - 111 LaboTex - CPF - 200 LaboTex - CPF - 220 LaboTex - NPF - 210 LaboTex - NPF - 200 LaboTex - NPF - 220 LaboTex - RPF - 220 LaboTex - RPF - 220 LaboTex - INV - 100 LaboTex - INV - 001 LaboTex - INV - 001	Cancel	LaboTex - CPF - 1 LaboTex - CPF - 2 LaboTex - CPF - 2 LaboTex - NPF - 1 LaboTex - NPF - 2 LaboTex - NPF - 2 LaboTex - NPF - 2 LaboTex - RPF - 1 LaboTex - RPF - 2 LaboTex - INV - 10 LaboTex - INV - 00	11 00 20 11 20 11 00 20 20 20 20 20 20 20 20 20 20 20 20
ハル名(N): Labo	Tex-pole.TPF		LaboTex-inverse.TPF
種類(T): Labo	Tex PF Text Files (*.TPF)	ファイルの種類(T):	LaboTex PF Text Files
oleを追加	する	— i n	verseを追加する

再計算極点図

逆極点図



Volumfraction 計算を開始



エラーが安定したら終了



VolumeFraction%が得られる。



VolumeFraction から計算した再計算極点図



再計算極点図を Export

PF Export as Text file	
ob No : Job02	
iample : LaboTex	
elect Data to Export :	
LaboTex - APF - 111 LaboTex - APF - 200	
LaboTex - APF - 220	
	יאראים(א): Labotex-polevr
LIK Cancel	フラノルの種類(T), LoboTox DE Toxt Files (* TDE)

-poleVF を追加する。

LaboTexDisplayでholder指定

🞽 LaboTexDisplay	1.03ST[19/03/31] b	y CTR 🚽 🗖 🗙					
File Help Material							
Select LaboTex holder							
C:¥CTR¥DATA¥ODFPoleFigure2¥LaboTex¥CW							
ValueODFVF GPPoleDisplay GPInverseDisplay							
ODFDisplay2 GPODFDisplay VF-ValueODFVF							
TPFtoPFtoODF3 hkluvwlistDisplay							

ValueODFVF でエラー評価(±1.5%以内で正常)



入力データは、***-pole.TPF (自動で読み込まれます)

ODFPoleFigure2ソフトウエアで最適化されたRp%に近いエラーが得られる。 詳細は、ValueODFVF説明書を参照してください。

GPPoleDisplay で再計算極点図の等高線描画

M	{1,1,1} 4.51	- 🗆 🗙	# {2	2,0,0} 5.61	- 🗆 🗡	24	{2,2,0]	} 3.98	- 🗆 🗡
тр	RD (1,1,1)	Max:=4.51 Min=0.06 4.4 4.2 4.0 8.8 3.4 3.2 2.8 2.4 2.2 2.0 1.4 1.2 1.4 1.2 0.8 0.4		{2,0,0}	User-581 Site Site	тр		(2,2,0)	Max=3.98 Min=0.12 3.8 3.6 3.6 2.8 2.8 2.8 2.4 2.2 2.0 1.8 1.6 1.6 1.6 1.6 1.6 0.8 0.6 0.6 0.4 0.2
<u>///</u>		GPPoleDisplay	1.35MT[17/10/31] by	CTR		- 🗆 🛛 🕹	00T[17/10/31] by CTR	- 🗆 🗙
File Help Re	esolution								
Home C#CTR¥DATA¥ODFPoleFigure2¥LaboTex¥CW¥work Display Title Filename 111_2.TXT 200_2.TXT 220_2.TXT (HKL) (HKL) [11,1] {2.00} {2.20} DispCondition Level Auto Max Intens. Input Max Intens.									
Smoothing Cycles 1 Weight 9 Display ContourDisplay ContourLevel+Displ. Step 0.2 Font 10									

入力データは LaboTex-pole.TPF (自動で読み込まれます)
 機能詳細は、GPPoleDisplay説明書を参照してください。

GPInverseDisplay

GPInverseDisplay 1.21T[17/10/31] by CTR – 🗆 🗙						
File Help						
Material Aluminum.TXT a 4.0494 b 4.0494 c 4.0494 α 90.0 γ 90.0						
□ LaboTex						
Method Viller Nortation(3 Axis Nortation) Viller Nortation(3 Axis Nortation)						
Inverse data select C:\CTR\DATA\ODFPoleFigure2\LaboTex\CW\LaboTex-inverse.TPF List RD						
Inverse Display Inverse max val 2D-3D 6.23 2D v 0.3 < 1.0 800 Cycles 1 v Weight 9 v						
Peak data Other font size Disp Font size Filename 12 v Base 12 v ContourDisplay ContourDisplay Center[001]						
Level 3 Peak serach Inverse Disp						



入力データは****-Inverse.TPF (自動で読み込まれます)
 機能詳細は、InverseDFisplayソフトウエア説明書を参照してください。

ODFGDisplay2ソフトウエア

同一フォーマットのファイルが存在する場合、最初に検出したデータとします。

M ODFDisplay2 1.45YMT[17/10/31] by CTR – 🗆 🗙						
File RoeModeEnable Help 3dispODF OtherODF Cubic						
ODF						
ODFTXTFile(or ODF15) C#CTR¥DATA¥ODFPoleFigure2¥LaboTex¥CW¥LaboTex.TXT						
Contour(Max=40)						
ODFMax= 8.78138 DispMax 8 Steplevel 0.5 Number=16						
Sample Symmetry(\$\phi 1)						
φ1range 0->90 V						
Display						
Bunge □ Phi1 ✔ Phi2 □ PHI □ Phi1 ● RINT all ✓						
Smoothing Cycle 1 V Center points 9 V Display						



入力データは****.TXT (自動で読み込まれます)機能詳細は、ODFDisplay2説明書を参照してください。

GPODFDisplayソフトウエア

同一フォーマットのファイルが存在する場合、最初に検出したデータとします。



入力データは****.TXT (自動で読み込まれます)機能詳細は、GPODFDisplay説明書を参照してください。



VF-ValueODFVFでVolumeFractionのエラー評価

入力データは、****-pole.TPF と****-poleVF.TPF (自動で読み込まれます) 機能詳細は、ValueODFVF説明書を参照してください。

評価結果が±1. 5%を超えている原因は、標準結晶方位{hkl}<uvw>に対し、測定された Euler 角度が ずれている事です。

説明書¥Soft¥DOC2¥VF-Error.PDF を参考にして下さい。

Webサイトからは

http://www.geocities.jp/y_craturasuper/VF-Error.pdf

TPFtoPFtoODF3ソフトウエア

LaboTex表示で、平滑化が必要な場合、

再計算極点図の平滑化を行い、再度LaboTexに読み込ませます。



GPODFDisplay による数値化





集計した結果のグラフ化と印刷



normalize list では結晶方位の多重性を考慮した計算が行われます。

方位によって、4:2:1の方位を0.5:1:2の係数で計算します。



<u> 7</u>	hkluvwlistDisplay 1.01T[19/03/31] by CTR	- 🗆 🗙
Fi	le DispODF Help	
	C:\CTR\DATA\ODFPoleFigure2\LaboTex\CW\labotex.csv	DispODF labotex
	C:\CTR\DATA\ODFPoleFigure2\StandardODF\standardodf.csv	✓ DispODF standardodf
	○ Dispselect	☑ DispODF
	○ Dispselect	☑ DispODF
	C Dispselect	☑ DispODF
	C Dispselect	☑ DispODF
) Dispselect	✓ DispODF
) Dispselect	✓ DispODF
[MakeCSVFile Load	hkluvwlistDisplayGraph



同一ODFで別の試料を解析した表示も同一の手順で可能になります。