

popLA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)

Cubic, Hexagonal 極点のODF解析

ODF図

マウス操作で結晶方位の決定

逆極点図

Direction, Plane 方位の決定の自動決定

ODF解析を行うことで、Rp%を算出し、極点図のError評価が行えます。

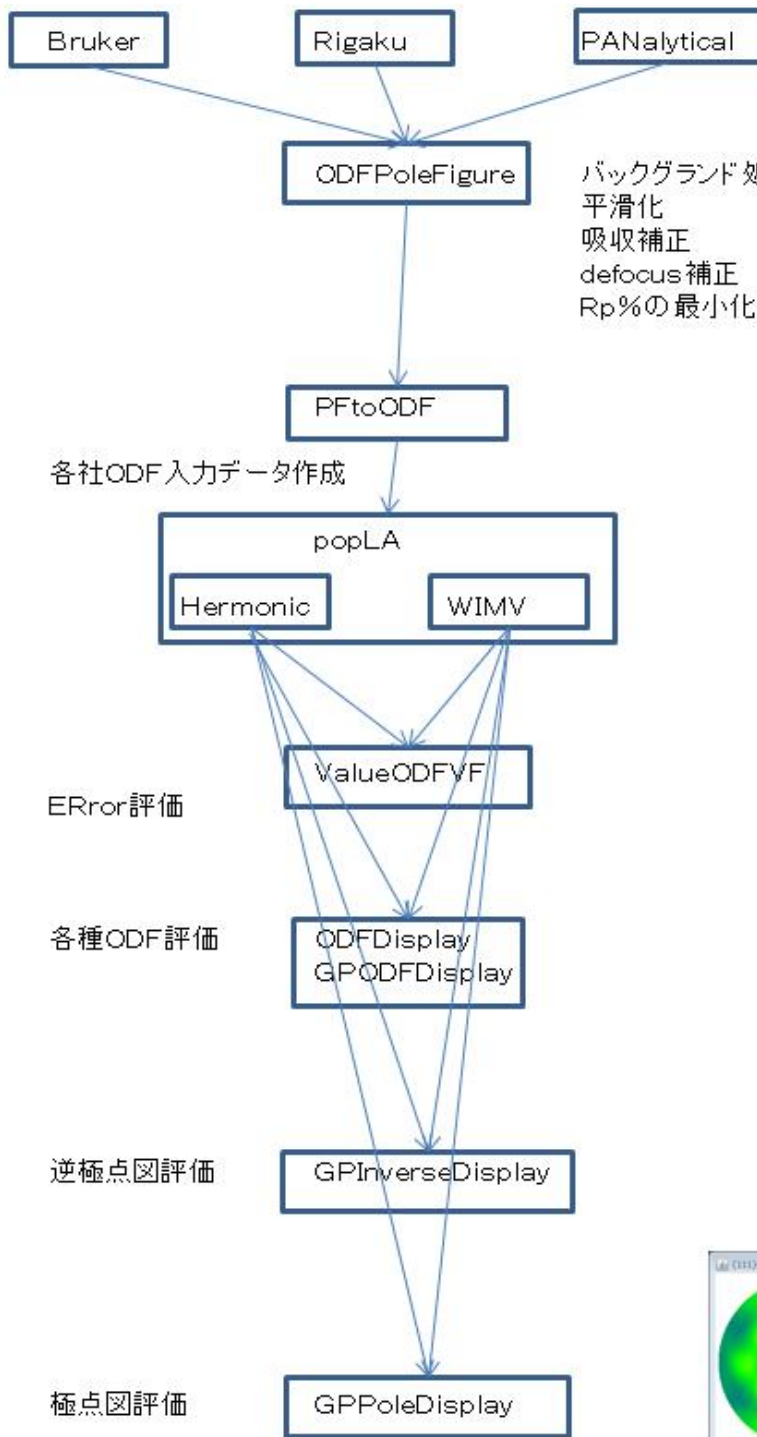
2016年1月27日

HelperTex Office

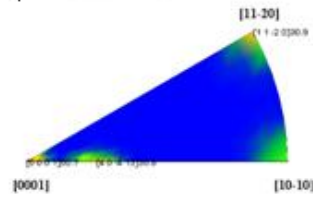
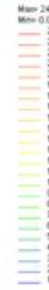
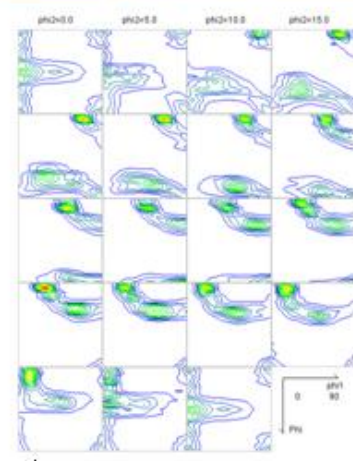
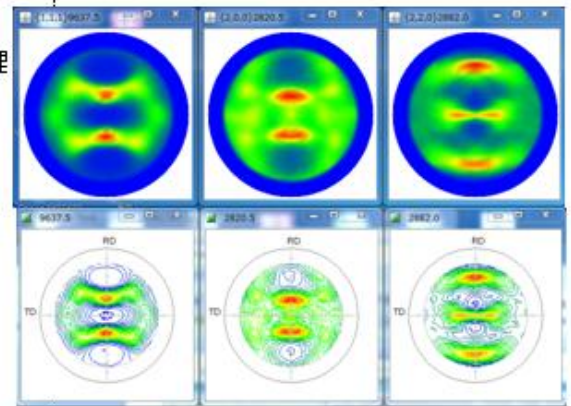
目次

1. 概要
2. 入力データ
3. 極点図データ補正
 3. 1 ODFPoleFigure2 ソフトウェア
 3. 2 測定データの選択
 3. 3 データ処理条件を設定
 3. 4 一括正極点図データ処理
4. popLA用入力データの作成
 4. 1 P F t o O D F 3 プログラムに T X T 2 データ
5. popLAによる解析
 5. 1 popLA プログラムの立ち上げ
 5. 2 RAWファイルからEPFファイルを作成
 5. 3 WINVを使う
 5. 4 WINVのODF図、再計算極点図表示
 5. 5 Harmonic法
 5. 6 Harmonic法のODF図、再計算極点図を表示
6. 結晶方位の解析 (Cubic)
 6. 1 マウスクリックによる結晶方位図
 6. 2 結晶方位の自動検出
 6. 3 結晶方位のFamily化List作成
 6. 4 GPODFDisplay機能
7. Error評価
8. 逆極点図
9. 再計算極点図の等高線表示

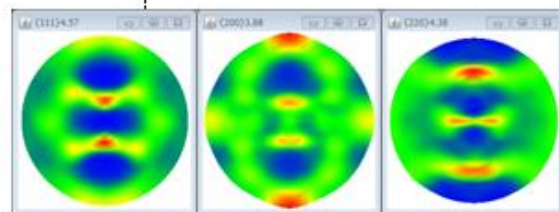
データの流れ



バックグラウンド処理
平滑化
吸収補正
defocus補正
Rp%の最小化



TLWIP SOP3_Max=55.7



各社ODF入力データ作成

ERror評価

各種ODF評価

逆極点図評価

極点図評価

1. 概要

popLAソフトウェアは、Los Alamosで作成されたODFでHarmonicとWIMV法がサポートされている。DOSベースで作成されている。

(WIMVは開発者の名前で、Williams method, Imhof methodをMatthiesとVinelが結合)

Rigaku ASCデータ形式を入力、

Bruker社 (Uxd), PANalytical (TXT, rdm1) 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 (2012/10/01) 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

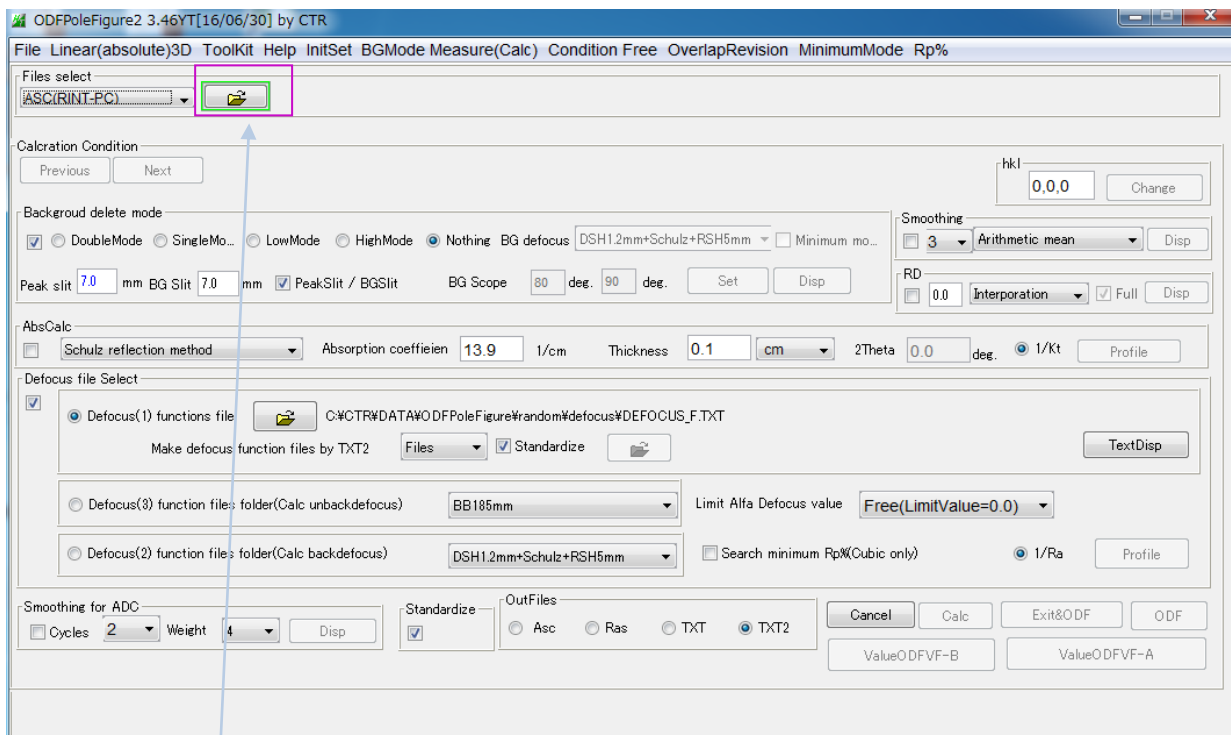
測定試料 A1材

3. 極点図データ補正

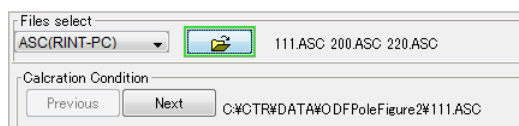
3.1 ODFPoleFigure2 ソフトウェア

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

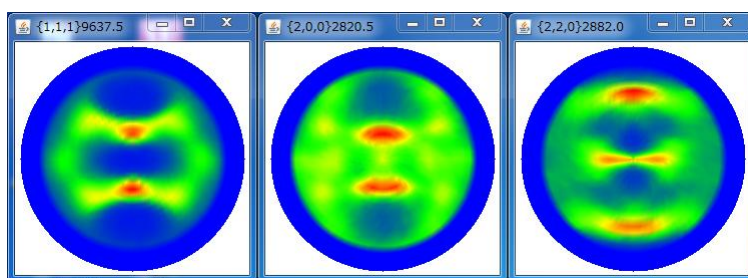
ODFPoleFigure2 ソフトウェアを起動



3.2 測定データの選択



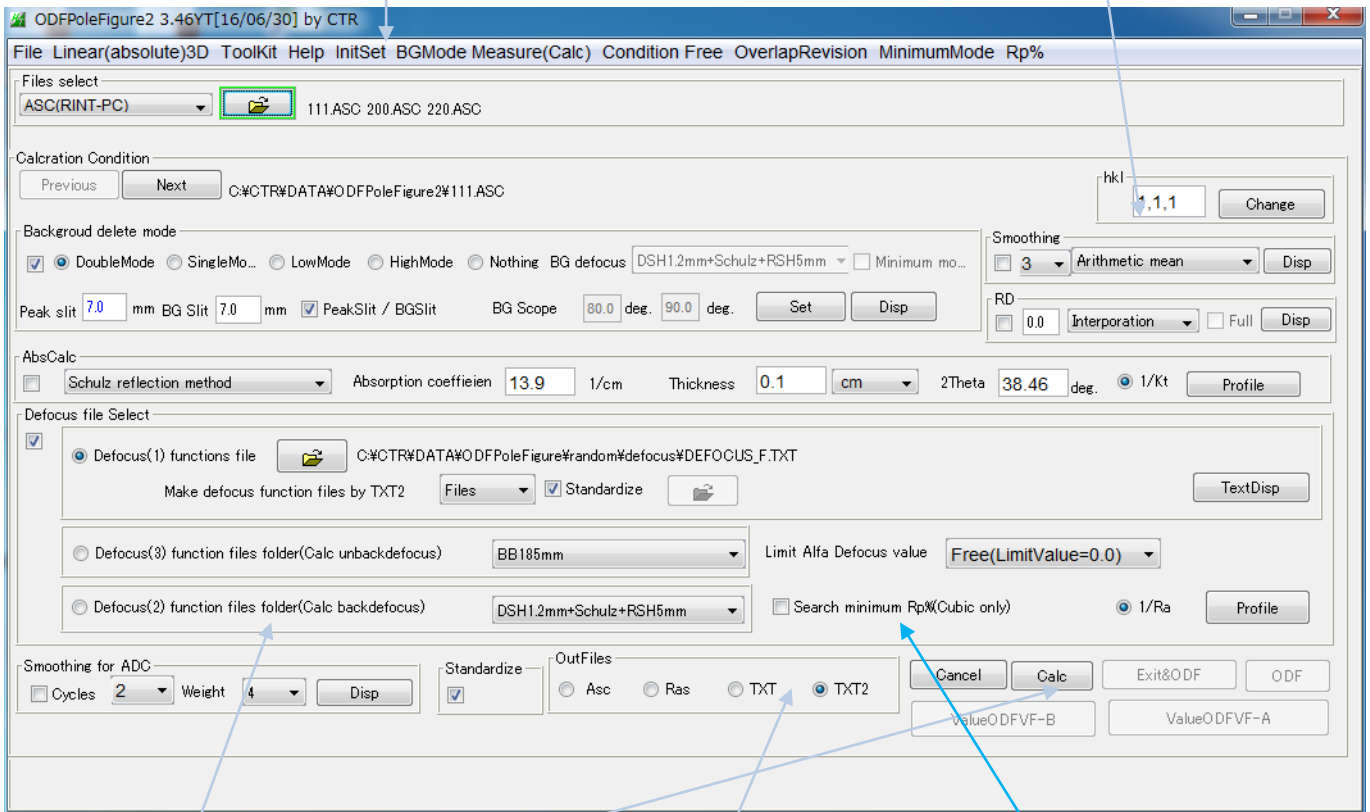
選択したファイルと極点図が表示される。



3. 3 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。

平滑化は α 方向、 β 方向、5点データ Savitzky-Golay 法

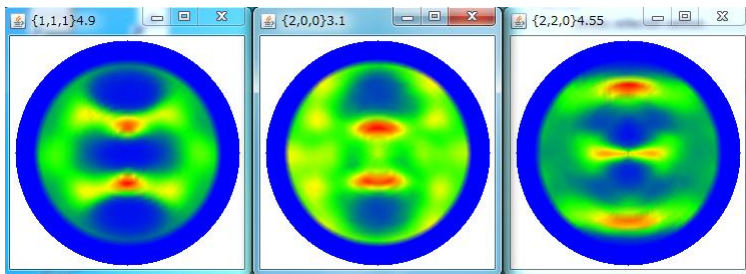


defocusはデータベースから計算

処理結果はTXT2データ

最適化Rp%

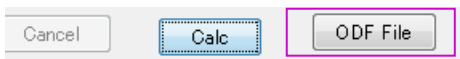
3. 4 一括正極点図データ処理を行う。



処理された極点図が表示され、

最適化Rp%で、極点図の最適化が行われます。

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!!

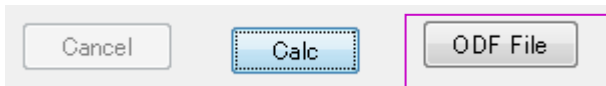


ODF Fileがアクティブとなる。

テキストデータも作成されている。

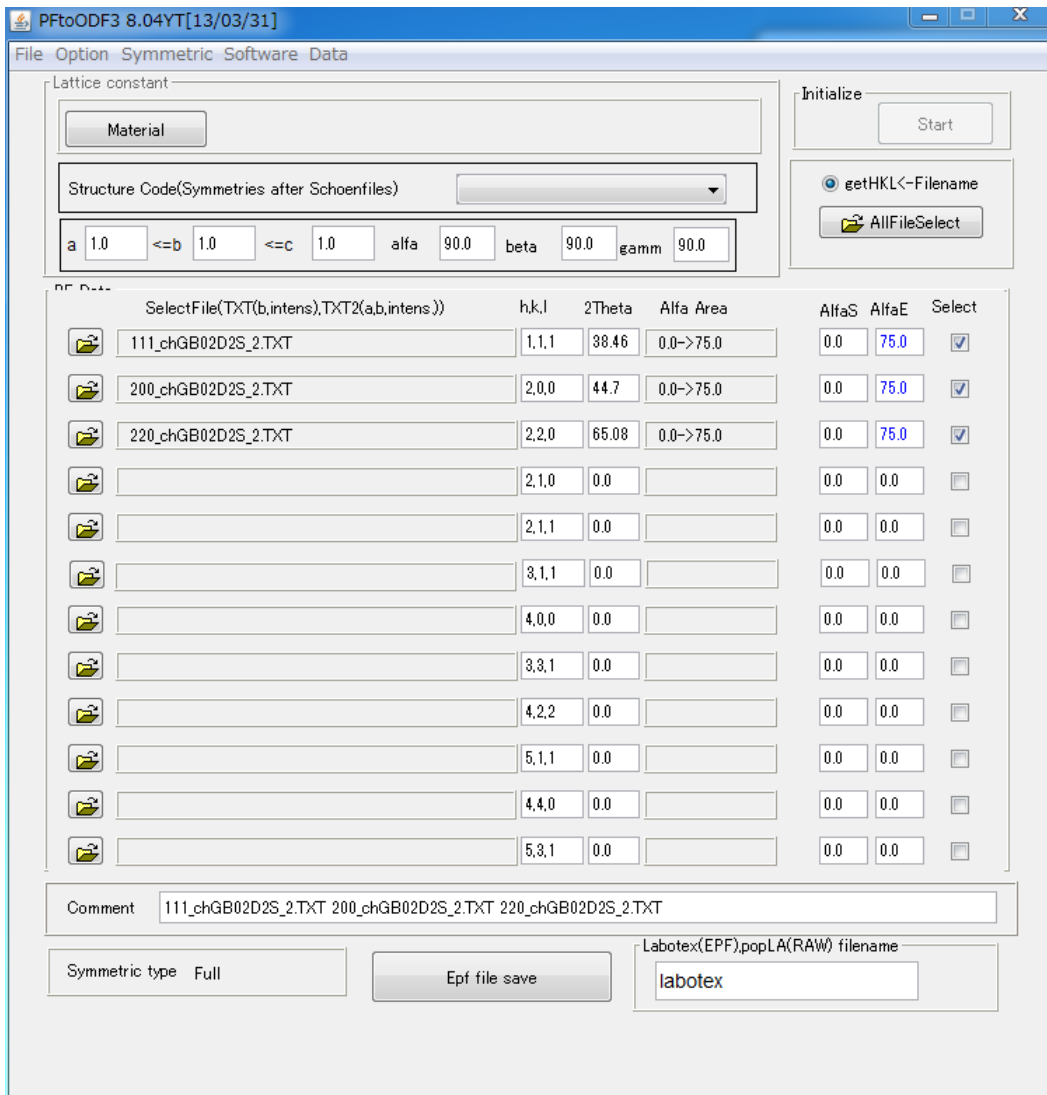
111_chGB02D2S_2	2012/09/23 9:14	テキスト文書	22 KB
200_chGB02D2S_2	2012/09/23 9:14	テキスト文書	22 KB
220_chGB02D2S_2	2012/09/23 9:14	テキスト文書	22 KB
111.ASC	2012/07/25 10:15	ASC ファイル	22 KB
200.ASC	2012/07/25 10:15	ASC ファイル	22 KB
220.ASC	2012/07/25 10:15	ASC ファイル	22 KB

4. popLA用入力データの作成

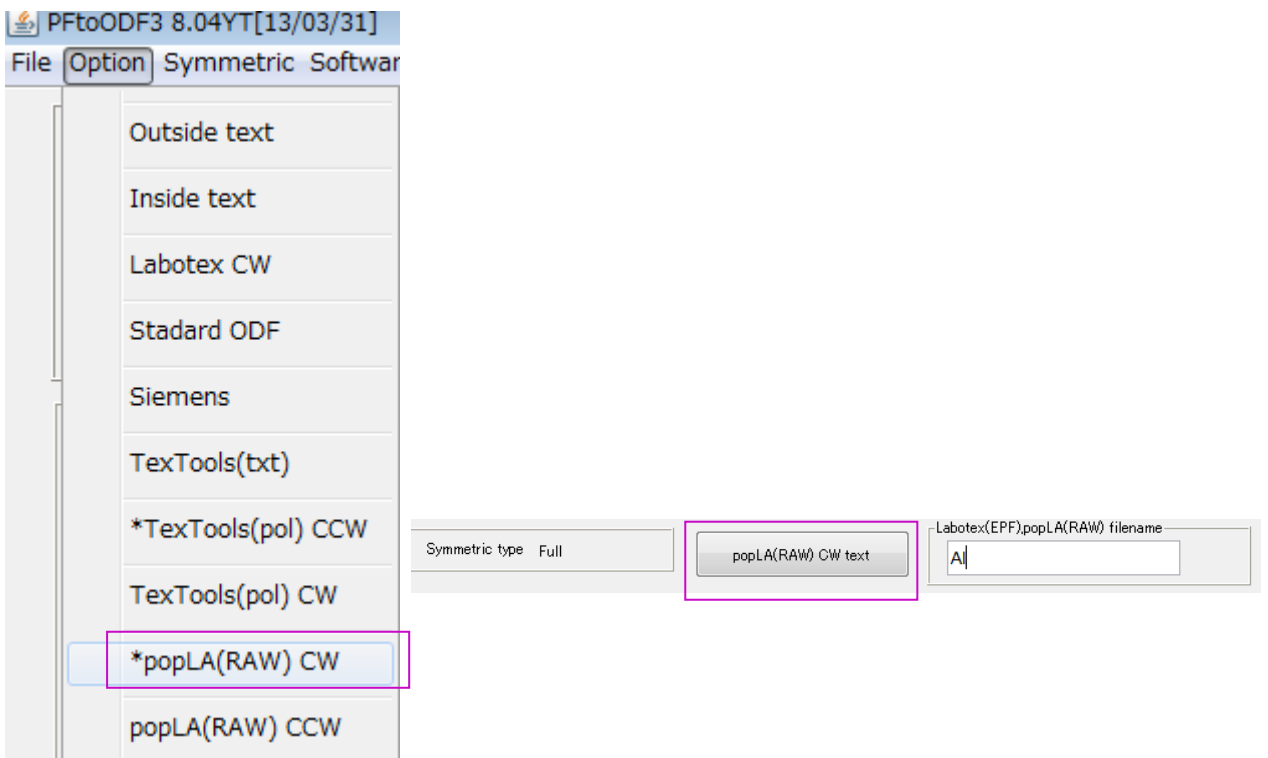


ODF Fileを押す。

4. 1 P F t o O D F 3 プログラムに T X T 2 データが引き継がれる。



メニュー Option から Standard ODF を選択



popLA(RAW)CWtext に変化する。File から ConditionSave を行えばこの作業は不要

popLA(RAW)CWTEXT を押す。

処理を行ったディレクトリに popLA ディレクトリが作られる。

111_chGB02D2S_2	2012/09/23 9:47	テキスト ドキュ...	22 KB
200_chGB02D2S_2	2012/09/23 9:47	テキスト ドキュ...	22 KB
220_chGB02D2S_2	2012/09/23 9:47	テキスト ドキュ...	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
311.ASC	2012/07/25 10:15	ASC ファイル	22 KB
popLA	2012/09/23 22:17	ファイル フォル...	
StandardODF	2012/09/23 22:07	ファイル フォル...	

popLAF ディレクトリに作成されるデータ

名前	更新日時	種類	サイズ
AI.DFB	2012/09/23 22:17	DFB ファイル	1 KB
AI.RAW	2012/09/23 22:17	RAW ファイル	18 KB

以上で popLA 向けデータ作成が完了

5. popLA による解析

まず、AI.RAW と AI.DFB を C:¥X にコピーする。

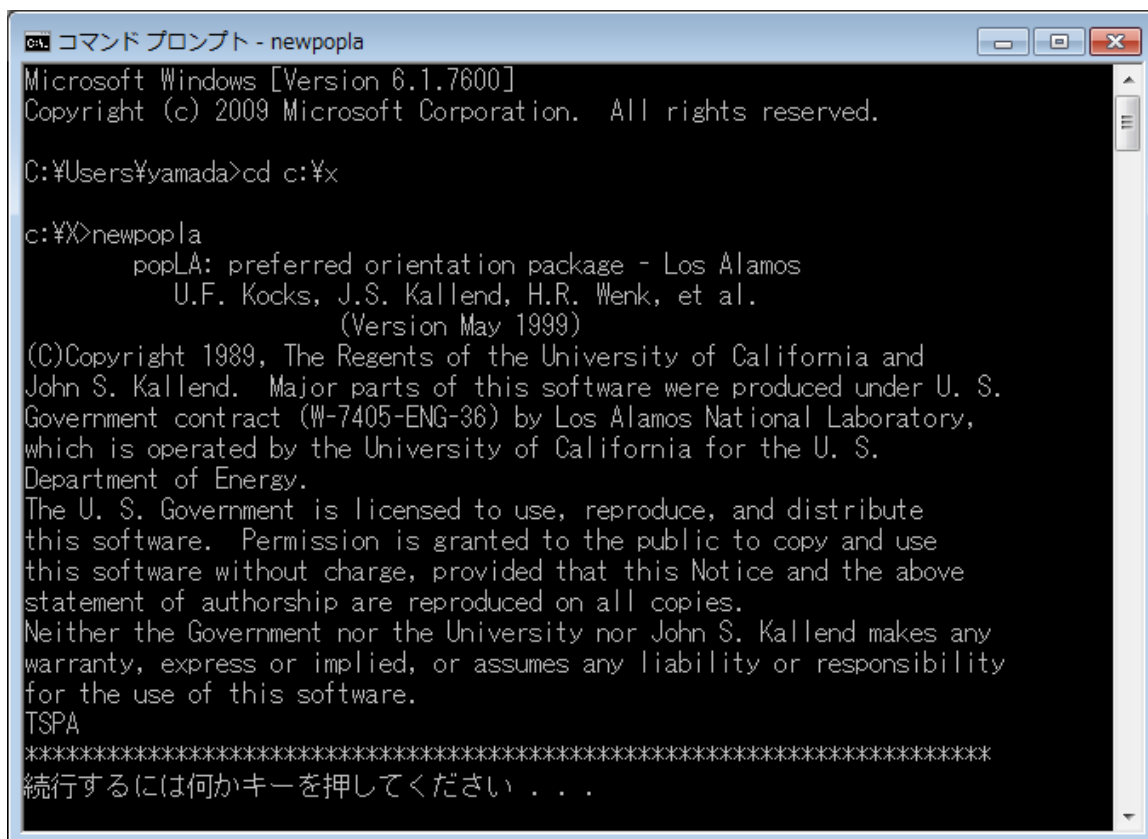
Dos の立ち上げ popLA プログラムの c:¥X にディレクトリを変更

```
Microsoft Windows [Version 6.1.7600]
Copyright (c) 2009 Microsoft Corporation. All rights reserved.

C:¥Users¥yamada>cd c:¥x

c:¥X>
```

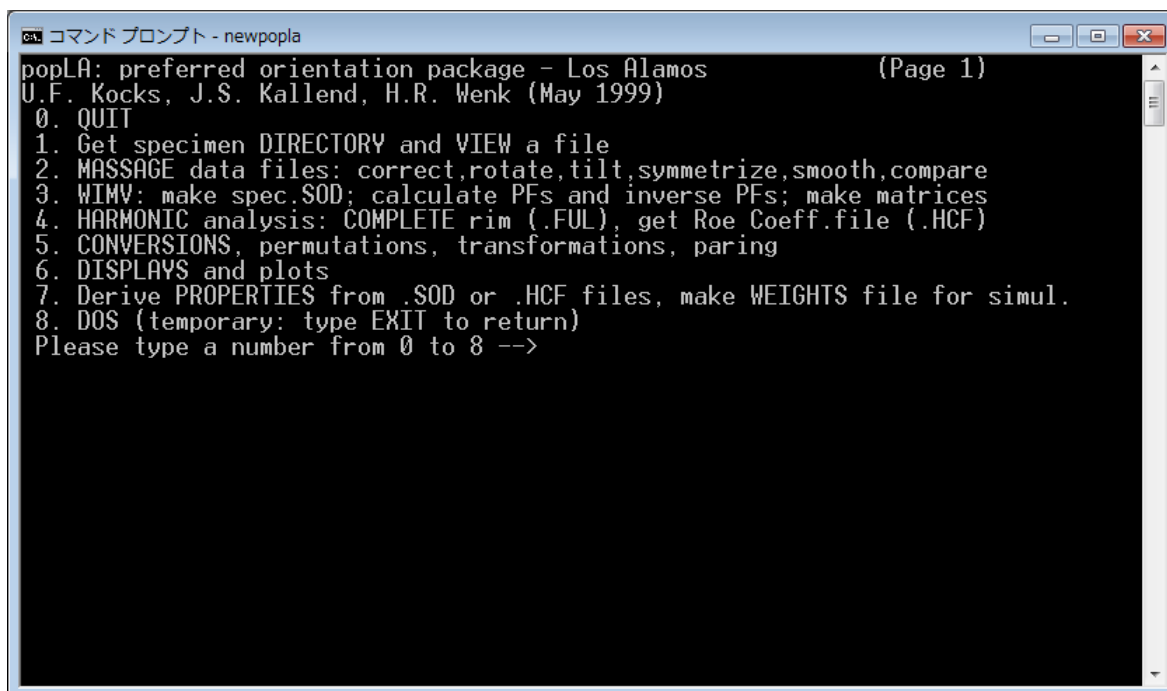
5. 1 popLA プログラムの立ち上げ



```
ca. コマンド プロンプト - newpopla
Microsoft Windows [Version 6.1.7600]
Copyright (c) 2009 Microsoft Corporation. All rights reserved.

C:\Users\yamada>cd c:\%x

c:\%X>newpopla
  popLA: preferred orientation package - Los Alamos
        U.F. Kocks, J.S. Kallend, H.R. Wenk, et al.
        (Version May 1999)
(C)Copyright 1989, The Regents of the University of California and
John S. Kallend. Major parts of this software were produced under U. S.
Government contract (W-7405-ENG-36) by Los Alamos National Laboratory,
which is operated by the University of California for the U. S.
Department of Energy.
The U. S. Government is licensed to use, reproduce, and distribute
this software. Permission is granted to the public to copy and use
this software without charge, provided that this Notice and the above
statement of authorship are reproduced on all copies.
Neither the Government nor the University nor John S. Kallend makes any
warranty, express or implied, or assumes any liability or responsibility
for the use of this software.
TSPA
*****
続行するには何かキーを押してください . . .
```



```
ca. コマンド プロンプト - newpopla
popLA: preferred orientation package - Los Alamos          (Page 1)
U.F. Kocks, J.S. Kallend, H.R. Wenk (May 1999)
0. QUIT
1. Get specimen DIRECTORY and VIEW a file
2. MESSAGE data files: correct, rotate, tilt, symmetrize, smooth, compare
3. WIMV: make spec.SOD; calculate PFs and inverse PFs; make matrices
4. HARMONIC analysis: COMPLETE rim (.FUL), get Roe Coeff.file (.HCF)
5. CONVERSIONS, permutations, transformations, paring
6. DISPLAYS and plots
7. Derive PROPERTIES from .SOD or .HCF files, make WEIGHTS file for simul.
8. DOS (temporary: type EXIT to return)
Please type a number from 0 to 8 -->
```

作業としては、

- ①RAWファイルからEPFファイルを作成
- ②WIMV法
- ③再計算極点図

5. 2 RAWファイルからEPFファイルを作成

2.) を選択


```
コマンド プロンプト - newpopla
MESSAGE DATA FILES (mostly PFs) (popLA page 2)
0. Quit
1. Return to Page 1
2. "Make THEORETICAL defocussing & background file: .DFB (R. Bolmaro)"
3. DIGEST Raw Data (.RAW), with exper.or theor. .DFB: make .EPF
4. ROTATE PFs or adjust for grid offsets: make .RPF or .JWC
5. TILT PFs around right axis: make .TPF (T. Ozturk) [TO BE REPLACED]
6. SYMMETRIZE PFs: make .QPF or .SPF or .FPF
7. " EXPAND PFs back to full circle (needed for WIMV & harm.): .FPF"
8. SMOOTH PFs or ODs with Gaussian Filter (quad, semi, or full): make .MPF
9. Take DIFFERENCE between 2 files (PFs or ODs): make .DIF
Please type a number from 0 to 9 ==>
```

3.) を選択

```
2012/09/23 22:17 17,445 A1.RAW
2009/10/28 03:48 17,674 DEMO.RAW
```

```
Note: the sample is assumed to have rotated counter-clockwise
Data will be sequenced clockwise in .EPF
Enter name of raw data file (ext .RAW assumed)
```

Al.raw と Al.DFB ファイルを指定

```
Enter name of raw data file (ext .RAW assumed) AL
Enter name of correction file (ext .DFB assumed)A1
```

EPF ファイルが作成される。

```
コマンド プロンプト - newpopla
A1 111_chGB02D2S_2.TXT 200_chGB02D2S_2.TX
(hkl)=(200) Background= 1 Using correction curve 2
...correcting raw data
...extrapolating outer ring

DATA FAKED beyond .0 degrees
...normalizing. ring(j),ibgx(j)= 0.000000E+00 0
Normalization factor= .668
...writing corrected data to AL .EPF

A1 111_chGB02D2S_2.TXT 200_chGB02D2S_2.TX
(hkl)=(220) Background= 1 Using correction curve 3
...correcting raw data
...extrapolating outer ring

DATA FAKED beyond .0 degrees
...normalizing. ring(j),ibgx(j)= 0.000000E+00 0
Normalization factor= .440
...writing corrected data to AL .EPF
Stop - Program terminated.

続行するには何かキーを押してください . . .
```

Return を押して続行

```

MESSAGE DATA FILES (mostly PFs) (popLA page 2)
0. Quit
1. Return to Page 1
2. "Make THEORETICAL defocussing & background file: .DFB (R. Bolmaro)"
3. DIGEST Raw Data (.RAW), with exper.or theor. .DFB: make .EPF
4. ROTATE PFs or adjust for grid offsets: make .RPF or .JWC
5. TILT PFs around right axis: make .TPF (T. Ozturk) [TO BE REPLACED]
6. SYMMETRIZE PFs: make .QPF or .SPF or .FPF
7. " EXPAND PFs back to full circle (needed for WIMV & harm.): .FPF"
8. SMOOTH PFs or ODs with Gaussian Filter (quad, semi, or full): make .MPF
9. Take DIFFERENCE between 2 files (PFs or ODs): make .DIF
Please type a number from 0 to 9 ==>

```

Page1に戻る。

```

popLA: preferred orientation package - Los Alamos (Page 1)
U.F. Kocks, J.S. Kallend, H.R. Wenk (May 1999)
0. QUIT
1. Get specimen DIRECTORY and VIEW a file
2. MESSAGE data files: correct,rotate,tilt,symmetrize,smooth,compare
3. WIMV: make spec.SOD; calculate PFs and inverse PFs; make matrices
4. HARMONIC analysis: COMPLETE rim (.FUL), get Roe Coeff.file (.HCF)
5. CONVERSIONS, permutations, transformations, paring
6. DISPLAYS and plots
7. Derive PROPERTIES from .SOD or .HCF files, make WEIGHTS file for simul.
8. DOS (temporary: type EXIT to return)
Please type a number from 0 to 8 -->

```

5.3 WINVを使う

```

WIMV Analysis (popLA page 3)
0. Quit
1. Return to Page 1
WIMV: make .SOD and recal. pole figures .WPF -- for:
2. cubic, tetra-,hexagonal crystals; sample diad: up to 3 PFs, 13 poles
3. trigonal cry.,gen'l.sample sym.,or higher: up to 7 PFs, 25 poles
4. orthorhombic crystals; gen'l.sample sym.: up to 7 PFs, 25 poles
Recalculate POLE FIGURES (even non-measured ones): make .APF -
5. using .WIM matrix for the desired PFs (up to 3, 13 poles)
6. using .BWM or .WM3 matrix for the desired PFs (up to 7, 25 poles)
7. Calculate INVERSE pole figures from .SOD: .WIP
   (So far assumes tetragonal crystal symmetry)
8. Make WIMV pointer matrix for new crystal structure and set of PFs
9. Make WIMV pointer matrix for any INVERSE pole figures: make .WMI
Please type a number from 0 to 9 -->

```

2.) で結晶系の指定2

```

2009/09/25 13:39 6,448 BCC2.WIM
2009/09/25 13:39 4,892 BERYL.WIM
2009/09/25 13:39 8,458 C112.WIM
2009/09/25 13:39 9,300 CUBIC.WIM
2009/09/25 13:39 4,892 TITAN.WIM
2009/09/25 13:40 4,890 ZIRCON.WIM

```

```

ODF ANALYSIS - WIMV ALGORITHM
COPYRIGHT (C) 1987,1988 JOHN S. KALLEND

*** Version September 1993 ***

Enter the name of the wimv matrix (?.WIM)
[Default is CUBIC] ==>

```

CUBICが default なので単に return

```
Enter the name of the wimv matrix (?WIM)
[Default is CUBIC] ==>
Name of data file (default extension .epf): A1
```

A1を指定する。

```
Sample Symmetry is:
0. Orthorhombic
1. Diad on Z
Enter 0 or 1 ==> 0
```

対称性は 1/4 として 0 を指定

```
A1 111_chGB02D2S_2.TXT 20
111 5.0 75.0 5.0360.0 1 1 2-1 3 100 0
200 5.0 75.0 5.0360.0 1 1 2-1 3 100 0
220 5.0 75.0 5.0360.0 1 1 2-1 3 100 0
The minimum pole figure intensity is .05
Do you wish to raise the Fon? N
```

Return で

```
Iteration 2 in progress
Sharpening may cause larger error in iteration 3
Texture Strength (m.r.d.): 1.5
(= square-root of "Texture Index")
Iteration 2 estimated OD error (%) = 33.1
Iteration 3 in progress
Texture Strength (m.r.d.): 1.6
Iteration 3 estimated OD error (%) = 18.9
Iteration 4 in progress
Texture Strength (m.r.d.): 1.6
Iteration 4 estimated OD error (%) = 12.1
Iteration 5 in progress
Texture Strength (m.r.d.): 1.6
Iteration 5 estimated OD error (%) = 9.2
Iteration 6 in progress
Texture Strength (m.r.d.): 1.7
Iteration 6 estimated OD error (%) = 7.2
Continue? Y
```

Error が小さくなるまで、return する。

```
Continue? Y
Iteration 62 in progress
Texture Strength (m.r.d.): 1.8
Iteration 62 estimated OD error (%) = .3
Continue? Y
```

n で終了する。

```
Continue? n
Normalization factor: 1.11
In output file, angles increase from 0 in nomenclature of
1. Kocks (need this one for WEIGHTS)
2. Roe/Matthies
3. Bunge (rotates plot +90 deg.)
Enter 1,2, or 3 ==> 3
```

B u n g e を得る。

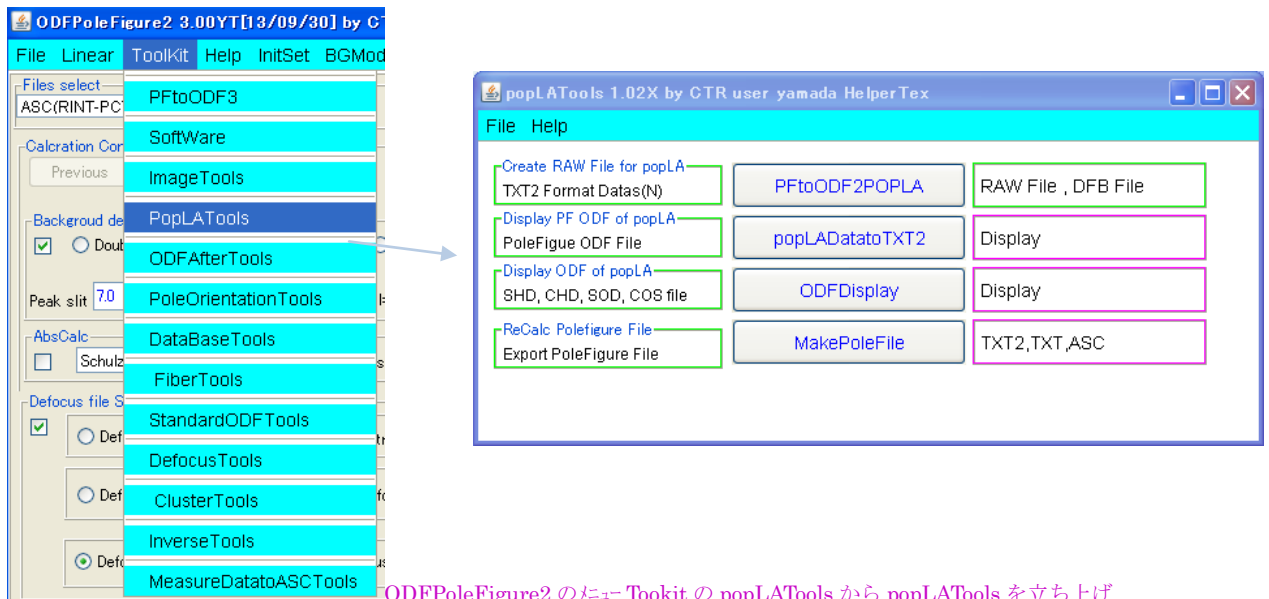
```

Enter 1,2, or 3 ==> 3
Making file Al      .SOD
Recalculated PF file name: Al      .WPF
続行するには何かキーを押してください . . .

```

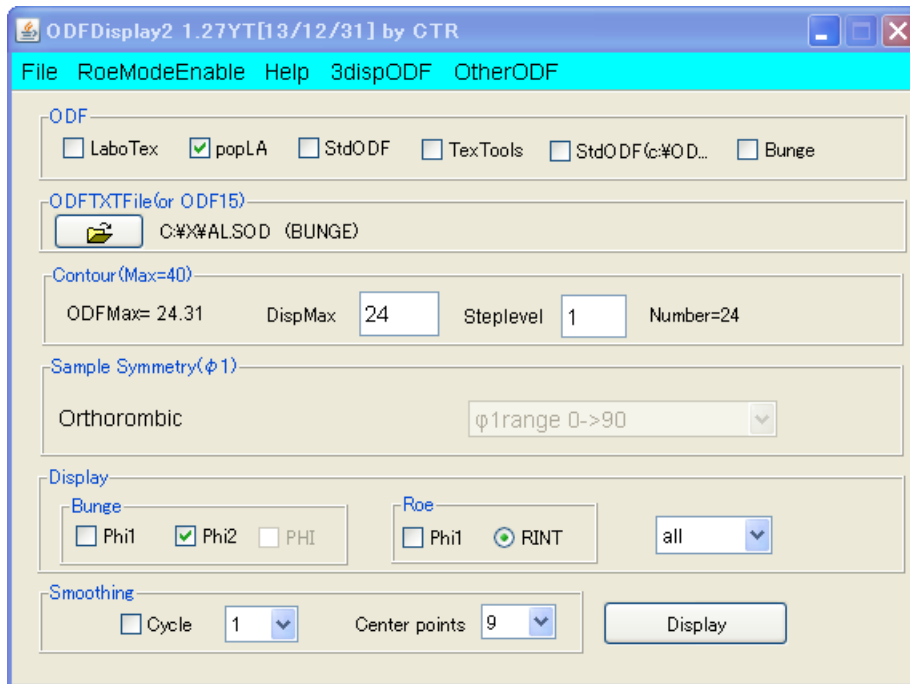
計算終了

5. 4 WINVのODF図、再計算極点図表示



ODFPoleFigure2のメニュー Toolkit の popLATools から popLATools を立ち上げ

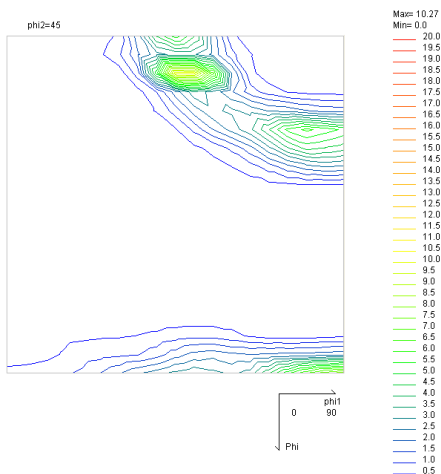
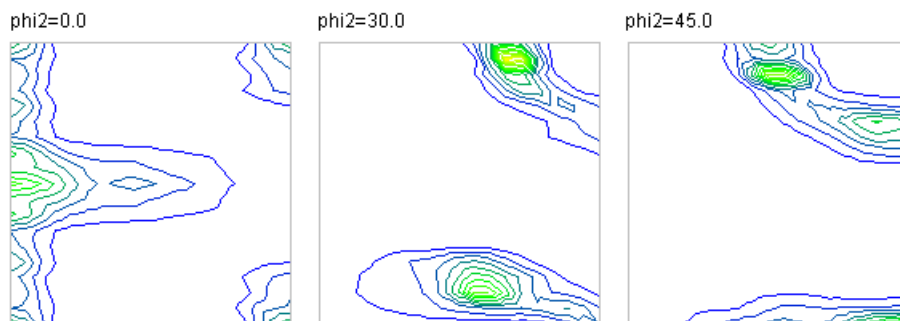
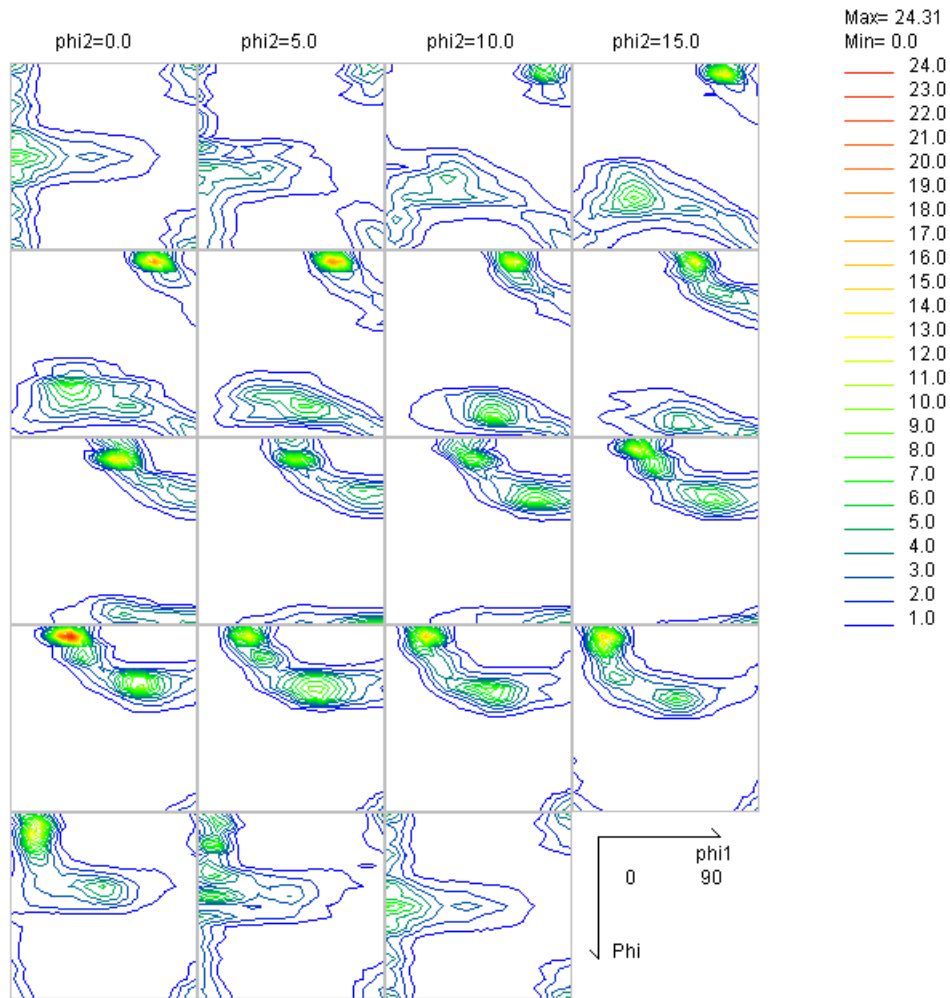
ODFDisplayでODF図を描画



popLADatatoTXT2で極点図を描画

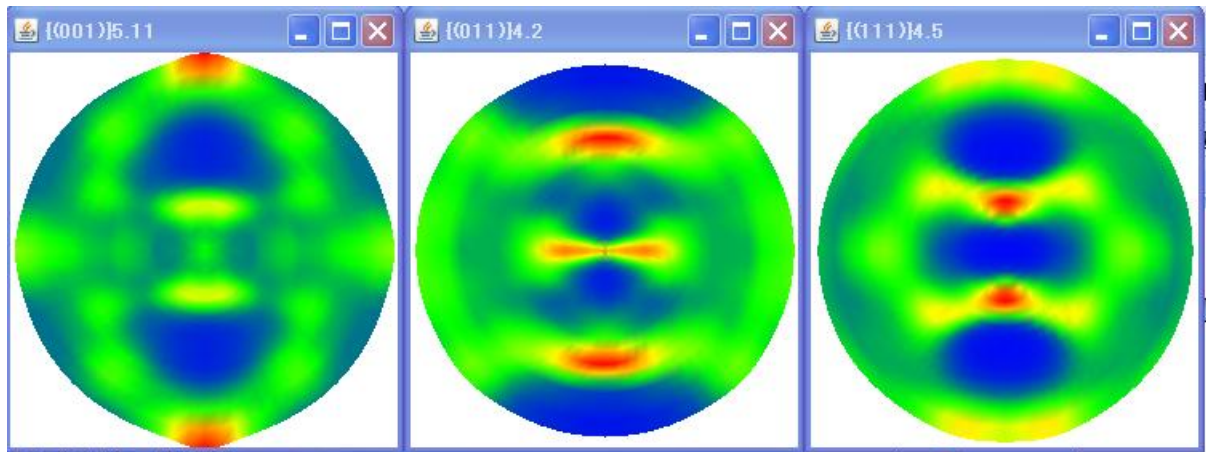
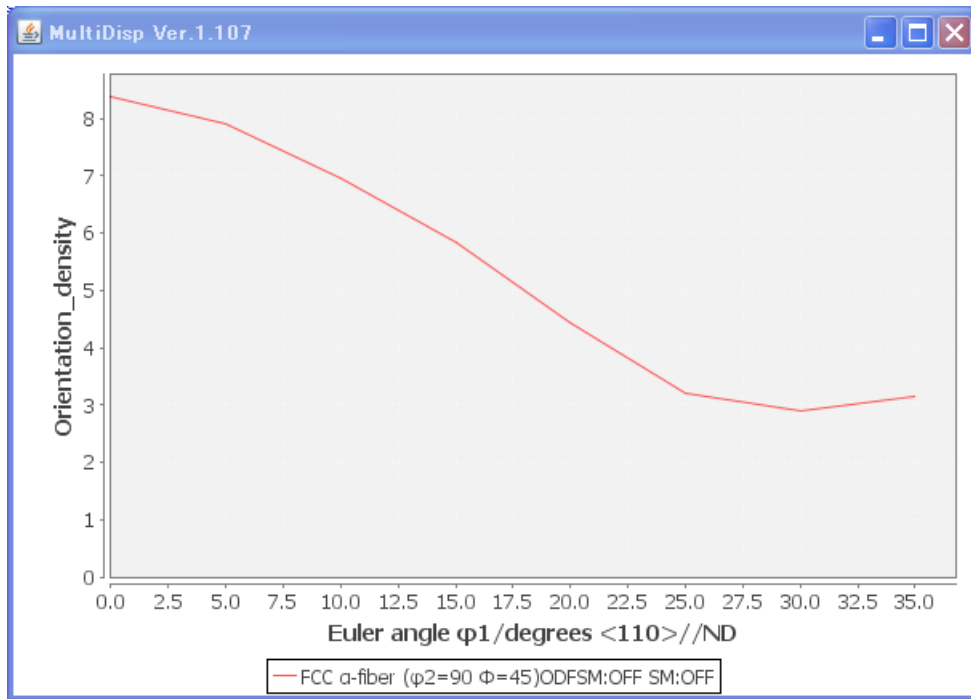


1 / 4 対称 CW 極点図を完全極点図で表現する。



ODFDisplay は多彩な表現が可能

Fiber も可能



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

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 (hk)l[uvw]
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. 5 Harmonic 法

すでにEPFファイル作成はWIMV法を使用時作成されているので省く

```
コマンドプロンプト - newpopla
popLA: preferred orientation package - Los Alamos (Page 1)
U.F. Kocks, J.S. Kallend, H.R. Wenk (May 1999)
0. QUIT
1. Get specimen DIRECTORY and VIEW a file
2. MESSAGE data files: correct,rotate,tilt,symmetrize,smooth,compare
3. WIMV: make spec.SOD; calculate PFs and inverse PFs; make matrices
4. HARMONIC analysis: COMPLETE rim (.FUL); get Roe Coeff.file (.HCF)
5. CONVERSIONS, permutations, transformations, paring
6. DISPLAYS and plots
7. Derive PROPERTIES from .SOD or .HCF files, make WEIGHTS file for simul.
8. DOS (temporary: type EXIT to return)
Please type a number from 0 to 8 -->
```

4.) の Harmonic 法を使用

```
コマンドプロンプト - newpopla
HARMONIC ANALYSIS (popLA page 4)
0. Quit
1. Return to Page 1
Find harmonic coefficients .HCF, completed PFs (.FUL) for:
2. Cubic crystal system
3. Hexagonal, tetragonal or orthorhombic crystal system
4. Compute SOD or COD from harmonic coefficients (slow!)
5. Recalculate pole figures .HPF
6. Inverse pole figures .HIP
7. List harmonic coefficients to screen or printer
Note: To convert Aachen-format Bunge coeffs. to Kallend's binary
      Roe coeff.file .HCF: use AC2W1mn (outside this menu) -
      Also need FAKTOR.CtW (J. Hirsch)
8. Establish coefficients for a given TRANSFORMATION
9. Apply TRANSFORMATION to given coefficients
Please type a number from 0 to 9 -->
```

2.) Cubic を指定

```
コマンドプロンプト - newpopla
Harmonic Pole Figure Analysis (Cubic)
Program (C) 1968-1987 by John Kallend.
All rights reserved
Enter name of data file (default .epf): Al
```

Al.epf を指定

```
Harmonic Pole Figure Analysis (Cubic)
Program (C) 1968-1987 by John Kallend.
All rights reserved
Enter name of data file (default .epf): Al
1Al 111_chGB02D2S_2.TXT 20
3 Pole figures read in.
How many iterations on missing parts? 4
```

そのまま


```
ca: コマンド プロンプト - newpopla
CUBIC ODF ANALYSIS FOR Al 24-SEP-***

Sample symmetry:
0. Orthorhombic
1. Mirror perpendicular to Z

Enter 0 or 1==> 0
```

1/4 対称で

```
Error output to:
1. printer
2. screen

Enter 1 or 2 ==> 2
```

```
ca: コマンド プロンプト - newpopla
200 Reflection. Trunc. error = .14 Normalization = .10E+01
220 Reflection. Trunc. error = .20 Normalization = .10E+01
Severity = 1.319. Generated to l = 22

ERROR ESTIMATES: 1. Polefigures
L      MEAN      111      200      220
0      .228E-06    .225E-06    .225E-06    .233E-06
2      .684E-03    .509E-03    .581E-03    .897E-03
4      .517E-03    .334E-03    .786E-03    .267E-03
6      .860E-03    .109E-02    .399E-03    .934E-03
8      .684E-03    .435E-03    .622E-03    .909E-03
10     .715E-03    .930E-03    .588E-03    .567E-03
12     .391E-03    .546E-03    .114E-03    .384E-03
14     .721E-03    .488E-03    .102E-02    .533E-03
16     .168E-03    .346E-04    .129E-03    .259E-03
18     .171E-03    .246E-03    .958E-04    .133E-03
20     .168E-03    .163E-03    .104E-03    .217E-03
22     .179E-03    .156E-04    .139E-03    .277E-03
ALL    .486E-01    .487E-01    .481E-01    .489E-01

2. Estimated avg. error in ODF .16
RE-ESTIMATING MISSING PARTS OF POLEFIGURES

Writing harmonic coefficients to Al .HCF
Print out Wlmn coefficients ? Y
```

展開係数Cが作成され

```

C:\ コマンドプロンプト - newpopla
20 14 20 .241E-04 20 16 0 -.157E-04 20 16 4 -.304E-04 20 16 8 .208E-06
20 16 12 .124E-04 20 16 16 .157E-04 20 16 20 -.198E-04 20 18 0 .165E-04
20 18 4 -.113E-04 20 18 8 .716E-05 20 18 12 .149E-04 20 18 16 .179E-04
20 18 20 .175E-05 20 20 0 .336E-04 20 20 4 .243E-04 20 20 8 .651E-05
20 20 12 -.201E-06 20 20 16 -.120E-05 20 20 20 .244E-04 22 0 0 -.631E-04
22 0 4 -.618E-05 22 0 8 .153E-03 22 0 12 .774E-05 22 0 16 -.740E-04
22 0 20 .100E-03 22 2 0 .736E-04 22 2 4 -.222E-04 22 2 8 -.866E-04
22 2 12 -.297E-04 22 2 16 .490E-06 22 2 20 -.761E-04 22 4 0 -.316E-04
22 4 4 .680E-05 22 4 8 .458E-04 22 4 12 .108E-04 22 4 16 -.822E-05
22 4 20 .365E-04 22 6 0 .881E-04 22 6 4 -.291E-04 22 6 8 -.956E-04
22 6 12 -.374E-04 22 6 16 -.691E-05 22 6 20 -.875E-04 22 8 0 -.740E-04
22 8 4 .820E-04 22 8 8 -.992E-04 22 8 12 .719E-04 22 8 16 .174E-03
22 8 20 -.581E-05 22 10 0 .622E-04 22 10 4 -.574E-04 22 10 8 .475E-04
22 10 12 -.523E-04 22 10 16 -.113E-03 22 10 20 -.110E-04 22 12 0 -.565E-04
22 12 4 .429E-04 22 12 8 -.142E-04 22 12 12 .410E-04 22 12 16 .751E-04
22 12 20 .228E-04 22 14 0 .239E-04 22 14 4 -.200E-04 22 14 8 .116E-04
22 14 12 -.186E-04 22 14 16 -.370E-04 22 14 20 -.717E-05 22 16 0 -.251E-04
22 16 4 .490E-05 22 16 8 .379E-04 22 16 12 .825E-05 22 16 16 -.797E-05
22 16 20 .296E-04 22 18 0 .193E-04 22 18 4 .589E-05 22 18 8 -.592E-04
22 18 12 .451E-06 22 18 16 .343E-04 22 18 20 -.361E-04 22 20 0 -.529E-05
22 20 4 .619E-07 22 20 8 .110E-04 22 20 12 .106E-05 22 20 16 -.451E-05
22 20 20 .758E-05 22 22 0 -.129E-05 22 22 4 .202E-06 22 22 8 .210E-05
22 22 12 .389E-06 22 22 16 -.554E-06 22 22 20 .159E-05
Writing full pole figures to Al .FUL
続行するには何かキーを押してください . . .

```

入力極点図の再計算極点図が作成される。

```

C:\ コマンドプロンプト - newpopla
HARMONIC ANALYSIS (popLA page 4)
0. Quit
1. Return to Page 1
Find harmonic coefficients .HCF, completed PFs (.FUL) for:
2. Cubic crystal system
3. Hexagonal, tetragonal or orthorhombic crystal system
4. Compute SOD or COD from harmonic coefficients (slow!)
5. Recalculate pole figures .HPF
6. Inverse pole figures .HIP
7. List harmonic coefficients to screen or printer
Note: To convert Aachen-format Bunge coeffs. to Kallend's binary
Roe coeff.file .HCF: use AC2Wlmn (outside this menu) -
Also need FAKTOR.CtW (J. Hirsch)
8. Establish coefficients for a given TRANSFORMATION
9. Apply TRANSFORMATION to given coefficients

Please type a number from 0 to 9 -->

```

4.) で展開係数から ODF 図を作成

```

2012/09/24 09:05 2,129 AL.HCF
2009/09/25 13:39 2,129 CNULL.HCF
0.222222222222

```

```

Calculate ODF from Harmonic Coefficients
Program by John Kallend (c) 1968 - 1988

What is the specimen name (.HCF Assumed)?

```

AL.HCF を指定

ENTER OUTPUT FORMAT REQUIRED

1. COD sections every 10 degrees, ROE angles only
2. SOD or COD every 5 degrees
3. COD sections at low index orientations (ROE, 8 SECTIONS)

==> 2

Average values of Wl_{mn} for different orders of l

l	Avg. Wl _{mn}
2	.00E+00
4	.16E-02
6	.30E-02
8	.67E-03
10	.51E-03
12	.77E-03
14	.24E-03
16	.12E-03
18	.23E-03
20	.64E-04
22	.38E-04

Default = CALCULATE TO L = 22, OK ? Y

CALCULATIONS FINISHED

MAX. VALUE = 6.01 MIN. VALUE = -.85

Choose output format:

1. as SOD (will be called .SHD)
2. as COD (will be called .CHD)

Enter 1 or 2 ==> 1

In output file, angles increase from 0 in nomenclature of

1. Kocks
2. Roe/Matthies
3. Bunge

Enter 1,2, or 3 ==> 3

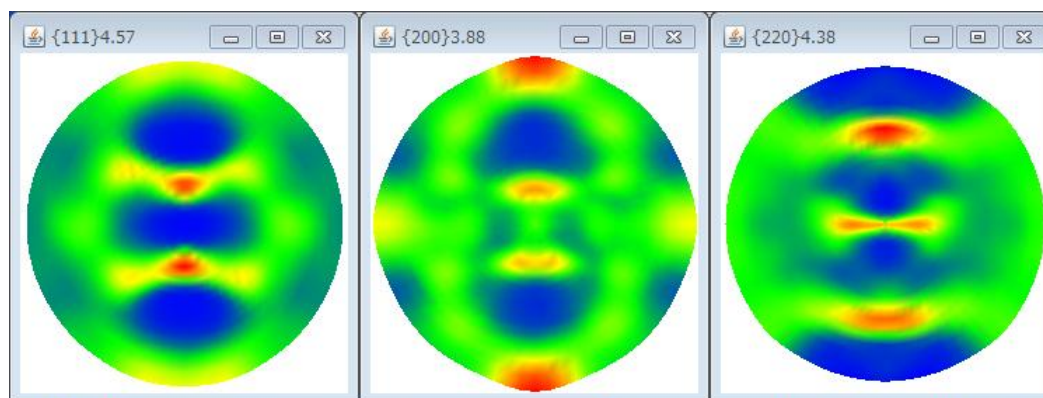
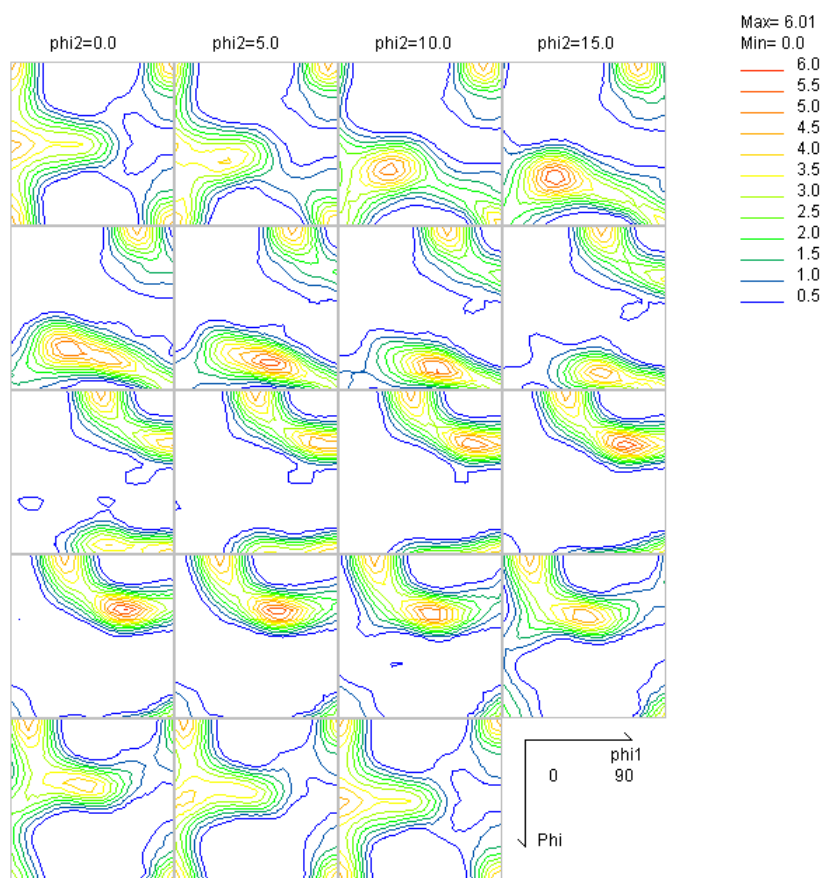
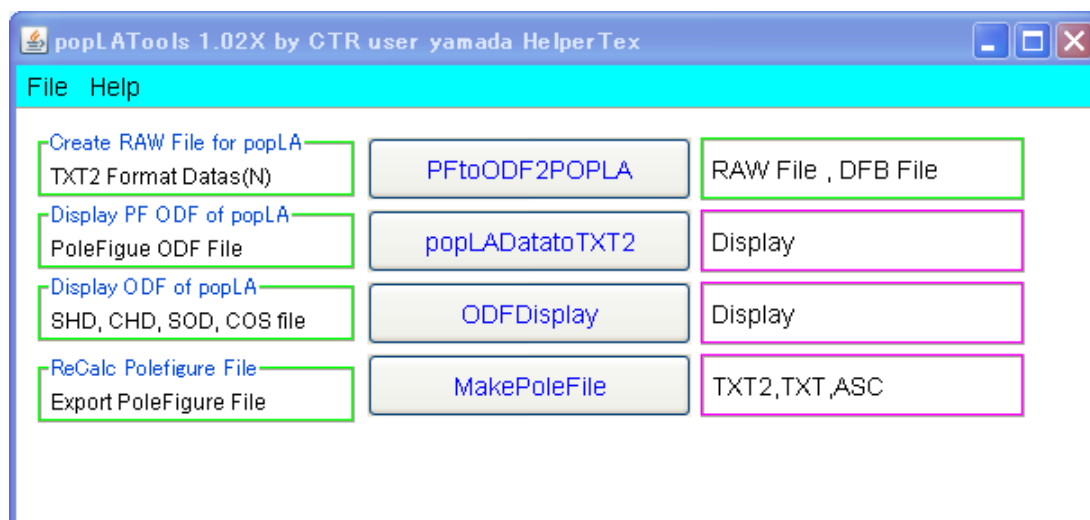
Enter 1,2, or 3 ==> 3

Making file Al .SHD

続行するには何かキーを押してください . . .

ODF は終了

5. 6 Harmonic法のODF図、再計算極点図を表示

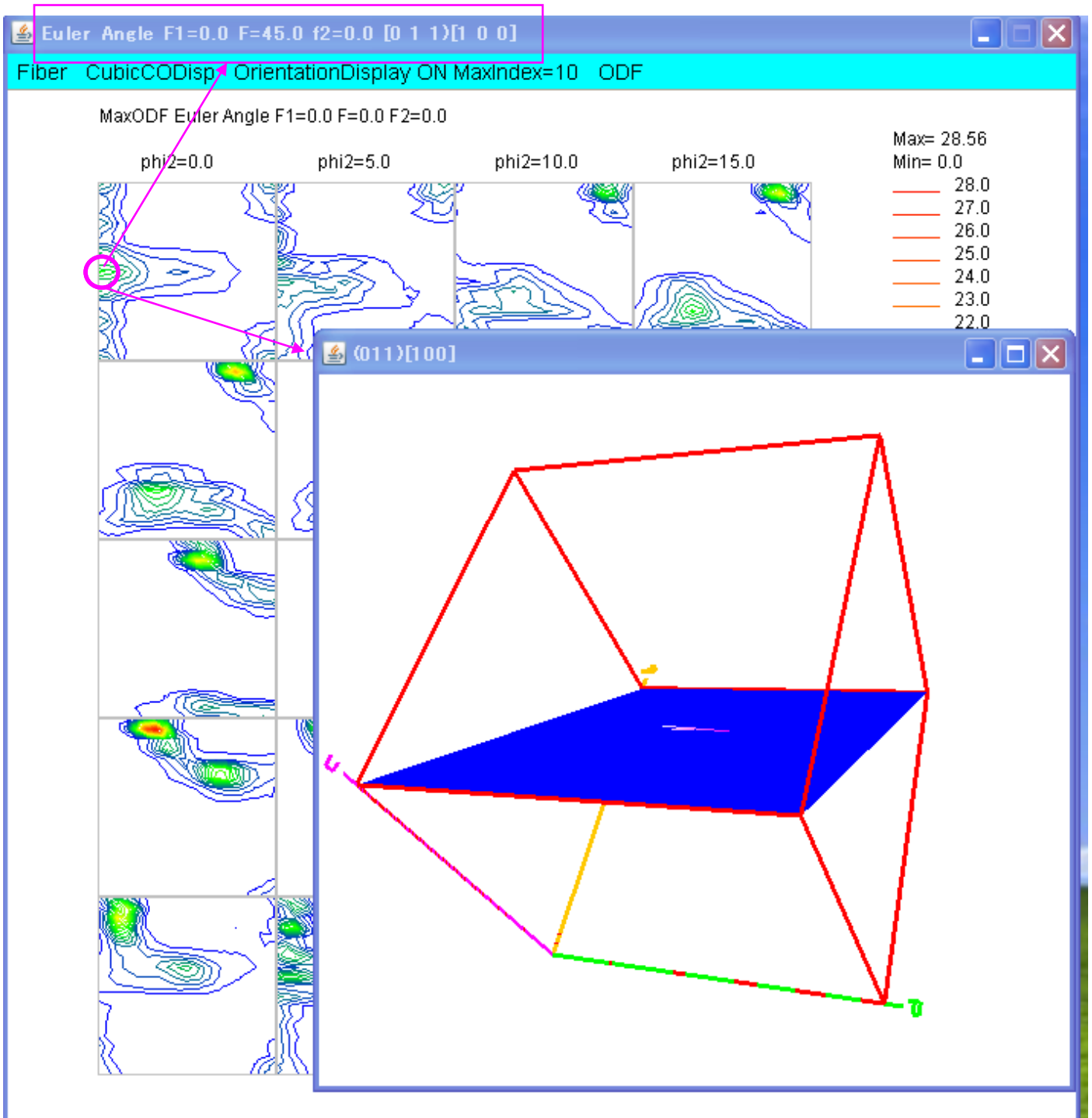


ほかのToolもWIMV同様適用できます。

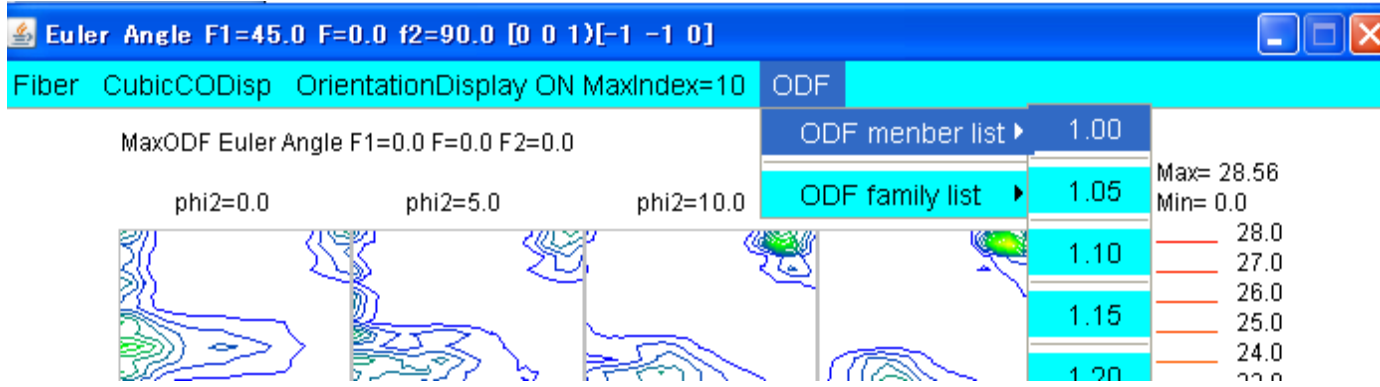
6. 結晶方位の解析

6. 1 マウスキックによる結晶方位図

○ をマウスキックすると、Euler角度と(hkl)[uvw]と結晶方位図を描画



6. 2 結晶方位の自動検出

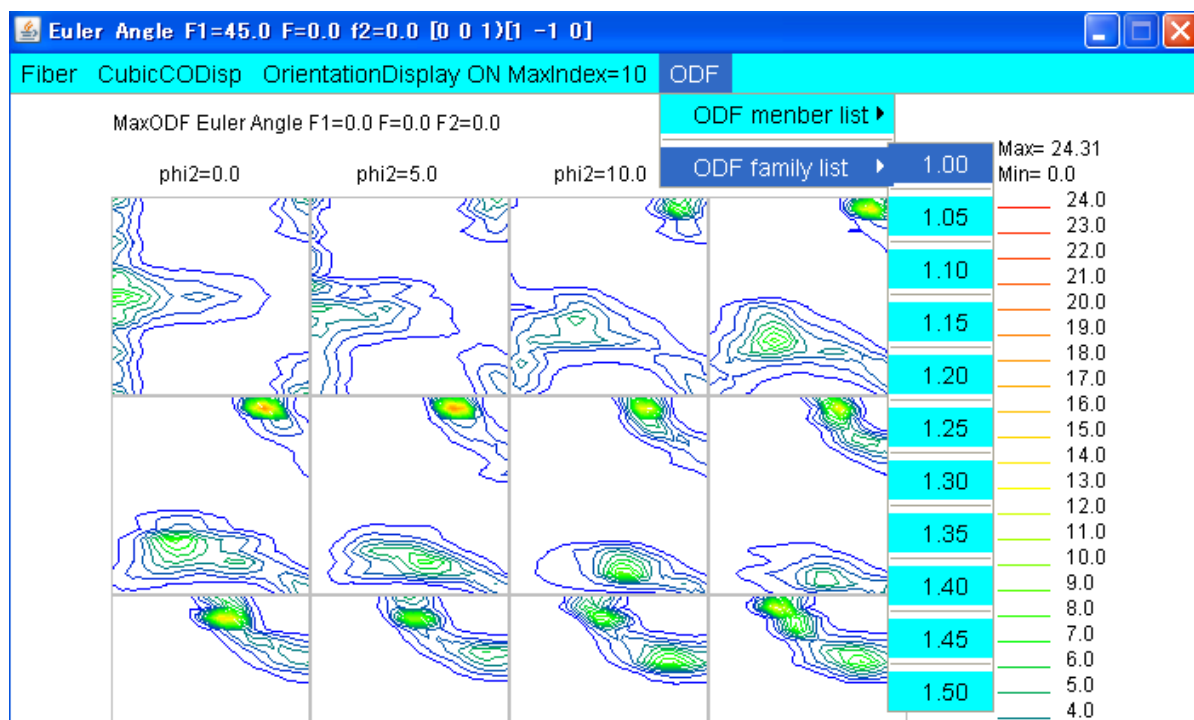


TextDisplay 1.11S C:\CTR\work\ODFDisplay\ODF.txt

File Help

Orientation	ϕ_1	Φ	ϕ_2	ODF
(2 1 3)[-3 -6 4]	58.98	36.7	63.43	8.48
(1 1 0)[0 0 1]	90.0	90.0	45.0	8.29
(0 1 1)[1 0 0]	0.0	45.0	0.0	8.29
(1 0 1)[0 -1 0]	0.0	45.0	90.0	8.29
(0 0 1)[1 0 0]	0.0	0.0	0.0	5.83
(0 1 0)[1 0 0]	0.0	90.0	0.0	5.83
(0 1 0)[0 0 1]	90.0	90.0	0.0	5.83
(0 0 1)[0 -1 0]	90.0	0.0	0.0	5.83
(0 0 1)[0 -1 0]	0.0	0.0	90.0	5.83
(1 0 0)[0 -1 0]	0.0	90.0	90.0	5.83
(1 0 0)[0 0 1]	90.0	90.0	90.0	5.83
(0 0 1)[-1 0 0]	90.0	0.0	90.0	5.83
(0 1 3)[1 0 0]	0.0	18.43	0.0	5.08
(0 3 1)[1 0 0]	0.0	71.57	0.0	5.08
(3 1 0)[0 0 1]	90.0	90.0	71.57	5.08
(1 3 0)[0 0 1]	90.0	90.0	18.43	5.08
(1 0 3)[0 -1 0]	0.0	18.43	90.0	5.08
(3 0 1)[0 -1 0]	0.0	71.57	90.0	5.08
(1 1 0)[1 -1 2]	54.9	90.0	45.0	2.99
(0 1 1)[2 -1 1]	35.26	45.0	0.0	2.99
(1 0 1)[1 -2 1]	35.26	45.0	90.0	2.99
(2 3 1)[3 -4 6]	52.87	74.5	33.69	2.94
(1 3 2)[6 -4 3]	27.03	57.69	18.43	2.78
(1 2 1)[1 -1 1]	39.23	65.91	26.57	2.77
(2 1 3)[1 -4 2]	46.91	36.7	63.43	2.62
(1 1 2)[1 -1 1]	90.0	35.26	45.0	2.43
(1 1 0)[1 -1 1]	35.26	90.0	45.0	2.43
(0 1 1)[1 -1 1]	54.74	45.0	0.0	2.43
(1 0 1)[1 -1 1]	54.74	45.0	90.0	2.43
(2 3 1)[1 -2 4]	64.93	74.5	33.69	2.35
(1 3 2)[4 -2 1]	14.96	57.69	18.43	1.03

6. 3 結晶方位のFamily化List作成



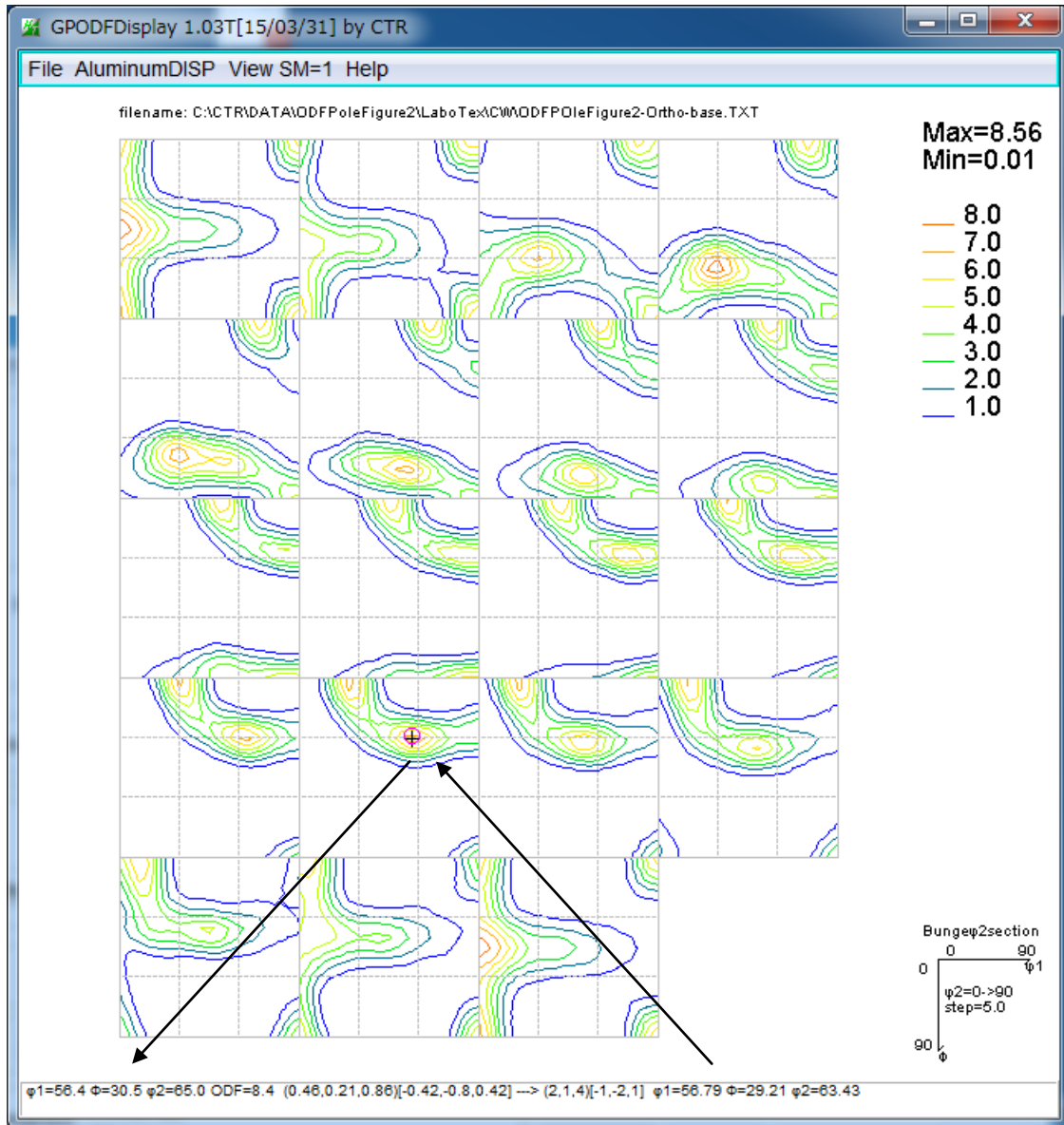
TextDisplay 1.11S C:\%CTR%work\ODFDisplay\ODF.txt

Orientation	φ_1	Φ	φ_2	ODF
{1 1 0}<0 0 1> goss	90.0	90.0	45.0	8.37
{1 3 2}<6 -4 3> S	27.03	57.69	18.43	8.03
{0 0 1}<1 0 0> cube	0.0	0.0	0.0	5.77
{0 1 3}<1 0 0>	0.0	18.43	0.0	4.95
{1 1 0}<-1 -1 2> brass	54.9	90.0	45.0	3.16
{1 1 2}<-1 -1 1> copper	90.0	35.26	45.0	2.7
{2 1 3}<-1 -4 2> R	46.91	36.7	63.43	2.68
{1 1 0}<-1 -1 1> P	35.26	90.0	45.0	2.43

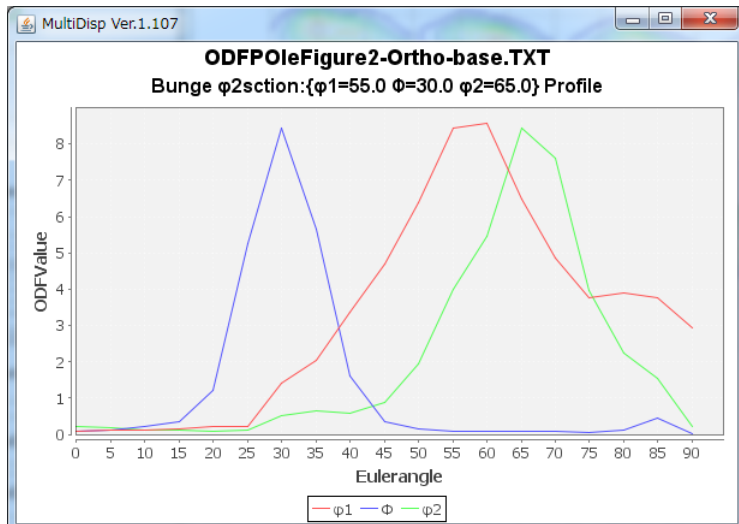
6. 5 GPODFDisplay機能

ODF解析結果の解析はODFDisplay2ソフトウェアがありますが、本ソフトウェアは $\{hkl\} <uvw>$ の決定機能と 3D-Fiber 機能があります。

ODF図上をマウス左クリックで”+”を表示し、結晶方位の整数化で計算された Euler 位置を”O”表示



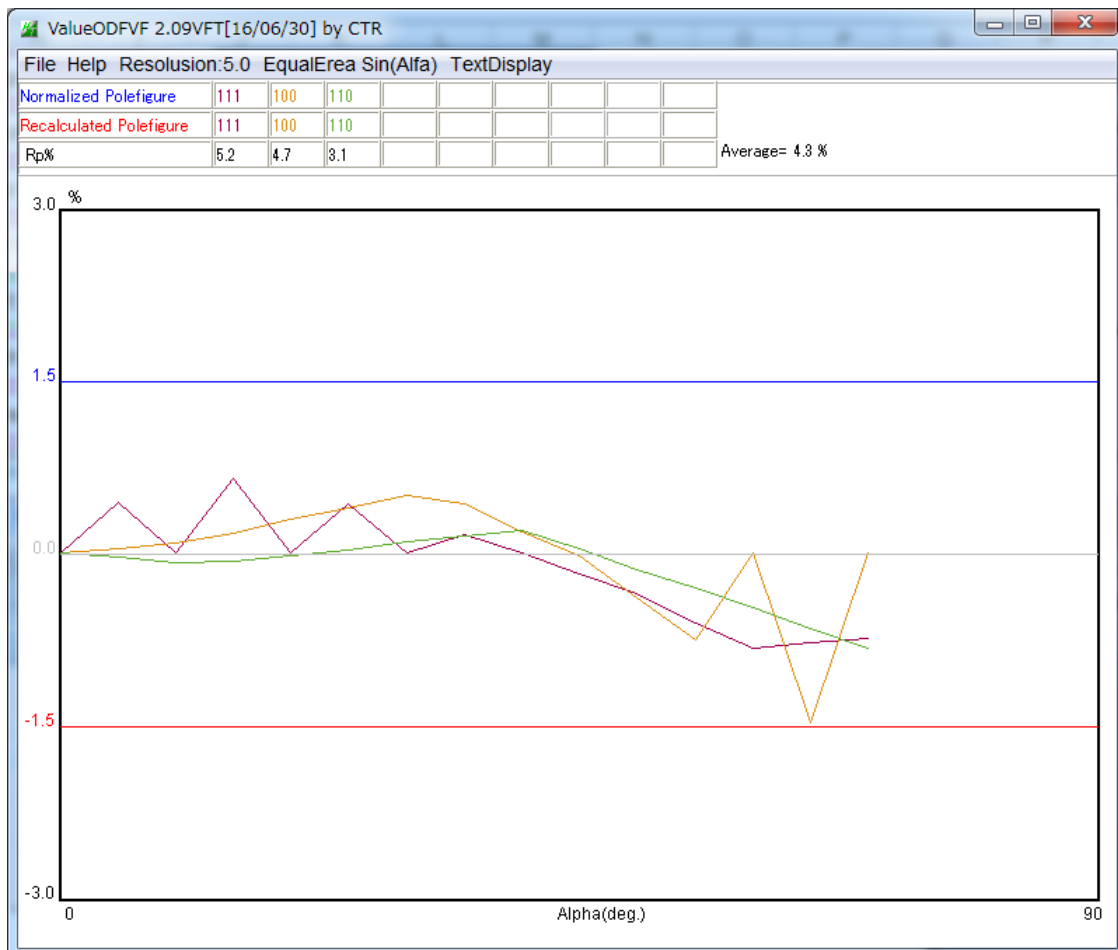
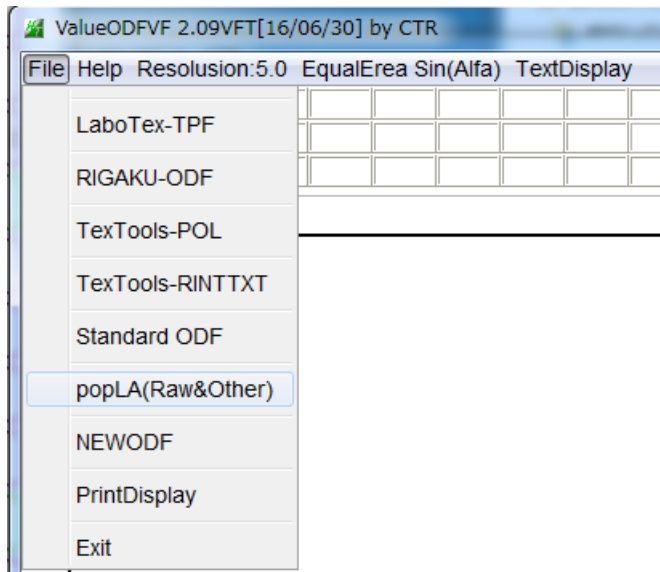
マウス右クリックで、 $\phi_1=55, \Phi=30, \phi_2=65$ を通過する ϕ_1, Φ, ϕ_2 プロファイルを表示



7. Error 評価

極点、ODFはブラックボックスではありません。

ODF解析結果の再計算極点図(.FUL or .WPF)と入力極点図 (.RAW) の比較をすることで入力極点図の評価が出来ます(Rp%)。評価は ValueODFVF ソフトウェアで行います。



$\alpha = 0$ は跔天図の中心

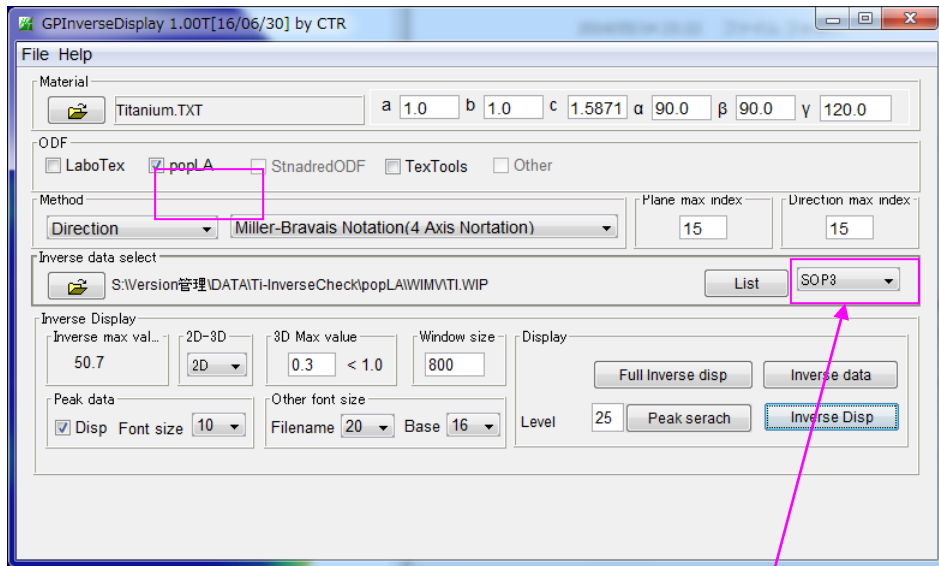
極点図の外側が下がり気味なので、defocus 補正が足りないことを表しています。

ODFPoleFigure2 ソフトウェアの Search minimum Rp%(Cubic only) で最小 Rp%モードで改善出来ます。

8. 逆極点図

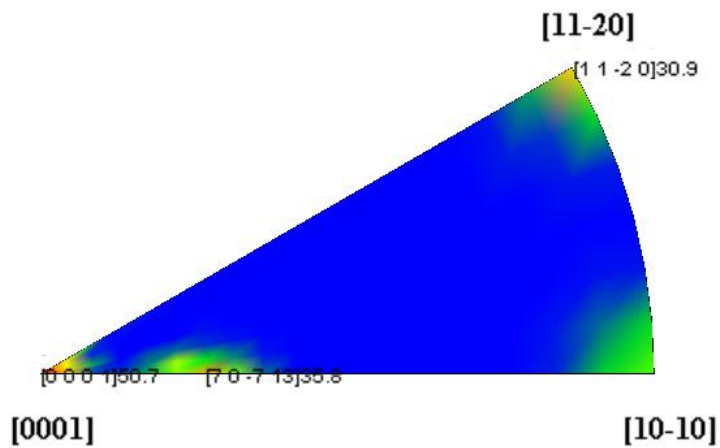
popLAによるWIMV法とHERMONIC法の逆極点図描画

例はTitaniumですが、Cubic、Tetragonal,Orthorhombi,Hexagonalも計算可能



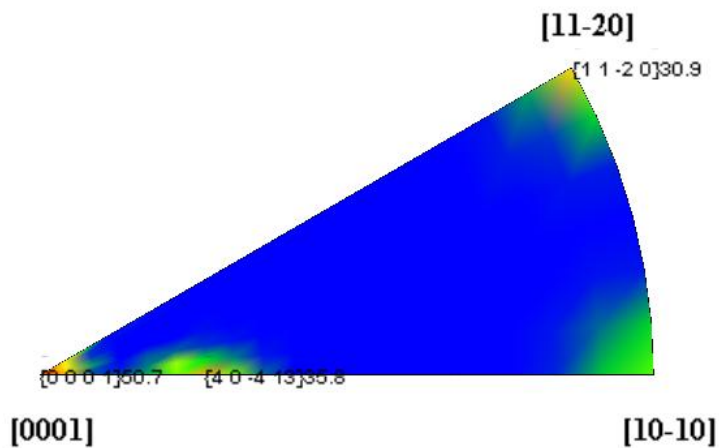
(SOP3:ND,SOP2:TD,SOP1:RD)

Ti-ND 方向の Direction



TL.WIP SOP3_Max=52.7

Ti-ND 方向の Plane



TL.WIP SOP3_Max=53.7

9. 再計算極点図の等高線表示

再計算極点図を T X T 2 に変換がおこなわれていれば、等高線表示も行えます。

