

L a b o T e x ソフトウェアと周辺ソフトウェアの使い方

(Rigaku,Bruker,PANalytical 社データに対応)

2016年06月01日



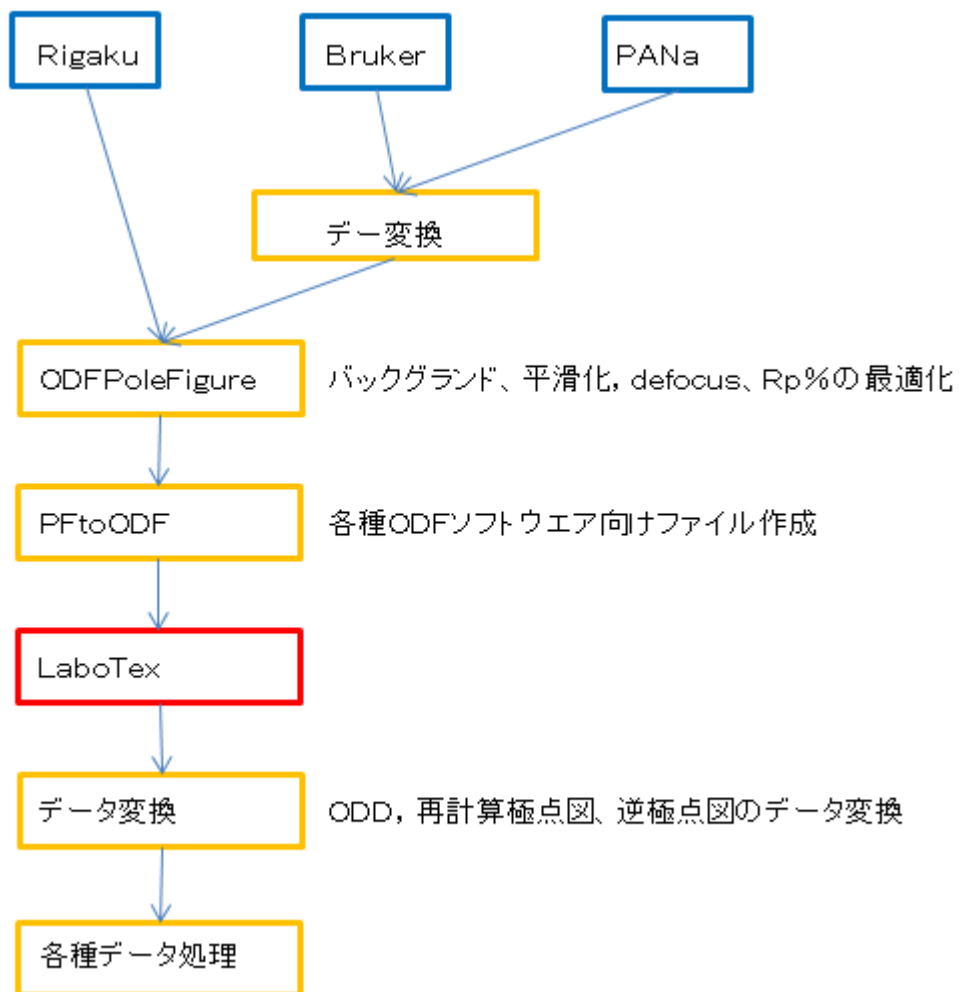
HelperTex Office

odftex@ybb.ne.jp

担当 山田 義行

2012/12/27	初版
2013/05/27	14/03/31 版に差し替え
2014/08/10	GPODFDisplay 追加

データフロー



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 LaboTex用入力データの作成
 3. 5 P F t o O D F 3 プログラムに T X T 2
4. LaboTex
 4. 1 データの読み込み
 4. 2 ODF解析
 4. 3 VolumeFraction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。
 5. 2 ODFDisplayでLaboTexのODF解析結果を表示
 5. 3 MakePoleFileで極点図表示
 5. 4 MakePoleFileで作成したTXT2データの立体表示
 5. 5 Fiberを表示
 5. 6 VolumeFractionの表示 (ODFVFGraph)
 5. 7 複数のVolumeFraction比較
 5. 8 GPODFDisplay機能

1. 概要

LaboTexソフトウェアは、ポーランドLaboSoft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、特徴は、VolumeFractionを求める際、Euler空間に対し非対称でFittingを行う、私を知る限り唯一の統合環境ODF解析ソフトウェアである。今回、配向評価総合パッケージCTRソフトウェア（2014/03/31）との関連で、操作方法の説明を行います。

Bruker (Uxd) 社データは、Uxd to AscでAscデータ変換

PANalytical (txt, xrdml) 社データはPANa to AscでAsc変換
を行いCTRソフトウェアを介してLaboTexで解析可能

2. 入力データ

測定装置 リガク製RINT2200+多目的試料台

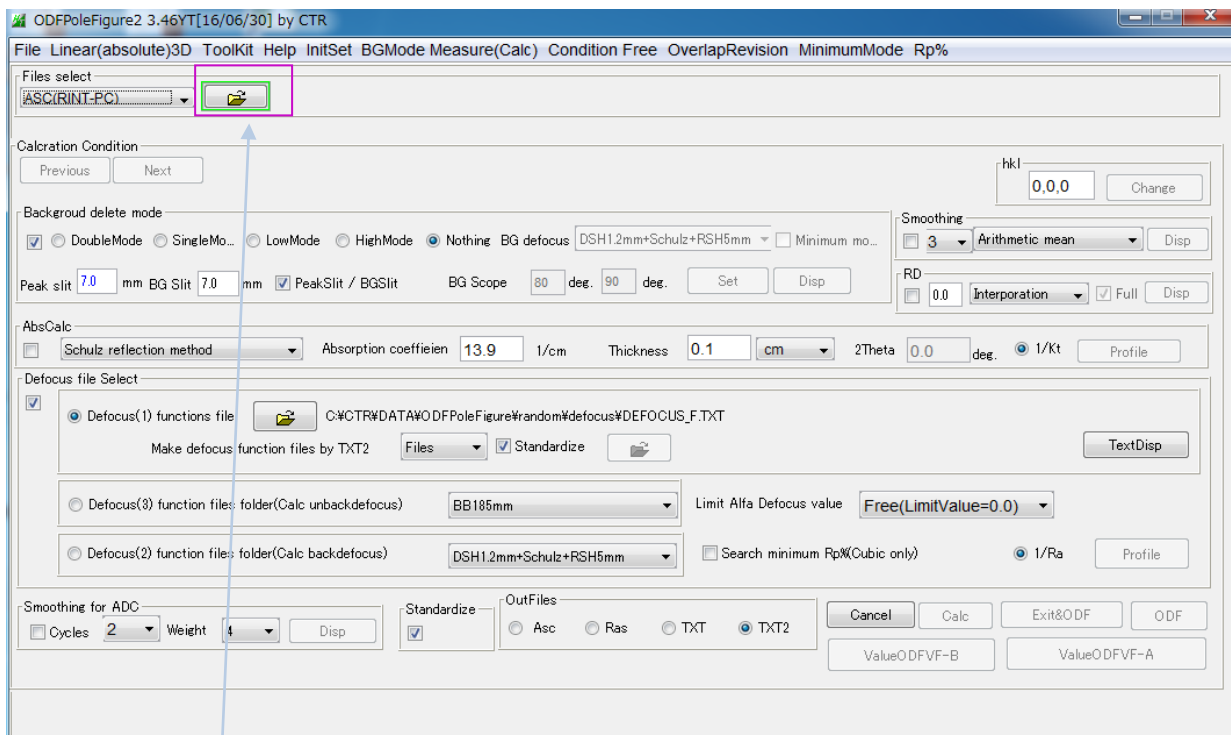
測定試料 A1材

3. 極点図データ補正

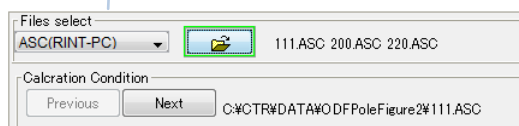
3.1 ODFPoleFigure2 ソフトウェア

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

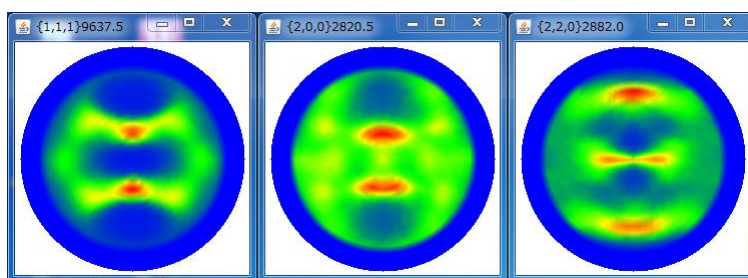
ODFPoleFigure2 ソフトウェアを起動



3.1 測定データの選択



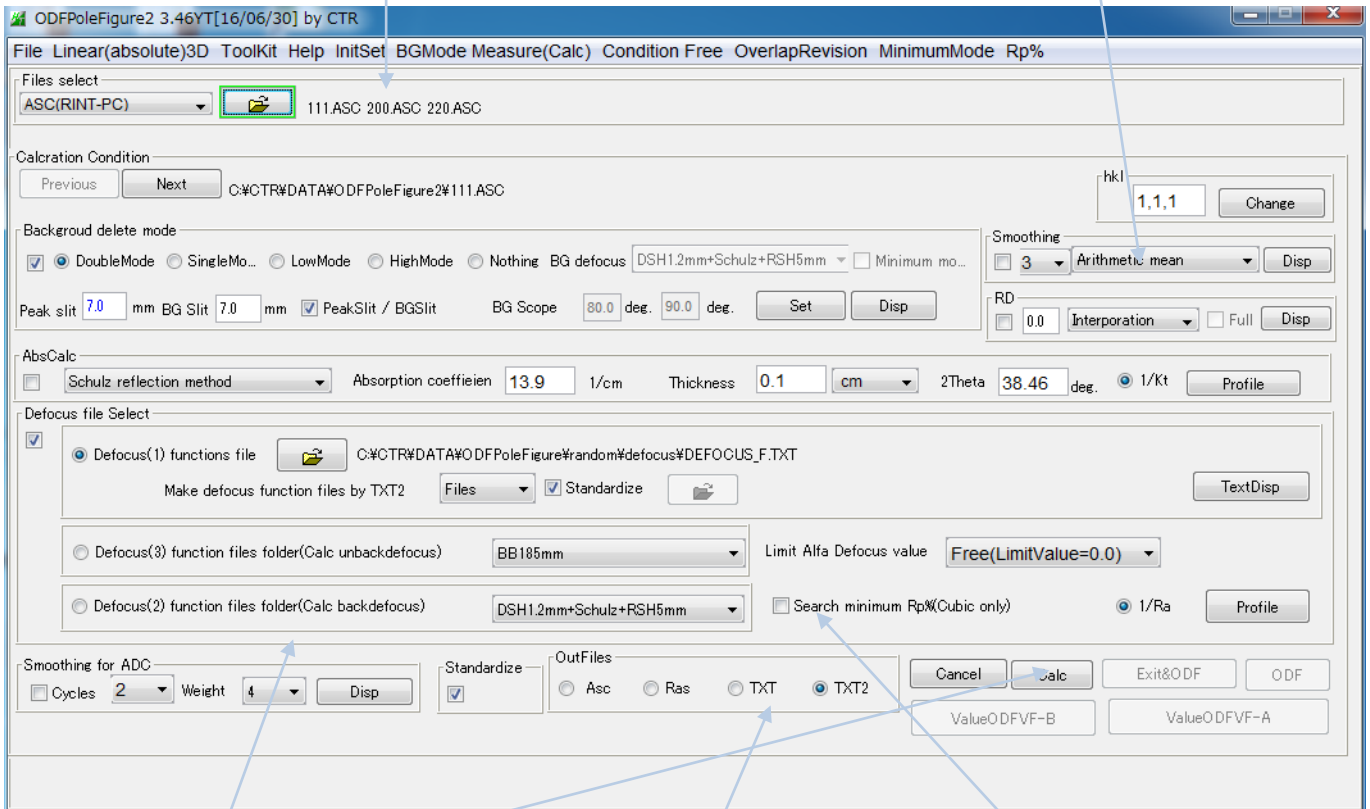
選択したファイルと極点図が表示される。



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。

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

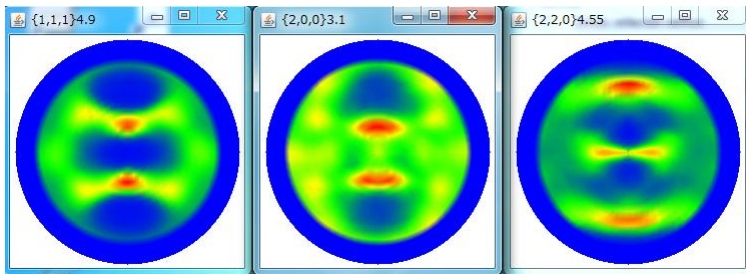


defocusはデータベースから計算

処理結果はTXT2データ

最適化Rp%

3. 3 一括正極点図データ処理 (Calcで計算)



処理された極点図が表示され、

最適化Rp%により、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!!

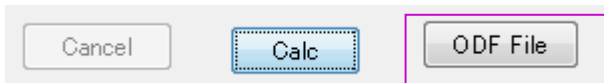


ODF Fileがアクティブとなる。

テキストデータも作成されている。

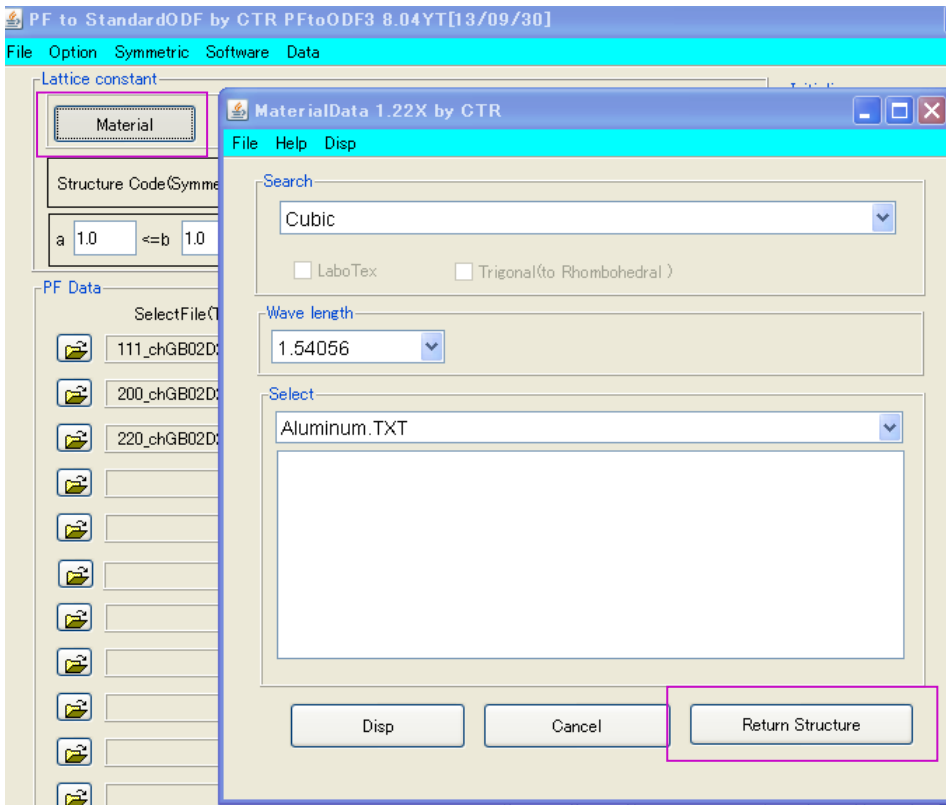
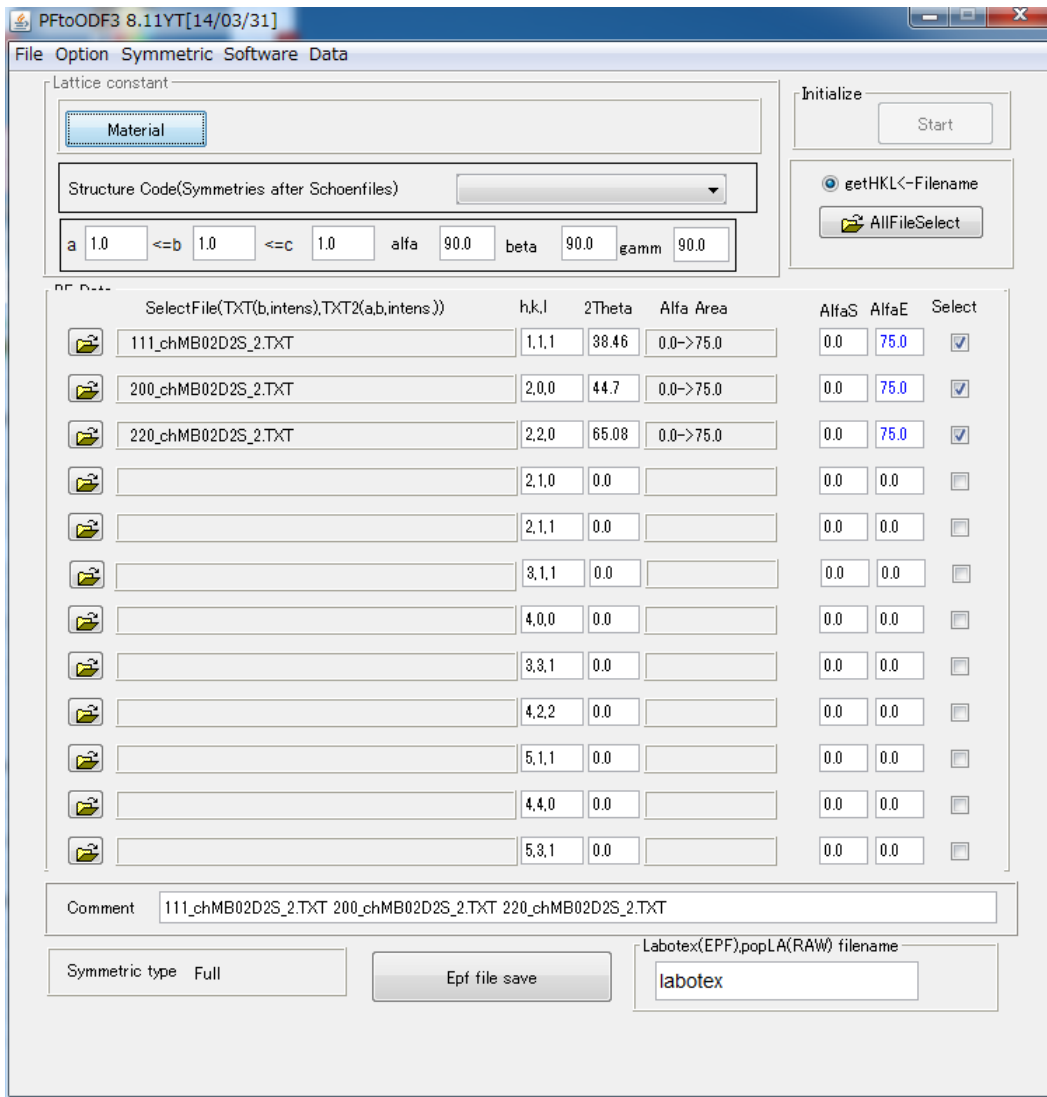
111_chGB02D2S_2	2012/09/23 9:14	テキスト文書	22 KB
200_chGB02D2S_2	2012/09/23 9:14	テキスト文書	22 KB
220_chGB02D2S_2	2012/09/23 9:14	テキスト文書	22 KB
111.ASC	2012/07/25 10:15	ASC ファイル	22 KB
200.ASC	2012/07/25 10:15	ASC ファイル	22 KB
220.ASC	2012/07/25 10:15	ASC ファイル	22 KB

3. 4 LaboTex用入力データの作成

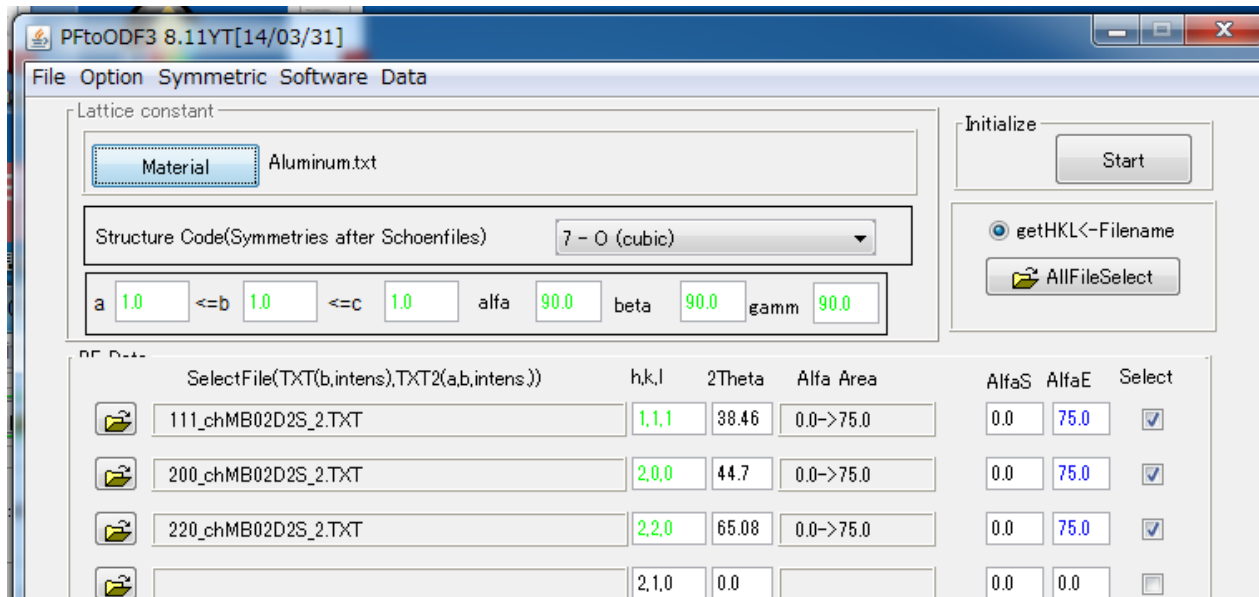


ODF Fileを押す。

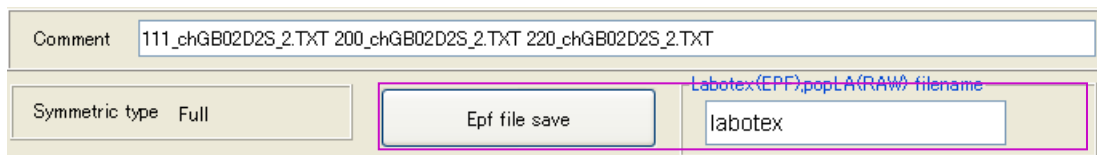
3. 5 P F t o O D F 3 プログラムに T X T 2 データが引き継がれる。



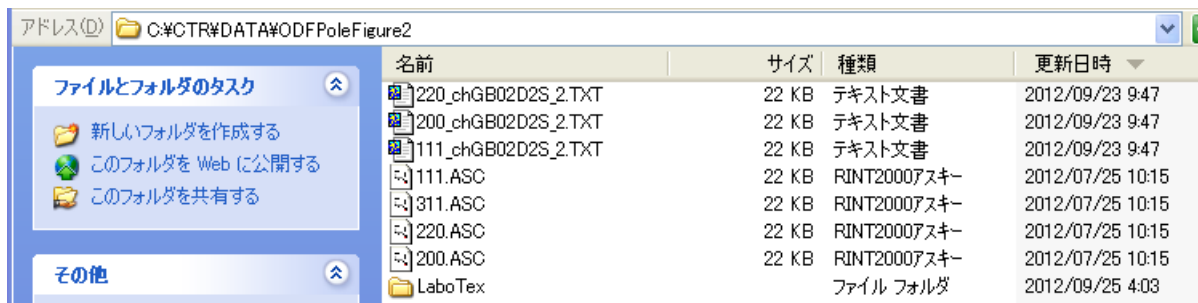
Material で対象物質を選択 (同一物質を扱うのであれば、File-Conditionsave でデフォルト化) Return Structure



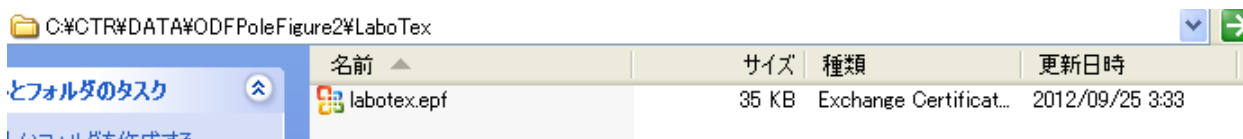
選択結果が画面に反映され、指数のチェックを行い、正常なら緑色で表示される。



ファイル名を変更し、Epf file save を行う。



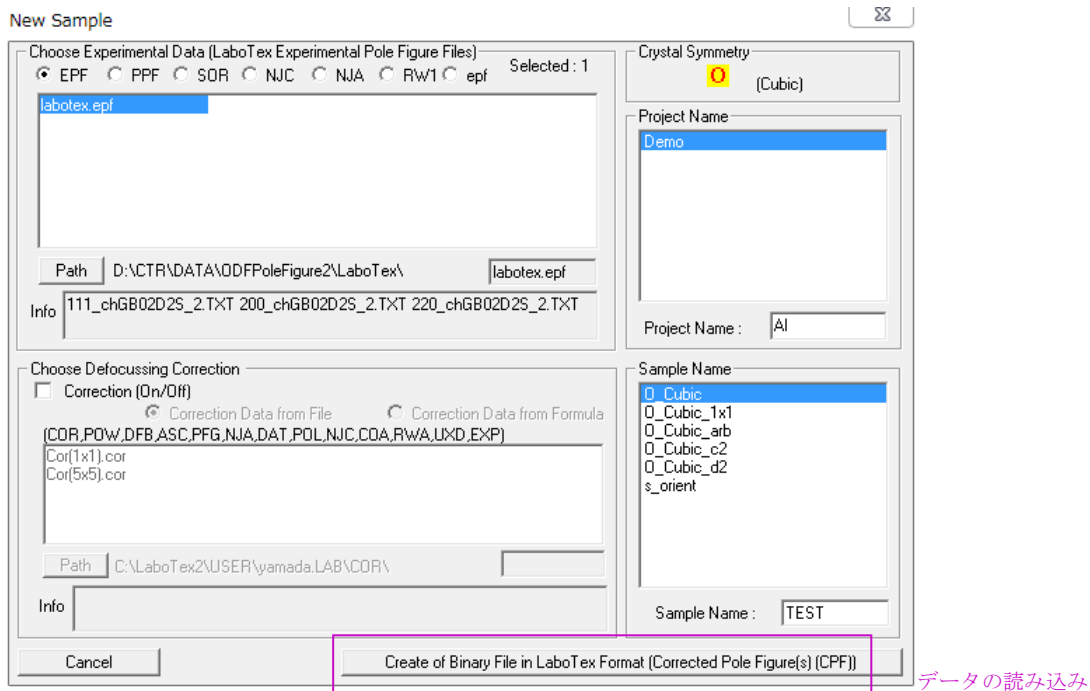
入力データと同一ディレクトリに LaboTex ディレクトリが作成され、



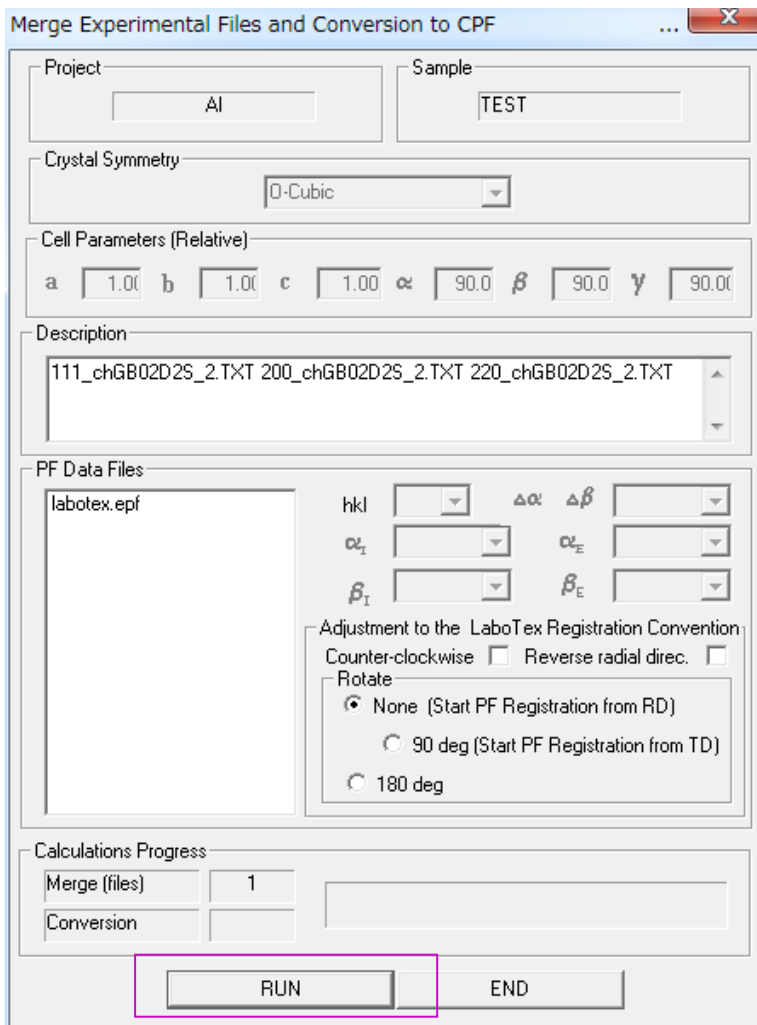
Epf ファイルが作成される。

4. LaboTex

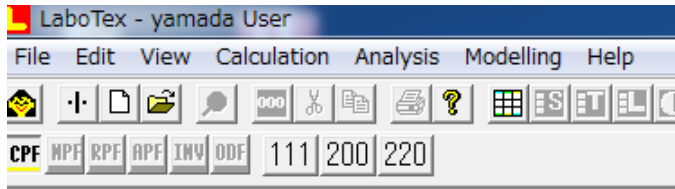
4. 1 データの読み込み



アルミニウム試料をプロジェクトをA1 サンプル名をTESTとして読み込む

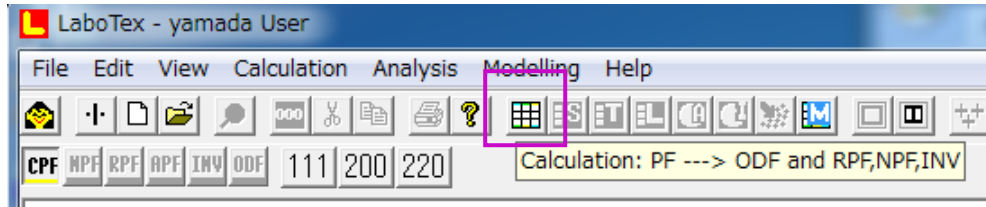


LaboTex では極点図データを CW として扱う。
CCW で扱う場合 Revers として指定する。
RUN->END で指定終了

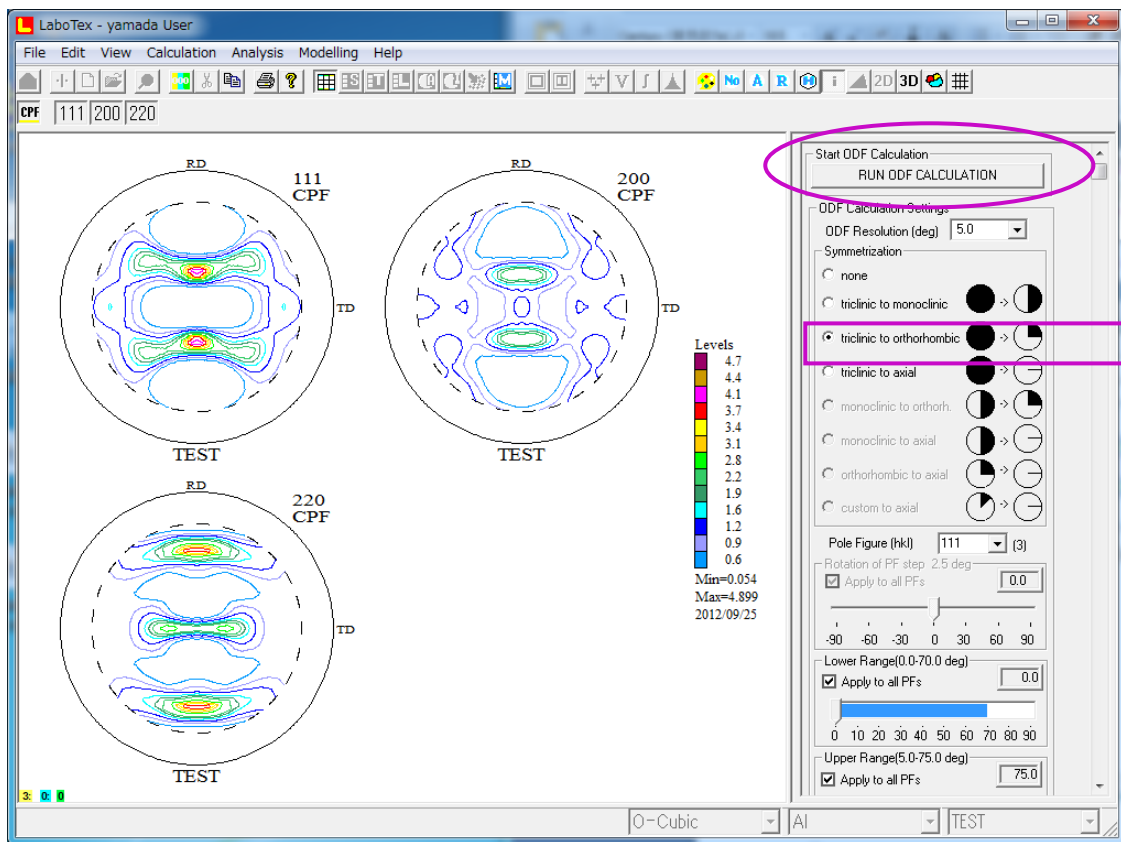


CPFとして {111}、{200}、{220}

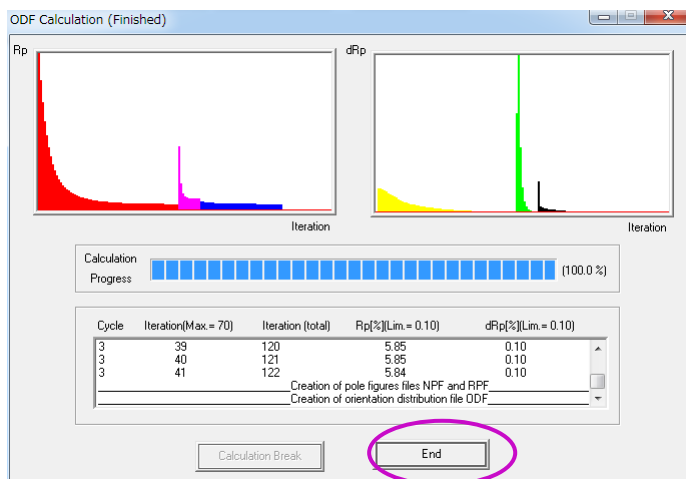
4.2 ODF解析



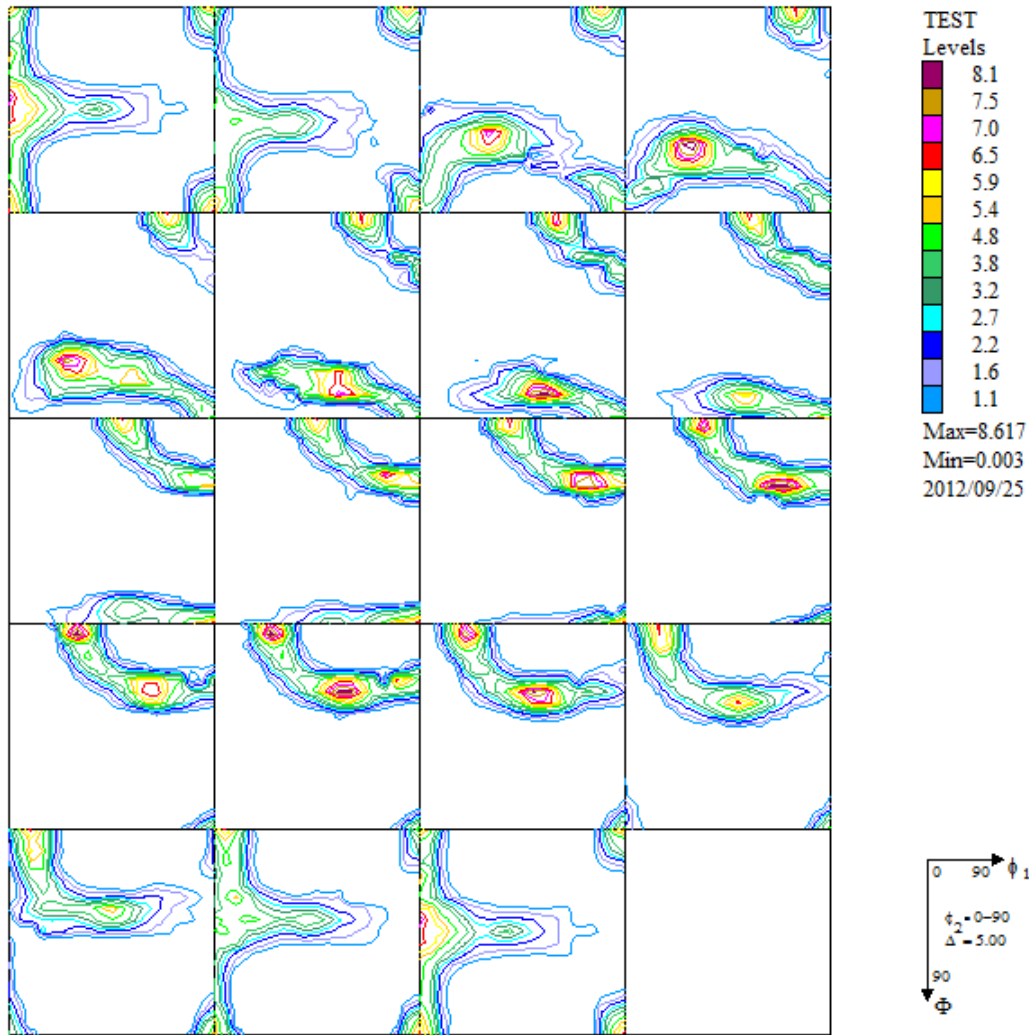
ODF図を表しているメニューからODF解析画面へ



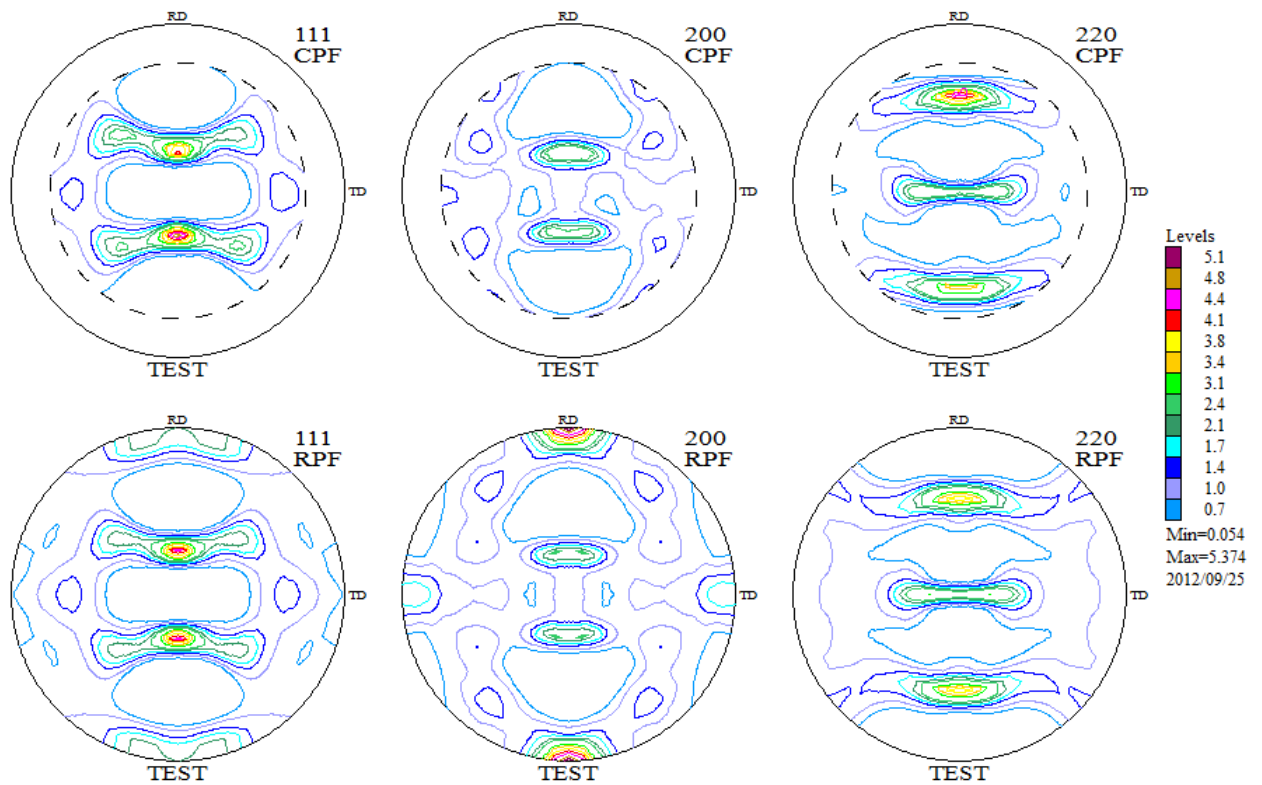
1/4 対称として ODF 解析をおこなう。Orthorhombic を選択して Run calculation



End で ODF 解析は終了

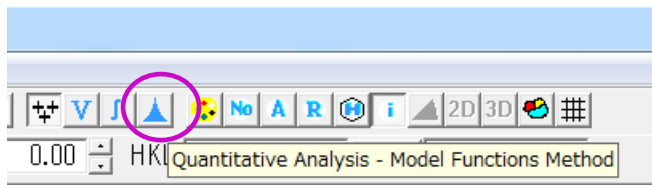


入力極点図から計算した ODF 図

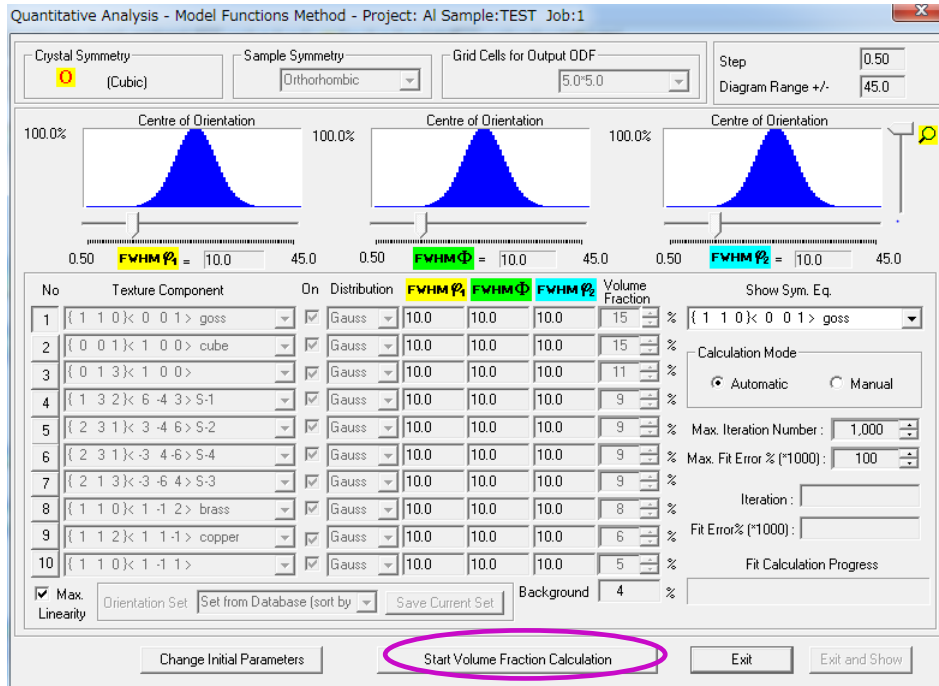


入力極点図(CPF)と ODF 解析から計算された再計算極点図 (RPF)

4.3 VolumeFraction計算



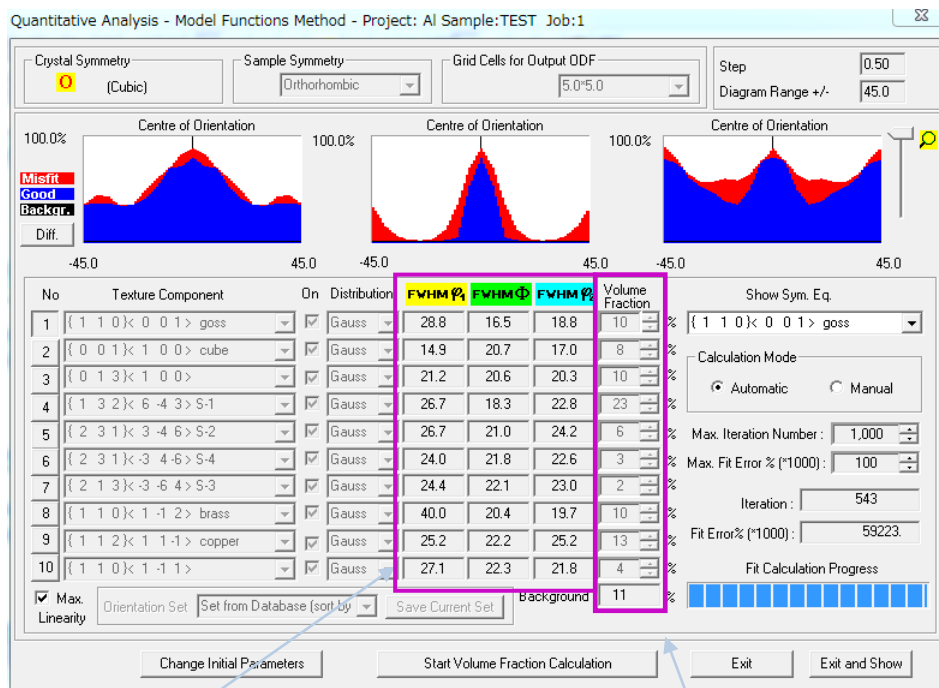
VolumeFraction (定量) を Model Functions Method で行う。



データベースの中から、可能性の高い結晶方位が既に等方性表記で表示している。

Start VolumeFraction Calculation で計算が始まる

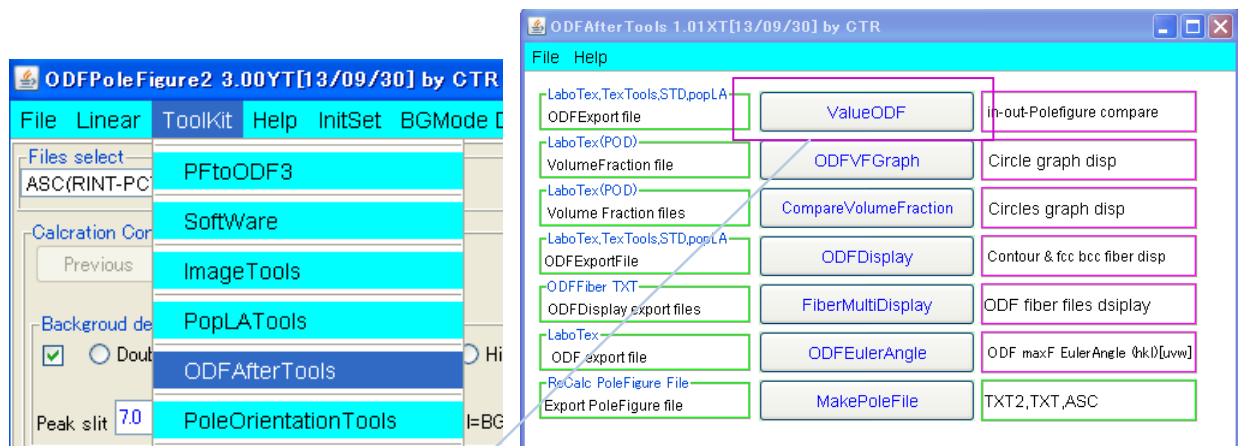
繰り返し計算し、errorが進まなくなったら終了



3方向 Euler角広がり非対称

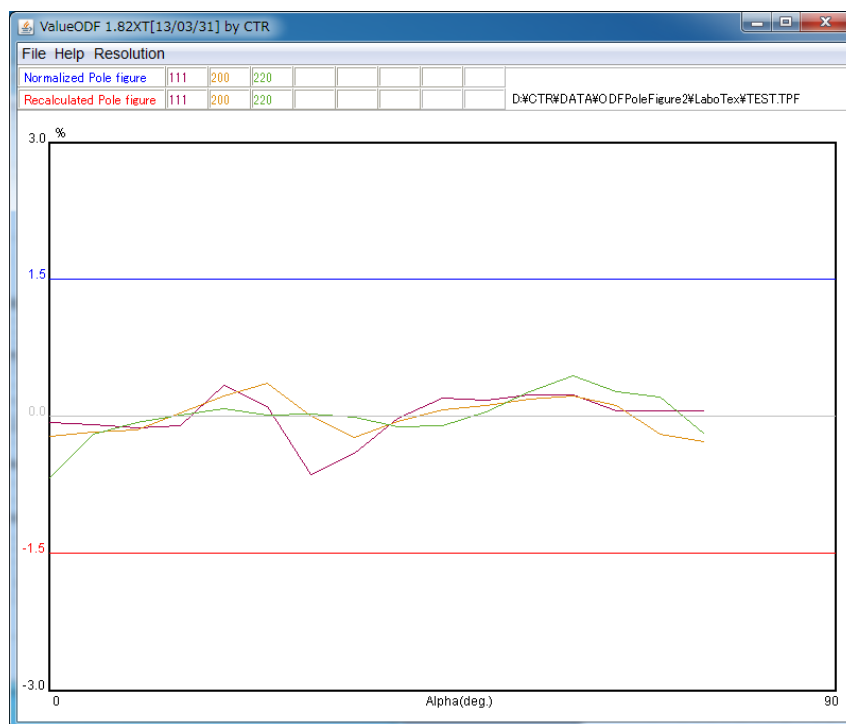
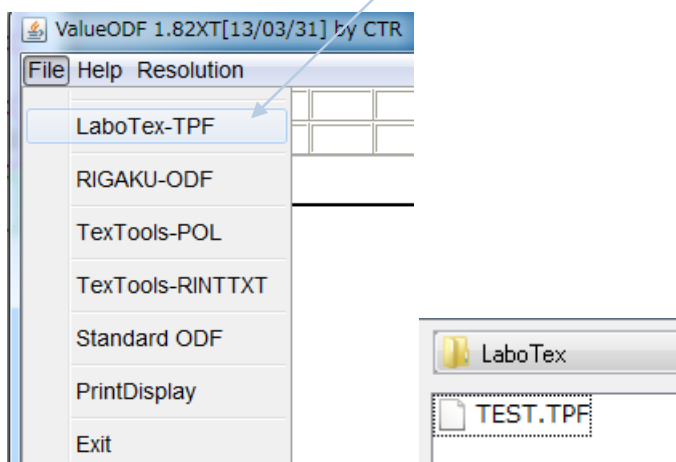
VolumeFractionが計算される。

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LaboTex作業ディレクトリを選択

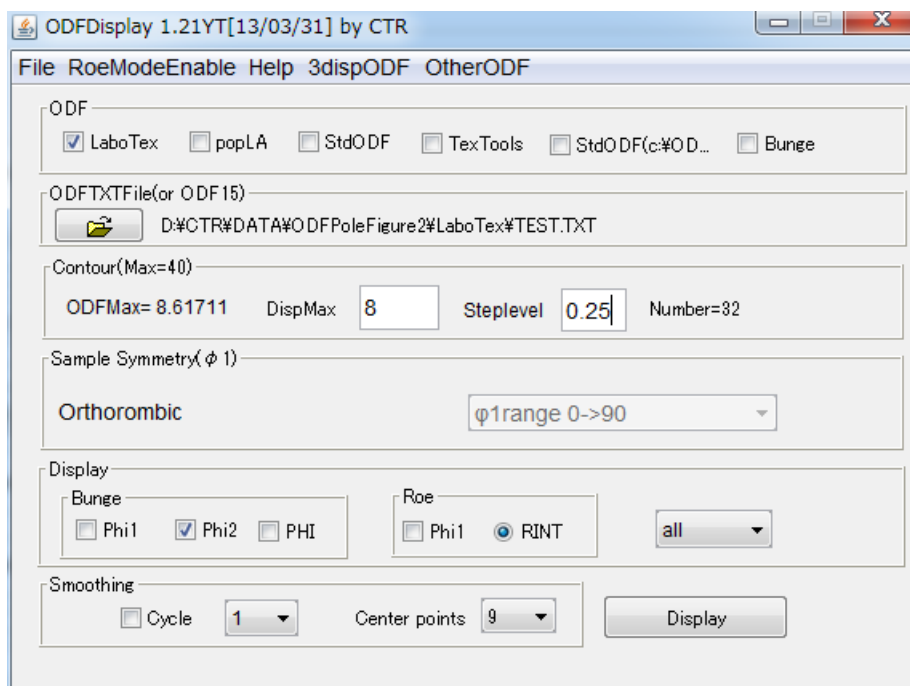


入力極点図と再計算極点図との差が1.5%以内であり、測定、処理結果は正常である。

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

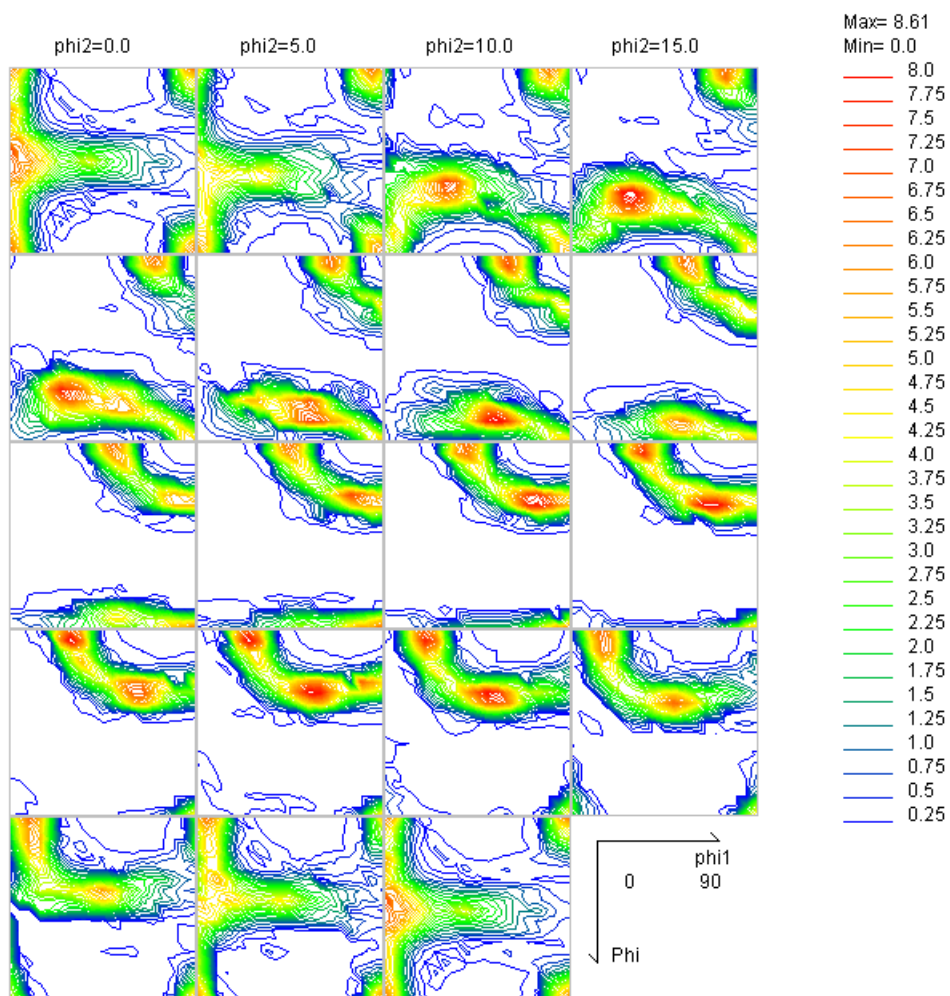
「7. 7. 3 登録 defocus 曲線を変更する」により修正する事が可能

5. 2 ODFDisplay で LaboTex の ODF 解析結果を表示

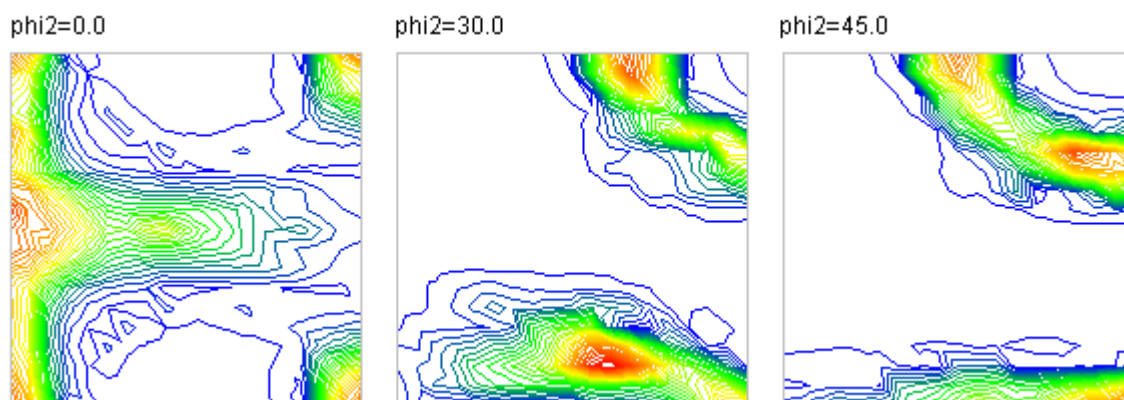


最大方位密度は 8.6 である。Steplevel を 0.25 として表示

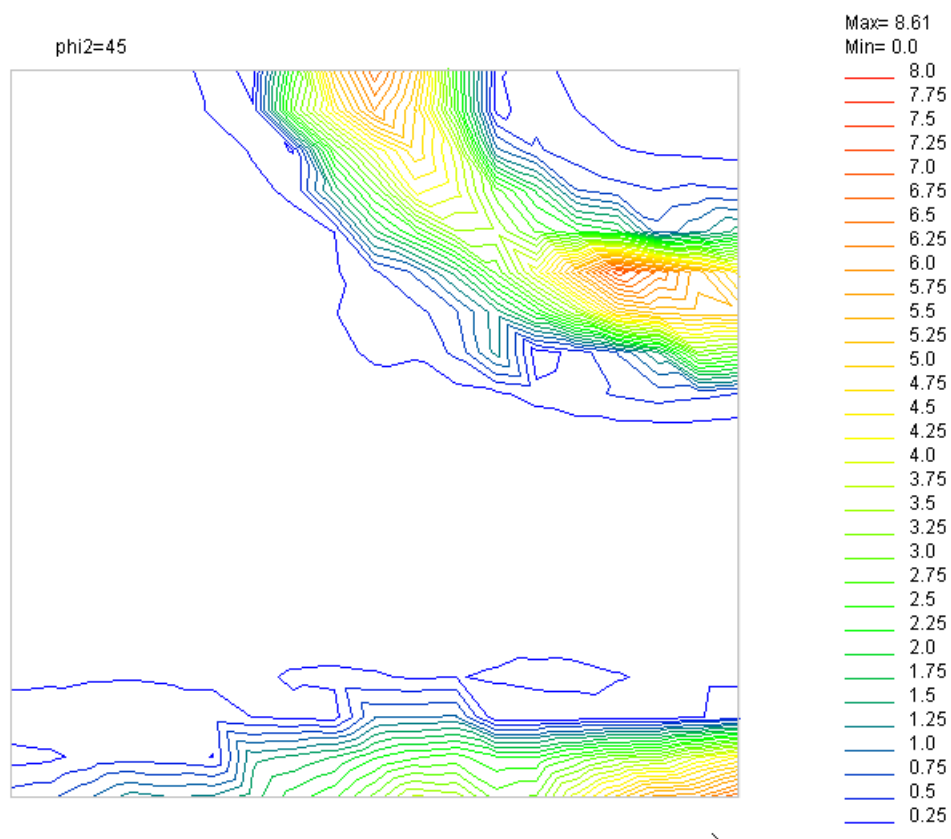
全面表示



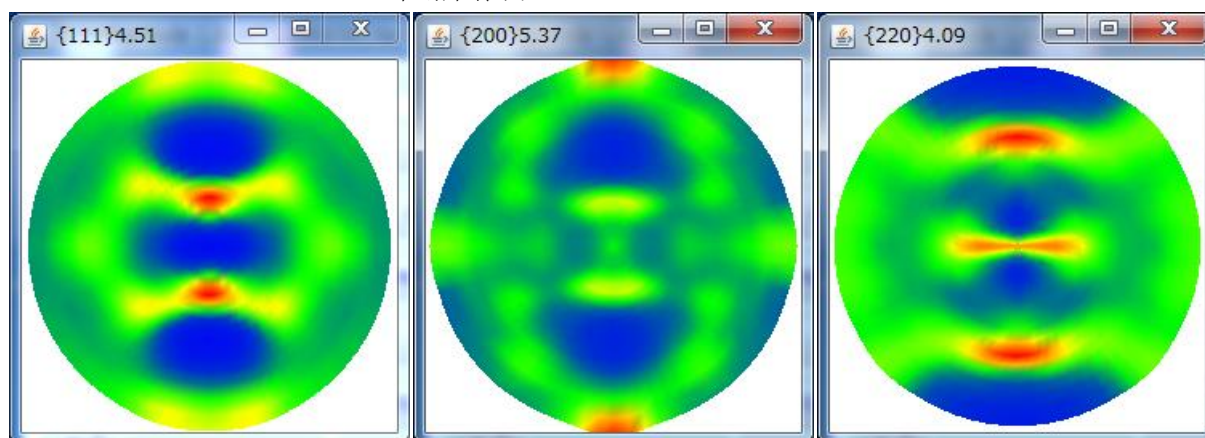
3面表示



1面表示

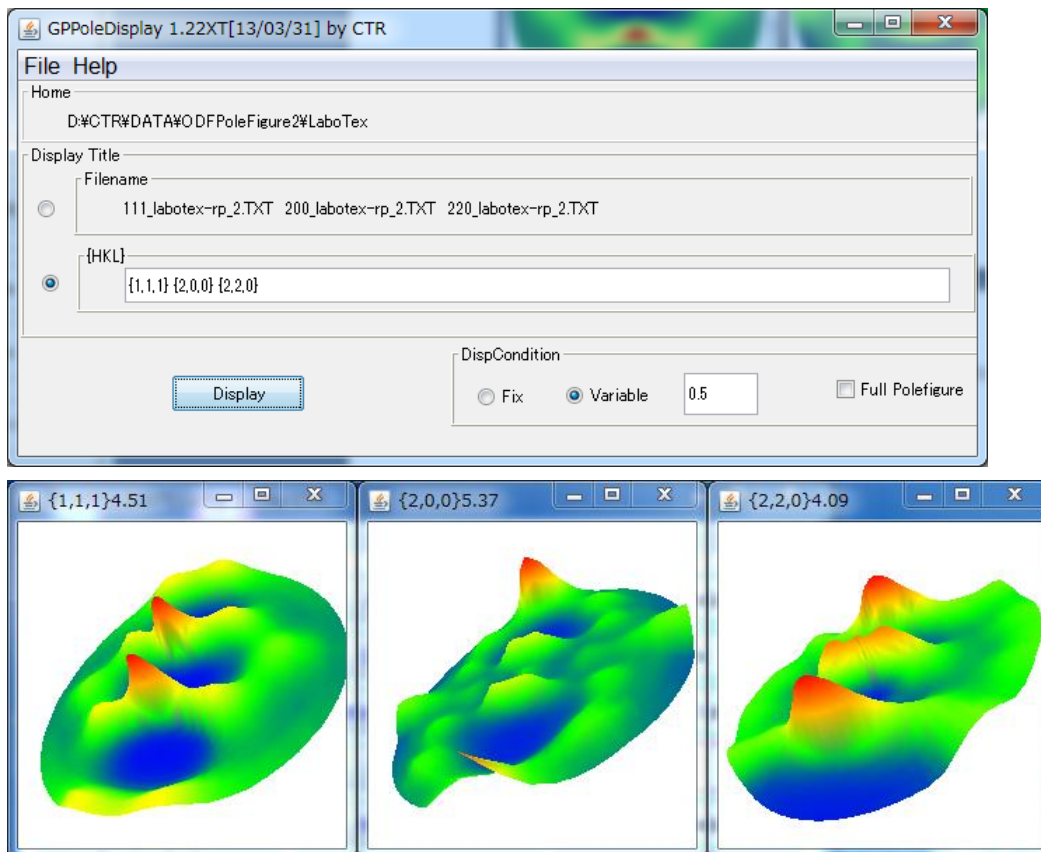


5.3 MakePoleFileで極点図表示

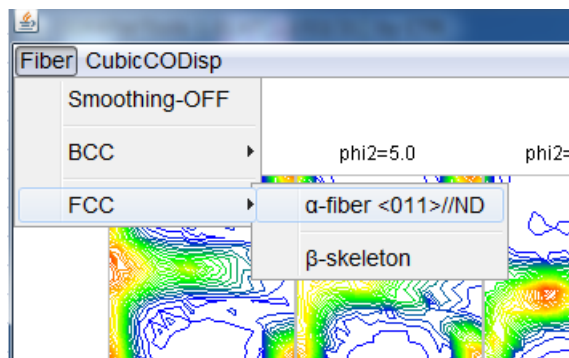


MakePoleFileはODFで計算された再計算極点図をTXT2ファイルに変換する。

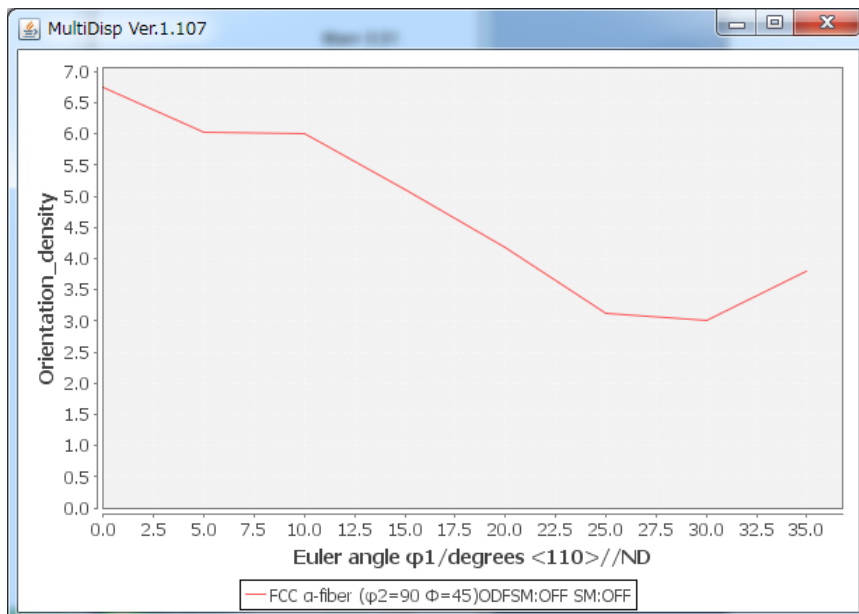
5. 4 Make Pole File で作成したTXT2データの立体表示



5. 5 Fiberを表示



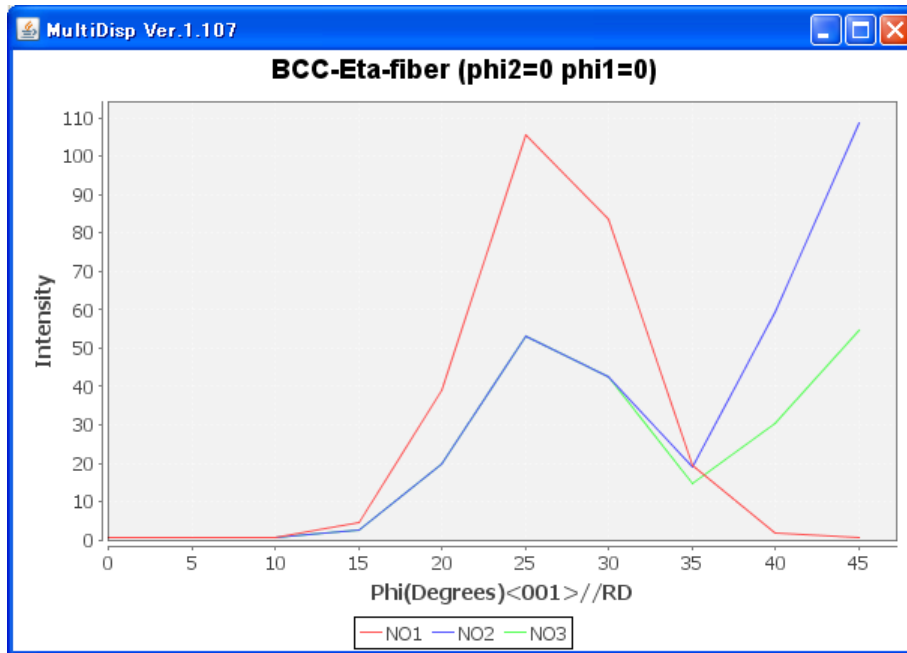
ODFDisplay の ODF 図メニューの Fiber から



Fiber 表示とファイルが作成される。

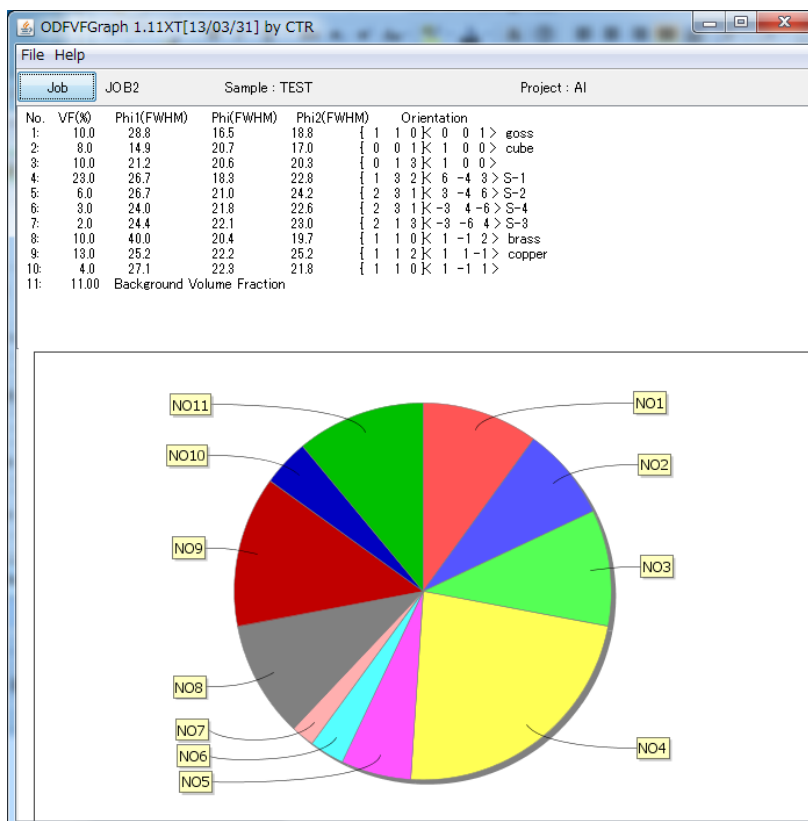
FIBER	2012/09/25 10:56	ファイルフォル...	
111_labotex-rp_2	2012/09/25 10:43	テキスト文書	23 KB
200_labotex-rp_2	2012/09/25 10:43	テキスト文書	23 KB
220_labotex-rp_2	2012/09/25 10:43	テキスト文書	23 KB
labotex	2012/09/25 3:33	Exchange Certifi...	35 KB
TEST.TPF	2012/09/25 10:26	TPF ファイル	39 KB
TEST	2012/09/25 10:26	テキスト文書	275 KB

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

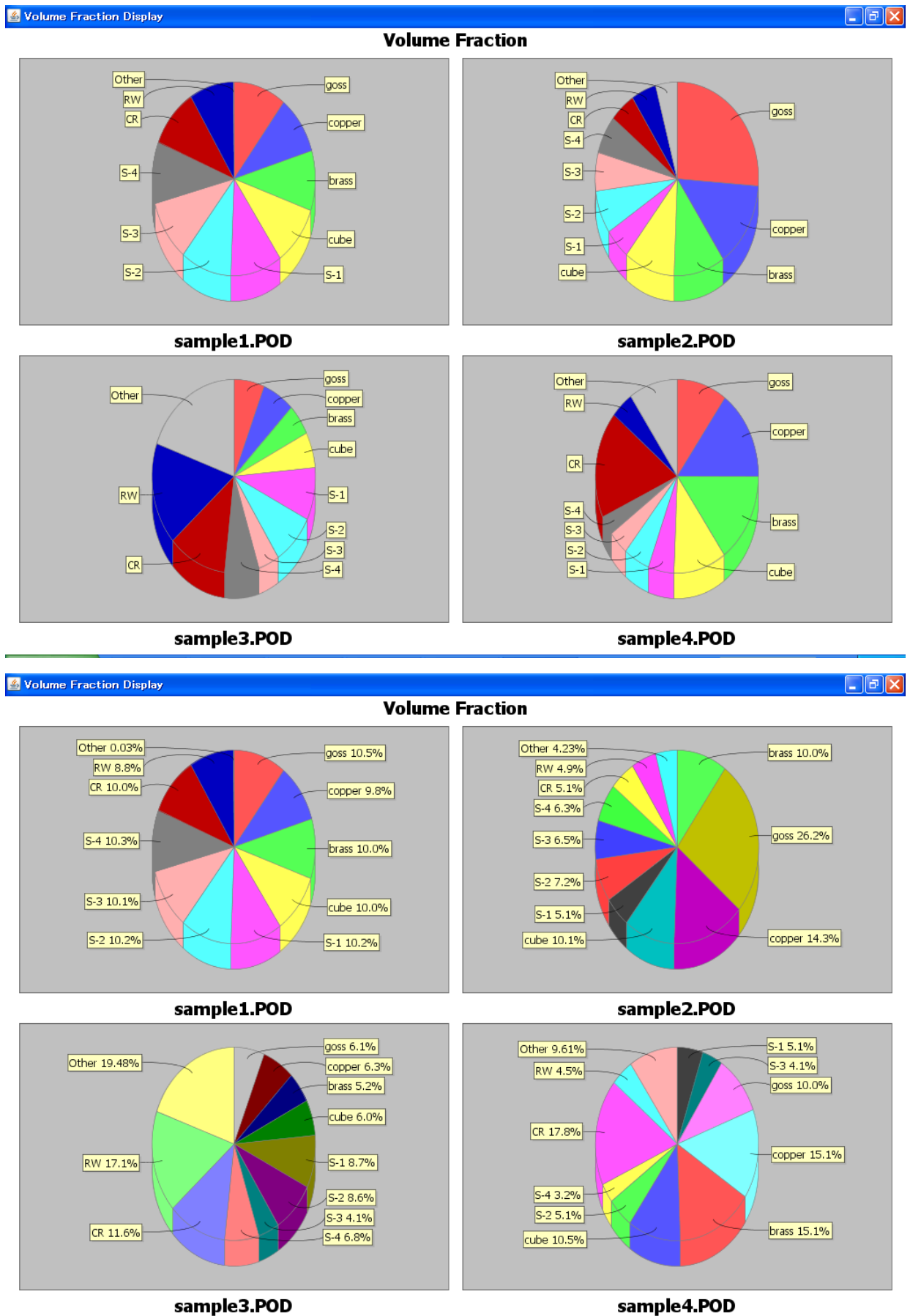


BCC-Fiber を NO1,No2,No3

5. 6 Volume Fraction の表示 (ODFVFG r a p h)



5. 7 複数のVolumeFraction比較 (Compare Volume Fraction)



他にも数多いサポートソフトウェアが付属しています。

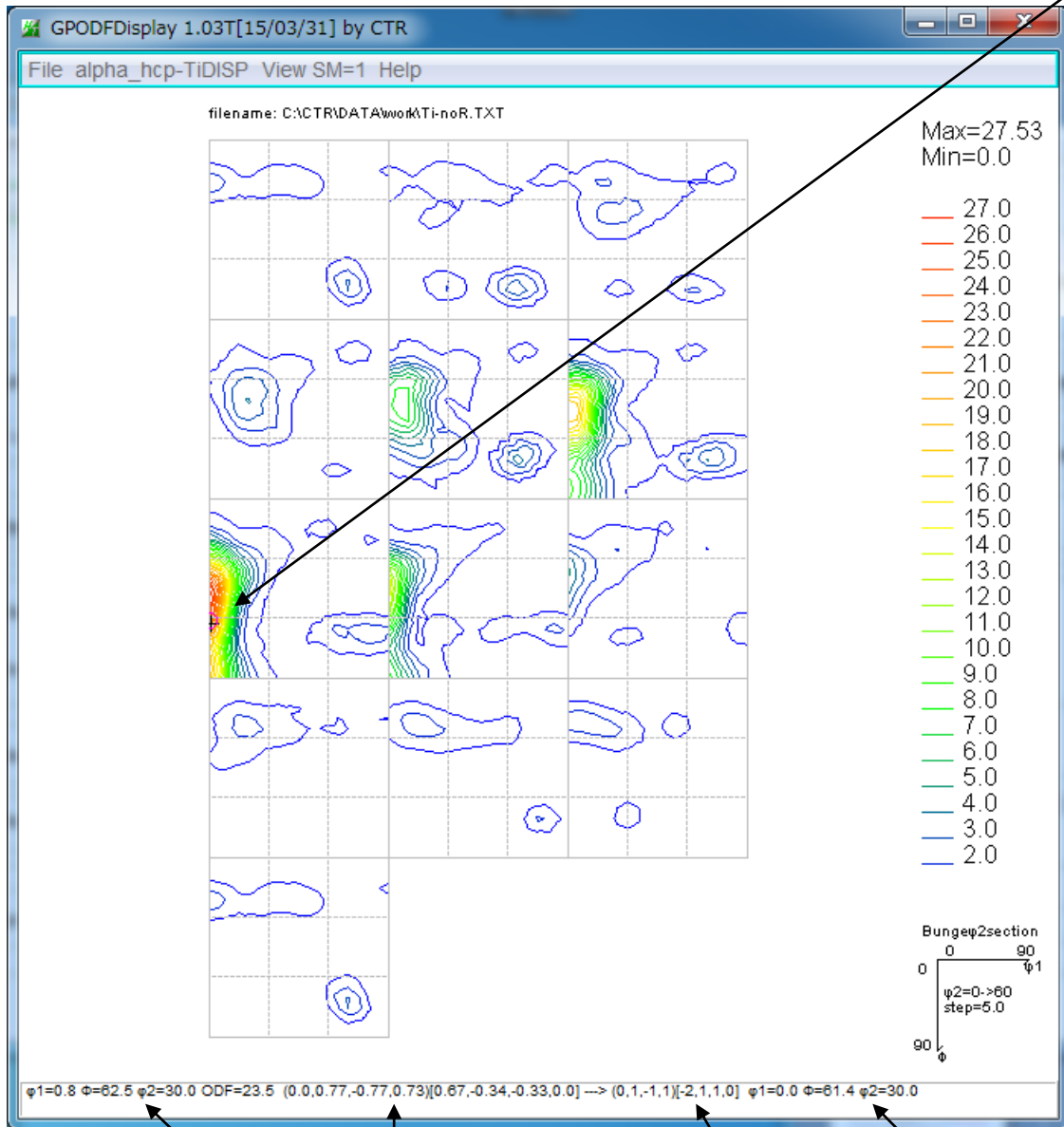
5. 8 GPODFDisplay機能

ODF解析結果のToolはODFDisplay2ソフトウェアがありますが、ODFDisplay2ソフトウェアは、Cubicに特化しています。汎用的なODF解析結果評価として新たに作成しました。

例えば、HexagonalのODF解析を行う場合、一般的なODF解析ソフトウェアでは3指数表示、直交軸は、 $\langle 100 \rangle$ - $\langle 1-20 \rangle$ - $\langle 001 \rangle$ 、が一般的ですが、本ソフトウェアでは、国内標準の4指数表示、直交軸は、 $\langle 10-10 \rangle$ - $\langle -12-10 \rangle$ - $\langle 0001 \rangle$ としています。

(この変換はHexaConvertソフトウェアで可能です。)

マウス左クリックで“+”位置が示され、計算された結晶方位の Euler 角度位置に“O”を表示



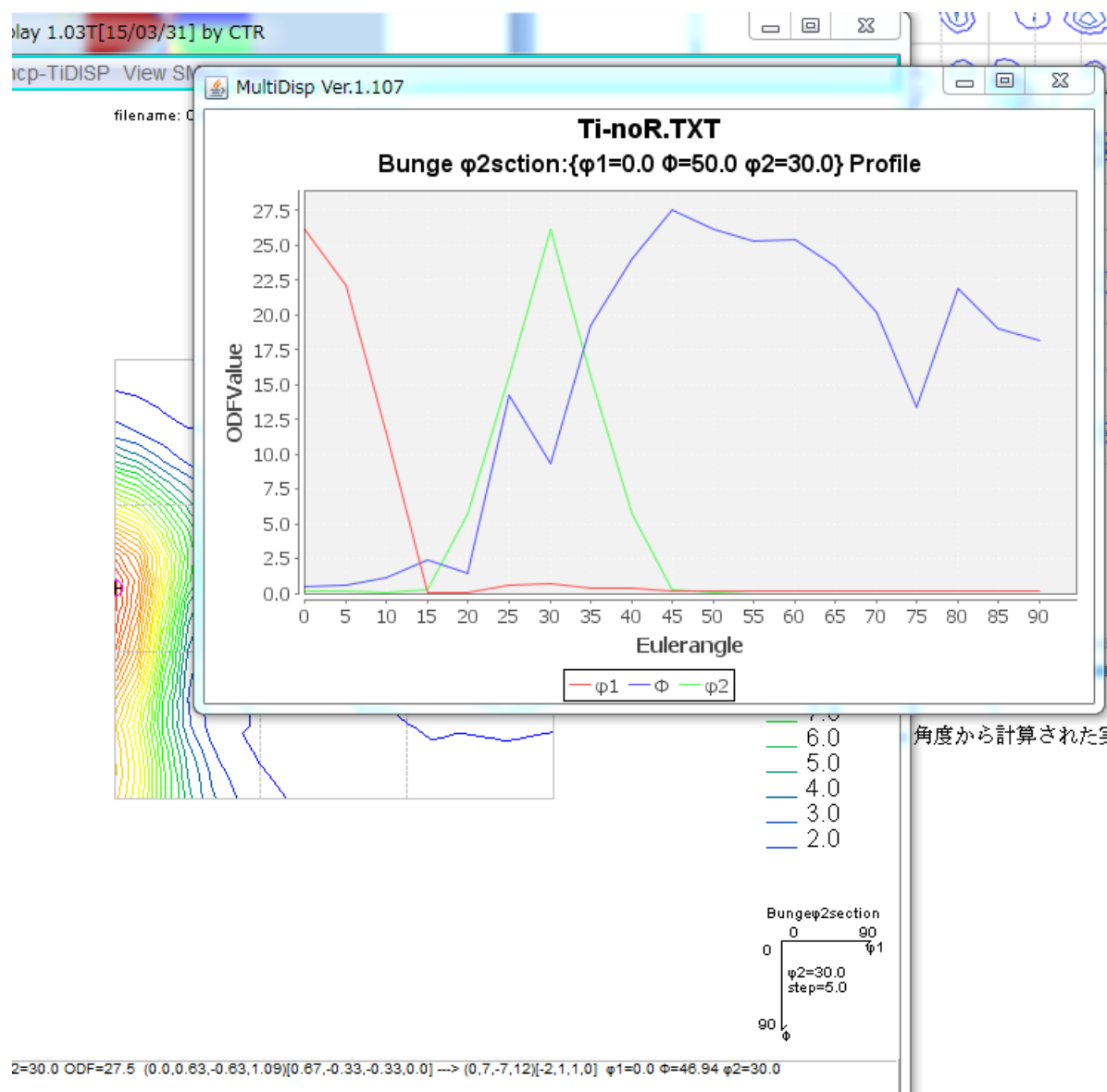
“+”位置の Euler 角度

Euler 角度から計算された実数結晶方位

整数化された結晶方位

整数化された結晶方位の Euler 角度

マウス右クリックで



ϕ 1 = 0、 Φ = 5 0、 ϕ = 3 0 を通過する ϕ 1、 Φ 、 ϕ プロファイルを表示します。

5. 9 再計算極点図の等高線表示

5. 4 で再計算極点図を T X T 2 に変換してあれば、再計算極点図の等高線表示が可能