

S t a n d a r d O D F 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)

2016年03月25日



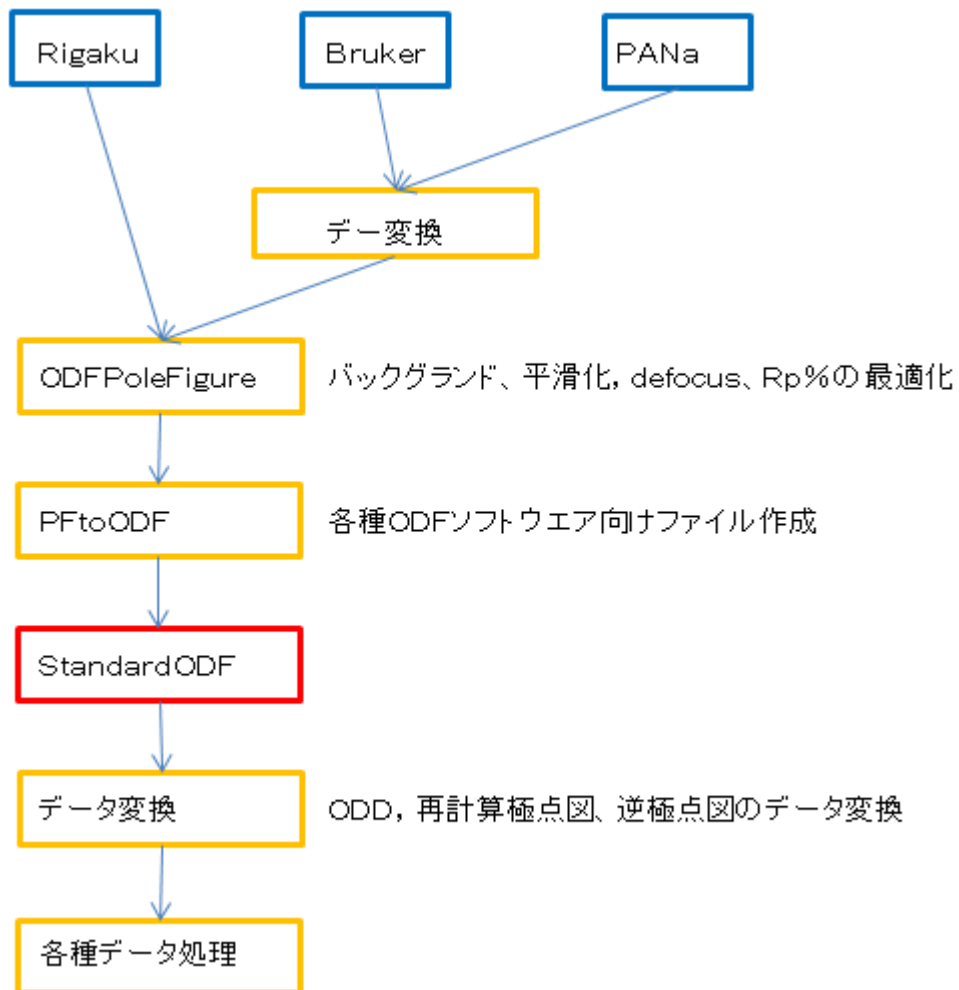
HelperTex Office

odftex@ybb.ne.jp

担当 山田 義行

2013/03/04	初版
2013/05/27	(Limit)14/03/31 版に差し替え
2014/05/21	ODFDisplay2 追加機能
2014/08/10	GPODFDisplay 機能追加
2016/03/25	GPInverseDisplay から等高線逆極点図表示

データフロー



目次

1. 概要
2. 解析に使用した入力データ
3. 極点図データ補正
 3. 1 測定データを選択
 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 StandardODF用入力データの作成
 3. 5 PFtoODF3プログラムにTXT2
4. StandardODFで読み込む
 4. 1 StandardODFで処理した結果をExport
5. ODF図、再計算極点図、逆極点図表示
6. 配向評価総合パッケージCTRソフトウェア
 6. 1 ValueODFは入力極点図と再計算極点図の比較を行う。
 6. 2 ODFDisplay
 6. 2. 1 Fiberを表示
 6. 2. 2 ODF図マウスクリックによる方位解析
 6. 2. 3 データベースによるODF方位密度List
 6. 2. 4 結晶方位データベース
 6. 3 再計算極点図の表示
 6. 4 逆極点図の表示
 6. 5 GPODFDisplay機能
 6. 6 再計算極点図の等高線表示
 6. 7 逆極点解析

1. 概要

StandardODFは、大阪府立大学井上先生による級数展開法ODF解析ソフトウェアであり国内では広く普及しているソフトウェアです。古くからX線メーカ各社の極点図データ処理後データを扱えるよう工夫されていた。

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。パッケージソフトウェアは全てのソフトウェアがjavaで作成されているので全てのWindows上で動作します。

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StandardODFで解析可能になります。

ODF解析結果のODF図、極点図、逆極点図を用いた各種解析をサポートします。

2. 解析に使用した入力データ

測定装置 リガク製RINT2200+多目的試料台

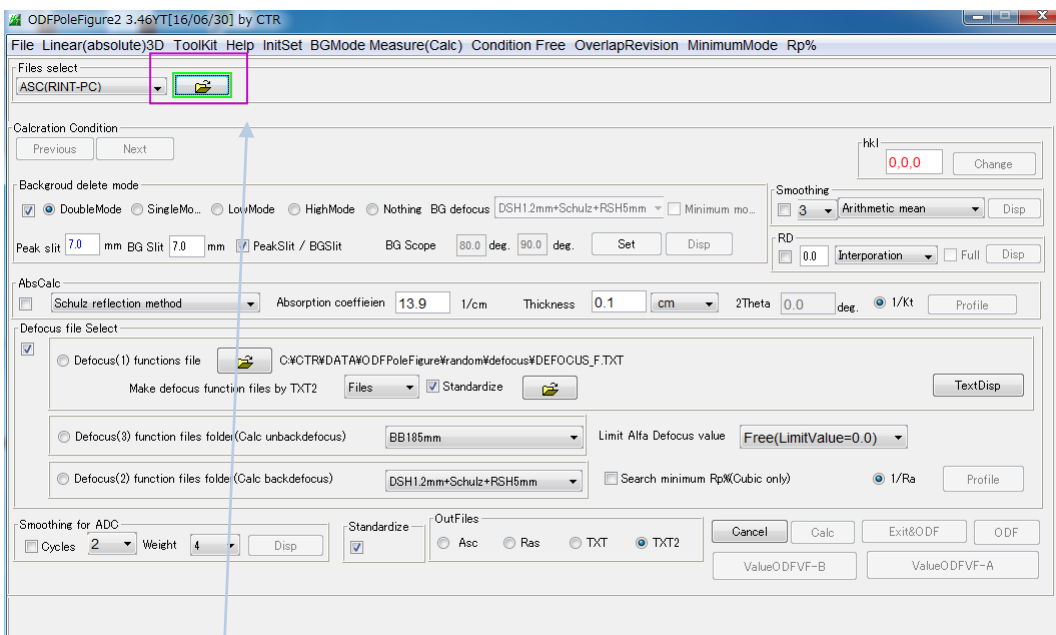
測定試料 A1材

3. 極点図データ補正

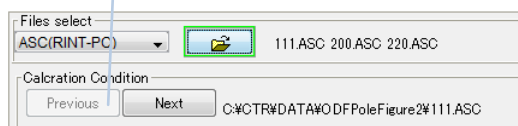
3.1 ODFPoleFigure2 ソフトウェア

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

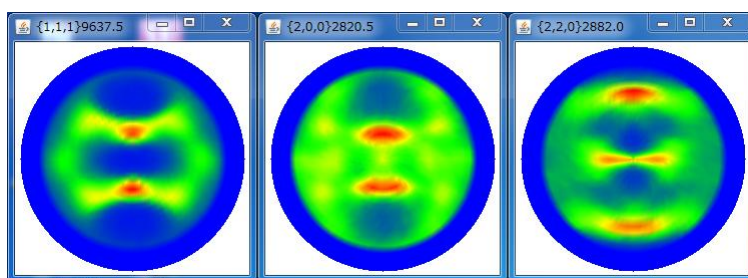
ODFPoleFigure2 ソフトウェアを起動



3.1 測定データの選択

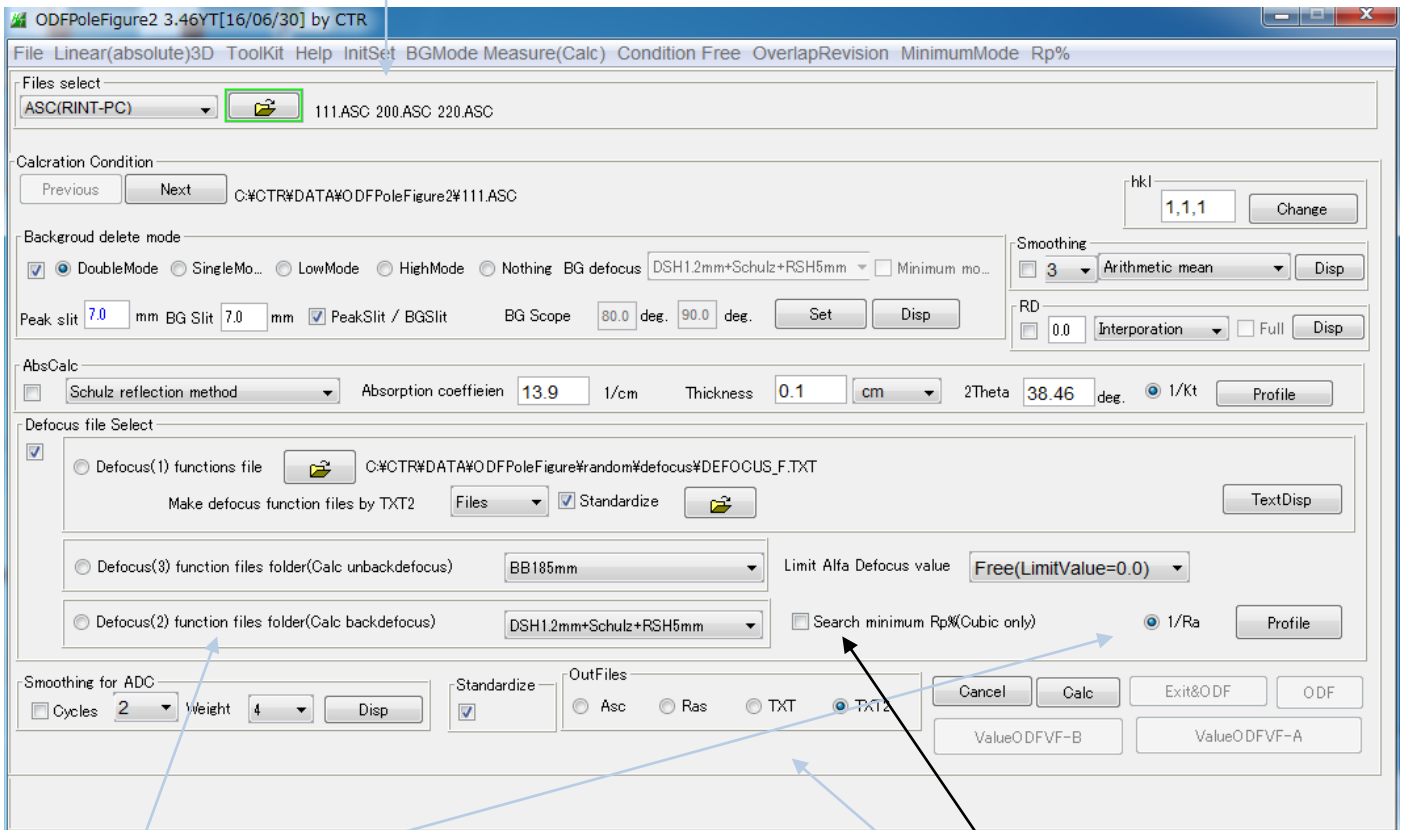


選択したファイルと極点図が表示される。



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。

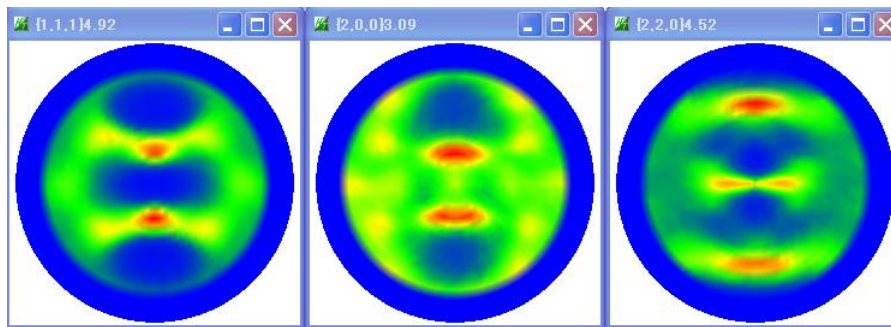


defocusはrandomサンプルを用いなくてデータベースから計算

最適化Rp%
処理結果はTXT2データ

3. 3 一括正極点図データ処理

Calcで各種計算が始まり



処理された極点図が表示される

Rp%の最適化で、極点図の最適化が行われ、エラーが減少します。

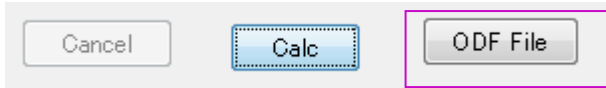
Search Rp% (1,1,1) 2.27% -> 2.29% (2,0,0) 4.4% -> 4.18% (2,2,0) 5.34% -> 4.89% Filemake success!!

Cancel Calc ODF File 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。

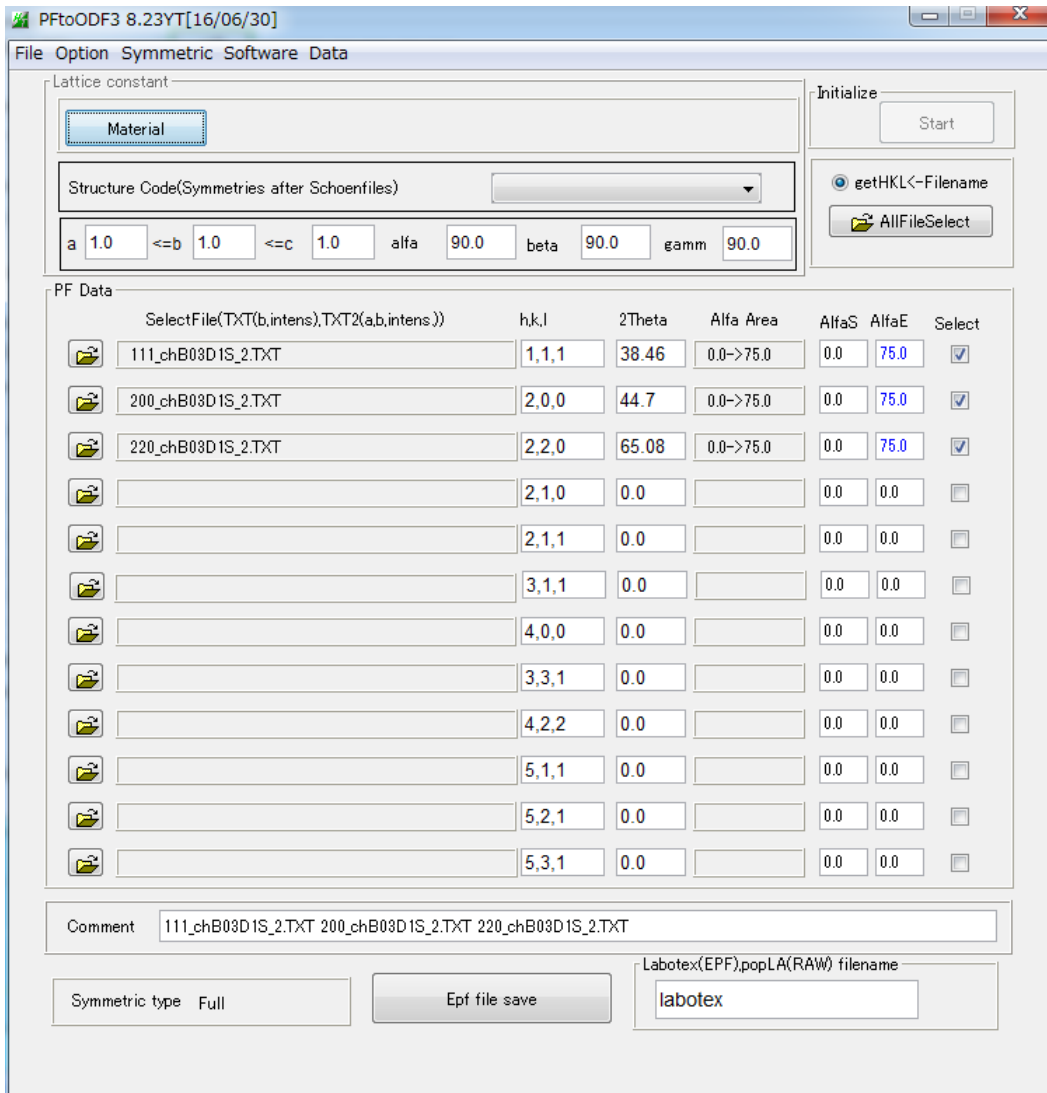
220_chB02D2S_2	22 KB	テキスト文書	2014/05/20 4:56
200_chB02D2S_2	22 KB	テキスト文書	2014/05/20 4:56
111_chB02D2S_2	22 KB	テキスト文書	2014/05/20 4:56
111	22 KB	RINT2000アスキー	2012/07/25 10:15
220	22 KB	RINT2000アスキー	2012/07/25 10:15
200	22 KB	RINT2000アスキー	2012/07/25 10:15

3. 4 StandardODF用入力データの作成

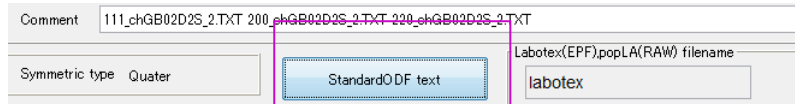
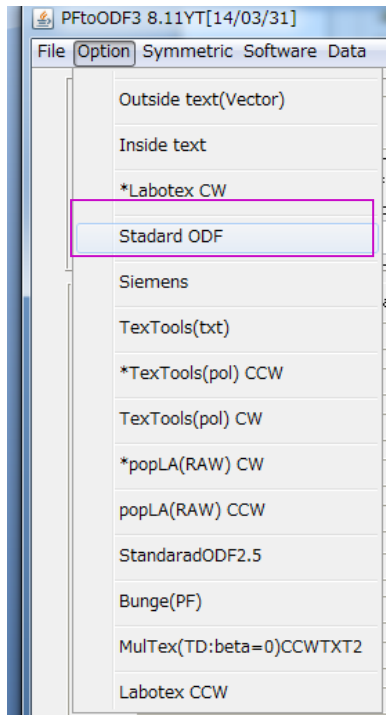


ODF File を押す。

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。



メニュー Option から StandardODF を選択



StandardODF に変化する。File から ConditionSave を行えばこの作業は不要

StandardODF で変換が行われます。

処理を行ったホルダに StandardODF ホルダが作られる。

111	22 KB	RINT2000アスキー	2012/07/25 10:15
200	22 KB	RINT2000アスキー	2012/07/25 10:15
220	22 KB	RINT2000アスキー	2012/07/25 10:15
111_chB02D2S_2	22 KB	テキスト文書	2014/05/20 4:56
200_chB02D2S_2	22 KB	テキスト文書	2014/05/20 4:56
220_chB02D2S_2	22 KB	テキスト文書	2014/05/20 4:56
StandardODF		ファイル フォルダ	2014/05/20 5:00

StandardODF ホルダに作成されるデータ

111_chB02D2S_2StdODF	9 KB	テキスト文書	2014/05/20 5:00
200_chB02D2S_2StdODF	9 KB	テキスト文書	2014/05/20 5:00
220_chB02D2S_2StdODF	9 KB	テキスト文書	2014/05/20 5:00

更に C:\YODF\PPFDATA 以下も同じデータが作成される。

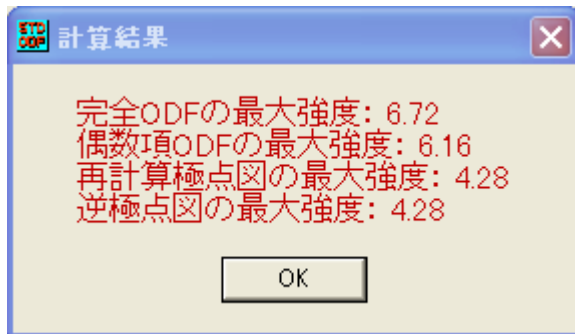
名前	サイズ	種類	更新日時
111_chB02D2S_2StdODF	9 KB	テキスト文書	2014/05/20 5:00
200_chB02D2S_2StdODF	9 KB	テキスト文書	2014/05/20 5:00
220_chB02D2S_2StdODF	9 KB	テキスト文書	2014/05/20 5:00

以上でStandardODF 向けデータ作成が完了

4. StandardODFで読み込む

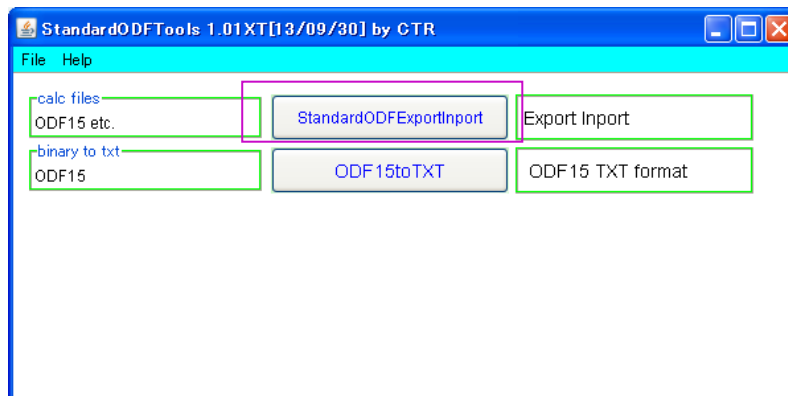
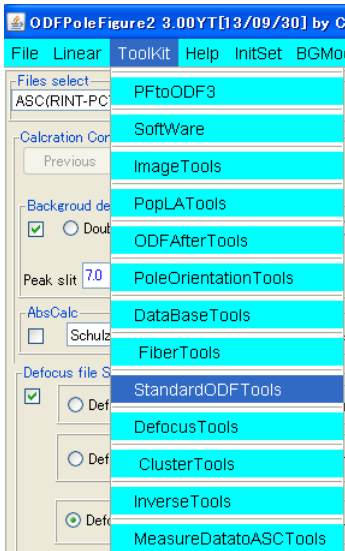


実行する。

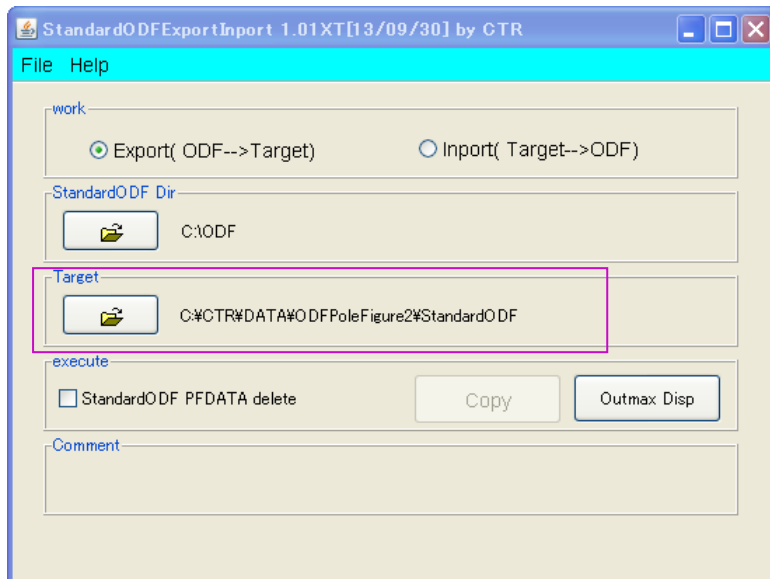


4. 1 StandardODFで処理した結果をExportする。

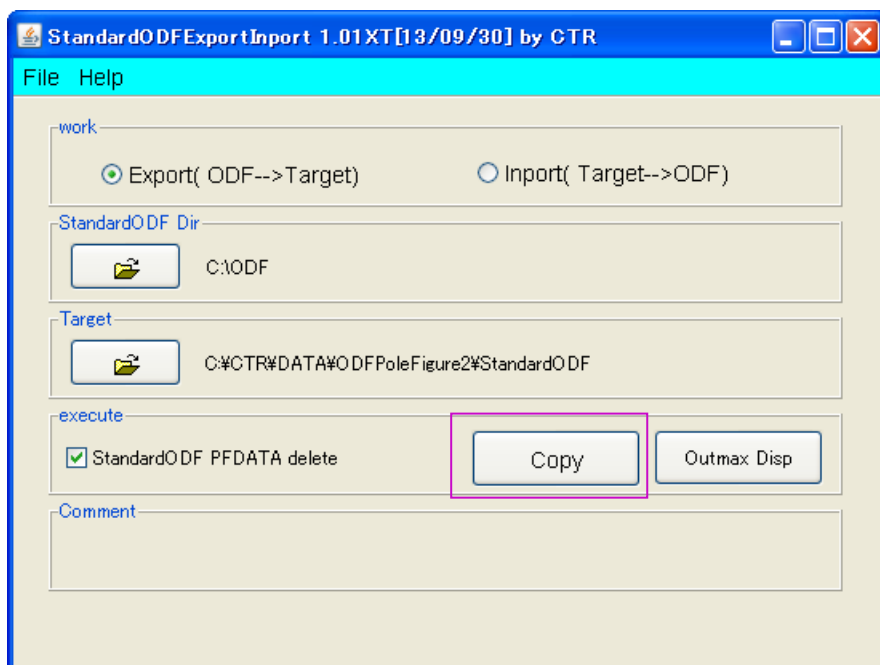
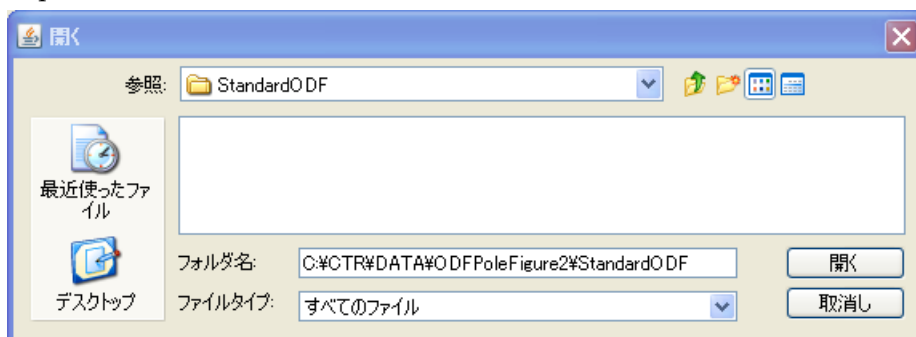
Exportすると、解析データを退避出来るので、後からの参照が便利になります。



StandardODFExportImport プログラムを選択



Export 先を指定



Copy keyでExportを行う。



が表示されればcopyは終了

Copy 先の確認

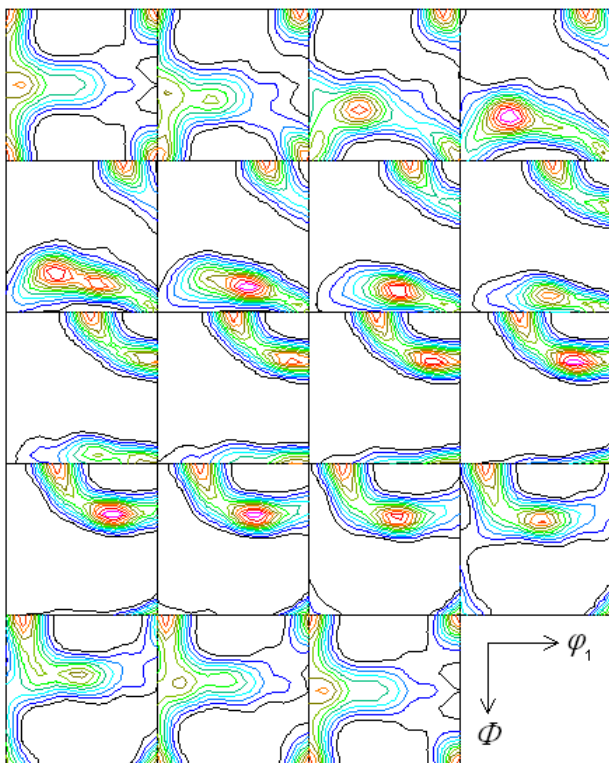
名前	サイズ	種類	更新日時
111_chB02D2S_2StdODF	9 KB	テキスト文書	2014/05/20 5:00
200_chB02D2S_2StdODF	9 KB	テキスト文書	2014/05/20 5:00
220_chB02D2S_2StdODF	9 KB	テキスト文書	2014/05/20 5:00
Data10	8 KB	テキスト文書	2014/05/20 5:04
Dtcubin1	1 KB	テキスト文書	2014/05/20 5:04
EVNCOEF	4 KB	ファイル	2014/05/20 5:04
ODDCOEF	3 KB	ファイル	2014/05/20 5:04
ODF13	5 KB	ファイル	2014/05/20 5:04
ODF14	28 KB	ファイル	2014/05/20 5:04
ODF15	28 KB	ファイル	2014/05/20 5:04
ODF16	88 KB	ファイル	2014/05/20 5:04
Outmax	1 KB	テキスト文書	2014/05/20 5:04
OUTPUT1	18 KB	テキスト文書	2014/05/20 5:04
OUTPUT2	72 KB	テキスト文書	2014/05/20 5:04
OUTPUT3	49 KB	テキスト文書	2014/05/20 5:04

このデータを `Import` すれば、StandardODF の等高線描画 ODFPLOT で表示可能になる。

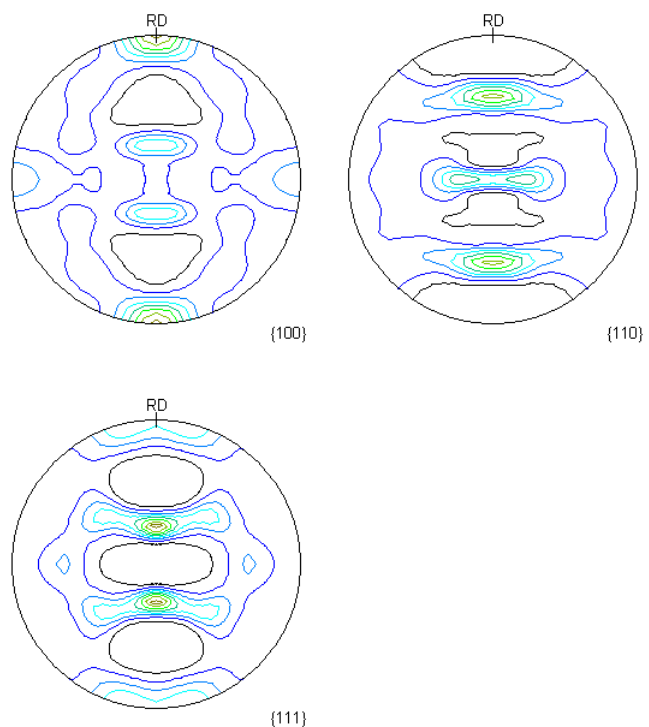
5. ODF 図、再計算極点図、逆極点図表示



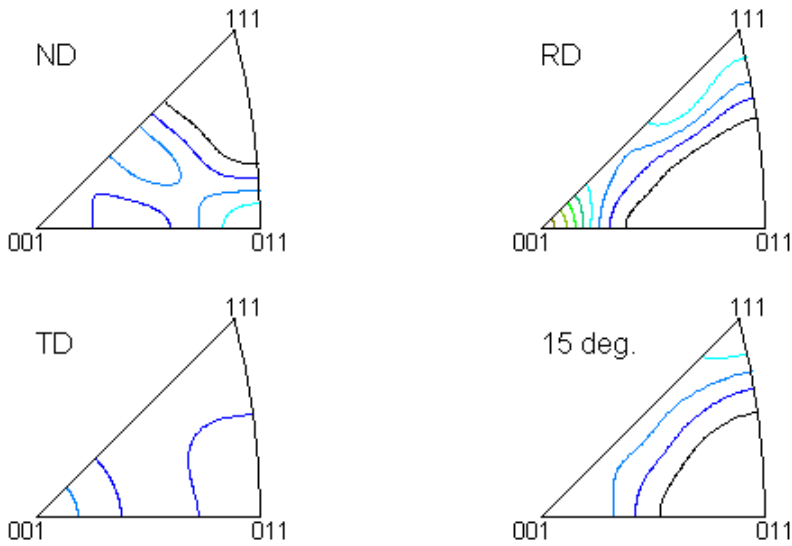
ODFPLOT ソフトウェアで描画する



Contour Levels: 0.5 1.0 1.5 2.0 2.5 3.0 3.5 4.0 4.5 5.0 5.5 6.0

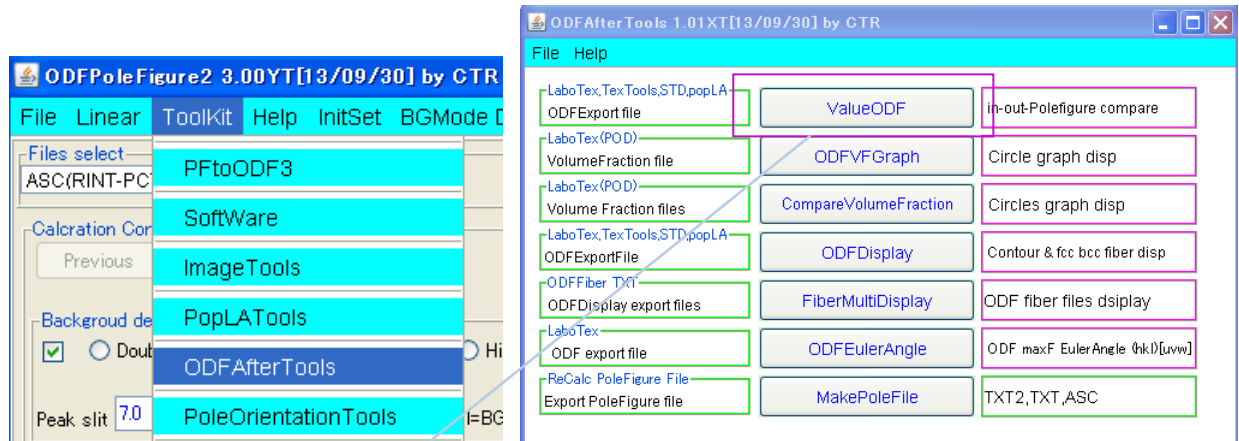


Contour Levels: 0.5 1.0 1.5 2.0 2.5 3.0 3.5 4.0



Contour Levels: 0.5 1.0 1.5 2.0 2.5 3.0 3.5 4.0

6. 配向評価総合パッケージCTRソフトウェア

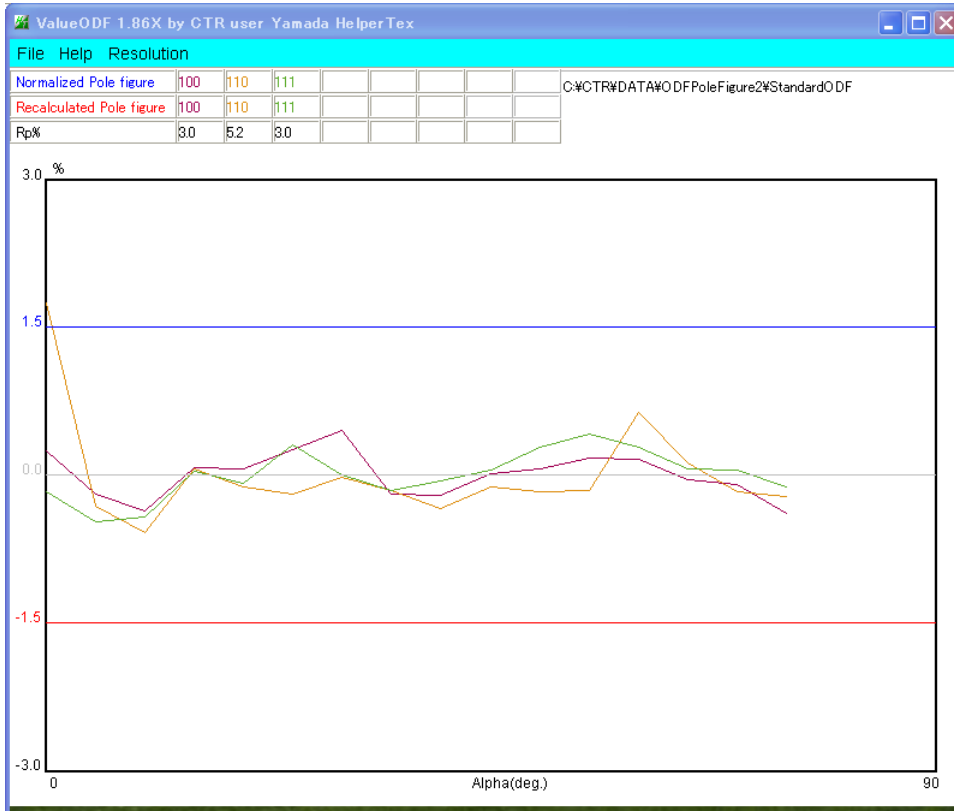


6. 1 ValueODF は入力極点図と再計算極点図の比較を行う。

ODF解析の結果から入力極点図と再計算極点図の比較が行え、入力極点図の整合性評価が可能



ValueODF で StandardODF の作業ディレクトリを選択



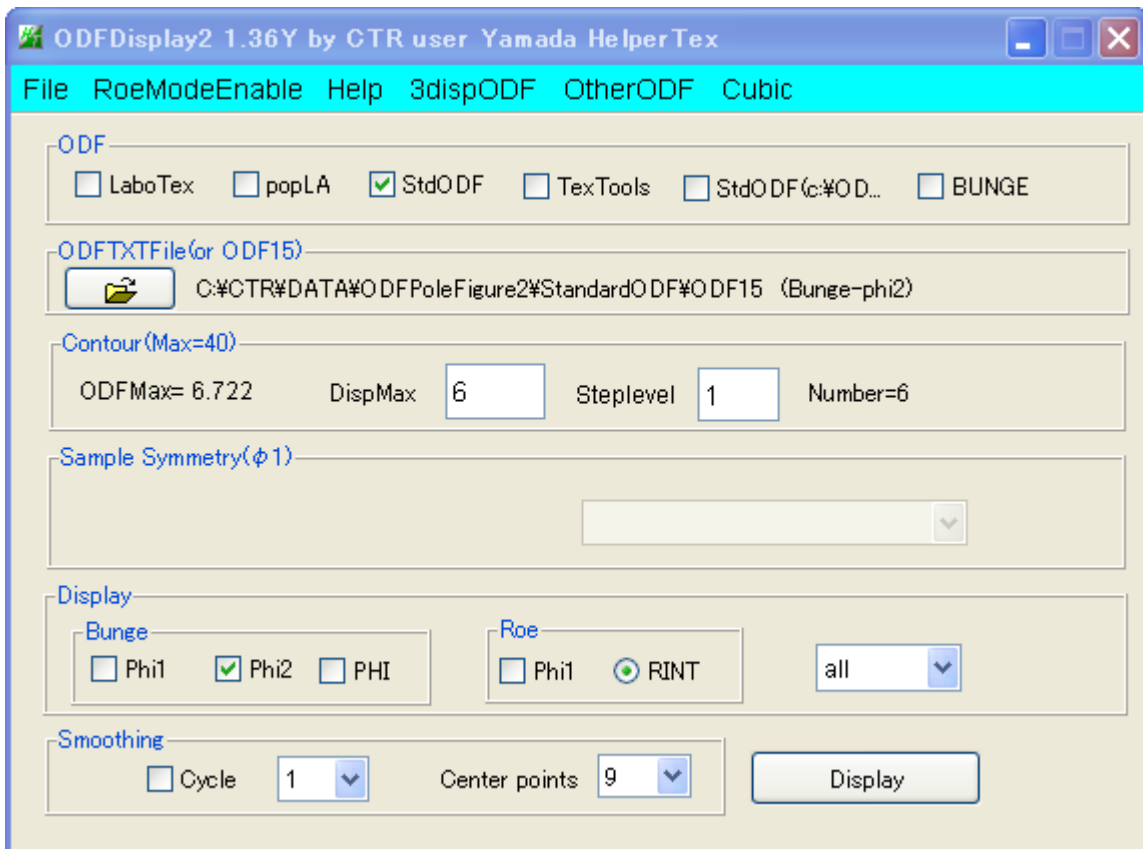
入力極点図と再計算極点図との差が 1.5%内であることは分かる。解析結果が正常であることが分かる。

又、入力極点図と再計算極点図の差がほぼ平坦であることから、適正な defocus 補正が行われている事が分かります。

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

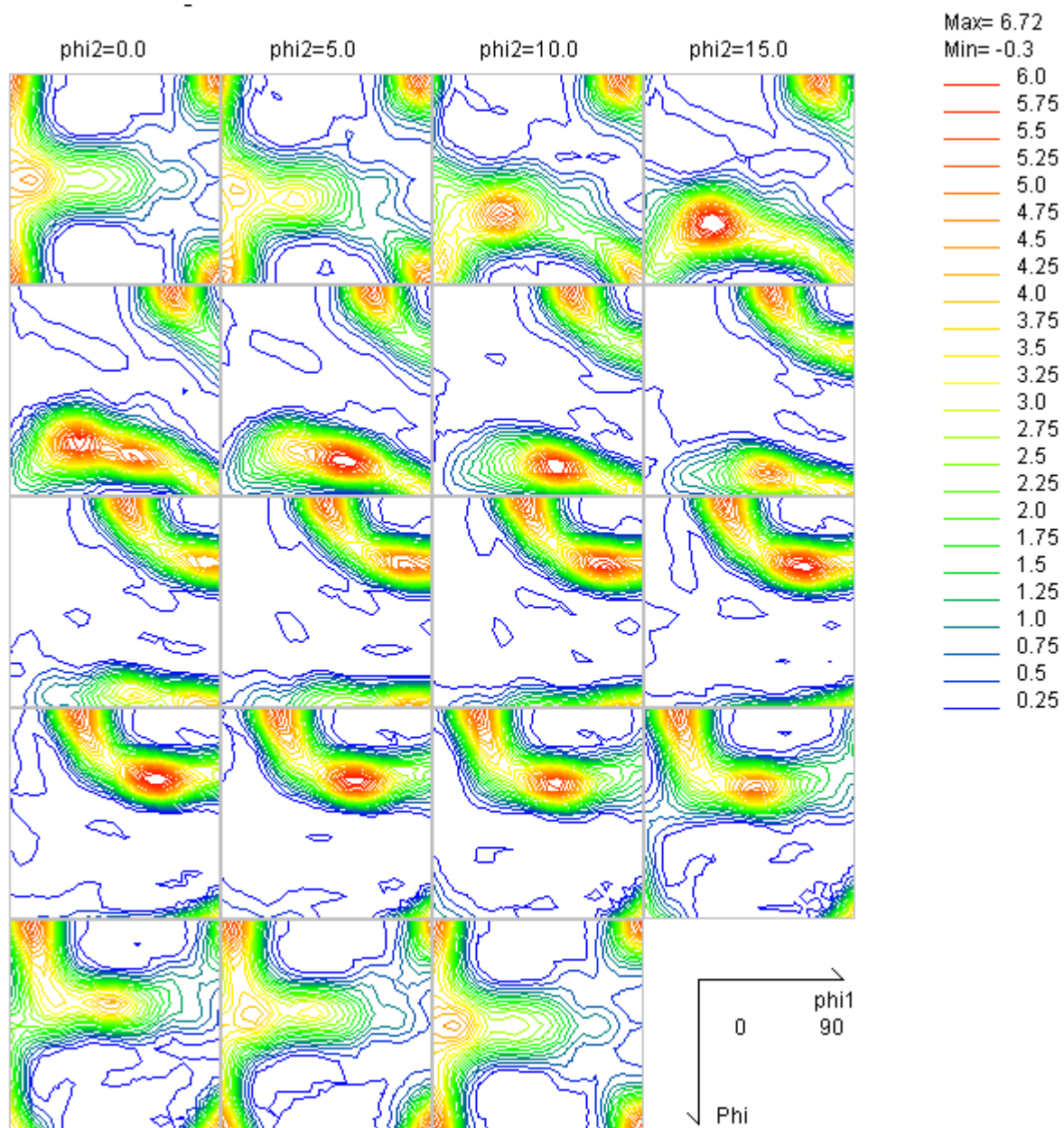
「7. 7. 3 登録 defocus 曲線を変更する」により修正する事が可能

6, 2 ODFDisplay2 で StandardODF 作業領域の ODF15 を選択

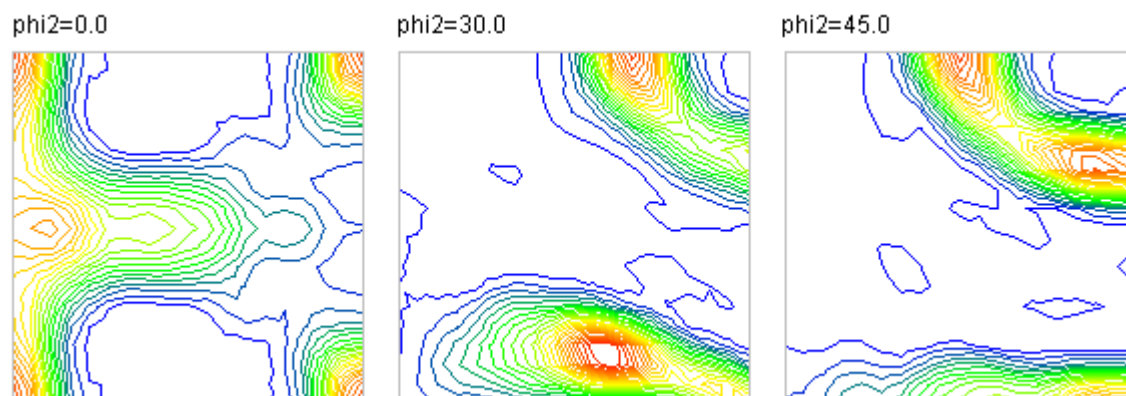


最大方位密度は 6.72 である。Steplevel を 0.25 として表示 (分割Max は 40)

Bunge-Roe 表示も可能

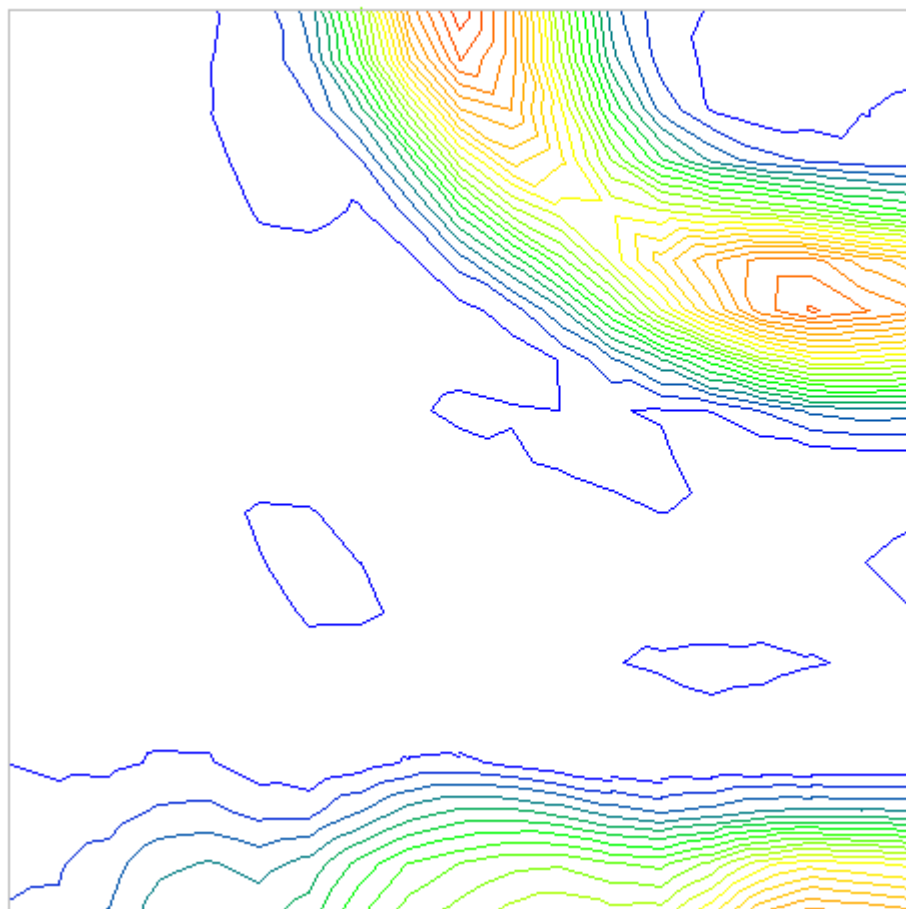


3 面表示



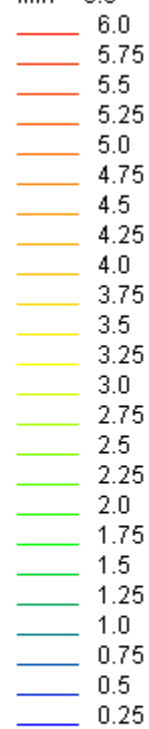
1 面表示

phi2=45

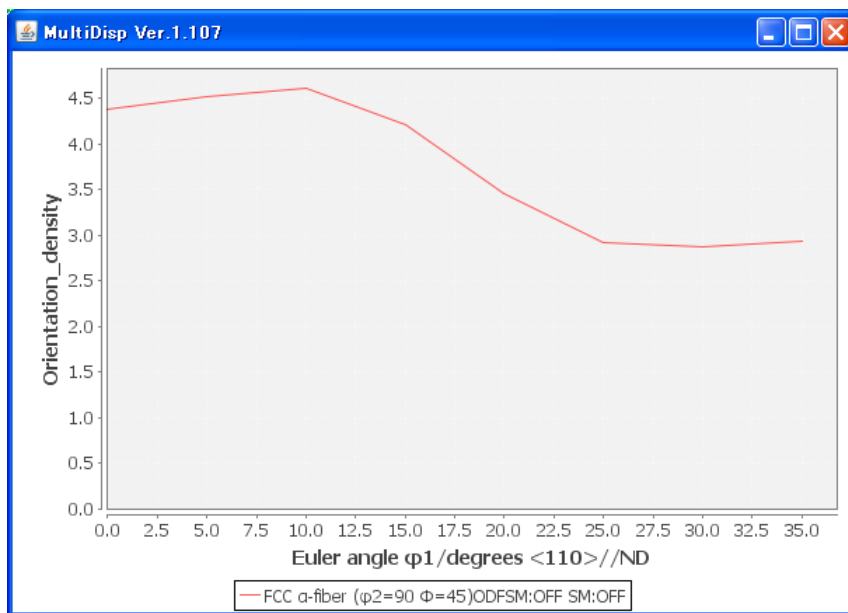
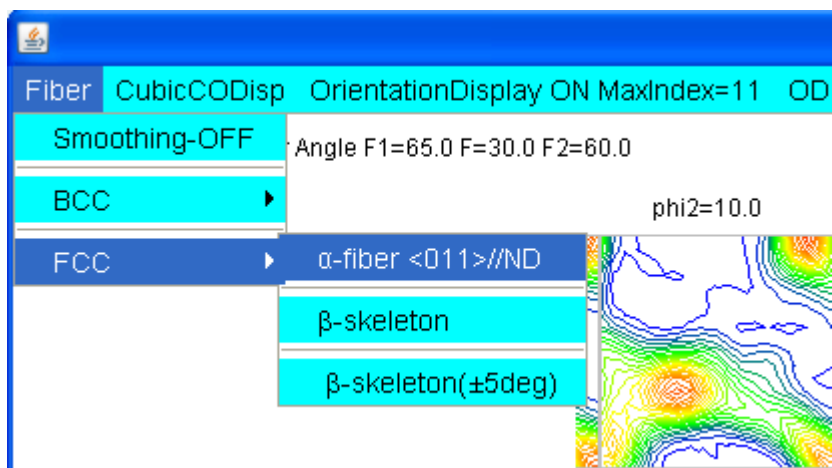


Max= 5.66

Min= -0.3



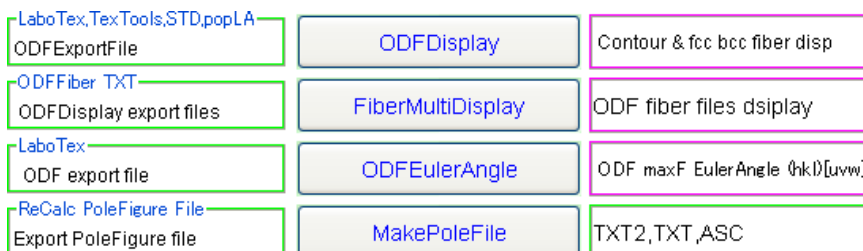
6. 2. 1 Fiberを表示



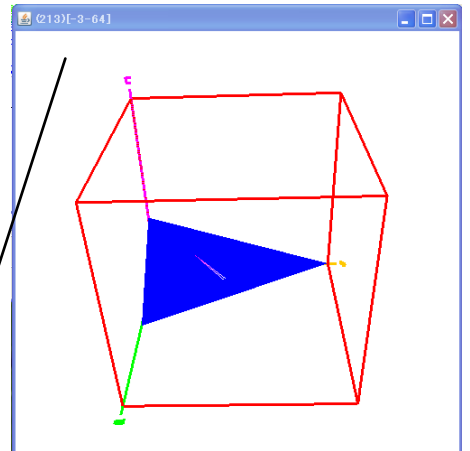
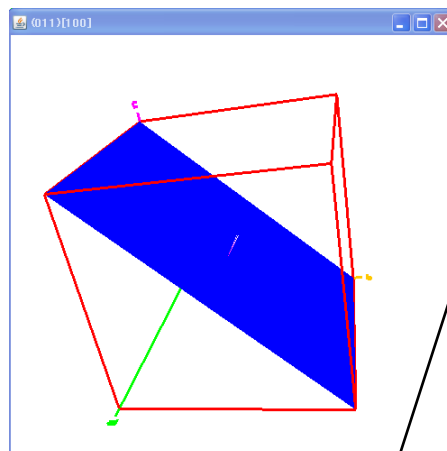
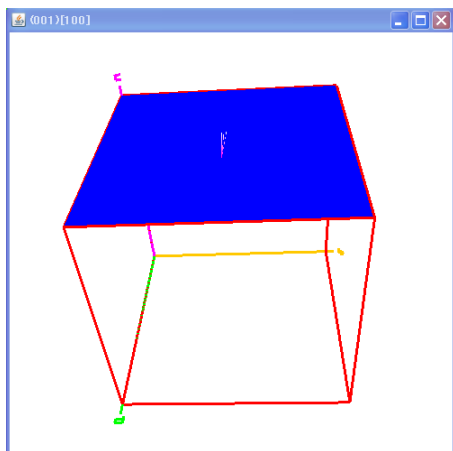
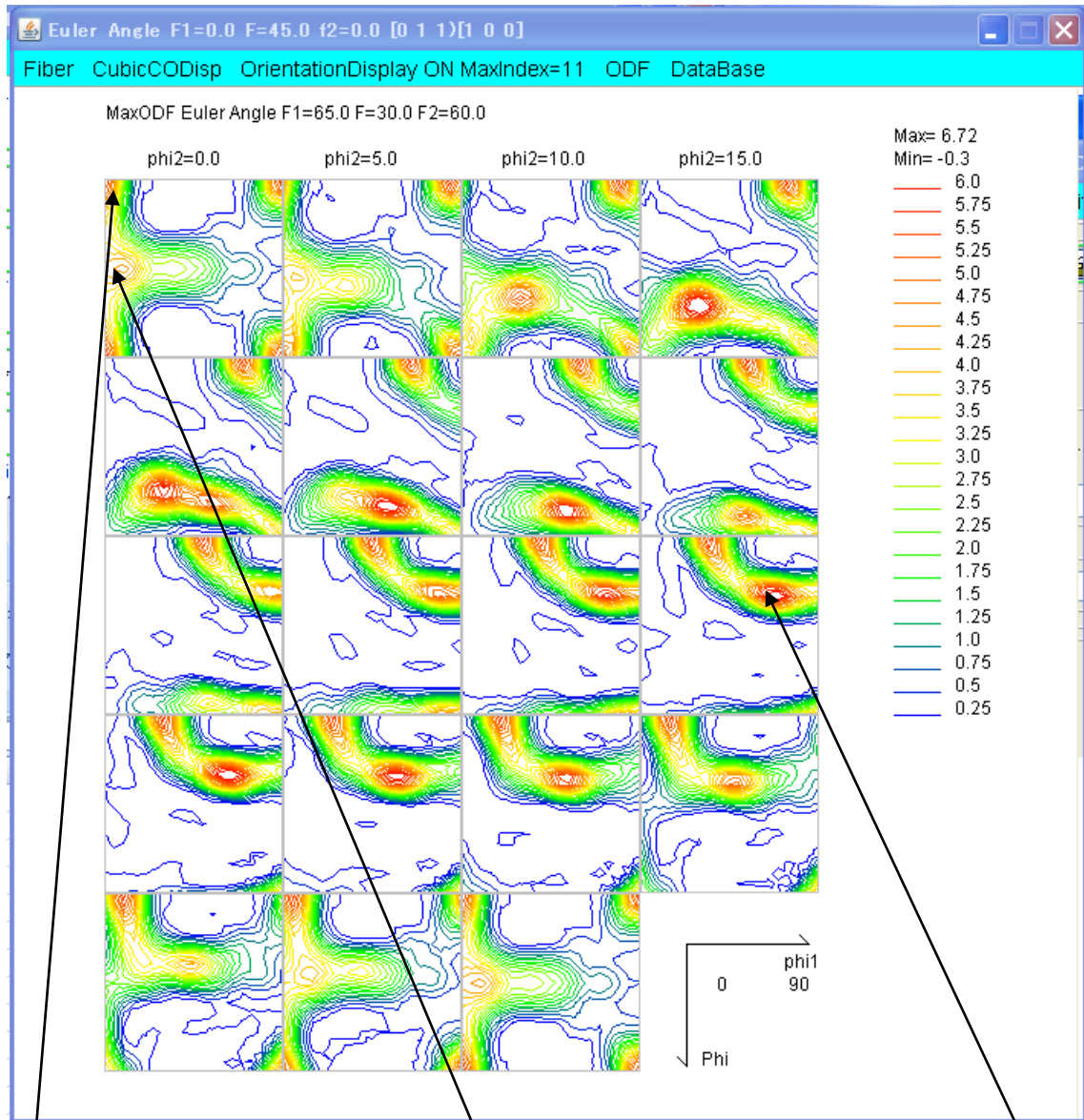
解析結果のファイルが作成される。



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

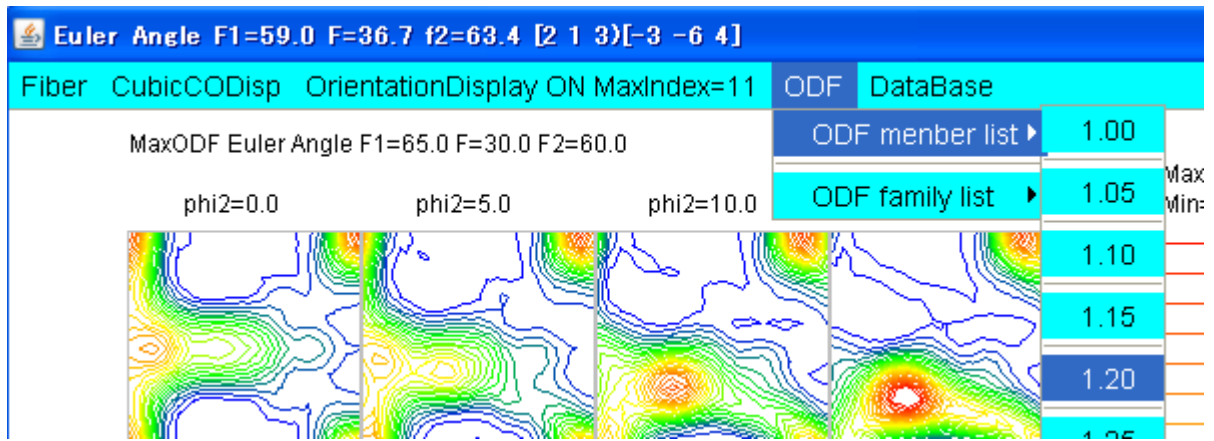


6. 2. 2 ODF図マウスクリックによる方位解析



Euler Angle F1=59.0 F=36.7 f2=63.4 [2 1 3][-3 -6 4]
 Fiber CubicCODisp OrientationDisplay ON MaxIndex=10 ODF

6. 2. 3 データベースによるODF方位密度L i s t

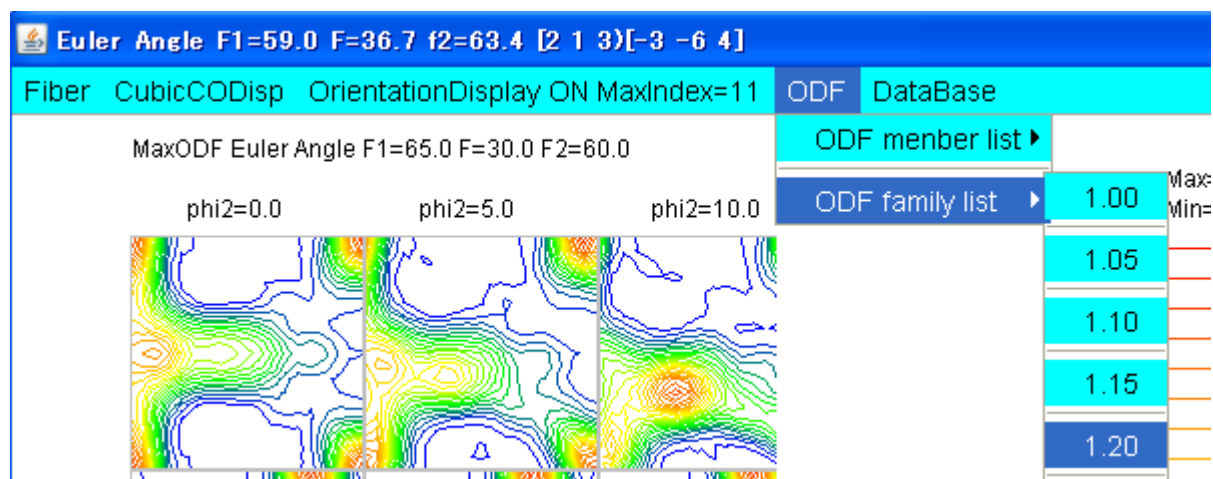


データベースに登録されている位置の方位密度のL i s tを作成

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

Orientation	ϕ_1	Φ	ϕ_2	ODF
(0 0 1)[1 0 0]	0.0	0.0	0.0	5.67
(0 1 0)[1 0 0]	0.0	90.0	0.0	5.67
(0 1 0)[0 0 1]	90.0	90.0	0.0	5.67
(0 0 1)[0 -1 0]	90.0	0.0	0.0	5.67
(0 0 1)[0 -1 0]	0.0	0.0	90.0	5.67
(1 0 0)[0 -1 0]	0.0	90.0	90.0	5.67
(1 0 0)[0 0 1]	90.0	90.0	90.0	5.67
(0 0 1)[-1 0 0]	90.0	0.0	90.0	5.67
(2 1 3)[-3 -6 4]	58.98	36.7	63.43	5.39
(4 11 4)[11 -8 11]	41.65	71.13	19.98	4.93
(1 3 1)[3 -2 3]	42.13	72.45	18.43	4.93
(1 3 2)[6 -4 3]	27.03	57.69	18.43	4.35
(0 1 1)[1 0 0]	0.0	45.0	0.0	4.34
(1 1 0)[0 0 1]	90.0	90.0	45.0	4.34
(1 0 1)[0 -1 0]	0.0	45.0	90.0	4.34
(4 4 11)[-11 -11 8]	90.0	27.21	45.0	4.11
(1 1 3)[-3 -3 2]	90.0	25.24	45.0	4.11
(0 1 3)[1 0 0]	0.0	18.43	0.0	3.84
(0 3 1)[1 0 0]	0.0	71.57	0.0	3.84
(3 1 0)[0 0 1]	90.0	90.0	71.57	3.84
(1 3 0)[0 0 1]	90.0	90.0	18.43	3.84
(1 0 3)[0 -1 0]	0.0	18.43	90.0	3.84
(3 0 1)[0 -1 0]	0.0	71.57	90.0	3.84
(0 1 2)[1 0 0]	0.0	26.57	0.0	3.75
(0 2 1)[1 0 0]	0.0	63.43	0.0	3.75
(2 0 1)[0 -1 0]	0.0	63.43	90.0	3.75
...

F a m i l y で扱う場合



F a m i l y 別 L i s t を作成

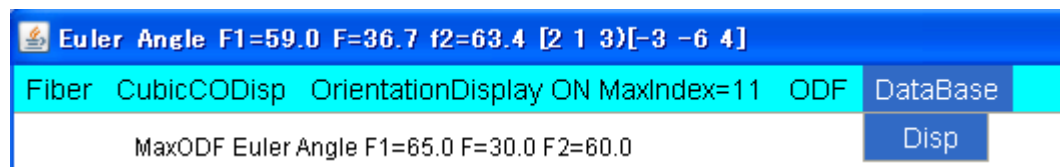
The screenshot shows a text file with the following content:

Orientation	ϕ_1	Φ	ϕ_2	ODF
{0 0 1}<1 0 0> cube	0.0	0.0	0.0	5.67
{1 3 2}<6 -4 3> S	27.03	57.69	18.43	5.39
{4 4 11}<-11 -11 8> Taylor	90.0	27.21	45.0	4.93
{1 1 3}<-3 -3 2> Q2	90.0	25.24	45.0	4.93
{0 1 1}<1 0 0> Goss	0.0	45.0	0.0	4.34
{0 1 3}<1 0 0>	0.0	18.43	0.0	3.84
{0 1 2}<1 0 0> Q1	0.0	26.57	0.0	3.75
{1 1 4}<-1 -7 2>	54.74	19.47	45.0	3.17
{1 1 2}<-1 -1 1> copper	90.0	35.26	45.0	3.07
{1 0 1}<-1 -2 1> Brass	35.26	45.0	90.0	2.97
{0 1 1}<5 -2 2> L	29.5	45.0	0.0	2.86
{2 1 3}<-1 -4 2> R	46.91	36.7	63.43	2.77
{3 6 2}<-8 5 -3> Q3	18.43	73.4	26.57	2.57
{1 1 0}<1 -1 1> P	35.26	90.0	45.0	1.96

6. 2. 4 結晶方位データベース

2 4 個の結晶方位が登録されています。

メンテナンスは D i s p で表示させ、選択する。



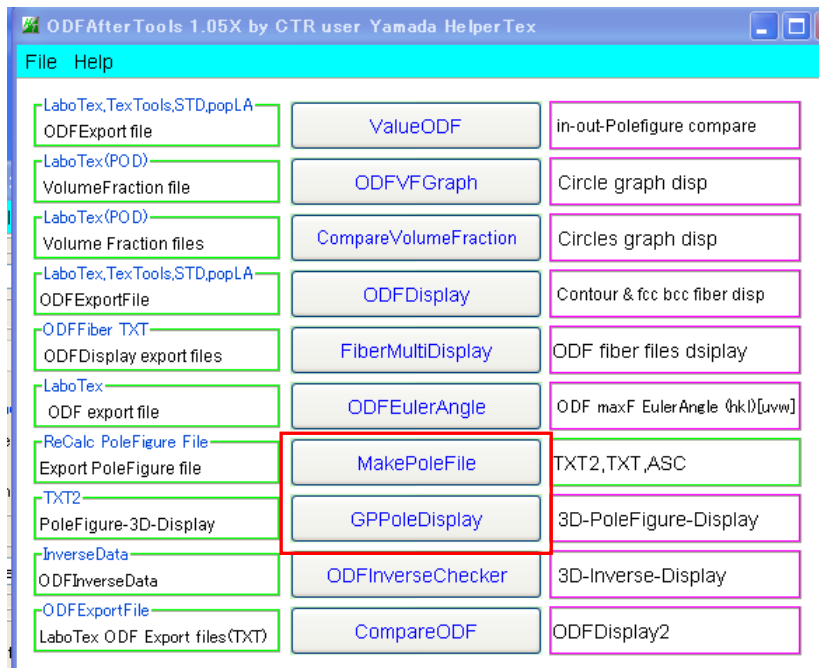
The screenshot shows a dialog box titled "DataBase" with the following content:

<input checked="" type="checkbox"/> {0 0 1}<1 0 0> cube	<input checked="" type="checkbox"/> {1 0 1}<-1 -2 1> Brass	<input checked="" type="checkbox"/> {1 1 2}<1 1 -2> copper	<input checked="" type="checkbox"/> {0 1 1}<1 0 0> Goss
<input checked="" type="checkbox"/> {0 0 1}<1 0 0> RW(or H)	<input checked="" type="checkbox"/> {1 1 0}<1 -1 1> P	<input checked="" type="checkbox"/> {1 1 1}<-1 -1 2>	<input checked="" type="checkbox"/> {0 1 1}<2 -5 5>
<input checked="" type="checkbox"/> {5 2 5}<1 -5 1>	<input checked="" type="checkbox"/> {0 1 3}<1 0 0>	<input checked="" type="checkbox"/> {1 2 2}<-2 -2 1>	<input checked="" type="checkbox"/> {1 1 3}<-1 -1 0>
<input checked="" type="checkbox"/> {1 1 2}<1 -1 0>	<input checked="" type="checkbox"/> {2 3 3}<0 -1 1>	<input checked="" type="checkbox"/> {1 1 1}<0 -1 1>	<input checked="" type="checkbox"/> {2 1 3}<-1 -4 2> R
<input checked="" type="checkbox"/> {2 1 3}<-3 -6 4> S	<input checked="" type="checkbox"/> {1 1 4}<-1 -7 2>	<input checked="" type="checkbox"/> {4 4 11}<-11 -11 8> Taylor	<input checked="" type="checkbox"/> {0 0 1}<2 -1 0> CH
<input checked="" type="checkbox"/> {0 1 2}<1 0 0> Q1	<input checked="" type="checkbox"/> {1 1 3}<-3 -3 2> Q2	<input checked="" type="checkbox"/> {3 6 2}<-8 5 -3> Q3	<input type="checkbox"/> {0 1 1}<5 -2 2> L

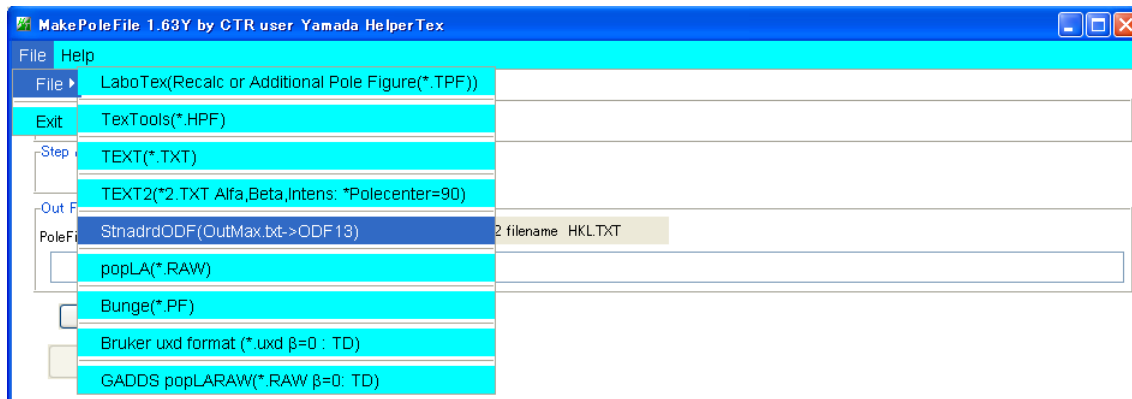
Buttons: OK, Cancel

6. 3 再計算極点図の表示

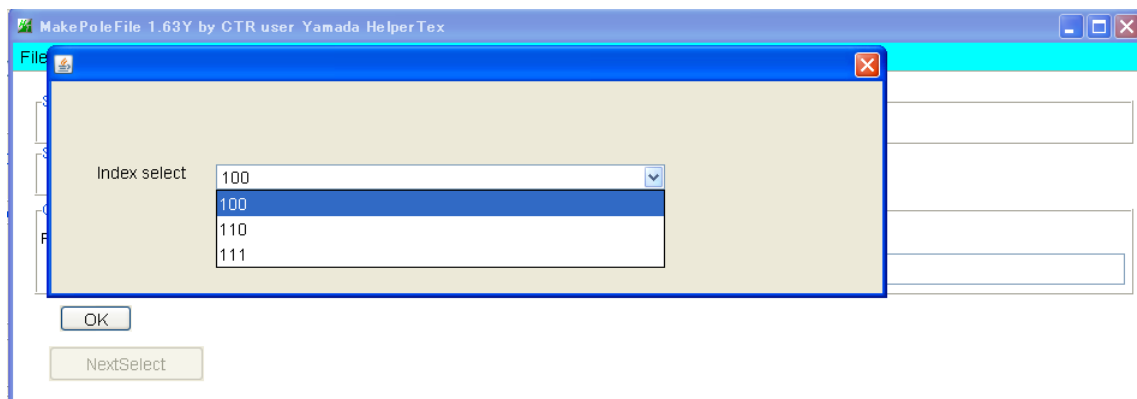
ODFPoleFigure2 → ODFAfter の MakePoleFile により StandardODF の極点図を TXT2 に変換
変換した TXT2 を GPPoleDisplay で描画

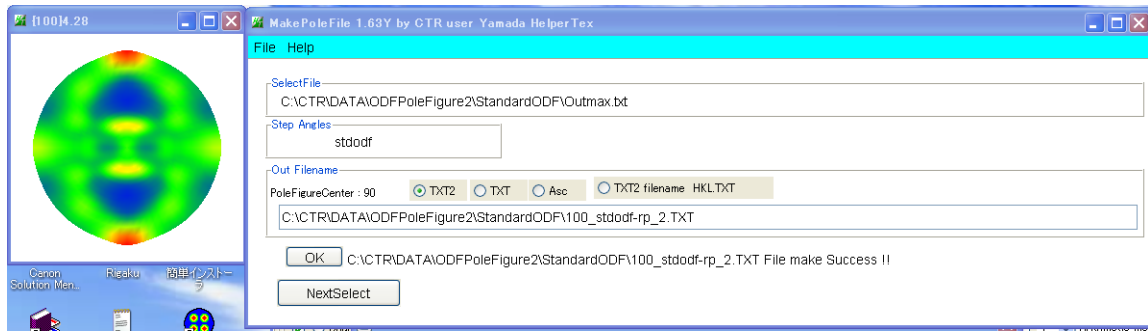


MakePoleFile で StandardODF が作成した OutMax ファイルを選択



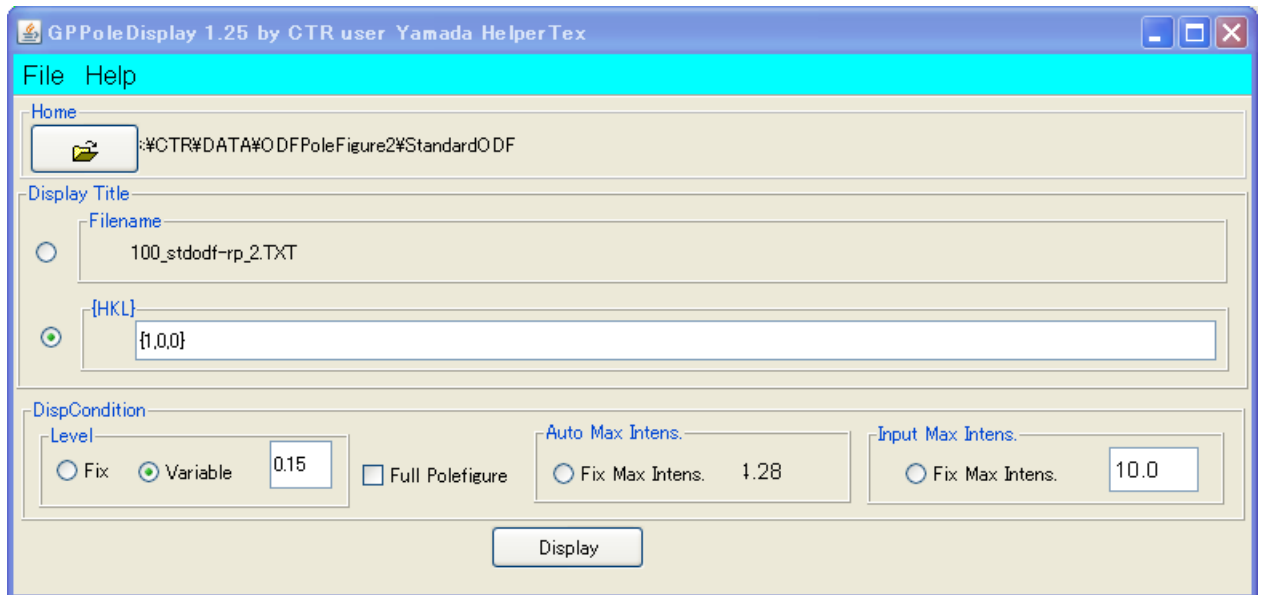
TXT2 に変換する極点図を選択



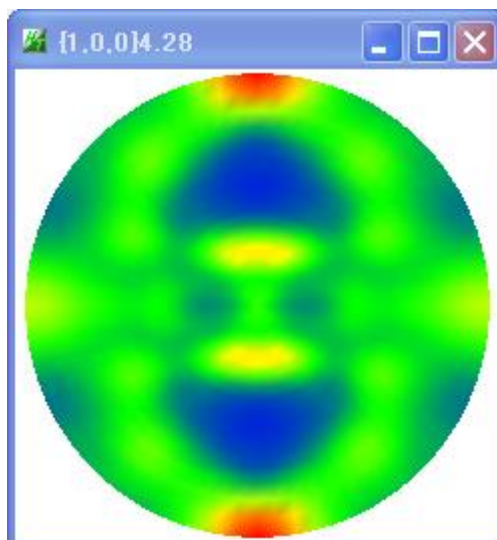


TXT2 ファイルが作成される。

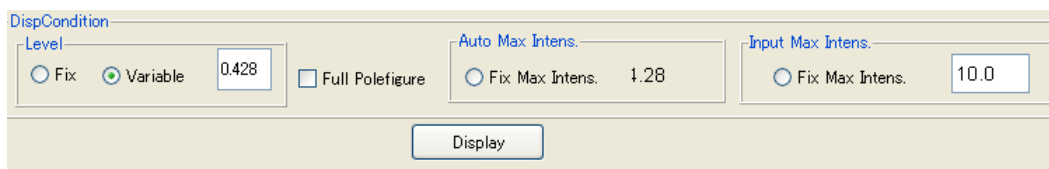
GPPoleDisplay で TXT2 を選択



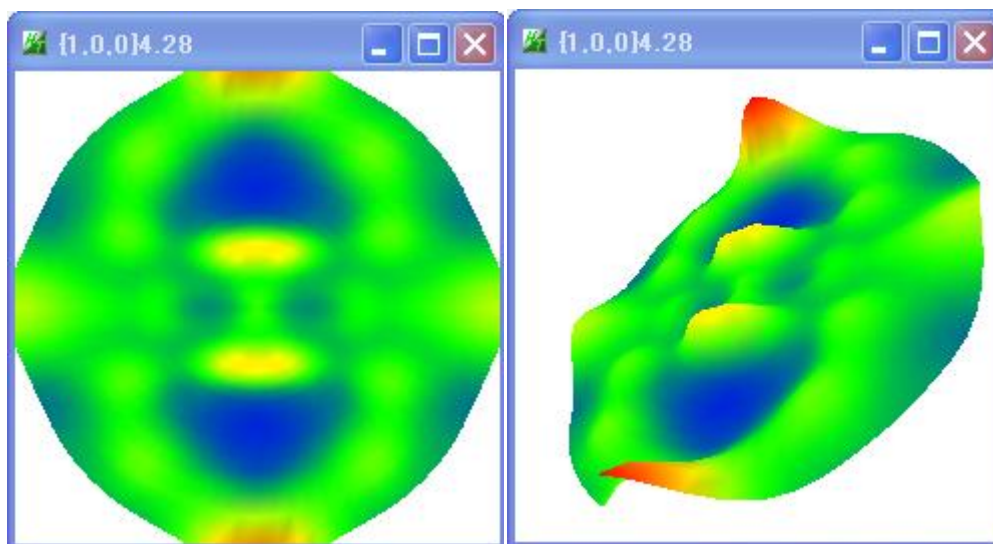
Display で描画 Max 密度が 4.28 が確認出来る



Level は $4.28 \times 0.1 = 0.428$ を入力して Display

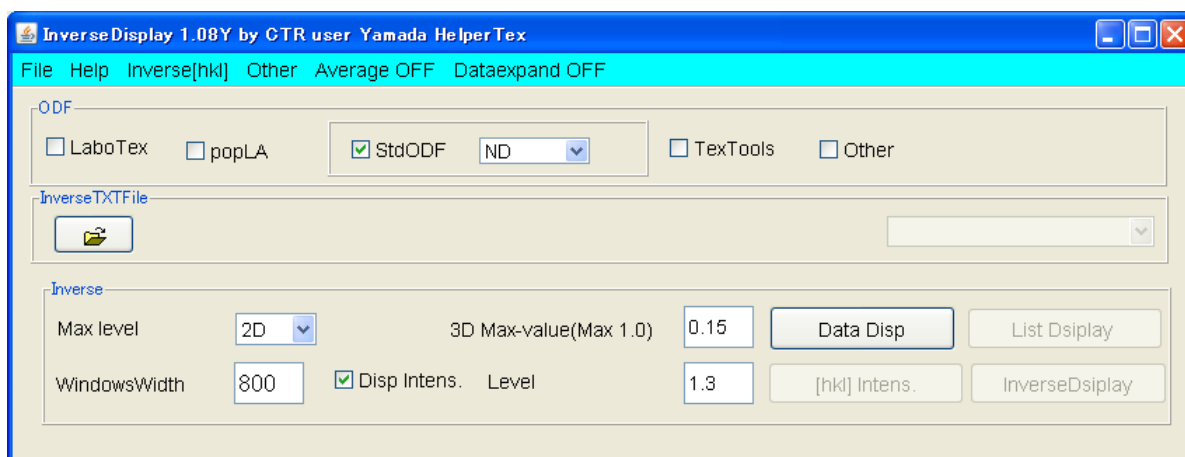


極図形上にマウスを移動させ、クリックして動かすと 3D が傾いて表示されます。



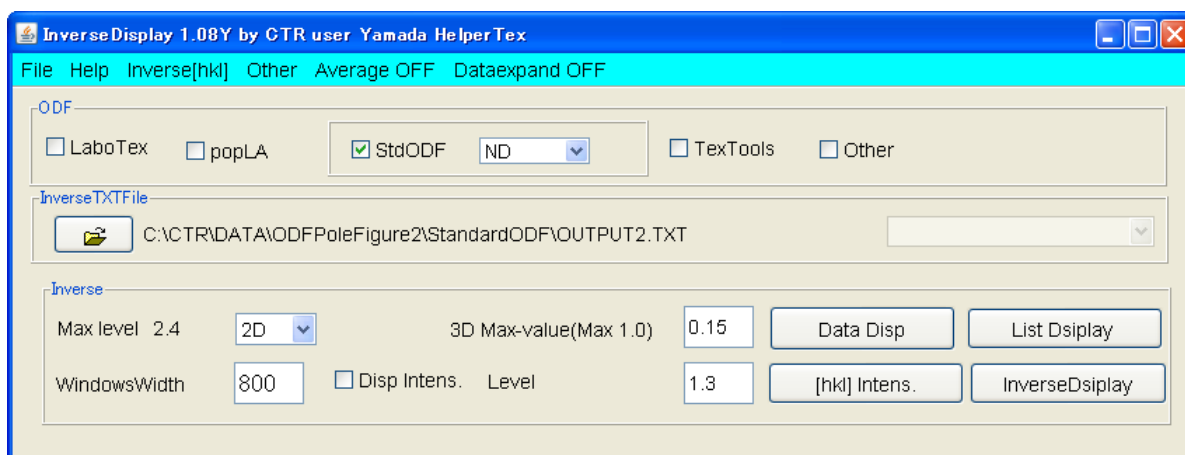
6. 4 逆極点図の表示

ODFDisplay2 → InverseTools → InverseDisplay で逆極点図が表示出来ます。

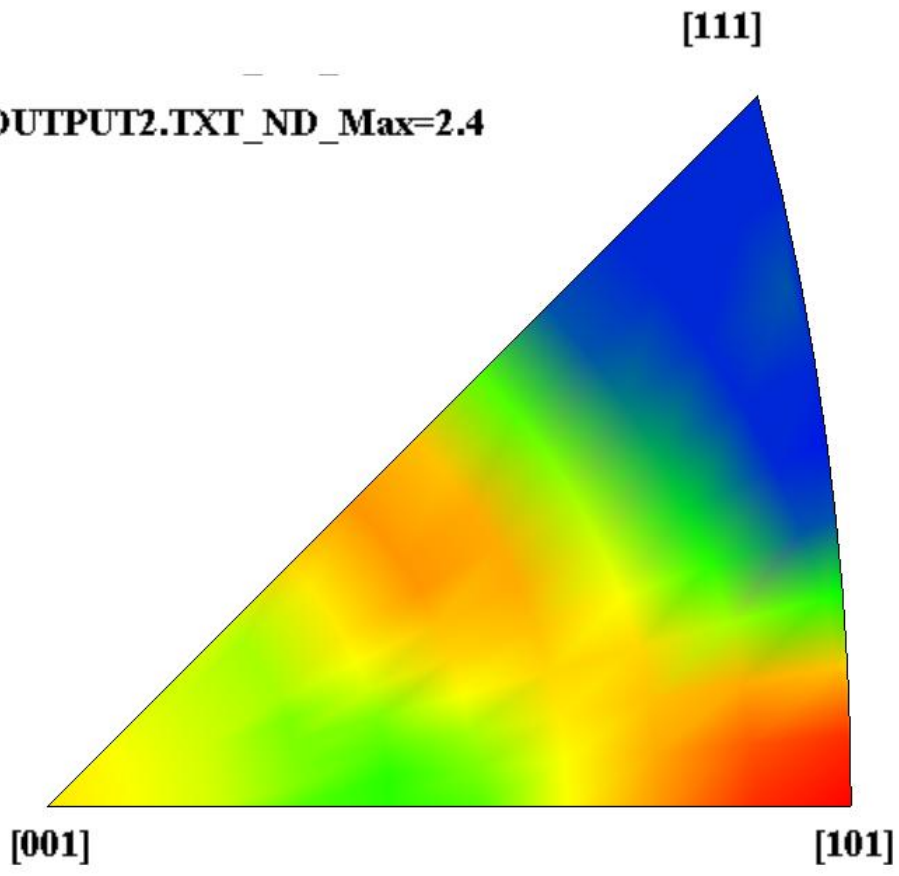


StandardODF が作成した OUTPUT2.TXT を開く

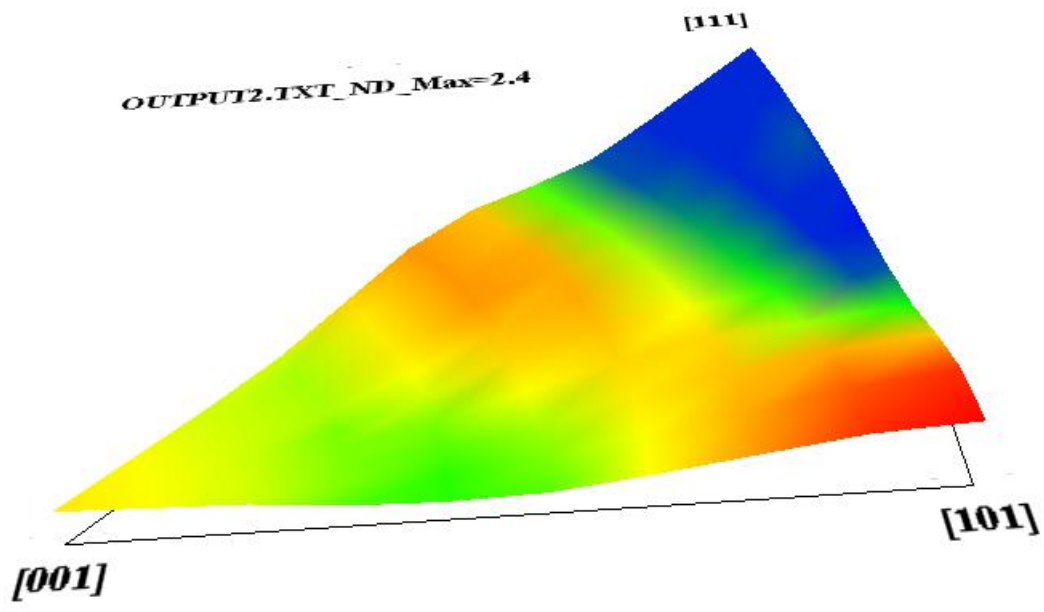
DataDisp → ListDisplay → [hkl]Intens → InverseDisplay で逆極点図を表示



OUTPUT2.TXT_ND_Max=2.4



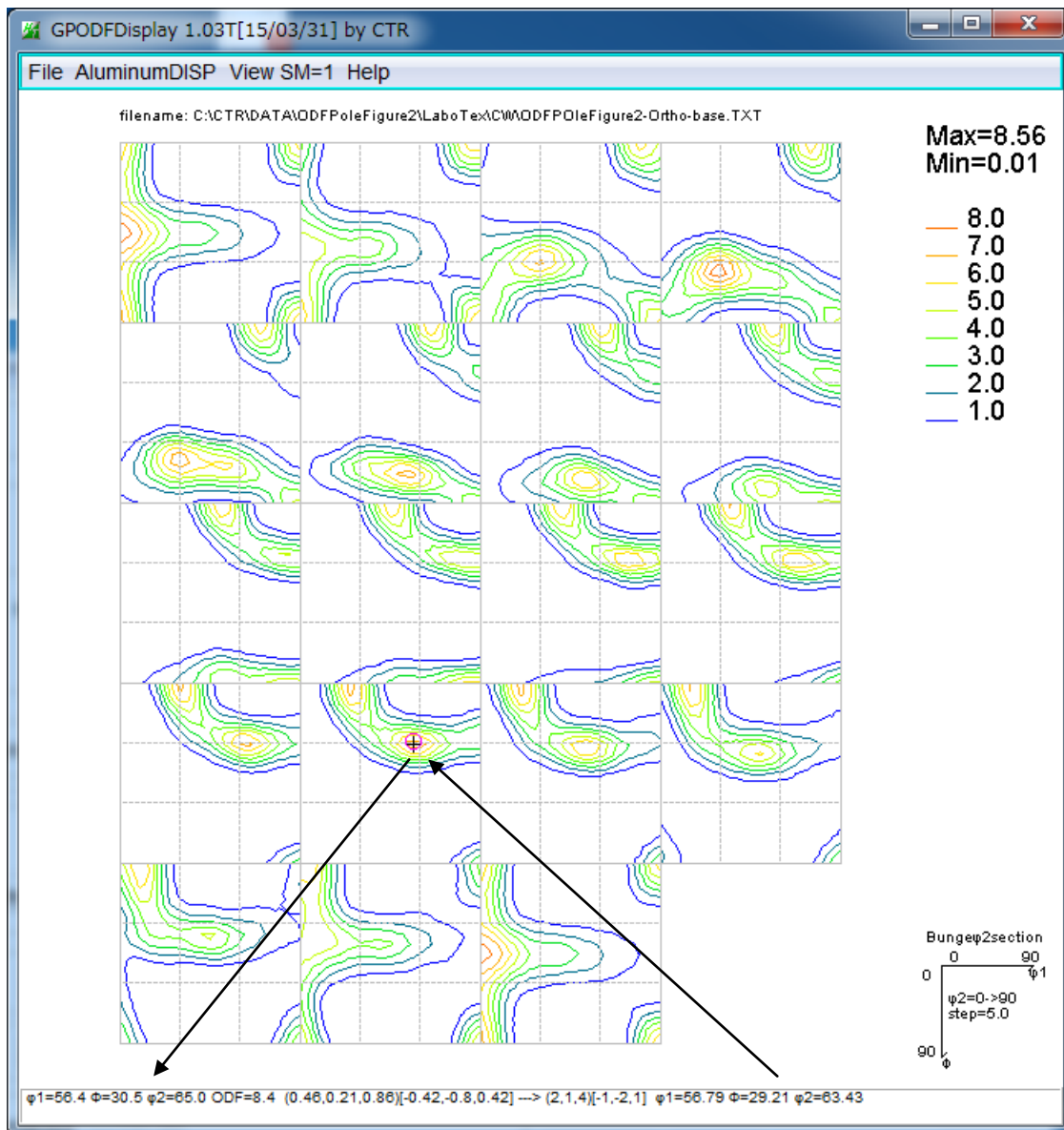
OUTPUT2.TXT_ND_Max=2.4



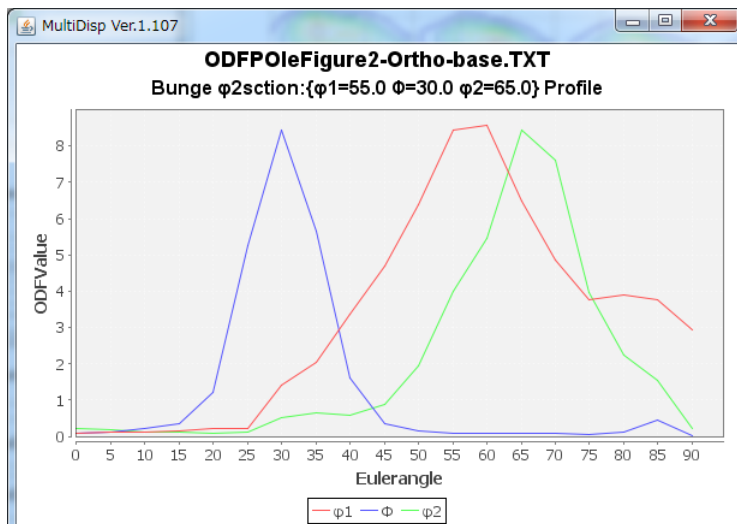
6. 5 GPODFDisplay機能

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

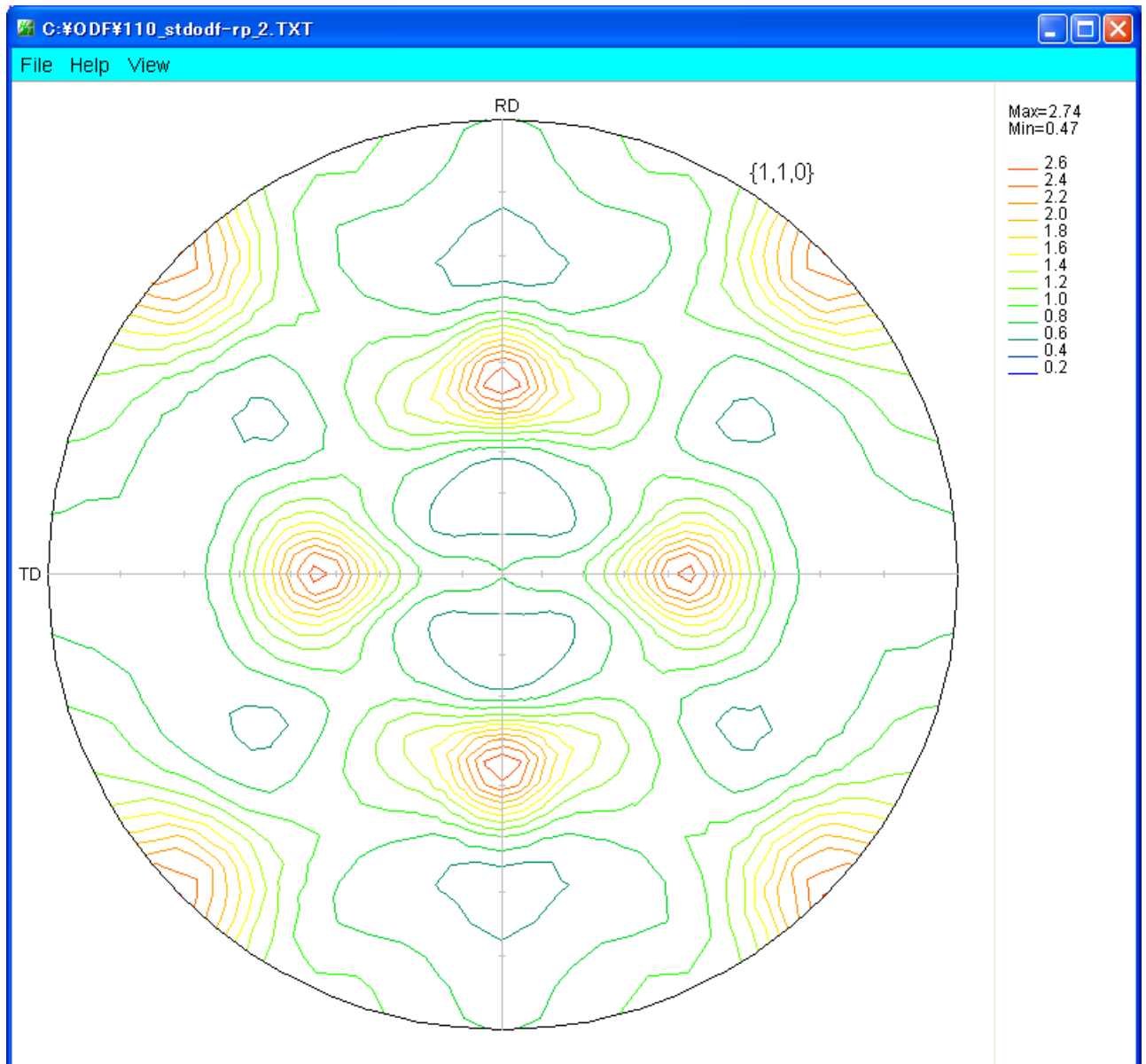


マウス右クリックで、 $\phi_1=55, \Phi=30, \phi_2=65$ を通過する ϕ_1, Φ, ϕ_2 プロファイルを表示



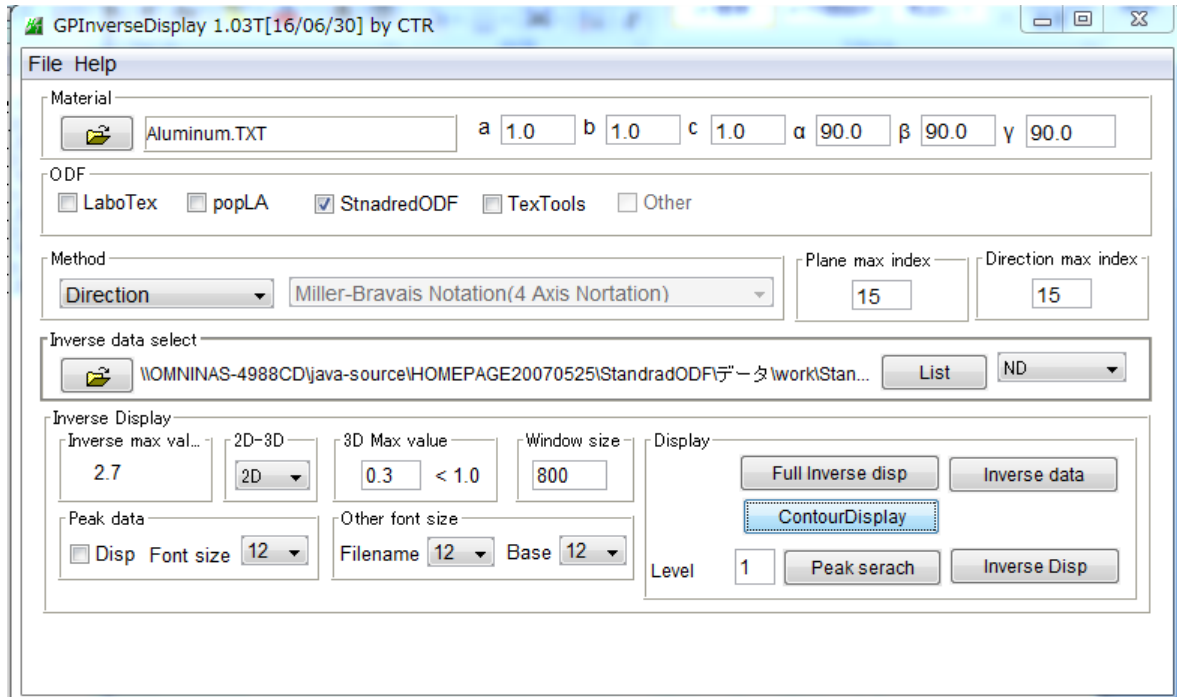
6. 6 再計算極点図の等高線表示

6. 3でStandardODFの再計算極点図をTXT2ファイルに変換されていれば等高線表示も可能になります。



6. 7 逆極点解析

GPInverseDisplay ソフトウェアで InverseCubicContourDisplay 用ファイル作成



ContourDisplay で逆極点図を表示し逆極点図上でマウスカーソルを移動させ Z=の最大値を探しマウスクリックで、[101]が決定される。

