

ODF解析のための準備

2014年03月16日

HelperTex Office

山田 義行

odftex@ybb.ne.jp

目次

1. 概要
2. TXT2データ
3. データの流れ
4. PFTtoODF3ソフトウェアの起動
5. PFTtoODF3の機能
6. TXT2データの読み込み
7. ODFの切り替え
8. 材料情報取得
9. LaboTexのデータ作成
10. TextToolsのデータ作成
11. StandardODFのデータ作成

1. 概要

前回、「アルミニウム材料の測定とデータ補正」で計算した結果 (TXT2) からODF解析前処理を
紹介します。各種ODF解析を行うためには、ODF解析用にデータ変換が必要になります。

変換するソフトウェアは、CTRパッケージソフトウェアのPFtoODF3ソフトウェアです。

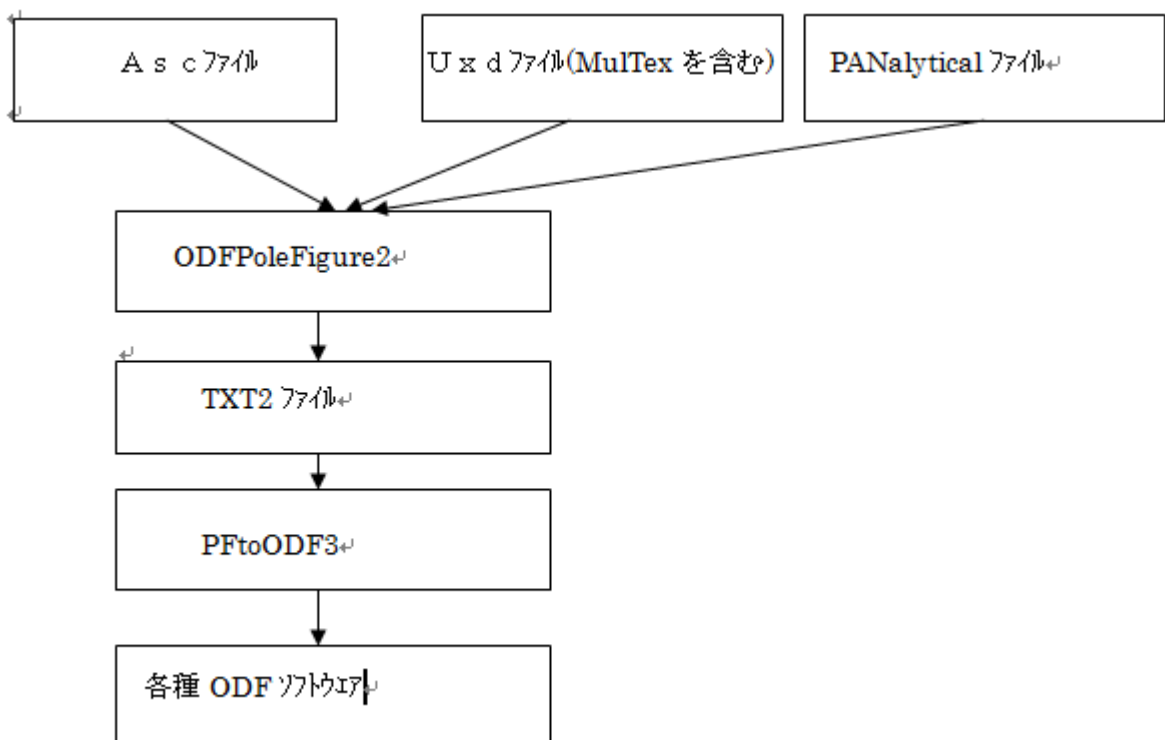
2. TXT2データ

TXT2ファイルは、(α 、 β 、極密度) のテキストデータで、 α 軸は極点図の中心が90度で
極点図の外側が0度、 β 軸はRDが0度で、データ回転はCCW、極密度は平均値が1.0のデータ。

111_chB02D1S_2	2014/03/15 18:32	テキスト文書	22 KB
200_chB02D1S_2	2014/03/15 18:32	テキスト文書	22 KB
220_chB02D1S_2	2014/03/15 18:32	テキスト文書	22 KB

15.0	0.0	0.311
15.0	5.0	0.3338
15.0	10.0	0.3473
15.0	15.0	0.3219
15.0	20.0	0.311
15.0	25.0	0.4649
15.0	30.0	0.9051
15.0	35.0	1.5882
15.0	40.0	1.5201
15.0	45.0	1.0571
15.0	50.0	0.8525
15.0	55.0	0.6075
15.0	60.0	0.4781
15.0	65.0	0.4395
15.0	70.0	0.4103
15.0	75.0	0.4665
15.0	80.0	0.9628
15.0	85.0	2.183
15.0	90.0	2.1309

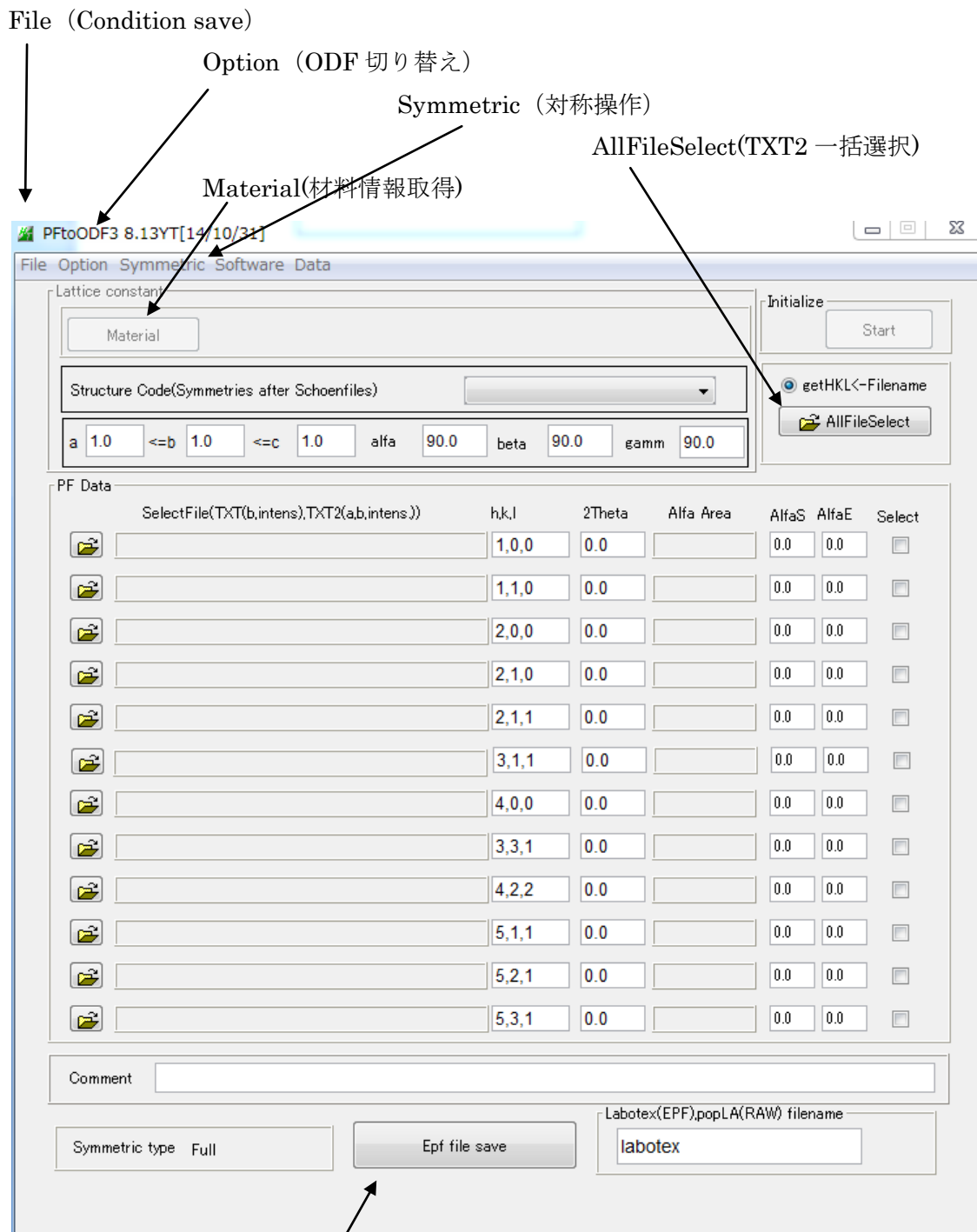
3. データの流れ



4. PFtoODF3ソフトウェアの起動

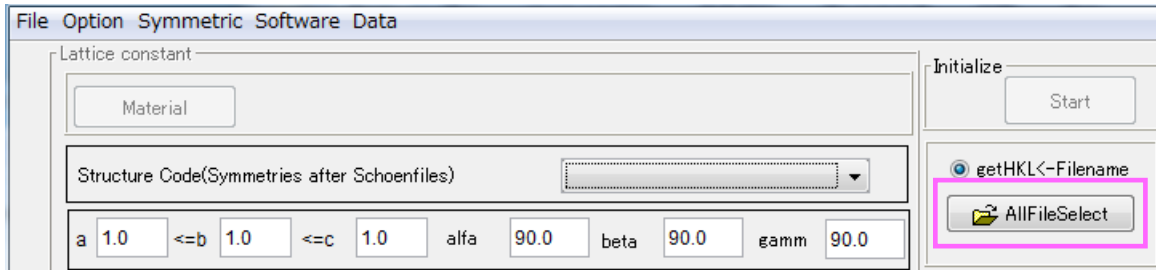
- 1) C:\¥CTR¥bin¥PFtoODF3.jar のダブルクリック
- 2) ODFPoleFigure2 ソフトウェア→T o o l K i t→P F t o O D F 3
- 3) ODFPoleFigure2 ソフトウェア解析終了時、Calc の隣の Exit&ODF は ODF

5. PFtoODF3の機能

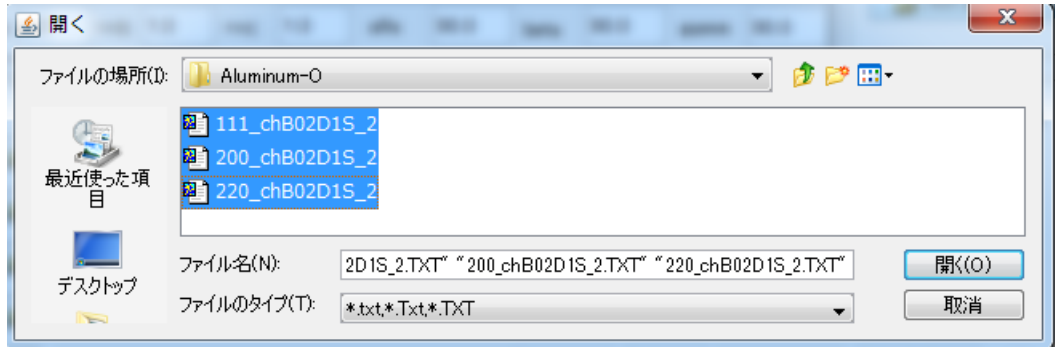


各種 ODF ファイル作成

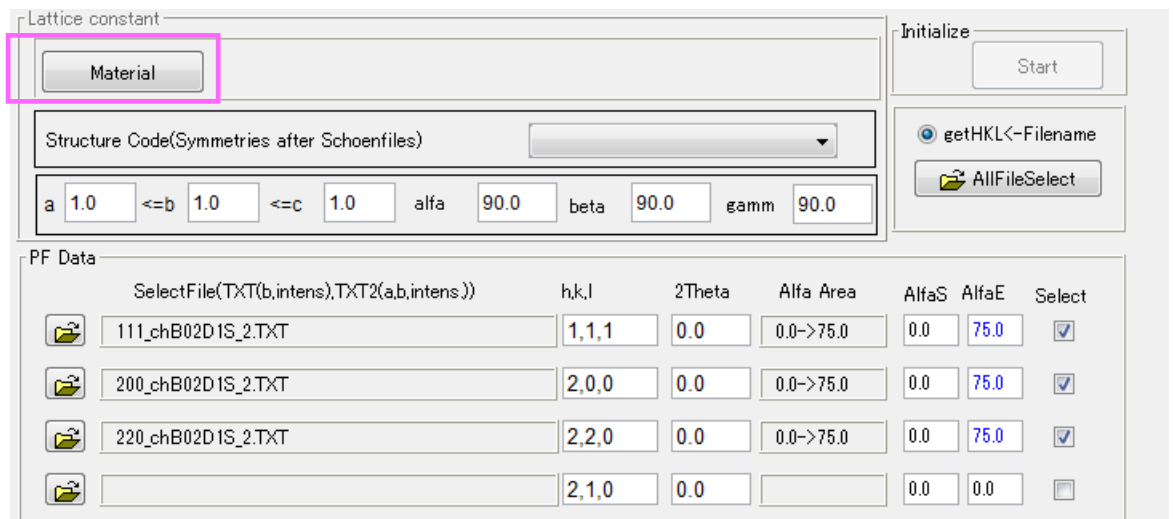
6. TXT2データの読み込み



AllFileSelect より



TXT2 ファイルを複数選択



選択で、ファイル名、指数、 α 軸範囲が表示される。

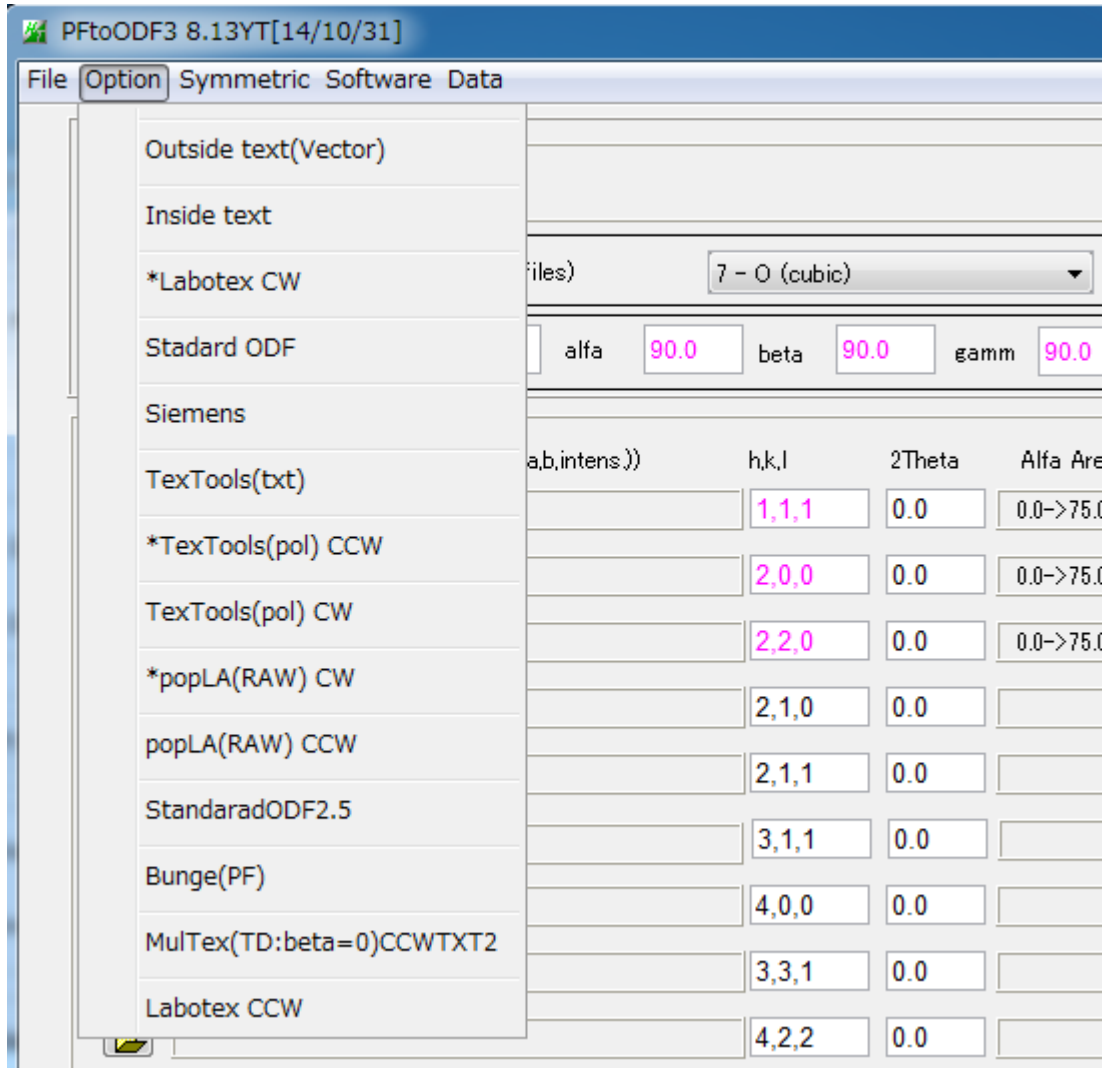
指数は、ファイルの先頭より取得しています。

α 軸は極点図の中心が0度、極点図の外側が90度に変換される。

Material で材料の格子定数や、指数チェックが行われる。

7. ODFの切り替え

メニューOption でODFを選択する。

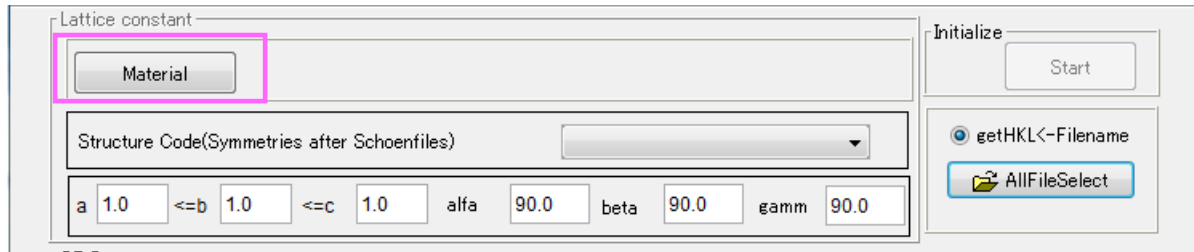


LaboTex や TexTools は非対称 ODF に対応しているが、TD 方向が異なる。

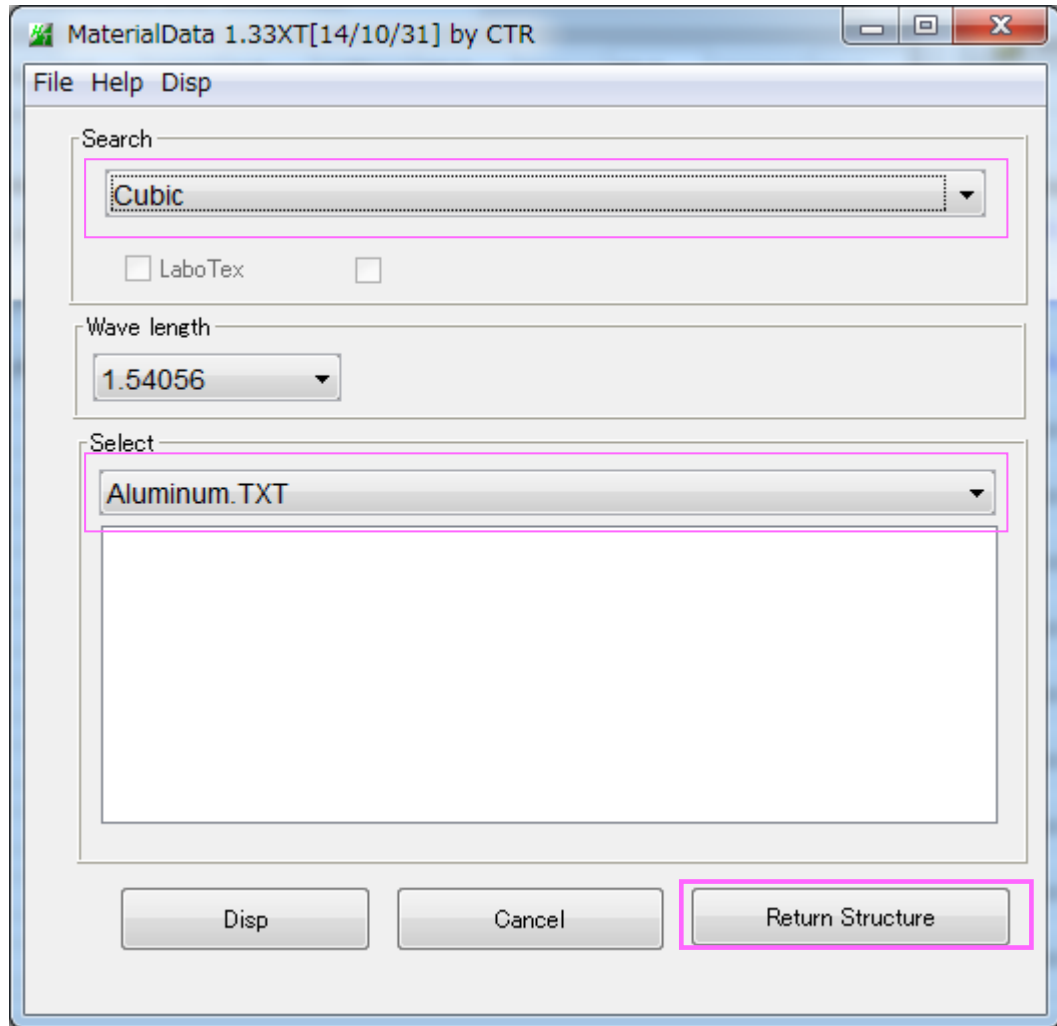
LaboTex の標準は、極点図の TD が右側、TexTools は左側である。

TD 方向により、データの回転方向が異なるので、CW,CCW と表示している。

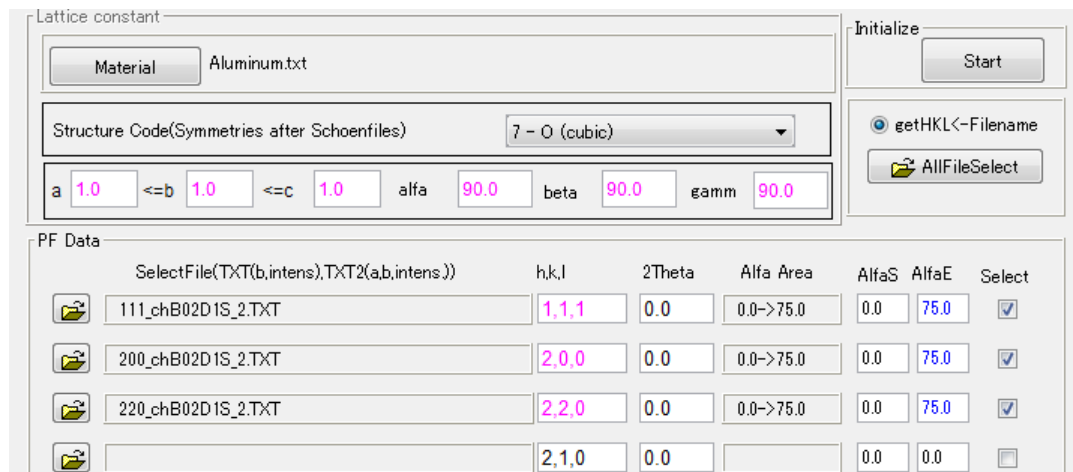
8. 材料情報取得



Material で material データ画面が表示



結晶系と材料名から材料を選択し、ReturnStructure で
PFtoODF3 ソフトウェアに情報が反映される。



9. LaboTex のデータ作成

Option で*LaboTex CW を選択

Comment 111_chB02D1S_2.TXT 200_chB02D1S_2.TXT 220_chB02D1S_2.TXT

Symmetric type Full

Epf file save

Labotex(EPF),popLA(RAW) filename
Al-O

Comment、EPF ファイル名を変更し Epf file save を行う。

```

TextDisplay 1.11S C:%Temp%Aluminum-O%LaboTex%CW%labotex.epf
File Help
111_chB02D1S_2.TXT 200_chB02D1S_2.TXT 220_chB02D1S_2.TXT

Structure Code a b c alfa beta gamma
7 1.0 1.0 1.0 90.0 90.0 90.0
3|
2Theta alf-s alf-e d-alf bet-s bet-e d-bet index H K L P/B
0.0 0.0 75.0 5.0 0.0 355.0 5.0 0 1 1 1 1
0.0 0.0 75.0 5.0 0.0 355.0 5.0 0 2 0 0 1
0.0 0.0 75.0 5.0 0.0 355.0 5.0 0 2 2 0 1

0.003300 0.000000 0.012300 0.006700 0.099800 0.244700 0.050700 0.356800
0.125200 0.016200 0.065400 0.014100 0.016200 0.012600 0.025700 0.012800
0.000000 0.007100 0.021000 0.001900 0.018700 0.007300 0.008500 0.006700
0.000000 0.008900 0.000000 0.030500 0.024800 0.002600 0.007100 0.000000
0.000000 0.041300 0.022100 0.030500 0.058300 0.060400 0.025700 0.037700
0.010700 0.024400 0.054000 0.057000 0.010800 0.038800 0.021400 0.021600
0.020500 0.006400 0.019100 0.004200 0.004400 0.015300 0.020500 0.001000
0.000000 0.011000 0.003000 0.000000 0.016700 0.043100 0.008000 0.006700
0.003300 0.003700 0.065800 0.027700 0.023000 0.016600 0.007400 0.012600
0.125200 0.063600 0.044300 0.086000 0.000000 0.013000 0.017500 0.145200
    
```

{111},{200},{220}ファイルが1つのファイルに纏まったデータが作成される。

ファイルは、入力データと同一ホルダに、新たに作成された LaboTex\CW ホルダ以下に登録

LaboTex	2014/03/16 5:35	ファイル フォル...	
111	2014/03/13 9:39	RINT20007ｽｷ...	22 KB
200	2014/03/13 9:39	RINT20007ｽｷ...	23 KB
220	2014/03/13 9:39	RINT20007ｽｷ...	22 KB
111_chB02D1S_2	2014/03/15 18:37	テキスト文書	22 KB
200_chB02D1S_2	2014/03/15 18:37	テキスト文書	22 KB
220_chB02D1S_2	2014/03/15 18:37	テキスト文書	22 KB

CTR > DATA > Aluminum-H-O > Aluminum-O > LaboTex > CW

新しいフォルダー

名前	更新日時	種類	サイズ
Al-O	2014/03/16 5:35	Exchange Certifi...	35 KB

10. TexTools のデータ作成

Option で*TexTools(POW) CCW を選択

Comment: 111_chB02D1S_2.TXT 200_chB02D1S_2.TXT 220_chB02D1S_2.TXT

Symmetric type: Full

Labotex(EPF),popLA(RAW) filename: AI-O

TexTools(pol) text

Comment やファイル名に関係なく、固定のファイルが作成される。

ファイル(F)	編集(E)	書式(O)	表示
0.0	0.0	2.50350	
0.0	5.0	2.28140	
0.0	10.0	2.37970	
0.0	15.0	2.06820	
0.0	20.0	2.06820	
0.0	25.0	1.81810	
0.0	30.0	1.90280	
0.0	35.0	2.12130	
0.0	40.0	1.92680	
0.0	45.0	1.63810	
0.0	50.0	1.02600	
0.0	55.0	1.07540	
0.0	60.0	1.08420	
0.0	65.0	1.34690	
0.0	70.0	1.49610	
0.0	75.0	1.65420	
0.0	80.0	1.66980	
0.0	85.0	1.41340	
0.0	90.0	1.14720	
^ ^	^ ^	^ ^ ^ ^	

名前	更新日時	種類	サイズ
LaboTex	2014/03/16 5:35	ファイル フォル...	
TexTools	2014/03/16 5:43	ファイル フォル...	
111	2014/03/13 9:39	RINT2000アキ-	22 KB
200	2014/03/13 9:39	RINT2000アキ-	23 KB
220	2014/03/13 9:39	RINT2000アキ-	22 KB
111_chB02D1S_2	2014/03/15 18:37	テキスト文書	22 KB
200_chB02D1S_2	2014/03/15 18:37	テキスト文書	22 KB
220_chB02D1S_2	2014/03/15 18:37	テキスト文書	22 KB

名前	更新日時	種類	サイズ
texttools111_0.pol	2014/03/16 5:43	POL ファイル	38 KB
texttools200_1.pol	2014/03/16 5:43	POL ファイル	38 KB
texttools220_2.pol	2014/03/16 5:43	POL ファイル	38 KB

ファイル名は、texttoolshkl_0.pol の別々のファイルが作成される。

11. StandardODFのデータ作成

Option で StandardODF を選択

Comment やファイル名に関係なく、固定のファイルが作成される。

111_chB02D1S_2StdODF - メモ帳

ファイル(F) 編集(E) 書式(O) 表示(V) ヘルプ(H)

```

0.0033 0.0126 0.0074 0.0166 0.023 0.0277 0.0658 0.0037 0.0033 0.0067 0.0
107 2.98251 0.0314 0.1009 2.98251 0.0089 0.015 0.0694 0.0429 0.1452 0.017
25 0.2011 0.2615 0.1932 0.1631 0.227 0.1116 0.2234 0.0997 0.0291 0.0507
5 1.103 0.9383 1.1144 1.5722 2.1055 1.7512 1.7241 2.3859 2.0012 1.6835 1
54 0.4735 0.5875 0.6459 0.5939 0.9356 0.4394 0.6107 0.4738 0.6903 0.5832
0.7343 0.1562 0.1354 0.1722 0.3631 0.7017 1.1857 2.2853 3.2759 3.3896 2.6
.8643 0.6772 0.5462 0.6332 0.9095 1.6717 3.3732 4.3666 3.4573 2.2829 1.22
0.44 1.9386 3.8506 4.7568 4.1771 1.4018 1.3662 0.5154 0.5912 0.7535 1.029
64 1.8179 0.8281 0.3596 0.1869 0.0948 0.0827 0.1162 0.0057 0.1077 0.0166

```

LaboTex	2014/03/16 5:35	ファイルフォル...	
TexTools	2014/03/16 5:43	ファイルフォル...	
StandardODF	2014/03/16 6:54	ファイルフォル...	
111	2014/03/13 9:39	RINT20007ｽ...	22 KB
200	2014/03/13 9:39	RINT20007ｽ...	23 KB
220	2014/03/13 9:39	RINT20007ｽ...	22 KB
111_chB02D1S_2	2014/03/15 18:37	テキスト文書	22 KB
200_chB02D1S_2	2014/03/15 18:37	テキスト文書	22 KB
220_chB02D1S_2	2014/03/15 18:37	テキスト文書	22 KB

CTR > DATA > Aluminum-H-O > Aluminum-O > StandardODF

新しいフォルダー

名前	更新日時	種類	サイズ
111_chB02D1S_2StdODF	2014/03/16 6:54	テキスト文書	9 KB
200_chB02D1S_2StdODF	2014/03/16 6:54	テキスト文書	9 KB
220_chB02D1S_2StdODF	2014/03/16 6:54	テキスト文書	9 KB

更に、C:\¥CODF¥PFDATA 以下にも作成される。

(C:) > ODF > PFDATA

新しいフォルダー

名前	更新日時	種類	サイズ
111_chB02D1S_2StdODF	2014/03/16 6:54	テキスト文書	9 KB
200_chB02D1S_2StdODF	2014/03/16 6:54	テキスト文書	9 KB
220_chB02D1S_2StdODF	2014/03/16 6:54	テキスト文書	9 KB
Alr111c	2000/10/30 17:07	テキスト文書	13 KB
Alr1200c	2000/10/30 17:08	テキスト文書	12 KB
Alr1220c	2000/10/30 17:09	テキスト文書	12 KB
FERL110I	2000/10/30 17:11	テキスト文書	11 KB
FERL200I	2000/10/30 17:12	テキスト文書	11 KB
FERL211I	2000/10/30 17:13	テキスト文書	11 KB
FERL310I	2000/10/30 17:14	テキスト文書	11 KB