

PETにおけるLaboTexとTexToolsの違い

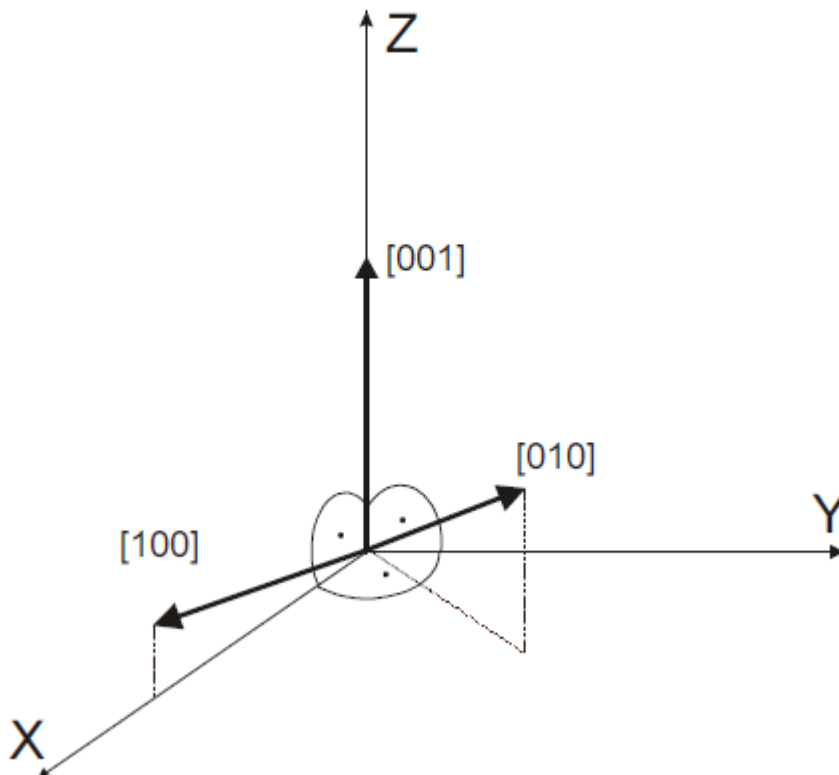
2013年07月23日

HelperTex Office

概要

LaboTexの軸の取り方は[001]方向にZ軸を配置する方法が採用されているため、非対称な結晶系になると複雑になる。

1.4. Crystal and sample coordinate systems. LaboTex Axis and Angles Convention.



Triclinic	C_1	C_1	$a < b < c$	$\alpha \ \beta \ \gamma < 90^\circ$	
-----------	-------	-------	-------------	--------------------------------------	--

CTRパッケージにはこの扱いを自動的に扱えるToolが用意されている。

今回、LaboTexで作成したPETの非対称極点図をLaboTextToolsで解析比較を行い、違いを理解して頂きます。

又、極点図のTD方向が異なる。極点図の上方向をRDとした場合、

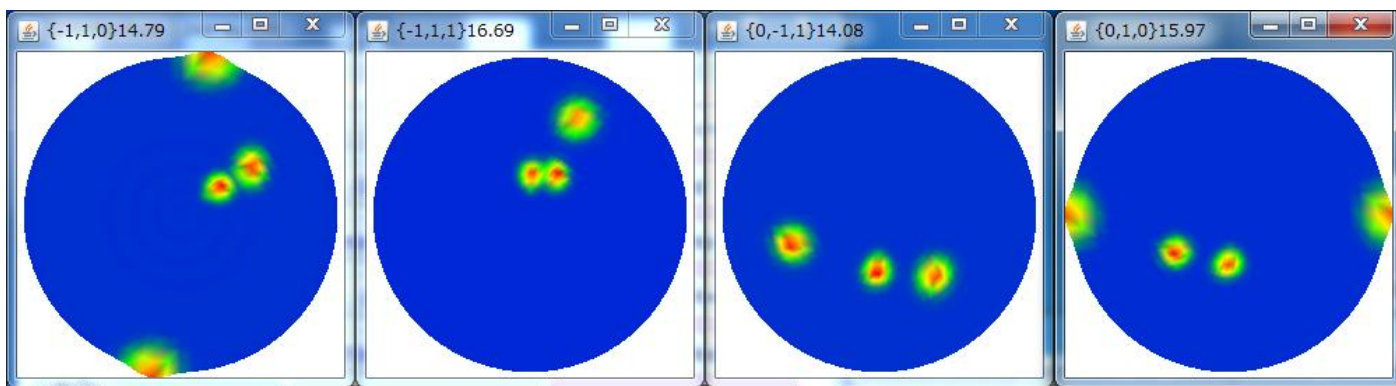
LaboTexのTD方向は右側

TextToolsのTD方向は左側

この影響は、ODFに現れる。

LaTeXでTexToolsと同じ軸の表現で解析した場合、TexToolsと同じ結果?? 危険

用意した極点図 $\{-110\}$, $\{-111\}$, $\{0-11\}$, $\{010\}$



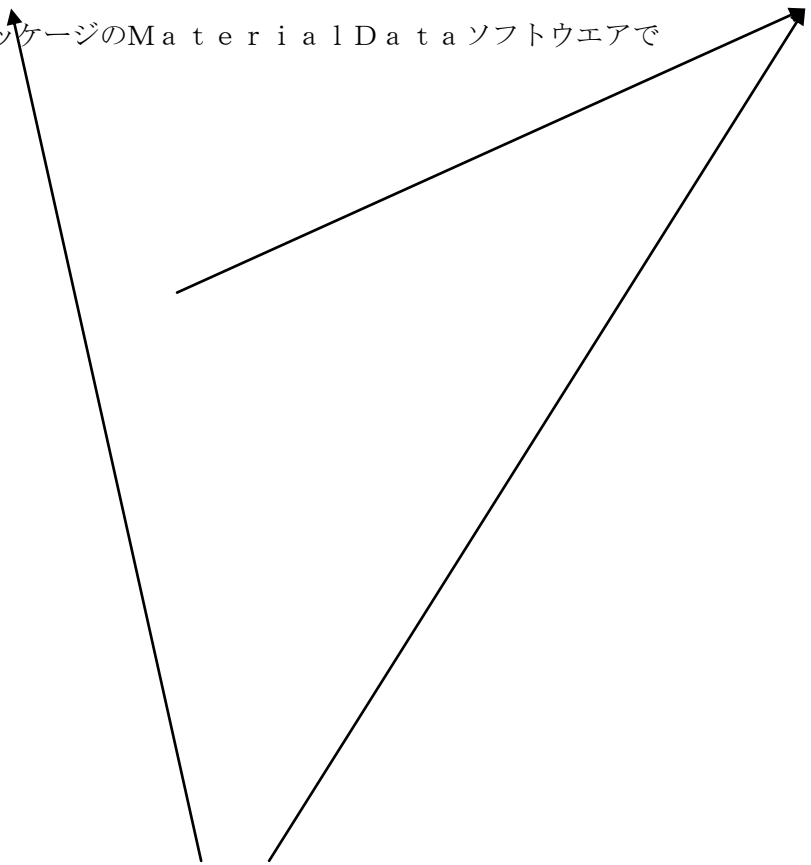
TexToolsで表わすと

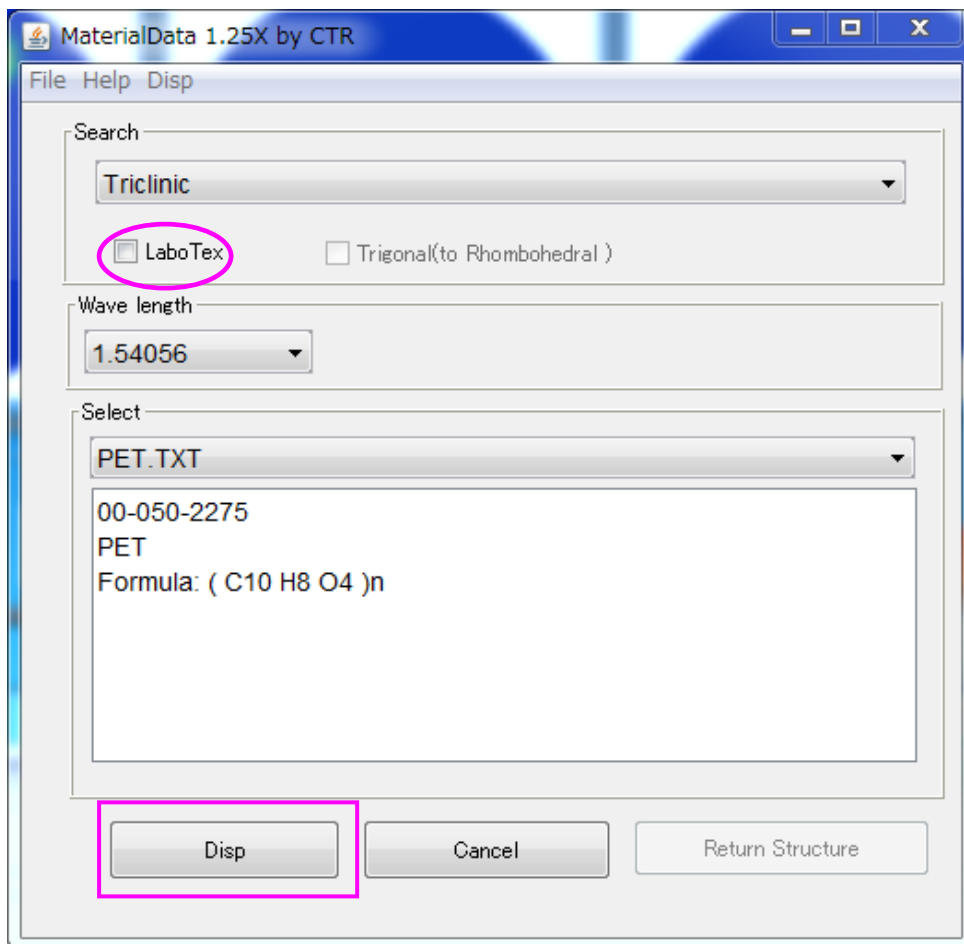
Triclinic			
4.537	(1.0)		
5.922	(1.3053)		
10.771	(2.374)		
99.92			
118.62			
111.37			
1.54056			
142			
0	-1	1	30.6
0	1	0	37.0
-1	1	1	21.8
-1	1	0	61.7

LaTeXで表わすと

PETDISP			
Triclinic			
4.537	(1.0)		
5.922	(1.3053)		
10.771	(2.374)		
99.92			
61.38			
68.63			
1.54056			
142			
0	-1	1	16.305
0	1	0	17.746
1	1	1	21.463
1	1	0	22.724

CTRパッケージのMaterialDataソフトウェアで





TextTools用データを作成 (PFtoODF3ソフトウェア)

PF to TextTools by CTR PFtoODF3 8.11YT[14/03/31]

File Option Symmetric Software Data

Lattice constant

Material PET.txt

Structure Code(Symmetries after Schoenfiles) 1 - C1 (triclinic)

a 1.0 <=b 1.3053 <=c 2.374 alfa 99.92 beta 118.62 gamm 111.37

Initialize

Start

getHKL<-Filename

AllFileSelect

PF Data

SelectFile(TXT(b,intens),TXT2(a,b,intens))	h,k,l	2Theta	Alfa Area	AlfaS	AlfaE	Select
-110_labotex-rp_2.TXT	-1,1,0	0.0	0.0->90.0	0.0	90.0	<input checked="" type="checkbox"/>
-111_labotex-rp_2.TXT	-1,1,1	0.0	0.0->90.0	0.0	90.0	<input checked="" type="checkbox"/>
0-11_labotex-rp_2.TXT	0,-1,1	0.0	0.0->90.0	0.0	90.0	<input checked="" type="checkbox"/>
010_labotex-rp_2.TXT	0,1,0	0.0	0.0->90.0	0.0	90.0	<input checked="" type="checkbox"/>
	2,1,1	0.0		0.0	0.0	<input type="checkbox"/>
	3,1,1	0.0		0.0	0.0	<input type="checkbox"/>
	4,0,0	0.0		0.0	0.0	<input type="checkbox"/>
	3,3,1	0.0		0.0	0.0	<input type="checkbox"/>
	4,2,2	0.0		0.0	0.0	<input type="checkbox"/>
	5,1,1	0.0		0.0	0.0	<input type="checkbox"/>
	4,4,0	0.0		0.0	0.0	<input type="checkbox"/>
	5,3,1	0.0		0.0	0.0	<input type="checkbox"/>

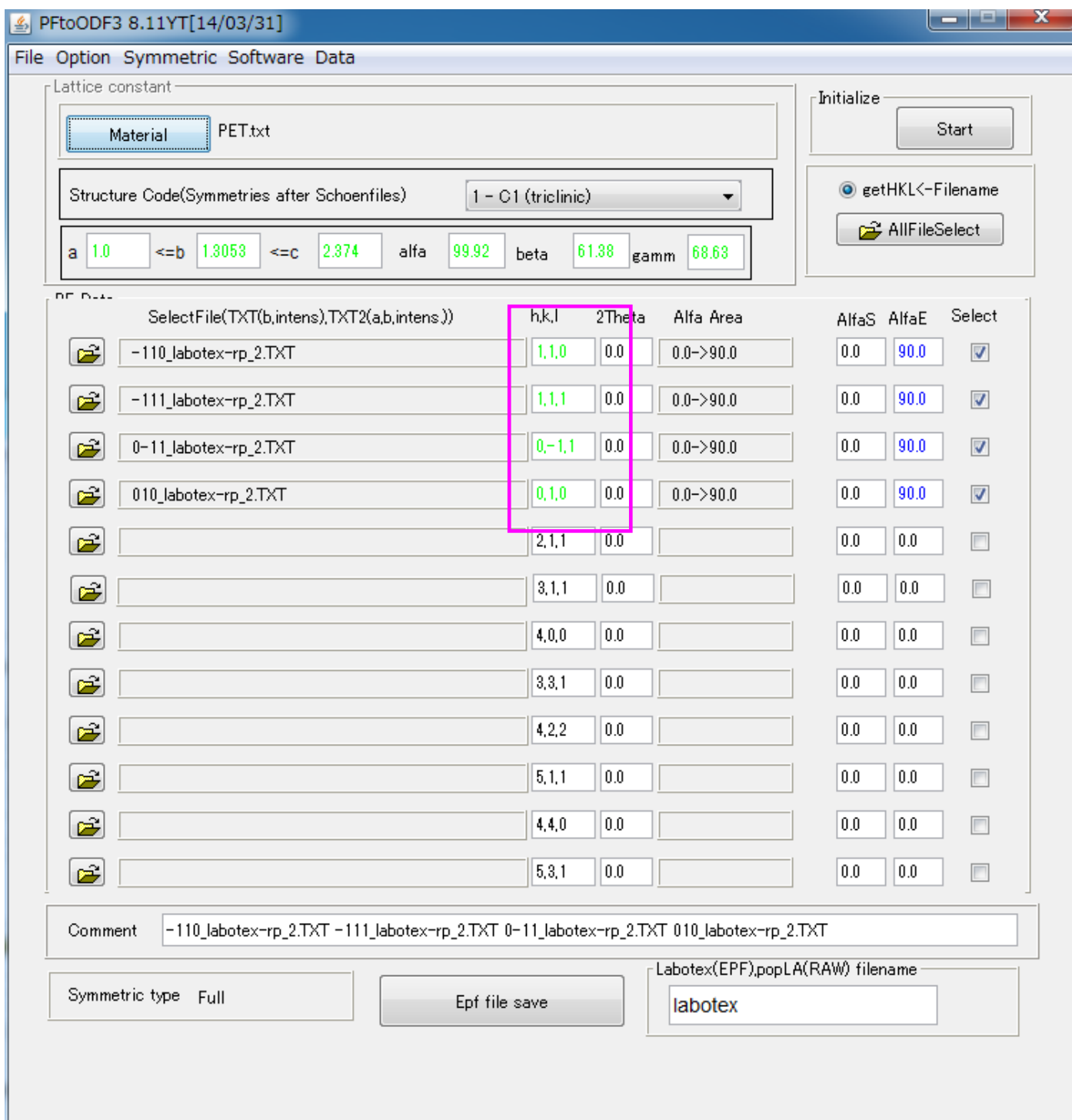
Comment -110_labotex-rp_2.TXT -111_labotex-rp_2.TXT 0-11_labotex-rp_2.TXT 010_labotex-rp_2.TXT

Symmetric type Full

TextTools(pol) text

Labotex(EPF),popLA(RAW) filename labotex

LaboTex用データ作成 (PFtoODF3ソフトウェア)



MaterialでMaterialDataソフトウェアが起動され、LaboTexデータが読み込まれる事で、格子定数と極点指数を自動変換する。

TexToolsによる解析

ODF Calculation Setup

Crystal info.
 Crystal system: **Triclinic**
 a: 1.00 α: 99.92
 b: 1.3053 β: 118.62
 c: 2.374 γ: 111.37

Pole figure info.
 Number of pole figures: **4**
 1st PF | 2nd PF | 3rd PF | 4th PF
 h: -1 k: 1 l: 0
 Browse PF file location: C:\tmp\PET\TexTools\textools-110_0.pol

Normalizing pole figures before ODF calculation
 With Orthogonal sample symmetry
 Resolution: 5.00

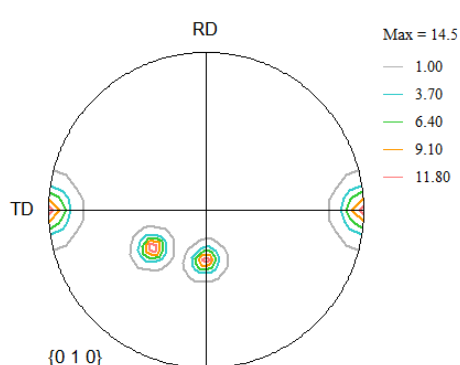
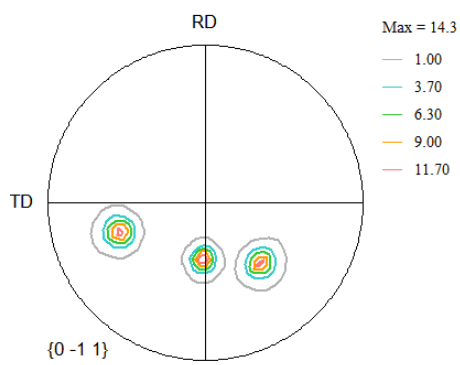
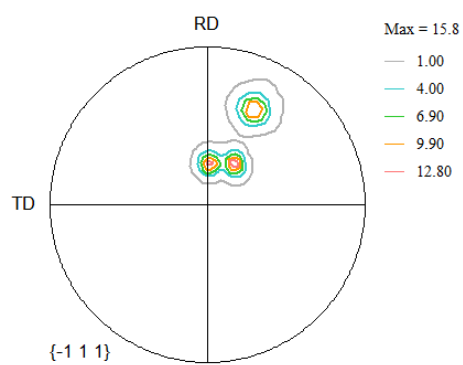
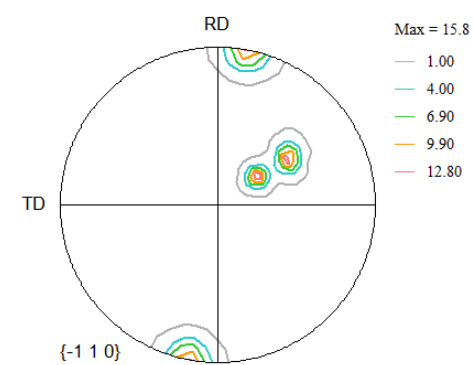
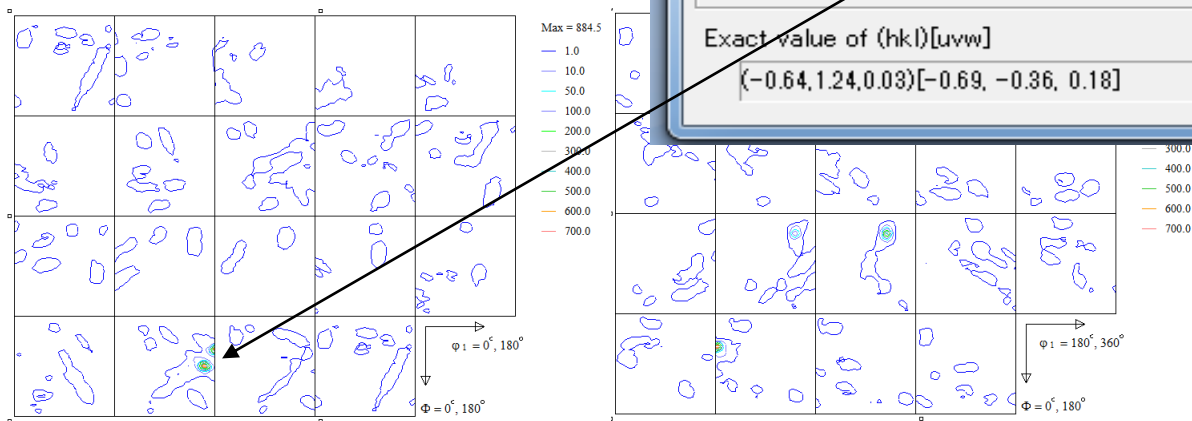
Save as: C:\tmp\132-6-43-1.62\TexTools\132-6-43.HOD

OK Advance

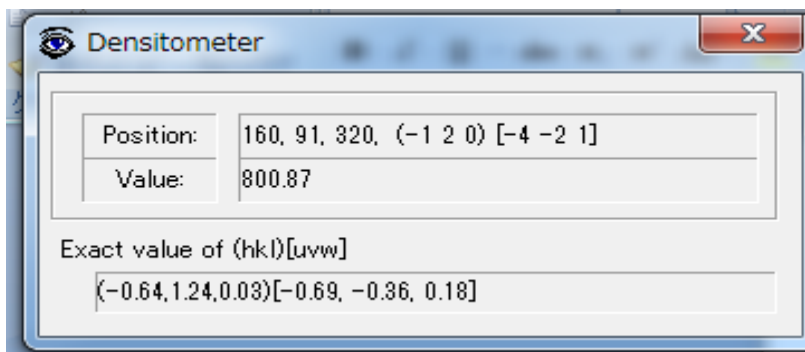
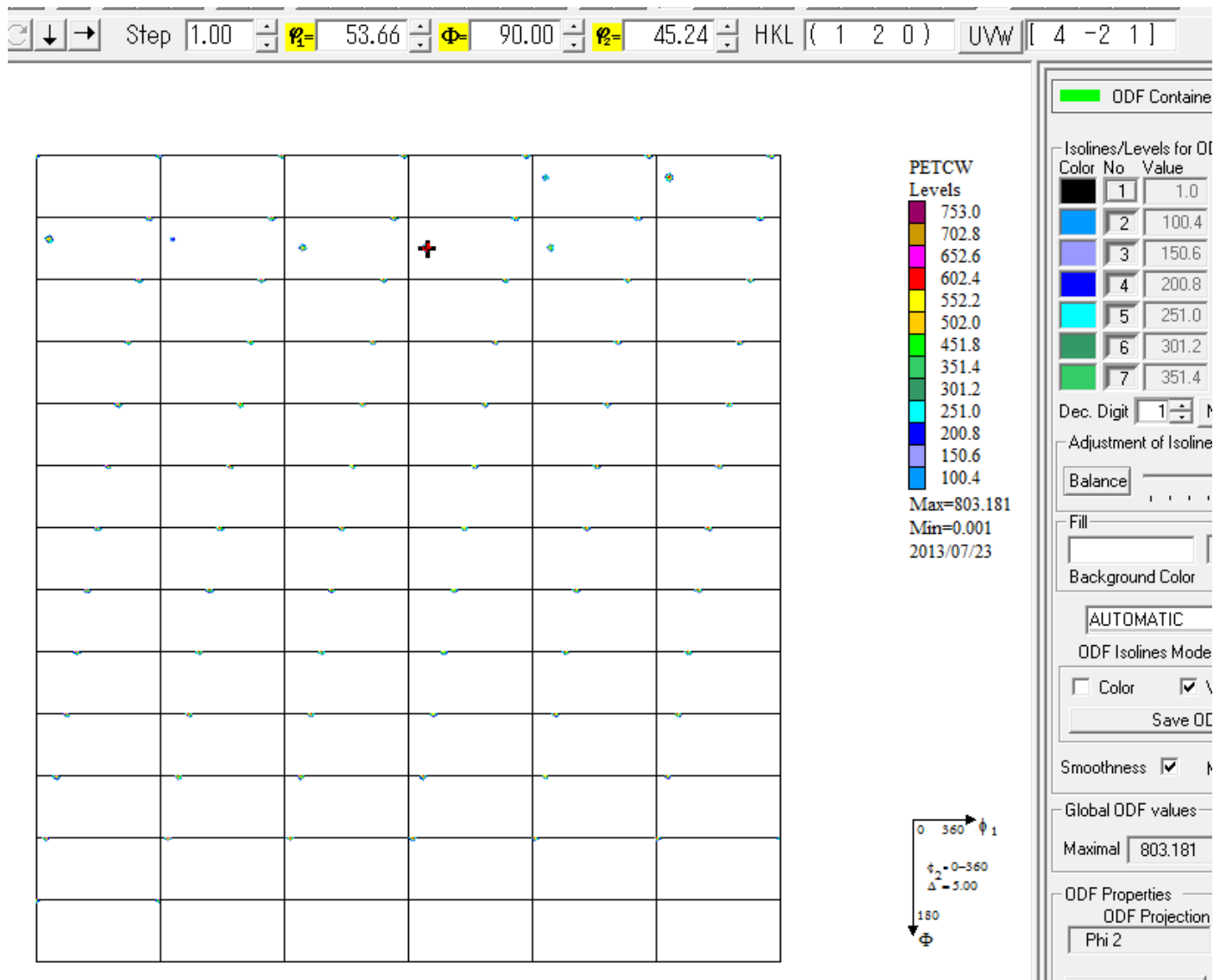
Densitometer

Position: 160, 91, 320, (-1 2 0) [-4 -2 1]
 Value: 800.87

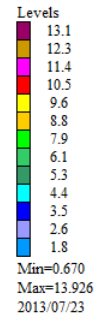
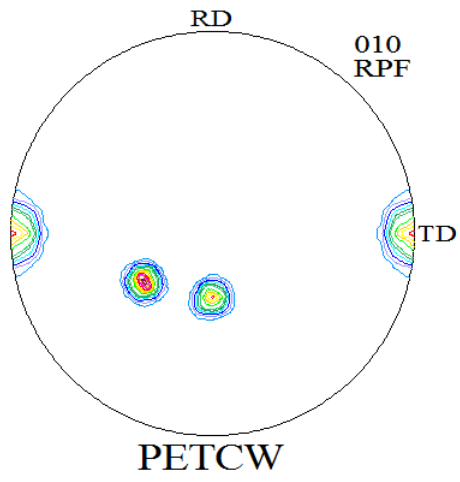
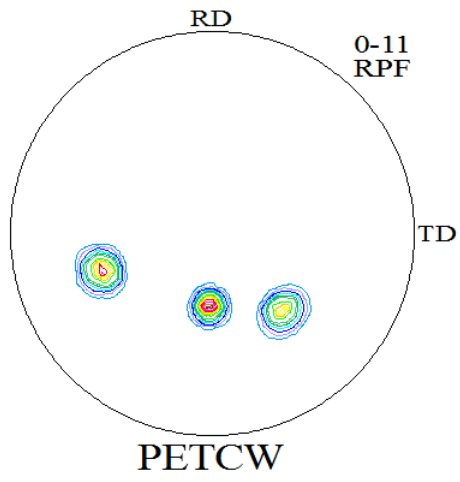
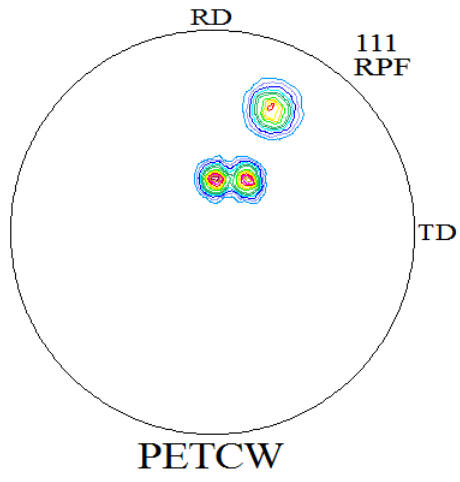
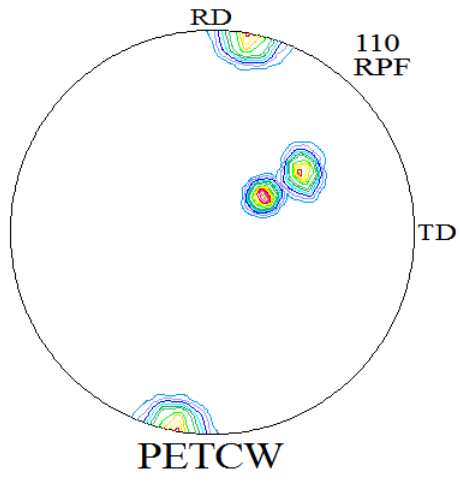
Exact value of (hk_l)[uvw]
 (-0.64, 1.24, 0.03)[-0.69, -0.36, 0.18]



LaboTexで解析



やはり異なるため、LaboTex用入力データでの解析が望ましい。



TexToolsと同じデータでlaboTex解析

PFtoODF3 8.11YT[14/03/31]

File Option Symmetric Software Data

Lattice constant

Material PET.txt

Structure Code(Symmetries after Schoenfiles) 1 - C1 (triclinic)

a 1.0 <=b 1.3053 <=c 2.374 alfa 99.92 beta 118.62 gamm 111.37

Initialize

Start

getHKL<-Filename

AllFileSelect

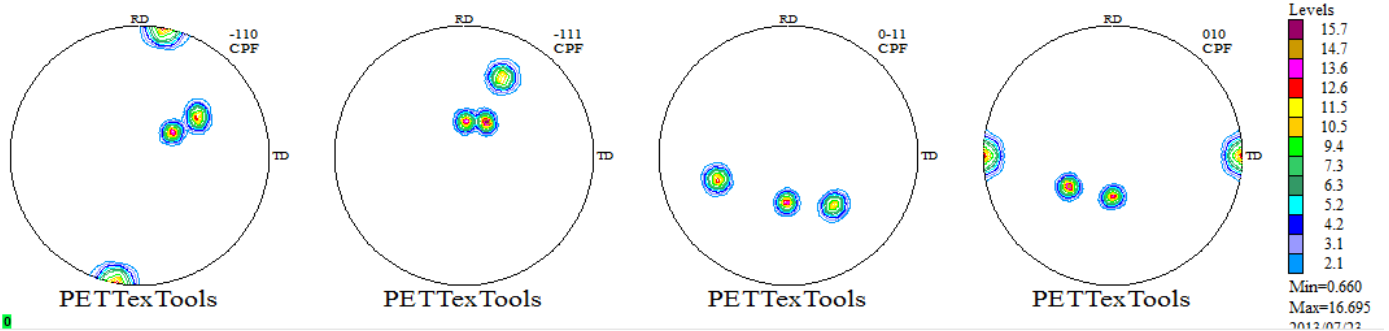
SelectFile(TXT(b,intens),TXT2(a,b,intens))	h,k,l	2Theta	Alfa Area	AlfaS	AlfaE	Select
-110_labotex-rp_2.TXT	-1,1,0	0.0	0.0->90.0	0.0	90.0	<input checked="" type="checkbox"/>
-111_labotex-rp_2.TXT	-1,1,1	0.0	0.0->90.0	0.0	90.0	<input checked="" type="checkbox"/>
0-11_labotex-rp_2.TXT	0,-1,1	0.0	0.0->90.0	0.0	90.0	<input checked="" type="checkbox"/>
010_labotex-rp_2.TXT	0,1,0	0.0	0.0->90.0	0.0	90.0	<input checked="" type="checkbox"/>
	2,1,1	0.0		0.0	0.0	<input type="checkbox"/>
	3,1,1	0.0		0.0	0.0	<input type="checkbox"/>
	4,0,0	0.0		0.0	0.0	<input type="checkbox"/>
	3,3,1	0.0		0.0	0.0	<input type="checkbox"/>
	4,2,2	0.0		0.0	0.0	<input type="checkbox"/>
	5,1,1	0.0		0.0	0.0	<input type="checkbox"/>
	4,4,0	0.0		0.0	0.0	<input type="checkbox"/>
	5,3,1	0.0		0.0	0.0	<input type="checkbox"/>

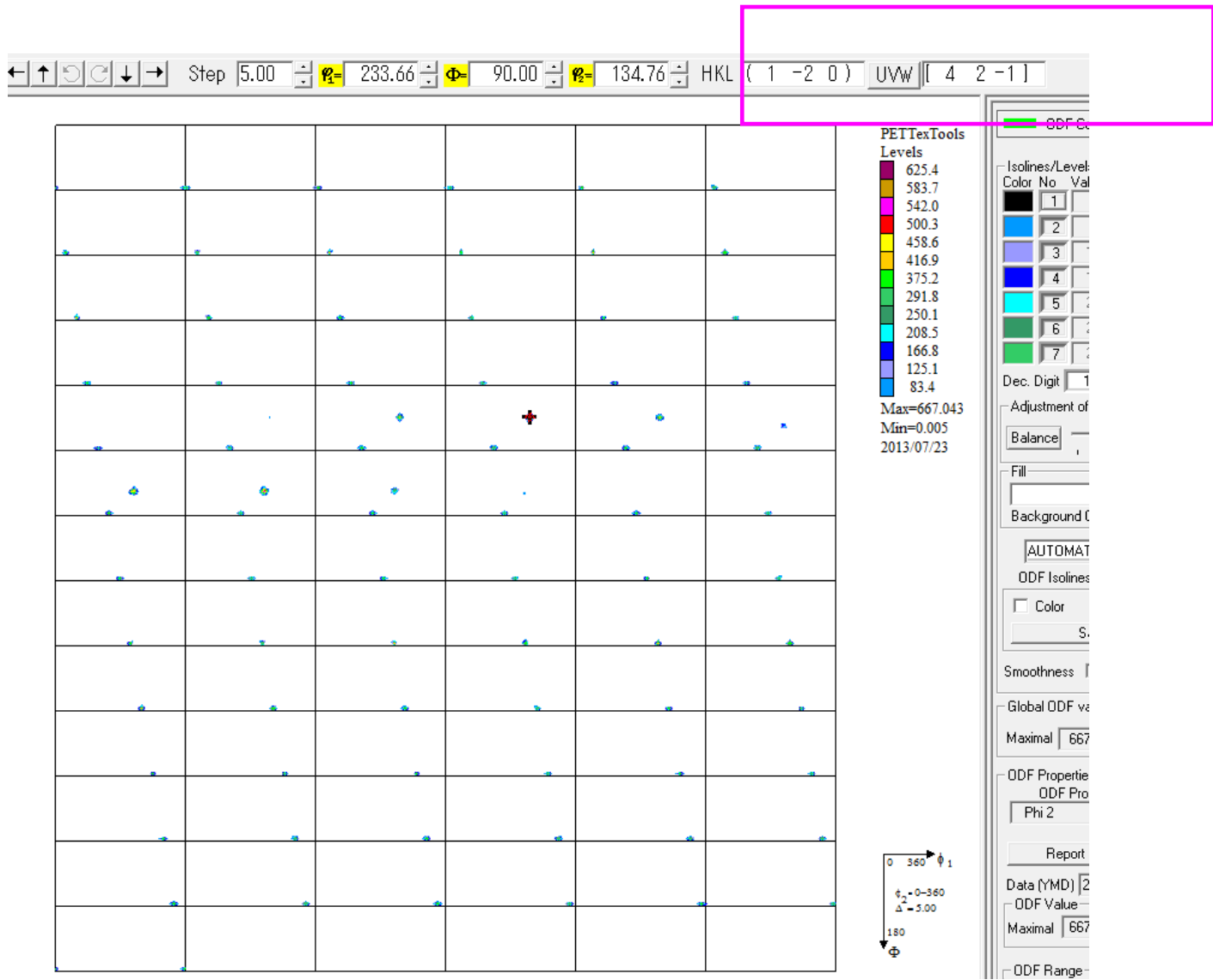
Comment -110_labotex-rp_2.TXT -111_labotex-rp_2.TXT 0-11_labotex-rp_2.TXT 010_labotex-rp_2.TXT

Symmetric type Full

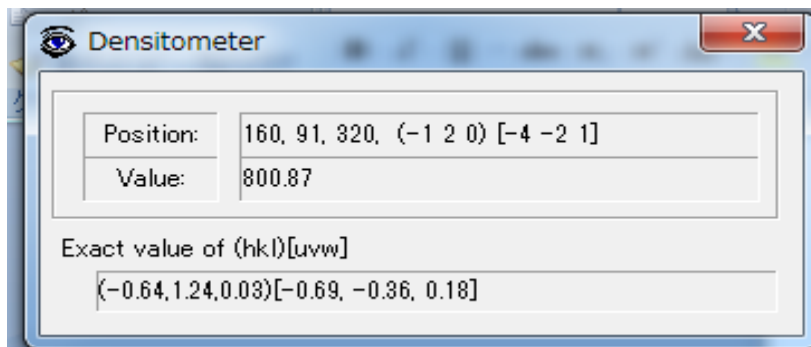
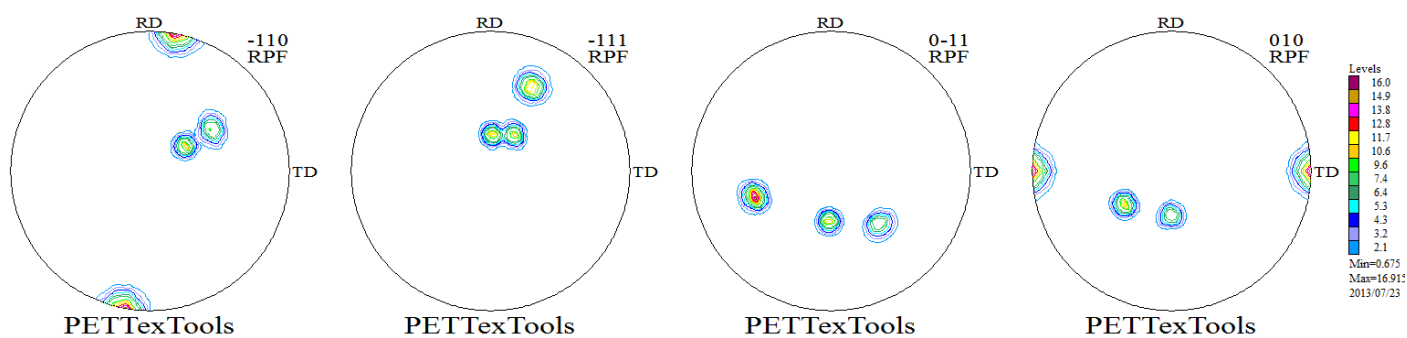
Epf file save

Labotex(EPF),popLA(RAW) filename PRTTexTools





TextToolsと同じ結果になる。

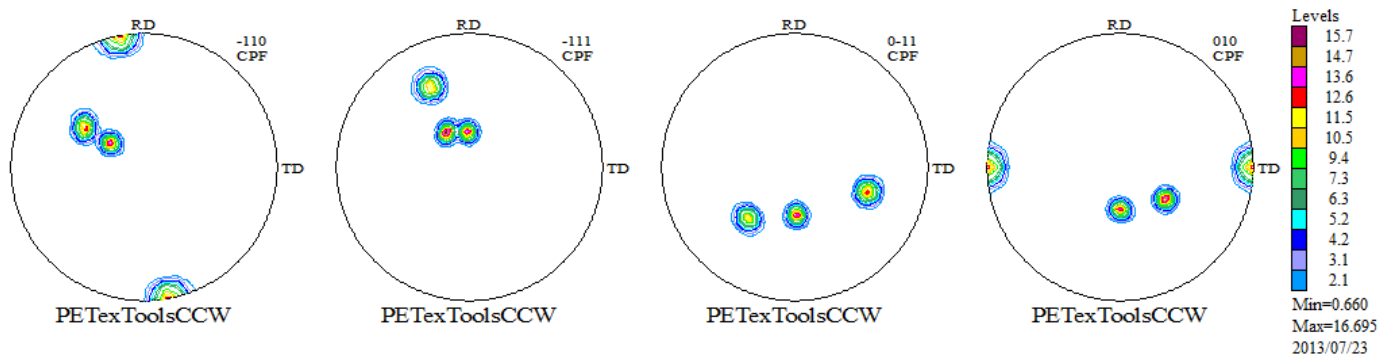


HKL (1 -2 0) UWW (4 2 -1)

同じにはならないので、この解析方法は危険

TexToolsと同じデータでlaboTex解析 (CCW)

入力データが逆回転となる。



Software interface toolbar and parameter controls. Parameters include Step: 5.00, ϕ_1 : 126.34, ϕ_2 : 90.00, ϕ_3 : 314.76, HKL: (-1 2 0), and U VW: [-4 -2 1].

