

標準データによる popLA 評価

2009年11月12日

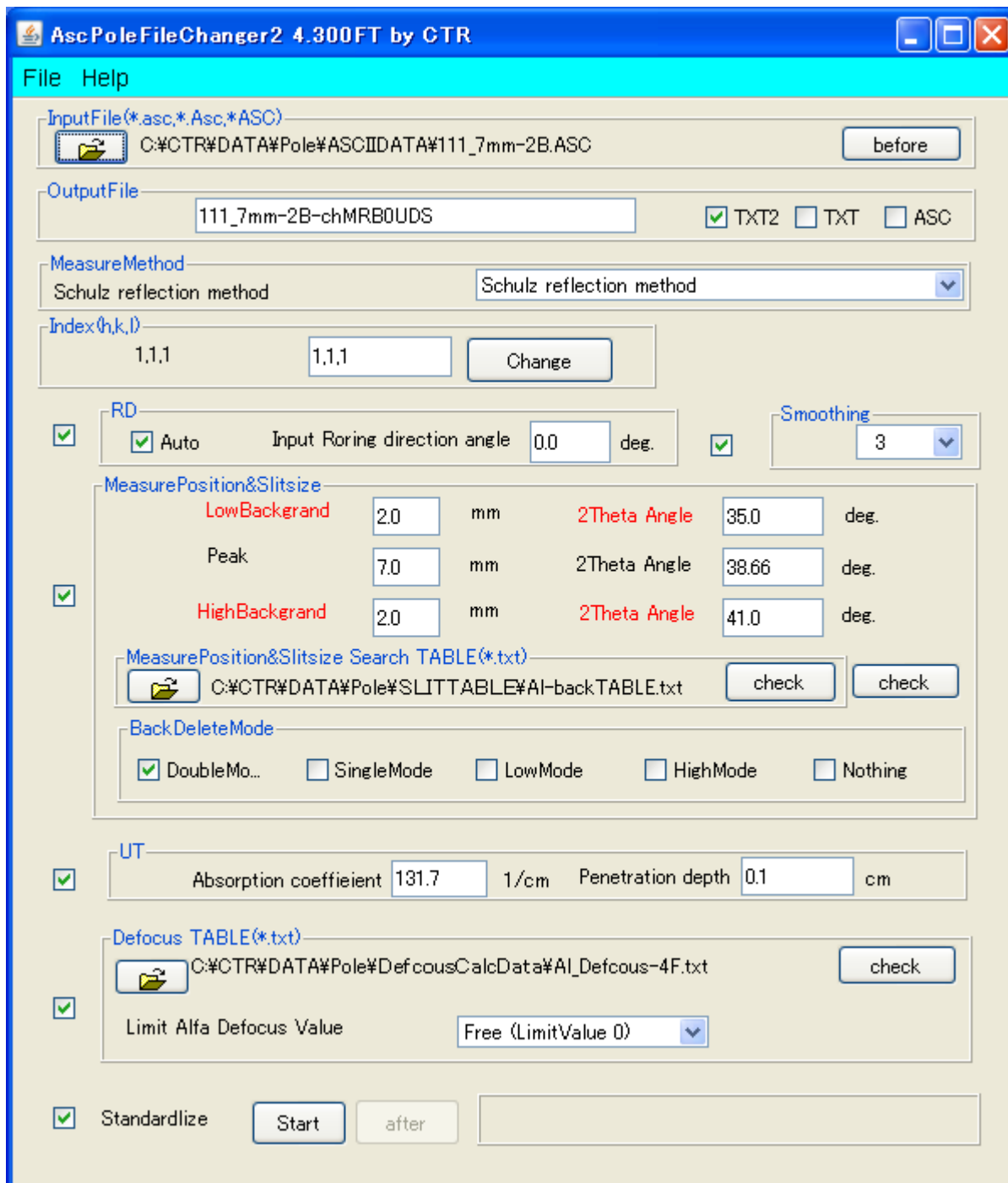
HelperTex

入力データ

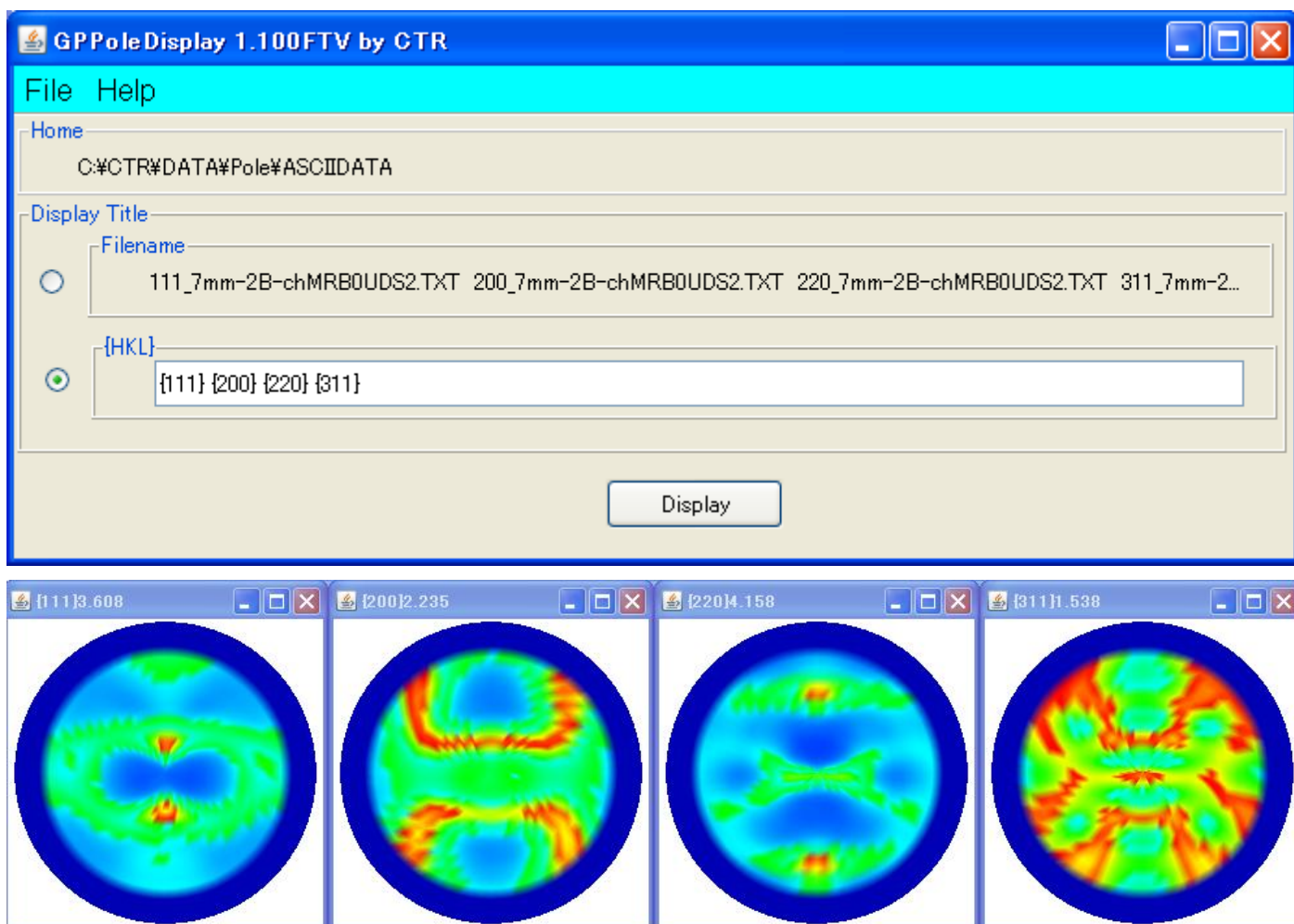
111_7mm-2B.ASC	23 KB	RINT2000アスキー	2008/10/23 9:32
200_7mm-2B.ASC	22 KB	RINT2000アスキー	2008/10/23 9:32
220_7mm-2B.ASC	22 KB	RINT2000アスキー	2008/10/23 9:32
311_7mm-2B.ASC	22 KB	RINT2000アスキー	2008/10/23 9:32

正極点データ処理

AscPoleFileChanger2ソフトウェアによりTXT2ファイルを作成



111_7mm-2B-chMRBOUDS2.TXT	21 KB	テキスト ドキュメント	2009/11/12 13:36
200_7mm-2B-chMRBOUDS2.TXT	21 KB	テキスト ドキュメント	2009/11/12 13:36
220_7mm-2B-chMRBOUDS2.TXT	21 KB	テキスト ドキュメント	2009/11/12 13:36
311_7mm-2B-chMRBOUDS2.TXT	21 KB	テキスト ドキュメント	2009/11/12 13:36



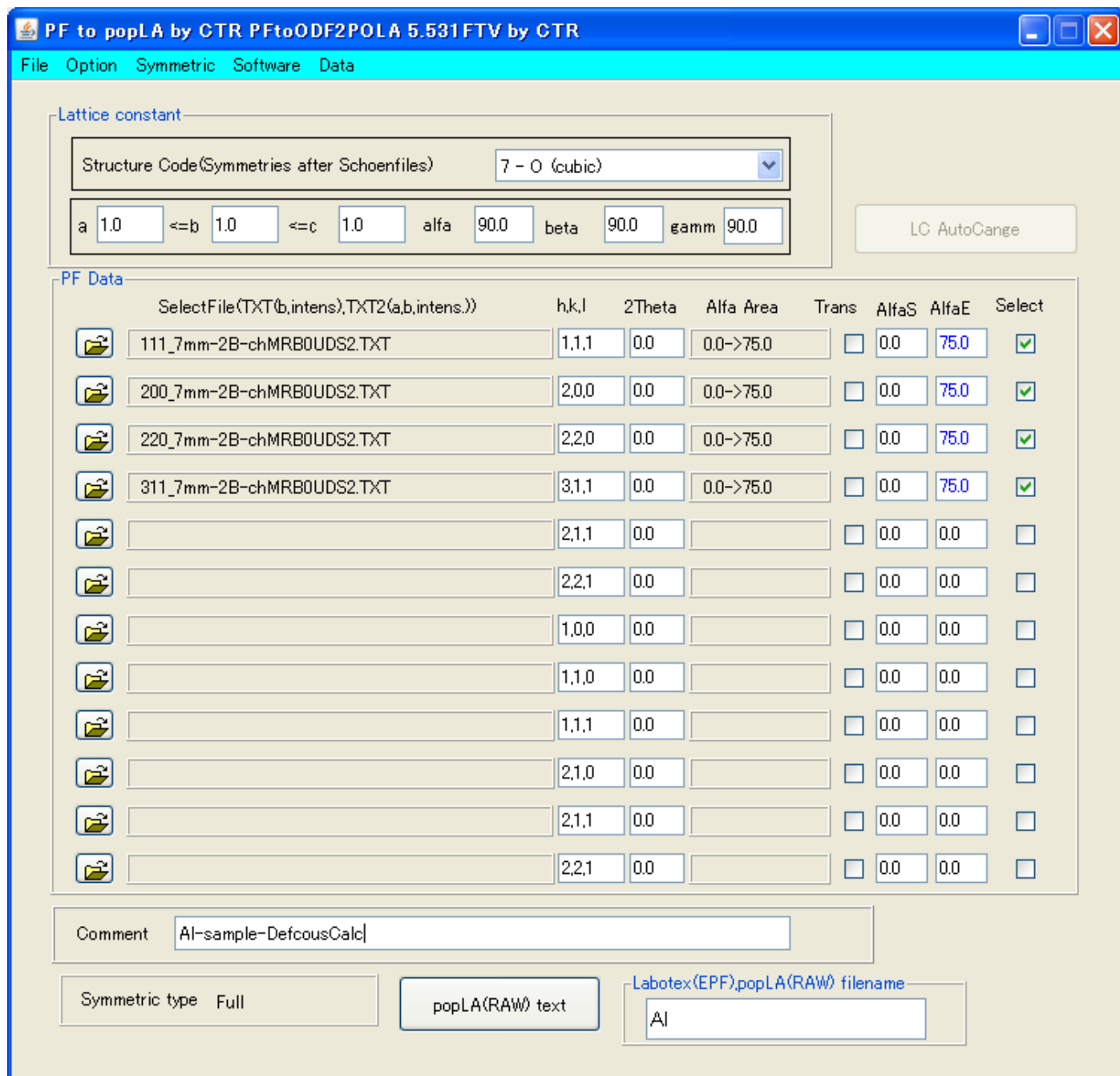
このTXT2データからpopLAの入力データであるRAWデータとDFBデータを作成する。

popLAでは、XRDで測定したデータを独自の方法でバックグラウンド除去、Defocus補正を行なっている。しかしDefocus補正は光学系で異なる為、処理結果の規格化強度（RAW）とダミーのDFBデータを作成する。

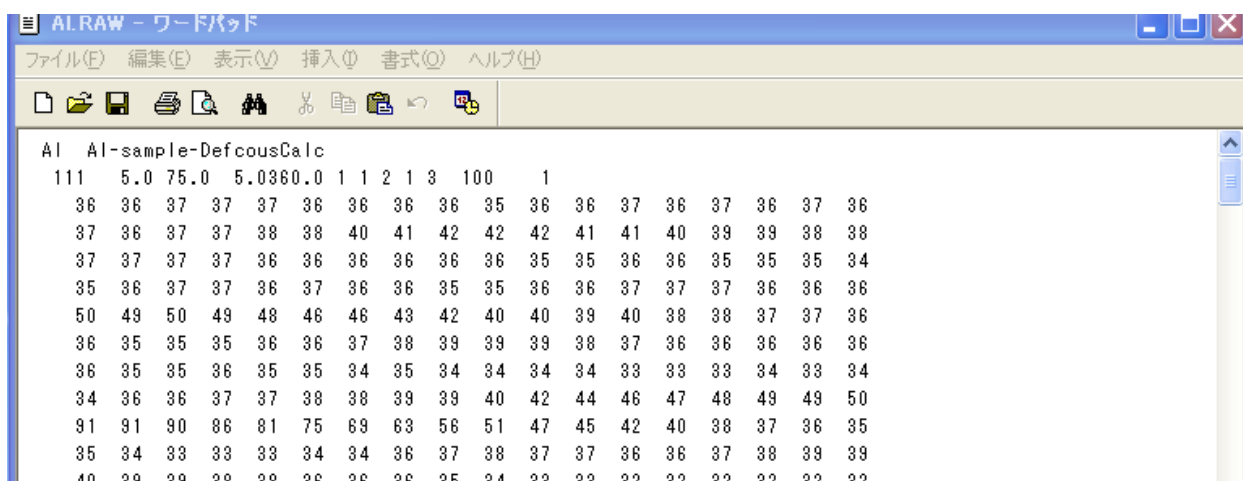
変換ソフトウェアはPFtoODF2POPLAとした。

PFtoODFソフトウェアは、市販されているソフトウェアであり、その機能アップバージョンがPFtoODF2ソフトウェアであるが、変換機能をpopLA単独としたのがPFtoODF2POPLAソフトウェアである。

PF to ODF 2ソフトウェアでRAW, DFBファイルを作成



RAWデータが表示される。



111_7mm-2B.ASC	23 KB	RINT2000アスキー	2008/10/23 9:32
200_7mm-2B.ASC	22 KB	RINT2000アスキー	2008/10/23 9:32
220_7mm-2B.ASC	22 KB	RINT2000アスキー	2008/10/23 9:32
311_7mm-2B.ASC	22 KB	RINT2000アスキー	2008/10/23 9:32
220_7mm-2B-chMRBOUDS2.TXT	21 KB	テキストドキュメント	2009/11/12 13:36
311_7mm-2B-chMRBOUDS2.TXT	21 KB	テキストドキュメント	2009/11/12 13:36
111_7mm-2B-chMRBOUDS2.TXT	21 KB	テキストドキュメント	2009/11/12 13:55
200_7mm-2B-chMRBOUDS2.TXT	21 KB	テキストドキュメント	2009/11/12 13:55
Al.DFB	1 KB	DFB ファイル	2009/11/12 14:04
Al.RAW	23 KB	生データ	2009/11/12 14:04

popLAはDOSモードで使うため、ファイル名の長さに注意

Windows-XPのDOSでは途中で動かなくなる。VISTAやWindows 7が良い

popLAはCドライブのXディレクトリで動作する為、上記Al. RAW to Al. DFBをコピーする。

Windows 7によるpopLA

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

C:\Users\yamada>cd c:\x
c:\x>tmpdos
```

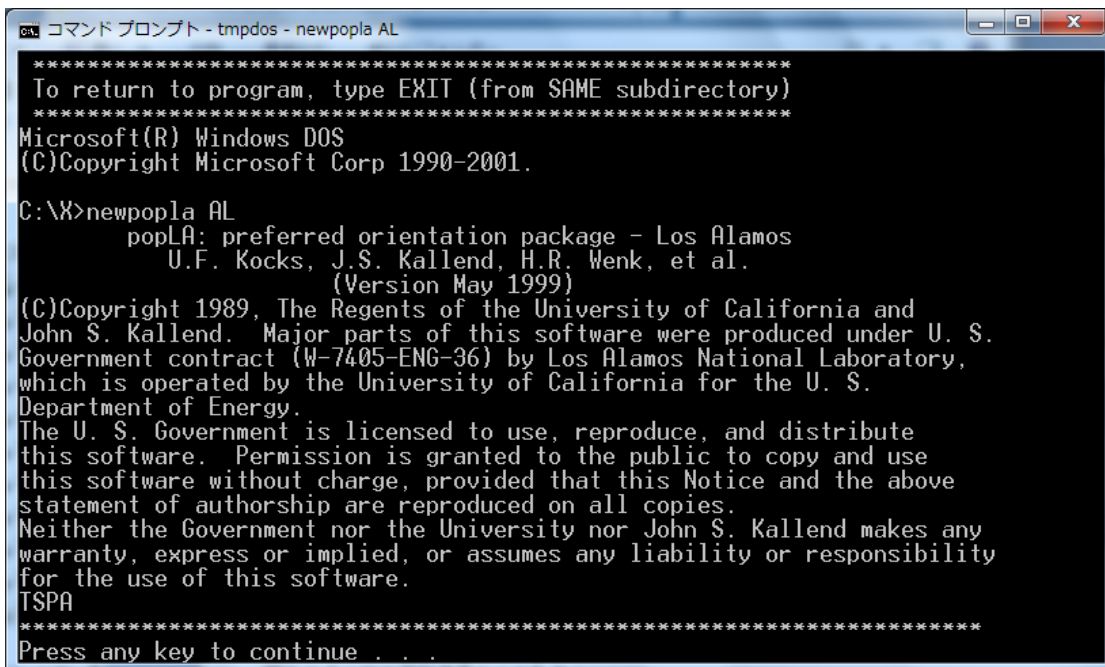
tmpdosで画面が切り替わる。

popla.batの修正版を起動

```
*****
To return to program, type EXIT (from SAME subdirectory)
*****
Microsoft(R) Windows DOS
(C)Copyright Microsoft Corp 1990-2001.

C:\X>newpopla AL
```

popLAのスタート画面が表示される。



```
ca: コマンド プロンプト - tmpdos - newpopla AL
*****
To return to program, type EXIT (from SAME subdirectory)
*****
Microsoft(R) Windows DOS
(C)Copyright Microsoft Corp 1990-2001.

C:\X>newpopla AL
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
*****
Press any key to continue . . .
```

```

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 -->

```

2. MESSAGE dataの作成

```

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 ==>

```

2. はD e f c o u sやバックグラウンド用のDFBファイル作成だが、既に作成されているので

3. RAWとDBFからEPFファイルを作成する。

```

Note: the sample is assumed to have rotated counter-clockwise
Data will be sequenced clockwise in .EPF

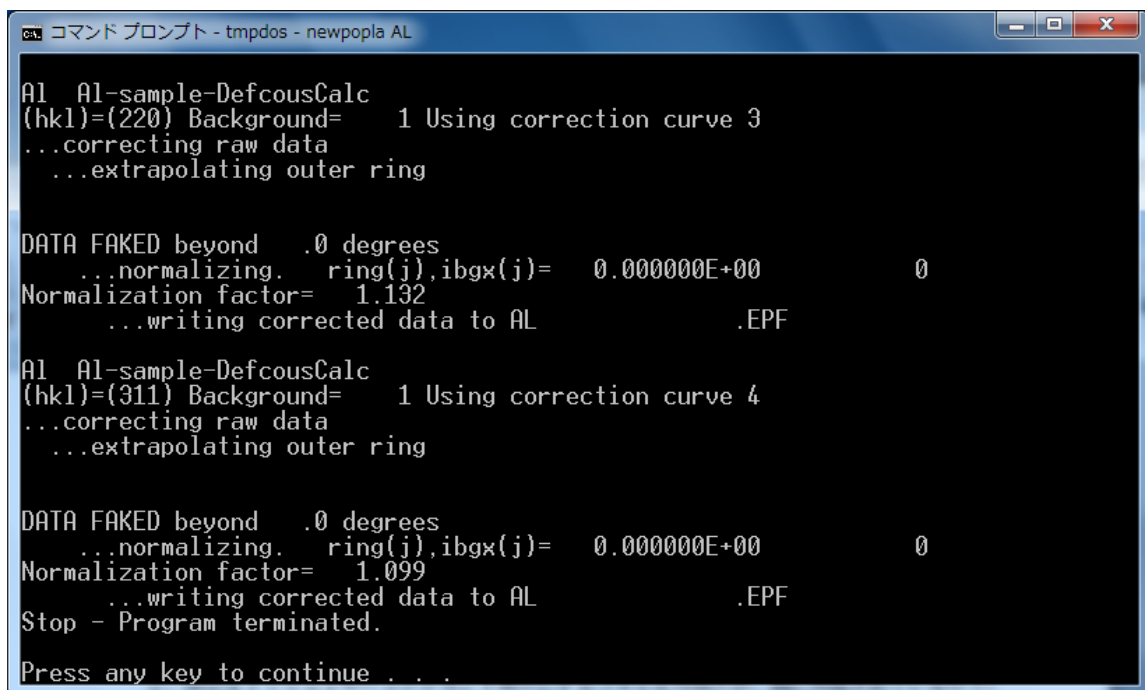
```

```

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

```

入力で




```

WIMV Analysis (popLA page 3)
0. Quit
1. Return to Page 1
WIMV: make .SOD and recalc. 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 -->

```

8. M I M V用 pointer matrix

AL.WIN を作成

2. でODF 解析

```

WIMV: make .SOD and recalc. 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 -

```

```

コマンドプロンプト - tmpdos - newpopla al
Directory of c:\x
2009/11/12  15:38          9,300 AL.WIM
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
              7 File(s)          48,180 bytes
              0 Dir(s)  88,377,569,280 bytes free

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] ==> AL
Name of data file (default extension .epf): AL

```

AL. WIMを入力 (ALだけ)

AL. EPFを入力 (ALだけ)

```

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

Al Al-sample-DefcousCalc
111 5.0 75.0 5.0360.0 1 1 2-1 3 100 1
200 5.0 75.0 5.0360.0 1 1 2-1 3 100 1
220 5.0 75.0 5.0360.0 1 1 2-1 3 100 1
The minimum pole figure intensity is .31
Do you wish to raise the Fon? N

```

ODFが走る。

```

コマンドプロンプト - tmpdos - newpopla al
Iteration 2 in progress
Sharpening may cause larger error in iteration 3
Texture Strength (m.r.d.): 1.2
(= square-root of "Texture Index")
Iteration 2 estimated OD error (%) = 19.1

Iteration 3 in progress
Texture Strength (m.r.d.): 1.3
Iteration 3 estimated OD error (%) = 7.8

Iteration 4 in progress
Texture Strength (m.r.d.): 1.3
Iteration 4 estimated OD error (%) = 4.8

Iteration 5 in progress
Texture Strength (m.r.d.): 1.4
Iteration 5 estimated OD error (%) = 3.5

Iteration 6 in progress
Texture Strength (m.r.d.): 1.4
Iteration 6 estimated OD error (%) = 2.7

Continue? Y

```

```

Continue? n
Normalization factor: 1.10
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

```

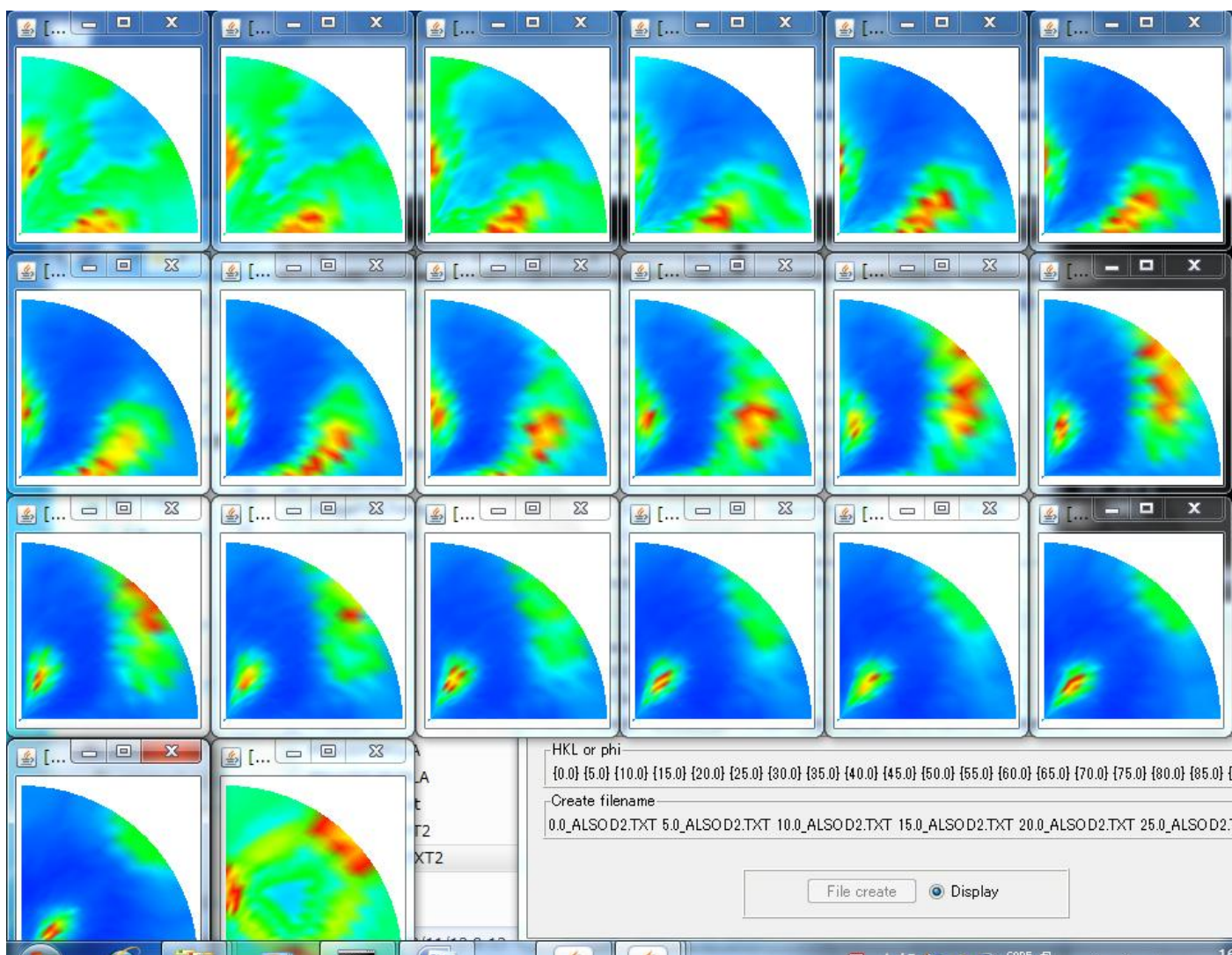
```
n output file, angles increase from 0 in nomenclature of
1. Kocks (need this one for WEIGHTS)
2. Roe/Matthies
3. Bunge (rotates plot +90 deg.)

Enter 1,2, or 3 ==> 3
making file AL .SOD
Recalculated PF file name: AL .WPF
Press any key to continue . . .
```

ODFファイルAL. SODと再計算極点図AL. WPF が計算される。

popladata to TXT2ソフトウェアで確認

AL. SOD



AL. WPF

