

JTEX (ATEX?) に関して

2018年10月10日

HelperTex Office

概要

JTEXの概要の調査

JTEXではなく、JTEXサイトでATEXがdownload出来る(無料)

入力データ



RigakuのXPAとは??

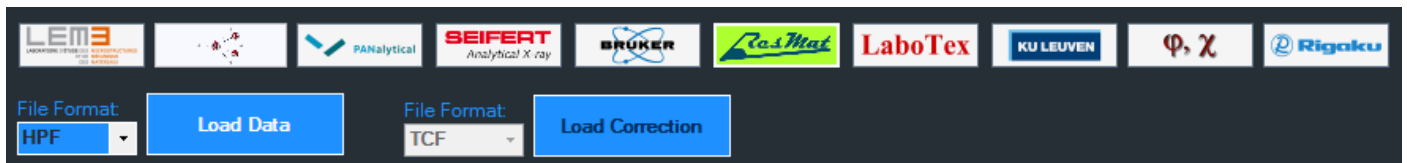


LaboTex



ガチガチのFormatでLaboTexで読み込めるデータでも読み込めない。

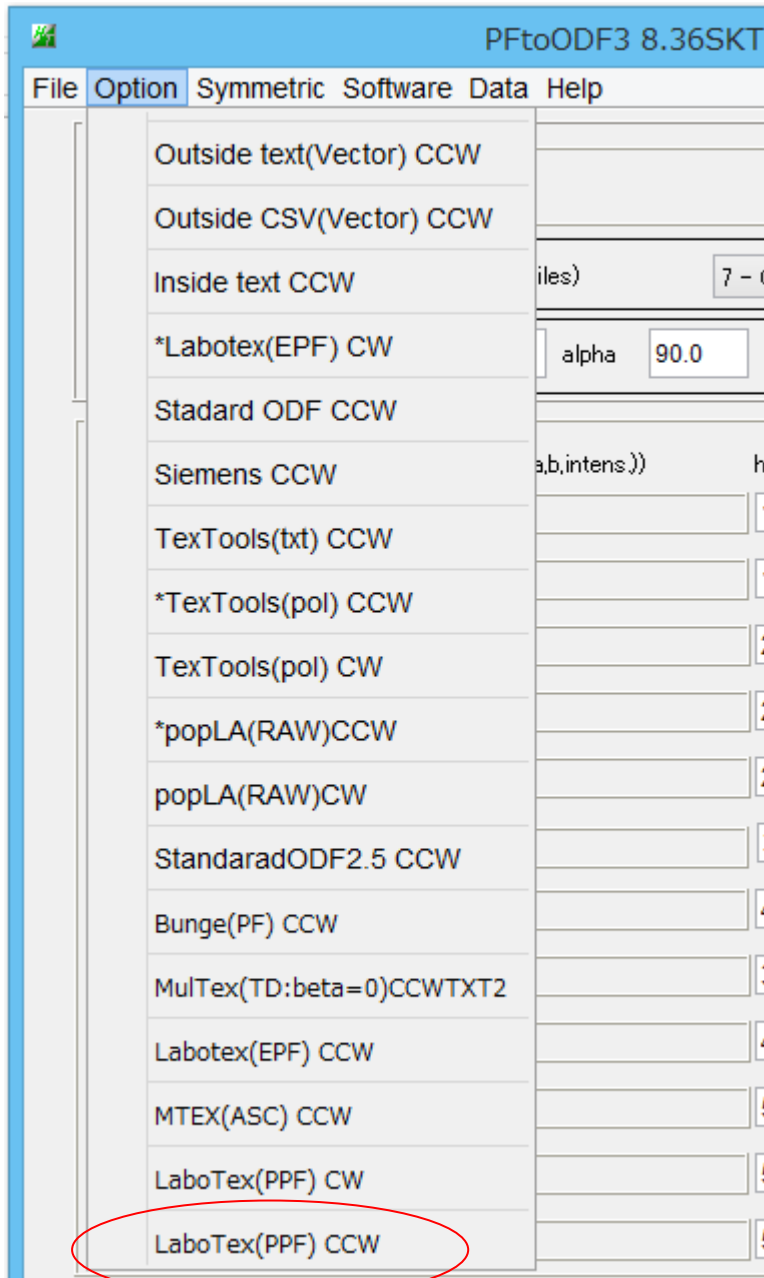
ResMat(TexTools)



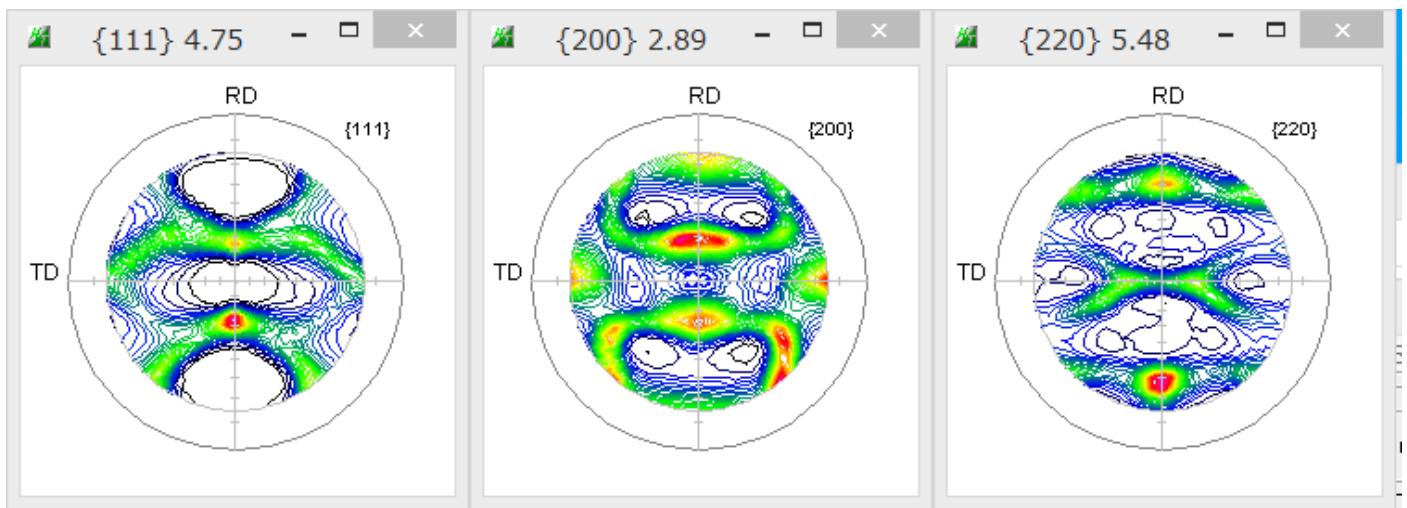
HPFは、TexToolsの再計算極点図の出力format

LaboTexのPPFformatを作成し調査する。

formatがガチガチでスペース1つずれても、読み込めない。



入力データ



PFtoODF3でPPFファイル作成

111_chB03D1_2.TXT 200_chB03D1_2.TXT 220_chB03D1_2.TXT

```

Structure Code a      b      c      alfa  beta  gamma      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
38.4    0.0   75.0   5.0    0.0   355.0  5.0    0     1  1  1  1  1
44.7    0.0   75.0   5.0    0.0   355.0  5.0    0     2  0  0  1  1
65.1    0.0   75.0   5.0    0.0   355.0  5.0    0     2  2  0  1  1
0.007276  0.007276  0.007276  0.007276  0.007276  0.007276  0.007276  0.007276  0.007276  0.007276
0.007276  0.007276  0.007276  0.007276  0.007276  0.007276  0.007276  0.007276  0.007276  0.007276
0.007276  0.007276  0.007276  0.007276  0.007276  0.007276  0.007276  0.007276  0.007276  0.007276
0.007276  0.007276  0.007276  0.007276  0.007276  0.007276  0.007276  0.007276  0.007276  0.007276
0.007276  0.007276  0.007276  0.007276  0.007276  0.007276  0.007276  0.007276  0.007276  0.007276
0.007276  0.007276  0.007276  0.007276  0.007276  0.007276  0.007276  0.007276  0.007276  0.007276
    
```

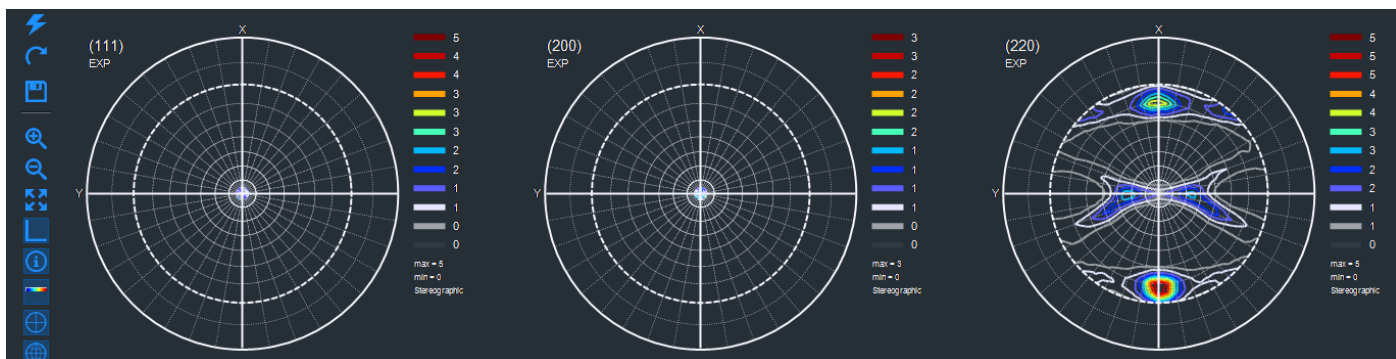
A T E Xで読み込み

File Format: PPF Load Data File Format: POW Load Correction

a: 1 b: 1 c: 1 α: 90 β: 90 γ: 90 Structure: [dropdown] Phi integration Left hand

	h	k	l	Step	2θ (°)	θ (°)	Collimator Height (mm)	Collimator Width (mm)	Detector Height (mm)	Detector Width (mm)	Bgd 2T inf (°)	Bgd 2T sup (°)
▶ 1	1	1	1	5/5	48	24	0.8	0.8	10	12	0	0
2	2	0	0	5/5	48	24	0.8	0.8	10	12	0	0
3	2	2	0	5/5	48	24	0.8	0.8	10	12	0	0

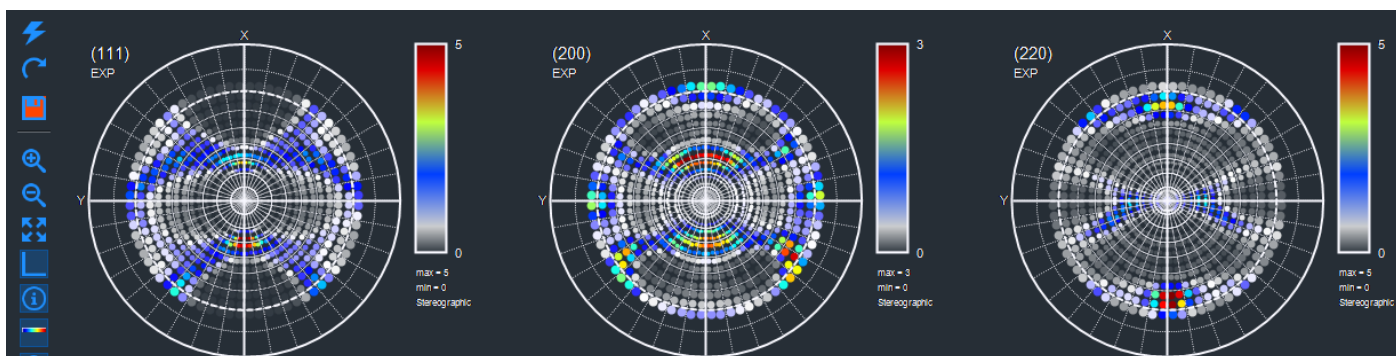
指数は読み込まれているが、2θ角度など???



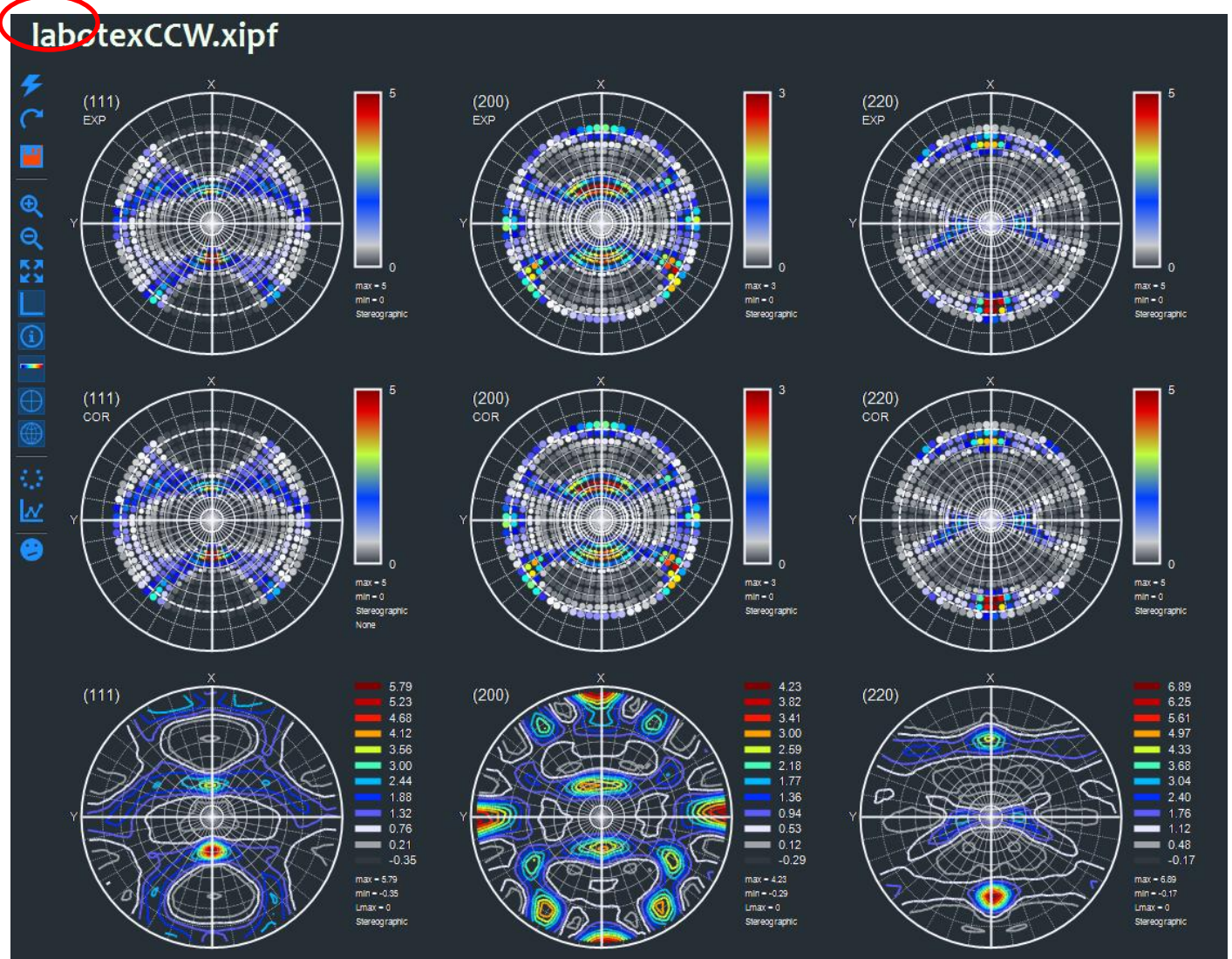
For Experimental

Contours Circles Filled Contours Filled

Fill Color: Rainbow



ODF 解析後の再計算極点図は表示される



更に ODF 結果の様なファイルが作成される。

odf_out.txt	2018/10/10 10:17	テキスト文書	1,107 KB
Texture_out.clm	2018/10/10 10:17	CLM ファイル	17 KB

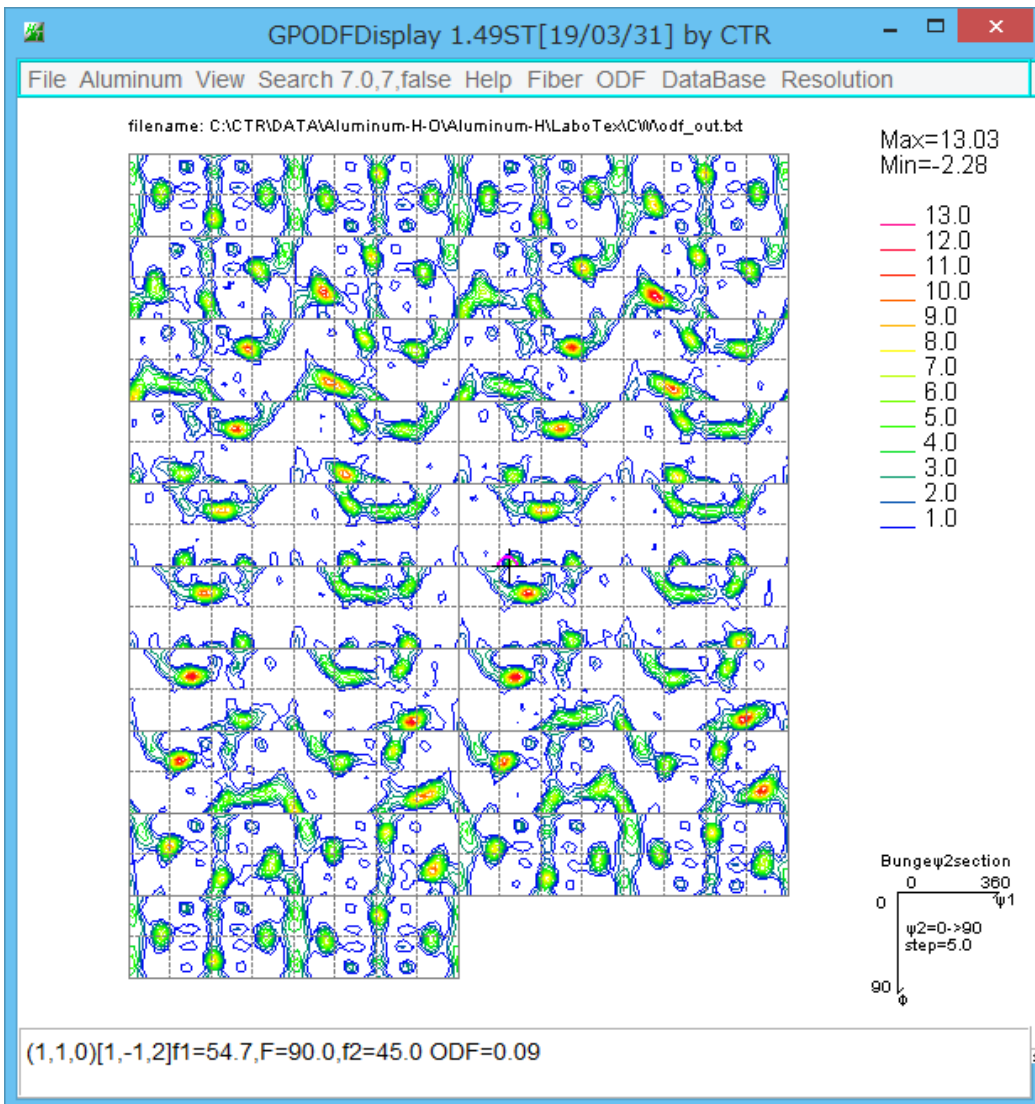
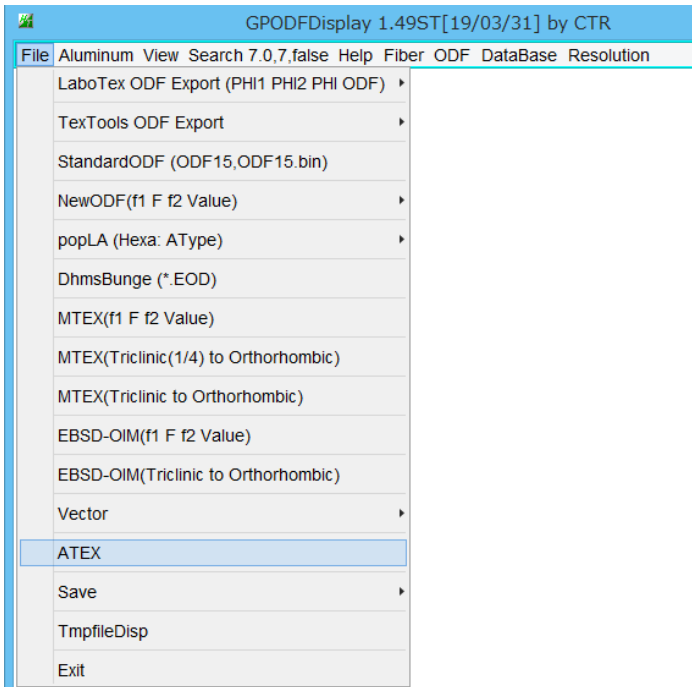
Phi1	Phi	Phi2	f(g)	f(g)dg * (10 * Nb_Phi1 * Nb_Phi * Nb_Phi2)
0.00	0.00	0.00	0.00	3.590
0.00	0.00	5.00	3.396	0.284
0.00	0.00	10.00	3.124	0.261
0.00	0.00	15.00	2.399	0.201
0.00	0.00	20.00	1.137	0.095
0.00	0.00	25.00	-0.083	0.000
0.00	0.00	30.00	-0.837	0.000
0.00	0.00	35.00	-1.105	0.000
0.00	0.00	40.00	-0.949	0.000
0.00	0.00	45.00	-0.650	0.000
0.00	0.00	50.00	-0.649	0.000
0.00	0.00	55.00	-0.919	0.000
0.00	0.00	60.00	-1.036	0.000
0.00	0.00	65.00	-0.867	0.000
0.00	0.00	70.00	-0.389	0.000
0.00	0.00	75.00	0.691	0.058
0.00	0.00	80.00	2.243	0.188
0.00	0.00	85.00	3.372	0.282
0.00	0.00	90.00	3.590	0.150
0.00	5.00	0.00	3.568	1.192
0.00	5.00	5.00	3.559	2.378
0.00	5.00	10.00	3.080	2.058
0.00	5.00	15.00	2.090	1.397
0.00	5.00	20.00	0.820	0.548
0.00	5.00	25.00	-0.243	0.000
0.00	5.00	30.00	-0.793	0.000
0.00	5.00	35.00	-0.844	0.000
0.00	5.00	40.00	-0.675	0.000
0.00	5.00	45.00	-0.680	0.000
0.00	5.00	50.00	-0.912	0.000
0.00	5.00	55.00	-0.962	0.000
0.00	5.00	60.00	-0.672	0.000
0.00	5.00	65.00	-0.396	0.000
0.00	5.00	70.00	-0.186	0.000
0.00	5.00	75.00	0.492	0.329
0.00	5.00	80.00	1.778	1.188
0.00	5.00	85.00	2.992	1.999
0.00	5.00	90.00	3.568	1.192
0.00	10.00	0.00	4.097	2.727
0.00	10.00	5.00	4.261	5.672
0.00	10.00	10.00	2.906	3.867
0.00	10.00	15.00	1.202	1.600
0.00	10.00	20.00	0.063	0.084
360.00	90.00	70.00	4.167	15.964↓
360.00	90.00	75.00	3.574	13.694↓
360.00	90.00	80.00	2.015	7.722↓
360.00	90.00	85.00	2.358	9.036↓
360.00	90.00	90.00	3.590	6.878↓

[EOF]

(ϕ_1 , Φ , ϕ_2) (360, 90, 90) が作成される。

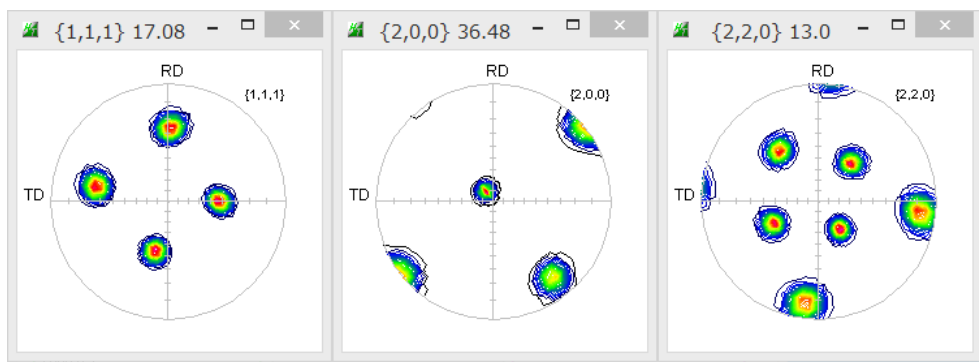
AT&EによるODF表示が不明なため、GPODFDisplay で表示

ODFデータの読み込み



非対称 ODF 解析の回転方向が分からないので調査

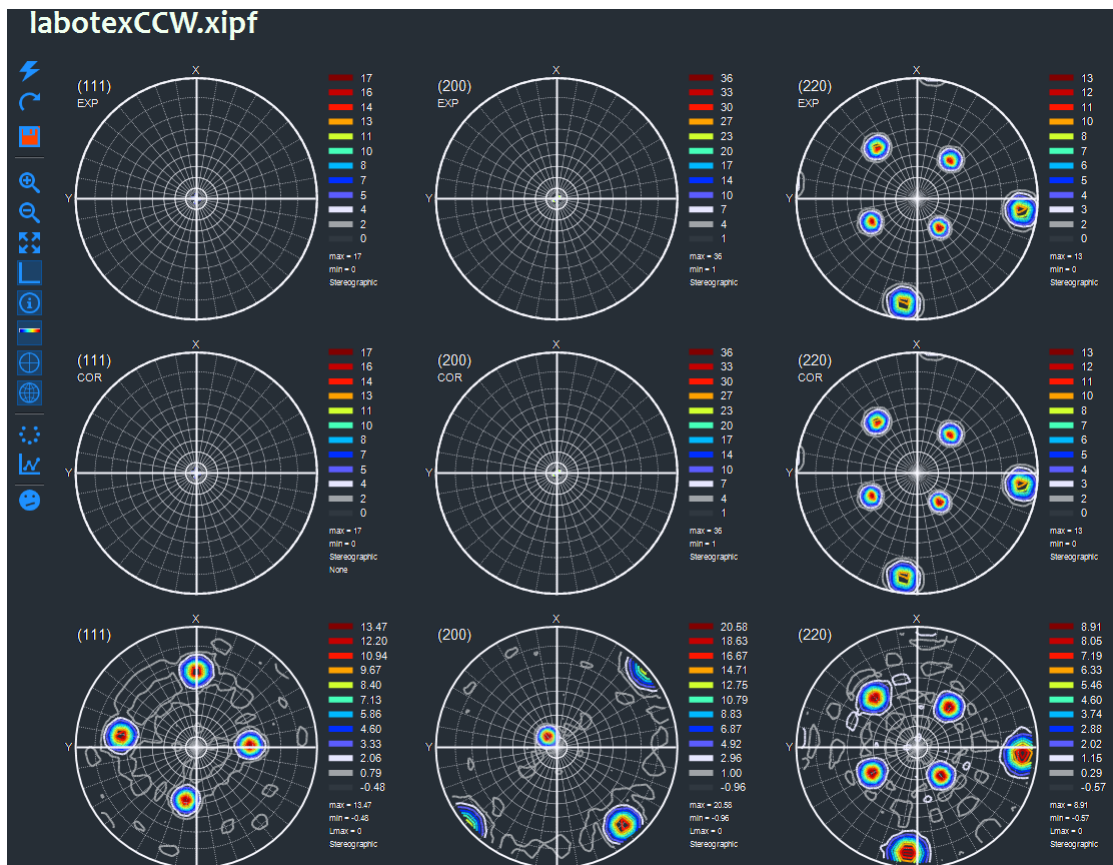
入力データ



CCW データ

111_5.0deg-rp2.TXT 200_5.0deg-rp2.TXT 220_5.0deg-rp2.TXT

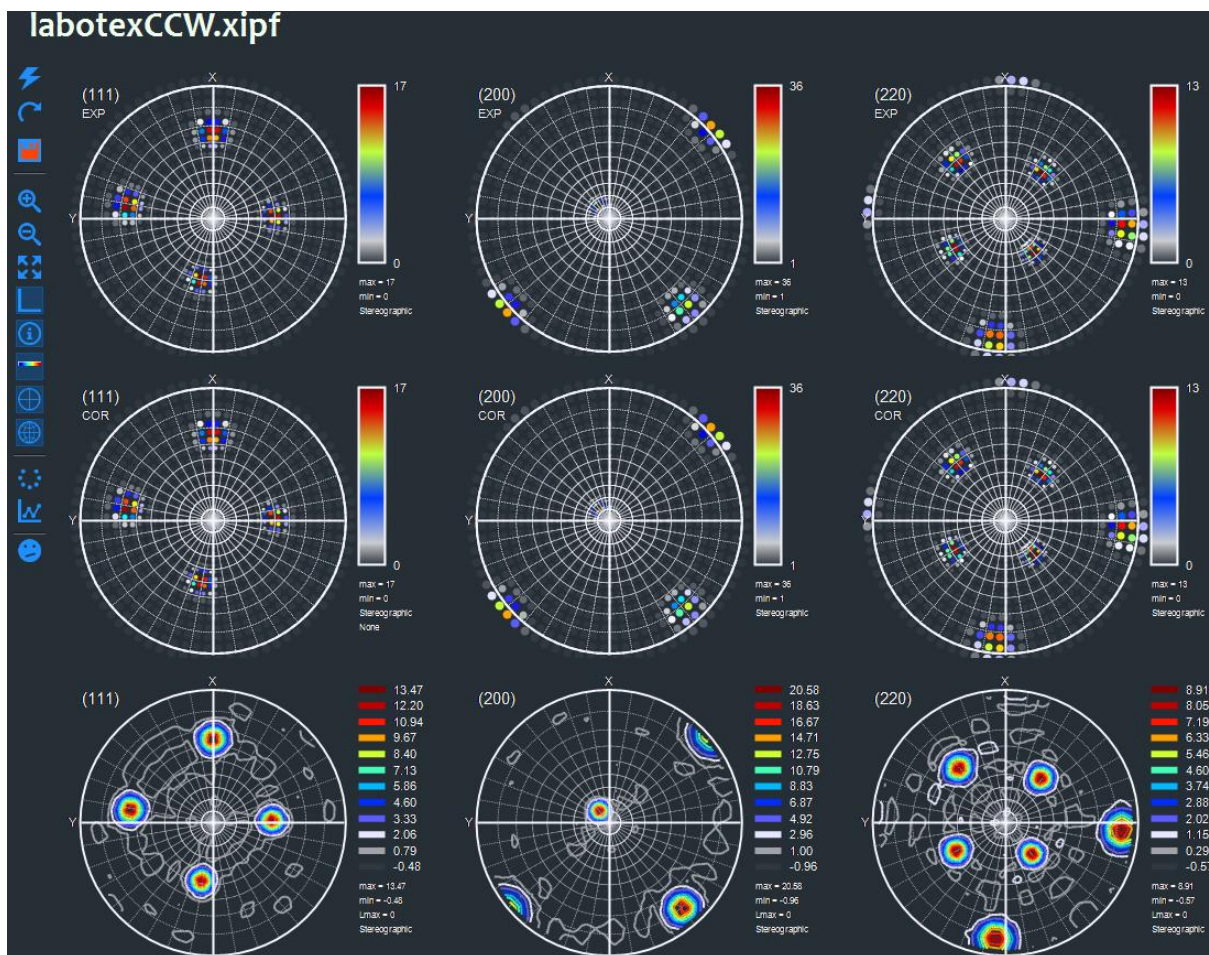
Structure Code	a	b	c	alfa	beta	gamma												
3	7	1.0		1.0	1.0	90.0	90.0	90.0										
2Theta	alf-s	alf-e	d-alf	bet-s	bet-e	d-bet	index	H	K	L	P/B							
28.4	0.0	90.0	5.0	0.0	355.0	5.0	0	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
69.0	0.0	90.0	5.0	0.0	355.0	5.0	0	4	0	0	0	1	1	1	1	1	1	1
47.3	0.0	90.0	5.0	0.0	355.0	5.0	0	2	2	0	0	1	1	1	1	1	1	1
0.520000		0.520000		0.520000		0.520000	0.520000		0.520000		0.520000	0.520000	0.520000	0.520000	0.520000	0.520000	0.520000	0.520000
0.520000		0.520000		0.520000		0.520000	0.520000	0.520000	0.520000	0.520000	0.520000	0.520000	0.520000	0.520000	0.520000	0.520000	0.520000	0.520000
0.520000		0.520000		0.520000		0.520000	0.520000	0.520000	0.520000	0.520000	0.520000	0.520000	0.520000	0.520000	0.520000	0.520000	0.520000	0.520000
0.520000		0.520000		0.520000		0.520000	0.520000	0.520000	0.520000	0.520000	0.520000	0.520000	0.520000	0.520000	0.520000	0.520000	0.520000	0.520000
0.520000		0.520000		0.520000		0.520000	0.520000	0.520000	0.520000	0.520000	0.520000	0.520000	0.520000	0.520000	0.520000	0.520000	0.520000	0.520000
0.520000		0.520000		0.520000		0.520000	0.520000	0.520000	0.520000	0.520000	0.520000	0.520000	0.520000	0.520000	0.520000	0.520000	0.520000	0.520000
0.520000		0.520000		0.520000		0.520000	0.520000	0.520000	0.520000	0.520000	0.520000	0.520000	0.520000	0.520000	0.520000	0.520000	0.520000	0.520000



再計算極点図はほぼ正しいが、Hermonicの様にghostが多い。

CCW で一致する。

プロットを変えてみる。



General Options

Isotropic Part:

Development EVEN initial:

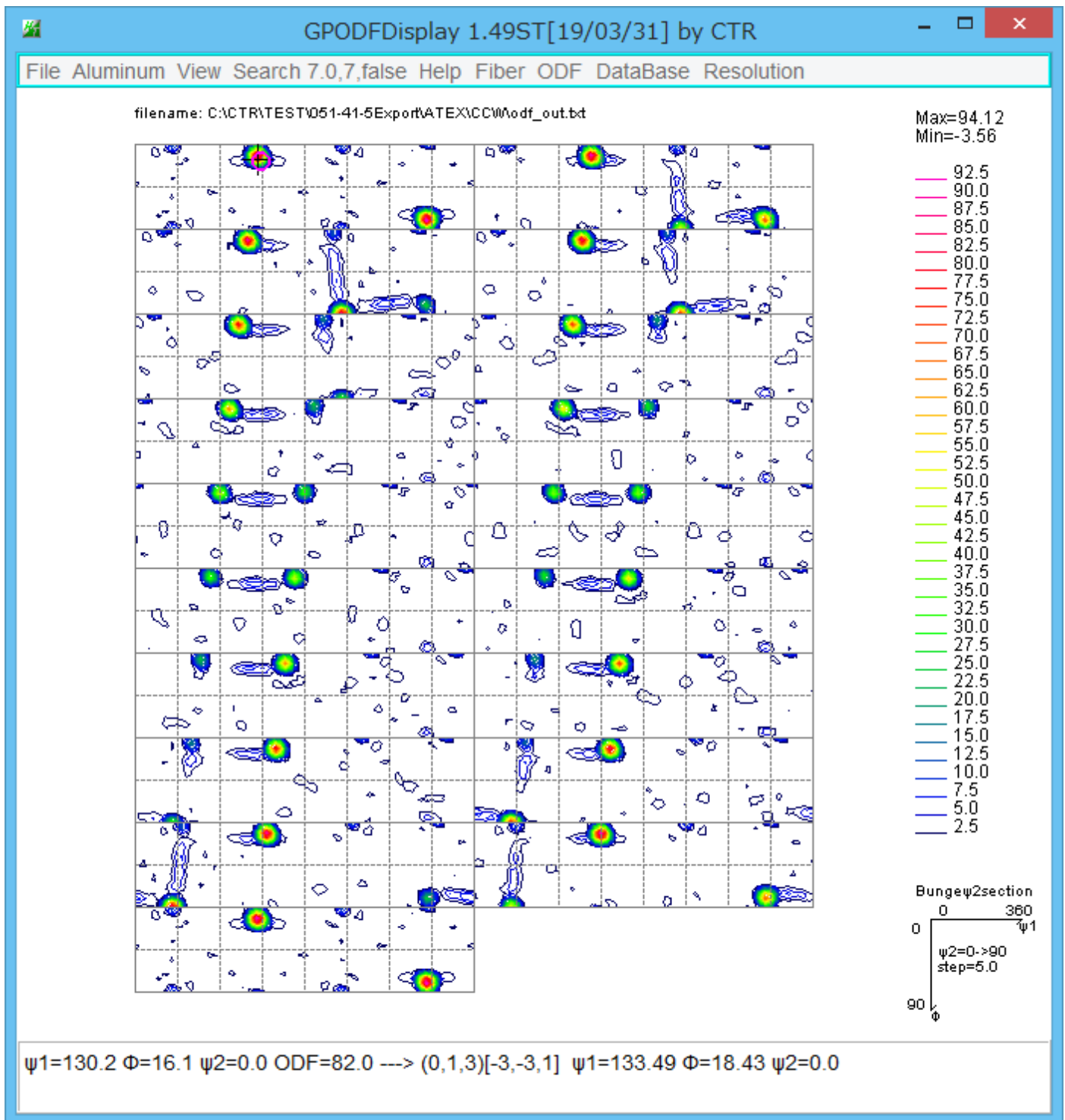
Development EVEN positivity:

Development ODD:

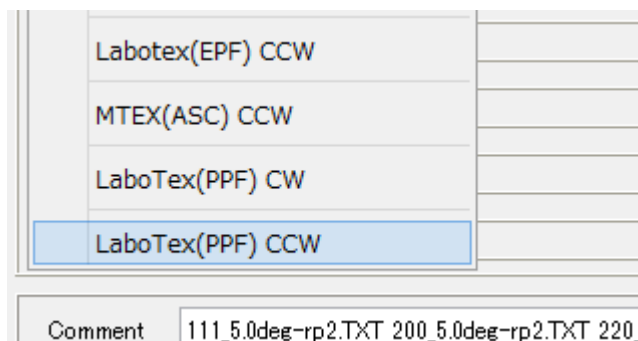
Maximum Tilt Angle (°):

C CWでTD方向は極点図の左側である。

ODF 結果



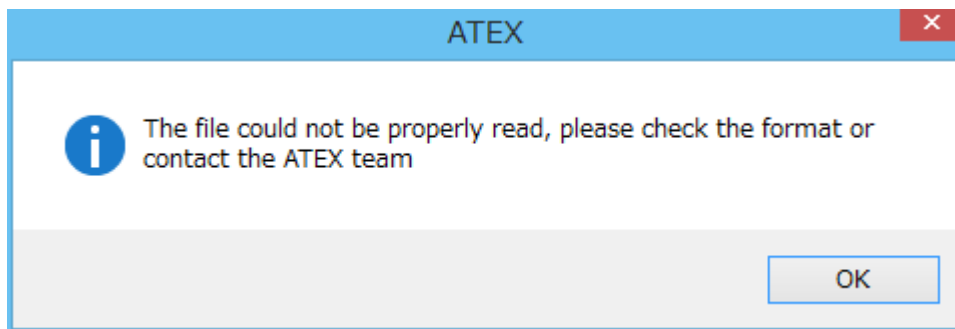
ATEXの場合、PFとODF3でLaboTEX (PPF) CCWを選択する。



2DPのような α 範囲が異なるデータ

```
111-5degZcut_chR0D1L39S_2.TXT 200-5degZcut_chR0D1L39S_2.TXT 220-5degZcut_chR0D1L39S_2.TXT 311-5degZcut_chR0D1L39S_2.TXT
Structure Code a      b      c      alfa    beta    gamma
7      1.0    1.0    1.0    90.0    90.0    90.0
4
2Theta  alf-s  alf-e  d-alf  bet-s  bet-e  d-bet  index  H  K  L  P/B
30.0    5.0    40.0   5.0    0.0    355.0  5.0    0      1  1  1  1  1
40.0    0.0    50.0   5.0    0.0    355.0  5.0    0      2  0  0  1  1
50.0   10.0   60.0   5.0    0.0    355.0  5.0    0      2  2  0  1  1
60.0   20.0   60.0   5.0    0.0    355.0  5.0    0      3  1  1  1  1
0.066060  0.065650  0.067291  0.060316  0.071805  0.069343  0.054982  0.046365
0.066470  0.075908  0.075908  0.047186  0.047596  0.064009  0.053751  0.047596
0.061957  0.059495  0.048827  0.057033  0.061547  0.063598  0.059085  0.068522
0.057444  0.069343  0.073446  0.060316  0.066470  0.062778  0.065650  0.075087
0.066881  0.073856  0.069343  0.096423  0.096834  0.075908  0.082473  0.079190
0.071805  0.059905  0.045955  0.050878  0.062367  0.058674  0.053751  0.066470
0.046640  0.046640  0.046640  0.050878  0.050878  0.050878  0.050878  0.050878
```

読み込めない



多分、極点図の中心が測定されていないデータは処理できないと考えます。