

# CTRソフトウェアによる材料の設定

2017年03月29日

*HelperTex Office*

概要

CTRソフトウェアでは、Materialソフトウェアによる材料の格子定数を定めていて LaboTex 向けの選択も行います。 LaboTex の格子定数は、直交座標系の Z 軸と結晶座標系の C 軸を一致させる手法が採用されている。この為、LaboTex で解析する場合、極点図の指数を変更する必要があります。

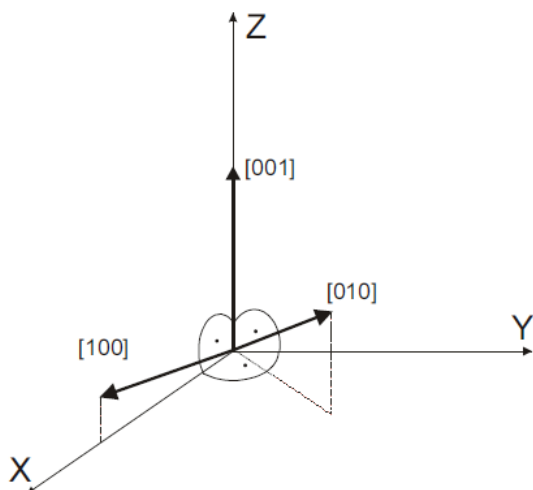


Figure 1

LaboTex uses following convention of the axis for fixing the crystal and sample coordinate system (Figure 1) :

1. X,Y,Z axis are perpendicular to each other,
2. [100] axis is in XZ plane,
3. Z axis is paralel to the [001] crystallographic axis,
4. Crystal coordinate system and sample coordinate system should be at the same order i.e. both right-handed or both left-handed,
5. Bunge definition of Euler angles.

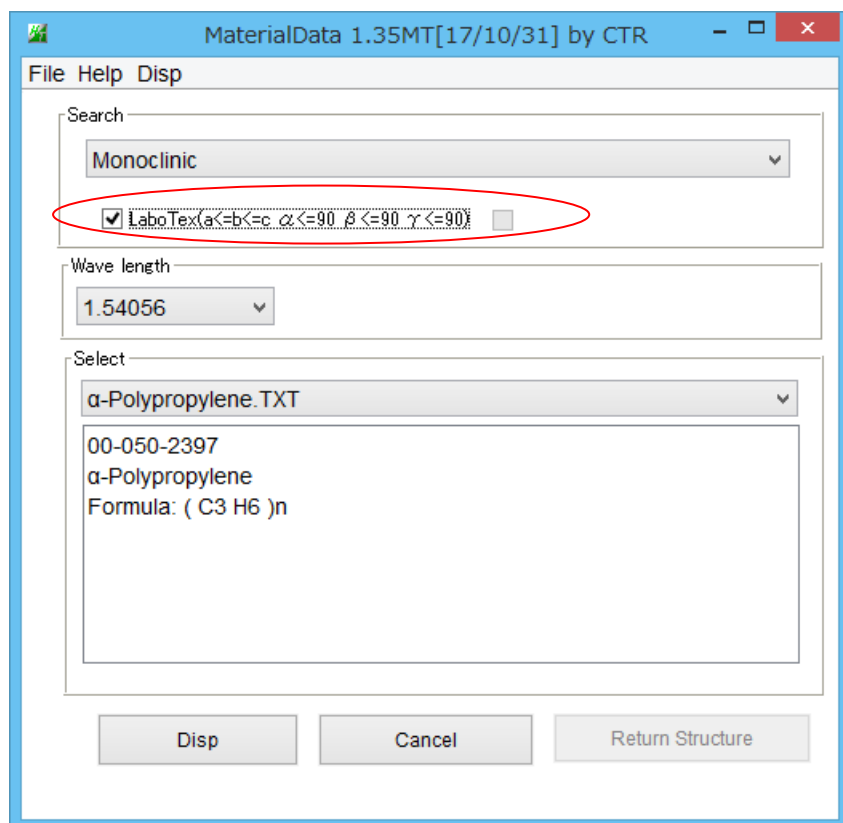
where X,Y,Z - axis of the crystal coordinate system,  
[100], [010],[001] - crystallographic axis.

Orthorhombic	$D_2$	$D_{2h}, D_2$	$a < b < c$	$90^\circ \ 90^\circ \ 90^\circ$	
	$C_2$	$C_{2v}$			
Monoclinic	$C_2$	$C_{2h}, C_2$	$a < b < c$	$90^\circ \ 90^\circ \ \gamma < 90^\circ$	
	$C_1$	$C_1$			
Triclinic	$C_1$	$C_1$	$a < b < c$	$\alpha \ \beta \ \gamma < 90^\circ$	

\* a, b, c,  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$ : the denotations of the cell parameters used in LaboTex

対策

Materialソフトウェアでは、LaboTex変換指定を可能にしています。



#### I C D D 表現

```
alpha-PolypropyleneDISP
Monoclinic
6.63      (1.0)
20.78     (3.1342)
6.5       (0.9804)
90.0
99.5
90.0
1.54056
145
0      2      0      2.6      10.39      8.503
1      0      0      1.2      6.5391     13.53
1      1      0      100.0    6.2375    14.187
0      4      0      54.0     5.195     17.054
1      3      0      71.4     4.7549    18.645
-1     2      1      2.3      4.5126    19.656
1      1      1      36.9     4.1556    21.364
-1     3      1      70.4     4.0593    21.877
1      2      1      1.8      3.9267    22.626
1      3      1      3.7      3.617     24.592
1      5      0      2.6      3.5075    25.372
0      6      0      10.8     3.4633    25.701
1      4      1      2.8      3.2854    27.119
-1     5      1      1.9      3.1986    27.869
0      1      2      1.5      3.168     28.145
2      2      0      8.8      3.1188    28.598
-2     1      1      1.6      3.0943    28.829
-1     0      2      1.6      3.0866    28.903
0      2      2      6.5      3.063     29.13
-2     2      1      0.2      2.9962    29.794
```

#### L a b o T e x 表現

```
alpha-PolypropyleneDISP
Monoclinic
6.5       (1.0)
6.63      (1.02)
20.78     (3.1969)
90.0
90.0
80.5
1.54056
145
0      0      2      2.6      10.39      8.503
0      -1     0      1.2      6.5391     13.53
0      -1     1      100.0    6.2375    14.187
0      0      4      54.0     5.195     17.054
0      -1     3      71.4     4.7549    18.645
1      1      2      2.3      4.5126    19.656
1      -1     1      36.9     4.1556    21.364
1      1      3      70.4     4.0593    21.877
1      -1     2      1.8      3.9267    22.626
1      -1     3      3.7      3.617     24.592
0      -1     5      2.6      3.5075    25.372
0      0      6      10.8     3.4633    25.701
1      -1     4      2.8      3.2854    27.119
1      1      5      1.9      3.1986    27.869
2      0      1      1.5      3.168     28.145
0      -2     2      8.8      3.1188    28.598
1      2      1      1.6      3.0943    28.829
2      1      0      1.6      3.0866    28.903
2      0      2      6.5      3.063     29.13
1      2      2      0.2      2.9962    29.794
```

格子定数とミラー指数が異なります。

MaterialソフトウェアでDispすると、システムのデフォルト領域にcopyされ、他のソフトウェアで参照します。(C:\¥CTR¥work¥MYICDD¥DISP¥disp.txt)

## 問題点

La b o T e x の再極点図を E x p o r t すると、指数領域が数値と解釈され妙な計算が行われる。

例えば、P o l y p r o p y l e n e の場合

{ 0 - 1 1 } が -9. 0.0 5.0

{ 1 - 1 1 } が 91. 0.0 5.0

と表示される。

{ 0 - 1 1 } の場合、 $(0) * 100 + (-1) * 10 + (1) = -9$ と計算される

{ 1 - 1 1 } の場合  $(1) * 100 + (-1) * 10 + (1) = 91$ と計算される

## P E T の場合

### I C D D

#### P E T D I S P

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	5.4317
0	1	0	37.0	4.9939
-1	1	1	21.8	4.1368
-1	1	0	61.7	3.9099
0	1	1	13.1	3.6865
-1	1	2	13.5	3.5637
1	0	0	100.0	3.4095
1	-1	1	25.2	3.1675
0	-1	3	2.2	3.1108
0	0	3	3.9	2.854
-1	-1	3	2.8	2.7877
0	-2	1	3.7	2.7283
-1	2	1	2.2	2.6932
-1	0	4	0.2	2.6497

### L a b o T e x

#### P E T D I S P

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	30.6	5.4317	16.305
0	1	0	37.0	4.9939	17.746
1	1	1	21.8	4.1368	21.463
1	1	0	61.7	3.9099	22.724
1	1	1	13.1	3.6865	24.122
1	2	2	13.5	3.5637	24.966
0	0	0	100.0	3.4095	26.114
-1	-1	1	25.2	3.1675	28.149
0	-1	3	2.2	3.1108	28.673
0	0	3	3.9	2.854	31.317
-1	-1	3	2.8	2.7877	32.081
0	-2	1	3.7	2.7283	32.798
1	2	1	2.2	2.6932	33.238
0	0	4	0.2	2.6497	33.801

{ 0 - 1 1 } が -9. 0.0 5.0

{ - 1 - 1 1 } が -109. 0.0 5.0

{ - 1 - 1 - 1 } が -111. 0.0 5.0

{ - 1 - 2 - 3 } が -123. 0.0 5.0

全て  $(h) * 100 + (k) * 10 + (l)$  で計算される

LaTeX極点図のTPFファイルを参照しているソフトウェア

ValueODF、ValueODFVF、makePoleFile、LaboTexDisplay  
PPの{004}、{0-11}、{0-13}の場合

ValueODF

ValueODF 1.89MVFT[17/10/31] by CTR									
File Help Resolution:5.0 Mode(1)									
Normalized Polefigure	4	-9	-7						W*PPの解析#I
Recalculated Polefigure	4	-9	-7						
Rp%	0.7	0.7	2.2						

ValueODFVF

ValueODFVF 2.15MVFT[17/10/31] by CTR									
File Help Resolution:5.0 EqualAngle TextDisplay FolderDisp Polefiguredisp									
Normalized Polefigure	004	0-9	0-7						W*PPの解析#ICDD#
Recalculated Polefigure	004	0-9	0-7						PP-Labo-pole.TPF
Rp%	0.4	0.5	1.9						Average= 0.9 %

MakePoleFile

Index select

- EXPERIMENTAL - CORRECTED POLE FIGURE -9
- EXPERIMENTAL - CORRECTED POLE FIGURE 4
- EXPERIMENTAL - CORRECTED POLE FIGURE -9
- EXPERIMENTAL - CORRECTED POLE FIGURE -7
- EXPERIMENTAL - NORMALIZED POLE FIGURE 4
- EXPERIMENTAL - NORMALIZED POLE FIGURE -9
- EXPERIMENTAL - NORMALIZED POLE FIGURE -7
- RECALCULATED POLE FIGURE 4
- RECALCULATED POLE FIGURE -9

Out Filename: \_\_\_\_\_  
PoleFigureCenter : 90  TXT2  TXT  Asc  Ras  TXT2 filename HKL.TXT

MakePoleFile 1.73MT[17/10/31] by CTR

SelectFile: W:\PPの解析\ICDD\平滑化\TD軸回転\LaboTex\CW\PP-Labo-pole.TPF

Step Angles: 5.0deg

Out Filename: PoleFigureCenter : 90  TXT2  TXT  Asc  Ras  TXT2 filename HKL.TXT

W:\PPの解析\ICDD\平滑化\TD軸回転\LaboTex\CW\0-9\_labotex\CW-rp\_2.TXT

と表示されている。

この問題を改善する為には、システムデフォルトを採用する必要があります。

T P Fファイルを参照する場合、

システムデフォルトに登録されている物質を参照する必要があります。

( I C D D  $\leftrightarrow$  L a b o T e x の変換テーブルが必要になります。)

ソフトウェアの改善

M a k e P o l e F i l e のマテリアル設定の追加

V a l u e O D F V F にマテリアル設定の追加

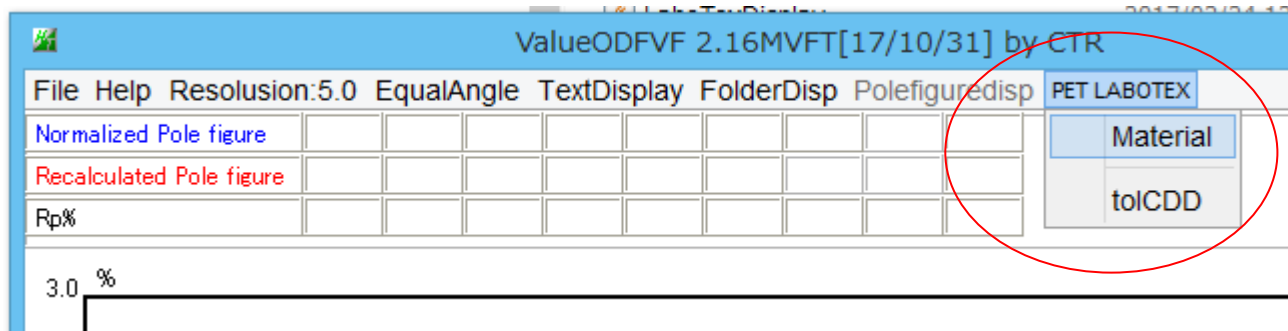
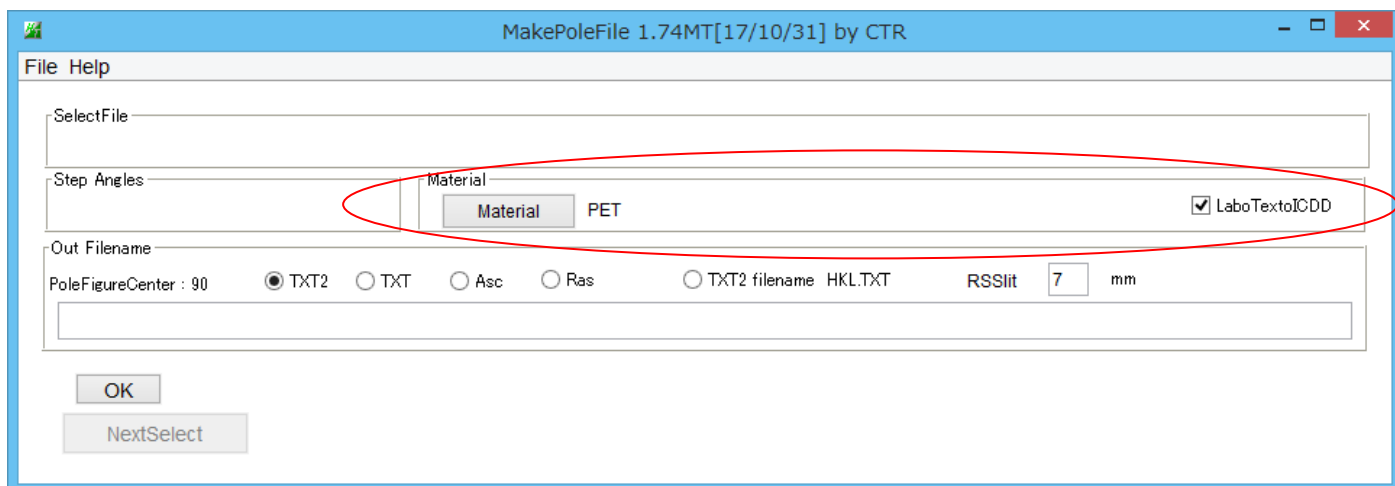
( V a l u e I D F にマテリアル設定の追加)

L a b o T e x D i s p l a y

改良点

L a b o T e x の極点図を E x p o r t した場合、極点図の指数は L a b o T e x 表示であるが、I C D D 表示に変換するとも可能になります。

ソフトウェアの変更



結果

ValueODFVFのLaboTex指数表示

ValueODFVF 2.16MVFT[17/10/31] by CTR										
File Help Resolution:5.0 EqualAngle TextDisplay FolderDisp Polefiguredisp α-Polypropylene LABOTEX										
Normalized Polefigure	004	0-11	0-13							W#PPの解析#ICDD#平滑化#TD軸
Recalculated Polefigure	004	0-11	0-13							PP-Labo-pole.TPF
Rp%	0.4	0.5	1.9							Average= 0.9 %
3.0 %										

ValueODFVFのICDD指数表示

ValueODFVF 2.16MVFT[17/10/31] by CTR										
File Help Resolution:5.0 EqualAngle TextDisplay FolderDisp Polefiguredisp α-Polypropylene ICDD										
Normalized Polefigure	040	110	130							W#PPの解析#ICDD#平滑化
Recalculated Polefigure	040	110	130							PP-Labo-pole.TPF
Rp%	0.4	0.5	1.9							Average= 0.9 %
3.0 %										

MakePoleFileのLaboTex指数表示

Index select

- EXPERIMENTAL - CORRECTED POLE FIGURE 004
- EXPERIMENTAL - CORRECTED POLE FIGURE 0-11
- EXPERIMENTAL - CORRECTED POLE FIGURE 0-13
- EXPERIMENTAL - NORMALIZED POLE FIGURE 004
- EXPERIMENTAL - NORMALIZED POLE FIGURE 0-11
- EXPERIMENTAL - NORMALIZED POLE FIGURE 0-13
- RECALCULATED POLE FIGURE 004
- RECALCULATED POLE FIGURE 0-11

OK NextSelect

MakePoleFileのICDD指数表示

Index select

- EXPERIMENTAL - CORRECTED POLE FIGURE 040
- EXPERIMENTAL - CORRECTED POLE FIGURE 110
- EXPERIMENTAL - CORRECTED POLE FIGURE 130
- EXPERIMENTAL - NORMALIZED POLE FIGURE 040
- EXPERIMENTAL - NORMALIZED POLE FIGURE 110
- EXPERIMENTAL - NORMALIZED POLE FIGURE 130
- RECALCULATED POLE FIGURE 040
- RECALCULATED POLE FIGURE 110

OK NextSelect