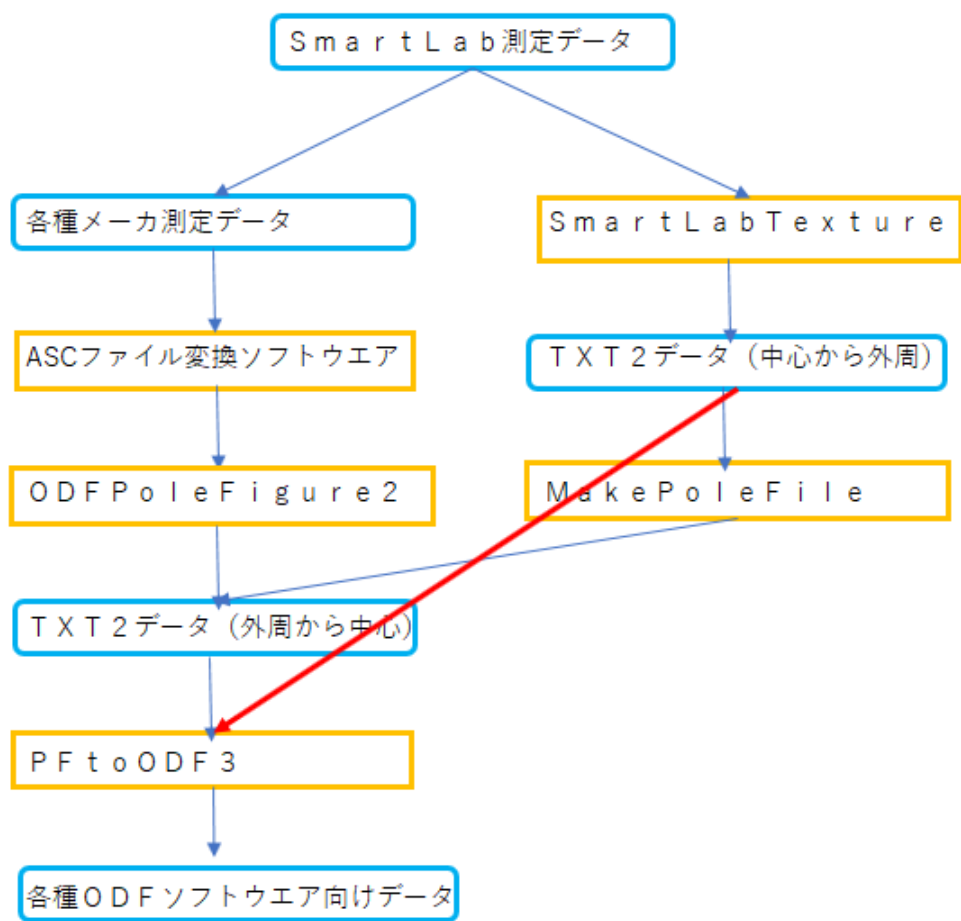


SmartLabExport 極点図から StandardODF 入力ファイル作成



2023年10月04日

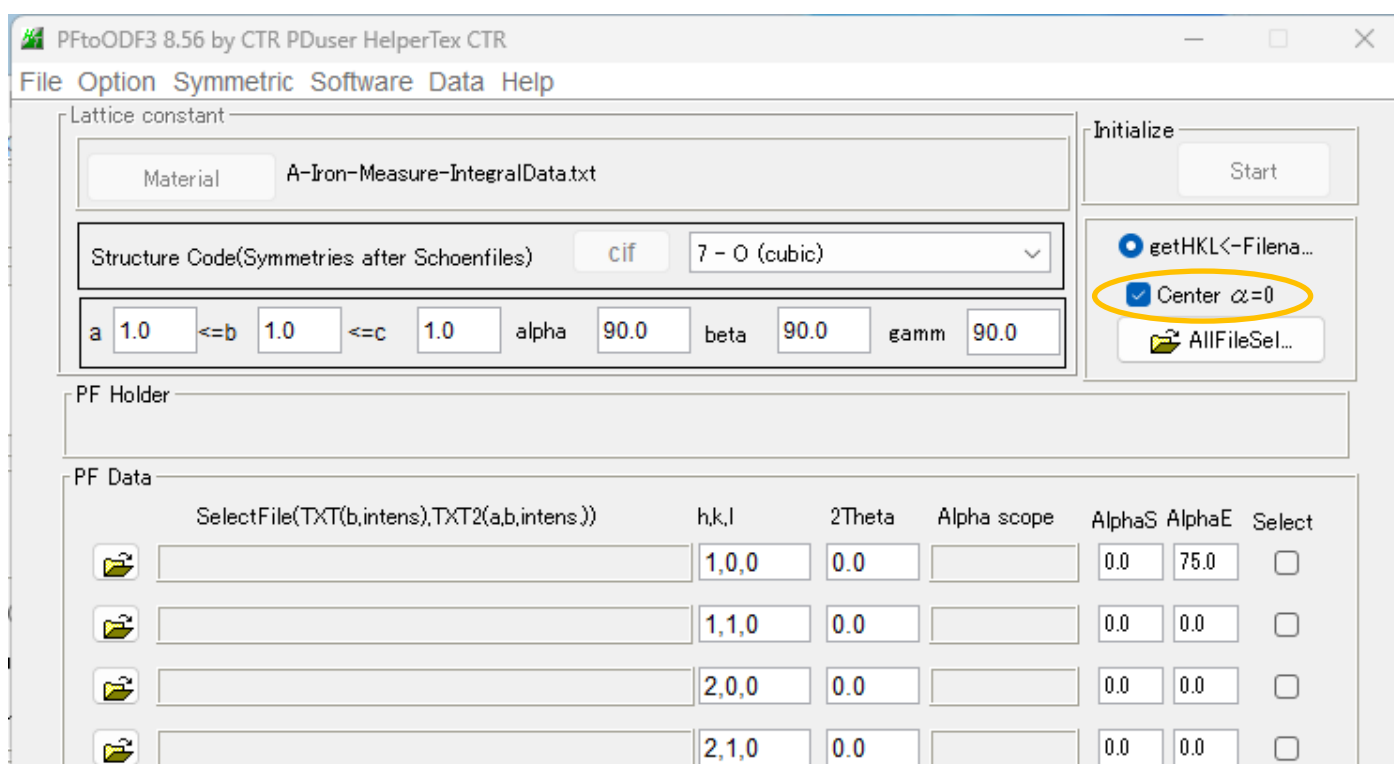
HelperTex Office

概要

SmartLabのExportデータは極点図の中心から外周に向けて並んである。
StandardODF入力データはPftoODF3ソフトウェアで作成している。
PftoODF3は極点図の外周から中心に向けたTXT2データを読み込むため
データ並び替えが必要（であったが、PftoODF3に中心から外周の並び極点図の読み込みを
追加した。

極点処理は、入力データ、バックグラウンドデータの確認修正、defocus効果の確認
Rp%の確認をしながら、ODFPoleFigure2ソフトウェアで行っているが
外部処理を行った極点図データも直接取り込めます。

変更



Center $\alpha=0$ の選択で、並び替えファイルを作成し、読み込みます。

ファイル名. asc → ファイル名c90. asc

SmartLabによる極点処理結果 (BG, defocus) のExport

SmartLab Studio II x64 v4.5.428.0 >> Administrators グループから Administrator としてログインしています

Exportファイル

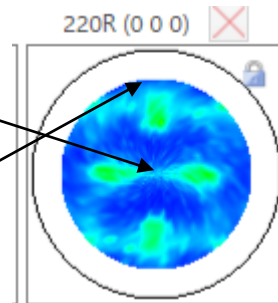
名前	更新日時	種類	サイズ
220R.txt	2023/10/04 水曜日 1:02	テキスト文書	20 KB
111R.txt	2023/10/04 水曜日 1:02	テキスト文書	20 KB
200R.txt	2023/10/04 水曜日 1:02	テキスト文書	20 KB

220R.txt ファイル

```

0 0 1.428611↓ 75 270 0.5123889↓
0 5 1.428611↓ 75 275 0.3151941↓
0 10 1.428611↓ 75 280 0.6171889↓
0 15 1.428611↓ 75 285 0.4483774↓
0 20 1.428611↓ 75 290 0.654504↓
0 25 1.428611↓ 75 295 0.8472329↓
0 30 1.428611↓ 75 300 0.9290087↓
0 35 1.428611↓ 75 305 1.382051↓
0 40 1.428611↓ 75 310 1.54987↓
0 45 1.428611↓ 75 315 2.596282↓
0 50 1.428611↓ 75 320 1.398029↓
0 55 1.428611↓ 75 325 0.5371994↓
0 60 1.428611↓ 75 330 0.2352046↓
0 65 1.428611↓ 75 335 0.2867115↓
0 70 1.428611↓ 75 340 0.9307951↓
0 75 1.428611↓ 75 345 0.5843396↓
0 80 1.428611↓ 75 350 0.5630025↓
0 85 1.428611↓ 75 355 0.7557314↓
0 90 1.428611↓ 75 360 0.4483774↓
    
```

$\alpha = 0$ は極点図の中心のTXT 2ファイル



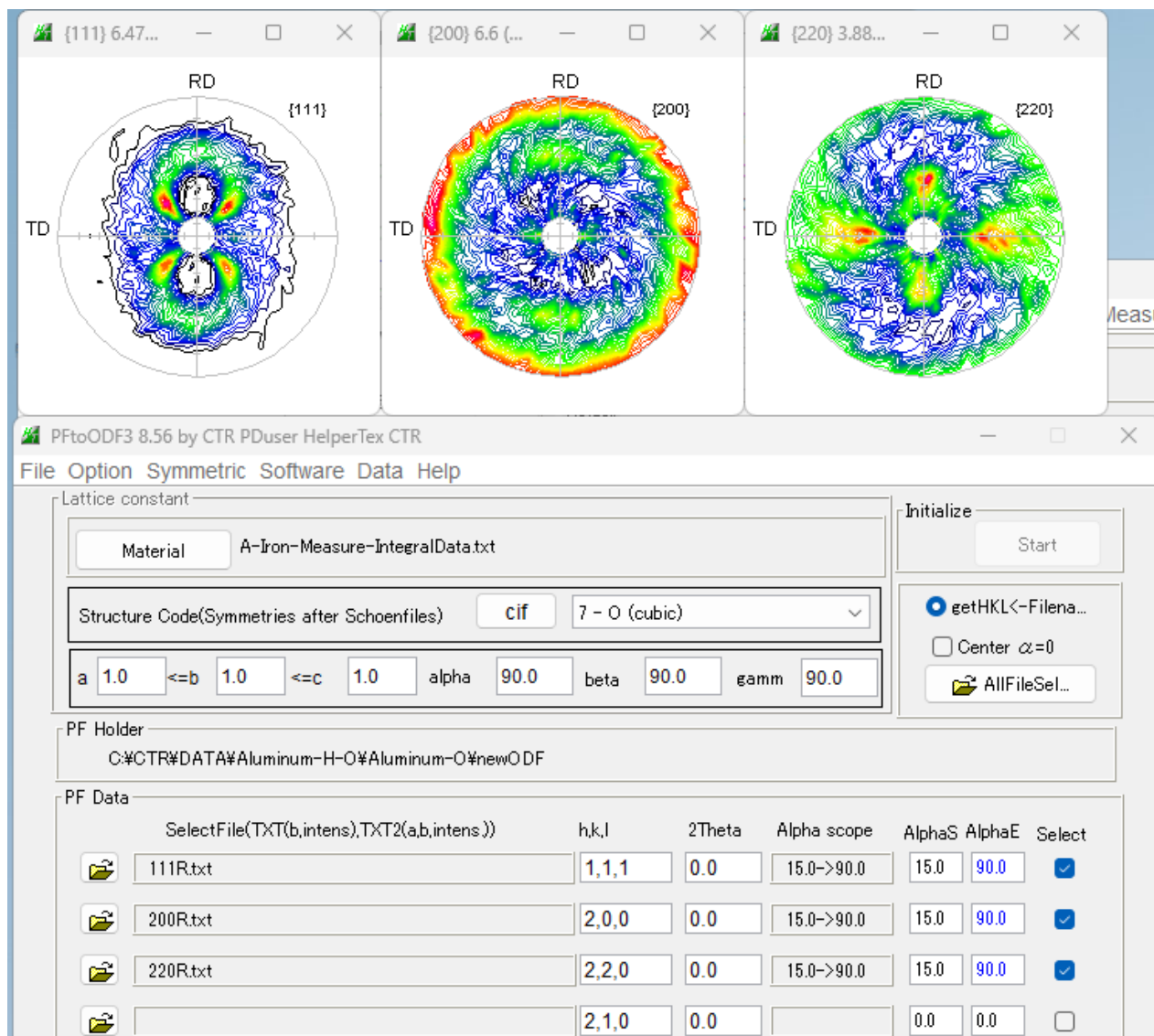
Standard ODFの入力ファイルはPFtoODF3ソフトウェアで作成

PFtoODF3は、ODFPoleFigure2ソフトウェア作成TXT2ファイルを読み込む
TXT2ファイル (α 、 β 、密度)

α は、極点図の外周から中心に向けて並ぶ

直接PFtoODF3で読み込む

極点図が逆転してしまう。

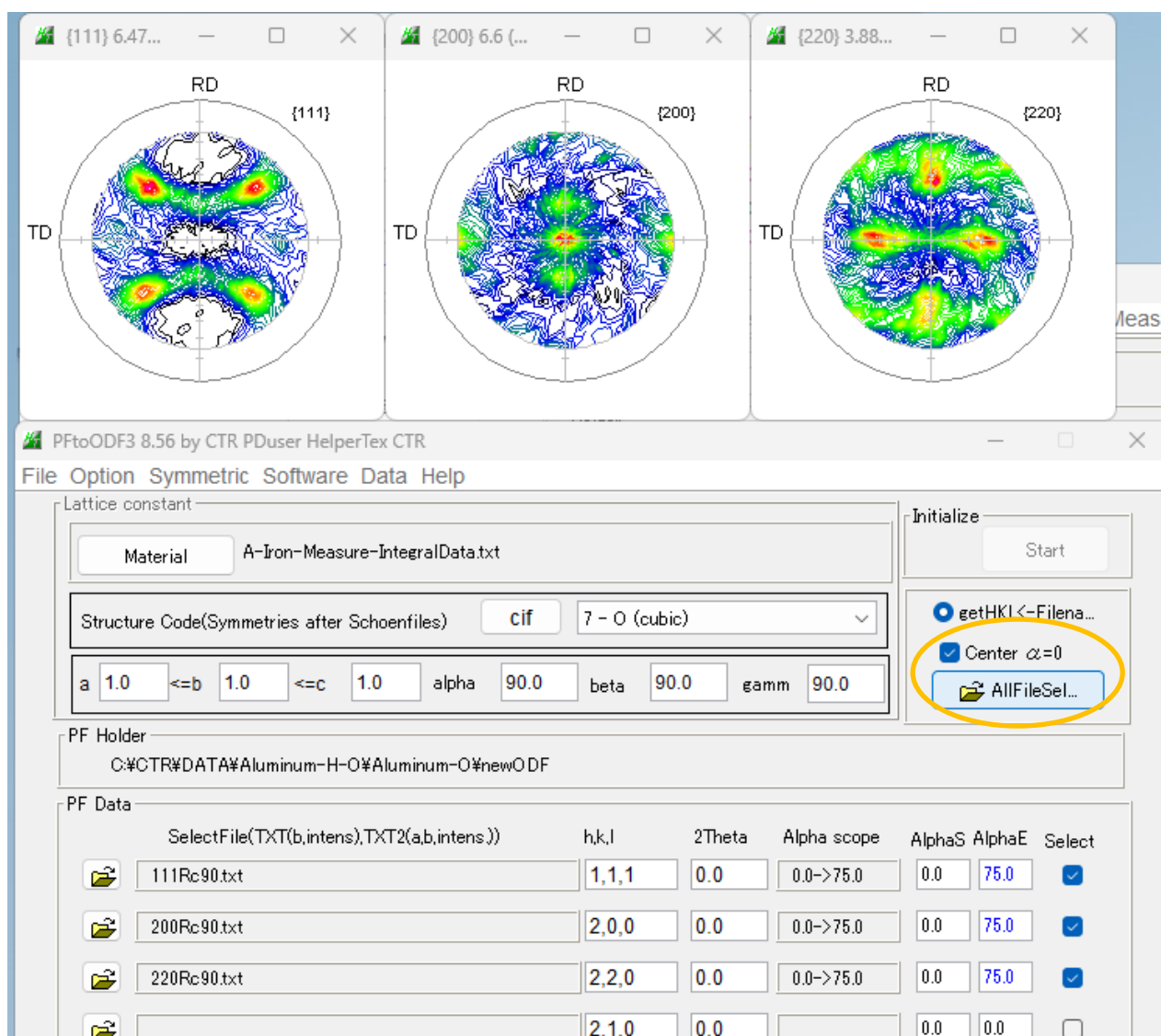


The screenshot displays the PFtoODF3 software interface. At the top, three windows show pole figures for {111}, {200}, and {220} reflections. Each window has 'RD' (Rolling Direction) and 'TD' (Transverse Direction) axes. The {111} plot shows a four-lobed pattern, {200} shows a six-lobed pattern, and {220} shows a four-lobed pattern. Below the plots is the software's control panel. It includes a 'Lattice constant' section with a 'Material' dropdown set to 'A-Iron-Measure-IntegralData.txt', a 'Structure Code' dropdown set to '7 - O (cubic)', and input fields for lattice parameters a, b, c, alpha, beta, and gamma, all set to 1.0 or 90.0. An 'Initialize' section has a 'Start' button and radio buttons for 'getHKL<-Filena...' (selected) and 'Center $\alpha=0$ '. Below this is a 'PF Holder' field containing a file path. The 'PF Data' section is a table with columns for file selection, h,k,l, 2Theta, Alpha scope, AlphaS, AlphaE, and a 'Select' checkbox.

SelectFile(TXT(b,intens),TXT2(a,b,intens))	h,k,l	2Theta	Alpha scope	AlphaS	AlphaE	Select
111R.txt	1,1,1	0.0	15.0->90.0	15.0	90.0	<input checked="" type="checkbox"/>
200R.txt	2,0,0	0.0	15.0->90.0	15.0	90.0	<input checked="" type="checkbox"/>
220R.txt	2,2,0	0.0	15.0->90.0	15.0	90.0	<input checked="" type="checkbox"/>
	2,1,0	0.0		0.0	0.0	<input type="checkbox"/>

$\alpha = 0$ は透過領域として読み込まれてしまう。

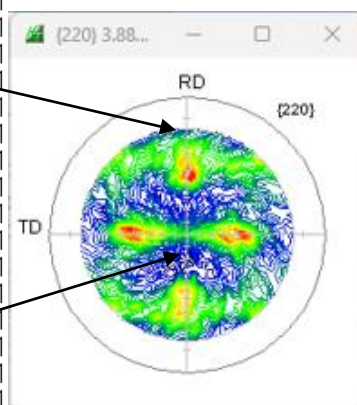
極点図中心 $\alpha = 0$ と指定して読み込む



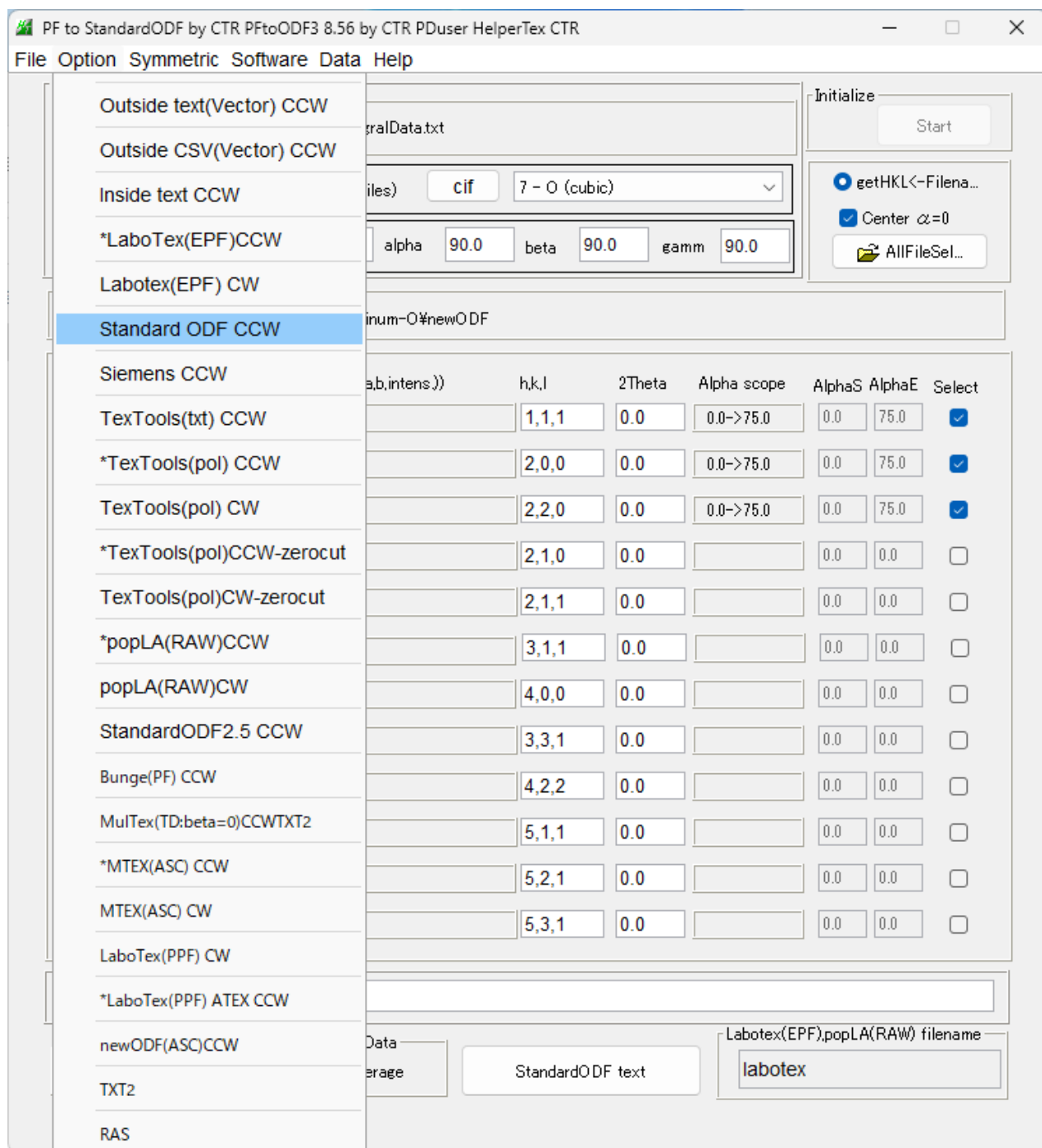
ファイル名+.txt → ファイル名+c90.txtとして変換したファイルを作成し表示している。

111Rc90.txtファイル

15.0	0.0	0.4483774、	90.0	270.0	1.428611
15.0	5.0	0.3773198、	90.0	275.0	1.428611
15.0	10.0	0.6891397、	90.0	280.0	1.428611
15.0	15.0	0.42446↓	90.0	285.0	1.428611
15.0	20.0	0.3001092、	90.0	290.0	1.428611
15.0	25.0	0.2219061、	90.0	295.0	1.428611
15.0	30.0	0.4741805、	90.0	300.0	1.428611
15.0	35.0	1.164412↓	90.0	305.0	1.428611
15.0	40.0	2.256079↓	90.0	310.0	1.428611
15.0	45.0	1.748851↓	90.0	315.0	1.428611
15.0	50.0	1.847498↓	90.0	320.0	1.428611
15.0	55.0	1.175031↓	90.0	325.0	1.428611
15.0	60.0	0.8934799、	90.0	330.0	1.428611
15.0	65.0	0.6252275、	90.0	335.0	1.428611
15.0	70.0	1.049787↓	90.0	340.0	1.428611
15.0	75.0	0.6509313、	90.0	345.0	1.428611
15.0	80.0	0.2547554、	90.0	350.0	1.428611
15.0	85.0	0.3889312、	90.0	355.0	1.428611
15.0	90.0	0.7336003、	90.0	360.0	1.428611



StandardODF向けファイル作成



作成されるStandardODF向けファイル

名前	更新日時	種類	サイズ
111Rc90StdODF.TXT	2023/10/04 水曜日 1:31	テキスト文書	11 KB
200Rc90StdODF.TXT	2023/10/04 水曜日 1:31	テキスト文書	11 KB
220Rc90StdODF.TXT	2023/10/04 水曜日 1:31	テキスト文書	11 KB

ODF Calculation

極点図データ

面指数	重み	ファイル名(フルパス)	
<input checked="" type="checkbox"/> (100)	1	C:\CTR\DATA\Aluminum-H-O\Alumin...	参照
<input checked="" type="checkbox"/> (110)	1	C:\CTR\DATA\Aluminum-H-O\Alumin...	参照
<input checked="" type="checkbox"/> (111)	1	C:\CTR\DATA\Aluminum-H-O\Alumin...	参照
<input type="checkbox"/> (210)	1		参照
<input type="checkbox"/> (211)	1		
<input type="checkbox"/> (221)	1		
<input type="checkbox"/> (310)	1		
<input type="checkbox"/> (311)	1		
<input type="checkbox"/> (321)	1		
<input type="checkbox"/> (331)	1		
<input type="checkbox"/> (411)	1		参照
<input type="checkbox"/> (511)	1		参照

α max = 75 $\Delta\alpha$ = 5 $\Delta\beta$ = 5

β 角のタイプ

- $\beta = 0^\circ, 5^\circ, 10^\circ, \dots, 350^\circ, 355^\circ$
- $\beta = 2.5^\circ, 7.5^\circ, 12.5^\circ, \dots, 357.5^\circ$

集合組織変換

- しない
- RD極点図 → ND-ODF
- TD極点図 → ND-ODF

Standard ODF
for Windows XP/Me/2000/9SSE/98/
NT4.0/95 Ver.2.4 [解析法について](#)

結晶方位分布関数

展開回数 22

ゼロ密度領域のしきい値 0.3

表示断面 Phi1断面 Phi2断面

再計算極点図

1 100 2 110

3 111 4

1/4極点図 係数 偶数項 奇数項

0% 100%

実行(G) 終了(E)

計算結果

完全ODFの最大強度: 26.61
偶数項ODFの最大強度: 21.81
再計算極点図の最大強度: 9.72
逆極点図の最大強度: 9.72

OK