

各種ODF用テキストデータ作成

P F t o O D F 3 ソフトウェア

Ver.8.46

2019年10月07日



HelperTex Office

<http://helpertex.sakura.ne.jp>

- * Version 7.002 2010/10/01 MaterialData と連動
- * Version 7.003 2010/10/03 MaterialData 起動はデータ選択後
- * Version 7.004 2010/12/10 step1.0 で 0-359 に限ってエラーstdlib 修正
- * Version 7.100 2010/12/13 popLA 向け一般ユーザに開放
- * Version 7.101 2010/12/31 StandaradODF2.5 を追加
- * Version 7.102 2011/01/05 popLA max100->計算に変更
- * Version 7.103 2011/01/05 popLA 測定されていない領域は 0. 0 とした
- * Version 7.104 2011/01/12 LaboTex でも polA に変換、変換モードを設定すれば良いが
- * Version 7.105 2011/01/15 StandardODF 変換では StadardODF ディレクトリ以下に登録
- * Version 7.105 2011/01/15 StandardODF 変換ではファイル名に_RD25 を追加
- * Version 7.106 2011/01/19 StandardODF の Dir を STndardODF でセットした Dir から取得
- * Version 7.107 2011/02/17 全てのODF用のサブディレクトリを作成し、ファイルを格納
- * Version 7.108 2011/09/09 格子定数表示が 1 桁足りない修正
- * Version 7.109 2011/09/09 極点図の中心は平均値へ
- * Version 7.110 2011/10/02 初期セットの値が Siemens と StandardODF が入れ違いになっていた。
- * Version 7.111 2012/02/03 TexTools(pol)に Clockwise rotation をサポート
- * Version 7.112 2012/02/13 popLA に Clockwise rotation をサポート
- * Version 7.113 2012/02/23 Bungeformat をサポート
- *Version 8.00Z3 2012/06/10 新しい管理に変更
- *Version 8.04 2012/09/15 popLA から CW,CCW を外す。
- *Version 8.05 2012/11/27 MULTEX 向け TXT 2 対応
- *Version 8.06 2012/11/30 Multex(TD be-ta=0)CCWTXT2 に変更
- * Version 8.07 2013/01/23 Vector 法の見直し
- * Version 8.08 2013/01/24 TEXT 表示を TextDisplay から n o t e p a d に変更
- * Version 8.09 2013/01/28 HelperTex CCW 追加、Conditionsave 見直し
- * Version 8.10 2013/03/04 Outside text 作成ファイル名入力可能に
- * Version 8.11 2013/04/07 popLA 解析時、work¥PFtoODF3¥popla80.txt ファイルあれば
* 外周 4 点による 3 次式の外挿を行う。
- *Version 8.12 2014/02/05 エラー処理の変更
- *Version 8.13 2014/02/17 Icon 変更
- * Version 8.14 2014/06/30 極点図の中心強度を平均値に変更
- * Version 8.15 2015/03/16 L i m i t より新しいファイルが選択されたとき、エラーファイル作成処理追加
- * Version 8.16 2015/09/22 極点図中心データの平均を行った後、中心データを小数点以下 4 桁に修正
- *Version 8.17 2015/11/07 単独ファイル選択の場合、Bungeformat の修正 BungeEpfwrite()
- * Version 8.18 2015/11/19 Space 対策 EpfFileMake() name->""+name+""
- * Version 8.19 2015/12/08 popLA75->80 を 75->75
- * Version 8.20 2015/12/19 popLA の 5 deg 以外に対応
- * Version 8.21 2016/01/11 TXT2 複数選択で非選択に対応
- * Version 8.22 2016/01/27 popLA RAW ファイル I A V G format 変更 popLArawwrite()
- *Version 8.23 2016/02/17 popLA *CW->*CCW に変える。
- * Version 8.24 2016/10/04 極点図の中心平均切り替え機能追加
- * Version 8.25 2016/10/05 Average の StandardODF 修正

*Version 8.26	2016/12/14	Vector 法、平滑化部分修正
* Version 8.27	2017/02/12	FileSelect で等高線極点図を表示
*Version 8.28	2017/03/08	デフォルト ODF を最終 ODF とする
*Version 8.29	2017/07/11	最終ファイル作成に失敗を修正
*Version8.30	2017/11/16	TexTools の NEW ファイル作成を上書きに変更
*Version8.31	2018/01/05	StandardODF テキスト中心データ 1 点異なる修正
*Version8.33	2018/02/12	MTEX サポート
*Version8.34	2018/04/12	Vector 法向け C S V ファイル作成
* Version 8.34	2019/04/12	Vector 用透過、反射 csv ファイル対応(40,45,50)
* Version 8.35	2018/07/03	0.0001 以下は 0 とした
*Version 8.40	2018/11/02	TexTools データ測定されていない領域の zero データ削除（処理が安定しない） 測定されていないを含めないと、繰り返し計算で結果が異なる
*Version 8.41	2018/12/24	入力データが T X T の場合、極点図の表示は行わない stdlib.TXT2poledisp
*Version 8.42	2019/07/06	TXT2 複数選択時 Step が細かいと選択できない修正、
*Version 8.43	2019/07/15	加工データの T X T 2 ファイル作成追加
*Version 8.45	2019/09/17	対称性を見直し
*Version 8.46	2019/10/07	popLA 測定されていない α 80 度のデータ予測を修正で予測なしとした

1. 概要
2. 入力データ
3. データ処理の流れ
4. ソフトウェアの使い方
 4. 1 起動
 4. 2 機能配置
 4. 3 メニュー
 4. 3. 1 F i l eメニュー
 4. 3. 2 O p t i o nメニュー
 4. 3. 3 データ対称操作
 4. 3. 4 ソフトウェアメニュー
 4. 3. 5 D a t aメニュー
5. アルミニウムデータを PoleFigure2 で処理し、PFtoODF3 で加工
 5. 1 PFtoODF3 に極点処理結果ファイルを反映
6. ODFファイルの作成
 6. 1 V e c t o r法データの作成
 6. 2 L a b o T e xデータの作成
 6. 3 S t a n d a r d O D Fデータ作成
 6. 4 T e x T o o l s (C C W) データの作成
 6. 5 p o p L A (C W) データの作成
 6. 6 B u n g eデータの作成
 6. 7 M u l T e xデータの作成
 6. 8 M T E Xデータの作成
7. L a b o T e xの向けデータの作成 (M a r e r i a l D a t a)
 7. 1 O r t h o r h o m b i c例
 7. 2 M o n o c l i n i c例
 7. 3 T r i c l i n i c例
8. T r i g o n a l (R h o m b o h e d e r a l)
9. 体心正方晶から面心正方晶への変換

1. 概要

本ソフトウェアは、正極点処理結果データ(TXT,TXt2)から各種ODF入力データに変換する事を目的としています。登録されているODF以外での対応も簡単に追加できます。

2. 入力データ

TXTデータ

β 角度、極密度の羅列

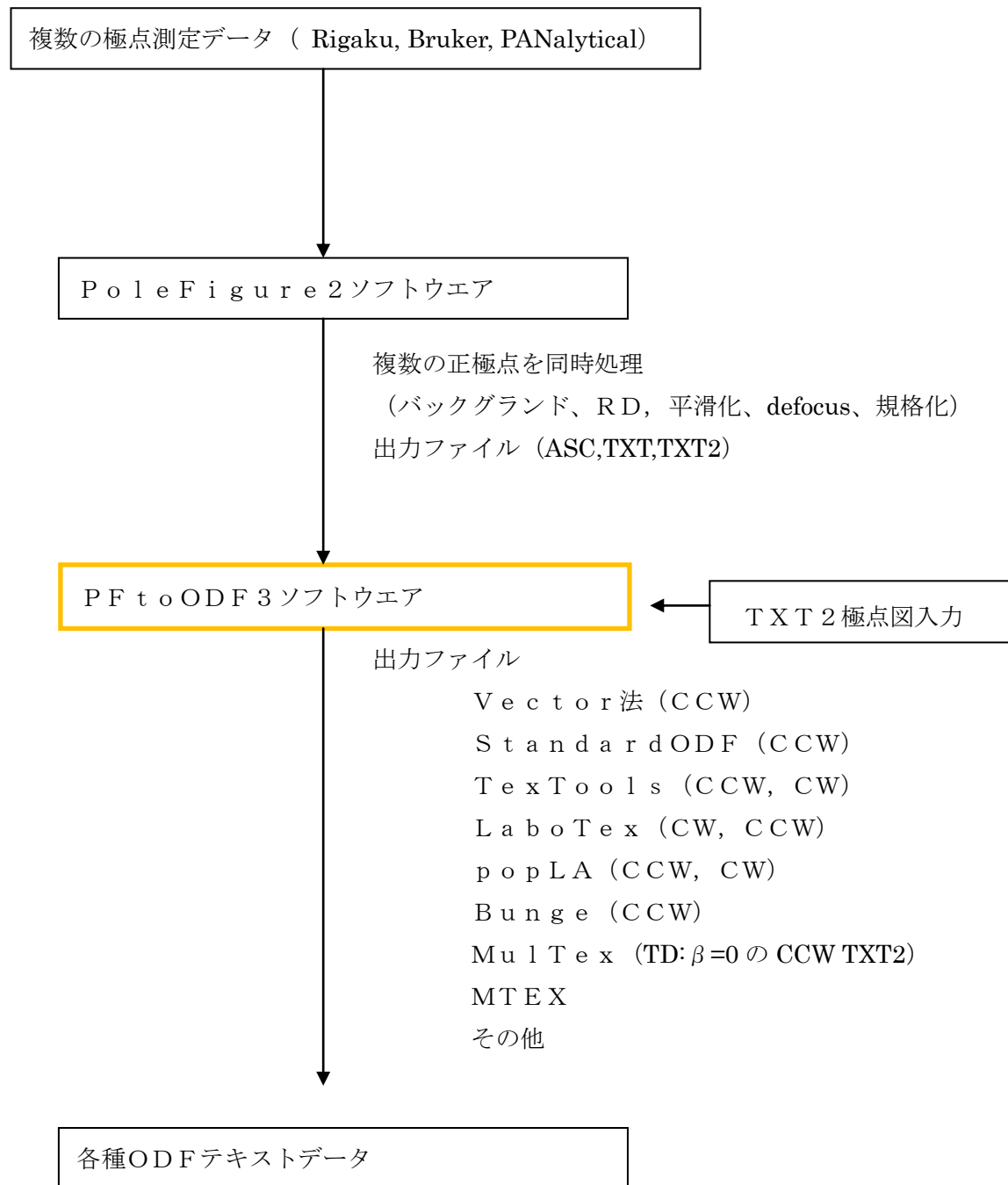
0.0	0.5918
5.0	0.6019
10.0	0.6454
15.0	0.681
20.0	0.7185
25.0	0.7852
30.0	0.8578
35.0	0.8878
40.0	0.8913
45.0	0.9063
50.0	0.8828
55.0	0.8292
60.0	0.8047
350.0	0.6775
355.0	0.6299
360.0	0.5993
0.0	0.2501
5.0	0.2635
10.0	0.2776
15.0	0.2666
20.0	0.3276
25.0	0.4374
30.0	0.6154

TXT2データ

α 角度、 β 角度、極密度の羅列

15.0	0.0	0.5918
15.0	5.0	0.6019
15.0	10.0	0.6454
15.0	15.0	0.681
15.0	20.0	0.7185
15.0	25.0	0.7852
15.0	30.0	0.8578
15.0	35.0	0.8878
15.0	40.0	0.8913
15.0	45.0	0.9063
15.0	50.0	0.8828
15.0	55.0	0.8292
15.0	60.0	0.8047
15.0	350.0	0.6775
15.0	355.0	0.6299
15.0	360.0	0.5993
20.0	0.0	0.2501
20.0	5.0	0.2635
20.0	10.0	0.2776
20.0	15.0	0.2666
20.0	20.0	0.3276
20.0	25.0	0.4374
20.0	30.0	0.6154

3. データ処理の流れ



CW,CCW とは

極点図データの並びで、通常、RD を起点とするが、Multex は TD を起点とし

CW : ClockWise (時計回転方向)

CCW: Counter-ClockWise (半時計回転方向)

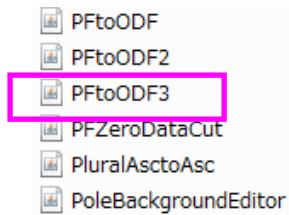
注意 : TD 方向は、CW は右、CCW は左に記載が妥当であるが、曖昧になっている。

4. ソフトウェアの使い方

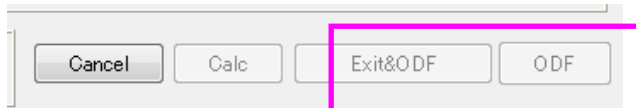
4. 1 起動

ソフトウェアの実態は、C:\CTR\bin\PFtoODF3.jar

1) このファイルを直接マウスクリックで起動

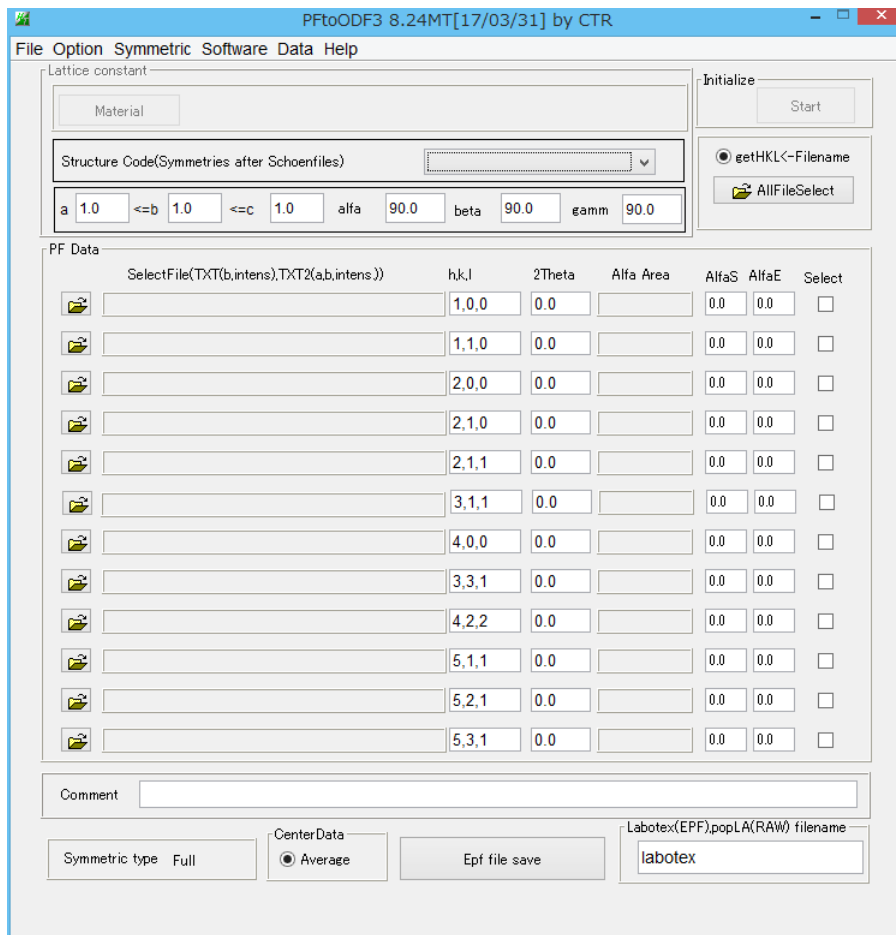
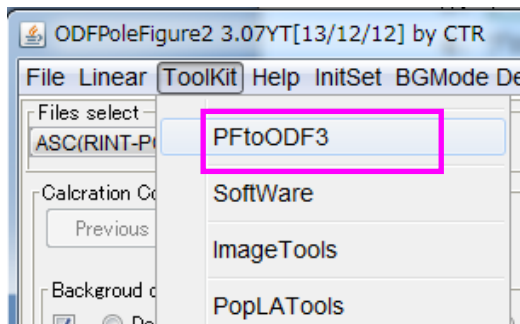


2) PoleFigure2 ソフトウェアで極点処理(Calc)を終了後、ODF ボタンで起動



PoleFigure2 ソフトウェアで処理したファイルが引き継がれる。

3) PoleFigure2 ソフトウェアの TooKit メニューの PFtoODF3 から起動



4. 2 機能配置

物質指定

格子定数、指数のチェックと指定

パラメータの初期化

複数同時入力ファイルの選択（極点図表示）

PftoODF3 8.24MT[17/03/31] by CTR

File Option Symmetric Software Data Help

Lattice constant

Material

Structure Code(Symmetries after Schoenflies)

a 1.0 <=b 1.0 <=c 1.0 alfa 90.0 beta 90.0 gamm 90.0

Initialize

Start

getHKL<-Filename

AllFileSelect

PF Data

SelectFile(TXT(b,intens),TXT2(a,b,intens))

	h,k,l	2Theta	Alfa Area	AlfaS	AlfaE	Select
	1,0,0	0.0		0.0	0.0	<input type="checkbox"/>
	1,1,0	0.0		0.0	0.0	<input type="checkbox"/>
	2,0,0	0.0		0.0	0.0	<input type="checkbox"/>
	2,1,0	0.0		0.0	0.0	<input 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"/>
	5,2,1	0.0		0.0	0.0	<input type="checkbox"/>
	5,3,1	0.0		0.0	0.0	<input type="checkbox"/>

Comment

Symmetric type Full

CenterData

Average

Epfile save

Labotex(EPF),popLA(RAW) filename

labotex

入力ファイル名表示

入力ファイルの単一指定

データ平均化状態表示

極点図中心密度の平均化

入力データ α 範囲表示

入力データの指数と 2θ 角度

出力ファイルの α 範囲指定

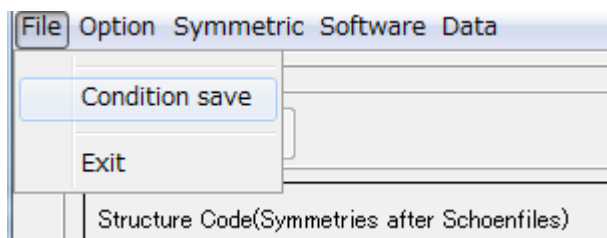
出力ファイル作成

出力ファイル名指定

作成するデータ指定

4. 3 メニュー

4. 3. 1 Fileメニュー



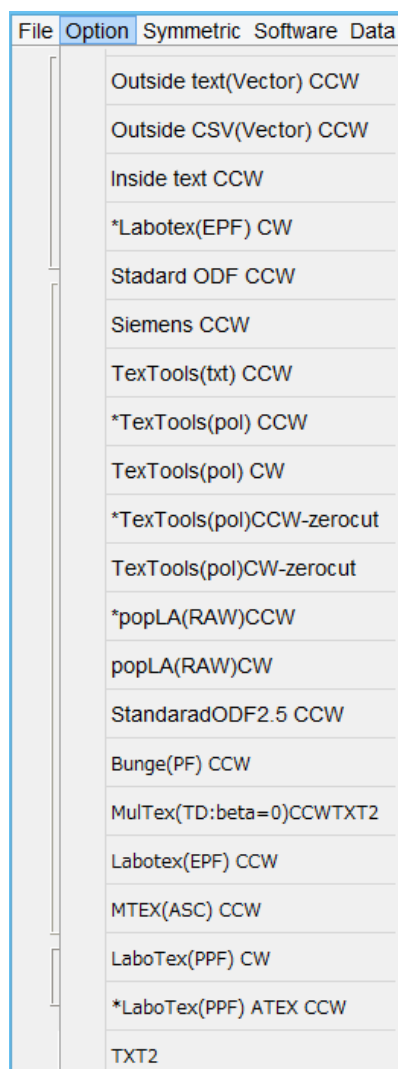
Condition save

Lattice conditionと指数のバックアップ
次回起動時にバックアップされたパラメータが表示される。

Exit

プログラムを終了する。

4. 3. 2 Optionメニュー



Vector法

LaboTexの標準データ

Standard ODFの標準データ

TexToolsの標準データ

TexTools標準データ(不安定)

TexToolsが改善されていない

popLAの標準データ

旧リガクODFの入力データ

Multex標準データ

MTEX

JTEX (ATEX)

CW,CCW は、極点図データの回転方向

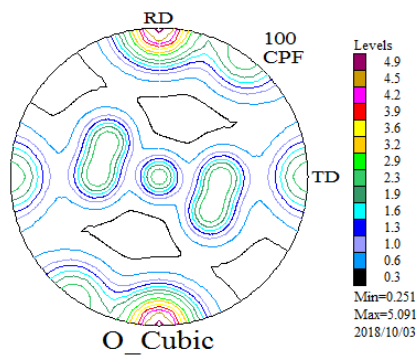
ODF解析を非対称 (Triclinic) で解析を行った場合、CW,CCW で ODF 図がシフトします。

LaboTex を非対称で解析し、他の ODF と比較する場合、LaboTex 内の CW->CCW をご使用下さい。

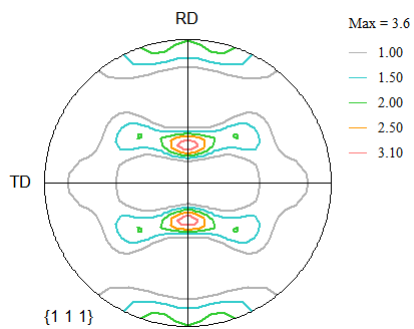
CWで読み込んだ時、TDは極点図の左側、CCWは右側配置になります。

この様に表現すると合理的と考えます。

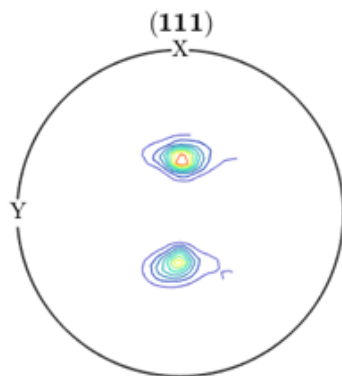
LaboTex (CW)



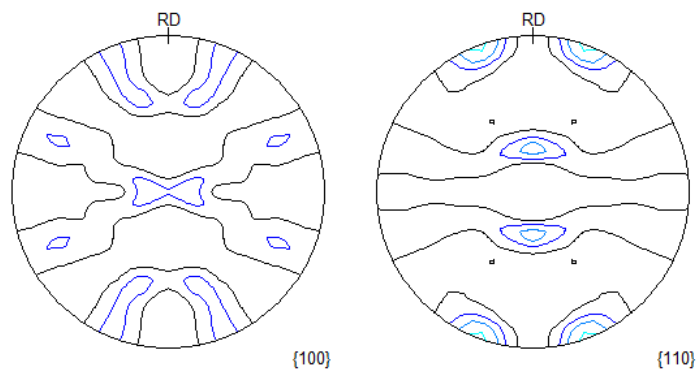
TexTools (CCW)



MTEX (CCW)

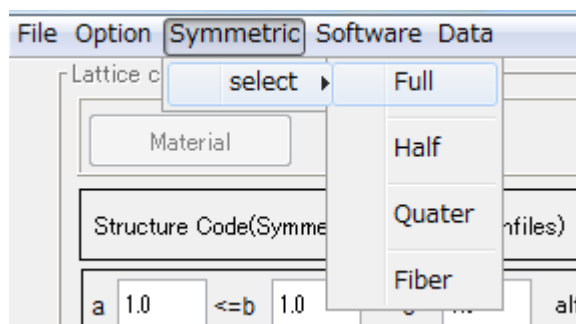


Standard ODF (1/4 対称なので、回転方向は関係ありません)



1/4 対称のODFでは、TD方向は関係なし、
 長嶋先生はTDを左、
 H.-J.Bunge(Texture Analysis Material Science)はTDは左表現

4. 3. 3 データ対称操作



F u l l

対称操作を行わない

H a l f

180度、左右対称操作

Q u a t e r

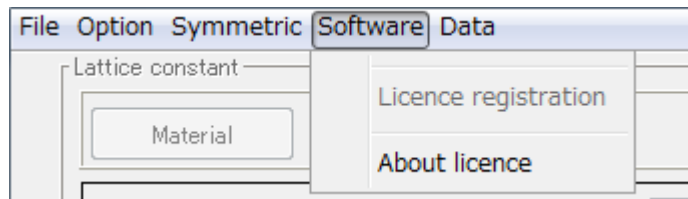
90度、対称操作

F i b e r

β 方向を平均化

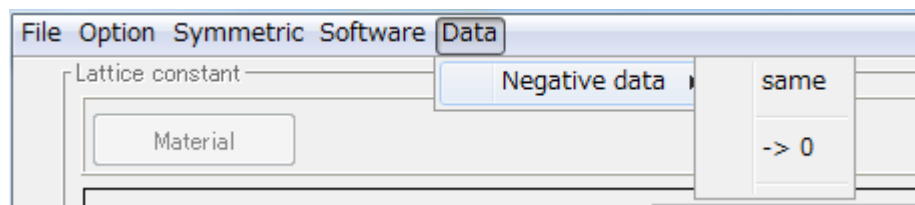
H a l f, Q u a t e r 機能は非対称極点図を扱う L a b o T e x, T e x T o o l s 向けで他のODFに関しては、F u l l のみをサポートしています。

4. 3. 4 S o f t w a r e メニュー



ソフトウェアのバージョン表示





4. 3. 5 D a t a メニュー



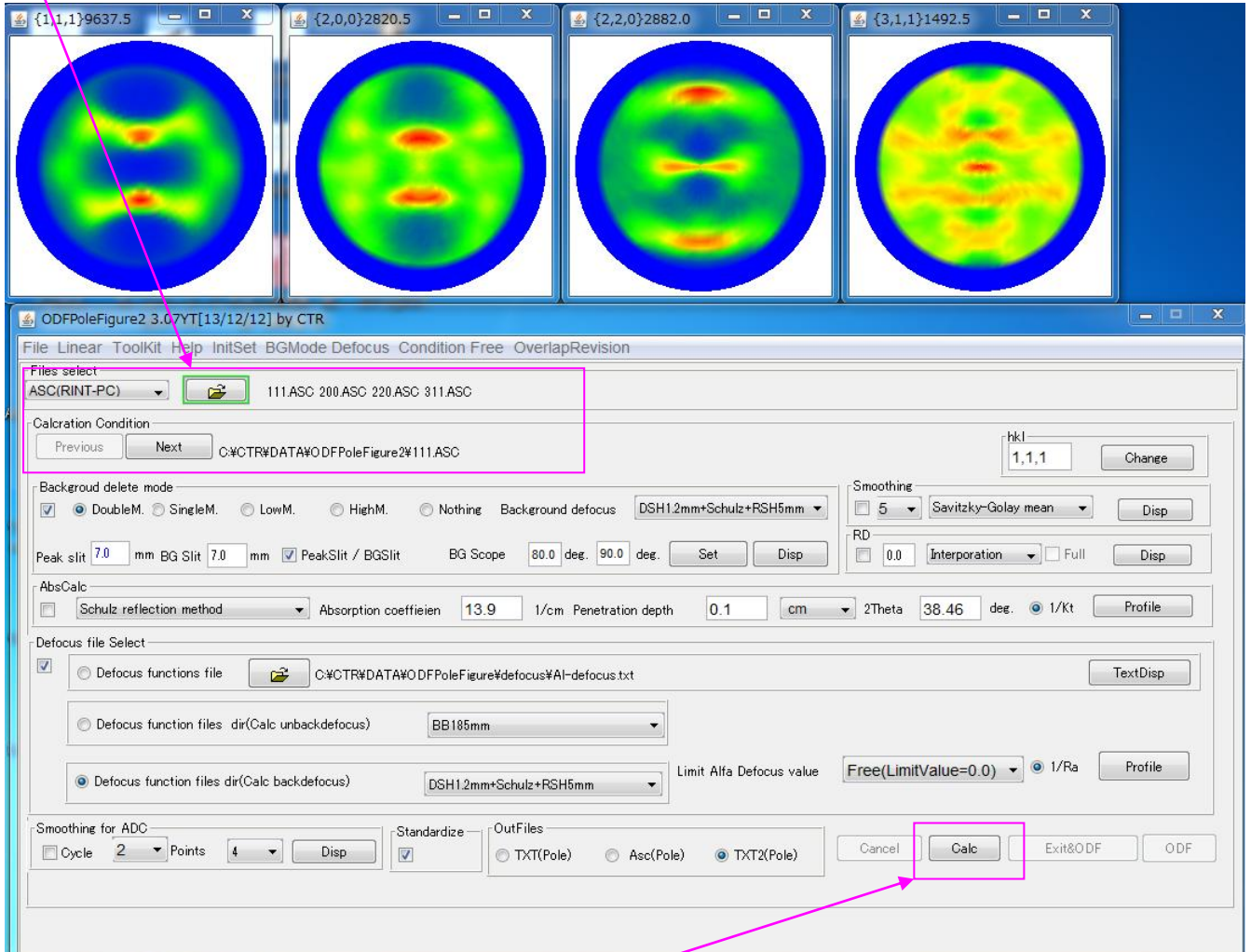
マイナスデータの扱いを指定

5. アルミニウムデータを PoleFigure2 で処理し、PFtoODF3 で加工

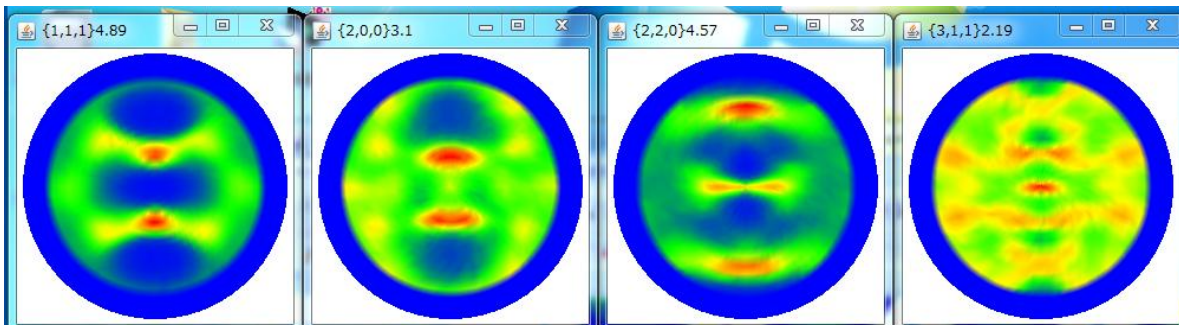
入力データ

 111.ASC	2012/07/25 10:15	ASC ファイル	22 KB
 200.ASC	2012/07/25 10:15	ASC ファイル	22 KB
 220.ASC	2012/07/25 10:15	ASC ファイル	22 KB
 311.ASC	2012/07/25 10:15	ASC ファイル	22 KB





複数の A S C ファイルを選択→極点図を表示する。



バックグラウンド処理、d e f o c u s 指定で計算を行う。処理結果極点図が表示

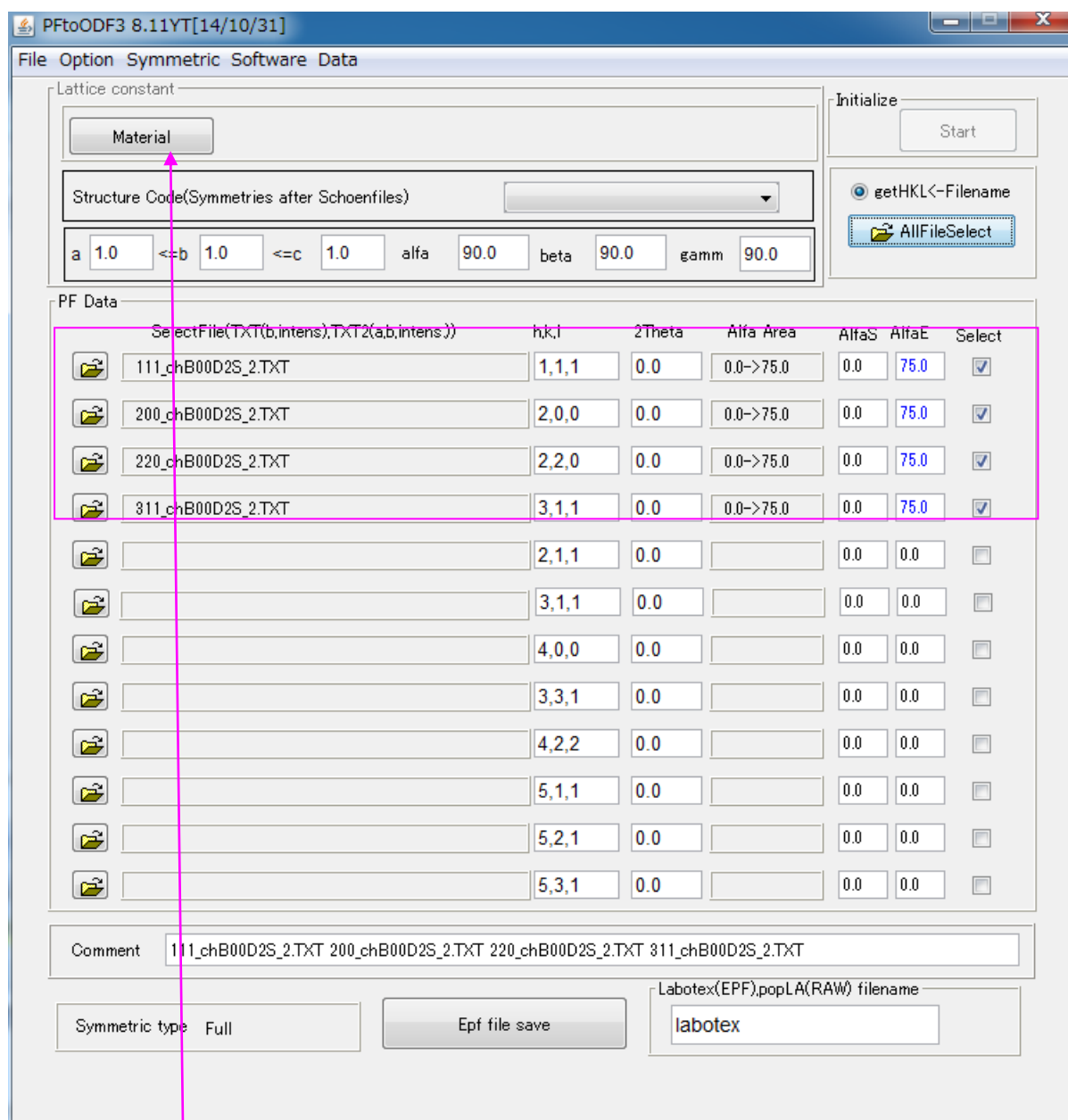
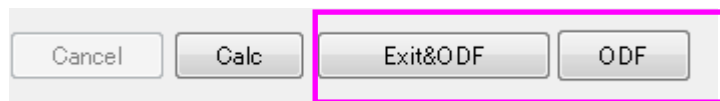


処理された T X T 2 ファイルが作成される。

 111_chB02D2S_2	2013/04/09 12:32	テキスト文書	22 KB
 200_chB02D2S_2	2013/04/09 12:32	テキスト文書	22 KB
 220_chB02D2S_2	2013/04/09 12:32	テキスト文書	22 KB
 311_chB02D2S_2	2013/04/09 12:32	テキスト文書	22 KB

5. 1 PFtoODF3 に極点処理結果ファイルを反映

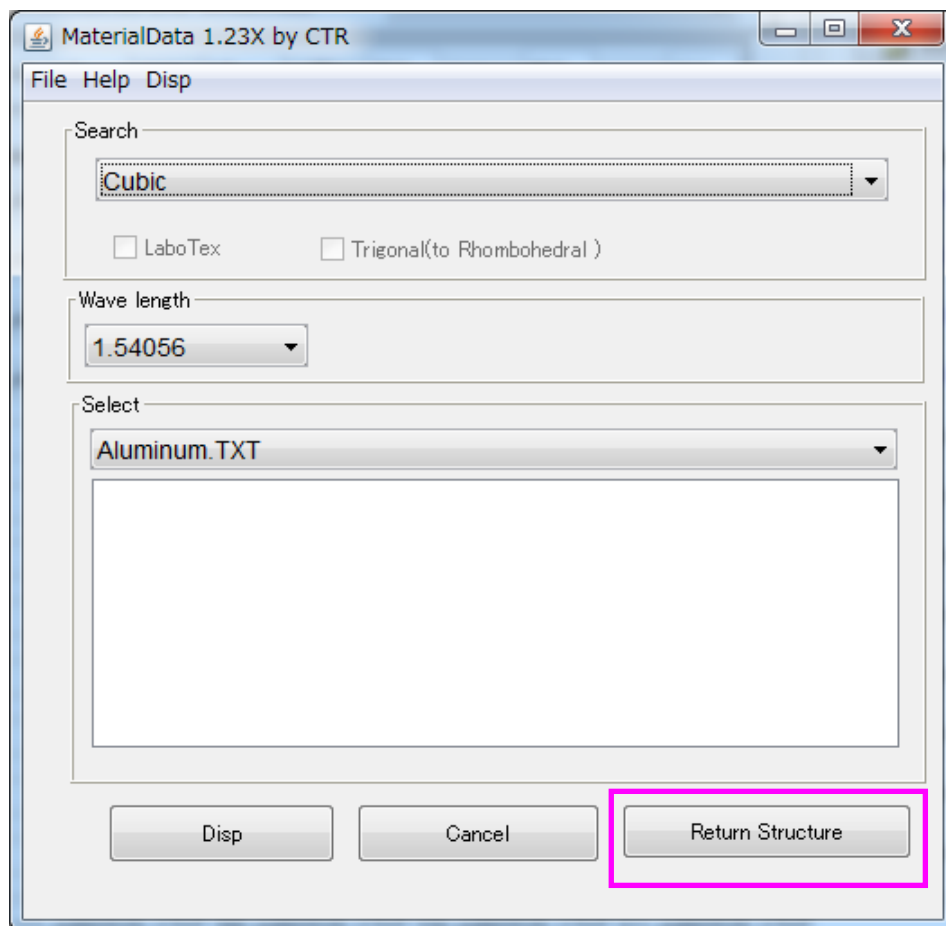
ODFPoleFigure2 ソフトウェアの ODF ボタンを押す



ODFPoleFigure2 ソフトウェアで処理したデータが反映される。

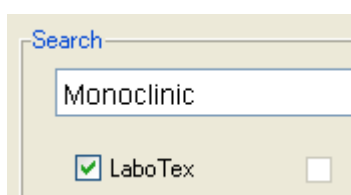
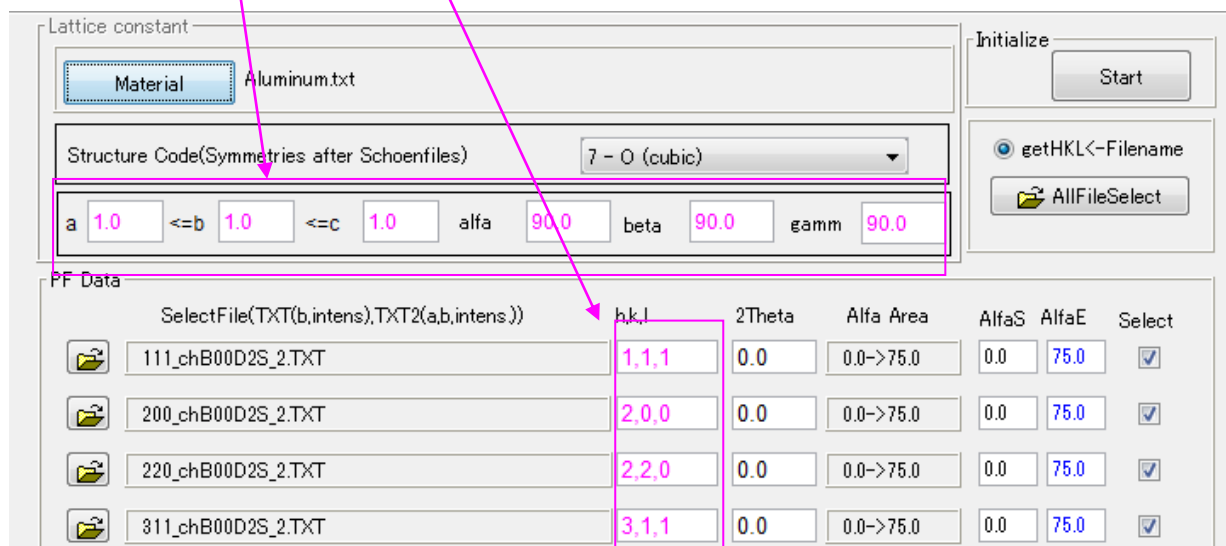


でアルミニウムを指定する。



Return Structure で

格子定数の表示と、指数の適合性をチェックし、問題なければ、紫色で表示する。



LaboTex にチェックを入れた場合、指数の入れ替えが行われ、

PFtoODF3 の指数変更が行われる。

6. ODFファイルの作成

6. 1 Vector法データの作成

Vector法は、(100)は完全極点図、それ以外は不完全極点図を対応
(111)極点図のVector法データを作成

Option で outside(Vector)を選択し、ファイル名を入力

Outside CSV(Vector)では、 $\alpha=30\text{deg}$ を2列登録される。

PF Data		h,k,l	2Theta	Alfa Area	AlfaS	AlfaE	Select
SelectFile(TXT(b,intens),TXT2(a,b,intens))	111_chB00D2S_2.TXT	1,1,1	0.0	0.0->75.0	0.0	75.0	<input checked="" type="checkbox"/>
	200_chB00D2S_2.TXT	2,0,0	0.0	0.0->75.0	0.0	75.0	<input type="checkbox"/>
	220_chB00D2S_2.TXT	2,2,0	0.0	0.0->75.0	0.0	75.0	<input type="checkbox"/>
	311_chB00D2S_2.TXT	3,1,1	0.0	0.0->75.0	0.0	75.0	<input type="checkbox"/>

Symmetric type Full	Outside text	Labotex(EPT),popLA(HAW) filename 111
---------------------	--------------	---

OutSide Text ボタンを押す。

作成された111. txtデータが表示される。

111 - メモ帳				
ファイル(F) 編集(E) 書式(O) 表示(V) ヘルプ(H)				
1152,	0.0,	5.0,	10.0,	15.0,
15.0,	0.5918,	0.6299,	0.6775,	0.6945,
20.0,	0.2501,	0.2493,	0.2682,	0.302,
25.0,	0.137,	0.1209,	0.1306,	0.171,
30.0,	0.1082,	0.107,	0.0903,	0.1106,
35.0,	0.0839,	0.0926,	0.105,	0.1104,
40.0,	0.1049,	0.1024,	0.125,	0.1479,
45.0,	0.2043,	0.2132,	0.265,	0.355,
50.0,	0.7794,	0.822,	0.9456,	1.1782,
55.0,	2.3692,	2.4214,	2.4608,	2.5572,
60.0,	3.9135,	3.8535,	3.6886,	3.4724,
65.0,	4.2245,	4.1247,	3.8232,	3.4255,
70.0,	1.956,	1.8922,	1.7478,	1.5081,
75.0,	0.4506,	0.4409,	0.3965,	0.3676,
80.0,	0.1278,	0.1283,	0.1253,	0.1142,
85.0,	0.0655,	0.0676,	0.0709,	0.0658,
90.0,	0.0514,	0.065,	0.0555,	0.0568,

ディレクトリOUTSIDEが作成

OUTSIDE	2013/04/09 13:02	ファイル フォル...	
200.ASC	2012/07/25 10:15	ASC ファイル	22 KB
220.ASC	2012/07/25 10:15	ASC ファイル	22 KB
311.ASC	2012/07/25 10:15	ASC ファイル	22 KB
111.ASC	2012/07/25 10:15	ASC ファイル	22 KB
111_chB02D2S_2	2013/04/09 12:32	テキスト文書	22 KB
200_chB02D2S_2	2013/04/09 12:32	テキスト文書	22 KB
220_chB02D2S_2	2013/04/09 12:32	テキスト文書	22 KB
311_chB02D2S_2	2013/04/09 12:32	テキスト文書	22 KB

OUTSIDEディレクトリに 111.TXT が作成

111	2013/04/09 13:02	テキスト文書	14 KB
-----	------------------	--------	-------

6. 2 L a b o T e xデータの作成

L a b o T e xは複数の極点データ、 α 範囲が異なっても、ドーナツ極点図も可能
Option で*LaboTex(CW)を選択し、ファイル名を入力

Comment	111_chB02D2S_2.TXT 200_chB02D2S_2.TXT 220_chB02D2S_2.TXT 311_chB02D2S_2.TXT		
Symmetric type	Full	Epf file save	Labotex(EPF),popLA(RAW) filename AL

Epf file save ボタンを押す

```

TextDisplay 1.11S C:\CTR\DATA\ODFPoleFigure2\LaboTex\CW\AL.epf
File Help
111_chB02D2S_2.TXT 200_chB02D2S_2.TXT 220_chB02D2S_2.TXT 311_chB02D2S_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
38.46 0.0 75.0 5.0 0.0 355.0 5.0 0 1 1 1 1
44.7 0.0 75.0 5.0 0.0 355.0 5.0 0 2 0 0 1
65.08 0.0 75.0 5.0 0.0 355.0 5.0 0 2 2 0 1
78.22 0.0 75.0 5.0 0.0 355.0 5.0 0 3 1 1 1

0.051400 0.065000 0.055500 0.056800 0.063700 0.059100 0.055500 0.060400
0.056000 0.070600 0.071400 0.058300 0.058000 0.053900 0.045000 0.057800
0.061600 0.058800 0.067800 0.060400 0.059100 0.055500 0.056300 0.057300
0.059600 0.054700 0.057300 0.050400 0.056000 0.053200 0.057000 0.054200
0.045000 0.059100 0.060600 0.061100 0.056500 0.063700 0.058800 0.057300
0.054500 0.047500 0.060600 0.068300 0.060400 0.061600 0.053700 0.059100
0.064200 0.053400 0.056800 0.066800 0.057000 0.064500 0.054500 0.053900
0.059300 0.065700 0.060400 0.062900 0.057300 0.067500 0.066800 0.056800
0.051400 0.049100 0.061100 0.055700 0.059100 0.063900 0.061100 0.054500
0.065500 0.067600 0.070900 0.065800 0.078800 0.070600 0.063700 0.062700
0.089400 0.074700 0.061400 0.059600 0.059400 0.062400 0.058300 0.055500
  
```

ディレクトリ L a b o T e x が作成

OUTSIDE	2013/04/09 13:02	ファイル フォル...	
LaboTex	2013/04/09 13:15	ファイル フォル...	
200.ASC	2012/07/25 10:15	ASC ファイル	22 KB
220.ASC	2012/07/25 10:15	ASC ファイル	22 KB
311.ASC	2012/07/25 10:15	ASC ファイル	22 KB
111.ASC	2012/07/25 10:15	ASC ファイル	22 KB
111_chB02D2S_2	2013/04/09 12:32	テキスト文書	22 KB
200_chB02D2S_2	2013/04/09 12:32	テキスト文書	22 KB
220_chB02D2S_2	2013/04/09 12:32	テキスト文書	22 KB
311_chB02D2S_2	2013/04/09 12:32	テキスト文書	22 KB

L a b o T e xディレクトリにCW¥AL. e p f ファイルが作成

AL	2013/04/09 13:15	Exchange Certifi...	47 KB
----	------------------	---------------------	-------

6. 3 S t a n d a r d O D F データ作成

極点図の中心から α 範囲の同一の複数の極点図を選択、

Option で*StandardODF を選択

Symmetric type Full	StandardODF text	Labotex(EPF),popLA(RAW) filename AL
---------------------	------------------	--

StandardODF txt ボタンを押す

111_chB02D2S_2StdODF - メモ帳

ファイル(F)	編集(E)	書式(O)	表示(V)	ヘルプ(H)
0.0514	0.0545	0.0611	0.0639	0.0591
0.0555	0.0583	0.0624	0.0594	0.0596
0.1576	0.1419	0.1271	0.1181	0.1078
0.6355	0.8237	1.0924	1.507	1.9553
1	0.4636	0.4147	0.3666	0.3371
22	0.2043	0.2281	0.2605	0.3516
0.9821	1.1836	1.5265	1.8472	2.1274
1.3742	1.8482	2.0201	1.9121	1.6648
8	0.5225	0.4087	0.3237	0.2576

ディレクトリ S t a n d a r d O D F が作成

OUTSIDE	2013/04/09 13:02	ファイル フォル...	
LaboTex	2013/04/09 13:15	ファイル フォル...	
StandardODF	2013/04/09 13:33	ファイル フォル...	
200.ASC	2012/07/25 10:15	ASC ファイル	22 KB
220.ASC	2012/07/25 10:15	ASC ファイル	22 KB
311.ASC	2012/07/25 10:15	ASC ファイル	22 KB
111.ASC	2012/07/25 10:15	ASC ファイル	22 KB
111_chB02D2S_2	2013/04/09 12:32	テキスト文書	22 KB
200_chB02D2S_2	2013/04/09 12:32	テキスト文書	22 KB
220_chB02D2S_2	2013/04/09 12:32	テキスト文書	22 KB
311_chB02D2S_2	2013/04/09 12:32	テキスト文書	22 KB

S t y a n d a r d O D F ディレクトリと C:\¥ODF¥PFDATA に以下のファイルを作成

StandardODF が指定場所にインストールされていない場合、C:\¥ODF 以下のファイルは作成されない

111_chB02D2S_2StdODF	2013/04/09 13:34	テキスト文書	9 KB
200_chB02D2S_2StdODF	2013/04/09 13:34	テキスト文書	9 KB
220_chB02D2S_2StdODF	2013/04/09 13:34	テキスト文書	9 KB
311_chB02D2S_2StdODF	2013/04/09 13:34	テキスト文書	9 KB

6. 4 T e x T o o l s (C C W) データの作成

T e x T o o l s は複数の極点データ、 α 範囲が異なっても、ドーナツ極点図も可能
Option で*TexTools(CCW)を選択する。

Symmetric type Full	TexTools(pol) text	Labotex(EPF),popLA(RAW) filename labotex
---------------------	--------------------	---

TexTools(pol) txt ボタンを押す



0.0	0.0	2.04400
0.0	5.0	2.11220
0.0	10.0	2.02530
0.0	15.0	2.08740
0.0	20.0	2.07960
0.0	25.0	2.14090
0.0	30.0	2.03390
0.0	35.0	2.14320
0.0	40.0	2.07110
0.0	45.0	2.12850
0.0	50.0	2.05640
0.0	55.0	2.01990
0.0	60.0	2.05170
0.0	65.0	2.07810
0.0	70.0	2.14550

ディレクトリ T e x T o o l s が作成

OUTSIDE	2013/04/09 13:02	ファイル フォル...	
LaboTex	2013/04/09 13:15	ファイル フォル...	
StandardODF	2013/04/09 13:33	ファイル フォル...	
TexTools	2013/04/09 15:34	ファイル フォル...	
200.ASC	2012/07/25 10:15	ASC ファイル	22 KB
220.ASC	2012/07/25 10:15	ASC ファイル	22 KB
311.ASC	2012/07/25 10:15	ASC ファイル	22 KB
111.ASC	2012/07/25 10:15	ASC ファイル	22 KB
111_chB02D2S_2	2013/04/09 15:32	テキスト文書	22 KB
200_chB02D2S_2	2013/04/09 15:32	テキスト文書	22 KB
220_chB02D2S_2	2013/04/09 15:32	テキスト文書	22 KB
311_chB02D2S_2	2013/04/09 15:32	テキスト文書	22 KB

T e x T o o l s ディレクトリに TexTools 入力ファイルが作成される。

texttools111_0.pol	2013/04/09 15:34	POL ファイル	38 KB
texttools200_1.pol	2013/04/09 15:34	POL ファイル	38 KB
texttools220_2.pol	2013/04/09 15:34	POL ファイル	38 KB
texttools311_3.pol	2013/04/09 15:34	POL ファイル	38 KB

6. 5 popLA (CW) データの作成

popLAは複数の極点データ、 α 範囲が0→80度の範囲、
0→75度のデータでも、外周を1点拡張することで、0→80度の範囲が得られる。

C:\¥CTR¥work¥PFtoODF3¥popla80.txt が存在すると、自動的に拡張が行われる。

Option で*popLA(RAW)CW を選択する。ファイル名を入力し、

Symmetric type Full	popLA(RAW) CW text	Labotex(EPF),popLA(RAW) filename AL
---------------------	--------------------	--

popLA(RAW)CW ボタンを押す

C:\¥CTR¥work¥PFtoODF3¥popla80.txt が存在する場合

AL.RAW - メモ帳																	
ファイル(F) 編集(E) 書式(O) 表示(V) ヘルプ(H)																	
AL	111	chB02D2S_2.TXT	200	chB02D2S_2.TXT	220	chB02D2S_2.TXT	311	chB02D2S_2.TXT									
111	5.0	80.0	5.0360.0	1	1	2	1	3	163	1							
8	10	9	9	10	9	9	9	9	11	11	9	9	8	7	9	10	9
11	9	9	9	9	9	9	8	9	8	9	8	9	8	7	9	9	9
9	10	9	9	8	7	9	11	9	10	8	9	10	8	9	10	9	10
8	8	9	10	9	10	9	11	10	9	8	8	9	9	9	10	9	8
10	11	11	10	12	11	10	10	14	12	10	9	9	10	9	9	10	9

C:\¥CTR¥work¥PFtoODF3¥popla80.txt が存在しない場合

AL.RAW - メモ帳																	
ファイル(F) 編集(E) 書式(O) 表示(V) ヘルプ(H)																	
AL	111	chB02D2S_2.TXT	200	chB02D2S_2.TXT	220	chB02D2S_2.TXT	311	chB02D2S_2.TXT									
111	5.0	75.0	5.0360.0	1	1	2	1	3	163	1							
8	10	9	9	10	9	9	9	9	11	11	9	9	8	7	9	10	9
11	9	9	9	9	9	9	8	9	8	9	8	9	8	7	9	9	9
9	10	9	9	8	7	9	11	9	10	8	9	10	8	9	10	9	10
8	8	9	10	9	10	9	11	10	9	8	8	9	9	9	10	9	8
10	11	11	10	12	11	10	10	14	12	10	9	9	10	9	9	10	9

ディレクトリ popLA が作成

OUTSIDE	2013/04/09 13:02	ファイルフォル...
LaboTex	2013/04/09 13:15	ファイルフォル...
StandardODF	2013/04/09 13:33	ファイルフォル...
TexTools	2013/04/09 15:34	ファイルフォル...
popLA	2013/04/09 22:15	ファイルフォル...
200.ASC	2012/07/25 10:15	ASC ファイル 22 KB
220.ASC	2012/07/25 10:15	ASC ファイル 22 KB
311.ASC	2012/07/25 10:15	ASC ファイル 22 KB
111.ASC	2012/07/25 10:15	ASC ファイル 22 KB
111_chB02D2S_2	2013/04/09 15:32	テキスト文書 22 KB
200_chB02D2S_2	2013/04/09 15:32	テキスト文書 22 KB
220_chB02D2S_2	2013/04/09 15:32	テキスト文書 22 KB
311_chB02D2S_2	2013/04/09 15:32	テキスト文書 22 KB

popLAディレクトリに、以下のファイルが作成される。

AL.DFB	2013/04/09 22:18	DFB ファイル	1 KB
AL.RAW	2013/04/09 22:18	RAW ファイル	23 KB

DEF, RAWファイルをpopLAのディレクトリC:\¥Xにコピーする。

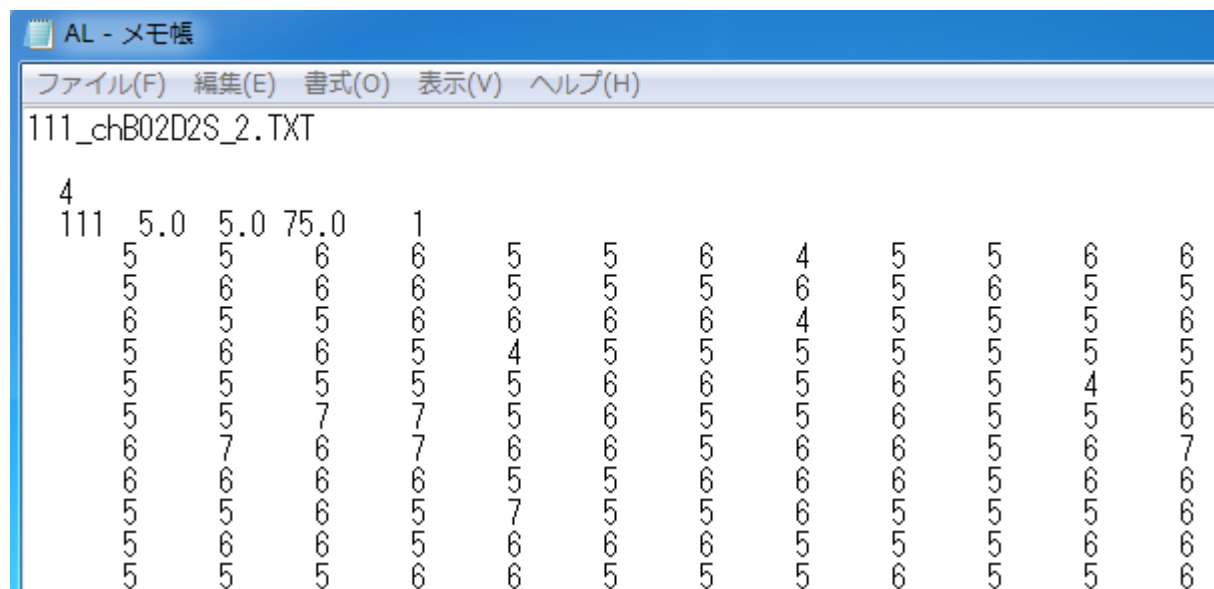
6. 6 Bungeデータの作成

Bungeは複数の極点データ

Option で Bunge(PF)を選択、ファイル名の入力し

Symmetric type Full	Bunge(PF) text	Labotex\ERR\popLA\KAW\ filename AL
---------------------	-----------------------	---------------------------------------

Bunge(PF)text ボタンを押す



Bungeディレクトリが作成され、

OUTSIDE	2013/04/09 13:02	ファイル フォル...	
LaboTex	2013/04/09 13:15	ファイル フォル...	
StandardODF	2013/04/09 13:33	ファイル フォル...	
TexTools	2013/04/09 15:34	ファイル フォル...	
popLA	2013/04/09 22:15	ファイル フォル...	
Bunge	2013/04/10 3:34	ファイル フォル...	
200.ASC	2012/07/25 10:15	ASC ファイル	22 KB
220.ASC	2012/07/25 10:15	ASC ファイル	22 KB
311.ASC	2012/07/25 10:15	ASC ファイル	22 KB
111.ASC	2012/07/25 10:15	ASC ファイル	22 KB
111_chB02D2S_2	2013/04/09 15:32	テキスト文書	22 KB
200_chB02D2S_2	2013/04/09 15:32	テキスト文書	22 KB
220_chB02D2S_2	2013/04/09 15:32	テキスト文書	22 KB
311_chB02D2S_2	2013/04/09 15:32	テキスト文書	22 KB

BungeディレクトリにAL.PF ファイルが作成される。

AL	2013/04/10 3:34	ファイル	34 KB
----	-----------------	------	-------

6. 7 Mu l T e x データの作成

Mu l T e x は複数の極点データに対応

Option で MulTex(TD: $\beta=0$)CCW TXT2 を選択、ファイル名を入力し

TXT2CCWfile save ボタンを押す

ファイル(F)	編集(E)	書式(O)	表示(V)
0.0	0.0	2.12920	
0.0	5.0	2.18660	
0.0	10.0	2.10130	
0.0	15.0	2.12230	
0.0	20.0	2.09590	
0.0	25.0	2.08510	
0.0	30.0	2.02690	
0.0	35.0	2.04400	
0.0	40.0	2.14790	
0.0	45.0	2.03310	
0.0	50.0	1.95480	
0.0	55.0	2.03850	
0.0	60.0	2.03620	

TXT2 ディレクトリが作成

ファイル名	日付	タイプ	サイズ
OUTSIDE	2013/04/09 13:02	ファイル フォル...	
LaboTex	2013/04/09 13:15	ファイル フォル...	
StandardODF	2013/04/09 13:33	ファイル フォル...	
TexTools	2013/04/09 15:34	ファイル フォル...	
popLA	2013/04/09 22:15	ファイル フォル...	
Bunge	2013/04/10 3:34	ファイル フォル...	
TXT2	2013/04/10 3:50	ファイル フォル...	
200.ASC	2012/07/25 10:15	ASC ファイル	22 KB
220.ASC	2012/07/25 10:15	ASC ファイル	22 KB
311.ASC	2012/07/25 10:15	ASC ファイル	22 KB
111.ASC	2012/07/25 10:15	ASC ファイル	22 KB
111_chB02D2S_2	2013/04/09 15:32	テキスト文書	22 KB
200_chB02D2S_2	2013/04/09 15:32	テキスト文書	22 KB
220_chB02D2S_2	2013/04/09 15:32	テキスト文書	22 KB
311_chB02D2S_2	2013/04/09 15:32	テキスト文書	22 KB

TXT2 ディレクトリに複数の TXT2 ファイルが作成される。

ファイル名	日付	タイプ	サイズ
TXT2CCW111_0	2013/04/10 3:50	テキスト文書	32 KB
TXT2CCW200_1	2013/04/10 3:50	テキスト文書	32 KB
TXT2CCW220_2	2013/04/10 3:50	テキスト文書	32 KB
TXT2CCW311_3	2013/04/10 3:50	テキスト文書	32 KB

通常の TXT2 ファイルと異なり、 $\alpha=0$ は極点図の中心で、 $\beta=0$ は TD 方向である。

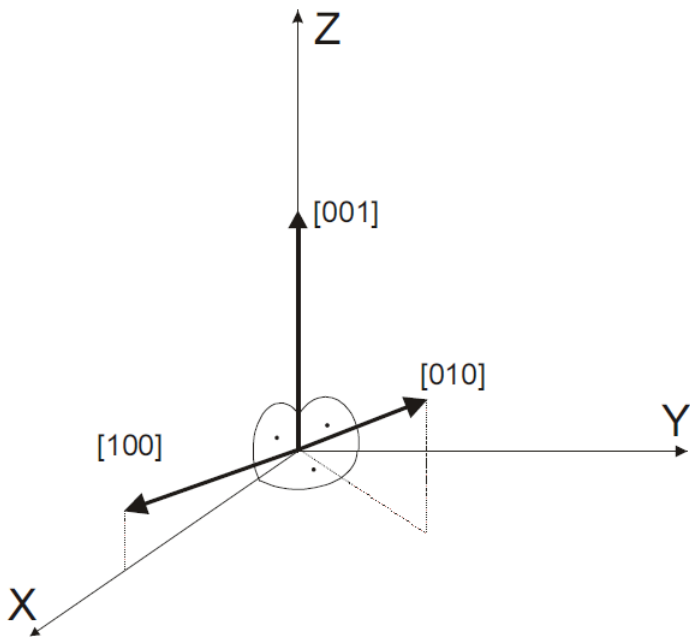
(通常の TXT2 ファイルは、 $\beta=90$ が極点図の中心で、 $\beta=$ は RD 方向で CCW 回転)

6. 8 MTEXデータの作成

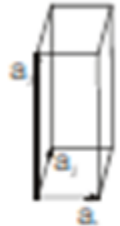
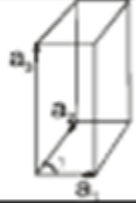

MTEXは、極点データ処理を行ったASCデータを」読み込む

7. LaboTexの向けデータの作成 (MaterialData)

LaboTexでZ軸と[001]方位を一致させ、基本面はXZ面で[100]方向と一致してる。
また、a，b，c軸の取り方も異なる事がある。

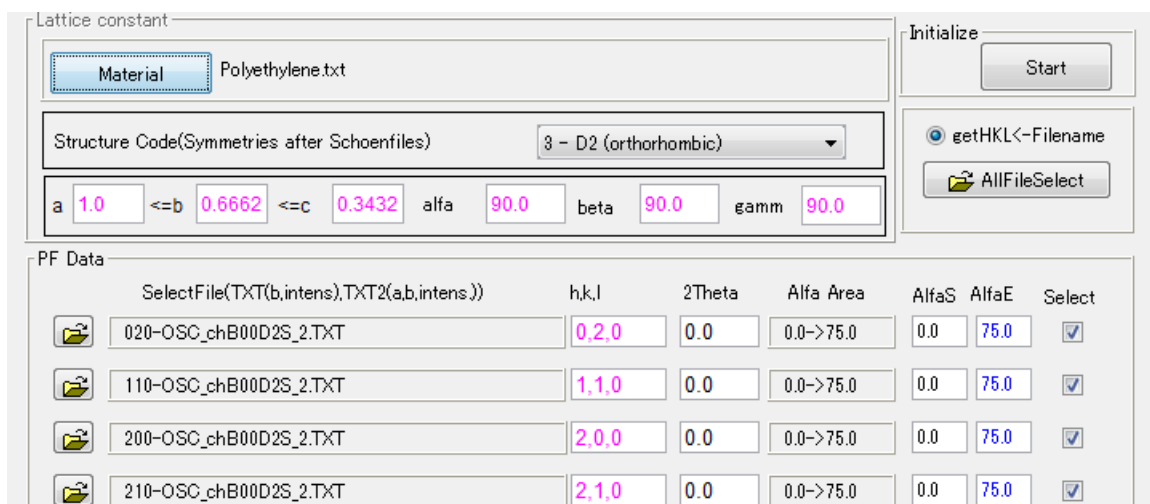
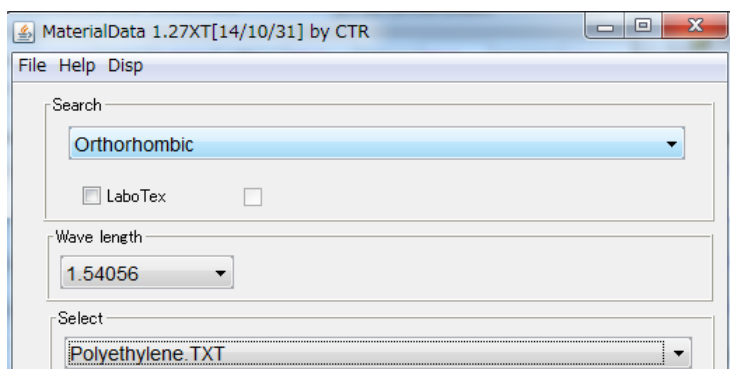


この影響でOrthorhombic、Monoclinic、Trigonalでは通常のICDD指数が異なる

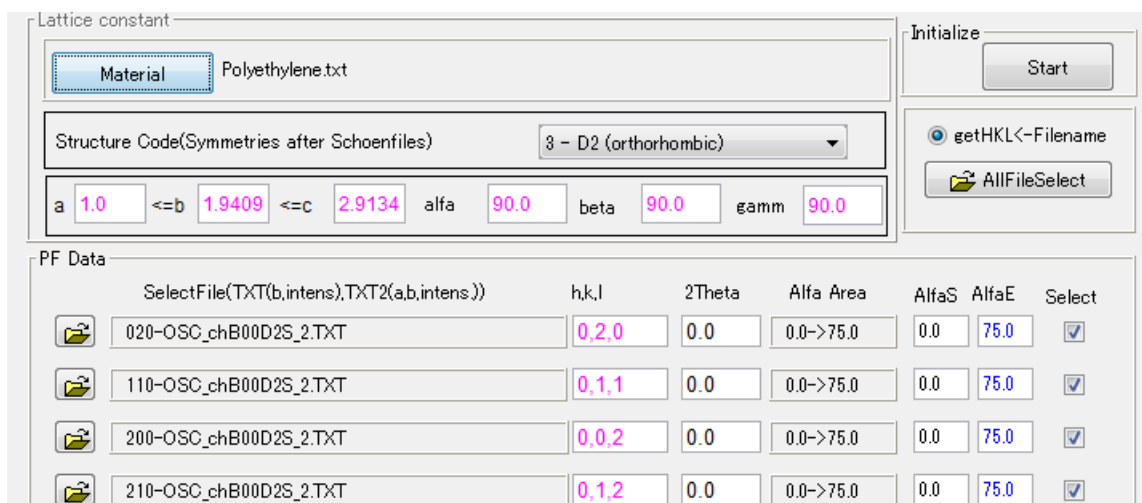
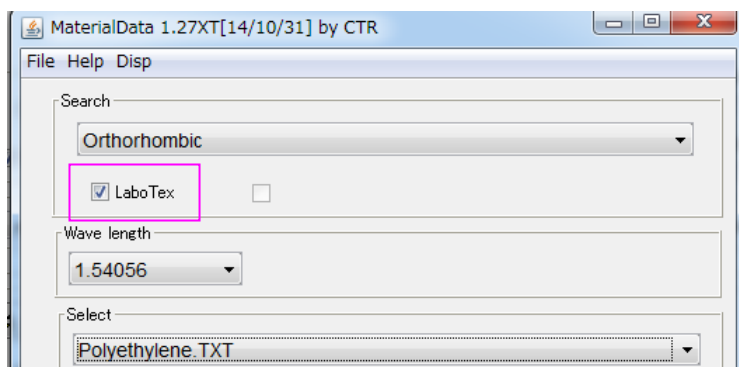
Orthorhombic	D_2	D_{2h}, D_2	$a < b < c$	$90^\circ \ 90^\circ \ 90^\circ$	
	C_2	C_{2v}			
Monoclinic	C_2	C_2, C_2	$a < b < c$	$90^\circ \ 90^\circ \ \gamma < 90^\circ$	
	C_1	C_1			
Triclinic	C_1	C_1	$a < b < c$	$\alpha \ \beta \ \gamma < 90^\circ$	

この変更をMaterialDataで実現している。

7. 1 Orthorhombic 例



LaboTex 用を選択すると



格子定数と指数の入れ替えが行われる。

7. 2 Monoclinic 例

MaterialData 1.27XT[14/10/31] by CTR

File Help Disp

Search
Monoclinic

☐ LaboTex

Wave length
1.54056

Select
Baddeleyite(ZrO2-Monoclinic)-01-070-7302.TXT

Lattice constant

Material Baddeleyite(ZrO2-Monoclinic)-01-070-7302.txt

Structure Code(Symmetries after Schoenfiles) 2 - C2 (monoclinic)

a 1.0 <=b 0.9811 <=c 0.9688 alfa 90.0 beta 99.218 gamm 90.0

Initialize
Start

☒ getHKL<-Filename
AllFileSelect

PF Data

SelectFile(TXT(b,intens),TXT2(a,b,intens.))	h,k,l	2Theta	Alfa Area	AlfaS	AlfaE	Select
<input type="checkbox"/> -111-OSC_chB00D2S_2.TXT	-1,1,1	0.0	0.0->75.0	0.0	75.0	<input checked="" type="checkbox"/>
<input type="checkbox"/> 001-OSC_chB00D2S_2.TXT	0,0,1	0.0	0.0->75.0	0.0	75.0	<input checked="" type="checkbox"/>
<input type="checkbox"/> 011-OSC_chB00D2S_2.TXT	0,1,1	0.0	0.0->75.0	0.0	75.0	<input checked="" type="checkbox"/>
<input type="checkbox"/> 110-OSC_chB00D2S_2.TXT	1,1,0	0.0	0.0->75.0	0.0	75.0	<input checked="" type="checkbox"/>

LaboTex 用を選択すると

MaterialData 1.27XT[14/10/31] by CTR

File Help Disp

Search
Monoclinic

☒ LaboTex

Wave length
1.54056

Select
Baddeleyite(ZrO2-Monoclinic)-01-070-7302.TXT

Lattice constant

Material Baddeleyite(ZrO2-Monoclinic)-01-070-7302.txt

Structure Code(Symmetries after Schoenfiles) 2 - C2 (monoclinic)

a 1.0 <=b 1.0322 <=c 1.0127 alfa 90.0 beta 90.0 gamm 80.782

Initialize
Start

☒ getHKL<-Filename
AllFileSelect

PF Data

SelectFile(TXT(b,intens),TXT2(a,b,intens.))	h,k,l	2Theta	Alfa Area	AlfaS	AlfaE	Select
<input type="checkbox"/> -111-OSC_chB00D2S_2.TXT	1,1,1	0.0	0.0->75.0	0.0	75.0	<input checked="" type="checkbox"/>
<input type="checkbox"/> 001-OSC_chB00D2S_2.TXT	1,0,0	0.0	0.0->75.0	0.0	75.0	<input checked="" type="checkbox"/>
<input type="checkbox"/> 011-OSC_chB00D2S_2.TXT	1,0,1	0.0	0.0->75.0	0.0	75.0	<input checked="" type="checkbox"/>
<input type="checkbox"/> 110-OSC_chB00D2S_2.TXT	0,-1,1	0.0	0.0->75.0	0.0	75.0	<input checked="" type="checkbox"/>

格子定数と指数の入れ替えが行われる。

7. 3 T r i c l i n i c 例

MaterialData 1.27XT[14/10/31] by CTR

File Help Disp

Search

Triclinic

☐ LaboTex

Wave length

1.54056

Select

PET.TXT

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-OSC_2.TXT	-1,1,0	0.0	0.0->75.0	0.0	75.0	<input checked="" type="checkbox"/>
-111-OSC_2.TXT	-1,1,1	0.0	0.0->75.0	0.0	75.0	<input checked="" type="checkbox"/>
0-11-OSC_2.TXT	0,-1,1	0.0	0.0->75.0	0.0	75.0	<input checked="" type="checkbox"/>
010-OSC_2.TXT	0,1,0	0.0	0.0->75.0	0.0	75.0	<input checked="" type="checkbox"/>

LaboTex 用を選択すると

MaterialData 1.27XT[14/10/31] by CTR

File Help Disp

Search

Triclinic

☒ LaboTex

Wave length

1.54056

Select

PET.TXT

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 61.38 gamm 68.63

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-OSC_2.TXT	1,1,0	0.0	0.0->75.0	0.0	75.0	<input checked="" type="checkbox"/>
-111-OSC_2.TXT	1,1,1	0.0	0.0->75.0	0.0	75.0	<input checked="" type="checkbox"/>
0-11-OSC_2.TXT	0,-1,1	0.0	0.0->75.0	0.0	75.0	<input checked="" type="checkbox"/>
010-OSC_2.TXT	0,1,0	0.0	0.0->75.0	0.0	75.0	<input checked="" type="checkbox"/>

格子定数と指数の入れ替えが行われる。

8. Trigonal の例

ICDDではTrigonalはHexagonalとして登録されている。

TrigonalとしてODF解析する場合、格子定数と指数の変換が必要になります。

MaterialData 1.27XT[14/10/31] by CTR

File Help Disp

Search: Hexagonal

LaboTex ☐ Trigonal(to Rhombohedral) ☐

Wave length: 1.54056

Select: AluminumOxide.TXT

Lattice constant

Material: AluminumOxide.txt

Structure Code(Symmetries after Schoenfiles): 11 - D6 (hexagonal)

a: 1.0, b: 1.0, c: 2.7301, alpha: 90.0, beta: 90.0, gamma: 120.0

Initialize: Start

getHKL<-Filename

AlFileSelect

PF Data

SelectFile(TXT(b,intens),TXT2(a,b,intens))	h,k,l	2Theta	Alfa Area	AlfaS	AlfaE	Select
006-OSC_chB00D2S_2.TXT	0,0,6	0.0	0.0->75.0	0.0	75.0	<input checked="" type="checkbox"/>
012-OSC_chB00D2S_2.TXT	0,1,2	0.0	0.0->75.0	0.0	75.0	<input checked="" type="checkbox"/>
104-OSC_chB00D2S_2.TXT	1,0,4	0.0	0.0->75.0	0.0	75.0	<input checked="" type="checkbox"/>
110-OSC_chB00D2S_2.TXT	1,1,0	0.0	0.0->75.0	0.0	75.0	<input checked="" type="checkbox"/>

Hexagonal->Trigonal を選択で格子定数と指数の入れ替えが行われる。

MaterialData 1.27XT[14/10/31] by CTR

File Help Disp

Search: Hexagonal

LaboTex ☐ Trigonal(to Rhombohedral) ☒

Wave length: 1.54056

Select: AluminumOxide.TXT

Lattice constant

Material: AluminumOxide.txt

Structure Code(Symmetries after Schoenfiles): 9 - D3 (trigonal)

a: 1.0, b: 1.0, c: 1.0, alpha: 55.2832, beta: 55.2832, gamma: 55.2832

Initialize: Start

getHKL<-Filename

AlFileSelect

PF Data

SelectFile(TXT(b,intens),TXT2(a,b,intens))	h,k,l	2Theta	Alfa Area	AlfaS	AlfaE	Select
006-OSC_chB00D2S_2.TXT	2,2,2	0.0	0.0->75.0	0.0	75.0	<input checked="" type="checkbox"/>
012-OSC_chB00D2S_2.TXT	1,1,0	0.0	0.0->75.0	0.0	75.0	<input checked="" type="checkbox"/>
104-OSC_chB00D2S_2.TXT	2,1,1	0.0	0.0->75.0	0.0	75.0	<input checked="" type="checkbox"/>
110-OSC_chB00D2S_2.TXT	1,0,-1	0.0	0.0->75.0	0.0	75.0	<input checked="" type="checkbox"/>

9. 体心正方晶から面心正方晶への変換

体心正方晶は、 a 軸を $\sqrt{2}$ 倍することで面心正方晶に変換出来る。

MaterialData 1.27XT[14/10/31] by CTR

File Help Disp

Search
Tetragonal

☐ LaboTex ☐ to FaceCenter Tetragonal

Wave length
1.54056

Select
zirconialow-Tetragonal-01-070-7302.TXT

Lattice constant

Material zirconialow-Tetragonal-01-070-7302.txt

Structure Code(Symmetries after Schoenfiles) 5 - D4 (teragonal)

a 1.0 <=b 1.0 <=c 1.4427 alfa 90.0 beta 90.0 gamm 90.0

Initialize
Start

getHKL<-Filename
AllFileSelect

PF Data

SelectFile(TXT(b,intens),TXT2(a,b,intens.))	h,k,l	2Theta	Alfa Area	AlfaS	AlfaE	Select
002-OSC_2.TXT	0,0,2	0.0	0.0->75.0	0.0	75.0	<input checked="" type="checkbox"/>
101-OSC_2.TXT	1,0,1	0.0	0.0->75.0	0.0	75.0	<input checked="" type="checkbox"/>
102-OSC_2.TXT	1,0,2	0.0	0.0->75.0	0.0	75.0	<input checked="" type="checkbox"/>
110-OSC_2.TXT	1,1,0	0.0	0.0->75.0	0.0	75.0	<input checked="" type="checkbox"/>

LaboTex と toFaceCenterTetragonal を選択で軸変換が行われる。

MaterialData 1.27XT[14/10/31] by CTR

File Help Disp

Search
Tetragonal

☒ LaboTex ☒ to FaceCenter Tetragonal

Wave length
1.54056

Select
BoronIronNeodymium.TXT

Lattice constant

Material zirconialow-Tetragonal-01-070-7302.txt

Structure Code(Symmetries after Schoenfiles) 5 - D4 (teragonal)

a 1.0 <=b 1.0 <=c 1.0202 alfa 90.0 beta 90.0 gamm 90.0

Initialize
Start

getHKL<-Filename
AllFileSelect

PF Data

SelectFile(TXT(b,intens),TXT2(a,b,intens.))	h,k,l	2Theta	Alfa Area	AlfaS	AlfaE	Select
002-OSC_2.TXT	0,0,2	0.0	0.0->75.0	0.0	75.0	<input checked="" type="checkbox"/>
101-OSC_2.TXT	1,1,1	0.0	0.0->75.0	0.0	75.0	<input checked="" type="checkbox"/>
102-OSC_2.TXT	1,1,2	0.0	0.0->75.0	0.0	75.0	<input checked="" type="checkbox"/>
110-OSC_2.TXT	2,0,0	0.0	0.0->75.0	0.0	75.0	<input checked="" type="checkbox"/>