

各種ODF用テキストデータ作成

# P F t o D F 3 ソフトウェア

Ver.8.58

2024年12月17日



*HelperTex Office*

Version 8.48	2020/12/14	データホルダ表示追加
Version 8.49	2020/12/30	LaboTex CCW 優先
Version 8.50	2021/01/09	LaboTexStructureCode に cif 対応
Version8.51	2021/01/29	cif データを Material 経由で取り込み
Version8.52	2021/02/16	cif データを Material 経由で取り込み
Version8.53	2021/08/09	RasXtoAsc 対策
Version8.54	2021/09/04	RAS ファイル変換追加(newODF 対策、RasXtoAsc)
Version8.54	2023/10/03	極点図中心から外側に並ぶ TXT2 ファイルの読み込み
Version8.58	2024/12/17	C O D cif 対応

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
  6. 9 R A S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
10. c i fデータをM a t e r i a l経由で取り込む

## 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

$\beta$  角度、極密度の羅列

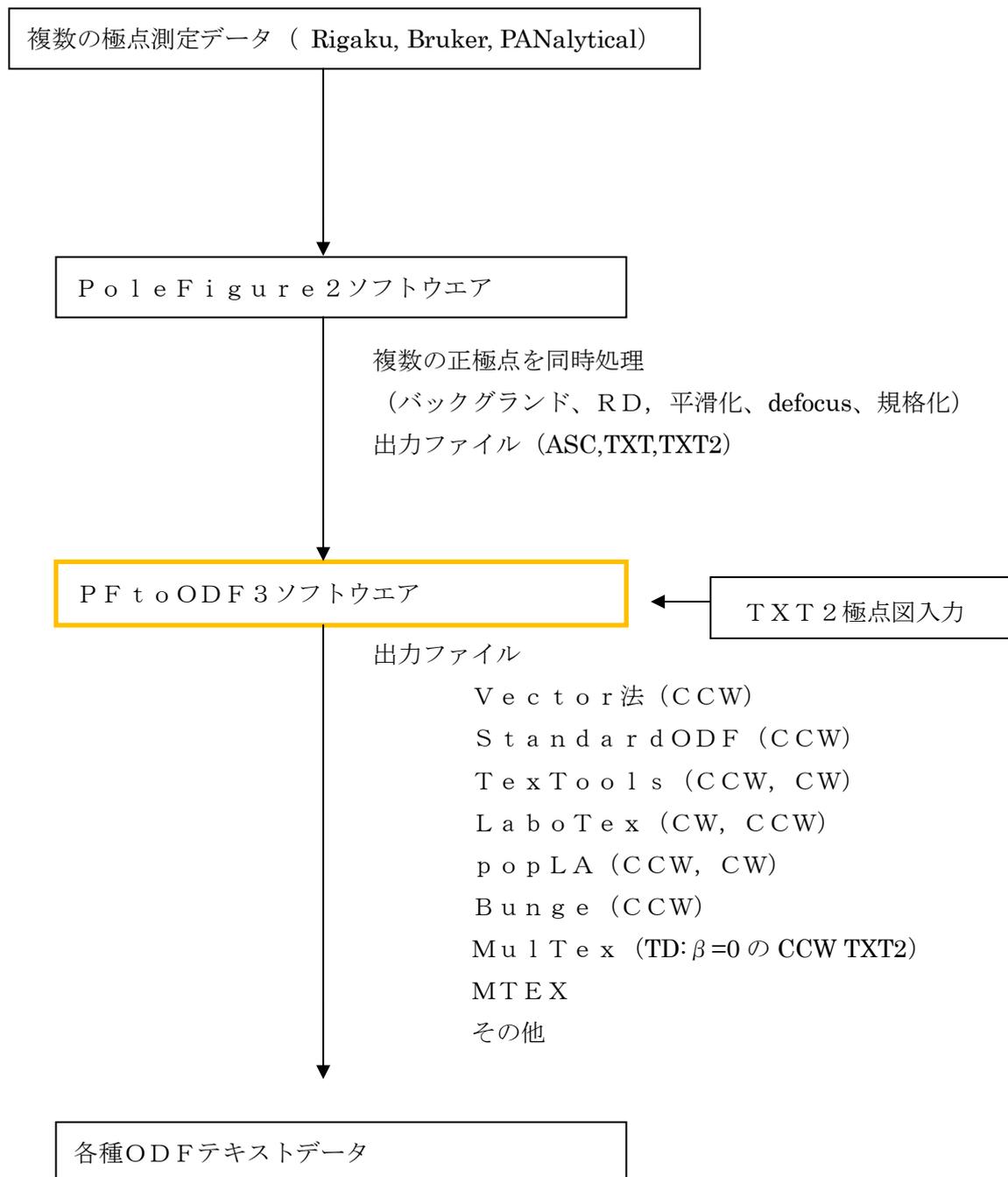
0.0	0.5918
5.0	0.6019
10.0	0.6454
15.0	0.681
20.0	0.7185
25.0	0.7852
30.0	0.8578
35.0	0.8878
40.0	0.8913
45.0	0.9063
50.0	0.8828
55.0	0.8292
60.0	0.8047
350.0	0.6775
355.0	0.6299
360.0	0.5993
0.0	0.2501
5.0	0.2635
10.0	0.2776
15.0	0.2666
20.0	0.3276
25.0	0.4374
30.0	0.6154

### TXT2データ

$\alpha$  角度、 $\beta$  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)

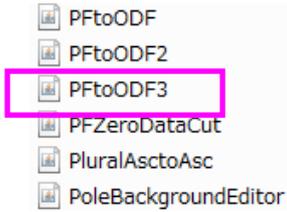
注意 : TD 方向は、CW は右、CCW は左に記載が妥当であるが、曖昧になっている。

#### 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

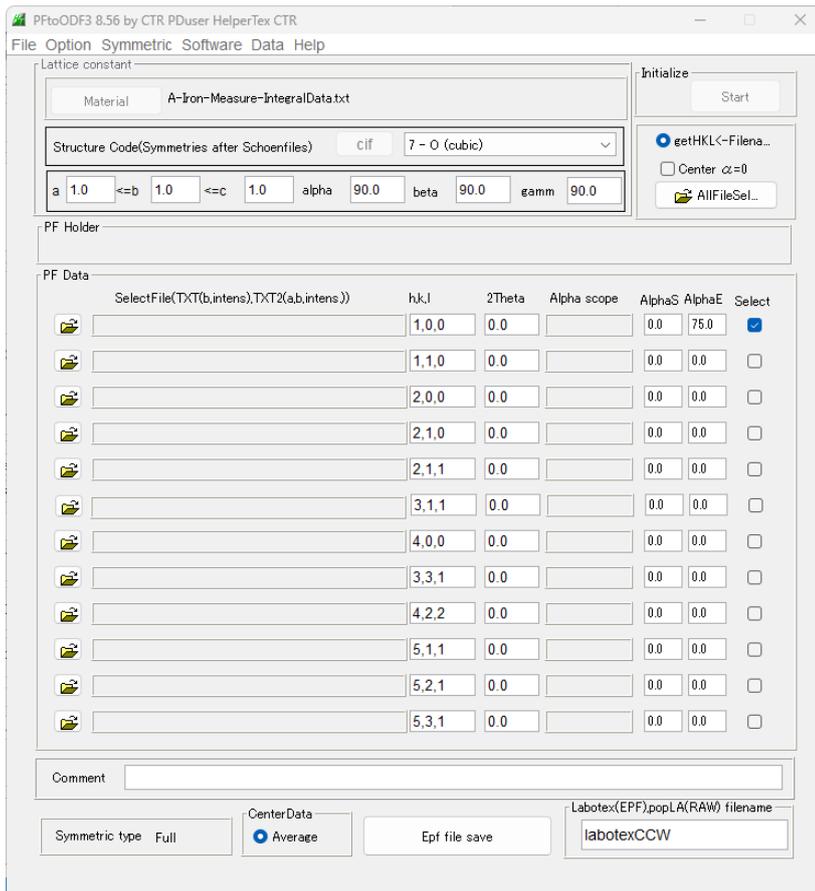
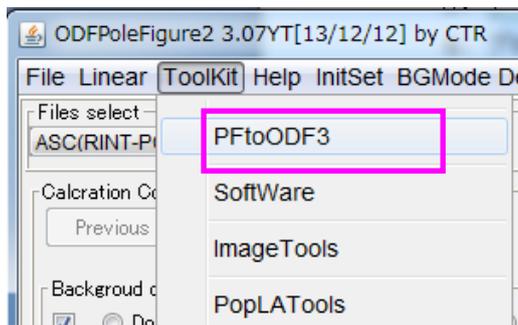


- 2) PoleFigure2 ソフトウェアで極点処理(Calc)を終了後、ODF ボタンで起動



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



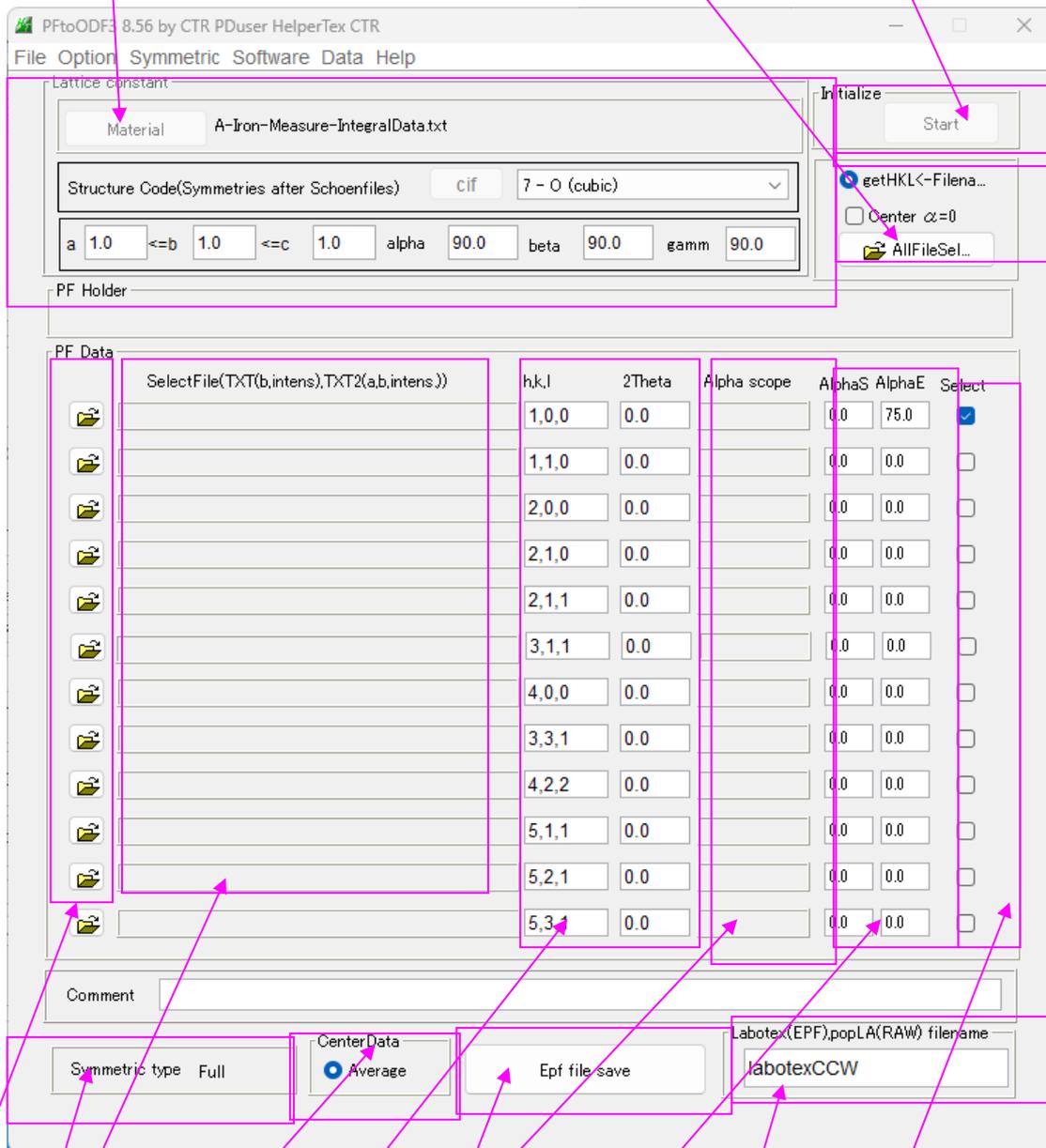
## 4. 2 機能配置

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）



入力ファイル名表示

出力ファイル名指定

入力ファイルの単一指定

入力データ  $\alpha$  範囲表示

入力データの指数と  $2\theta$  角度

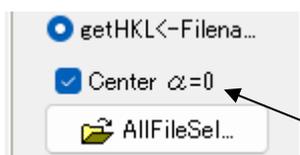
極点図中心密度の平均化

出力ファイルの  $\alpha$  範囲指定

作成するデータ指定

データ平均化状態表示

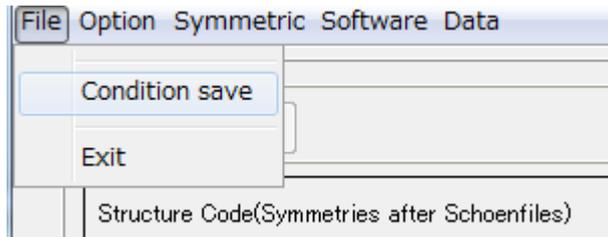
出力ファイル作成



SmartLabExport データ（極点図中心から外側の並び）

#### 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

The image shows a screenshot of the 'Option' menu with various data format options. Pink arrows point from text labels on the right to specific menu items. The menu items are: Outside text(Vector) CCW, Outside CSV(Vector) CCW, Inside text CCW, \*LaboTex(EPF)CCW, Labotex(EPF) CW, Standard ODF CCW, Siemens CCW, TexTools(txt) CCW, \*TexTools(pol) CCW, TexTools(pol) CW, \*TexTools(pol)CCW-zero-cut, TexTools(pol)CW-zero-cut, \*popLA(RAW)CCW, popLA(RAW)CW, StandardODF2.5 CCW, Bunge(PF) CCW, MuTex(TD:beta=0)CCWXT2, \*MTEX(ASC) CCW, MTEX(ASC) CW, LaboTex(PPF) CW, \*LaboTex(PPF) ATEX CCW, newODF(ASC)CCW, TXT2, RAS.

Vector法

LaboTexの標準データ

StandardODFの標準データ

TexToolsの標準データ

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

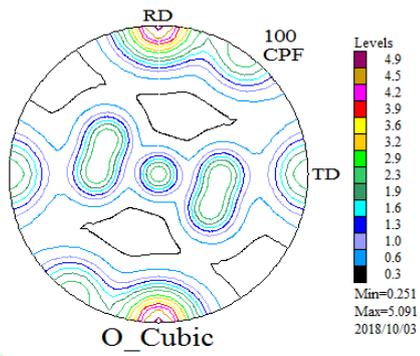
ODF解析を非対称 (Triclinic) で解析を行った場合、CW,CCW で ODF 図がシフトします。

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。

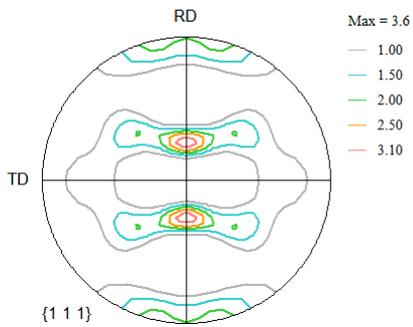
CWで読み込んだ時、TDは極点図の左側、CCWは右側配置になります。

この様に表現すると合理的と考えます。

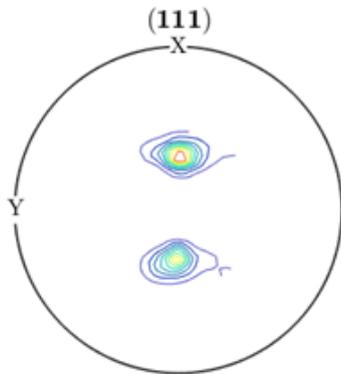
LaboTex (CW)



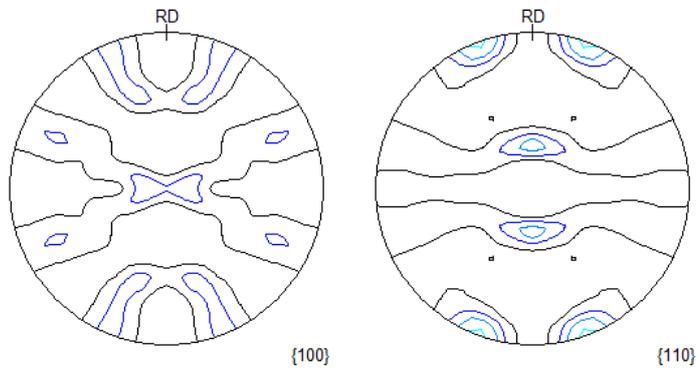
TextTools (CCW)



MTEX (CCW)

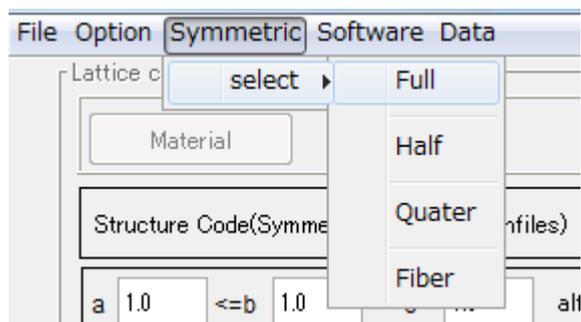


StandardODF (1/4対称なので、回転方向は関係ありません)



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

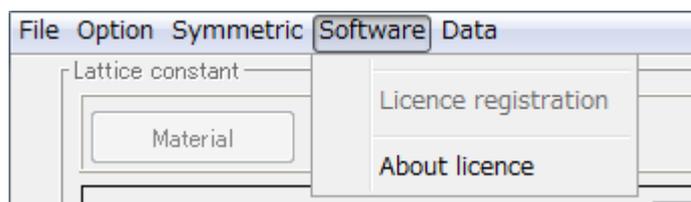
90度、対称操作

F i b e r

$\beta$  方向を平均化

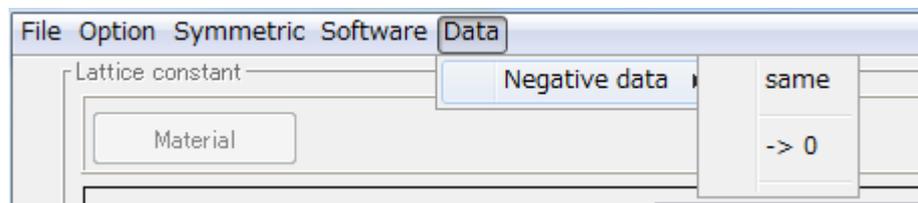
H a l f, Q u a t e r 機能は非対称極点図を扱う L a b o T e x, T e x T o o l s 向けで他のODFに関しては、F u l l のみをサポートしています。

#### 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



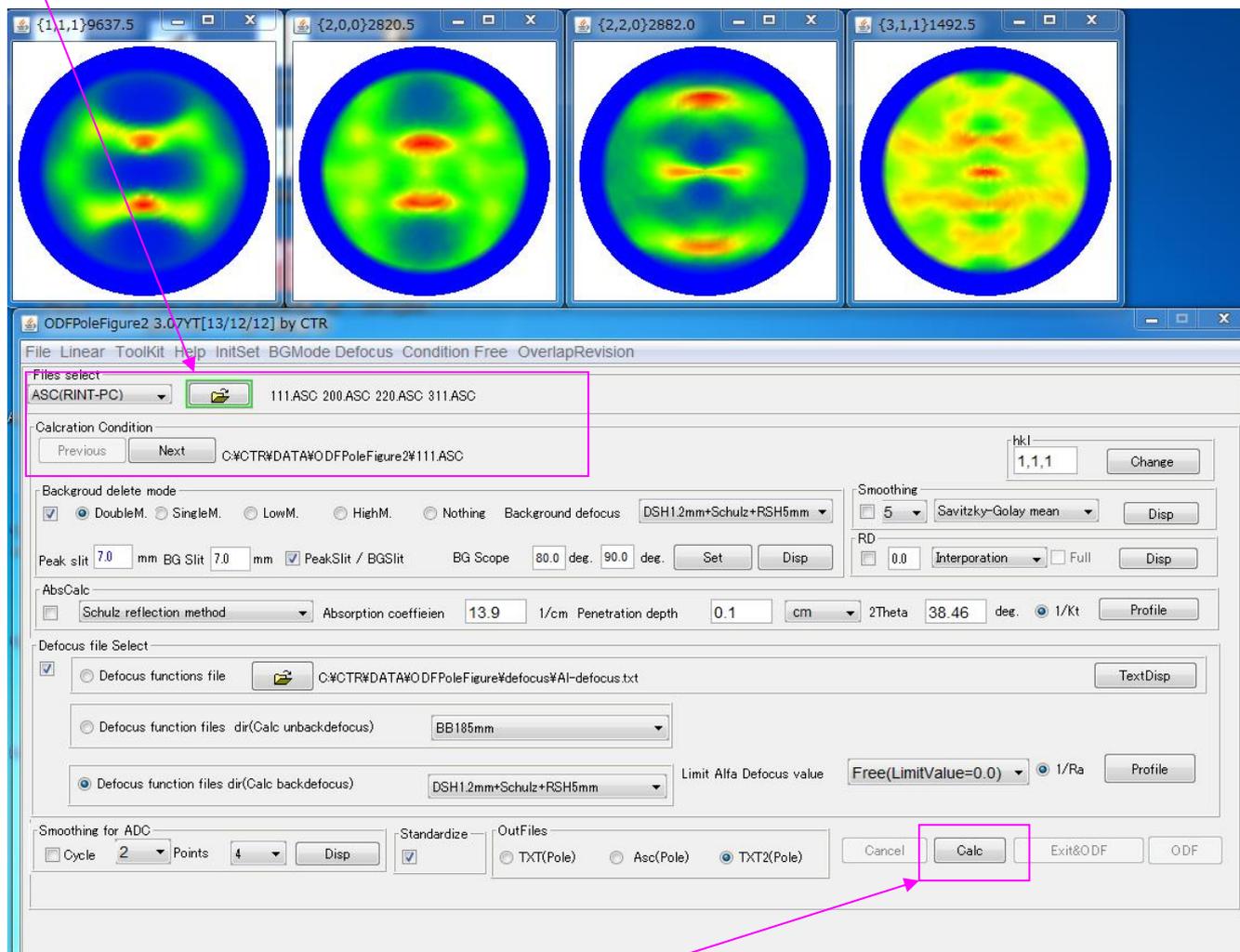
マイナスデータの扱いを指定

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

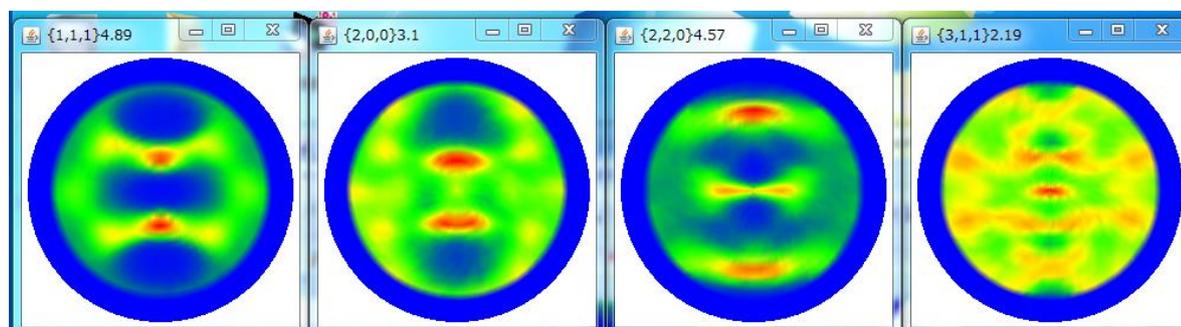
## 入力データ

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ASC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、defocus指定で計算を行う。処理結果極点図が表示

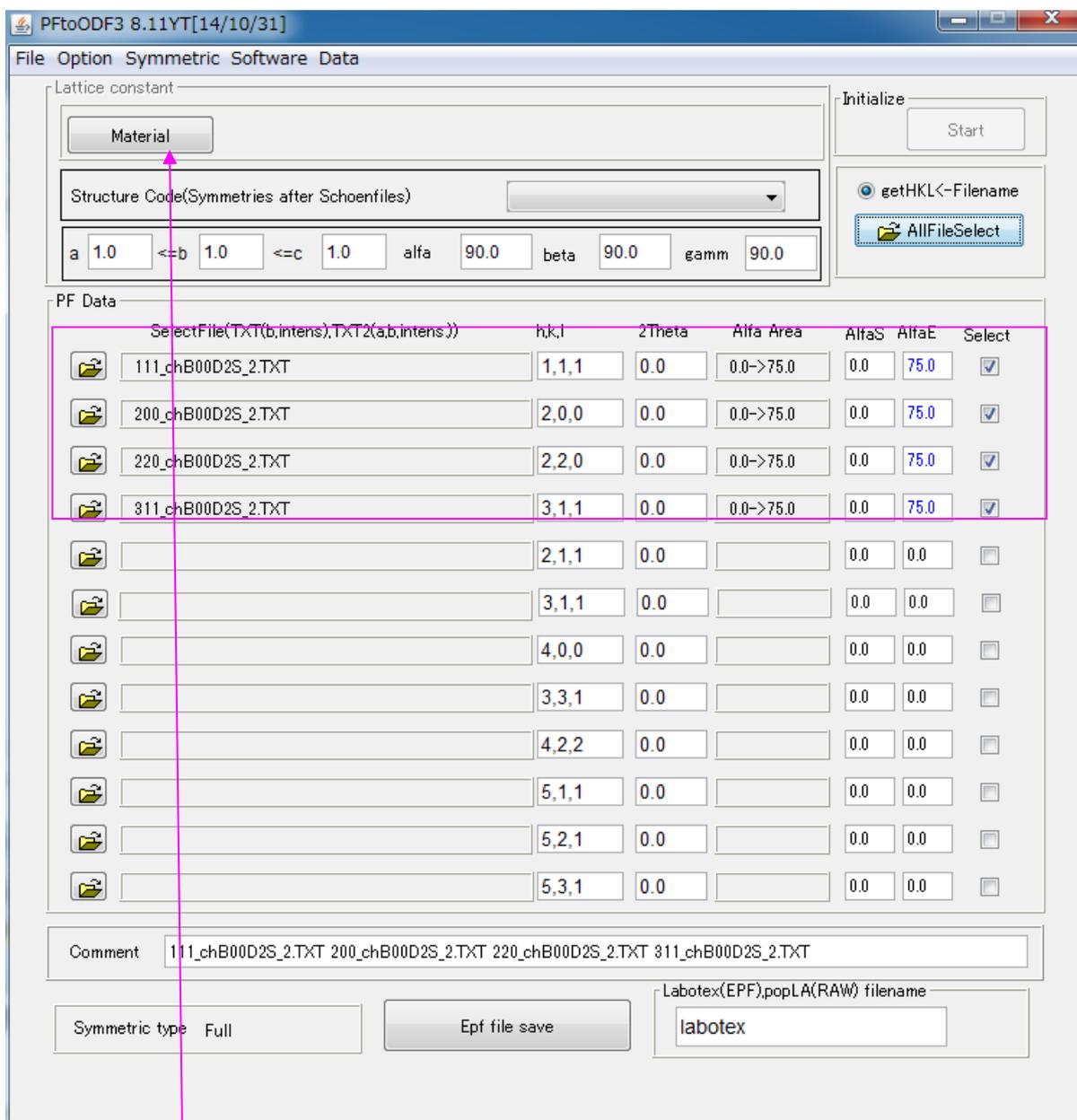
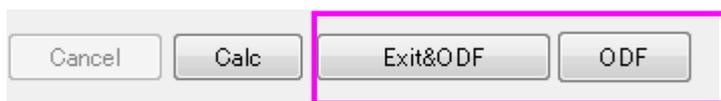


処理されたTXT2ファイルが作成される。

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

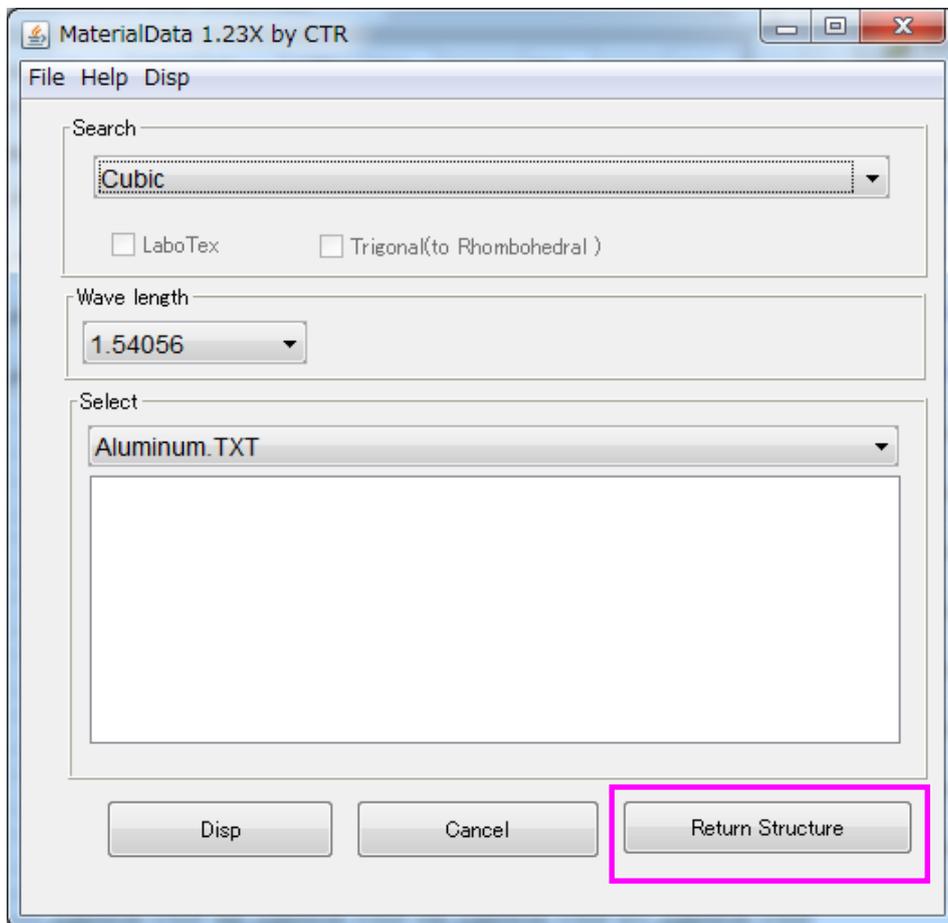
ODFPoleFigure2 ソフトウェアの ODF ボタンを押す



ODFPoleFigure2 ソフトウェアで処理したデータが反映される。

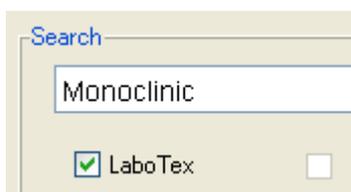
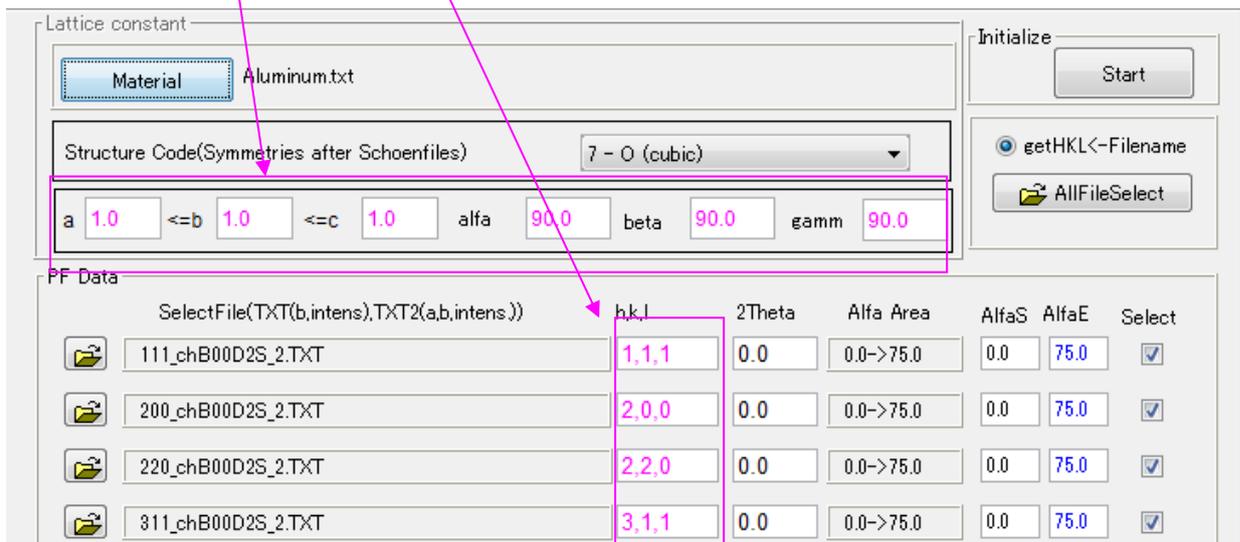


でアルミニウムを指定する。



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	SelectFile(TXT(b,intens),TXT2(a,b,intens))	h,k,l	2Theta	Alfa Area	AlfaS	AlfaE	Select
	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	<b>Outside text</b>	Labotex(LPT),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。

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 LaboTexデータの作成

LaboTexは複数の極点データ、 $\alpha$  範囲が異なっても、ドーナツ極点図も可能  
Option で\*LaboTex(CCW)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LaboTex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

LaboTexディレクトリにCW¥AL. epfファイルが作成

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

LaboTex に読み込むと極点図 CW で表示されるため、RD 軸で逆転表示される

### 6. 3 StandardODFデータ作成

極点図の中心から  $\alpha$  範囲の同一の複数の極点図を選択、

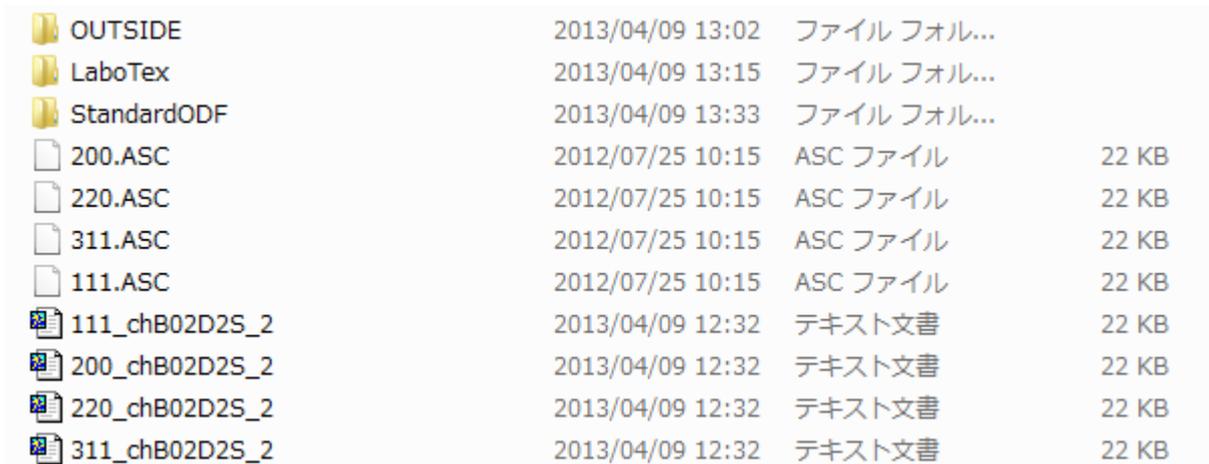
Option で\*StandardODF を選択



StandardODF txt ボタンを押す



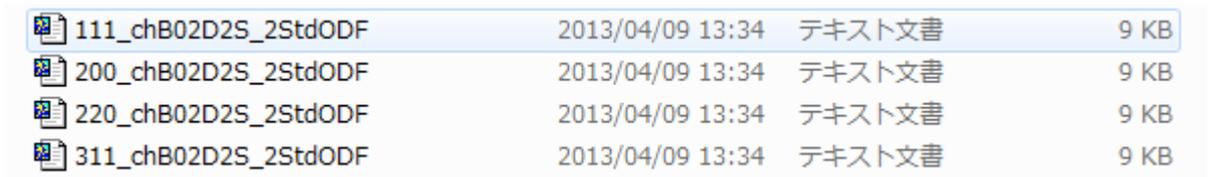
ディレクトリ StandardODF が作成



StandardODF ディレクトリと C:\¥ODF¥PFDATA に以下のファイルを作成

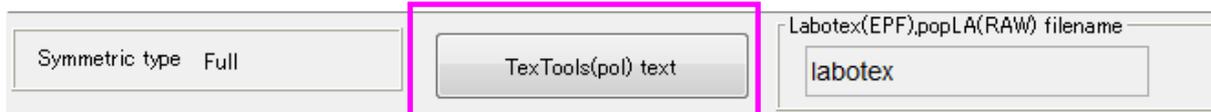
StandardODF が指定場所にインストールされていない場合、C:\¥ODF 以下のファイルは作成されな

い



#### 6. 4 TexTools (CCW) データの作成

TexToolsは複数の極点データ、 $\alpha$  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。



TexTools(pol) txt ボタンを押す



ディレクトリ TexTools 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

TexTools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、 $\alpha$  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:\¥CTRY¥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、

popLA(RAW)CW ボタンを押す

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

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	T 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 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:\¥CTRY¥work¥PFtoODF3¥popla80.txt が存在しない場合

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	T 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 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:\YX にコピーする。

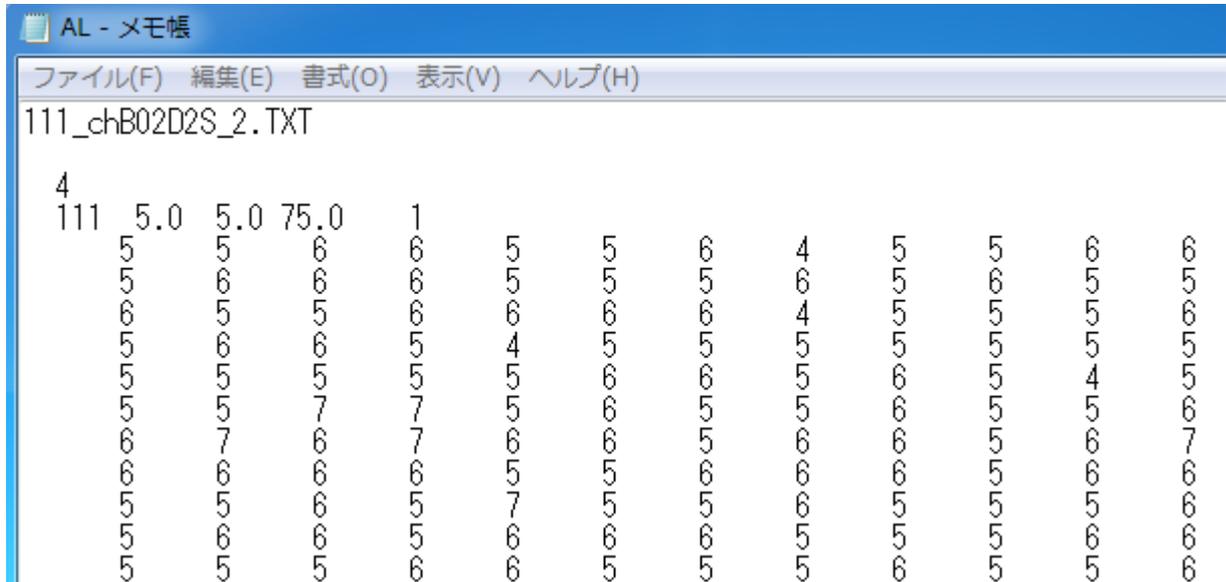
## 6. 6 Bungeデータの作成

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



Bunge(PF)text ボタンを押す



Bungeディレクトリが作成され、



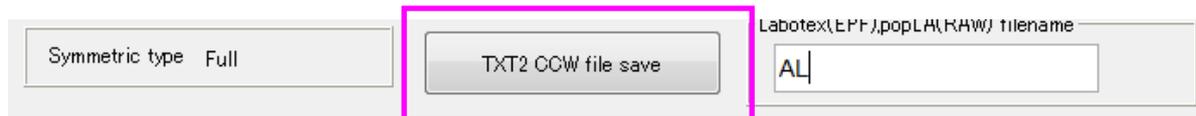
BungeディレクトリにAL.PFファイルが作成される。



## 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

TXT2CCW311_3 - メモ帳			
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

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。

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)

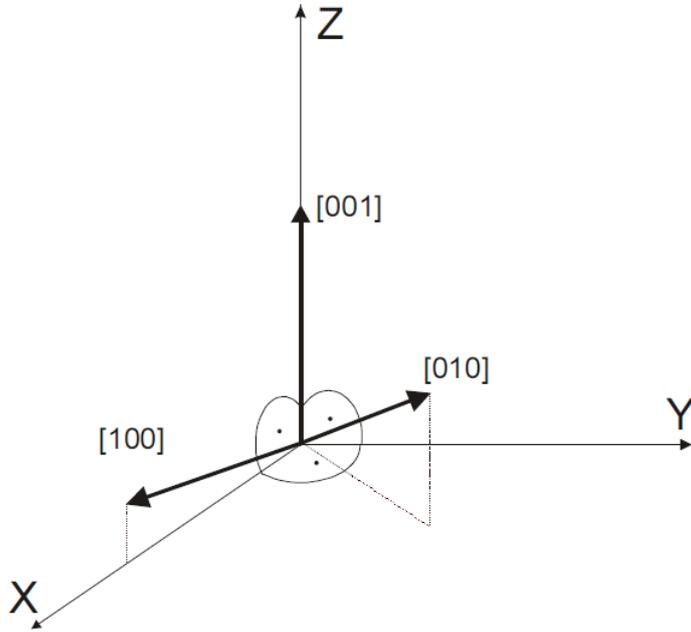
6. 8 MTEXデータの作成

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。

## 6. 9 RASデータの作成

Symmetric type Full	CenterData <input checked="" type="radio"/> Average	RAS file save	Labotex(EPF),popLA(RAW) filename RAS
---------------------	--	---------------	---

新たにRASホルダを作成し、変換ファイルを登録する

RASフォーマット

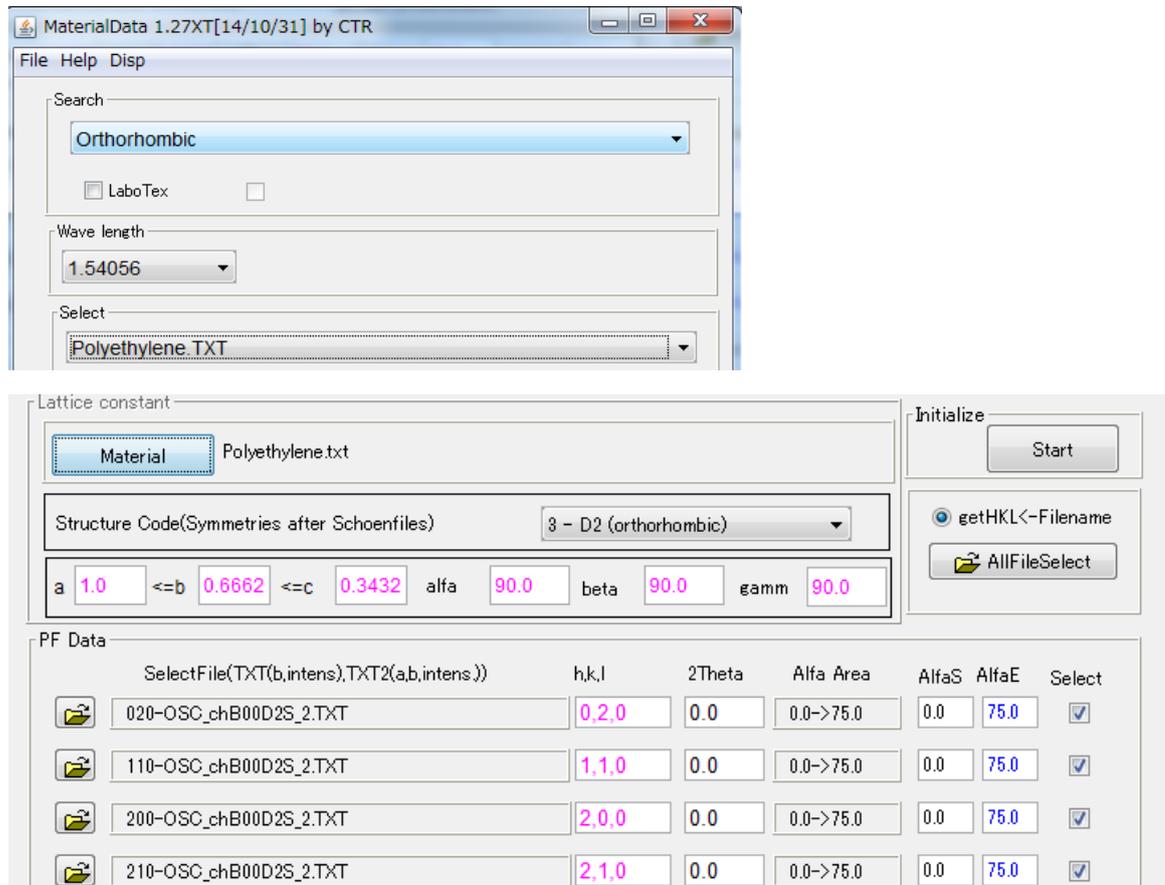
```
*RAS DATA START
*RAS HEADER START
*FILE_3DE_VERSION "1.100"
*FILE_COMMENT
*FILE_DATA_TYPE "RAS_3DE_POLEFIG"
*FILE_MD5
*FILE_MEMO
*FILE_OPERATOR "Administrator"
*FILE_SAMPLE
*FILE_TYPE "RAS_RAW"
*FILE_VERSION "1.0000000000"
*MEAS_3DE_ALPHA_ANGLE "15.0"
*MEAS_3DE_ALPHA_START "15.0"
*MEAS_3DE_ALPHA_STEP "5.0"
*MEAS_3DE_ALPHA_STOP "90.0"
*MEAS_3DE_BG_HIGH_ANGLE "0.00"
*MEAS_3DE_BG_HIGH_EXEC "0"
*MEAS_3DE_BG_HIGH_INT "0"
*MEAS_3DE_BG_HIGH_TIME "1.00"
*MEAS_3DE_BG_LOW_ANGLE "0.00"
*MEAS_3DE_BG_LOW_EXEC "1"
*MEAS_3DE_BG_LOW_INT "0"
*MEAS_3DE_BG_LOW_TIME "1.00"
*MEAS_3DE_BG_MODE "0"
*MEAS_3DE_MEASUR "Coaxial circle scan"
*MEAS_3DE_METHOD "Schulz reflection_method"
```

DATA > Aluminum-H-O > Aluminum-H

名前	更新日時	種類	サイズ
LaboTex	2021/08/31 1:33	ファイル フォルダ	
StandardODF	2021/08/31 1:33	ファイル フォルダ	
TexTools	2021/08/31 1:33	ファイル フォルダ	
MTEX	2021/08/31 1:33	ファイル フォルダ	
CTRODF	2021/08/31 12:41	ファイル フォルダ	
RAS	2021/09/05 4:26	ファイル フォルダ	
111.ASC	2014/03/15 8:42	RINT20007キー	22 KB
200.ASC	2014/03/15 8:42	RINT20007キー	22 KB
220.ASC	2014/03/15 8:42	RINT20007キー	22 KB
111_chB0DS_2.TXT	2019/02/19 5:03	テキスト文書	26 KB
200_chB0DS_2.TXT	2019/02/19 5:03	テキスト文書	26 KB
220_chB0DS_2.TXT	2019/02/19 5:03	テキスト文書	26 KB

名前	更新日時	種類	サイズ
 111.ras	2021/09/05 4:26	RAS ファイル	43 KB
 200.ras	2021/09/05 4:26	RAS ファイル	43 KB
 220.ras	2021/09/05 4:26	RAS ファイル	43 KB

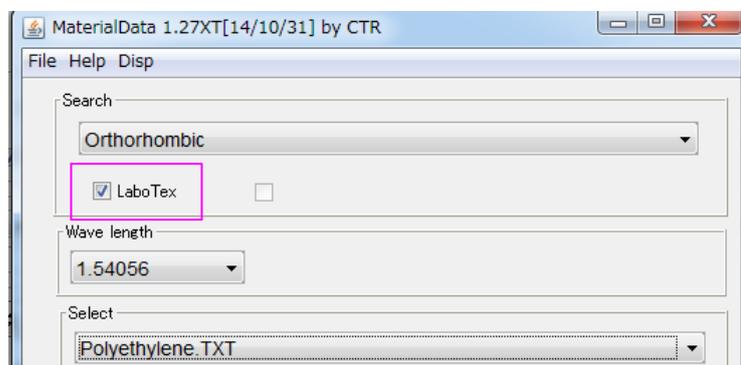
## 7. 1 Orthorhombic 例



The screenshot shows the MaterialData 1.27XT software interface. The 'Search' dropdown is set to 'Orthorhombic'. The 'Wave length' is set to 1.54056. The 'Select' dropdown is set to 'Polyethylene.TXT'. The 'Lattice constant' section shows the material 'Polyethylene.txt' and the structure code '3 - D2 (orthorhombic)'. The lattice constants are: a = 1.0, b = 0.6662, c = 0.3432, alpha = 90.0, beta = 90.0, gamma = 90.0. The 'Initialize' section has a 'Start' button and a 'getHKL<-Filename' radio button. The 'PF Data' table lists four files with their h,k,l values, 2Theta, Alfa Area, AlfaS, AlfaE, and Select checkboxes.

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

LaboTex 用を選択すると



The screenshot shows the MaterialData 1.27XT software interface. The 'Search' dropdown is set to 'Orthorhombic'. The 'LaboTex' checkbox is checked and highlighted with a pink box. The 'Wave length' is set to 1.54056. The 'Select' dropdown is set to 'Polyethylene.TXT'.

Lattice constant

Material: Polyethylene.txt

Structure Code(Symmetries after Schoenfiles): 3 - D2 (orthorhombic)

a: 1.0    <=b: 1.9409    <=c: 2.9134    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
020-OSC_chB00D2S_2.TXT	0,2,0	0.0	0.0->75.0	0.0	75.0	<input checked="" type="checkbox"/>
110-OSC_chB00D2S_2.TXT	0,1,1	0.0	0.0->75.0	0.0	75.0	<input checked="" type="checkbox"/>
200-OSC_chB00D2S_2.TXT	0,0,2	0.0	0.0->75.0	0.0	75.0	<input checked="" type="checkbox"/>
210-OSC_chB00D2S_2.TXT	0,1,2	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. 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
-111-OSC_chB00D2S_2.TXT	-1,1,1	0.0	0.0->75.0	0.0	75.0	<input checked="" type="checkbox"/>
001-OSC_chB00D2S_2.TXT	0,0,1	0.0	0.0->75.0	0.0	75.0	<input checked="" type="checkbox"/>
011-OSC_chB00D2S_2.TXT	0,1,1	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"/>

LaboTex 用を選択すると

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

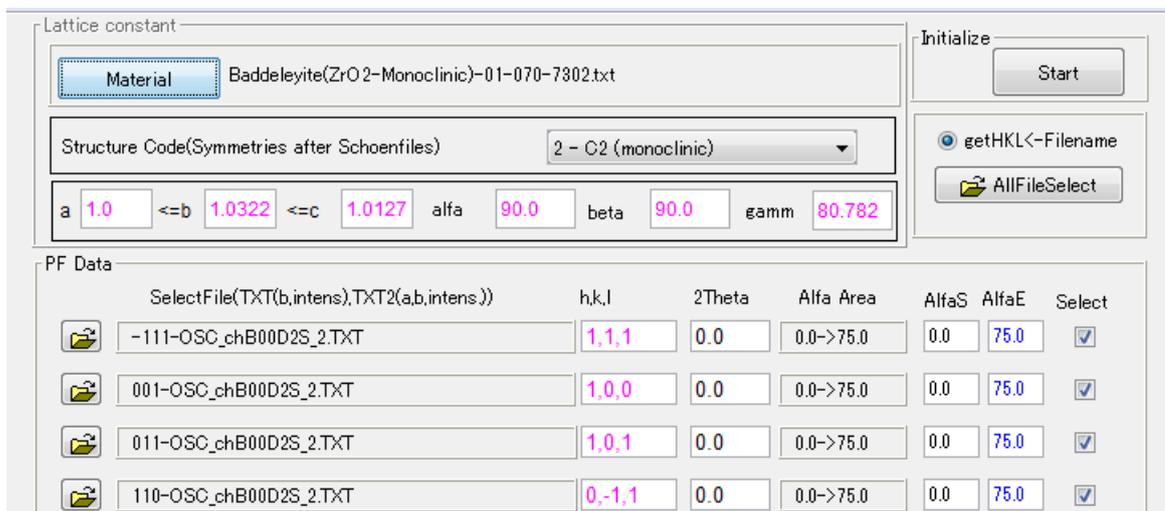
File Help Disp

Search: Monoclinic

LaboTex:

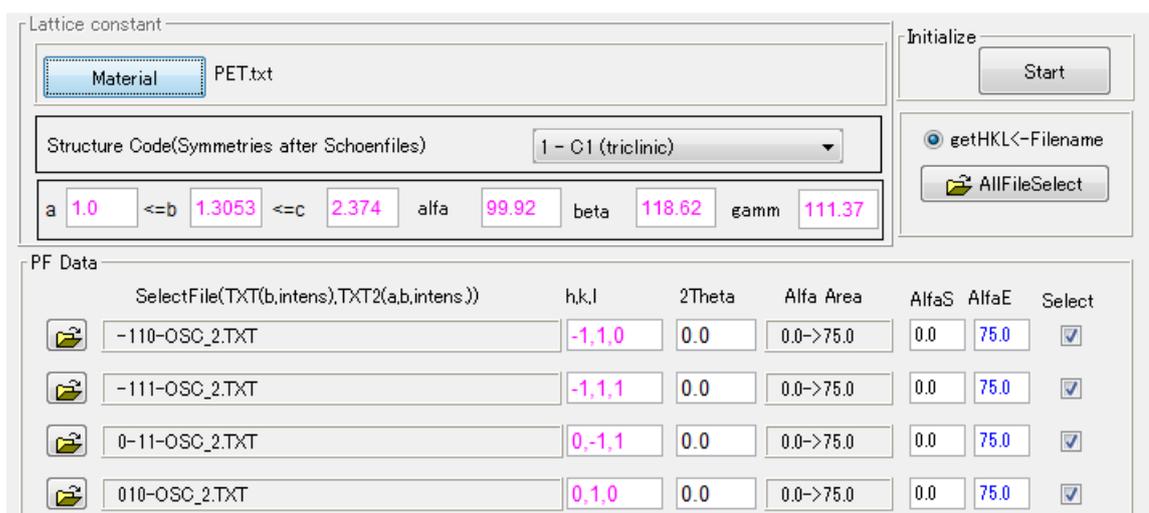
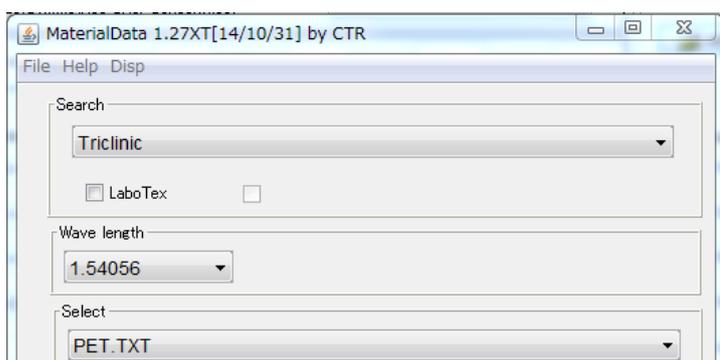
Wave length: 1.54056

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

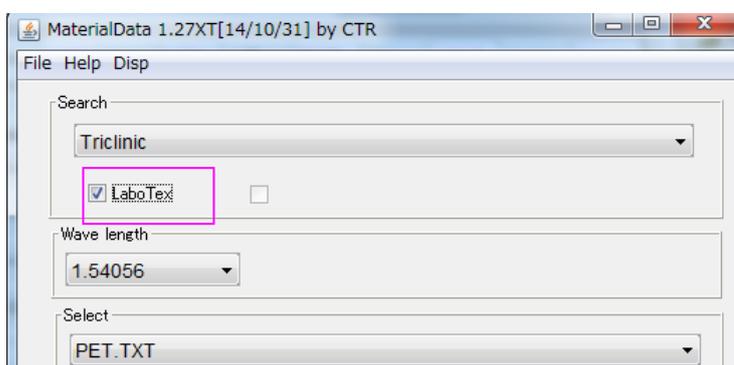


格子定数と指数の入れ替えが行われる。

### 7.3 Triclinic 例



LaboTex 用を選択すると



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    alfa: 90.0    beta: 90.0    gamm: 120.0

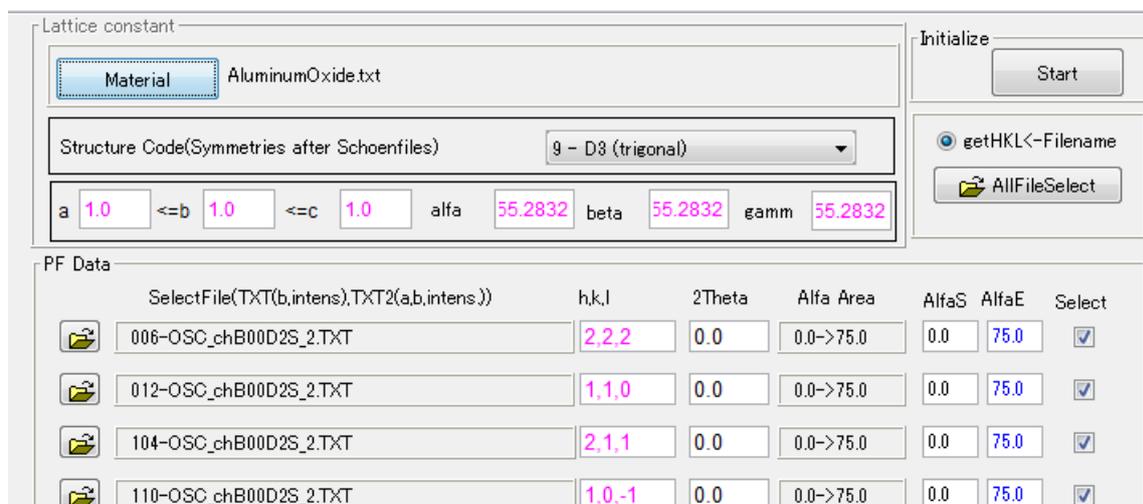
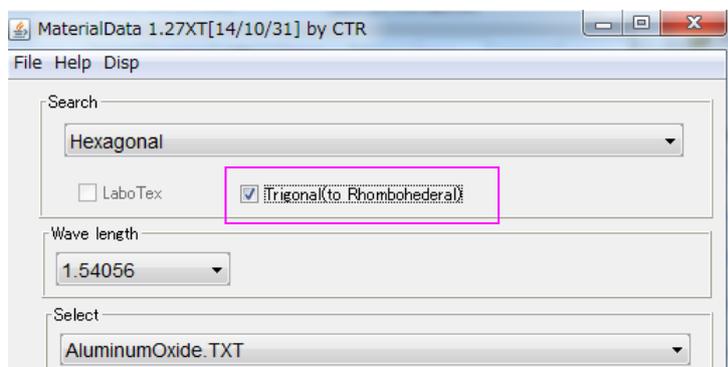
Initialize: Start

getHKL<-Filename  
AllFileSelect

PF Data

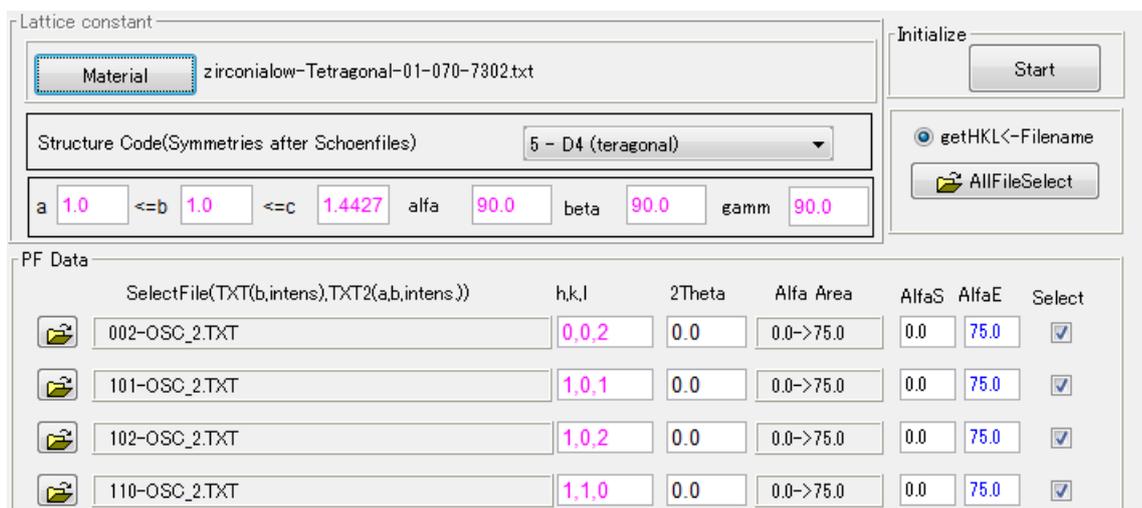
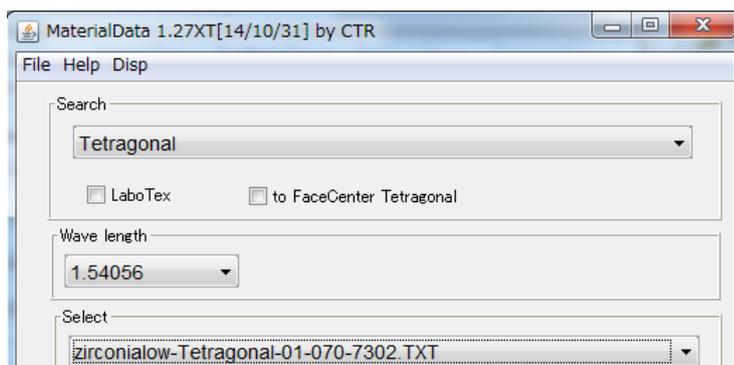
SelectFile(TXT(b,intens),TXT2(a,b,intens.))	h,k,l	2Theta	Alfa Area	AlfaS	AlfaE	Select
006-OSC_chB00D2S_2.TXT	0,0,6	0.0	0.0->75.0	0.0	75.0	<input checked="" type="checkbox"/>
012-OSC_chB00D2S_2.TXT	0,1,2	0.0	0.0->75.0	0.0	75.0	<input checked="" type="checkbox"/>
104-OSC_chB00D2S_2.TXT	1,0,4	0.0	0.0->75.0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

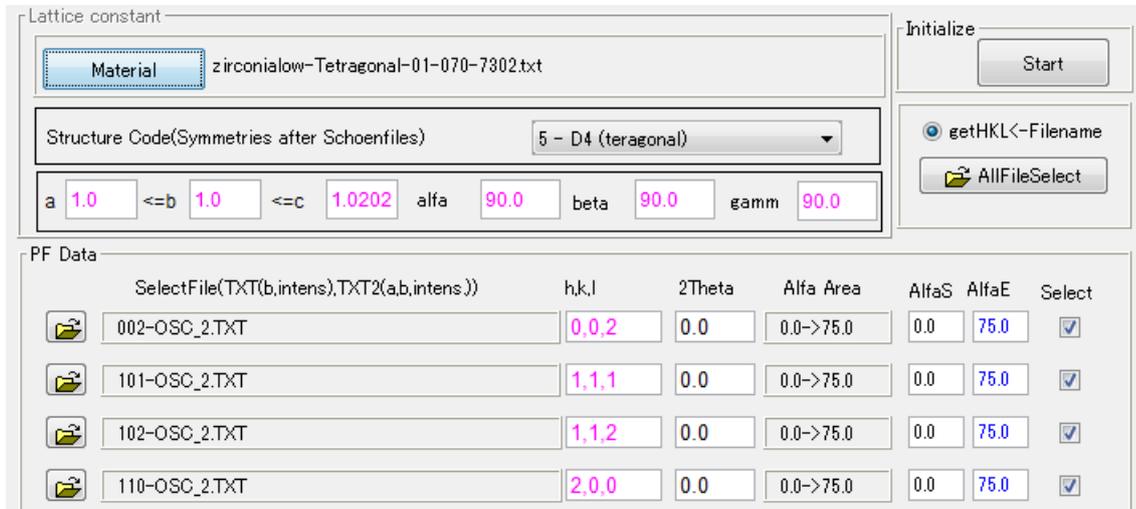
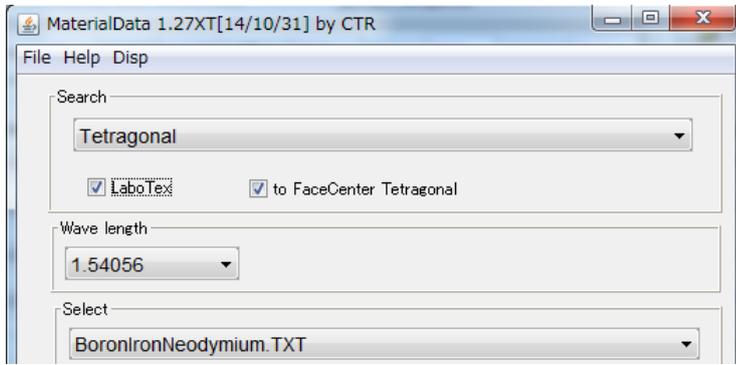


## 9. 体心正方晶から面心正方晶への変換

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。



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



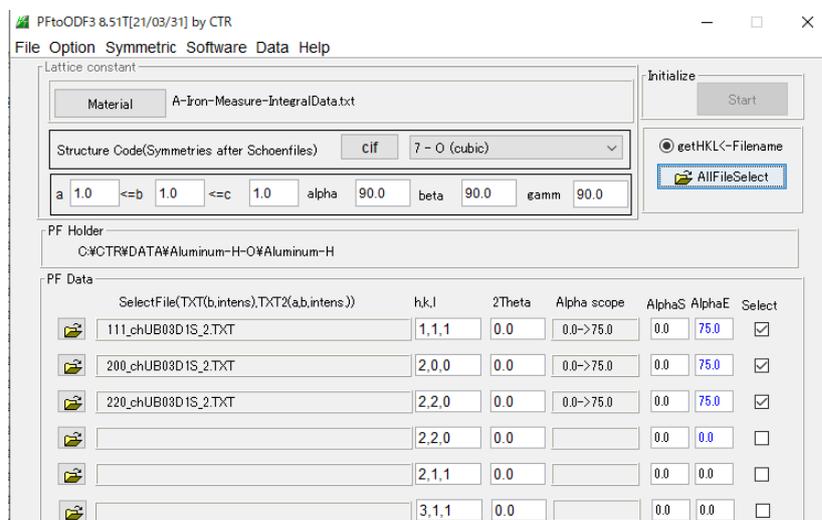
## 10. cifデータをMaterial経由で取り込む

DataBaseに登録されていない物質をcifデータから一時的に取り込む

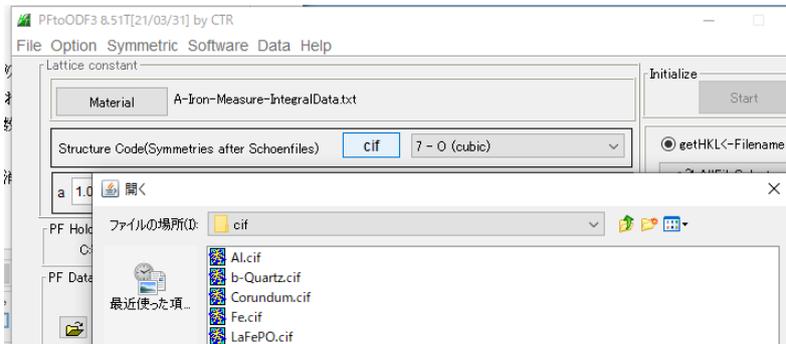
LaboTexデータ形式は複雑で、結晶系によっては、指数の入れ替えが行われる。

DataBaseに登録されていない場合、cif形式で取り込むが、指数の入れ替えを行うMaterialを介す事とする。

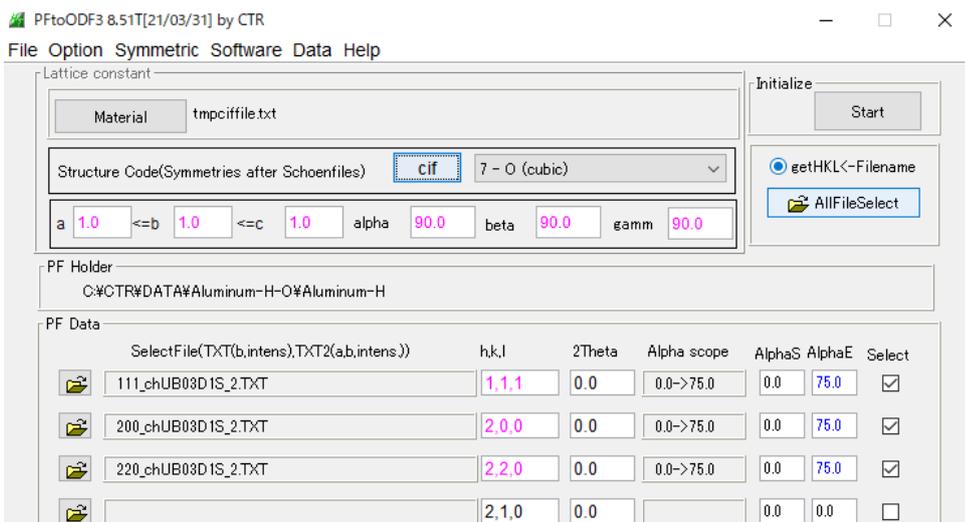
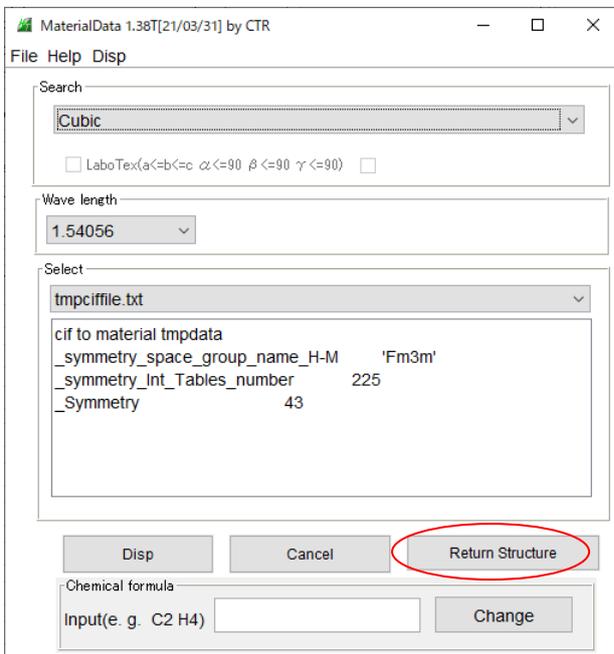
cifデータで必要な、格子定数、空間群データ、指数のみ扱い、消滅測、相対強度は無視する。一時的なtmpciffile.txtデータを作成しMaterial経由で取り込む



cifからAlcifを選択



Al.cif から計算された一時的な tmpciffile.txt が作成され、Material 経由で読み込む



LaboTexでは、C軸をZ軸に合わせた指数計算が行われるが、この指数変更を、Materialで実現のため、Material経由で読み込んでいます。読み込む情報は、空間群と格子定数、空間群から、対応する反射を読み込むが、相対強度は計算していません。h k l の評価を行います。