各種ODF用テキストデータ作成

PFtoDF3ソフトウエア

Ver.8.58

2024年12月17日



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 2021/0/01/09	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
Version8.582024/12/17	C O D c if 対応

- 1. 概要
- 2. 入力データ
- 3. データ処理の流れ
- 4. ソフトウエアの使い方
 - 4.1 起動
 - 4.2 機能配置
 - 4. 3 メニュー
 - 4. 3. 1 Fileメニュー
 - 4. 3. 2 Option X=--
 - 4.3.3 データ対称操作
 - 4.3.4 ソフトウエアメニュー
 - 4. 3. 5 Data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 Vector法データの作成
 - 6. 2 LaboTexデータの作成
 - 6. 3 StandardODFデータ作成
 - 6. 4 TexTools (CCW) データの作成
 - 6.5 popLA (CW) データの作成
 - 6. 6 Bungeデータの作成
 - 6. 7 MulTexデータの作成
 - 6.8 MTEXデータの作成
 - 6. 9 RASデータの作成
- 7. LaboTexの向けデータの作成 (MarerialData)
 - 7.1 Orthorhombic例
 - 7.2 Monoclinic例
 - 7.3 Triclinic例
- 8. Trigonal (Rhombohederal)
- 9. 体心正方晶から面心正方晶への変換
- 10. cifデータをMaterial経由で取り込む

1. 概要

本ソフトウエアは、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
$\begin{array}{c} 0.0\\ 5.0\\ 10.0\\ 15.0\\ 20.0\\ 25.0\\ 30.0\\ 35.0\\ 40.0\\ 45.0\\ 55.0\\ 60.0\\ \end{array}$	0.5918 0.6019 0.6454 0.681 0.7185 0.7852 0.8578 0.8878 0.8813 0.9063 0.8828 0.8292 0.8047
350.0 355.0 360.0 0.0 5.0 10.0 15.0 20.0 25.0 30.0	0.6775 0.6299 0.5993 0.2501 0.2635 0.2776 0.2666 0.3276 0.3276 0.4374 0.6154

TXT2データ

α角度、	β角度、	極密度の羅列
15.0 15.0 15.0 15.0 15.0 15.0 15.0 15.0	$\begin{array}{c} 0.0\\ 5.0\\ 10.0\\ 15.0\\ 20.0\\ 25.0\\ 30.0\\ 35.0\\ 40.0\\ 45.0\\ 55.0\\ 55.0\\ 60.0\\ \end{array}$	0.5918 0.6019 0.6454 0.681 0.7185 0.7852 0.8578 0.8878 0.8913 0.8913 0.9063 0.8828 0.8292 0.8047
15.0 15.0 20.0 20.0 20.0 20.0 20.0 20.0 20.0 2	350.0 355.0 360.0 0.0 5.0 10.0 15.0 20.0 25.0 30.0	$0.6775 \\ 0.6299 \\ 0.5993 \\ 0.2501 \\ 0.2635 \\ 0.2776 \\ 0.2666 \\ 0.3276 \\ 0.4374 \\ 0.6154$



各種ODFテキストデータ

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. ソフトウエアの使い方
 - 4.1 起動

ソフトウエアの実態は、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

PFtoODF
PFtoODF2
PFtoODF3
PFZeroDataCut
PluralAsctoAsc
PoleBackgroundEditor

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

Cancel	Calc	Exit&ODF	ODF

PoleFigure2 ソフトウエアで処理したファイルが引き継がれる。

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

le Linear Too	olKit Help InitS	et BGMo	de De	
iles select -		_	F	
SC(RINT-P	PFtoODF3			
Calcration Co	SoftWare		-	
Previous	ImageTools			
Backgroud c	PopLATools		_	
:oODF3 8.56 by CTR PDuse	r HelperTex CTR		D	
Option Symmetric Sof	ftware Data Help			
attice constant				Initialize
Material A-Iron	-Measure-IntegralData.txt			Start
Structure Code(Symmetries	s after Schoenfiles)	if 7 - O (cub	ic) ~	ogetHKL<-Filena
a 1.0 <=b 1.0	<=c 1.0 alpha 90	0.0 beta 90	0.0 gamm 90.0	Center a=0
2				
if		1,0,0 1,1,0 2,0,0 2,1,0 2,1,1 3,1,1 4,0,0	0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0	0.0 75.0 2 0.0 0.0 . 0.0 0.0 . 0.0 0.0 . 0.0 0.0 . 0.0 0.0 . 0.0 0.0 . 0.0 0.0 . 0.0 0.0 .
		1,0,0 1,1,0 2,0,0 2,1,0 2,1,1 3,1,1 4,0,0 3,3,1	0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0	00 750 Image: Constraint of the constrain
		1,0,0 1,1,0 2,0,0 2,1,0 2,1,1 3,1,1 4,0,0 3,3,1 4,2,2	0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0	00 750 Image: Constraint of the constrain
		1,0,0 1,1,0 2,0,0 2,1,0 2,1,1 3,1,1 4,0,0 3,3,1 4,2,2 5,1,1	0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0	00 750 2 00 00 0 00 00 0 00 00 0 00 00 0 00 00 0 00 00 0 00 00 0 00 00 0 00 00 0 00 00 0 00 00 0
		1,0,0 1,1,0 2,0,0 2,1,0 2,1,1 3,1,1 4,0,0 3,3,1 4,2,2 5,1,1 5,2,1	0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0	00 750 2 00 00 0 00 00 0 00 00 0 00 00 0 00 00 0 00 00 0 00 00 0 00 00 0 00 00 0 00 00 0 00 00 0 00 00 0 00 00 0
		1,0,0 1,1,0 2,0,0 2,1,0 2,1,1 3,1,1 4,0,0 3,3,1 4,2,2 5,1,1 5,2,1 5,2,1 5,3,1	0.0 0.0	00 750 0 00 00 0 00 00 0 00 00 0 00 00 0 00 00 0 00 00 0 00 00 0 00 00 0 00 00 0 00 00 0 00 00 0 00 00 0 00 00 0 00 00 0
Image: Comment		1,0,0 1,1,0 2,0,0 2,1,0 2,1,1 3,1,1 4,0,0 3,3,1 4,2,2 5,1,1 5,2,1 5,3,1	0.0	

4.2 機能配置



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

File Option Symmetr	ric Software Data
Condition save	
Exit	
Structure Code(S)	/ /mmetries after Schoenfiles)

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 >= --





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。



TexTools (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 Analysus Material Science)はTDは左表現

File	Option	Symmetric	Softw	are Data	
Γ	Lattice c	select)	Full	
	M	aterial		Half	
	Structu	re Code(Symn	ne	Quater	nfiles)
	a 1.0	<=b 1.0		Fiber	alt

F u l l

対称操作を行わない

Half

180度、左右対称操作

Quater

90度、対称操作

Fiber

β方向を平均化

Half, Quater機能は非対称極点図を扱うLaboTex, TexTools向けで 他のODFに関しては、Fullのみをサポートしています。

4. 3. 4 Softwareメニュー

File Option Symmetric	Software Data	
Lattice constant	Licence registration	
Material	About licence	

ソフトウエアのバージョン表示

4. 3. 5 Data×=--

File Option Symmetric Software	Data		
Lattice constant	Negative data 🕠	same	
Material		-> 0	

マイナスデータの扱いを指定

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。

2013/04/09 12:32	テキスト文書	22 KB
2013/04/09 12:32	テキスト文書	22 KB
2013/04/09 12:32	テキスト文書	22 KB
2013/04/09 12:32	テキスト文書	22 KB
	2013/04/09 12:32 2013/04/09 12:32 2013/04/09 12:32 2013/04/09 12:32	2013/04/09 12:32 テキスト文書 2013/04/09 12:32 テキスト文書 2013/04/09 12:32 テキスト文書 2013/04/09 12:32 テキスト文書

^{5.1} PFtoODF3 に極点処理結果ファイルを反映

ODFPoleFigure2 ソフトウエアの ODF ボタンを押す

Cancel	Calc	Exit&ODF	ODF

attice constant				Initialize
Material				Start
Structure Code(Symmetries after Schoer	nfiles)		•	⊚ getHKL<-Filename
				AllFileSelect
a 1.0 <=b 1.0 <=c 1.0	alfa 90.0	beta 9	90.0 gamm 90.0	
PF Data				
SelectFile(TXT(b,intens),TXT2	(a,b,intens.))	h,k,i	2Theta Alfa Area	AlfaS AlfaE Select
☐ 111_dhB00D2S_2.TXT		1,1,1	0.0 0.0->75.0	0.0 75.0 🗸
200_chB00D2S_2.TXT		2,0,0	0.0 0.0->75.0	0.0 75.0 🗸
220_chB00D2S_2.TXT		2,2,0	0.0 0.0->75.0	0.0 75.0 🔽
311_chB00D2S_2.TXT		3,1,1	0.0 0.0->75.0	0.0 75.0 📝
		2,1,1	0.0	0.0 0.0
		3,1,1	0.0	0.0 0.0
		4,0,0	0.0	0.0 0.0
		3,3,1	0.0	0.0 0.0
		4,2,2	0.0	0.0 0.0
		5,1,1	0.0	0.0 0.0
		5,2,1	0.0	0.0 0.0
		5,3,1	0.0	0.0 0.0
Comment 111_chB00D2S_2.TXT 200_c	hB00D2S_2.TXT 220	_chB00D2S:	2.TXT 311_chB00D2S_2.TXT	
			Labotex(EPF),popLA(I	RAW) filename
Symmetric type Full	Epf file :	save	labotex	

ODFPOleFigure2 ソフトウエアで処理したデータが反映される。

Material でアルミニウムを指定する。

🛃 MaterialData 1.23X by CTR			
File Help Disp			
∫ Search			
Cubic	•		
LaboTex Trigonal(to Rhombohedral)			
Wave length			
1.54056 -			
Select			
Aluminum.TXT	•		
Disp Cancel Return	Structure		

Return Structure $\tilde{\mathbb{C}}$

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。

Lattice constant Material Aluminum.txt		Initialize		
Structure Code(Symmetries after Schoenfiles) 7 - 0 (cubic) a 1.0 <=c 1.0 alfa 90.0 gamm 90.0 a 1.0 <=c 1.0 alfa 90.0 gamm 90.0				
PF-Data SelectFile(TXT(b,intens),TXT2(a,b,intens))	h,k,l2Theta Alfa Area	AlfaS AlfaE Select		
111_chB00D2S_2.TXT 200_chB00D2S_2.TXT	1,1,1 0.0 0.0->75.0 2,0,0 0.0 0.0->75.0	0.0 75.0 V 0.0 75.0 V		
220_chB00D2S_2.TXT 311_chB00D2S_2.TXT	2,2,0 0.0 0.0->75.0 3,1,1 0.0 0.0->75.0	0.0 75.0 🔽		

Search-	
Monoclinic	
✓ LaboTex	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、 α =30deg 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
2	111_chB00D2S_2.TXT	1,1,1	0.0	0.0->75.0	0.0	75.0	
>	200_chB00D2S_2.TXT	2,0,0	0.0	0.0->75.0	0.0	75.0	
	220_chB00D2S_2.TXT	2,2,0	0.0	0.0->75.0	0.0	75.0	
2	811_chB00D2S_2.TXT	3,1,1	0.0	0.0->75.0	0.0	75.0	

		Labotex(EPF),popLA(KAW) filename
Symmetric type Full	Outside text	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。

ſ	🥘 111 - メモ帳				
	ファイル(F) 編	集(E) 書式(O)	表示(V) へル	プ(H)	
	1152,	0.0,	5.0,	10.0,	15.0, 0.0045
	20.0,	0.0918, 0.2501,	0.8299, 0.2493,	0.0775, 0.2682,	0.6945, 0.302,
	25.0,	0.137,	0.1209,	0.1306,	0.171, 0.1106
	35.0,	0.0839,	0.0926,	0.105,	0.1104,
	40.0, 45.0	0.1049, 0.2043	0.1024, 0.2132	0.125, 0.265	0.1479, 0.355
	50.0,	0.7794,	0.822,	0.9456,	1.1782,
	55.U, 60.0.	2.3692, 3.9135.	2.4214, 3.8535.	2.4608, 3.6886.	2.5572, 3.4724.
	ě5.0,	4,2245,	4.1247,	3.8232,	3.4255,
	70.0, 75.0,	1.956, 0.4506,	1.8922, 0.4409,	1.7478, 0.3965,	1.5081, 0.3676,
	80.0,	0.1278,	0.1283,	0.1253,	0.1142,
	90.0,	0.0514,	0.065,	0.0555,	0.0568,

ディレクトリOUTSIDEが作成

퉬 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

6. 2 LaboTexデータの作成

LaboTexは複数の極点データ、 α 範囲が異なっていても、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



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
Δ
2Theta alf-s alf-e d-alf bet-s bet-e d-bet index HKL P/B
38.46 0.0 75.0 5.0 0.0 355.0 5.0 0 111 1
44.7 0.0 75.0 5.0 0.0 355.0 5.0 0 200 1
65.08 0.0 75.0 5.0 0.0 355.0 5.0 0 2.20 1
78.22 0.0 75.0 5.0 0.0 355.0 5.0 0 311 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

퉬 OUTSIDE	2013/04/09 13:02	ファイル フォル…	
퉬 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
StandardODF txt ボタン	~を押す	
111_chB02D2S_2StdODF - メモ	三帳	

ファイル	F	() 編生(F١	ま式	<u>`0</u> `	, 表示	'v) ヘルプ(H)
22 110		1111212	- /		<u> </u>	1 22/11		

l	0.0514 0.0545 0.0611 0.0639 0.0591 0.0557 0.0611 0.0491 0.0
l	0555 0.0583 0.0624 0.0594 0.0596 0.0614 0.0747 0.0894 0.0627
	.1576 0.1419 0.1271 0.1181 0.1078 0.1012 0.0971 0.0819 0.081
	0.6355 0.8237 1.0924 1.507 1.9553 2.4414 3.0219 3.3091 3.47
	1 0.4636 0.4147 0.3666 0.3371 0.3144 0.3144 0.3618 0.4021 C
	22 0.2043 0.2281 0.2605 0.3516 0.5743 1.0376 1.656 2.3506 2
	0.9821 1.1836 1.5265 1.8472 2.1274 2.3324 2.3125 1.7549 0.9
	1.3742 1.8482 2.0201 1.9121 1.6648 1.4896 1.3255 1.3467 1.3
	8 0.5225 0.4087 0.3237 0.2576 0.2485 0.2009 0.2115 0.1887 C

ディレクトリStandardODFが作成

퉬 OUTSIDE	2013/04/09 13:02	ファイル フォル…	
퉬 LaboTex	2013/04/09 13:15	ファイル フォル…	
퉬 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

StyandardODF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 TexTools (CCW) データの作成

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

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

TexTools(pol) txt ボタンを押す

textools31	1_3.pol -	メモ帳	
ファイル(F)	編集(E)	書式(O)	表示(V)
0.0	0.0	2.044	100
0.0	5.0	2.112	220
0.0	15.0	2.020	740
Ŏ.Ŏ	2 <u>0</u> .0	2.079	96Ö
0.0	25.0	2.140)90
	30.0 35 0	2.033	890 820
ŏ.ŏ	ĂŎ.Ŏ	2.071	ĪŎ
0.0	45.0	2.128	350
	50.0 55 0	2.056	540 190
0.0	60.0	2.051	70
0.0	65.0	2.078	310
ų.v	<u>/U.V</u>	Z. 145	50

ディレクトリTexToolsが作成

퉬 OUTSIDE	2013/04/09 13:02	ファイル フォル…	
퉬 LaboTex	2013/04/09 13:15	ファイル フォル…	
퉬 StandardODF	2013/04/09 13:33	ファイル フォル…	
퉬 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。

textools111_0.pol	2013/04/09 15:34	POL ファイル	38 KB
textools200_1.pol	2013/04/09 15:34	POL ファイル	38 KB
textools220_2.pol	2013/04/09 15:34	POL ファイル	38 KB
textools311_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、



popLA(RAW)CW ボタンを押す

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

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

ſ	🗍 AL.R	AW -	メモ帽	Į.															
l	ファイノ	ν(F)	編集((E)	書式(O)表	⊼(V)	\sim l	ノプ(H))									
l	<u>AL 1</u> 1	1_ch	BQ2D	28_2	.TXT	200	_chB	02D2	<u>S_2</u> ;	TXT	220_	.chB0	2D2S	_2.T	XT 3	11_c	:hB02	D2S_	2.TXT
ľ		<u>5.0</u> 10	_/5. Q	Щg	.036	U.U G	I I G	21	3 I Q	63 11	11	a	q	8	7	a	10	q	
l	11	'ğ	ğ	ğ	'ğ	ğ	ğ	8	ğ	8	'9	8 8	ğ	8 8	ź	ğ	'ğ	ğ	
l	9	10	9	19	8	17	9	11	19	10	8	9	10	8	9	10	9	10	
		11	11	10	12	11	10	10	10	12	10	8 9	9	10	9	9	10	8 9	

ディレクトリpopLAが作成

🐌 OUTSIDE	2013/04/09 13:02	ファイル フォル…	
퉬 LaboTex	2013/04/09 13:15	ファイル フォル…	
퉬 StandardODF	2013/04/09 13:33	ファイル フォル…	
퉬 TexTools	2013/04/09 15:34	ファイル フォル…	
퉬 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

		Labotex(EPF),popLA(RAW) Tilename
Symmetric type Full	Bunge(PF) text	AL
		· · · · · · · · · · · · · · · · · · ·

Bunge(PF)text ボタンを押す

	📃 AL - メモ帳											
	ファイル(F)	編集(E)	書式(0)表示	(V) 🔨	ルプ(H)						
	111_chB02D2	2S_2.1	ГХТ									
	4 111 5.0 5 5 5 5 5 5 5 5 5 5 5 5 5 5	5.0 56565576565	75.0 6 5 6 5 7 6 6 6 5	166655776556	55645565766	200000000000	000000000000000000000000000000000000000	46455566655	9999999999999	വചന്യപ്പപ്പായവ	65554566565	65655676666
F	3ungeアイ	レクト	トリカイド馬	広され、								
				201	3/04/09	13:02	ファイル	レフォル				
	LaboTex			201	3/04/09	13:15	ファイル	レフォル				
		JUF		201	3/04/09	15:33	ファイル	レフォル				
	bopl A			201	3/04/09	22:15	ファイル	レフォル				
	Bunge			201	3/04/10	3:34	ファイル	レフォル				
	200.ASC			201	2/07/25	10:15	ASC 7:	アイル		22 KB		
	220.ASC			201	2/07/25	10:15	ASC 7	アイル		22 KB		
	311.ASC			201	2/07/25	10:15	ASC フ:	アイル		22 KB		
	111.ASC			201	2/07/25	10:15	ASC フ:	アイル		22 KB		
	111_chB0	2D2S_	2	201	3/04/09	15:32	テキスト	、文書		22 KB		
	■ 200_chB0	2D2S_	2	201	3/04/09	15:32	テキスト	文書		22 KB		
	₩ 220_CnB0	2025_	2	201	3/04/09	15:32	テキスト	「又否		22 KB		
		2023_	2	201	3/04/09	13.32	7471	N.G		22 ND		

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 MulTexデータの作成

MulTexは複数の極点データに対応

Option で MulTex(TD: β =0)CCWTXT2 を選択、ファイル名を入力し

 Symmetric type Full
 TXT2 CCW file save
 Labotex(LPF),popLA(RAW) filename

TXT2CCWfile save ボタンを押す

TXT2CCW	311_3 - :	メモ帳	
ファイル(F)	編集(E)	書式(O)	表示(V)
0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0	0.0 5.0 10.0 15.0 20.0 25.0 30.0 25.0	2.129 2.186 2.101 2.122 2.095 2.085 2.026	20 60 30 30 90 10 90
0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0	35.0 40.0 45.0 50.0 55.0 60.0	2.044 2.147 2.033 1.954 2.038 2.036	00 90 10 80 50 20

TXT2 ディレクトリが作成

OUTSIDE	2013/04/09 13:02	ファイル フォル…	
퉬 LaboTex	2013/04/09 13:15	ファイル フォル…	
퉬 StandardODF	2013/04/09 13:33	ファイル フォル…	
퉬 TexTools	2013/04/09 15:34	ファイル フォル…	
퉬 popLA	2013/04/09 22:15	ファイル フォル…	
퉬 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、 $\beta = 1$ 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(Marerial Data)
 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 ₂₁₀ D ₂	$a \leq b \leq c$	90° 90° 90°	3,
	C,	C ₂ ,			a, j
M on or linic	G	C25,C2	a < b c	90° 90° γ<90°	a, a,
	C ₁	C,			
Triclinic	C,	C,	a < b < c	α β γ < 90°	

この変更をMaterialDataで実現している。

6.9 RASデータの作成

	-CenterData ——		- L	.abotex(EPF),popLA(RAW) filename —
Symmetric type Full	Average	RAS file save		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
*KAS_HEADEK_SIAKI
*FILE_3DE_VERSION I.IOU
*FILE_CUMMENI
*FILE_DATA_TYPE KAS_3DE_PULEFIG
*FILE_MD5
*FILE_MEMU
*FILE_UPERATUR 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_″O″
*MEAS_3DE_BG_HIGH_INT_~Q~
*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 ″O″
*MEAS_3DE_BG_LOW_TIME ~1.00~
*MEAS_3DE_BG_MODE_"0"
*MEAS_3DE_MEASUR "Coaxial circle scan"
*MEAS_3DE_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 フォルダー	
l	StandardODF	2021/08/31 1:33	ファイル フォルダー	
	TexTools	2021/08/31 1:33	ファイル フォルダー	
	MTEX	2021/08/31 1:33	ファイル フォルダー	
	CTRODF	2021/08/31 12:41	ファイル フォルダー	
	RAS	2021/09/05 4:26	ファイル フォルダー	
	🖳 111.ASC	2014/03/15 8:42	RINT200077+-	22 KB
	🖳 200.ASC	2014/03/15 8:42	RINT200077+-	22 KB
	🖳 220.ASC	2014/03/15 8:42	RINT2000774-	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

MaterialData 1.27XT[14/10/31] by CTR	
File Help Disp	
Search	
Orthorhombic	
LaboTex	
∫ Wave length	
1.54056 -	
Select	
Polyethylene.TXT	

Material Polyethylene.txt	Initialize	
Structure Code(Symmetries after Schoenfiles) 3 - D2 (orthorhombic)	⊚ getHKL<-Filename	
a 1.0 <=b 0.6662 <=c 0.3432 alfa 90.0 beta 90.0 gamm 90.0	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 🔽	
110-OSC_chB00D2S_2.TXT 1,1,0 0.0 0.0->75.0	0.0 75.0 🗸	
200-OSC_chB00D2S_2.TXT 2,0,0 0.0 0.0->75.0	0.0 75.0 🗸	
210-OSC_chB00D2S_2.TXT 2,1,0 0.0 0.0->75.0	0.0 75.0 🗸	

LaboTex 用を選択すると

🕹 MaterialData 1.27XT[14/10/31] by CTR
ïle Help Disp
Search
Orthorhombic 🔹
V LaboTex
Wave length
1.54056 -
Select
Polyethylene.TXT

Lattice constant Material Polyethylene.txt			Initialize Start
Structure Code(Symmetries after Schoenfiles) 3 - D2 (orthorhombic)			● getHKL<-Filename
a 1.0 <=b 1.9409 <=c 2.9134 alfa 90.0	beta	90.0 gamm 90.0	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 🗸
2.110-OSC_chB00D2S_2.TXT	0,1,1	0.0 0.0->75.0	0.0 75.0 🔽
200-OSC_chB00D2S_2.TXT	0,0,2	0.0 0.0->75.0	0.0 75.0 🗸
210-OSC_chB00D2S_2.TXT	0,1,2	0.0 0.0->75.0	0.0 75.0 🗸

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		23
File Help Disp		
Search		
Monoclinic	•	
LaboTex		
Wave length		_
1.54056 💌		
Select		_
Baddeleyite(ZrO2-Monoclinic)-01-070-7302.TXT	•	

Lattice constant Material Baddeleyite(ZrO 2-Monoclinic)-01-070-7302	xt Star	t	
Structure Code(Symmetries after Schoenfiles)	2 (monoclinic)	⊚ getHKL<-Filename	
a 1.0 <=b 0.9811 <=c 0.9688 alfa 90.0 b	eta 99.218 gamm 90.0	act	
FF Data			
SelectFile(TXT(b,intens),TXT2(a,b,intens.)) h,H	,I 2Theta Alfa-Area AlfaS-AlfaE Se	elect	
-111-OSC_chB00D2S_2.TXT	,1,1 0.0 0.0->75.0 0.0 75.0	V	
001-OSC_chB00D2S_2.TXT 0	0,1 0.0 0.0->75.0 0.0 75.0	V	
011-OSC_chB00D2S_2.TXT 0	1,1 0.0 0.0->75.0 0.0 75.0		
110-OSC_chB00D2S_2.TXT 1	1,0 0.0 0.0->75.0 0.0 75.0	V	

LaboTex 用を選択すると

ا الله MaterialData 1.27XT[14/10/31] by CTR	x
File Help Disp	
Search	
Monoclinic	-
V Labo Tex	
Wave length	
1.54056 -	
Select	
Baddeleyite(ZrO2-Monoclinic)-01-070-7302.TXT	-]

Lattice constant Material Baddeleyite(ZrO 2-Monoclinic)-01-070-7302.txt	Initialize Start
Structure Code(Symmetries after Schoenfiles) 2 - C2 (monoclinic)	getHKL<-Filename
a 1.0 <=b 1.0322 <=c 1.0127 alfa 90.0 beta 90.0 ga	mm 80.782
PF Data	
SelectFile(TXT(b,intens),TXT2(a,b,intens)) h,k,I 2Theta	Alfa Area AlfaS AlfaE Select
-111-OSC_chB00D2S_2.TXT 1,1,1 0.0	0.0->75.0 0.0 75.0 🗸
001-OSC_chB00D2S_2.TXT 1,0,0 0.0	0.0->75.0 0.0 75.0 🗸
011-OSC_chB00D2S_2.TXT 1,0,1 0.0	0.0->75.0 0.0 75.0 🗸
110-OSC_chB00D2S_2.TXT 0,-1,1 0.0	0.0->75.0 0.0 75.0 📝

格子定数と指数の入れ替えが行われる。

7.3 Triclinic例

MaterialData 1.27XT[14/10/31] by CTR	
File Help Disp	
Search	
Triclinic	•
LaboTex	
Wave length	
1.54056 •	
Select	
PET.TXT	-

Material PET.txt	Initialize Start
Structure Code(Symmetries after Schoenfiles) 1 - C1 (triclinic) -	getHKL<-Filename
a 1.0 <=b 1.3053 <=c 2.374 alfa 99.92 beta 118.62 gamm 111.37	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 🔽
-111-OSC_2.TXT -1,1,1 0.0 0.0->75.0	0.0 75.0 🔽
□-11-OSC_2.TXT 0,-1,1 0.0 0.0->75.0	0.0 75.0 🗸
010-OSC_2.TXT 0,1,0 0.0 0.0->75.0	0.0 75.0 🔍

LaboTex 用を選択すると

MaterialData 1.27XT[14/10/31] by CTR	x
File Help Disp	
Search	
Triclinic	•
Wave length	
1.54056	
PET.TXT	•

Material PET.txt	Initialize Start
Structure Code(Symmetries after Schoenfiles) 1 - C1 (triclinic) -	⊚ getHKL<-Filename
a 1.0 <=b 1.3053 <=c 2.374 alfa 99.92 beta 61.38 gamm 68.63	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 🗸
□ -111-OSC_2.TXT 1,1,1 0.0 0.0->75.0	0.0 75.0 🔍
0-11-OSC_2.TXT 0,-1,1 0.0 0.0->75.0	0.0 75.0 🔽
010-OSC_2.TXT 0,1,0 0.0 0.0->75.0	0.0 75.0 🔽

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 Rhombohederal)	
Wave length	
1.54056	
Select	
AluminumOxide.TXT	•
	,
Lattice constant	

Lattice constant			Initialize
Structure Code(Symmetries after Schoenfiles)	11 - D6 (hexa	gonal) 🔹	⊚ getHKL<-Filename
a 1.0 <=b 1.0 <=c 2.7301 alfa 90.0) beta 9	0.0 gamm 120.0	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 🗸
012-OSC_chB00D2S_2.TXT	0,1,2	0.0 0.0->75.0	0.0 75.0 🗸
2.104-OSC_chB00D2S_2.TXT	1,0,4	0.0 0.0->75.0	0.0 75.0 🔽
110-OSC_chB00D2S_2.TXT	1,1,0	0.0 0.0->75.0	0.0 75.0 🗸

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[1	4/10/31] by CTR	
File Help Disp		
Search		
Hexagonal		•
LaboTex	☑ Trigonal(to Rhombohederal)	
Wave length		
1.54056 🝷]	
Select AluminumOxide.T	(T	•]

	laterial AluminumOxide.txt				Initialize	Start
Structu	re Code(Symmetries after Schoenfiles)	9 - D3 (trigon	al)	•	© getHKL<	-Filename
a 1.0	<=b 1.0 <=c 1.0 alfa 55.28	332 beta 5	5.2832 gar	nm 55.2832	AllFi	leSelect
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	\checkmark
2	012-OSC_chB00D2S_2.TXT	1,1,0	0.0	0.0->75.0	0.0 75.0	\checkmark
2	104-OSC_chB00D2S_2.TXT	2,1,1	0.0	0.0->75.0	0.0 75.0	
2	110-OSC_chB00D2S_2.TXT	1,0,-1	0.0	0.0->75.0	0.0 75.0	V

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√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		1	
			Initialize
Material zirconialow-Tetragonal-01-070-7302.txt			Start
Structure Code(Symmetries after Schoenfiles) 5 -	D4 (teragonal)	•	⊚ getHKL<-Filename
a 1.0 <=b 1.0 <=c 1.4427 alfa 90.0	beta 90.0 gan	nm 90.0	AllFileSelect
PF Data			
SelectFile(TXT(b,intens),TXT2(a,b,intens.))	n,k,I 2Theta	Alfa Area	AlfaS AlfaE Select
002-OSC_2.TXT	0,0,2 0.0	0.0->75.0	0.0 75.0 🔽
101-OSC_2.TXT	1,0,1 0.0	0.0->75.0	0.0 75.0 🗸
102-OSC_2.TXT	1,0,2 0.0	0.0->75.0	0.0 75.0
110-OSC_2.TXT	1,1,0 0.0	0.0->75.0	0.0 75.0 🗸

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

MaterialData 1.27XT[14/10/31] by CTR	
ïle Help Disp	
Search	
Tetragonal	•
✓ LaboTex ✓ to FaceCenter Tetragonal	
_ Wave length	
1.54056 -	
Select	
BoronIronNeodymium.TXT	•

Material zirconialow-Tetragonal-01-070-7302.txt	Initialize Start
Structure Code(Symmetries after Schoenfiles) 5 - D4 (teragonal)	⊚ getHKL<-Filename
a 1.0 <=b 1.0 <=c 1.0202 alfa 90.0 beta 90.0 gamm 90.0	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 📝
101-OSC_2.TXT 1,1,1 0.0 0.0->75.0	0.0 75.0 🗸
102-OSC_2.TXT 1,1,2 0.0 0.0->75.0	0.0 75.0 🔽
110-OSC_2.TXT 2,0,0 0.0 0.0->75.0	0.0 75.0 🔽

10. c i f 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 c i f データから一時的に取り込む L a b o T e x 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、 c i f 形式で取り込むが、指数の入れ替えを行う M a t e r i a l を介す事とする。

c i f 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

M	aterial A-Iron-Measure-IntegralDat	a.txt				-Initialize	Start
Structu	re Code(Symmetries after Schoenfiles)	cif	7 - 0 (cubi	c)	~	● getHKL<-	Filename
a 1.0	<=b 1.0 <=c 1.0 alph	a 90.0	beta 90).0 gar	nm 90.0	🚅 AllFile	Select
PF Holde	r CTR¥DATA¥Aluminum-H-O¥Aluminum-H	4					
0.+							
PF Data							
PF Data	SelectFile(TXT(b,intens),TXT2(a,b,inte	ns))	h,k,l	2Theta	Alpha scope	AlphaS AlphaE	Select
PF Data	SelectFile(TXT(b,intens),TXT2(a,b,inte 111_chUB03D1S_2.TXT	ns))	h,k,l	2Theta 0.0	Alpha scope	AlphaS AlphaE	Select
PF Data	SelectFile(TXT(b,intens),TXT2(ab,inte 111_chUB03D1S_2.TXT 200_chUB03D1S_2.TXT	ns))	h,k,l 1,1,1 2,0,0	2Theta 0.0 0.0	Alpha scope 0.0->75.0 0.0->75.0	AlphaS AlphaE 0.0 75.0 0.0 75.0	Select
PF Data	SelectFile(TXT(b,intens),TXT2(a,b,intens),TXT2(a,b,intens),TXT2(a,b,intens),TXT2(a,b,intens),TXT200_chUB03D1S_2.TXT2200_chUB03	ns))	hk.l 1,1,1 2,0,0 2,2,0	2Theta 0.0 0.0 0.0	Alpha scope 0.0->75.0 0.0->75.0 0.0->75.0	AlphaS AlphaE 0.0 75.0 0.0 75.0 0.0 75.0	Select
PF Data	SelectFile(TXT(b,intens),TXT2(a,b,inte 111_chUB03D1S_2.TXT 200_chUB03D1S_2.TXT 220_chUB03D1S_2.TXT	ins.))	hk,l 1,1,1 2,0,0 2,2,0 2,2,0	2Theta 0.0 0.0 0.0 0.0	Alpha scope 0.0->75.0 0.0->75.0 0.0->75.0	AlphaS AlphaE 0.0 75.0 0.0 75.0 0.0 75.0 0.0 75.0 0.0 0.0	Select

c i f 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

File	Holp Disp				
1.10	e neip Disp				
[Search				
	Cubic		~		
	LaboTex(a<=b<=c α <=90 β <=90 γ <=90)				
	Wave length				
	1.54056 ~				
	Select				
	tmpciffile.txt			~	
	cif to material tmpdata _symmetry_space_group_name_H-M 'Fm3m' _symmetry_Int_Tables_number 225 _Symmetry 43				
	Disp Cancel	Return St	tructure	$\mathbf{\Sigma}$	
oODF	Input(e. g. C2 H4)	Char	nge		- 0
oODF	F3 8.51T[21/03/31] by CTR on Symmetric Software Data Help	Char	nge		
oODF Option	F3 8.51T[21/03/31] by CTR on Symmetric Software Data Help constant	Char	nge		
oODF Option	F3 & 51T[21/03/31] by CTR n Symmetric Software Data Help constant Material tmpciffile.txt	Char	nge		Initialize Start
oODF Option Attice	F3 8.51T[21/03/31] by CTR on Symmetric Software Data Help constant Material tmpciffile.txt ture Code(Symmetries after Schoenfiles) Cif 7	Char	nge		Initialize Start
oODF Option Attice	Input(e. g. C2 H4) F3 8.51T[21/03/31] by CTR on Symmetric Software Data Help constant Material tmpciffile.txt ture Code(Symmetries after Schoenfiles) Cif 7	Char	nge		Initialize Start Start
oODF Option Attice	Input(e. g. C2 H4) F3 8.51T[21/03/31] by CTR on Symmetric Software Data Help constant Material tmpciffile.txt sture Code(Symmetries after Schoenfiles) Cif. 7 0 <=b	Char - O (cubic) reta 90.0	nge	mm 90.0	Initialize Start Start E getHKL<-Filename E AllFileSelect
oODF Option Struce	Input(e. g. C2 H4) F3 8.51T[21/03/31] by CTR on Symmetric Software Data Help constant Material tmpciffile.txt sture Code(Symmetries after Schoenfiles) Cif 7 0 <=b 1.0 <=c 1.0 alpha 90.0 E	Char - O (cubic) reta 90.) ga	mm 90.0	Initialize Start e getHKL<-Filename AllFileSelect
oODF Optio Struc a 1.(F Hole	Input(e. g. C2 H4) F3 8.51T[21/03/31] by CTR on Symmetric Software Data Help constant Material tmpciffile.txt ture Code(Symmetries after Schoenfiles) Cif 7 0 <=b	Char - O (cubic) reta 90.) ga	mm 90.0	Initialize Start e getHKL<-Filename
oODF Option Option Struc Struc F Hole C	Input(e. g. C2 H4) F3 8.51T[21/03/31] by CTR on Symmetric Software Data Help constant Material tmpciffile.txt ture Code(Symmetries after Schoenfiles) Ciff 7 0 <=b 1.0 <=c 1.0 alpha 90.0 b der xeCTR#DATA#Aluminum-H=O#Aluminum-H ra	Char - O (cubic) leta 90.0)) ga	mm 90.0	Initialize Start ● getHKL<-Filename
oODF Dptio Ottice Struc a 1.0 F Hole C	Input(e. g. C2 H4) F3 8.51T[21/03/31] by CTR In Symmetric Software Data Help constant Material tmpciffile.txt ture Code(Symmetries after Schoenfiles) Ciff 7 0 <=b 1.0 <=c 1.0 alpha 90.0 E ker s¥CTR¥DATA¥Aluminum-H-O¥Aluminum-H a SelectFile(TXT(b,intens),TXT2(a,b,intens.)) h,	Char - O (cubic) eeta 90.	2Theta	mm 90.0	Pe AlphaS AlphaE Select
oODF Optio Struc a 1.(F Hole C F Date	Input(e. g. C2 H4) F3 8.51T[21/03/31] by CTR nn Symmetric Software Data Help constant Material tmpciffile.txt sture Code(Symmetries after Schoenfiles) Ciff 7 0 <=b	Char - O (cubic) eta 90.	2Theta 0.0	mm 90.0 Alpha scop	Pe AlphaS AlphaE Select
oODF Optio Struc a 1.0 F Hole C F Date	Input(e. g. C2 H4) F3 8.51T[21/03/31] by CTR on Symmetric Software Data Help constant Material tmpciffile.txt iture Code(Symmetries after Schoenfiles) Cif 7 0<<=b	Char - O (cubic) eta 90.0 k,l ,1,1	2Theta 0.0 0.0	mm 90.0 Alpha scoj 0.0->75.0	Pe AlphaS AlphaE Select 0.0 75.0 ♥
oODF Dptio Struc Struc F Hole C F Data	Chelmical ion holds Input(e. g. C2 H4) F3 8.51T[21/03/31] by CTR on Symmetric Software Data Help constant Material tmpciffile.txt sture Code(Symmetries after Schoenfiles) Cif 7 0 <=b	Char - O (cubic) neta 90.0 k,l ,1,1 ;0,0 ;2,0	2Theta 0.0 0.0 0.0	Mm 90.0	Pe AlphaS AlphaE Select 0.0 75.0 ✓ 0.0 75.0 ✓

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。