

# A T E X ( J T E X ) O D F を 使 う

2018年10月14日

*HelperTex Office*

odftex@ybb.ne.jp

本ソフトウェア, M T E X , L a b o T e x など導入説明いたします。ご連絡下さい。

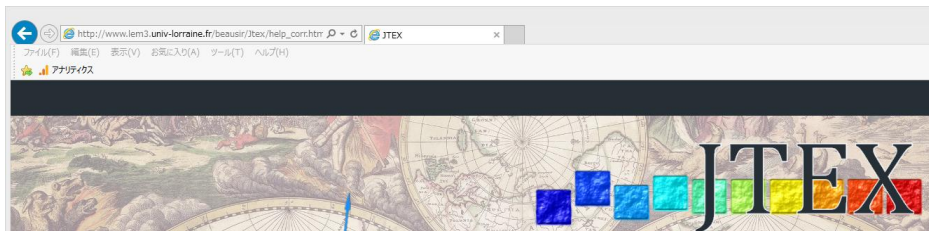
## 概要

無料ODF解析としてMTEXを紹介しましたが、MATLABが必要である。前提条件なしで使用できる無料ODF解析ソフトウェア(期間限定?)を紹介します。

ソフトウェア名は、ATEXソフトウェアです。

## downloadサイト

[http://www.lem3.univ-lorraine.fr/beausir/Jtex/help\\_corr.html](http://www.lem3.univ-lorraine.fr/beausir/Jtex/help_corr.html)



## サイトの下部

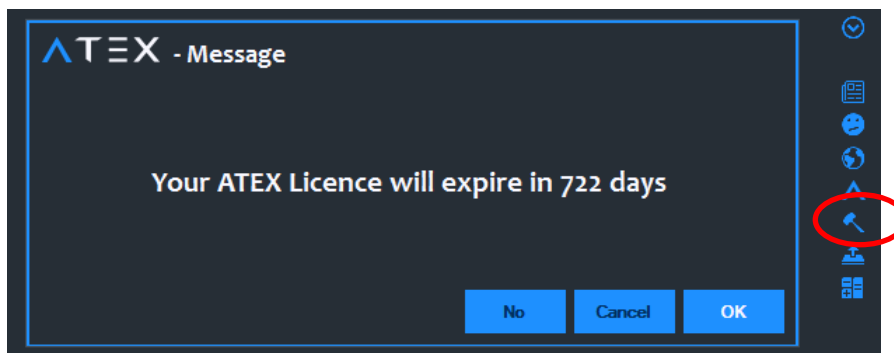


download JTEX on [www.atex-software.eu](http://www.atex-software.eu)



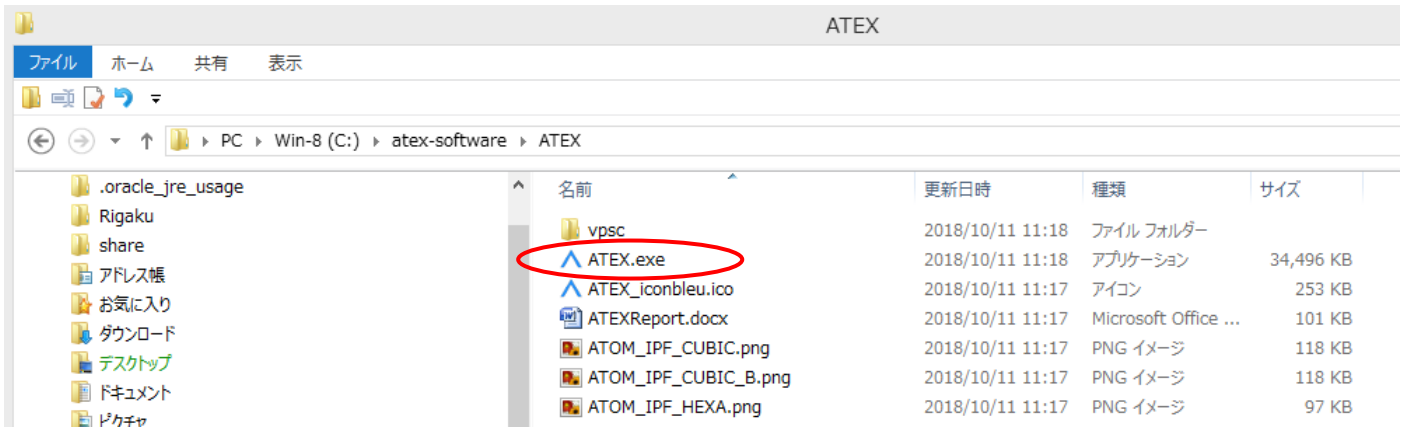
ご使用には、情報登録が必要です。

後から気が付いたのですが、

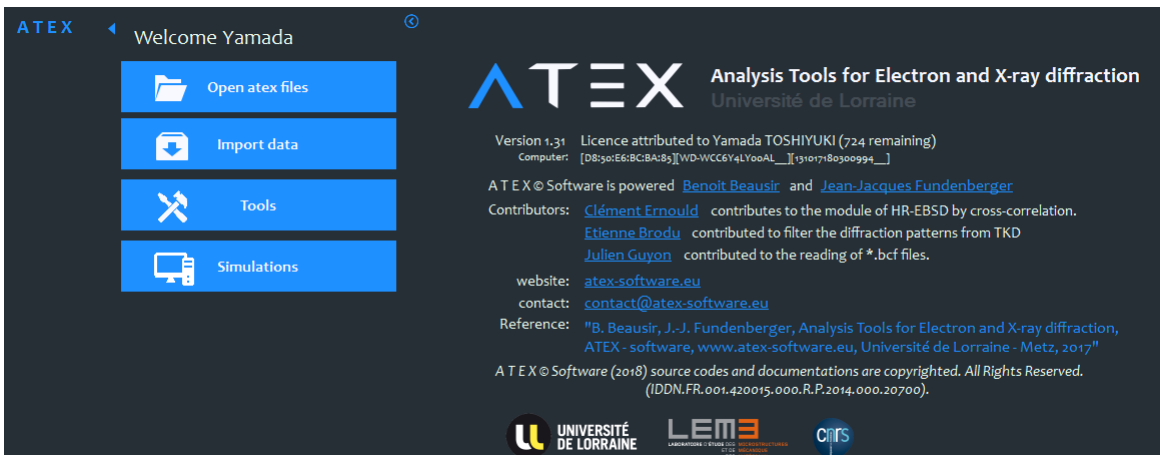


インストールすると

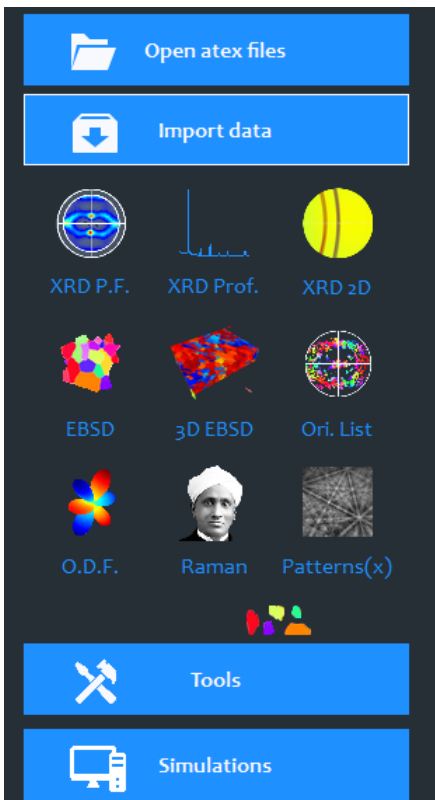
C:\¥atex-software¥ATEX



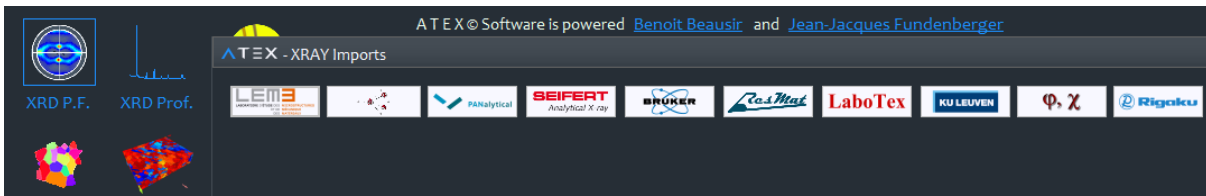
## ATEX の起動



## データ入力

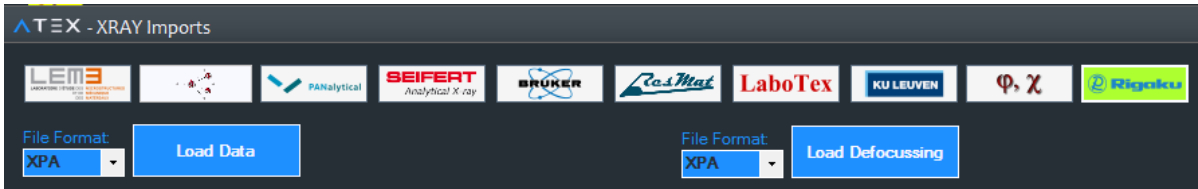


## 極点データの入力



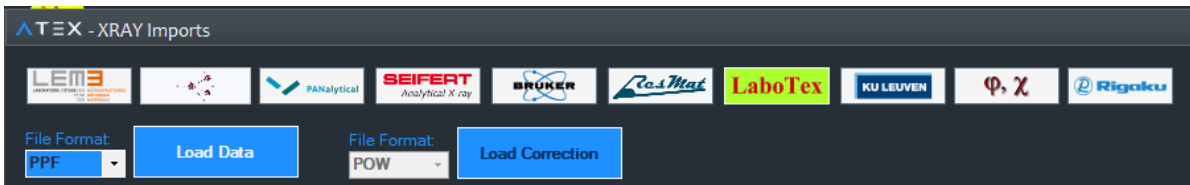
各メーカーの入力画面が表示されます。

R i g a k uでは



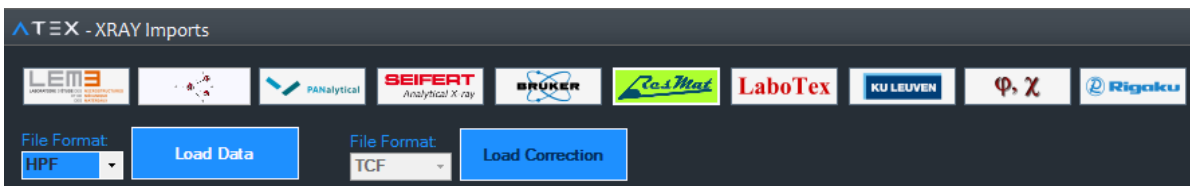
X P Aとは??

L a b o T e x



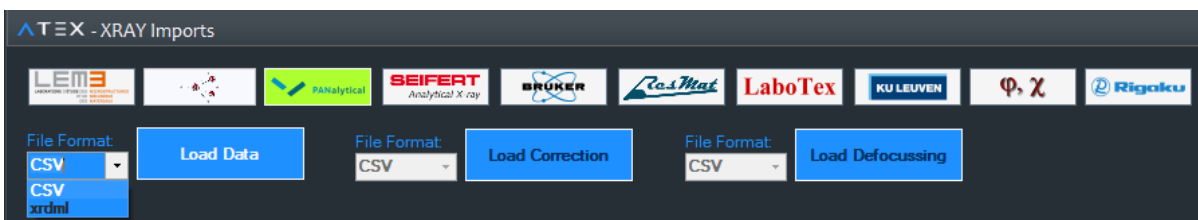
P P Fは、複数の極点図をまとめたファイルでE P Fファイルと似ています。

R e s M a t ( T e x T o o l s )



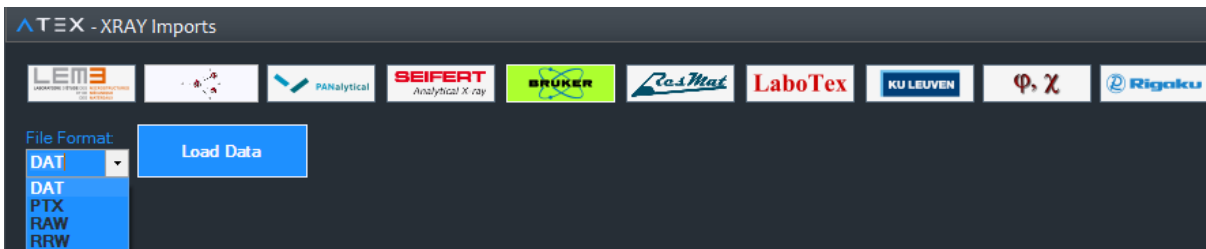
H P Fは、T e x T o o l s の再計算極点図をE x p o r tしたファイル

P A N a



C S V,x r d m l は測定データ

B r u k e r



測定データ

## 動作評価するデータ

ATEXには、テストデータは付属していません。

制限として、反射極点データで、極点図の中心データが必要

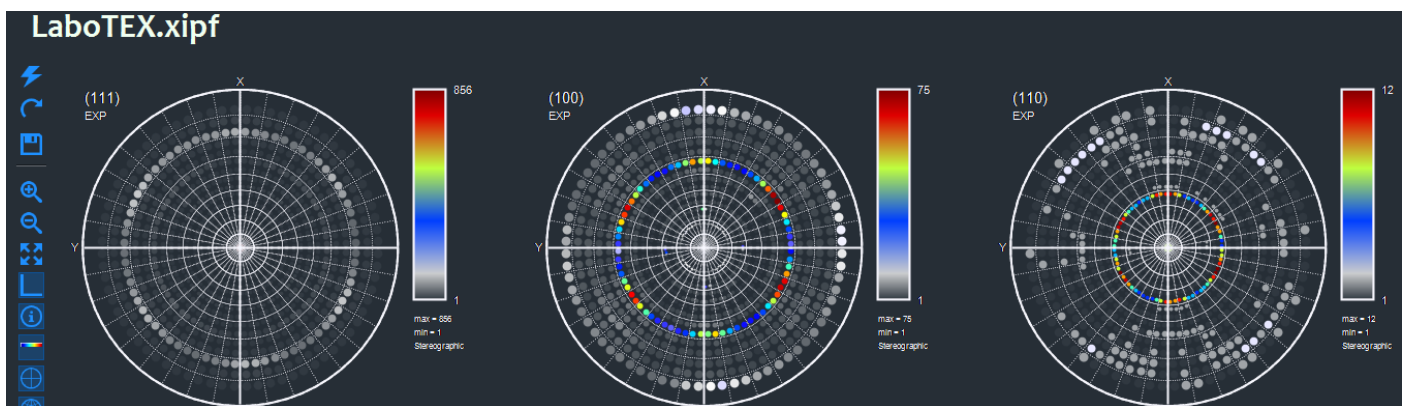
MTEX付属のデータを入力で確認

## LaboTex

File Format: **PPF** **Load Data** File Format: **POW** **Load Correction**

a: **1** b: **1** c: **1**  $\alpha$ : **90**  $\beta$ : **90**  $\gamma$ : **90** Structure:   Phi integration  Left hand

	h	k	l	Step	$2\theta$ (°)	$\theta$ (°)	Collimator Height (mm)	Collimator Width (mm)	Detector Height (mm)	Detector Width (mm)	Bgd 2T inf (°)	Bgd 2T sup (°)
▶ 1	1	1	1	5/5	48	24	0.8	0.8	10	12	0	0
2	1	0	0	5/5	48	24	0.8	0.8	10	12	0	0
3	1	1	0	5/5	48	24	0.8	0.8	10	12	0	0



PAN a

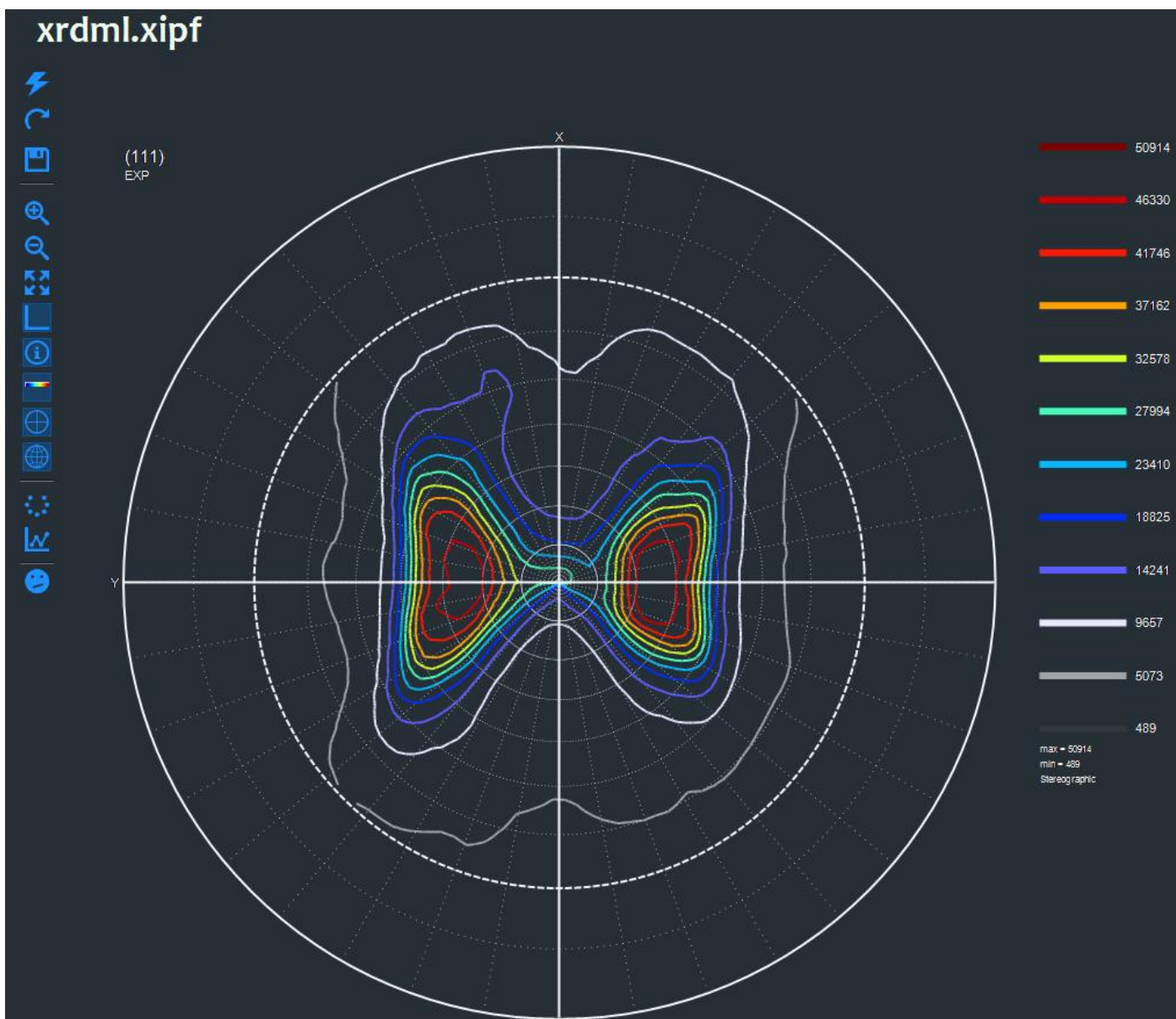
File Format: **xrdml** **Load Data**   
 File Format: **xrdml** **Load Correction**   
 File Format: **xrdml** **Load Defocussing**

a: **0**    b: **0**    c: **0**    α: **0**    β: **0**    γ: **0**   
 Structure: **[ ]**   
 Phi integration  
 Left hand

	h	k	l	Step	2θ (°)	θ (°)	Collimator Height (mm)	Collimator Width (mm)	Detector Height (mm)	Detector Width (mm)	Bgd 2T inf (°)	Bgd 2T sup (°)
▶ 1	1	1	1	3/3	43.249	21.625	0	0	0	0	0	0

a: **1**    b: **1**    c: **1**    α: **90**    β: **90**    γ: **90**   
 Structure: **Cubic**   
 Phi integration  
 Left hand

表示



File Format: DAT Load Data

a: 1
b: 1
c: 1
 $\alpha$ : 90
 $\beta$ : 90
 $\gamma$ : 90

Structure:  
 Phi integration  
 Left hand

	h	k	l	Step	$2\theta$ (°)	$\theta$ (°)	Collimator Height (mm)	Collimator Width (mm)	Detector Height (mm)	Detector Width (mm)	Bgd 2T inf (°)	Bgd 2T sup (°)
▶ 1	1	1	1	5/5	48	24	0.8	0.8	10	12	0	0
2	2	0	0	5/5	48	24	0.8	0.8	10	12	0	0
3	2	2	0	5/5	48	24	0.8	0.8	10	12	0	0
4	3	1	1	5/5	48	24	0.8	0.8	10	12	0	0

データ表示

**siemens.xipf**

(111)  
EXP

max = 26361  
min = 1164  
Stereographic

(200)  
EXP

max = 11288  
min = 1178  
Stereographic

(220)  
EXP










max = 11616  
min = 500  
Stereographic

(311)  
EXP

max = 6091  
min = 592  
Stereographic

# ResMat (TexTools)

MTEXにデータがないので、TexToolsで作成

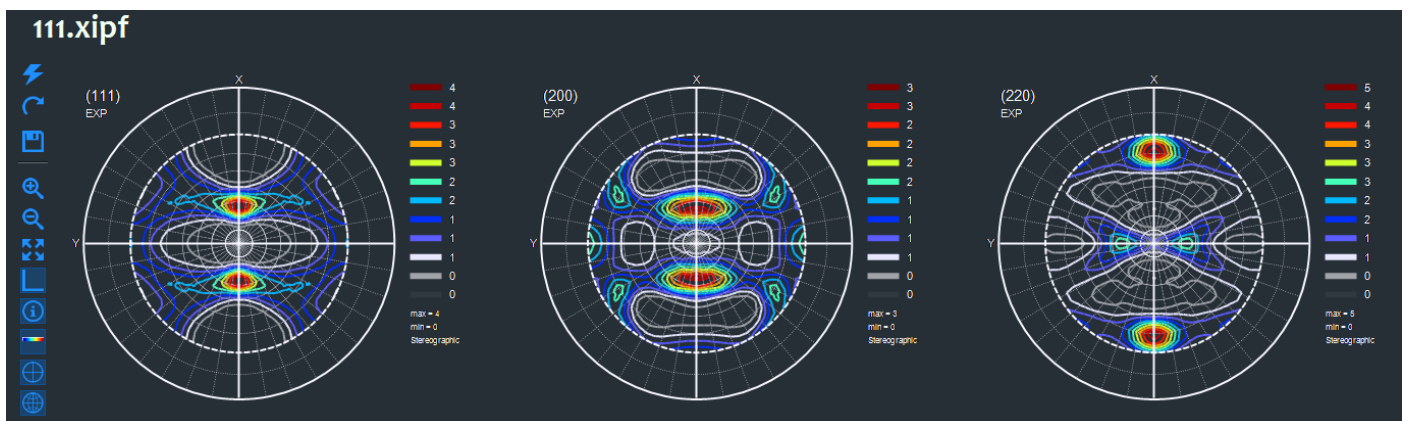
File Format: **HPF** Load Data

File Format: **TCF** Load Correction

a:  b:  c:   $\alpha$ :   $\beta$ :   $\gamma$ :  Structure:   Phi integration  Left hand

	h	k	l	Step	$2\theta$ (°)	$\theta$ (°)	Collimator Height (mm)	Collimator Width (mm)	Detector Height (mm)	Detector Width (mm)	Bgd 2T inf (°)	Bgd 2T sup (°)
▶ 1	1	1	1	5/5	48	24	0.8	0.8	10	12	0	0
2	2	0	0	5/5	48	24	0.8	0.8	10	12	0	0
3	2	2	0	5/5	48	24	0.8	0.8	10	12	0	0

## データ表示





入力データ読み込み表示までの評価

L a b o T e x の P P F 読み込みでは、

2  $\theta$  角度を読み込まない。

格子定数、h k l は正常に読み込む

極点図の等高線表示は、3 極点図の最後だけで表示

P A N a の x d m l 読み込み

2  $\theta$  角度を読み込む

格子定数が x d m l に登録がないので表示できない。h k l は読み込む

B r u k e r の d a t 読み込み

2  $\theta$  角度を読み込まない。

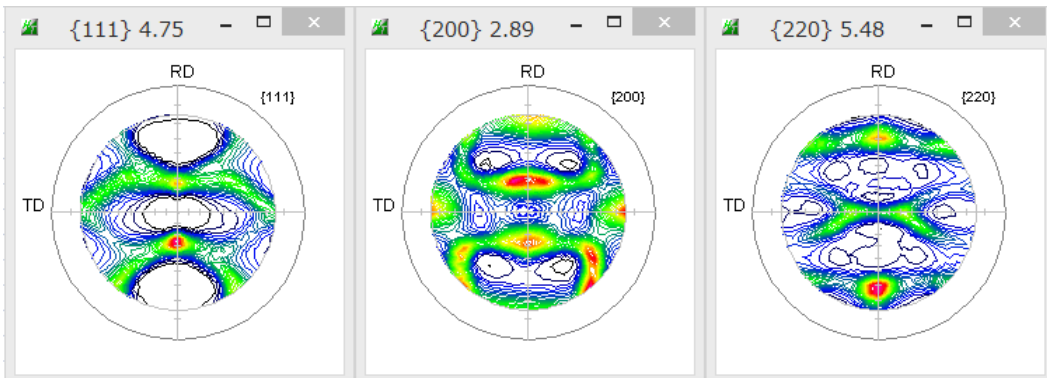
格子定数、h k l は正常に読み込む

T e x T o o l s の H P F 読み込み

2  $\theta$  角度を読み込まない。

格子定数、h k l は正常に読み込む

LabotexのPPF形式データによるODF解析評価



PFTtoODF3 8.36SKT[19/03/31] by CTR

File Option Symmetric Software Data Help

Initialize Start

getHKL<-Filename AllFileSelect

alpha 90.0 beta 90.0 gamma 90.0

h,k,l	2Theta	Alpha scope	AlphaS	AlphaE	Select
1,1,1	0.0	0.0->75.0	0.0	75.0	<input checked="" type="checkbox"/>
2,0,0	0.0	0.0->75.0	0.0	75.0	<input checked="" type="checkbox"/>
2,2,0	0.0	0.0->75.0	0.0	75.0	<input checked="" 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 111\_chB03D1\_2.TXT 200\_chB03D1\_2.TXT 220\_chB03D1\_2.TXT

Symmetric type Full CenterData Average Epf file save Labotex(EPF),popLA(RAW) filename labotex

非対称極点図のPPFファイル作成

111\_chB03D1\_2.TXT 200\_chB03D1\_2.TXT 220\_chB03D1\_2.TXT

Structure Code a b c alfa beta gamma 90.0 90.0 90.0

2Theta	alf-s	alf-e	d-alf	bet-s	bet-e	d-bet	index	H	K	L	P/B
50.0	0.0	75.0	5.0	0.0	355.0	5.0	0	1	1	1	1
50.0	0.0	75.0	5.0	0.0	355.0	5.0	0	2	0	0	1
50.0	0.0	75.0	5.0	0.0	355.0	5.0	0	2	2	0	1
0.007276	0.007276	0.007276	0.007276	0.007276	0.007276	0.007276	0.007276	0.007276	0.007276	0.007276	0.007276
0.007276	0.007276	0.007276	0.007276	0.007276	0.007276	0.007276	0.007276	0.007276	0.007276	0.007276	0.007276
0.007276	0.007276	0.007276	0.007276	0.007276	0.007276	0.007276	0.007276	0.007276	0.007276	0.007276	0.007276
0.007276	0.007276	0.007276	0.007276	0.007276	0.007276	0.007276	0.007276	0.007276	0.007276	0.007276	0.007276

通常ODF解析では2θ角度は必要ないが、ATEXが受け付けないのでダミーを入力

A T E X で読み込み

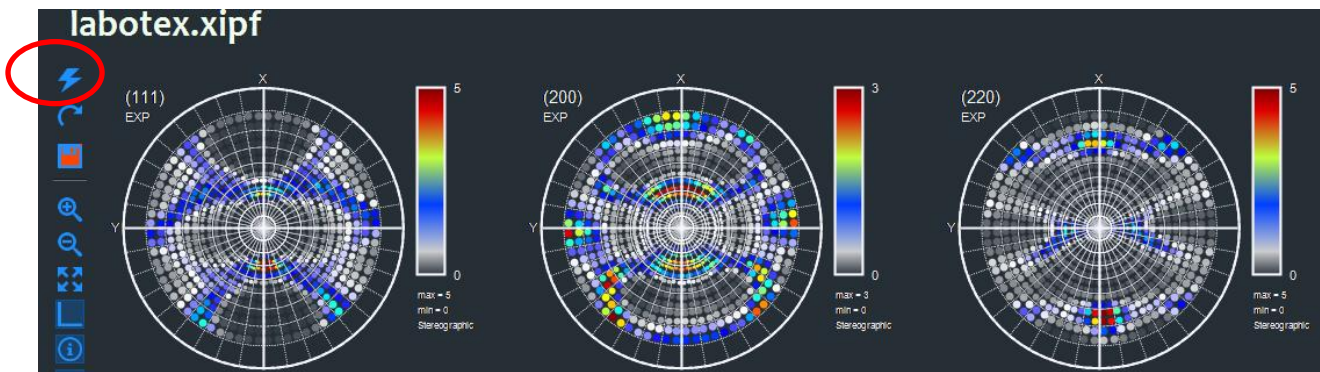
ATEX © Software is powered [Benoit Beusir](#) and [Jean-Jacques Fundenberger](#)

ATEX - XRAY Imports

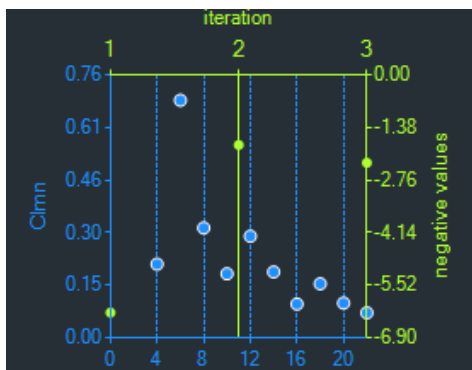
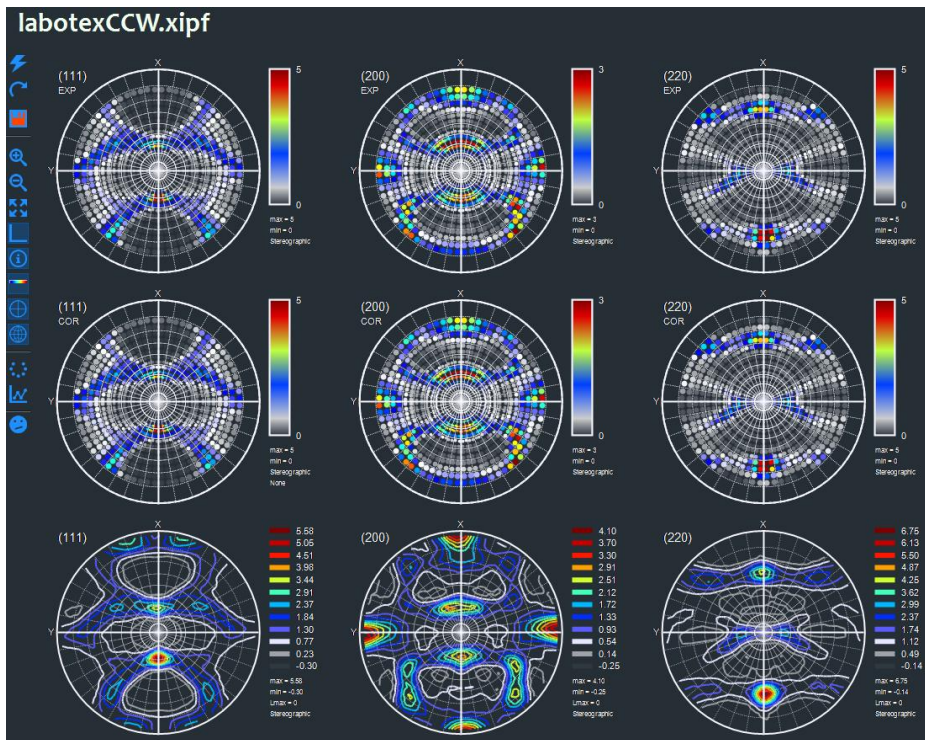
File Format: **PPF** Load Data File Format: **POW** Load Correction

a: 1 b: 1 c: 1  $\alpha$ : 90  $\beta$ : 90  $\gamma$ : 90 Structure: **Cubic**  Phi integration  Left hand

	h	k	l	Step	$2\theta$ (°)	$\theta$ (°)	Collimator Height (mm)	Collimator Width (mm)	Detector Height (mm)	Detector Width (mm)	Bgd 2T inf (°)	Bgd 2T sup (°)
▶ 1	1	1	1	5/5	48	24	0.8	0.8	10	12	0	0
2	2	0	0	5/5	48	24	0.8	0.8	10	12	0	0
3	2	2	0	5/5	48	24	0.8	0.8	10	12	0	0



ODF 計算開始

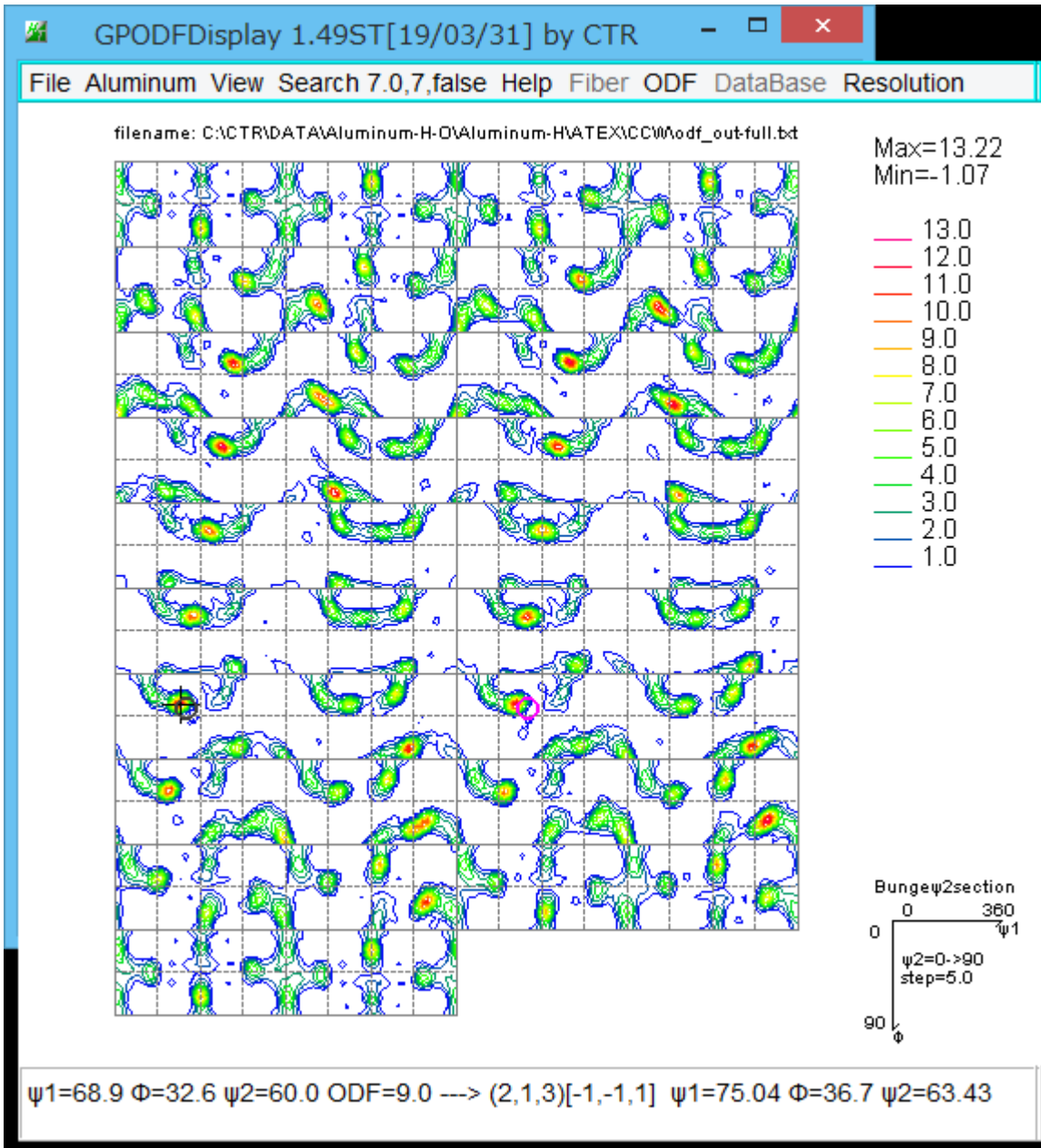


(hkl)	E.max	E.min	R.max	R.min	err	err>1
(111)	6.34	0.00	5.58	-0.30	100.00	14.4
(2 0 0)	3.84	0.05	4.10	-0.25	37.98	14.9
(2 2 0)	7.40	0.16	6.75	-0.14	26.44	14.78

ExportされたODF図

▶ Aluminum-H-O ▶ Aluminum-H ▶ ATEX ▶ CCW

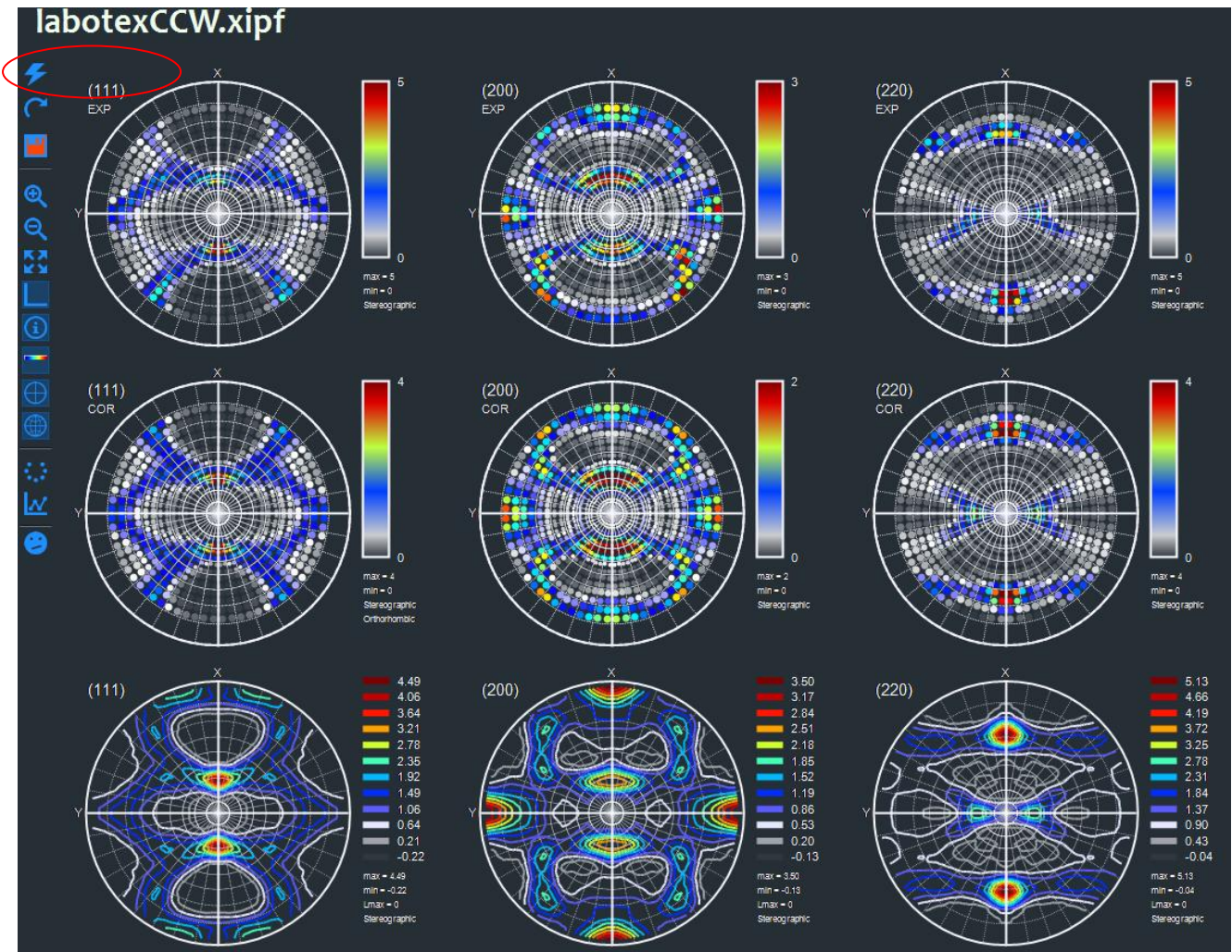
名前	更新日時	種類	サイズ
odf_out.txt	2018/10/14 8:30	テキスト文書	1,107 KB
Texture_out.clm	2018/10/14 8:30	CLM ファイル	17 KB
labotexCCW.xipf.atex	2018/10/14 8:29	ATEX files	859 KB
labotexCCW.PPF	2018/10/14 8:27	PPF ファイル	45 KB



Miscellaneous

Sample symmetry: **Orthorhombic**

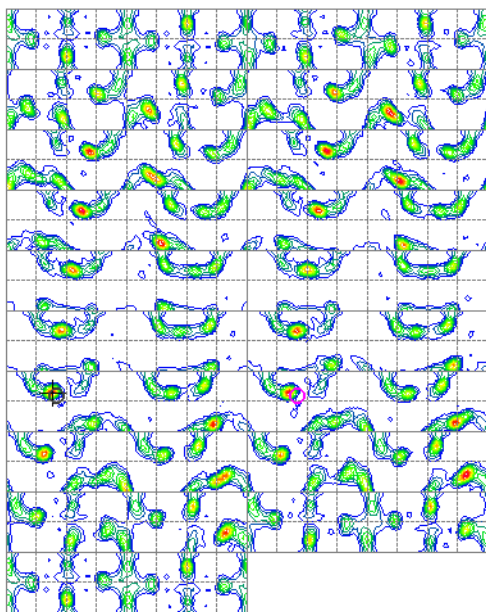
対称ODF計算



非対称

**Orthorhombic**

filename: C:\TRIDATA\Aluminum-H-O\Aluminum-H\ATEX\CCW\odf\_out-full.bt

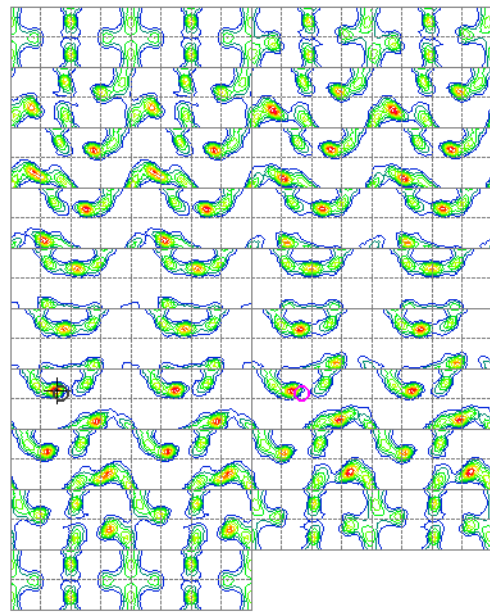


Max=13.22  
Min=-1.07

13.0  
12.0  
11.0  
10.0  
9.0  
8.0  
7.0  
6.0  
5.0  
4.0  
3.0  
2.0  
1.0

Bungepsi2section  
0 360  
psi1  
psi2=0->90  
step=5.0  
90

filename: C:\TRIDATA\Aluminum-H-O\Aluminum-H\ATEX\CCW\odf\_out.bt



Max=9.12  
Min=-0.87

9.0  
8.0  
7.0  
6.0  
5.0  
4.0  
3.0  
2.0  
1.0

Bungepsi2section  
0 360  
psi1  
psi2=0->90  
step=5.0  
90

4 对称极点图

PFtoODF3 8.36SKT[19/03/31] by CTR

File Option Symmetric Software Data Help

Lattice constant

Material Aluminum.txt

Structure Code(Symmetries after Schoenfiles) 7 - O (cubic)

a 1.0 <=b 1.0 <=c 1.0 alpha 90.0 beta 90.0 gamma 90.0

Initialize Start

getHKL<-Filename

AllFileSelect

PF Data

SelectFile(TXT(b,intens),TXT2(a,b,intens))	h,k,l	2Theta	Alpha scope	AlphaS	AlphaE	Select
111_chB03D1_2.TXT	1,1,1	0.0	0.0->75.0	0.0	75.0	<input checked="" type="checkbox"/>
200_chB03D1_2.TXT	2,0,0	0.0	0.0->75.0	0.0	75.0	<input checked="" type="checkbox"/>
220_chB03D1_2.TXT	2,2,0	0.0	0.0->75.0	0.0	75.0	<input checked="" 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"/>

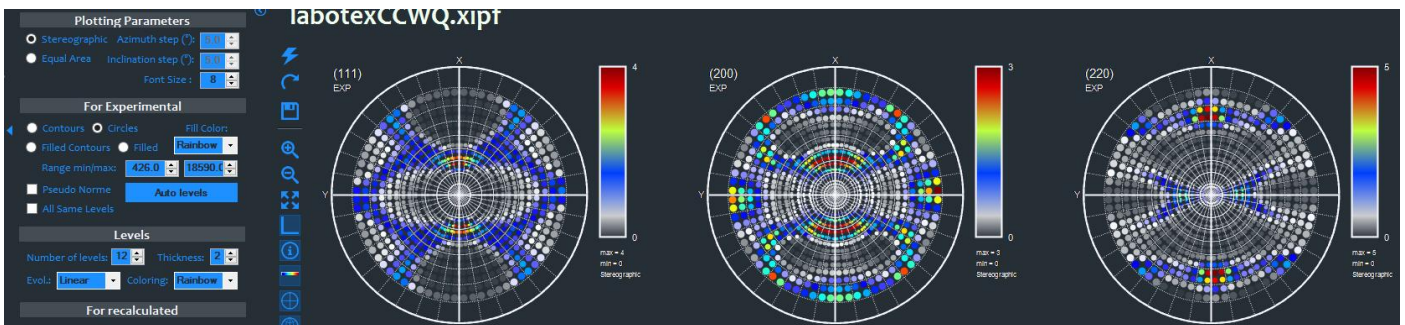
Comment 111\_chB03D1\_2.TXT 200\_chB03D1\_2.TXT 220\_chB03D1\_2.TXT

Symmetric type Quater

CenterData Average

ppf file save

Labotex(EPF).popLA(RAW) filename labotexCCWQ

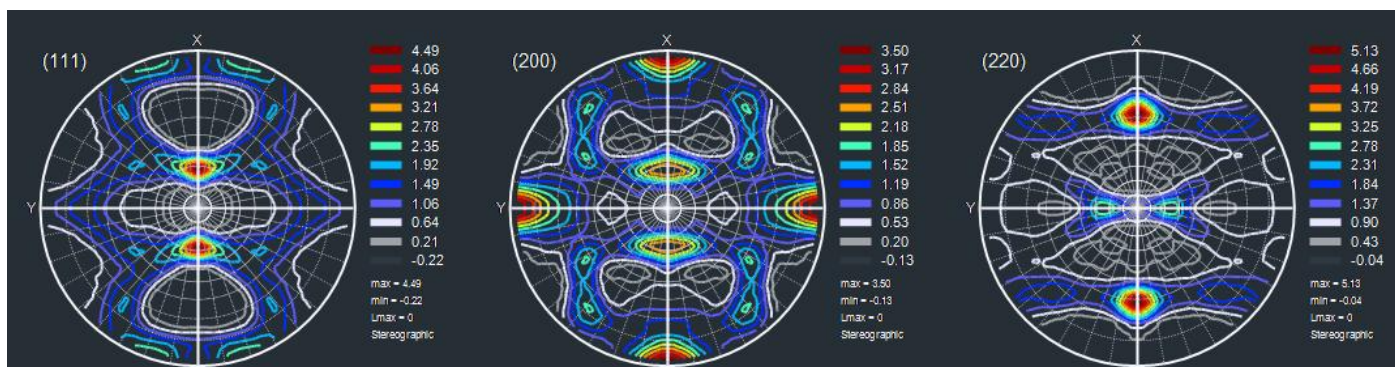


## ODF 解析

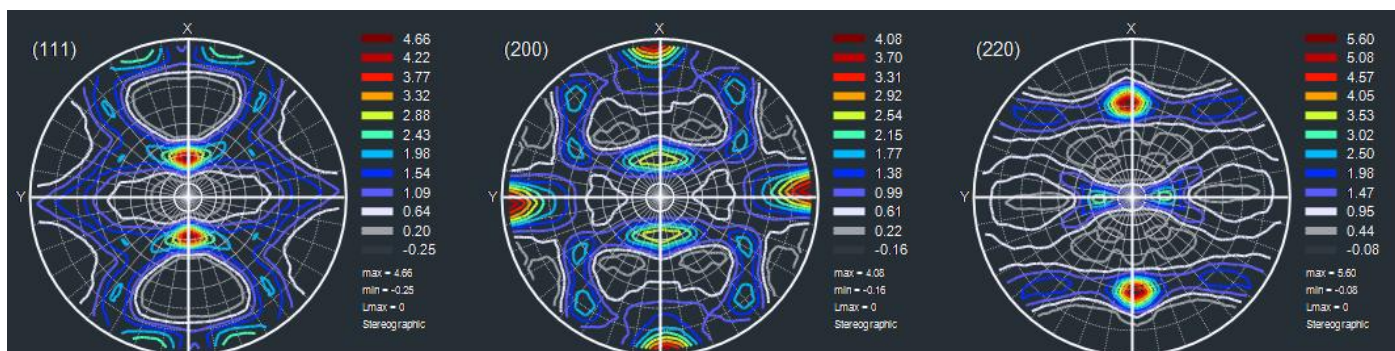
極点図は若干 CCW 方向に回転する。

ATEXのOrthorhombicと比較

非対称からOrthorhombic



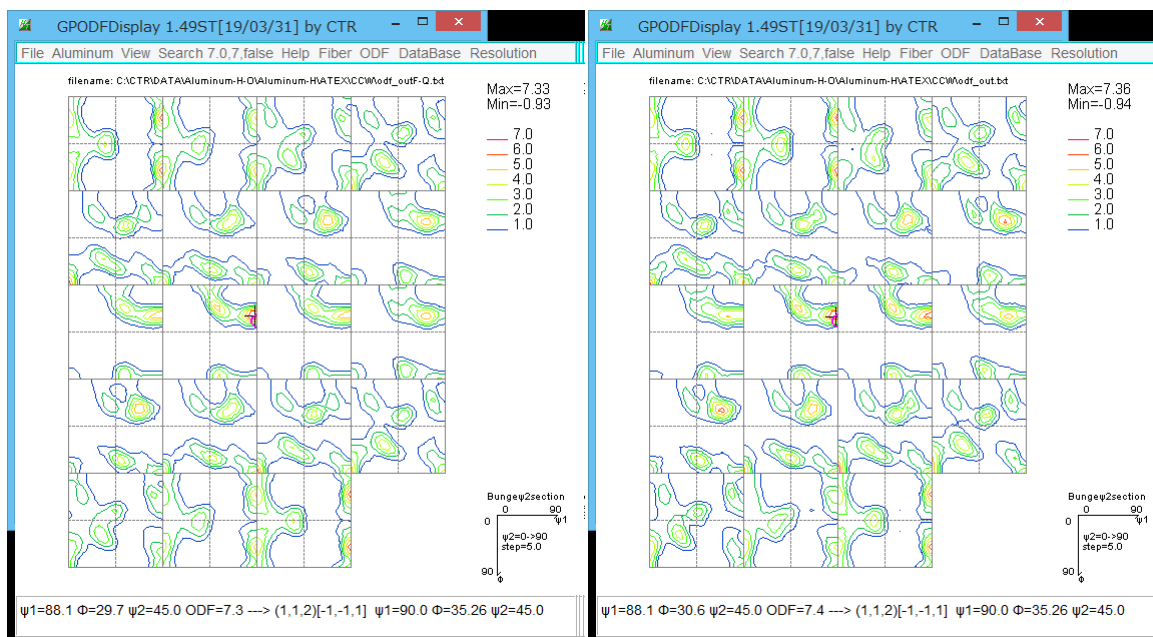
対称極点図をTriclinic解析



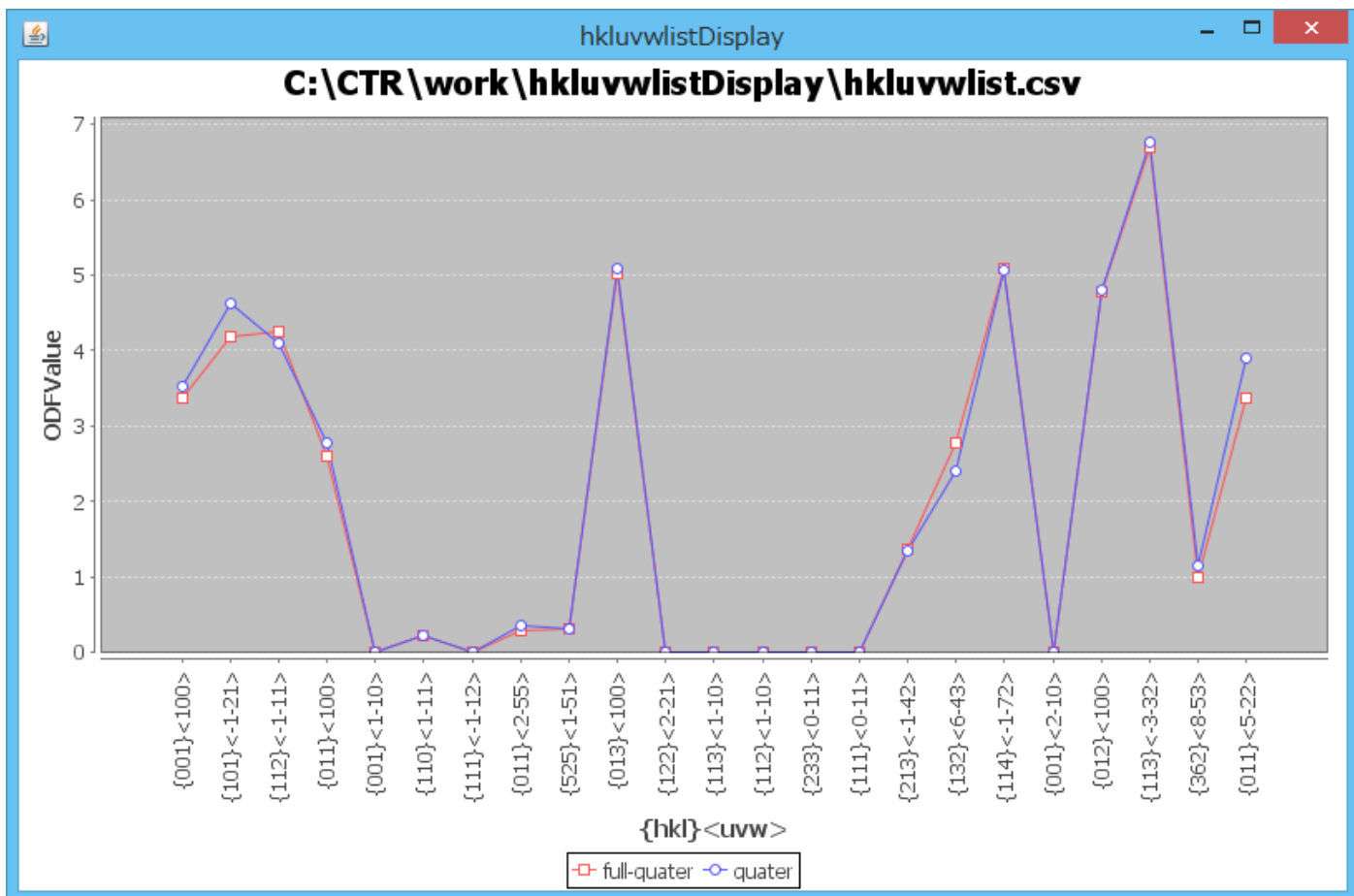
## ODF 図比較

非対称からOrthorhombic

対称極点図から解析



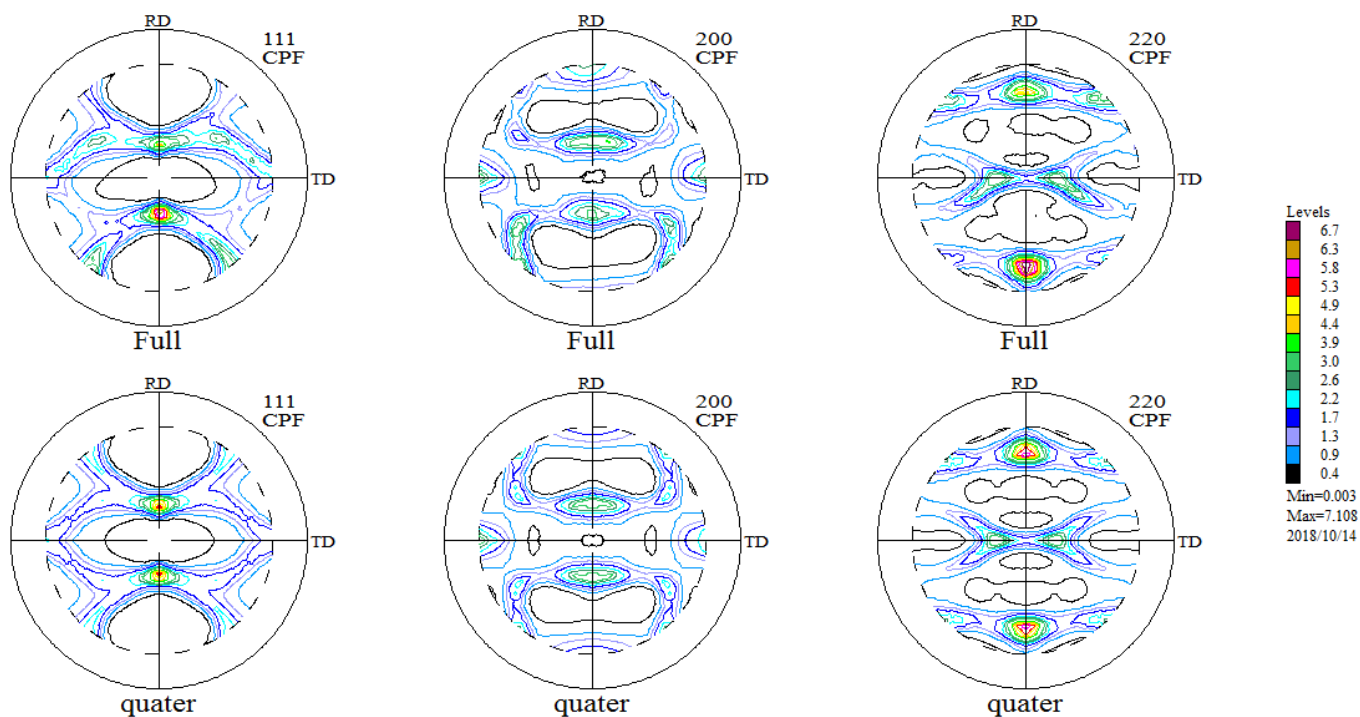
結晶方位密度の違い



ほぼ同一の結果が得られる。

再計算極点図は本来、左右上下対称になるが、若干ずれて表示されるが、表示上の問題と思われる。

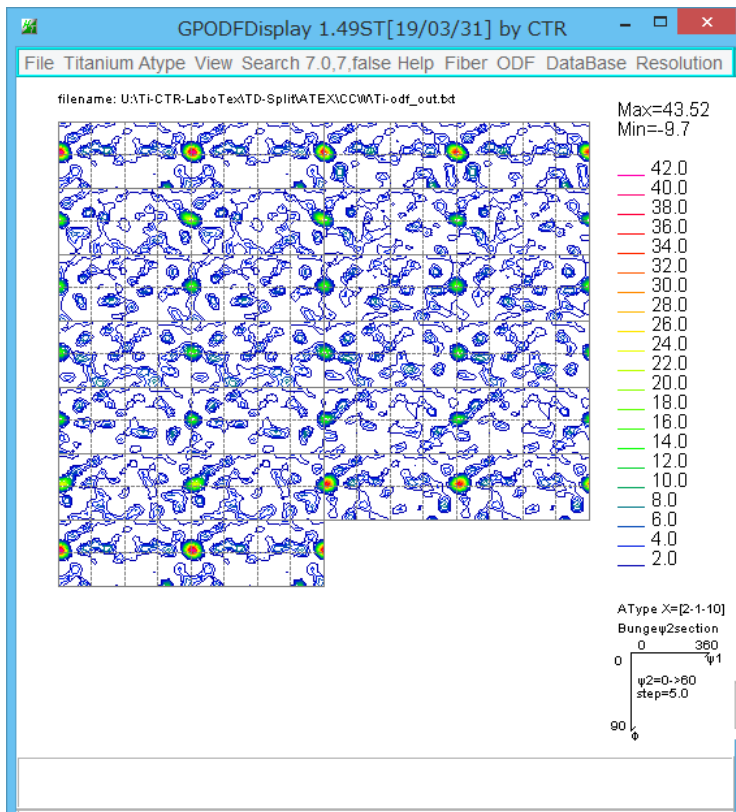
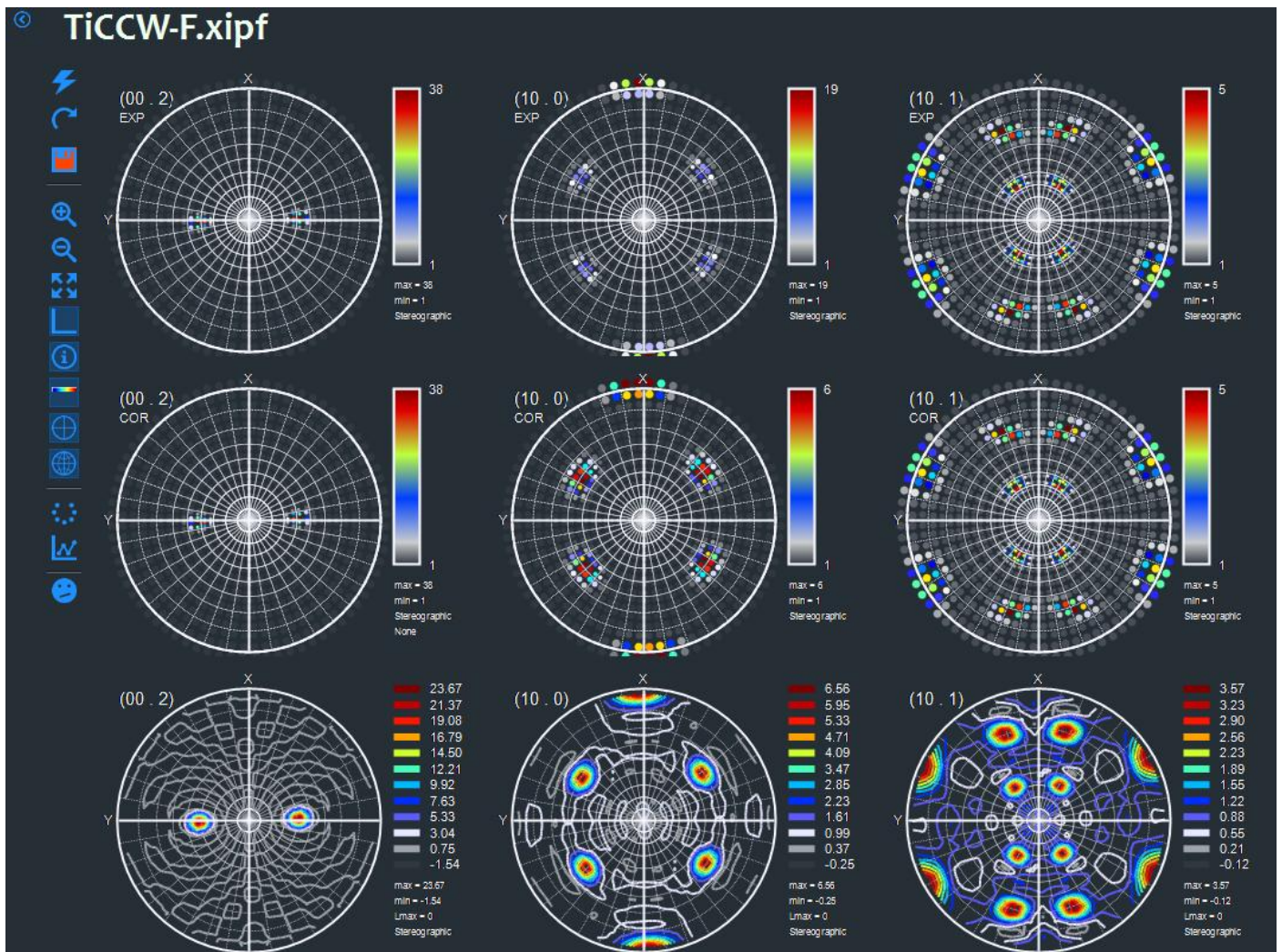
LaTeXでPPFファイルの読み込み

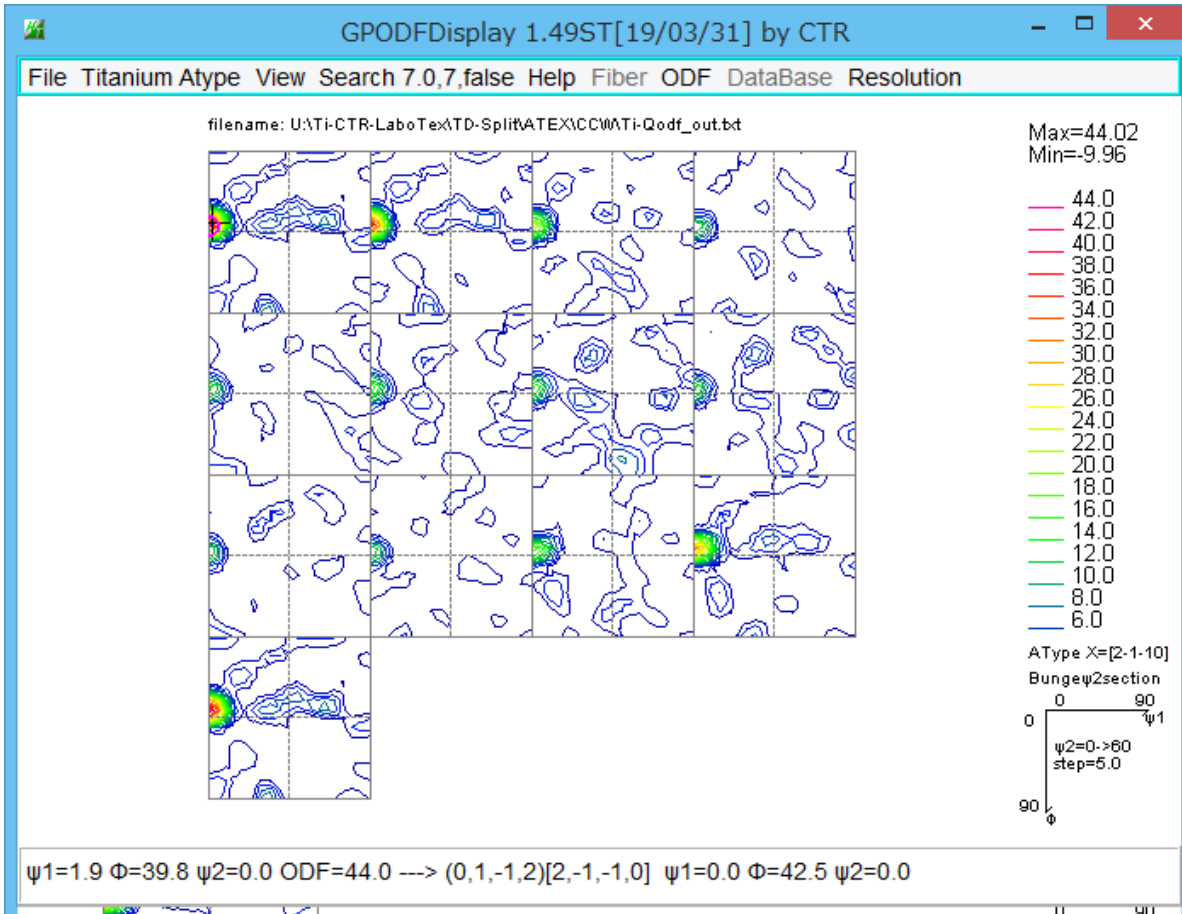
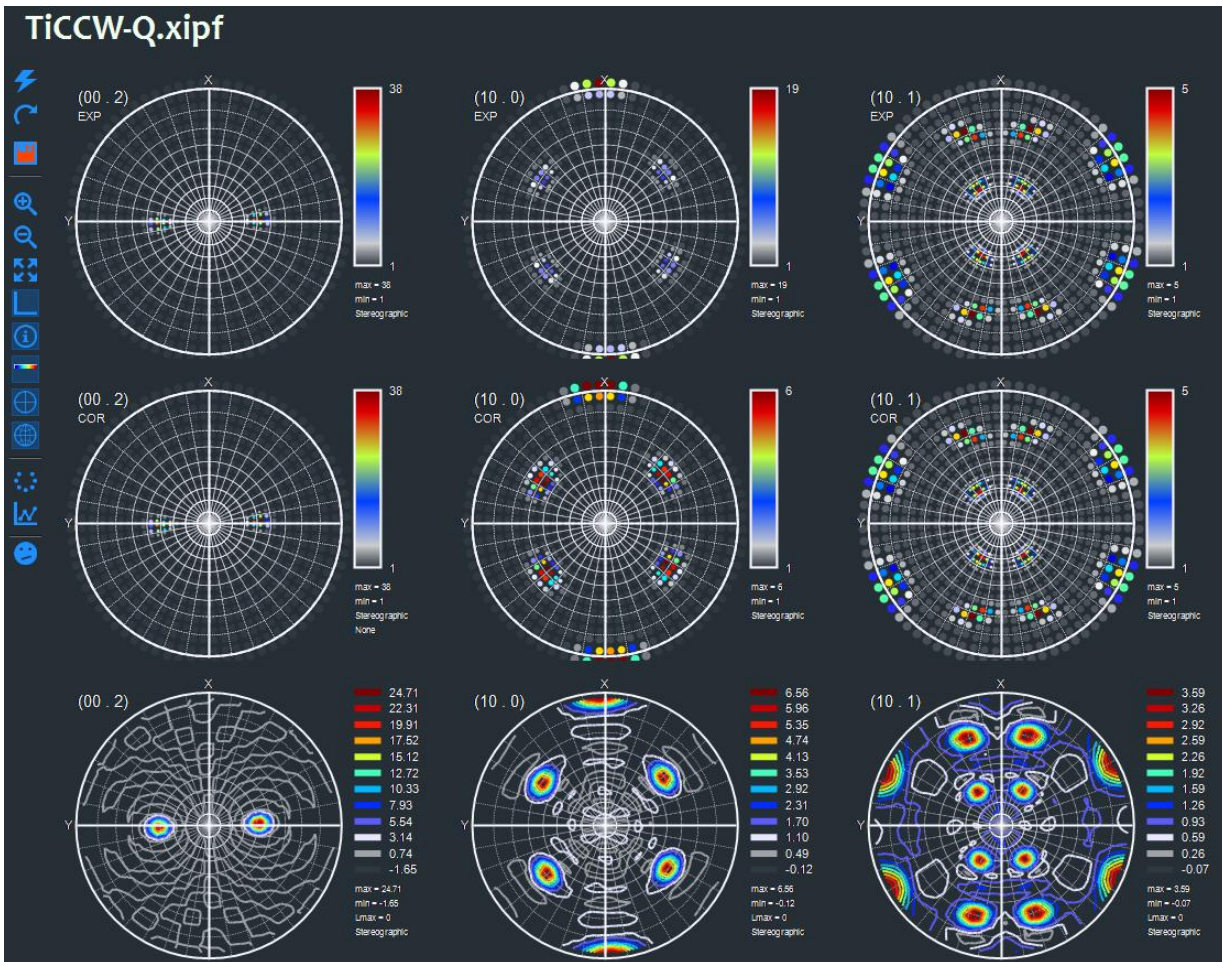


回転はずれていない



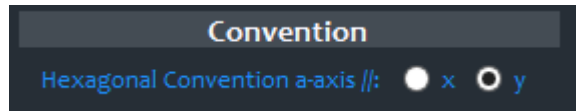
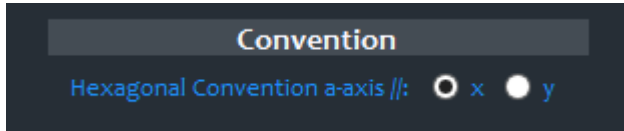
HexagonalのTiをPPFで読み込む



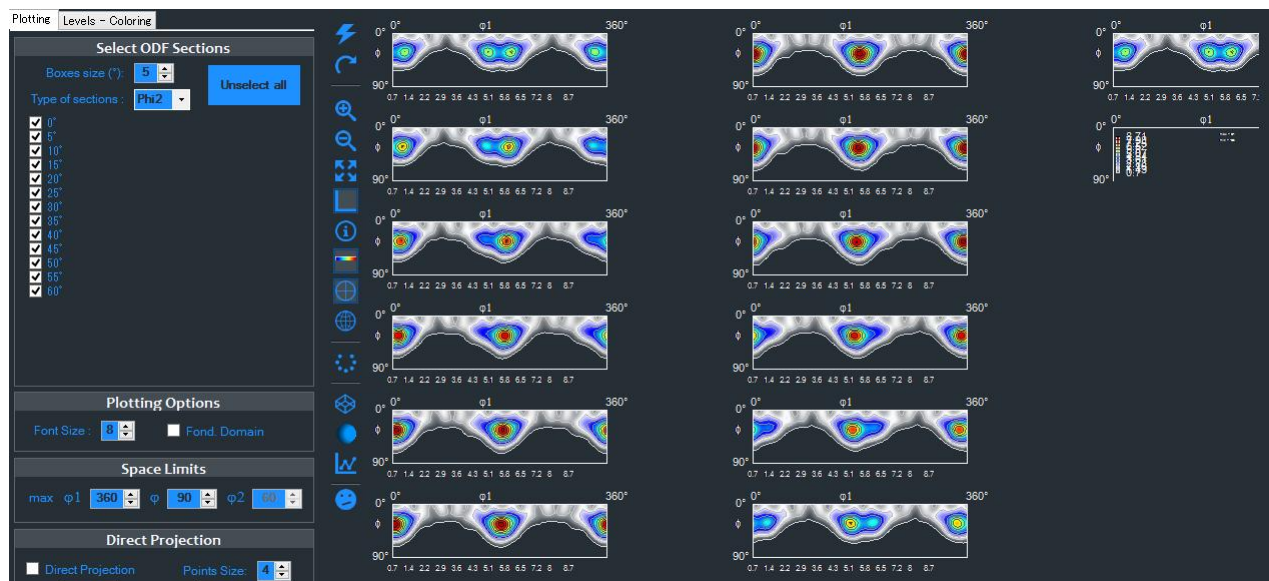
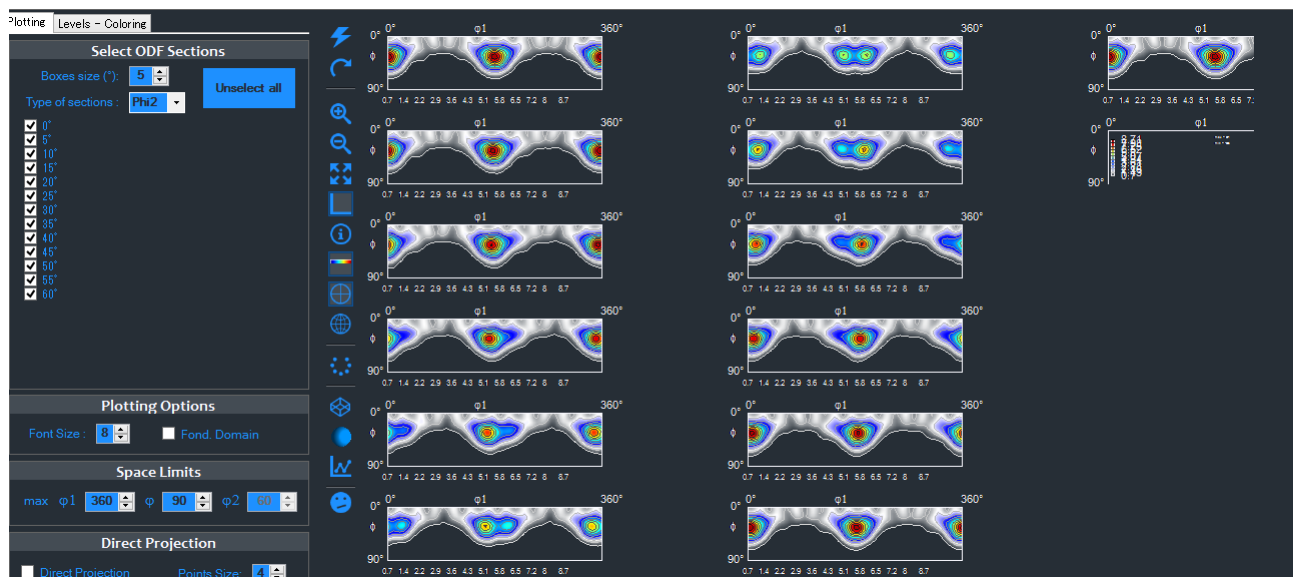
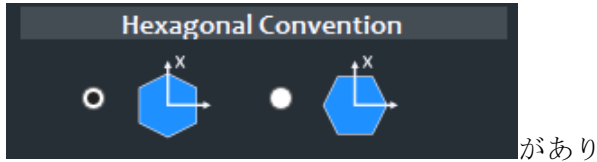


Hexagonal も正常に動作します。

ATEXのHexagonalではEBSDの場合とXRDでは対応が異なりType変更が出来ないようです。

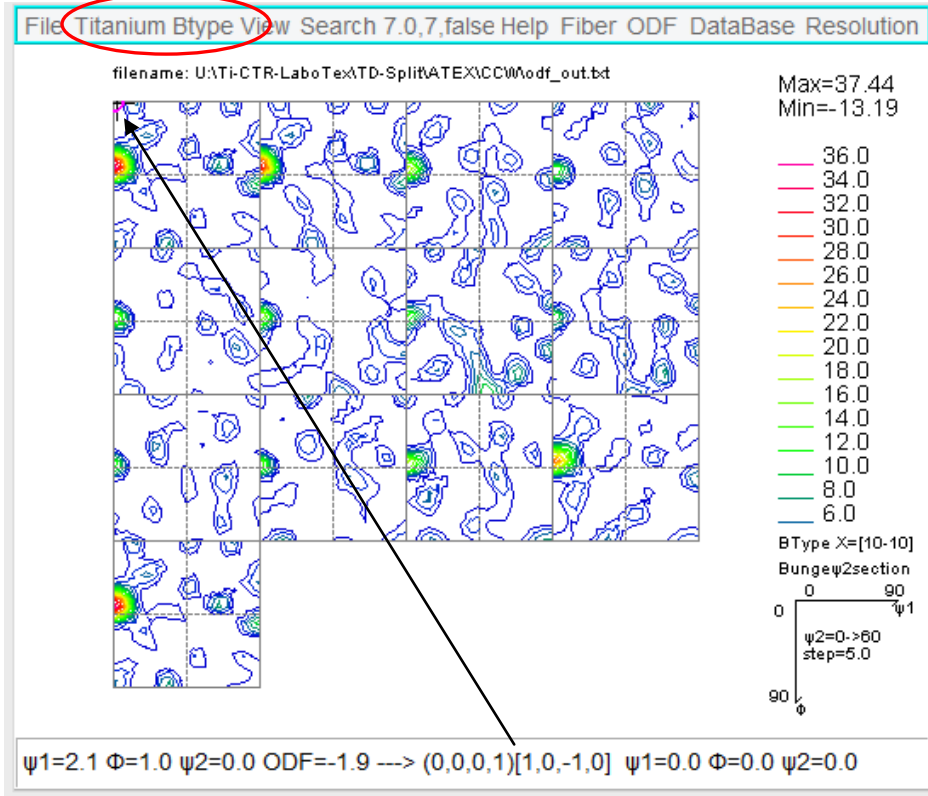


で作成されるODFファイルに違いがありません。EBSDでは



変更できるがXRDではODF図の表示方法が分からないので作成されるファイルを読み替える

ATEX(Triclinic)	
ATEX(Triclinicv(1/4) to Orthorhombic)	(Hexa BType ) or Other
Save	(Hexa BType) to (Hexa AType)



ATEX(Triclinicv(1/4) to Orthorhombic)	(Hexa BType ) or Other
Save	(Hexa BType) to (Hexa AType)

