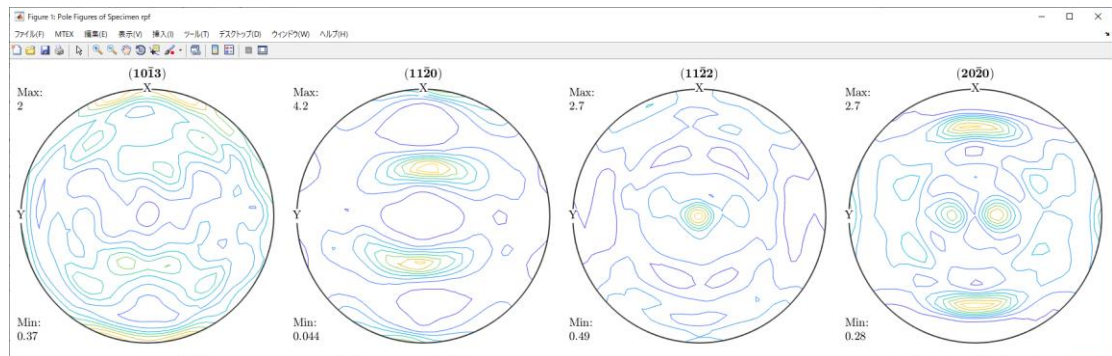


MTEX付属popla.epfファイルの解析



2020年12月13日

HelperTex Office

1. 概要

popLAは、Los Alamosから配布されているDOSモードのODF解析でCTRでもサポートしています。今回、MTEXで解析を行うが、データError評価を行うため、CTRでMTEX入力ASC変換を行い、MTEXで解析を行う。popla.pdfは極点図からマグネシウムの可能性があるので、マグネシウムとして解析を行う。

2. 解析手順

Make Pole FileでEPF→TXT2変換

PF to ODF3でMTEX入力データ作成

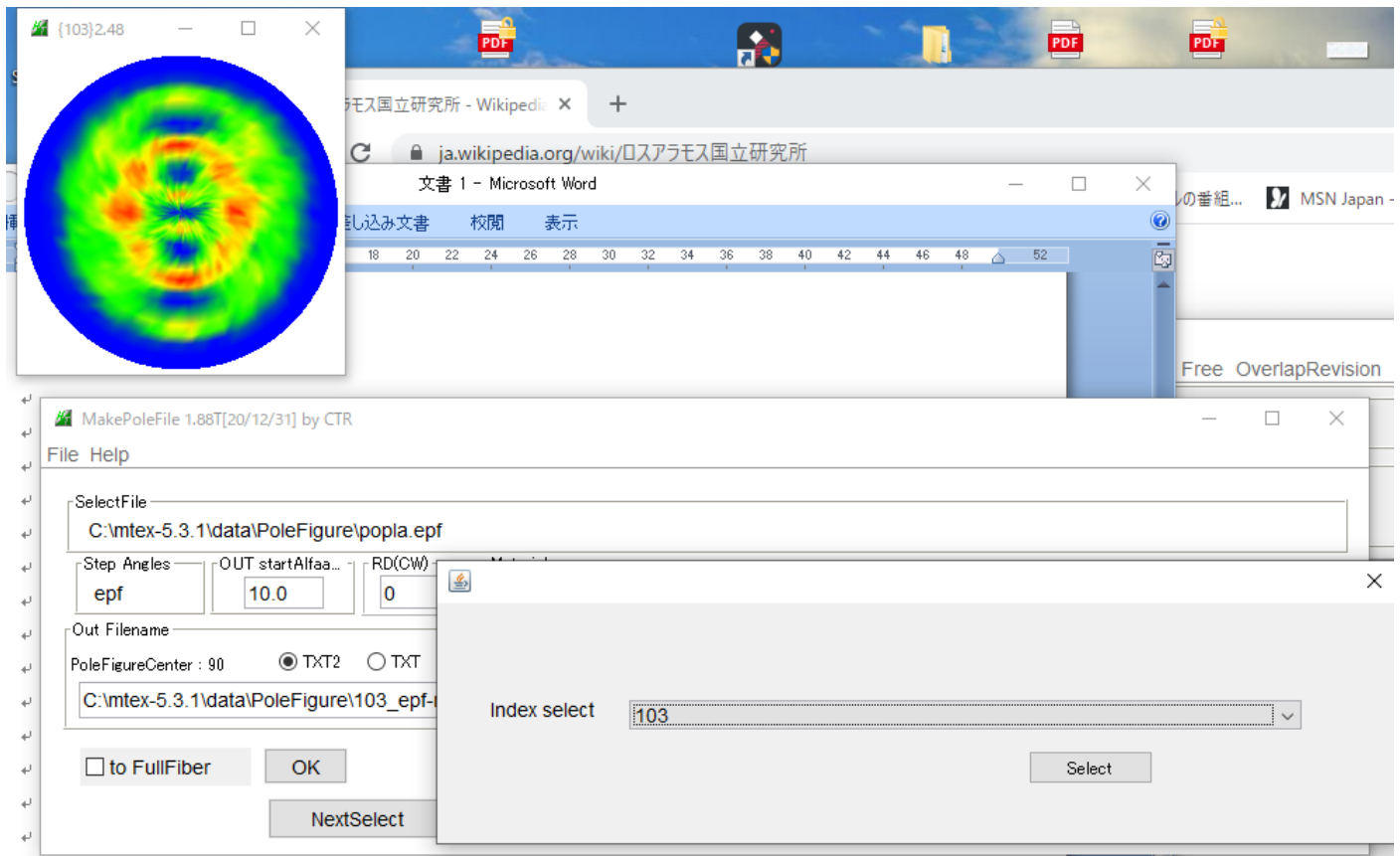
MTEXで解析し、再計算極点図をExport

Value ODF VFでRp%計算とdefocus補正

Defocus補正極点図をMTEXが読み込めるASC変換

MTEXで再度ODF計算

3. MakePoleFileでEPF→TXT2変換

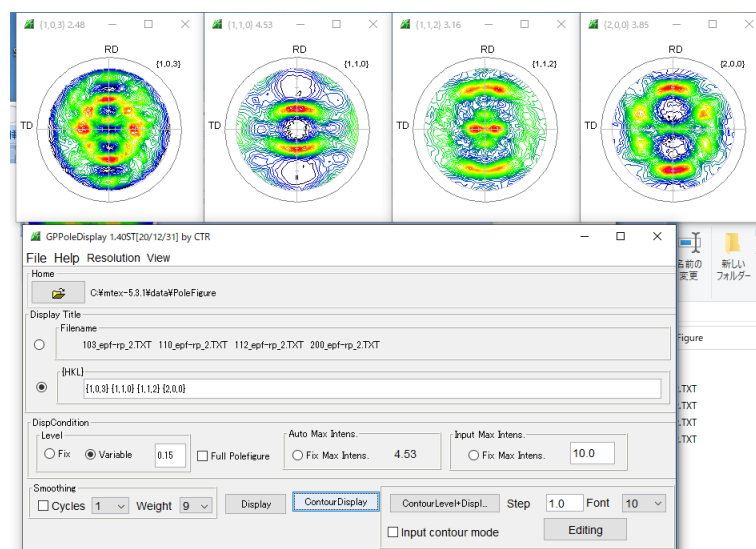


4回繰り返してTXT2ファイル作成

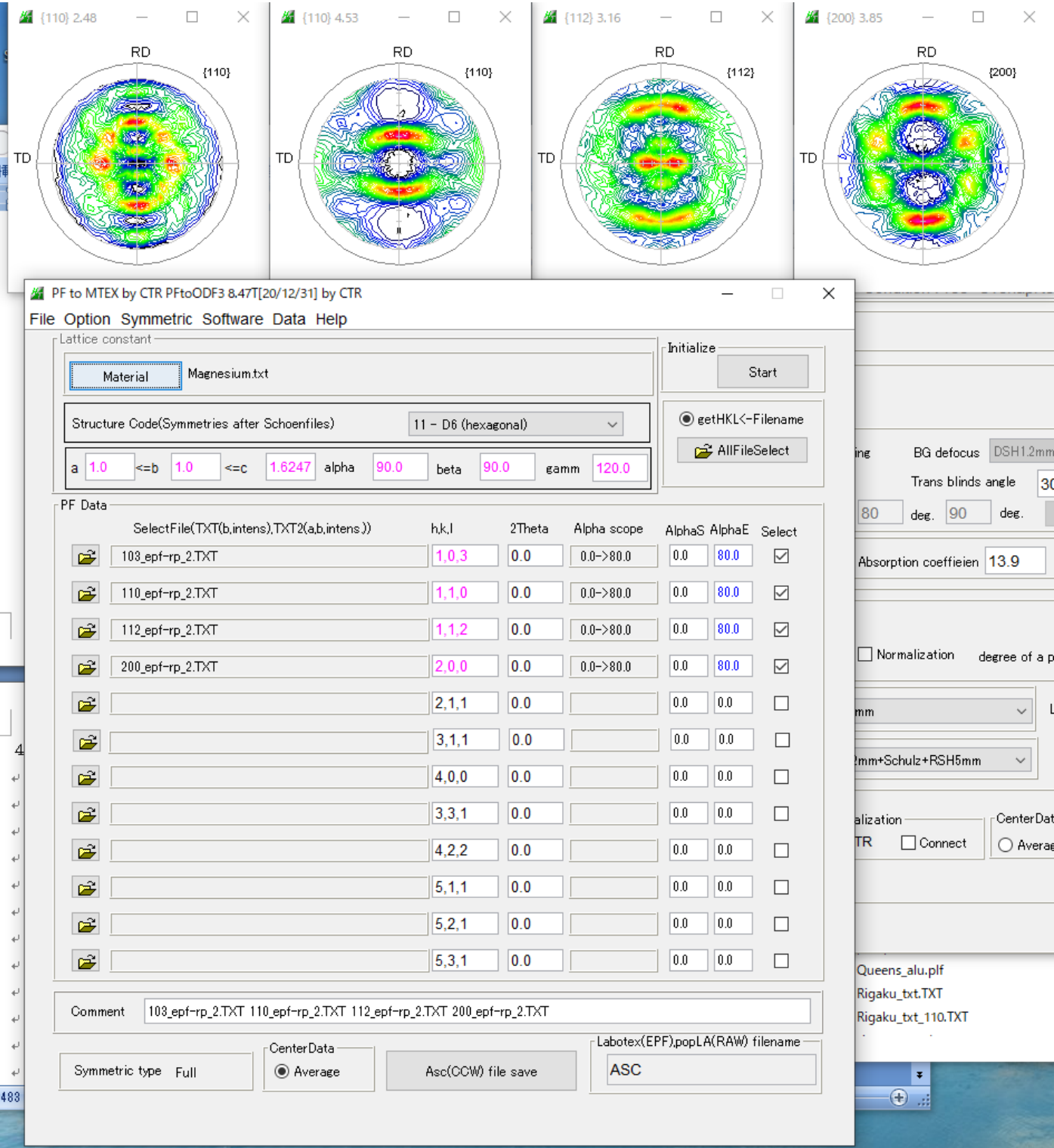
popla.epf	2020/10/12 4:56	Exchange Certifica...	23 KB
-----------	-----------------	-----------------------	-------

mtex-5.3.1 > data > PoleFigure			
名前	更新日時	種類	サイズ
200_epf-rp_2.TXT	2020/12/13 9:33	テキスト文書	21 KB
112_epf-rp_2.TXT	2020/12/13 9:33	テキスト文書	21 KB
110_epf-rp_2.TXT	2020/12/13 9:33	テキスト文書	21 KB
103_epf-rp_2.TXT	2020/12/13 9:33	テキスト文書	21 KB

極点図の確認



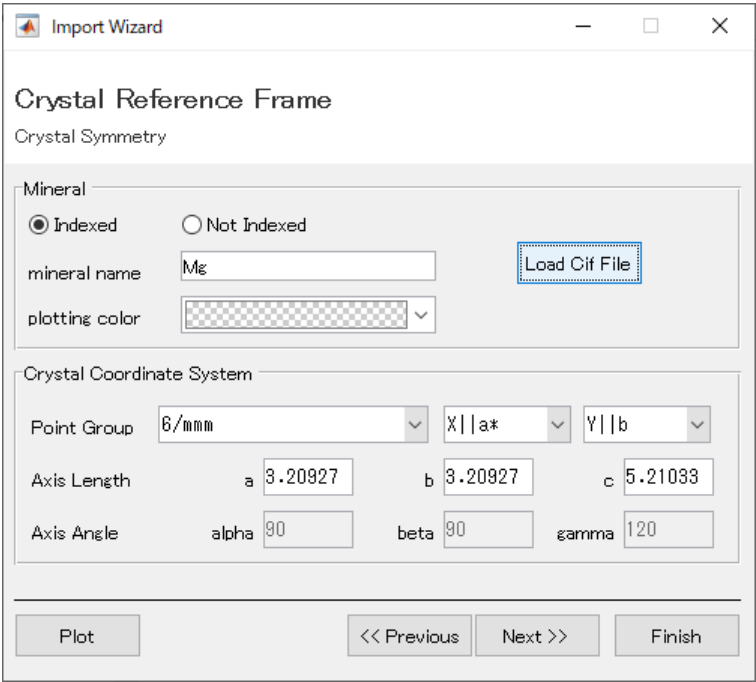
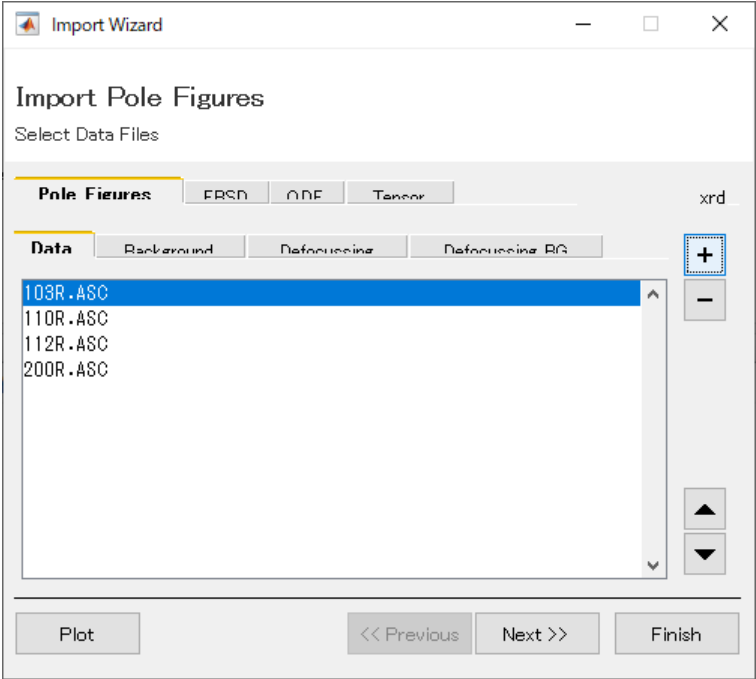
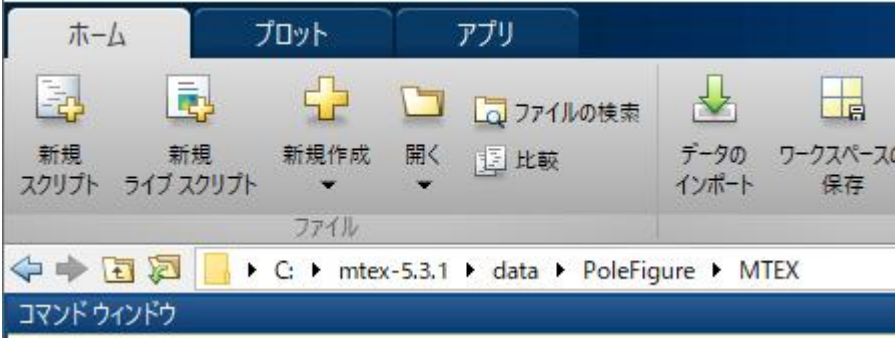
4. PF to ODF 3でMTEX入力データ作成



> mtex-5.3.1 > data > PoleFigure > MTEX

名前	更新日時	種類	サイズ
103R.ASC	2020/12/13 9:39	RINT20007スキー	12 KB
110R.ASC	2020/12/13 9:39	RINT20007スキー	12 KB
112R.ASC	2020/12/13 9:39	RINT20007スキー	12 KB
200R.ASC	2020/12/13 9:39	RINT20007スキー	12 KB

- 5. MTEXで解析し、再計算極点図をE x p o r t
- 5. 1 A S Cデータ読み込み



Import Wizard

Specimen Reference Frame

Specimen Symmetry

Specimen Coordinate System

rotate data by Euler angles (Bunge) in degree

specimen symmetry

MTEX Plotting Convention

Y Z X X Z Y Z Y X X Y X Y Z Y Z X

Plot the data to verify that the coordinate system is properly aligned!

Plot << Previous Next >> Finish

Import Wizard

Miller Indices

Correct Miller Indices

Imported Pole Figure Data Sets

(10-13)	103R.ASC
(11-20)	110R.ASC
(11-22)	112R.ASC
(20-20)	200R.ASC

Miller Indices

h

k

i

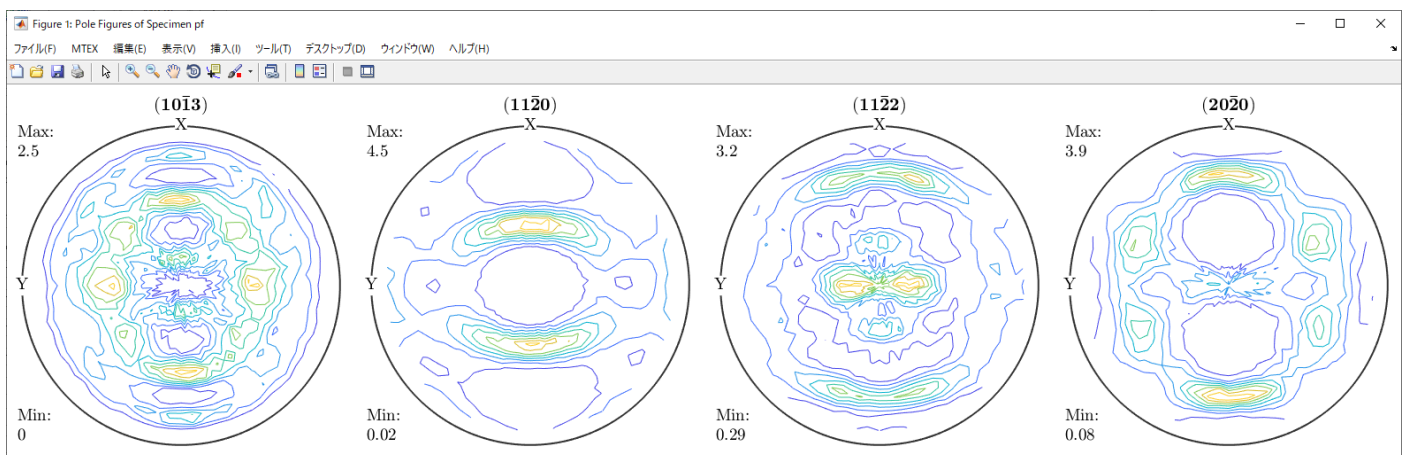
l

Structure Coefficients

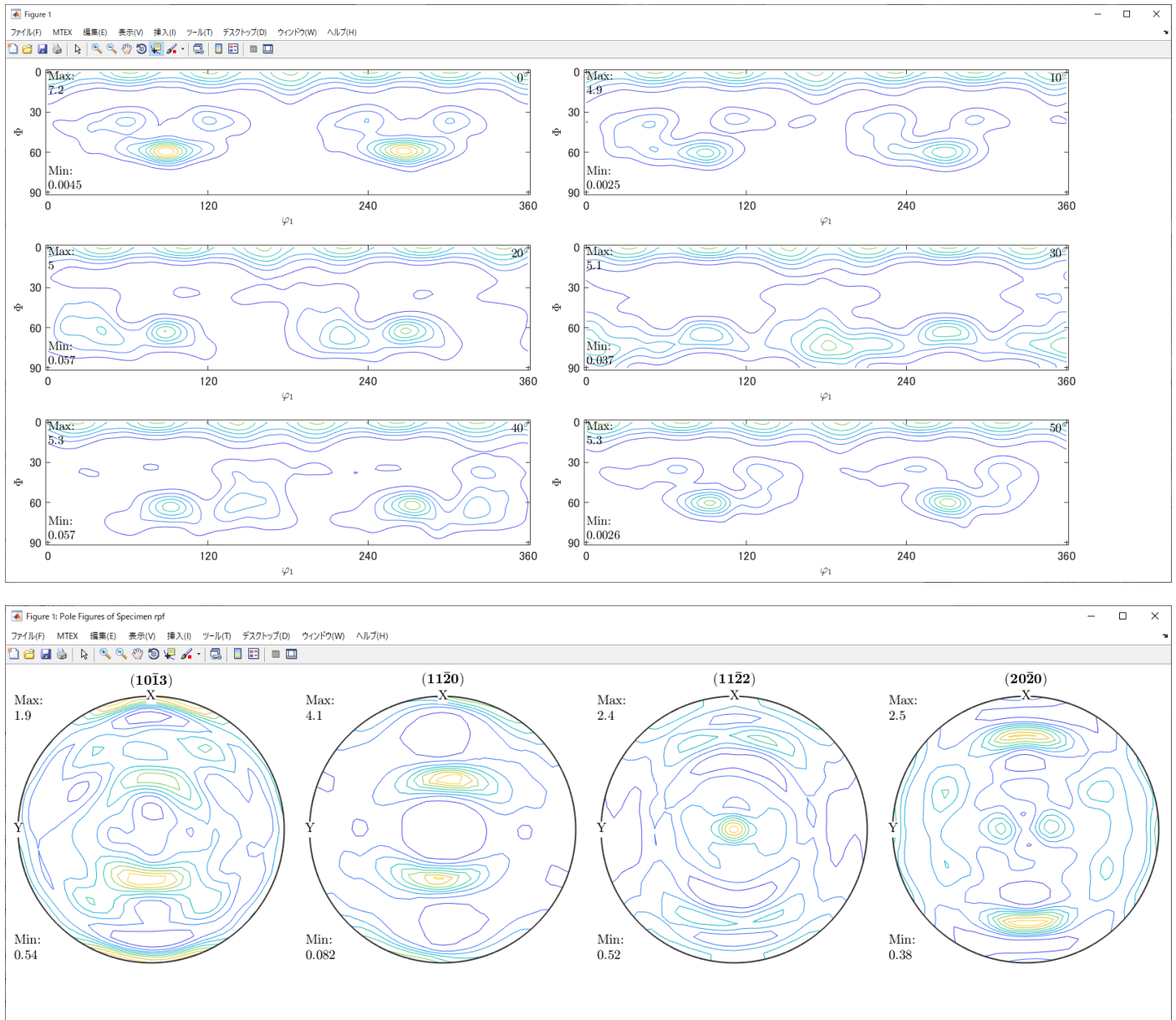
c

For superposed pole figures separate multiple Miller indece and structure coefficients by space!

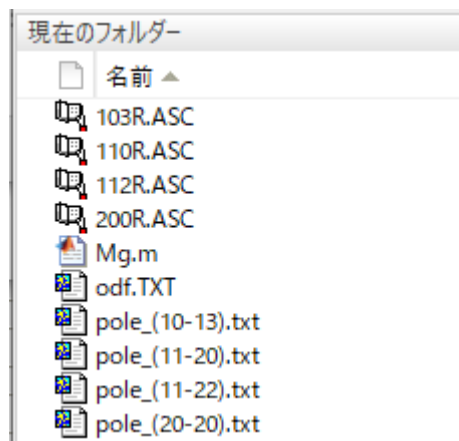
Plot << Previous Next >> Finish



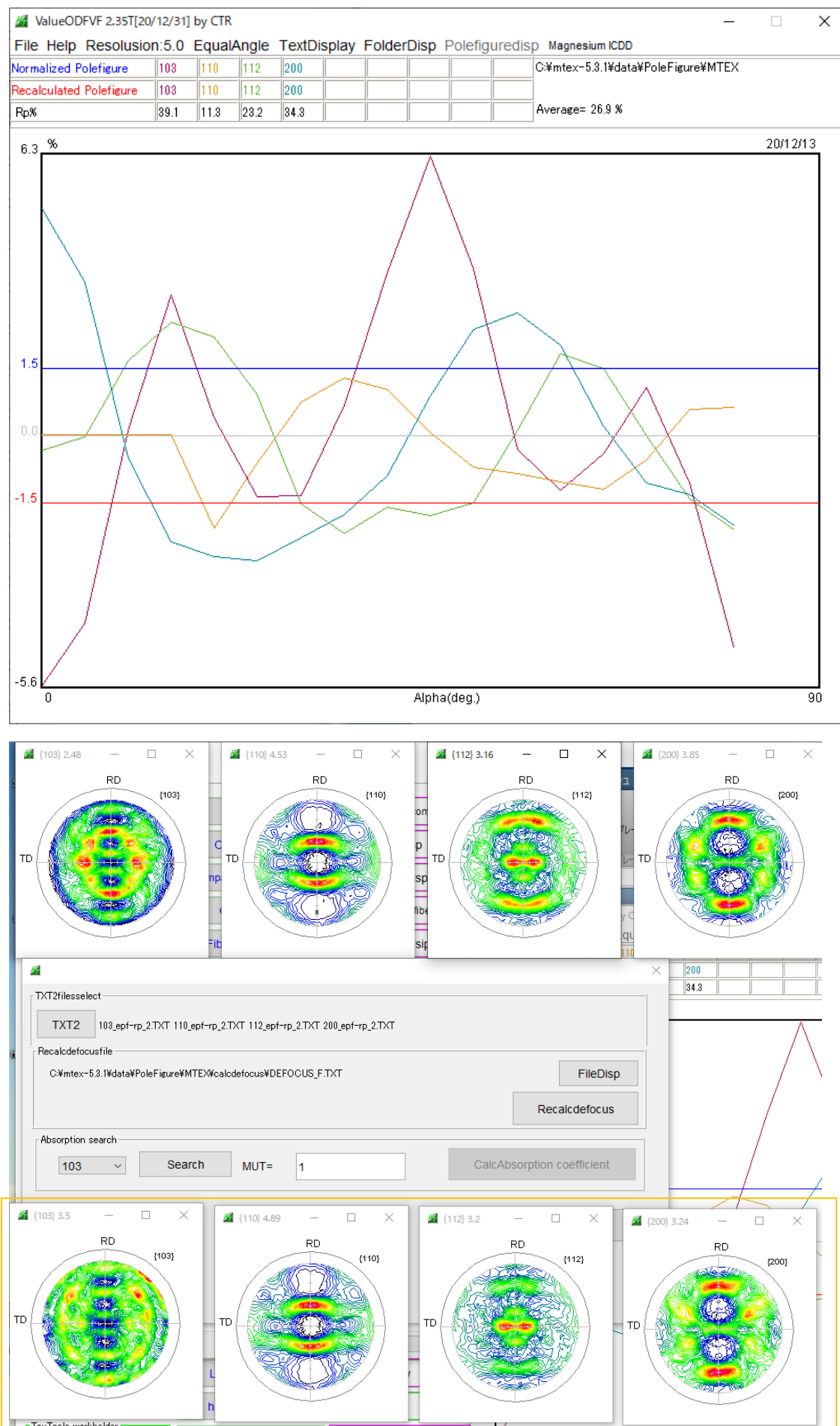
5. 2 ODF 解析



再計算極点図をE x p o r t



6. ValueODFVFでRp%計算とdefocus補正



defocus 補正極点図

7. D e f o c u s 補正極点図をM T E Xが読み込めるA S C変換

PF to MTEX by CTR PFtoODF3 8.47T[20/12/31] by CTR

File Option Symmetric Software Data Help

Lattice constant

Material

Magnesium.txt

Structure Code(Symmetries after Schoenfiles)

11 - D6 (hexagonal)

a

1.0

<=b

1.0

<=c

1.6247

alpha

90.0

beta

90.0

gamma

120.0

Initialize

Start

getHKL<-Filename

AllFileSelect

PF Data

SelectFile(TXT(b,intens),TXT2(a,b,intens))	h,k,l	2Theta	Alpha scope	AlphaS	AlphaE	Select
<div>103_epf-rp_2.TXT</div>	1,0,3	0	0.0->80.0	0.0	80.0	<input checked="" type="checkbox"/>
<div>110_epf-rp_2.TXT</div>	1,1,0	0	0.0->80.0	0.0	80.0	<input checked="" type="checkbox"/>
<div>112_epf-rp_2.TXT</div>	1,1,2	0	0.0->80.0	0.0	80.0	<input checked="" type="checkbox"/>
<div>200_epf-rp_2.TXT</div>	2,0,0	0	0.0->80.0	0.0	80.0	<input checked="" type="checkbox"/>
<div></div>	2,1,1	0.0		0.0	0.0	<input type="checkbox"/>
<div></div>	3,1,1	0.0		0.0	0.0	<input type="checkbox"/>
<div></div>	4,0,0	0.0		0.0	0.0	<input type="checkbox"/>
<div></div>	3,3,1	0.0		0.0	0.0	<input type="checkbox"/>
<div></div>	4,2,2	0.0		0.0	0.0	<input type="checkbox"/>
<div></div>	5,1,1	0.0		0.0	0.0	<input type="checkbox"/>
<div></div>	5,2,1	0.0		0.0	0.0	<input type="checkbox"/>
<div></div>	5,3,1	0.0		0.0	0.0	<input type="checkbox"/>

Comment

103_epf-rp_2.TXT 110_epf-rp_2.TXT 112_epf-rp_2.TXT 200_epf-rp_2.TXT

Symmetric type

Full

CenterData

☒ Average

Asc(CCW) file save

Labotex(EPF),popLA(RAW) filename

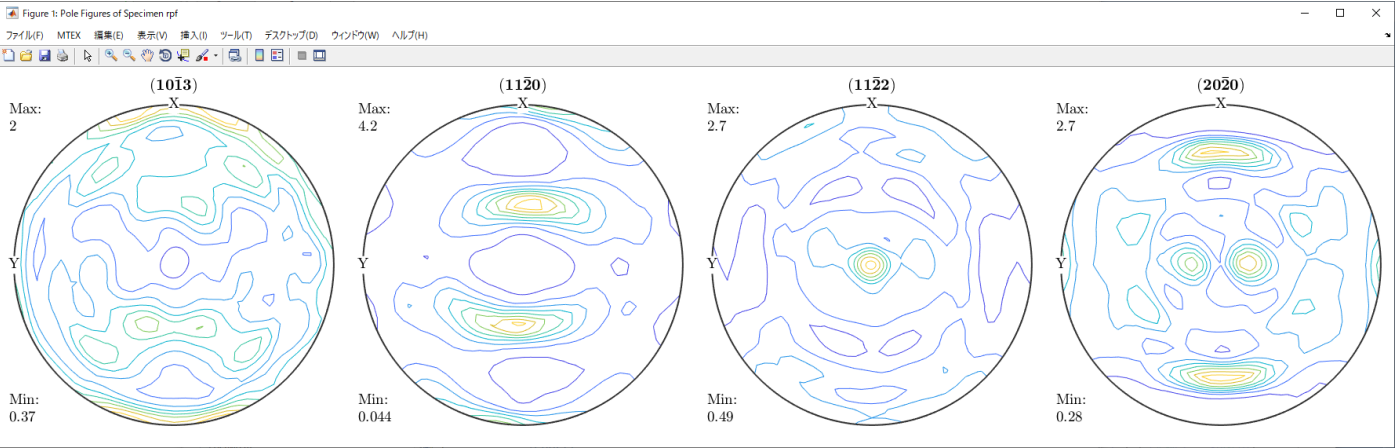
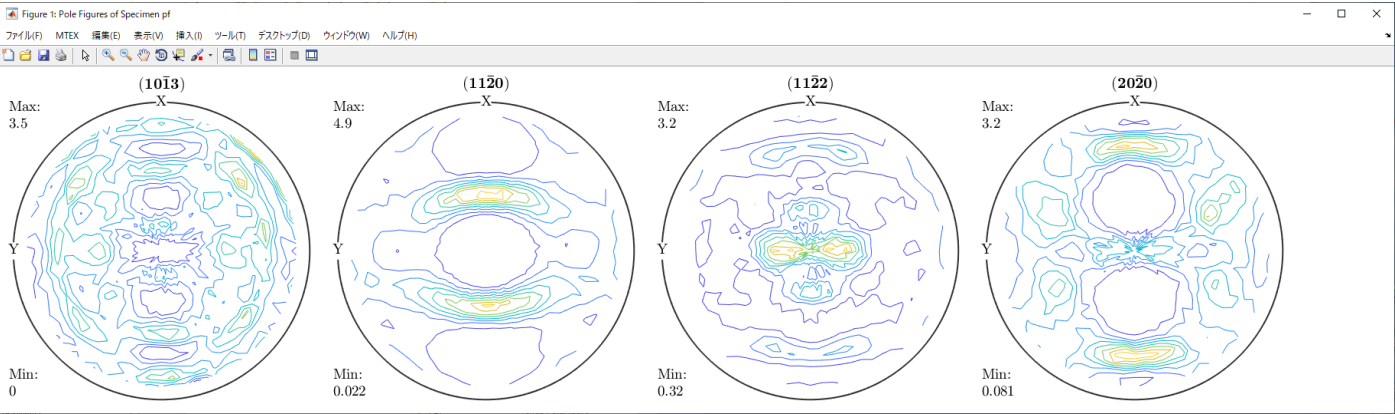
ASC

> mtex-5.3.1 > data > PoleFigure > MTEX > calcdefocus > Newdata > MTEX

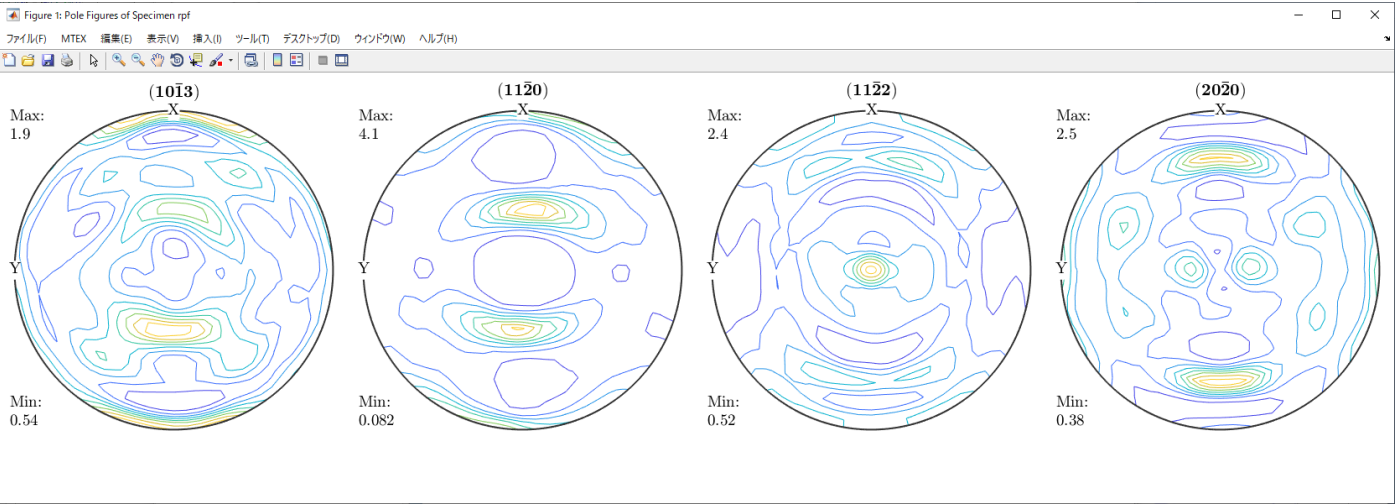
名前	更新日時	種類	サイズ
<div>103R.ASC</div>	2020/12/13 9:55	RINT2000アスキー	18 KB
<div>110R.ASC</div>	2020/12/13 9:55	RINT2000アスキー	18 KB
<div>112R.ASC</div>	2020/12/13 9:55	RINT2000アスキー	18 KB
<div>200R.ASC</div>	2020/12/13 9:55	RINT2000アスキー	18 KB

8. MTEXで再度ODF計算

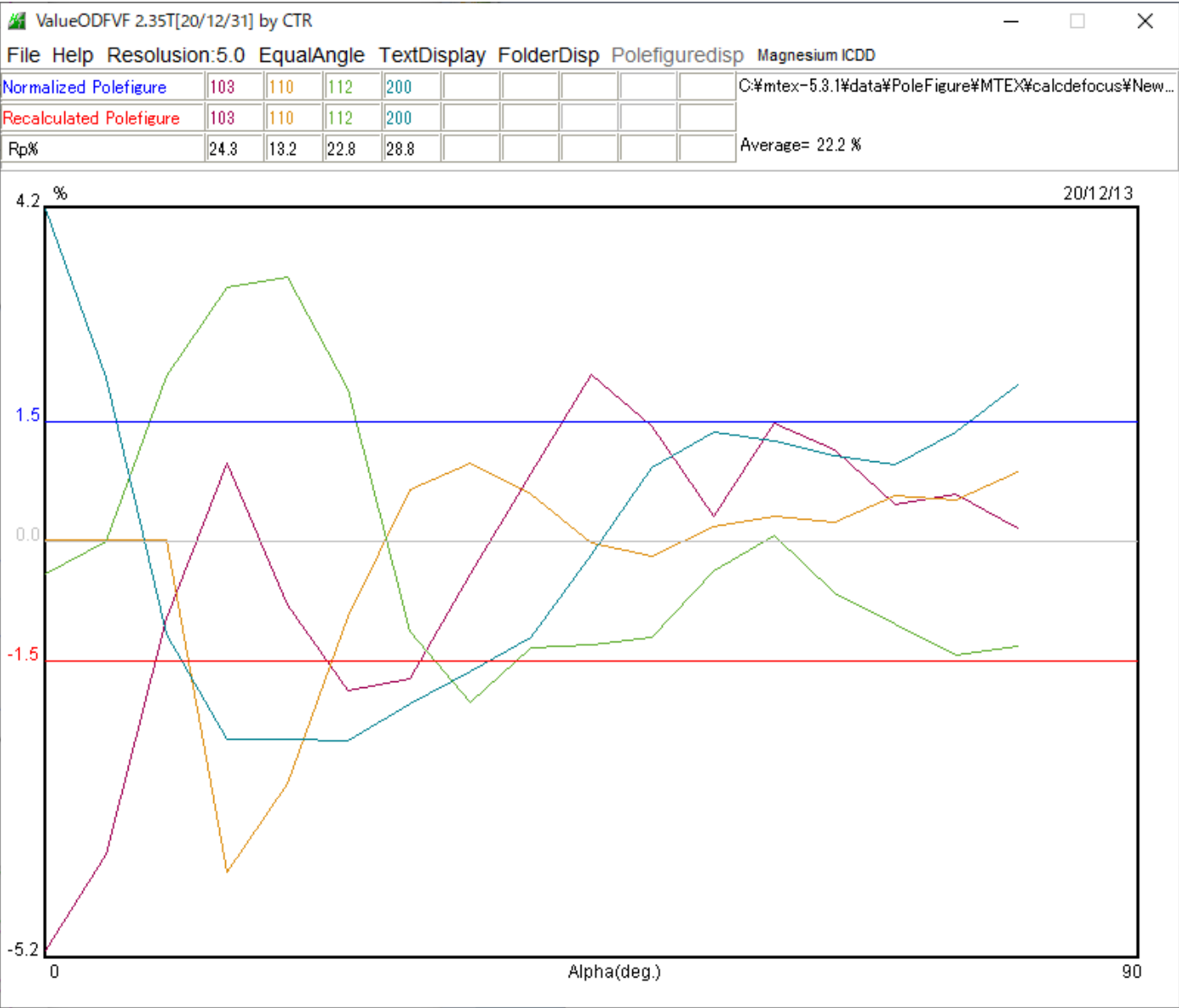
mtex-5.3.1 ▶ data ▶ PoleFigure ▶ MTEX ▶ calcdefocus ▶ Newdata ▶ MTEX



defocusなし



8. 1 再計算極点図をExportしRp%計算



若干の改善が見られます。

8. 2 ODF図のExport

