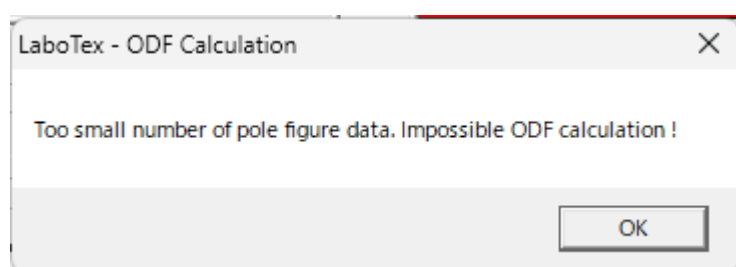


## L a b o T e x 解析エラー対策

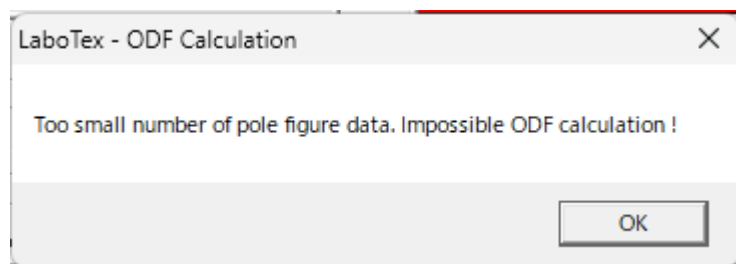


2025年12月06日

HelperTex Office

## 概要

### LaboTexでODF解析時



が発生する事があります。

原因は、入力データにおいて、解析に必要なデータ点数が少ない場合発生します。

入力データは、0.000001以下は0.000000としているため、入力データに0.000001以下データが多い場合、上位エラーが発生しています。

0.000001以下は0.000001とする対策を行いました。

通常の極点測定ではこの現象は発生しません。

本来、極点図の最小値はrandomレベルであり、統計変動の影響で0.0辺りをバラツクため、0.0の値は少なくなり、上記現象は発生しません。

但し、単結晶のシュミレーション極点図や、バックグラウンドが高い測定データを扱う場合発生しています。

対策として、PFtoODF3ソフトウェアに最小値、0.000001を追加することで対応します。



0.000001はrandomレベル+0.0001%になります。

以下に結果を示します。

# Titanium (-120) [210] シミュレーション

HexaConvert 1.17T[25/12/31] by CTR

File Step Help random Dispfile

A ☐ X-Axis[100] ([2-1-10])  B ☒ X-Axis[210] ([10-10]) 

Miller Notation (3Axis Notation)

☐ -1 2 0 2 1 0 hkl uvw

Miller Bravais Notation (4 Axis Notation)

☒ -1 2 -1 0 1 0 -1 0 hkil uvxw

Euler(p1Fp2)

☐ 0.0 90.0 0.0

Material select

Titanium-Ti-alpha-COD.TXT

c/a 1.588 Input  $\psi$ 2 Angles 0 Calc

DISP

Position 10 Disp size 200 DISP

BG Corr Black Line size 1.0 MINUS

Polefigure

FWHM 10 degree Step 5 Polefigure 0,0,1 ☒ Orthorhombic Disp

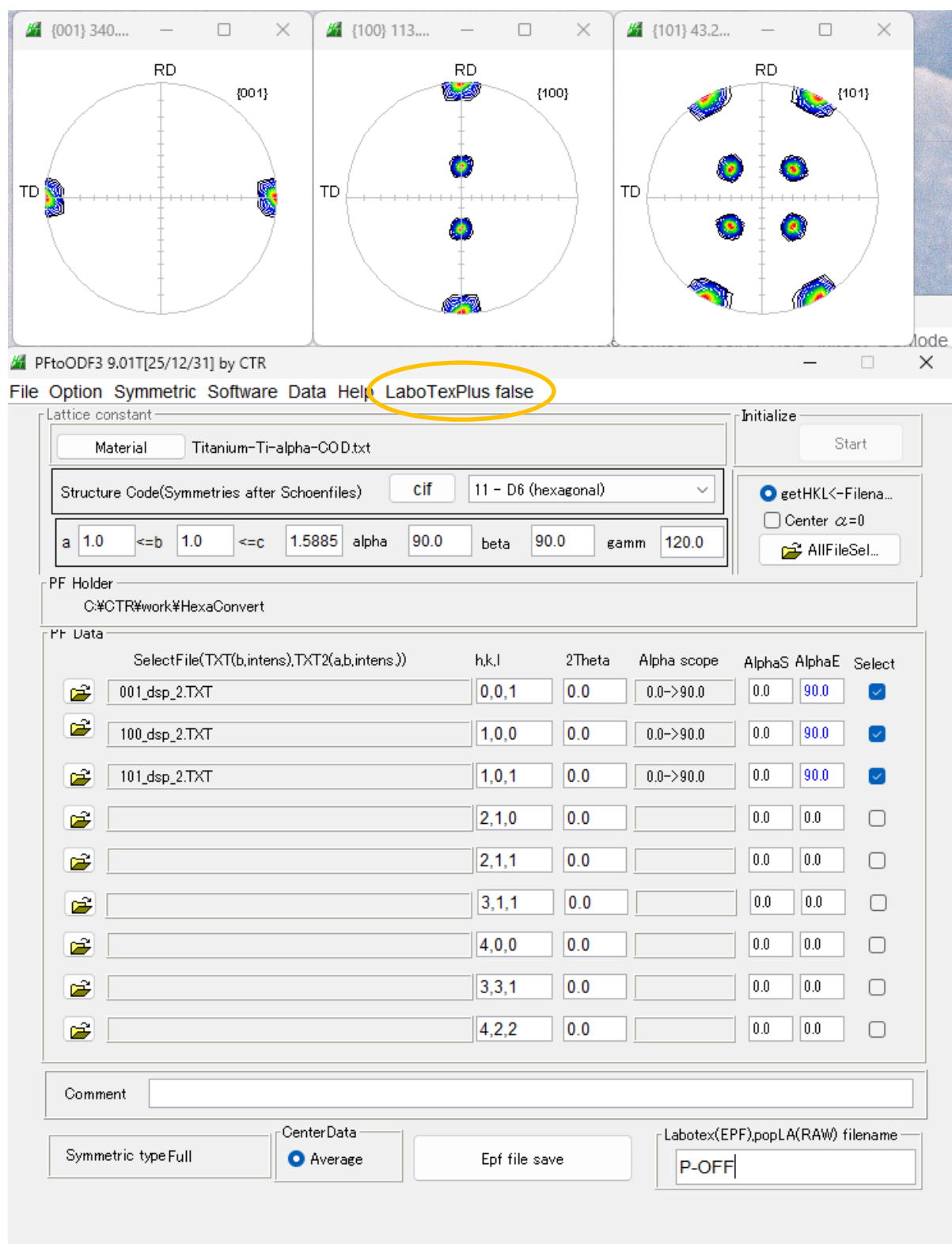
Gratio 0.5 ☐ Lorentzcut(max/20) Holder C:\CTR\work\HexaConvert

OK Return Structure

(100)

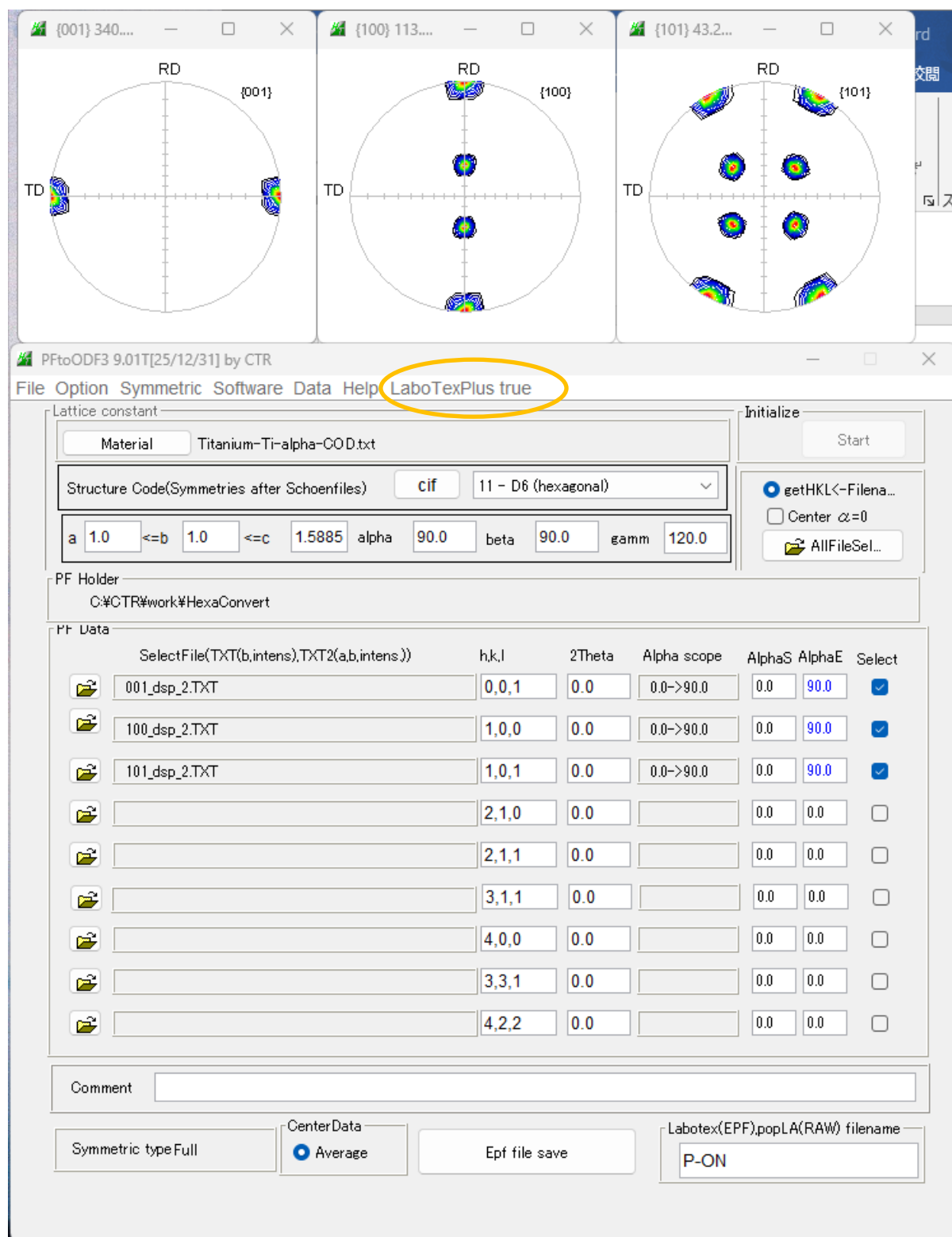
0.0	155.0	1.1253657160280552E-20↓
0.0	160.0	7.389145310884662E-13↓
0.0	165.0	8.886217909064711E-7↓
0.0	170.0	2.22037649083899↓
0.0	175.0	21.186513479159405↓
0.0	180.0	113.7764121426672↓
0.0	185.0	21.186513479159405↓
0.0	190.0	2.22037649083899↓
0.0	195.0	8.886217909064711E-7↓
0.0	200.0	7.389145310884662E-13↓
0.0	205.0	1.1253657160280552E-20↓

従来



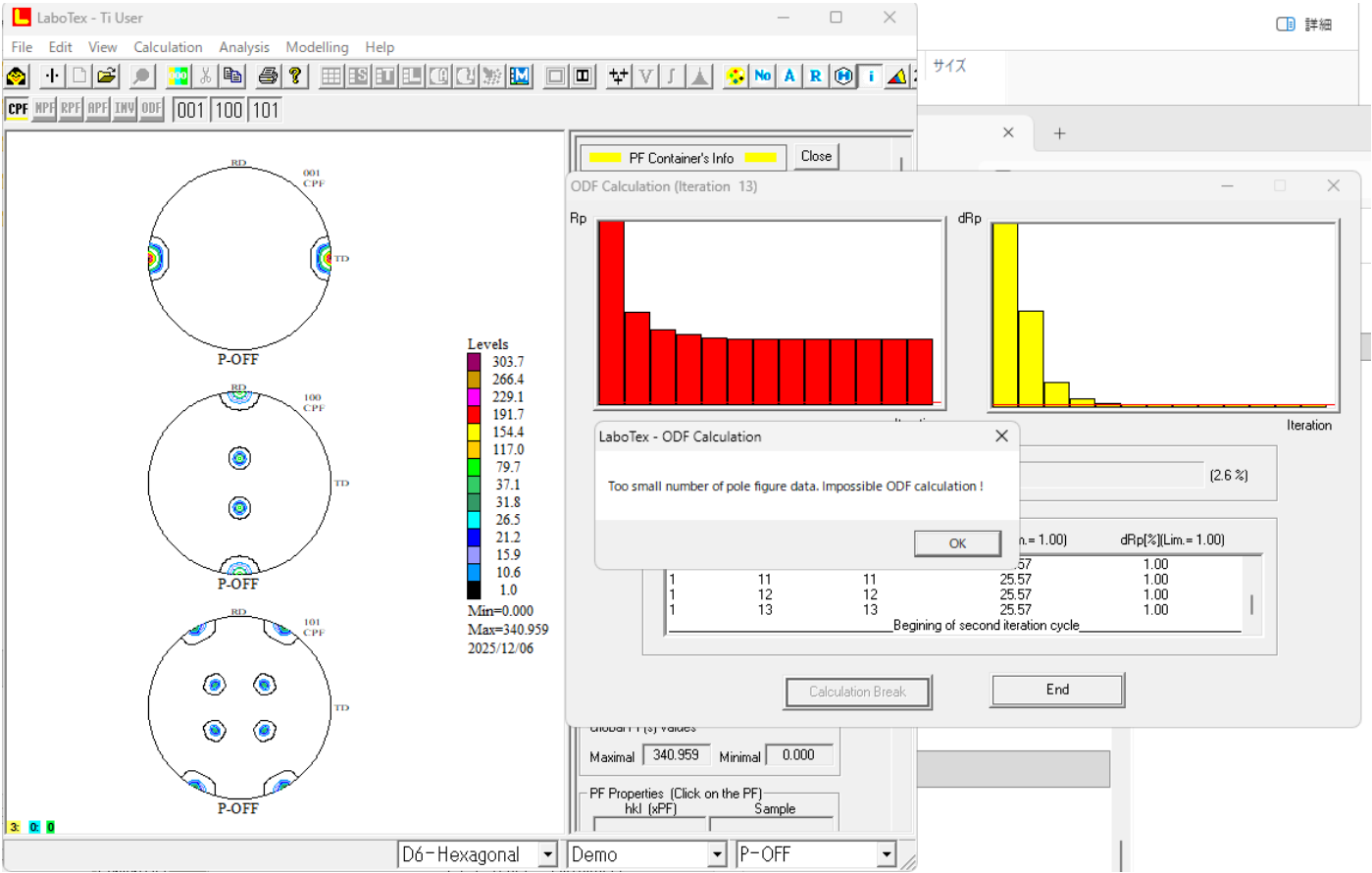
```
0.000000 0.000000 0.000000 0.000000 0.000000 0.000000 0.000000 0.000000
0.000000 0.000000 2.220376 21.18651 113.7764 21.18651 2.220376 0.000000
0.000000 0.000000 0.000000 0.000000 0.000000 0.000000 0.000000 0.000000
```

変更



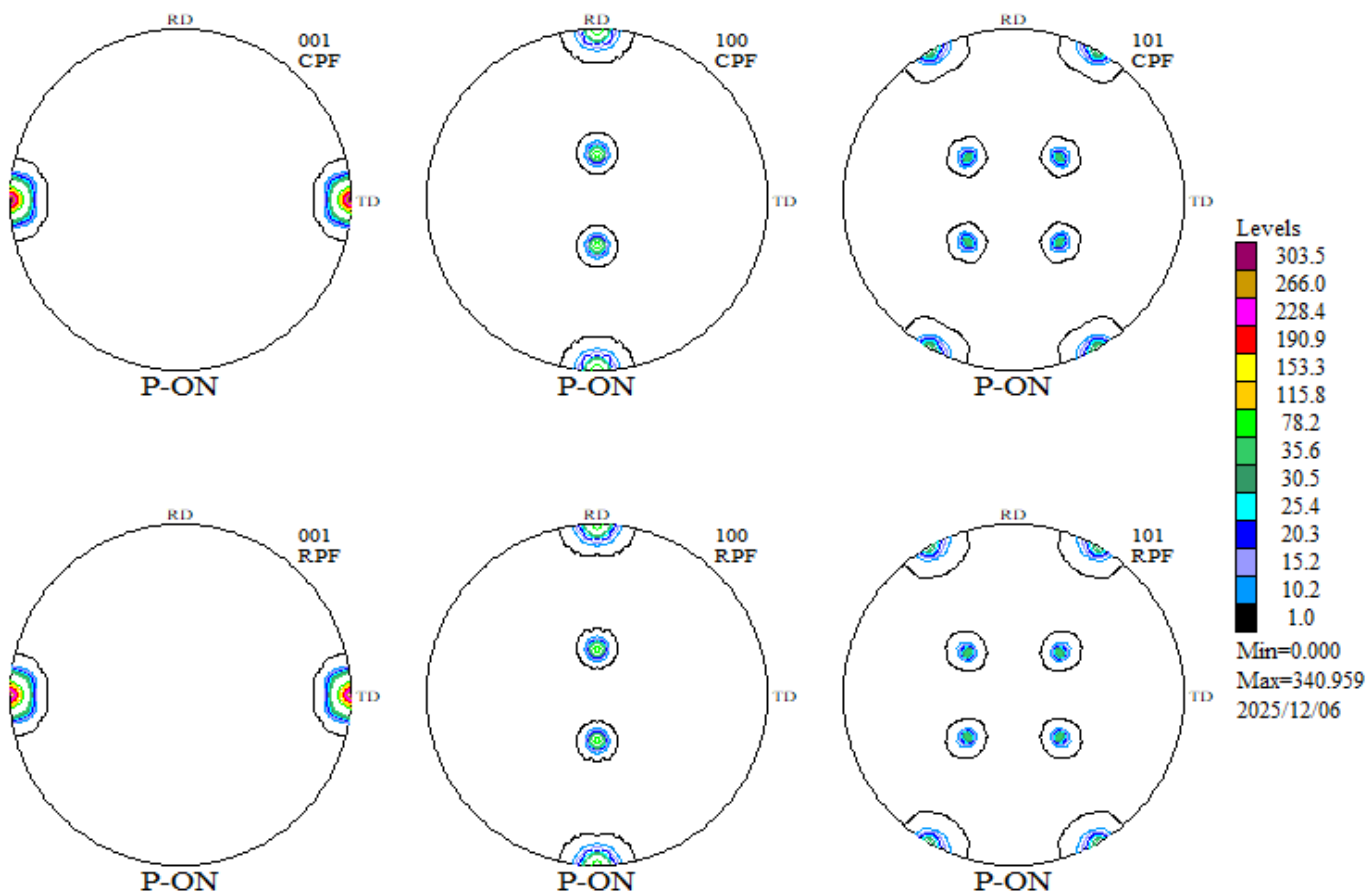
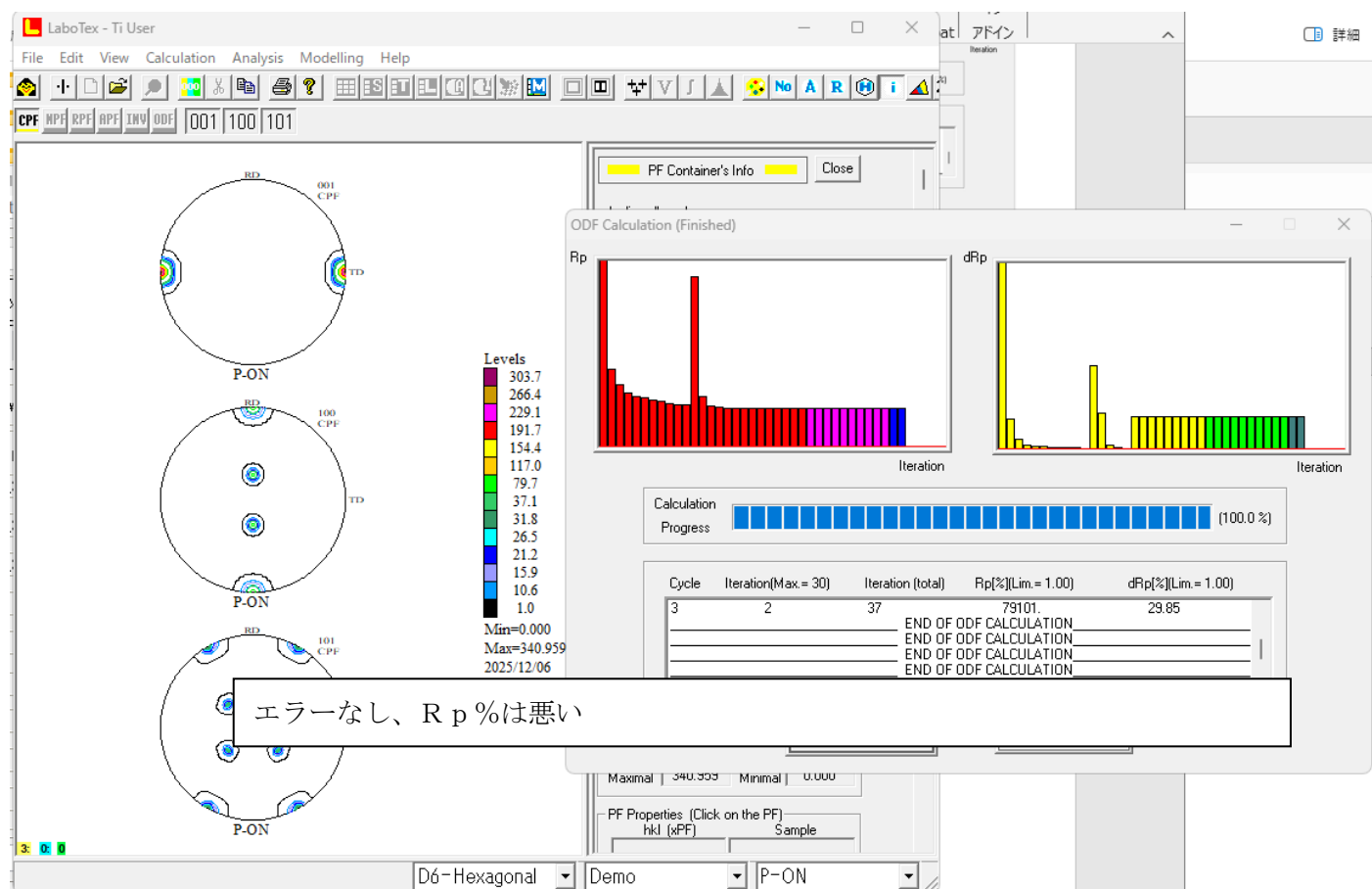
```
0.000001 0.000001 0.000001 0.000001 0.000001 0.000001 0.000001 0.000001
0.000001 0.000001 2.220376 21.18651 113.7764 21.18651 2.220376 0.000001
0.000001 0.000001 0.000001 0.000001 0.000001 0.000001 0.000001 0.000001
```

以前

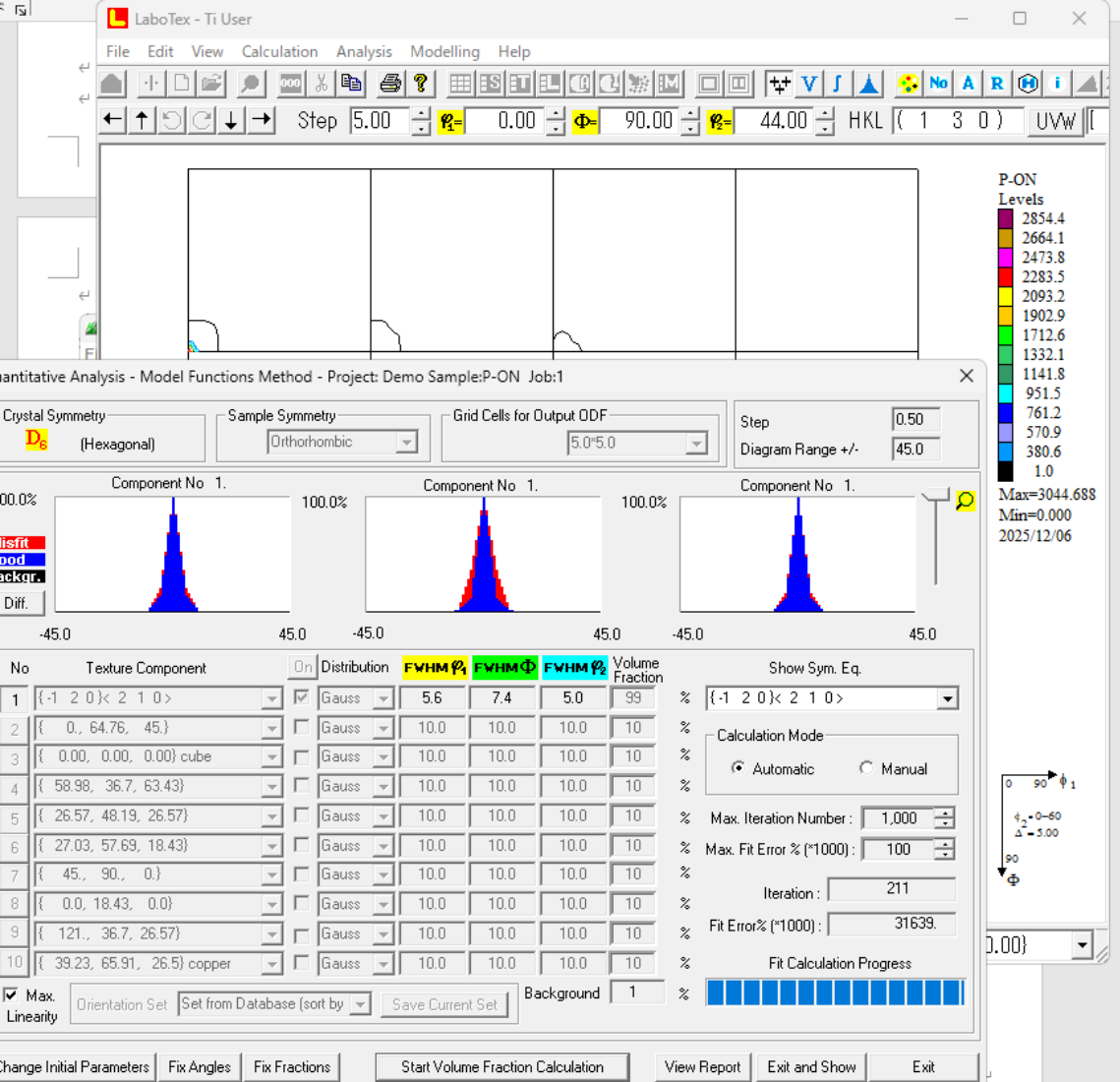
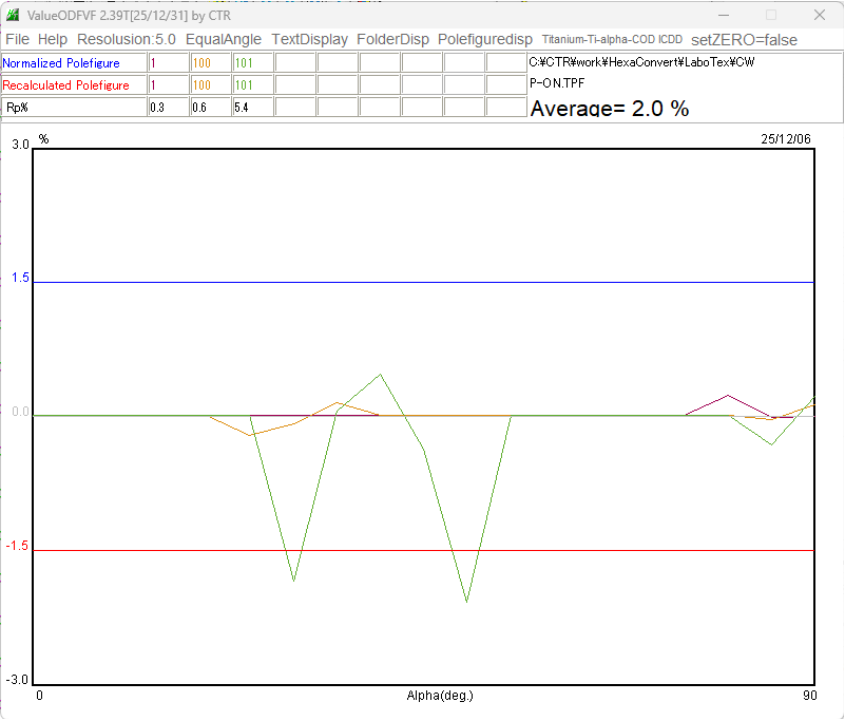


エラー

改良



ValueODFVFによるRp%±1.5%Overがあるが全体が2.0%で良い結果である。



Component No 1 - Distribution :Gauss

99.32 5.6 7.4 5.0 {-1 2 0}< 2 1 0>

0.68 Background Volume Fraction