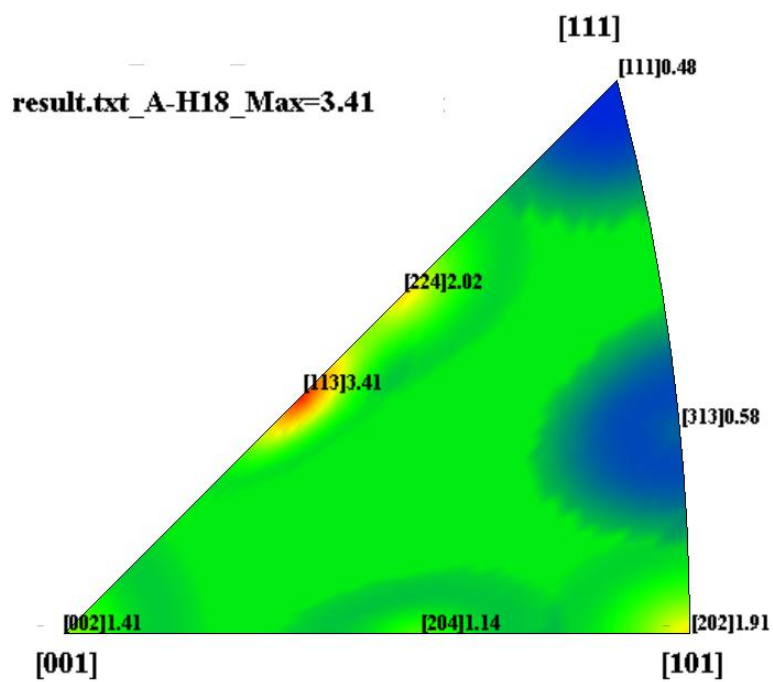


CTR ソフトウェアによる

## 逆極点パッケージソフトウェア



2013年11月02日

*HelperTex Office*

## 概要

CTR パッケージソフトウェアは、極点図処理から始まり、ODF 解析用ツールとして作成されているが、逆極点図処理も含まれていた。しかし、逆極点測定は、極点測定と異なるので、逆極点のみを単独で使えるパッケージソフトウェアとした。

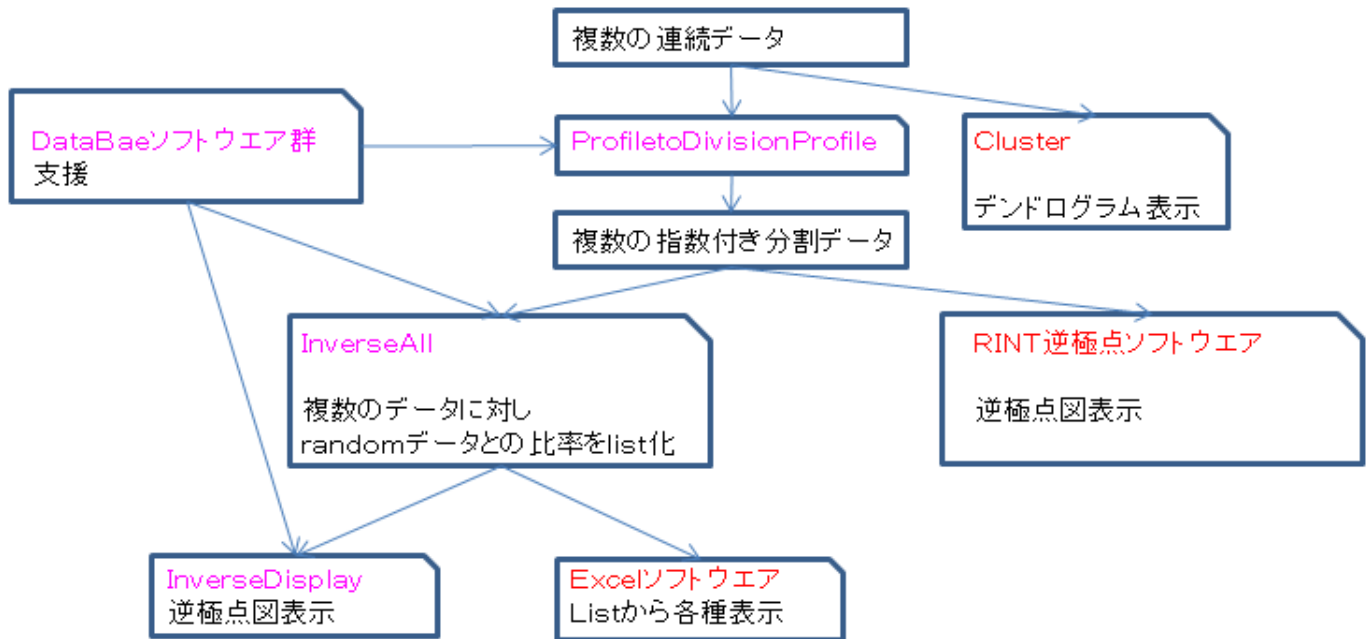
パッケージは、逆極点処理とデータベースで構成されている。

### 逆極点処理部分

- 連続測定プロファイルを分割プロファイルに変換、
- 分割プロファイルに指数付け、
- 複数のファイルの一括逆極点計算
- Excel で読み込める逆極点リスト作成
- 逆極点図の描画

### データベース

- COD, ICDD データを独自フォーマットに変換し、データベース化
- データベースに登録されているデータのプロファイル表示とファイル作成、多重描画
- 逆極点処理の効率化



ProfiletoDivisionProfile

InverseAll

InverseDisplay

が含まれます。

支援ソフトウェア

TextDisplayソフトウェア

テキストデータの表示

MultiDisplayソフトウェア

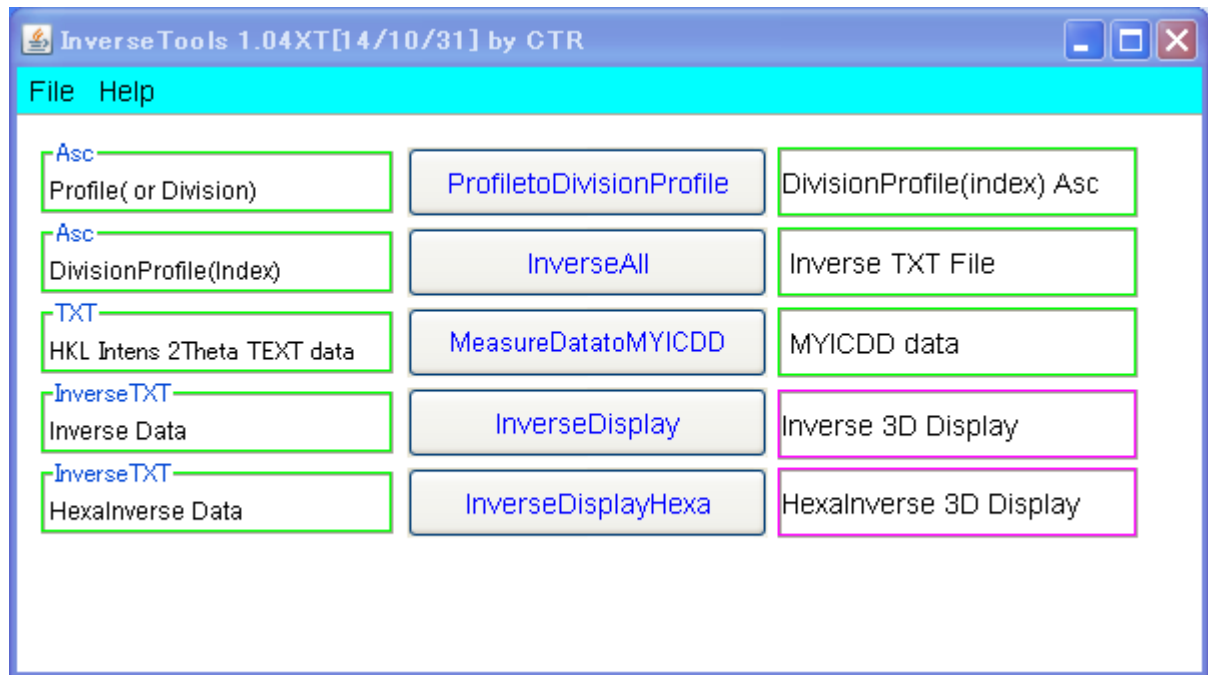
プロファイル表示

InverseDisplayTXT2ソフトウェア

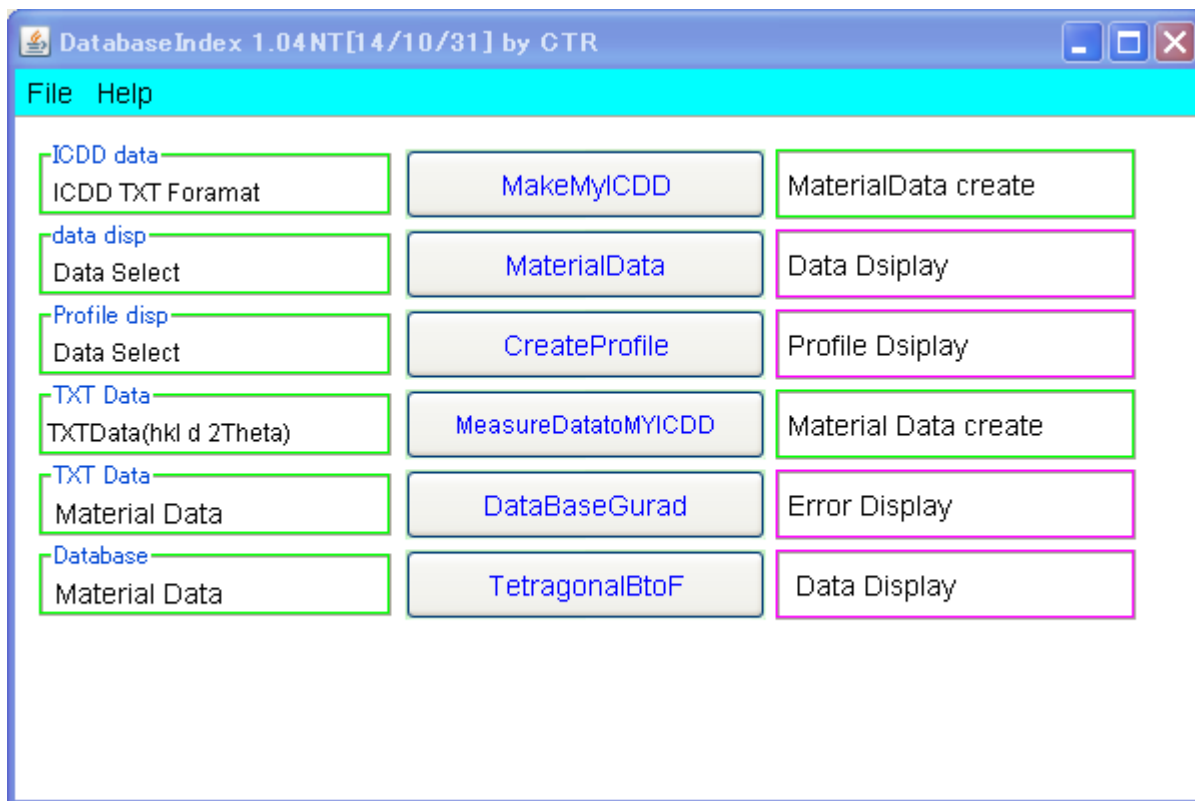
2D, 3D逆極点図の描画

# 逆極点処理

C:\¥CTR¥Index¥InverseTools.jar



- ProfiletoDivisionProfile** 連続測定データの分割化、分割データの指数付け
- InverseAll** 複数のファイルを一括逆極点処理と結果のテキストファイル化
- MeasureDatatoMYICDD** 測定データからデータベース作成
- InverseDisplay** 逆極点図結果ファイルから 2D,3D 逆極点図の描画
- InverseDisplayHexa** ODF 解析結果の 2D,3D 逆極点図の描画



- MakeMyICDD** COD, ICDDデータから独自データベース変換
- MaterialData** 登録データベースを表示
- CreateProfile** 登録データベースからプロファイル表示
- MeasureDatatoMYICDD** 測定データから独自データベース作成
- DataBaseGurad** 独自データベースの管理
- TetragonalBtoF** TetragonalデータのBCC→FCC変換

入力データ

ASCファイル (リガクテキストデータ)

RINTシステムでは、RawデータをASCII変換、SmartLabでは測定で直接作成

```

*TYPE          = Raw
*CLASS         = ASCII CLASS
*SAMPLE        =
*COMMENT       = A1
*FNAME         = 6022H18.raw
*DATE          = 05-Jun-12 07:49

*GROUP_COUNT   = 1
*GONIO         = RINT2000 広角コンフォーマ、185
*ATTACHMENT    = 極点多目的試料台
*ASC           = 1, 0, 0.000000, 0.000000
*SLIT_NAME     = 0, 発散スリット
*SLIT_NAME     = 1, 発散縦制限スリット
*SLIT_NAME     = 2, 散乱スリット
*SLIT_NAME     = 3, 受光スリット
*COUNTER       = シンチレーションカウンタ, 0
*POS_FORMAT    = 0
*SCAN_AXIS     = 2theta/theta
*MEAS_MODE     = Continuous Scanning
*TARGET        = 29
*XRAY_CHAR     = K-ALPHA1
*WAVE_LENGTH1  = 1.54056
*WAVE_LENGTH2  = 1.5444
*THICKNESS     = 0, 0.000000
*MU            = 0, 0.000000
*SCAN_MODE     = 2theta/theta
*SPEED_DIM     = sec./step
*XUNIT         = deg.
*YUNIT         = counts
*SCALE_MODE    = 1
*REP_COUNT     = 1
*SE_COUNT      = 0
*STD_MATERIAL  = Unknown, Unknown, 0.000000, 0.000000, 0.000000, 0.000000, 0.000000, 0.000000
*LATT_CONS     = 0, Unknown, Unknown, 0.000000, 0.000000, 0.000000, 0.000000, 0.000000, 0.000000
*SEC_COUNT     = 1
*TSPEC_SIZE    = 0
*EXTRA_SIZE    = 0
*MEMO          =

*BEGIN
*GROUP         = 0
*START         = 30
*STOP          = 140
*STEP          = 0.02
*OFFSET        = 0.000000
*SPEED         = 0.24
*SLIT_SPEC     = 0, 1°, 1.75, 10
*SLIT_SPEC     = 1, 10mm, 8, 10
*SLIT_SPEC     = 2, 1°, 0.94, 20
*SLIT_SPEC     = 3, 0.3mm, 0.3, 20
*KV            = 40
*MA            = 40
*LOW           = 0.000000
*HIGH          = 0.000000
*CTEMPER       = 0, 0.000000
*CTEMPER       = 1, 0.000000
*CTEMPER       = 2, 0.000000
*PAREX         = 0, 0.000000
*PAREX         = 1, 0.000000
*PAREX         = 2, 0.000000
*PAREX         = 3, 0.000000
*PAREX         = 4, 0.000000
*PAREX         = 5, 0.000000
*PAREX         = 6, 0.000000
*PAREX         = 7, 0.000000
*PAREX         = 8, 0.000000
*PAREX         = 9, 0.000000
*PAREX         = 10, 0.000000
*PAREX         = 11, 0.000000
*PAREX         = 12, 0.000000
*PAREX         = 13, 0.000000
*PAREX         = 14, 0.000000
*PAREX         = 15, 0.000000
*FULL_SCALE    = 1000
*INDEX         = 0, 0, 0
*COUNT        = 5501
42, 41, 36, 46
47, 38, 46, 53
30, 41, 53, 46
58, 51, 48, 42]

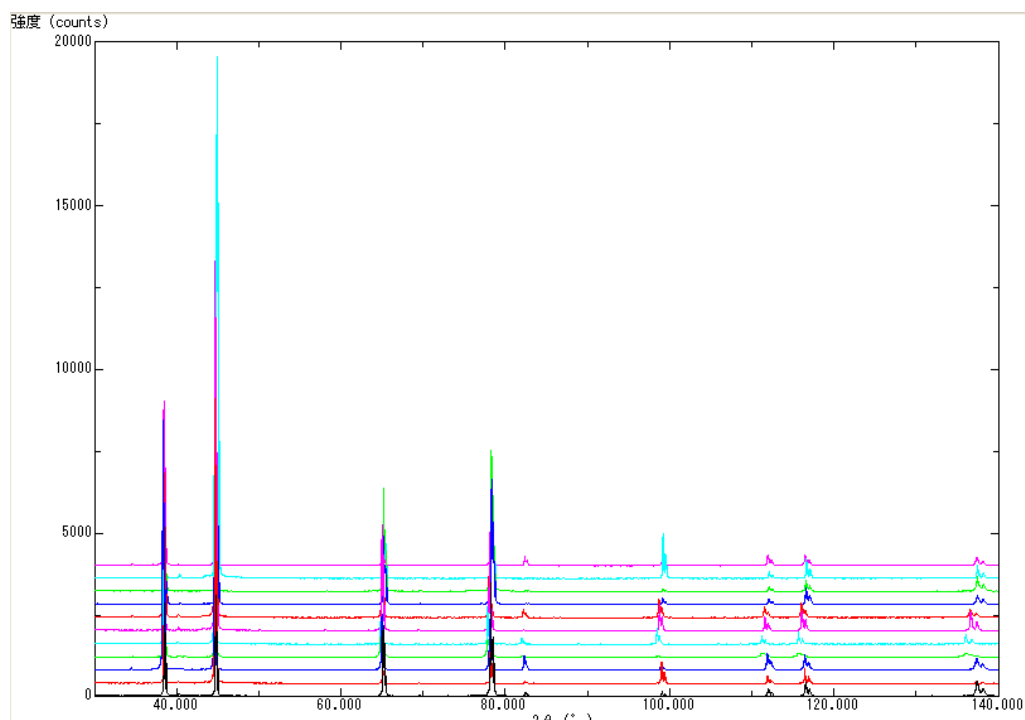
```

\*INDEX に指数登録がされていません。

## 実際の測定データ群

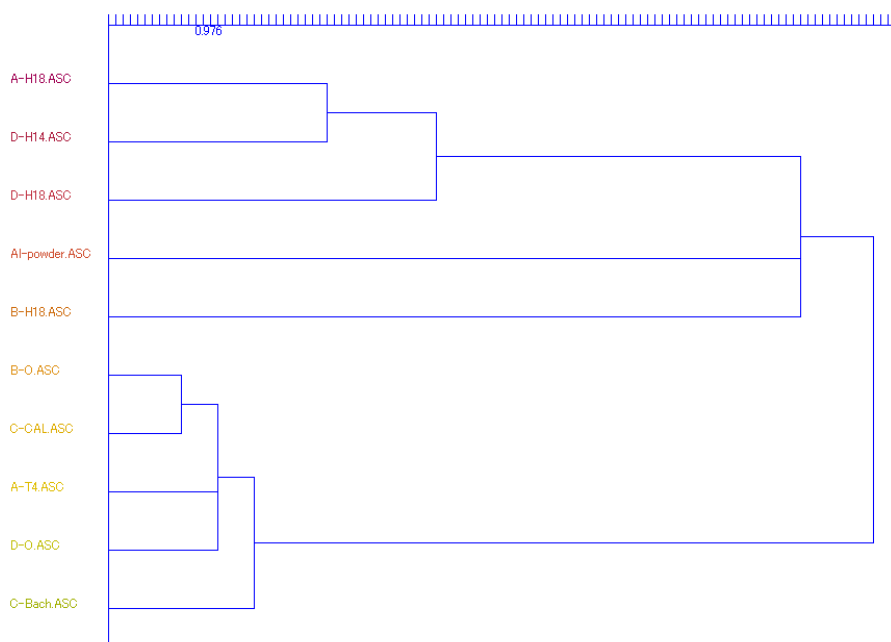
A-H18.ASC	2012/06/26 10:44	ASC ファイル	24 KB
A-T4.ASC	2012/06/26 10:44	ASC ファイル	24 KB
B-H18.ASC	2012/06/26 10:44	ASC ファイル	24 KB
D-H18.ASC	2012/06/26 10:44	ASC ファイル	24 KB
D-O.ASC	2012/06/26 10:44	ASC ファイル	24 KB
Al-powder.ASC	2012/06/26 10:44	ASC ファイル	24 KB
B-O.ASC	2012/06/26 10:44	ASC ファイル	24 KB
C-Bach.ASC	2012/06/26 10:44	ASC ファイル	24 KB
C-CAL.ASC	2012/06/26 10:44	ASC ファイル	24 KB
D-H14.ASC	2012/06/26 10:44	ASC ファイル	24 KB
Random-plate.ASC	2012/06/26 10:44	ASC ファイル	23 KB

## 多重記録で表現すると

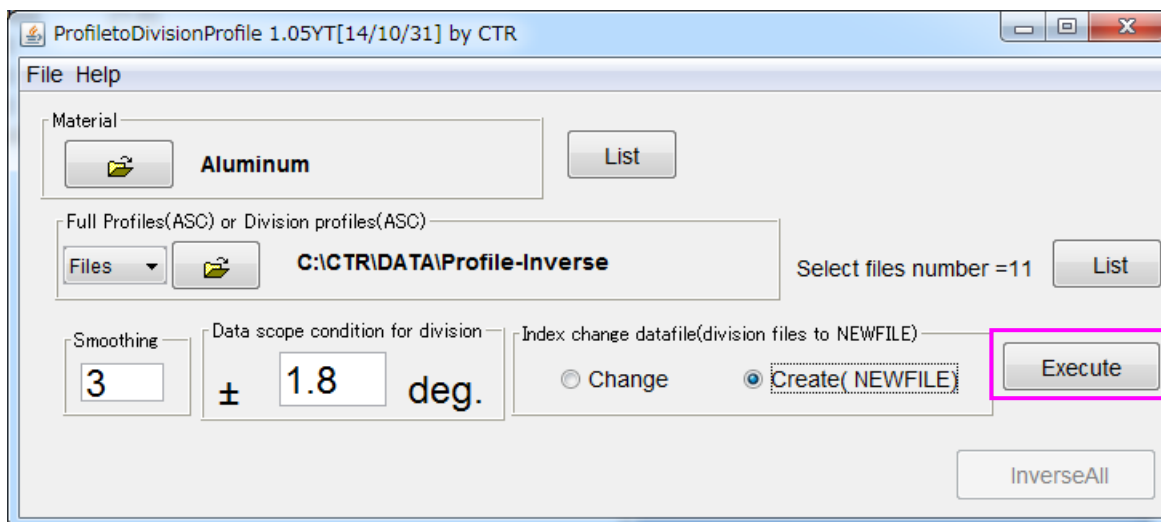


配向している事がわかります。

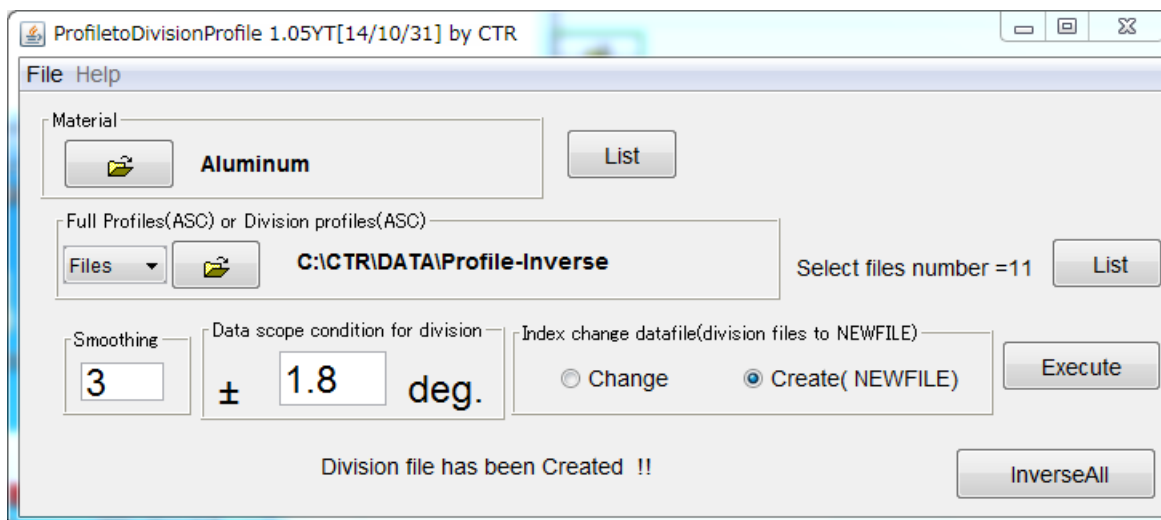
プロファイルを相互に相関係数を計算して `sort` するとデンドログラムで表示出来ます。(Cluster)



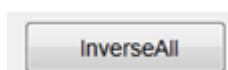
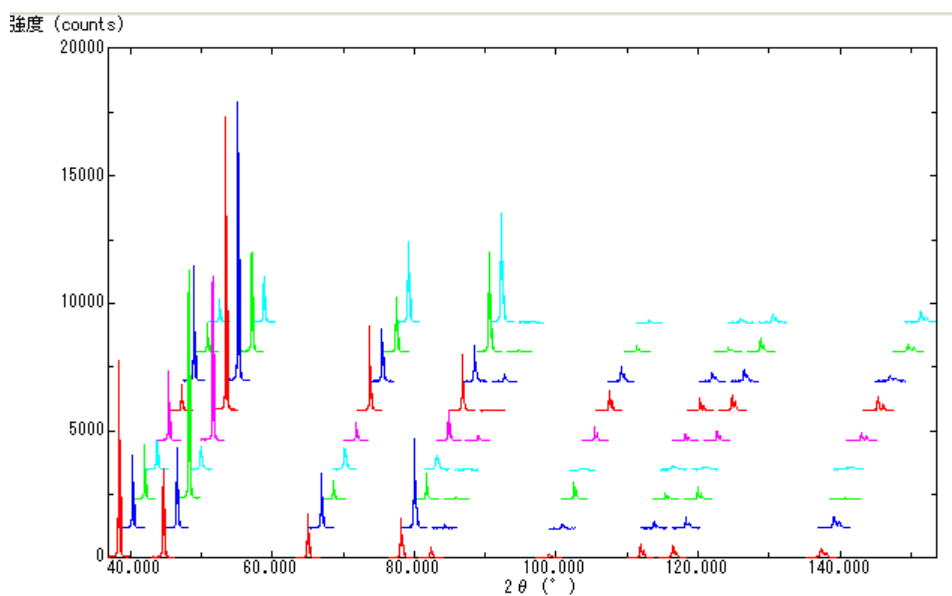
逆極点を計算するには、指数付き分割データに変換する事になります。(ProfiletoDivisionProfile))



上記 1 1 個のアルミニウムデータを Material で示すデータを用いて、  
指数付き分割データに変換し、3 点の移動平均を行い C S データでファイルを作成します。

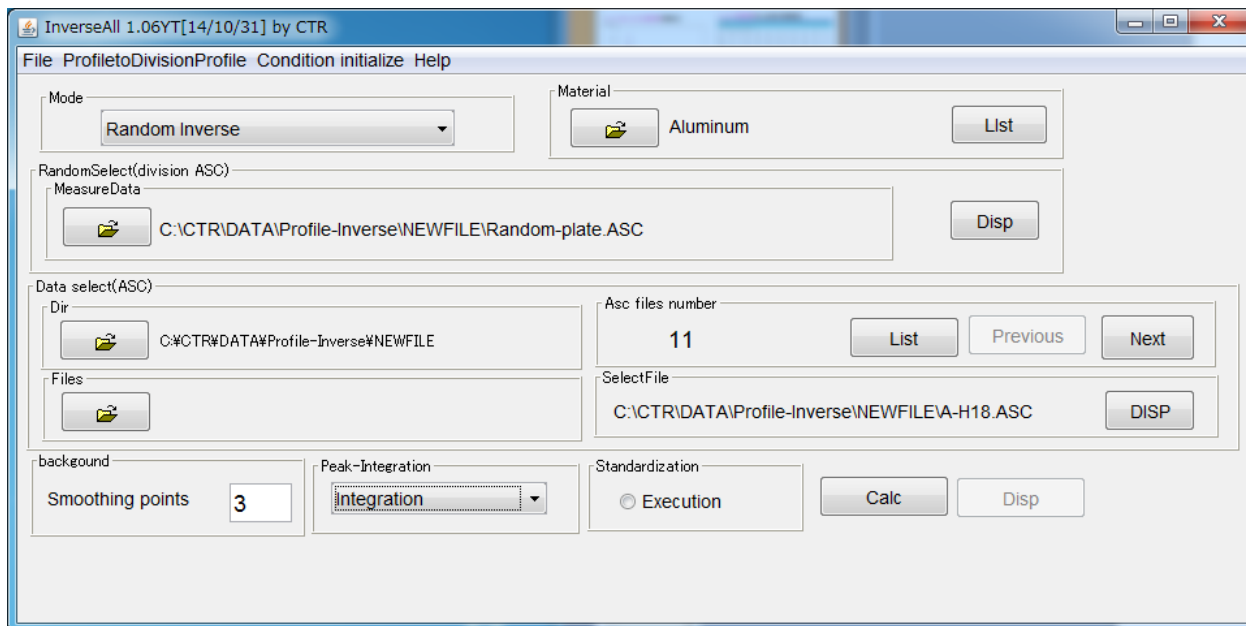


指数付き分割データの多重記録、



で逆極点の計算を行います。

# 逆極点計算プログラム (InverseAll)



random試料を用い、両端3点でバックグラウンド強度を計算し、積分強度で逆極点の計算を行う。

Randommode BGsmoints=3 Integration

	[111]	[200]	[220]	[311]	[222]	[400]	[331]	[420]	[422]
A-H18	0.575	1.409	1.914	3.413	0.375	1.42	0.584	1.136	2.018
A-T4	0.379	3.562	0.559	0.74	0.296	6.933	0.462	0.835	0.093
Al-powder	1.643	1.682	1.668	1.696	1.658	2.586	1.607	1.463	1.79
B-H18	0.293	0.654	1.268	1.065	0.345	0.538	0.693	0.748	0.872
B-O	0.474	2.519	0.571	0.87	0.577	5.098	0.495	0.782	0.824
C-Bach	0.161	4.836	2.509	1.737	0.151	8.229	0.861	1.438	1.521
C-CAL	0.851	5.058	1.84	1.38	0.839	8.156	1.036	1.541	0.942
D-H14	0.222	1.85	1.895	3.798	0.064	2.749	0.527	1.613	1.108
D-H18	0.21	0.907	3.033	4.515	0.062	0.995	0.42	0.96	1.869
D-O	0.046	8.341	1.278	1.656	0.204	14.521	0.475	1.289	1.035
Random-plate		1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0

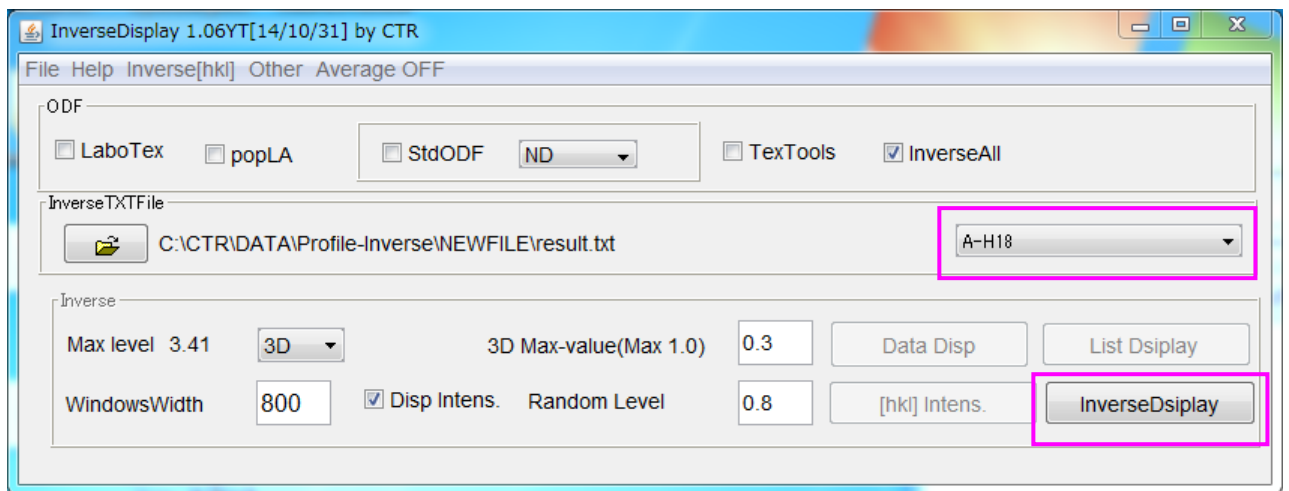
Excelで読み込む

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J
1	Randommode BGsmoints=3 Integration									
2		[111]	[200]	[220]	[311]	[222]	[400]	[331]	[420]	[422]
3	A-H18	0.575	1.409	1.914	3.413	0.375	1.42	0.584	1.136	2.018
4	A-T4	0.379	3.562	0.559	0.74	0.296	6.933	0.462	0.835	0.093
5	Al-powder	1.643	1.682	1.668	1.696	1.658	2.586	1.607	1.463	1.79
6	B-H18	0.293	0.654	1.268	1.065	0.345	0.538	0.693	0.748	0.872
7	B-O	0.474	2.519	0.571	0.87	0.577	5.098	0.495	0.782	0.824
8	C-Bach	0.161	4.836	2.509	1.737	0.151	8.229	0.861	1.438	1.521
9	C-CAL	0.851	5.058	1.84	1.38	0.839	8.156	1.036	1.541	0.942
10	D-H14	0.222	1.85	1.895	3.798	0.064	2.749	0.527	1.613	1.108
11	D-H18	0.21	0.907	3.033	4.515	0.062	0.995	0.42	0.96	1.869
12	D-O	0.046	8.341	1.278	1.656	0.204	14.521	0.475	1.289	1.035
13	Random-pli	1	1	1	1	1	1	1	1	1

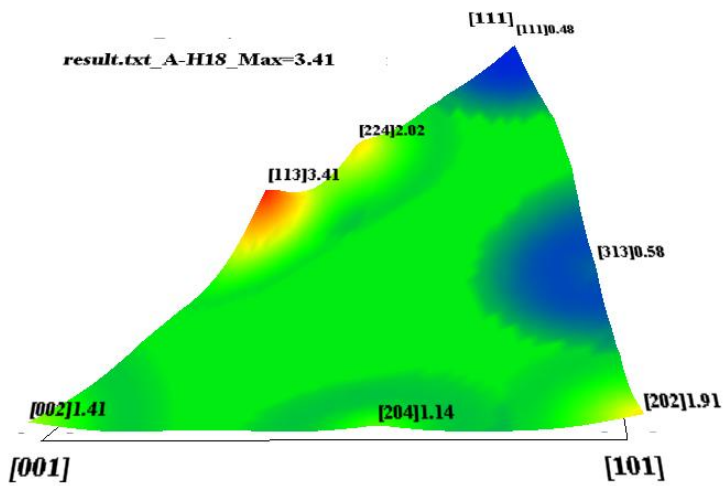
各種加工が可能になります。



## 逆極点図の表示



上記処理結果 Result.txt ファイルを読み、表示するファイルを選択し、InverseDisplay 3D表示で表示



2D表示

