

Br u k e r 社データとCTRパッケージの関係

Br u k e r 社極点図データでは $\beta=0$ は TD 方向である事は重要である。

2012年12月05日

HelperTex Office

odftex@ybb.ne.jp

概要

CTRパッケージはRIGAKU向けに作成されているが、他社データも簡単に取り込む事が可能です。Bruker社のデータに関し、通常の極点測定データや、Multex関係のデータが扱えるようになりました。他のデータでも、Import, Exportが簡単に対応可能です。

連絡頂ければ、体験CD-ROMを提供し、ODF導入のアドバイスをいたします。

対応フォーマット

測定データ(拡張子は . U x d)

```
-----
FILEVERSION=2↓
SAMPLE='Zr'↓
SITE='Japan'↓
USER='Administrator'↓
GONIOMETER_CODE=3348↓
; D8 Theta/2Theta; Special↓
SAMPLE_CHANGER_CODE=0↓
ATTACHMENTS_CODE=0↓
GONIOMETER_RADIUS=300.000000↓
FIXED_DIVSLIT=0.000000↓
FIXED_SAMPLESLIT=0.000000↓
SCATTER_SLITS='N'↓
FIXED_DETSLIT=0.000000↓
MONOCHROMATOR=0↓
; None↓
THIN_FILM='N'↓
BETA_FILTER='N'↓
FIXED_ANTISLIT=1.000000↓
ANALYZER_CODE=0↓
; None↓
DATE_MEASURED='07-Oct-2012 13:10:10'↓
WL_UNIT='A'↓
WL1=1.540600↓
WL2=1.544390↓
WL3=1.392220↓
WLRATIO=0.500000↓

; (Data for Range number 1)↓
DRIVE='PHI'↓
STEPTIME=1.999970↓
STEP_SIZE=5.000000↓
STEPMODE='C'↓
START=0.000000↓
THETA=16.070000↓
2THETA=32.139999↓
KHI=0.000000↓
PHI=0.000000↓
X=0.000000↓
Y=0.000000↓
Z=0.250000↓
DIVERGENCE=0.200000↓
ANTISCATTER=2.991000↓
DETECTOR=1↓
; S.C.↓
HV=771.000000↓
GAIN=80.000000↓
LLD=0.600000↓
ULD=1.738940↓
DETECTORSLIT='out'↓
AUX1=0.000000↓
AUX2=0.000000↓
AUX3=0.000000↓
TIME_STARTED=13.000000↓
TEMP_RATE=0.000000↓
TEMP_DELAY=0.000000↓
KV=40↓
MA=30↓

RANGE_WL=1.540600↓
3DPLANE=0↓
COUNTS↓
489      503      506      476      479      484      449      442
495      461↓
500      483      465      516      532      498      522      551
540      589↓
562      547      537      554      523      513      529      523
555      530↓
521      | 546      502      505      491      521      566      529
543      544↓
548      550      557      565      558      561      617      602
555      577↓
532      558      530      602      627      581      574      561
574      586↓
557      577      543      505      548      501      518      529
525      503↓
502      502↓

; (Data for Range number 2)↓
DRIVE='PHI'↓
STEPTIME=1.999970↓
STEP_SIZE=5.000000↓
```

複数のピークデータやバックグラウンドデータが1つのファイルに収められているデータ

Mu l T e x から出力されるデータ（拡張子は . U x d）

```
[SAMPLE= MulTex Area to *.uxd: 110.uxd↓
_WL=0=↓
_WL=1=↓
_WL=2=↓
; (Data for Range number 1)↓
_DRIVE='PHI' ↓
_STEPSIZE=5.000000↓
_START=0.000000↓
_2THETA=0.000000↓
_THETA=0.000000↓
_KHI=0.000000↓
_PHI=0.000000↓
_COUNTS↓
424 424 424 424 424 424 424 424↓
424 424 424 424 424 424 424 424↓
424 424 424 424 424 424 424 424↓
424 424 424 424 424 424 424 424↓
424 424 424 424 424 424 424 424↓
424 424 424 424 424 424 424 424↓
424 424 424 424 424 424 424 424↓
424 424 424 424 424 424 424 424↓
424 424 424 424 424 424 424 424↓
424 424 424 424 424 424 424 424↓
```

```
[_DRIVE='PHI' ↓
_STEPSIZE=5.000000↓
_START=0.000000↓
_2THETA=0.000000↓
_THETA=0.000000↓
_KHI=5.000000↓
_PHI=0.000000↓
_COUNTS↓
296 270 266 261 235 211 196 194↓
199 214 203 194 191 196 215 224↓
206 211 237 211 206 224 215 196↓
191 194 203 214 199 194 196 211↓
235 261 266 270 296 270 266 261↓
235 211 196 194 199 214 203 194↓
191 196 215 224 206 211 237 211↓
206 224 215 196 191 194 203 214↓
199 194 196 211 235 261 266 270↓
```

極密度が 1 0 0 倍されている極点図

極点図毎に別ファイル構造

対応ソフトウェア

ODFPoleFigure2

2 種類の uxd ファイルを読み込む

各種データ処理を行う。

UxdtoAsc

測定データから複数の Asc データを作成

$\beta=0$ が TD,RD に対応

測定データ強度は、そのまま、 $\beta=0$ を RD,TD に切り替える。

MakePoleFile

MulTex 出力ファイルを R I N T 形式（極点図中心の α 角度を 9 0 . 0 度）に変換

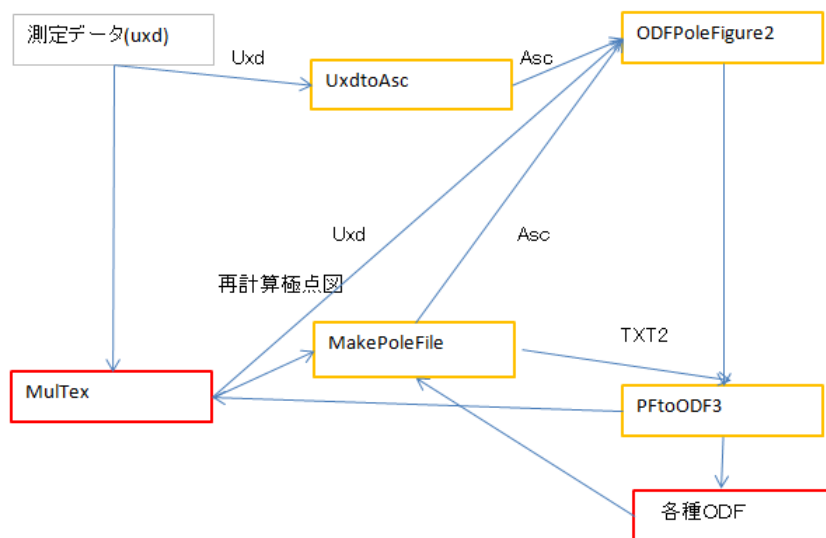
Asc,TXt2,TXT に対応

極密度が整数で書き込まれている。データを 1/100 とする。

PFtoODF3

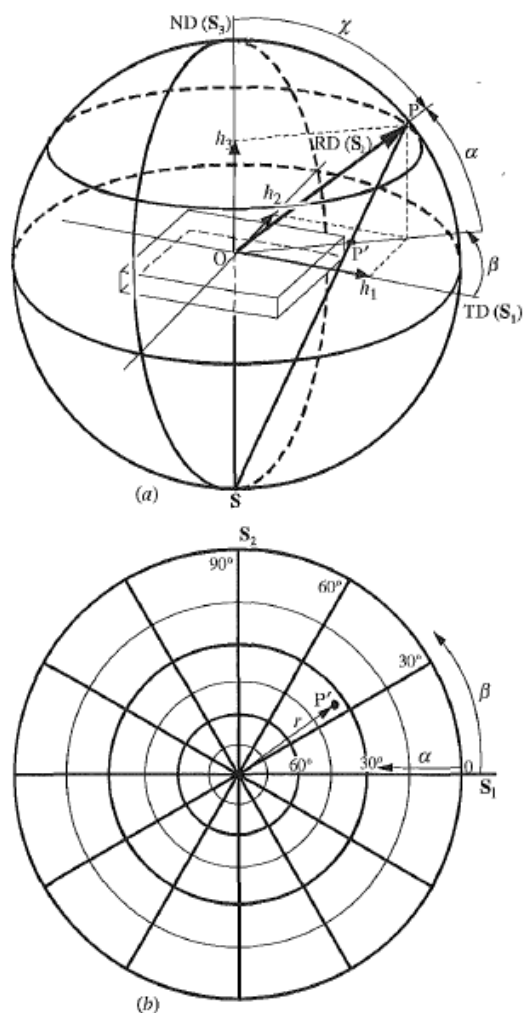
極点図補正データを MulTex 用（ $\beta=0$: TD）に変換

データの流れ



Br u k e r 社の極点図

Br u k e r 社の説明に以下の図があります。



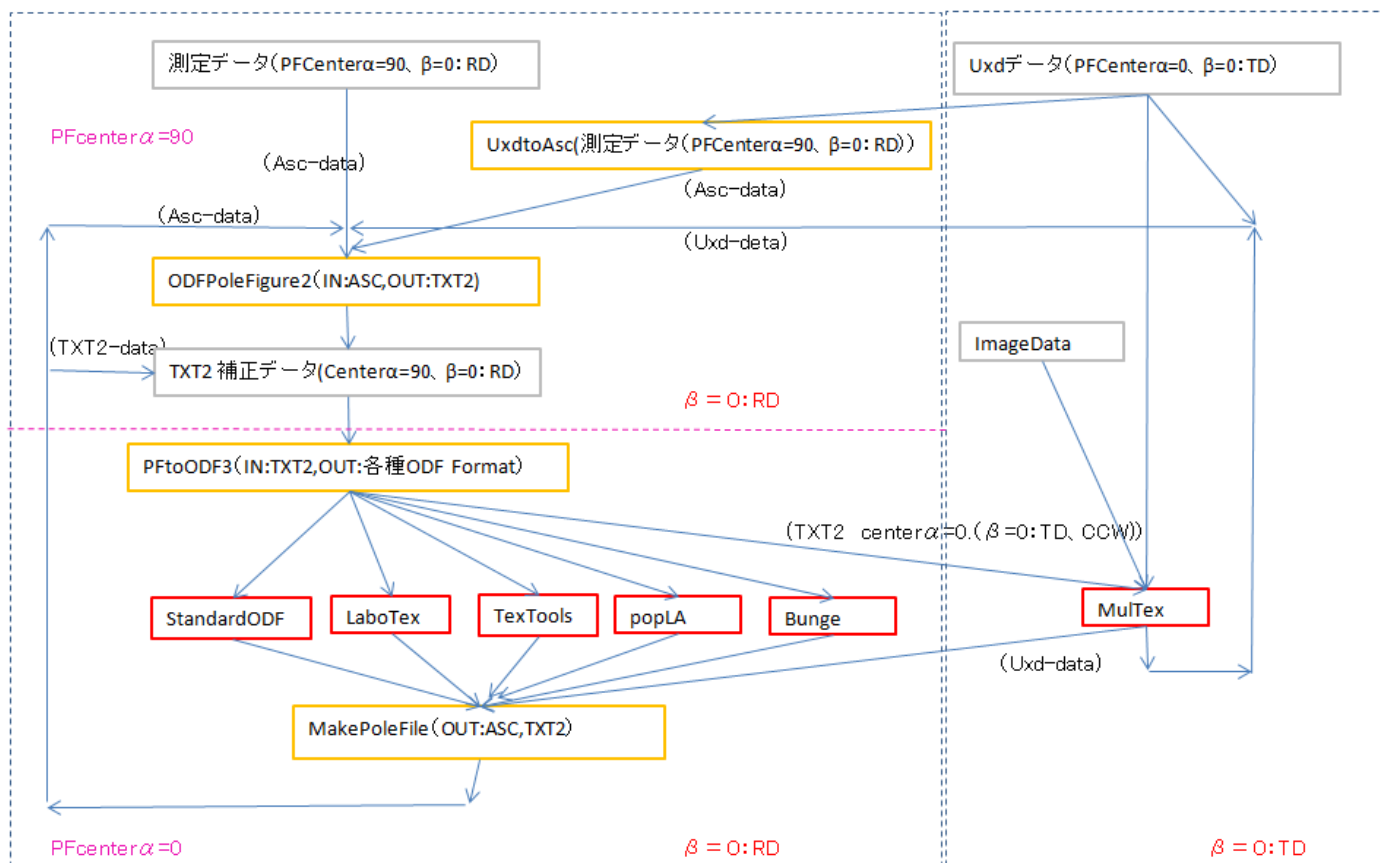
極点図の右側に TD を配置し、CCW 方向に RD があります。

$\beta = 0$ は TD 方向であることが分かります。

又、 α 軸は極点図の中心が $\alpha = 90$ となっているが、実際のデータでは中心は $\alpha = 0.0$ である。

この結果をプログラムに反映しました。

Mu1Tex と各種ODFの関係



2次元ディテクを用いた極点図データから各種ODF解析が可能になります。

Mu1Texから以下のデータをExport

名前	更新日時	種類	サイズ
110.uxd	2012/12/05 2:56	UXD ファイル	16 KB
200.uxd	2012/12/05 2:56	UXD ファイル	16 KB
211.uxd	2012/12/05 2:56	UXD ファイル	16 KB

Formatは

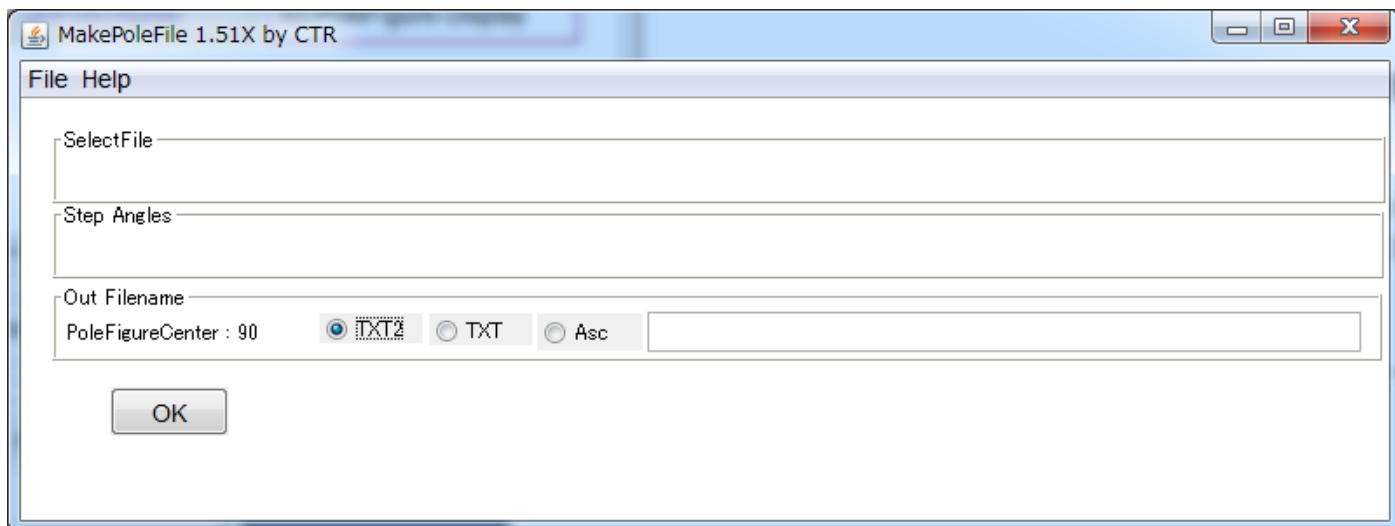
```
[SAMPLE= Mu1Tex Area to *.uxd: 110.uxd↓
_WL=0=↓
_WL=1=↓
_WL=2=↓
; (Data for Range number 1)↓
_DRIVE='PHI'↓
_STEPSIZE=5.000000↓
_START=0.000000↓
_2THETA=0.000000↓
_THETA=0.000000↓
_KHI=0.000000↓
_PHI=0.000000↓
_COUNTS↓
  424      424      424      424      424      424      424      424、
  424      424      424      424      424      424      424      424、
  424      424      424      424      424      424      424      424、
  424      424      424      424      424      424      424      424、
  424      424      424      424      424      424      424      424、
  424      424      424      424      424      424      424      424、
  424      424      424      424      424      424      424      424、
  424      424      424      424      424      424      424      424、
  424      424      424      424      424      424      424      424、
; (Data for Range number 2)↓
_DRIVE='PHI'↓
_STEPSIZE=5.000000↓
_START=0.000000↓
_2THETA=0.000000↓
_THETA=0.000000↓
_KHI=5.000000↓
_PHI=0.000000↓
_COUNTS↓
  296      270      266      261      235      211      196      194、
```

各種データ処理（吸収補正、defocus）が行われていれば、MakePoleFileソフトウェアでFormat変換を行い、PFtoODF3で各種ODFFormatに変換

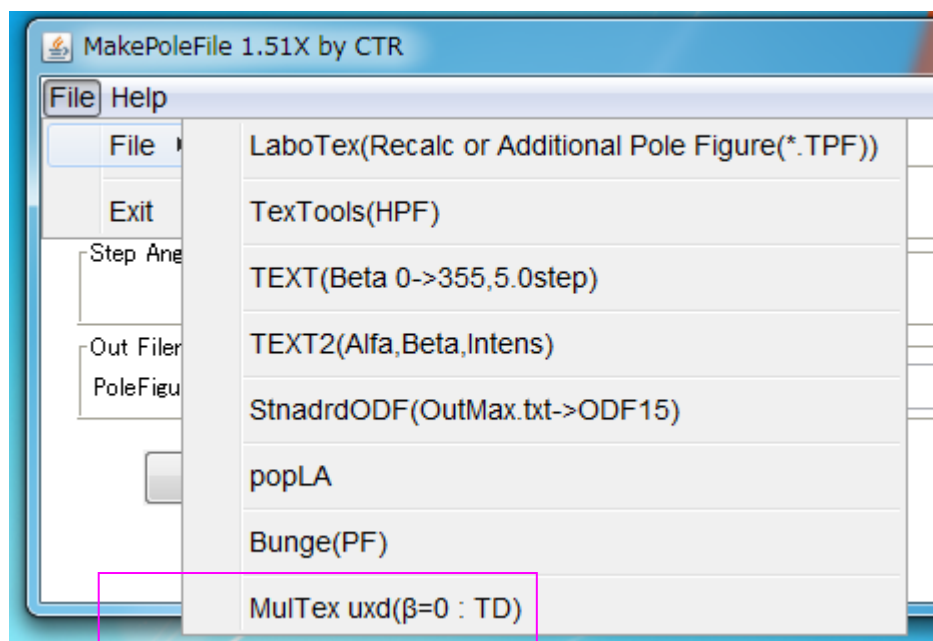
MakePoleFileソフトウェアの開始

直接 C:\¥CTR¥MakePoleFile をダブルクリック

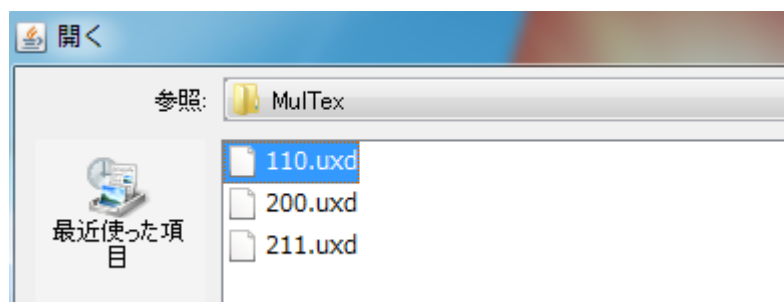
ODFPoleFigure2 ソフトウェア→Toolkit→ODFAfterTools→MakePoleFile をクリック

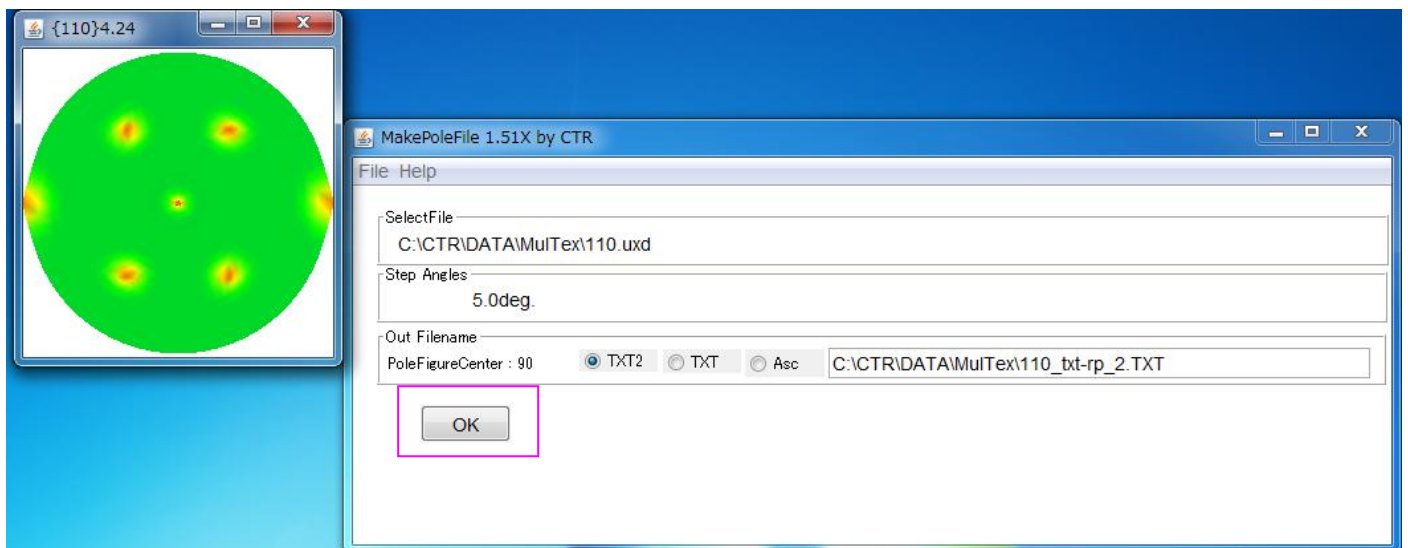


File-File-MulTex uxd($\beta=0$:TD)を選択

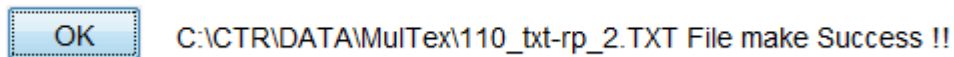


変換するファイルを指定する。





ファイル名を変更し、TXT2 を選択して OK で TXT2（極点図の中心 $\alpha = 0$ 、 $\beta = 0$: RD) のファイル作成



同様に他のファイルも変換する。

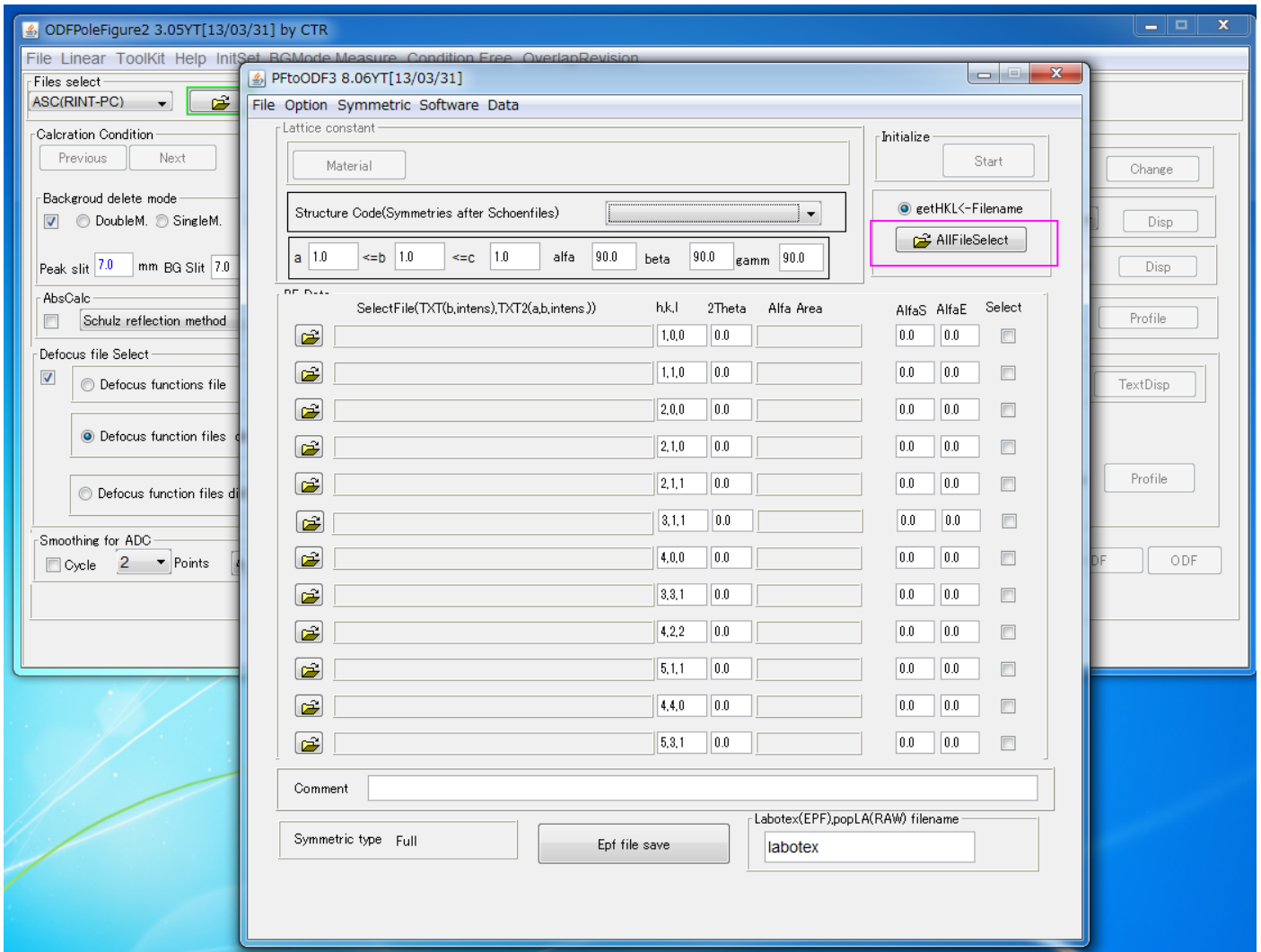
名前	更新日時	種類	サイズ
110.uxd	2012/12/05 2:56	UXD ファイル	16 KB
200.uxd	2012/12/05 2:56	UXD ファイル	16 KB
211.uxd	2012/12/05 2:56	UXD ファイル	16 KB
110_txt-rp_2	2012/12/14 5:25	テキスト文書	22 KB
200_txt-rp_2	2012/12/14 5:27	テキスト文書	22 KB
211_txt-rp_2	2012/12/14 5:27	テキスト文書	22 KB

変換された TXT2 データを各種 ODF Format に変換は、PF to ODF 3 ソフトウェアで

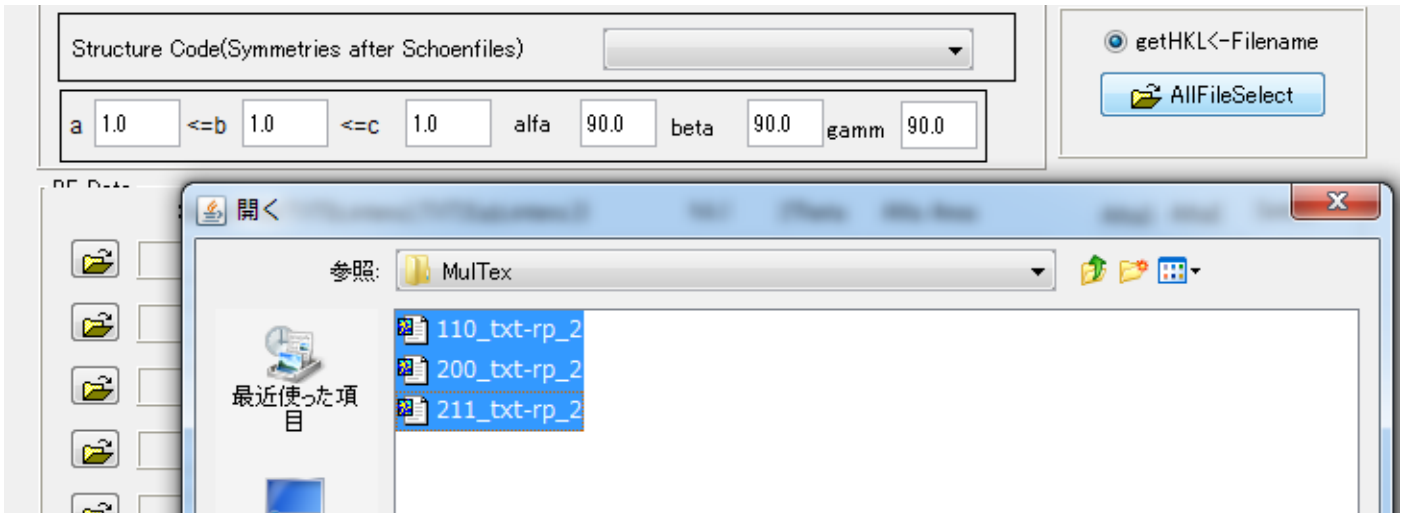
PF to ODF ソフトウェアの開始

直接 C:\CTR\PFtoODF3 をダブルクリック

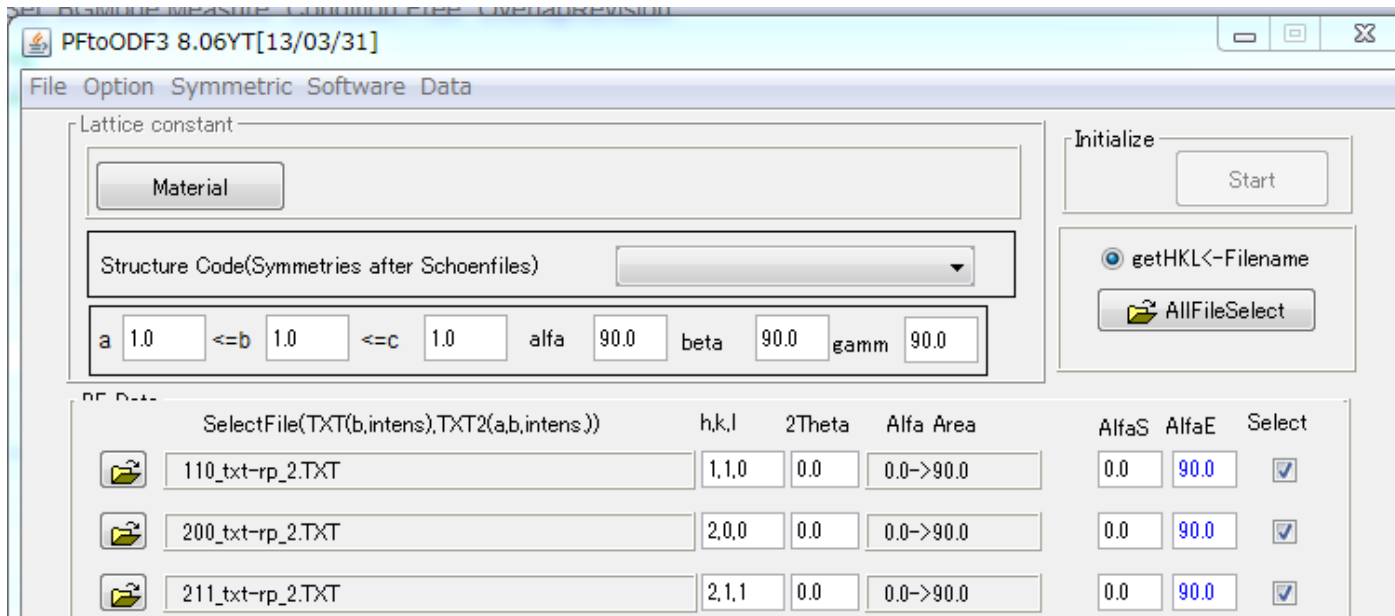
ODFPoleFigure2 ソフトウェア -> Toolkit -> PFtoODF3 をクリック



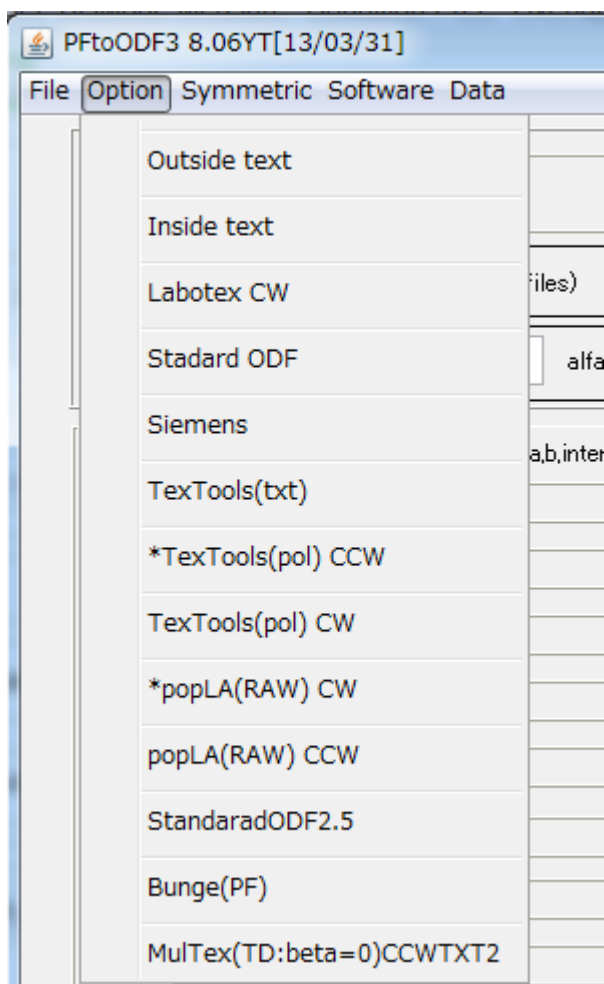
AllFileSelect で TXT2 を複数選択



選択された TXT2 ファイルと指数が表示される（指数はファイル名の先頭から作成）



各種 ODF は Option から選択する。



以上で各種 ODF Format ファイルが作成可能です。

Source : MakePoleFile/Bruker 社データと CTR パッケージの関係

PDF:DOC/MULTEX/BRUKER-CTR