R I N T - P C システムの測定データをC T R で解析

(SmartLabデータも共通)

2020年09月09日 HelperTex Office 1. 概要

RINT-PCシステムはWindowsで測定データはバイナリーで登録されるが、 ASCII変換を行う事と、CTRシステムで読み込む事が可能になります。

以下に、透過反射測定されたrandomデータと配向データの解析方法を説明します。 2.入力データ

r a n d o mデータ

TEST → PCDATA → random

^	名前	日付時刻	種類	サイズ	タグ
	📥 110.raw	2017/07/13 18:29	RAW ファイル	28 KB	
	📥 200.raw	2017/07/13 18:29	RAW ファイル	28 KB	
	📥 211.raw	2017/07/13 18:29	RAW ファイル	28 KB	
	📥 222.raw	2017/07/13 18:29	RAW ファイル	28 KB	

テストサンプル

TEST → PCDATA → sample

^	名前	日付時刻	種類	サイズ タグ
	📥 110.raw	2017/07/13 18:29	RAW ファイル	28 KB
	📥 200.raw	2017/07/13 18:29	RAW ファイル	28 KB
	📥 211.raw	2017/07/13 18:29	RAW ファイル	28 KB
	📥 222.raw	2017/07/13 18:29	RAW ファイル	28 KB

作業手順

- 1. RawデータをASCII変換
- 2. Random データバックグランドを削除し、defocus ファイル作成(ODFPoleFigure2)
- 3. サンプルファイルのデータ処理

SmartLabは、2項から始める

極点処理

バックグランド除去	処理を行う。
defocus補正、	反射、透過とも行う。

3. RawデータをASCII変換

R a wデータを一括マウスドラッグ&ドロップする。

(M(F) ハルブ(H) 変換実行 終了 ファイル設定 * TEST ▶ PCDATA ▶ random 次力ファイル・名 フォル方: C:¥CTR¥DATA¥TEST¥PCDATA¥randor 00. raw 211. raw 222. raw 110. raw 出力ファイル・名 フォルグ: C:¥CTR¥DATA¥TEST¥PCDATA¥randor 00. raw 211. raw 222. raw 100. ASC 211. ASC 222. ASC 110. ASC 行文字 Macintosh形式 (日付時刻 2017/07/13 18:29 2017/07/13 18:29 2017/07/13 18:29 2017/07/13 18:29	種類 RAW ファイル RAW ファイル RAW ファイル
変換実行 終了 ファイル設定 ファイル設定 浅焼形式 RINT2000 形式 入力ファイル名 フォゆ*: C:¥CTR¥DATA¥TEST¥PCDATA¥randor 00.raw 211.raw 222.raw 110.raw 200.raw 出力ファイル名 フォゆ*: C:¥CTR¥DATA¥TEST¥PCDATA¥randor 00.ASC 211.ASC 222.ASC 110.ASC 222.raw 行文字 Macintosh形式 (日付時刻 2017/07/13 18:29 2017/07/13 18:29 2017/07/13 18:29 2017/07/13 18:29	種類 RAW ファイル RAW ファイル RAW ファイル
独形式 RINT2000 形式 ▼ 入力ファイル名 フォルダ: C:¥CTR¥DATA¥TEST¥PCDATA¥randor 00.raw 211.raw 222.raw 110.raw 出力ファイル名 フォルダ: C:¥CTR¥DATA¥TEST¥PCDATA¥randor 00.ASC 211.ASC 222.ASC 110.ASC 行文字 Macintosh形式 (<cr>) ▼</cr>	日付時刻 2017/07/13 18:29 2017/07/13 18:29 2017/07/13 18:29 2017/07/13 18:29	種類 RAW ファイル RAW ファイル RAW ファイル
 入力ファイル名 フォルダ: C:¥CTR¥DATA¥TEST¥PCDATA¥randor 00.raw 211.raw 222.raw 110.raw 出力ファイル名 フォルダ: C:¥CTR¥DATA¥TEST¥PCDATA¥randor 200.raw 200.raw 211.raw 211.raw 222.raw 	2017/07/13 18:29 2017/07/13 18:29 2017/07/13 18:29 2017/07/13 18:29	RAW ファイル RAW ファイル RAW ファイル
00.raw 211.raw 222.raw 110.raw 出力ファイル名 7州坊: C:¥CTR¥DATA¥TEST¥PCDATA¥randor 00.ASC 211.ASC 222.ASC 110.ASC 行文字 Macintosh形式 (<cr>) マ</cr>	2017/07/13 18:29 2017/07/13 18:29 2017/07/13 18:29	RAW ファイル RAW ファイル
出力ファイル名 7州ŷ: C:¥CTR¥DATA¥TEST¥PCDATA¥randor 00.ASC 211.ASC 222.ASC 110.ASC 行文字 Macintosh形式 (<cr>) ▼</cr>	2017/07/13 18:29 2017/07/13 18:29	RAW ファイル
00.ASC 211.ASC 222.ASC 110.ASC 行文字 Macintosh形式 (<cr>) ▼</cr>	2017/07/13 18:29	
行文字 Macintosh形式 (<cr>) ▼</cr>		RAW ファイル

RINT2000形式に変換実行

 $\mathsf{TEST} \ \flat \ \mathsf{PCDATA} \ \flat \ \mathsf{random}$

^	名前	日付時刻	種類	サイズ	タグ
	🛋 110.raw	2017/07/13 18:29	RAW ファイル	28 KB	
	🛃 200.raw	2017/07/13 18:29	RAW ファイル	28 KB	
	🛃 211.raw	2017/07/13 18:29	RAW ファイル	28 KB	
	222.raw	2017/07/13 18:29	RAW ファイル	28 KB	
	🖫 200.ASC	2018/07/14 9:24	RINT200077+-	21 KB	
	🖫 211.ASC	2018/07/14 9:24	RINT200077+-	21 KB	
	🖳 222.ASC	2018/07/14 9:24	RINT200077+-	20 KB	
	🖳 110.ASC	2018/07/14 9:24	RINT200077+-	22 KB	

変換結果

s a m p l e データもASCに変換

TEST → PCDATA → sample

名前	日付時刻	種類	サイズタ
📥 110.raw	2017/07/13 18:29	RAW ファイル	28 KB
📥 200.raw	2017/07/13 18:29	RAW ファイル	28 KB
👗 211.raw	2017/07/13 18:29	RAW ファイル	28 KB
📥 222.raw	2017/07/13 18:29	RAW ファイル	28 KB
🖫 211.ASC	2018/07/14 9:25	RINT2000774-	21 KB
🖳 222.ASC	2018/07/14 9:25	RINT200077+-	20 KB
🖳 110.ASC	2018/07/14 9:25	RINT200077+-	21 KB
🖳 200.ASC	2018/07/14 9:25	RINT200077+-	21 KB

以降SUS試料を使って説明します。

4. Random データバックグランドを削除し、defocus ファイル作成(ODFPoleFigure1.5) 入力データを ASC(RINTPC)とする。

M	
File Linear(absolute)Con	tour ToolKit
Files select	
ASC(RINT-HP)	🖻
ASC(RINT-PC)	
ASC(RINT-HP)	
ASC(RAPID)	

randomファイルを全て選択し、読み込む



バックグランド削除を行う



(C:) > CTR > TEMP > random

<u>ວ</u> , ເ

^	□ 名前	更新日時 个	種類	
	🖳 110.ASC	2017/12/05 14:04	RINT200077+-	
	📭 200.ASC	2017/12/05 14:04	RINT2000774-	
	0 211.ASC	2017/12/05 14:04	RINT200077*-	
	🕰 310.ASC	2017/12/05 14:04	RINT200077+-	
ſ	🐏 110_chB2_2.TXT	2020/09/09 12:41	テキスト文書	
	🐏 200_chB2_2.TXT	2020/09/09 12:41	テキスト文書	
	🐏 211_chB2_2.TXT	2020/09/09 12:41	テキスト文書	
	🐏 310_chB2_2.TXT	2020/09/09 12:41	テキスト文書	
L	SLITTTHETAFILE	2020/09/09 12:41	ファイル	

データの登録

□ Ref □ Trans Schulz reflection method ∨ Change Absorption coefficien 303.	🍰 開く	
Defocus file Select Transmission defcous HKL+T	ファイルの場所(エ):	📑 random
Image: Simple state in the	武庫 武庫 武庫 北 武庫 江 武庫 北 武庫 北 武庫 北 武庫 北 武庫 北 武庫 北 武庫 江 江 江 江 江	 110_chB2_2.TXT 200_chB2_2.TXT 211_chB2_2.TXT 310_chB2_2.TXT

登録された画面



Calcデータ処理



) > CTR > TEMP > sample

•	□ 名前	更新日時	種類	
	📭 110.ASC	2017/12/05 14:04	RINT2000774-	
	🛄 200.ASC	2017/12/05 14:04	RINT2000774-	
	🖳 211.ASC	2017/12/05 14:04	RINT2000774-	
	🖳 310.ASC	2017/12/05 14:04	RINT200077+-	
	🐏 110_chB2D_2.TXT	2020/09/09 12:46	テキスト文書	
	🕘 200_chB2D_2.TXT	2020/09/09 12:46	テキスト文書	
	🐏 211_chB2D_2.TXT	2020/09/09 12:46	テキスト文書	
	📳 310_chB2D_2.TXT	2020/09/09 12:46	テキスト文書	

入力極点図と再計算極点図から計算される R p %



このRp%を最小化する。

A ODEData Revenue 1 5 1 557(7) (06/31) hu (TD		_
III DUPPOLEIQUELS ISSI (27/093) BY CIN	~	
File Linear(3D) Toolkit Help InitSet Rp% Minumum Ali background Transmissiondilinds=30.0		
ASC(RINT-PC) V II0ASC 200ASC 211ASC 310ASC		
Calcration Condition		
Previous Next C#CTR#TEMP#sample#110.ASC	Arithmetic mean 🗸 Disp	
Backgroud delete mode	rporation 🗸 🗌 Full 🛛 Disp	
AbsCalc Ref Trans Schulz reflection method	20.12 deg. (i) 1/Kt Profile	
Cefocus file Select Transmission defcous HKL+T	·]	
🗹 😰 🗋 Normalization Polynomialdegr 0 🗋 TencklhoffFitting TXT2 C*CTR*TEMP¥random*defocus*DEFOCUS_NOTNORM_F.TXT Tex	ctDisp 💿 1/Ra Profile 🗸	
Smoothing(for ADC) Cycles 2 v Weight 15 v Afterconnection Disp OTR Connect Average Search minimum EqualAngleRpM(Cubic only)	Outhiles O Ras O Asc I TXT2 O TXT	
ValueODF-B ValuODF-A Cancal	Calc Corriect ODF File	
	Select crystal : Cubic 20/09/09	
	CTRHome : C:	

Defocus file Select Transmission defcous HKL+T	
Image: Second	Disp 💿 1/Ra
Smoothing(for ADC)	Uuthiles
Cycles 2 v Weight 15 v Afterconnection Disp CTR Connect	◯ Ras ◯ As
ValueODF-B ValuODF-A Cancel	Calc Co
Filemake oursessell	Select crystal :

最適化前の Rp%と最適化後の Rp%を確認する

5



ValuODF-A



Rp%が±1.5%をオーバしているが、平均値11.3%から10.0%に改善されている

StandardODF解析の入力データ作成

File Option Symm	etric Software Data	Help						
Lattice constant -						Initialize		
Material	A-Iron-Measure-Integ	gralData.txt					St	art
Structure Code(Symmetries after Schoenf	iles)	7 - 0 (cubic)		~	● get	HKL<-F	ilenam
a 1.0 <=b	1.0 <=c 1.0	alpha 90.0	beta 9	0.0 ga	mm 90.0	~	AllFileS	ielect
PF Data					L			
Selec	tFile(TXT(b,intens),TXT2(a	a,b,intens.))	h,k,l	2Theta	Alpha scope	AlphaS A	IphaE	Select
😅 110_ch8	32DS_2.TXT		1,1,0	20.12	0.0->75.0	0.0	75.0	\checkmark
😂 200_ch8	32DS_2.TXT		2,0,0	28.62	0.0->75.0	0.0	75.0	\checkmark
🚅 211_ch	32DS_2.TXT		2,1,1	35.26	0.0->75.0	0.0	75.0	\checkmark
💕 310_chł	32DS_2.TXT		3,1,0	46.04	0.0->75.0	0.0	75.0	\checkmark
			2,1,1	0.0		0.0	0.0	
2			3,1,1	0.0		0.0	0.0	
2			4,0,0	0.0		0.0	0.0	
			3,3,1	0.0		0.0	0.0	
2			4,2,2	0.0		0.0	0.0	
2			5,1,1	0.0		0.0	0.0	
			5,2,1	0.0		0.0	0.0	
			5,3,1	0.0		0.0	0.0	
Comment 11) chB2DS 2.TXT 200 chB2	DS_2.TXT 211 ch	5,3,1 B2DS_2.TXT_3	0.0	.TXT	0.0	0.0	
	, _Centerl	Data —		_	Labotex(E	PF),popLA(RAW) fi	lenam
Symmetric type	Full 🔘 Ave	erage	Epf file	save	labote	x		

M PFtoODF3 8.47T[21/08/31] by CTR						
File	Option	Symmetric	Software	Data	Help	
	Ou	itside text(V	ector) CC\	N	rralData tvt	
	Outside CSV(Vector) CCW Inside text CCW *Labotex(EPF) CW					
				iles)		
			alpha [
	Sta	adard ODF	CCW		>	
					L :	

S t a n d a r d O D F を選択

常にStandardODFに設定



StandardODF入力データ作成



CTR > TEMP > sample > StandardODF

│ 名前 ^	更新日時	種類
🐏 110_chB2DS_2StdODF.TXT	2020/09/09 12:59	テキスト文書
🐏 200_chB2DS_2StdODF.TXT	2020/09/09 12:59	テキスト文書
🐏 211_chB2DS_2StdODF.TXT	2020/09/09 12:59	テキスト文書
🐏 310_chB2DS_2StdODF.TXT	2020/09/09 12:59	テキスト文書

S t a n d a r d O D F で解析

Ŀ	🗱 ODF Calculation			:	×
	□ 極点図データ			Constant ODE	
2	面指数 重み	ファイル名(フルバス)		Stanaara ODF	
1	▼ (100) 1	C:¥CTR¥TEMP¥sample¥StandardODF¥2	参照	for Windows XP/Me/2000/98/SE/98/ NT4.0/95 Ver.2.4 解析法について	1
n	✓ (110) 1	C:¥CTR¥TEMP¥sample¥StandardODF¥1	参照		-
	(111)		参照		1
	(210) 1		参照	展開次数 22	
	✓ (211) 1	C:¥CTR¥TEMP¥sample¥StandardODF¥2	参照	ゼロ密度領域のしきい値 0.3	
	(221) 1		参照	+-w C Phi1版面	
	(310) 1	C:¥CTR¥TEMP¥sample¥StandardODF¥3	参照	表示断面 ● Phi2断面	
	(311) 1		参照		
	(321) 1		参照	- 再計算極点図	
	(331) 1		参照	1 100 💌 2 110 💌	
	(411) 1		参照		
E	(511)		参照		
	∞ max= 75	$\Delta \alpha = 5$ $\Delta \beta = 5$			_
	β角のタイプ ●	β =0°, 5°, 10°, ·····, 350°, 355°		1/4種点図 C係数 偶数項 奇数項	
NAME OF	С	β = 2.5°, 7.5°, 12.5°, ·····, 357.5°		0% 100	%
	- 集合組織変換				
	○しない ○ F	RD極点図 → ND-ODF C TD極点図 → N	D-ODF	実行(G) 終了(E)	
				1	



StandardODF解析結果の退避

M ODFPolefigure1.5 1.65T[21/08/31] by CTR

Cycles

File Linear(3D) ToolKit Help InitSet Rp% Minumum All background Trans Files select PFtoODF3 ASC(RINT-PC) -Calcration Conditio SoftWare Previous ImageTools Backgroud delete PopLATools 🗹 🔿 DoubleMo 🔵 High Mode 💿 Nothing 🛛 Min ODFAfterTools AbsCalc -🗌 Ref 🔄 Tra PoleOrientationTools Change Absorption (Defocus file Se DataBaseTools 🗹 🖻 TencklhoffFitting D 0 FiberTools Smoothing(for A

DefecueTecle

StandardODFTools

StandardODFTools 1.04ST[21/08/31] by CTR - ×						
File Help						
Calc files ODF15 etc.	StandardODFExportInport	Export Inport				
rbinary to txt ODF15	ODF15toTXT	ODF15 TXT format				
TXT2 TXT2Format files	MakeODF13	ODF13,OutMax.TXT				
StandardODFFormat	EvncoeftoODF	ODF,Pollefigure,Inverse				
Export files StandardODFExortfiles	StandardODFDsiplay	RecalcPoleFigure,ODF,Inverse				
		near(3D) TOOIKIT HEID INITSET RD				

nection Disp

Normaliz

CTR

🔏 StandardODFDisplay 1.04ST[21/08/31] by CTR – 🗆 🗙							
File Help							
StandardODFExportInport							
Select StandardODF Outmax							
ValueODFVF	GPPoleDisplay	GPInverseDisplay					
ODFDisplay2	GPODFDisplay	hkluvwlistDisplay					
hkllistDisplay							

データ退避

StandardODFExportInport 1.03ST[21/08/31] by CTR	- 🗆 × 🚃	
File Help		
_ work		
Export(ODF>Target) O Inport(()) 開く	
StandardODF Dir	、 ファイルの場所(I): 📑 sample	
C:\ODF	StandardODF	
Target	最近使った項	
CIR¥TEMP¥sample¥StandardODF		
	デフカトップ	

	<u>#</u> _	StandardODFExportInport 1.03ST[21/08/31] by CTR – 🗆 🗙				
	File	e Help				
	[work				
		Export(ODF>Target) O Inport(Target>ODF)				
gl	[StandardODF Dir				
		C:\ODF				
ılı ils ali	Target C¥CTR¥TEMP¥sample¥StandardODF					
/e		execute StandardODF PFDATA delete Copy Outmax Disp				
		Comment				
l	_					

execute ✓ StandardODF PFDATA delete	Сору	Outmax Disp
Comment Copy 13 files		

> CTR > TEMP > sample > StandardODF

□ 名前	更新日時	種類
📳 110_chB2DS_2StdODF.TXT	2020/09/09 12:59	テキスト文書
📳 200_chB2DS_2StdODF.TXT	2020/09/09 12:59	テキスト文書
211_chB2DS_2StdODF.TXT	2020/09/09 12:59	テキスト文書
310_chB2DS_2StdODF.TXT	2020/09/09 12:59	テキスト文書
🖳 Data10.txt	2020/09/09 13:07	テキスト文書
🖳 Dtcubin1.txt	2020/09/09 13:07	テキスト文書
EVNCOEF	2020/09/09 13:07	ファイル
CDDCOEF	2020/09/09 13:07	ファイル
CDF13	2020/09/09 13:07	ファイル
ODF14	2020/09/09 13:07	ファイル
ODF15	2020/09/09 13:07	ファイル
DDF15.TXT	2020/09/09 13:07	テキスト文書
CDF16	2020/09/09 13:07	ファイル
📳 Outmax.txt 📃 🥄	2020/09/09 13:07	テキスト文書
	2020/09/09 13:07	テキスト文書
	2020/09/09 13:07	テキスト文書
📳 ΟυΤΡυΤ3.ΤΧΤ	2020/09/09 13:07	テキスト文書
に a n a d a r d ODF入力ファイル		
	\backslash	

StandardODF解析結果のExportファイル

StandardODFDisplay 1.04ST[21/08/31] by (_		\times	-	
File Help	開く				
StandardODFExportInport	ファイルの場所(I):	📑 Standard	ODF		
Select StandardODF Outmax	@=	🖳 Outmax.t	xt		
	■ 最近使った項…				
ValueODFVF GPPole	デスクトップ				

5

プ

再計算極点図が表示されます。





 $\{310\}$ 極点図中心の値で入力データが大きく、再計算極点図は小さい、この部分はrandom 5dなので、入力データのrandom が以上に高いと考えられます。

ODF解析結果



ステップを5 dgeから1 degに変換





GPInverseDisplay GPInverseDisplay 1.35T[21/08/31] by CTR \times File Help Symmetry - Material Aluminum.TXT a 4.0494 b 4.0494 c 4.0494 α 90.0 β 90.0 γ 90.0 ODF LaboTex popLA StnadredODF TexTools TXT(b,f,l) MTEX Method -Direction max index Plane max index- Miller Nortation(3 Axis Nortation) 15 Plane 15 ⊫Inverse data select∹ C:\CTR\TEMP\sample\StandardODF\ODF16 ND List Inverse Display-Inverse max val... 2D-3D 3D Max value Window size Smooting $2D \sim$ 1 Veight 9 0.0 0.3 < 1.0 800 Cycles InverseData Peak data-Other font size Disp Font size 12 🗸 Filename 12 🗸 Base 12 🗸 Full Inverse disp Inverse data -Display Level 0 Peak serach MaxFix 10 ContourDisplay Center[001] Inverse Disp

X ... A



36Box評価

InverseCubicContourDisplay 1.17ST[21/08/31] by CTR



Calc Disp →

InverseCubicContourDisplay 1.17ST[21/08/31] by CTR







