

# R I N T - P C システムの測定データを C T R で解析

( S m a r t L a b データも共通 )

2020年08月26日

He l p e r T e x O f f i c e

## 1. 概要


R I N T-PCシステムはW i n d o w s で測定データはバイナリーで登録されるが、A S C I I 変換を行う事と、C T R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 r a n d o m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. R a wデータをA S C I I 変換
2. R a n d o m データバックグラウンドを削除し、defocus ファイル作成(ODFPoleFigure2)
3. サンプルファイルのデータ処理

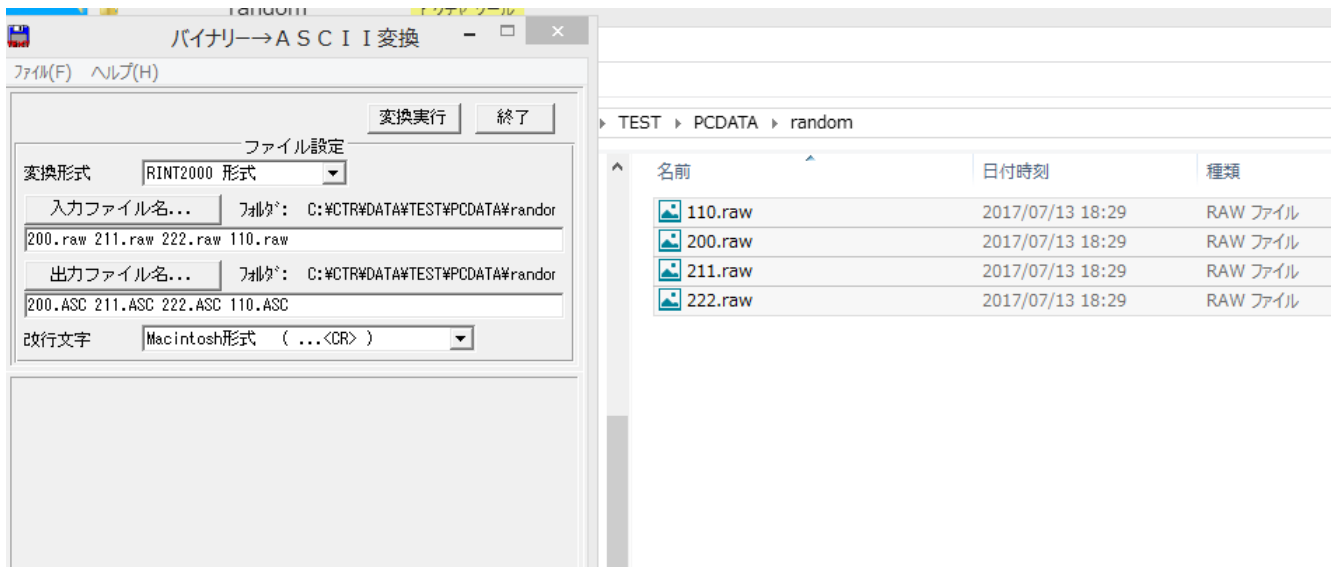
**S m a r t L a b**は、2項から始める

## 極点処理

バックグラウンド除去      処理を行う。  
d e f o c u s 補正、      反射、透過とも行う。

### 3. RawデータをASCII変換

Rawデータを一括マウสดラッグ&ドロップする。



R I N T 2 0 0 0形式に変換実行

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	
200.ASC	2018/07/14 9:24	RINT2000アスキー	21 KB	
211.ASC	2018/07/14 9:24	RINT2000アスキー	21 KB	
222.ASC	2018/07/14 9:24	RINT2000アスキー	20 KB	
110.ASC	2018/07/14 9:24	RINT2000アスキー	22 KB	

変換結果

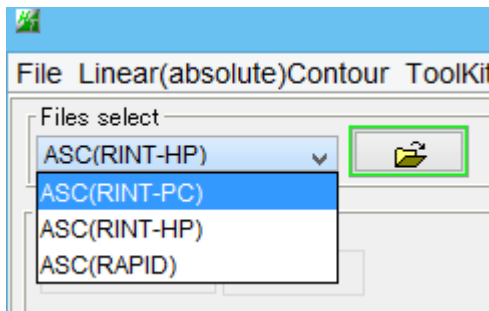
s a m p l eデータもASCに変換

TEST ▶ PCDATA ▶ sample

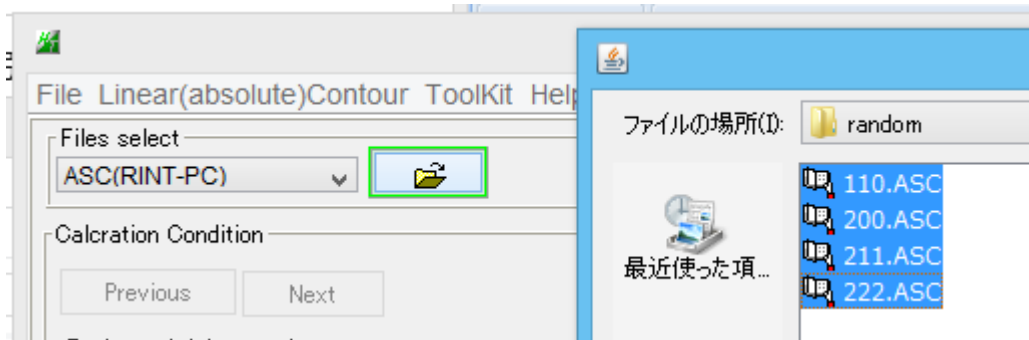
名前	日付時刻	種類	サイズ	タグ
110.raw	2017/07/13 18:29	RAW ファイル	28 KB	
200.raw	2017/07/13 18:29	RAW ファイル	28 KB	
211.raw	2017/07/13 18:29	RAW ファイル	28 KB	
222.raw	2017/07/13 18:29	RAW ファイル	28 KB	
211.ASC	2018/07/14 9:25	RINT2000アスキー	21 KB	
222.ASC	2018/07/14 9:25	RINT2000アスキー	20 KB	
110.ASC	2018/07/14 9:25	RINT2000アスキー	21 KB	
200.ASC	2018/07/14 9:25	RINT2000アスキー	21 KB	

#### 4. Random データバックグラウンドを削除し、defocus ファイル作成(ODFPoleFigure2)

入力データを ASC(RINT-PC)とする。



random ファイルを全て選択し、読み込む



## バックグラウンド削除を行う

ODFPoleFigure2 3.95T[20/10/31] by CTR

File Linear(absolute)Contour ToolKit Help InitSet BGMode Measure Condition Free OverlapRevision MinimumMode Rp% Normalization

Files select: ASC(RINT-PC) 110.ASC 200.ASC 211.ASC 222.ASC

Calculation Condition: C:\CTR\DATA\TEST\PCDATA\random#110.ASC

Background delete mode:  DoubleMode  SingleMode  LowMode  HighMode  Nothing

BG defocus: DSH1.2mm+Schulz+RSH5mm

Smoothing:  +α 3 Arithmetic mean Disp

RD:  0.0 Interpolation Full Disp

Peak slit: 7.0 mm BG Slit: 7.0 mm  PeakSlit / BGS\_ BG Scope: 80.0 deg. 90.0 deg. Set Disp  Inhibit

AbsCalc: [1,1,0] 159... [2,0,0] 235... [2,1,1] 380... [2,2,2] 300.6

RD plots: [1,1,0], [2,0,0], [2,1,1], [2,2,2]

Filemake success !! CTRHome : C: Select crystal : Cubic 20/08/26

File Name	Date	Type	Size
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
110.ASC	2018/07/14 9:24	RINT2000アスキー	22 KB
200.ASC	2018/07/14 9:24	RINT2000アスキー	21 KB
211.ASC	2018/07/14 9:24	RINT2000アスキー	21 KB
222.ASC	2018/07/14 9:24	RINT2000アスキー	20 KB
110_chB00_2.TXT	2020/08/26 7:09	テキスト文書	23 KB
200_chB00_2.TXT	2020/08/26 7:09	テキスト文書	22 KB
211_chB00_2.TXT	2020/08/26 7:09	テキスト文書	22 KB
222_chB00_2.TXT	2020/08/26 7:09	テキスト文書	22 KB
SLITTHETAFILE	2020/08/26 7:09	ファイル	1 KB

## データの登録

Defocus file Select Transmission defocus HKL+T

Defocus(1) functions file

Make defocus function files by TXT2 Files  Normalization degree of a polynomial 0  TenckhoffFitting

Defocus(3) function files folder(Calc unbackdefocus) BB185mm Limit Alfa Defocus value Free(LimitValue=0.0)

Defocus(2) function files folder(Calc backdefocus) DSH1.2mm+Schulz+RSH5mm  Search minimum EqualAngleRp%(Cubic only)

ファイルの場所(D): random

最近使った項... 110\_chB00\_2.TXT, 200\_chB00\_2.TXT, 211\_chB00\_2.TXT, 222\_chB00\_2.TXT

## 登録された画面

Defocus file Select Transmission defocus HKL+T

Defocus(1) functions file C:\CTR\DATA\TEST\PCDATA\random\defocus\DEFOCUS\_NOTNORM\_F.TXT

Make defocus function files by TXT2 Files  Normalization degree of a polynomial 0  TenckhoffFitting

Defocus(3) function files folder(Calc unbackdefocus) BB185mm Limit Alfa Defocus value Free(LimitValue=0.0)

Defocus(2) function files folder(Calc backdefocus) DSH1.2mm+Schulz+RSH5mm  Search minimum EqualAngleRp%(Cubic only)

## 5. サンプルファイルのデータ処理

### データの読み込み

The screenshot displays the ODF software interface with four circular plots at the top showing intensity distributions for different hkl values: (1,1,0), (2,0,0), (2,1,1), and (2,2,2). The main window is titled "ODFPoleFigure2 3.95T[20/10/31] by CTR". The menu bar includes File, Linear(absolute)Contour, Toolkit, Help, InitSet, BGMode, Measure, Condition, Free, OverlapRevision, MinimumMode, Rp%, and Normalization. The "Files select" section shows "ASC(RINT-PC)" and a list of files: 110.ASC, 200.ASC, 211.ASC, 222.ASC. The "Calculation Condition" section shows the path "C:\CTR\DATA\TEST\PCDATA\sample#110.ASC" and "hkl 1,1,0". The "Background delete mode" section has "LowMode" selected. The "Smoothing" section has "Arithmetic mean" selected. The "AbsCalc" section has "Schulz reflection method" selected. The "Defocus file" section has "Defocus(1) functions file" selected. The "Normalization" section has "CTR" selected. The status bar shows "Filemake success !!", "CTRHome : C:", "Select crystal : Cubic", and "20/08/26".

### Calc データ処理

The screenshot displays the ODF software interface with four circular plots at the top showing intensity distributions for different hkl values: (1,1,0), (2,0,0), (2,1,1), and (2,2,2). The main window is titled "ODFPoleFigure2 3.95T[20/10/31] by CTR". The menu bar includes File, Linear(absolute)Contour, Toolkit, Help, InitSet, BGMode, Measure, Condition, Free, OverlapRevision, MinimumMode, Rp%, and Normalization. The "Files select" section shows "ASC(RINT-PC)" and a list of files: 110.ASC, 200.ASC, 211.ASC, 222.ASC. The "Calculation Condition" section shows the path "C:\CTR\DATA\TEST\PCDATA\sample#110.ASC" and "hkl 1,1,0". The "Background delete mode" section has "LowMode" selected. The "Smoothing" section has "Arithmetic mean" selected. The "AbsCalc" section has "Schulz reflection method" selected. The "Defocus file" section has "Defocus(1) functions file" selected. The "Normalization" section has "CTR" selected. The status bar shows "Filemake success !!", "CTRHome : C:", "Select crystal : Cubic", and "20/08/26".

## データ処理されたファイル

 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
 110.ASC	2018/07/14 9:25	RINT2000アスキー	21 KB
 200.ASC	2018/07/14 9:25	RINT2000アスキー	21 KB
 211.ASC	2018/07/14 9:25	RINT2000アスキー	21 KB
 222.ASC	2018/07/14 9:25	RINT2000アスキー	20 KB
 110_chB20D1S_2.TXT	2020/08/26 7:18	テキスト文書	26 KB
 200_chB20D1S_2.TXT	2020/08/26 7:18	テキスト文書	26 KB
 211_chB20D1S_2.TXT	2020/08/26 7:18	テキスト文書	26 KB
 222_chB20D1S_2.TXT	2020/08/26 7:18	テキスト文書	26 KB

R p %評価で入力極点図の評価が行えます。

$$RP_{\{hh\}} = \frac{1}{N} \sum_{l=1}^N \left| \frac{\{PF_{\text{exp.}}\}_l - \{PF_{\text{calc.}}\}_l}{\{PF_{\text{exp.}}\}_l} \right| \cdot 100\%$$

## 6. 最小化 Rp% を用いたデータ処理

ODFPoleFigure2 3.95T[20/10/31] by CTR

File Linear(absolute)Contour Toolkit Help InitSet BGMode Measure Condition Free OverlapRevision MinimumMode Rp% Normalization

Files select: ASC(RINT-PC) 110.ASC 200.ASC 211.ASC 222.ASC

Calculation Condition: Previous Next C:\CTR\DATA\TEST\PCDATA\sample#110.ASC hkl 1,1,0

Background delete mode:  DoubleMode  SingleMode  LowMode  HighMode  Nothing BG defocus DSH1.2mm+Schulz+RSH5mm

Minimum( $\alpha, \beta$ )  MinimumAverage( $\alpha, \beta$ )  0.5 Trans blinds angle 30.0

Peak slit 7.0 mm BG Slit 7.0 mm  PeakSlit / BGS.. BG Scope 80.0 deg. 90.0 deg.

AbsCalc:  Ref  Trans Schulz reflection method Absorption coefficient 303.149 1/cm Thickness 0.02 cm 2Theta 20.04 deg.  1/Kt Profile

Defocus file Select Transmission defocus HKL+T

Defocus(1) functions file C:\CTR\DATA\TEST\PCDATA\random#defocus\DEFOCUS\_NOTNORM\_F.TXT

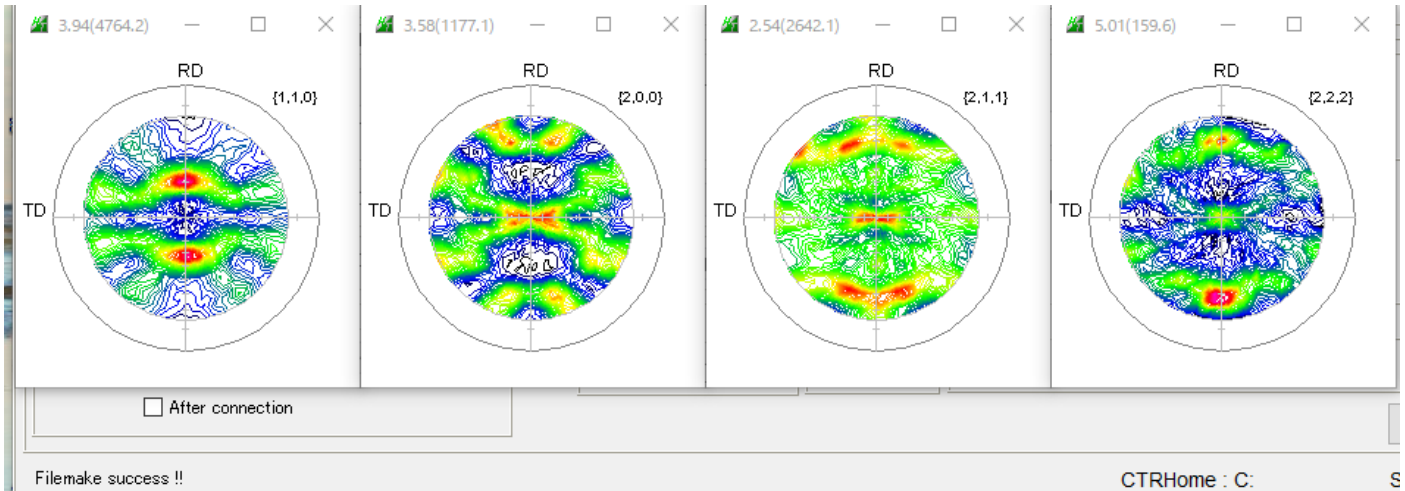
Defocus(3) function files folder(Calc unbackdefocus) BB185mm Limit Alfa Defocus value Free(LimitValue=0.0)

Defocus(2) function files folder(Calc backdefocus) DSH1.2mm+Schulz+RSH5mm  Search minimum EqualAngleRp%(Cubic only)  1/Ra Profile

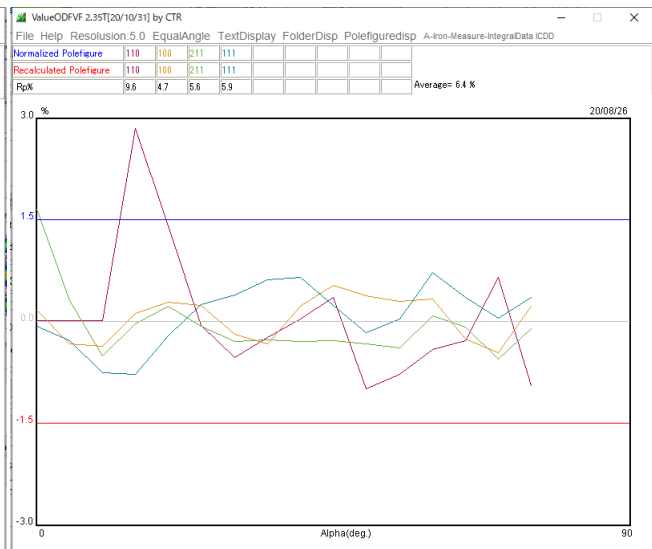
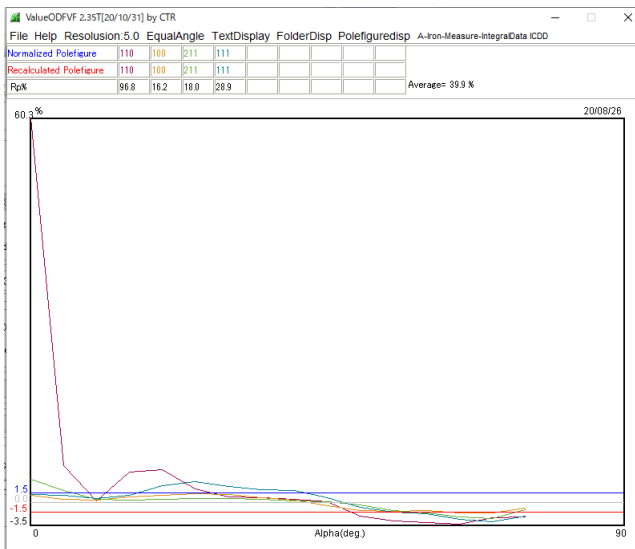
Smoothing for ADC:  Cycles 2 Weight 10

Normalization:  CTR  Connect  Average OutFiles:  Asc  MTextAsc  Ras  TXT  TXT2

Filemake success !! CTRHome : C: Select crystal : Cubic 20/08/26



Before



110	100	211	111
110	100	211	111
96.8	16.2	18.0	28.9

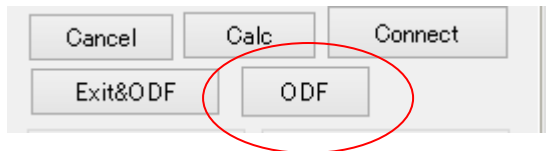
Average= 39.9 %

110	100	211	111
110	100	211	111
9.6	4.7	5.6	5.9

Average= 6.4 %



## 7. ODF ファイル作成



PfToODF3 8.47T[20/10/31] by CTR

File Option Symmetric Software Data Help

Lattice constant

Material: A-Iron-Measure-IntegralData.txt

Structure Code(Symmetries after Schoenfiles): 7 - O (cubic)

a: 1.0    <=b: 1.0    <=c: 1.0    alpha: 90.0    beta: 90.0    gamm: 90.0

Initialize: Start

getHKL<-Filename (selected)

AllFileSelect

PF Data

SelectFile(TXT(b,intens),TXT2(a,b,intens))	h,k,l	2Theta	Alpha scope	AlphaS	AlphaE	Select
110_chB20D1S_2.TXT	1,1,0	20.04	0.0->75.0	0.0	75.0	<input checked="" type="checkbox"/>
200_chB20D1S_2.TXT	2,0,0	28.9	0.0->75.0	0.0	75.0	<input checked="" type="checkbox"/>
211_chB20D1S_2.TXT	2,1,1	35.42	0.0->75.0	0.0	75.0	<input checked="" type="checkbox"/>
222_chB20D1S_2.TXT	2,2,2	50.76	0.0->75.0	0.0	75.0	<input checked="" type="checkbox"/>
	2,1,1	0.0		0.0	0.0	<input type="checkbox"/>
	3,1,1	0.0		0.0	0.0	<input type="checkbox"/>
	4,0,0	0.0		0.0	0.0	<input type="checkbox"/>
	3,3,1	0.0		0.0	0.0	<input type="checkbox"/>
	4,2,2	0.0		0.0	0.0	<input type="checkbox"/>
	5,1,1	0.0		0.0	0.0	<input type="checkbox"/>
	5,2,1	0.0		0.0	0.0	<input type="checkbox"/>
	5,3,1	0.0		0.0	0.0	<input type="checkbox"/>

Comment: 110\_chB20D1S\_2.TXT 200\_chB20D1S\_2.TXT 211\_chB20D1S\_2.TXT 222\_chB20D1S\_2.TXT

Symmetric type: Full

CenterData:  Average

Epf file save

Labotex(EPF),popLA(RAW) filename: labotex

8. randomサンプルが得られない場合

バックグラウンド除去、defocusを内部計算、最小化Rp%を行う。

ODFPoleFigure2.35T[20/10/31] by CTR

File Linear(absolute)Contour ToolKit Help InitSet BGMode Measure Condition Free OverlapRevision MinimumMode Rp% Normalization

Files select  
ASC(RINT-FC) 110.ASC 200.ASC 211.ASC 222.ASC

Calculation Condition  
C:\CTR\DATA\TEST\PCDATA\sample\notrandom\110.ASC

Background delete mode  
 DoubleMode  SingleMode  LowMode  HighMode  Nothing  
 Minimum( $\alpha, \beta$ )  MinimumAverage( $\alpha, \beta$ ) 0.5  
 Peak slit 7.0 mm BG Slit 7.0 mm  PeakSlit / BGS... BG Scope 80.0 deg. 90.0 deg. Set Disp  $\alpha$ Inhibit

Smoothing  
 + $\alpha$  3 Arithmetic mean Disp  
 RD 0.0 Interpolation Full Disp

AbsCalc  
 Ref  Trans Schulz reflection method Change Absorption coefficient 303.149 1/cm Thickness 0.02 cm Set 2Theta 20.04 deg.  1/Kt Profile

Defocus file Select Transmission defocus HKL+T  
 Defocus(1) functions file C:\CTR\DATA\TEST\PCDATA\random\defocus\DEFOCUS.NOTFORM.F.TXT  
 Make defocus function files by TXT2 Files  Normalization degree of a polynomial 0  TenckhoffFitting TextDisp

Defocus(3) function files folder(Calc unbackdefocus) BB185mm Limit Alpha Defocus value Free(LimitValue=0.0)

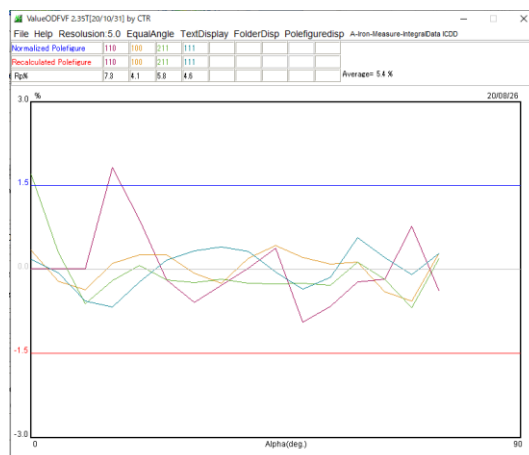
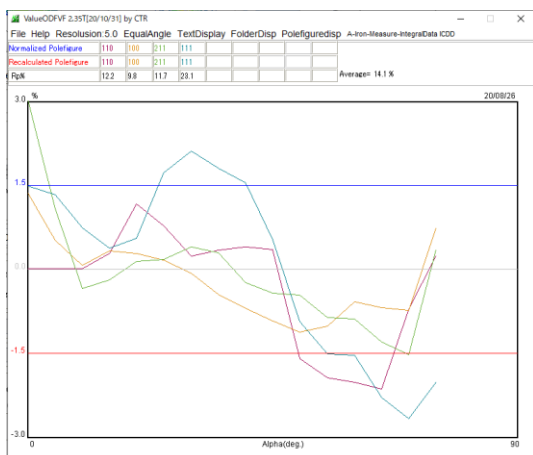
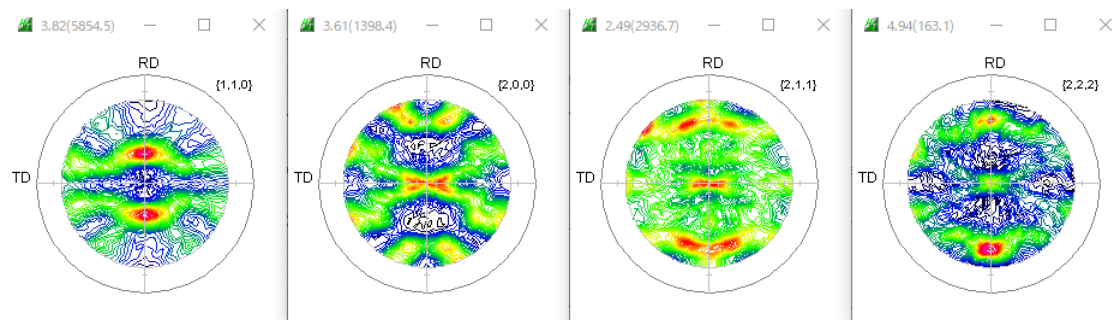
Defocus(2) function files folder(Calc backdefocus) DSH1.2mm+Schulz+RSH5mm  Search minimum EqualAngleRp%(Cubic only)  1/Ra Profile

Smoothing for ADC  
 Cycles 2 Weight 10 Disp  
 After connection

Normalization  
 CTR  Connect  Average OutFiles  
 Asc  MTextAsc  Ras  TXT  TXT2

Cancel Calc Connect  
 Exit&ODF ODF  
 ValueODFVF-B ValueODFVF-A

CTRHome : C: Select crystal : Cubic 20/08/26

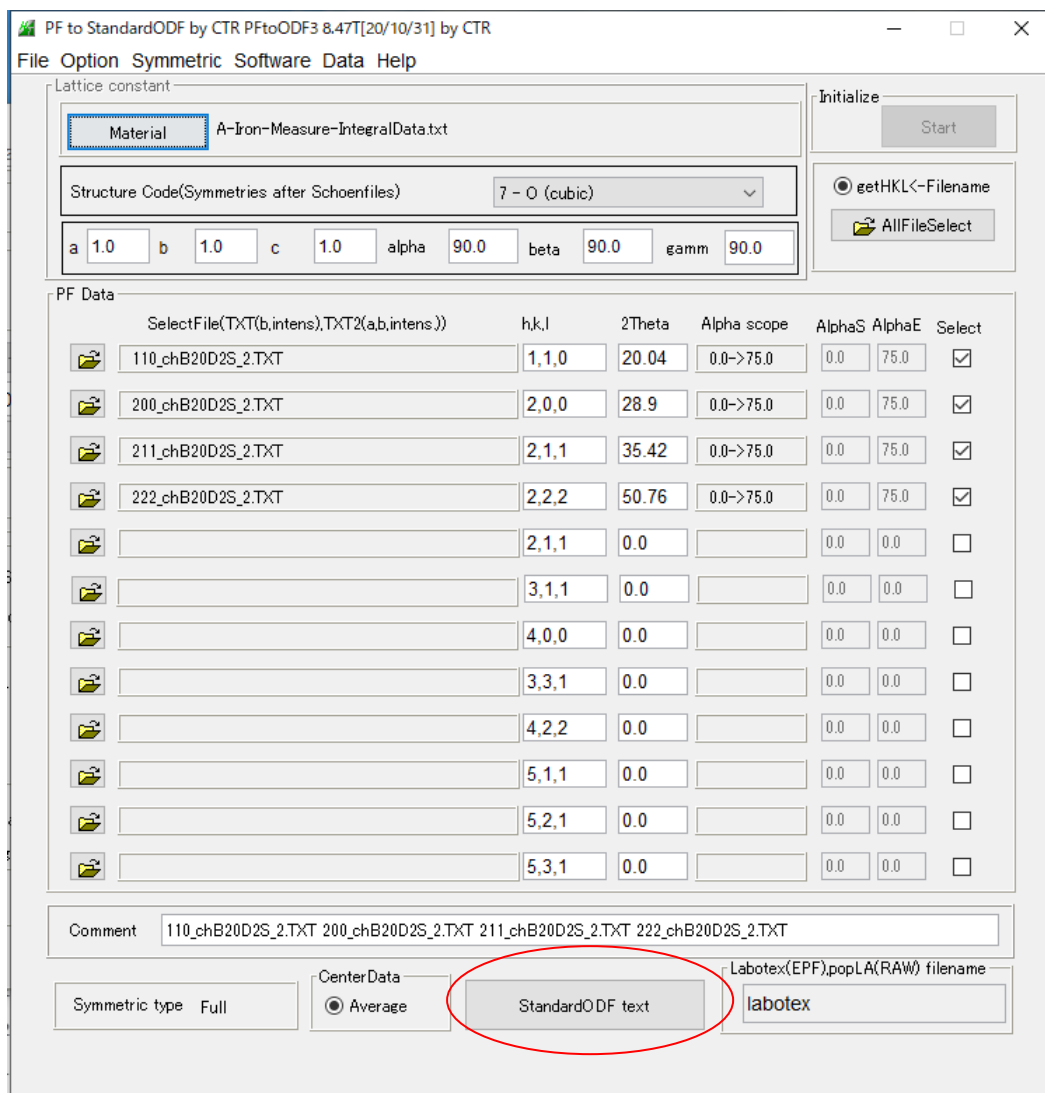
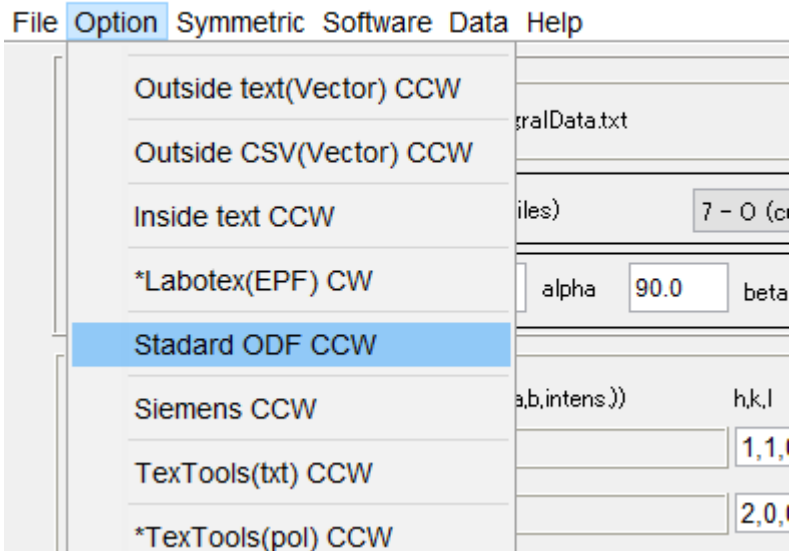


Average= 14.1 %

Average= 5.4 %

randomサンプルなし、内部計算defocus、最小化Rp%データをODF解析

PFtoODF3 8.47T[20/10/31] by CTR



作成される T X T データ

入力データ      データ処理されたデータ      StandardODF 入力データ

名前	更新日時	種類	サイズ
StandardODF	2020/08/26 7:33	ファイル フォルダ	
110.ASC	2018/07/14 9:25	RINT2000アスキー	21 KB
200.ASC	2018/07/14 9:25	RINT2000アスキー	21 KB
211.ASC	2018/07/14 9:25	RINT2000アスキー	21 KB
222.ASC	2018/07/14 9:25	RINT2000アスキー	20 KB
110_chB20D2S_2.TXT	2020/08/26 7:32	テキスト文書	36 KB
200_chB20D2S_2.TXT	2020/08/26 7:32	テキスト文書	35 KB
211_chB20D2S_2.TXT	2020/08/26 7:32	テキスト文書	35 KB
222_chB20D2S_2.TXT	2020/08/26 7:32	テキスト文書	35 KB
DefocusMulti.txt	2020/08/26 7:34	テキスト文書	1 KB

> CTR > DATA > TEST > PCDATA > sample > notrandom > StandardODF

名前	更新日時	種類	サイズ
110_chB20D2S_2StdODF.TXT	2020/08/26 7:33	テキスト文書	11 KB
200_chB20D2S_2StdODF.TXT	2020/08/26 7:33	テキスト文書	11 KB
211_chB20D2S_2StdODF.TXT	2020/08/26 7:33	テキスト文書	11 KB
222_chB20D2S_2StdODF.TXT	2020/08/26 7:33	テキスト文書	11 KB

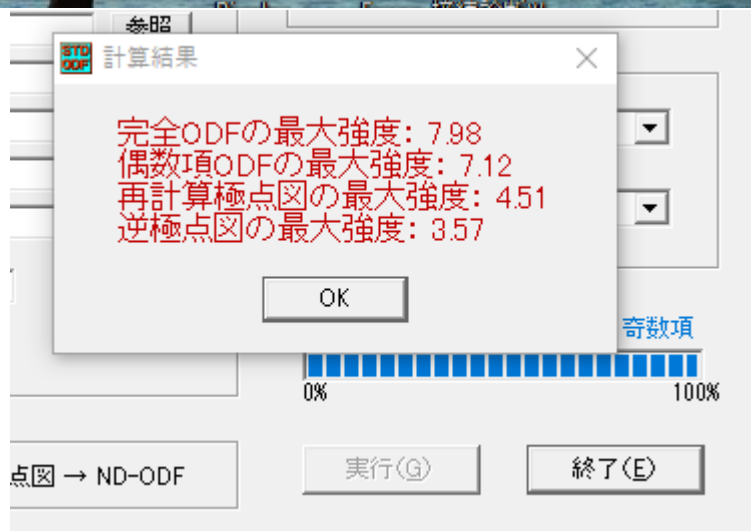
更に C:\¥ODF¥PFDATA 登録される

(C:) > ODF > PFDATA

名前	更新日時	種類	サイズ
Alr111c.txt	2000/10/30 17:07	テキスト文書	13 KB
Alr1200c.txt	2000/10/30 17:08	テキスト文書	12 KB
Alr1220c.txt	2000/10/30 17:09	テキスト文書	12 KB
FERL110L.TXT	2000/10/30 17:11	テキスト文書	11 KB
FERL200L.TXT	2000/10/30 17:12	テキスト文書	11 KB
FERL211L.TXT	2000/10/30 17:13	テキスト文書	11 KB
FERL310L.TXT	2000/10/30 17:14	テキスト文書	11 KB
110_chB20D2S_2StdODF.TXT	2020/08/26 7:42	テキスト文書	11 KB
200_chB20D2S_2StdODF.TXT	2020/08/26 7:42	テキスト文書	11 KB
211_chB20D2S_2StdODF.TXT	2020/08/26 7:42	テキスト文書	11 KB
222_chB20D2S_2StdODF.TXT	2020/08/26 7:42	テキスト文書	11 KB

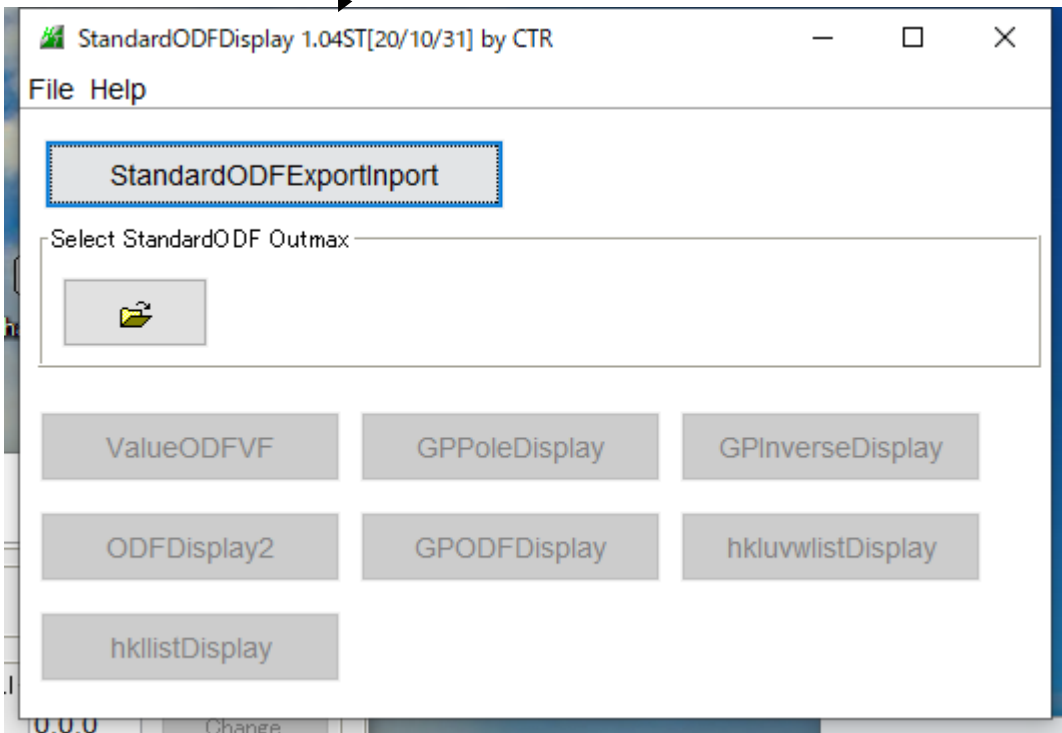
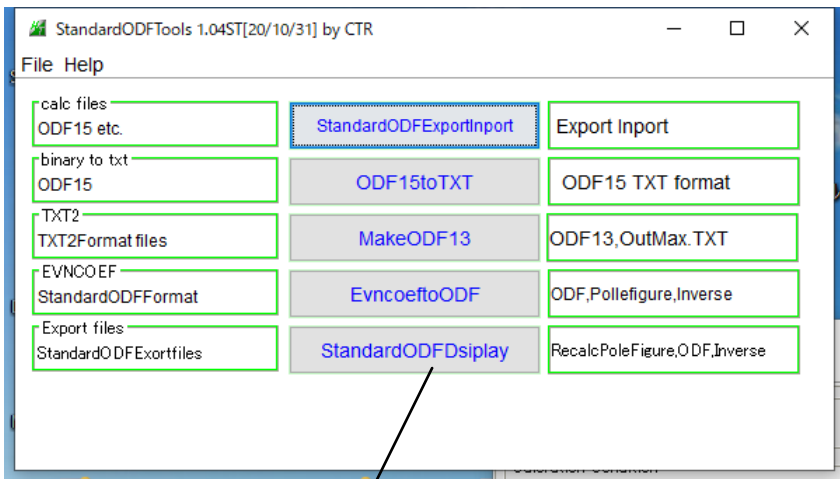
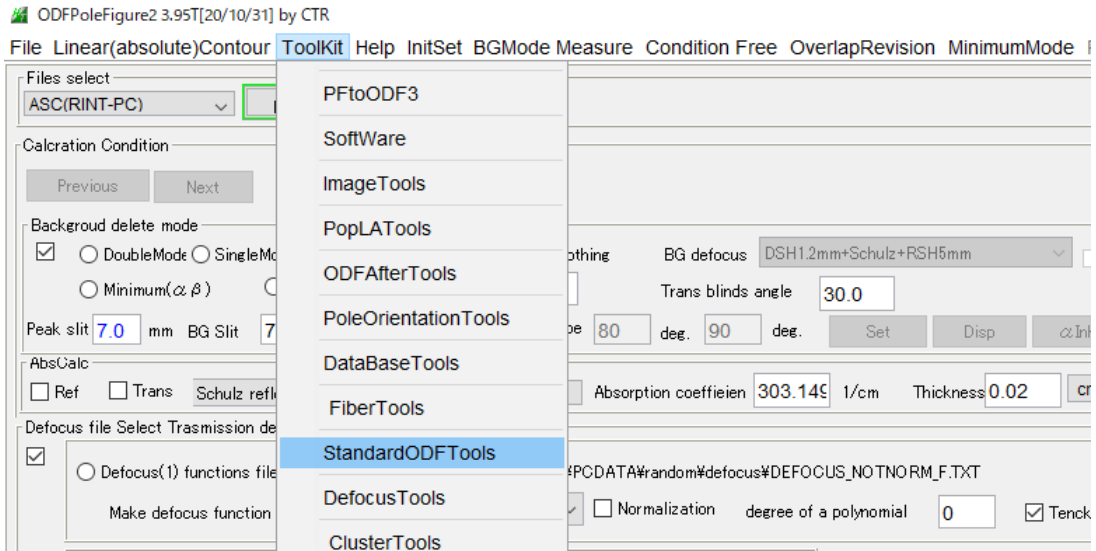
StandardODFで解析する場合、解析直下の StandardODF データを用いる。

## 9. Standard ODF 解析

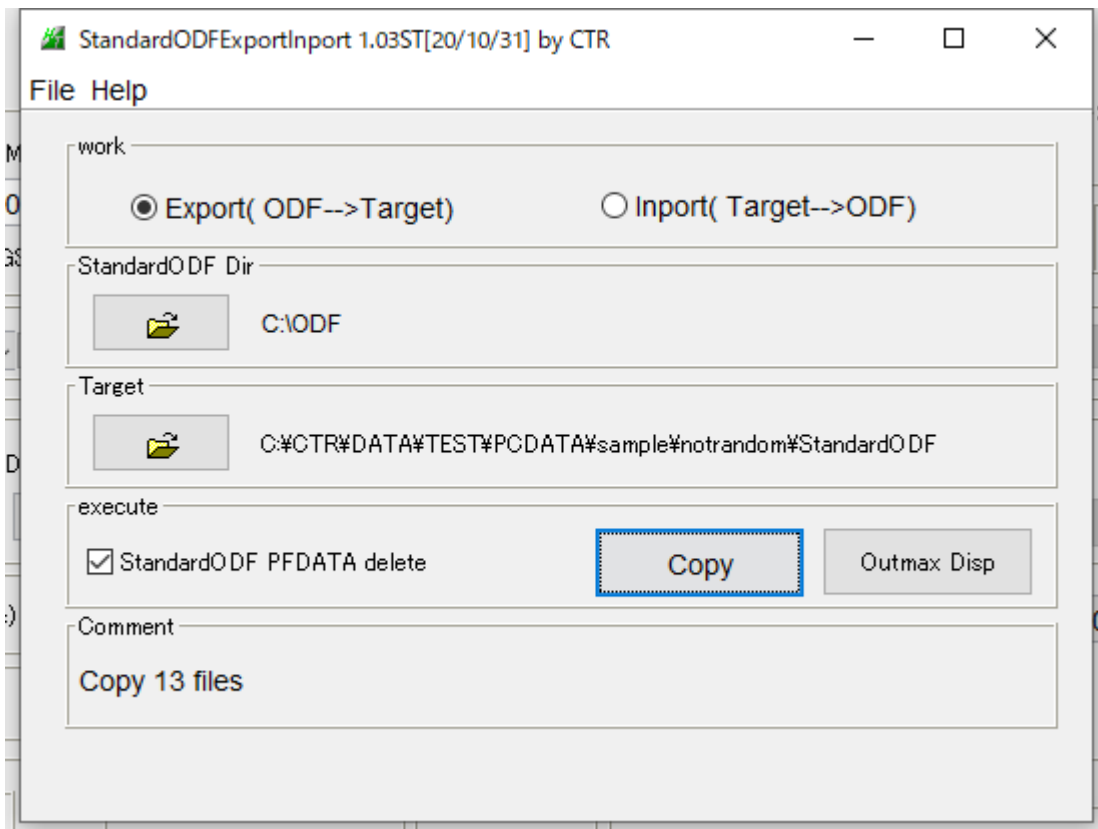
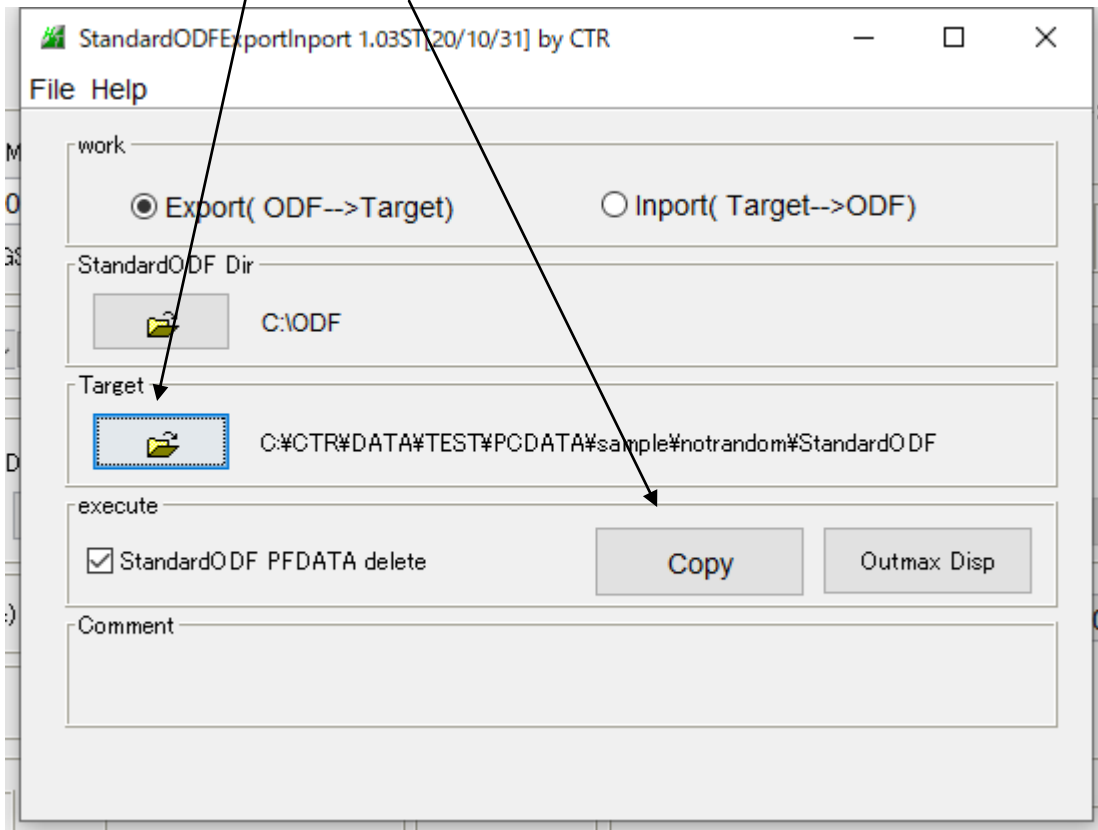


Standard ODF 解析の解析結果は同一ファイルに上書きされるため  
解析結果の退避を行う。

# 10. データ退避



退避先を選択してC o p yを行う

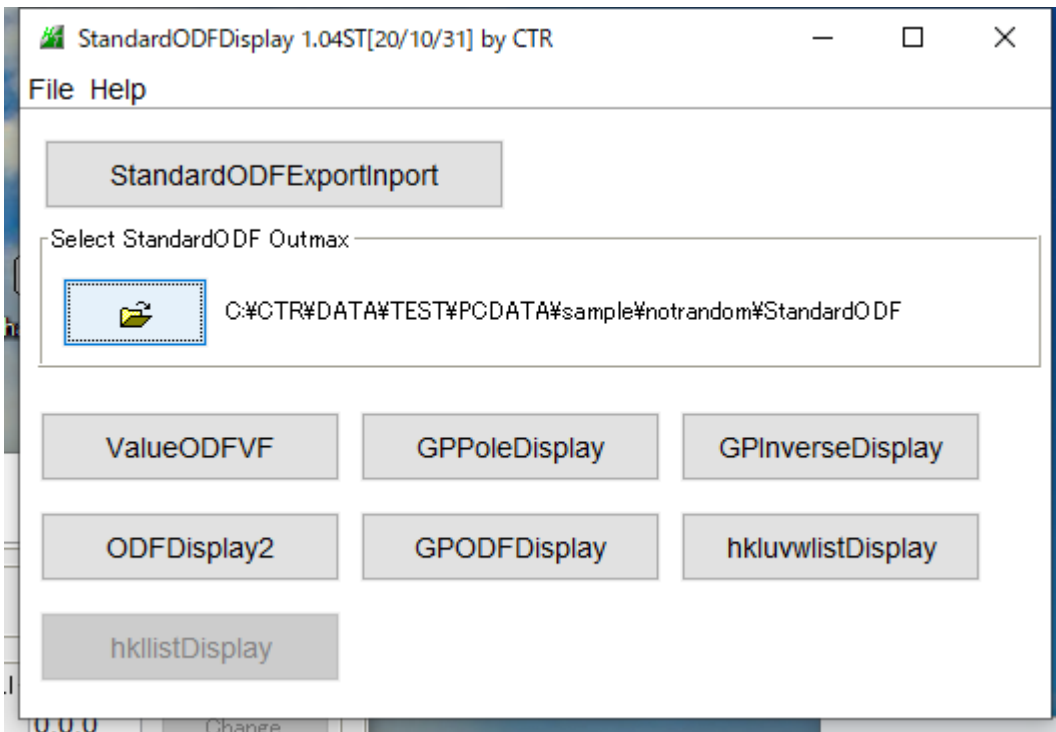


退避されたデータ

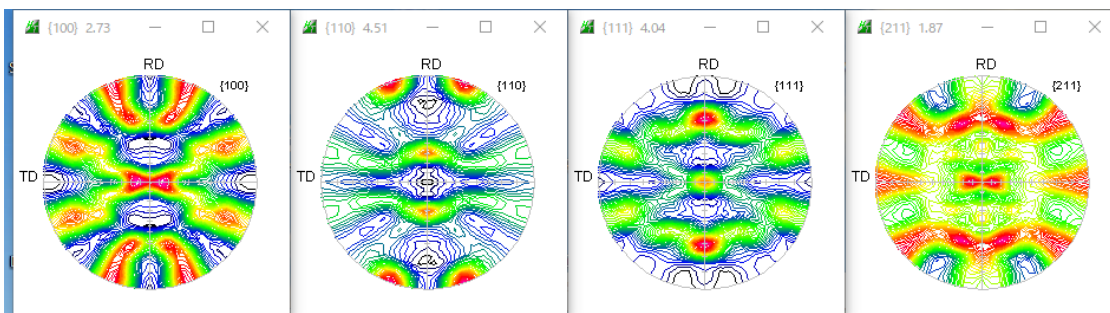
(C:) > CTR > DATA > TEST > PCDATA > sample > notrandom > StandardODF

名前	更新日時	種類	サイズ
110_chB20D2S_2StdODF.TXT	2020/08/26 7:42	テキスト文書	11 KB
200_chB20D2S_2StdODF.TXT	2020/08/26 7:42	テキスト文書	11 KB
211_chB20D2S_2StdODF.TXT	2020/08/26 7:42	テキスト文書	11 KB
222_chB20D2S_2StdODF.TXT	2020/08/26 7:42	テキスト文書	11 KB
Dtcubin1.txt	2020/08/26 7:53	テキスト文書	1 KB
OUTPUT1.TXT	2020/08/26 7:53	テキスト文書	23 KB
OUTPUT2.TXT	2020/08/26 7:53	テキスト文書	75 KB
Data10.txt	2020/08/26 7:53	テキスト文書	11 KB
ODF13	2020/08/26 7:53	ファイル	6 KB
ODF14	2020/08/26 7:53	ファイル	28 KB
Outmax.txt	2020/08/26 7:53	テキスト文書	1 KB
OUTPUT3.TXT	2020/08/26 7:53	テキスト文書	49 KB
ODF15	2020/08/26 7:53	ファイル	28 KB
ODF15.TXT	2020/08/26 7:53	テキスト文書	233 KB
EVNCOEF	2020/08/26 7:53	ファイル	4 KB
ODDCOEF	2020/08/26 7:53	ファイル	3 KB
ODF16	2020/08/26 7:53	ファイル	88 KB

1 1. 各種データの最大値が登録されているファイルを選択



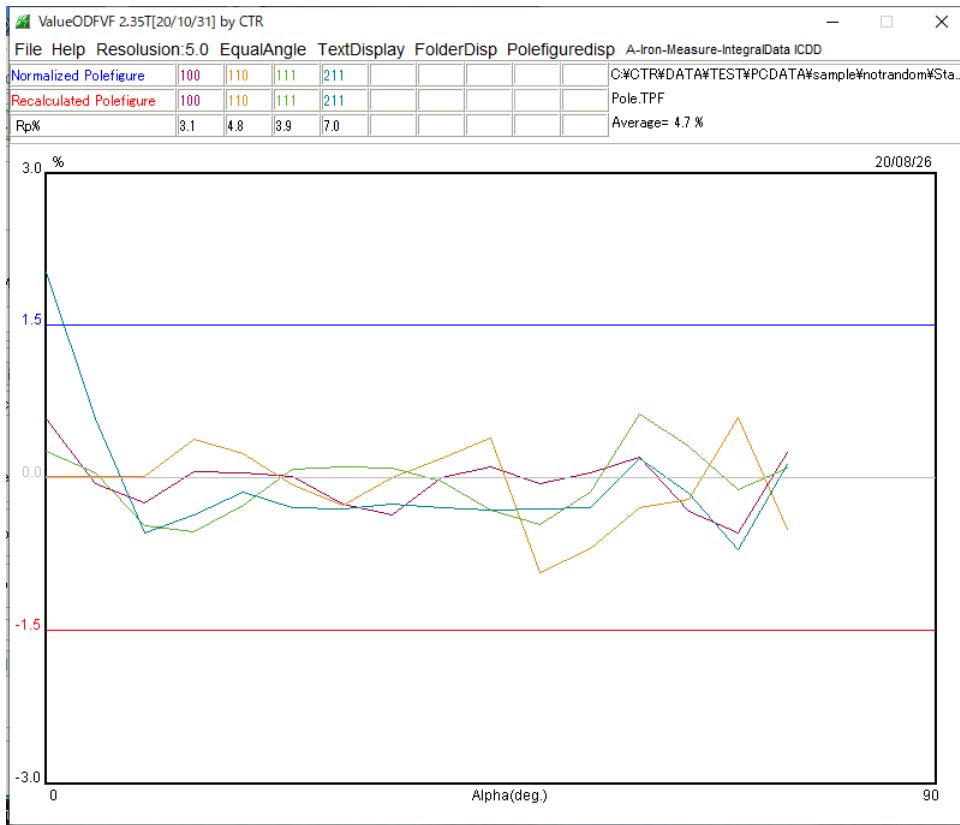
再計算極点図が表示される





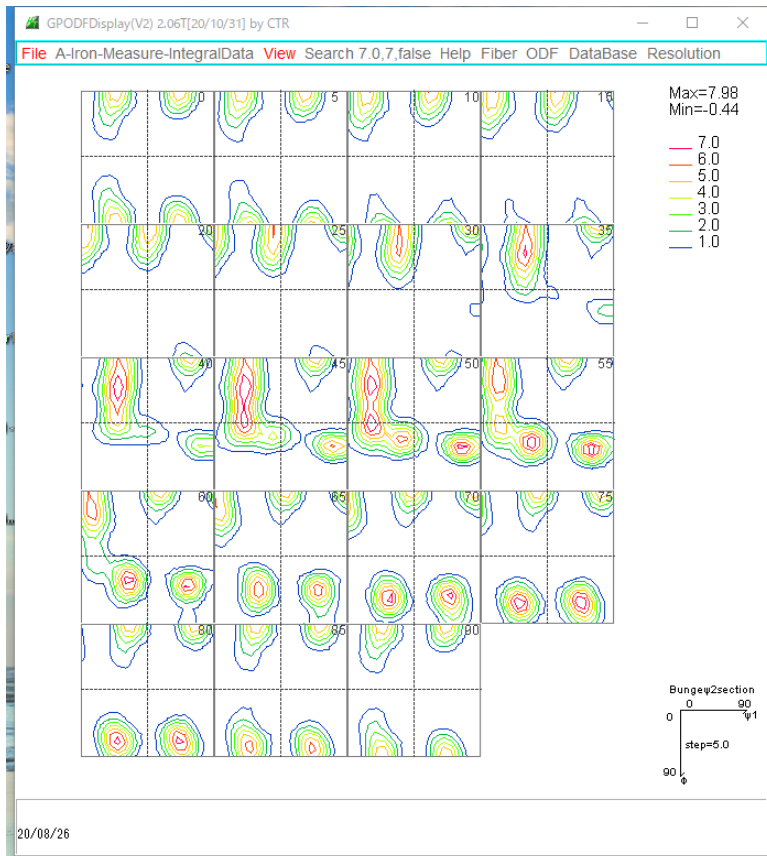
## 1 2. Standard ODFによるRp%確認

### ValueODFVF



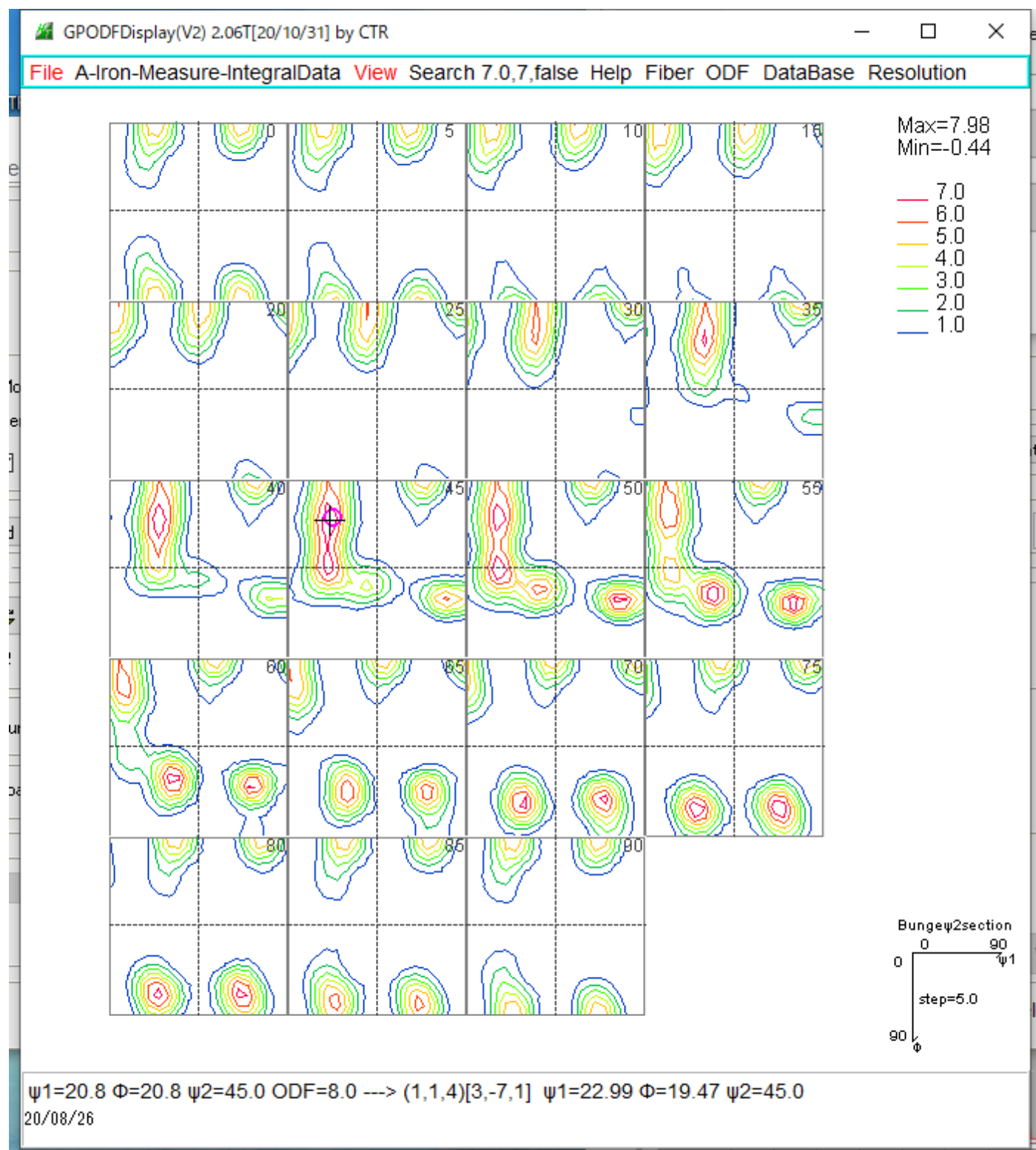
## 1 3. ODF 解析結果

### GPODFDisplay



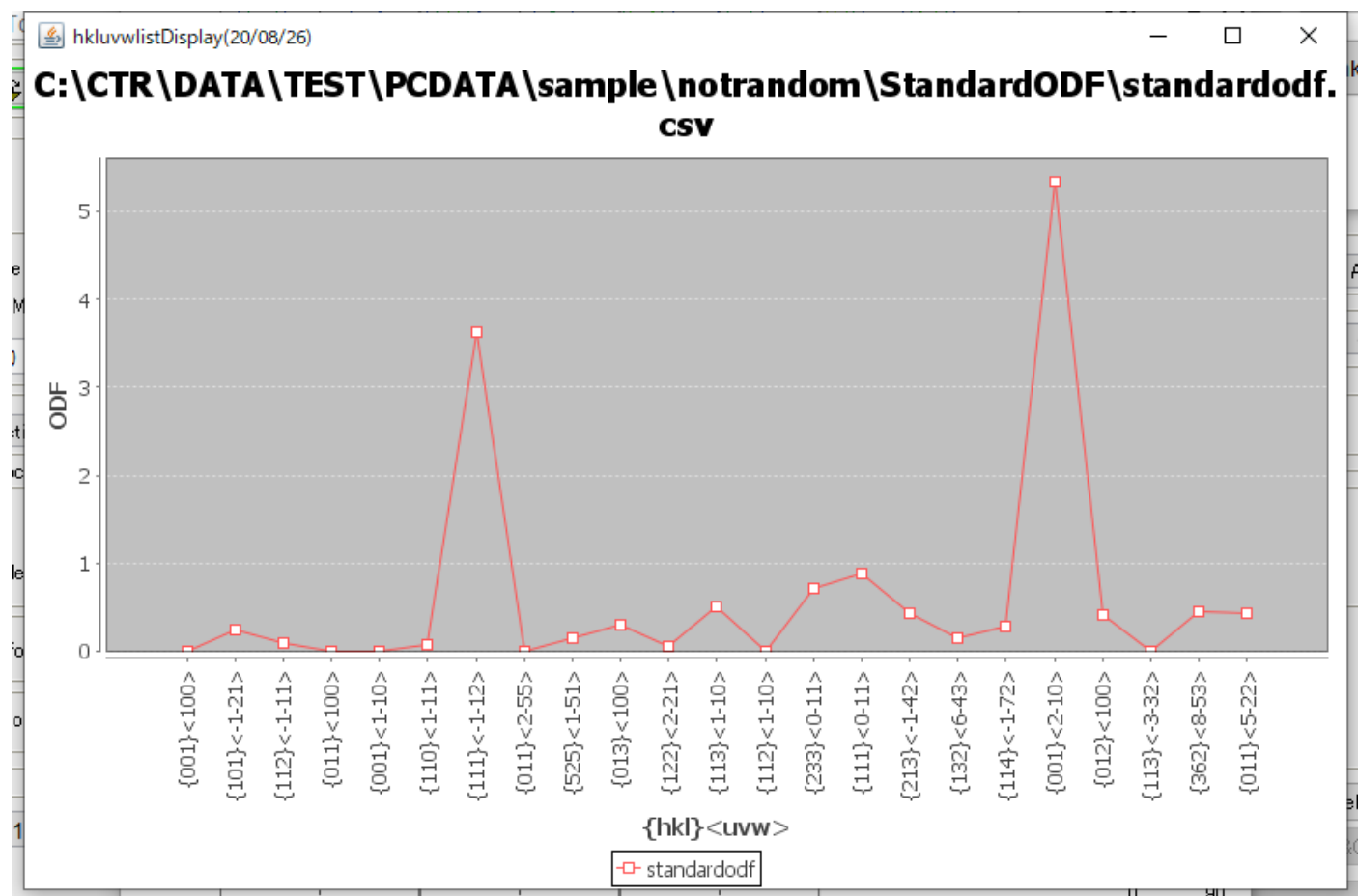
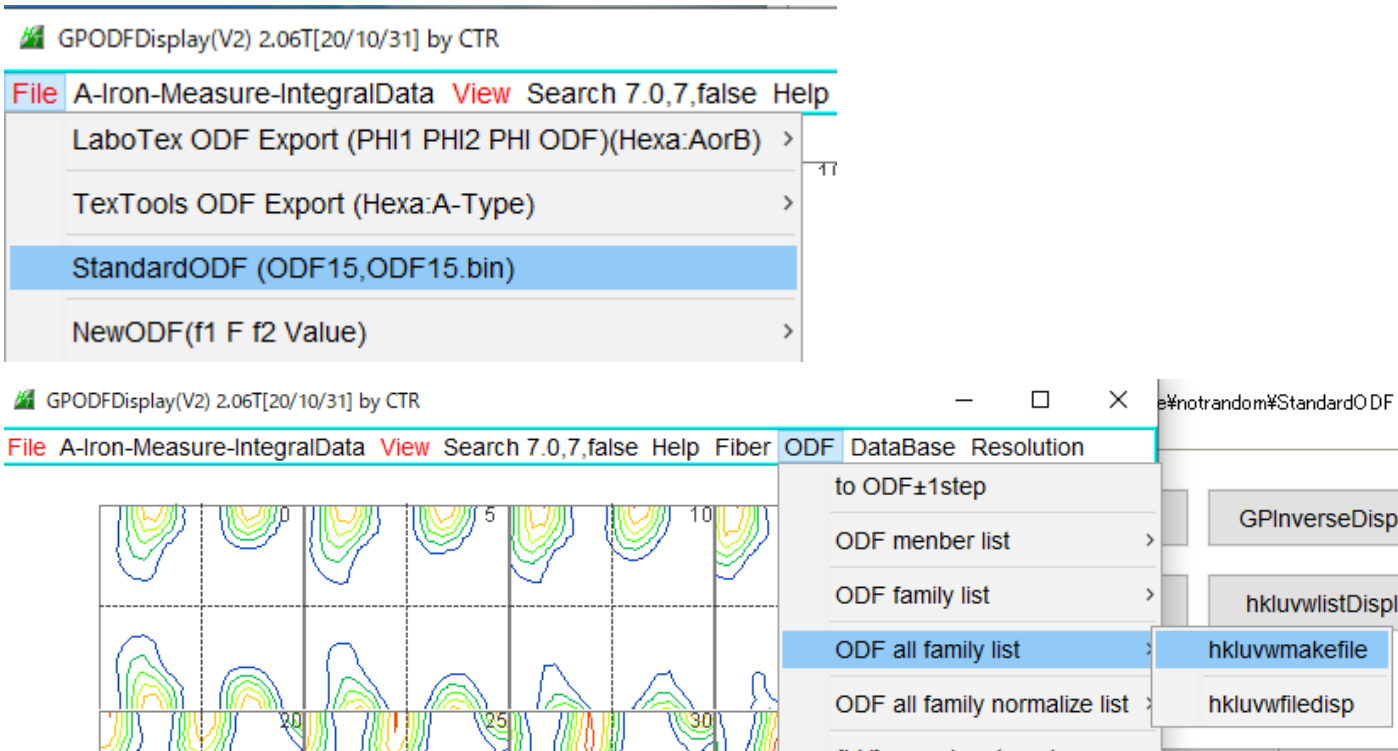
マウス移動でリアルタイム方位計算、クリックで方位を固定する

マウスクリック位置+、方位計算による方位位置○



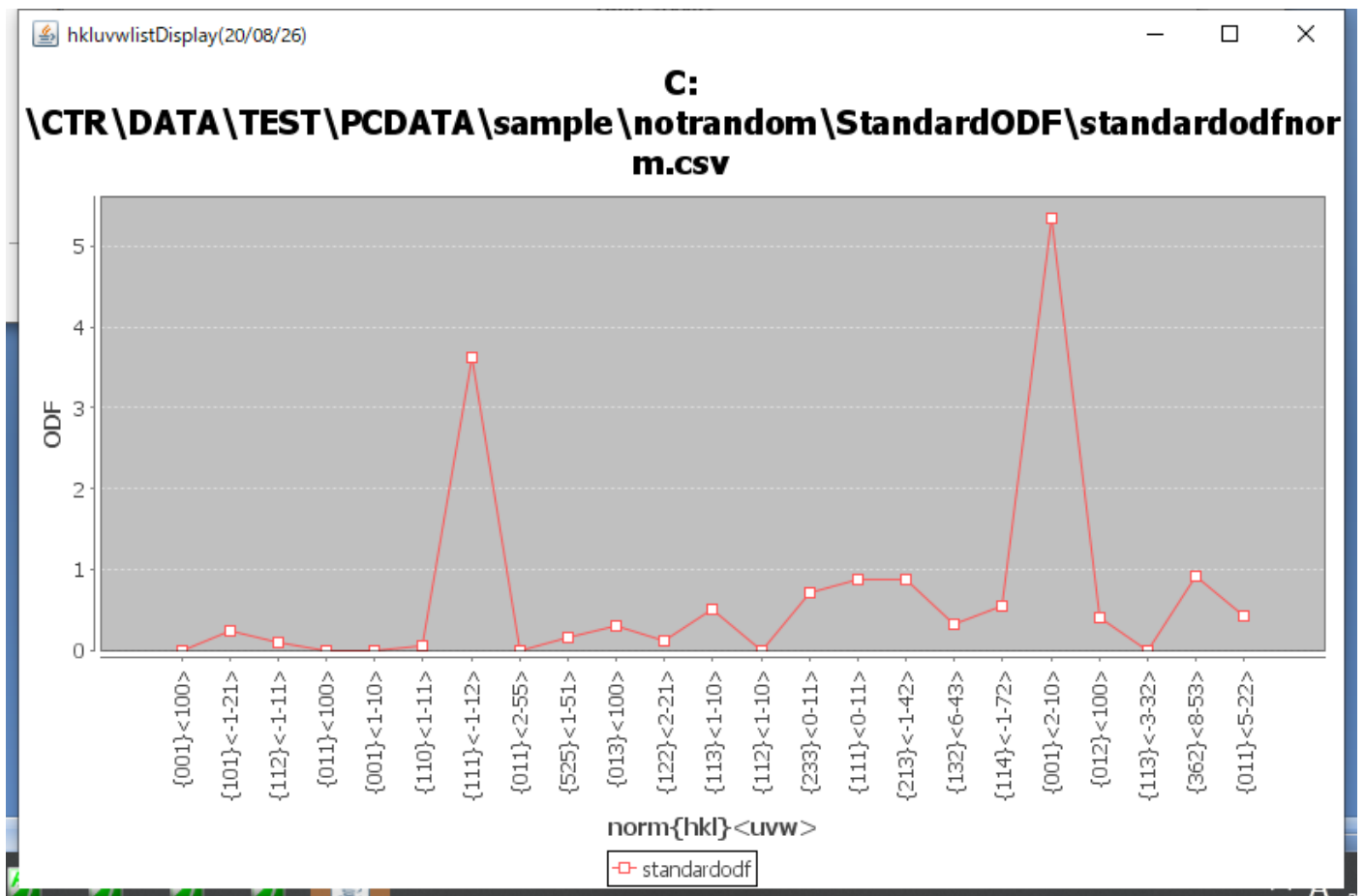
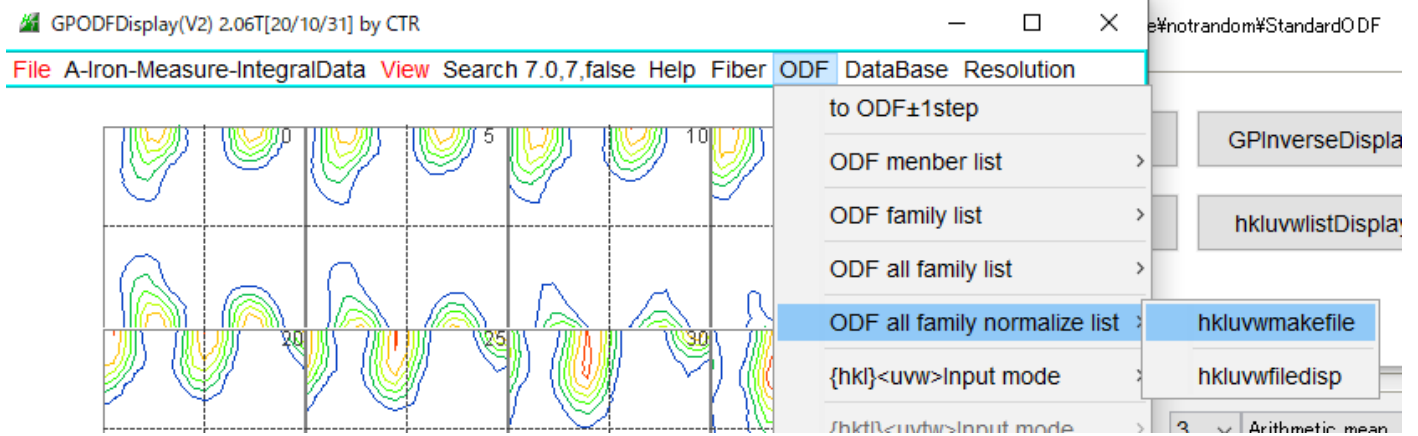
方位リスト

再度データ選択



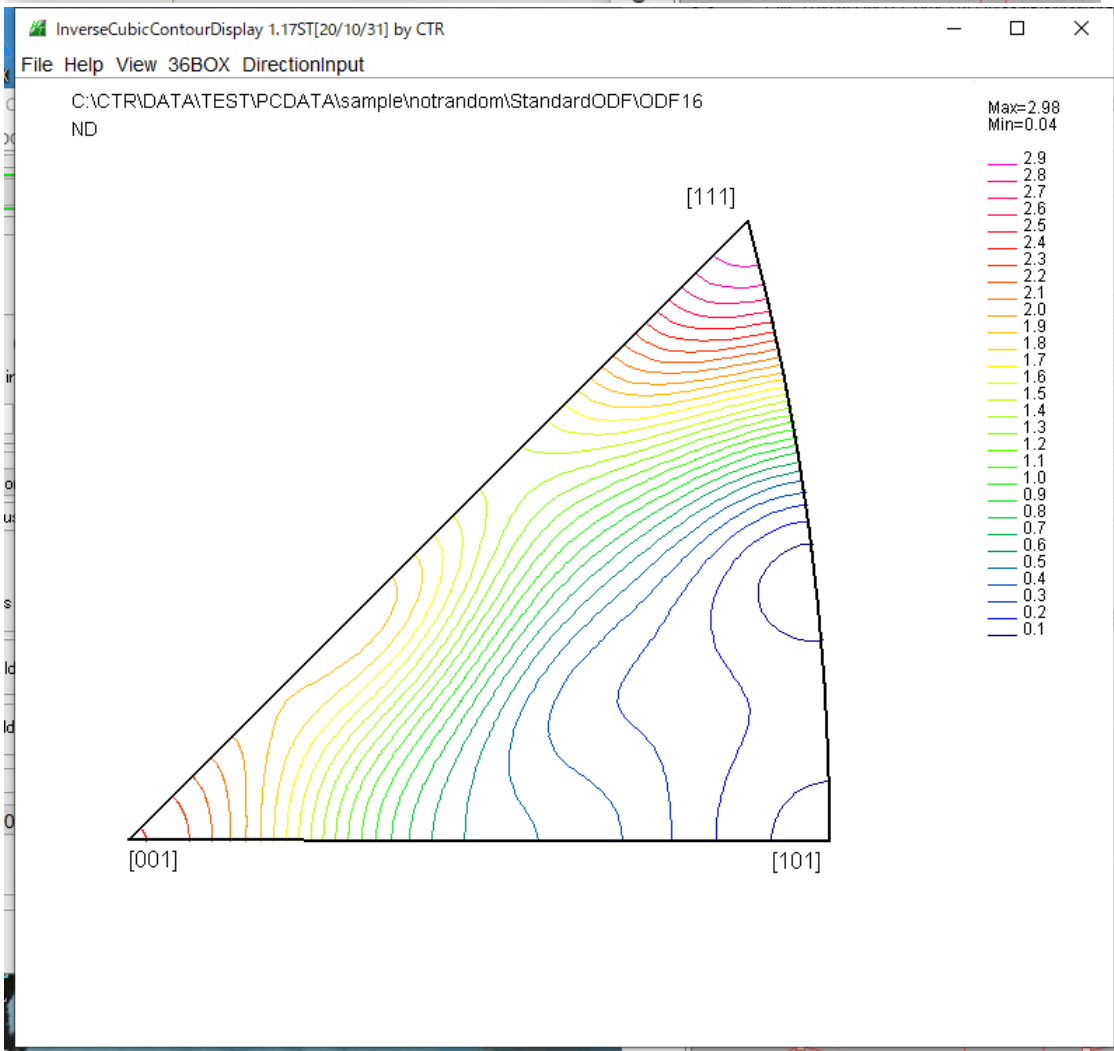
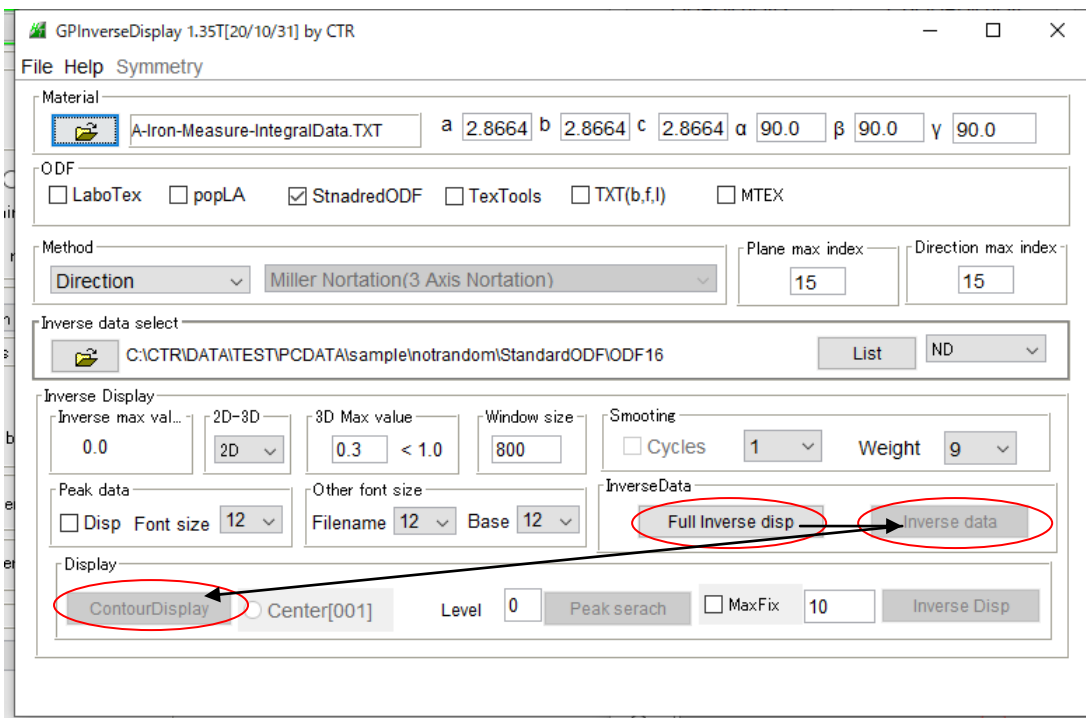
方位によって同一Volume Fractionでも4:2:1の違いを理解して評価する。

4 : 2 : 1 を規格化して表示



### 1.3. 逆極点图

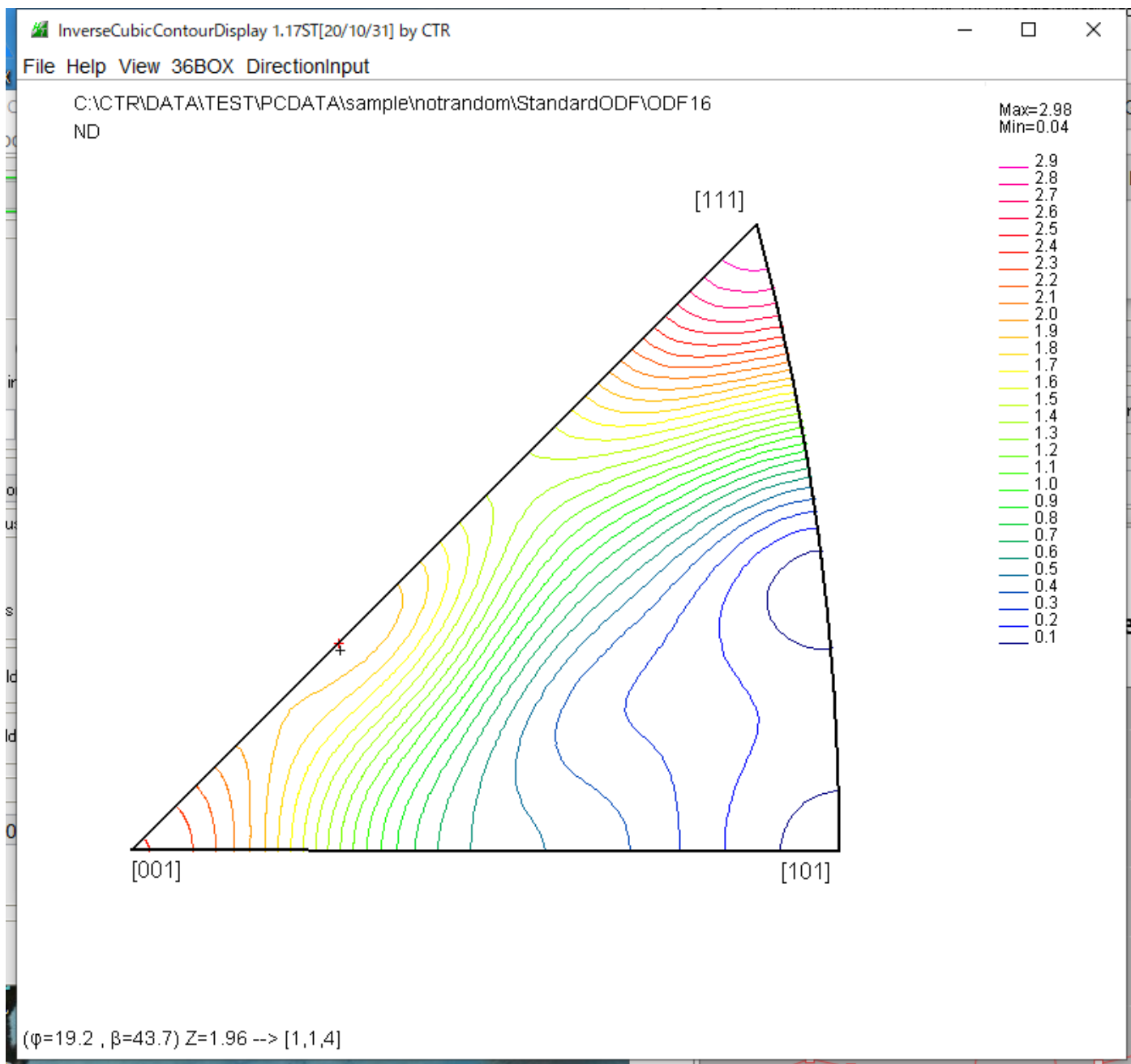
#### GPIInverseDisplay



マウス移動で方位をサーチし、クリックで固定

マウス移動をリアルタイムで方位計算を行い表示する

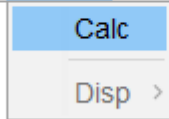
マウスクリックで方位を固定し、クリック位置に方位角度に+、整数化された方位位置に赤の+



### 36BOX 評価

InverseCubicContourDisplay 1.17ST[20/10/31] by CTR

File Help View 36BOX DirectionInput



InverseCubicContourDisplay 1.17ST[20/10/31] by CTR

File Help View 36BOX DirectionInput

