ODF解析用簡易極点データ処理

本ソフトウエアは、HelperTexサイトからダウンロード可能ですが、 更に詳細のソフトウエアは、評価版CTRパッケージを請求してください。

> 2016年04月11日 *HelperTex Office*

CTRパッケージソフトウエアでは各種X線メーカの測定データに対応しているが、 スタートは、リガクのASCデータである。本資料では、測定データをASCとして説明します。 極点解析は、方位密度の正確な測定が必要なため、本来の回折線以外は削除します。 この削除の為に、バックグランド測定を行っています。 又、極点図の外側で、測定強度が低下するdefocus現象があります。 極点処理では、このバックグランド削除とdefocus補正を必ず行います。

説明に必要なアプリケーションと測定データがパッケージに含まれています。

```
C:¥CTR¥bin¥MultiDisp.jar
C:¥CTR¥bin¥ODFPoleFigure1_5.jar
C:¥CTR¥bin¥PFtoODF2.jar
C:¥CTR¥bin¥PoleDisplayTXT2.jar
C:¥CTR¥bin¥PoleFigureContourDisplayTXT2.jar
C:¥CTR¥bin¥TextDisplay.jar
C:¥CTR¥DATA¥ODFPoleFigure¥111-OSC.ASC
C:¥CTR¥DATA¥ODFPoleFigure¥200-OSC.ASC
C:¥CTR¥DATA¥ODFPoleFigure¥220-OSC.ASC
C:¥CTR¥DATA¥ODFPoleFigure¥random¥111.ASC
C:¥CTR¥DATA¥ODFPoleFigure¥random¥200.ASC
C:¥CTR¥DATA¥ODFPoleFigure¥random¥220.ASC
```

極点データ処理

ODFPoleFigure1_5.jar

極点データ処理本体

PoleDisplayTXT2.jar

3D極点図表示ドライバー

PoleFigureContourDislpaTXT2.jar

等高線極点図表示ドライバー

TextDisplay.jar

テキストファイルの表示ドライバー

MultiDisplay.jar

プロファイル多重記録ドライバー

測定データ

ODFPoleFigure¥111-OSC.ASC ODFPoleFigure¥200-OSC.ASC ODFPoleFigure¥220-OSC.ASC

Defocus 補正用 random データ

ODFPoleFigure¥random¥111.ASC ODFPoleFigure¥random¥200.ASC ODFPoleFigure¥random¥220.ASC

M ODFPolefigure1.5 1.23ET[17/03/31] by CTR
File Linear(3D) ToolKit Help InitSet Rp%
Files select ASC(RINT-PC)
Calcration Condition Previous Next Declaration Change Smoothing Change Cycles 2 V Weight 9 Disp
Cackgroud delete mode
Abscration method Abscration coefficien 1.0 1/cm Thickness 1.0 cm 2Theta 0.0 deg. 0.1/Kt Profile
TXT2 TextDisp 01/Ra Profile Limit Alfa Defocus val Free
Standardize OutFiles Standardize Asc O Ras O TXT2 O TXT Search minimum Rp%(Cubic only) ValueODF-B ValuODF-A Cancel Calc ODF File

Defocus 補正用ファイルの作成

C:¥CTR¥DATA¥ODFPoleFigure¥random の aaa.SAC.200.ASC.220.ASC を選択

M ODFPolefigure 5 1.2	3ET[17/03/31] by	CTR	
File Linear(3D) ToolK	it Help InitSet R	p%	
-Files select ASC(RINT-PC)	111.ASC 20	0.ASC 220.ASC	
Calcration Condition Previous Next		PoleFigure¥random¥111.4	ASC
3D 極点図が表示されます	- o		
🎽 {1,1,1} 7363.2	K [2,0,0] 3692.4	💶 🗖 🔀 🎽 {2.2.0} 24	52.8

3個の PoleDisplayTXT2.jar で表示しています。

バックグランドの確認

Files select ASC(RINT-PC		111.ASC 200.	ASO 220 ASC				
-Calcration Con Previous	Next C:	¥CTR¥DATA¥ODFP	oleFigure¥random¥11	1.ASC		hkl 1,1,1	Change
	 DoubleMode 	🔘 Single Mode	🔿 LowMode	🔵 HighMode	🔘 Nothing	Set	Disp

β方向の最大、最小、平均、バックグランドをα方向にプロットしています。

バックグランドにピークの影響を受けていないことが重要です。



MultiDisplay.jar で表示しています。

defocus用補正データは、バックグランド削除を行って作成します。

Calcで処理される。

📓 ODFPolefigure1.5 1.23ET[17/03/31] by CTR
File Linear(3D) ToolKit Help InitSet Rø%
Files select ASC(RINT-PC) 111.ASC 200.ASC 220.ASC
Calcration Condition Previous Next C.#CTR#DATA#ODFPoleFigure#random#111.ASC
Backgroud delete mode
AbsCalc Schulz reflection method Absorption coefficien 133.0 1/cm Thickness 0.2 cm 2Theta 38.58 des 0 1/kt Profile
Detocus tile Select TextDisp C1/Ra Profile Limit Alfa Defocus val. Free Y
Standardize OutFiles Image: Control of the standardize of the stan

β方向が 1/4 の場合、full にチェックが付きます。

入力データ

ミラー指数 最大強度(cps) ↓			
M {1.1.1} 7363.2	# {2,0,0} 3692.4	<mark>#</mark> {2,2,0} 2452.8	

処理結果



<u>स्</u> र]111.ASC	17 KB RINT2000アスキー	2014/03/13 7:40	ユナジャ
🗟 200.ASC	17 KB RINT2000アスキー	2014/03/13 7:40	人力テータ
🗟 220.ASC	17 KB RINT2000アスキー	2014/03/13 7:40	
111_chFB0S_2.TXT	22 KB テキスト文書	2016/04/11 7:52	加理結果
1200_chFB0S_2.TXT	22 KB テキスト文書	2016/04/11 7:52	や生相木
220_chFB0S_2.TXT	22 KB テキスト文書	2016/04/11 7:52	
SLITTTHETAFILE	1 KB ファイル	2016/04/11 7:52	内部ファイル

バックグランド削除したTXT2ファイルをdefocusファイルに登録

🖉 ODFPolefigure1.5 1.23ET[17/	▲ 勵<		
File Linear(3D) ToolKit Help	参照:	🗀 random 💿 🤌 📁 🖽 📟	
ABC(RINT-PC)	レンジャント していた。 していたい	 111_chFB0S_2.TXT 200_chFB0S_2.TXT 220_chFB0S_2.TXT 220_chFB0S_2.TXT 1_chFB0S_2.TXT[*] "200_chFB0S_2.TXT[*] "220_chFB0S_2.TXT" アイルタイプ: *txt*.Txt 	s 2 V Weight 9 Disp Interporation V Full e. 01/kt Limit Alfa Defocus val FreeV Calc ODF File
複数のTXT2	2を選択す	3.	
DDFPolefigure1.5 1.23ET[17/0	I3/31] by CTR		_ 🗆 🗡
Files select ASC(RINT-PC)	111.ASC 200.ASC 2	10.ASC	
Calcration Condition Previous Next C#CTR#	DATA¥ODFPoleFig	re¥random¥111.ASC	Cycles 2 Veight 9 Disp
Backgroud delete mode	SingleMode 🤇	LowMode AighMode O Nothing Set Disp	0.0 Interporation V Full
Schulz reflection method	Absorpt	on coeffiejen 133.0 1/cm Thickness 0.2 cm 2Theta 38.5	3 deg. 💿 1/Kt
Defocus file Select- TXT2 C¥CTR¥I	DATA¥ODFPoleFigu	et andom¥defocus¥DEFOCUS_F.TXT TextDisp ⊙ 1/Ra Pro	ofile Limit Alfa Defocus val Free 💟
Standardize OutFiles	⊙ TXT2 ○ TXT	Search minimum Rp%(Cubic only) ValueODF-B ValuODF-A	Cancel Calc ODF File
Filemake success !!			

登録されたファイルを確認

Defocus の登録するファイルの先頭はミラー指数でなければなりません。

🔏 TextDisplay 1.13S C:¥CTR¥DATA¥ODFPoleFigure¥random¥defocus¥DEFOCUS_F.TXT

File Help

filename,alfanumber,alfastartangle,alfastep,function-n,mm, 16/04/11 3.10 for DefocusCalc, 111_chFB0S_2.TXT,16,0.0,5.0,5,7.0,0.996810023261569,0.0067643904415228655,-5.195374344988798E-4,1.563028427 200_chFB0S_2.TXT,16,0.0,5.0,5,7.0,0.9985658803450581,-5.425320466262325E-4,1.1017873974498673E-4,-5.95784437 220_chFB0S_2.TXT,16,0.0,5.0,5,7.0,1.0041178616409216,-0.008445127701160854,6.728557897000935E-4,-2.480123346

TXTDisplay.jar で表示しています。









FIG. 2. Decrease in intensity with increasing tilt angle Φ for different diffracting planes of a zirconium specimen with random orientation.

CTRパッケージ付属ソフトウエア TenckhoffCalc ソフトウエアで相関状態を確認



赤が測定データ、青がTenckhoffの計算曲線に良く一致している事が分かります。



計算結果をdefocusに指定する事もあります

配向試料の極点データ処理

ファイル選択

🖉 ODFPolefigure1. 1.23ET[17/03/31] by CTR
File Linear(3D) Tookit Help InitSet Rp%
Files select ASC(RINT-PC) Ill-OSC.ASC 200-OSC.ASC 220-OSC.ASC
Description Smoothing Previous Next C#CTR#DATA#ODFPoleFigure#111-OSC.ASC 1,1,1 Change Cycles 2 Weight 9
Backgroud delete mode
Image: Schulz reflection method
Image: Select rest of the Select r
StanGardize – OutFiles Asc O Ras O TXT2 O TXT Search minimum Rp%(Cubic only) ValueODF-B ValuODF-A Cancel Calc ODF File

選択したデータが表示される。



バックグランド処理とdefocus補正にチェックしてCalc



各種ODF向けファイルの作成

🖀 PFtoODF2 6.15T[16/10/31]															
File	Option Symmetric	c Softwar	e Dar	ta											
г	Outside text														
	Inside text					-									
	Labotex	ymmetries	after	Schoenfil	les/	7-	O (cubic)			×					
	Stadard ODF	1.0 <	<=c	1.0	alfa	90.0	beta	90.0	gamı	m 90.0		L	C AutoCł	nange	
	Siemens						-								
	TexTools(txt)	ile(TXT(b,	intens)	,TXT2(a,b	o,intens.))	h,k,l	2Thet	а	Alfa Area	Trans	AlfaS	AlfaE	Select	
	TexTools(pol)	_chB0DS_2	.TXT				1,1,1	38.42	2	0.0->75.0		0.0	75.0		
	popLA(RAW)	_chB0DS_2	2.TXT				2,0,0	44.64	4	0.0->75.0		0.0	75.0		
	220-OSC	_chB0DS_2	2.TXT				2,2,0	65.0		0.0->75.0		0.0	75.0		
							2,1,0	0.0				0.0	0.0		
							2,1,1	0.0				0.0	0.0		
							2,2,1	0.0				0.0	0.0		
							1,0,0	0.0				0.0	0.0		
							1,1,0	0.0				0.0	0.0		
							1,1,1	0.0				0.0	0.0		
							2,1,0	0.0				0.0	0.0		
							2,1,1	0.0				0.0	0.0		
							2,2,1	0.0				0.0	0.0		
	Comment 111-OSC_chB0DS_2.TXT 200-OSC_chB0DS_2.TXT 220-OSC_chB0DS_2.TXT														
	Symmetric type	Full			Ep	if file sa	ve	-Labo	tex(E bote	PF),popLA(I	RAW) fil	ename-			

Keyを操作すれば各種ODF向けファイルが作成される。

3D極点図から等高線極点図切り替え

<pre>M ODFPolefigure1.5 1.23ET[17/03/31]</pre>								
File	Linear(3	D) T	0	olKit	Help	InitSet		
Files	X-Sca	le						
-Calc	PoleF	igure		ЗD	<u> </u>	111-050		
F	revious	N	9:	Co	ntour	DATA¥C		



等高線数が40本で表示されているが変更は極点図をマウスクリック



```
極点図の拡大
```





ODF解析結果の再計算極点図と入力極点図から入力極点図のErrorを行う事が出来ます。

ODFPoleFigure1_5,ODFPoleFigure2 ソフトウエアでは最小化 Rp%機能がありますが、CTR パッケージソフト ウエア(評価版 CTR ソフトウエア)が必要です。

AbsCalc Schulz reflection method Absorption coefficien 1/cm	Thickness 1.0 cm 2Theta 0.0 deg. (a) 1/Kt Profile
Vetocus tile Select Image: Circle Content of Circle Content o	TextDisp
Standardize OutFiles Asc Ras O TXT2 TKT Search minimum Rp%(Cubic only)	ValueODF-B ValuODF-A Cancel Calc ODF File

最小化R p %の効能

/ 2005Polefigure1.5 1.23T[16/10/31] by CTR	
File Linear(Contour) ToolKit Help InitSet Rp%	
Files select	
ASC(RINT-PC) V 200-OSC.ASC 200-OSC.ASC 220-OSC.ASC	
Previous Next CxECTR#DATA#ODFPoleFigure#111-OSC ASC	
Backgroud delete mode	es 2 Veight 9 Disp
O DoubleMode SingleMode LowMode HighMode Nothing Set Disp	Interporation 🗸 🗌 Full
Schulz reflection method Absorption coefficien 1.0 1/cm Thickness 1.0 cm 2Theta 38.42 de	eg. (@ 1/Kt Profile
Uefocus file Select Image: Comparison of the select Image: Comparison of the select Image: Comparison of the select Image: Comparison of the select Image: Comparison of the select Image: Comparison of the select Image: Comparison of the select Image: Comparison of the select Image: Comparison of the select Image: Comparison of the select Image: Comparison of the select Image: Comparison of the select Image: Comparison of the select Image: Comparison of the select Image: Comparison of the select Image: Comparison of the select Image: Comparison of the select Image: Comparison of the select Image: Comparison of the select Image: Comparison of the select Image: Comparison of the select Image: Comparison of the select Image: Comparison of the select Image: Comparison of the select Image: Comparison of the select Image: Comparison of the select Image: Comparison of the select Image: Comparison of the select Image: Comparison of the select Image: Comparison of the select Image: Comparison of the select Image: Comparison of the select Image: Comparison of the select Image: Comparison of the select Image: Compari	Limit Alfa Defocus val Free 🔻
Standardize - OutFiles	Calc ODF File
Search Rp% (1,1,1) 2.84% -> 1.84% (2,0,0) 3.22% -> 3.11% (2,2,0) 3.07% -> 2.82% Filemake success!!	
R p %の最小化で個々のR p %が以下の様に改善されます。 / \	
Search Rp% (1,1,1) 2.84% -> 1.84% (2,0,0) 3.22% -> 3.11% (2,2,0) 3.07% > 2.82% Filemake success!!	
/# ValueODEVE 2.10VET[16/10/31] by CTR	
File Help Resolusion:5.0 Mode(1) TextDisplay	ビRn%前のRn%
Normalized Polefigure 111 100 110 C¥CTR¥DATA¥ODFPoleFigure¥CTRODF	
Recalculated Poletigure 111 100 110 pole:TPF	1
Rp% 1.8 3.1 2.8 Average= 2.5 %	TR¥DATA¥ODI
30 %	DIDE
poie-	BIPF
Aver	age= 3.0 %
	5.0% - 2.5%
-1.5	
-3.0	
0 Alpha(deg.) 90 g	

更に、配向全般をサポートしているソフトウエア群も CTR パッケージソフトウエアに含まれます。

M ODFPolefigure1.5 1.23T[16/10/31] by CTR	
File Linear(Contour) ToolKit Help InitSet Rp%	
Files select ASC(RINT-PC)	PFtoODF3
Calcration Condition Previous Nex Backgroud delete mode- © Doubl AbsCalc Schulz reflection Detocus file Select © CALC Standardize - OutFiles © Asc	SoftWare
	ImageTools
	PopLATools
	ODFAfterTools
	PoleOrientationTools
	DataBaseTools
	FiberTools
	StandardODFTools
	DefocusTools
	ClusterTools
	InverseTools
	MeasureDatatoAscTools
	OrientationDisplayTools