

ODF解析のための簡易CTRパッケージソフトウェア

ODFPoleFigure1.5S

Ver2.03

ODFPoleFigure1.5S-PFtoODF2-ValueODF

ODFPoleFigure1.5の改良版で、

ホルダの異なるデータの解析、

ホルダ指定による大量データの一括処理が可能

従来、ODF解析後Error評価していましたが、

事前に、Rp%を計算し、最適な処理により最少なRp%を求めた

極点処理が可能になりました。

Defocus 曲線を作成時、規格化なしで作成した時の defocus ファイル名は DEFOCUS_NOTNORM_F

になり、このファイルを用いる場合、配向試料の計算結果の再規格化あり、なしが選択出来ます。

しかし、規格化なしではRp%の最適化は行えません。必ず、規格化ありとして下さい。

2022年08月16日

HelperTex Office

目次

1. 概要
2. ソフトウェアの構成
3. 動作環境
4. 操作の流れ
 4. 1 d e f o c u s ファイルの作成
 4. 2 s a m p l e 測定データからODF入力データ作成
 4. 3 E r r o r R p % の計算
5. ODF P o l e F i g u r e 1. 5 S の使い方
 5. 1 d e f o c u s 補正ファイルの作成
 5. 1. 1 透過法 d e f o c u s の対応
 5. 2 s a m p l e データ解析
 5. 3 ODF入力ファイルの作成
 5. 4 入力極点図と再計算極点図 E r r o r R p % の評価
 5. 4. 1 L a b o T e x
 5. 4. 2 T e x T o o l s
 5. 4. 3 S t a n d a r d O D F
 5. 4. 4 N e w O D F (r i g a k u)
 5. 4. 6 C T R O D F
 5. 4. 7 V e c t o r
6. 解析に伴う、規格化強度と M a x 強度
7. R p % の自動決定
 7. 1 d e f o c u s データの作成
 7. 2 T X T 2 データから d e f o c u s ファイルの作成
 7. 3 R p % の検索モードによる極点処理
 7. 4 R p % 検索結果の E r r o r 表示
8. 等高線表示
9. バックグラウンド
10. 透過極点図、反射極点図接続
11. データ処理後の E r r o r 評価
12. 大量 S a m p l e の一括処理
 12. 1 A S C データを指数毎に同一のファイル名に変更
 12. 2 d e f o c u s ファイル作成
 12. 3 一括処理
 12. 3. 1 対象データを指定
 12. 3. 2 対象ホルダを指定
 12. 3. 3 処理結果
13. 大量データの平均化

1. 概要

本ソフトウェアは、結晶方位分布関数（Crystallite Orientation Distribution Function：ODF）向けに複数の入力極点図を簡単な操作で作成する事を目的にしたソフトウェア群である。

操作方法を理解出来たら、オプション機能が充実している CTR フルパッケージに移行してください。

入力極点図データは、R i g a k u - A S C I I データであるが、PAnalytical や Bruker データの場合、CTR パッケージに含まれるデータ変換ソフトウェアで A S C I I データに変換すれば、同様に扱える。

操作方法を簡単にするために、極点図測定ではサンプル名と極点図ファイル名は、サンプル名をホルダ名、極点図ファイル名の先頭に指数で作成する。ホルダ、サンプル名にはスペースを用いない事

例えば、光学系補正データ（r a n d o m 試料）、s a m p l e A, s a m p l e B を測定する場合

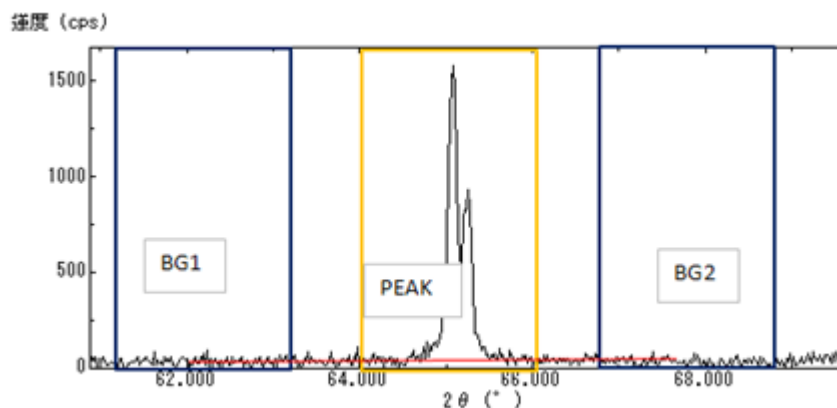
```
C:\CTR\DATA\Aluminum\A\111.ASC
C:\CTR\DATA\Aluminum\A\200.ASC
C:\CTR\DATA\Aluminum\A\220.ASC
```

```
C:\CTR\DATA\Aluminum\B\111.ASC
C:\CTR\DATA\Aluminum\B\200.ASC
C:\CTR\DATA\Aluminum\B\220.ASC
```

```
C:\CTR\DATA\Aluminum\random\111.ASC
C:\CTR\DATA\Aluminum\random\200.ASC
C:\CTR\DATA\Aluminum\random\220.ASC
```

とします。

バックグラウンド測定



極点測定は、正味 p e a k 積分測定を行っています。

材料を傾けて測定すると、ピークの幅が広がりバックグラウンド領域に広がってくるので十分離れた角度でバックグラウンド測定を行って下さい。

極点図のカウント単位は c p s です。

極点図の計算を行った場合、極点図の中心は平均値とした(Ver1.12 以降)

defocus測定

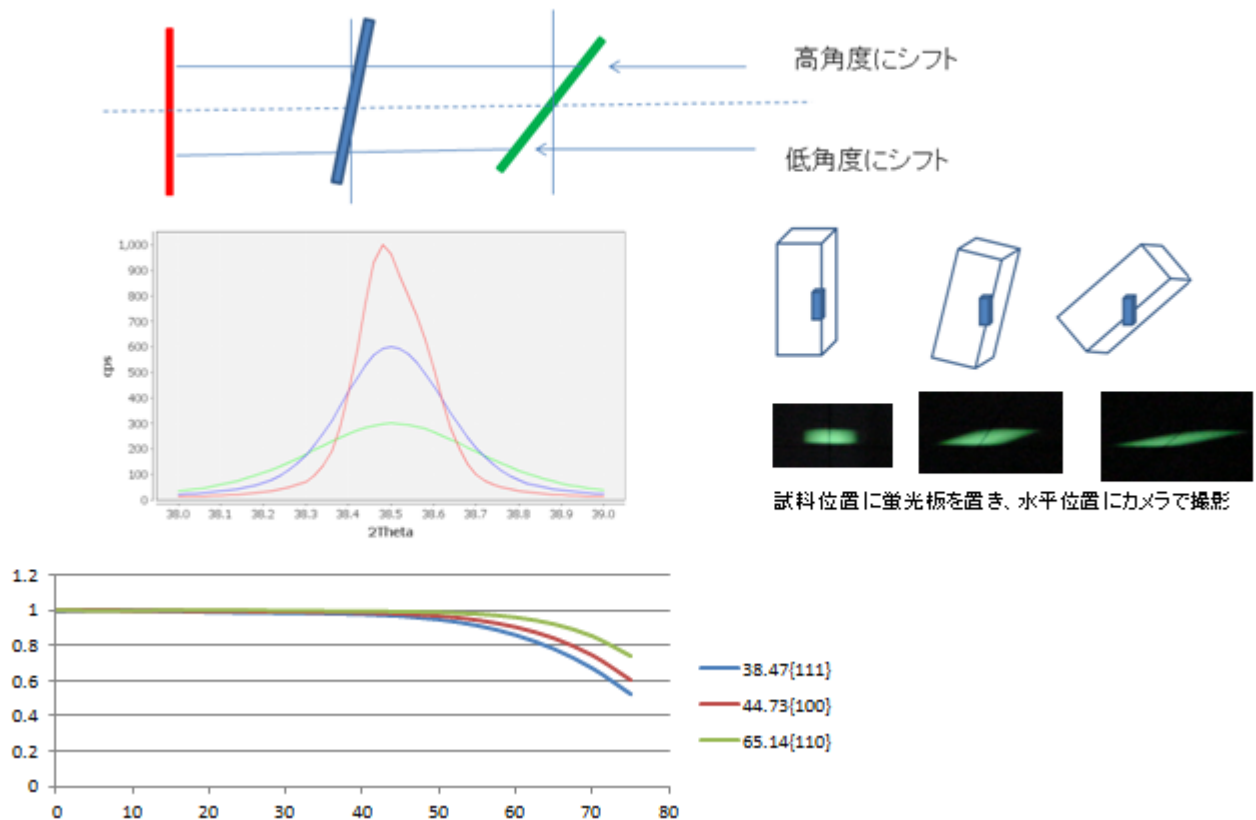
極点図測定では試料をビーム対して傾けて測定しています。

傾ける事で、回折線は 2θ 方向に広がります。

試料を 90° 傾けると回折線の強度はゼロになります。

補正量を少なくするために α は 0° から 75° とし、更に補正を行います。

試料を傾けるとプロファイルが広がる(Defocus)



極点図の中心付近はフラットになりますが、なぜかデコボクする事があり、中心3点の平均値でその3点の領域データとしています。

例えば、 5° ステップで測定する場合、 α 方向 90° 、 85° 、 80° のデータを平均して 90° 、 85° 、 80° のデータとしております。

Schulzの反射法の場合、測定材料には関係なく、測定スリット幅、測定 2θ 角度、煽り角度(α 確度)に依存したデータになります。

透過法データではdefocusは発生しないと考えています。

2. ソフトウェアの構成

ODFPoleFigure1_5(Ver1.08以降、限定仕様と FullCTR で ToolKit の変更)

極点図処理 (バックグラウンド除去、RD補正、平滑化、吸収補正、defocus補正)

PFtoODF(限定仕様の場合PFtoODF2, FULLCTRの場合PFtoODF3)

各種ODF入力データの作成

ValueODF (VF)

入力極点図と再計算極点図からエラーRp%を計算し、入力極点図、処理方法の評価を行う。

この機能も Cubic の場合、ODFPoleFigure1.5 に含まれていて事前に最小の Rp%を算出する補正を行います。ただし Rp%の計算機能は FULLCTR の機能です。

*FULLCTR とは、CTR フルパッケージソフトウェアです。

3. 動作環境

Windows 32, Windows 64bit

java 3Dが32bit版のため、javaは32bit版をインストールする

java-32Bitruntimeとjava 3Dがインストールされている事
インストールされていない場合、

C:\¥CTR¥javazip がパッケージに含まれている場合

最初に jre-XXXX-windows-i586

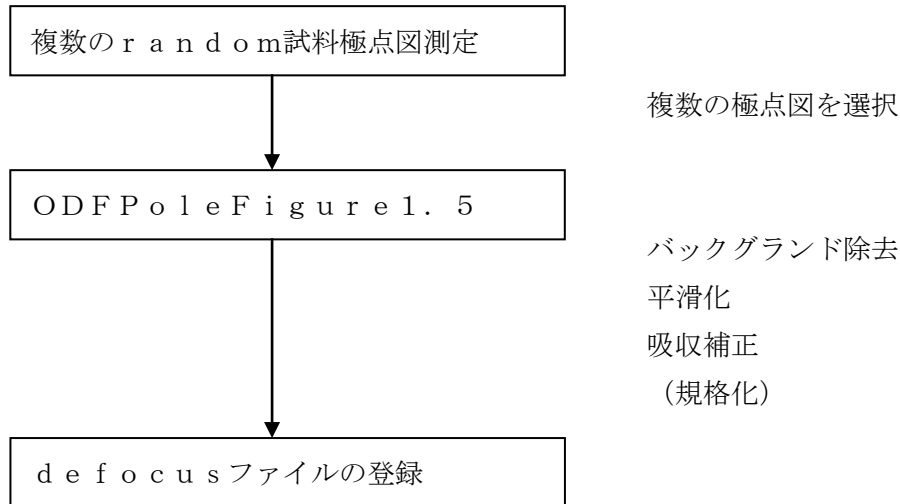
次に j3d-1_5_2-windows-i586

をインストールしてください。

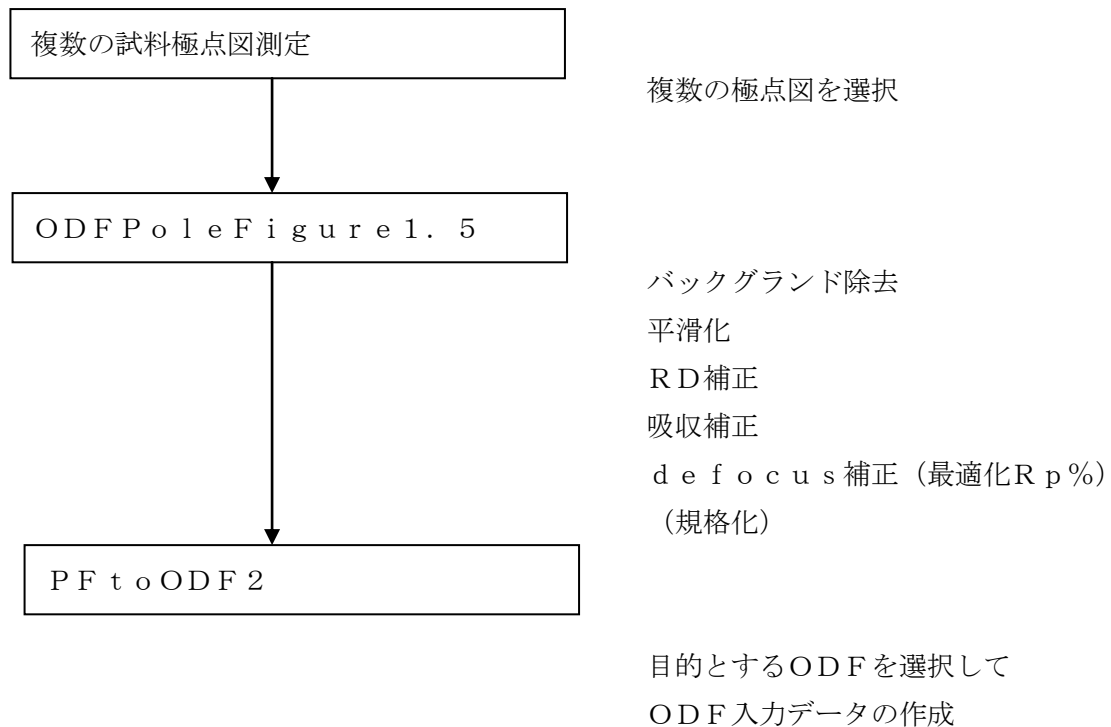
パッケージに含まれていない場合、Oracleサイトからdownloadして下さい。

4. 操作の流れ

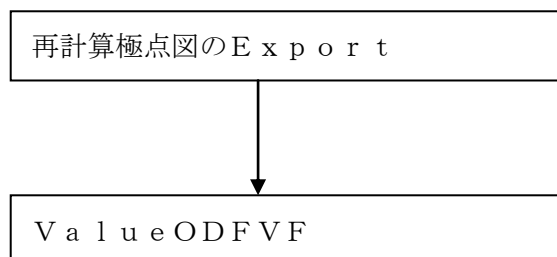
4. 1 d e f o c u s ファイルの作成



4. 2 s a m p l e 測定データからODF入力データ作成



4. 3 E r r o r Rp%の計算

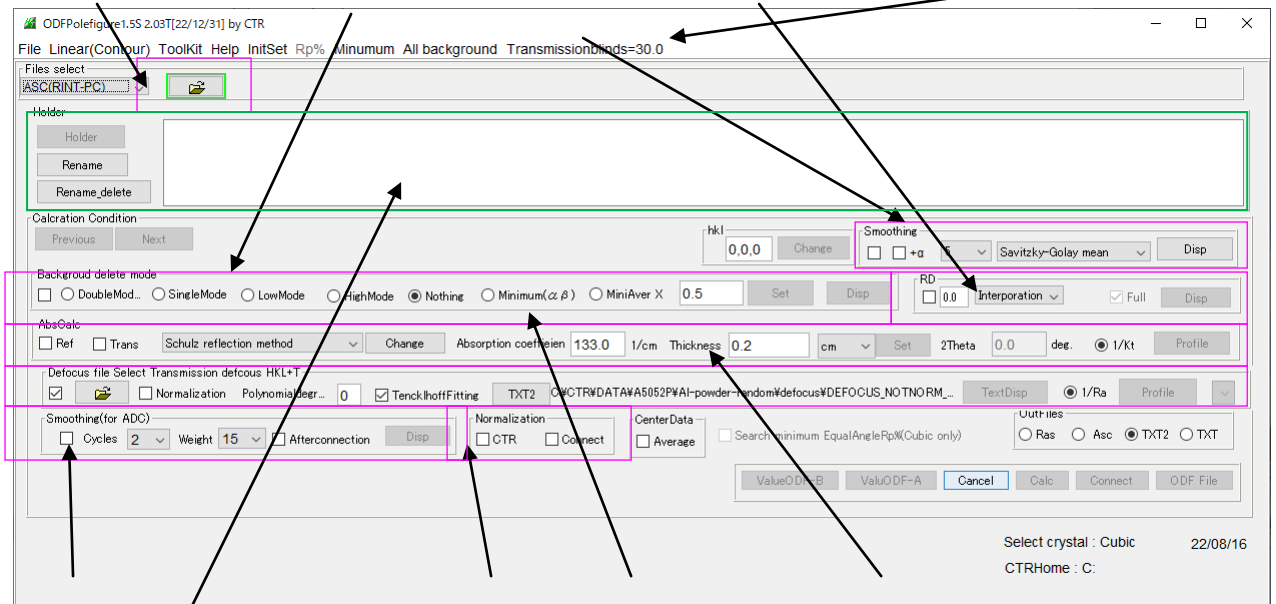


CTRフルパッケージの場合は、ODFPoleFigure1.5 ソフトウェア内部で予備 Rp%を計算しますが、ODF 解析の結果とは異なります。最終的には、ODF解析結果から Rp%を確認してください。

5. ODF Pole Figure 1.5Sの使い方

C:\¥CTR¥bin¥ODFPoleFigure の立ち上げ

ファイル選択 バックグラウンド削除 平滑化 RD補正 透過法ブラインド設定



平滑化 ホルダ指定 規格化 吸収補正 d e f o c u s 補正

ファイル選択 (or ホルダ) ホルダ機能は、12項で説明

複数のASCIIデータの選択 (or ホルダ)

バックグラウンド除去

バックグラウンド測定したBG1 (低角度) とBG2 (高角度) の計算方法を指定

doubleMode: BG1 とBG2 の平均値

SingleMode BG1 とBG2 の低い強度

LowMode BG1 の強度

HighMode BG2 の強度

Nothing 強度は0

Minimum(α , β) 測定データの最小値

MiniAver X α 平均強度の最小値に係数を掛けて決定 (或いはBG強度入力)

平滑化

各極点図位置 (α , β) に Weight の重み付け、周辺4点の移動平均を Cycles 回数繰り返す。

RD補正

測定時の試料取り付け位置の補正

吸収補正

試料厚さが薄い場合、補正を行う。

d e f o c u s 補正

光学系強度を無配向試料測定から補正を行う。

規格化

測定極点図の平均値で補正を行う。

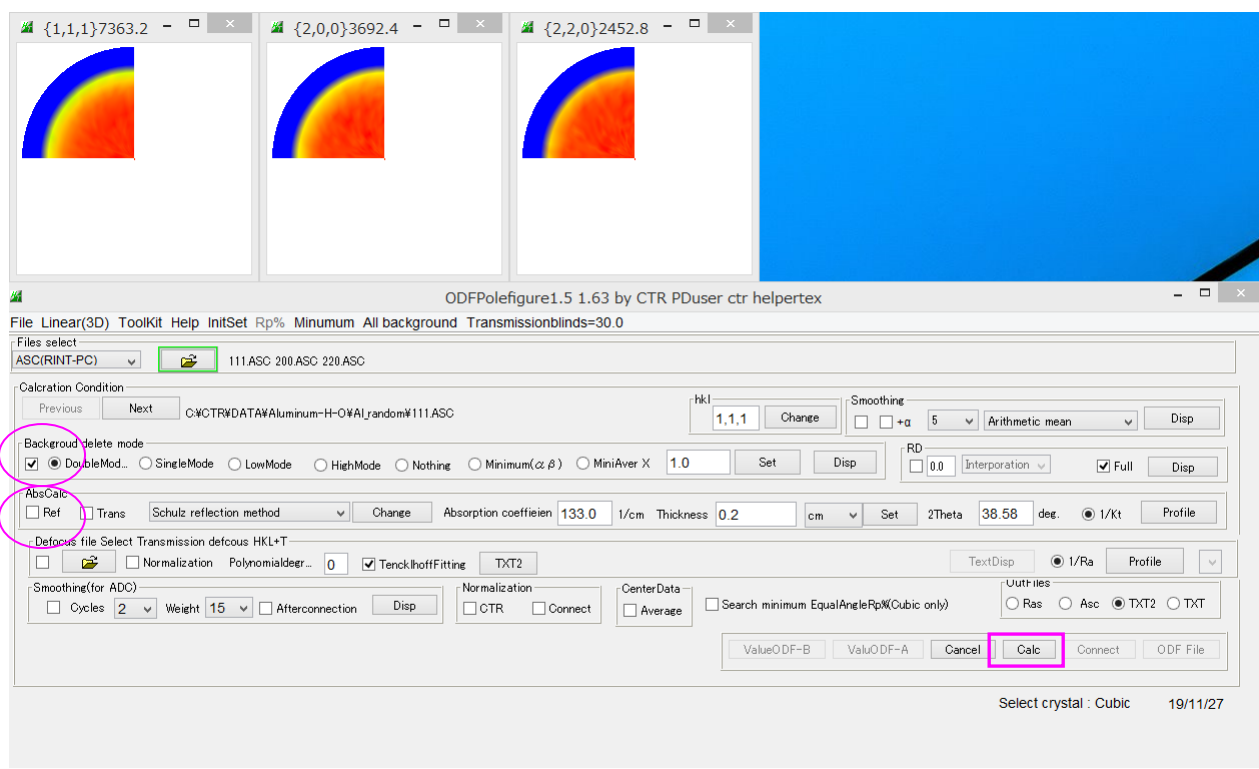
C:\¥CTR¥work¥stdNORM¥stdNORM.txt に “RINT” を登録すると正極点と同等

“CTR” の場合、極点図の中心と外周の重みを 1/2 とする。

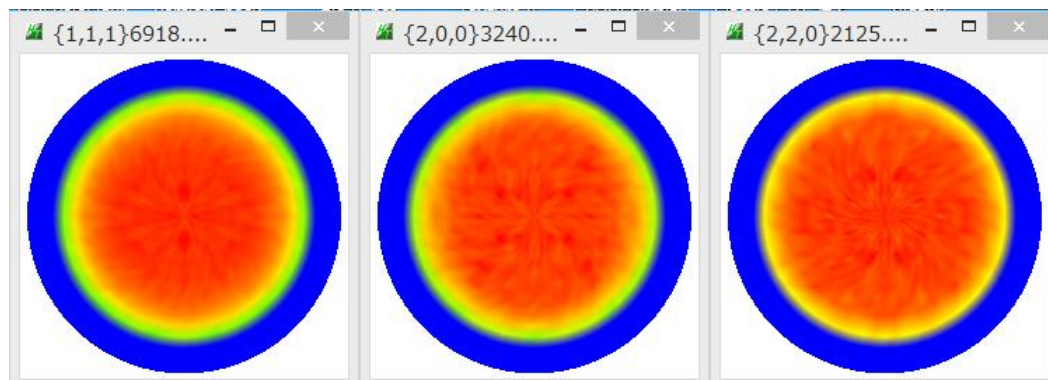
ToolKit

F u l l S e t のCTRパッケージの場合、T o o lの使用が可能

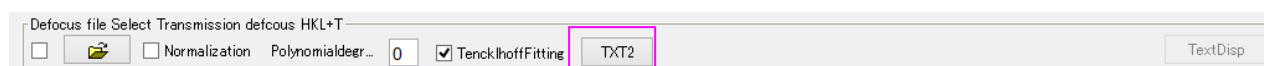
5. 1 d e f o c u s 補正ファイルの作成



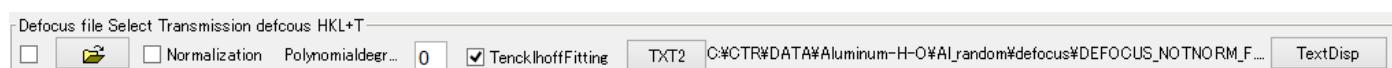
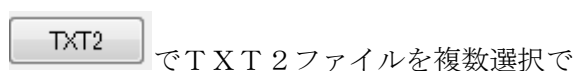
バックグラウンド除去と規格化なしを指定してCalc



表示は、バックグラウンド削除極点図{指数}最大強度
defocusファイルの選択



defocus ファイル名が表示されている場合、 で取り消す。



新しいD e f o c u sファイルが登録される。

randomホルダ

defocus	ファイル フォルダ	2017/04/19 7:22
111	17 KB RINT2000アスキー	2014/03/13 7:40
200	17 KB RINT2000アスキー	2014/03/13 7:40
220	17 KB RINT2000アスキー	2014/03/13 7:40
200_chFB0S_2	22 KB テキスト文書	2014/04/08 11:08
220_chFB0S_2	22 KB テキスト文書	2014/04/08 11:08
DefocusMulti	1 KB テキスト文書	2014/04/08 11:34
111_chFB0_2	30 KB テキスト文書	2017/04/19 7:19
200_chFB0_2	30 KB テキスト文書	2017/04/19 7:19
220_chFB0_2	30 KB テキスト文書	2017/04/19 7:19
SLITTTTHETAFILE	1 KB ファイル	2017/04/19 7:19

.ASC は入力極点図

_chFB0S_2.TXT は極点処理結果で、

F: 極点図の対称操作処理

B0: バックグラウンド処理が DoubleMode

S: 強度の規格化处理

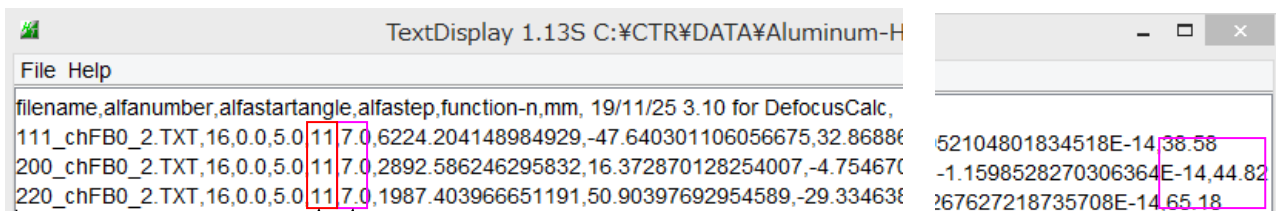
_2: TXT 2 ファイル (α 、 β 、極密度)

_1F.TXT 1 個の defocus 多項式近似ファイル

DEFOCUS__F.TXT 複数の defocus 多項式近似ファイル

Real0_1F.TXT Excel でプロファイル表示データ

多項式近似ファイルの表示



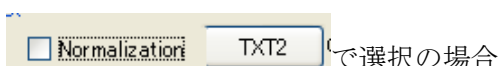
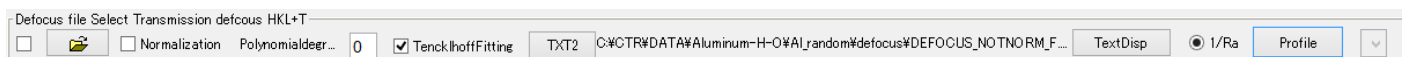
データの先頭が指数で始まっている。

入力データに対して自動で多項式近似式を決めるのは先頭の指数部分

Ver1.14 以降は、スリット幅と 2 Theta 角度も登録されています。

Ver1.62 以降は多項式次数は自動もサポート

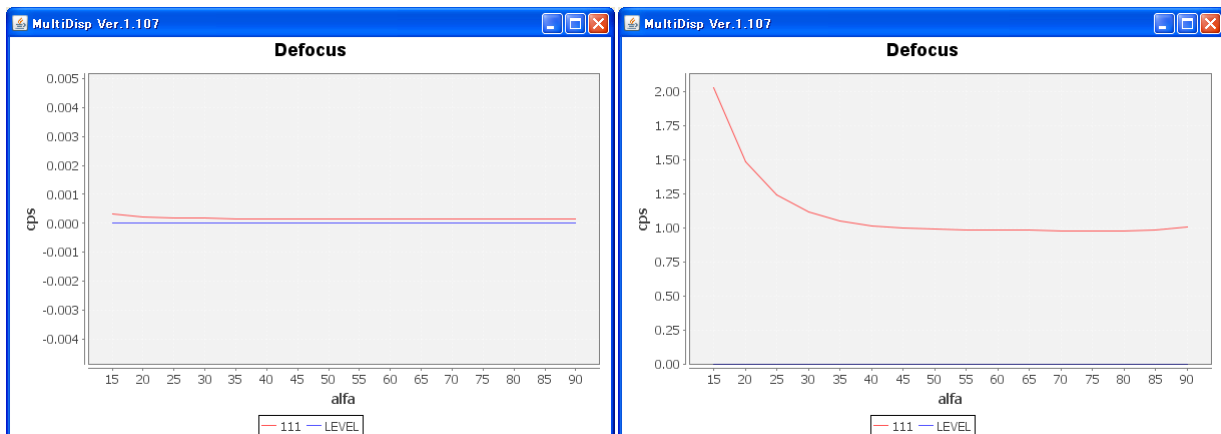
Profile で確認



で選択の場合



で選択の場合



defocus プロファイルにうねりが発生する場合、TenckhoffFitting を選択

内部規格化されない defocus 曲線

内部規格化された defocus 曲線

5. 1. 1 透過法 defocus の対応

random サンプルの透過測定、反射測定を行い、バックグラウンド除去、吸収補正を行い TXT2 を作成し、defocus に登録します。

```
filename,alfanumber,alfastartangle,alfastep,function-n,mm, 18/07/05 3.10 for DefocusCalc,  
100-randomR_chB2U_2.TXT,11,0.0,5.0,5.4.0,1791.1363628142017,5.149741637224214,-0  
100-randomT_chB2U_2.TXT,11,40.0,5.0,5.1.0,139129.59922880543,-9728.982031433585,;
```

透過 defocus 曲線の指数の後に”T”を追加し、save する。

```
filename,alfanumber,alfastartangle,alfastep,function-n,mm, 18/07/05 3.10 for DefocusCalc,  
100-randomR_chB2U_2.TXT,11,0.0,5.0,5.4.0,1791.1363628142017,5.149741637224214,-0  
100T-randomT_chB2U_2.TXT,11,40.0,5.0,5.1.0,139129.59922880543,-9728.98203143358
```

反射法の場合、解析する反射指数と登録されている defocus 曲線指数の確認を行うが、透過法の場合、確認が行われません。計算結果 TXT2 ファイル名に_ch 以降に”D”が追加されていることを確認してください。

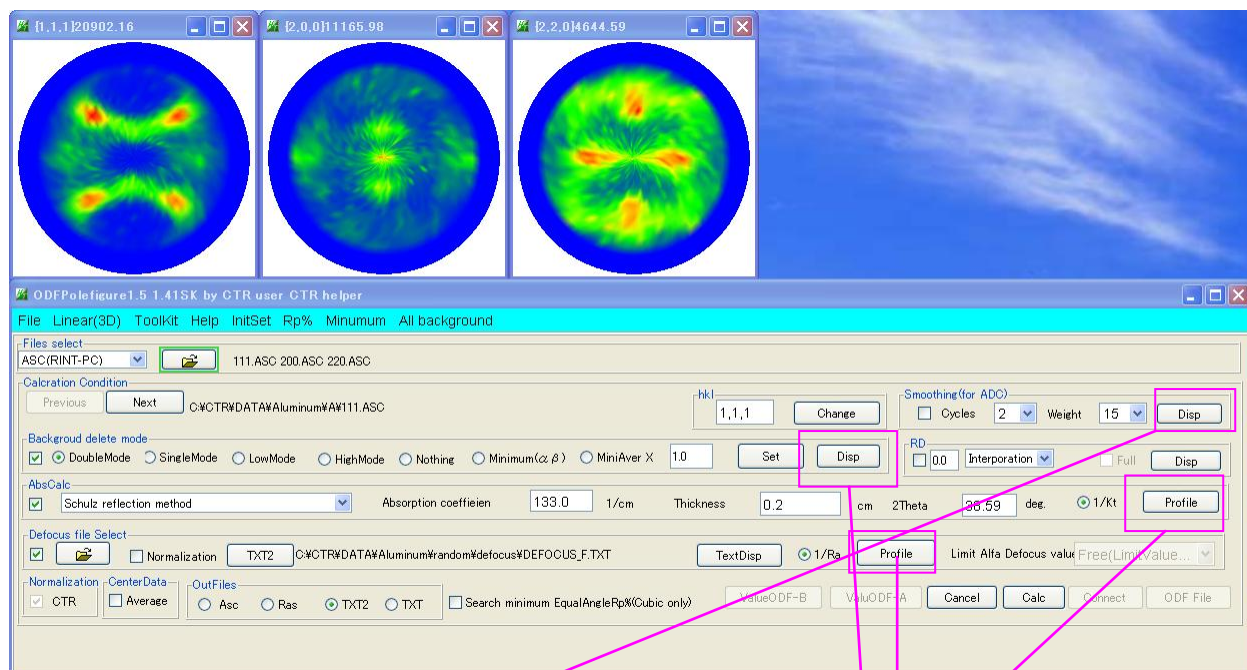
もし、透過用 defocus ファイルが見つからなくても、計算は行われるが、以下のメッセージを表示する。

The defocus line of the transmission method isn't found to the defocusfile. Filemake success !!

反射法は defocus ファイルが見つからない場合、計算は行われません。

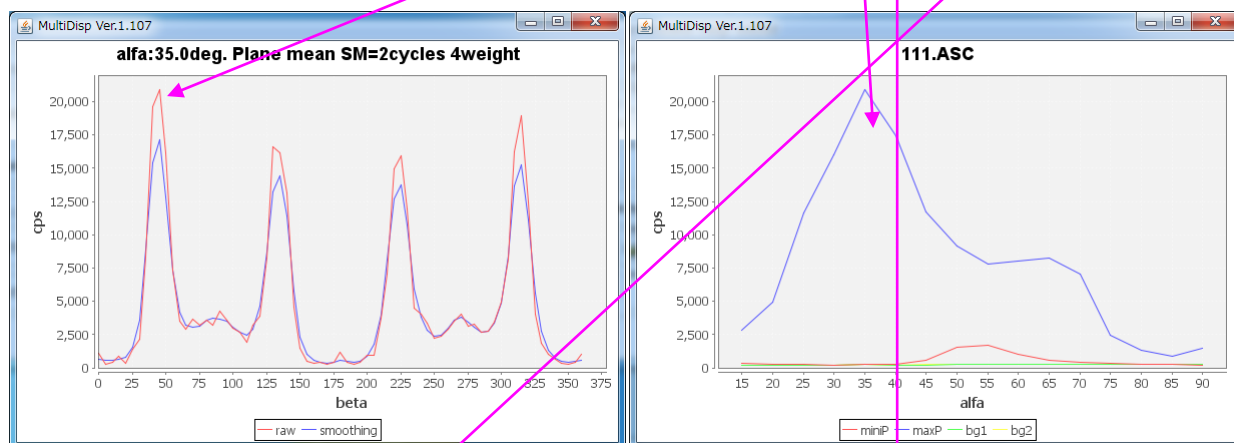
5. 2 sampleデータ解析

複数のASCII極点図を選択



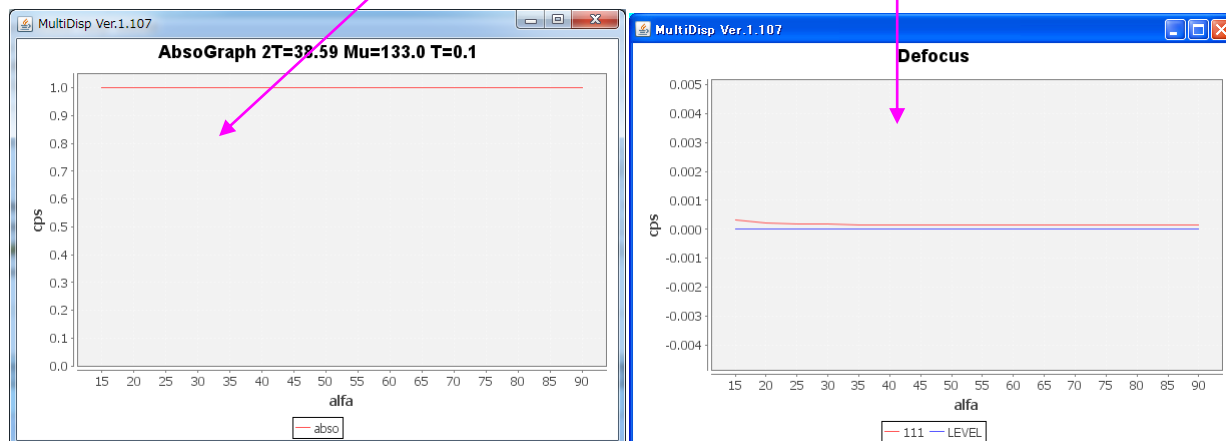
平滑化の確認

バックグラウンドの確認



吸収補正の確認

defocusの確認

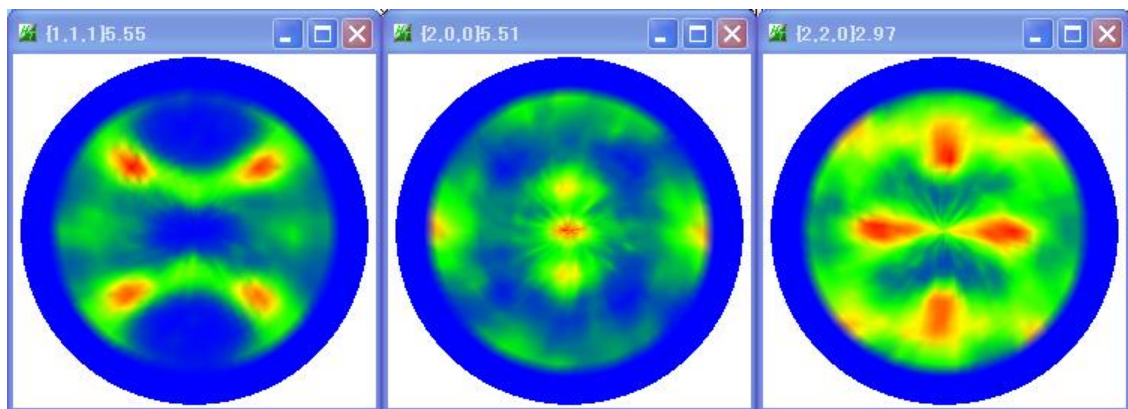


random評価を行う場合、平滑化は行わないでください。
一括補正を行う。



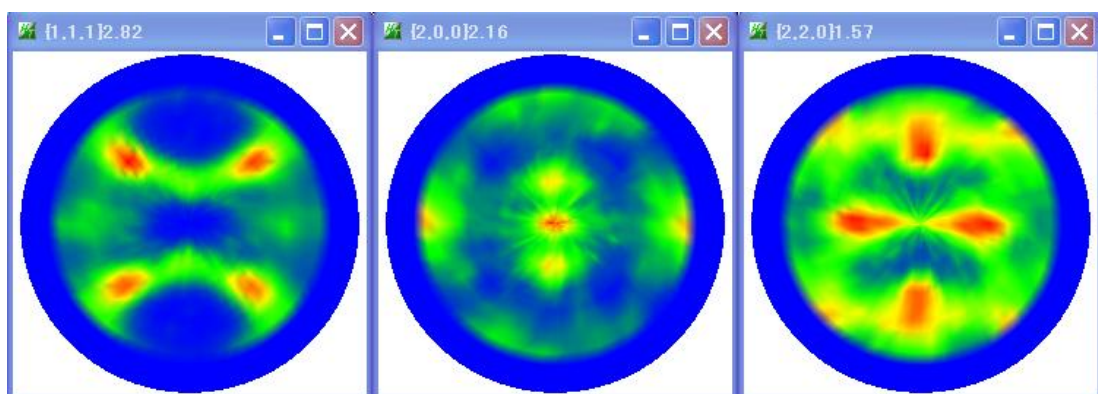
内部規格化ありの場合

Normalization CenterData
☒ CTR ☒ Average



内部規格化なしの場合

Normalization CenterData
☐ CTR ☒ Average

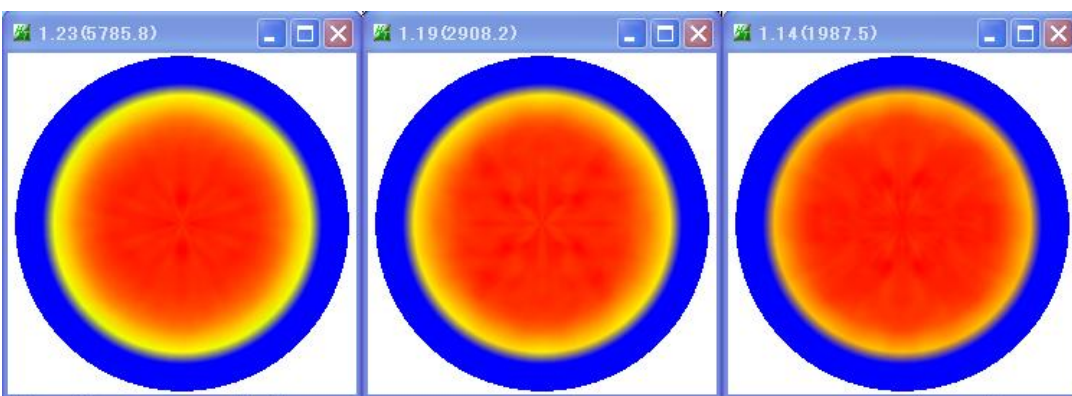


上記規格化密度が大きく異なるのは、規格化定数 $\langle I \rangle$ が大きく異なる事が原因です。

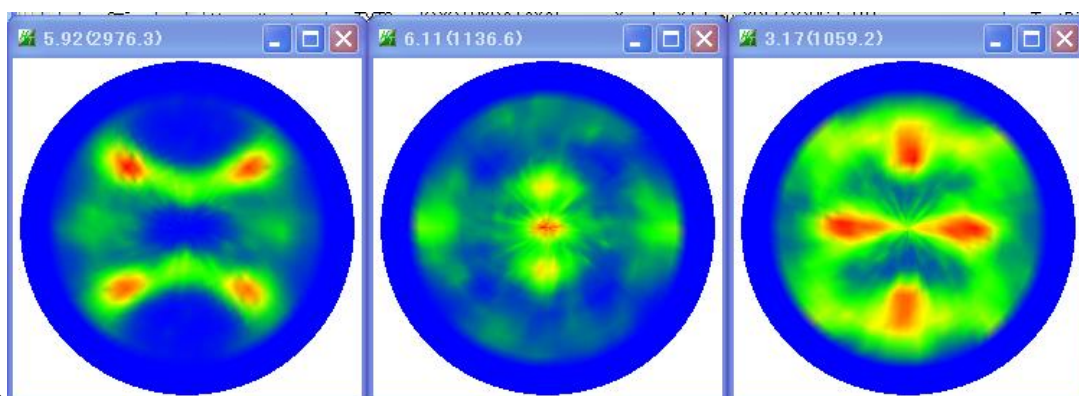
以下に双方の規格化定数 $\langle I \rangle$ を比較します。 CTR では、random+内部規格化をお勧めいたします。

最大値（規格化定数）を表示しています。

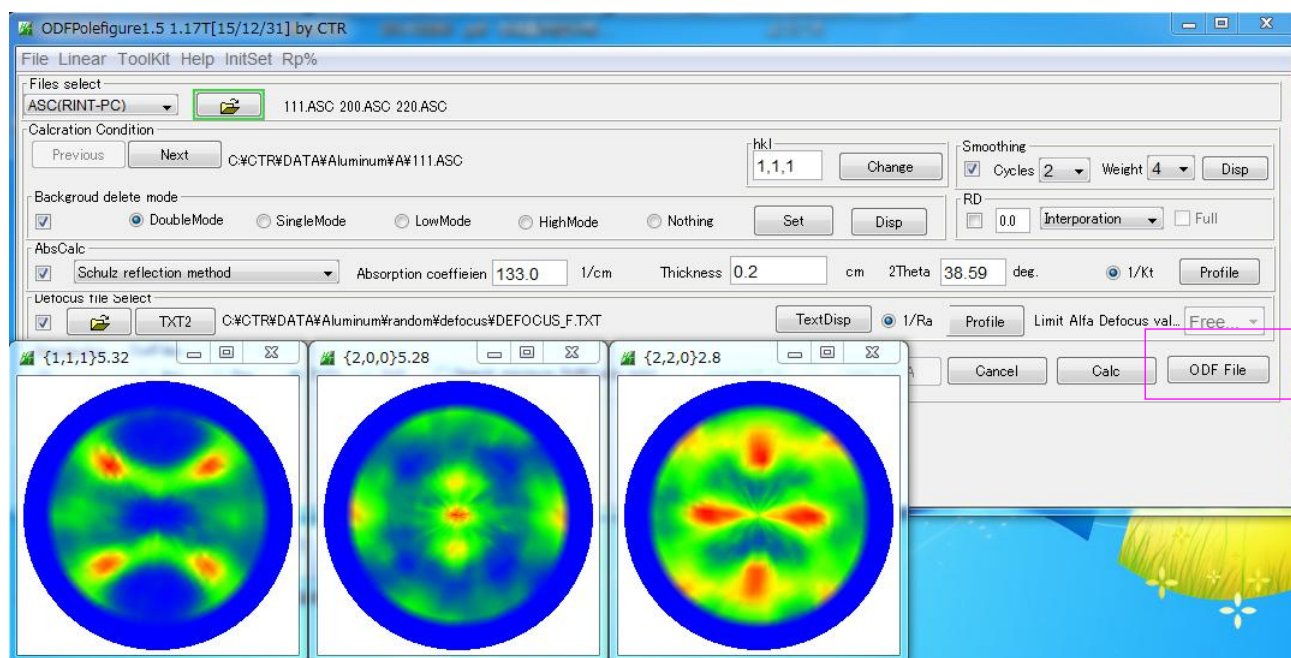
random



sample



処理結果の極点図が表示され、ODFFile コマンドが選択可能になる。



作成された処理結果ファイル

C:\CTR\DATA\Aluminum\A\111.ASC
C:\CTR\DATA\Aluminum\A\200.ASC
C:\CTR\DATA\Aluminum\A\220.ASC
C:\CTR\DATA\Aluminum\A\111_chA24BOUDS_2.TXT
C:\CTR\DATA\Aluminum\A\200_chA24BOUDS_2.TXT
C:\CTR\DATA\Aluminum\A\220_chA24BOUDS_2.TXT

_ch 以降のファイル名

A24	平滑化 4 p o i n t s の 2 C y c l e s
B0	バックグラウンド削除は doubleMode
U	吸収補正処理
D	d e f o c u s 処理
S	極密度の規格化
_2	TXT2 データ(α 、 β 、極密度)

5. 3 ODF入力ファイルの作成

F u l l S e t の C T R パッケージの場合、P F t o O D F 3 ソフトウェアが表示

ODF P o l e F i g u r e の画面

処理結果ファイル」が表示される。

Cancel Calc ODF File

ODF P o l e F i g u r e の画面

処理結果ファイル」が表示される。

PFtoODF2 6.12T[14/10/31]

File Option Symmetric Software Data

Lattice constant

Structure Code(Symmetries after Schoenflies) 7 - O (cubic)

a 1.0 <=b 1.0 <=c 1.0 alfa 90.0 beta 90.0 gamm 90.0

LC AutoChange

SelectFile(TXT(b,intens),TXT2(a,b,intens.))	h,k,l	2Theta	Alfa Area	Trans	AlfaS	AlfaE	Select
111_chA24B0UDS_2.TXT	1,1,1	38.59	0.0->75.0	<input type="checkbox"/>	0.0	75.0	<input checked="" type="checkbox"/>
200_chA24B0UDS_2.TXT	2,0,0	44.85	0.0->75.0	<input type="checkbox"/>	0.0	75.0	<input checked="" type="checkbox"/>
220_chA24B0UDS_2.TXT	2,2,0	65.22	0.0->75.0	<input type="checkbox"/>	0.0	75.0	<input checked="" type="checkbox"/>
	2,1,0	0.0		<input type="checkbox"/>	0.0	0.0	<input type="checkbox"/>
	2,1,1	0.0		<input type="checkbox"/>	0.0	0.0	<input type="checkbox"/>
	2,2,1	0.0		<input type="checkbox"/>	0.0	0.0	<input type="checkbox"/>
	1,0,0	0.0		<input type="checkbox"/>	0.0	0.0	<input type="checkbox"/>
	1,1,0	0.0		<input type="checkbox"/>	0.0	0.0	<input type="checkbox"/>
	1,1,1	0.0		<input type="checkbox"/>	0.0	0.0	<input type="checkbox"/>
	2,1,0	0.0		<input type="checkbox"/>	0.0	0.0	<input type="checkbox"/>
	2,1,1	0.0		<input type="checkbox"/>	0.0	0.0	<input type="checkbox"/>
	2,2,1	0.0		<input type="checkbox"/>	0.0	0.0	<input type="checkbox"/>

Comment 111_chA24B0UDS_2.TXT 200_chA24B0UDS_2.TXT 220_chA24B0UDS_2.TXT

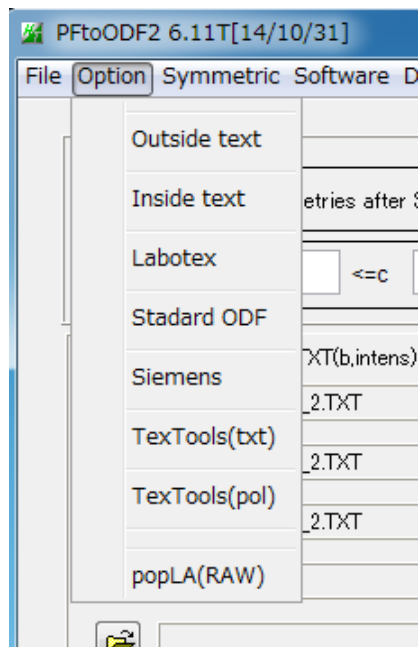
Symmetric type Full

Ept file save

Labotex(EPF),popLA(RAW) filename
AluminumA

格子定数とODFファイルに含める極点図を選択してファイルを作成する。

ODFファイルの切り替えで、各ODF向けデータ作成が作成可能



ODFの選択は Option から選択する

作成されたファイル

```
C:\CTR\DATA\Aluminum\111.ASC
C:\CTR\DATA\Aluminum\200.ASC
C:\CTR\DATA\Aluminum\220.ASC
C:\CTR\DATA\Aluminum\111_chA24BOUDS_2.TXT
C:\CTR\DATA\Aluminum\200_chA24BOUDS_2.TXT
C:\CTR\DATA\Aluminum\220_chA24BOUDS_2.TXT
C:\CTR\DATA\Aluminum\AluminumA.epf
C:\CTR\DATA\Aluminum\popla.DFB
C:\CTR\DATA\Aluminum\popla.RAW
C:\CTR\DATA\Aluminum\texttools111_0.pol
C:\CTR\DATA\Aluminum\texttools200_1.pol
C:\CTR\DATA\Aluminum\texttools220_2.pol
C:\CTR\DATA\Aluminum\111_chA24BOUDS_2StdODF.TXT
C:\CTR\DATA\Aluminum\200_chA24BOUDS_2StdODF.TXT
C:\CTR\DATA\Aluminum\220_chA24BOUDS_2StdODF.TXT
```

LaboTex

AluminumA.epf

popLA

popla.DFB

popla.RAW

TextTools

Texttools111_0.pol

Texttools200_1.pol

Texttools220_2.pol

Standard ODF

111_ch24B0UDS_2StdODF.TXT

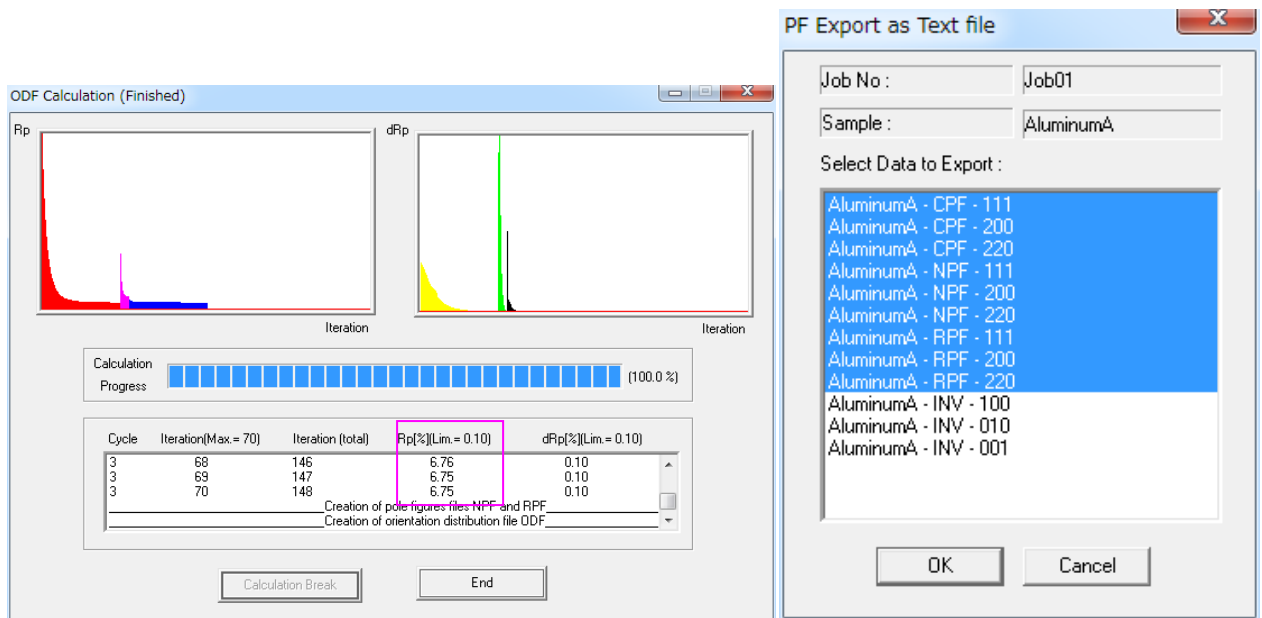
200_ch24B0UDS_2StdODF.TXT

220_ch24B0UDS_2StdODF.TXT

5. 4 入力極点図と再計算極点図 Error Rp %の評価

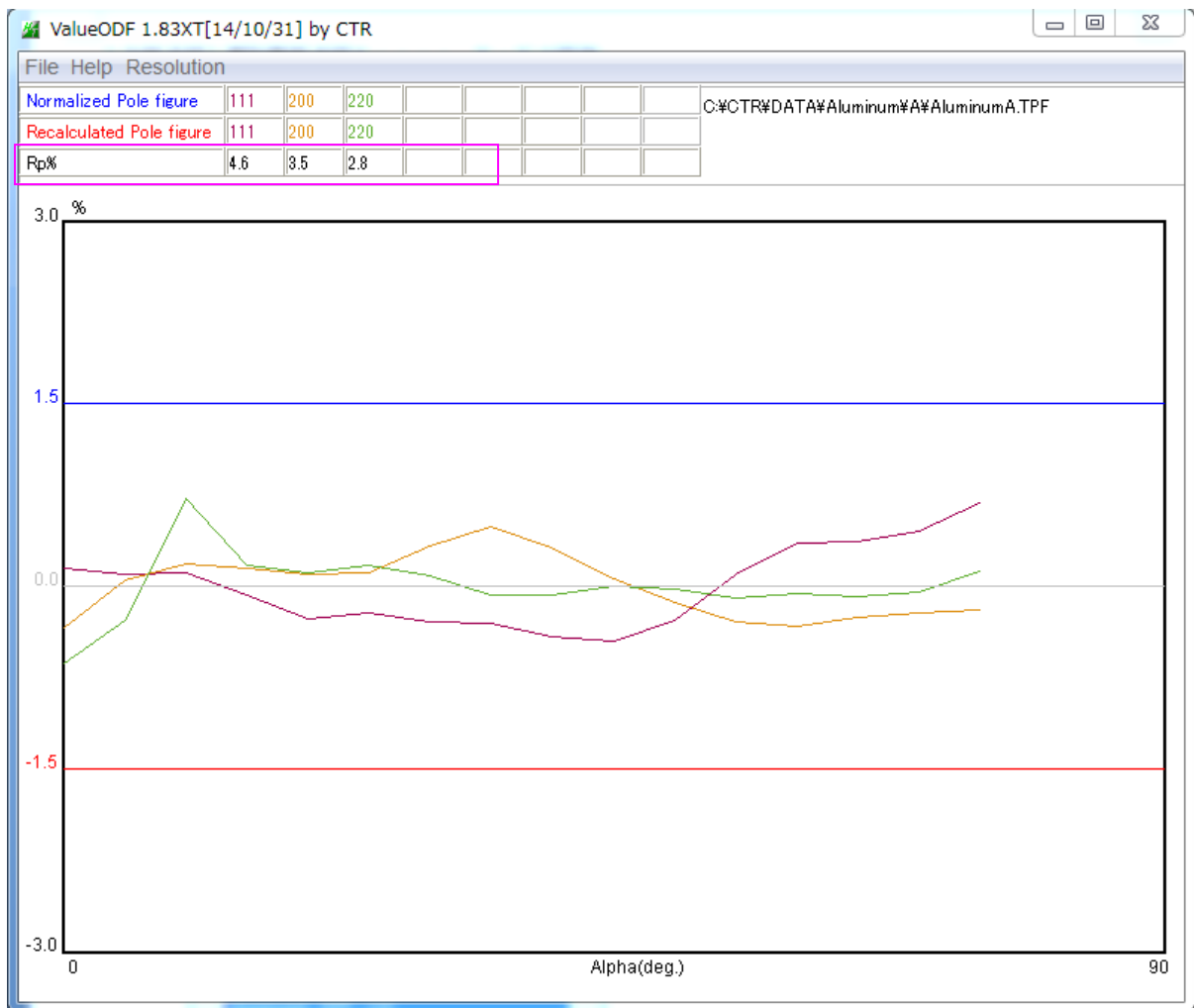
5. 4. 1 LaboTex

ODF解析を行い、極点図のExportを行う。



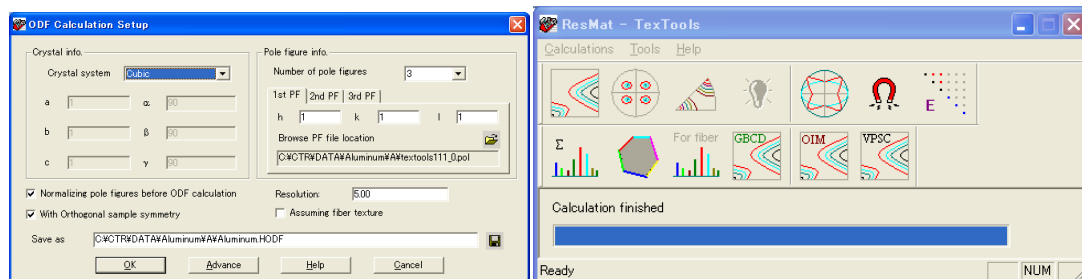
ValueODFによるRp %の表示

FileメニューからExportファイルを選択



α プロファイルが基準値 $\pm 1.5\%$ 以内であり、測定や補正に問題がない事が分かります。

5. 4. 2 TexTools



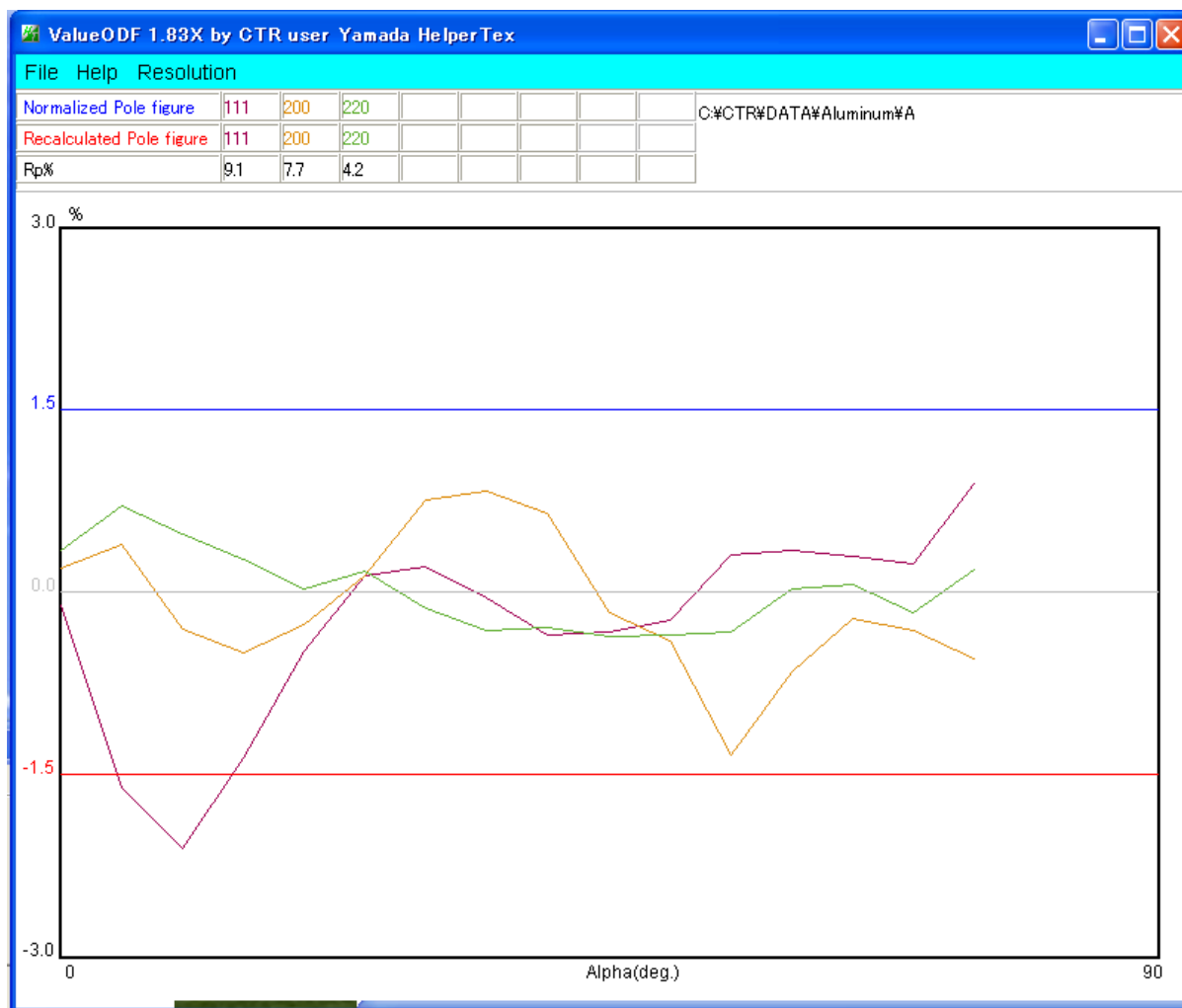
Rp%はODF 計算結果ファイルに書き出される。

15
0.0100 0.1100↓

目標 1 % に対して、11 % になった。

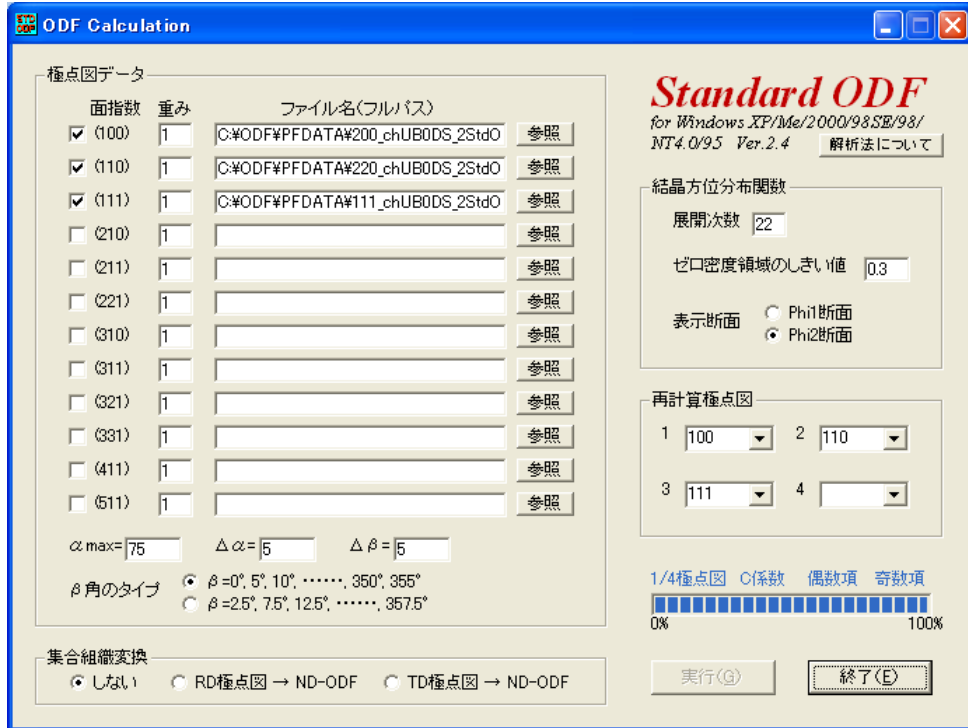
ValueODF で評価

ODF 解析後、入力極点図と同じ極点図の再計算極点図を計算する



{111} 極点図のブレが -1.5 % を外れている。

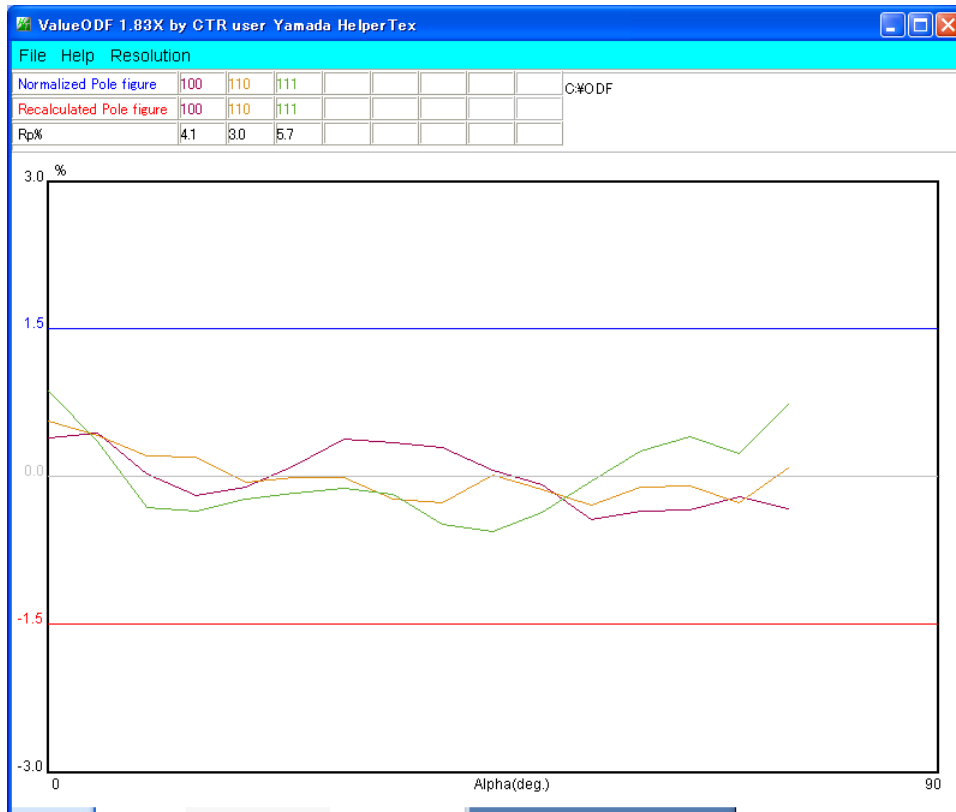
5. 4. 3 S t a n d a r d O D F



Error は OUTPUT1.TXT に書き出される。

{100} 0.70%↓、{110} 0.29%↓、{111} 0.39%↓

ValueODFでは計算直後の C:\ODF を指定して Rp %を表示



StandardODFのerrorとRp%は異なる。

5. 4. 4 NewODF (r i g a k u)

NewODFの入力ファイルはR a s ファイル、NewODFの Export ファイルは ASC ファイル詳しくは、ValueODFVF を参照してください。

5. 4. 5 CTRODF

CTRODFの入力データはTXT2ファイル,CTRODFの Export ファイルは TPF ファイルです。詳しくは、CTRODF を参照してください。

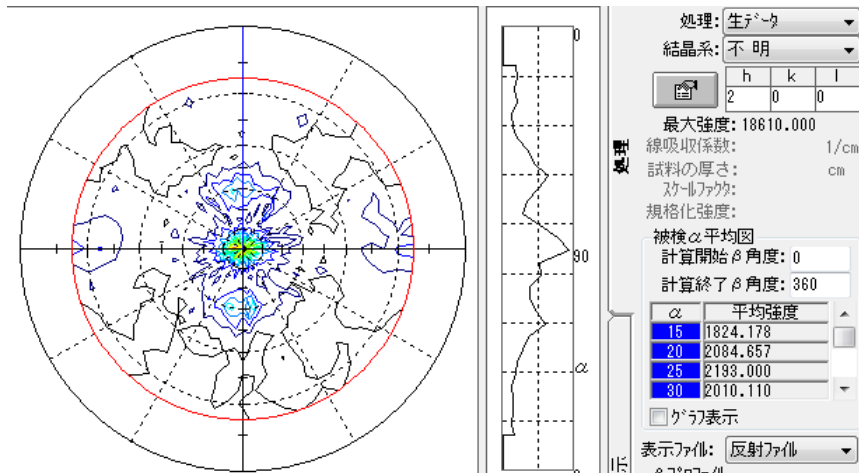
5. 4. 6 V e c t o r T o o l s

本ソフトウェアで透過反射データの接続を行い、PFtoODF3 で OutSide データを作成し V e c t o r 法解析結果から 3 6 B O X 描画、 μ - ζ ベクトル法描画を行う

6. 解析に伴う、規格化強度とMax強度

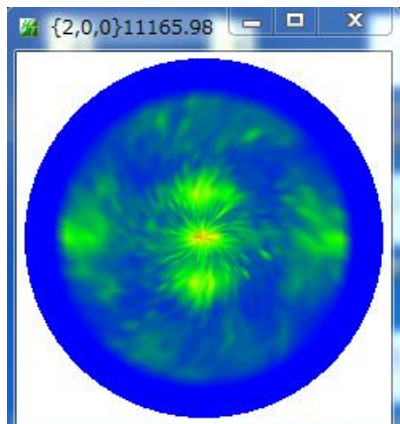
本ソフトウェアでは、データ読み込み時、cpsに変換されて表示される。

例えば、C:\CTR\DATA\Aluminum-H-O\Aluminum-O\200.ASC では
測定時の表示は

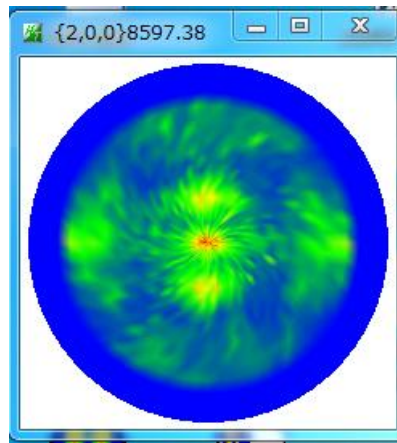


最大値は、18610counts
FT 時間： 1.66667
と、登録されている
Cps への変換は
 $18610/1.6667 = 11165.78$

本ソフトウェアで読み込むと

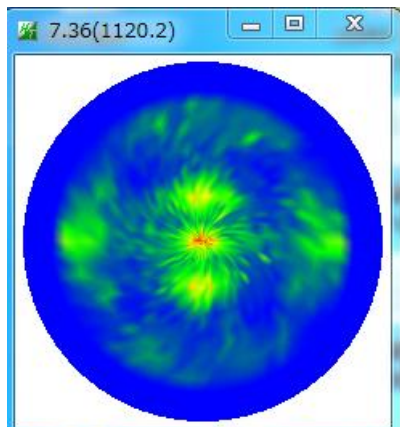
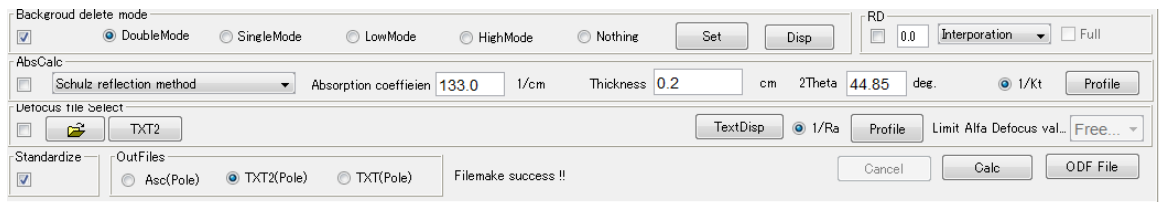


データ処理せずに Calc



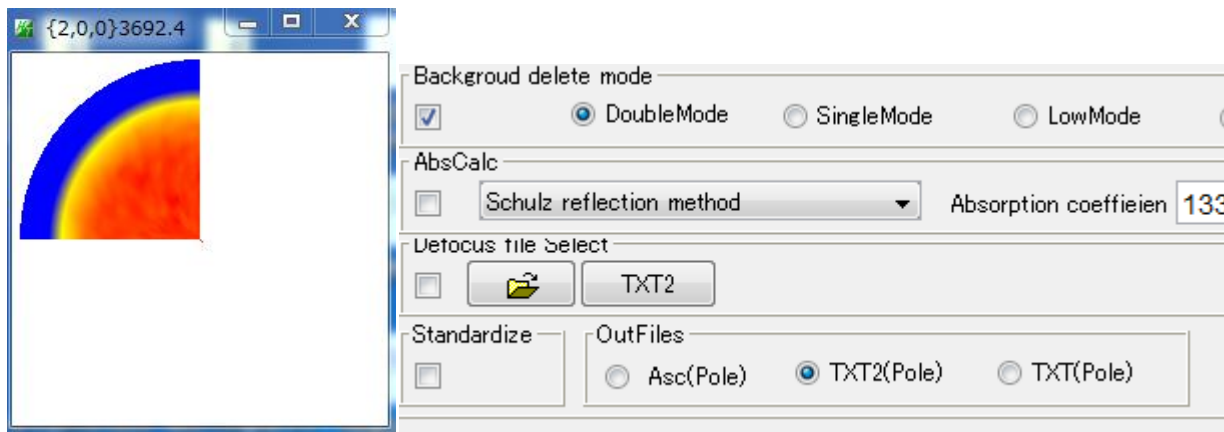
極点図の中心 ($\alpha=90$) の強度
は平均化される。
この為、 $11165.98 > 8597.38$
に変わった。

内部計算規格化

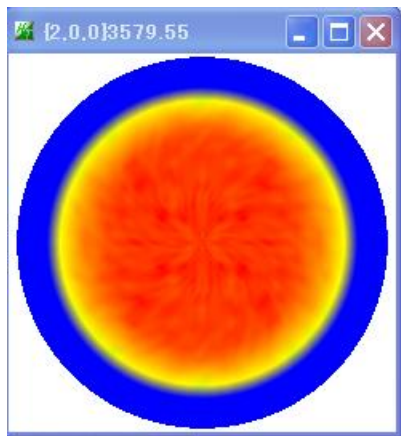


最大極密度と（規格化値）が表示される

defocus補正



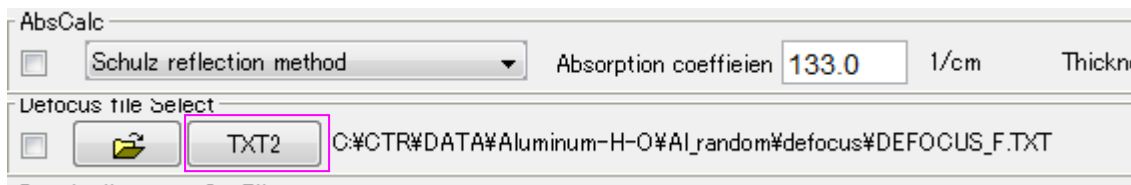
バックグラウンドを削除する。



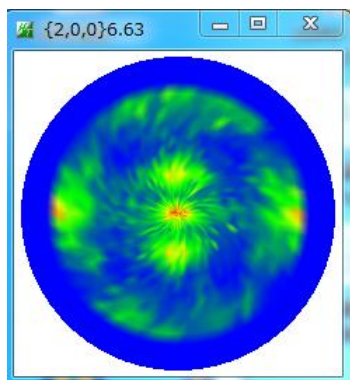
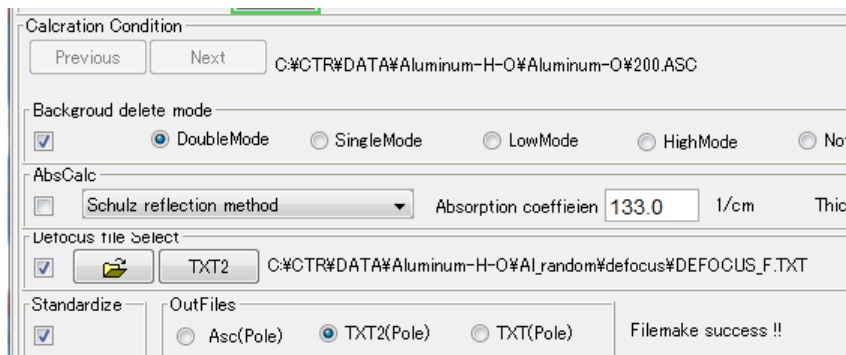
β 方向不完全データのい対称操作は
Ver1.13 以降サポートしています。

200_chB0_2.TXT	2015/07/28 6:44	テキスト文書	7 KB
111.ASC	2014/03/13 7:40	RINT200071+	17 KB
200.ASC	2014/03/13 7:40	RINT200071+	17 KB
220.ASC	2014/03/13 7:40	RINT200071+	17 KB

作成された TXT2 ファイルを defocus に登録



配向データの defocus 処理



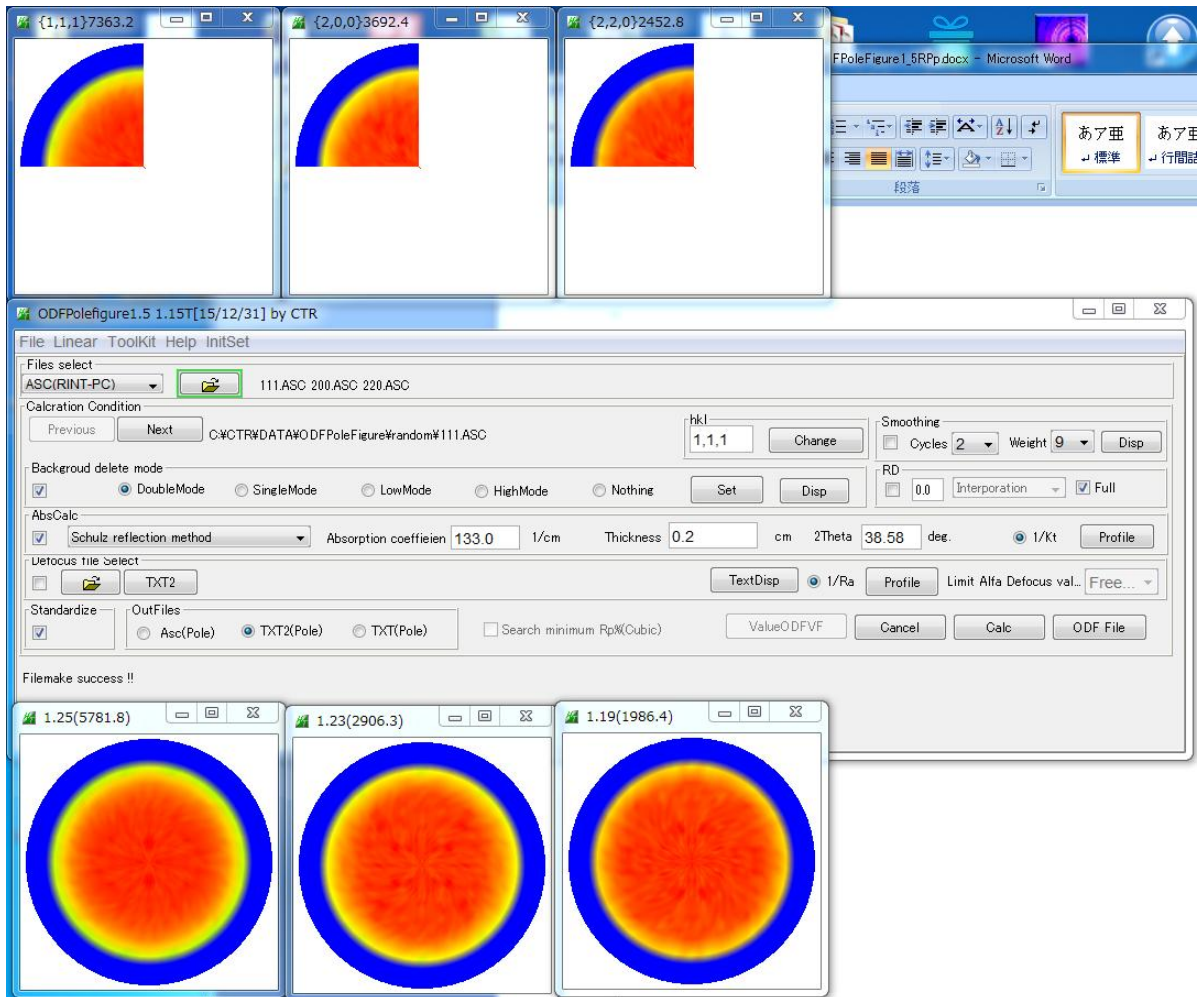
7. R p %の自動決定(Cubic 専用),Schulz スリットを用いた光学系用

Ver1.15 以降の CTR フルパッケージで機能します。

テストデータ CTR¥DATA¥ODFPoleFigure データで説明します。

7. 1 d e f o c u s データの作成

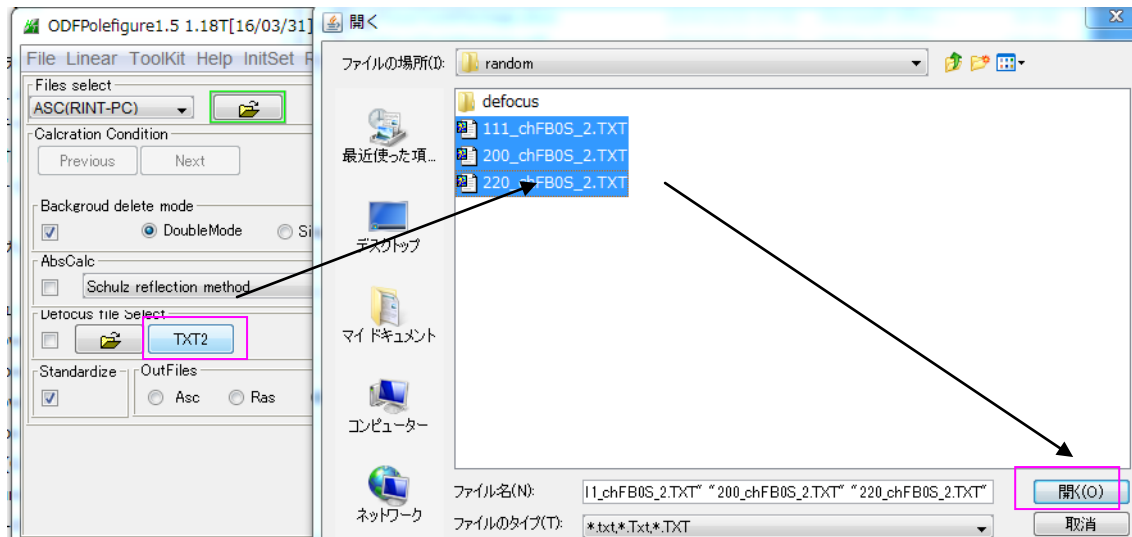
CTR¥DATA¥ODFPoleFigure¥random データを defocus 補正なしで処理



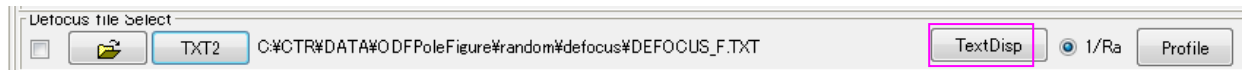
	111.ASC	2014/03/13 7:40	RINT20007ｽｷｰ	17 KB
	200.ASC	2014/03/13 7:40	RINT20007ｽｷｰ	17 KB
	220.ASC	2014/03/13 7:40	RINT20007ｽｷｰ	17 KB
	111_chFB0S_2.TXT	2015/10/05 4:32	テキスト文書	22 KB
	200_chFB0S_2.TXT	2015/10/05 4:32	テキスト文書	22 KB
	220_chFB0S_2.TXT	2015/10/05 4:32	テキスト文書	22 KB
	SLITTTTHETAFILE	2015/10/05 4:32	ファイル	1 KB

TXT2 データと測定スリット、2Theta 角度ファイルが作成されます。

7. 2 TXT2 データから defocus ファイルの作成



DEFOCUS_F.TXT として defocus ファイルが作成されます。



filename, alfanumber, alfastartangle, alfastep, function-n, mm, 15/10/05 3.10 for DefocusCalc.

111_chFB0S_2.TXT, 16, 0.0, 5.0, 5.7, 0.0, 996810023261569, 0.0067643904415228655, -5.195374344988798E-4, 1.5630284271532113E-5, -1.8492260952845102E-7, 4.92354686744974E-10, 38.58
200_chFB0S_2.TXT, 16, 0.0, 5.0, 5.7, 0.0, 9985658803450581, -5.425320466262325E-4, 1.1017873974498673E-4, -5.957844371358092E-6, 1.4087621587787994E-7, -1.2523139698631716E-9, 44.82
220_chFB0S_2.TXT, 16, 0.0, 5.0, 5.7, 0.1, 0041178616409216, -0.008445127701160854, 6.728557897000935E-4, -2.4801233462125573E-5, 4.207513185279399E-7, -2.693205038757078E-9, 65.18

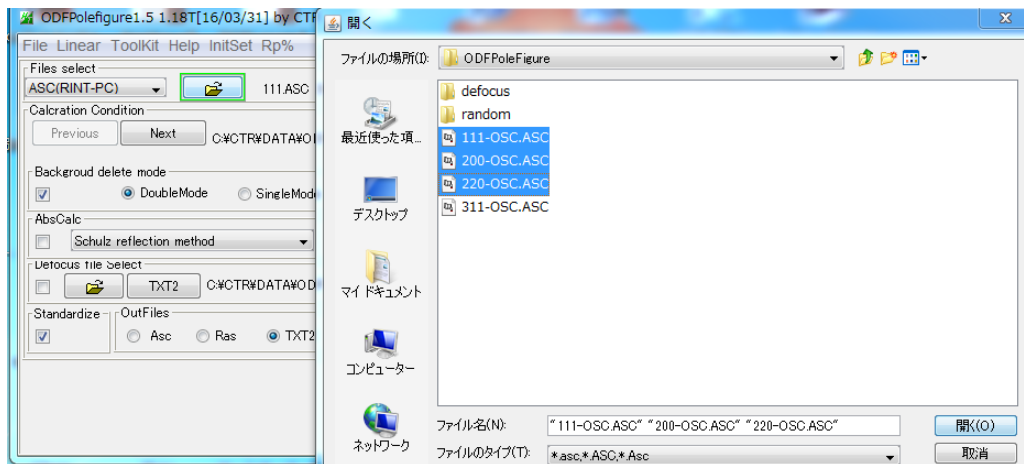
スリット幅と 2Theta 角度が新たに登録されています。

Defocus 操作で作成されるファイル

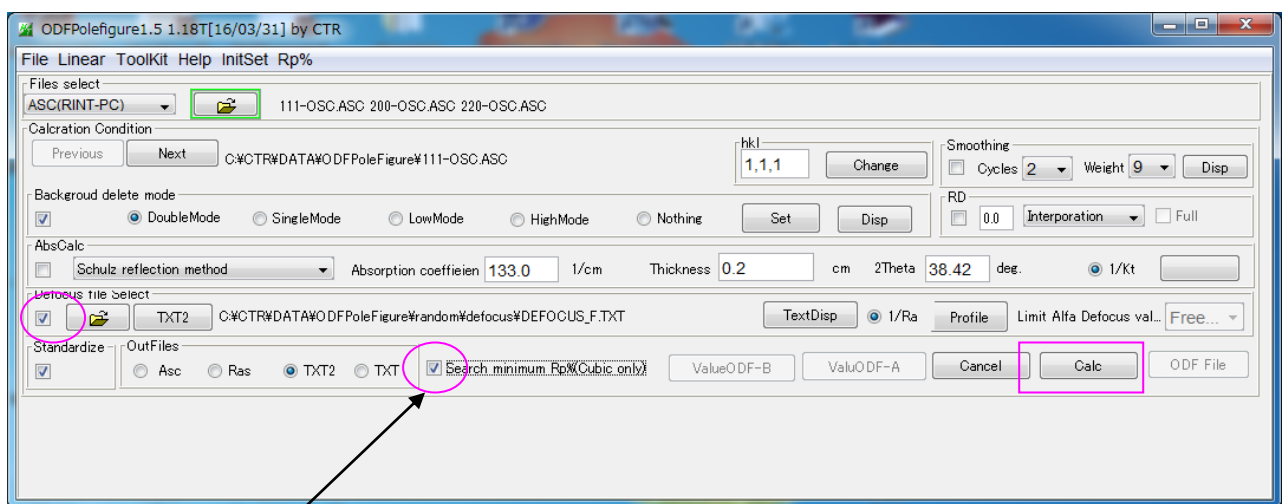
0_1F.TXT	2015/10/25 7:49	テキスト文書	1 KB
1_1F.TXT	2015/10/25 7:49	テキスト文書	1 KB
2_1F.TXT	2015/10/25 7:49	テキスト文書	1 KB
DEFOCUS_F.TXT	2015/10/25 7:49	テキスト文書	1 KB
real0_1F.TXT	2015/10/25 7:49	テキスト文書	1 KB
real1_1F.TXT	2015/10/25 7:49	テキスト文書	1 KB
real2_1F.TXT	2015/10/25 7:49	テキスト文書	1 KB

7. 3 Rp%の検索モードによる極点処理

CTR¥DATA¥ODFPoleFigure データ (5 d e g ステップのみに対応)

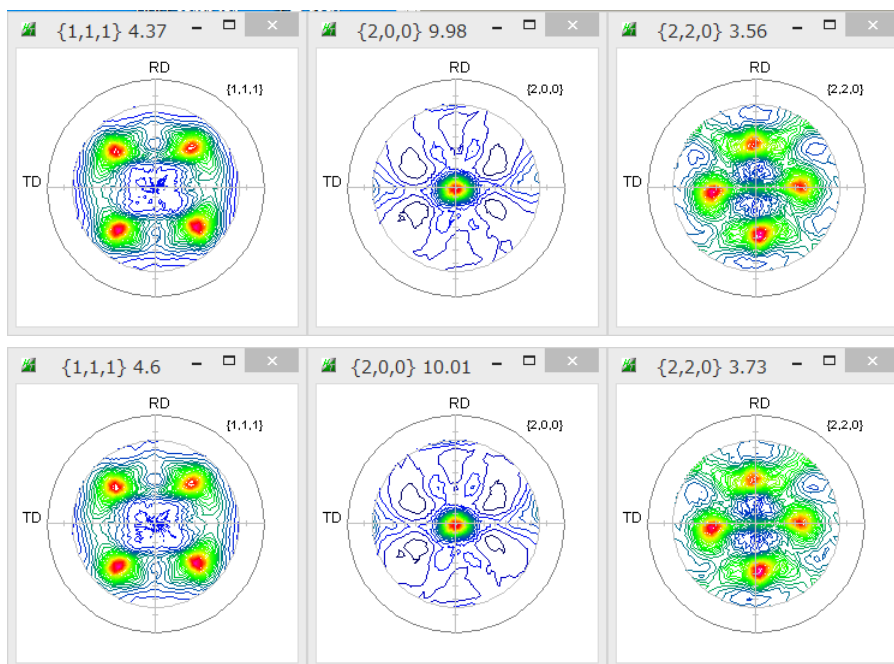


Defocus 補正処理と Rp%の検索モード



計算プログラムが別途必要で、インストールされていないとアクティブになりません。

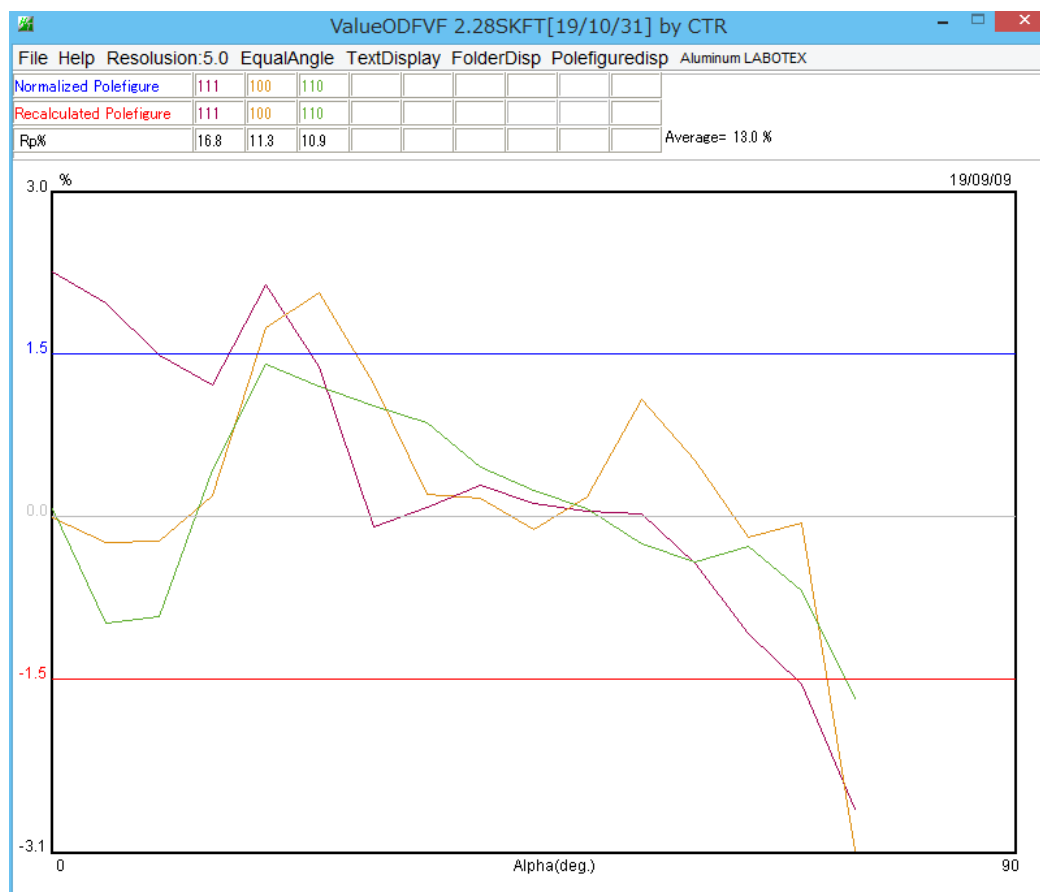
結果 (上段 : defocus 補正のみ、下段 : defocus 補正+再 defocus 処理 (Rp%))



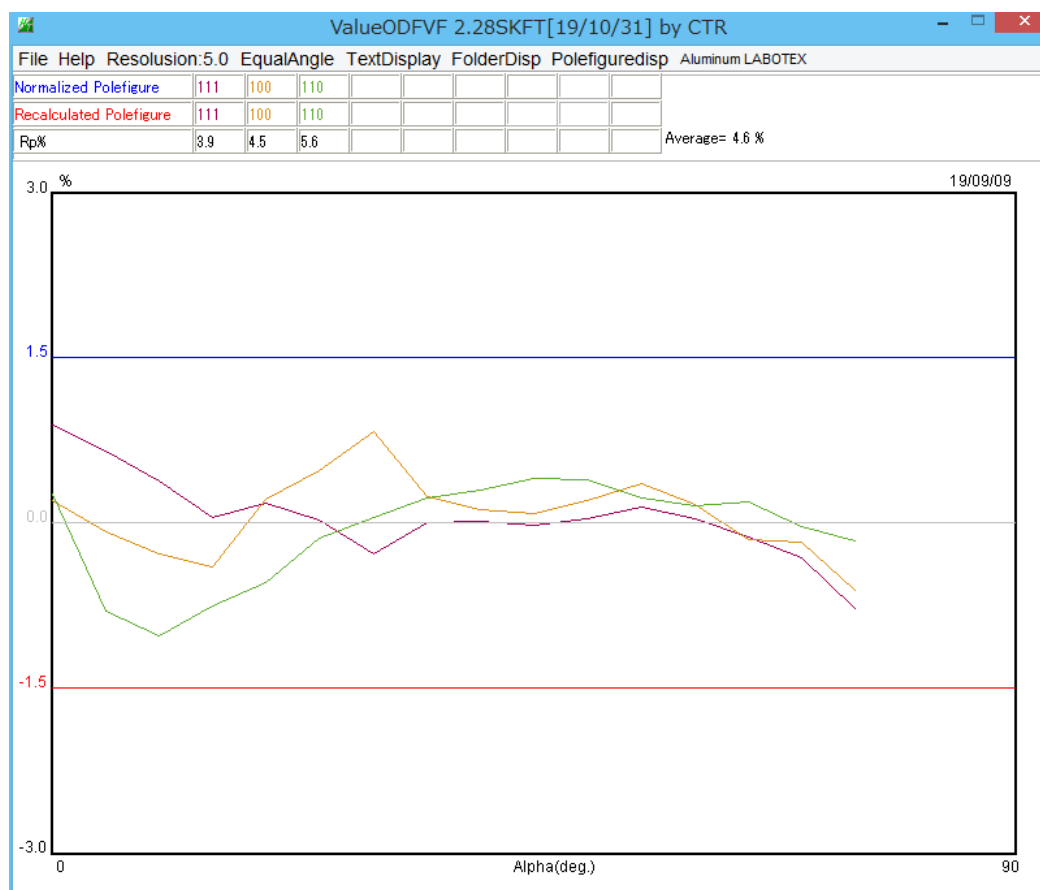
defocus 補正が正確に行われていれば最適化Rp%でも改善されません。

7. 4 Rp%検索結果のError表示

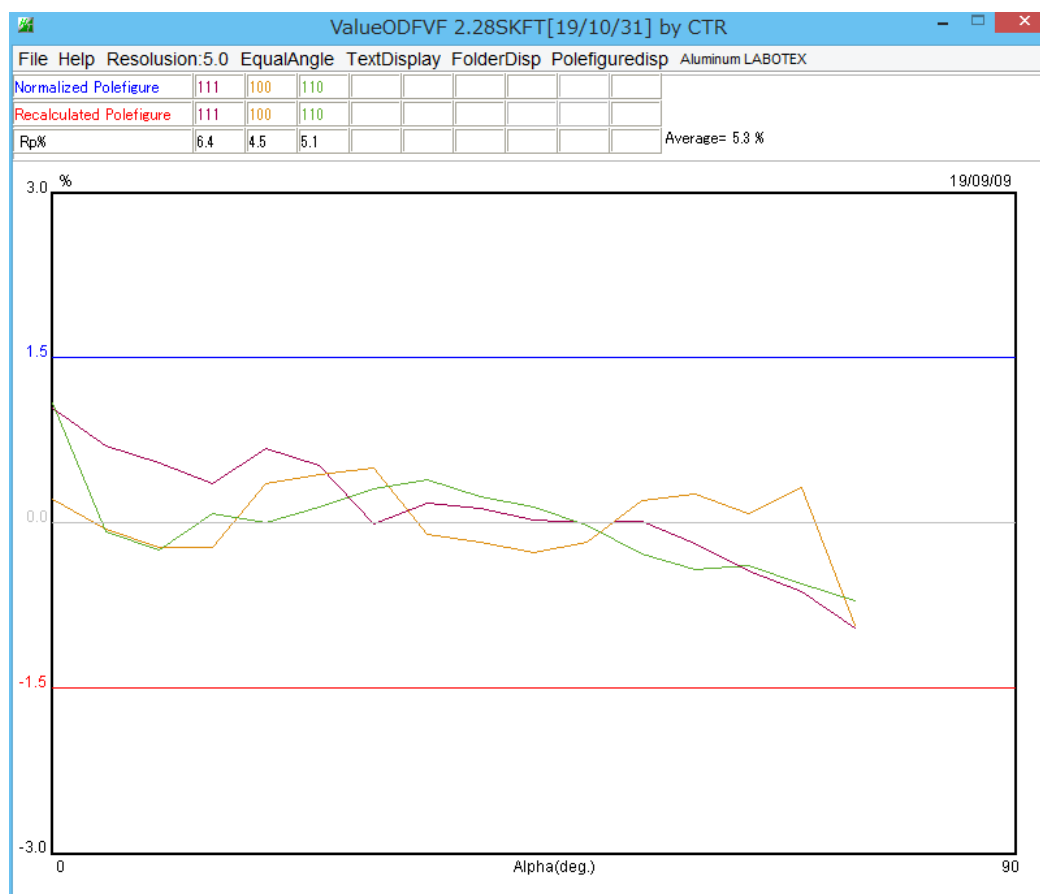
Defocus 補正なし



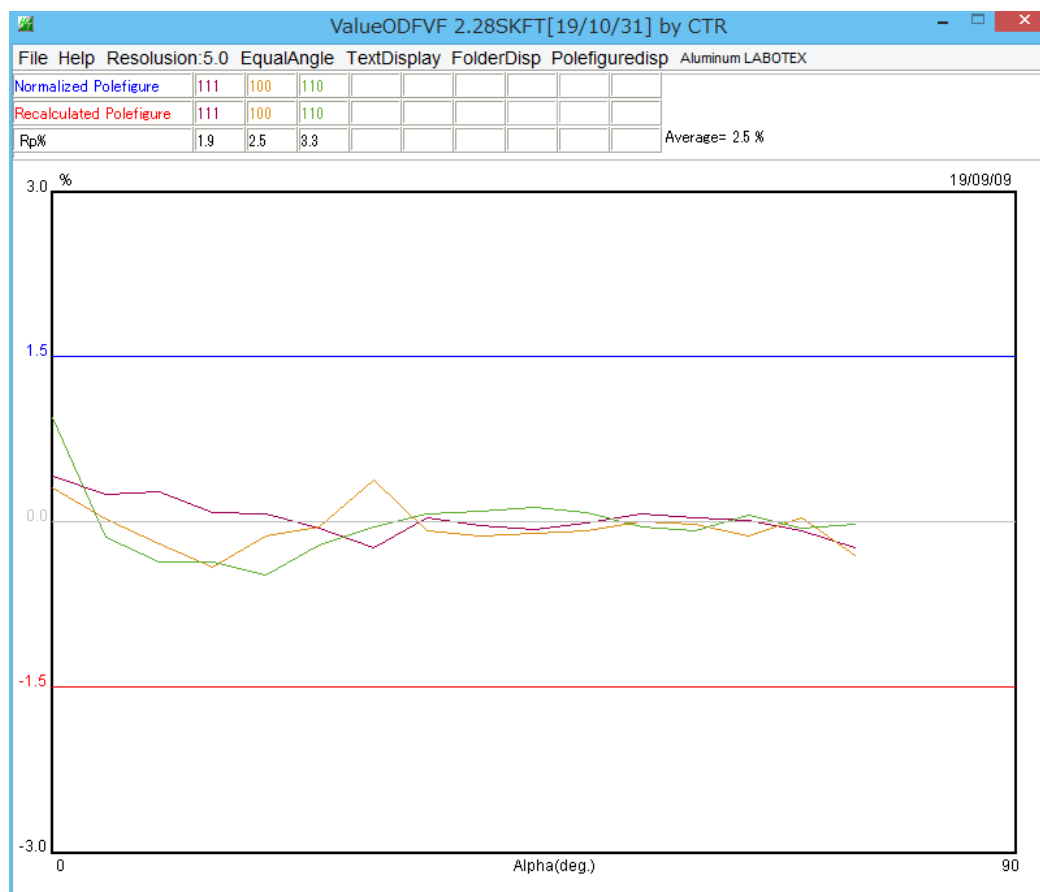
Defocus 補正なし+再 defocus 補正



Defocus 処理



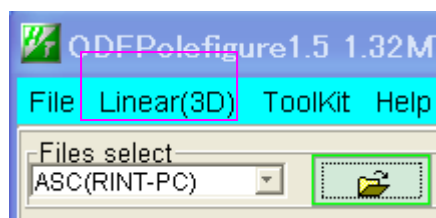
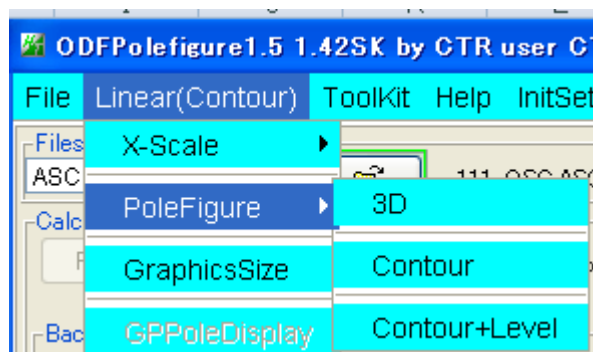
Defocus 処理+再 defocus 補正



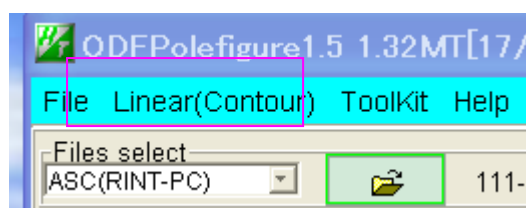
最適化 R p % で平均値が改善されない場合は採用しないで下さい。

8. 等高線表示

等高線 3D 表示から等高線表示に切り替えるには `Contour` を選択

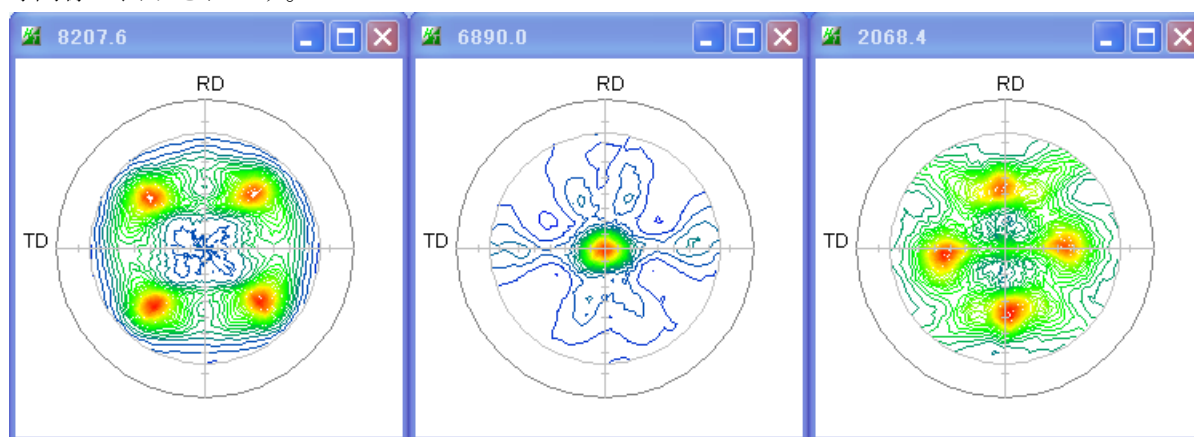


表示から

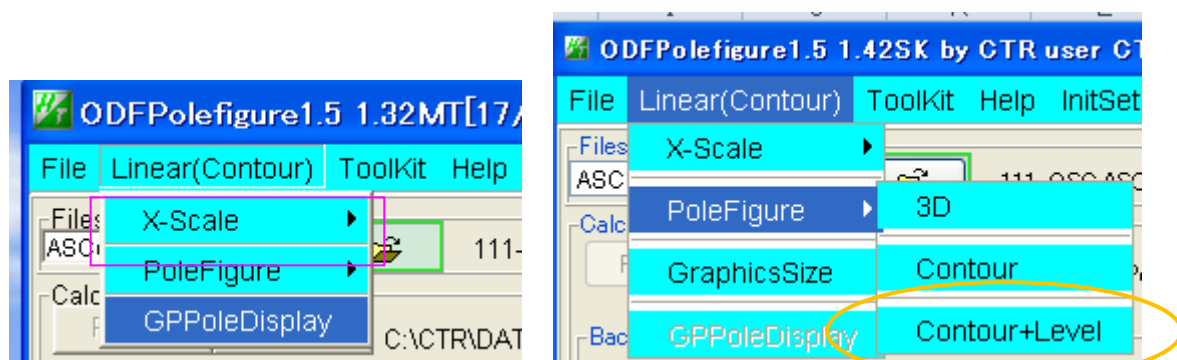


に変わり

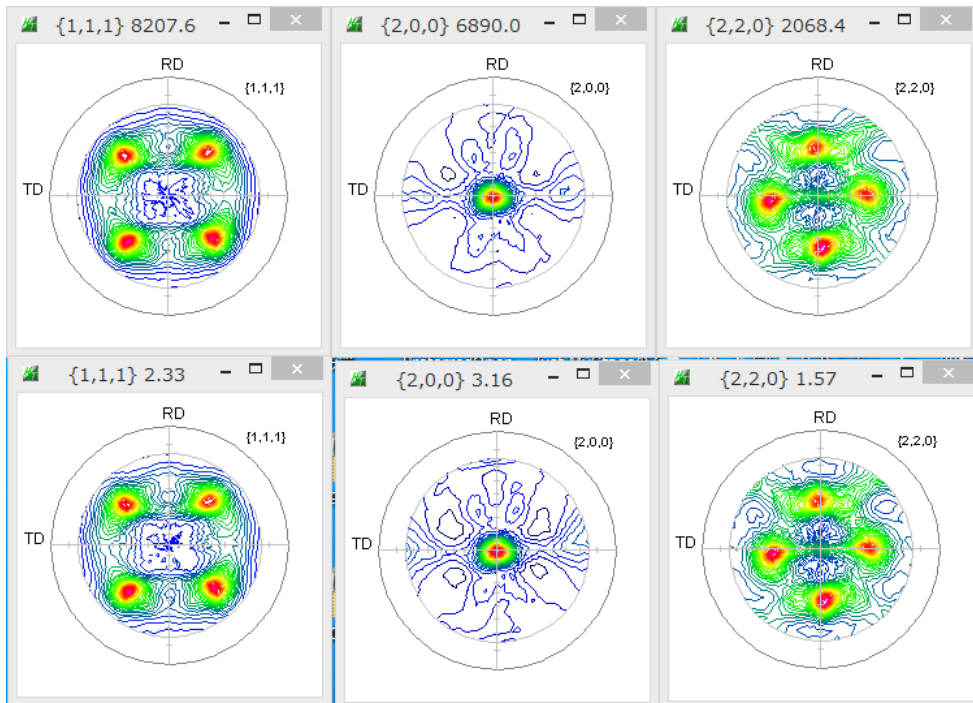
等高線が表示されます。



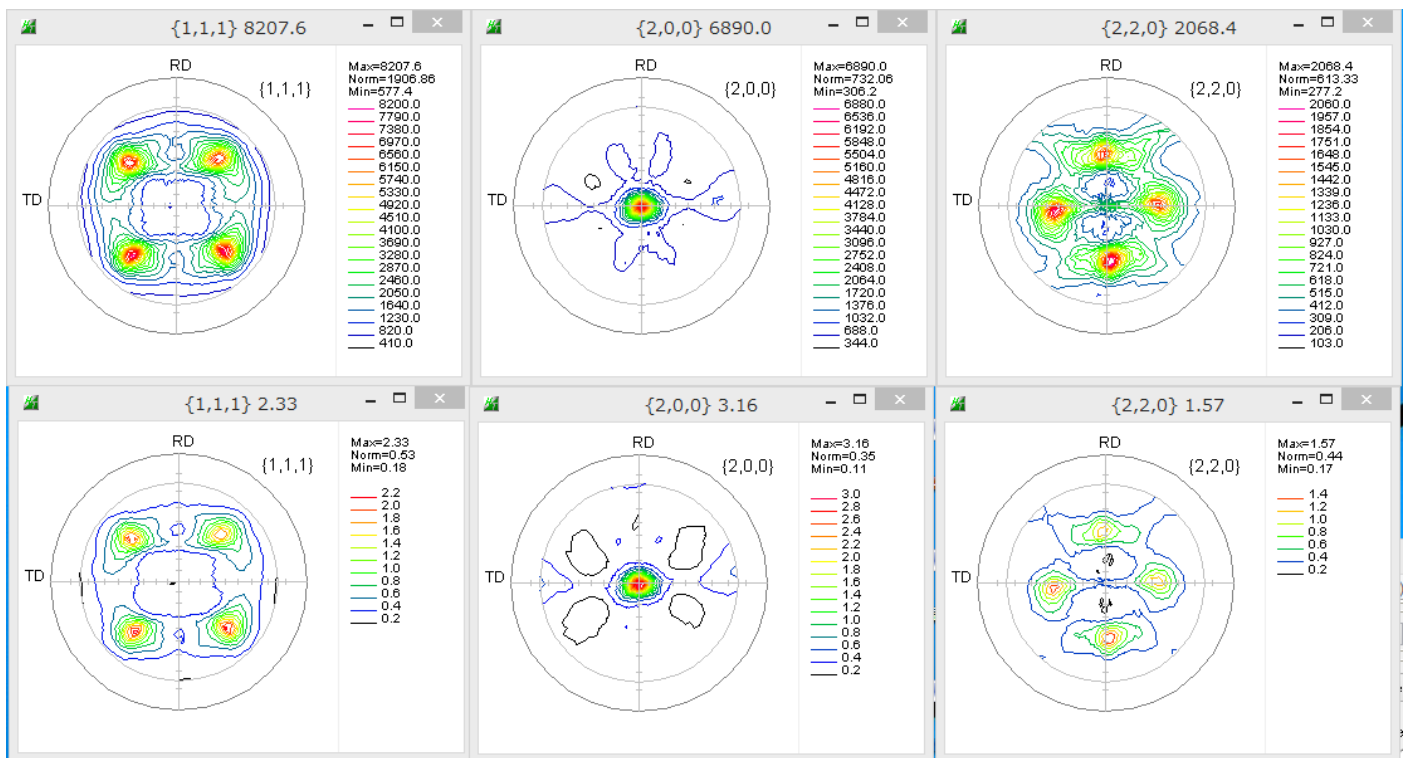
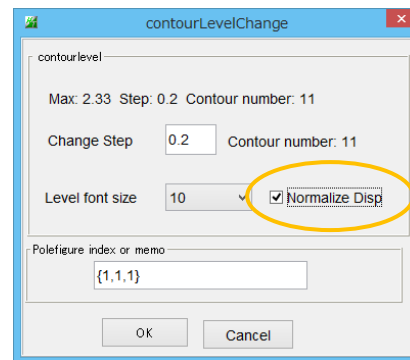
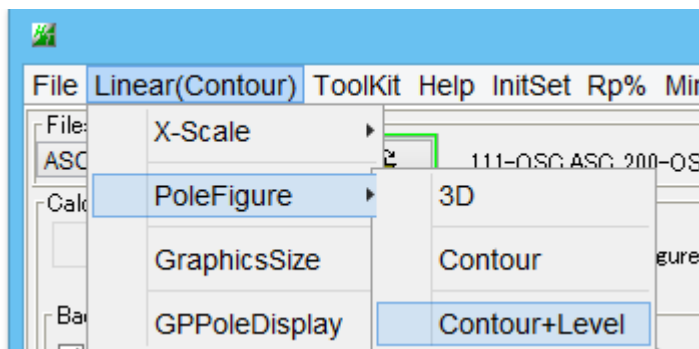
Calc により、極点図を処理すると



GPPoleDisplay により、あるいは `Contour+Level` で等高線表示に等高線レベル表示を行うことが可能になります。



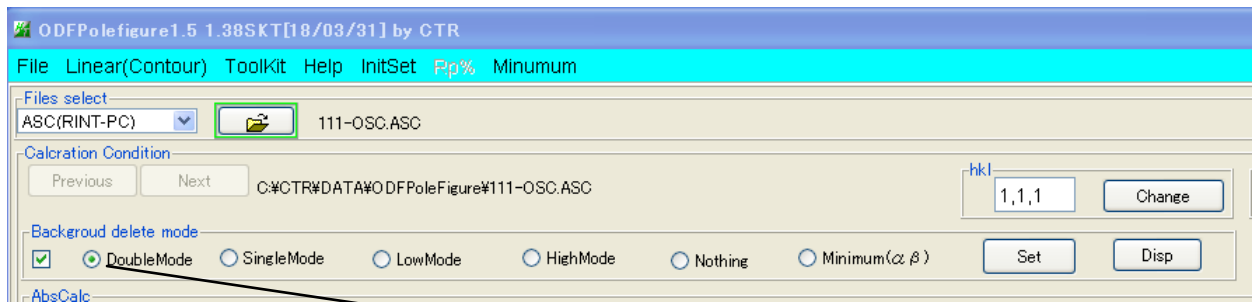
等高線レベル表示



表示した等高線レベルをマウスクリックで NoramalizeDsipON で平均強度を表示

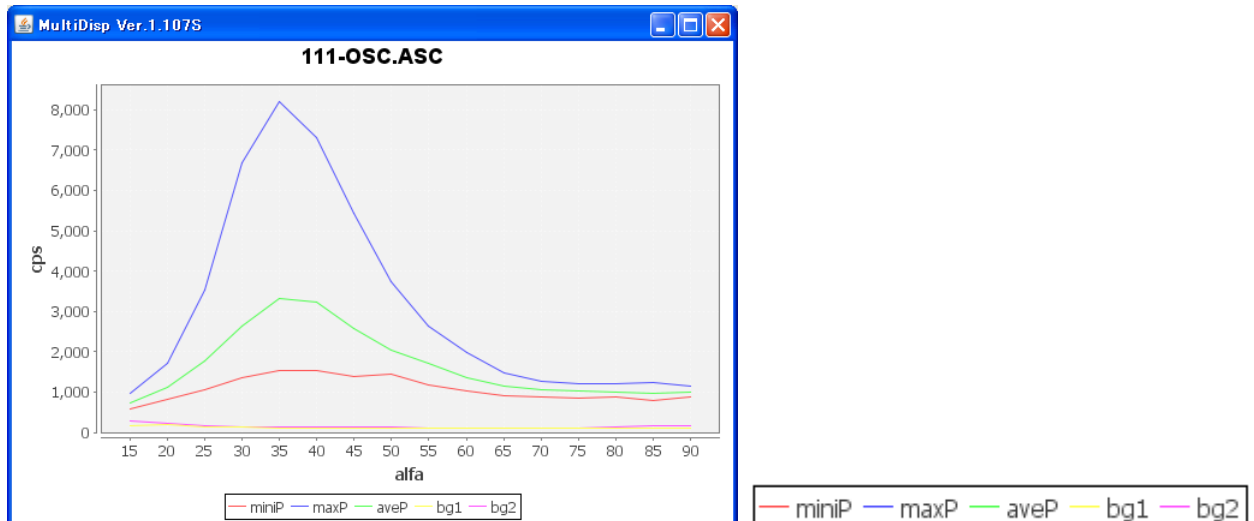
9. バックグラウンド

通常、実際の極点図（ピーク極点図）測定とバックグラウンド測定は同時に行われるが、バックグラウンドにピークの影響を受ける事があり、高分子材料などではバックグラウンドの測定が難しい。本機能は測定されているバックグラウンドの扱いに関する説明を行う。

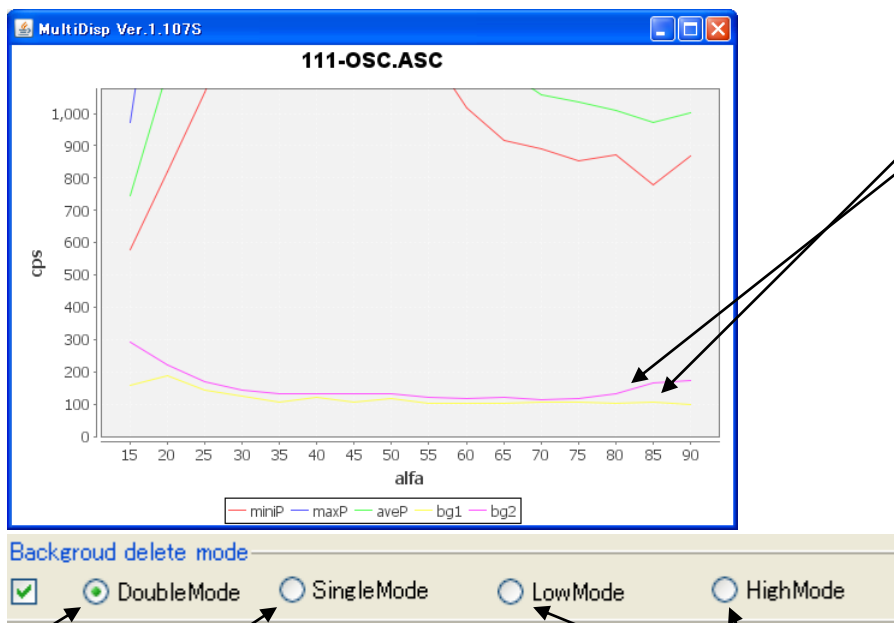


選択されたデータでは、バックグラウンドはピーク位置の Low 側と High 側で測定されています。Disp でバックグラウンドの状態を表示します。

α 軸方向に関してバックグラウンドの Low と High を表示しています



拡大



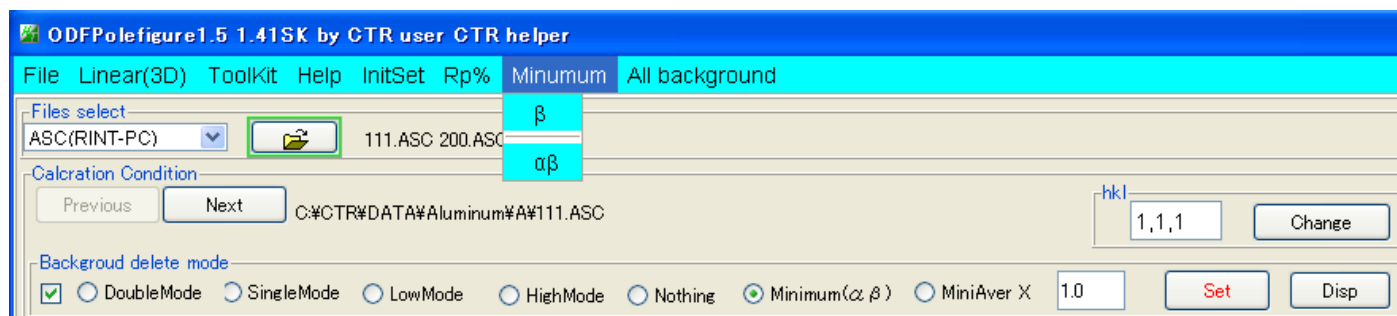
Low と High の平均をバックグラウンド

Low と High の低い値をバックグラウンド

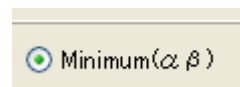
Low 側をバックグラウンド

High 側をバックグラウンド

高分子材料などではこの設定では足りないため、機能が追加されています。

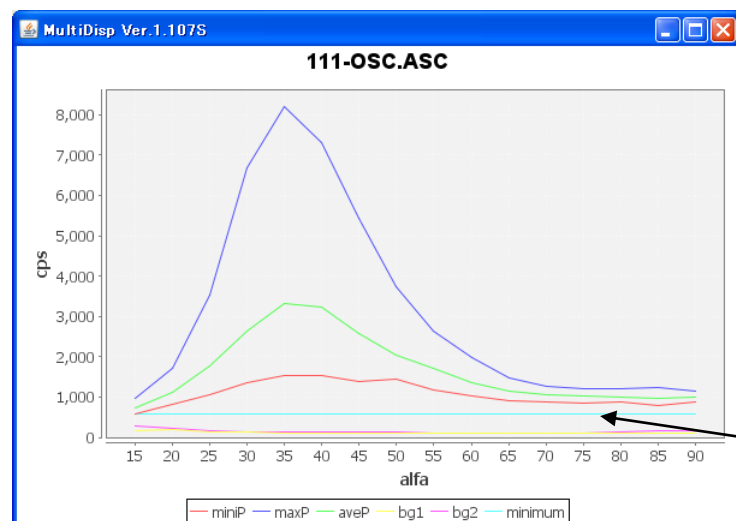


ピーク極点図の最小値をバックグラウンドに設定します。

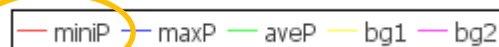
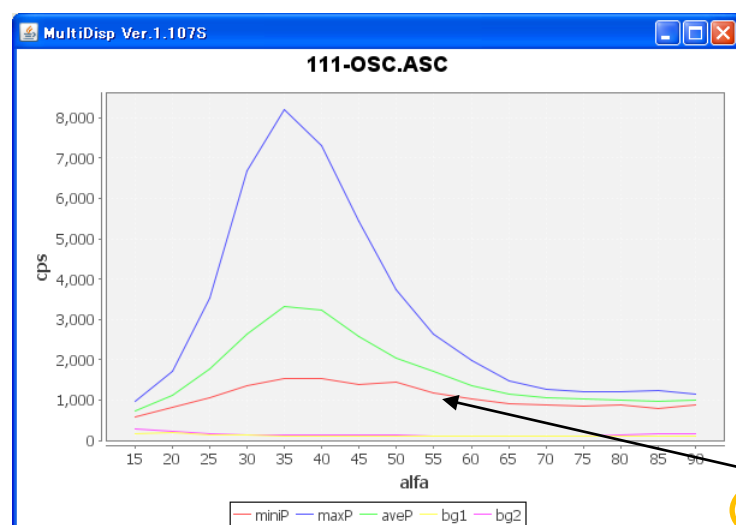


ピーク極点図の最少値をバックグラウンド

一括入力



α 毎に β 方向の最少値をバックグラウンド



高分子材料などのバックグラウンド測定が困難な場合、 β 方向の平均値の最小値に係数を掛けて決定
 係数が 1 より大きい場合、バックグラウンドの直接入力値とする。

All background

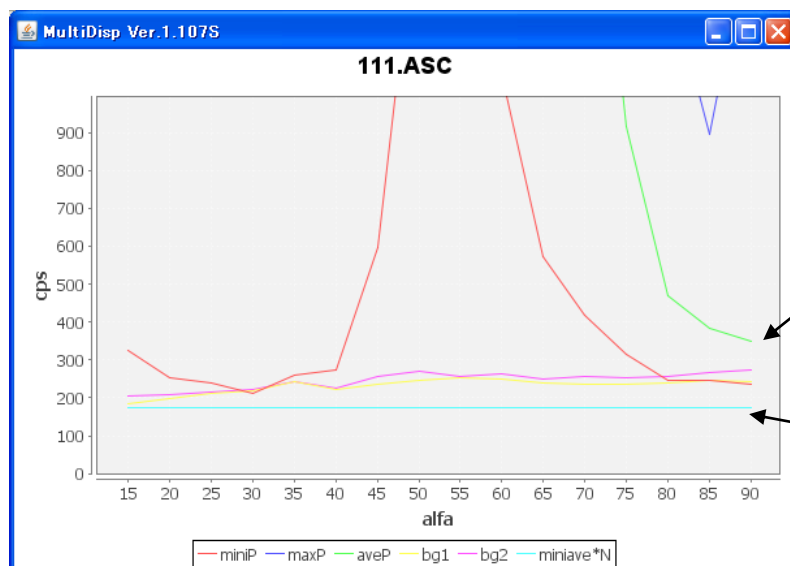
Minimum($\alpha\beta$)

MiniAver * N

All BG setOFF

hkl
1,1,1 Change

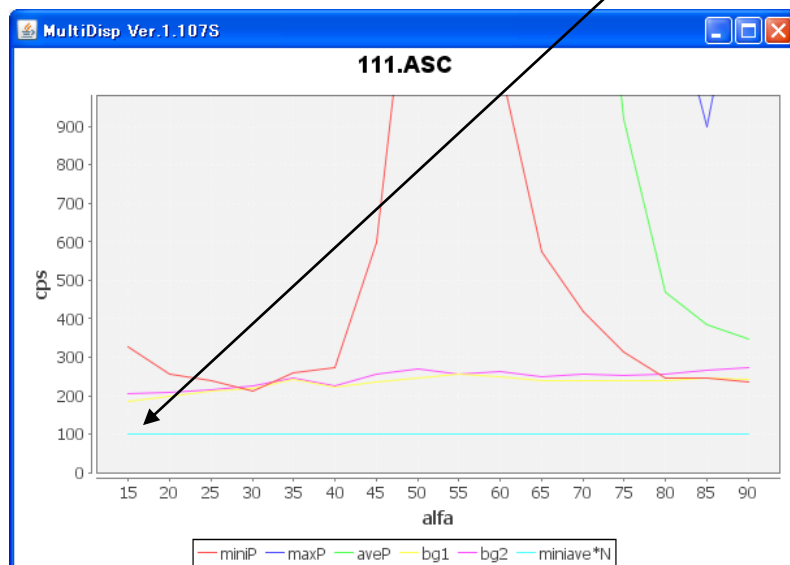
☐ Nothing ☐ Minimum($\alpha\beta$) ☒ MiniAver X 0.5 Set Disp



β 方向の最小平均値

計算バックグラウンド

☐ Nothing ☐ Minimum($\alpha\beta$) ☒ MiniAver X 100 Set Disp



透過極点図と反射極点図の同時処理と透過極点図と反射極点図の接続

同時処理

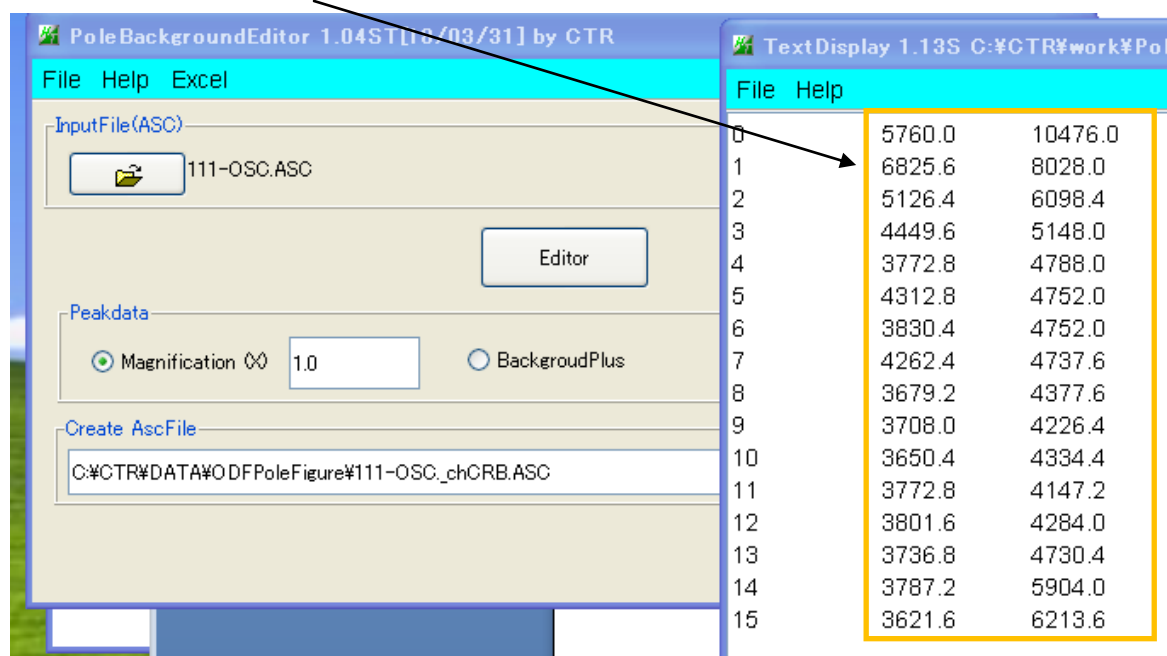
データ接続

Cancel Calc Connect ODF File

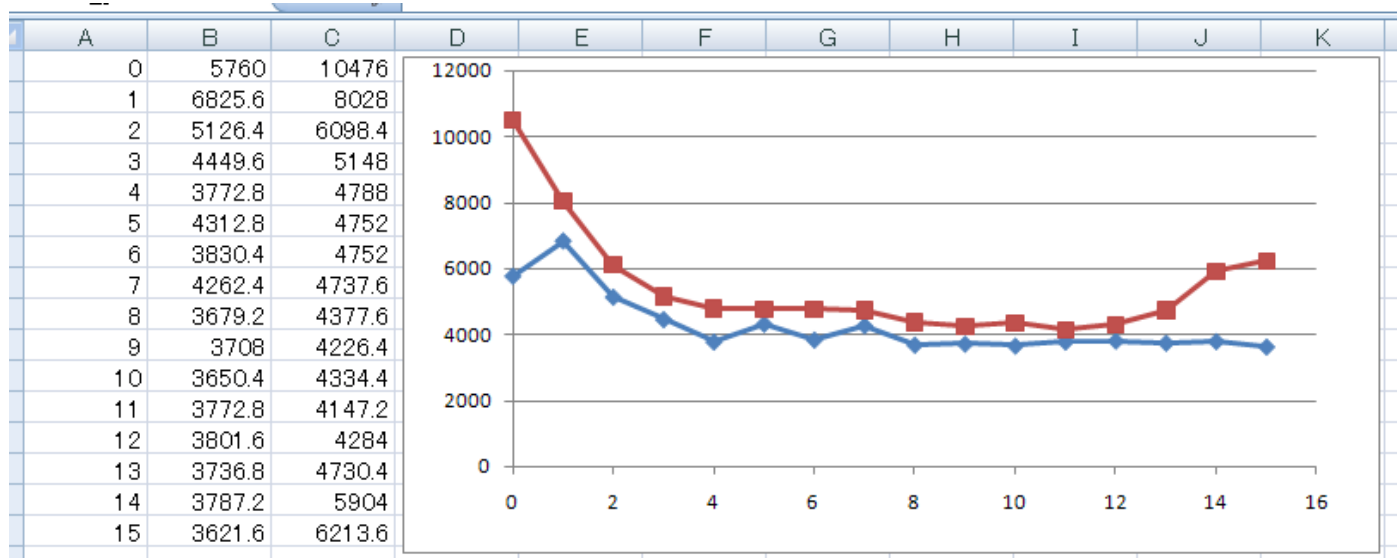
測定バックグラウンドの修正

ODFPoleFigure1.5->ToolKit>SoftWare->PageNest->PoleBackgroundEditor

測定バックグラウンドの修正



E x c e l のよる修正



10. 透過極点図、反射極点図接続

透過極点図を含む場合、Rp%の最小化は機能しませんが、Cubicに関しては確認可能。

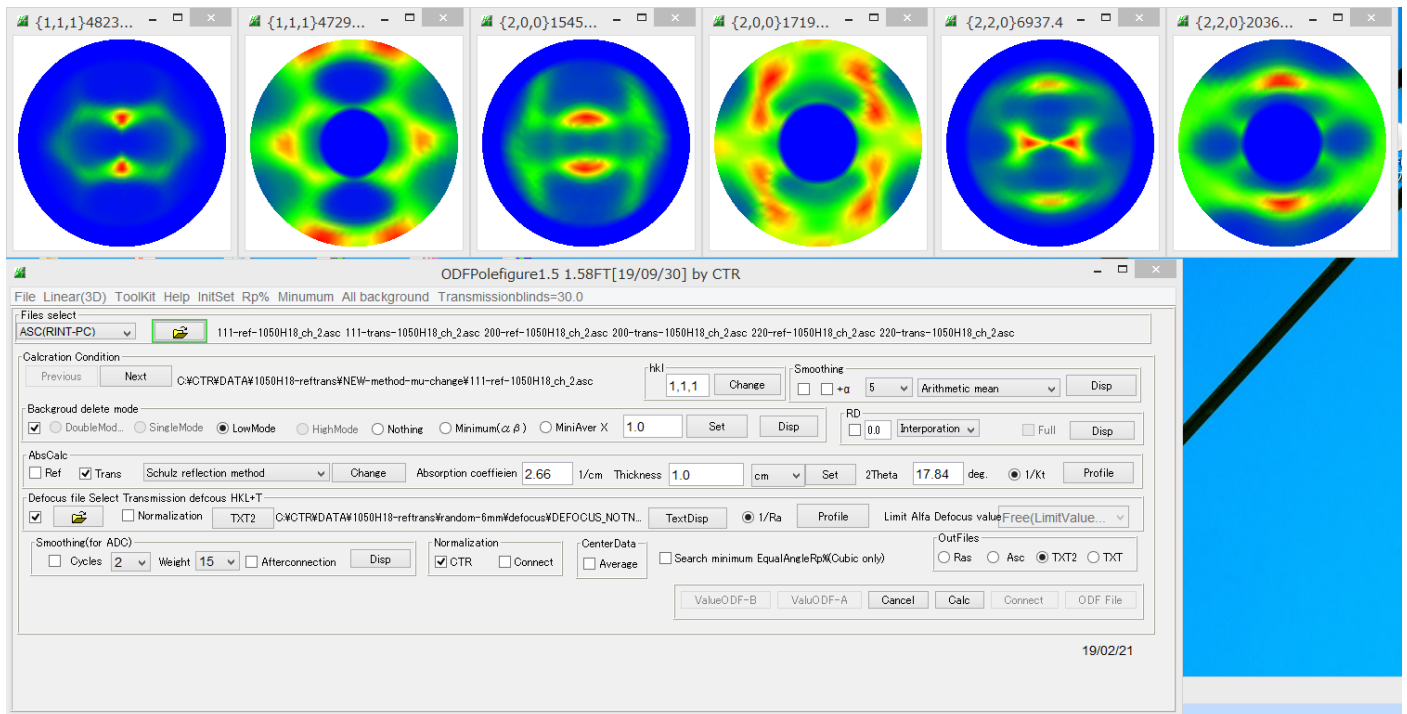
条件は、defocus補正+Cubicです。

以下の極点図の場合、

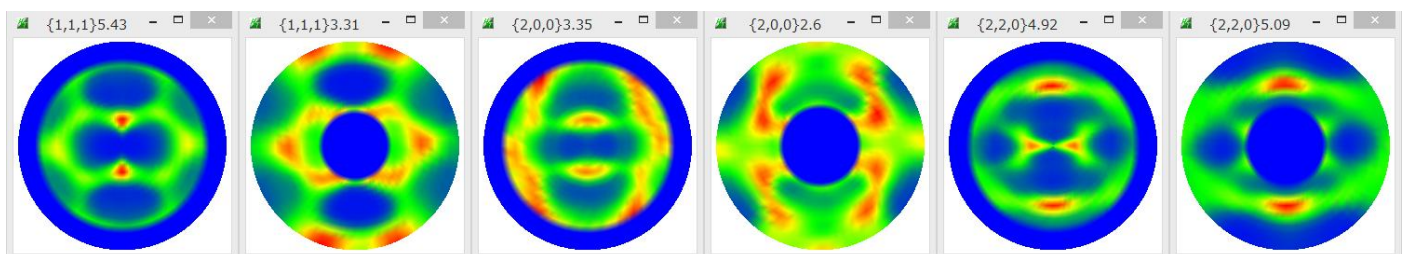
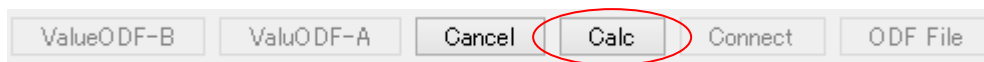
バックグラウンド補正、透過法の吸収補正、反射法のdefocus補正を行い、データ接続後状態確認出来ます。

反射法の吸収補正は吸収補正部分Refにチェックすると機能します。

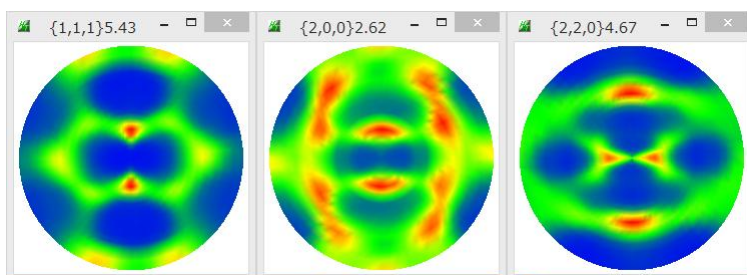
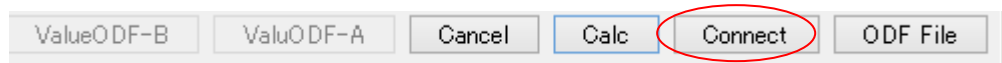
透過法のdefocus補正はdefocus補正テーブルに透過法で測定したrandomデータを登録後指数の後に、'T'を追加、例えば、111_ch_2.TXT 場合、111T_ch_2.TXT とします。



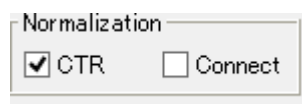
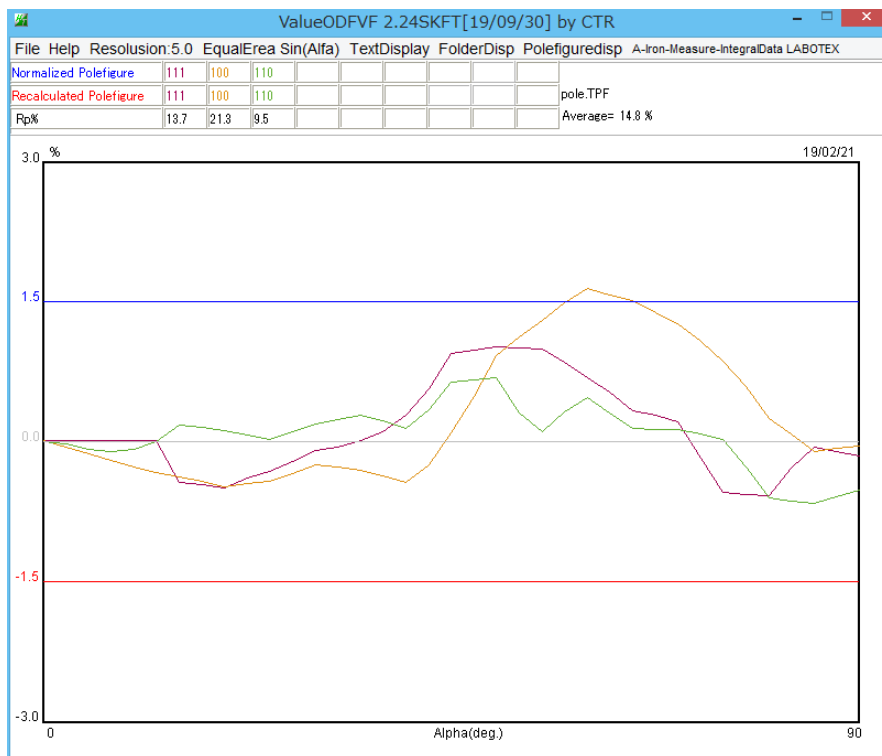
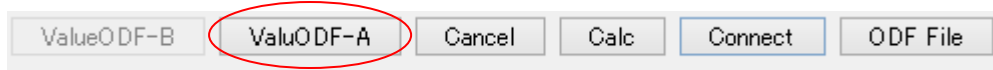
補正を行う。



データ接続を行う

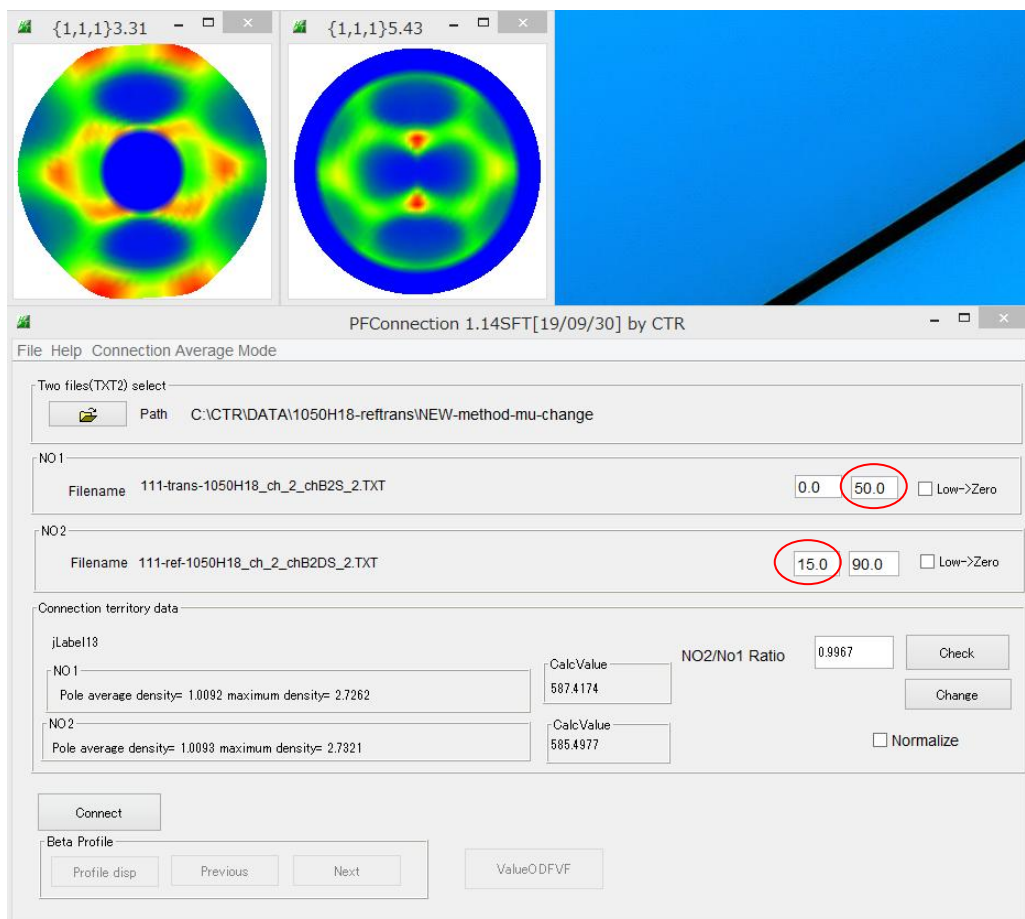


評価を行う。



評価は、規格化を行ってください。

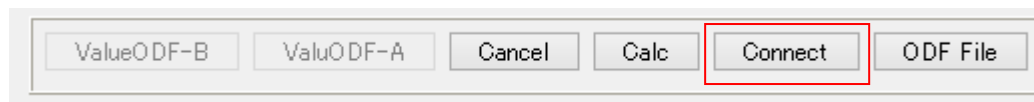
状態が悪い場合は、データ接続範囲を PFConnection ソフトウェア変更してください



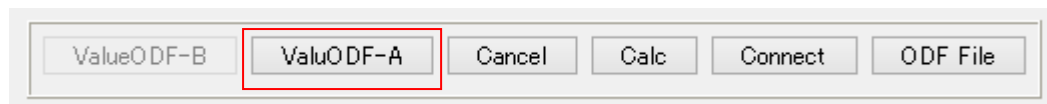
11. データ処理後のError評価

Rp%の最適化後Error評価を行っていましたが、最適化なしでError評価を行います。

透過極点図と反射極点図のデータ処理後

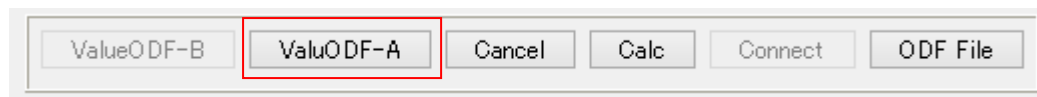


データ接続



評価が可能になります。

反射極点図のデータ処理後



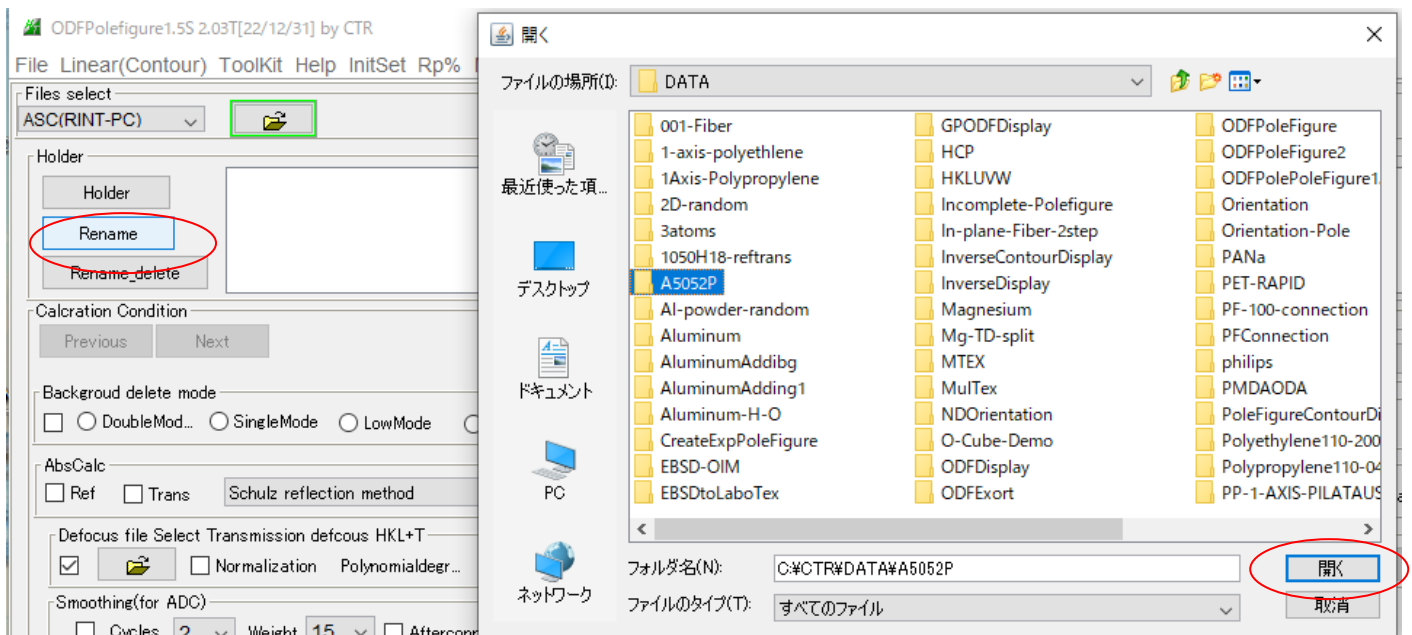
1 2. 大量S a m p l e の一括処理

1 2. 1 A S C データを指数毎に同一のファイル名に変更

```
C:\CTR\DATA\A5052P\AI-powder-random\111-random.ASC  
C:\CTR\DATA\A5052P\AI-powder-random\200-random.ASC  
C:\CTR\DATA\A5052P\AI-powder-random\220-random.ASC  
C:\CTR\DATA\A5052P\AI-powder-random\311-random.ASC  
C:\CTR\DATA\A5052P\NO001\111-NO001.ASC  
C:\CTR\DATA\A5052P\NO001\200-NO001.ASC  
C:\CTR\DATA\A5052P\NO001\220-NO001.ASC  
C:\CTR\DATA\A5052P\NO001\311-NO001.ASC  
C:\CTR\DATA\A5052P\NO002\NO002-111.ASC  
C:\CTR\DATA\A5052P\NO002\NO002-200.ASC  
C:\CTR\DATA\A5052P\NO002\NO002-220.ASC  
C:\CTR\DATA\A5052P\NO002\NO002-311.ASC  
C:\CTR\DATA\A5052P\NO003\111.ASC  
C:\CTR\DATA\A5052P\NO003\200.ASC  
C:\CTR\DATA\A5052P\NO003\220.ASC  
C:\CTR\DATA\A5052P\NO003\311.ASC  
C:\CTR\DATA\A5052P\NO004\111-NO004.ASC  
C:\CTR\DATA\A5052P\NO004\200-NO004.ASC  
C:\CTR\DATA\A5052P\NO004\220-NO004.ASC  
C:\CTR\DATA\A5052P\NO004\311-NO004.ASC  
C:\CTR\DATA\A5052P\NO005\AAA-NO005.ASC  
C:\CTR\DATA\A5052P\NO005\BBB-NO005.ASC  
C:\CTR\DATA\A5052P\NO005\CCC-NO005.ASC  
C:\CTR\DATA\A5052P\NO005\DDD-NO005.ASC  
C:\CTR\DATA\A5052P\NO006\A111-NO006.ASC  
C:\CTR\DATA\A5052P\NO006\A200-NO006.ASC  
C:\CTR\DATA\A5052P\NO006\A220-NO006.ASC  
C:\CTR\DATA\A5052P\NO006\A311-NO006.ASC
```

S a m p l e NO001, NO002, NO003, NO004, NO005, NO006 に対し異なるファイル名が存在する。

CTRソフトウェアでは、ホルダにスペースは使用しない、ファイル名の先頭に指数配置としています。



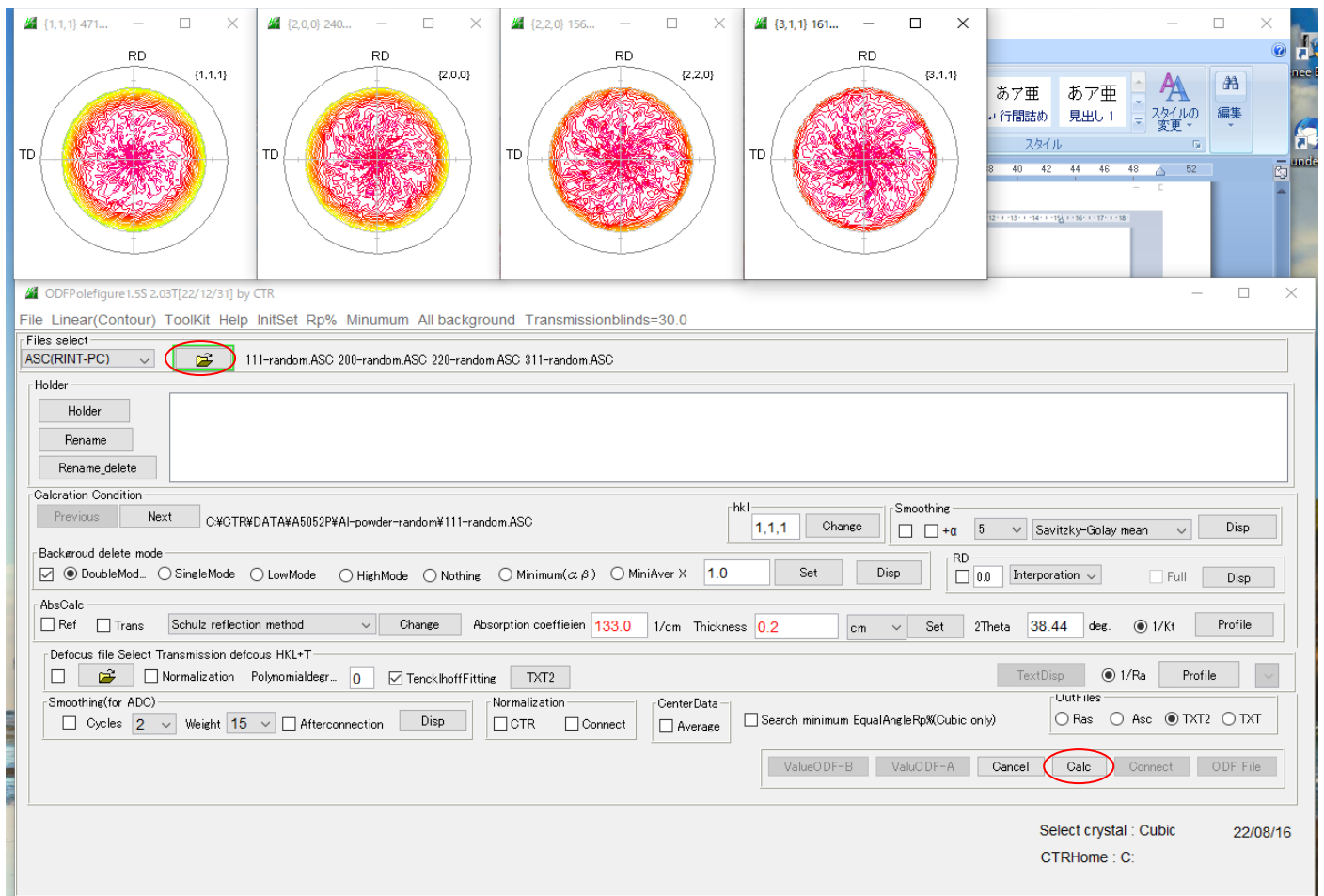
変更するホルダを指定

ASC ファイルを指数+ r e n a m e _ 2 . A D C に変更

統一したファイル名が追加されます。

```
↳:¥CTR¥DATA¥A¥A5052P¥AI-powder-random¥111-random.ASC
C:¥CTR¥DATA¥A¥A5052P¥AI-powder-random¥111_rename_2.ASC
C:¥CTR¥DATA¥A¥A5052P¥AI-powder-random¥200-random.ASC
C:¥CTR¥DATA¥A¥A5052P¥AI-powder-random¥200_rename_2.ASC
C:¥CTR¥DATA¥A¥A5052P¥AI-powder-random¥220-random.ASC
C:¥CTR¥DATA¥A¥A5052P¥AI-powder-random¥220_rename_2.ASC
C:¥CTR¥DATA¥A¥A5052P¥AI-powder-random¥311-random.ASC
C:¥CTR¥DATA¥A¥A5052P¥AI-powder-random¥311_rename_2.ASC
C:¥CTR¥DATA¥A¥A5052P¥NO001¥111-NO001.ASC
C:¥CTR¥DATA¥A¥A5052P¥NO001¥111_rename_2.ASC
C:¥CTR¥DATA¥A¥A5052P¥NO001¥200-NO001.ASC
C:¥CTR¥DATA¥A¥A5052P¥NO001¥200_rename_2.ASC
C:¥CTR¥DATA¥A¥A5052P¥NO001¥220-NO001.ASC
C:¥CTR¥DATA¥A¥A5052P¥NO001¥220_rename_2.ASC
C:¥CTR¥DATA¥A¥A5052P¥NO001¥311-NO001.ASC
C:¥CTR¥DATA¥A¥A5052P¥NO001¥311_rename_2.ASC
C:¥CTR¥DATA¥A¥A5052P¥NO002¥111_rename_2.ASC
C:¥CTR¥DATA¥A¥A5052P¥NO002¥200_rename_2.ASC
C:¥CTR¥DATA¥A¥A5052P¥NO002¥220_rename_2.ASC
C:¥CTR¥DATA¥A¥A5052P¥NO002¥311_rename_2.ASC
C:¥CTR¥DATA¥A¥A5052P¥NO002¥NO002-111.ASC
C:¥CTR¥DATA¥A¥A5052P¥NO002¥NO002-200.ASC
C:¥CTR¥DATA¥A¥A5052P¥NO002¥NO002-220.ASC
C:¥CTR¥DATA¥A¥A5052P¥NO002¥NO002-311.ASC
C:¥CTR¥DATA¥A¥A5052P¥NO003¥111.ASC
C:¥CTR¥DATA¥A¥A5052P¥NO003¥111_rename_2.ASC
C:¥CTR¥DATA¥A¥A5052P¥NO003¥200.ASC
C:¥CTR¥DATA¥A¥A5052P¥NO003¥200_rename_2.ASC
C:¥CTR¥DATA¥A¥A5052P¥NO003¥220.ASC
C:¥CTR¥DATA¥A¥A5052P¥NO003¥220_rename_2.ASC
C:¥CTR¥DATA¥A¥A5052P¥NO003¥311.ASC
C:¥CTR¥DATA¥A¥A5052P¥NO003¥311_rename_2.ASC
C:¥CTR¥DATA¥A¥A5052P¥NO004¥111-NO004.ASC
C:¥CTR¥DATA¥A¥A5052P¥NO004¥111_rename_2.ASC
C:¥CTR¥DATA¥A¥A5052P¥NO004¥200-NO004.ASC
C:¥CTR¥DATA¥A¥A5052P¥NO004¥200_rename_2.ASC
C:¥CTR¥DATA¥A¥A5052P¥NO004¥220-NO004.ASC
C:¥CTR¥DATA¥A¥A5052P¥NO004¥220_rename_2.ASC
C:¥CTR¥DATA¥A¥A5052P¥NO004¥311-NO004.ASC
C:¥CTR¥DATA¥A¥A5052P¥NO004¥311_rename_2.ASC
C:¥CTR¥DATA¥A¥A5052P¥NO005¥111_rename_2.ASC
C:¥CTR¥DATA¥A¥A5052P¥NO005¥200_rename_2.ASC
C:¥CTR¥DATA¥A¥A5052P¥NO005¥220_rename_2.ASC
C:¥CTR¥DATA¥A¥A5052P¥NO005¥311_rename_2.ASC
C:¥CTR¥DATA¥A¥A5052P¥NO005¥AAA-NO005.ASC
C:¥CTR¥DATA¥A¥A5052P¥NO005¥BBB-NO005.ASC
C:¥CTR¥DATA¥A¥A5052P¥NO005¥CCC-NO005.ASC
C:¥CTR¥DATA¥A¥A5052P¥NO005¥DDD-NO005.ASC
C:¥CTR¥DATA¥A¥A5052P¥NO006¥111_rename_2.ASC
C:¥CTR¥DATA¥A¥A5052P¥NO006¥200_rename_2.ASC
C:¥CTR¥DATA¥A¥A5052P¥NO006¥220_rename_2.ASC
C:¥CTR¥DATA¥A¥A5052P¥NO006¥311_rename_2.ASC
C:¥CTR¥DATA¥A¥A5052P¥NO006¥A111-NO006.ASC
C:¥CTR¥DATA¥A¥A5052P¥NO006¥A200-NO006.ASC
C:¥CTR¥DATA¥A¥A5052P¥NO006¥A220-NO006.ASC
C:¥CTR¥DATA¥A¥A5052P¥NO006¥A311-NO006.ASC
```

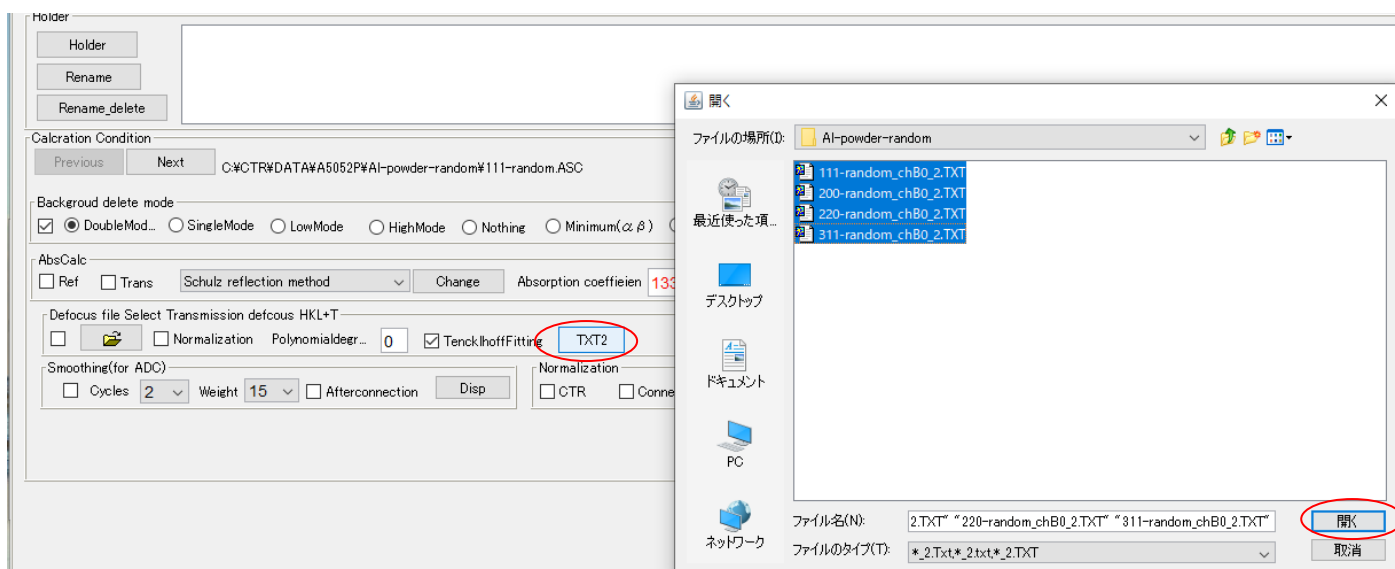

12.2 defocusファイル作成 randomデータからバックグラウンド削除



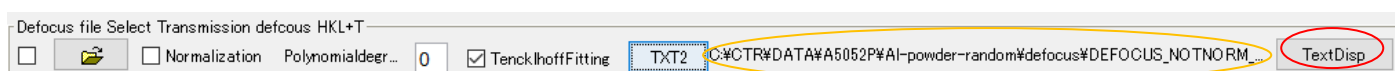
CTR > DATA > A5052P > Al-powder-random

名前	更新日時	種類	サイズ
111_rename_2.ASC	2015/10/20 12:45	RINT2000アスキー	22 KB
111-random.ASC	2015/10/20 12:45	RINT2000アスキー	22 KB
200_rename_2.ASC	2015/10/20 12:45	RINT2000アスキー	22 KB
200-random.ASC	2015/10/20 12:45	RINT2000アスキー	22 KB
220_rename_2.ASC	2015/10/20 12:45	RINT2000アスキー	22 KB
220-random.ASC	2015/10/20 12:45	RINT2000アスキー	22 KB
311_rename_2.ASC	2015/10/20 12:45	RINT2000アスキー	22 KB
311-random.ASC	2015/10/20 12:45	RINT2000アスキー	22 KB
111-random_chB0_2.TXT	2022/08/16 7:30	テキスト文書	22 KB
200-random_chB0_2.TXT	2022/08/16 7:30	テキスト文書	22 KB
220-random_chB0_2.TXT	2022/08/16 7:30	テキスト文書	22 KB
311-random_chB0_2.TXT	2022/08/16 7:30	テキスト文書	22 KB
SLITTHETAFILE	2022/08/16 7:30	ファイル	1 KB

データ登録



ファイルが登録される。



TextDispで確認

TextDisplay 1.14S C:\CTR\DATA\A5052P\AI-powder-random\defocus\DEFOCUS_NOTNORM_F.TXT

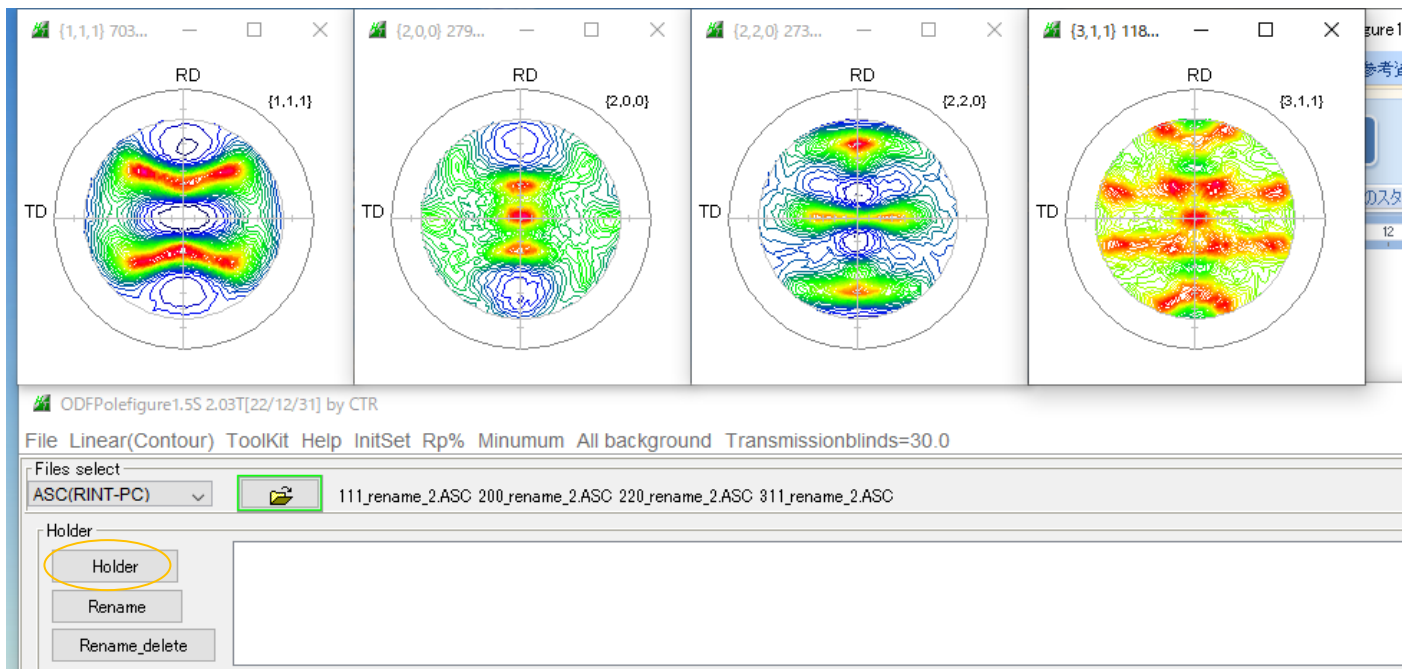
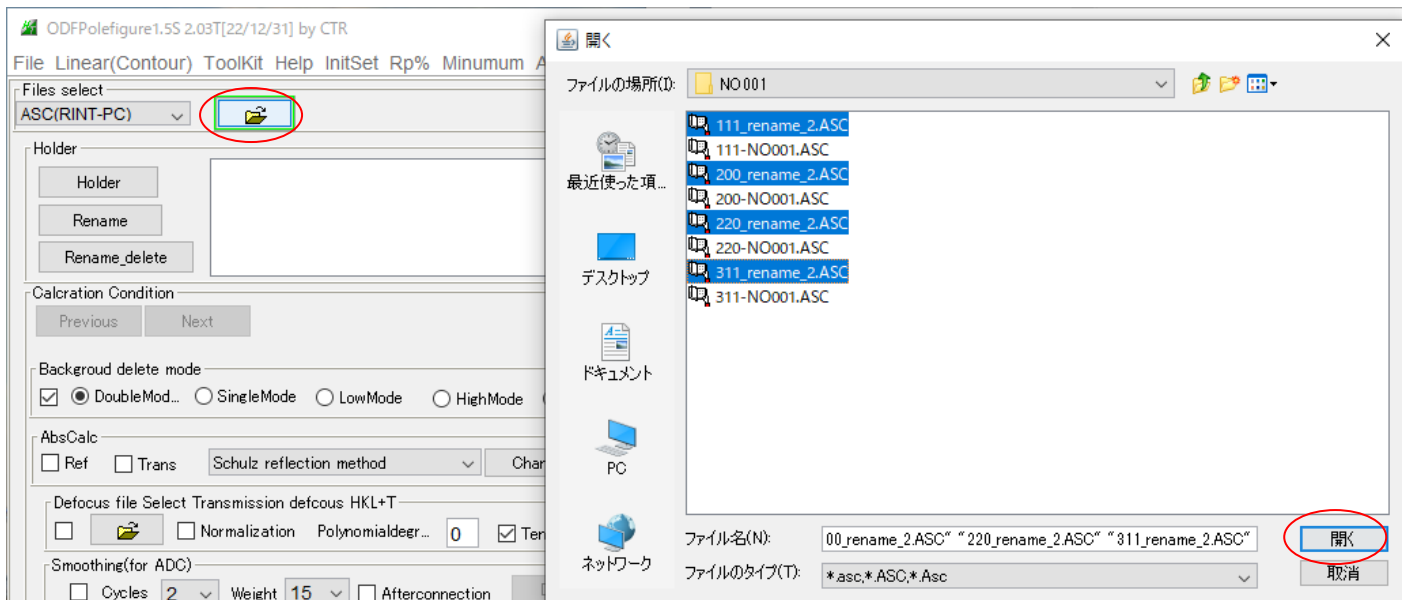
File Help

filename, alfa number, alfa start angle, alfa step, function-n, mm, 22/08/16 3.10 for DefocusCalc,
111-random_chB0_2.TXT, 16, 0.0, 5.0, 11, 7.0, 1.0000034457616345, 2.235768202495103E-4, -1
200-random_chB0_2.TXT, 16, 0.0, 5.0, 11, 7.0, 1.000000567854821, 1.2052191563923832E-4, -7
220-random_chB0_2.TXT, 16, 0.0, 5.0, 11, 7.0, 0.999999718448499, -1.6153241666465665E-4, 8
311-random_chB0_2.TXT, 16, 0.0, 5.0, 11, 7.0, 1.000000252560573, -7.564951030858934E-6, -1.

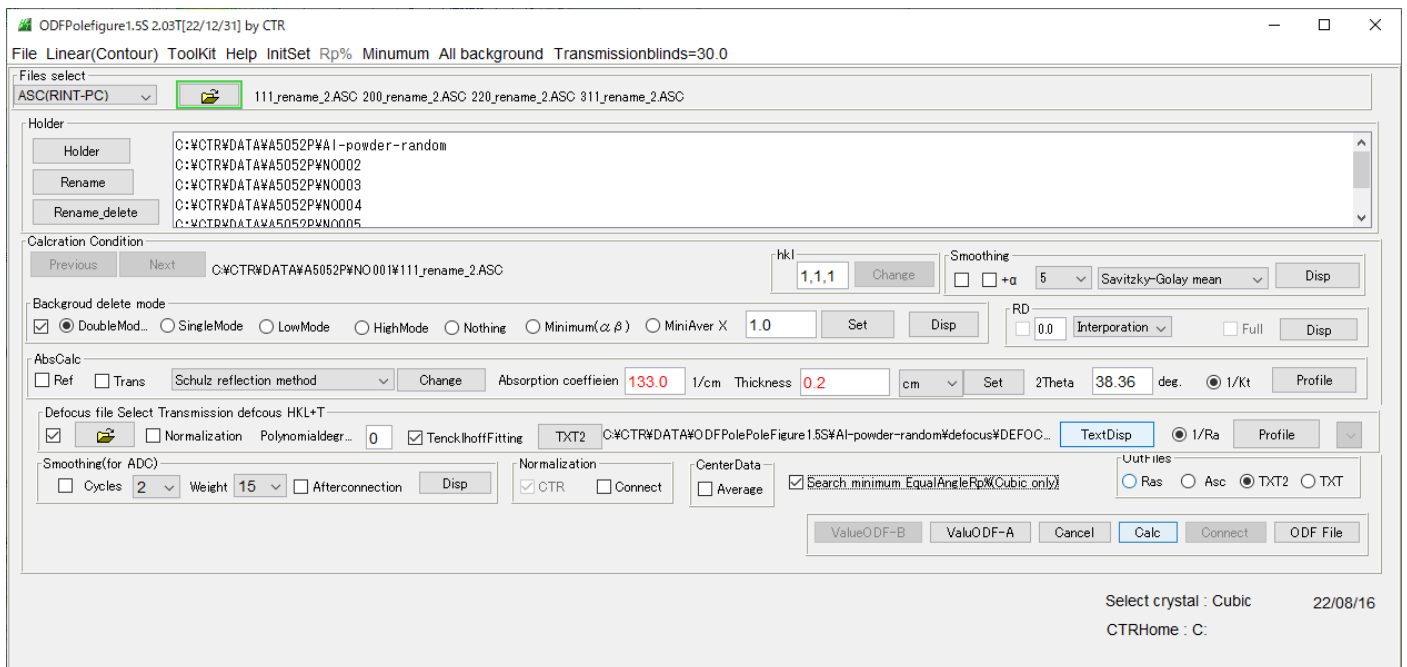
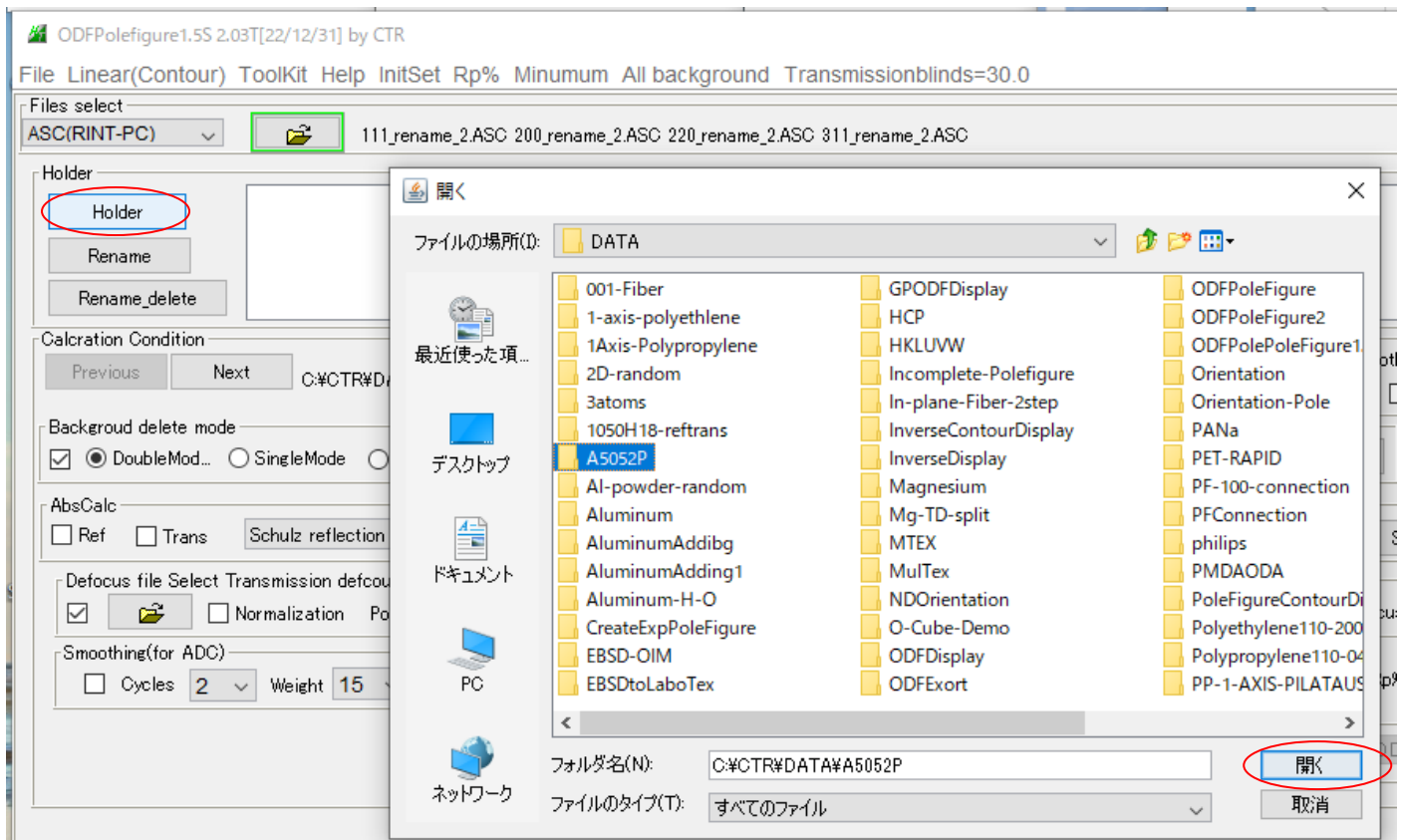
先頭の指数が重要で、この指数でdefocus補正曲線が自動的に選択されます。

1 2. 3 一括処理

1 2. 3. 1 対象データを指定

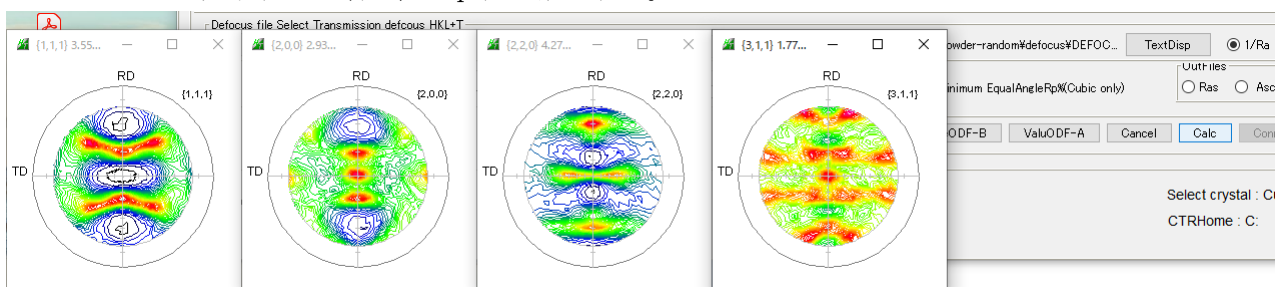


1 2. 3. 2 対象ホルダを指定



最初に選択した ASC データと後から指定したホルダの同一名ファイルの一括処理を行う。

処理スピードは低下するが最適化 R p % を指定する。



処理が終了

1 2. 3. 3 処理結果

```

C:\CTR\DATA\A5052P\AI-powder-random¥111_rename_2_chB0DS_2.TXT
C:\CTR\DATA\A5052P\AI-powder-random¥200_rename_2_chB0DS_2.TXT
C:\CTR\DATA\A5052P\AI-powder-random¥220_rename_2_chB0DS_2.TXT
C:\CTR\DATA\A5052P\AI-powder-random¥311_rename_2_chB0DS_2.TXT
C:\CTR\DATA\A5052P\NO001¥111_rename_2_chB0DS_2.TXT
C:\CTR\DATA\A5052P\NO001¥200_rename_2_chB0DS_2.TXT
C:\CTR\DATA\A5052P\NO001¥220_rename_2_chB0DS_2.TXT
C:\CTR\DATA\A5052P\NO001¥311_rename_2_chB0DS_2.TXT
C:\CTR\DATA\A5052P\NO002¥111_rename_2_chB0DS_2.TXT
C:\CTR\DATA\A5052P\NO002¥200_rename_2_chB0DS_2.TXT
C:\CTR\DATA\A5052P\NO002¥220_rename_2_chB0DS_2.TXT
C:\CTR\DATA\A5052P\NO002¥311_rename_2_chB0DS_2.TXT
C:\CTR\DATA\A5052P\NO003¥111_rename_2_chB0DS_2.TXT
C:\CTR\DATA\A5052P\NO003¥200_rename_2_chB0DS_2.TXT
C:\CTR\DATA\A5052P\NO003¥220_rename_2_chB0DS_2.TXT
C:\CTR\DATA\A5052P\NO003¥311_rename_2_chB0DS_2.TXT
C:\CTR\DATA\A5052P\NO004¥111_rename_2_chB0DS_2.TXT
C:\CTR\DATA\A5052P\NO004¥200_rename_2_chB0DS_2.TXT
C:\CTR\DATA\A5052P\NO004¥220_rename_2_chB0DS_2.TXT
C:\CTR\DATA\A5052P\NO004¥311_rename_2_chB0DS_2.TXT
C:\CTR\DATA\A5052P\NO005¥111_rename_2_chB0DS_2.TXT
C:\CTR\DATA\A5052P\NO005¥200_rename_2_chB0DS_2.TXT
C:\CTR\DATA\A5052P\NO005¥220_rename_2_chB0DS_2.TXT
C:\CTR\DATA\A5052P\NO005¥311_rename_2_chB0DS_2.TXT
C:\CTR\DATA\A5052P\NO006¥111_rename_2_chB0DS_2.TXT
C:\CTR\DATA\A5052P\NO006¥200_rename_2_chB0DS_2.TXT
C:\CTR\DATA\A5052P\NO006¥220_rename_2_chB0DS_2.TXT
C:\CTR\DATA\A5052P\NO006¥311_rename_2_chB0DS_2.TXT

```

	平滑化			バックグラウンド	吸収補正	RD補正	Defocus補正			規格化
	Mean	Golay	ADC				random	計算1	計算2	
ODFPoleFigure1.5	M	G	AXXX	B0	U	R0	D			S
ODFPoleFigure1.5S	M	G	AXXX	B0	U	R0	D			S
ODFPoleFigure2	M	G	AXXX	B00	U	R0	D1	D3	D2	S
ODFPoleFigure2S	M	G	AXXX	B00	U	R0	D1	D3	D2	S

より、バックグラウンド除去、d e f o c u s 補正、規格化が行われています。

1 3. 大量データの平均化

A d d i n g P o l e ソフトウェアで平均化を行う。