

汎用極点図データ処理

## ODFPoleFigure2 (S) ソフトウェア

Ver.4.03

従来、曲線データのError評価は、ODF解析後、ValueODFVFで確認していましたがVer3.42以降、本ソフトウェア内で、最適なRp%の補正処理が行えるようになりました。

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。

Ver3.85(2019/02/20)以降,Cubic の Calc,Connect でも ValueODFVF 動作

2022年08月16日



*HelperTex Office*

## 目次

1. 概要
2. 特徴
3. データの流れ
4. プログラムの使い方
5. 主な機能
6. 配向評価総合パッケージ CTR ソフトウェアとの連動
7. ASCデモデータによる動作確認
  7. 1 処理データ選択
  7. 2 測定データ評価
  7. 3 測定バックグラウンド強度の修正
    7. 3. 1 Fiber状態のバックグラウンド凸凹修正
    7. 3. 2 手入力による修正
    7. 3. 3 ASC変換されたバックグラウンド
    7. 3. 4 試料台のブラインドにより測定出来ていないデータ削除
  7. 4 平滑化
  7. 5 RD補正
  7. 6 吸収補正
  7. 7 Defocus補正
    7. 7. 1 TXT2ファイル指定によるdefocus補正ファイル作成
    7. 7. 2 random試料との強度比較を行う場合
    7. 7. 3 登録defocus曲線を変更する
    7. 7. 4 透過法defocusの対応
  7. 8 規格化
    7. 8. 1 内部計算規格化強度の計算
    7. 8. 2 規格化モードの切り替え
  7. 9 一括データ処理を行う。
  7. 10 定型化処理の簡素化
  7. 11 相互に重なりあう極点図の分離
  7. 12 強制バックグラウンド処理
  7. 13 同時に表示する極点図Max強度を絶対、相対の選択
  7. 14 作成されるファイル
8. Bruker社データの読み込み
  8. 1 Uxdフォーマットの場合、予めUxdからASCフォーマットに変換する方法
  8. 2 Uxdフォーマットを直接変換方法
  8. 3 MulTex3データの場合
  8. 4 GADDS popLA (raw) の場合
9. PANalytical社データの読み込み
  9. 1 予め、txt、xrdmlフォーマットからASCフォーマットに変換する方法
  9. 2 予め、CSVフォーマットからASCフォーマットに変換する方法
  9. 3 直接変換方法
10. Rp%の最適化

1 1. 極点図の3D表示、等高線表示

1 2. 処理結果のError評価

付録 (データフォーマット)

F-1 R i g a k u社ASCデータ

F-2 B r u k e r社 U x dデータ1

F-3 B r u k e r社、U x dデータ2

F-4 B r u k e r社 M u l t e x 3 p o p L A ( r a w)

F-5 B r u k e r社 G A D D S p o p L A ( r a w) データ

F-6 P A N a l y c i c a l社 T X Tデータ

F-7 P A N a l y c i c a l社 x d m lファイル

F-8 P A N a l y c i c a l社 C S Vデータ

## 1. 概要

本ソフトウェアは、当社で開発した配向評価総合パッケージ CTR ソフトウェアの中核となるソフトウェアであり、国内外 X 線メーカの測定データに各種補正を行い、世界で最もポピュラーな ODF 解析ソフトウェアを手軽に使えるよう配慮してあります。データ処理内部は全て c p s 単位で扱われています。測定ファイル名の先頭は指数としてください。

ODFPoleFigure2Sは、ホルダー一括処理（圧延板処理向け）を行います。

<https://helpertex.sakura.ne.jp/Soft/DOC4/rollingsystem-CTR.pdf>を参考にしてください。

## 2. 特徴

すべてのプログラムが java で記述されている。（Windows のどの OS 上でも動作）

サポートされていない測定データでも簡単に取り込める（簡単に追加可能）

複数の測定データを一括データ処理

データ処理

バックグラウンド削除、バックグラウンド修正、平滑化、RD 補正、吸収補正、defocus 補正、規格化処理のビジュアル化

極点図の 3D,等高線表示

バックグラウンドプロファイルの確認と修正バックグラウンドの確認

平滑化処理画面を参考に適切値を選択

RD 補正処理画面を参考に適切値を選択

吸収補正量画面を表示

Defocus 補正量を表示（補正量の大きな場合、補正量により、作成する極点図に制限）

Defocus 補正量の変更

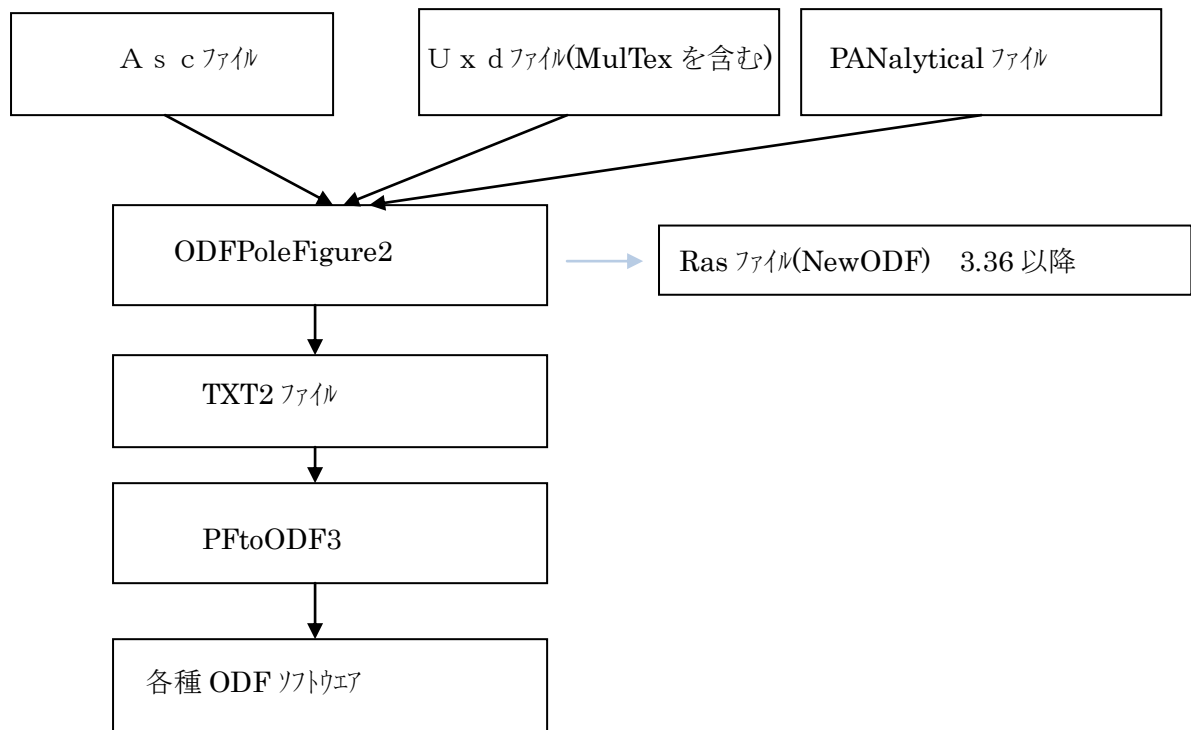
入力極点図と処理後の極点図を同時表示

処理条件を l o c k により、常に同一条件による処理を可能にする。（ルーチンワーク）

利用目的が品質管理用なら、ファイル選択、一括処理で、ODF 入力データ作成は 10 秒以内で終了

## 3. データの流れ

測定データファイル名の先頭に指数を配置する事



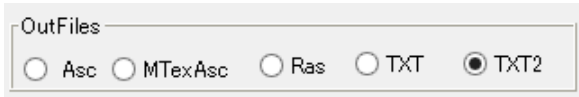
#### 4. プログラムの使い方

C:\¥CTR¥bin¥ODFPoleFigure2.jar ファイルをマウスでクリック

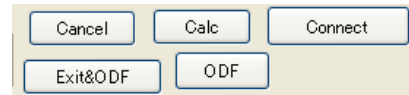
#### 5. 主な機能

The image displays the ODFPoleFigure2 software interface with several panels and settings highlighted by blue arrows and pink text annotations:

- InitSet / BGMode Measure / Condi:** A menu area with options like Measure, Straight, Defocus, etc. An annotation points to the 'All background' option with the text "バックグラウンドモード切り替え".
- Condition Free:** A panel with 'Lock' and 'Free' buttons. An annotation points to the 'Free' button with the text "処理条件 lock-free 切り替え".
- Background delete mode:** A panel with radio buttons for DoubleMode, SingleMode, LowMode, HighMode, and Nothing. An annotation points to the 'Nothing' option with the text "バックグラウンド選択と修正".
- Files select:** A panel showing the selected file 'ASC(RINT-PC)'. An annotation points to the file name with the text "入力、表示データ選択".
- Smoothing:** A panel with a 'Smoothing' dropdown set to '3' and 'Arithmetic mean'. An annotation points to the '3' dropdown with the text "平滑化モード切り替え".
- RD:** A panel with 'RD' set to '0.0' and 'Interpolation' selected. An annotation points to the 'Interpolation' dropdown with the text "RD 補正モード切り替え".
- AbsCalc:** A panel with 'AbsCalc' set to 'Trans' and 'Schulz reflection method'. An annotation points to the 'Schulz reflection method' dropdown with the text "吸収補正指定".
- Defocus file Select:** A panel with 'Defocus(2) function files folder' set to 'SmartLab-DSH2mm-Schulz'. An annotation points to this dropdown with the text "defocus 指定".
- Smoothing for ADC:** A panel with 'Cycles' set to '2' and 'Weight' set to '4'. An annotation points to the 'Cycles' dropdown with the text "平滑化指定".
- Normalization:** A panel with 'CTR' selected under 'Normalization'. An annotation points to the 'CTR' radio button with the text "規格化と極点図の中心の平均化".



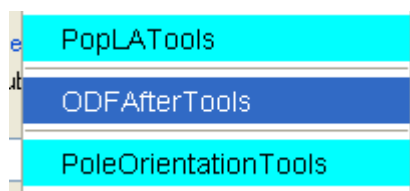
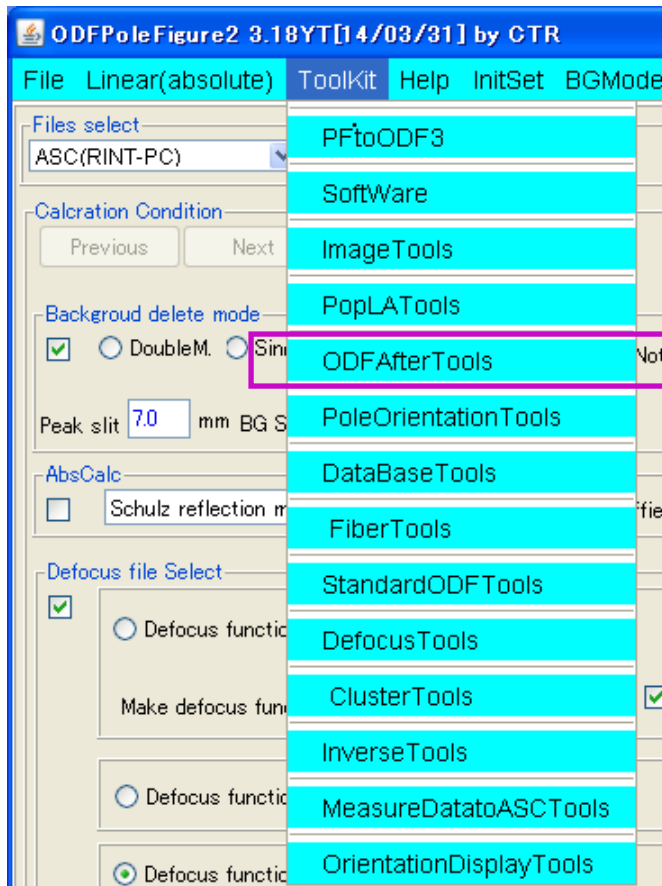
作成フォーマット指定



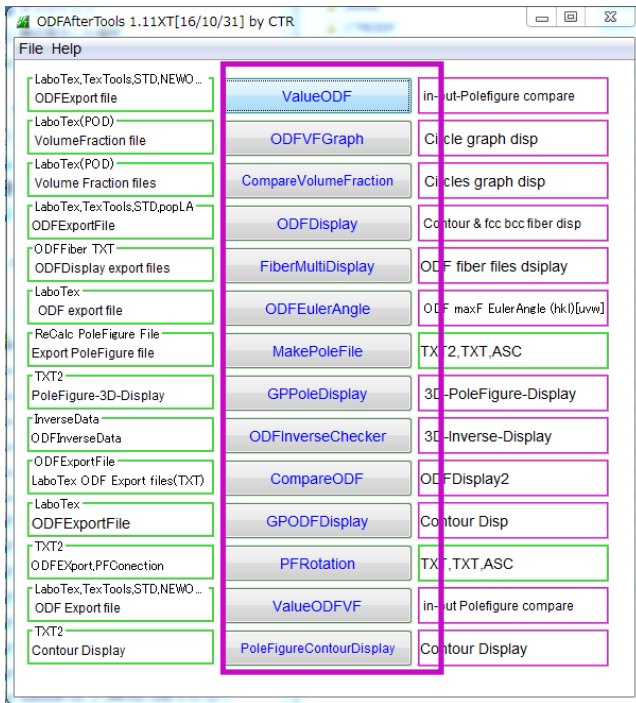
計算実行

## 6. 配向評価総合パッケージ CTR ソフトウェアとの連動

メニューの ToolKit から以下のカテゴリプルダウンメニューを表示、選択で別の画面が表示される。



たとえば、では

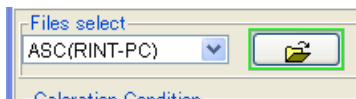


が表示され

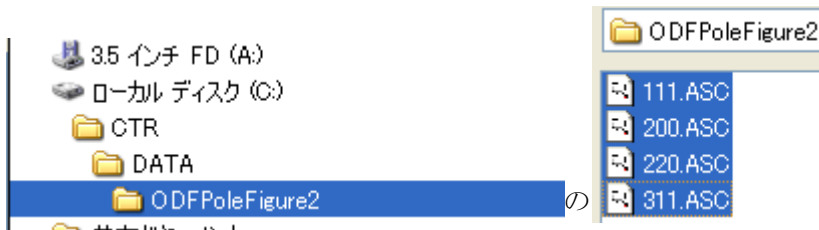
更に中央のアプリケーション名を選択すると、各種ソフトウェアが動作します。

## 7. ASCデモデータによる動作確認

### 7. 1 処理データ選択

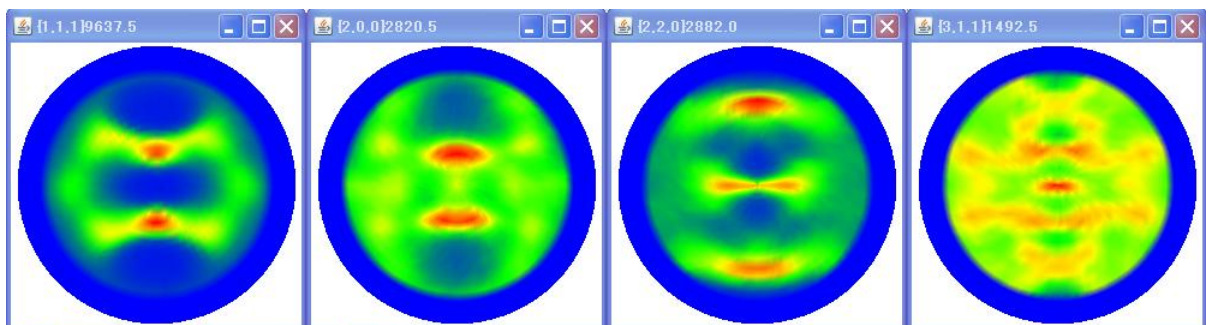


からデモデータ選択

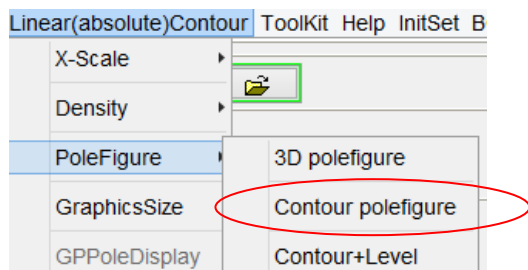


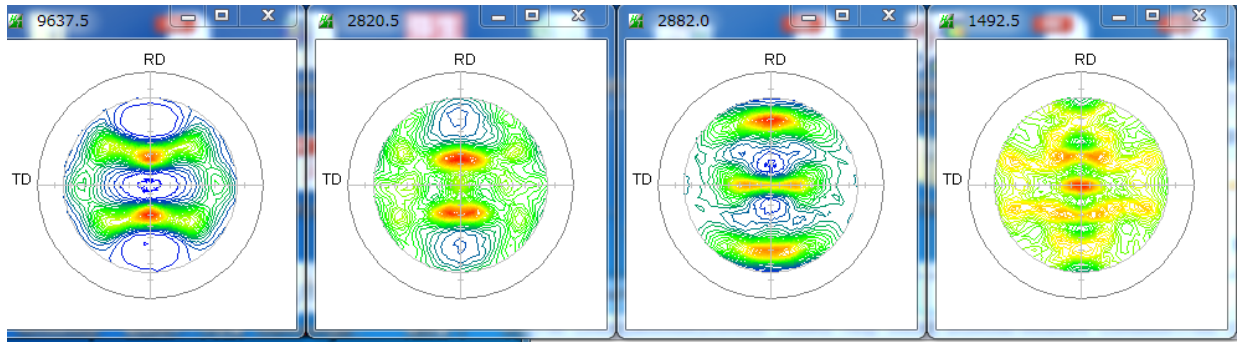
を複数選択する。

選択した測定データを表示します。指数と最大強度が表示

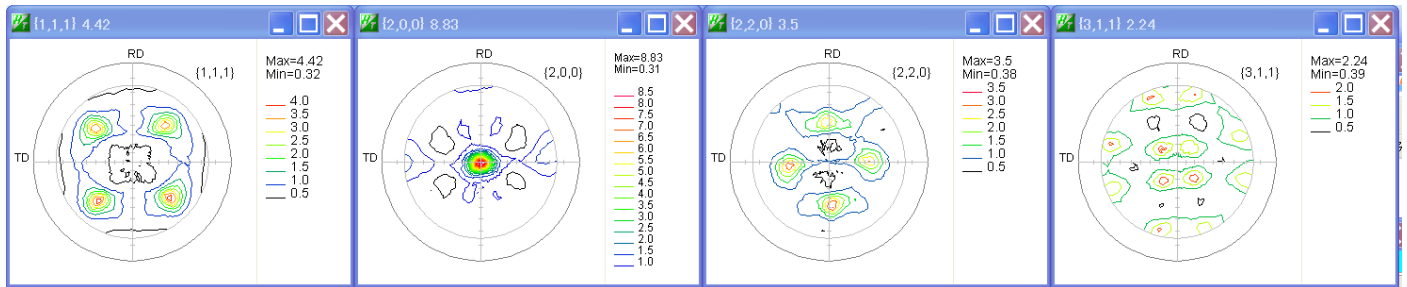


描画を等高線に切り換えると



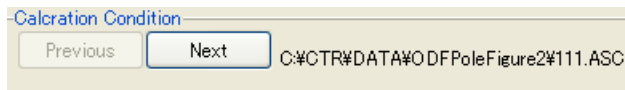


Calc で極点処理を行うと、GPPoleDisplay で等高線レベル表示が可能になります。

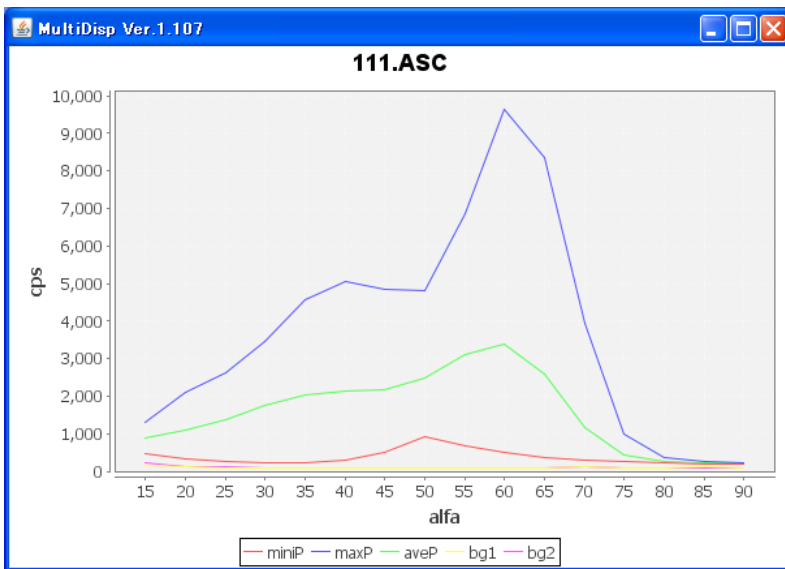
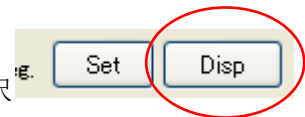


Contour+Level でも等高線レベル表示が可能

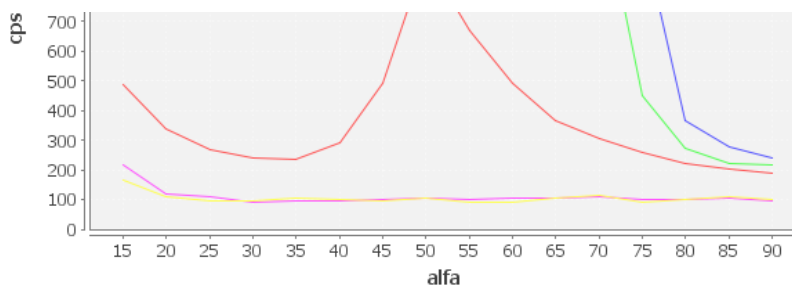
## 7. 2 測定データ評価



で表示データを選択



拡大



横軸は  $\alpha$  軸

$\beta$  方向の平均値を表示

赤: ピークの最小強度

青: ピークの最大強度

緑: ピークの平均値

黄: バックグラウンド low

赤: バックグラウンド high

評価はバックグラウンドに着目

拡大すると

バックグラウンドが左側で

ピークと同じ動きを示す。

バックグラウンド測定  $2\theta$  角度が

ピーク角度に近い為

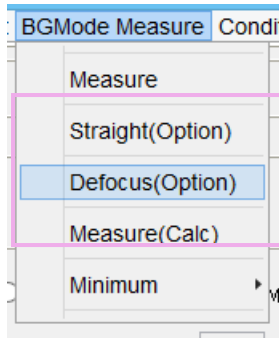
修正の必要がある。

## 7. 3 測定バックグラウンド強度の修正

$\alpha$  軸に対するバックグラウンド強度プロファイルは、defocus 曲線と同じような傾向があり、通常極点図の

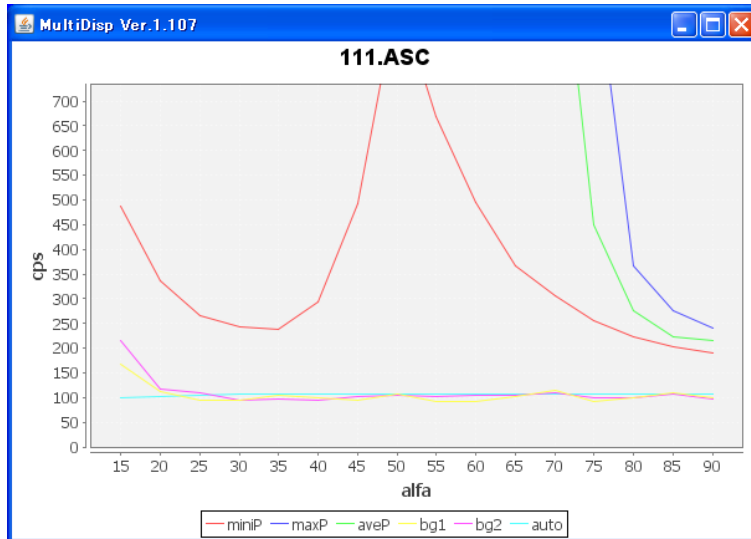


外側になるに従って、強度が減衰します。メニューの BGMMode から defocus を選択



defocus を選択後、再度 DISP から拡大する。

バックグラウンドの修正は、反射極点で、極点図の中心まで測定されているデータに限ります。

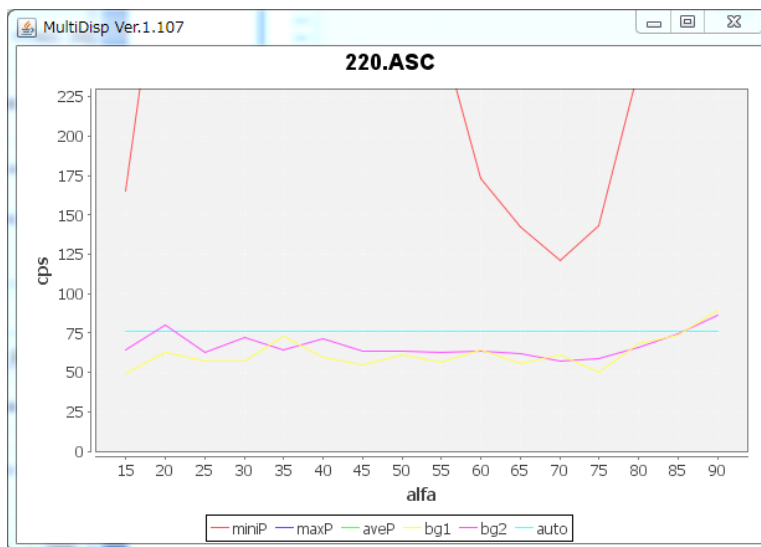


Auto 曲線は極点図の中心付近の3点の平均値から計算されます。  
修正可能モード  
Straight (Option)  
Defocus(Optional)

水色:Auto 曲線が表示される。この曲線をバックグラウンド強度として修正されます。

### Auto 曲線の変更

{220}極点図を拡大すると

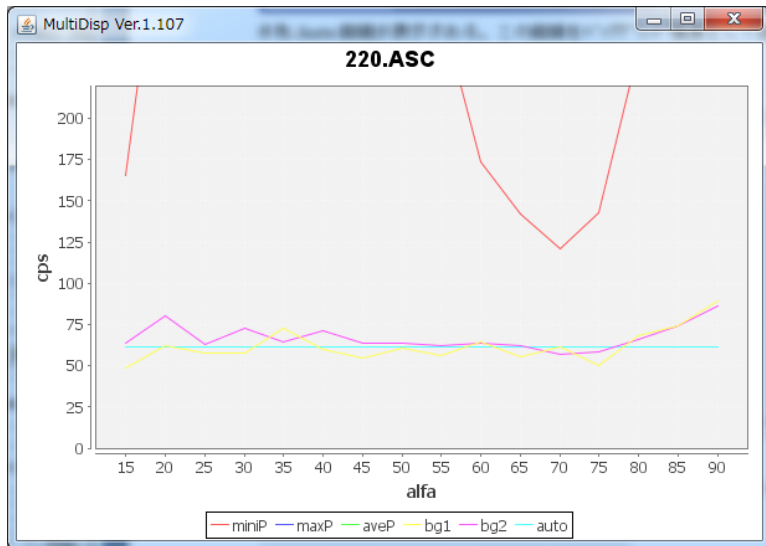


$\alpha$  軸で平均値を計算する範囲を指定する。  
45 度から 60 度が最適とした場合

BG Scope 45 deg. 60 deg. Set Disp

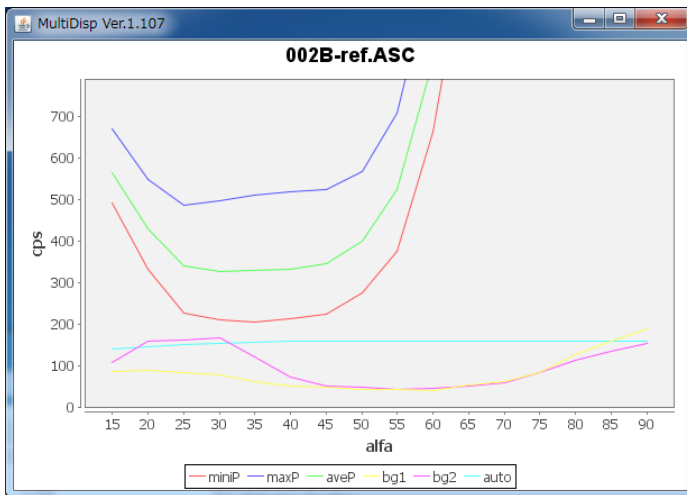
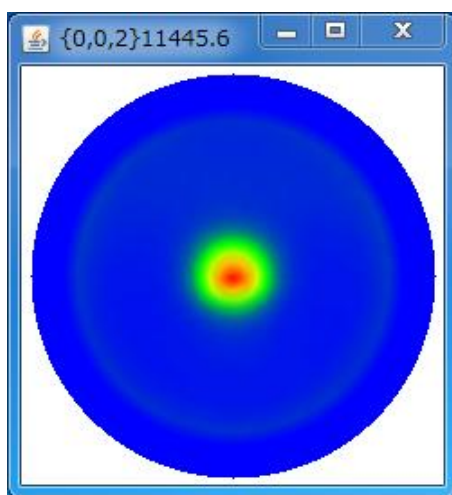
45 度から 60 度を入力し Set する。

再度 DISP と拡大で



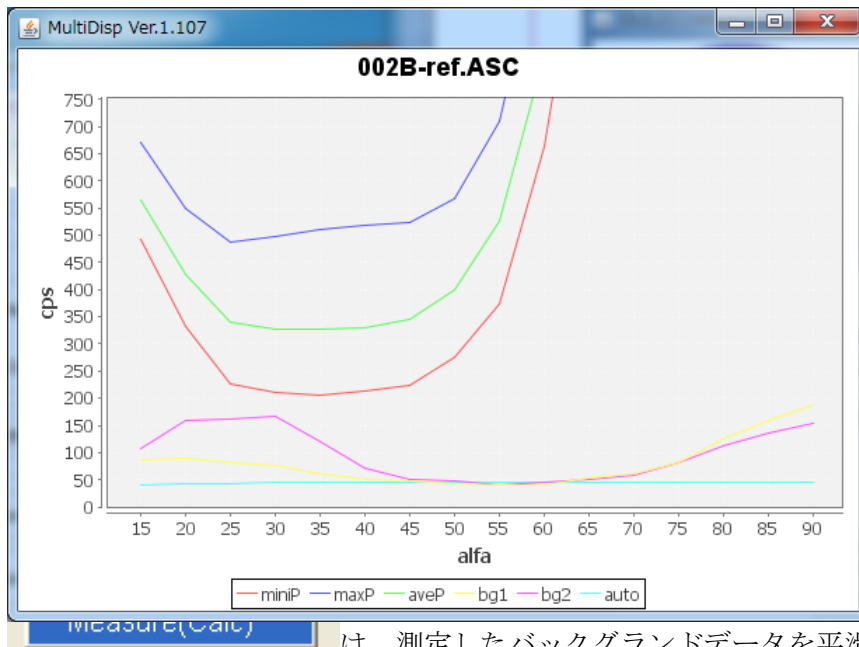
修正は可能ですが、測定時のバックグラウンド測定  $2\theta$  角度をピーク角度から 3 度位離して測定すると良い結果が得られる。

この修正機能は、マグネシウムなどに見られる極点図の中心付近のバックグラウンド

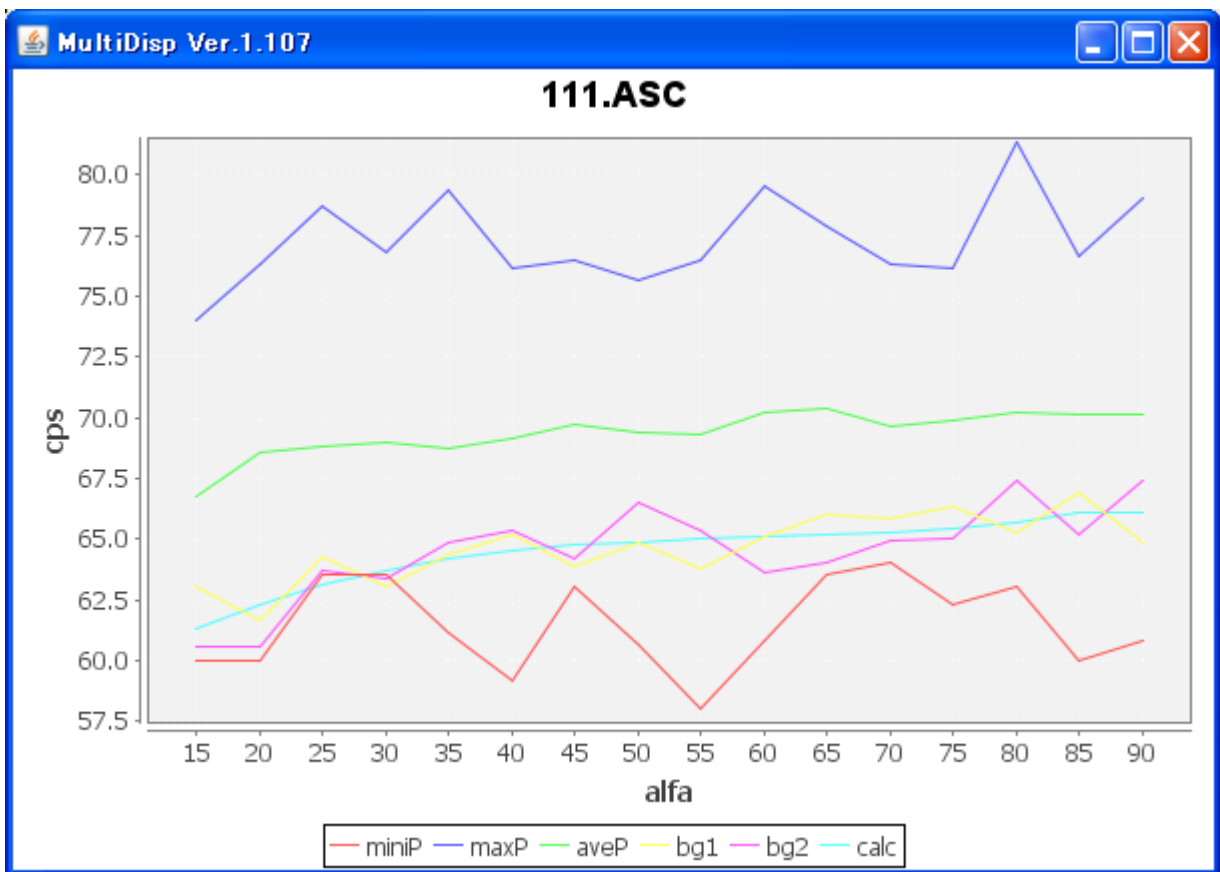
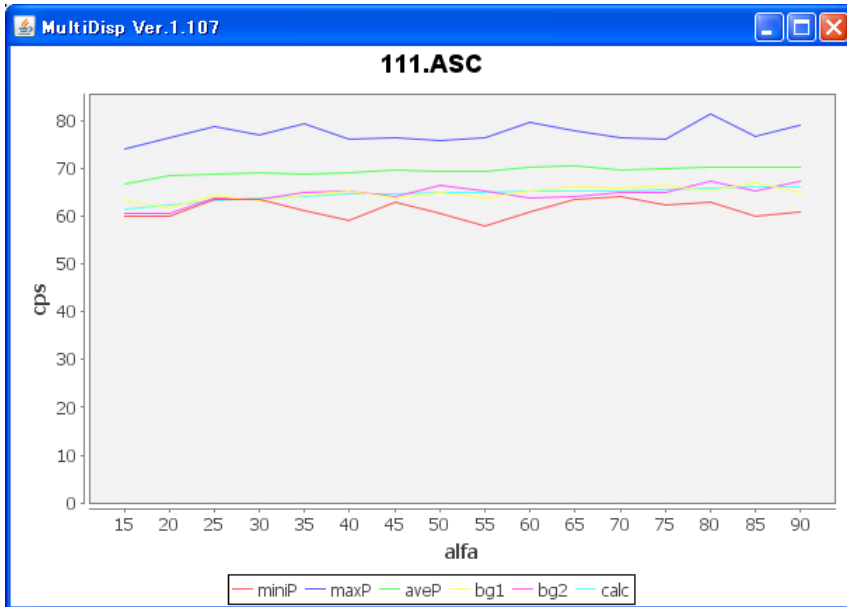


$\alpha$  軸 50 度から 65 度で平均値を算出

BG Scope  deg.  deg.



は、測定したバックグラウンドデータを平滑化する。



黄色、紫色の変動の大きいバックグラウンドに対し、平滑化を行っている。

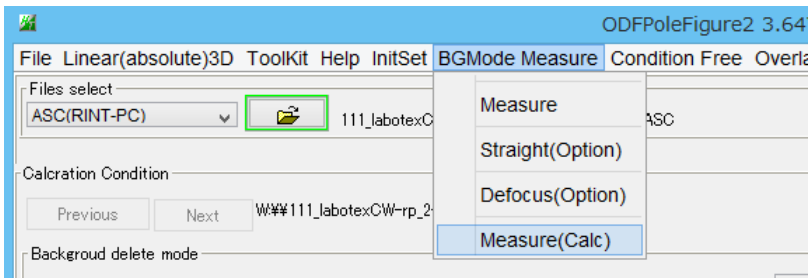
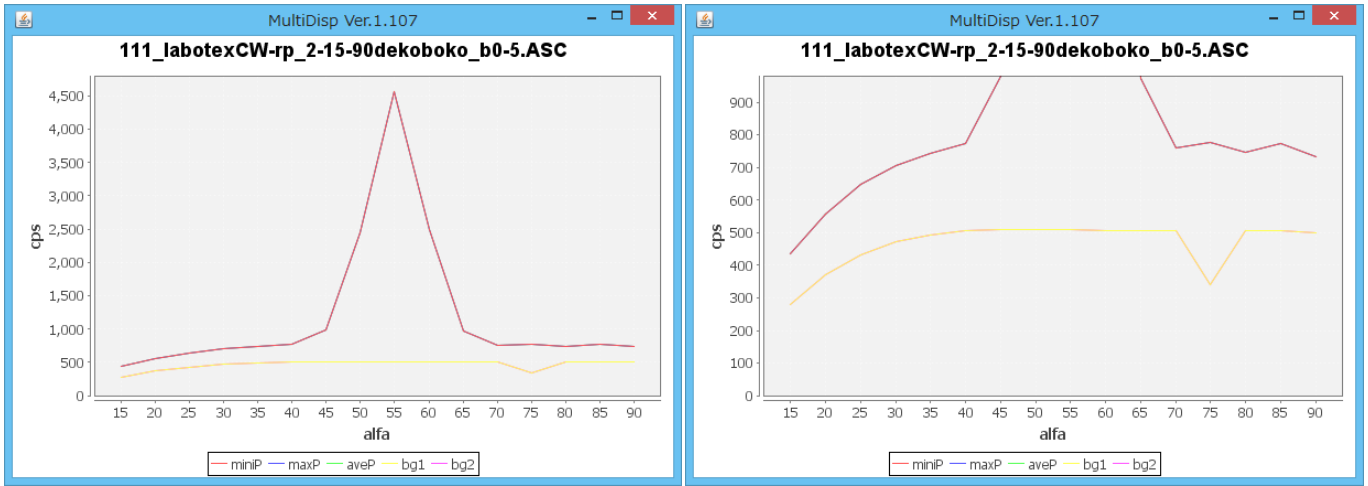
例えば、15度から90度を5度間隔で測定した場合、 $\alpha$ 軸 15,20,25度の平均値をS  
80,85,90度の平均をEとした場合、 $\alpha$ 軸 20,25,,,80,85,90のデータを

20、25、30、、、80、85、90

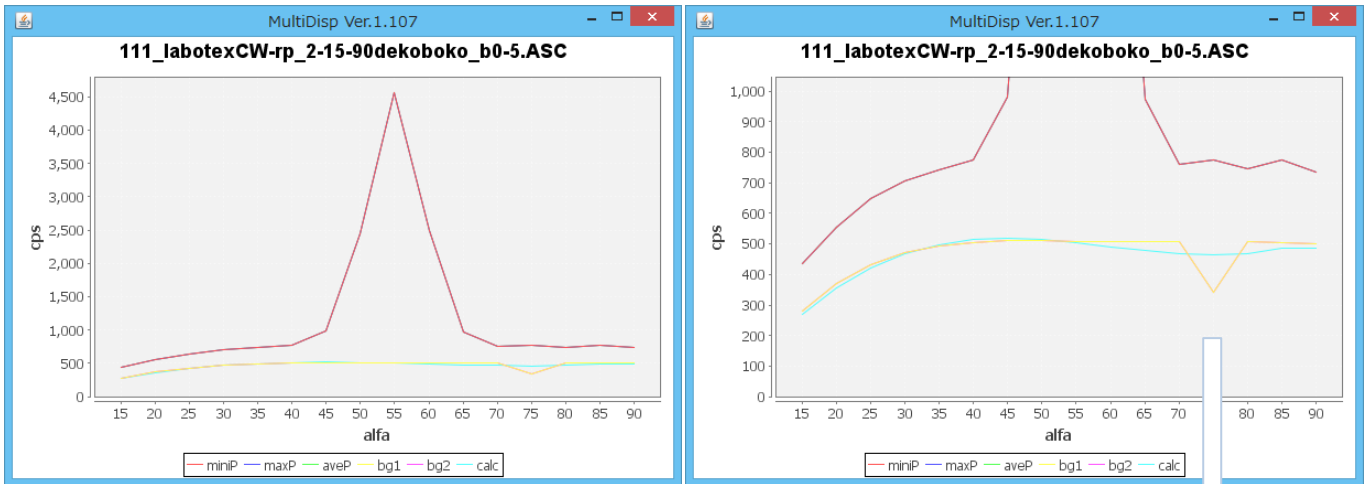
S、測定データ、E、E、Eとし、3次関数にFittingを行い、  
15、から80度データはFittingデータとし、85、90度データは、  
80、85、90の平均値とした。

バックグラウンドの凸凹で処理を行うとFiber要素が混入します。

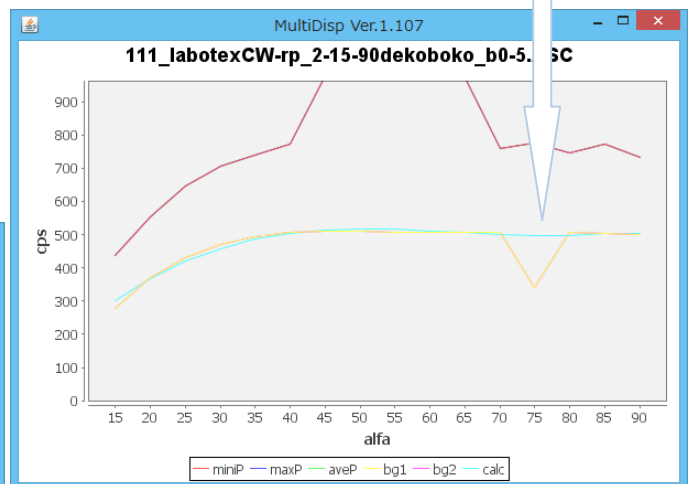
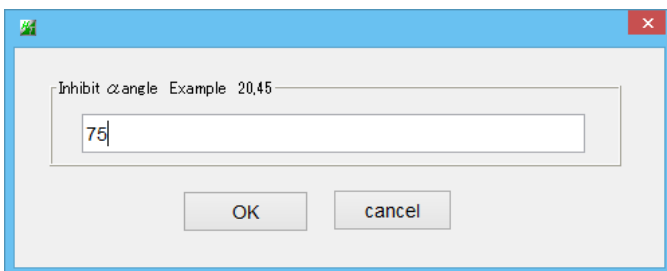
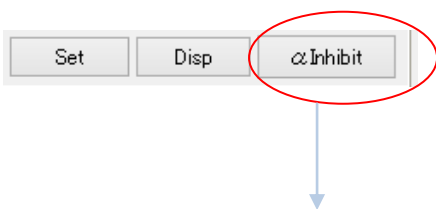
### 7. 3. 1 Fiber 状態のバックグラウンド凸凹修正



バックグラウンドの平滑化



特異点を削除



高分子材料の様にバックグラウンド測定が難しい場合

バックグラウンド強度が測定されていない場合、バックグラウンドを変更できます。

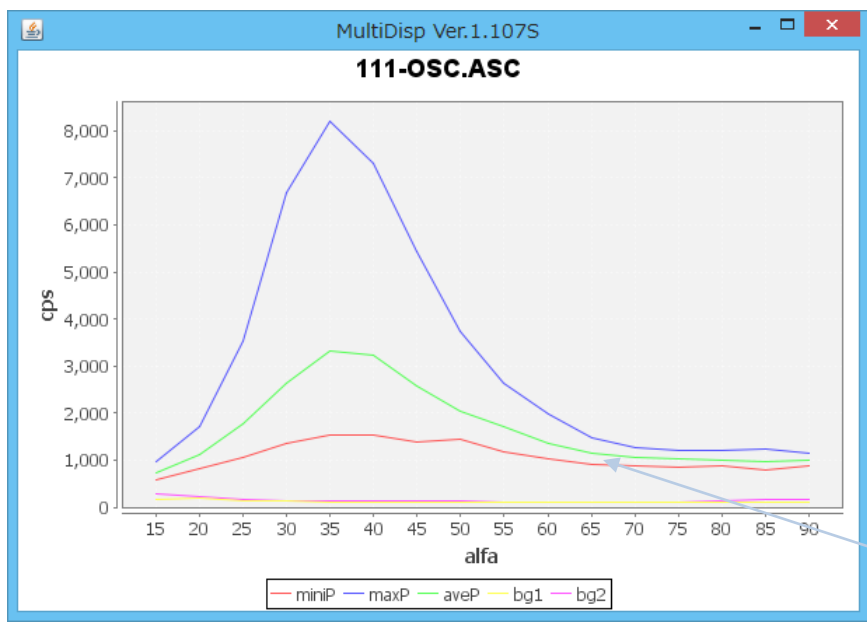
測定ピーク極点図の $\alpha$ 毎に最小強度をバックグラウンドとする

BGMode Measure		Condition Free	
Measure			
Straight(Optional)			
Defocus(Optional)			
Measure(Calc)			
Minimum	$\beta$		
All background	$\alpha\beta$		

Minimum( $\beta$ )       Minimum( $\alpha\beta$ )

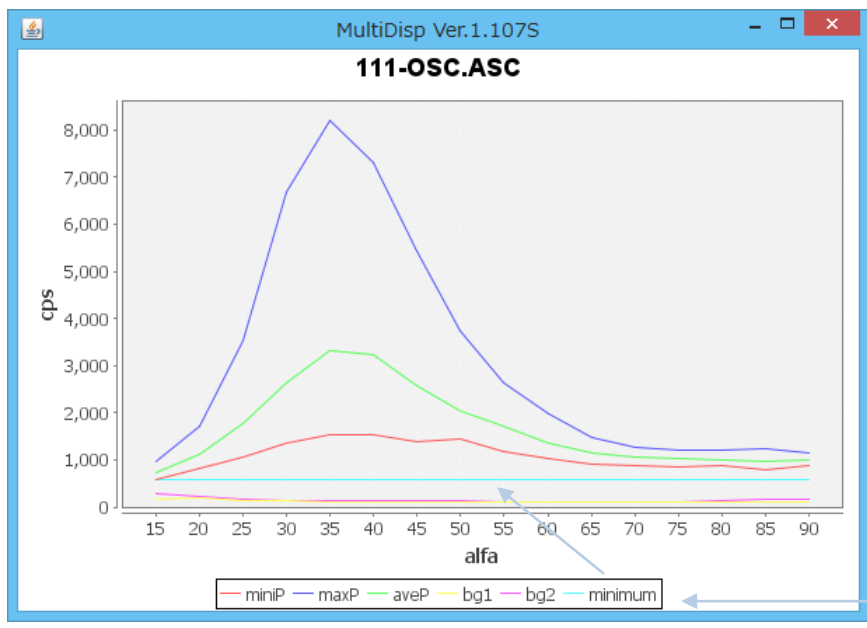
$\alpha$  毎に  $\beta$  方向の最小値をバックグラウンドとする  
全データの最小値をバックグラウンドとする。

### Minimum( $\beta$ )



バックグラウンド

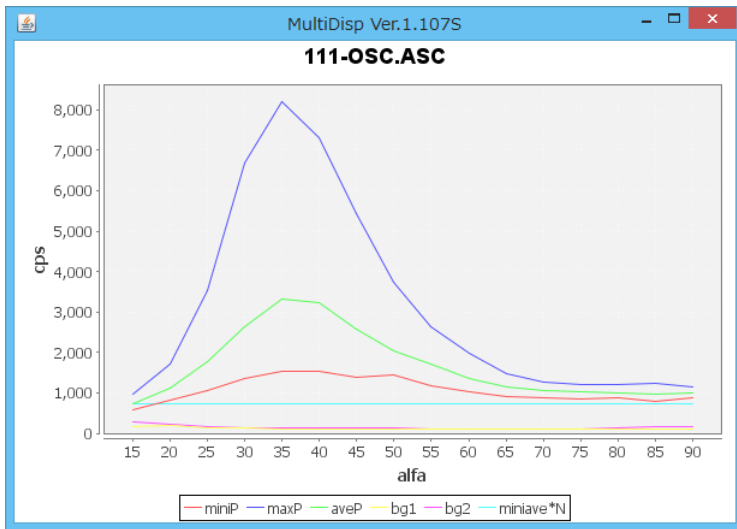
### Minimum( $\alpha\beta$ )



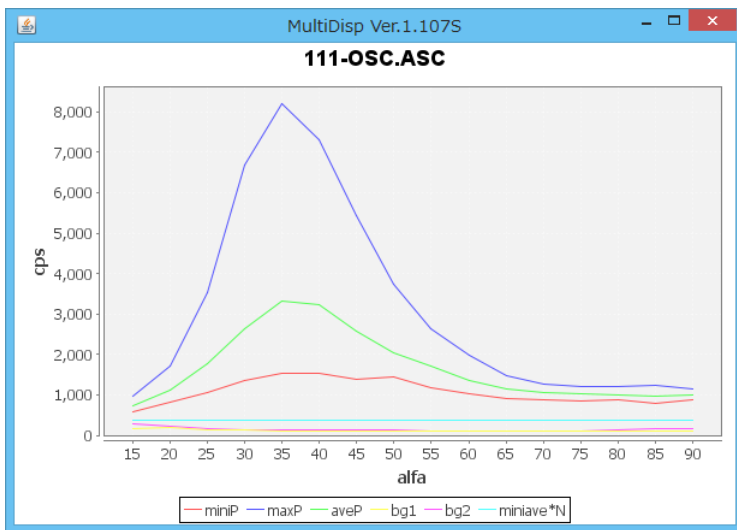
バックグラウンド

測定ピーク極点図  $\beta$  方向の最小平均値に係数 (1.0 以下) を掛けてバックグラウンドを決定

MinimumAverage( $\alpha$ )X

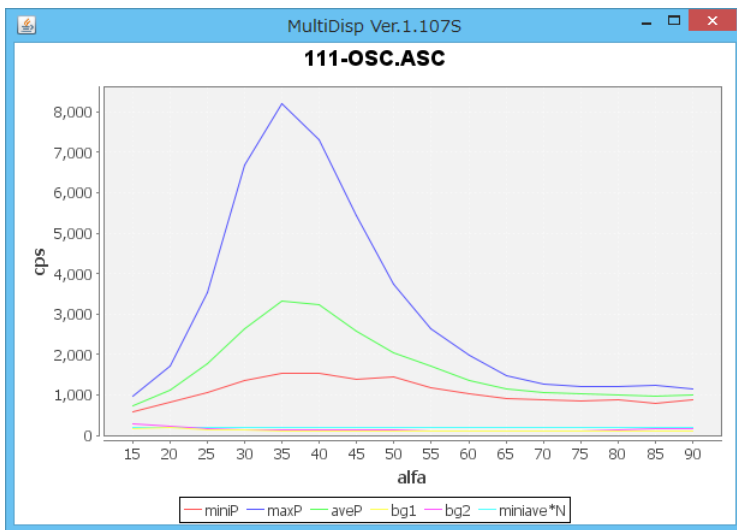


MinimumAverage( $\alpha$ )X

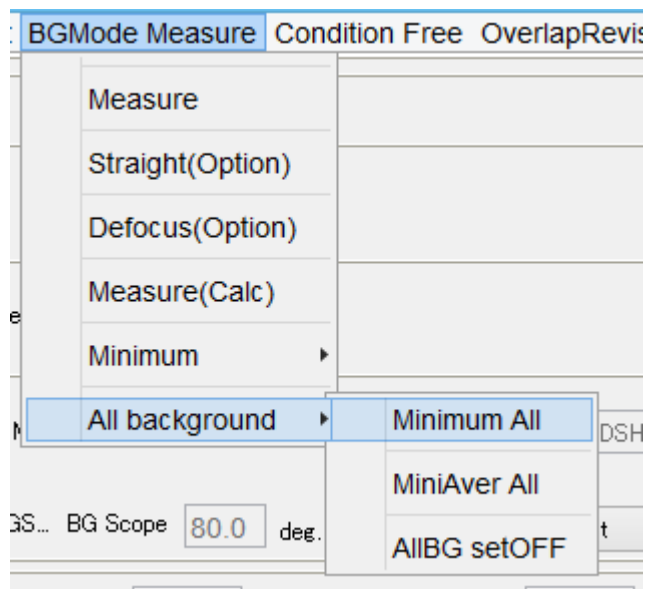


1. 0 以上は直接 cps でバックグラウンド指定

MinimumAverage( $\alpha$ )X



一括バックグラウンドレベル指定



### Minimum All

最小強度を複数の極点図に対し、一括指定

### MiniAver All

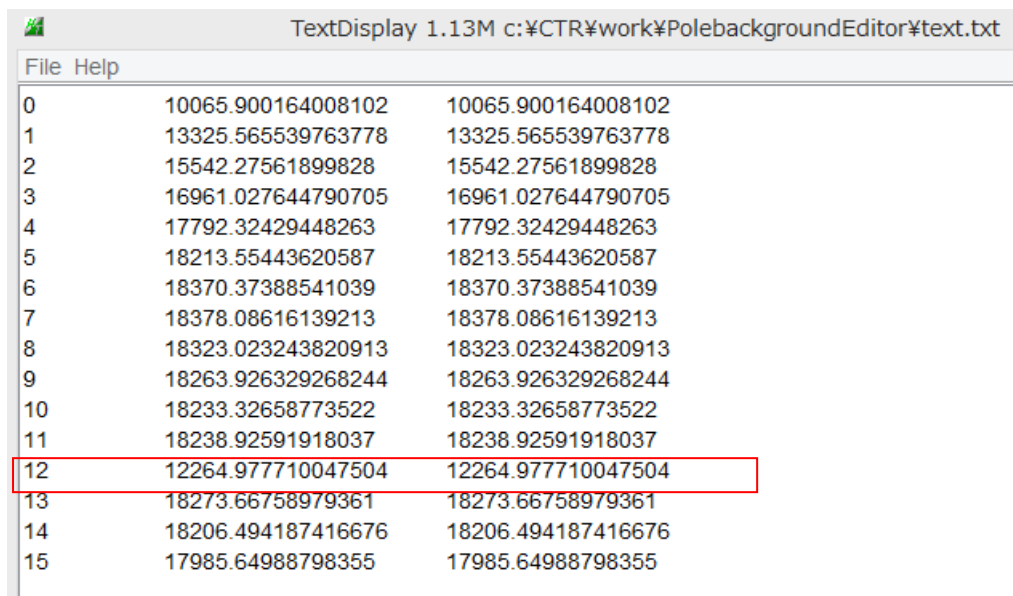
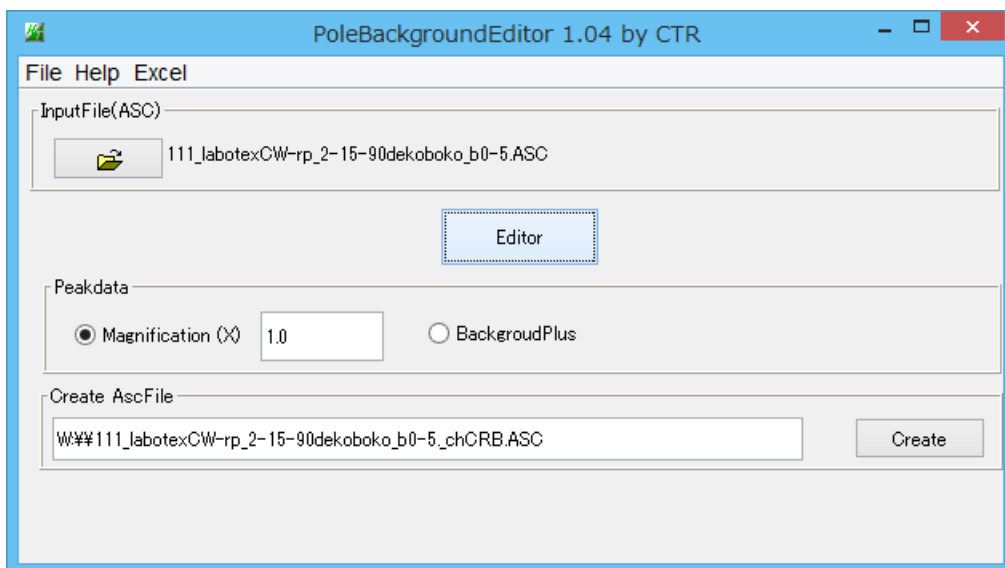
最小平均値に対する係数あるいは直接バックグラウンド入力値を一括指定

### AllBG setOFF

一括指定した値を取り消し、バックグラウンド指定なしに変更

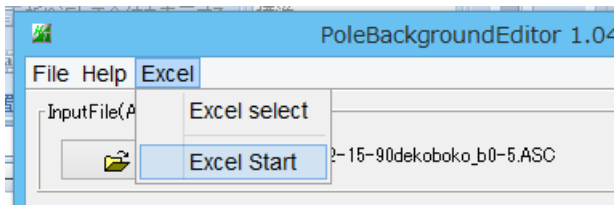
### 7. 3. 2 手入力による修正

TooKit->SoftWare->Next->PoleBackgroubndEditor

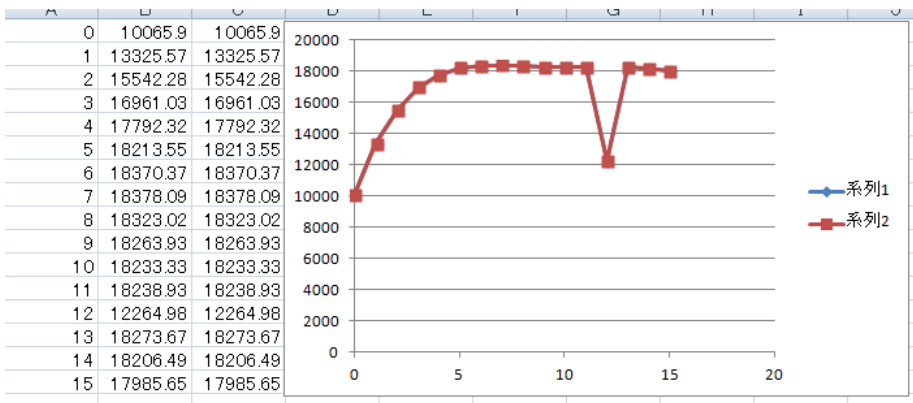


修正後、Save を行い、Create する。





Excel で修正



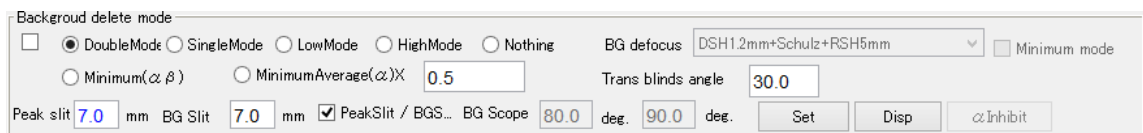
save 後 Create する

### 7. 3. 3 ASC変換されたバックグラウンド

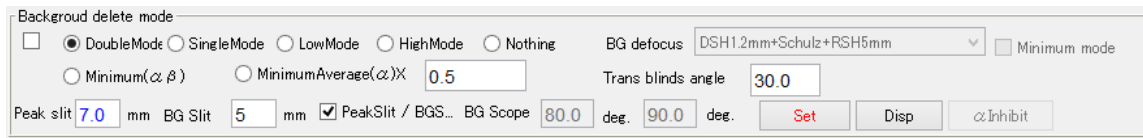
測定で、ピーク積分測定とバックグラウンド積分測定の受光スリット幅を変えて測定した場合、ASC変換されたデータには、バックグラウンドの受光スリット幅は登録されていません。

例えば、

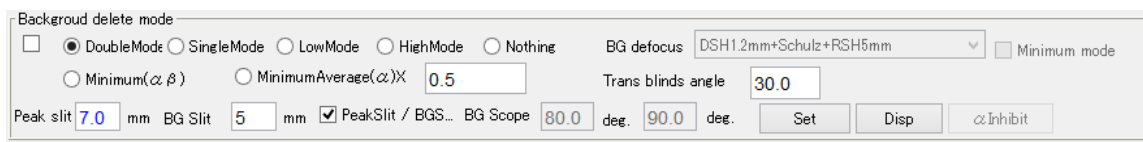
ピーク積分測定の受光スリット幅を 7 mm、バックグラウンド積分測定に受光スリットを 5 mm で測定した場合、



と表示されます。



バックグラウンドスリット幅を 5 mm と入力し、**Set** ボタンでデータ変更してください。

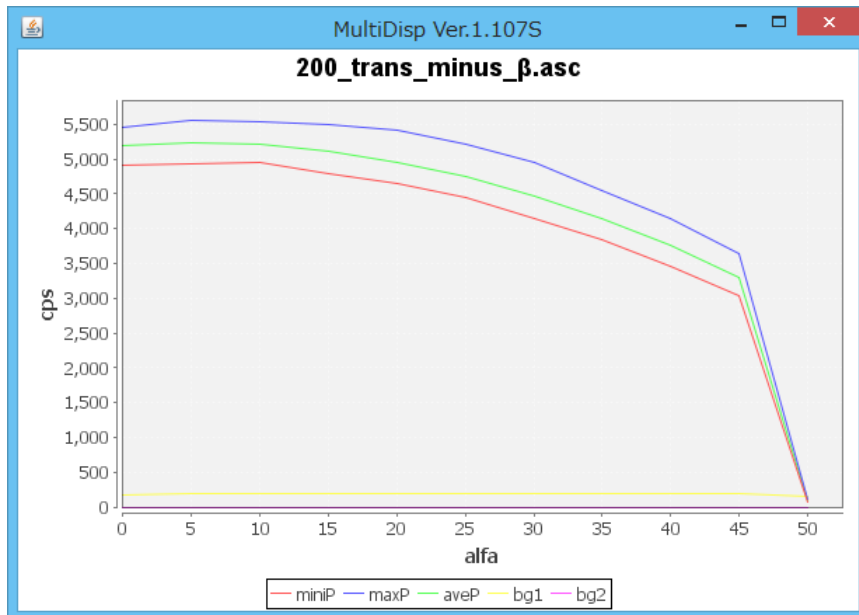


### 7. 3. 4 試料台のブラインドにより測定出来ないデータ削除

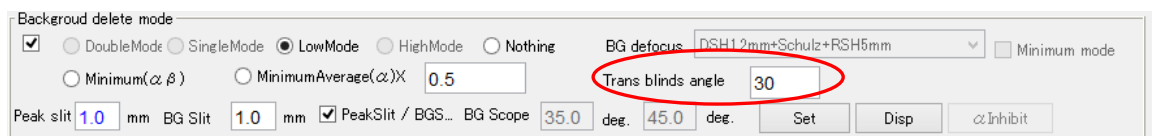
多目的試料台を用いて透過極点図を測定すると、多目的試料台のブラインドにより光学的に測定出来ない領域があり、領域は 30 度です。

透過極点図測定ピーク角度、あるいはバックグラウンド測定角度を  $2\theta$  とした場合測定出来る  $\alpha$  角度 =  $90 - 30 - 2\theta / 2$  度です。

以下は  $2\theta$  角度  $2\theta = 28.7$  の実測値です。  $\alpha = 45$  度まで測定出来ています。



このようなデータを以下の条件で読み込めば、 $\alpha = 50$ 度のデータは読み込まれません。

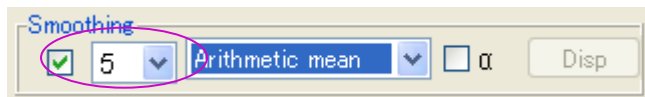


予め角度を指定してからデータを読み込んで下さい。

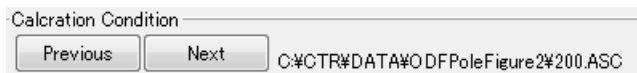
#### 7. 4 平滑化

結晶粒が荒い場合、測定データに一粒毎のピークが現れます。大きなピークが残ると、ODFなどの解析結果に影響します。平滑化の手法と平滑化点数を選び、最適化を行う。

**random**評価を行う場合、平滑化は行なわないでください。

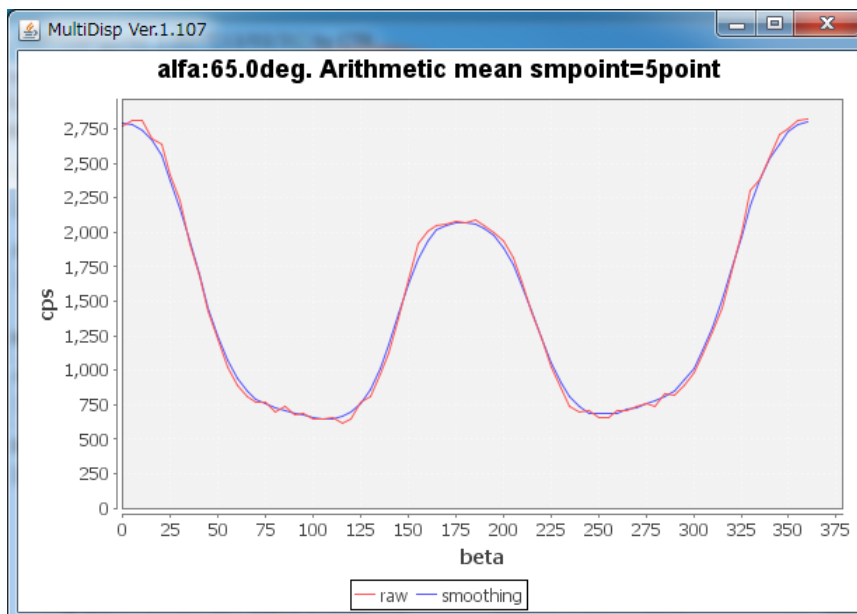


Dispでは選択されているデータの最大強度が存在する $\alpha$ 軸位置の $\beta$ 軸方向のプロファイルと、平滑化を行ったプロファイルが表示される。平滑化方向は $\alpha$ 軸と $\beta$ 軸双方に平滑化を行っている。



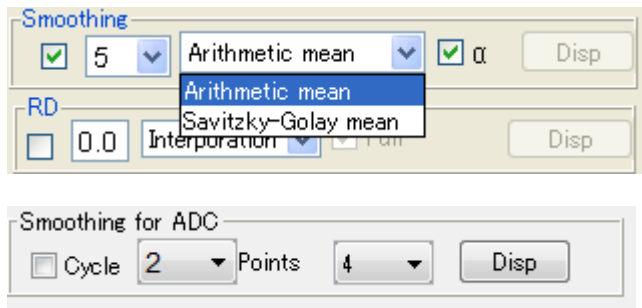
例えば、{200}極点図を選択

で DISP



平滑化パラメータは全ての極点図で共通です。

平滑化の手法は



### Arithmetic

指定した点数の移動平均

$\alpha$  方向は選択

### Savitzky-Golay

重み付き移動平均、 $\alpha$  方向は選択

(Rigaku 正極点と同じ)

### Smoothing for ADC

平面 5 点の重み付き移動平均

を繰り返す

大きな平滑化が行えるが、

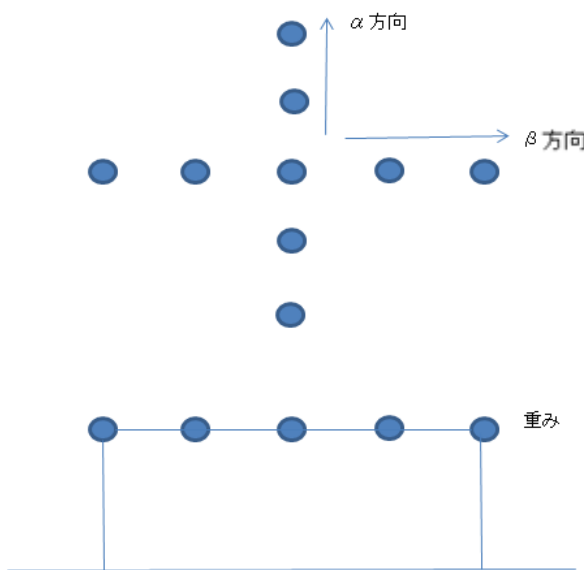
最大強度が下がります。

$\alpha$  方向と  $\beta$  方向に対し同時平滑

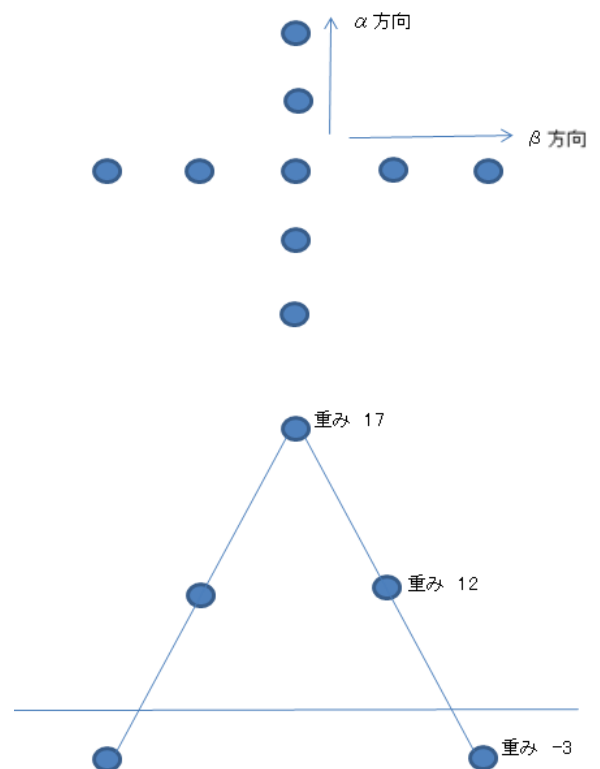
ADC 法では  $\alpha$ 、 $\beta$  のステップ間隔が同一であること  
平滑化は、ADC 手法がより良い平滑化と思われま

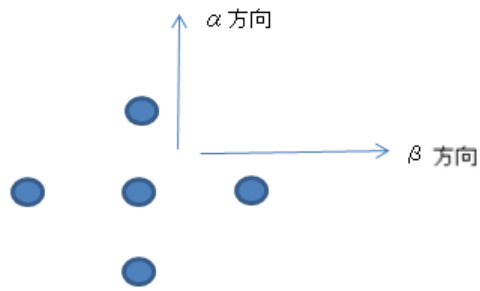
平滑化 5 点の重み

Arithmetic mean

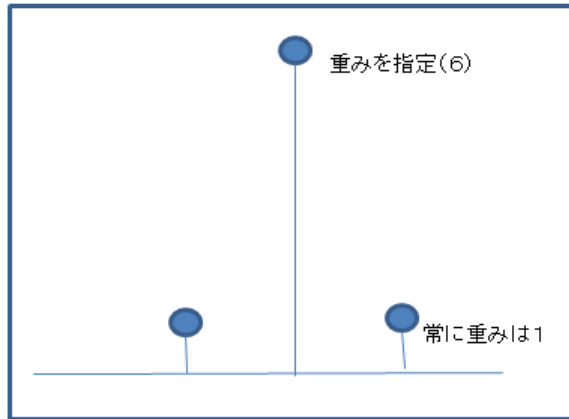


Savitzky-Golay mean





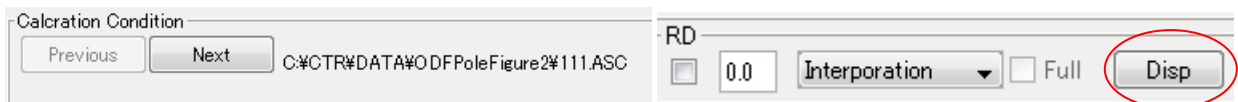
繰り返しが2

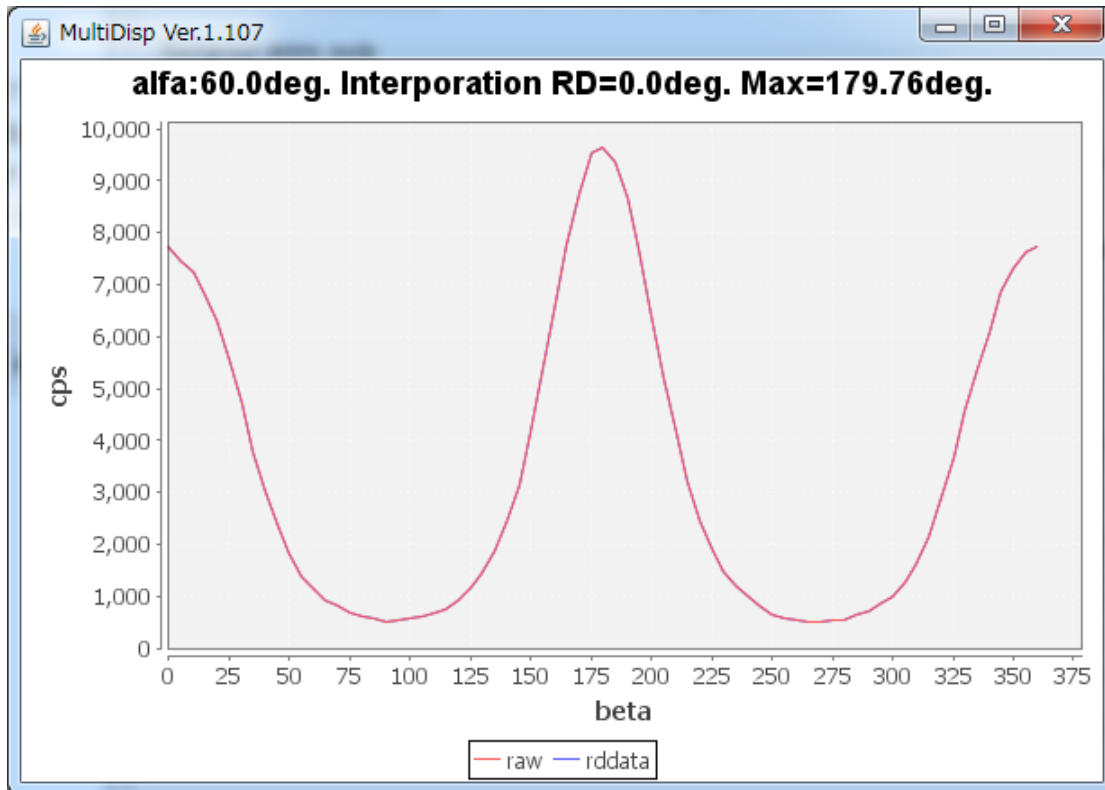


## 7. 5 RD補正

RD (Rolling Direction) は圧延された材料がはき出される方向であるが、その方向を極点図測定時にシステムで決まった方向に取り付ける。しかし、この取り付けが曲がっていると、回転した極点図として測定される。RD-マイナスRDラインに対し、回転により対称極点図にする機能である。

RD-DISP は、選択されている極点図の最大強度の  $\alpha$  軸角度における  $\beta$  軸方向のプロファイルを表示する。例えば、 $\{111\}$ 極点図を選択し DISP では



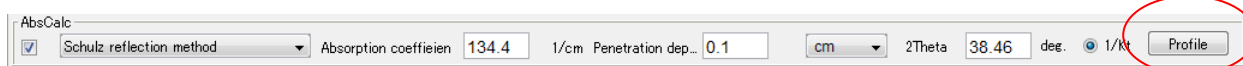


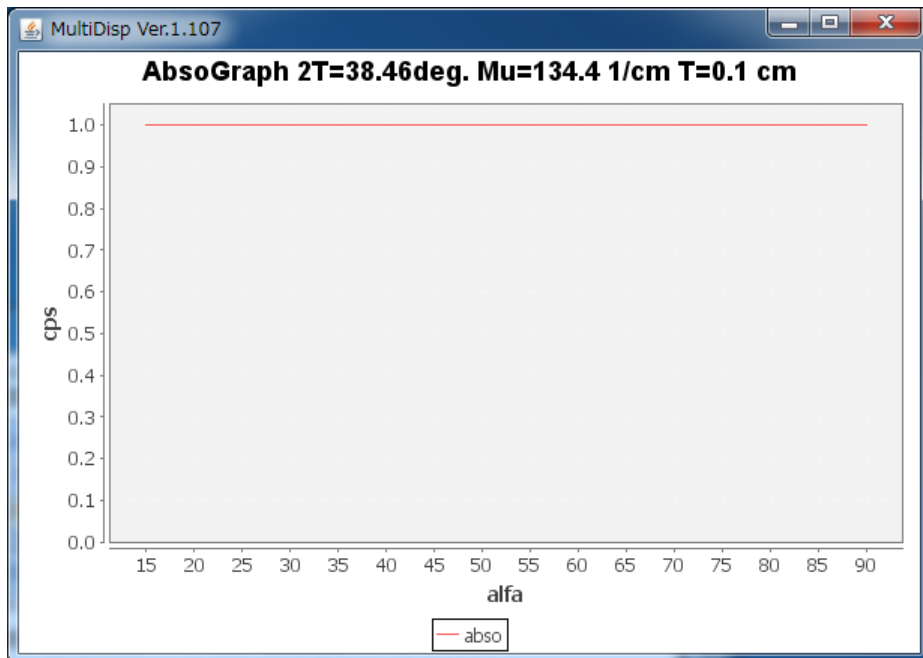
ピークプロファイルがシャープな極点図を選択し、最大強度の $\beta$ 角度を確認  
 最大強度角度が、0、45、90のよう角度を示す極点図で決定する。

このパラメータも全ての極点図に対して共通に使われる。

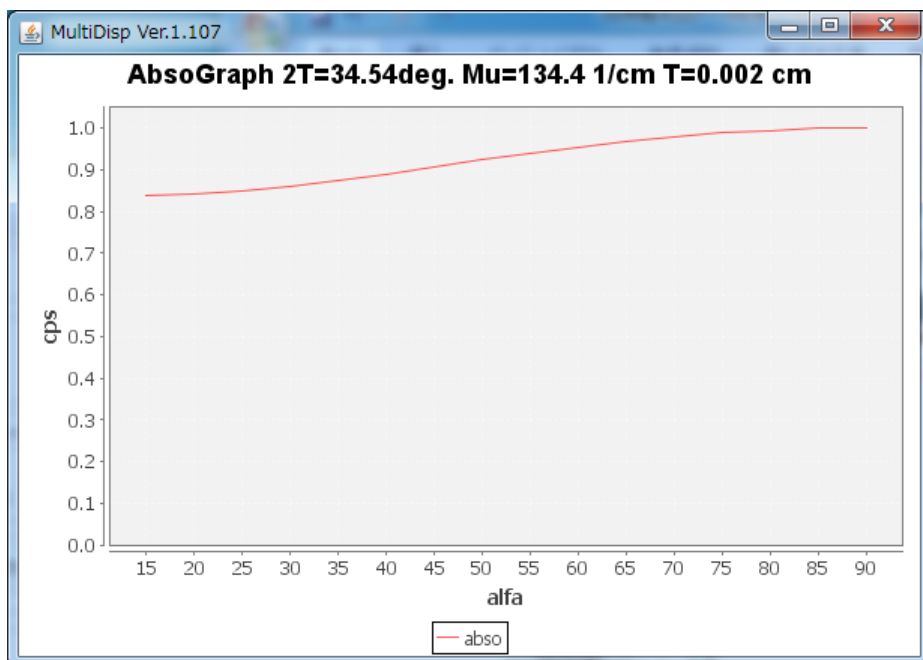
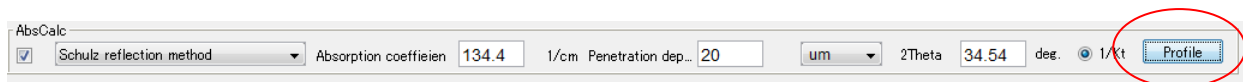
## 7. 6 吸収補正

XRDによる方位測定ではEBSDに比べ、若干深さ方向の方位も測定されていると言われてい  
 ます。吸収が少ない材料では、より深い位置からの反射があり、この影響はDefocusと区別が  
 難しくなります。しかし吸収の大きな試料における反射法極点図測定では、吸収の影響は少  
 ない。透過法では、吸収係数と試料厚さを掛け合わせた値が1.0に近いと吸収の影響は少  
 くなります。アルミニウム1mmをCu管球で測定した吸収補正曲線





厚さを  $20 \mu\text{m}$  とした場合



このプロファイルは補正量であり、表示している係数を測定した極点図に掛け合わせます。

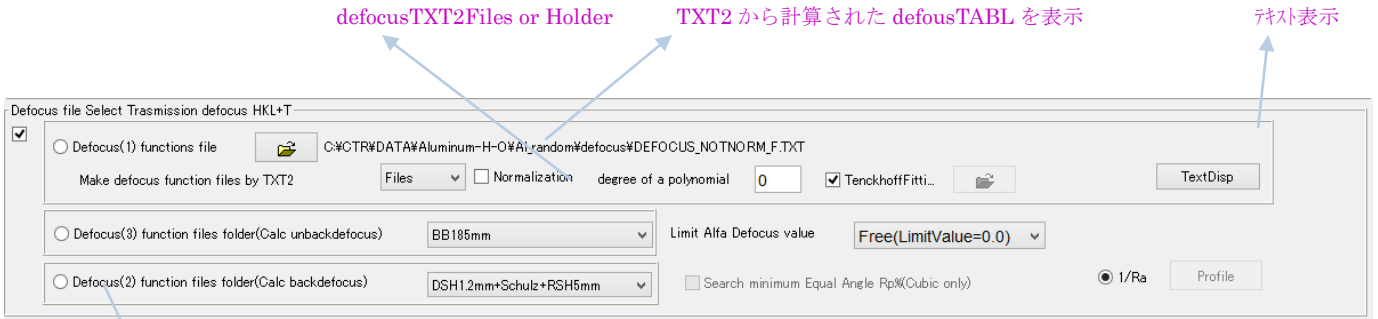
## 7. Defocus 補正

反射法極点図測定では、X線ビームに対し、試料を煽って測定を行う。煽り方向には Schulz スリットで制限しているが、多少の広がりがある。この為、この広がりがある試料を煽ることで、回折線も広がり有限な受光スリットからはみ出し、回折強度の低下が生じる。この現象が Defocus であり、測定  $2\theta$  角度が低角度、受光スリットが狭い場合、大きく落ち込み、補正量が大きくなる。

補正曲線は、測定試料と同じ材質の無配向試料を測定して補正する。被検試料測定時、受光スリット幅は無配向試料測定と同一でなければならない。無配向試料が得られない場合、計算で求める。

defocusTABLE 選択 選択された defocusTABLE



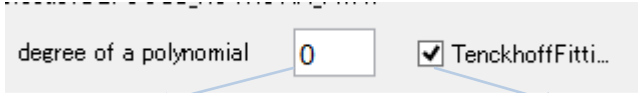


defocusTXT2Files or Holder      TXT2 から計算された defocusTABL を表示      テキスト表示

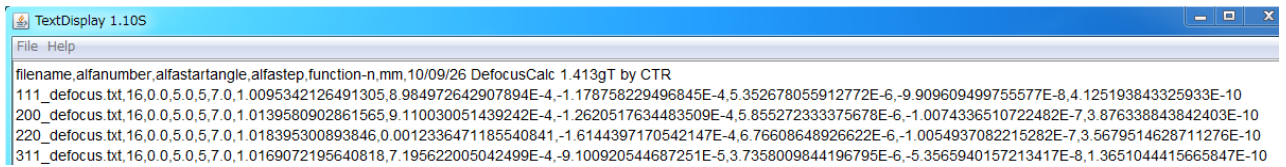
全ての角度、全てのスリット幅に対応 TABLE1      全ての角度、全てのスリット幅に対応 TABLE2      プロファイル表示

Standardize は、補正曲線の疑似規格化を行う（一般には指定する）、指定しない場合は、極点図の相対強度を計算する場合に使用

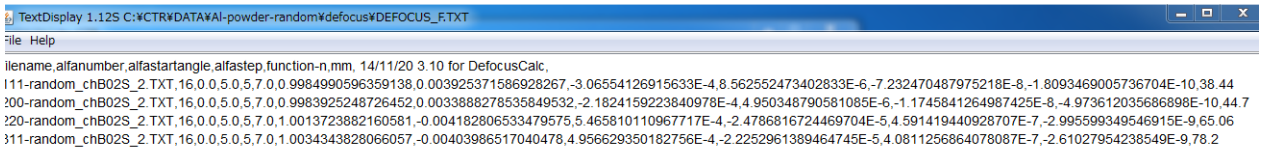
TextDisp は、選択された TABLE を表示、各反射が多項式で示される。



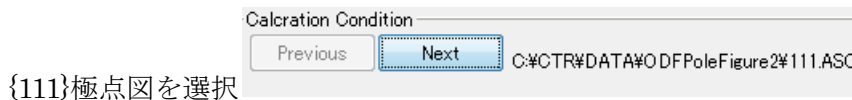
0 : 多項式次数の自動決定      Tenckhoff 式に Fitting



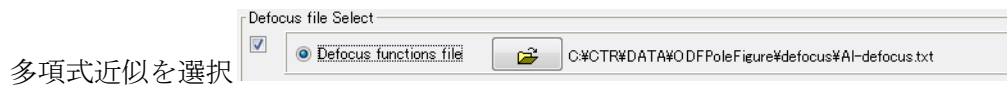
受光スリット幅変更で defocus 曲線再計算用 TABLE (TABLE に 2  $\theta$  角度が含まれている)



受光スリット幅を変更して新しい defocus 曲線を用いた場合、NEWDEF ホルダに新しい補正曲線が作成されている。この新しい補正曲線をマージするには、AddDefocusFile ソフトウェアを利用すれば可能



{111}極点図を選択

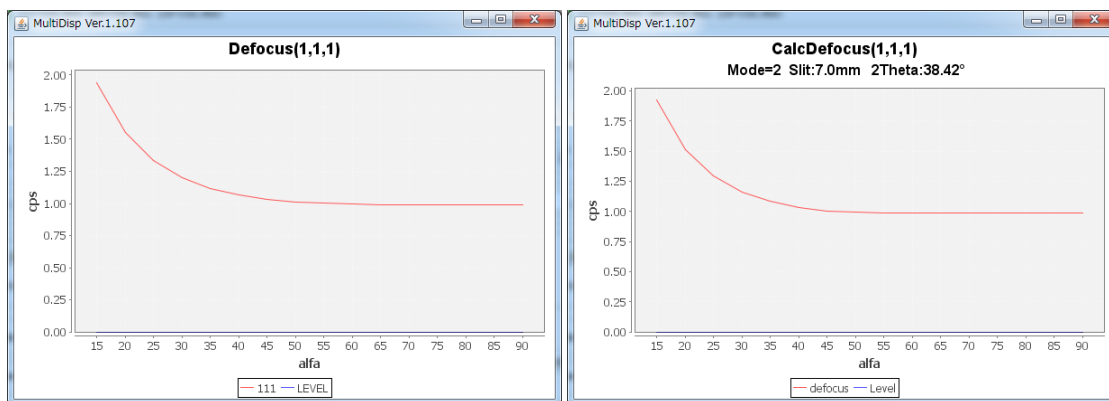


多項式近似を選択

と



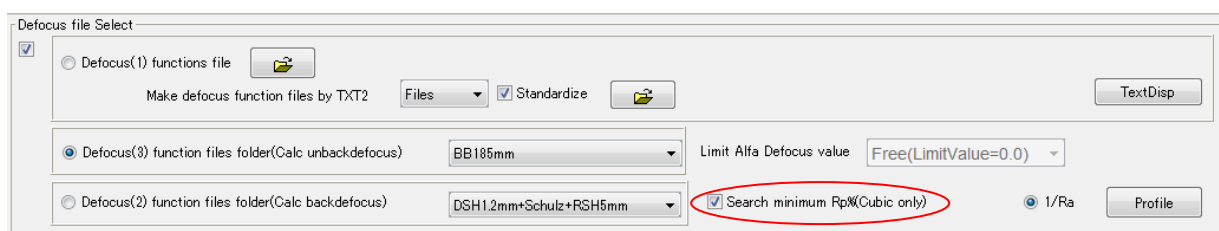
を比較



ほぼ同一の補正曲線が得られる。測定  $2\theta$  が高角度になれば、補正量が少なくなる。

多項式曲線にうねりが発生する場合、TenckhoffFitting で整形

R p %最適化による d e f c u s 補正



R p %は、ODF解析時、入力極点図と再計算極点図の差から計算される評価値で、入力極点図の整合性が評価されます。

本、ソフトウェアではC u b i c材料に対し、疑似的にODF解析を行い、最適なd e f o c u s補正を試みます。

#### 7. 7. 1 TXT2ファイル指定によるd e f o c u sファイル作成

d e f o c u s曲線を作成する場合、ファイル名の先頭に指数を付けたファイルを作成する。S c h u l z n反射法では、d e f o c u s曲線は予測出来るが、2次元ディテクタを用いた場合、材料を傾けると、同じ $2\theta$ 角度でもd e f o c u sプロファイルが変化する。同一 $2\theta$ 角度を用いたファイル名は、111-,222-,333-として分けする。又、ファイル内に登録する指数もファイル名と同じように指数を変える。



アドレス D) C:\CTR#DATA#2D-random

名前	サイズ	種類	更新日時
110-10Zcut.asc	74 KB	RINT2000アスキー	2012/05/24 15:27
200-10Zcut.asc	60 KB	RINT2000アスキー	2012/05/24 15:27
211-10Zcut.asc	53 KB	RINT2000アスキー	2012/05/24 15:27
220-50Zcut.asc	98 KB	RINT2000アスキー	2012/05/24 15:27
400-50Zcut.asc	70 KB	RINT2000アスキー	2012/05/24 15:27
422-50Zcut.asc	58 KB	RINT2000アスキー	2012/05/24 15:27

このデータは、ファイル名指数とファイルに登録されている指数が異なるため、ファイル内の指数を書き換える。

111-10zcut.asc,220-50zcut.asc

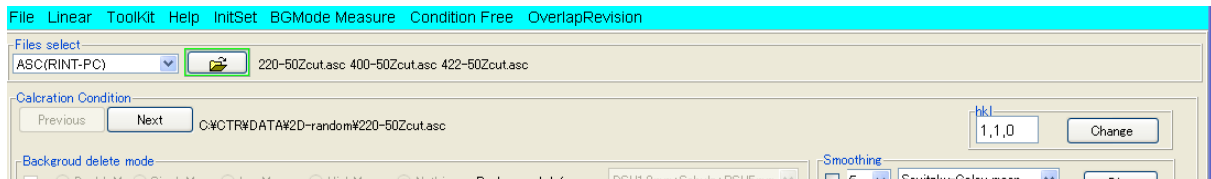
200-10zcut.asc,400-50zcut.asc

211-10zcut.asc,422-50zcut.asc

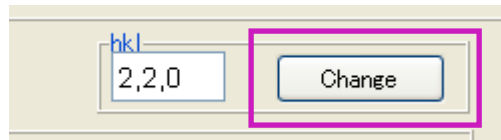
このファイルに登録されている指数が同じになっているため、以下の操作で

ファイル名の指数とファイルに登録されている指数を同じにしてASCファイルを作成する。

220-50zcut.asc ファイルのファイル内は 1,1,0 が登録されているので

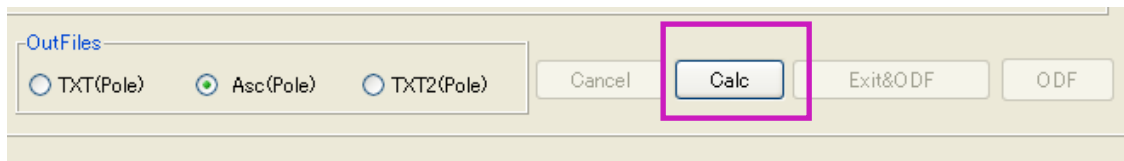


指数を 2,2,0 に変更して Change する。



400-50zcut.asc,422-50zcut.asc も同様に変更する。

変更したら、データ処理は一切行わないで Asc ファイル作成する。



110-10Zcut.asc	74 KB	RINT2000アスキー	2012/05/24 15:27
200-10Zcut.asc	60 KB	RINT2000アスキー	2012/05/24 15:27
211-10Zcut.asc	53 KB	RINT2000アスキー	2012/05/24 15:27
220-50Zcut.asc	98 KB	RINT2000アスキー	2012/05/24 15:27
400-50Zcut.asc	70 KB	RINT2000アスキー	2012/05/24 15:27
422-50Zcut.asc	58 KB	RINT2000アスキー	2012/05/24 15:27
220-50Zcut_ch.asc	129 KB	RINT2000アスキー	2013/04/18 14:20
400-50Zcut_ch.asc	88 KB	RINT2000アスキー	2013/04/18 14:20
422-50Zcut_ch.asc	85 KB	RINT2000アスキー	2013/04/18 14:20

### 変更されたA s c ファイル

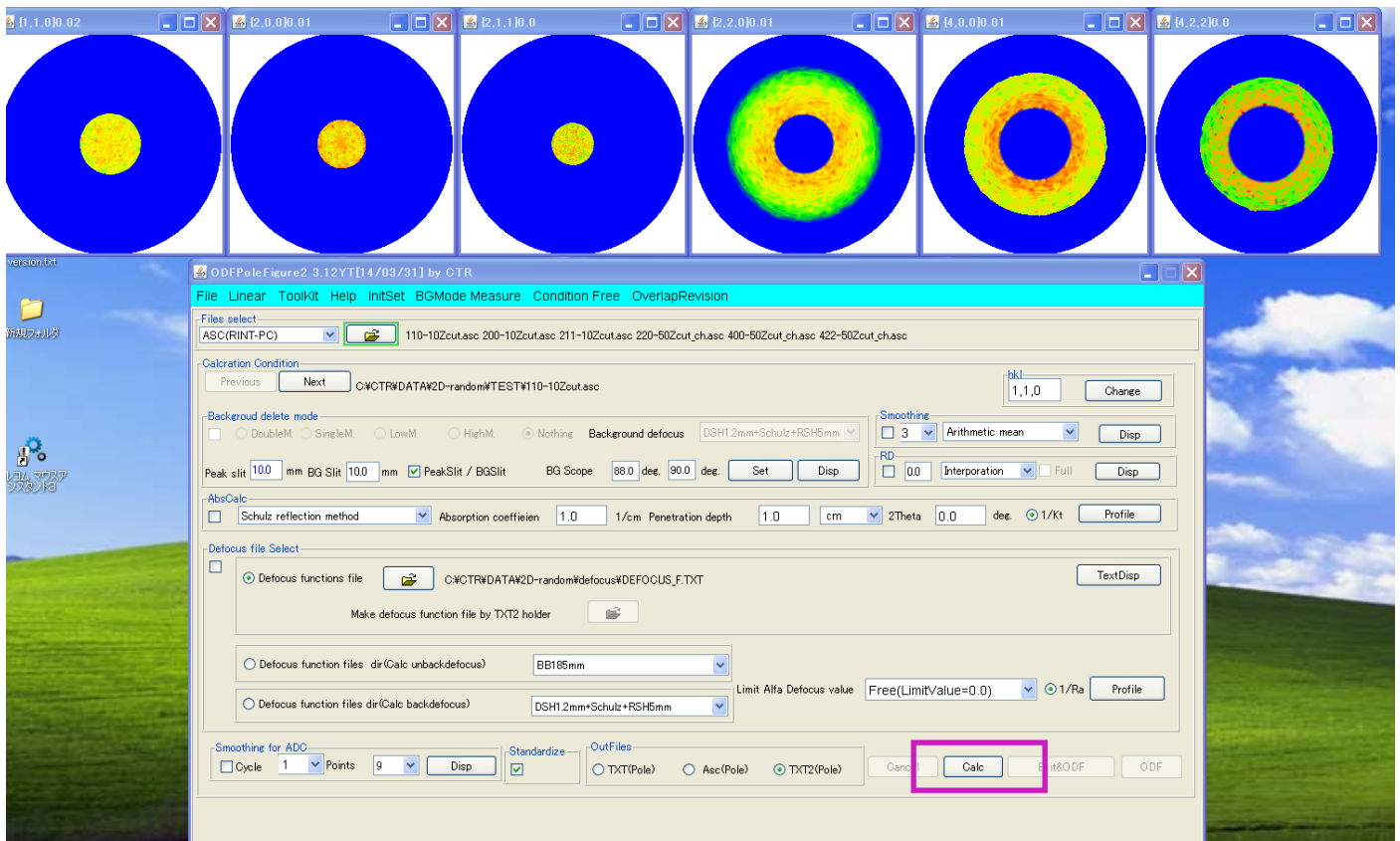
ファイル名のファイル内に登録された指数が同じになったので、

110-10Zcut.asc	74 KB	RINT2000アスキー	2012/05/24 15:27
200-10Zcut.asc	60 KB	RINT2000アスキー	2012/05/24 15:27
211-10Zcut.asc	53 KB	RINT2000アスキー	2012/05/24 15:27
220-50Zcut.asc	98 KB	RINT2000アスキー	2012/05/24 15:27
400-50Zcut.asc	70 KB	RINT2000アスキー	2012/05/24 15:27
422-50Zcut.asc	58 KB	RINT2000アスキー	2012/05/24 15:27
220-50Zcut_ch.asc	129 KB	RINT2000アスキー	2013/04/18 14:20
400-50Zcut_ch.asc	88 KB	RINT2000アスキー	2013/04/18 14:20
422-50Zcut_ch.asc	85 KB	RINT2000アスキー	2013/04/18 14:20

defocusの動作確認の為、TEXTホルダを作成し、ファイル名指数と登録指数が同じファイルをTESTホルダにコピーする。

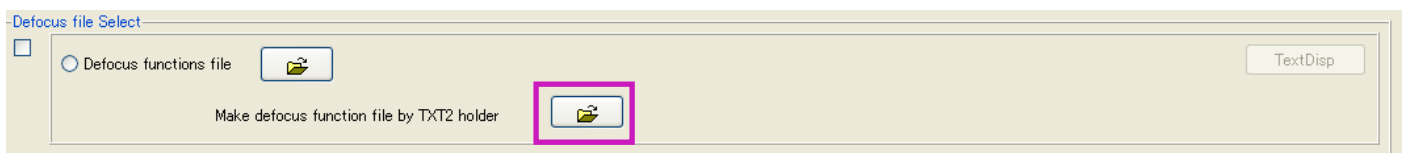
C:\CTR#DATA#2D-random#TEST				
	名前	サイズ	種類	更新日時
	110-10Zcut.asc	74 KB	RINT2000アスキー	2012/05/24 15:27
	200-10Zcut.asc	60 KB	RINT2000アスキー	2012/05/24 15:27
	211-10Zcut.asc	53 KB	RINT2000アスキー	2012/05/24 15:27
	220-50Zcut_ch.asc	129 KB	RINT2000アスキー	2013/04/18 14:20
	400-50Zcut_ch.asc	88 KB	RINT2000アスキー	2013/04/18 14:20
	422-50Zcut_ch.asc	85 KB	RINT2000アスキー	2013/04/18 14:20

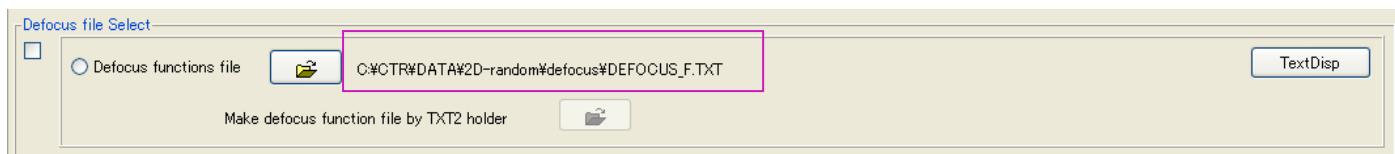
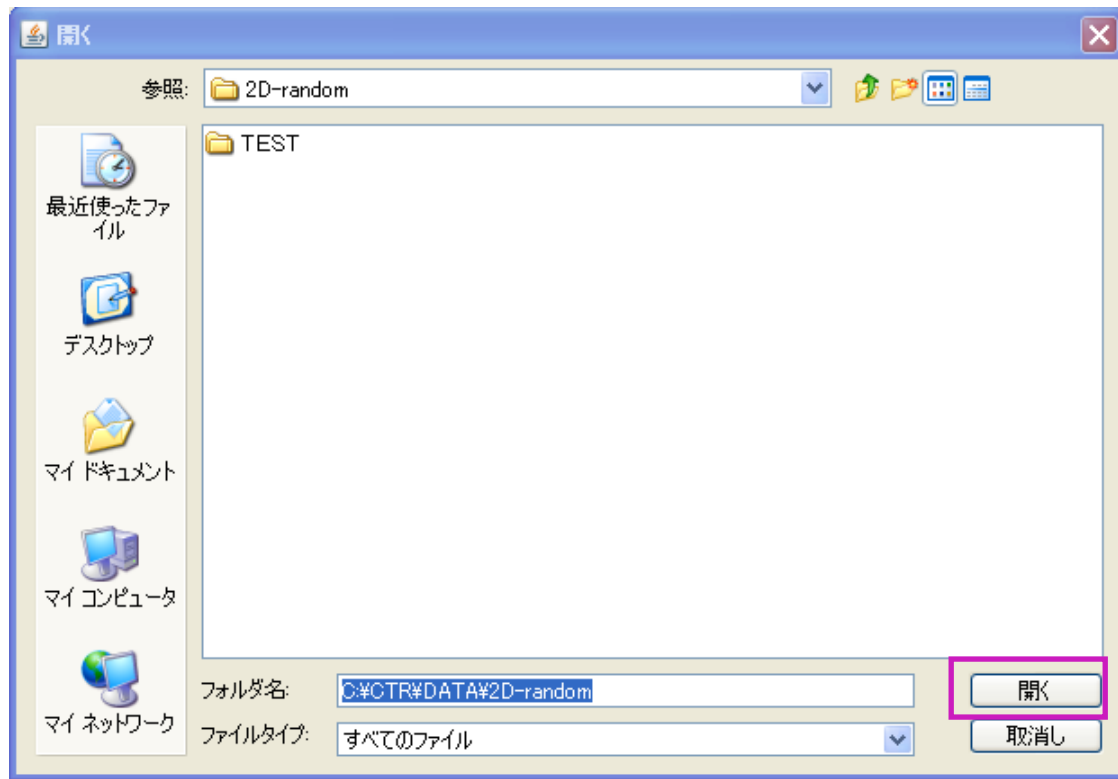
TEXT2ファイルを作成する。(TESTホルダの上のホルダを指定)



defocus補正を行わないで、CalcでTXT2ファイルを作成  
関係のないTXT2ファイルが同一ホルダに存在しないようにして下さい。

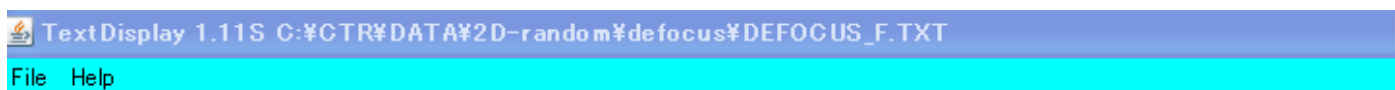
Defocus functions fileが表示されている場合、非選択で表示をなくす。  
DefocusTXT2 Holderで作成したTXT2ホルダを指定





多項式近似式ファイルが表示される。

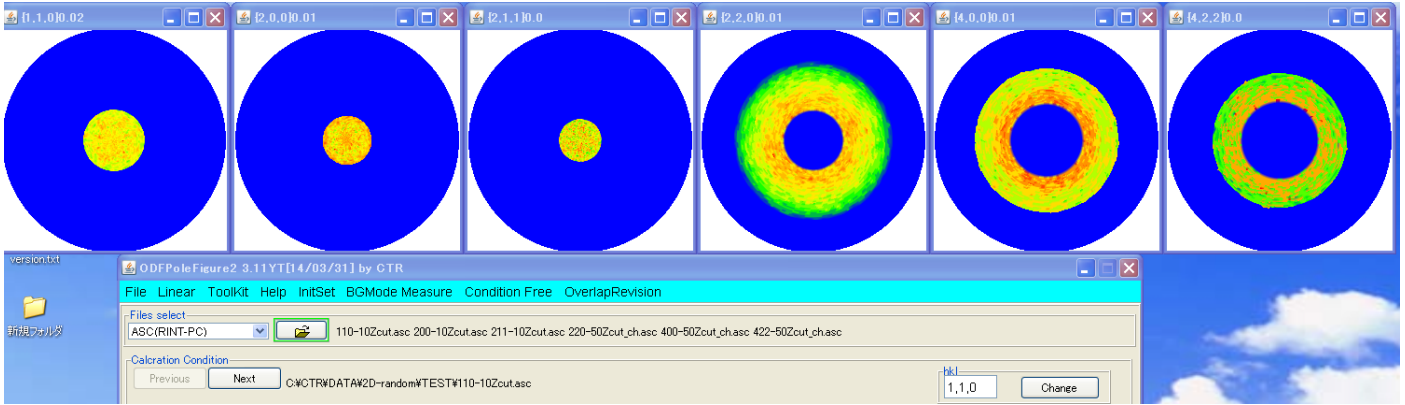
TextDisp で



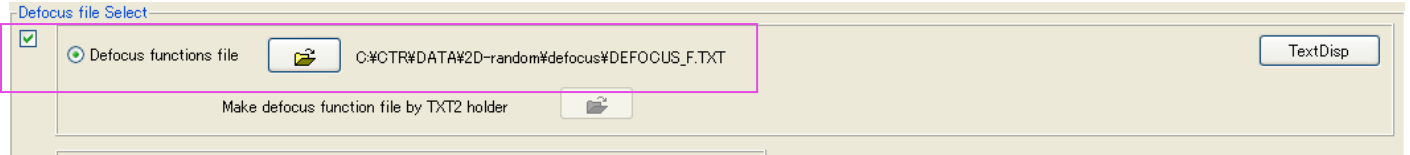
```
filename,alfanumber,alfastartangle,alfastep,function-n,mm, 13/04/18 3.10 for DefocusCalc,  
110-10Zcut_chS_2.TXT,31,0.0,1.0,5,1.0,1.0040661619731068,0.003442768673125065,-0.003036413474887437  
200-10Zcut_chS_2.TXT,25,0.0,1.0,5,1.0,1.006157539262177,0.0019599331210058257,-0.001782656111757175  
211-10Zcut_chS_2.TXT,22,0.0,1.0,5,1.0,1.0024814354941622,-0.01732047204549961,0.006801914717419526,-  
220-50Zcut_ch_chS_2.TXT,41,30.0,1.0,5,1.0,2.1655659983420623,-0.19978133466348624,0.011862841623337:  
400-50Zcut_ch_chS_2.TXT,29,36.0,1.0,5,1.0,115.26874426146864,-12.950983920527575,0.5764885049590572  
422-50Zcut_ch_chS_2.TXT,24,38.0,1.0,5,1.0,117.4372704492457,-12.2973794634932,0.5148113663300319,-0.0
```

以上で、TXT2 から defocus 近似式を作成出来た。

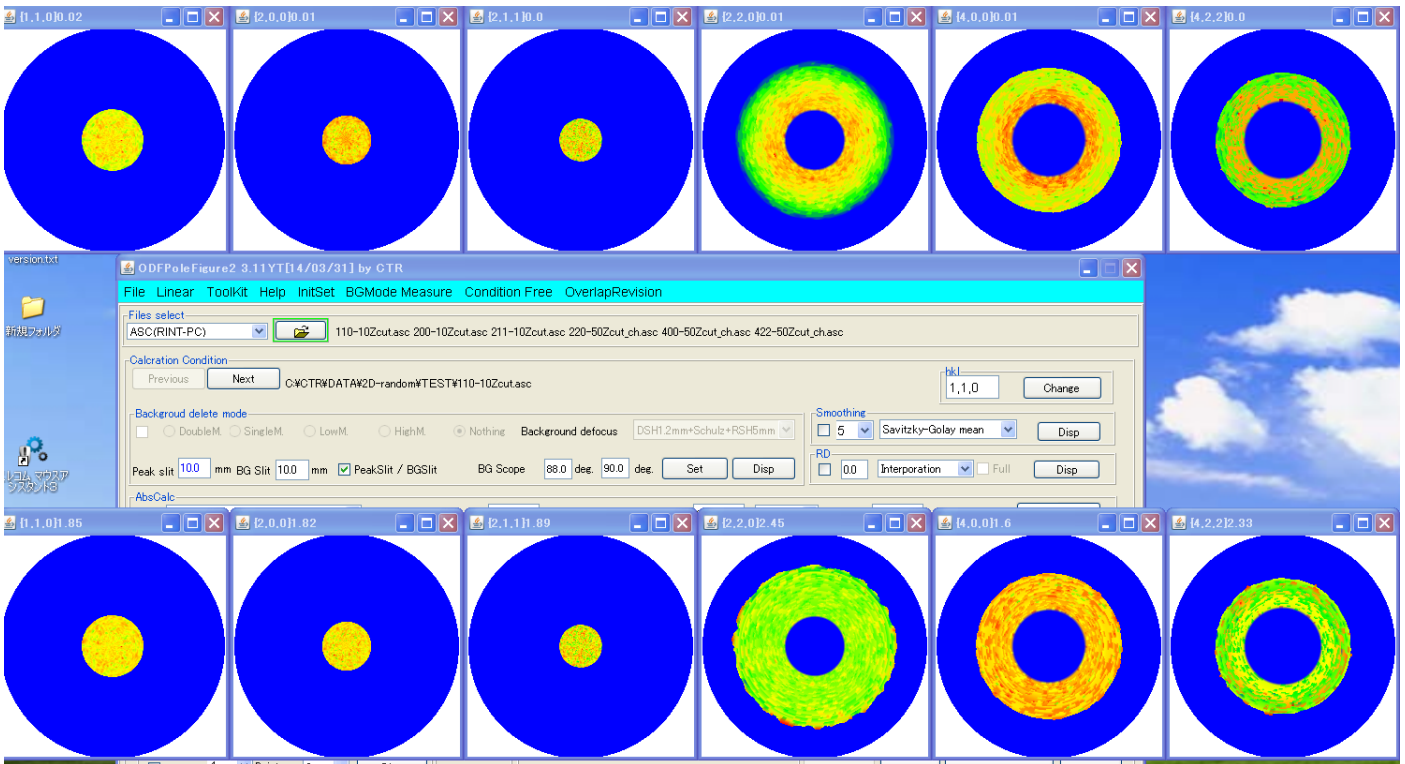
確認の為、先ほど作成した TEXT データを補正してみます。



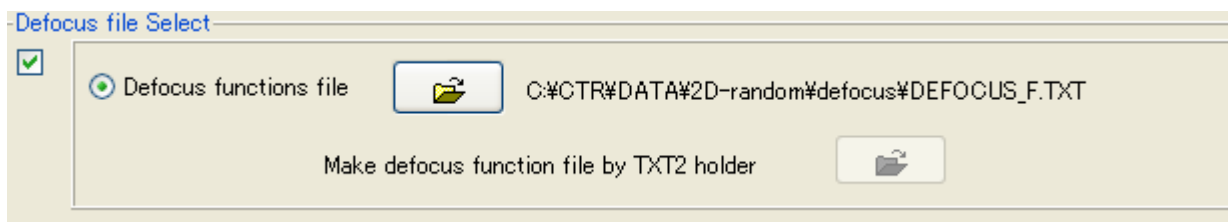
defocus補正を



でcalcしてみると



ほぼフラットになる事が確認できます。



以降、

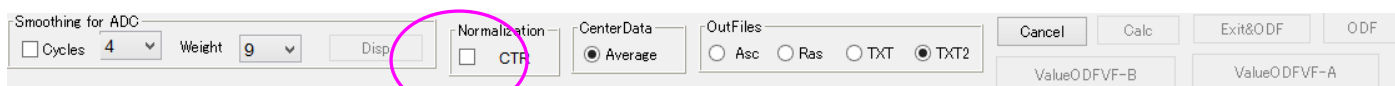
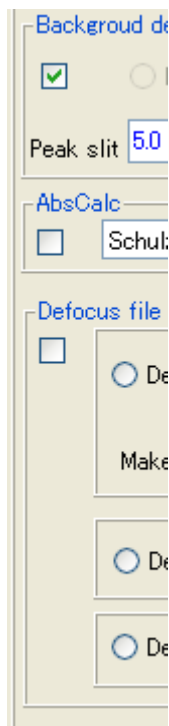
の

表示があれば、そのままdefocus補正出来ます。

表示されていない場合、計算された DEFOCUS\_F.TXT を直接指定する。

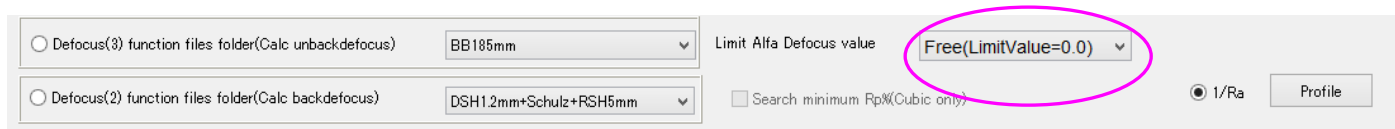
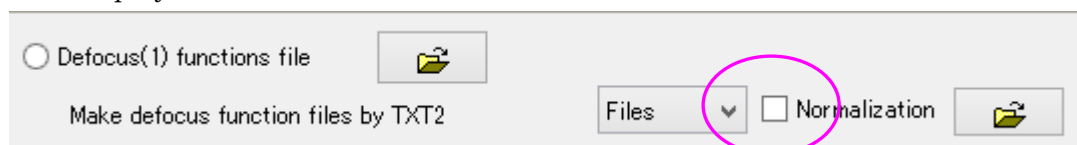
### 7. 7. 2 random試料との強度比較を行う場合

極点図間の相対強度を計算する場合、defocusデータは強度の規格は行わない  
TXT2を作成する時も、バックグラウンド除去のみを行い、疑似規格化は行わない



defocusファイル作成時も疑似規格化は行わない。(通常の場合を行う)

defocus補正を行わないで疑似規格化の場合、内部計算規格化値(cps)で表示  
(PoleDisplayTXT2のVersion 1.311以降で対応)



疑似規格化を行わないdefocus曲線に対し、極点図の範囲制限機構は動作させないで下さい  
(0.0とする)

### 7. 7. 3 登録 defocus 曲線を変更する

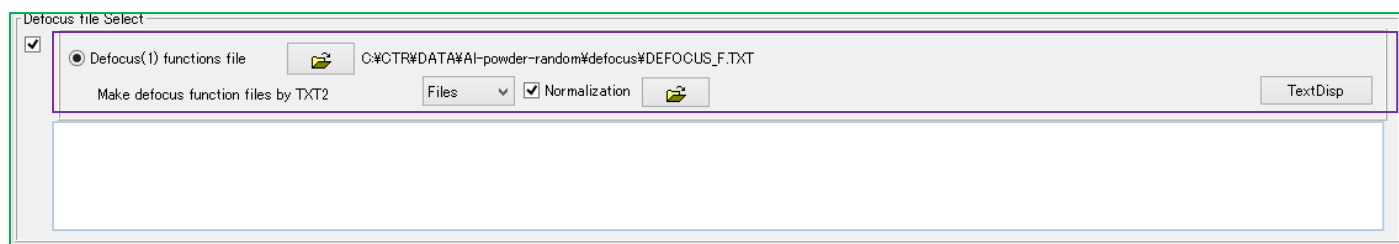
Slit幅を変更すると、補正曲線を変更する事が出来ます。

通常は測定スリット幅が表示されています。

Peak slit  mm BG Slit  mm  PeakSlit / BGSlit

変更は、PeakSlit 幅と BGSlit 幅を同じ値に変更してください。

表示スリット幅より小さくすると、補正量が大きくなり、大きくすると、補正量が小さくなります。



内部 TABLE から計算されます。

T e n c k o f f の計算式を使った計算が行われます。

#### 7. 7. 4 透過法 d e f o c u s の対応

r a n d o m 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 T X T 2 を作成し、d e f o c u s 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 d e f o c u s 曲線の指数の後に”T”を追加し、s a v e 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,-(  
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 d e f o c u s 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 T X T 2 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 d e f o c u s 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 d e f o c u s ファイルが見つからない場合、計算は行われません。

#### 7. 8 規格化

極点図の重み付き平均値で規格化を行う。 R I N Tと同じ

更に、極点図の中心と外側の重みを1/2とする方法がある。(CTR)

R I N Tと同じ計算にするには、”C:\¥CTR¥work¥stdNORM¥stdNORM.txt”ファイルを作成して”RINT”と書きこむ

規格化の方法は以下の3方法があります。

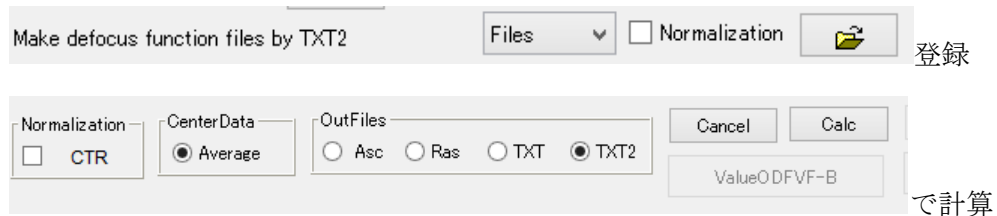
内部計算規格化、 r a n d o m規格化 (強度比)、 r a n d o m規格化+疑似規格化

内部計算規格化

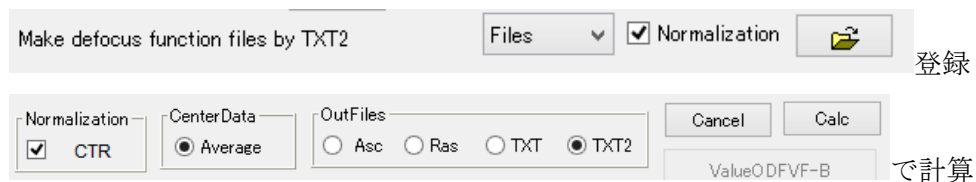
d e f o c u s 指定なし、Standardize ON

Random 規格化 (強度比)

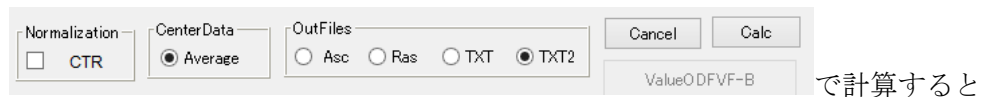
Defocus データをバックグラウンド削除、Standardize OFF でTXT2 作成し



r a n d o m規格化 (双方の規格化)



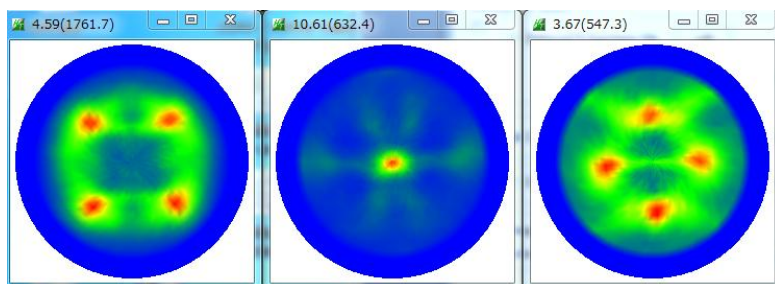
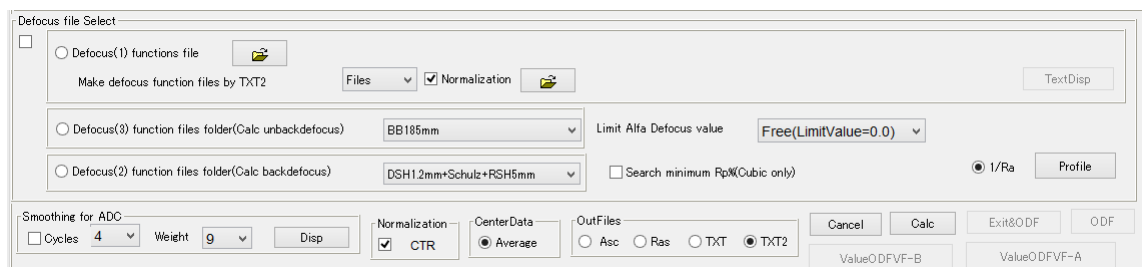
内部計算規格化で



極点図の中心を平均値とした最大強度を表示します

#### 7. 8. 1 内部計算規格化強度の計算

d e f o c u s 補正を行わないで疑似規格化を行うと内部計算規格化を行い規格化平均強度を表示します。



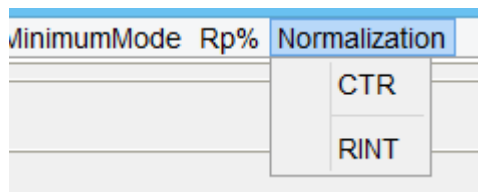
内部規格化の場合、指数なしで、規格化強度と内部計算規格化平均強度(cps 単位)を表示

PoleDisplayTXT2.jar ソフトウェアで実現している。10

#### 7. 8. 2 規格化モードの切り替え



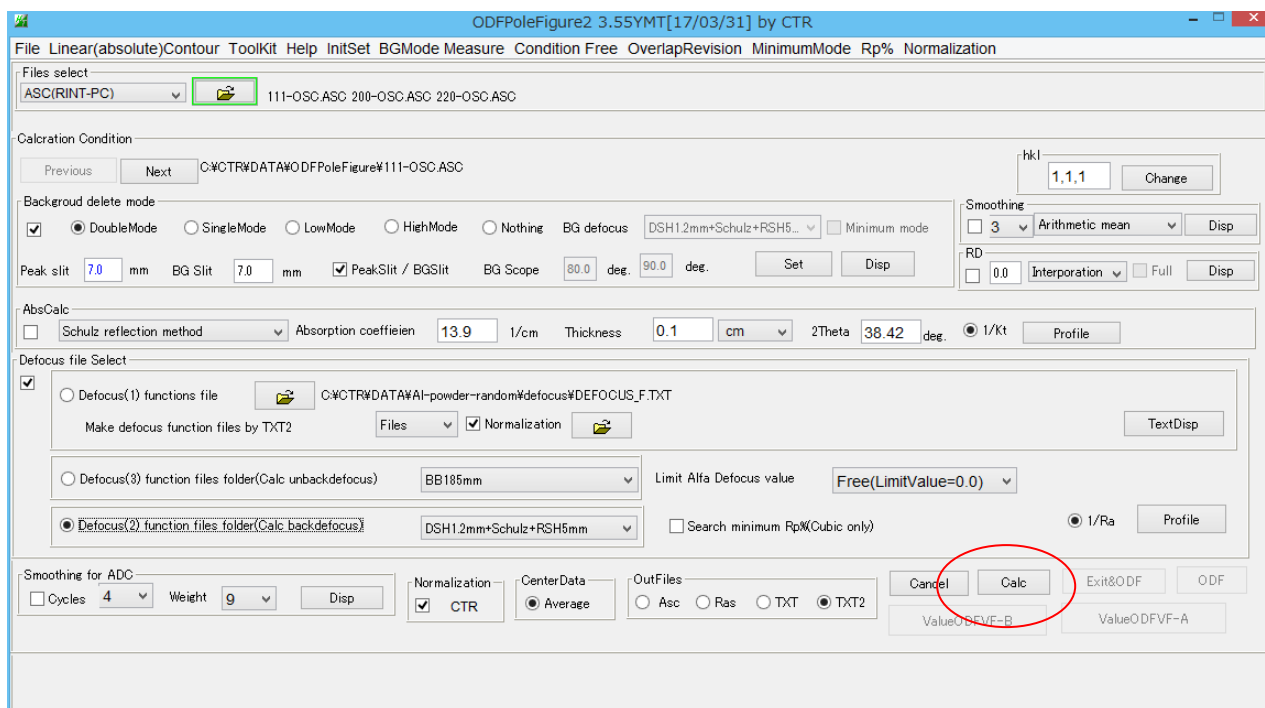
規格化の計算方法は各種存在します。



CTRは、ODF解析ソフトウェアで内部規格化される値に近い規格化  
RINTはリガク正極点ソフトウェアと同一の計算方法

通常はCTRが適当と思われます。

## 7. 9一括データ処理を行う。

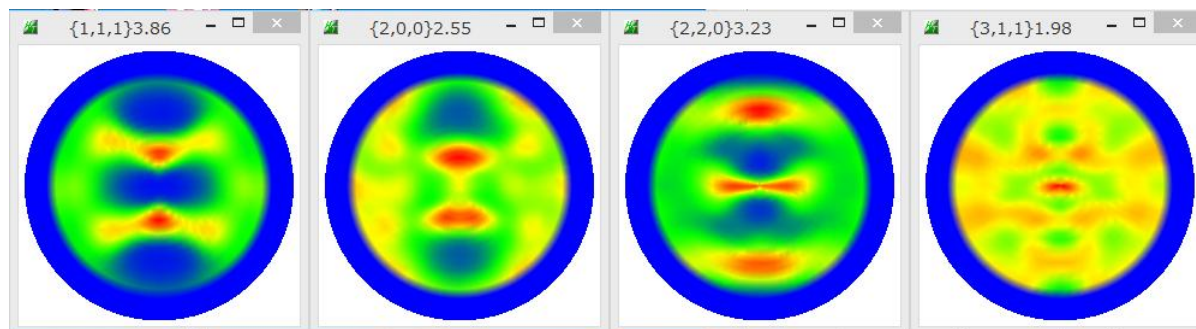
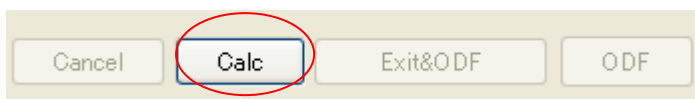


バックグラウンドは、{200}のみ、 $\alpha$  軸 40 度から 55 度でバックグラウンドを計算

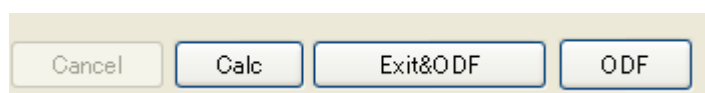
平滑化は移動平均 3 点

Defocus は計算による方法を選択

強度の疑似規格化を行い



処理結果を描画、強度が規格化極密度に変わり



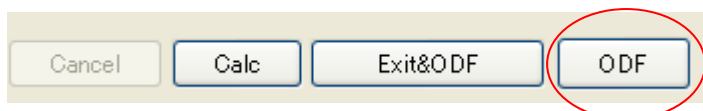
ODFFile ボタンが押せる状態に変化



一方測定データのディレクトリを覗くと

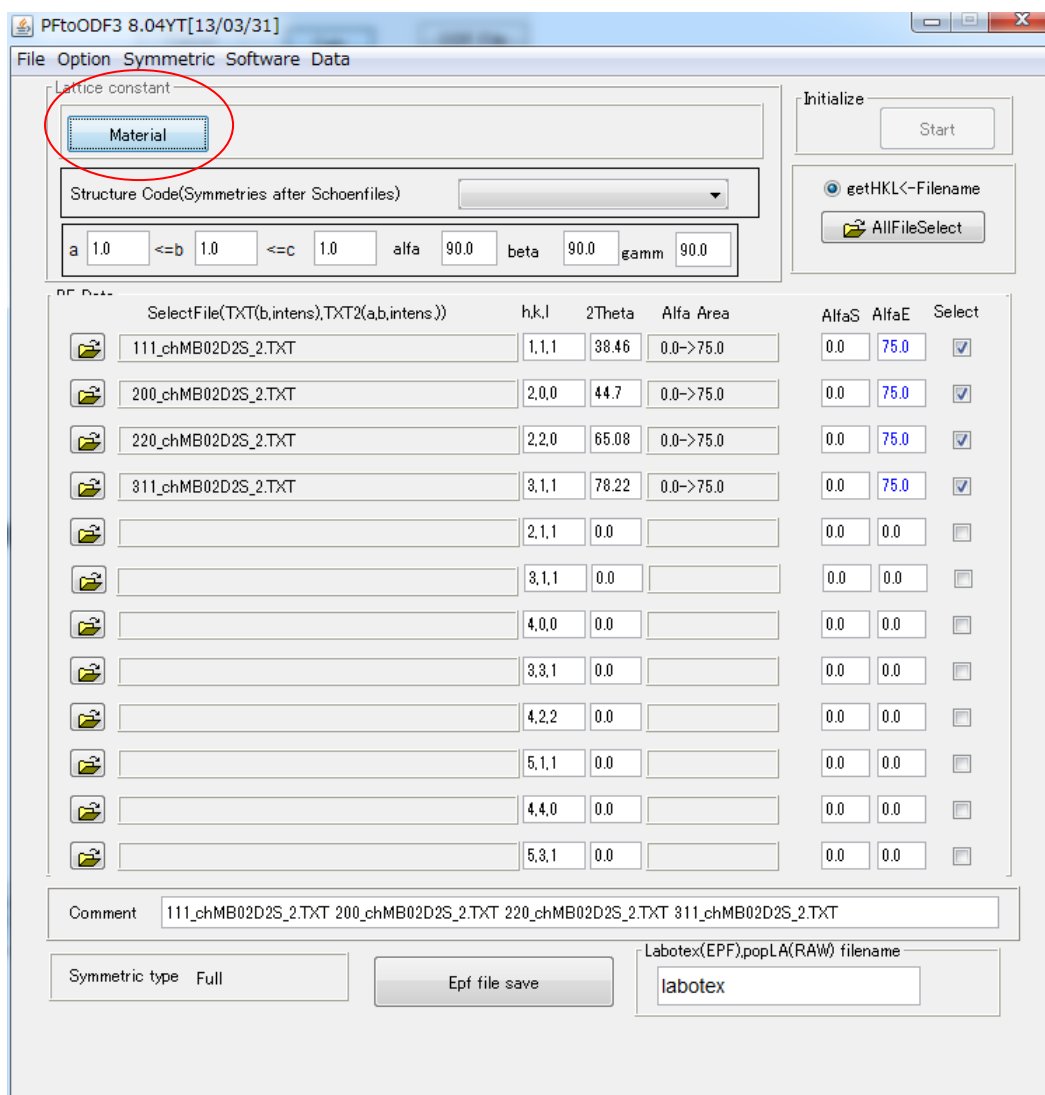
200.ASC	2012/07/25 10:15	ASC ファイル	22 KB
220.ASC	2012/07/25 10:15	ASC ファイル	22 KB
311.ASC	2012/07/25 10:15	ASC ファイル	22 KB
111.ASC	2012/07/25 10:15	ASC ファイル	22 KB
111_chMB02D2S_2	2012/09/19 18:27	テキスト文書	22 KB
200_chMB02D2S_2	2012/09/19 18:27	テキスト文書	22 KB
220_chMB02D2S_2	2012/09/19 18:27	テキスト文書	22 KB
311_chMB02D2S_2	2012/09/19 18:27	テキスト文書	22 KB

処理結果の \_ch 以降の英数字はデータ処理の内容を表示しています。



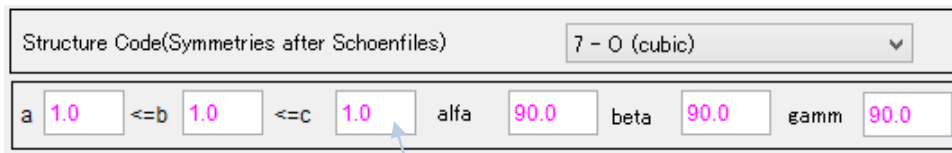
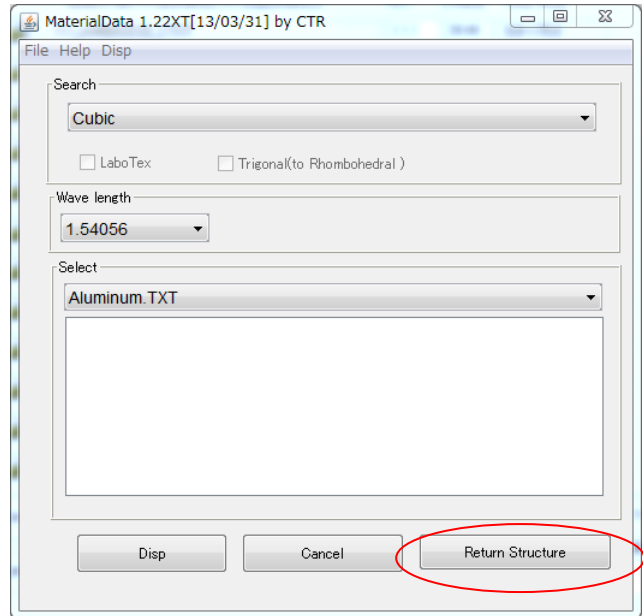
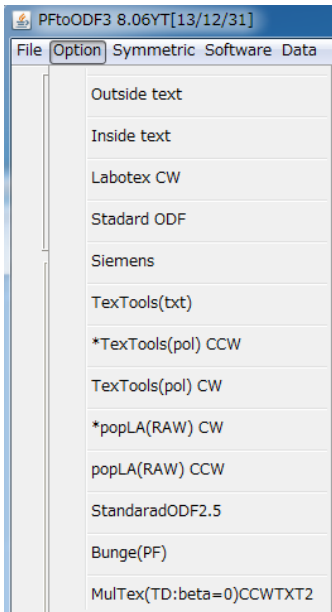
ODFFile を押すと P F t o O D F 3 にデータを

引き継ぐ

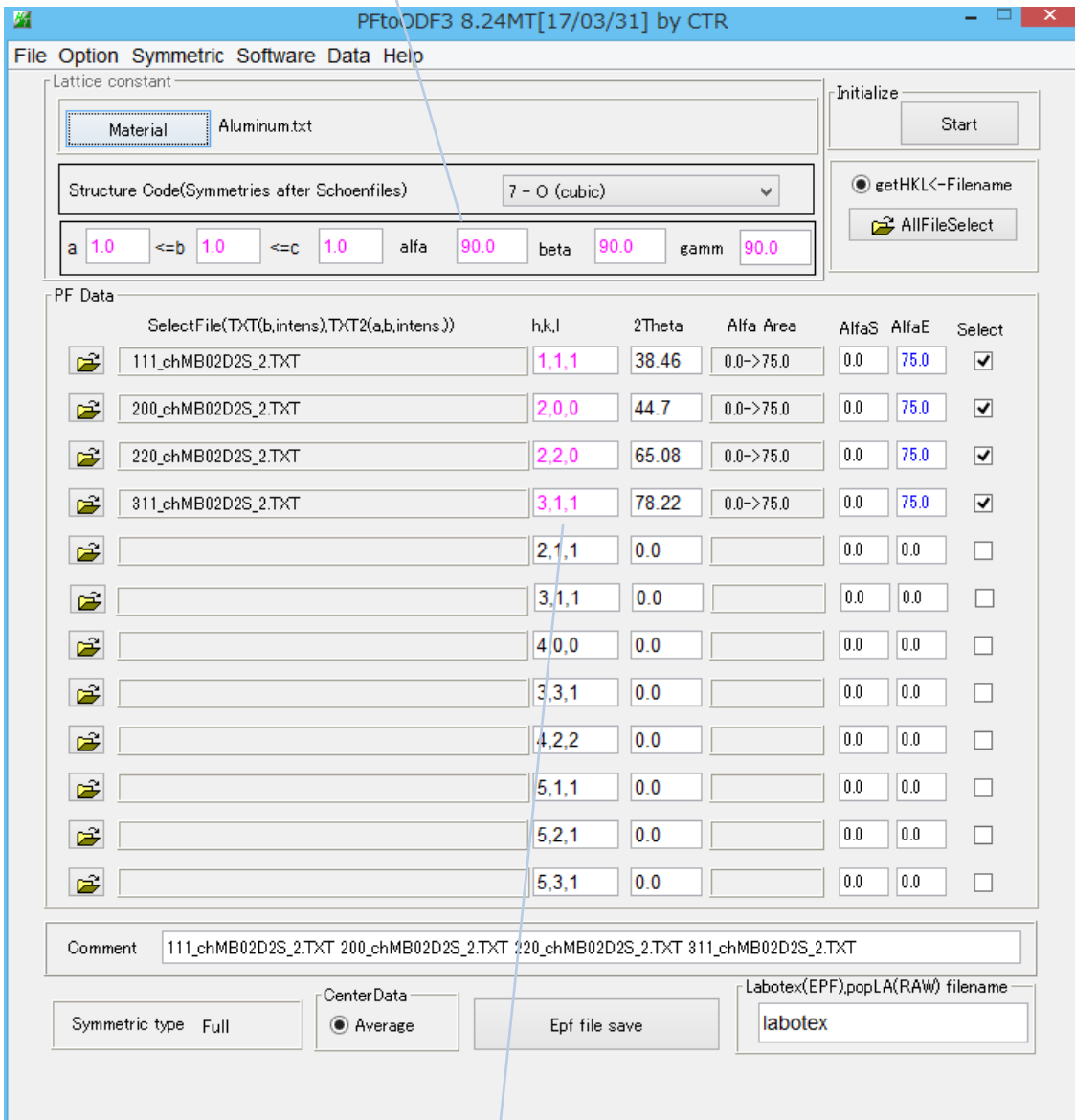






Option から ODF を選択

Material から材料選択



LaboTexのパラメータを取得



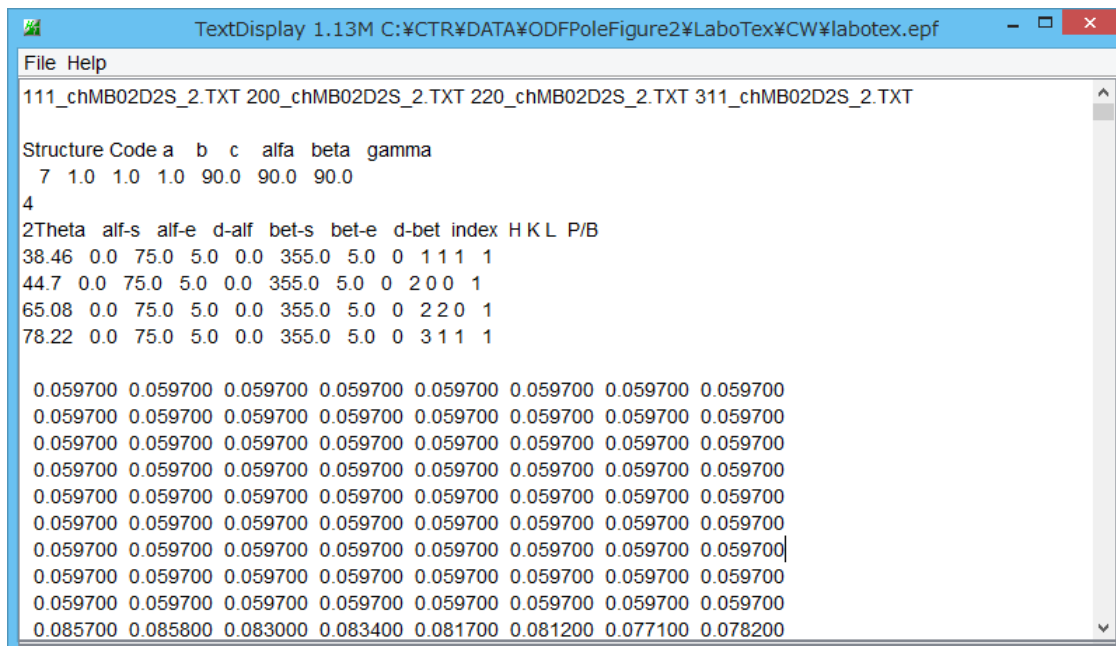
SelectFile(TXT(b,intens),TXT2(a,b,intens))	h,k,l	2Theta	Alfa Area	AlfaS	AlfaE	Select
 111_chMB02D2S_2.TXT	1,1,1	38.46	0.0->75.0	0.0	75.0	<input checked="" type="checkbox"/>
 200_chMB02D2S_2.TXT	2,0,0	44.7	0.0->75.0	0.0	75.0	<input checked="" type="checkbox"/>
 220_chMB02D2S_2.TXT	2,2,0	65.08	0.0->75.0	0.0	75.0	<input checked="" type="checkbox"/>
 311_chMB02D2S_2.TXT	3,1,1	78.22	0.0->75.0	0.0	75.0	<input checked="" type="checkbox"/>

極点図の指数チェックを行い、正常であることを表す。



ファイル名を入力して Epffilesave を行えば、ODF 向けファイルが作成できる。

作成されたファイルを表示

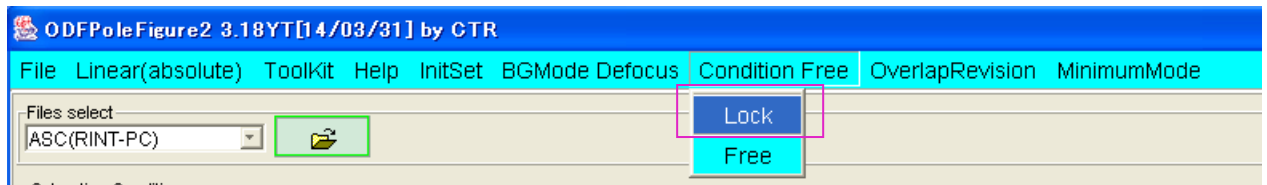


ODF 別のディレクトリの下にファイルが作成される。

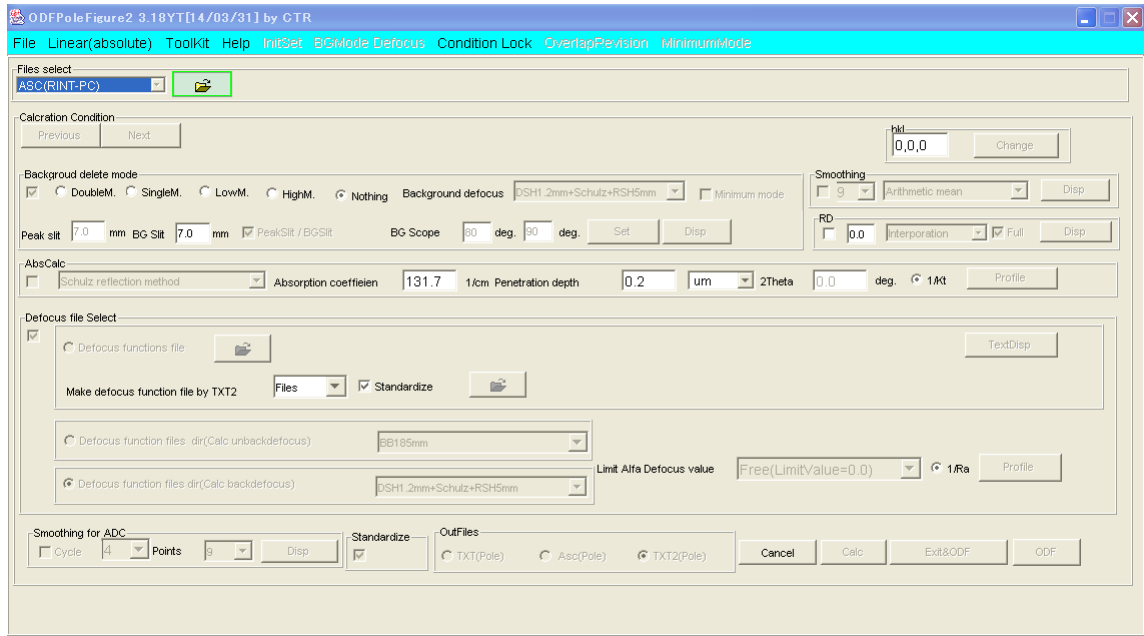
File Name	Date/Time	Type	Size
LaboTex	2012/09/19 18:45	ファイル フォル...	
200.ASC	2012/07/25 10:15	ASC ファイル	22 KB
220.ASC	2012/07/25 10:15	ASC ファイル	22 KB
311.ASC	2012/07/25 10:15	ASC ファイル	22 KB
111.ASC	2012/07/25 10:15	ASC ファイル	22 KB
111_chMB02D2S_2	2012/09/19 18:27	テキスト文書	22 KB
200_chMB02D2S_2	2012/09/19 18:27	テキスト文書	22 KB
220_chMB02D2S_2	2012/09/19 18:27	テキスト文書	22 KB
311_chMB02D2S_2	2012/09/19 18:27	テキスト文書	22 KB

## 7. 10 定型化処理の簡素化

日常、製品管理などの作業では、毎日同一処理条件でデータ処理を行うケースがある。  
このような場合、処理条件をLockする事が出来ます。



Lockを選択すると、



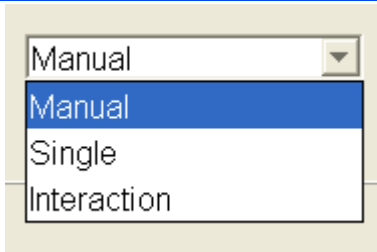
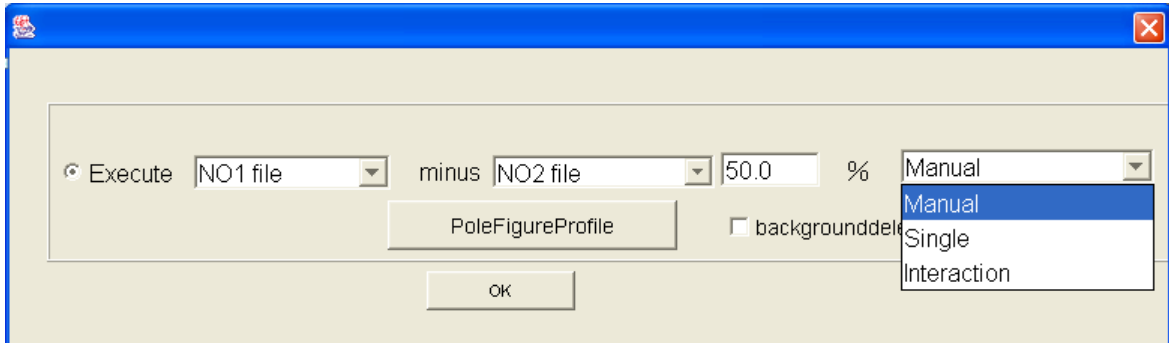
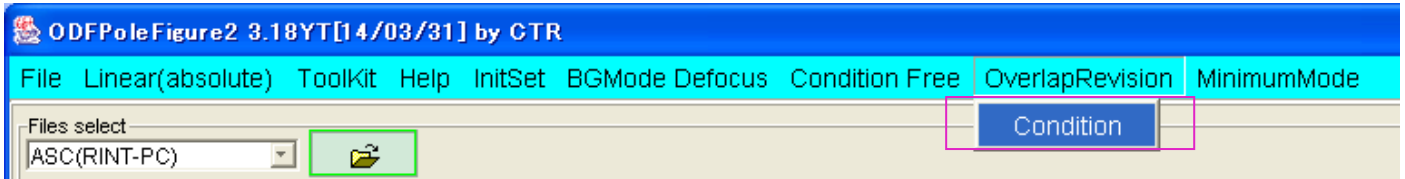
個々のデータに関するデータ以外変更出来ない設定になります。

### 7. 1 1 相互に重なりあう極点図の分離

高分子材料などでは、近接回折線の影響が極点図に現れる事があります。

このような場合、測定条件を変更して再測定しなければなりません、簡易的に一方の極点図から他方を差し引く方法と相互に差し引く方法を提供します。

極点図を分離する手段を提供します。(PoleFigureDifference ソフトウェアで TXT2 対応)



NO1file-No2filw\*%

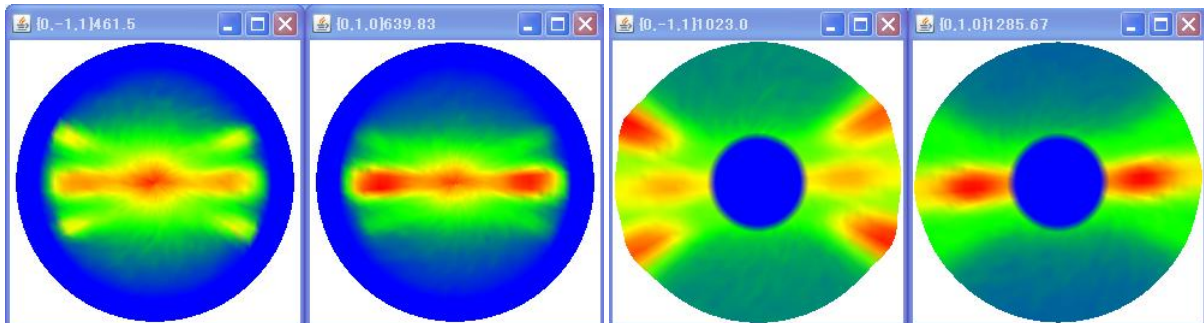
NO1file-NO2file の自動差し引き

相互に自動差し引き

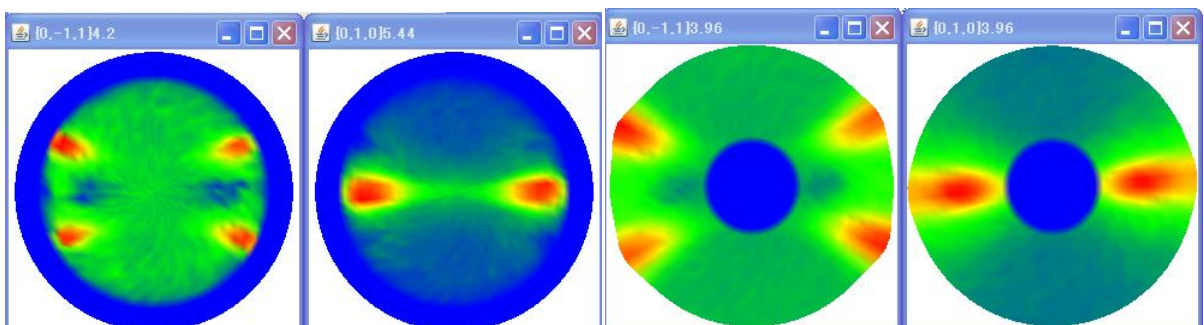
注意：相互に差し引く場合、極点図の最大極密度が極点図に現れている条件の元に動作します。

### PET の Interaction モードの実施例

測定データ

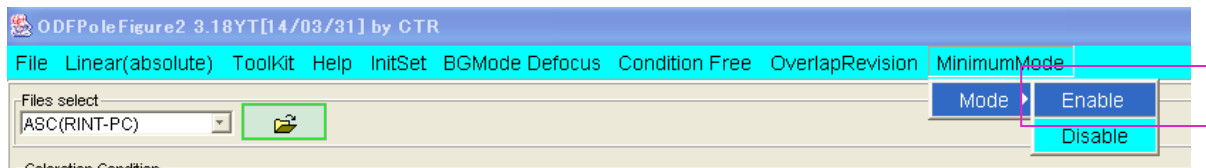


処理後

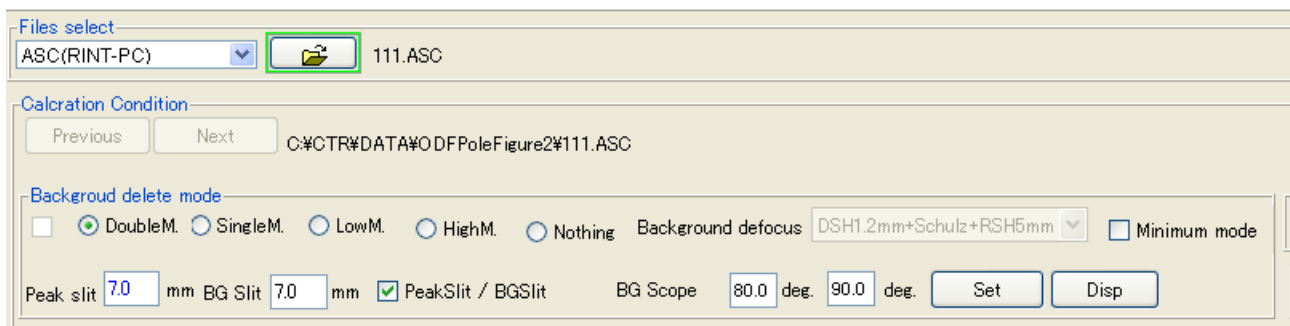
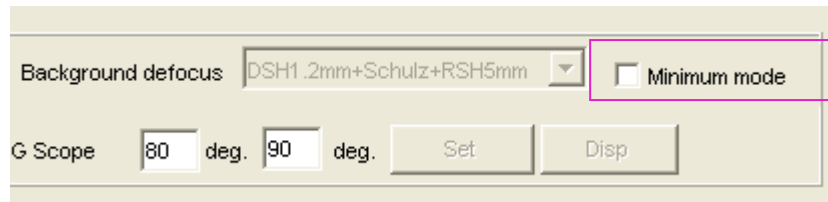


## 7. 1.2 強制バックグラウンド処理

反射法と透過法を接続する場合、バックグラウンドの影響で接続部分が不連続になる事がある。バックグラウンド処理を行った後、 $\beta$ プロファイルを一定の値シフトする事を狙い、各 $\alpha$ に対し、 $\beta$ プロファイルの最低値を0.0までシフトします。



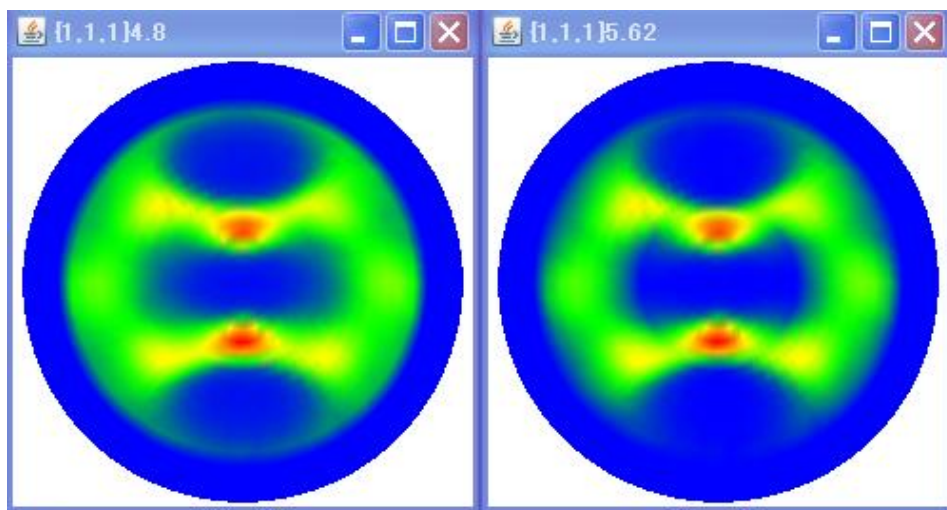
MinimumMode を Enable とする。



ファイルを指定して Minimum mode を S E T する。



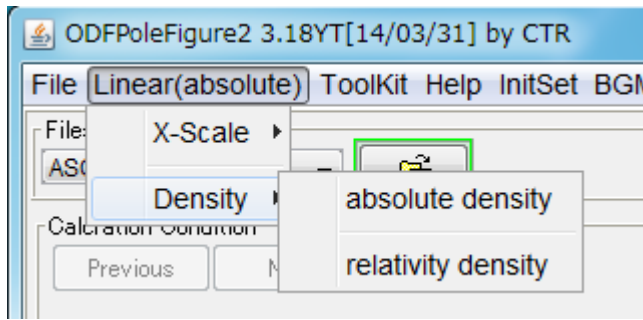
同一条件で、Minimum mode を指定すると、バックグラウンドレベルが低下した分、極密度がアップしています。





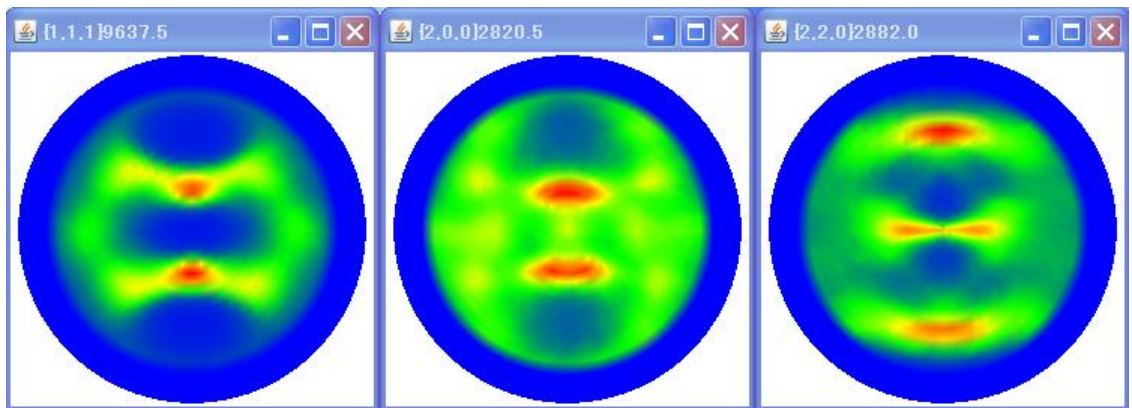
7. 1.3 同時に表示する極点図 Max 強度を絶対、相対の選択

通常、極点図の最大強度は、指数毎に最大強度を算出しているが、複数の極点図で最大強度を算出し、共通で最大強度で描画する事が出来ます。



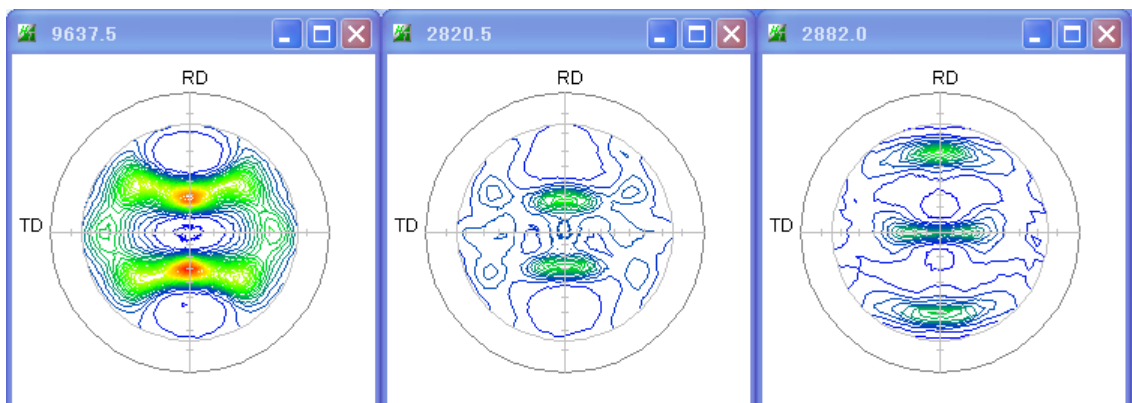
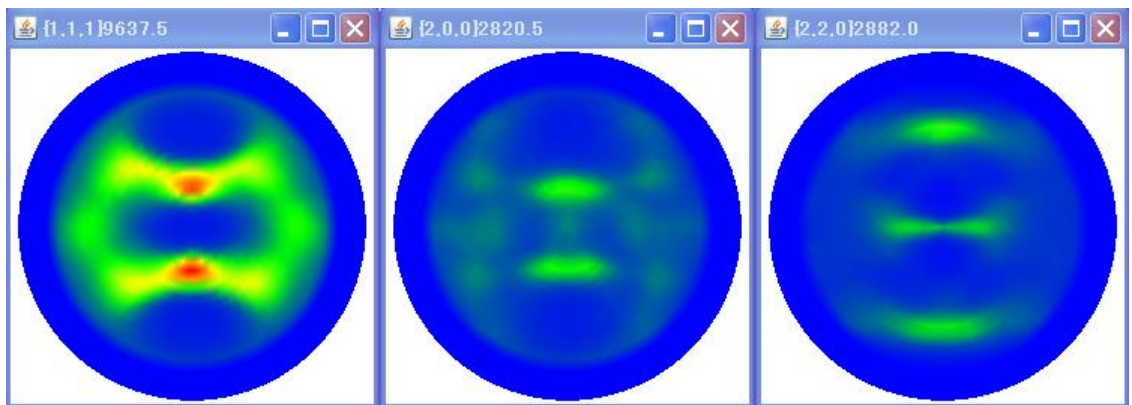
absolute density

モードで描画



relativity density

モードで描画



## 7. 14 作成されるファイル



A s c

入力A s c ファイルと同一のフォーマット、解析結果のファイルをホルダNEWに作成

M t e x A s c

上記A s c と同一であるが、 $\beta = 360$ 度データを含めない

R a s

リガク SmartLab 用フォーマット

T X T

リガク R I N T データのテキストフォーマット ( $\beta$ 、強度)

T X T 2

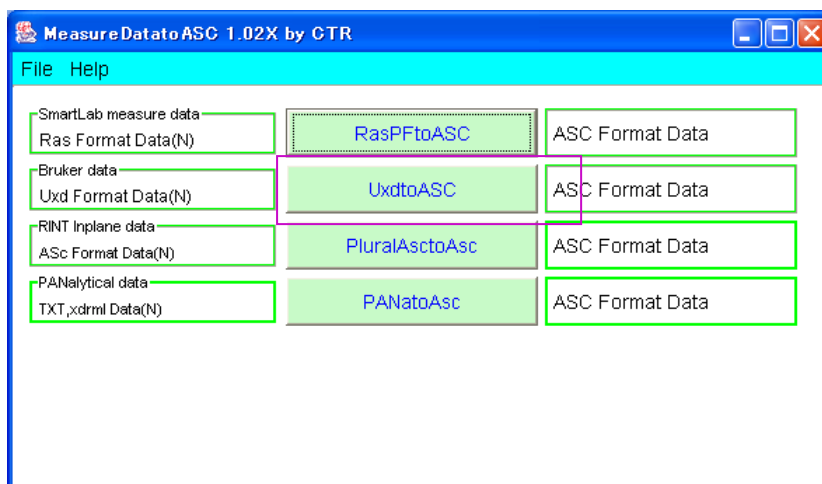
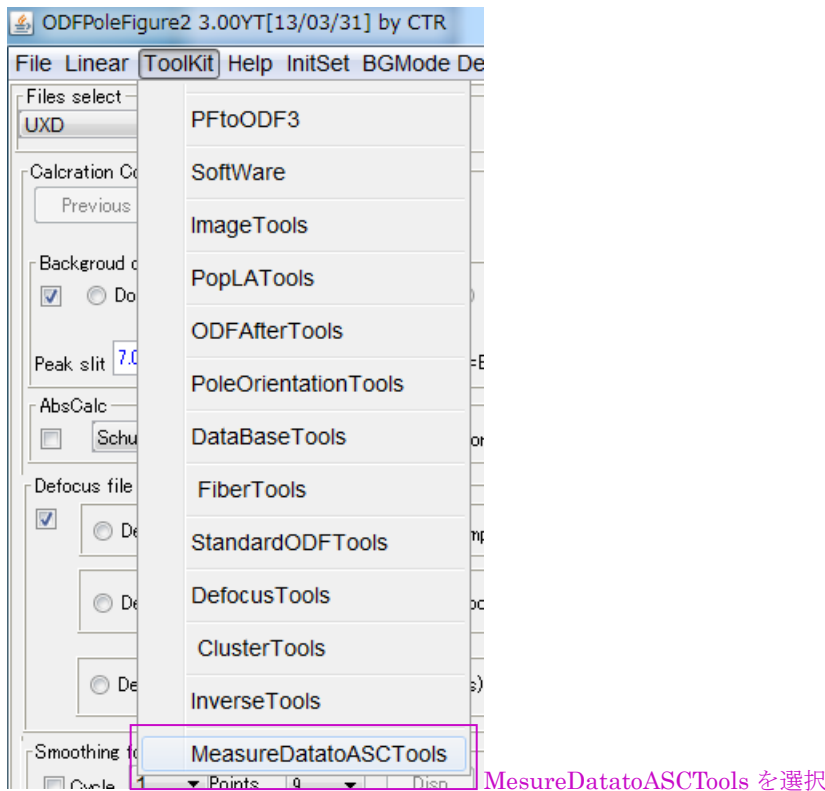
一般的なテキストデータフォーマット( $\alpha$ 、 $\beta$ 、強度)

作成されるファイル名は、処理結果が反映される

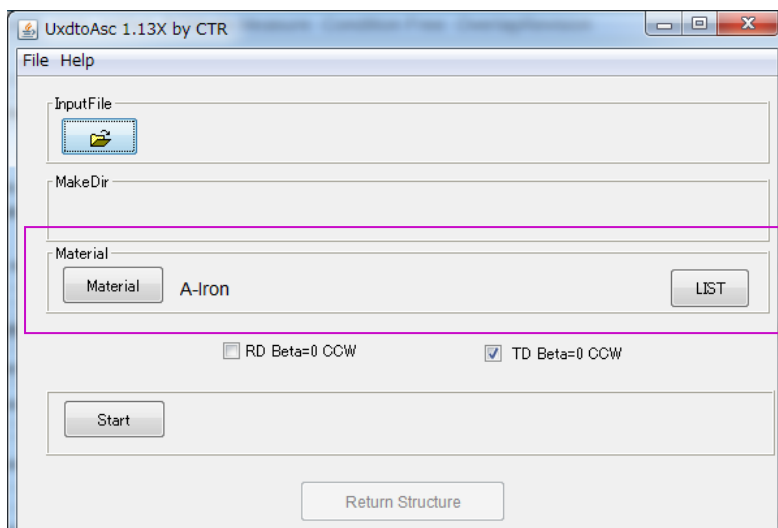


## 8. Bruker社データの読み込み

### 8.1 Uxdフォーマットの場合、予めUxdからASCフォーマットに変換する方法（F-2,F-3データ）



#### UxdtoASC を選択

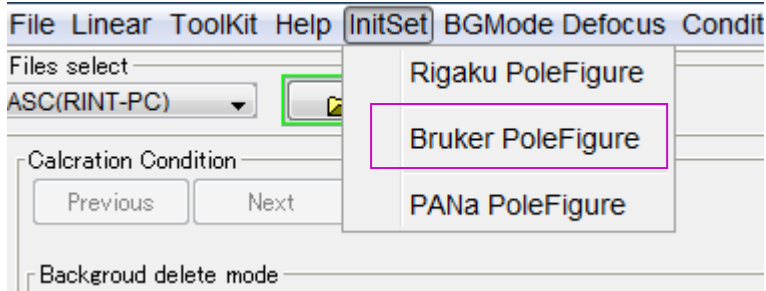


入力U x dファイルに指数が登録されていません。  
A s cファイルでは指数の項目があります。自動指数付けを行う上で材料を明確にして下さい。

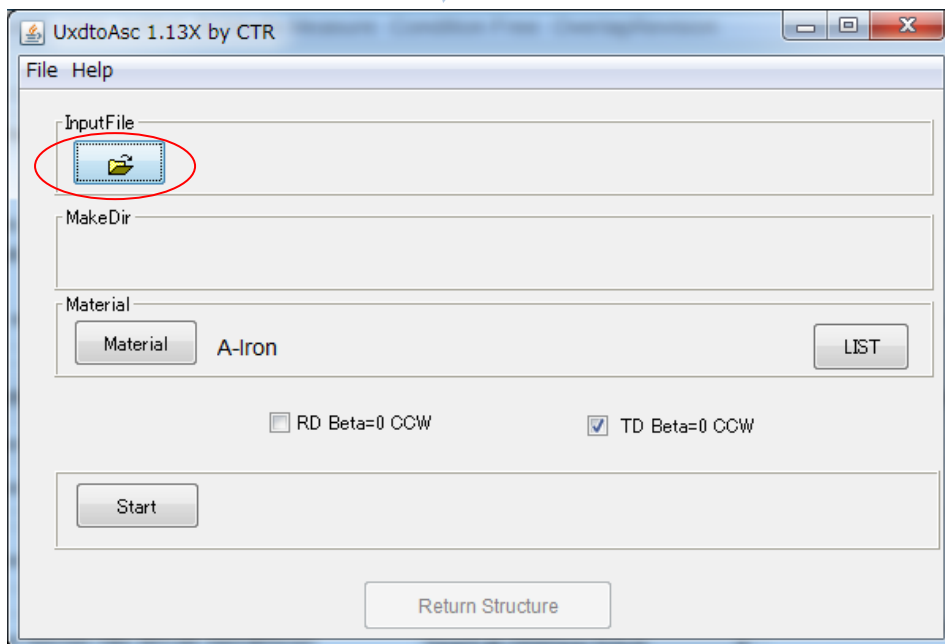
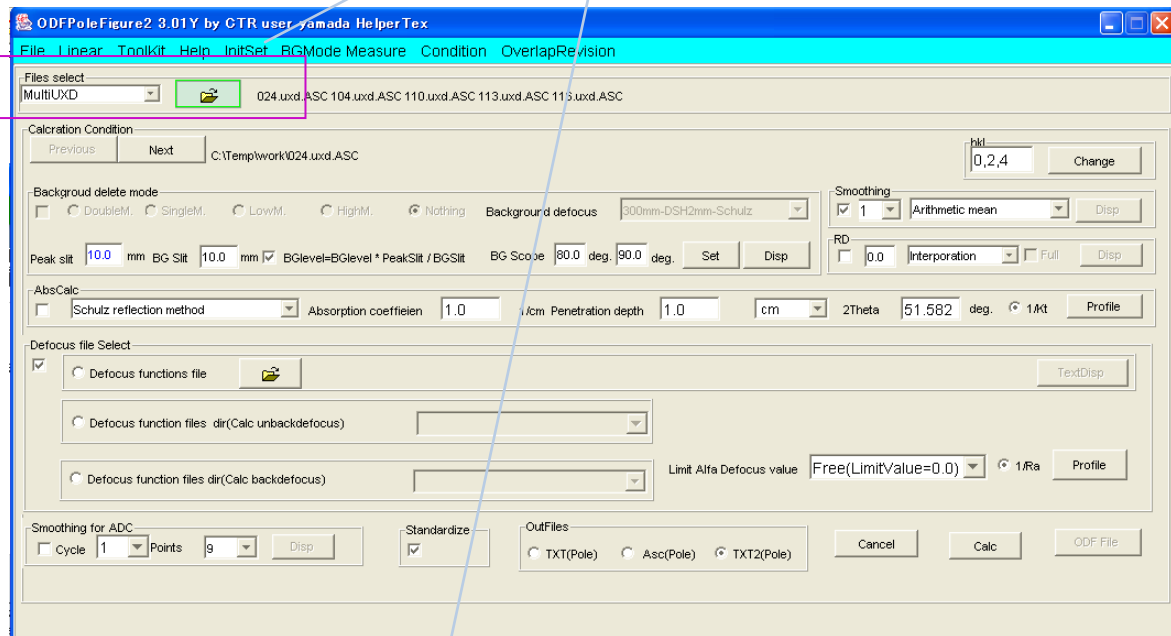
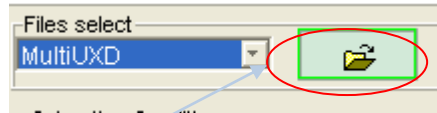
U x dファイル選択、  
Start で Asc ファイルに変換します。

## 7. 2 U x dフォーマットを直接変換方法(F-2 データ)

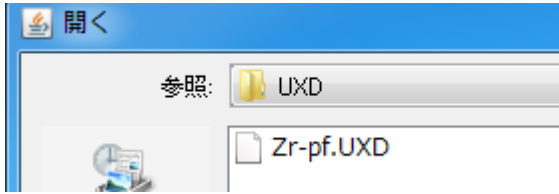
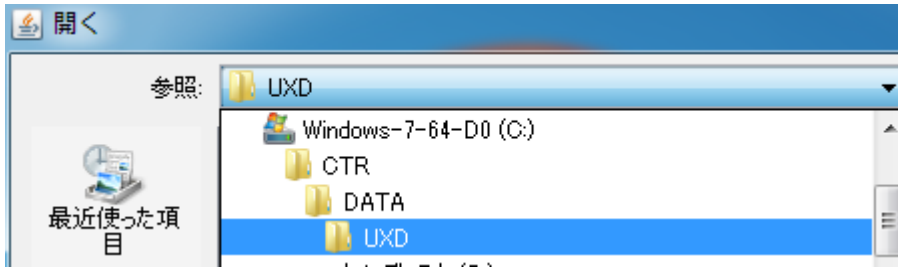
1つのファイルに複数の極点図が登録されている測定データ



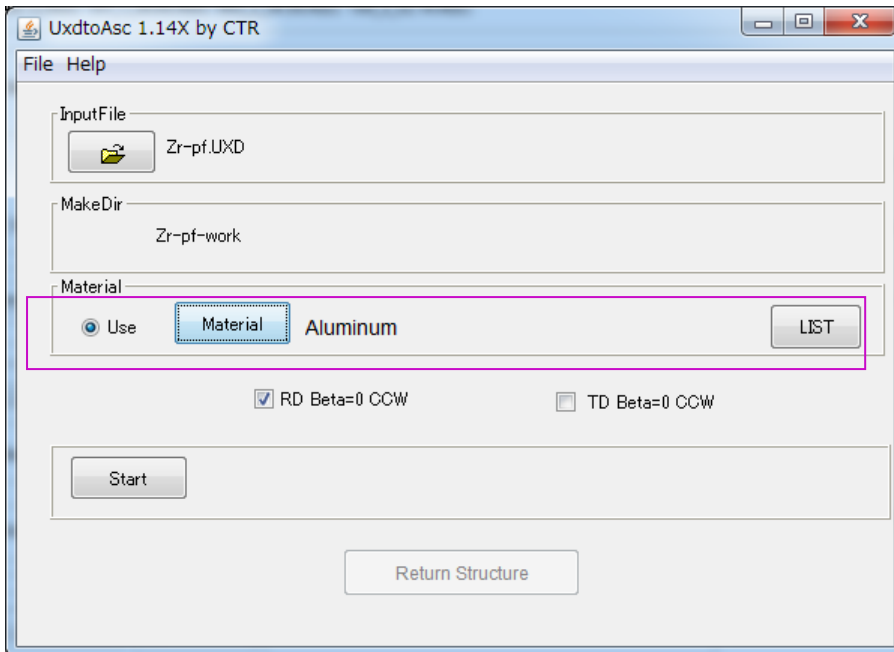
InitSet->Bruker PoleFigure を選択



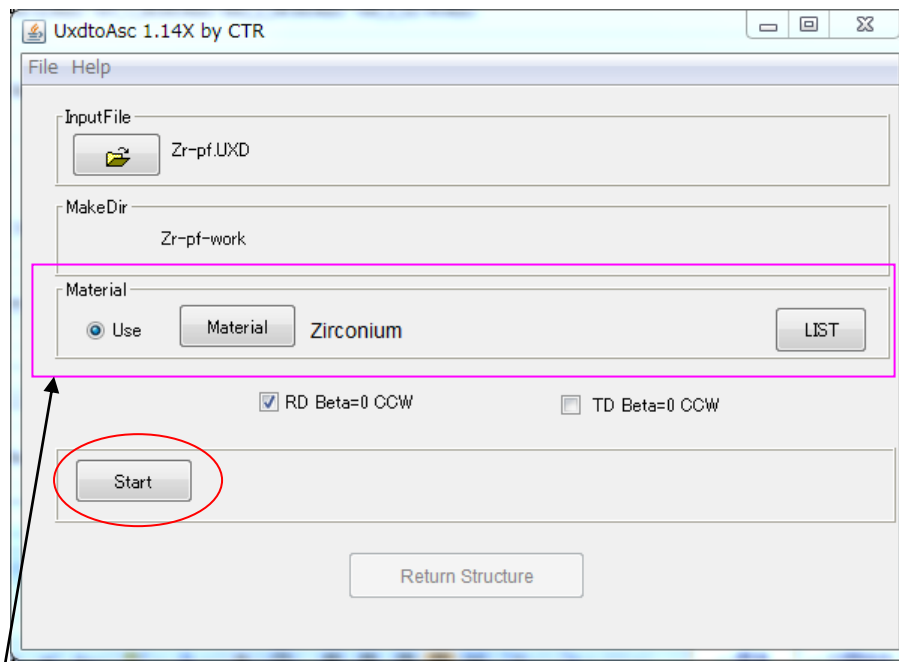
U x dファイルを選択



CTR¥DATA¥UXD¥ZR-pf.UXD ファイルを選択

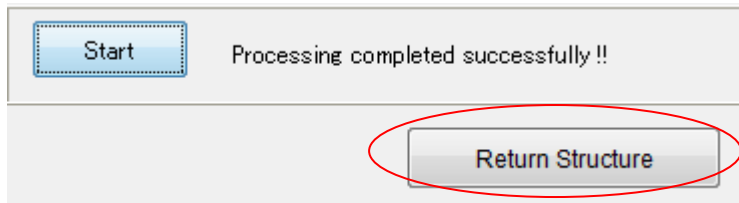


Material を Zirconium に変える。



Start で Asc ファイル変換開始

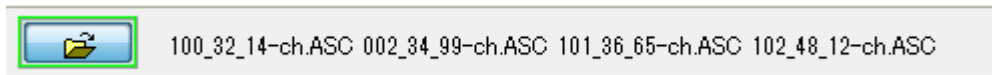
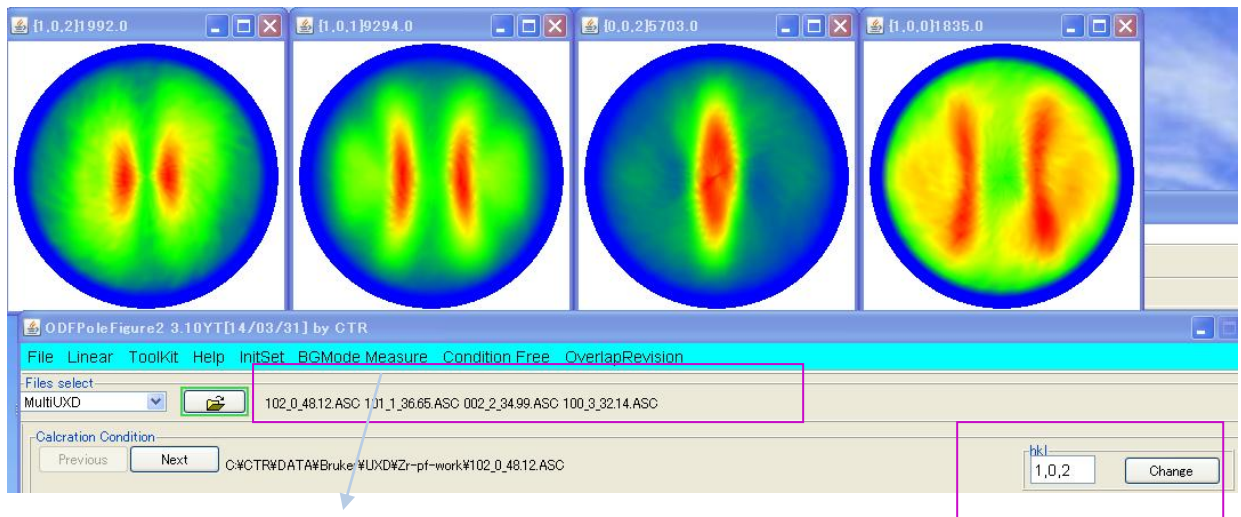
自動指数付けを行う



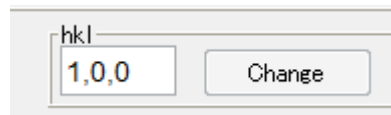
変換終了したら、ReturnStructure で終了



各極点図のタイトルに指数と最大強度を表示しています。指数の確認してください。指数が間違っている場合、前の画面で Material の指定を確認してください。



選択した Uxd ファイルから、複数の Asc ファイルが作成されています。ファイル名は指数+測定  $2\theta$  角度を表しています。



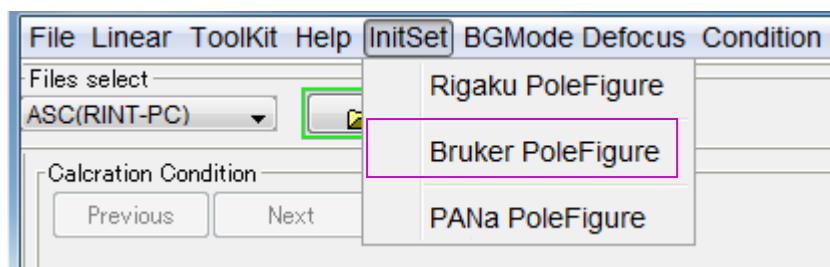
Asc ファイル内の指数が登録されている部分を表示しています。

この部分は、defocus 多項式近似式のサチに使われる重要な情報です。

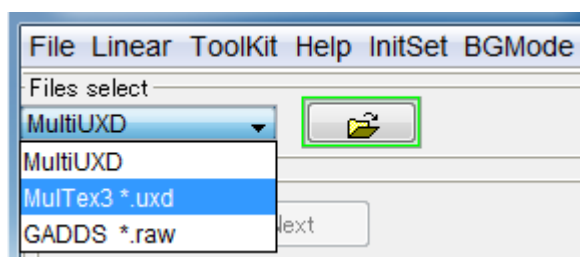
以降は Asc ファイルの操作と同じ

### 8. 3 Mu l T e x 3 データの場合 (データ処理結果) (F-3 データ)

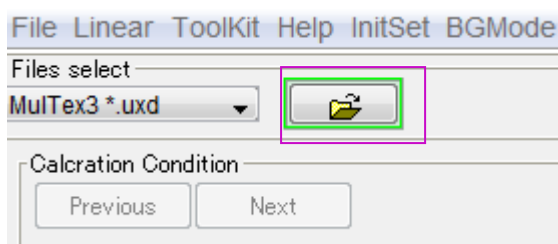
Mu l T e x 3 データの場合、ファイルは極点図毎に別々で、既にバックグラウンドは削除されている。ファイルの選択は



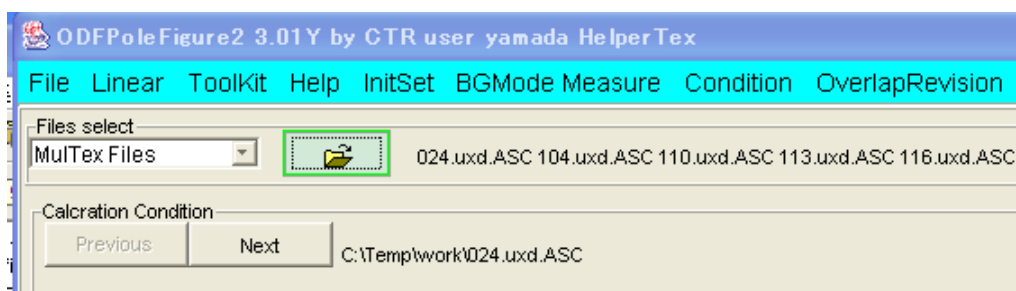
Bruker PoleFigure を選択



MulTex3 \*.uxd を選択



Uxd ファイルを複数選択

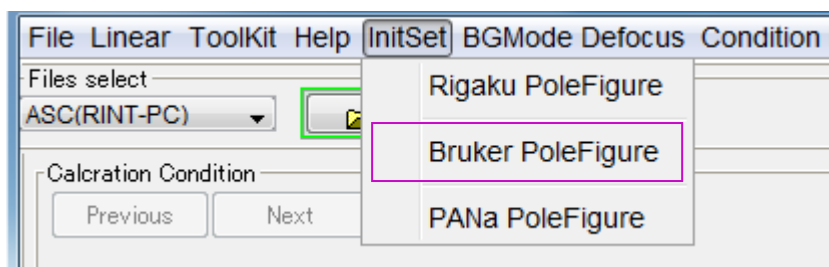


選択したファイルから ASC 変換したファイル名が表示、ASC ファイルは、選択した Uxd デレクトリに work デレクトリが作成され、そのデレクトリに作成される。極点図で表示している反射指数はファイル名から取得している。

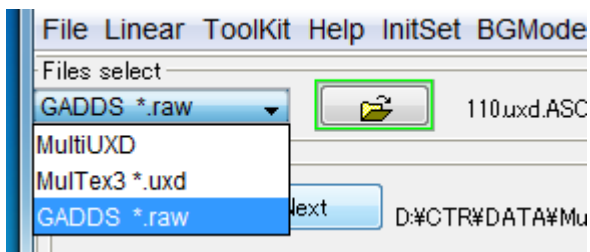
名前	サイズ	種類	更新日時
024.uxd.ASC	14 KB	RINT2000アスキー	2012/10/08 7:18
104.uxd.ASC	14 KB	RINT2000アスキー	2012/10/08 7:18
110.uxd.ASC	13 KB	RINT2000アスキー	2012/10/08 7:18
113.uxd.ASC	14 KB	RINT2000アスキー	2012/10/08 7:18
116.uxd.ASC	15 KB	RINT2000アスキー	2012/10/08 7:18

後は、ASC ファイル選択と同様の処理を行う。

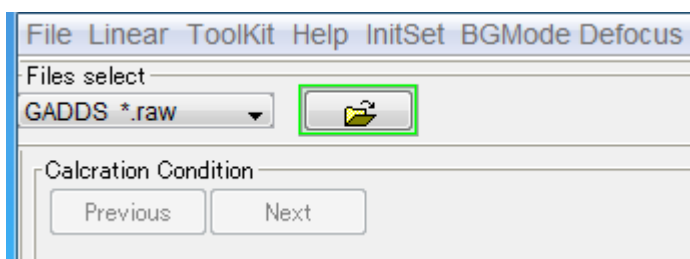
8. 4 GADDS popLA (raw) の場合(F-4,F-5 データ)



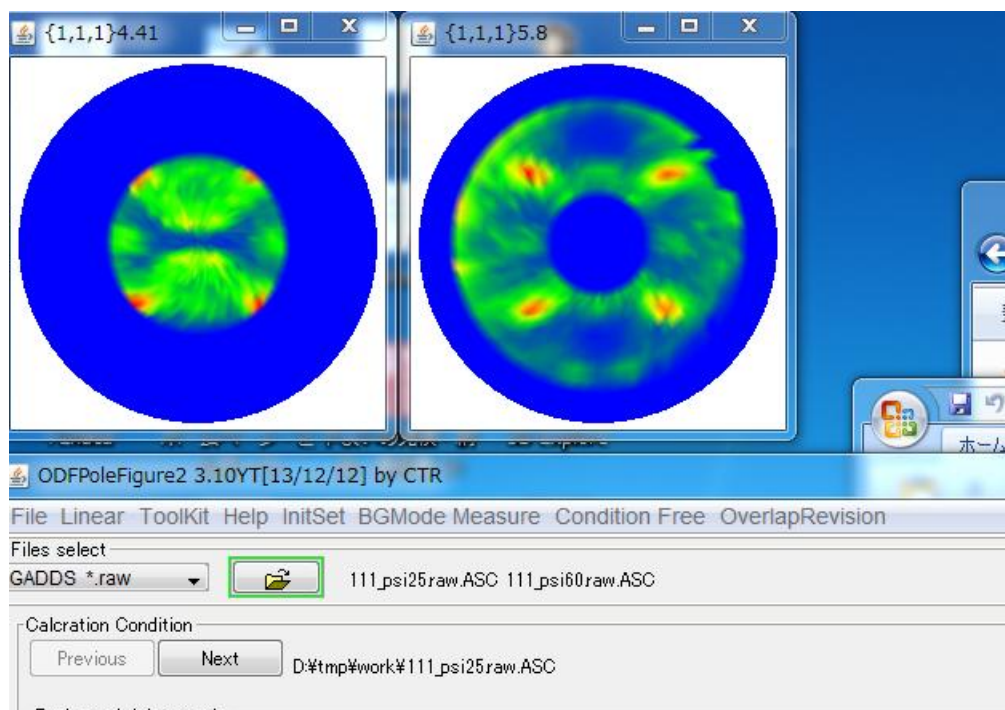
Bruker PoleFigure 選択



GADDS \*.raw を選択



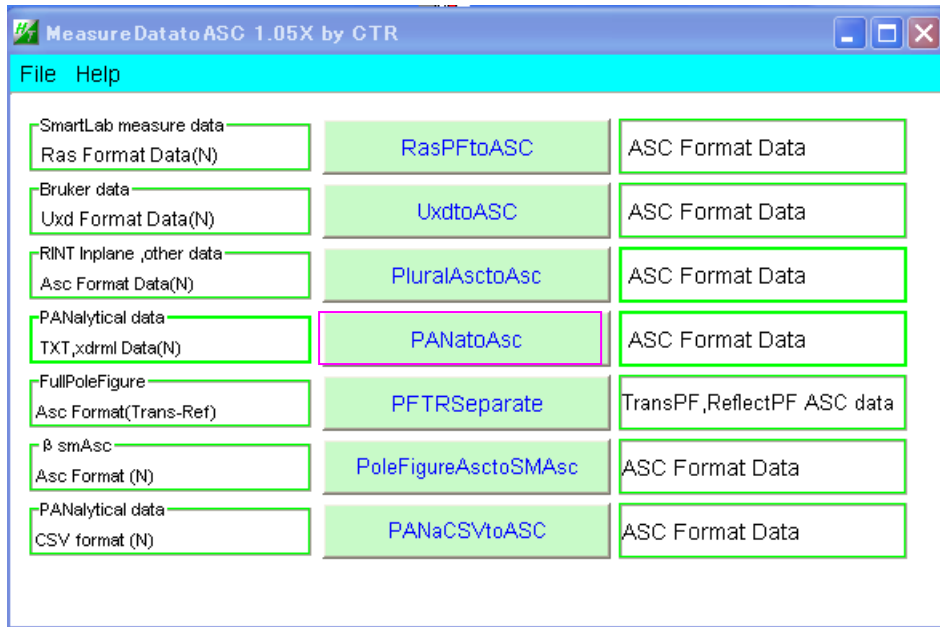
raw ファイルを選択



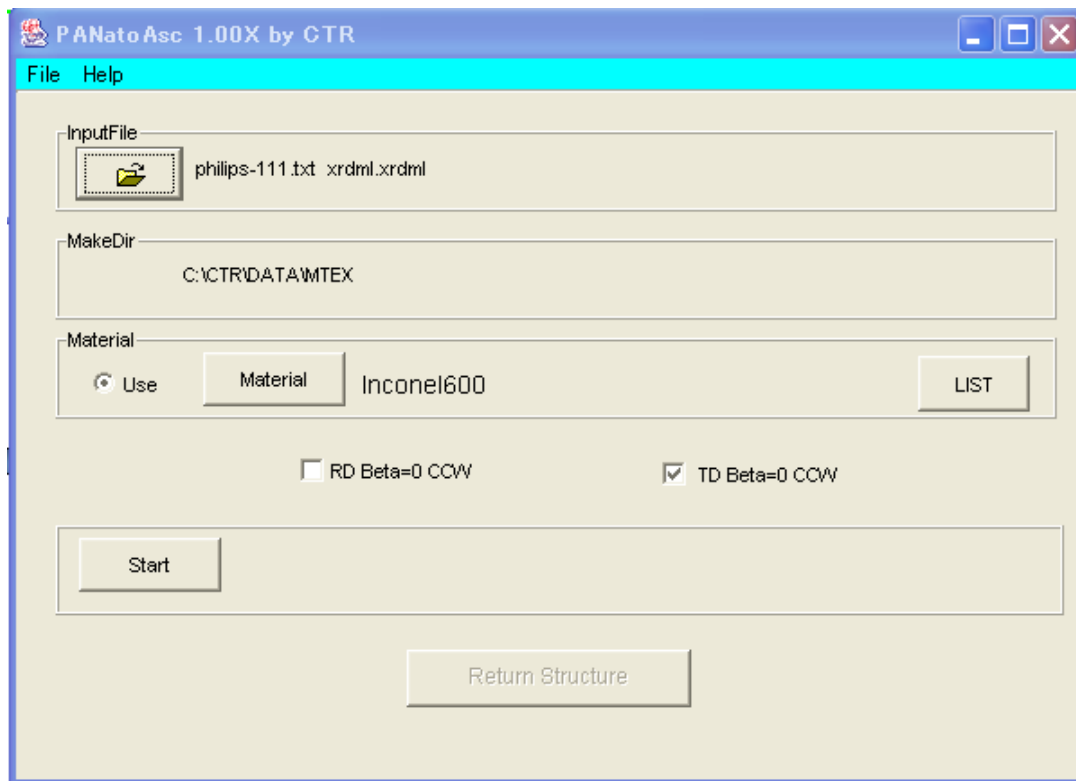
Raw データ選択で、workディレクトリが作成され、workディレクトリにASCファイルに変換されたファイルが作成される。以降、ASCファイルを選択したモードで動作します。

9. P A N a l y t i c a l 社データの読み込み(F-6,F-7データ)

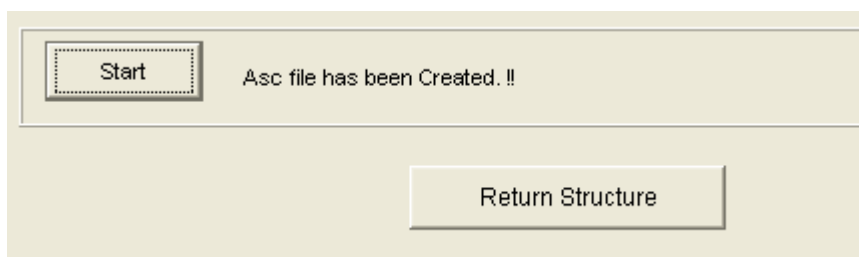
9. 1 予め、t x t、x r d m lフォーマットからA S Cフォーマットに変換する方法



PoleFigure2->ToolKits->MeasureDatatoASC->PANatoAsc



複数のT X T、x r d m lファイルを選択し、

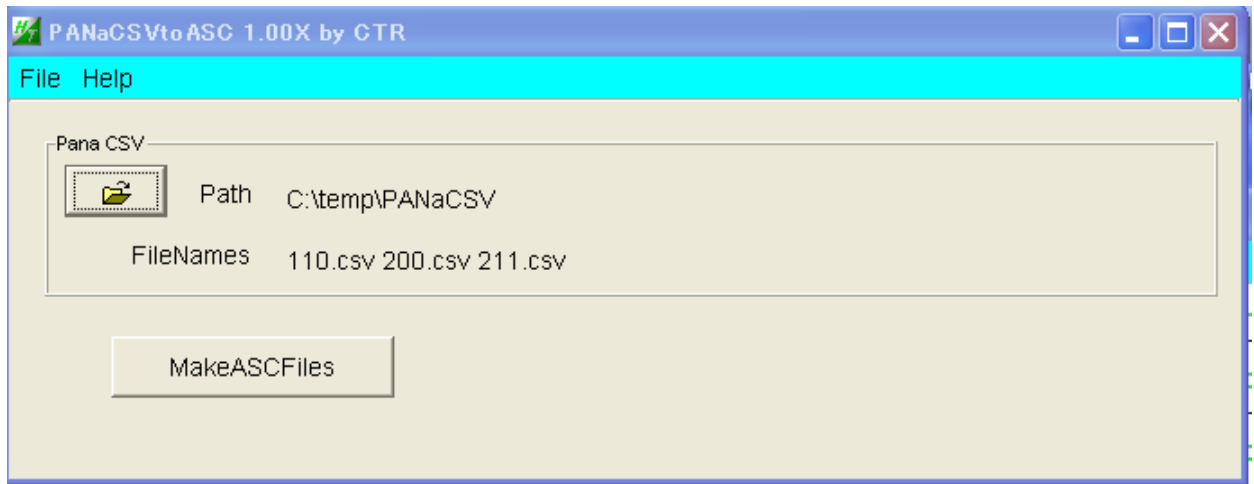


S t a r t で A s c ファイルを作成

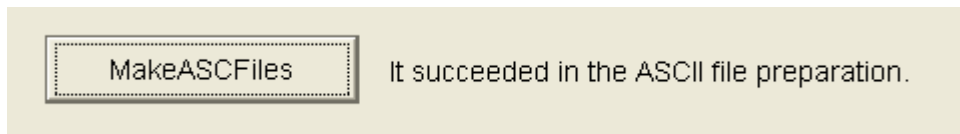


9. 2 予め、CSVフォーマットからASCフォーマットに変換する方法

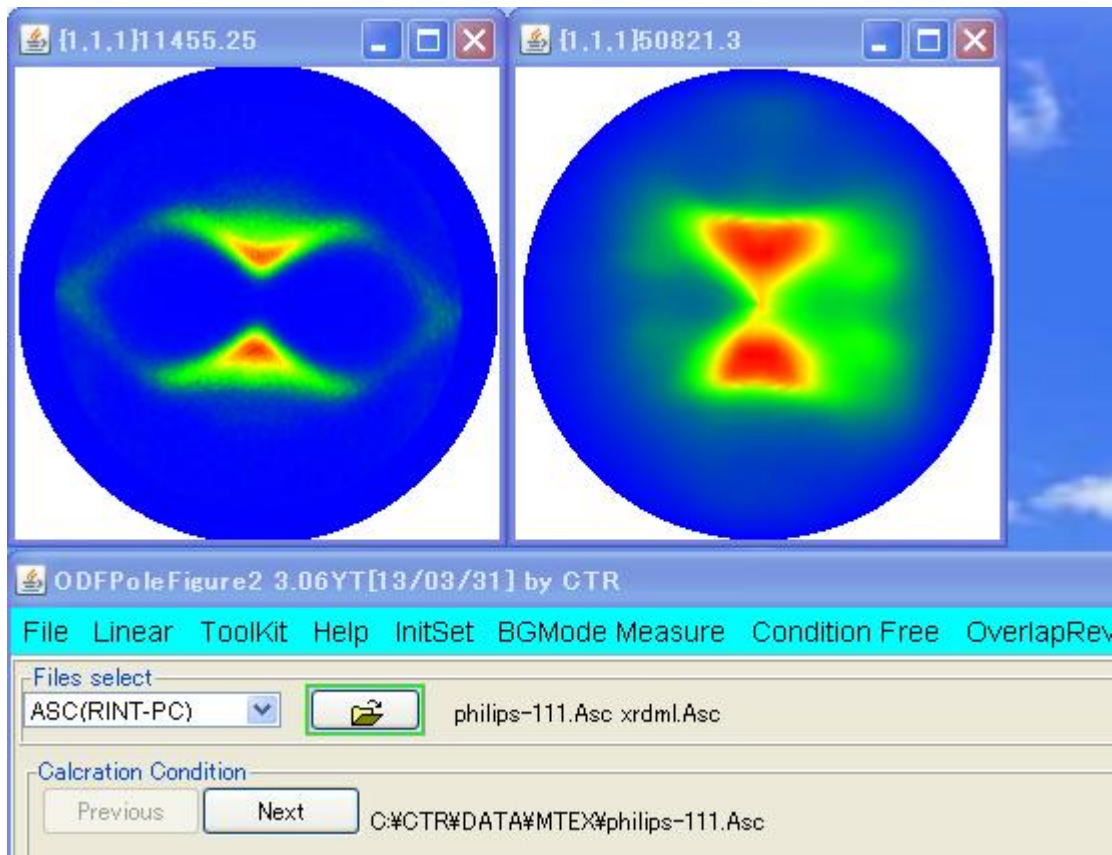
PoleFigure2->ToolKits->MeasureDatatoASC->PANaCSVtoASC



複数の CSV データを選択し、MakeASCFiles で ASC ファイルが作成される。

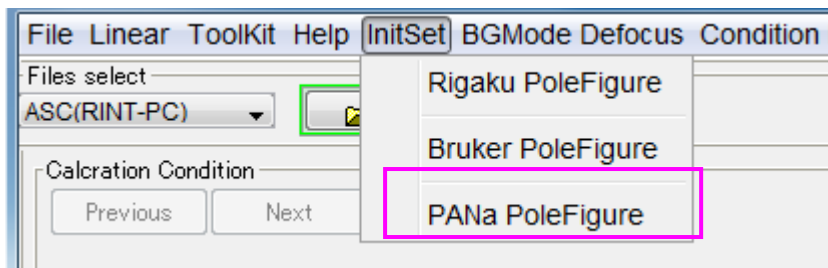


ODFPoleFigure2 ソフトウェアでASCとして読み込む



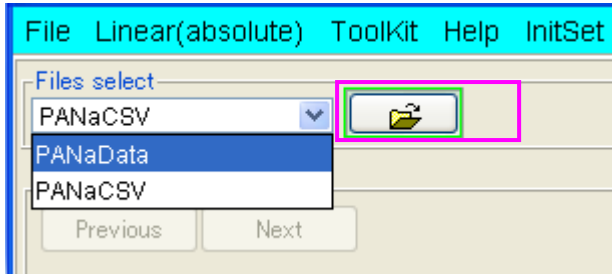


### 9. 3 直接読み込む

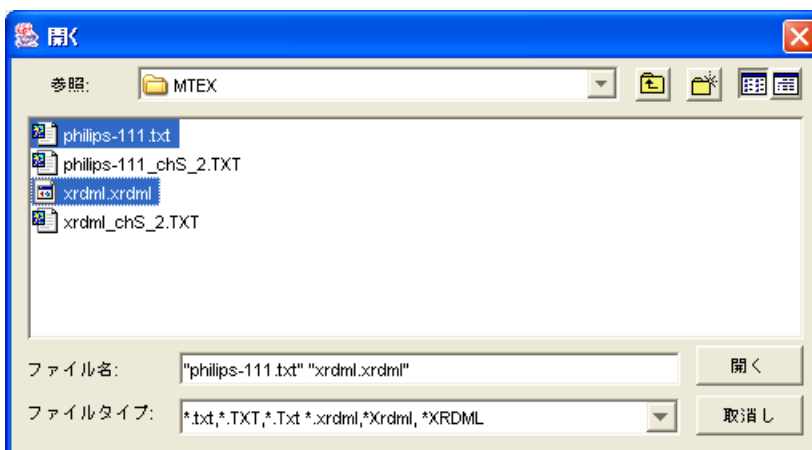
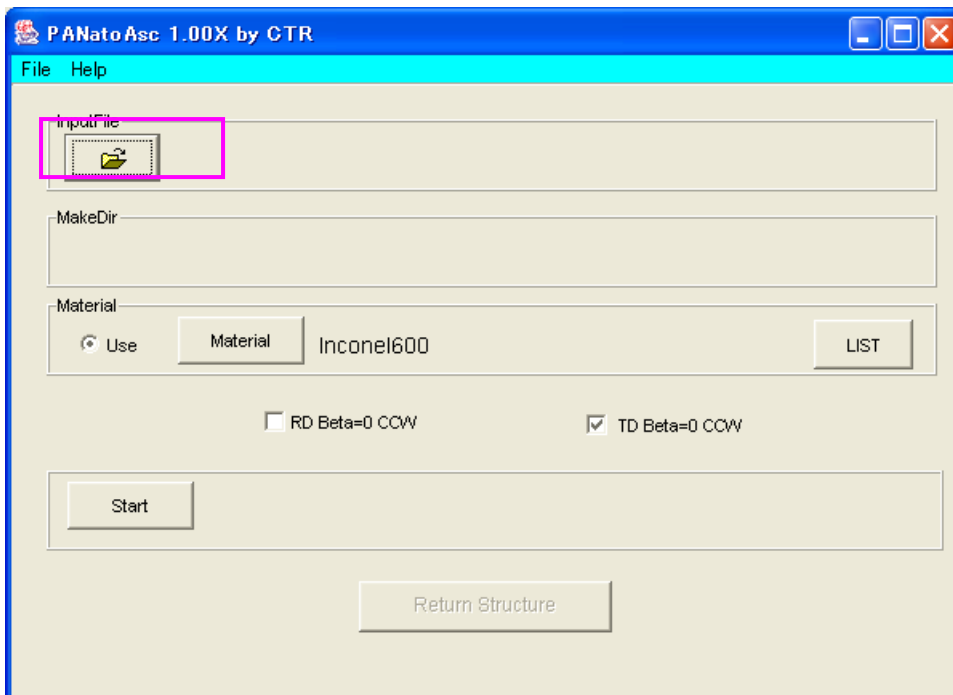


InitSet で PANA PoleFigure を選択

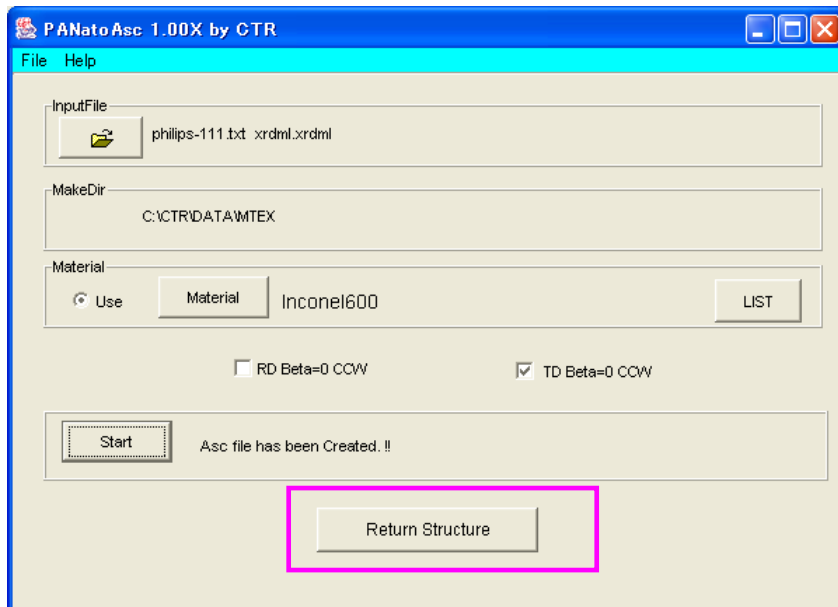
#### 9. 3. 1 TXTやdrmlファイルの場合



ファイルを選択 (PANatoAsc が立ち上がる)

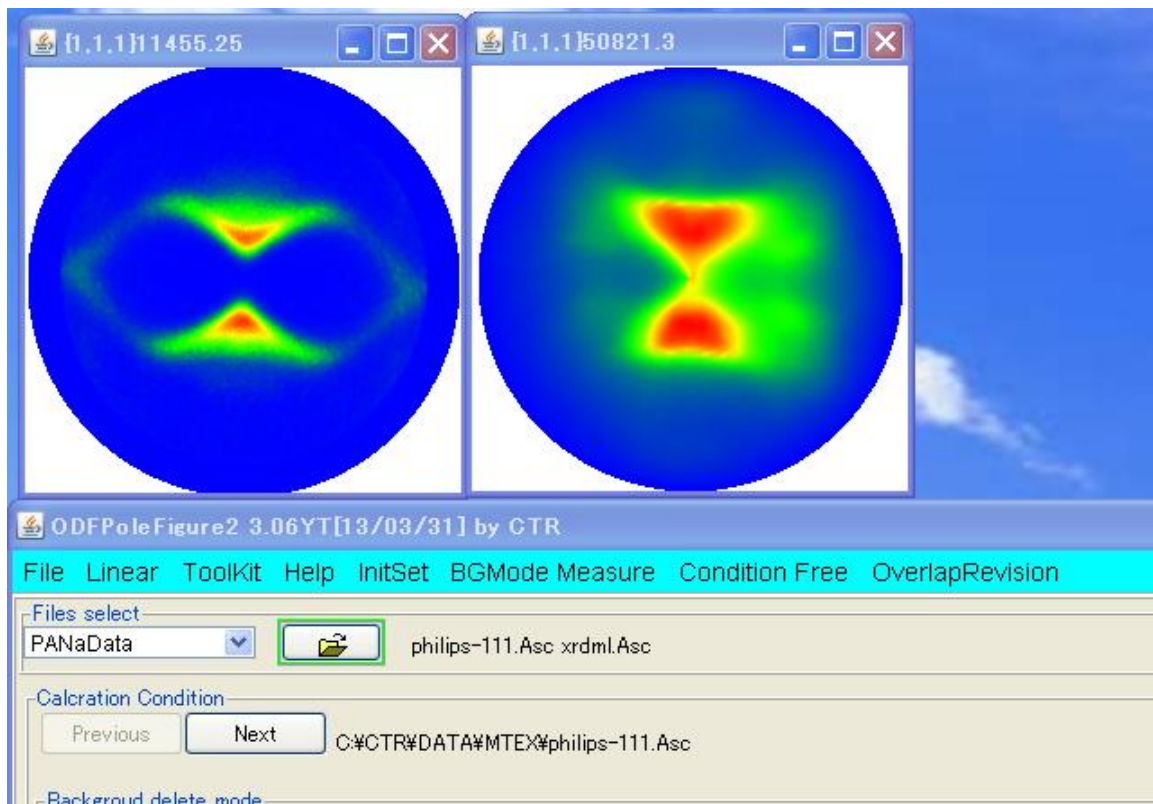


T X T と xrdml ファイルを選択

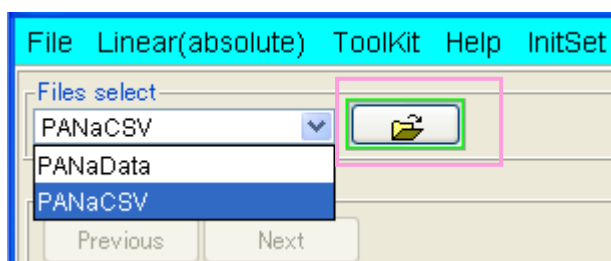


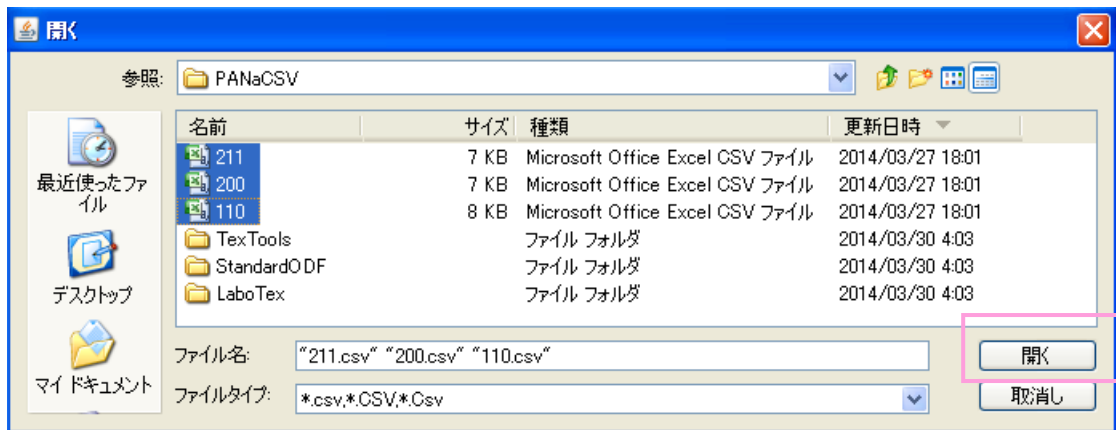
Start で Asc ファイルに変換、Return Structure

ASCファイルが load される。

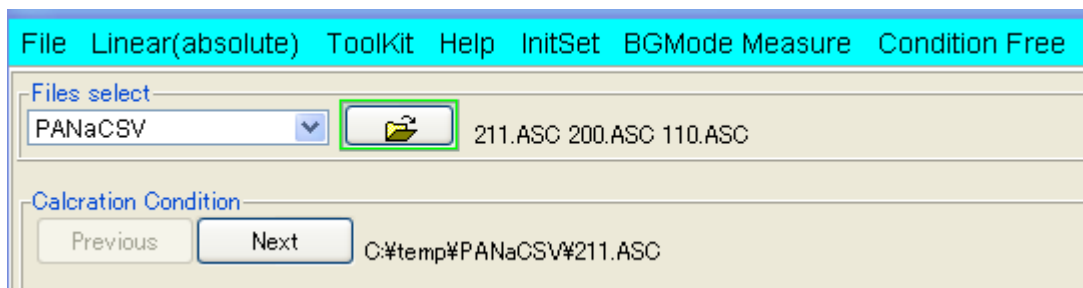


9. 3. 2 CSV ファイルの場合





複数の CSV データを選択



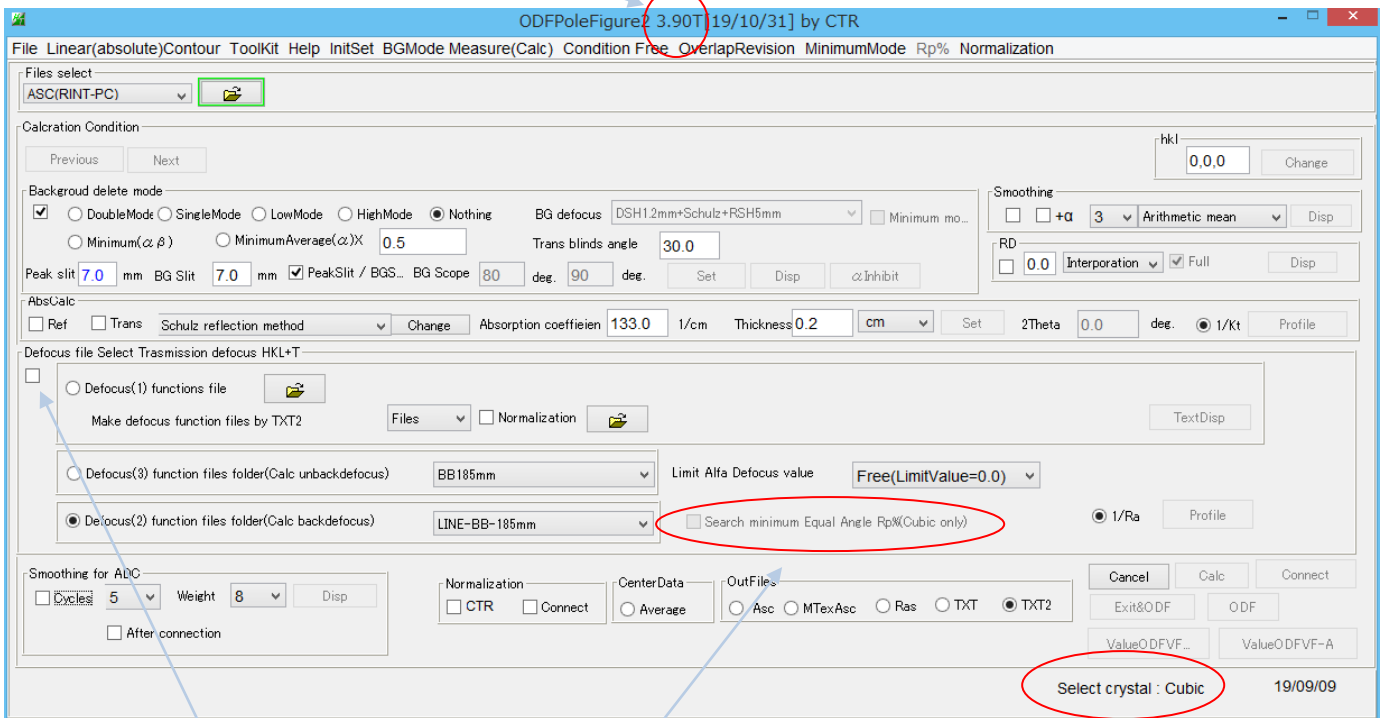
CSV から ASC に変換されたデータが load される。

## 10. Rp%の最適化(Cubic 限定)

再defocus処理とは、解析内でRp%を再計算してTXT2を補正する。

Schulz スリット光学系用です。

追加機能(Ver3.90以降変更あり)



Defocus 指定

再 defocus 指定

Cubic 以外は赤字で表示(Ver4.01)

### defocus 組み合わせ

defocus 補正なし

defocus 補正なし+再defocus 処理

defocus 補正あり (defocus(1)、defocus(2)、defocus(3))

defocus 補正あり+再defocus 処理

上記組み合わせを

random 試料

CTR¥DATA¥Al-powder-random

配向データ

CTR¥DATA¥ODFPoleFigure

ODF ソフトウェア

LaboTex2 (Ver.3.0.53)

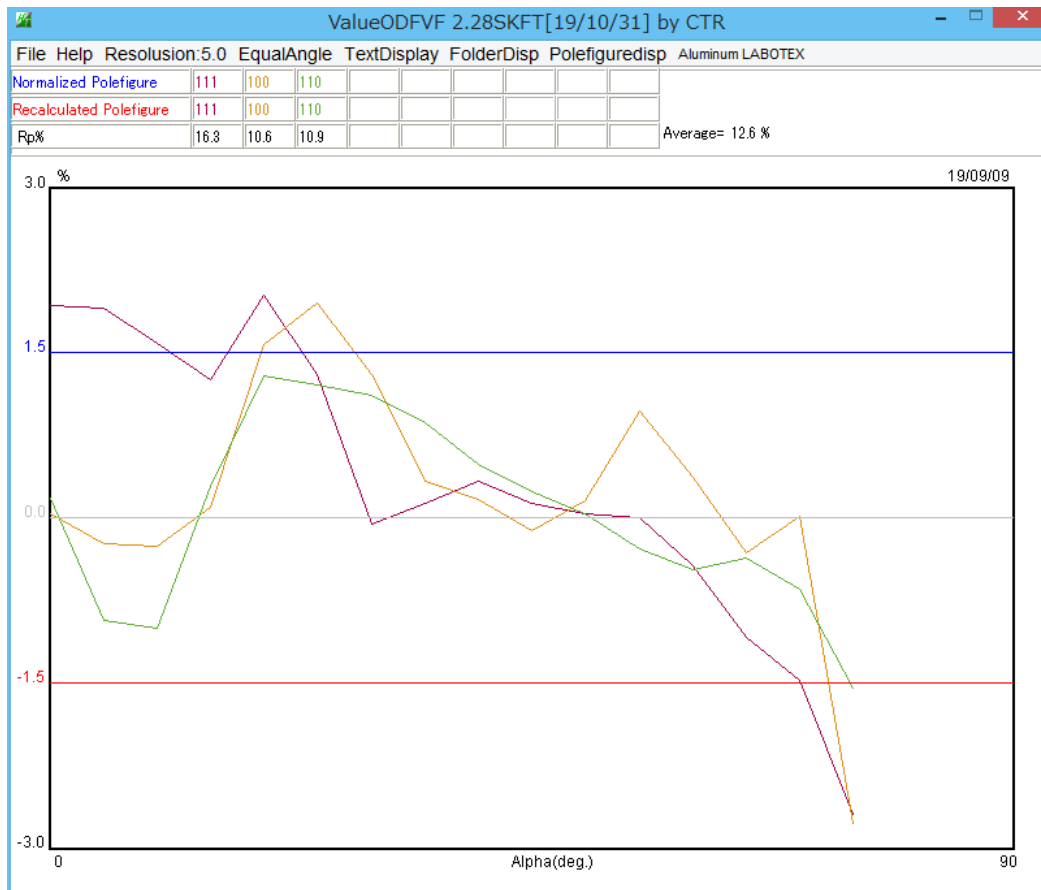
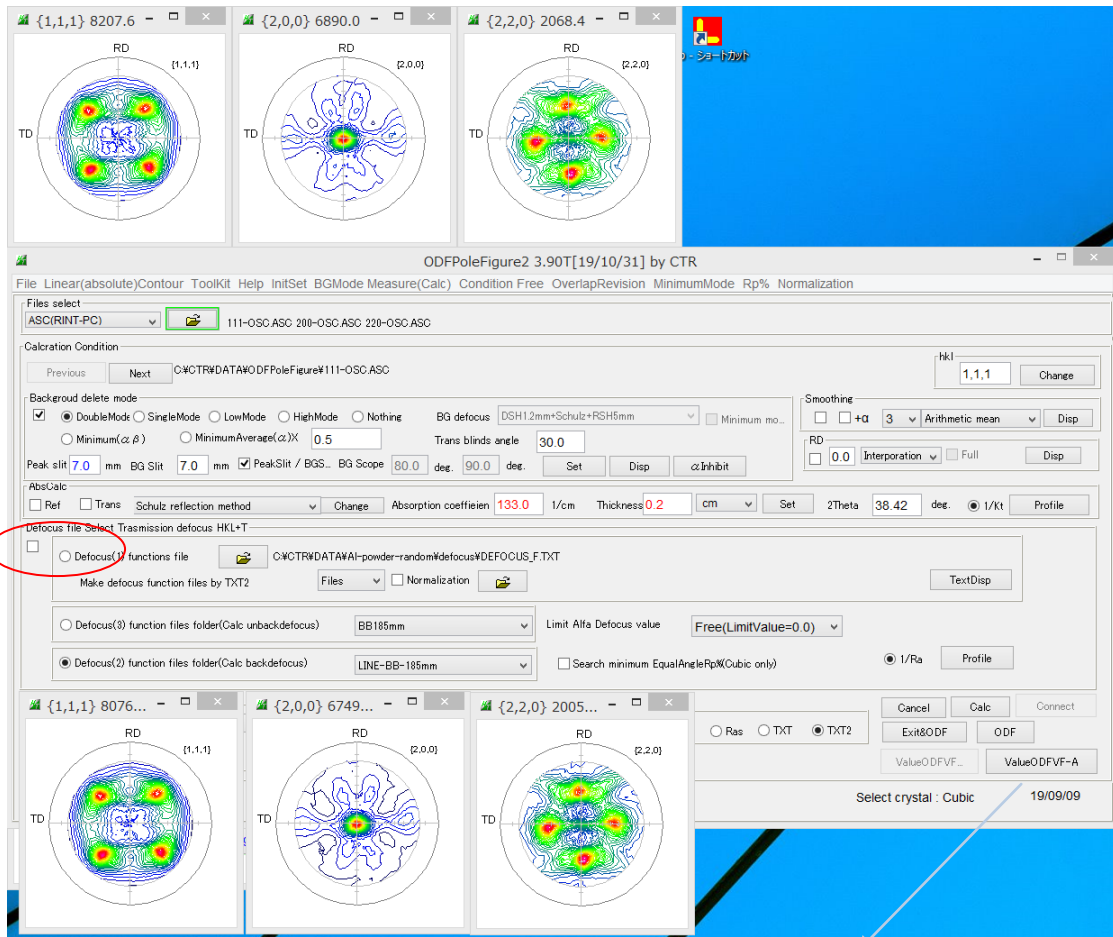
Rp%評価

ValueODFVF(Ver.2.28)

で比較します。

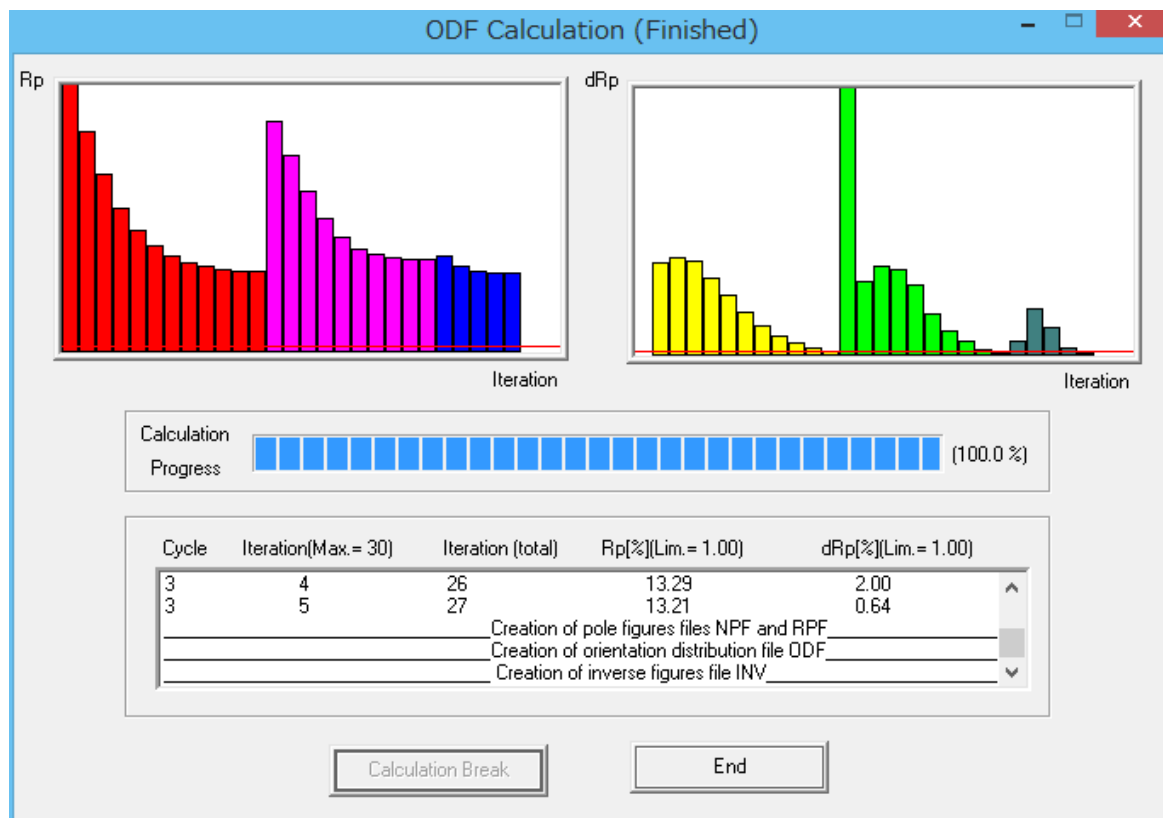
最適化Rp%で平均値が下がる場合、選択してください。

# 10.1 defocus補正なし

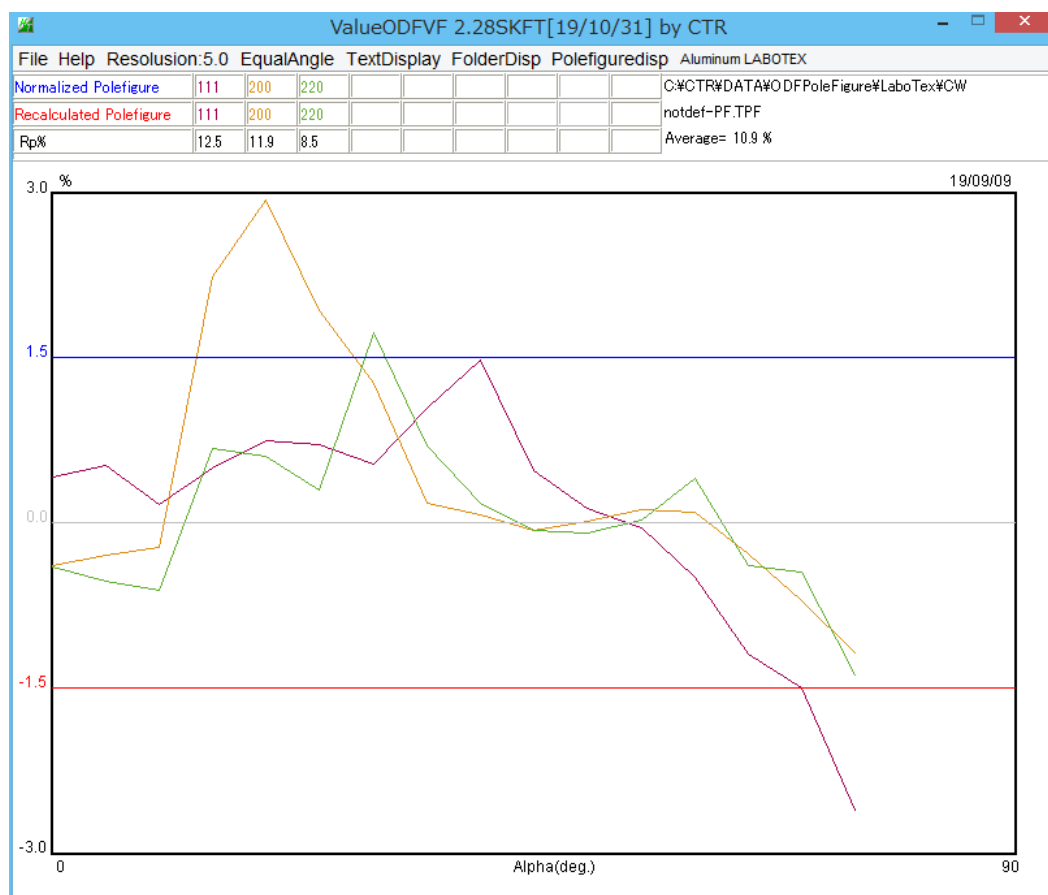


R p %プロフィールが±1.5%を超える。

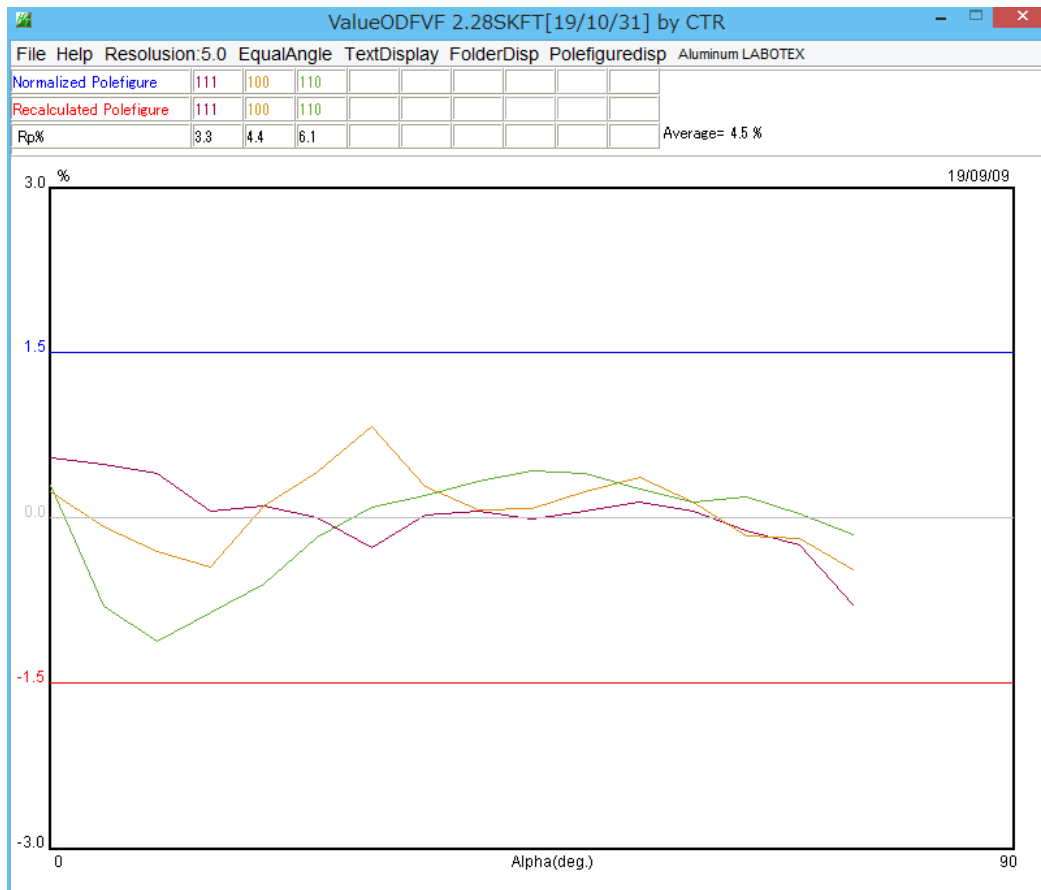
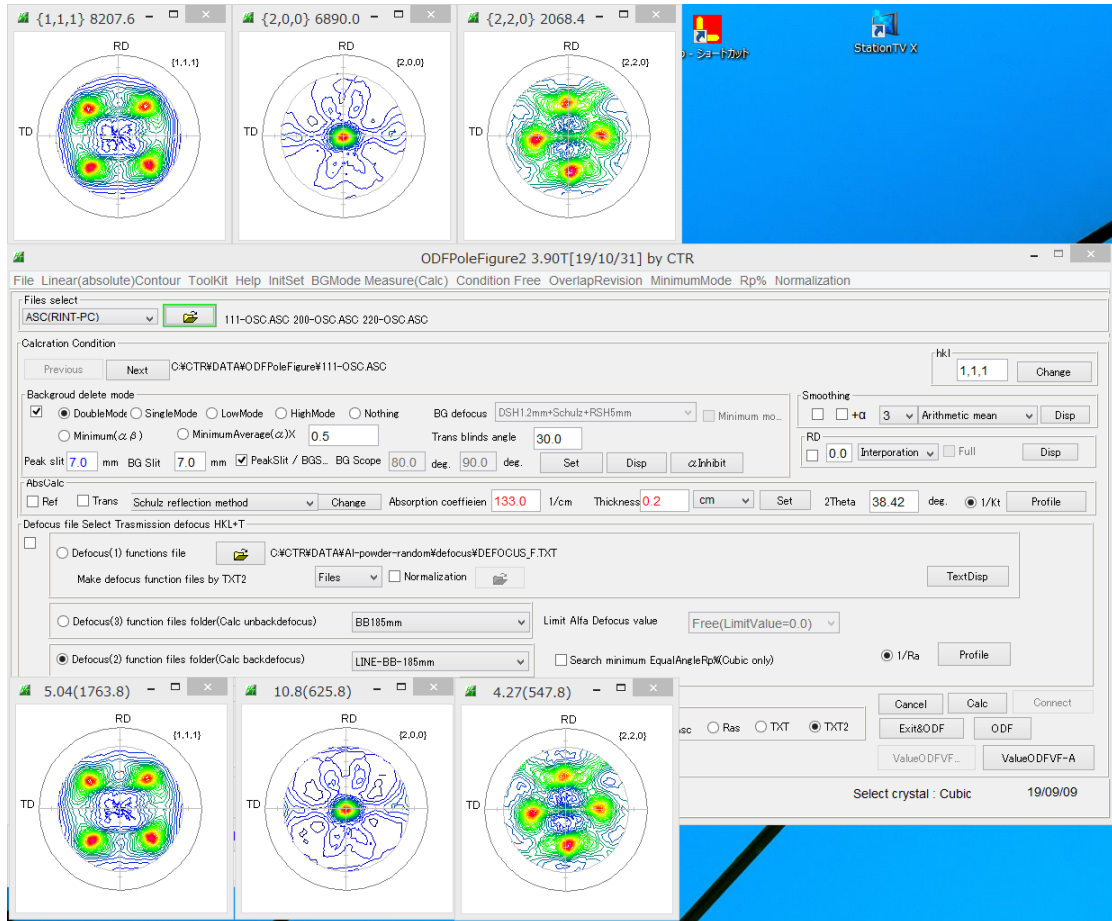
LaTeXで評価



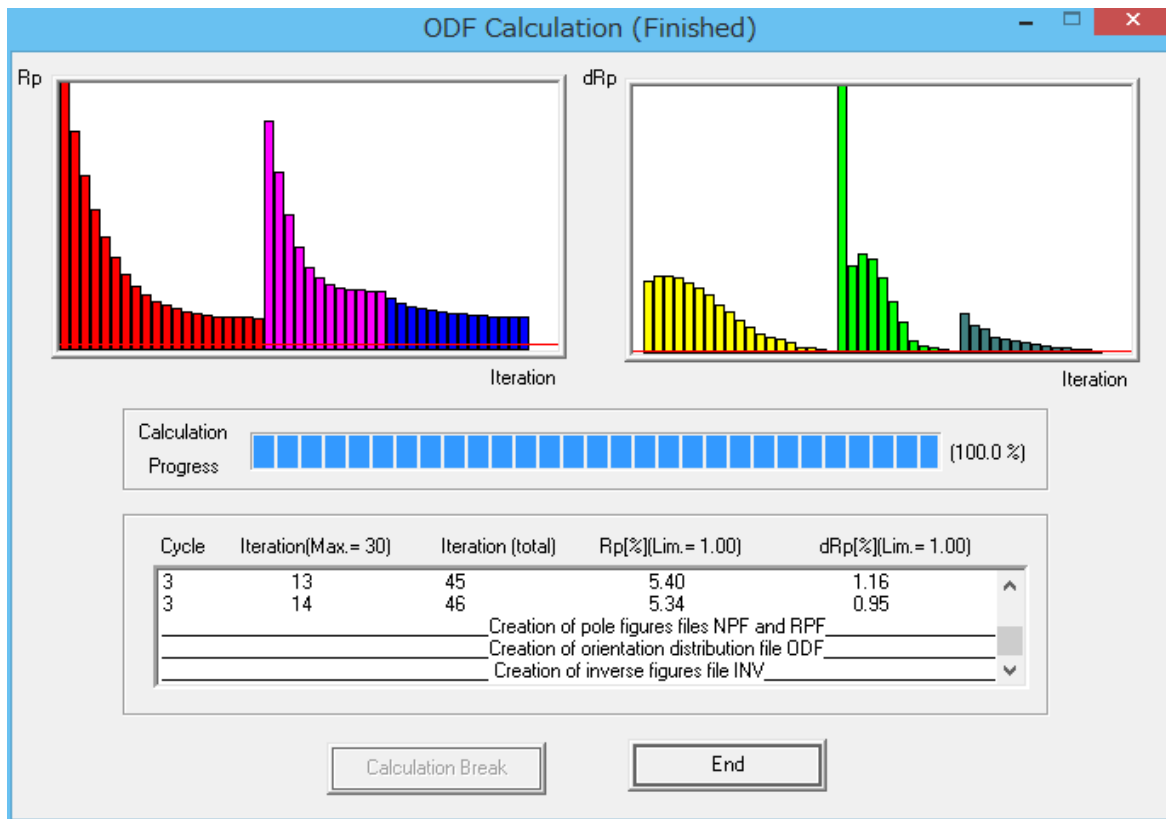
Rp %プロファイル評価



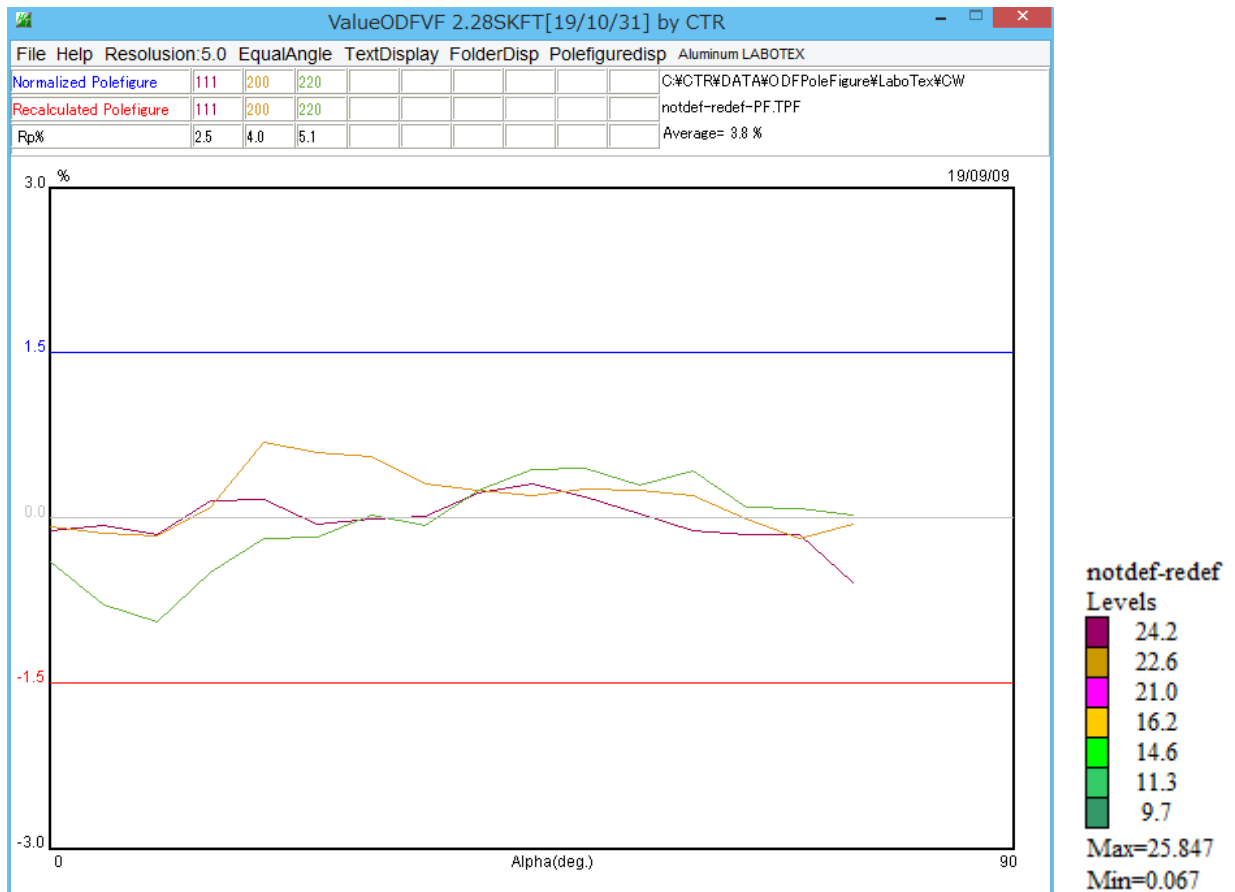
## 10.2 defocus補正なし+再defocus処理



LaboTexで処理

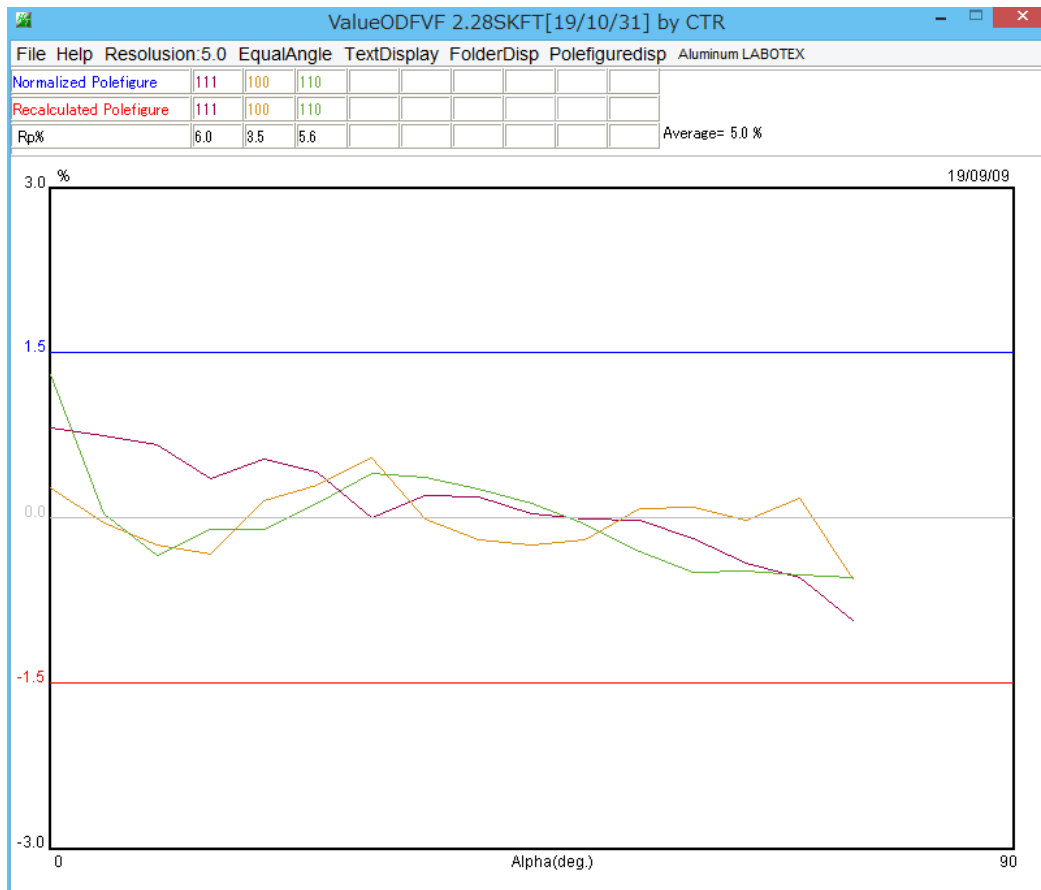
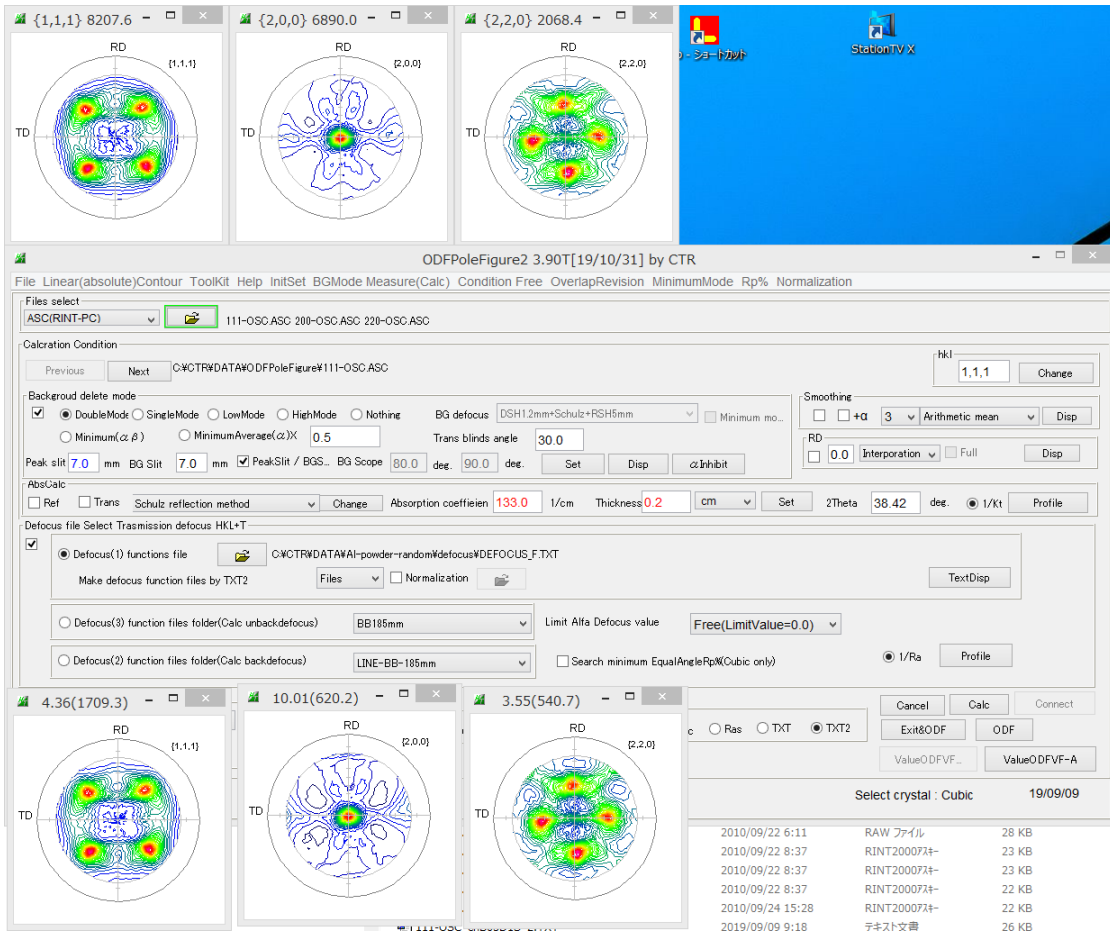


CTRで評価

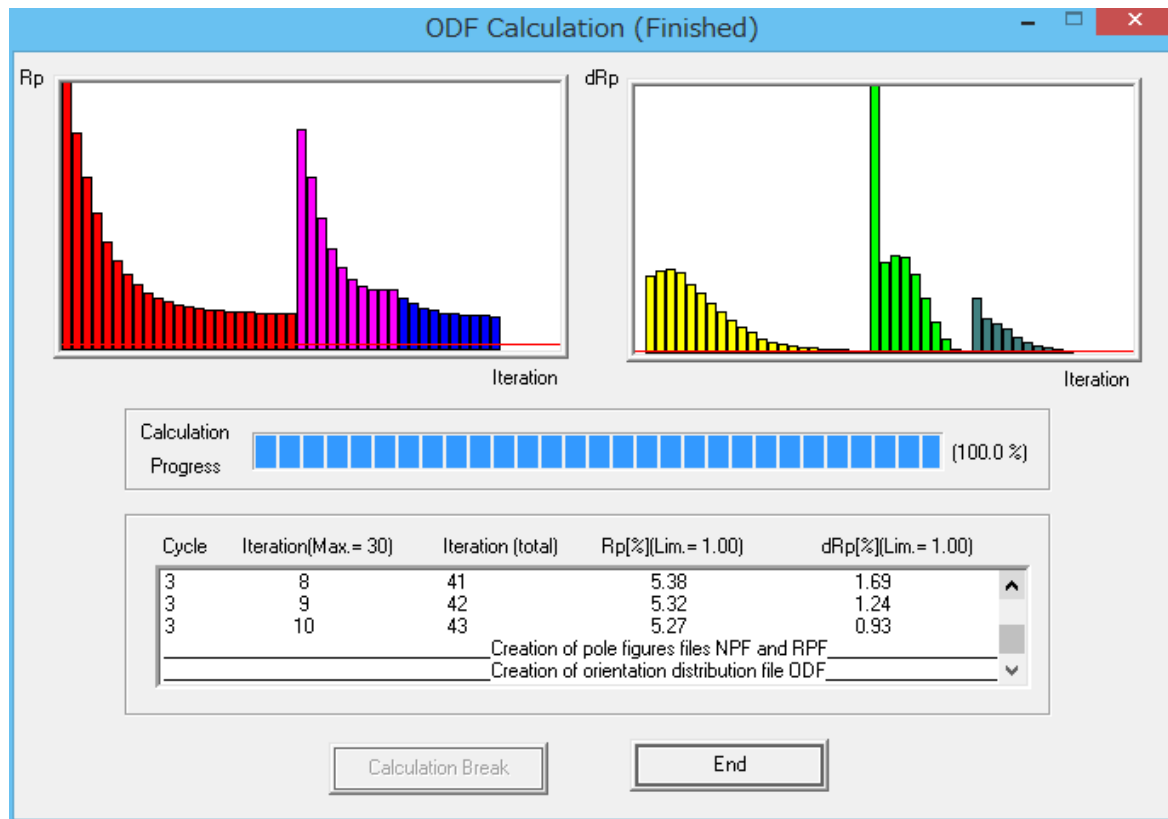




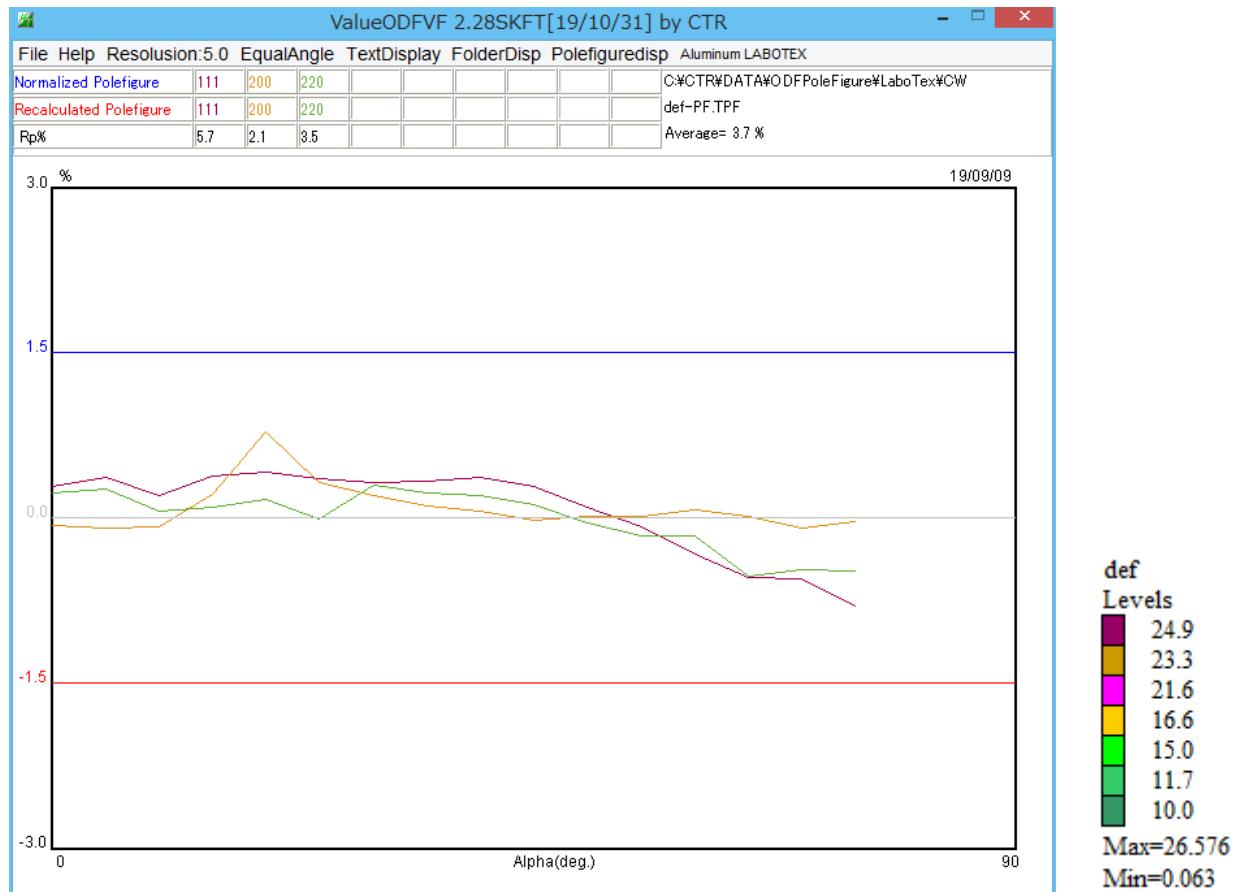
### 10.3. defocus補正あり (defocus(1))



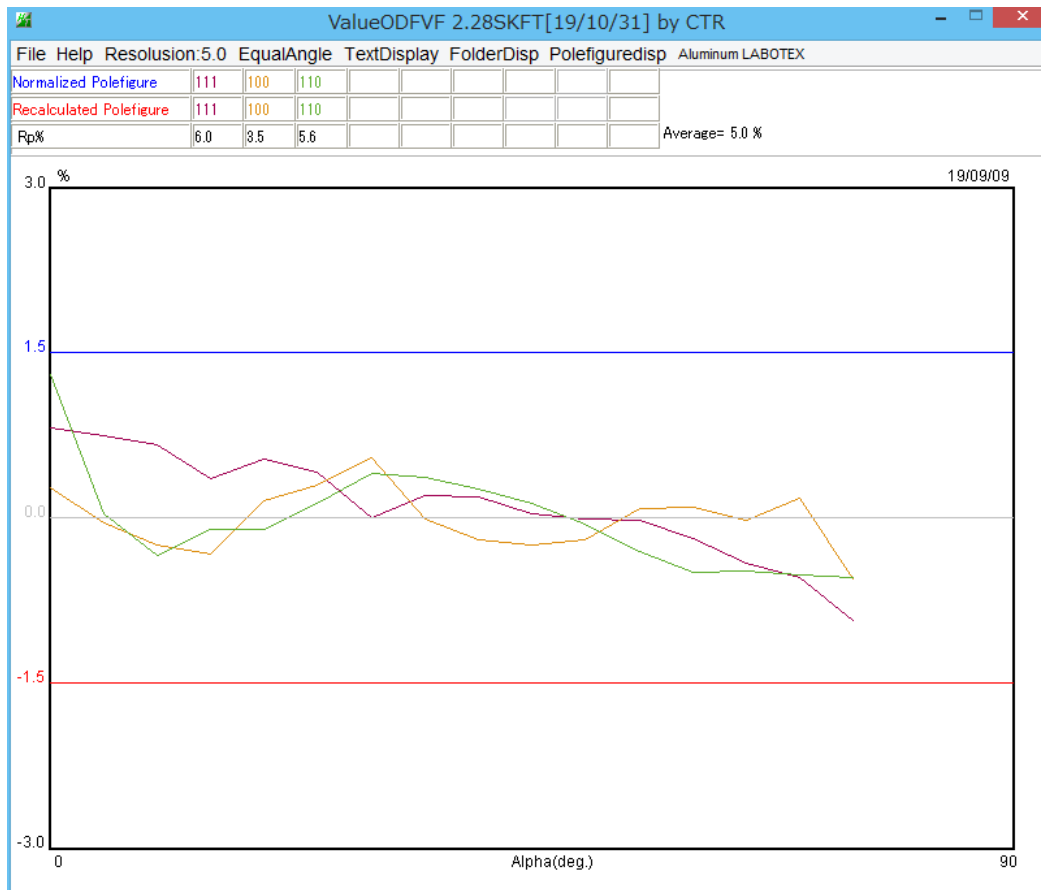
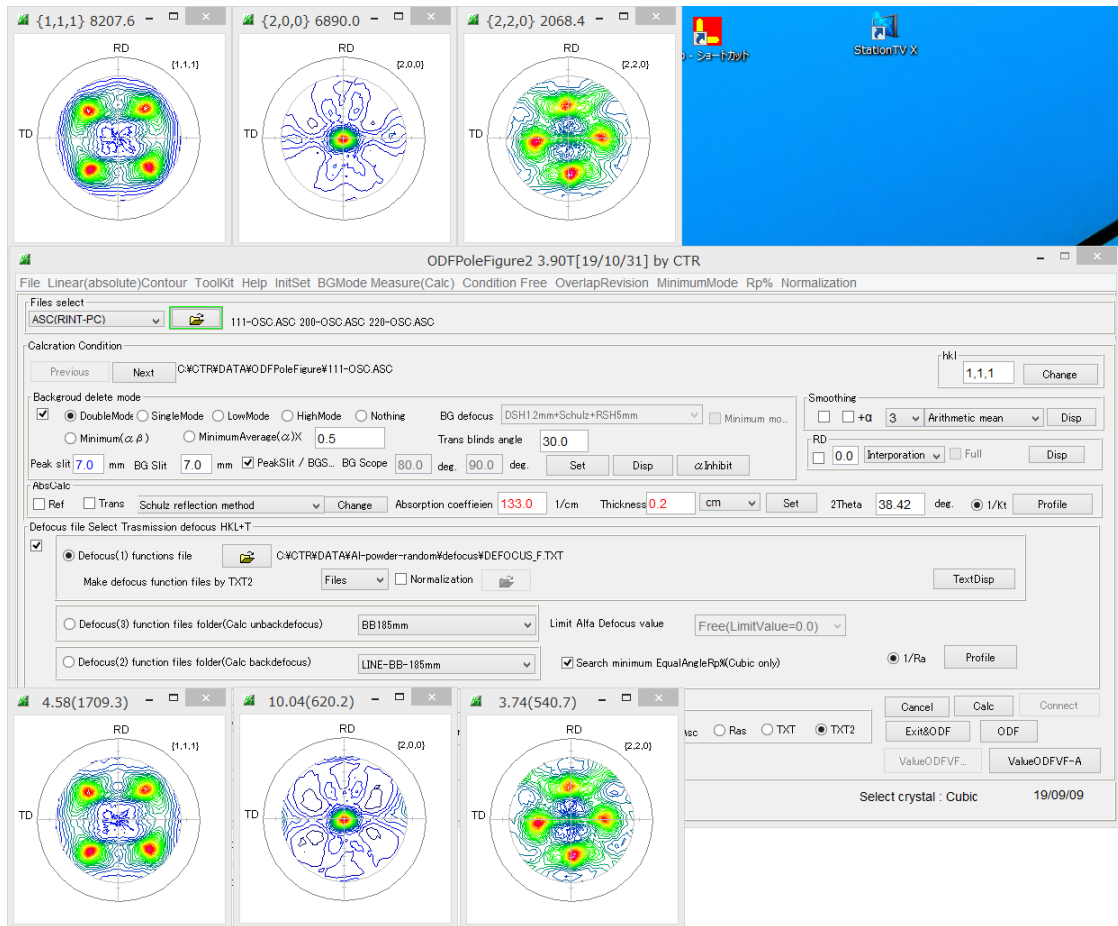
LaboTexで処理



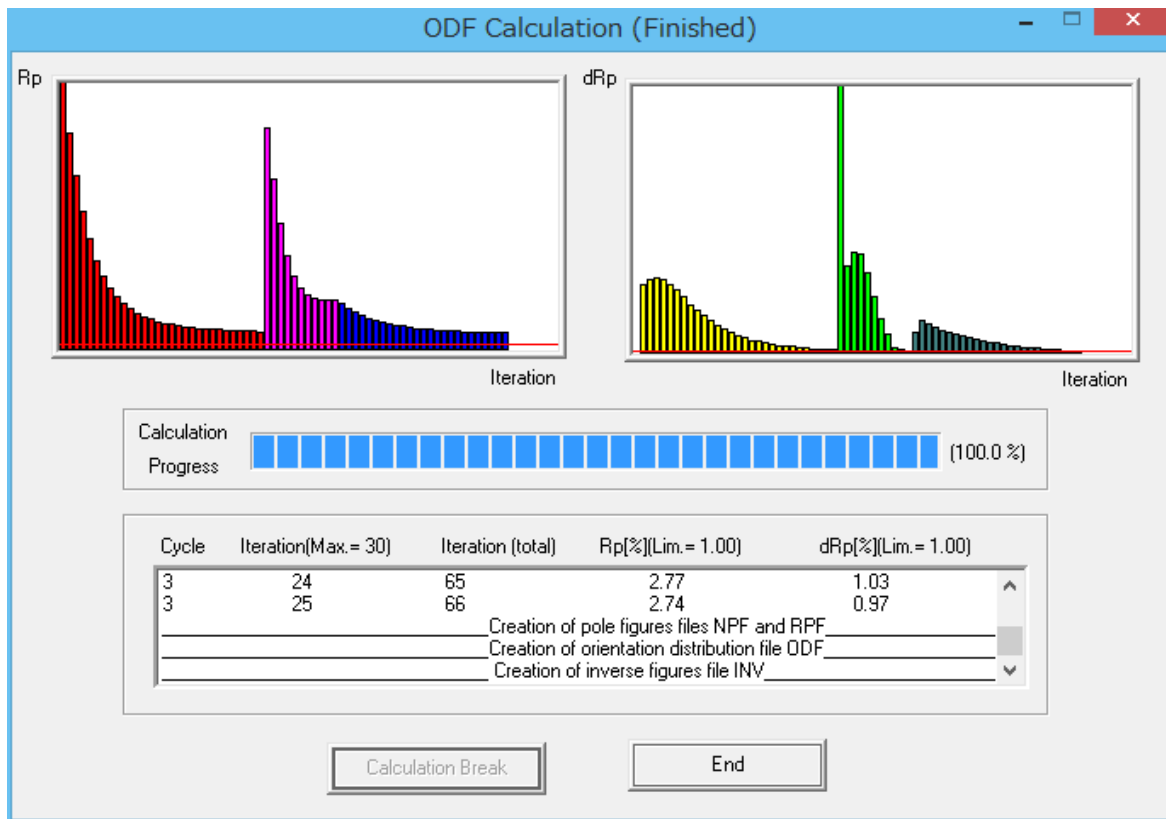
CTRで評価



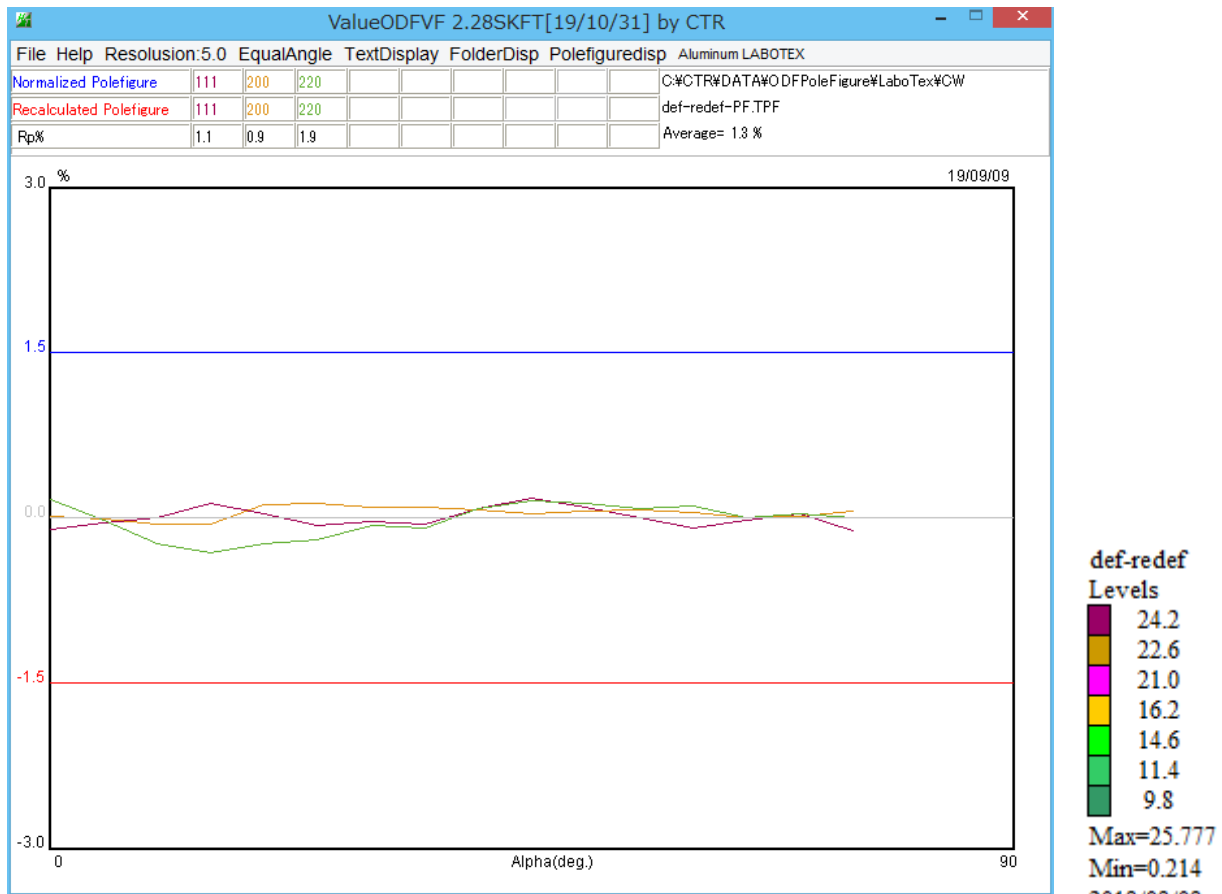
# 10.4 defocus補正あり+再defocus処理



LaboTexで処理



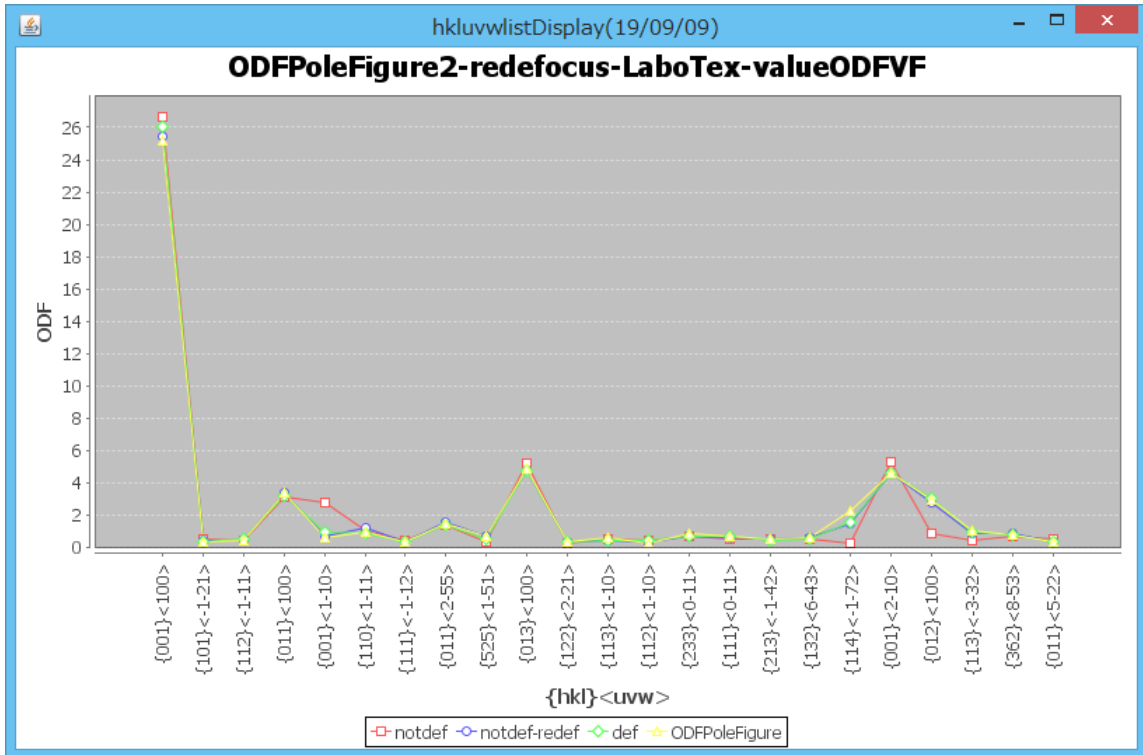
CTRで評価



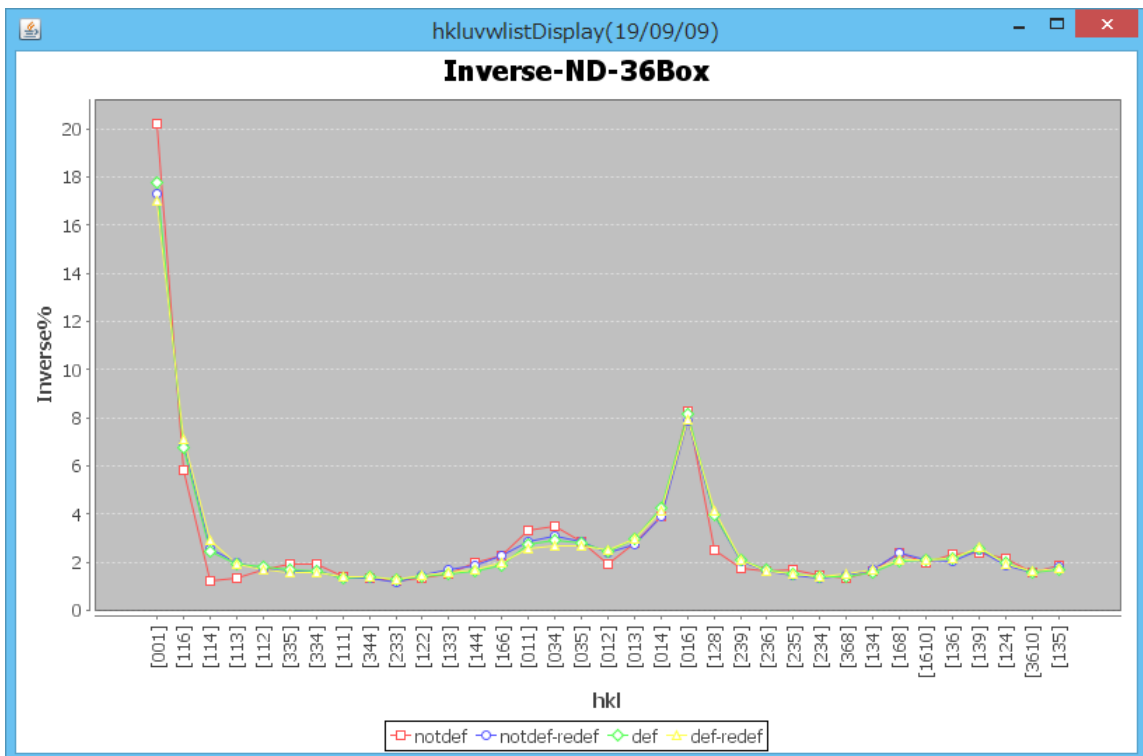
10.5 データまとめ

ODFPoleFigure2	LaboTex				ValueODFVF
	Rp%	Rp%	dR%	ODFMax	Rp%
defocus補正なし	12.6	13.21	0.64	26.915	10.9
defocus補正なし+再defocus	4.5	5.34	0.95	25.847	3.8
defocus補正あり	5	5.27	0.93	26.576	3.7
defocus補正あり+再defocus	5	2.74	0.97	25.777	1.3

ODF 方位密度プロファイル



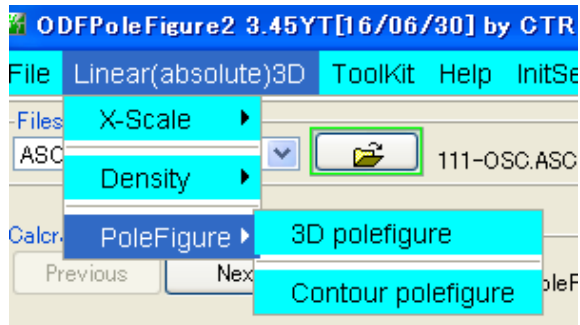
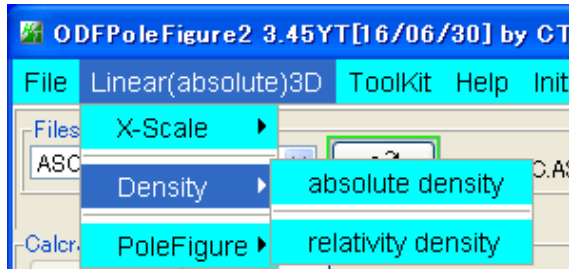
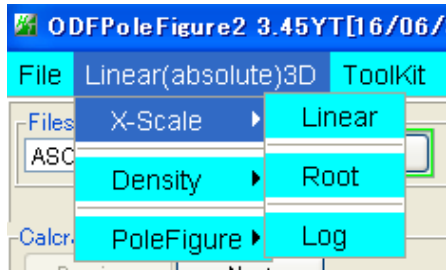
逆極点図 36 Box プロファイル



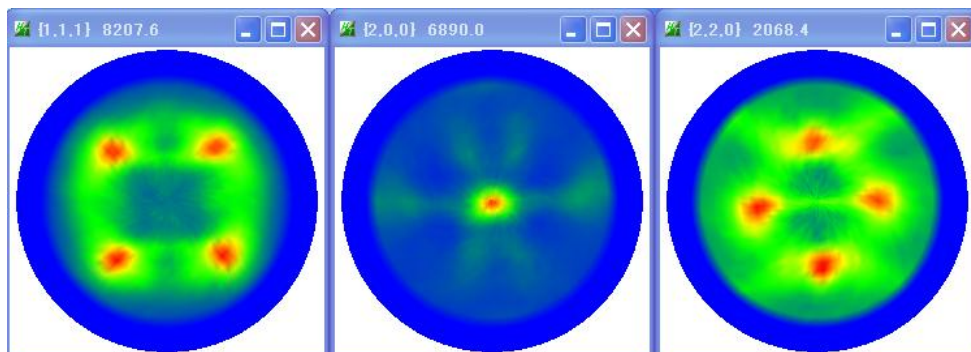
defocus 補正なし以外はおぼ一致します。

# 1 1. 極点図の3D表示、等高線表示

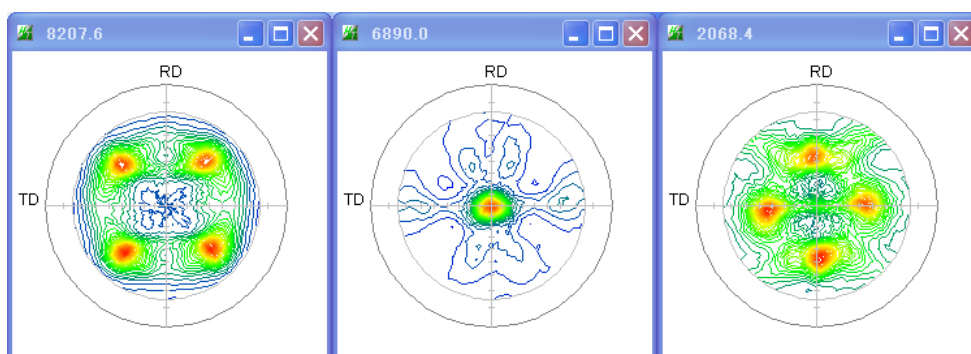
極点図表示切り替え部



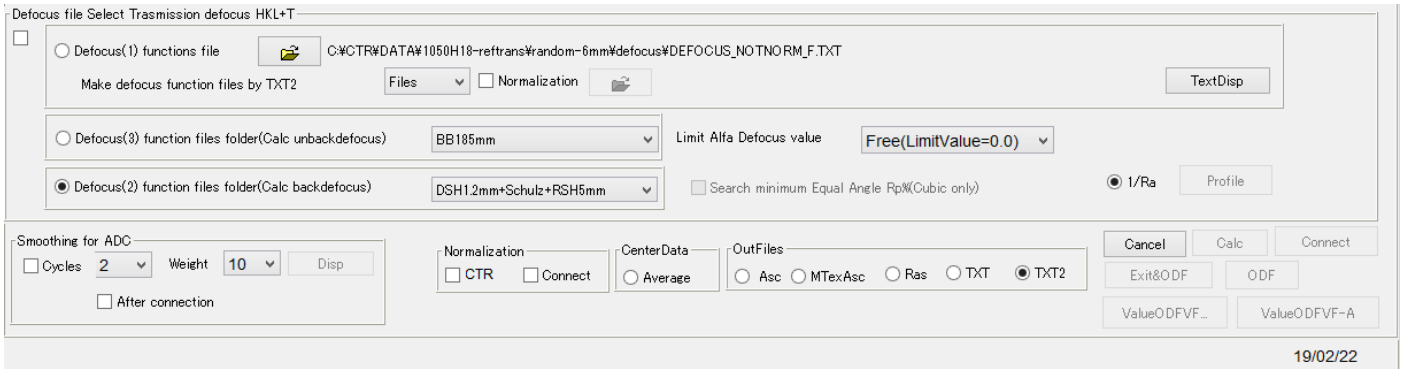
## Linear(absolute)3D



## Linear(absolute)Contour



## 12. 処理結果のError評価



最適化Rp%後ValueODFVF-AでError評価していたがRp%チェックなしでも、Error評価が可能になりました。

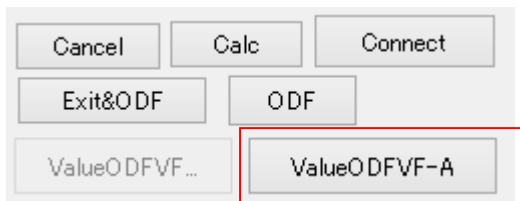


反射法Calc後のError評価

透過極点図と反射極点図処理後



データの接続



データ接続後、Error評価

付録 (データフォーマット)

F-1 R i g a k u社ASCデータ

```

*TYPE          = Raw
*CLASS         = Polefig
*SAMPLE        =
*COMMENT       = 反射α=15.000
*FNAME         = 111-7mm.raw
*DATE          = 22-Feb-11 08:22

*GROUP_COUNT   = 1
*GONIO         = RINT2000 広角コンヒオメータ, 185
*ATTACHMENT    = 極点用多目的試料台
*ASC           = 0, 0, 0.000000, 0.000000
*FILTER        = Kβフィルター
*SLIT_NAME     = 0, 発散スリット
*SLIT_NAME     = 1, 散乱スリット
*SLIT_NAME     = 2, 受光スリット
*SLIT_NAME     = 3, 発散縦制限スリット
*COUNTER       = シンチレーションカウンタ, 0
*POS_FORMAT    = 0
*SCAN_AXIS     = beta
*MEAS_MODE     = Continuous Scanning
*TARGET        = 29
*XRAY_CHAR     = K-ALPHA1
*WAVE_LENGTH1  = 1.54056
*WAVE_LENGTH2  = 1.5444
*THICKNESS     = 0, 0.000000
*MU            = 0, 0.000000
*SCAN_MODE     = beta
*SPEED_DIM     = sec./step
*XUNIT         = deg.
*YUNIT         = counts
*SCALE_MODE    = 1
*REP_COUNT     = 1
*SE_COUNT      = 0
*STD_MATERIAL  = Unknown, Unknown, 0.000000, 0.000000, 0.000000, 0.000000, 0.000000, 0.000000
*LATT_CONS     = 0, Cubic, Unknown, 0.000000, 0.000000, 0.000000, 0.000000, 0.000000, 0.000000
*SEC_COUNT     = 16
*TSPEC_SIZE    = 0
*EXTRA_SIZE    = 0
*PF_MEASUR    = Coaxial circle scan

*SPEED_DIM     = sec./step
*XUNIT         = deg.
*YUNIT         = counts
*SCALE_MODE    = 1
*REP_COUNT     = 1
*SE_COUNT      = 0
*STD_MATERIAL  = Unknown, Unknown, 0.000000, 0.000000, 0.000000, 0.000000, 0.000000, 0.000000
*LATT_CONS     = 0, Cubic, Unknown, 0.000000, 0.000000, 0.000000, 0.000000, 0.000000, 0.000000
*SEC_COUNT     = 16
*TSPEC_SIZE    = 0
*EXTRA_SIZE    = 0
*PF_MEASUR    = Coaxial circle scan
*PF_DATATYPE   = Integral intensity
*PF_METHOD     = 0, Unknown
*PF_METHOD     = 1, Schulz reflection method
*PF_PCOUNT    = 0, 0
*PF_PCOUNT    = 1, 16
*PF_ASTART     = 0, 0.000000
*PF_ASTART     = 1, 15
*PF_ASTOP      = 0, 50
*PF_ASTOP      = 1, 90
*PF_ASTEP      = 0, 5
*PF_ASTEP      = 1, 5
*PF_ASPEED     = 0, 0.000000
*PF_ASPEED     = 1, 0.000000
*PF_GAMMA      = 0, 20
*PF_GAMMA      = 1, 20
*PF_2THANGLE   = 0, 17.5
*PF_2THANGLE   = 1, 38.46
*PF_2THSTART   = 0, 0.000000
*PF_2THSTART   = 1, 0.000000
*PF_2THSTOP    = 0, 0.000000
*PF_2THSTOP    = 1, 0.000000
*PF_2THSTEP    = 0, 0.000000
*PF_2THSTEP    = 1, 0.000000
*PF_ASPEED     = 0, 0.000000
*PF_ASPEED     = 1, 0.000000
*MEMO          =
    
```



F-2 Bruker社 Uxdデータ

---

```
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↓
SOLLER_SLITS='N'↓
FIXED_DETSLIT=0.000000↓
MONOCHROMATOR=0↓
; None↓
THIN_FILM='N'↓
BETA_FILTER='N'↓
FIXED_ANTISLIT=1.000000↓
ANALYZER_CODE=0↓
; None↓
DATEMEASURED='07-Oct-2008 13:17:26'↓
WL_UNIT='A'↓
WL1=1.540600↓
WL2=1.544390↓
WL3=1.392220↓
WLRATIO=0.500000↓
ANODE='Cu'↓
; (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↓
TIMESTARTED=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)↓

```

F - 3 Bruker社、Uxdデータ (データ処理結果)

```

[SAMPLE= MultTex Area to *.uxd: 111.uxd↓
WL=0=↓
WL=1=↓
WL=2=↓
; (Data for Range number 1)↓
DRIVE='PHI'↓
STEPWISE=5.000000↓
START=0.000000↓
2THETA=43.431953↓
THETA=21.715976↓
KHI=0.000000↓
PHI=0.000000↓
COUNTS↓
  8241      8241      8241      8241      8241      8241      8241      8241↓
  8241      8241      8241      8241      8241      8241      8241      8241↓
  8241      8241      8241      8241      8241      8241      8241      8241↓
  8241      8241      8241      8241      8241      8241      8241      8241↓
  8241      8241      8241      8241      8241      8241      8241      8241↓
  8241      8241      8241      8241      8241      8241      8241      8241↓
  8241      8241      8241      8241      8241      8241      8241      8241↓
  8241      8241      8241      8241      8241      8241      8241      8241↓
; (Data for Range number 2)↓
DRIVE='PHI'↓
STEPWISE=5.000000↓
START=0.000000↓
2THETA=43.431953↓
THETA=21.715976↓
KHI=5.000000↓
PHI=0.000000↓
COUNTS↓
  7689      7502      7876      7414      7984      7496      7764      7625↓
  7998      7388      7512      7461      7853      7842      7591      7670↓
  7761      7546      7927      8359      8391      8420      8110      7922↓
  7604      6980      7143      7354      7553      7392      7327      7092↓
  7184      7204      7361      7459      7801      7758      8424      8229↓
  8977      8577      9616      8058      9761      8442      9771      8248↓
  9333      9292      9518      9776      9506      9631      9333      9119↓
  9320      9236      9244      9120      9210      8836      8833      8831↓
  9029      8592      8727      8239      8310      8105      7663      7695↓

```

```

; (Data for Range number 3)↓
_DRIVE='PHI'↓
_STEPSIZE=5.000000↓
_START=0.000000↓
_2THETA=43.431953↓
_THETA=21.715976↓
_KHI=10.000000↓
_PHI=0.000000↓
_COUNTS↓
  8054    8216    7189    7239    7453    8359    6686    8312↓
  8207    8509    8359    10330   9806    10322   10280   10734↓
  11166   10653   10903   10876   10771   10221   10369   10243↓
  10345   8894    9462    9483    9304    8821    8777    7556↓
  7469    6735    7575    7763    8170    8455    9249    8885↓
  9476    10168   11077   11919   11735   13064   12765   13096↓
  13150   13145   13319   13402   13401   13374   13265   13726↓
  13783   13291   13099   13098   13174   12863   12637   12187↓
  12035   11587   11211   10269   9744    9356    8553    8064↓
; (Data for Range number 4)↓
_DRIVE='PHI'↓
_STEPSIZE=5.000000↓
_START=0.000000↓
_2THETA=43.431953↓
_THETA=21.715976↓
_KHI=15.000000↓
_PHI=0.000000↓
_COUNTS↓
  8285    7958    7752    8144    8931    9065    9812    11311↓
  11651   12940   13843   13650   14221   13748   14304   13516↓
  14414   14065   14537   13890   13913   13692   13886   13672↓
  13489   13134   12981   12520   11461   10304   9728    8640↓
  8149    6250    8376    7945    8147    8246   10028   10499↓
  12232   12810   14499   15018   15046   15464   15275   16325↓
  15744   15162   15309   14705   14749   14744   14518   14626↓
  14970   14884   15032   15289   15434   15504   15458   15115↓
  14710   14015   13102   12014   10848   9526    8592    7982↓

```

F-4 Bruker社 Multex3 popLA (raw)

測定されていない領域に0、あるいは1が登録されている。



```

111 psi pole figure data converted with GADDS-WNT V4
(111) 5.0 80.0 5.0360.0 1 1 1 2 3 100 0↓
27 27 27 27 27 27 27 27 27 27 27 27 27 27 27 27 27↓
27 27 27 27 27 27 27 27 27 27 27 27 27 27 27 27 27↓
27 27 27 27 27 27 27 27 27 27 27 27 27 27 27 27 27↓
27 27 27 27 27 27 27 27 27 27 27 27 27 27 27 27 27↓
29 27 27 27 29 32 35 35 31 28 26 26 28 33 35 35 34 33↓
33 31 28 28 29 30 28 25 25 27 27 26 26 25 26 28 30 33↓
36 36 38 40 42 43 44 48 49 46 51 56 57 65 65 64 63 70↓
72 72 66 66 65 66 57 60 60 58 59 55 52 40 36 33 30 29↓
29 27 27 26 27 34 44 48 57 53 53 66 77 75 69 83 82 82↓
82 98 105 79 63 66 60 56 56 44 37 34 36 34 26 24 29 31↓
29 30 37 45 56 74 90 94 109 132 162 170 169 157 141 153 189 176↓
167 165 151 154 151 167 169 151 138 108 98 77 62 50 40 53 55 33↓
24 31 24 23 32 38 48 65 89 118 133 166 160 153 156 155 138 158↓
174 196 157 199 205 199 196 214 171 100 92 73 48 45 41 28 34 45↓
37 31 32 45 76 108 127 171 206 192 205 189 199 187 170 175 170 159↓
139 147 156 154 170 176 201 241 207 226 191 202 160 123 87 50 26 21↓
21 19 27 39 31 59 86 109 150 192 193 189 181 150 154 144 113 128↓
151 142 138 139 144 244 189 176 182 180 109 97 79 57 37 41 29 34↓
28 34 41 61 90 137 166 176 159 148 126 113 128 112 140 143 129 180↓
116 103 99 132 104 113 134 112 156 209 178 181 137 98 66 68 31 27↓
25 37 37 30 52 45 90 109 129 134 133 126 121 116 129 112 113 130↓
134 119 124 120 133 157 130 140 134 117 137 166 119 62 47 39 32 36↓
33 38 44 58 85 98 114 122 130 125 144 124 111 151 114 127 89 82↓
106 88 112 102 118 110 112 107 179 125 92 107 111 77 66 49 43 24↓
39 28 30 47 45 45 73 75 117 92 113 110 111 111 121 93 87 84↓
94 89 97 95 100 135 143 124 131 112 93 88 44 45 32 40 51 49↓
43 46 44 56 64 76 117 122 109 115 127 117 98 89 89 82 80 93↓
91 105 85 76 83 124 86 98 141 95 109 94 53 66 58 40 40 36↓
59 78 47 45 41 35 57 99 91 126 160 152 99 94 92 96 93 77↓
79 101 79 90 79 120 132 157 123 111 92 105 72 33 40 48 67 77↓
67 78 71 43 47 58 73 106 109 120 135 139 118 94 100 108 104 101↓
103 106 87 82 83 99 122 103 111 92 128 113 78 60 47 31 51 53↓
80 83 72 68 66 55 61 91 117 127 119 119 108 105 95 130 104 84↓
86 91 96 105 126 132 103 100 100 119 106 71 45 49 41 68 110 126↓
97 106 66 39 39 71 85 84 104 163 132 159 145 124 79 100 92 100↓
121 103 91 98 78 88 77 133 116 140 152 98 79 63 50 59 72 82↓
110 125 101 65 57 61 55 70 105 119 141 155 133 106 104 99 94 104↓
120 129 115 101 100 99 151 203 117 125 115 69 52 54 51 71 137 134↓
146 105 58 73 59 78 84 97 163 284 270 188 104 90 85 47 61 86↓
71 63 94 75 84 57 77 113 246 201 126 158 96 70 56 59 74 102↓
111 93 89 66 57 65 58 90 117 181 338 290 141 80 84 86 74 74↓
76 73 80 81 75 94 145 269 305 330 214 75 57 58 68 69 115 108↓
113 98 69 80 74 86 107 175 370 438 273 156 50 56 35 38 48 33↓
33 35 32 36 46 49 59 126 295 441 304 164 131 66 51 63 78 112↓
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0↓
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0↓

0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0↓
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0↓
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0↓
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0↓
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0↓
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0↓
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0↓
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0↓
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0↓
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0↓
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0↓
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0↓
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0↓
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0↓
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0↓
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0↓
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0↓
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0↓
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0↓
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0↓
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0↓
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0↓
↓ [EOF]

```

```

File: X:\David\Freiberg\NIR700-111\XpertData\70111c.rw1
Sample: DG-NIWR-700-C/1h
Created: 21-Jul-2006 21:30
Type: Raw pole figure
Origin: Exported by X'Pert SW; hkl:1 1 1

Goniometer radius (mm): 320
Sample stage: Other
Receiving slit (mm): 1.00
Divergence slit (mm): 0.00
Distance focus mask (mm): 145
X-ray tube anode: Unknown
Tube focus: Generator (kV):
Generator (kV): 40
Generator (mA): 40
Wavelength (A): 1.5406

Start End Step
Psi: 0.00 75.00 2.50
Phi: 0.00 360.00 2.50

hkl: 1 1 1

2Theta (-): 44.0830
Time per step (s): 0.80
Sample oscillation (mm): 0

Phi\Psi 0.00 2.50 5.00 7.50 10.00 12.50 15.00 17.50 20.00 22.50 25.00 27.50
1.25 2.45 2.45 7.20 3.61 5.00 17.11 24.20 51.20 96.80 90.31 28.80 20.00
3.75 5.00 1.25 7.20 8.45 7.20 16.20 40.61 72.20 63.01 110.45 63.01 17.11
6.25 3.61 6.05 2.45 6.05 9.80 21.01 54.45 63.01 63.01 112.81 76.05 24.20
8.75 6.05 6.05 6.05 7.20 13.61 20.00 39.20 45.00 80.00 110.45 48.05 30.01
11.25 6.05 5.00 6.05 8.45 11.25 12.80 22.05 78.01 92.45 99.01 63.01 35.11
13.75 3.61 5.00 5.00 1.25 12.80 17.11 27.61 46.51 92.45 84.05 57.80 30.01
16.25 5.00 2.45 1.25 7.20 13.61 16.20 32.51 64.80 74.11 82.01 57.80 31.25
18.75 3.61 3.61 3.61 6.05 13.61 25.31 48.05 56.11 63.01 59.51 66.61 51.20
21.25 1.25 9.80 2.45 13.61 15.31 21.01 42.05 54.45 49.61 70.31 36.45 42.05
23.75 6.05 5.00 2.45 2.45 12.80 25.31 37.81 49.61 40.61 52.81 40.61 33.80
26.25 2.45 2.45 5.00 2.45 6.05 15.31 32.51 43.51 36.45 28.80 54.45 28.80
28.75 5.00 2.45 3.61 8.45 6.05 12.80 49.61 66.61 54.45 43.51 35.11 27.61
31.25 5.00 2.45 3.61 7.20 8.45 8.45 33.80 45.00 43.51 78.01 40.61 35.11
33.75 5.00 3.61 3.61 3.61 9.80 20.00 36.45 66.61 36.45 36.45 42.05 61.25
36.25 1.25 5.00 6.05 7.20 11.25 13.61 31.25 57.80 63.01 88.20 40.61 35.11
38.75 3.61 3.61 11.25 11.25 8.45 17.11 39.20 63.01 82.01 66.61 48.05 36.45

```

```

<?xml version="1.0" encoding="UTF-8"?>↓
<xrdMeasurements xmlns="http://www.xrdml.com/XRDMeasurement/1.2" xmlns:xsi="http
://www.w3.org/2001/XMLSchema-instance" xsi:schemaLocation="http://www.xrdml.com/
XRDMeasurement/1.2 http://www.xrdml.com/XRDMeasurement/1.2/XRDMeasurement.xsd" s
tatus="Completed">↓
  <comment>↓
    <entry>Configuration=MRD SW - All Optics, Owner=User-1, Creation
date=9/5/2005 1:49:22 PM</entry>↓
    <entry>Goniometer=PW3050/65 (Theta/2Theta); Minimum step size 2T
heta:0.001; Minimum step size Omega:0.001</entry>↓
    <entry>Sample stage=MRD Cradle; Minimum step size Phi:0.01; Mini
mum step size Psi:0.01; Minimum step size X:0.01; Minimum step size Y:0.01; Mini
mum step size Z:0.001</entry>↓
    <entry>Diffractometer system=XPERT-PRO</entry>↓
    <entry>Measurement program=Cu-111 Standard Tex-Pol-C 3degree, Ow
ner=User-1, Creation date=9/16/2005 2:29:49 PM</entry>↓
  </comment>↓
  <sample type="To be analyzed">↓
    <id>Copper</id>↓
    <name>Cu Texture Standard</name>↓
    <preparedBy>PANalytical BV</preparedBy>↓
  </sample>↓
  <xrdMeasurement measurementType="Texture pole figure" status="Completed"
measurementStepAxis="Psi">↓
    <comment>↓
      <entry/>↓
    </comment>↓
    <usedWavelength intended="K-Alpha 1">↓
      <kAlpha1 unit="Angstrom">1.5405980</kAlpha1>↓
      <kAlpha2 unit="Angstrom">1.5444260</kAlpha2>↓
      <kBeta unit="Angstrom">1.3922500</kBeta>↓
      <ratioKAlpha2KAlpha1>0.5000</ratioKAlpha2KAlpha1>↓
    </usedWavelength>↓
    <incidentBeamPath>↓
      <radius unit="mm">320.00</radius>↓
      <xRayTube id="1010048" name="PW3373/10 Cu LFF DK147424">
        <tension unit="kV">45</tension>↓
        <current unit="mA">40</current>↓
        <anodeMaterial>Cu</anodeMaterial>↓
        <focus type="Line">↓
          <length unit="mm">12.0</length>↓
          <width unit="mm">0.4</width>↓
          <takeOffAngle unit="deg">6.0</takeOffAng
le>↓

```

