

PANalyticalデータをAscデータに変換

PAN to Asc ソフトウェア

Ver.1.11

2025年05月04日

HelperTex Office

概要

PANalyticalシステムで測定したデータから各種ODF解析する場合、CTRソフトウェアに取り込めれば、従来の資産をそのまま利用出来るのでメリットが多い。CTRソフトウェアの核となる ODFPoleFigure2 ソフトウェアは、Asc データを読み込むため、PANalyticalのデータを Asc 変換する。データとしては、MTEX で公開しているデータを使う。

Mtex-1.1\data\philips

 NiR-700-111.txt	42 KB	テキスト文書
 NiR-700-200.txt	46 KB	テキスト文書
 NiR-700-220.txt	42 KB	テキスト文書

Mtex-3.0\data\PoleFigureData

 philips-111.txt	261 KB	テキスト文書
 xrdml.xrdml	71 KB	XRDML ファイル

DataFormat

NiR-700-111.txt

File:	X:\David\Freiberg\NiR700-111\XpertData\70111c.nw1															
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 (Å):	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	30.00	32.50	35.00	37.50
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	26.45	22.05	13.61	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	17.11	39.20	25.31	12.80
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	17.11	21.01	24.20	30.01

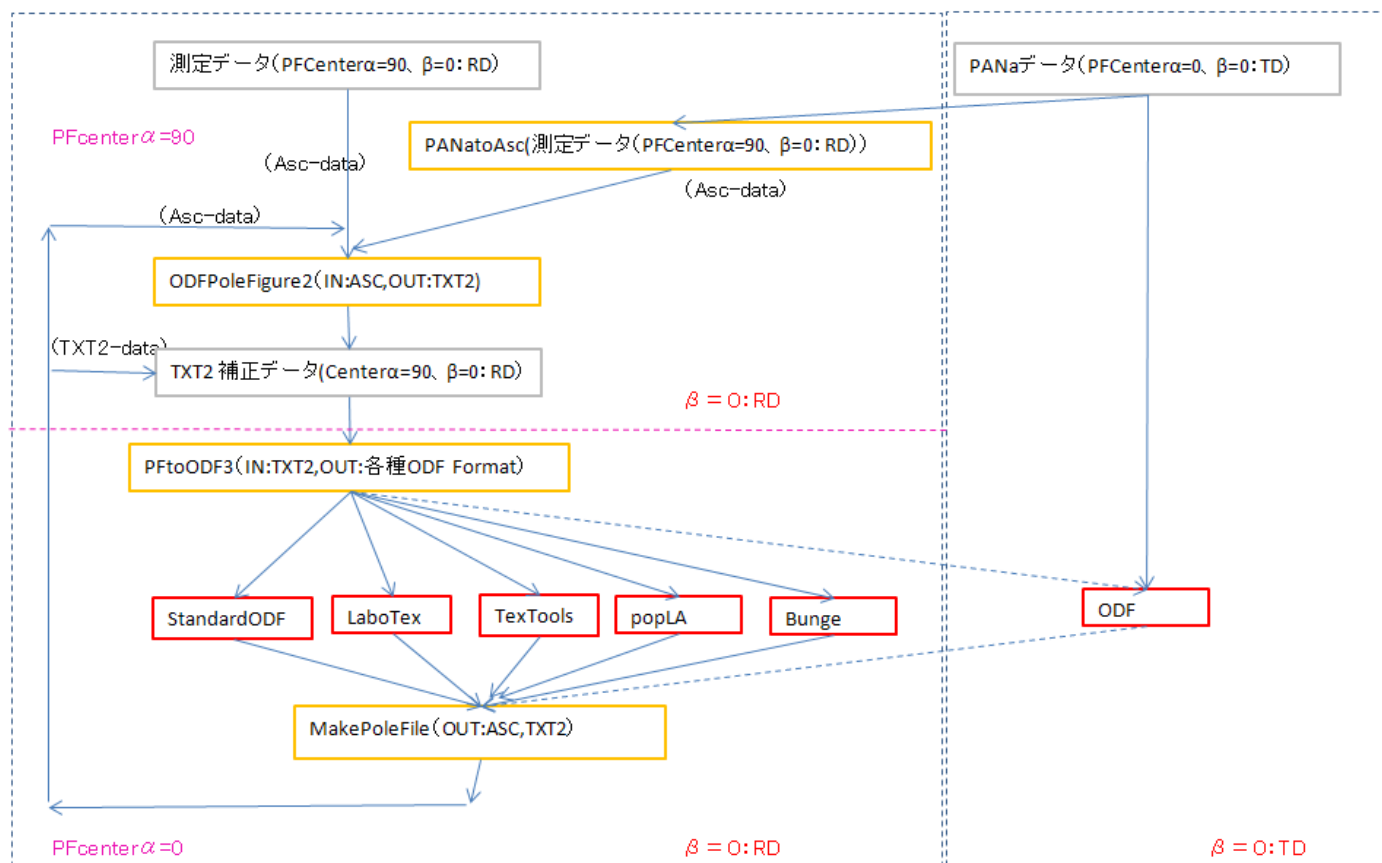
横に α 軸

縦に β 軸 (Scanした中心角度)

XRDMLFormat

```
Text Display 1.16S
File Help
<?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" status="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 2Theta 0.001; Minimum step size Omega 0.001</entry>
    <entry>Sample stage=MRD Cradle; Minimum step size Phi 0.01; Minimum step size Psi 0.01; Minimum step size X 0.01; Minimum step size Y 0.01; Minimum step size Z 0.001</entry>
    <entry>Diffractometer system=XPERT-PRO</entry>
    <entry>Measurement program=Cu-111 Standard Tex-Pol-C 3degree, Owner=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">
      <Alpha1 unit="Angstrom">1.5405980</Alpha1>
      <Alpha2 unit="Angstrom">1.5444260</Alpha2>
      <Beta unit="Angstrom">1.3922500</Beta>
      <ratio(Alpha2/Alpha1)>0.5000</ratio(Alpha2/Alpha1)>
    </usedWavelength>
    <incidentBeamPath>
      <radius unit="mm">320.00</radius>
      <RayTube 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</takeOffAngle>
        </focus>
      </RayTube>
      <filter id="20010004" name="Nickel">
        <material>Ni</material>
        <thickness unit="mm">0.020</thickness>
      </filter>
      <sollerSlit id="21010002" name="Soller 0.04 rad.">
        <opening unit="rad">0.0400</opening>
      </sollerSlit>
      <mask id="22080002" name="Inc. Mask Fixed 10 mm (MPD/MPD)">
        <distanceToSample unit="mm">220.00</distanceToSample>
        <width unit="mm">6.60</width>
      </mask>
      <divergenceSlit id="22010004" name="Slit Fixed 1/29-" xsi:type="fixedDivergenceSlitType">
        <distanceToSample unit="mm">225.00</distanceToSample>
        <height unit="mm">0.76</height>
      </divergenceSlit>
    </incidentBeamPath>
    <reflection>
      <hkl>
        <h>1</h>
        <k>1</k>
        <l>1</l>
      </hkl>
    </reflection>
    <dataPoints>
      <positions axis="2Theta" unit="deg">
        <commonPosition>43.249</commonPosition>
      </positions>
      <positions axis="Omega" unit="deg">
        <commonPosition>21.625</commonPosition>
      </positions>
      <positions axis="Phi" unit="deg">
        <startPosition>1.50</startPosition>
        <endPosition>358.50</endPosition>
      </positions>
      <positions axis="Psi" unit="deg">
        <commonPosition>0.00</commonPosition>
      </positions>
      <positions axis="X" unit="mm">
        <commonPosition>5.50</commonPosition>
      </positions>
      <positions axis="Y" unit="mm">
        <commonPosition>-37.00</commonPosition>
      </positions>
      <positions axis="Z" unit="mm">
        <commonPosition>3.001</commonPosition>
      </positions>
      <commonCountingTime unit="seconds">5.00</commonCountingTime>
      <intensities unit="counts">160142 159414 158835 158473 158293 159354 159482 158357 1
    </dataPoints>
  </xrdMeasurement>
</scan>
<scan appendNumber="0" mode="Continuous" scanAxis="Phi" status="Completed">
```

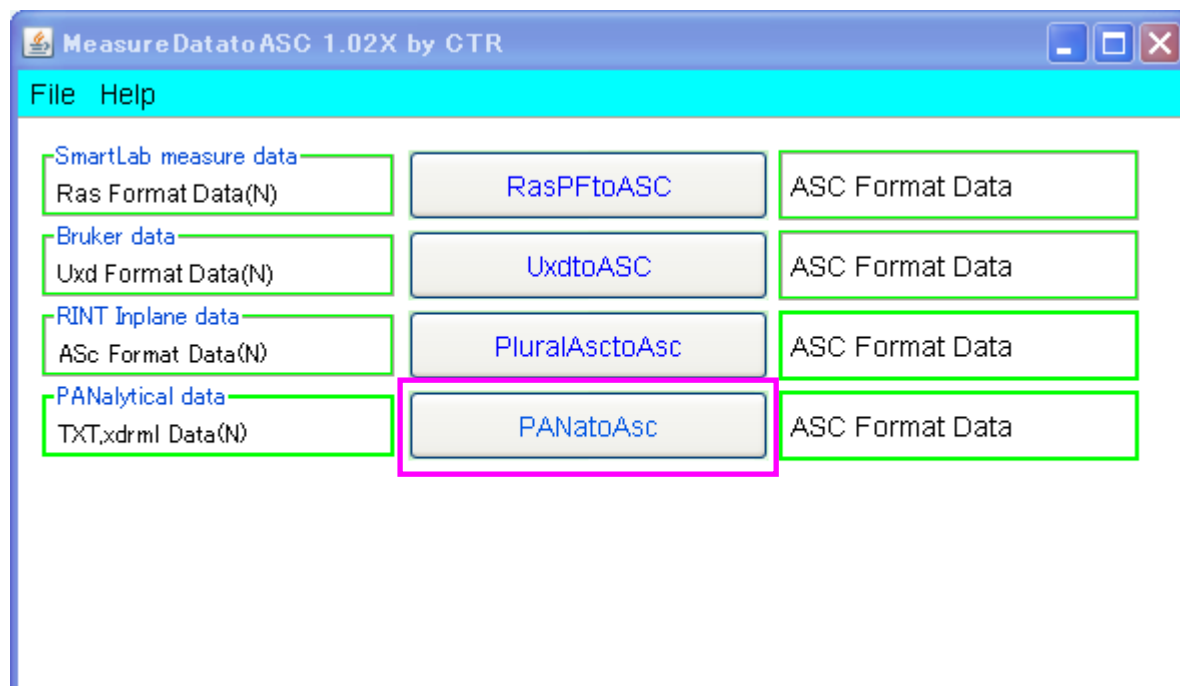
データの流れ



ソフトウェアの使い方

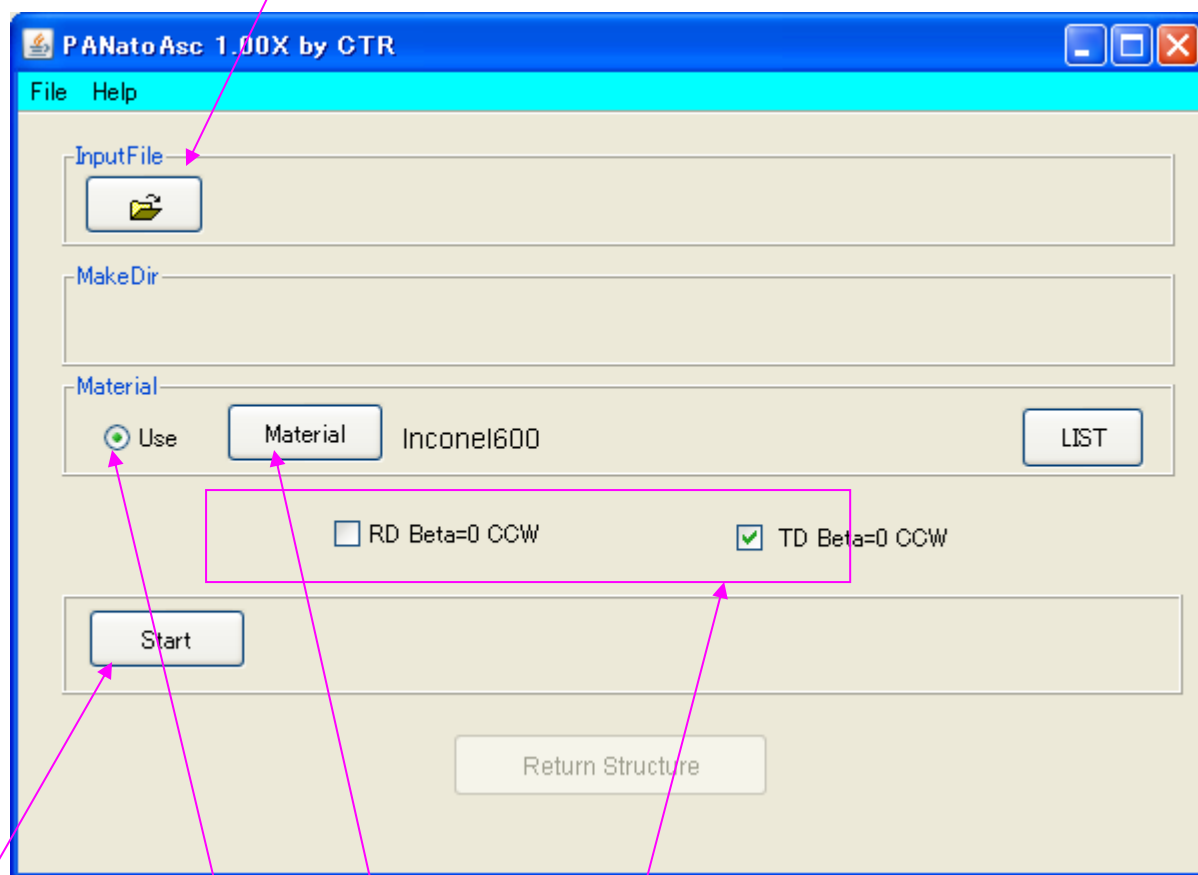
C:\¥CTR¥bin¥PANatoAsc.jar を起動

ODFPolefigure2->ToolKit->PANatoAsc をマウスクリック



PANa to Asc ソフトウェア画面

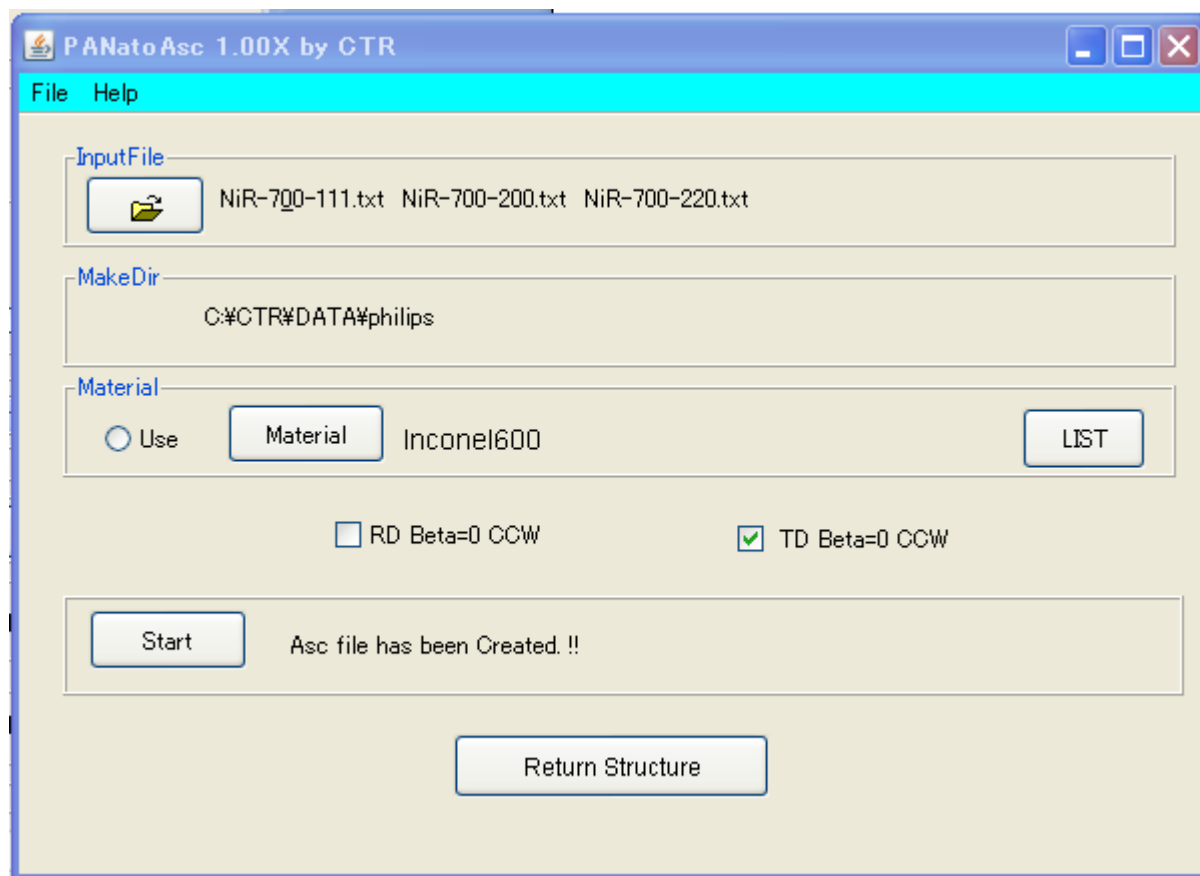
入力ファイル(複数も可能)を選択



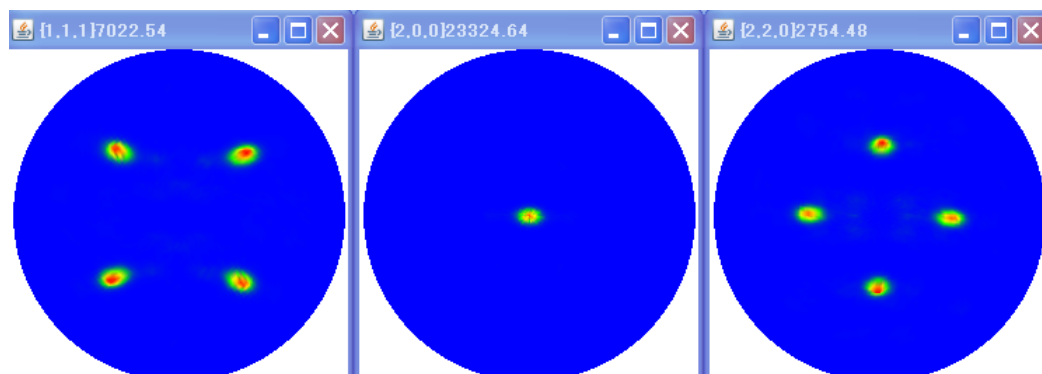
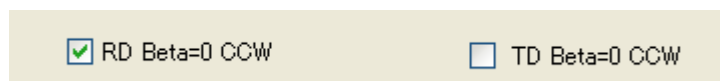
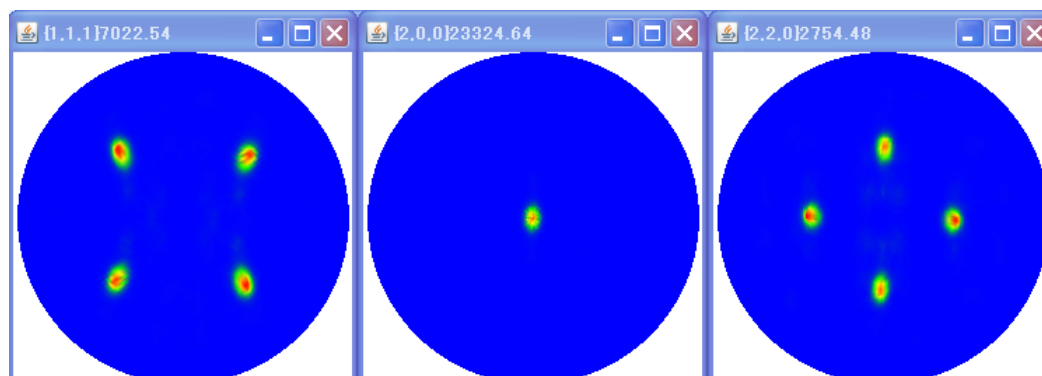
変換開始 指数自動変換機能 物質指定 β スタート角度指定

複数のファイル (TXあるいはx r d m l) をA S Cデータに変換する。
A S CデータのI N D E x 部分にM a t e r i a l データを使って指数の特定
 β スタート角度T D $\rightarrow$ R Dに変更する。

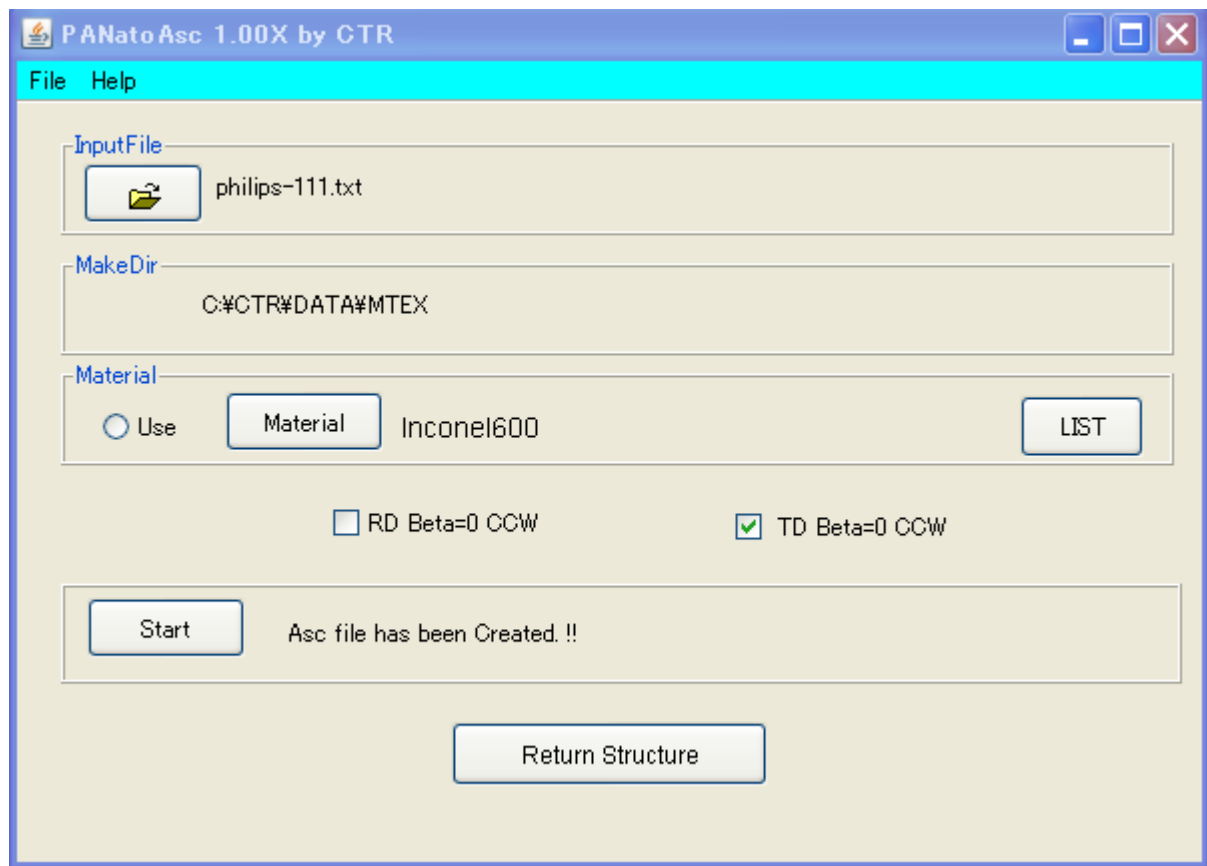
M t e x 1. 1 データを変換



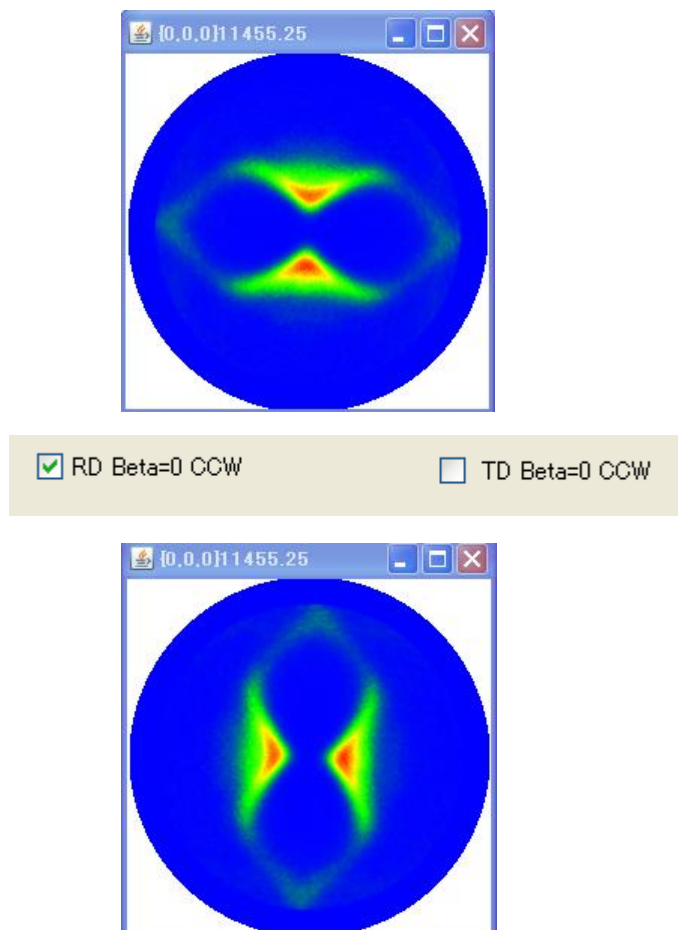
ODFPoleFigure2 ソフトウェアで読み込み



M t e x 3. 0 データを変換



ODFPoleFigure2 ソフトウェアで読み込み



多分、 $\beta = 0$ は TD 方向と想定されます。

指数付けの確認

TextDisplay 1.10S

File Help

File: C:\mtex\pol-voll\79-80-111.rw1

Sample:

Created: 25-Jan-2009 23:03

Type: Raw pole figure

Origin: Exported by X'Pert SW; hkl:0 0 0

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 (Å): 1.5406

Start End Step

Psi: 0.00 80.00 1.00

Phi: 0.00 360.00 1.00

hkl: 0 0 0

2Theta (°): 44.3000

Time per step (s): 0.20

Sample oscillation (mm): 0

Phi\Psi	0.00	1.00	2.00	3.00	4.00	5.00	6.00	7.00	8.00	9.00
0.50	5.00	20.00	14.45	5.00	0.00	5.00	5.00	0.00	9.80	0.00

入力データには指数が登録されていないが 2θ 角度情報があるので、この情報から指数を想定します。
登録情報は

Material

☒ Use Inconel600

1.54056

6

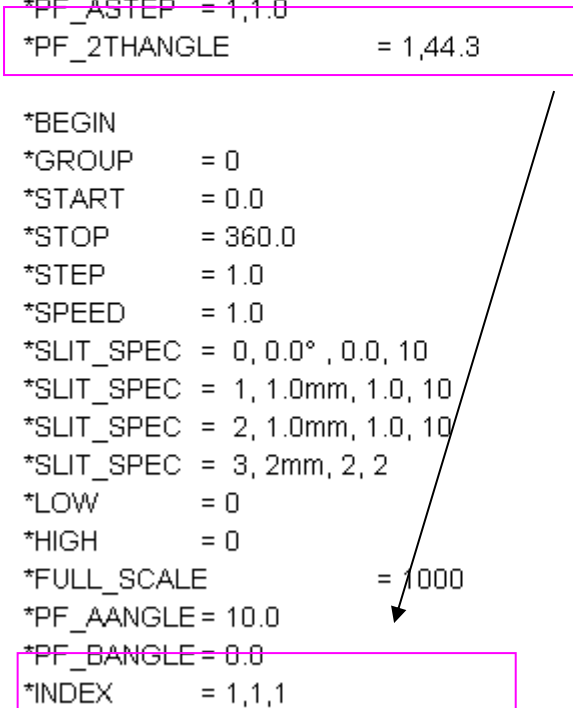
1	1	1	80.0	44.102
2	0	0	55.0	51.381
2	2	0	100.0	75.624
3	1	1	40.0	91.926
2	2	2	6.0	97.33
4	0	0	4.0	120.228

この情報から変換された ASC データは

ASC ファイル

```
*GROUP_COUNT      = 1
*MEAS_MODE        = Continuous Scanning
*SPEED_DIM = sec./step
*YUNIT            = counts
*PF_METHOD        = 1, Schulz reflection method
*PF_PCOUNT       = 1,81
*PF_ASTART = 1,10.0
*PF_ASTOP  = 1,90.0
*PF_ASTEPP = 1,1.0
*PF_2THANGLE      = 1,44.3

*BEGIN
*GROUP      = 0
*START      = 0.0
*STOP       = 360.0
*STEP       = 1.0
*SPEED      = 1.0
*SLIT_SPEC  = 0, 0.0°, 0.0, 10
*SLIT_SPEC  = 1, 1.0mm, 1.0, 10
*SLIT_SPEC  = 2, 1.0mm, 1.0, 10
*SLIT_SPEC  = 3, 2mm, 2, 2
*LOW        = 0
*HIGH       = 0
*FULL_SCALE      = 1000
*PF_ANGLE = 10.0
*PF_BANGLE = 0.0
*INDEX       = 1,1,1
*COUNT      = 361
578.125
336.125
```



指数が登録されます。