

U x d t o A S C ソフトウェアの使い方

Ver. 1.17

A S C ファイル名とデータ *INDEX に指数を取り込むため、MaterialDATA の取り込み
M T E X 付属の U x d フォーマットに対応 (データが縦に並ぶ)

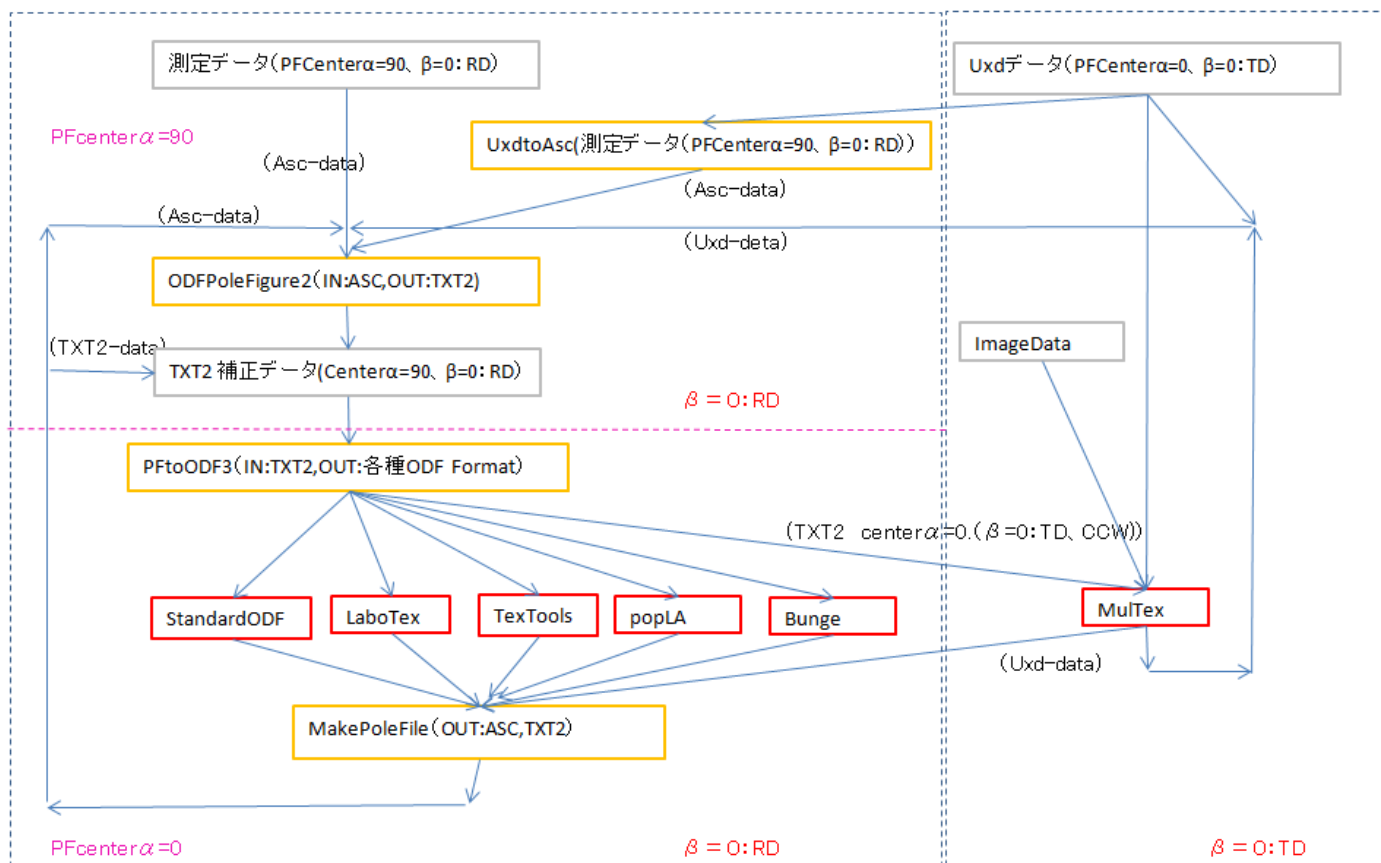
2021年09月12日



HelperTex Office

概要

Brucker社の極点データUXDテキストデータをリガクASCテキストデータに変換する。UXDテキストデータフォーマットには複数の種類が存在するようで全てのフォーマットをサポートしていません。以前、Brucker社のシステムを使われている方がStandardODFでODF解析する為に提供して頂いたデータ（複数のピーク極点図とバックグラウンドデータの組み合わせが結合されている）、MultiTexで極点解析したデータ（複数のピーク極点図）からLaboTexを解析する為に提供されたデータ、MTEXのデモデータ（複数のピーク極点図でバックグラウンドデータを含まない、強度データが縦に並ぶ）に対応しています。どのデータも指数情報が含まれていない為、Ascフォーマットの指数部分にMaterialDataプログラムを併用しています。



変換

複数のU X Dファイルを一括変換

変換後のA s cデータは対象ファイルのディレクトリに関連するディレクトリを作成し登録される。

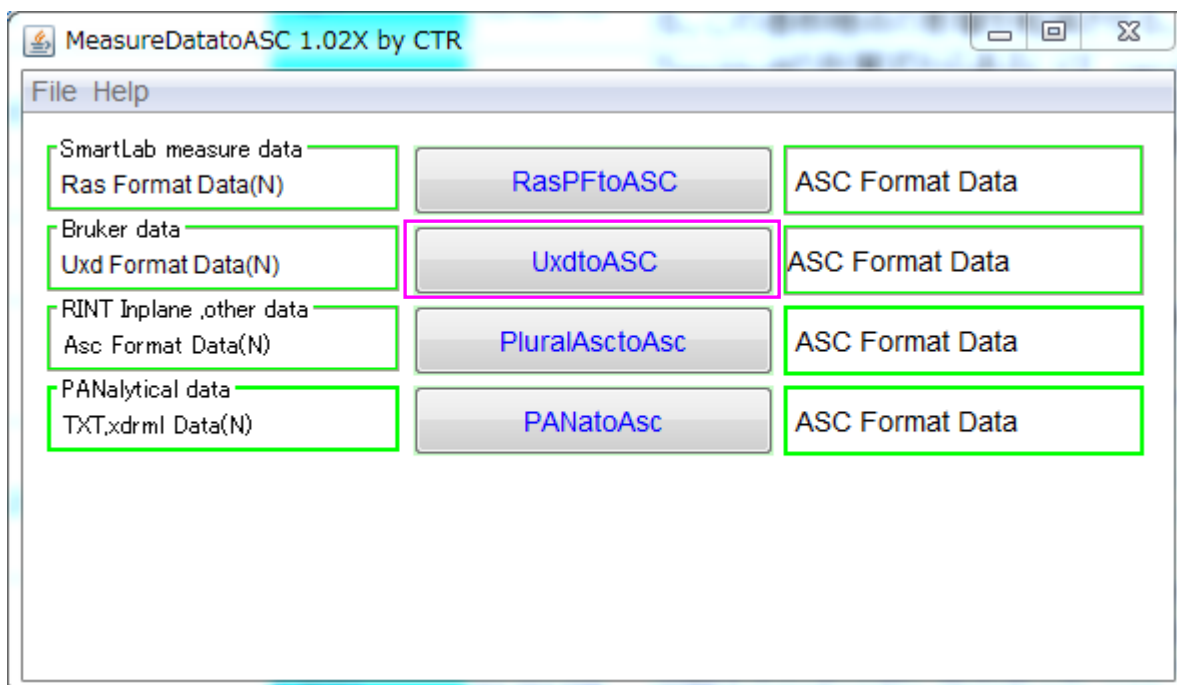
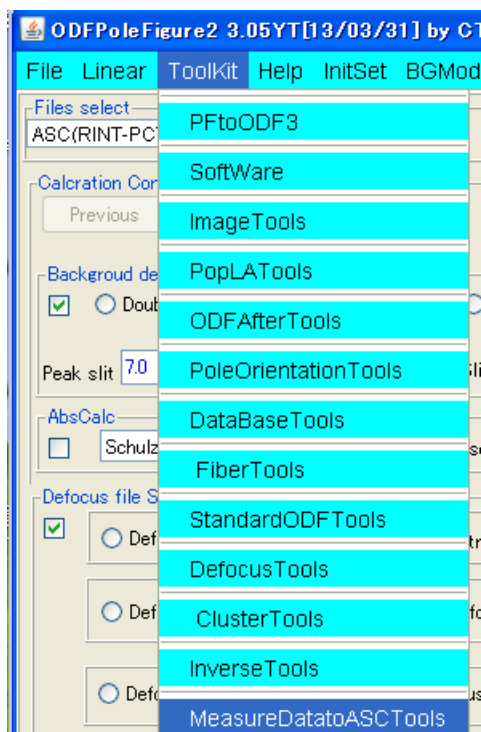
処理後はデータをc p s単位に書き換える。

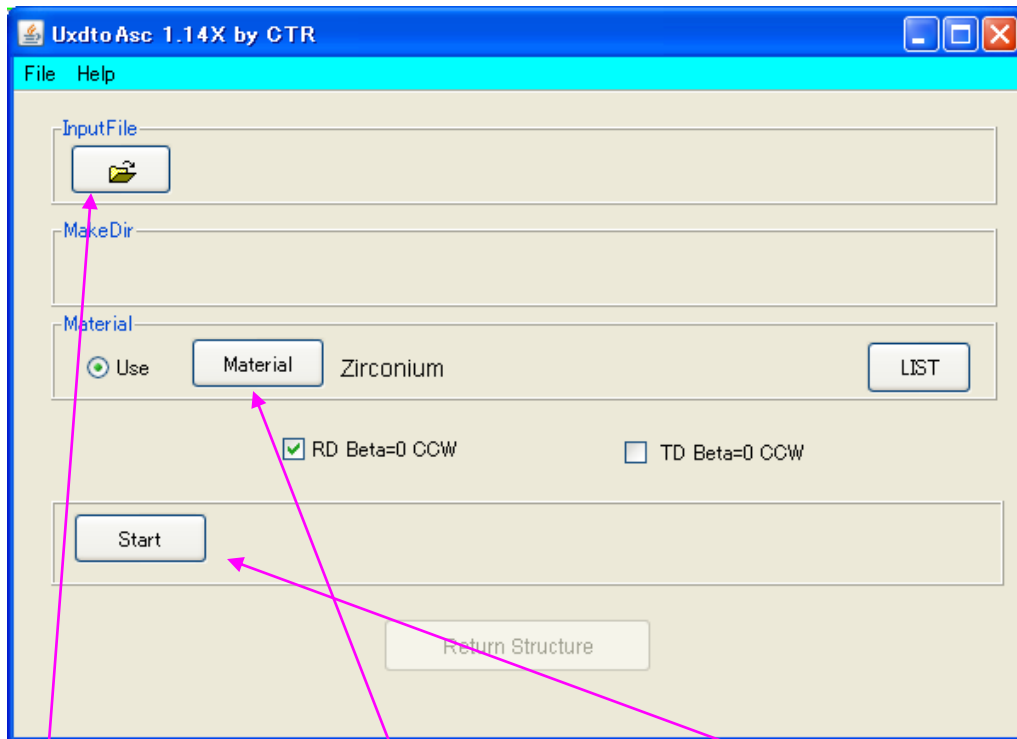
ピークデータとバックグラウンドデータをA S Cデータに書き換える。

A S Cデータはリガクの極点処理、あるいはODFPoleFigure2 ソフトウェアで処理が可能

ソフトウェアの起動

ODFPoleFigure2->ToolKit->MeasureDatatoASCTools->UxdtoAsc





ファイル選択

指数変換の為に材料を選択する。 変換の実行



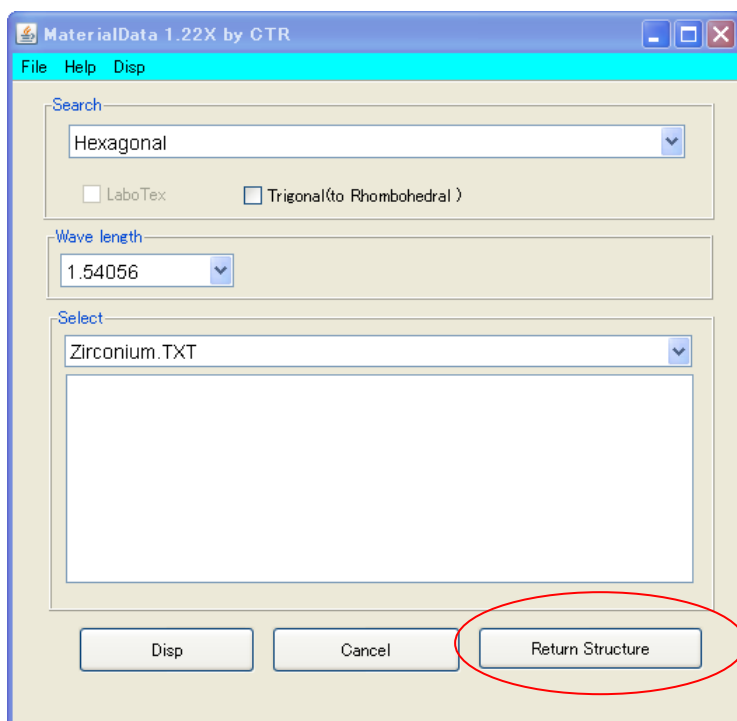
で処理を行うファイルを選択（複数選択可能）

選択と同時にファイル名表示と処理結果を登録するディレクトリを表示
物質情報を指定により指数を決定



A s cファイルの INDEX 部分に指数登録とファイル名に指数を取り込む

被検材料の選択

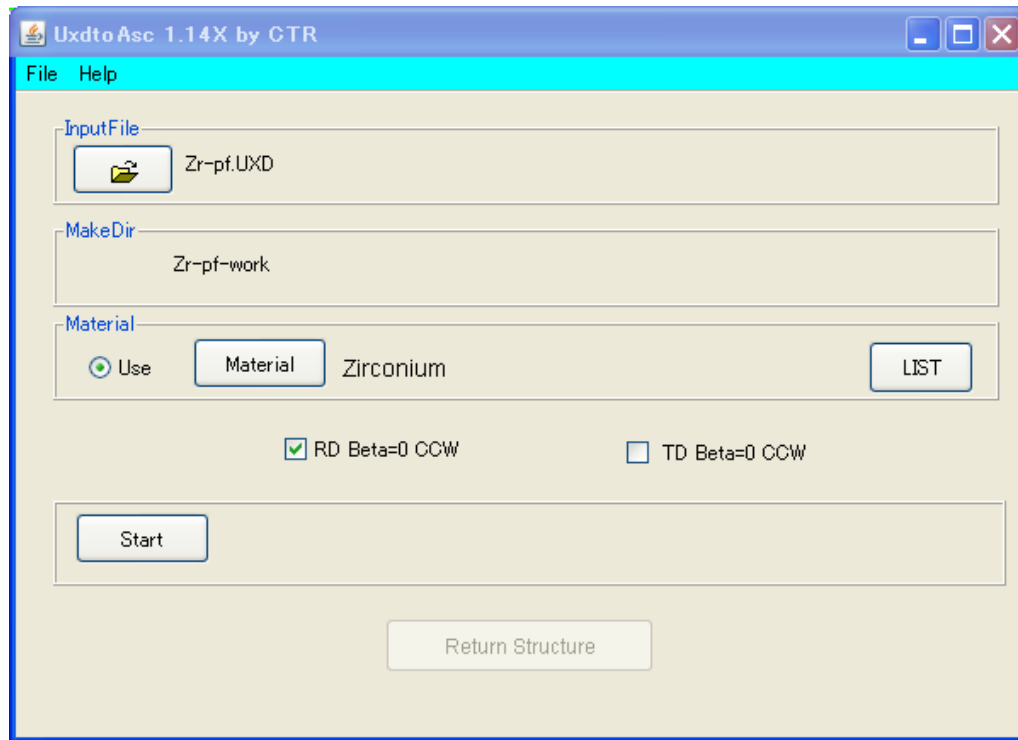


変換の実例

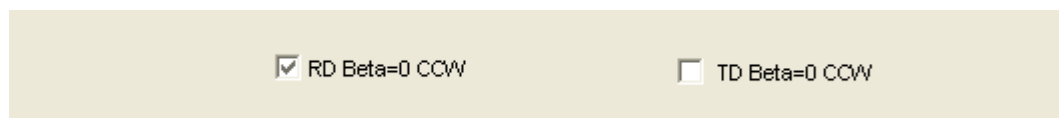
対象ファイル(複数選択も可能)

C:\¥CTR¥DATA¥UXD¥Zr-pf.UXD

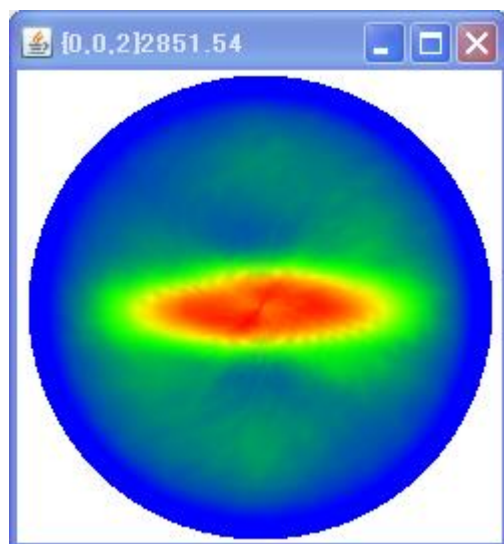
ファイル選択後



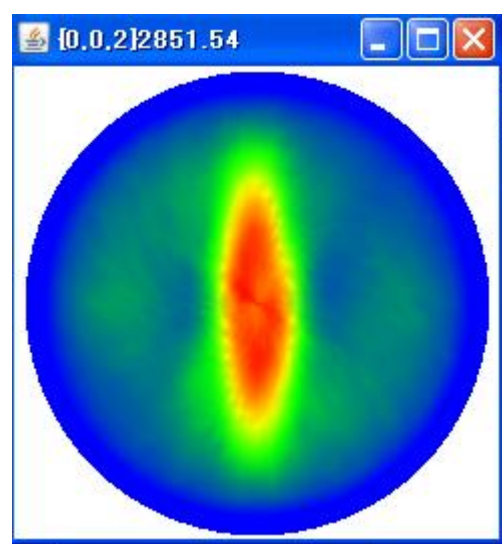
入力極点図 $\beta=0$ がRDあるいはTDの指定



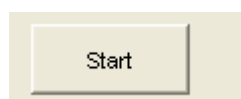
RD Beta=0



TD Beta=0

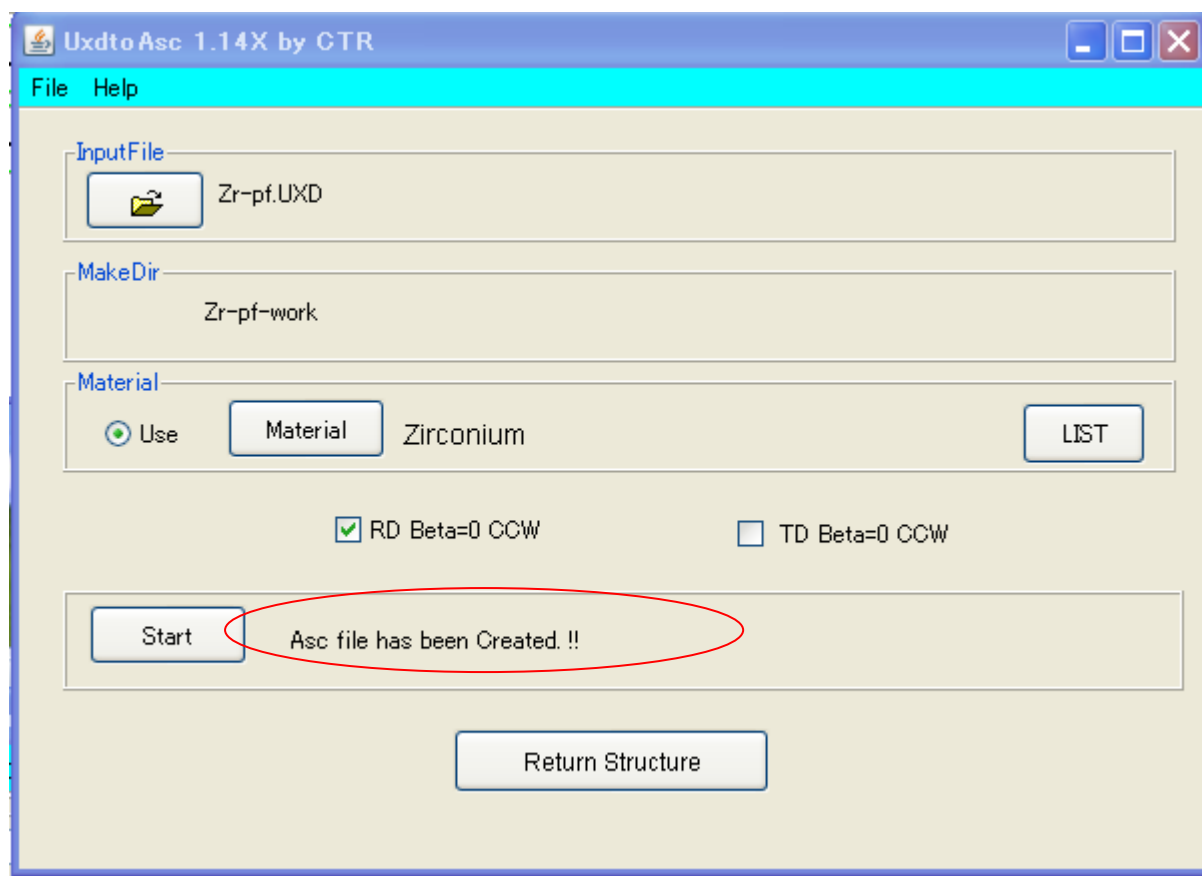


(変換後、ODFPoleFigure2 で表示)



で変換開始

変換終了画面



作成されたファイル

| 名前 | サイズ | 種類 | 更新日時 |
|-----------------|-------|--------------|-----------------|
| 002_2_34.99.ASC | 30 KB | RINT2000アスキー | 2012/12/20 5:15 |
| 100_3_32.14.ASC | 30 KB | RINT2000アスキー | 2012/12/20 5:15 |
| 101_1_36.65.ASC | 30 KB | RINT2000アスキー | 2012/12/20 5:15 |
| 102_0_48.12.ASC | 30 KB | RINT2000アスキー | 2012/12/20 5:15 |
| 0_48.12.ASC | 30 KB | RINT2000アスキー | 2012/12/20 5:17 |
| 1_36.65.ASC | 30 KB | RINT2000アスキー | 2012/12/20 5:17 |
| 2_34.99.ASC | 30 KB | RINT2000アスキー | 2012/12/20 5:17 |
| 3_32.14.ASC | 30 KB | RINT2000アスキー | 2012/12/20 5:17 |

指数付き、指数なしファイル、 2θ 角度の前の数字は連番で、同一 2θ 角度ファイルの識別

```
*BEGIN↓
*GROUP = 0↓
*START = 0.0↓
*STOP = 360.0↓
*STEP = 5.0↓
*SPEED = 1.0↓
*SLIT_SPEC = 0, 0.2°, 0.2, 10↓
*SLIT_SPEC = 1, 2.991mm, 2.991, 10↓
*SLIT_SPEC = 2, 2.991mm, 2.991, 10↓
*SLIT_SPEC = 3, 2mm, 2, 2↓
*LOW = 7443.0↓
*HIGH = 5634.0↓
*FULL_SCALE = 1000↓
*PF_ANGLE = 10.0↓
*PF_BANGLE = 0.0↓
*INDEX = 0,0,2↓
*COUNT = 73↓
231.50347255208828↓
204.5030675460132↓
228.00342005130076↓
```

```
*BEGIN↓
*GROUP = 0↓
*START = 0.0↓
*STOP = 360.0↓
*STEP = 5.0↓
*SPEED = 1.0↓
*SLIT_SPEC = 0, 0.2°, 0.2, 10↓
*SLIT_SPEC = 1, 2.991mm, 2.991, 10↓
*SLIT_SPEC = 2, 2.991mm, 2.991, 10↓
*SLIT_SPEC = 3, 2mm, 2, 2↓
*LOW = 7443.0↓
*HIGH = 5634.0↓
*FULL_SCALE = 1000↓
*PF_ANGLE = 10.0↓
*PF_BANGLE = 0.0↓
*INDEX = 0,0,0↓
*COUNT = 73↓
231.50347255208828↓
204.5030675460132↓
228.00342005130076↓
```

変換データは CPS 単位です。

入力データ 1 (ユーザから入手)

C:\¥CTR¥DATA¥UXD¥Zr-pf.UXD

複数の極点図が連続的に登録されているフォーマットで、バックグラウンドは1点測定データ

PEAKDATA

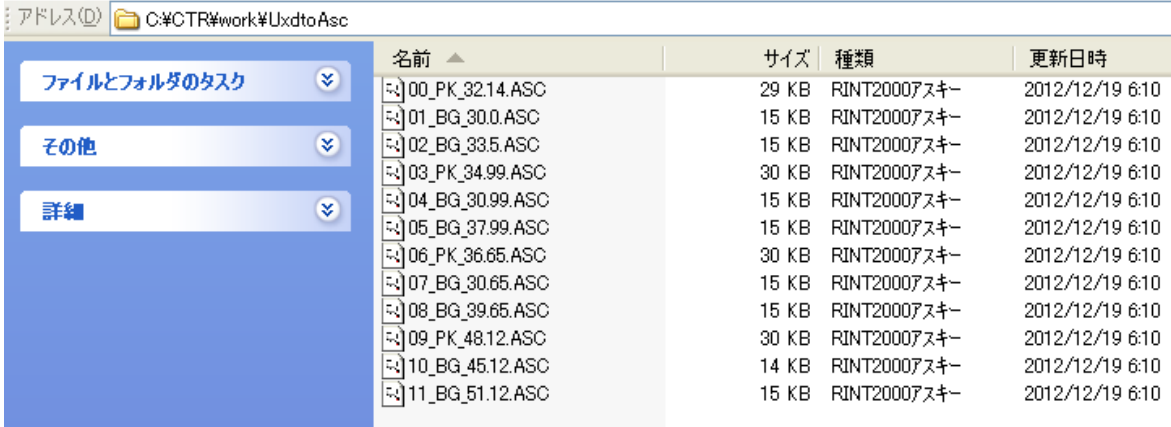
```
; (Data for Range number 1)↓
DRIVE='PHI'↓
STEP TIME=1.999970↓
STEP SIZE=5.000000↓
STEP MODE='C'↓
START=0.000000↓
THETA=16.070000↓
2THETA=32.139999↓
KHI=0.000000↓
PHI=0.000000↓
X=0.000000↓
Y=0.000000↓
Z=0.250000↓
DIVERGENCE=0.200000↓
ANTISCATTER=2.991000↓
DETECTOR=1↓
; S.C.↓
HV=771.000000↓
GAIN=80.000000↓
LLD=0.600000↓
ULD=1.738940↓
DETECTORSLIT='out'↓
AUX1=0.000000↓
AUX2=0.000000↓
AUX3=0.000000↓
TIME STARTED=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)↓
```

バックグラウンドデータ

```
; (Data for Range number 18)↓
DRIVE='PHI'↓
STEP TIME=4.000000↓
STEP SIZE=5.000000↓
STEP MODE='S'↓
START=0.000000↓
THETA=15.000000↓
2THETA=30.000000↓
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↓
TIME STARTED=2685.000000↓
TEMP RATE=0.000000↓
TEMP DELAY=0.000000↓
KV=40↓
MA=30↓
RANGE WL=1.540600↓
3DPLANE=0↓
COUNTS↓
336↓
; (Data for Range number 19)↓
```

Startで

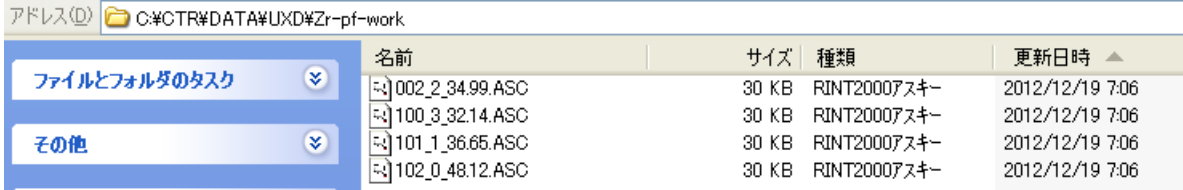
Zr-pf.UXD を単独 Asc ファイルに変換 (work エリアに仮に作成)



| 名前 | サイズ | 種類 | 更新日時 |
|-----------------|-------|--------------|-----------------|
| 00_PK_32.14.ASC | 29 KB | RINT2000アスキー | 2012/12/19 6:10 |
| 01_BG_30.0.ASC | 15 KB | RINT2000アスキー | 2012/12/19 6:10 |
| 02_BG_33.5.ASC | 15 KB | RINT2000アスキー | 2012/12/19 6:10 |
| 03_PK_34.99.ASC | 30 KB | RINT2000アスキー | 2012/12/19 6:10 |
| 04_BG_30.99.ASC | 15 KB | RINT2000アスキー | 2012/12/19 6:10 |
| 05_BG_37.99.ASC | 15 KB | RINT2000アスキー | 2012/12/19 6:10 |
| 06_PK_36.65.ASC | 30 KB | RINT2000アスキー | 2012/12/19 6:10 |
| 07_BG_30.65.ASC | 15 KB | RINT2000アスキー | 2012/12/19 6:10 |
| 08_BG_39.65.ASC | 15 KB | RINT2000アスキー | 2012/12/19 6:10 |
| 09_PK_48.12.ASC | 30 KB | RINT2000アスキー | 2012/12/19 6:10 |
| 10_BG_45.12.ASC | 14 KB | RINT2000アスキー | 2012/12/19 6:10 |
| 11_BG_51.12.ASC | 15 KB | RINT2000アスキー | 2012/12/19 6:10 |

ファイルの先頭から連番、ピークバックの識別、測定 2θ 角度の ASC ファイルが作成される。

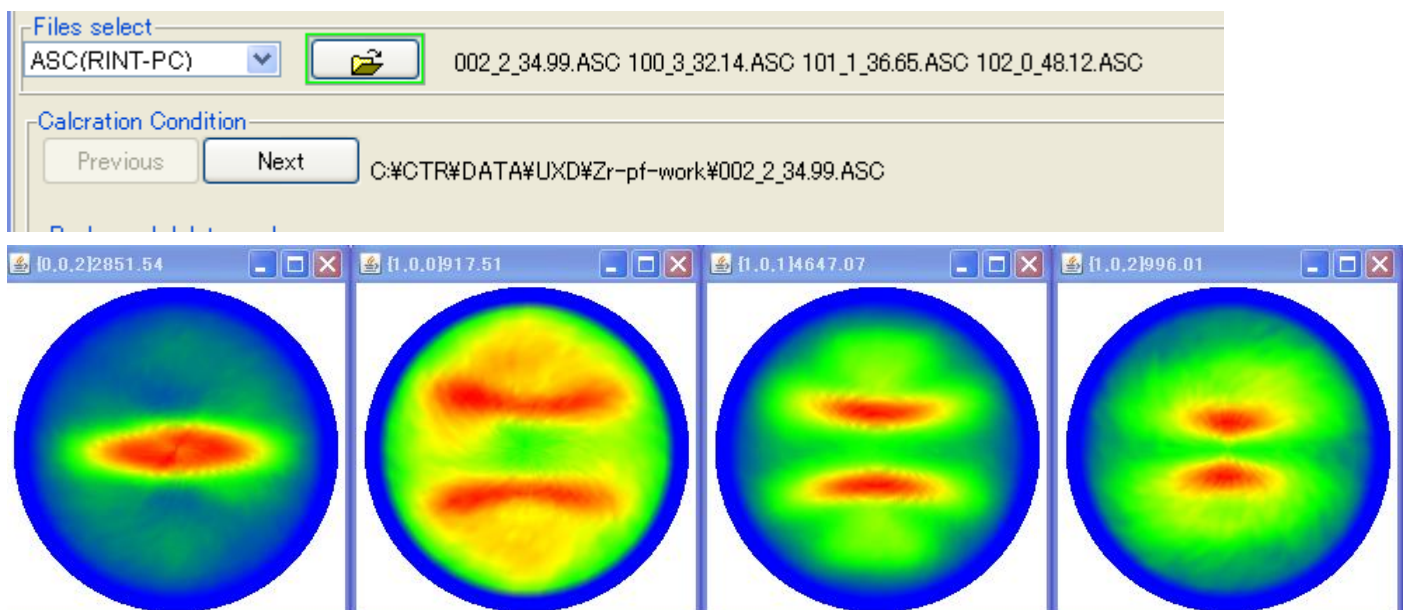
バックグラウンドをピークファイルに結合し、指数付きファイルを作成 (実際に作成されるファイル)



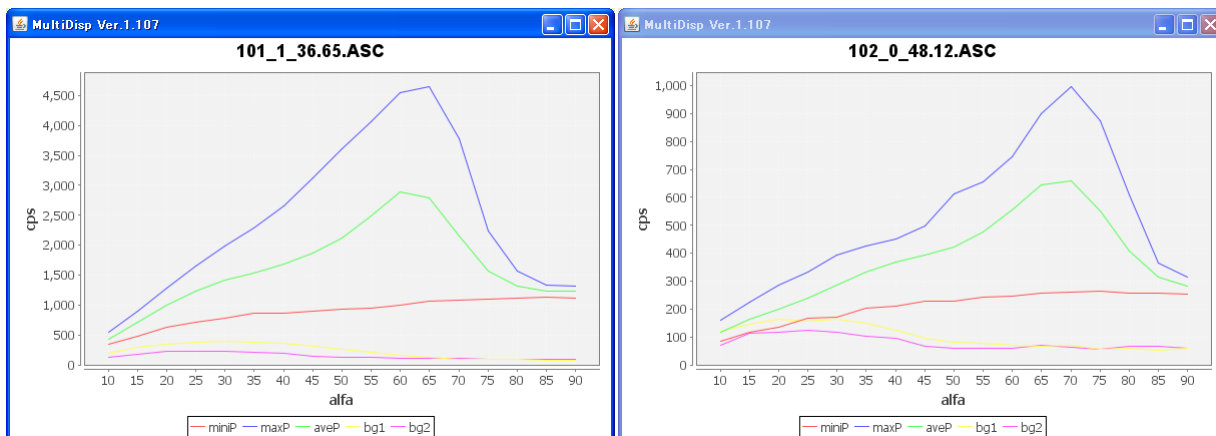
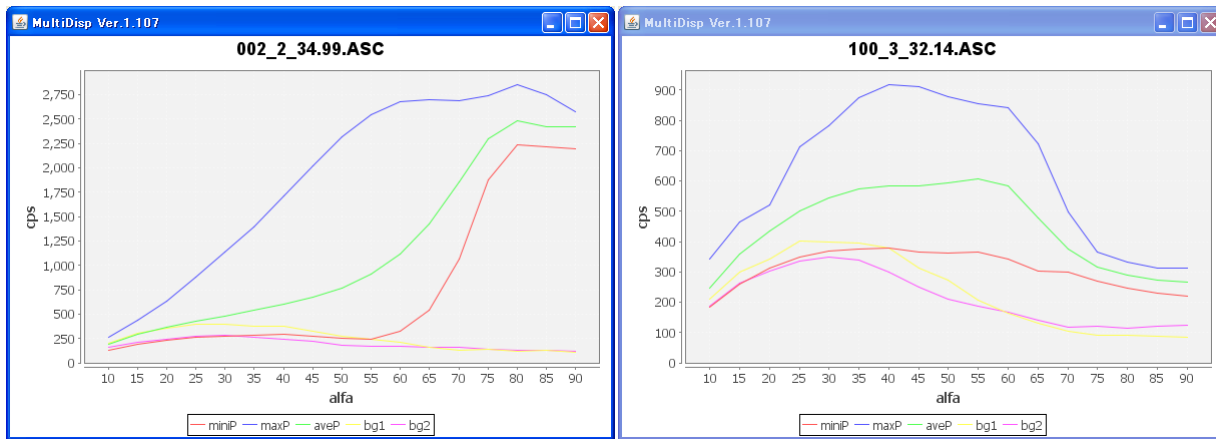
| 名前 | サイズ | 種類 | 更新日時 |
|-----------------|-------|--------------|-----------------|
| 002_2_34.99.ASC | 30 KB | RINT2000アスキー | 2012/12/19 7:06 |
| 100_3_32.14.ASC | 30 KB | RINT2000アスキー | 2012/12/19 7:06 |
| 101_1_36.65.ASC | 30 KB | RINT2000アスキー | 2012/12/19 7:06 |
| 102_0_48.12.ASC | 30 KB | RINT2000アスキー | 2012/12/19 7:06 |

指数、連番、測定 2θ 角度の ASC ファイルが作成される。

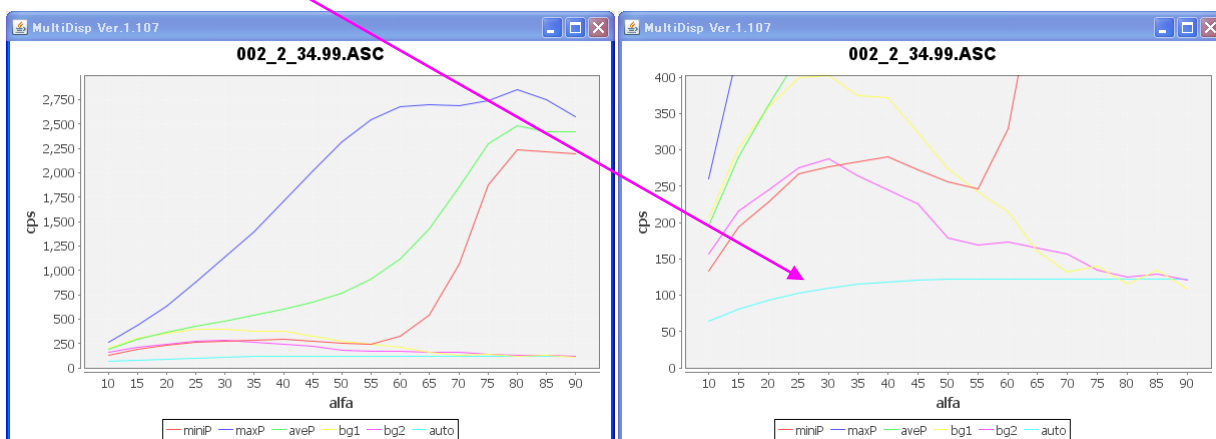
Asc ファイルを ODFPoleFigure2 で読み込む



バックグラウンドの確認



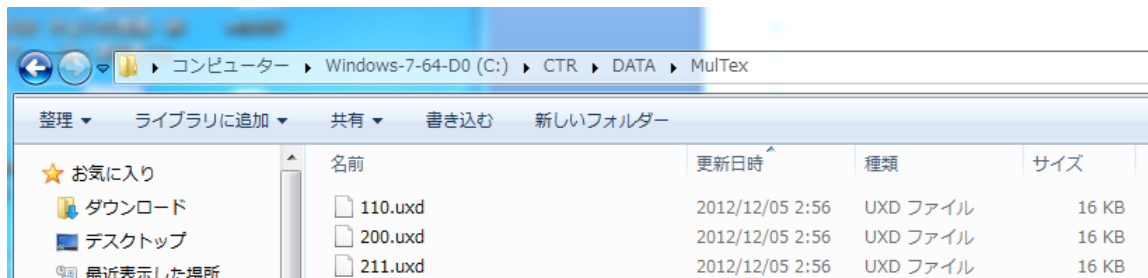
バックグラウンドの修正 **BGMode Defocus** SmartLab-DSH2mm-Schulz (300mm)



バックグラウンドの Defocus は別に実測値から多項式を近似したデータベースから計算しています。

入力データ 2

C:\CTR\DATA\MulTex



データフォーマット

```
SAMPLE= MulTex Area to *.uxd: 110.uxd↓
WL=0=↓
WL=1=↓
WL=2=↓
; (Data for Range number 1)↓
DRIVE='PHI'↓
STEPsize=5.000000↓
START=0.000000↓
2THETA=0.000000↓
THETA=0.000000↓
KHI=0.000000↓
PHI=0.000000↓
COUNTS↓
  424    424    424    424    424    424    424    424↓
  424    424    424    424    424    424    424    424↓
  424    424    424    424    424    424    424    424↓
  424    424    424    424    424    424    424    424↓
  424    424    424    424    424    424    424    424↓
  424    424    424    424    424    424    424    424↓
  424    424    424    424    424    424    424    424↓
  424    424    424    424    424    424    424    424↓
  424    424    424    424    424    424    424    424↓
; (Data for Range number 2)↓
DRIVE='PHI'↓
STEPsize=5.000000↓
START=0.000000↓
2THETA=0.000000↓
THETA=0.000000↓
KHI=5.000000↓
PHI=0.000000↓
COUNTS↓
  296    270    266    261    235    211    196    194↓
```

MulTexである程度データ処理された結果ではほかのODF解析で処理するformatです。
本ソフトウェアではなく

DFPoleFigure2 ソフトウェアあるいは、

ODFAfterTools の MakePoleFile ソフトウェアで変換し、PFtoODF3 で他の ODF ファイルを作成

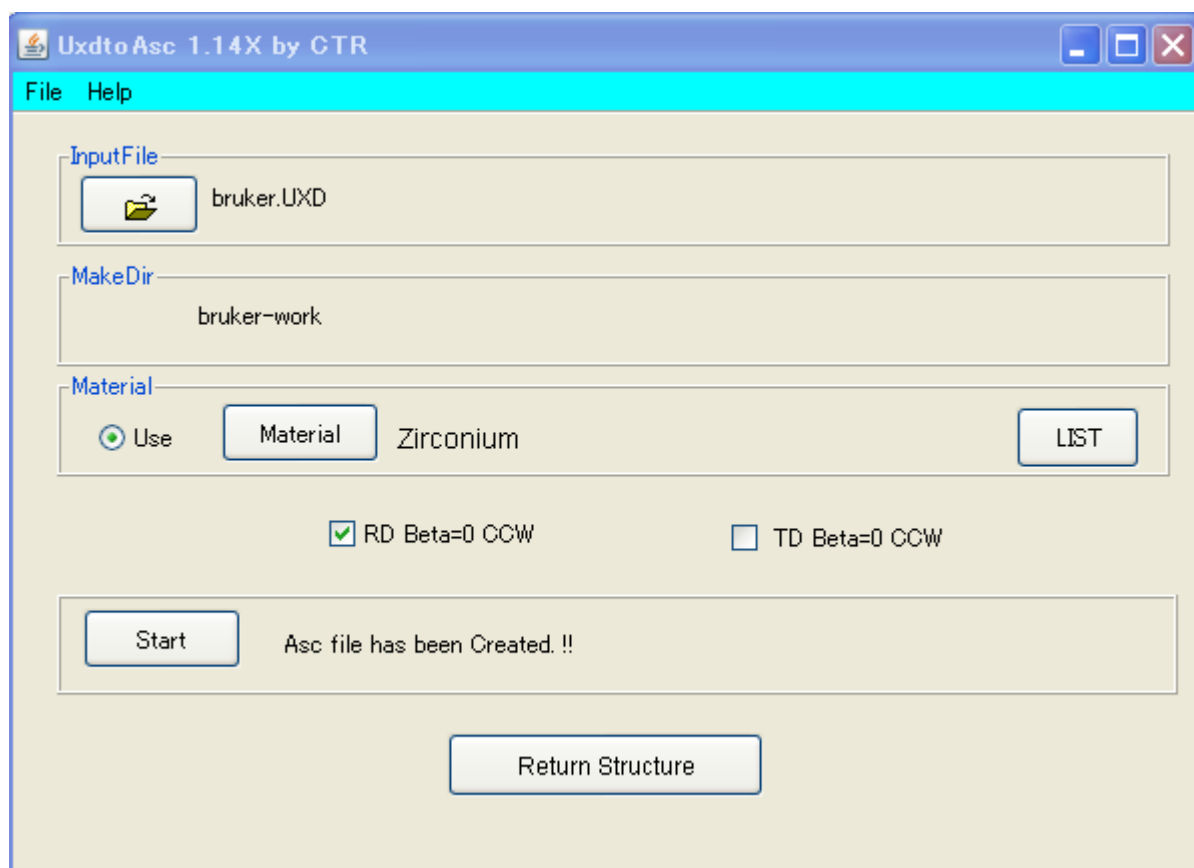
入力データ 3 (MTEX)

C:\¥CTR¥DATA¥MTEX¥bruker.uxd

```
; (Data for Range number 1)↓
DRIVE='PHI'↓
STEPTIME=1.000000↓
STEP SIZE=5.000000↓
STEPMODE='C'↓
START=0.000000↓
THETA=17.200001↓
2THETA=34.400002↓
KHI=0.000000↓
PHI=0.000000↓
X=0.876000↓
Y=9.952000↓
Z=0.085500↓
DIVERGENCE=0.200000↓
ANTISCATTER=0.200000↓
DETECTOR=1↓
; S.C.↓
HV=584.000000↓
GAIN=80.000000↓
LLD=0.494000↓
ULD=2.094000↓
DETECTORSLIT='unkn'↓
AUX1=0.000000↓
AUX2=0.000000↓
AUX3=0.000000↓
TIMESTARTED=15.000000↓
TEMP_RATE=0.000000↓
TEMP_DELAY=0.000000↓
KV=40↓
MA=40↓
RANGE_WL=1.540600↓
3DPLANE=0↓
2THETACPS↓
  0.0000 2436.0↓
  5.0000 2464.0↓
 10.0000 2412.0↓
 15.0000 2319.0↓
 20.0000 2270.0↓
 25.0000 2263.0↓
 30.0000 2276.0↓
 35.0000 2238.0↓
 40.0000 2180.0↓
 45.0000 2196.0↓
 50.0000 2314.0↓
 55.0000 2407.0↓
 60.0000 2656.0↓
```

バックグラウンドデータが含まれていない。

データの読み込み

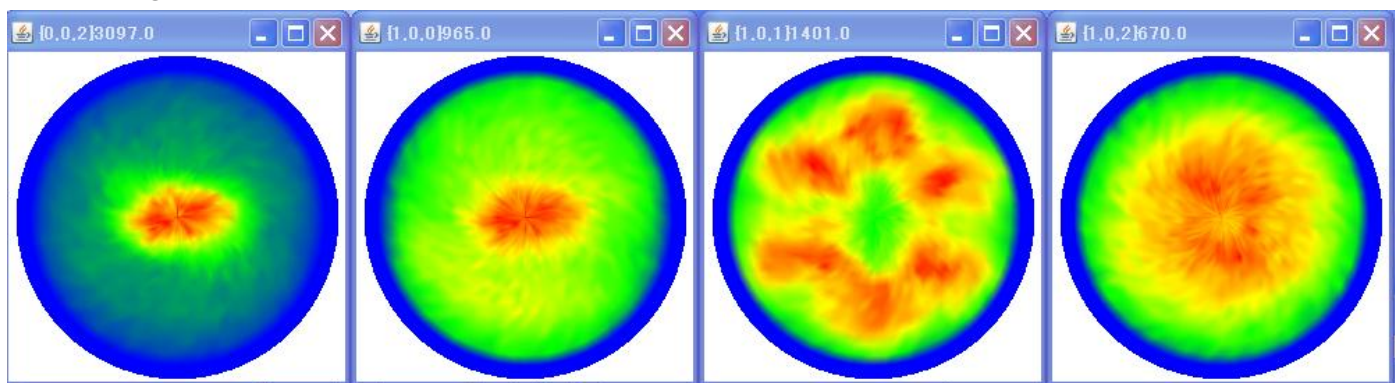


作成されたA S Cファイル

アドレス(D) C:\CTR#DATA#MTEX#bruker-work

| 名前 | サイズ | 種類 | 更新日時 |
|-----------------|-------|--------------|-----------------|
| 002_3_34.4.ASC | 15 KB | RINT2000アスキー | 2012/12/19 7:35 |
| 100_1_31.0.ASC | 15 KB | RINT2000アスキー | 2012/12/19 7:35 |
| 101_2_36.45.ASC | 15 KB | RINT2000アスキー | 2012/12/19 7:35 |
| 102_0_47.8.ASC | 15 KB | RINT2000アスキー | 2012/12/19 7:35 |

ODFPoleFigure2 で読み込み

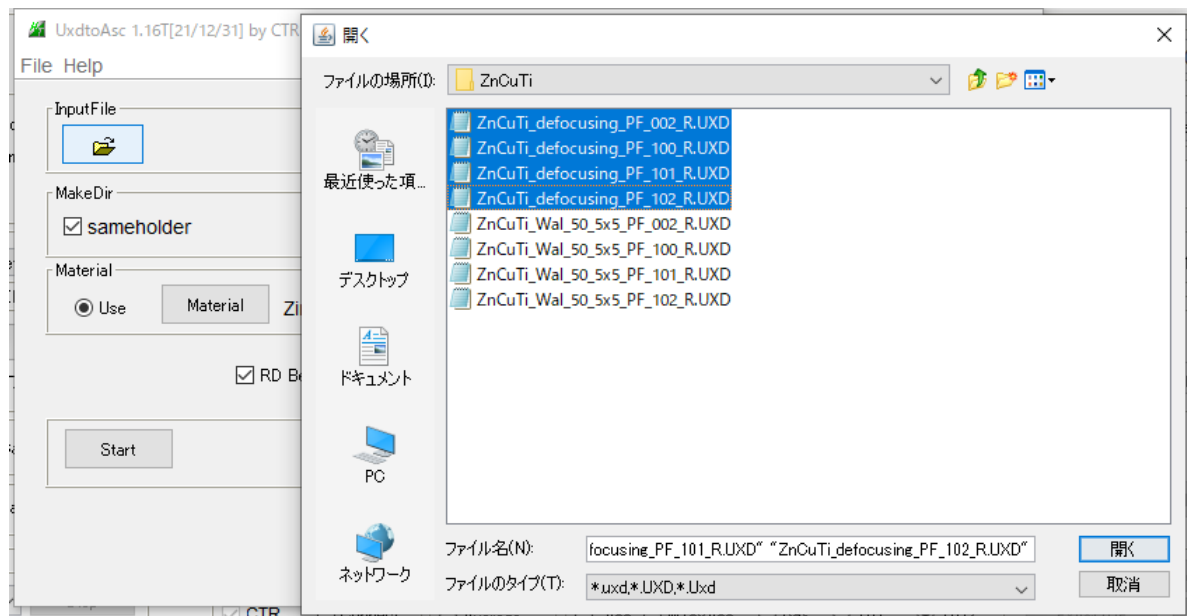


機能追加

従来、1つのファイルに複数の極点図が収録されていたが、指数毎に別々ファイルデータを追加した。

> mtex-5.1.1 > data > PoleFigure > ZnCuTi

| 名前 | 更新日時 | 種類 | サイズ |
|--------------------------------|-----------------|----------|-------|
| ZnCuTi_defocusing_PF_002_R.UXD | 2020/10/15 5:49 | UXD ファイル | 33 KB |
| ZnCuTi_defocusing_PF_100_R.UXD | 2020/10/15 5:49 | UXD ファイル | 33 KB |
| ZnCuTi_defocusing_PF_101_R.UXD | 2020/10/15 5:49 | UXD ファイル | 33 KB |
| ZnCuTi_defocusing_PF_102_R.UXD | 2020/10/15 5:49 | UXD ファイル | 33 KB |
| ZnCuTi_Wal_50_5x5_PF_002_R.UXD | 2020/10/15 5:49 | UXD ファイル | 33 KB |
| ZnCuTi_Wal_50_5x5_PF_100_R.UXD | 2020/10/15 5:49 | UXD ファイル | 33 KB |
| ZnCuTi_Wal_50_5x5_PF_101_R.UXD | 2020/10/15 5:49 | UXD ファイル | 33 KB |
| ZnCuTi_Wal_50_5x5_PF_102_R.UXD | 2020/10/15 5:49 | UXD ファイル | 33 KB |



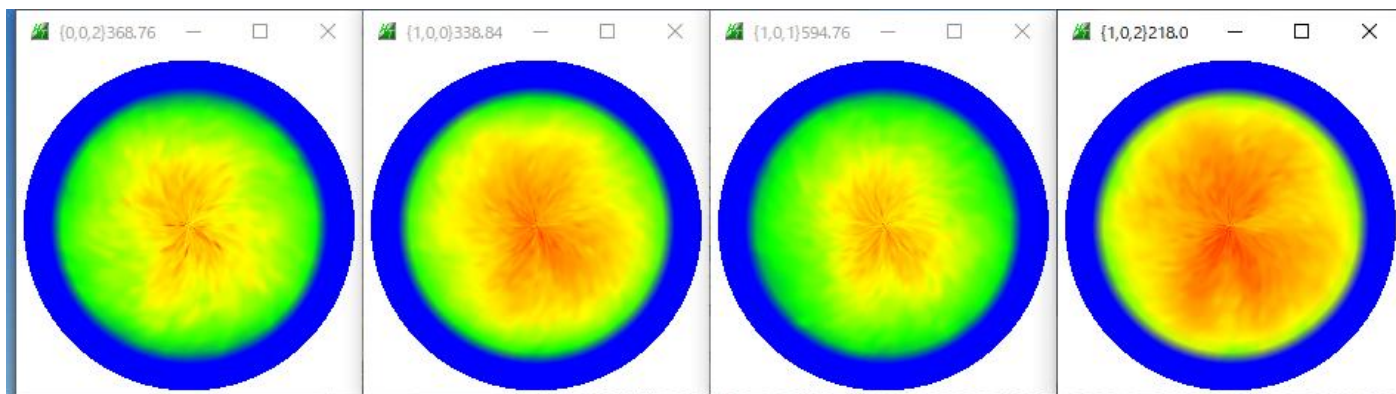
Start

Asc file has been Created. !!

mtex-5.1.1 > data > PoleFigure > ZnCuTi > UXD_work

| 名前 | 更新日時 | 種類 | サイズ |
|------------------|------------------|--------------|-------|
| 002_0_36.54.ASC | 2021/09/12 16:15 | RINT20007スキー | 15 KB |
| 100_0_39.13.ASC | 2021/09/12 16:15 | RINT20007スキー | 15 KB |
| 101_0_43.395.ASC | 2021/09/12 16:15 | RINT20007スキー | 15 KB |
| 102_0_54.566.ASC | 2021/09/12 16:15 | RINT20007スキー | 15 KB |

defocusデータ



metalデータ

