ルーチンワーク用極点データ処理

AscPoleFileChanger

毎日、大量の極点処理を行うために作成された極点データ処理 入力データは、RINTASCIIテキストデータ 出力は、処理結果のRINTASCIIテキストデータ、PFtoODF向けテキストデータ

処理をサポートするデータ

バックグランド位置を指定する SLIT-TABLEDefocus曲線を指定する Defocus-TABLE

処理内容

R D 補正(自動計算も可能)
 スムージング
 バックグランド計算
 吸収補正
 D e f c o u s 補正
 強度の内部規格化

予め決めること

ODF解析する場合、複数の極点図が必要です。 この測定条件を材料別に決定します。 例えばCuターゲットを用いてA1試料の測定

	BG1-Slit	BG1 -2 θ	ビーク-	-slitビークー:	2 <i>0</i> BG2−S	Эli BG2-2 <i>8</i>
{111}	2mm	35.0度	7mm	実測	2mm	41.0度
{200}	2mm	43.0度	7mm	実測	2mm	47.0度
{220}	2mm	60.0度	7mm	実測	2mm	70.0度
{311}	2mm	75.0度	7mm	実測	2mm	80.5度

Al-Slit-TABLE は

111,2.0,35.0,2.0,41.0↓ 200,2.0,43.0,2.0,47.0↓ 220,2.0,60.0,2.0,47.0↓ 311,2.0,75.0,2.0,80.5↓

ファイル名 Al-Slit-TABLE.txt として作成。これがバックグランド位置指定ファイルです。

あるいは CuターゲットでCu試料の測定

	BG1-Slit	BG1 -2 θ	ビークー	-slitビーク-2	20BG2−S	ы: BG2-2 <i>Ө</i>
{111}	2mm	41.0度	7mm	実測	2mm	45.5度
{200}	2mm	48.5度	7mm	実測	2mm	52.5度
{220}	2mm	70.5度	7mm	実測	2mm	77.0度
{311}	2mm	87.5度	7mm	実測	2mm	92.5度

Cu-Slit-TABLE は

111,2.0,41.0,2.0,45.5 200,2.0,48.5,2.0,52.5 220,2.0,70.5,2.0,77.0 311,2.0,87.5,2.0,92.5

ファイル名 Cu-Slit-TABLE.txt として作成。

作成理由

ルーチンでODF解析する場合、バックグランド位置とスリットの幅を変更する理由が ありません。

又、RINT-ASCIIテキストファイルにはバックグランド情報がありません。 AscPoleFileChangerソフトウエアで解析する場合、このファイル作成は必須です。 最初に測定する試料

X線による極点解析で重要な事は、光学系の補正を行う為の Defcous 曲線の作成です。 この Defcous 曲線は、無配向試料の測定で得られます。

例えば、A1のODF解析を行うのであれば、A1の無配向試料が必要です。 もし手持ちがない場合、A1の粉末で代用します。

測定条件は、Al-Slit-TABLE 条件で測定します。

Defocus-TABLEの作成

Defocus-TABLE は材料が異なれば別の TABLE が必要です。

- A1 試料の場合、Al-Defocus-TABLE.txt
- C u 試料の場合、Cu-Defocus-TABLE.txt
- F e A試料の場合、Fe-A-Defocus-TABLE.txt
- F e G 試料の場合、Fe-G-Defcous-TABLE.txt

など

A1の無配向試料からDefcous-TABLEの作成

Al-Slit-TABLE.txt に従った測定を行う。

TXT ファイル (1)		
(X) 27 (7) (1)		
Al-Slit-TABLE.txt	2008/08/02 8:56	TXT ファイル
牛=* た(4)		
生7 -9 (4)		
🖪 111-7mm-2B.raw	2008/06/26 11:09	生データ
🔄 200-7mm-2B.raw	2008/06/27 1:09	生データ
🖻 220-7mm-2B.raw	2008/06/27 15:43	生データ
🔄 311-7mm-2B.raw	2008/06/30 23:32	生データ

バイナリーー>ASCII変換ソフトでRINT2000ASCIIファイル作成

L バイナリー→ASCII変換
ファイル(F) ヘルプ(H)
変換実行 終了
ファイル設定
変換形式 RINT2000 形式 ▼
入力ファイル名 フォルダ: C:¥CTR¥Al-Defocus¥
200-7mm-2B.raw 220-7mm-2B.raw 311-7mm-2B.raw 111-7mm-2B.raw
出力ファイル名 フォルダ: C:¥CTR¥Al-Defocus¥
200-7mm-2B.ASC 220-7mm-2B.ASC 311-7mm-2B.ASC 111-7mm-2B.ASC
改行文字 ₩indows/DOS形式(<cr+lf>) ▼</cr+lf>
h-

RINT2000774- (4)		
🖳 111-7mm-2B.ASC	2008/08/02 8:58	RINT200077+-
🖻 200-7mm-2B.ASC	2008/08/02 8:58	RINT200077+-
🖻 220-7mm-2B.ASC	2008/08/02 8:58	RINT200077+-
🖷 311-7mm-2B.ASC	2008/08/02 8:58	RINT200077+-
TXT ファイル (1) ―――		
Al-Slit-TABLE.txt	2008/08/02 8:56	TXT ファイル
生データ (4)		
🖻 111-7mm-2B.raw	2008/06/26 11:09	生データ
🛯 200-7mm-2B.raw	2008/06/27 1:09	生データ
🛯 220-7mm-2B.raw	2008/06/27 15:43	生データ
🛯 311-7mm-2B.raw	2008/06/30 23:32	生データ

AscPoleFileChangerを使ってデータ処理

SlitーTABLEを指定する。

AscPoleFileChanger 3.29D by CTR
File Help
InputFile
OutputFile
MetureMethod Schulz reflection method
Index(h,k,l) Change
RD Smoothing Smoothing Input Roring direction angle 0.0 deg.
MeasrePosition&Slitsize LowBackgrand 2,0 mm 2Theta Angle 75,0 deg.
Peak 7,0 mm 2Theta Angle deg.
High Backgrand 20 mm 21heta Angle 805 deg.
C:#CTR#AI-Defocus#AI-Slit=TABLE.txt check
UT Absorption coefficient 139.8 1/cm Penetration depth 1.0 cm
Defocus TABLE Y Check
Standardlize Start

InputFile			
2			🔽 TXT
	で処理ファイルを指定する。	作成するテキストは	

-InputFile	C:¥CTR¥AI-Defocus¥111-7mm-2B.ASC	
OutputFile—		
	111-7mm-2B-chB	TXT2 TXT ASC

処理はバックグランド除去

Index(h.k.l)				
	1.1.1 1.1.1	C	hange		
	RD-			⊢Smoot	hing
	🔲 Auto 🛛 Input Ror	ing direction angle	0.0 deg.		1 🔻
	MeasrePosition&Slitsize				
	LowBackgrand	2.0 mm	2Theta Angle	35.0	deg.
\bigcirc	Peak	7.0 mm	2Theta Angle	38.6	deg.
	/ HighBackgrand	2.0 mm	2Theta Angle	41.0	deg.
	MeasrePosition&Slitsize S	Search TABLE -Defocus¥AI-Slit-T	ABLE.txt		check

指定したファイルに登録された{h,k,l}を元に、Slit-TABLE からバックグランド情報を表示

ł	{h,k,l}が間違っていたら変更	Change f	る。	
\langle	Standardlize	Start	 ල Start	する。
,	作成されるファイル名は、			
	OutputFile 111-7mm-2B-cł	nBS	TXT2	🛛 TXT 📄 ASC
1	111.7mm-2B-chBS.txt 他のデータも同様に処理する	0.0		
	TXT ファイル (5) ――			-
	111-7mm-2B-chBS.TXT	2008/08/02 9:13	TXT ファイル	
(200-7mm-2B-chBS.TXT	2008/08/02 9:13	TXT ファイル	
	220-7mm-2B-chBS.TXT	2008/08/02 9:13	TXT ファイル	
	311-7mm-2B-chBS.TXT	2008/08/02 9:13	TXT ファイル	
	Al-Slit-TABLE.txt	2008/08/02 8:56	TXT ファイル	

バックグランド処理と強度の規格化が行われたデータ

処理結果の極点図を見る場合、TXTと共にASCにチェックを入れて処理すれば 処理結果のASCファイルが作成され、RINT極点処理で表示できます。

Defocus-TABLEの作成

バックグランドが処理された無配向試料TXTデータから

Defocu	ı s M a k e T A B i	LEプログラムで作成
--------	---------------------	------------

DefocusmakeTABLE 1.50D by CTR	1 23
File Help SM-Mode	
Ppath	
Filename	
Alfa Numb File number	
Object Alfa StartAlfa(Center: 0.0) 0 StrepAlfa 5.0	
Fitting Fu 5 Max Limit	
Y-positions(,) 1.0,2.0,3.0,4.0,5.0,6.0,7.0	
⊇¥ ⊇¥	
Target Filename Filename	
Normlize Auto(RINT) -	
Calc	
DefocusmakeTABLE 1.50D by CTR	
File Help SM-Mode	
Select Files(Beta Intens)	
Select Files(Alfa Beca intens) End でTVTデータを同時に複粉指定	
参照:]] Al-Defocus	
111-7mm-2B-chBS.TXT	
200-7mm-2B-chBS.TXT	
220-7mm-2B-chBS.TXT	
Al-Slit-TABLE.txt	
デスクトップ	
File Help SM-Mode	
Ppath C:¥CTR¥AI-Defocus	
Filename 111-7mm-2B-chBS.TXT 200-7mm-2B-chBS.TXT 220-7mm-2B-chBS.TXT 311-7mm-2B-chBS.TXT	
Alfa Numb 16 File number 4	
Object Alfa StartAlfa(Center: 0.0) O StrepAlfa 5.0 Alfastart 0.0 Endalfa 75.0	
Fitting Fu 5 Max Limit	
Y-positions(,) 1.0,2.0,3.0,4.0,5.0,6.0,7.0	
Dir D.#CTR¥AI-Defocus	
Target Filename Filename	
Normlize Auto(RINT)	
Calc	

作成するファイル名を Al-defcous-TABLE とする。

Dir D:¥CTR¥AI-Defocus			
Target Filename Al-Defocus-TABLE			
Normlize	Auto(RINT)		

Calc

で計算スタート以下のTABLE が表示される。

🖹 Al-Defocus-TABLE.txt - ワードパッド D 🛩 🖬 🚑 📐 🛤 12₁₀ X 🖻 🛱 🗠 MS UI Gothic 10 日本語 B Z U 😥 🖹 🗄 🗄 filename,alfanumber,alfastartangle,alfastep,function-n,mm, 08/08/03 DefocusmakeTABLE 1.50D by CTR for DefocusCalc, 111-7mm-2B-chBS.TXT,16,0.0,5.0,5,1.0,0.9994461241684207,0.0032905555002585895,-1.7083940637844147E-4,1.5904252086610059E-6,5.665479838059514E-8,-9.230636671155936E-10, 200-7mm-2B-chBS.TXT,16,0.0,5.0,5,2.0,1.0040217652208994,0.0028198432815964873,-7.939726305771996E-5,-1.6504542374573601E-6,1.1283880137791253E-7,-1.2729038438702862E-9, 220-7mm-2B-chBS.TXT,16,0.0,5.0,5,3.0,1.0068377040031788,-0.007115786525166091,8.944965353147171E-4,-3.840518933793997E-5,6.673538698876415E-7,-4.067214492881486E-9, 311-7mm-2B-chBS.TXT,16,0.0,5.0,5,4.0,1.0051866463168397,-0.0027952741955815114,2.856170514841873E-4,-1.2826893246971672E-5,2.431114960105621E-7,-1.609132691656713E-9,

作成されるこ	ファイル
--------	------

TXT ファイル (7)			
111-7mm-2B-chBS.TXT	2008/08/02 9:13	TXT ファイル	
200-7mm-2B-chBS.TXT	2008/08/02 9:13	TXT ファイル	
220-7mm-2B-chBS.TXT	2008/08/02 9:13	TXT ファイル	
311-7mm-2B-chBS.TXT	2008/08/02 9:13	TXT ファイル	
Al-Defocus-TABLE.txt	2008/08/03 4:49	TXT JRAN	
Al-Slit-TABLE.txt	2008/08/02 8:56	TXT ファイル	
realAl-Defocus-TABLE.txt	2008/08/03 4:49	IXI JR TIL	

Al-Defocus-TABLE.txt は、AscPoleFileChanger用のTABLE realAl-Defocus-TABLE.txt は、Excel表示用ファイル

_,0.0,5.0,10.0,15.0,20.0,25.0,30.0,35.0,40.0,45.0,50.0,55.0,60.0,65.0,70.0,75.0, 111-7mm-2B-chBS.TXT,0.99945,1.01186,1.01733,1.0179,1.01576,1.0129,1.01081,1.01006,1.01(200-7mm-2B-chBS.TXT,1.00402,1.016,1.02363,1.02763,1.02944,1.03075,1.03307,1.03716,1.04; 220-7mm-2B-chBS.TXT,1.00684,0.98922,0.99299,1.00244,1.00884,1.00889,1.00319,0.99475,0.§ 311-7mm-2B-chBS.TXT,1.00519,0.99689,0.99524,0.99532,0.99466,0.99265,0.98988,0.98758,0.§



図では横軸0 - > 80 g 0:は極点図の中心です。 極点図の外側では強度が低くなることが分かります。

これで、A1用の準備が完了しました。

AscPoleFileChanger 3.29D by CTR			
File Help			
InputFile			
OutputFile			
MetureMethod Schulz reflection method			
Index(h,k,l) Change			
RD Smoothing Smoothing Smoothing T			
MeasrePosition&Slitsize LowBackgrand 20 mm 2Theta Angle 60.0 deg.			
Peak 7.0 mm 2Theta Angle deg. HighBackgrand 2.0 mm 2Theta Angle 70.0 deg.			
MeasrePosition&Slitsize Search TABLE C:¥CTR¥AI-Defocus¥AI-Slit-TABLE.txt check			
UT Absorption coefficient 139.8 1/cm Penetration depth 1.0 cm			
C+¥CTR¥AI-Defocus¥AI-Slit-TABLE.txt check			
Standardlize Start			