

ODF解析のための測定データ

2021年09月10日

HelperTex Office

概要

ODF解析としては、LaboTex, TexTools, StandardODF, MTEX, popLAなどがあるが、入力データフォーマットは異なります。

極点測定データは、raw, asc, ras, rasX, uxd, xrdmlなどがある。

この測定データからODF解析入力データは、background除去、吸収補正、Defocus補正、RD補正、平滑化などの処理を行って作成する。

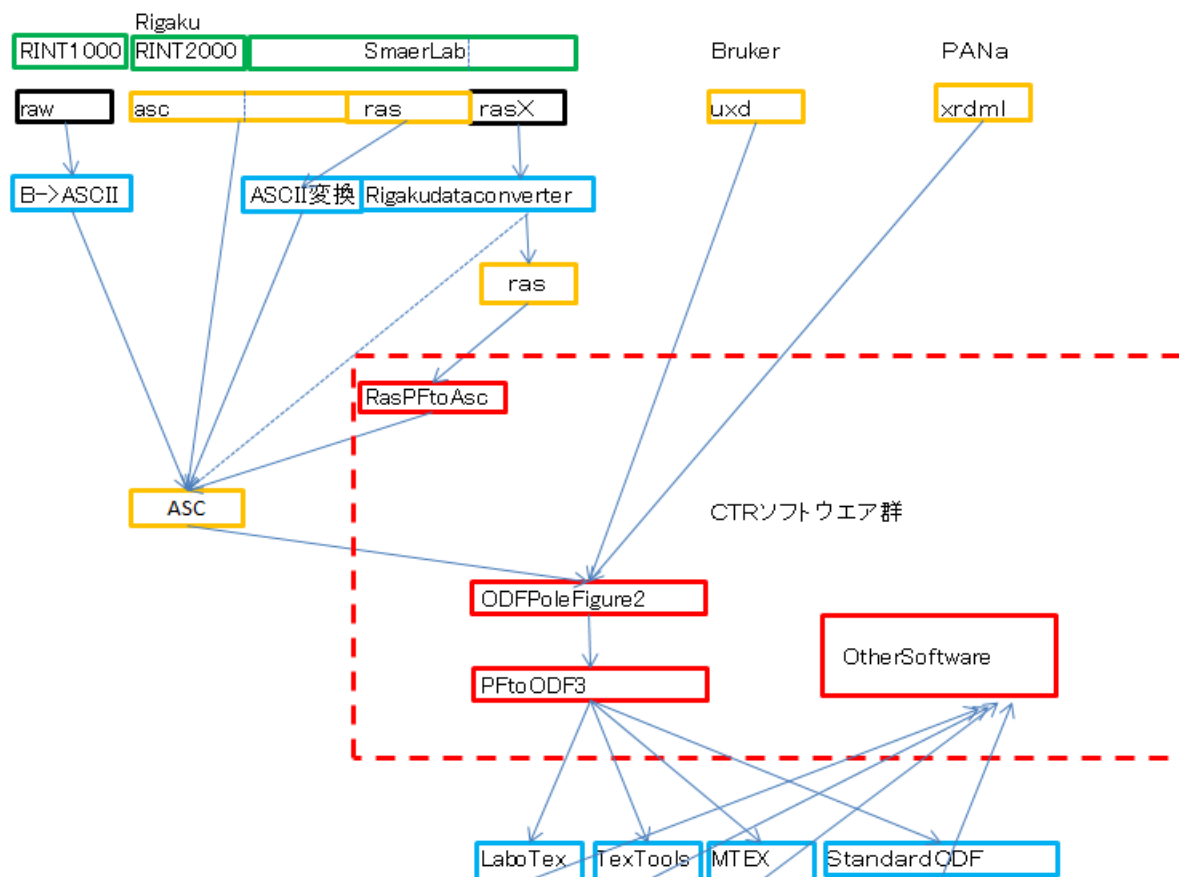
CTRソフトウェアでは、測定データからODF解析の入力データを作成する。

CTRソフトウェアの各種処理を行うODFPoleFigureソフトウェアの基本はascデータを入力し、TXT2データ (α, β , Intens) を作成、ファイル名は指数で始まる。

asc以外の極点データは変換ソフトウェアが行います。

各種ODF入力データは、PFtoODF3ソフトウェアでTXT2を入力として作成しています。

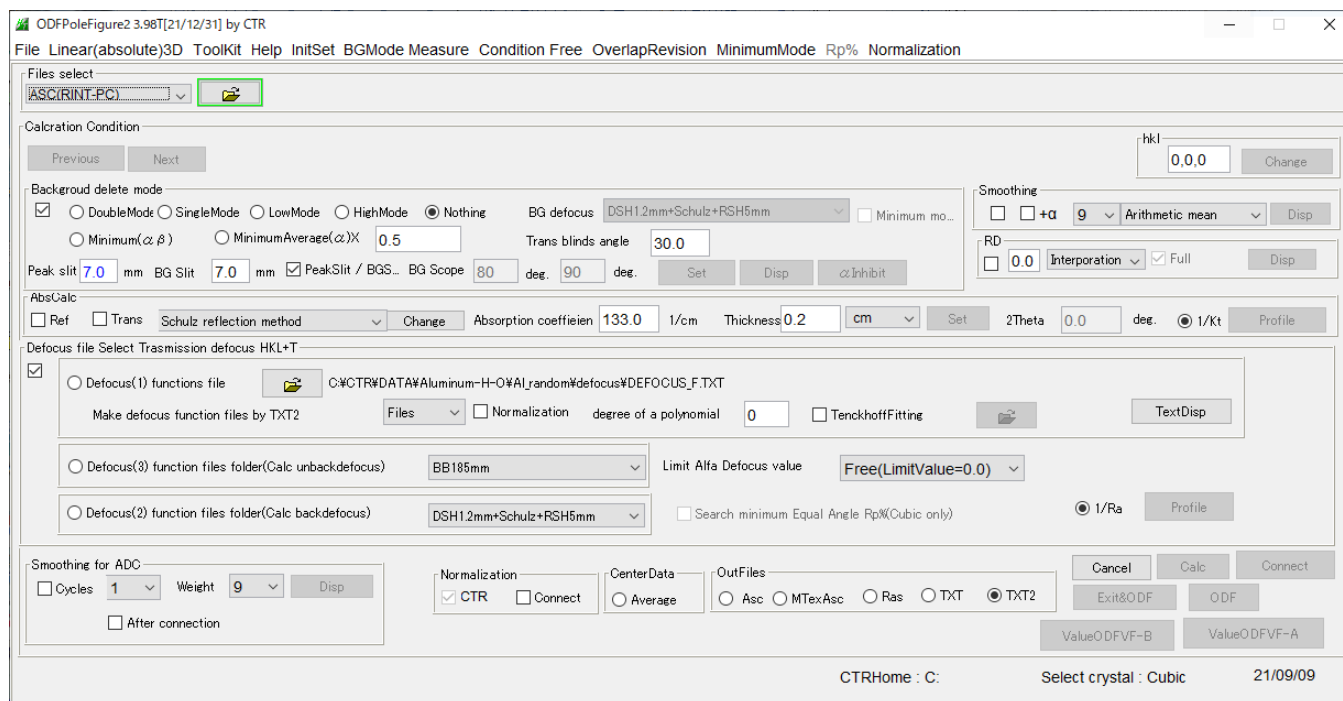
各メーカー別データの流れ



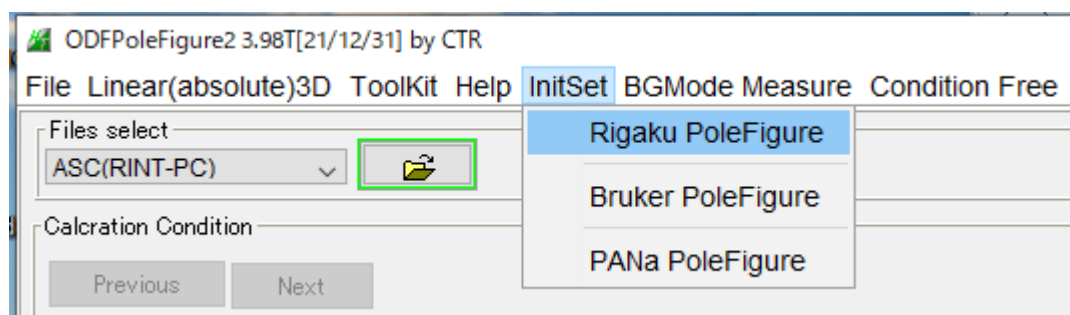
ODFPoleFigureソフトウェアは、asc, uxd, xrdmlファイルを入力
図中のRigakudataconverterからascは、2021/8/30にはサポートされていません。

SmartLabでは、測定時、ras+ascであったが現在はバイナリファイルrasXに統一されている

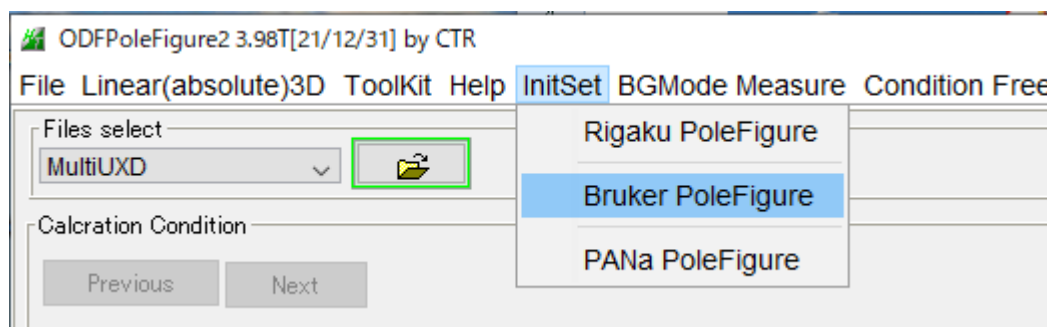
ODFPoleFigure2ソフトウェア



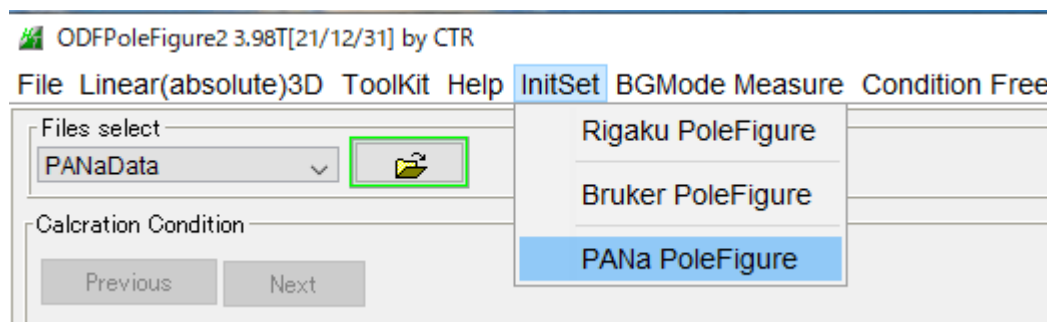
a s c フォーマット (直接読み込み)



u x d フォーマット (間接読み込み)

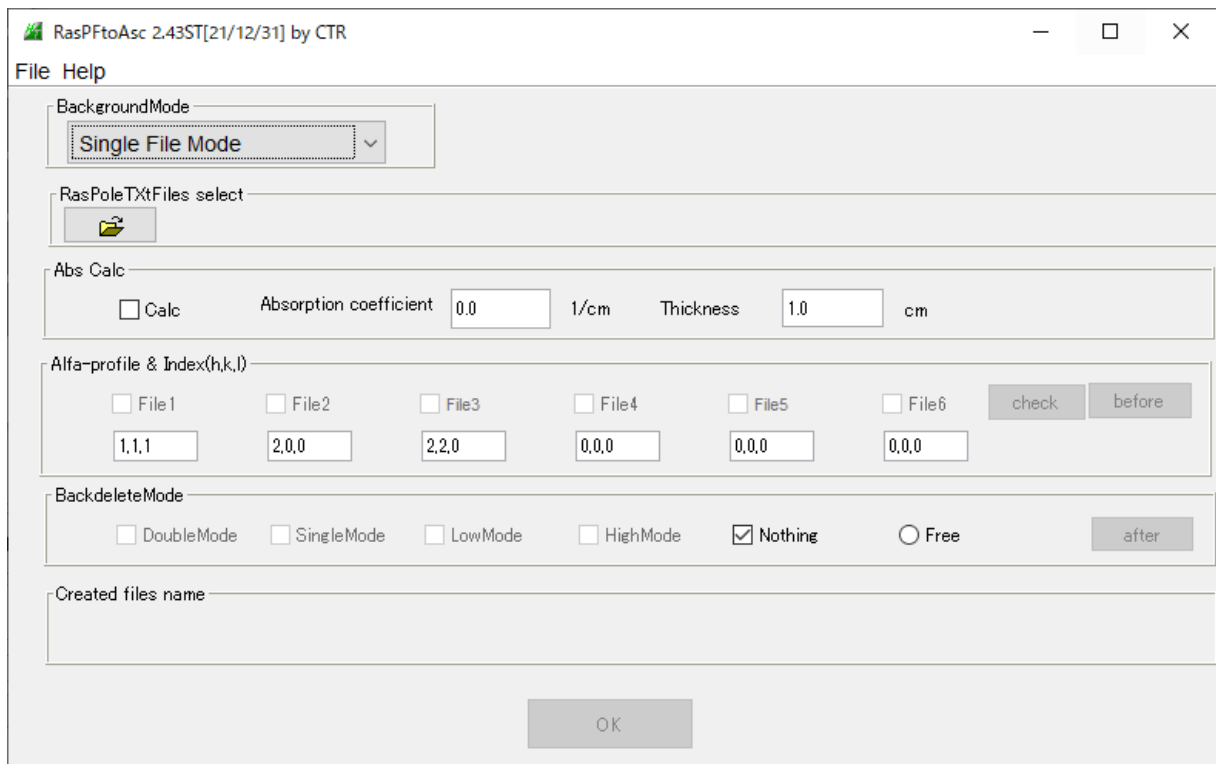


x r d m l フォーマット (間接読み込み)



r a s フォーマット

r a s データの場合、事前に、R a s t o A s c ソフトウェアで r a s → a s c 変換を行う。
a s c、u x d、x r d m l に比べ扱いにくい



b a c k g r o u n d の扱い

a s c フォーマットは、b a c k g r o u n d が登録されている。

u x d フォーマットは、b a c k g r o u n d が登録されている。

1つのファイルに複数の極点図が登録されている。
(2θ 角度は登録されているが指数はなしのため M a r e r i a l から変換)

x r d m l フォーマットは、b a c k g r o u n d が登録されていないため、
極点図ファイルと b a c k g r o u n d ファイルを読み込む

r a s フォーマットは、b a c k g r o u n d が登録されている。

r a s X フォーマットは、バイナリーの為、直接扱えない

リガクデータコンバーターで r a s フォーマットに変換する
(コンバーターで A s c にも変換できるがバックグラウンドが欠落している (2021 年 8 月))
A S C ファイルにバックグラウンドが欠落しているため
r a s X → リガクコンバーター → r a s → R a s P F t o A s c → A S C
r a s X になり更に扱い難くなってしまった。

b a c k g r o u n d が登録されていない場合、極点図、b a c k g r o u n d ファイルを
a s c に変換後結合する。

ODF 向けファイル作成

PfToODF3 8.54T[21/12/31] by CTR

File Option Symmetric Software Data Help

Outside text(Vector) CCW

Outside CSV(Vector) CCW

Inside text CCW

***LaboTex(EPF)CCW**

Labotex(EPF) CW

Stadard ODF CCW

Siemens CCW

TexTools(txt) CCW

*TexTools(pol) CCW

TexTools(pol) CW

*TexTools(pol)CCW-zero cut

TexTools(pol)CW-zero cut

*popLA(RAW)CCW

popLA(RAW)CW

StandaradODF2.5 CCW

Bunge(PF) CCW

MulTex(TD:beta=0)CCWXTX2

*MTEX(ASC) CCW

MTEX(ASC) CW

LaboTex(PPF) CW

*LaboTex(PPF) ATEX CCW

TXT2

RAS

IntegralData.txt

Files) cif 7 - 0 (cubic)

alpha 90.0 beta 90.0 gamm 90.0

Initialize

Start

getHKL<-Filename

AllFileSelect

h,k,l	2Theta	Alpha scope	AlphaS	AlphaE	Select
1,0,0	0.0		0.0	75.0	<input checked="" type="checkbox"/>
1,1,0	0.0		0.0	0.0	<input type="checkbox"/>
2,0,0	0.0		0.0	0.0	<input type="checkbox"/>
2,1,0	0.0		0.0	0.0	<input type="checkbox"/>
2,1,1	0.0		0.0	0.0	<input type="checkbox"/>
3,1,1	0.0		0.0	0.0	<input type="checkbox"/>
4,0,0	0.0		0.0	0.0	<input type="checkbox"/>
3,3,1	0.0		0.0	0.0	<input type="checkbox"/>
4,2,2	0.0		0.0	0.0	<input type="checkbox"/>
5,1,1	0.0		0.0	0.0	<input type="checkbox"/>
5,2,1	0.0		0.0	0.0	<input type="checkbox"/>
5,3,1	0.0		0.0	0.0	<input type="checkbox"/>

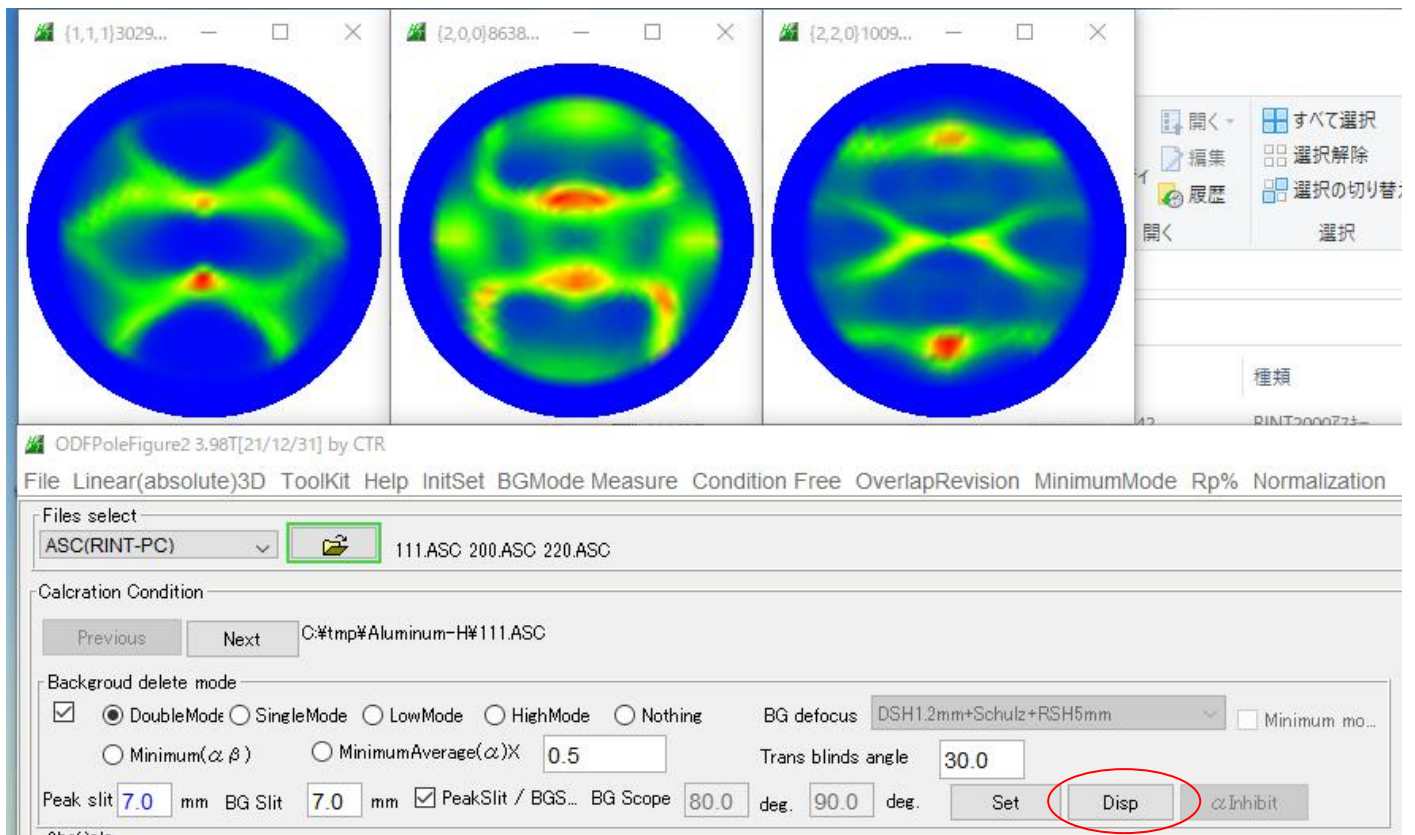
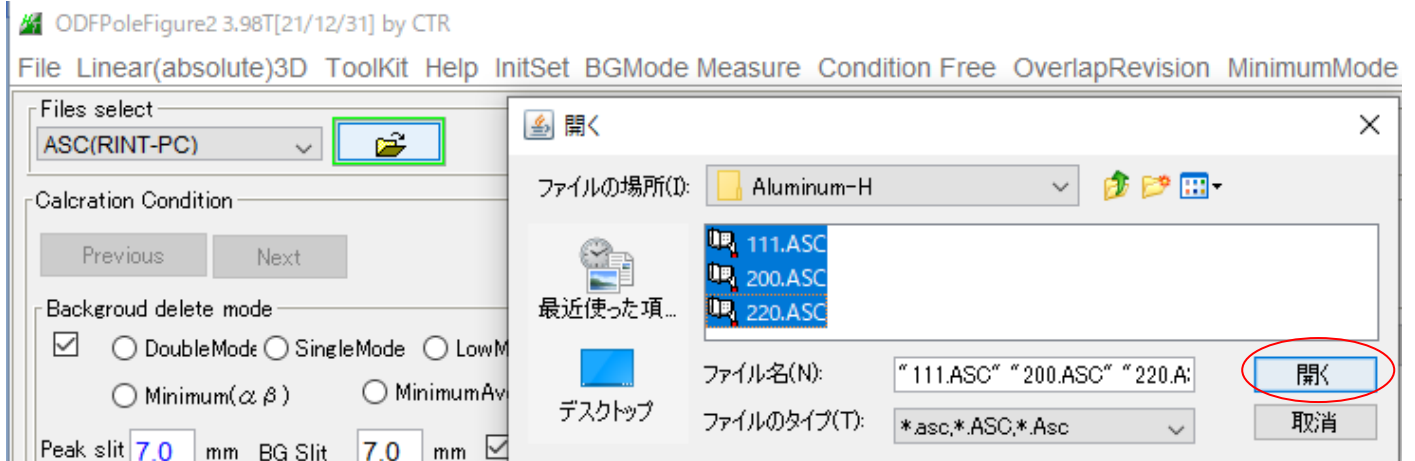
Data storage

Epf file save

Labotex(EPF),popLA(RAW) filename

labotex

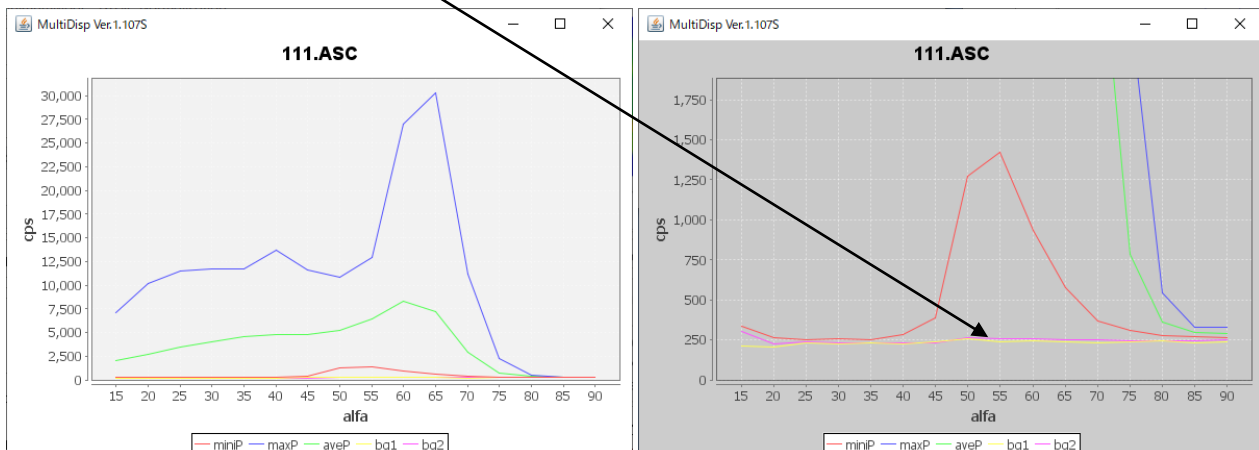
ascデータの取り込み



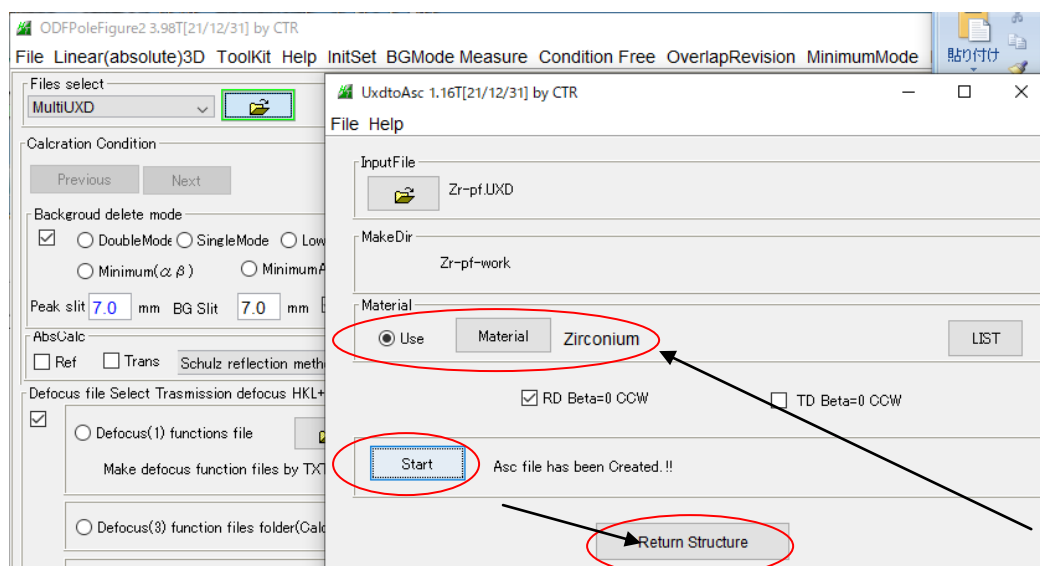
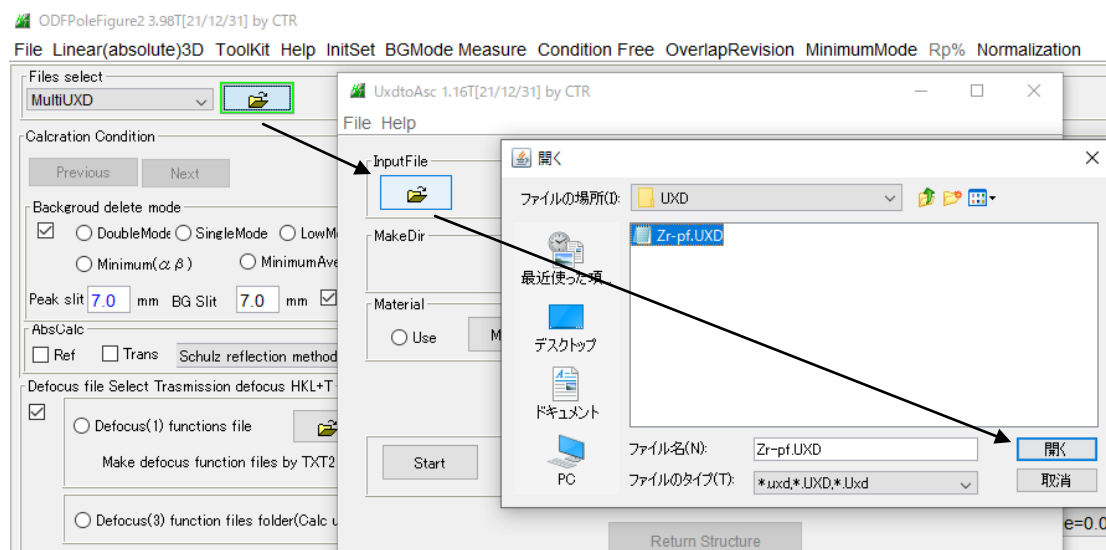
選択した極点図が表示され、ファイル名が表示されます。

Background 部の DoubleMode にチェックされています。

Background の bg1,bg2 が測定されています。

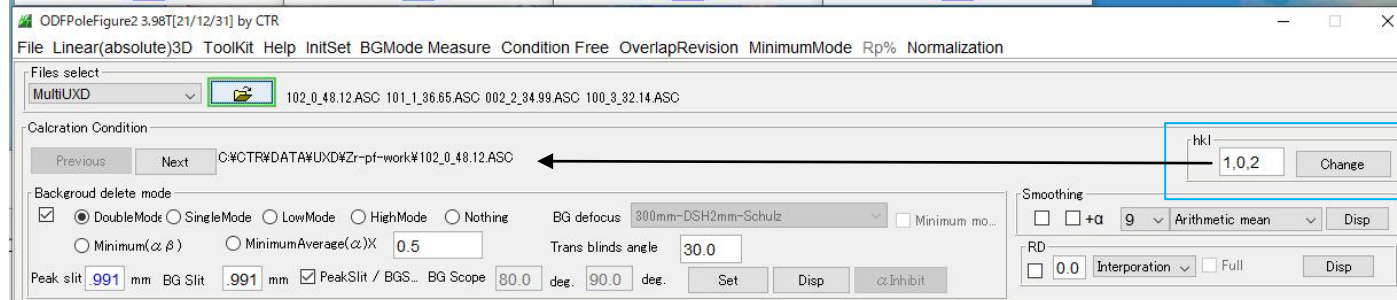
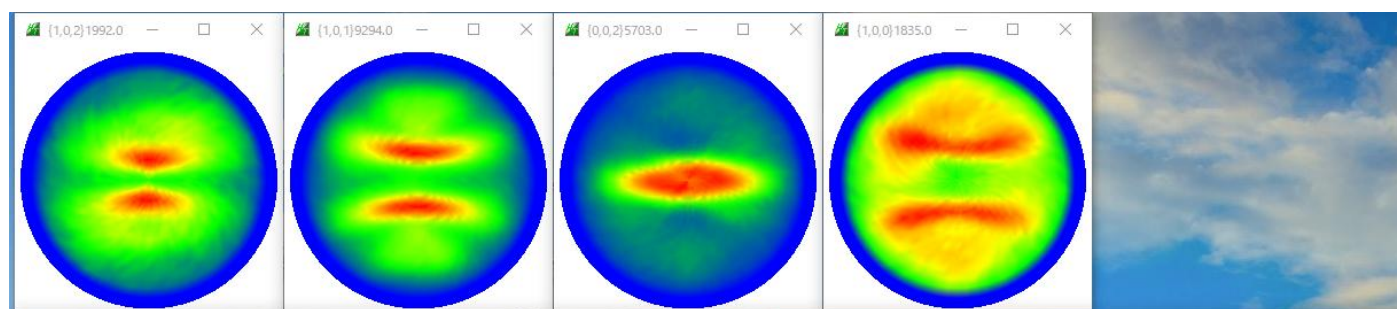


u x d データの取り込み

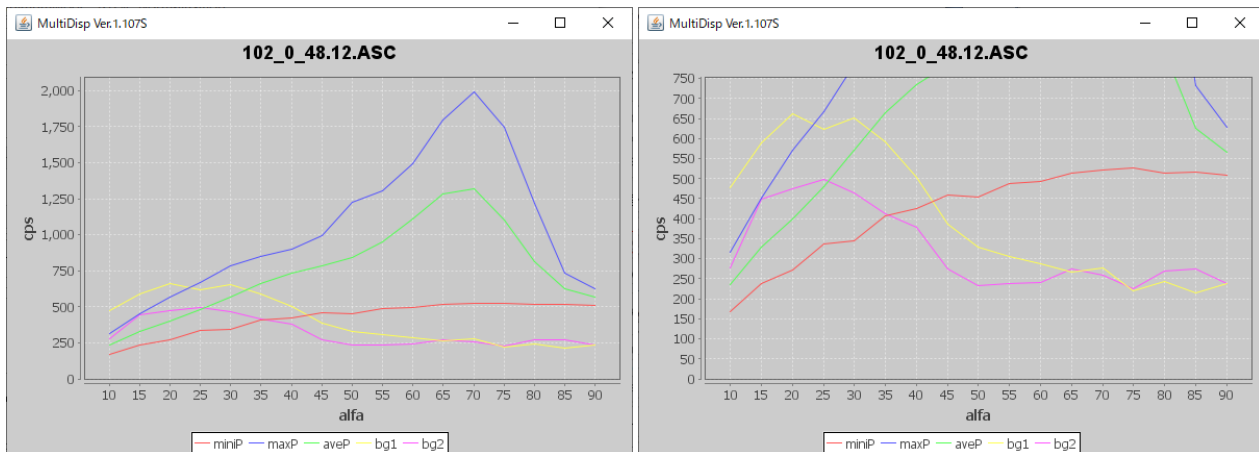
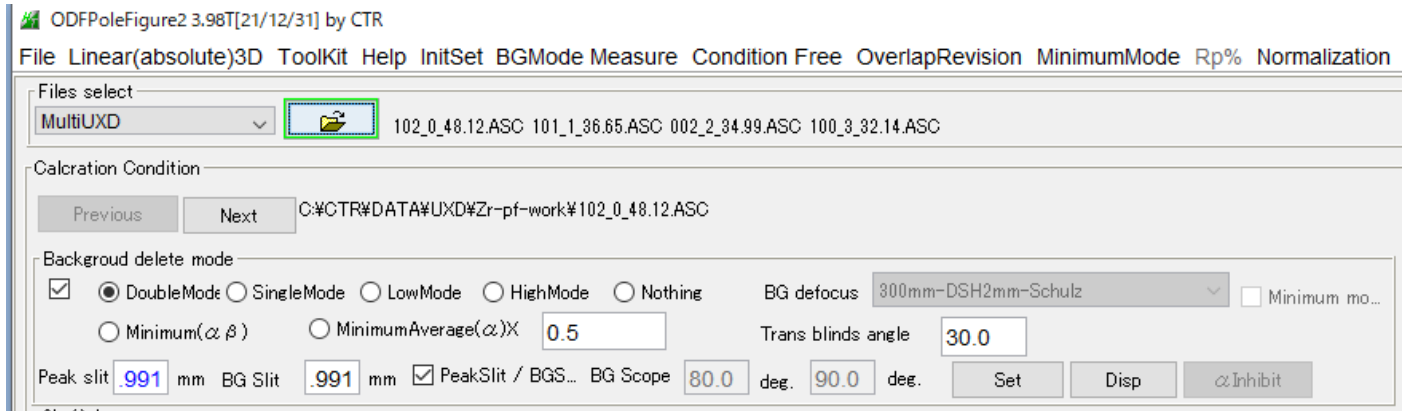


ファイルの先頭に指数付加

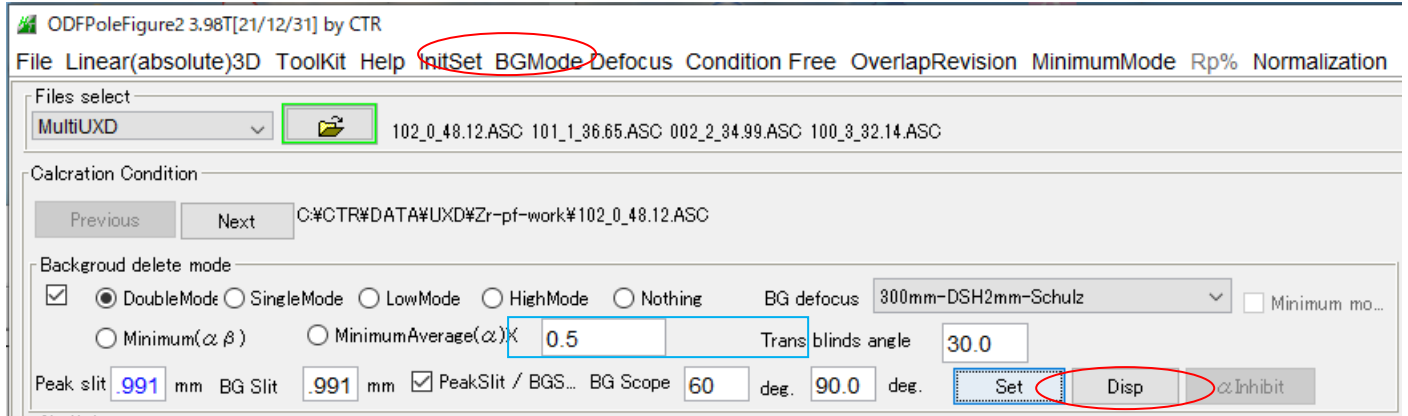
u x d ファイルには指数が登録されていないため、2 θ 角度から取り込んでいます。



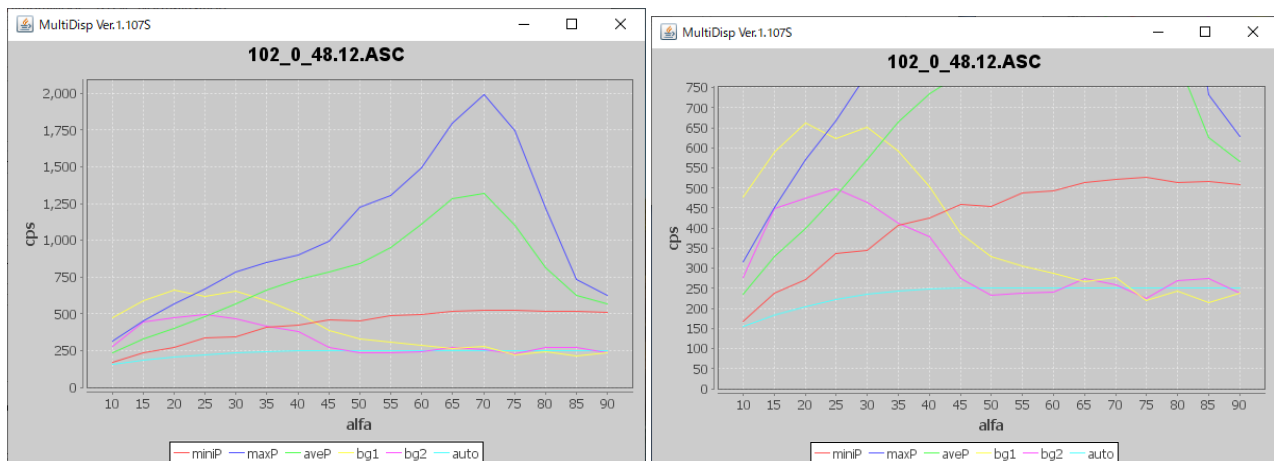
Background 部は DoubleMode がチェックされています。



backgroundの左側が異常に盛り上がっています。BGMode-Defocus で修正



測定データの α 60->90 のデータからバックグラウンドを計算



水色：計算したバックグラウンド