

S m a r t L a b の r a s ファイルからODF解析

2021年08月08日

*HelperTex Office*

## 概要

S m a r t L a bでは、測定時 r a s ファイルと A s c ファイルの作成を行っていたが、最近バイナリファイル r a s X が登録される。

この r a s X はリガクデータコンバータで r a s ファイルと A s c に変換が可能であるが、A s c ファイルにバックグラウンドデータが登録されていない。

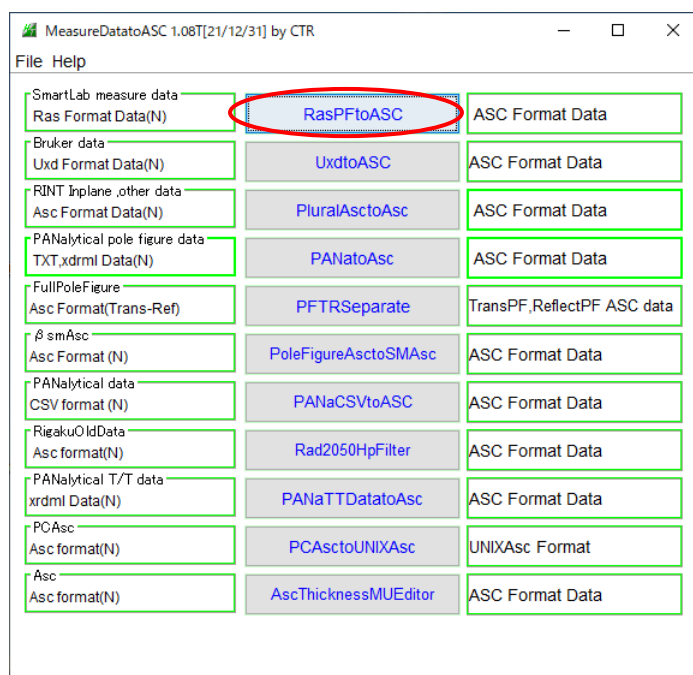
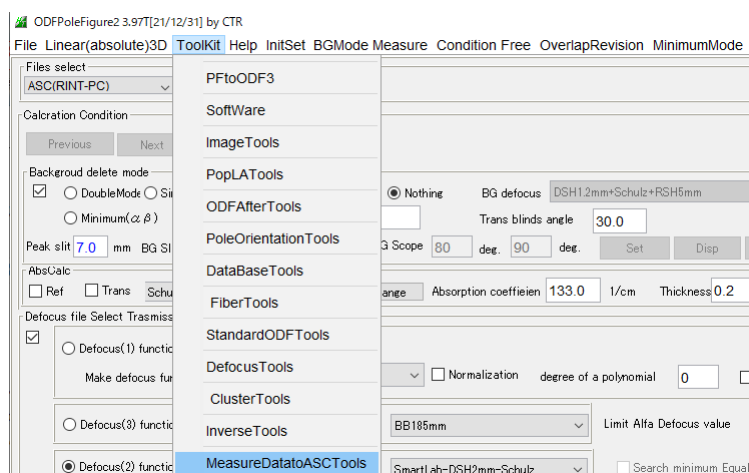
本資料では、r a n d o m が n a i s u s の解析を r a s ファイルから説明します。

## 解析データ

> tmp > ras

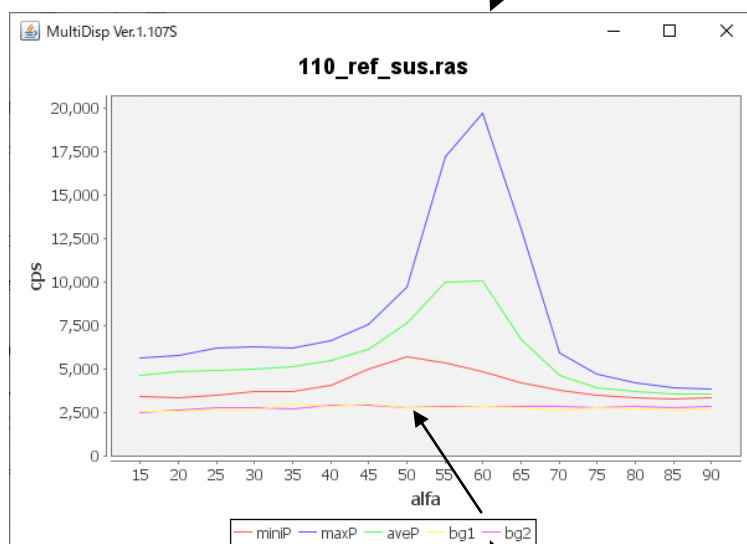
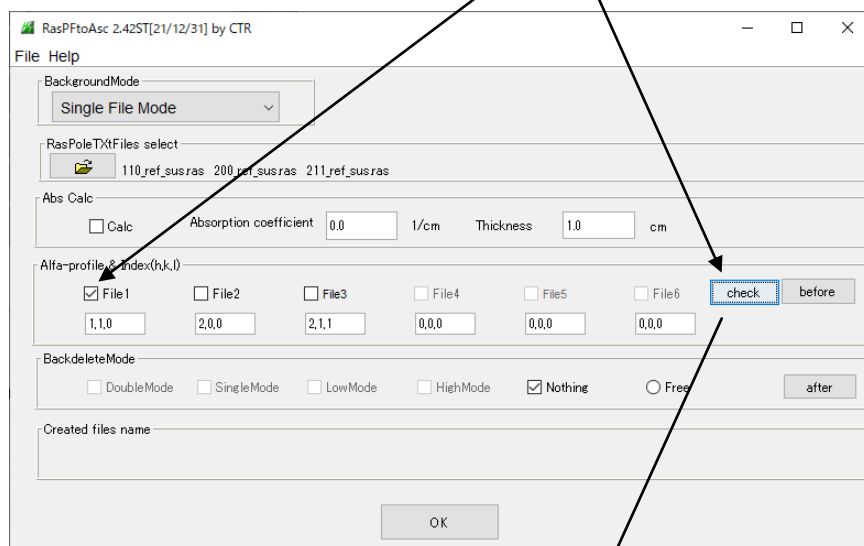
名前	更新日時	種類	サイズ
110_ref_sus.ras	2012/05/22 12:18	RAS ファイル	245 KB
200_ref_sus.ras	2012/05/22 12:54	RAS ファイル	245 KB
211_ref_sus.ras	2012/05/22 13:21	RAS ファイル	245 KB

r a s から A s c データ変換は R a s P F t o A s c ソフトウェア

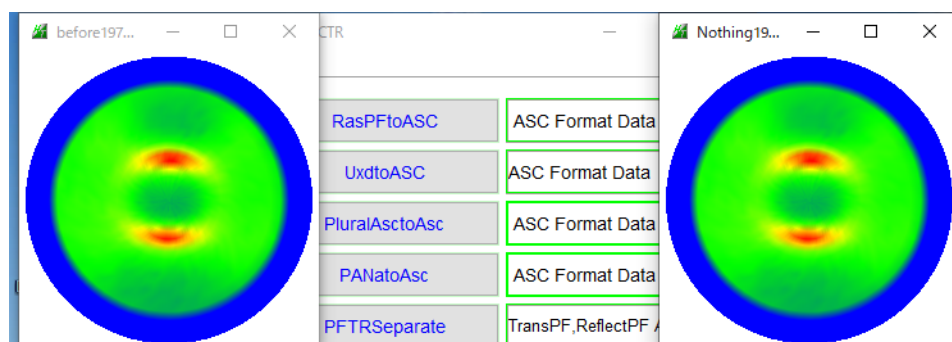


## 入力データの選択

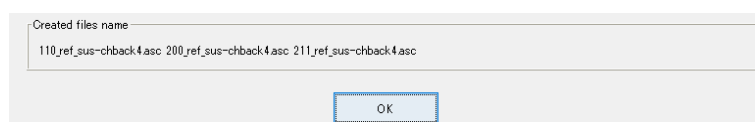
チェックを入れてデータを確認する。



r a s ファイルにバックグラウンドデータの登録を確認



Before と after で極点図確認



OKでA s c データ作成

> tmp > ras

名前	更新日時	種類	サイズ
110_ref_sus.ras	2012/05/22 12:18	RAS ファイル	245 KB
200_ref_sus.ras	2012/05/22 12:54	RAS ファイル	245 KB
211_ref_sus.ras	2012/05/22 13:21	RAS ファイル	245 KB
110_ref_sus-chback4.asc	2021/08/08 5:05	RINT2000アスキー	16 KB
200_ref_sus-chback4.asc	2021/08/08 5:05	RINT2000アスキー	16 KB
211_ref_sus-chback4.asc	2021/08/08 5:05	RINT2000アスキー	16 KB

## バックグラウンドデータ

110\_ref\_sus-chback4.asc - メモ帳

ファイル(F) 編集(E) 書式(O) 表示(V) ヘルプ(H)

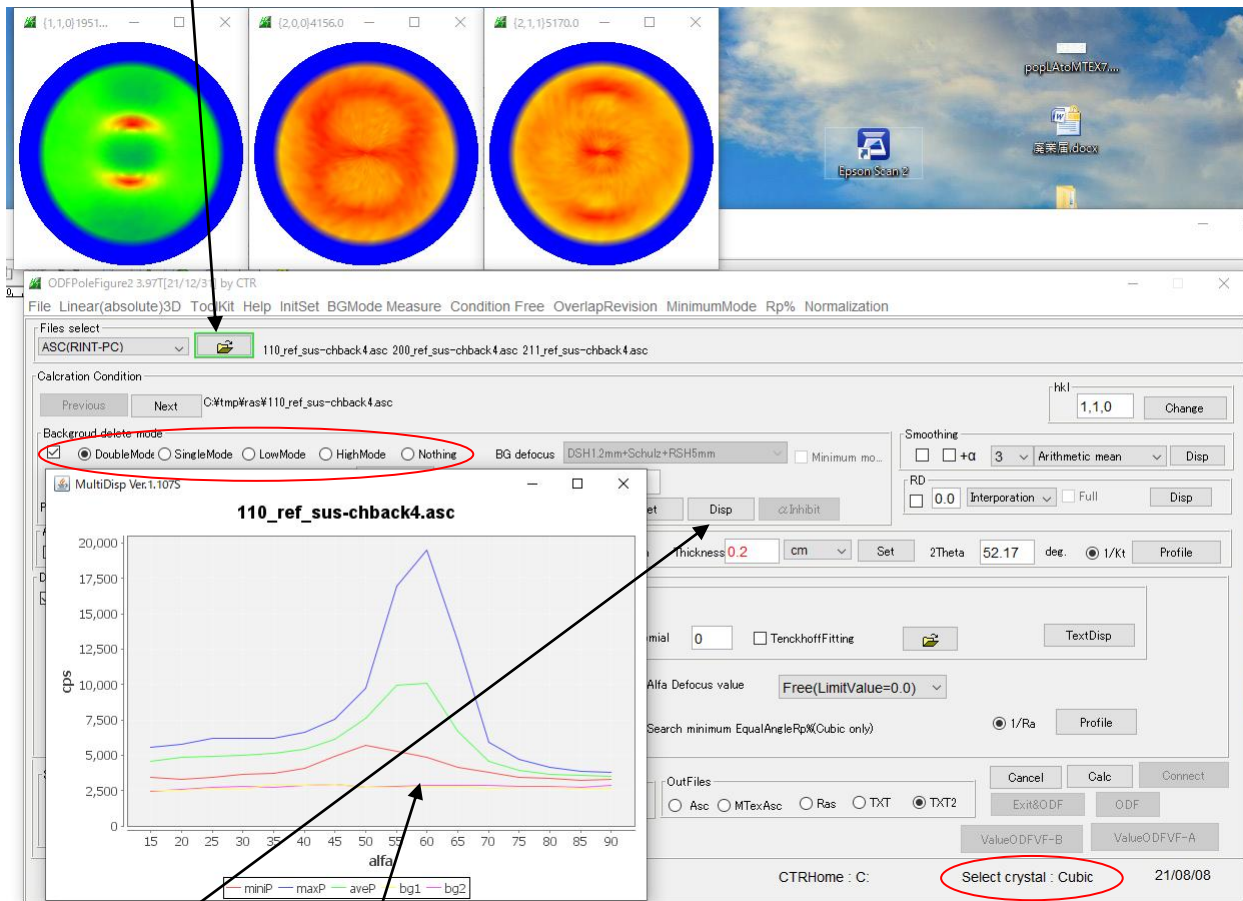
```
*TYPE = Raw
*CLASS = Polefig
*SAMPLE =
*COMMENT =
*FNAME =
*DATE =

*GROUP_COUNT = 1
*THICKNESS = 0, 1.0
*MU = 0, 0.0
*MEAS_MODE = Continuous Scanning
*SPEED_DIM = sec./step
*YUNIT = counts
*PF_METHOD = 1, Schulz reflection method
*PF_PCOUNT = 1,16
*PF_ASTART = 1,15.0
*PF_ASTOP = 1,90.0
*PF_ATEST = 1,5.0
*PF_2THANGLE = 1,52.17

*BEGIN
*GROUP = 0
*START = 0.0
*STOP = 360.0
*STEP = 5.0
*SPEED = 1.0
*SLIT_SPEC = 0, 1.0deg, 3.3163000000, 10
*SLIT_SPEC = 1, 2.0mm, 2.0, 10
*SLIT_SPEC = 2, 10.000mm, 10.000, 10
*SLIT_SPEC = 3, 10.000mm, 10.000, 10
*LOW = 91512.0
*HIGH = 88560.0
*FULL_SCALE = 1000
*PF_ANGLE = 15.0
*PF_BANGLE = 0.0
*INDEX = 1,1.0
*COUNT = 73
4454.0
4454.0
4576.0
```

## 極点処理

### Asc データの選択



Asc データにバックグラウンドが登録されていると、background にチェックが入り、Nothing 以外にチェック Disp で background が表示される。

**Bakugroud** プロファイルに凸凹がある場合、BGMode でプロファイル修正を行う

凸凹があると、バックグラウンド削除で予期しない面配向が発生することもある。

### defocus に関して

1. random 試料から計算する場合

3. 内部計算データの作成をバックグラウンドデータで作成した

2. 内部計算データの作成をバックグラウンドに defocus 補正を施し作成した

内部計算を用いる場合、2. と 3. を確かめて使用 (多分 2. 選択がベータ)

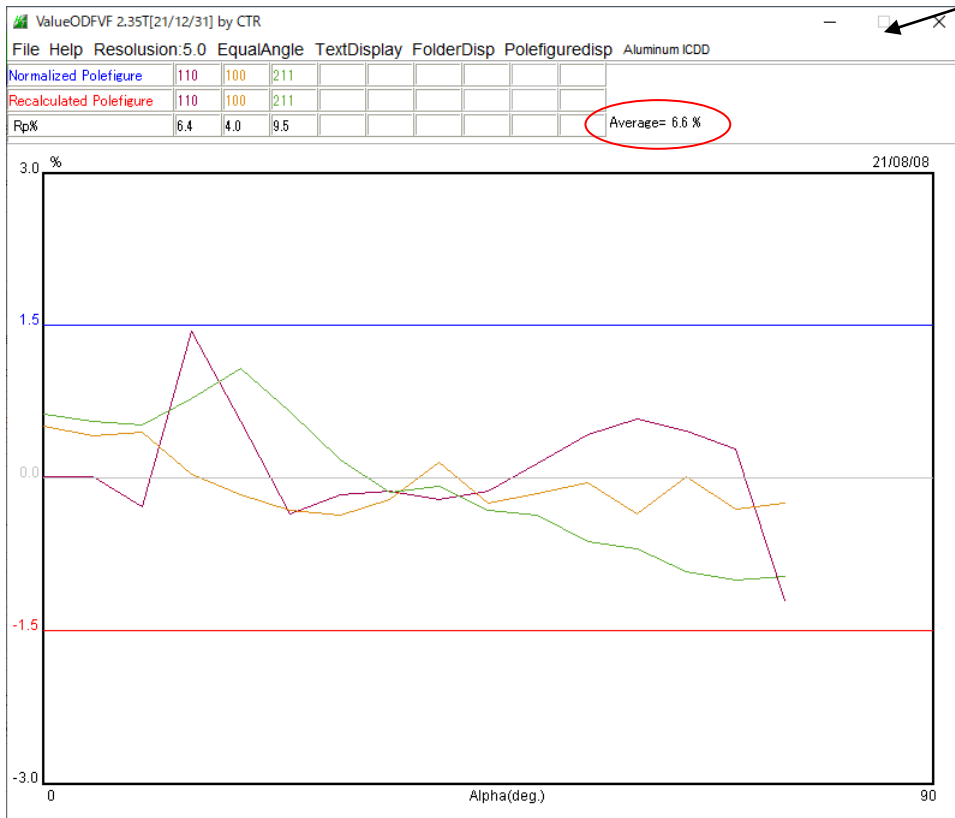
☐ Search minimum Equal Angle Rp%(Cubic only)

選択された defocus 補正曲線を変化させ最適な補正曲線を選択

計算結果の極点図から ODF 解析結果との比較 Rp % の計算

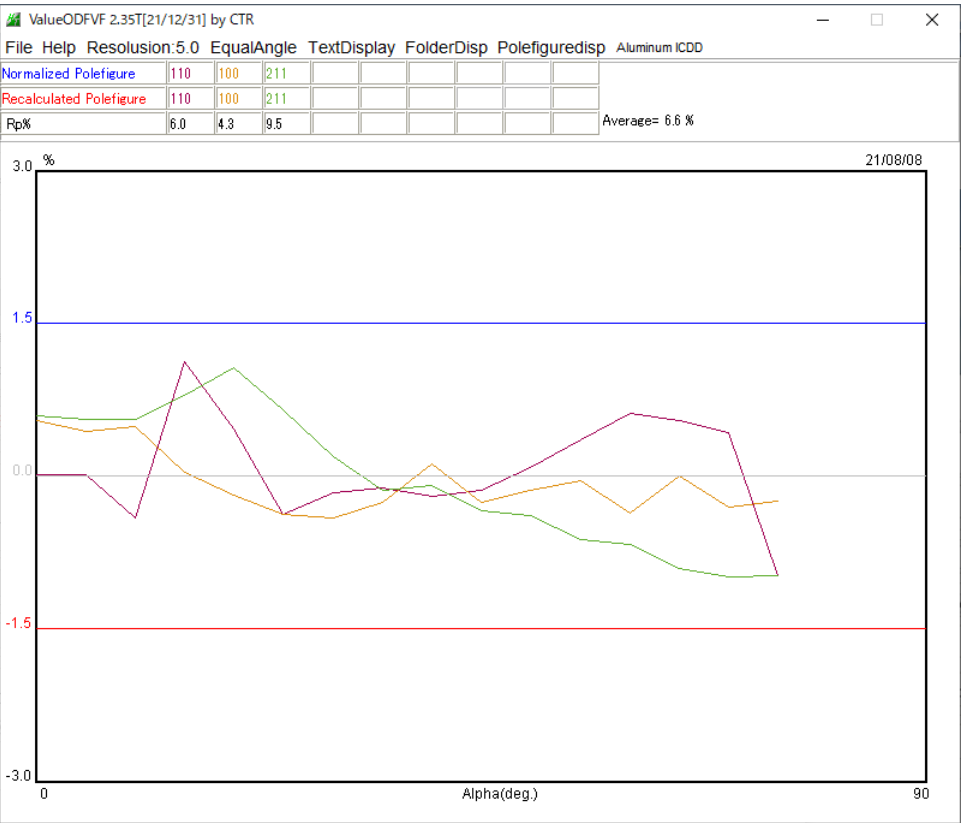
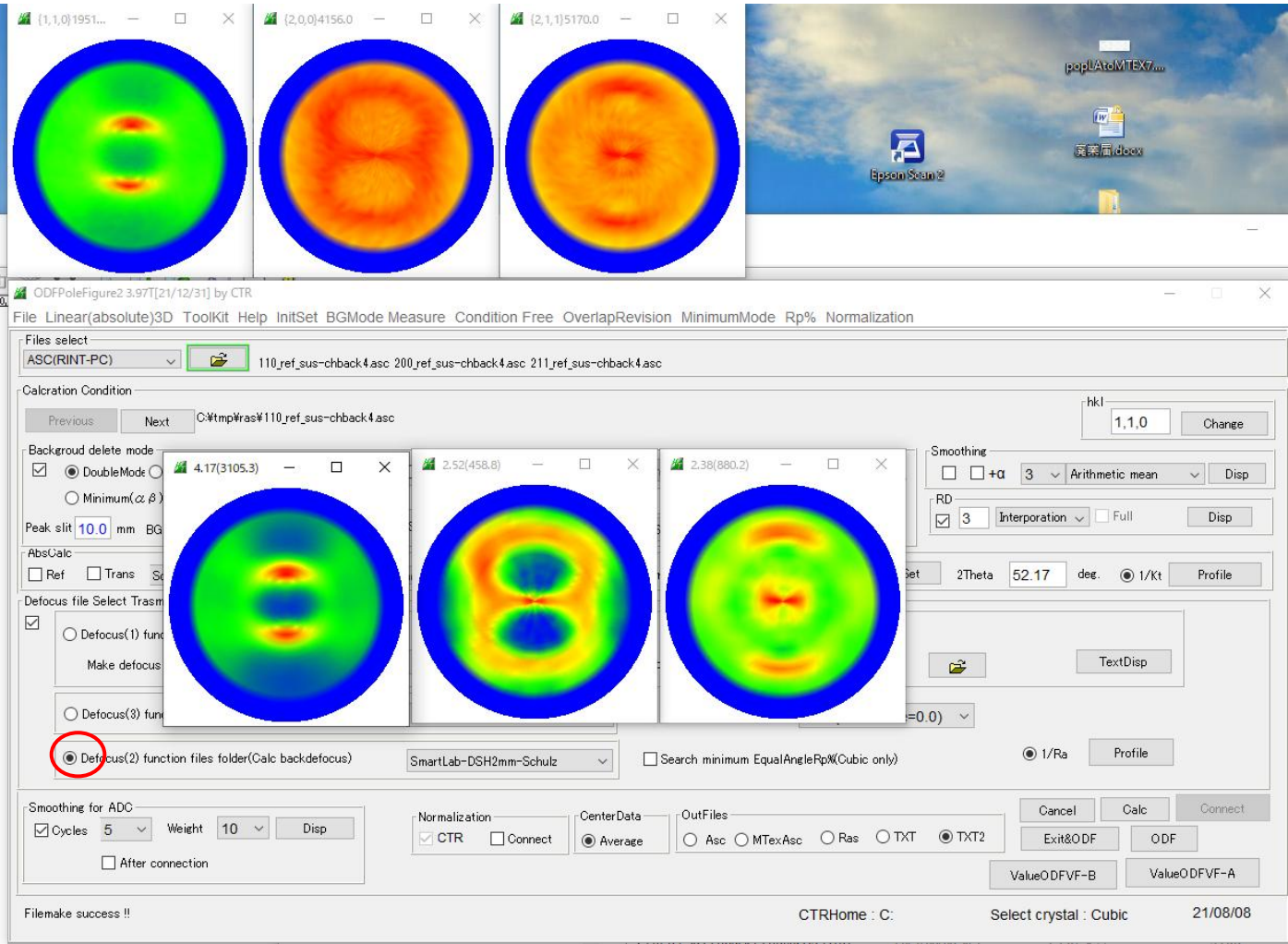
defocus補正なしで計算 (BG 削除+RD補正+平均化+規格化)

The screenshot displays the SmartLab software interface for ODF calculation. The top row shows three circular ODF maps. The main window is titled "ODFPoleFigure2 3.97T[21/12/31] by CTR". The "Files select" section shows the input files: "110\_ref\_sus-chback4.asc", "200\_ref\_sus-chback4.asc", and "211\_ref\_sus-chback4.asc". The "Calculation Condition" section includes "Background delete mode" (checked), "DoubleMode" (selected), "Peak slit 10.0 mm", "BG S" (selected), "AbsCalc" (checked), "Ref" (checked), "Trans" (checked), and "Sch" (checked). The "Defocus file Select Transmis" section shows "Defocus(1) function" (selected). The "Smoothing for ADC" section shows "Cycles 5" and "Weight 10". The "Normalization" section shows "CTR" (checked). The "CenterData" section shows "Average" (selected). The "OutFiles" section shows "TXT2" (selected). The "Select crystal" dropdown is set to "Cubic". The "ValueODFVF-B" and "ValueODFVF-A" buttons are visible. The status bar shows "Filemake success!!", "CTRHome : C:", and "21/08/08".



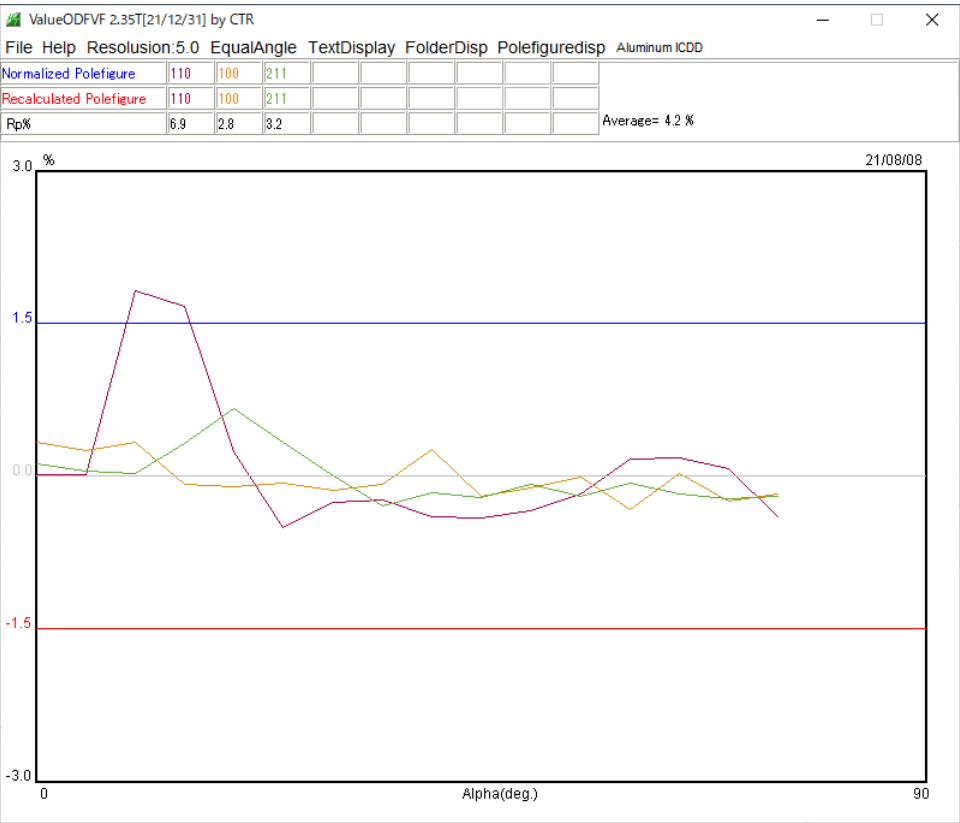
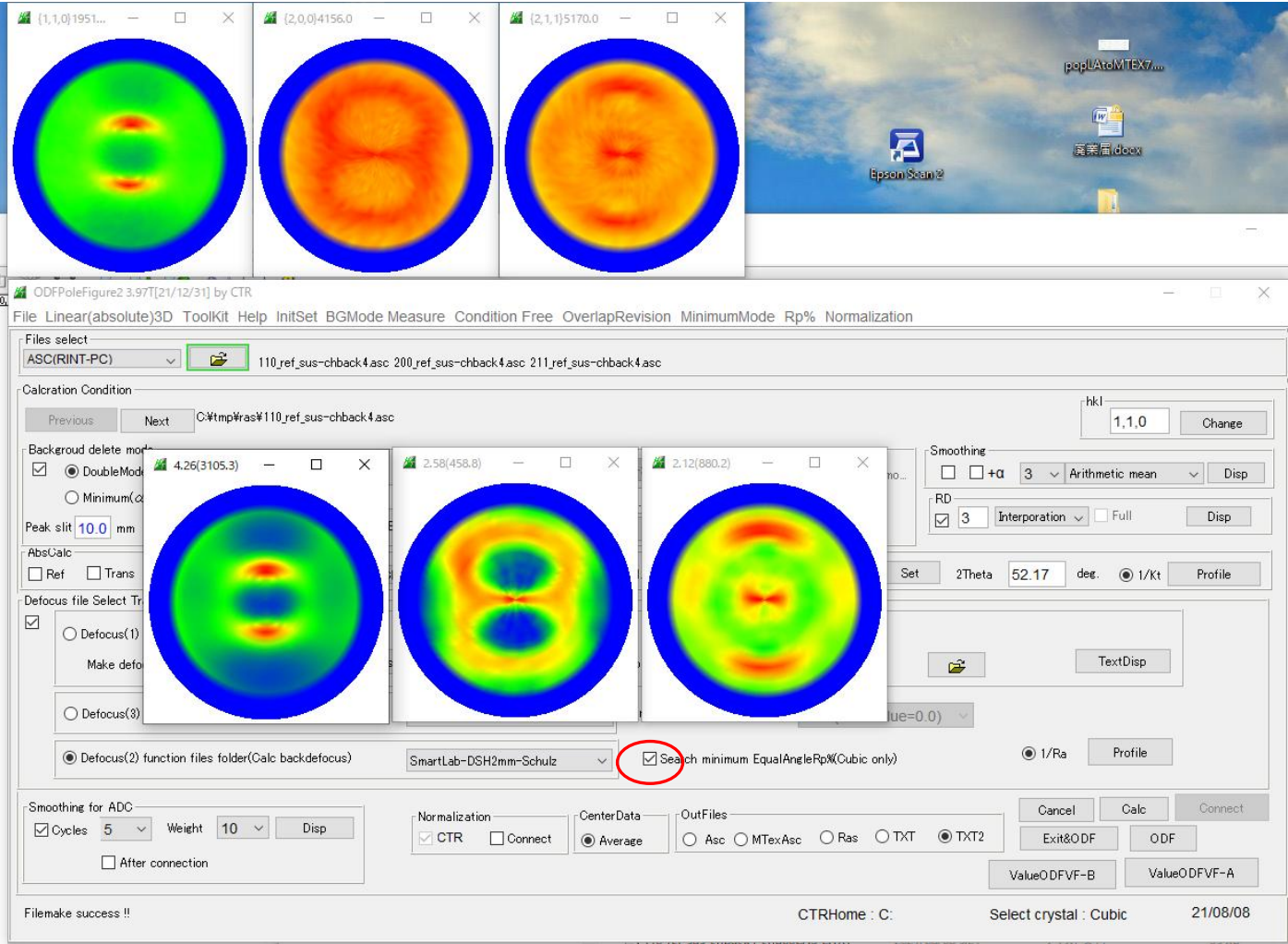


d e f o c u s 補正あり（内部計算）（BG 削除+RD 補正+ d e f o c u s 補正+平均化+規格化）



d e f o c u s 補正ありなしでR p %に変化なし

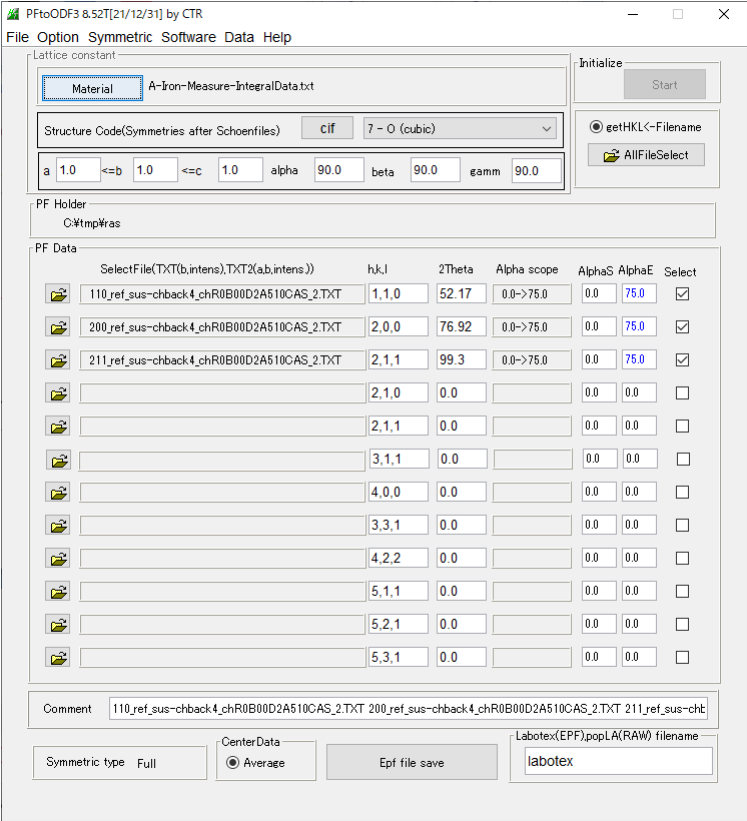
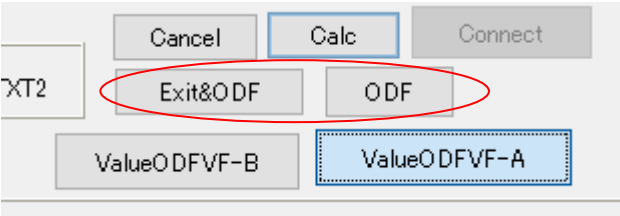
defocus補正あり(内部計算)(BG削除+RD補正+defocus補正+最適Rp%+平均化+規格化)



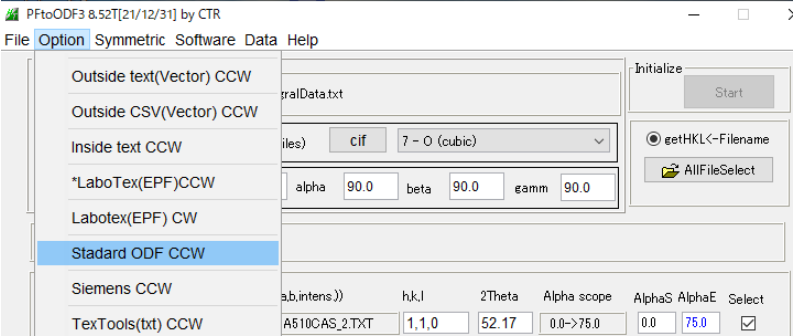
R p %が最適化されています。以降このデータを用いる。



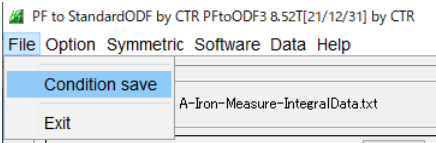
StandardODF入力データ作成



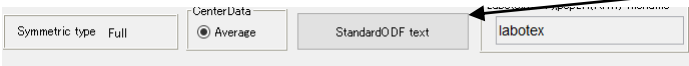
LaboTexデータ画面をStandardODFに変更



以降 StandardODF をデフォルトにする方法は、条件を s a v e する。



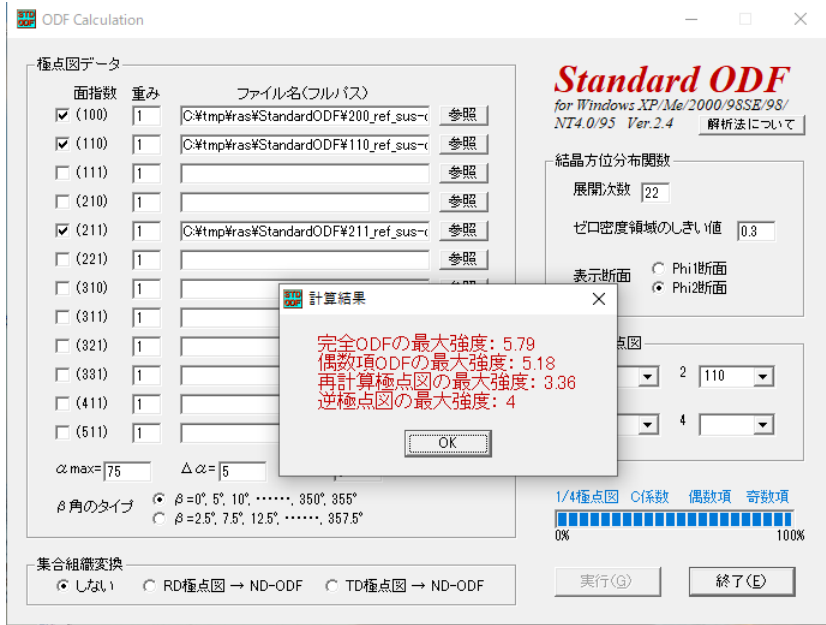
StandardODF 向けファイル作成



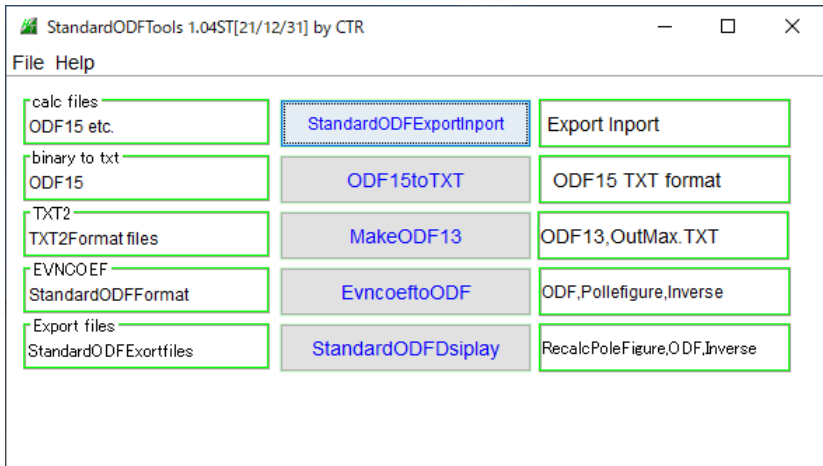
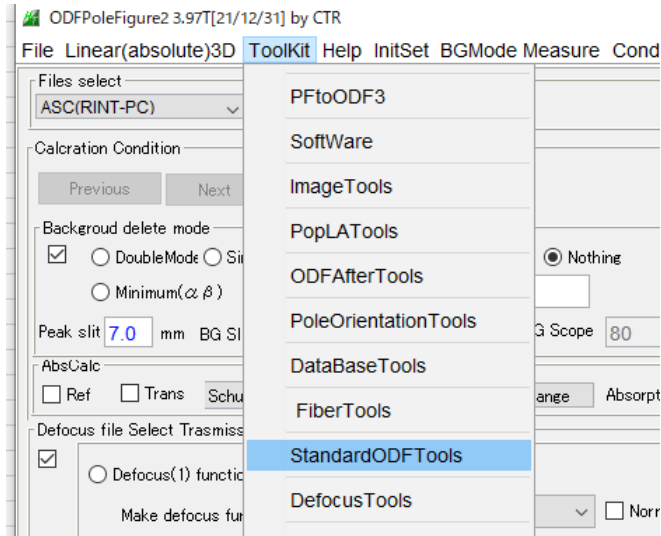
名前	更新日時	種類	サイズ
110_ref_sus-chback4_chR0B00D2A510CAS_2StdODETXT	2021/08/08 5:57	テキスト文書	11 KB
200_ref_sus-chback4_chR0B00D2A510CAS_2StdODETXT	2021/08/08 5:57	テキスト文書	11 KB
211_ref_sus-chback4_chR0B00D2A510CAS_2StdODETXT	2021/08/08 5:57	テキスト文書	11 KB

## StandardODFで解析

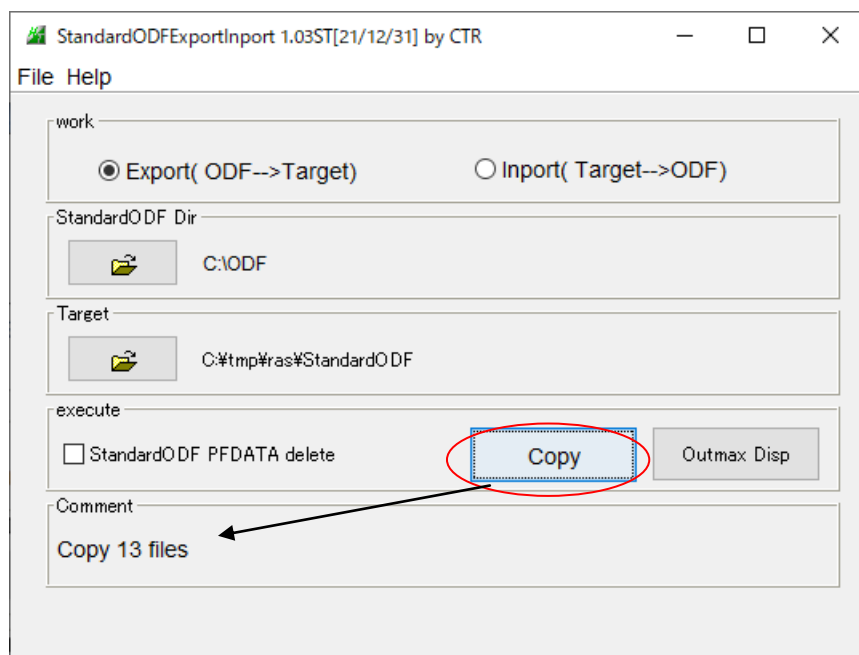
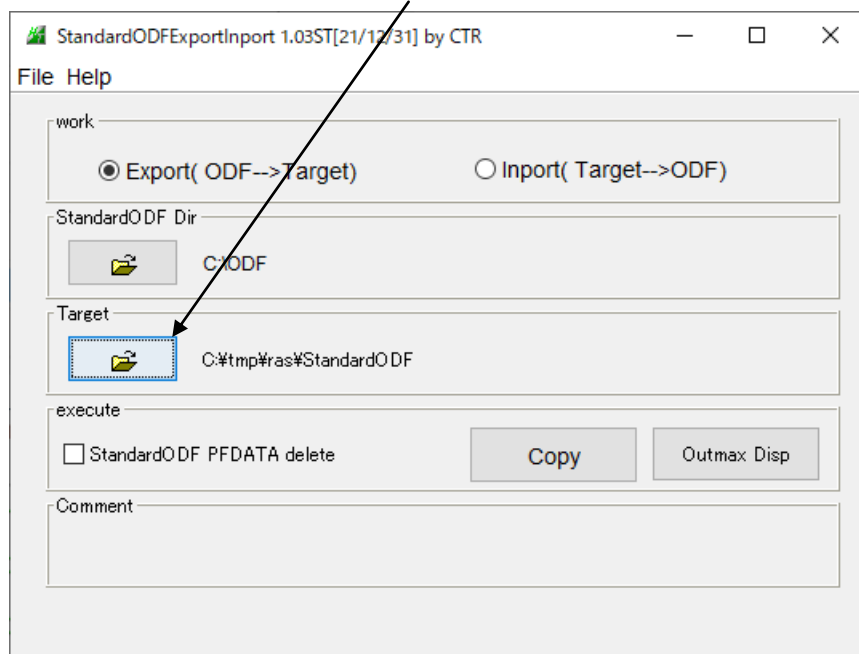
上記作成したファイルを指定



ODF 計算を終了したら、C:\¥ODF 以下のデータを s a v e する。

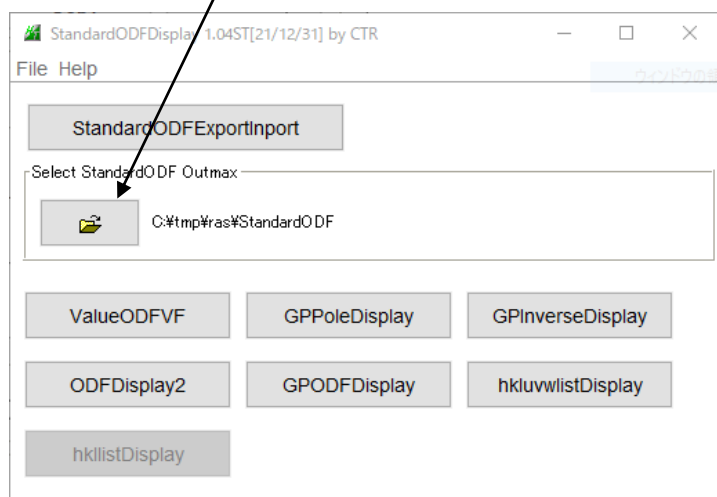


退避するホルダを選択、ODF 入力ホルダを選択

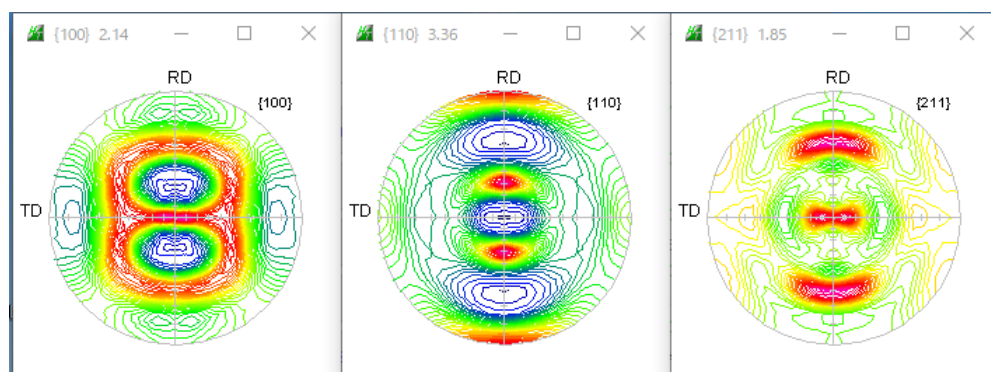


Export files StandardODFExortfiles	StandardODFDsisplay	RecalcPoleFigure,ODF,Inverse
---------------------------------------	---------------------	------------------------------

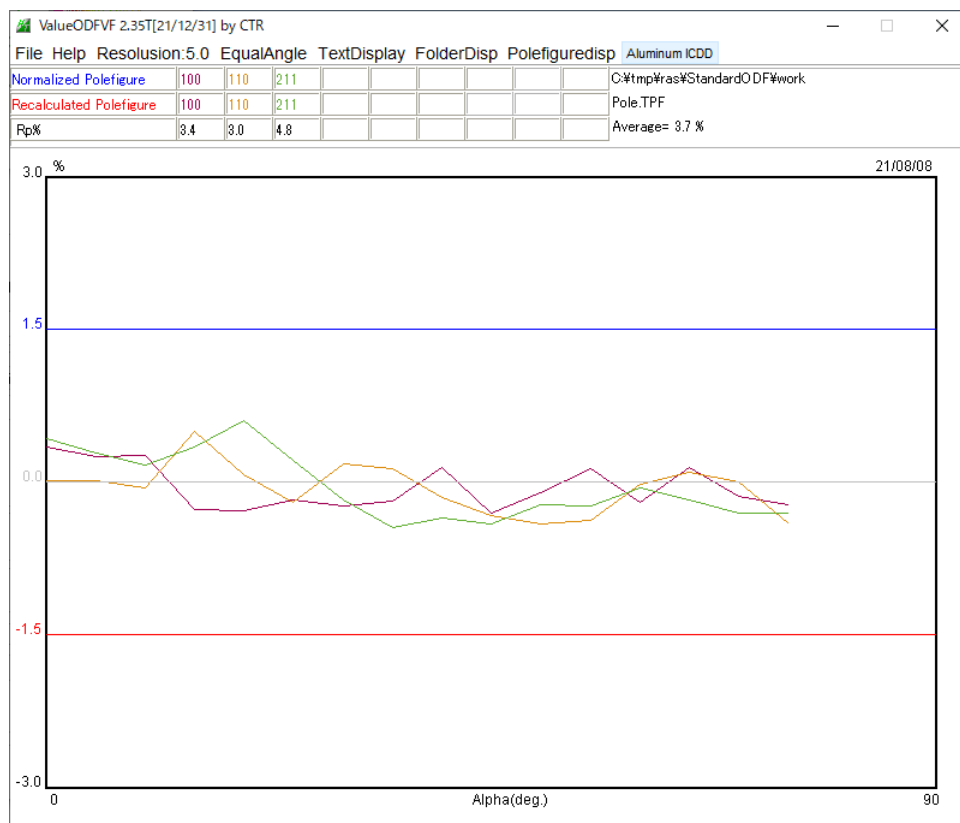
ホルダを選択



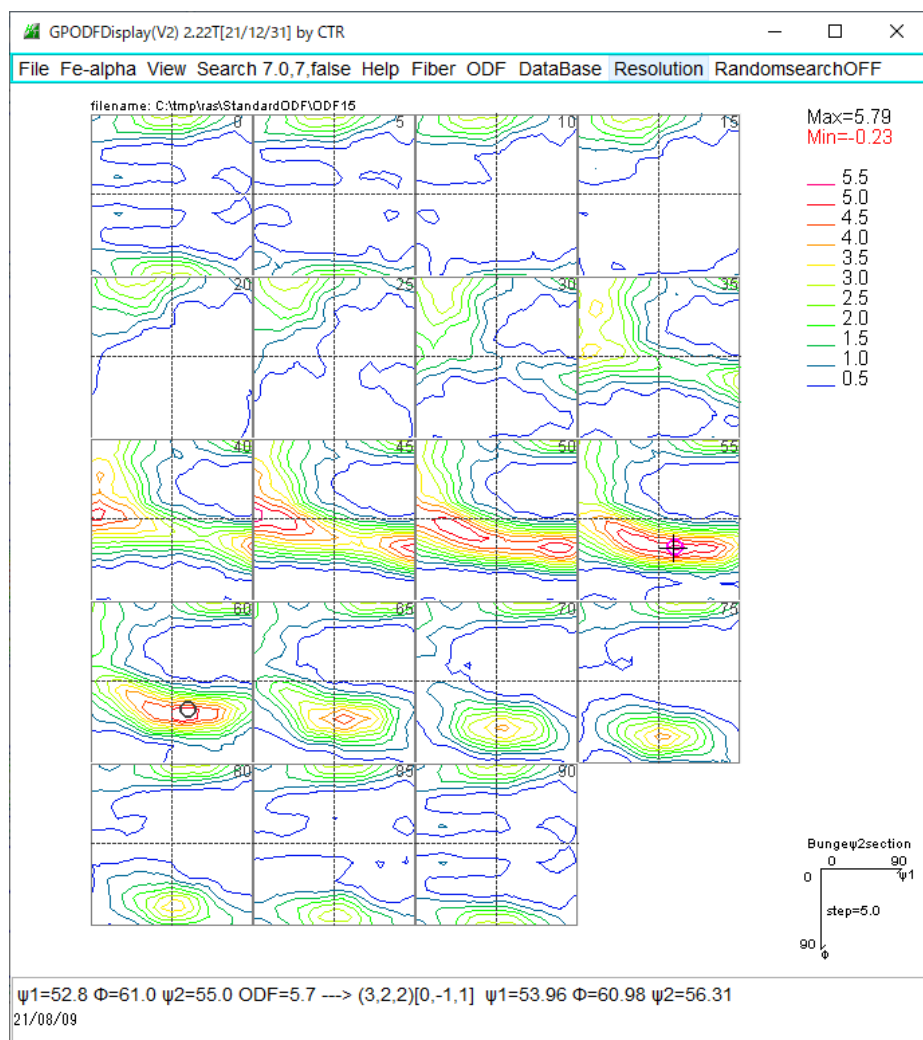
再計算極点図が表示されます。



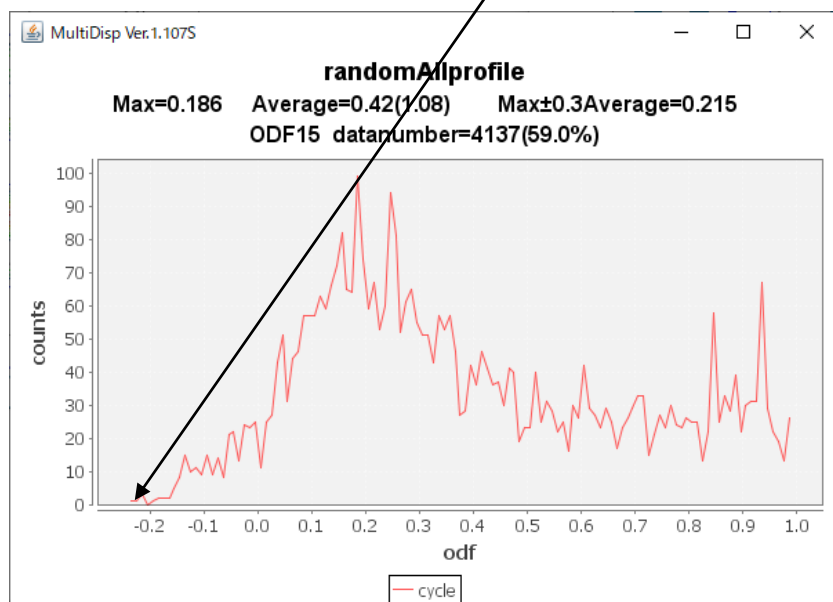
ValueODFVF で Rp%の確認



## ODF図の解析

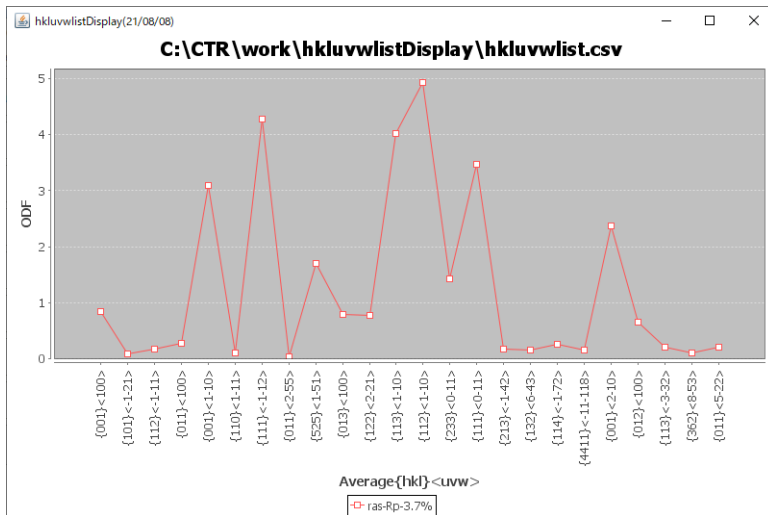


Random レベルを示す Min=-0.23

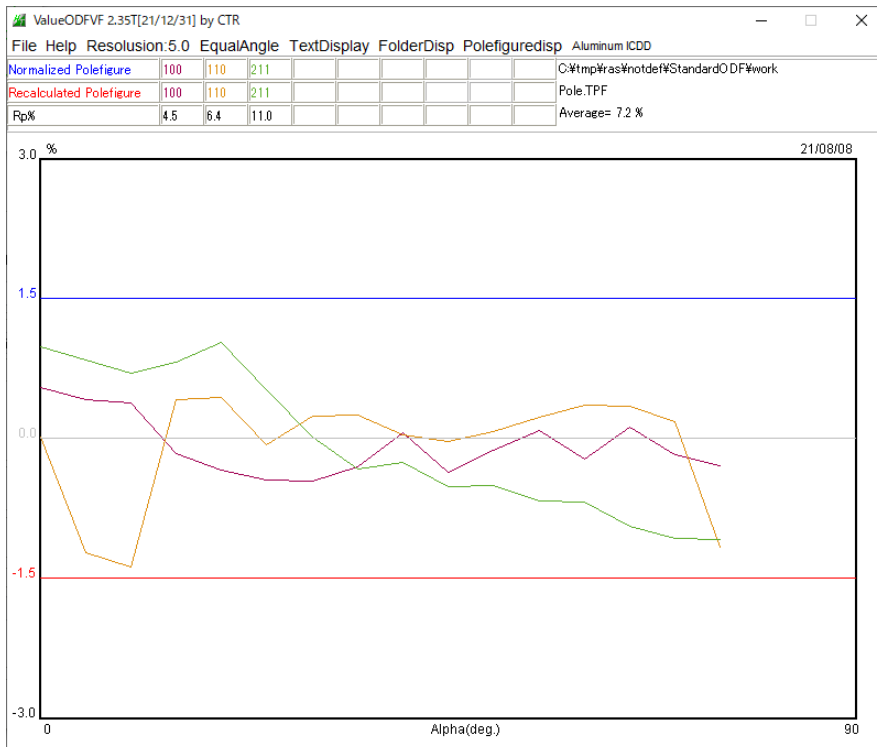
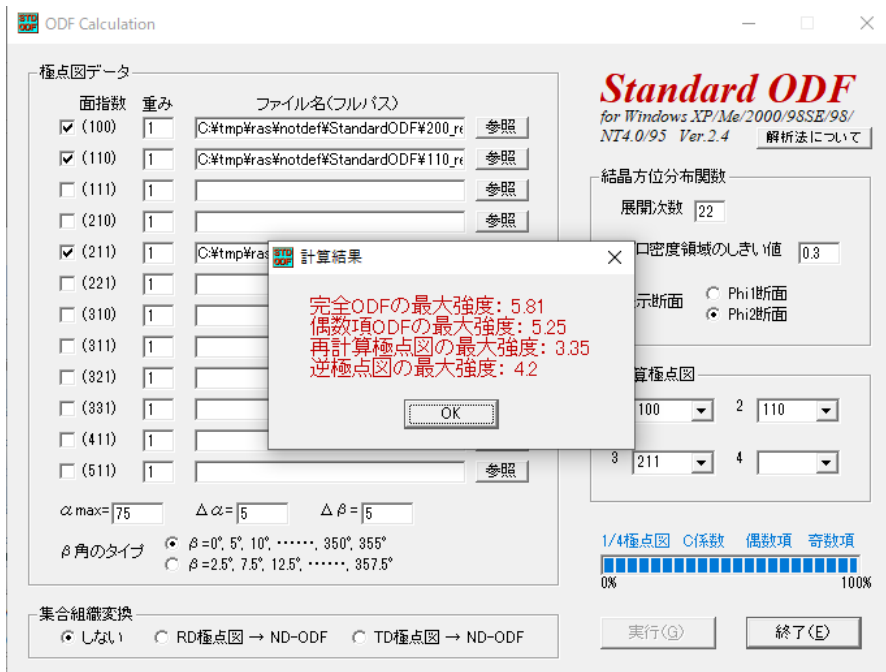


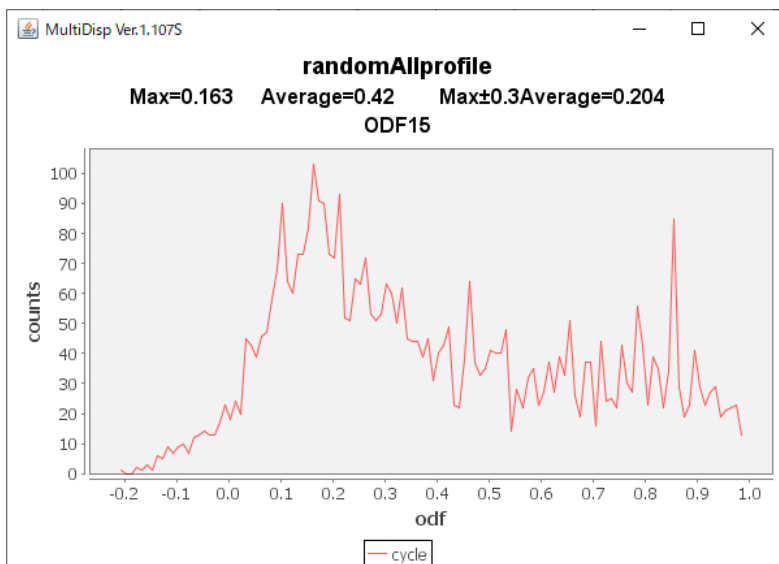
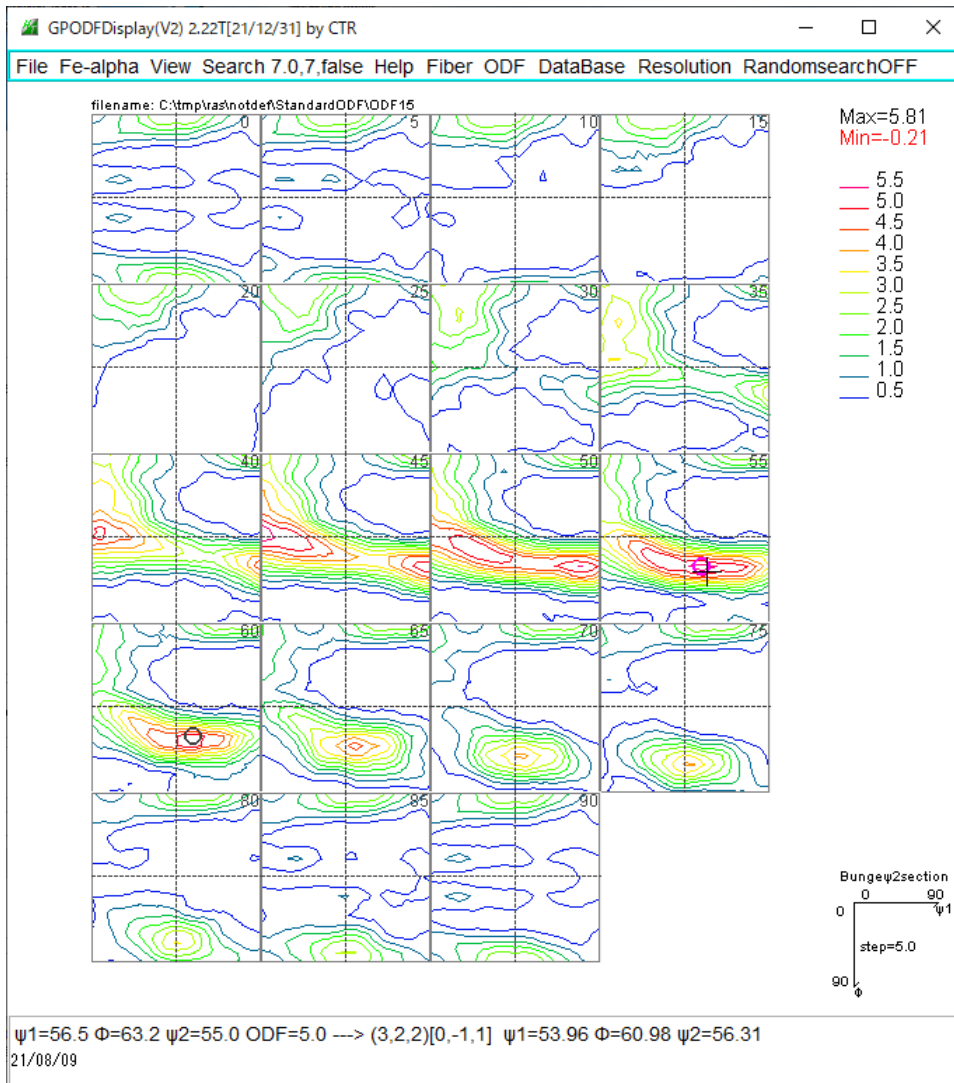
平均値で0.217  $\rightarrow$  random値は18.6%と計算されるが、Ghostの影響を受けているため、random評価は出来ません。





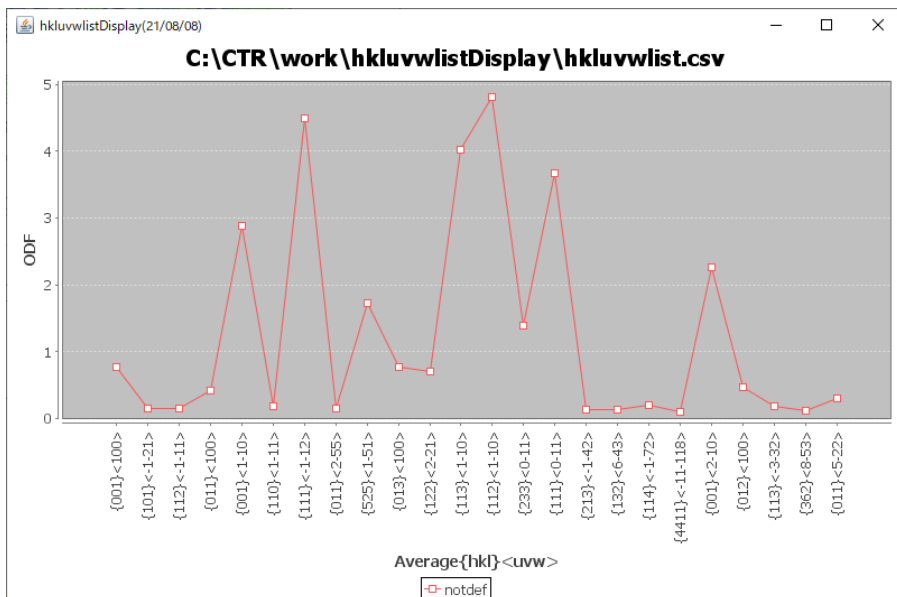
defocus補正なしでは



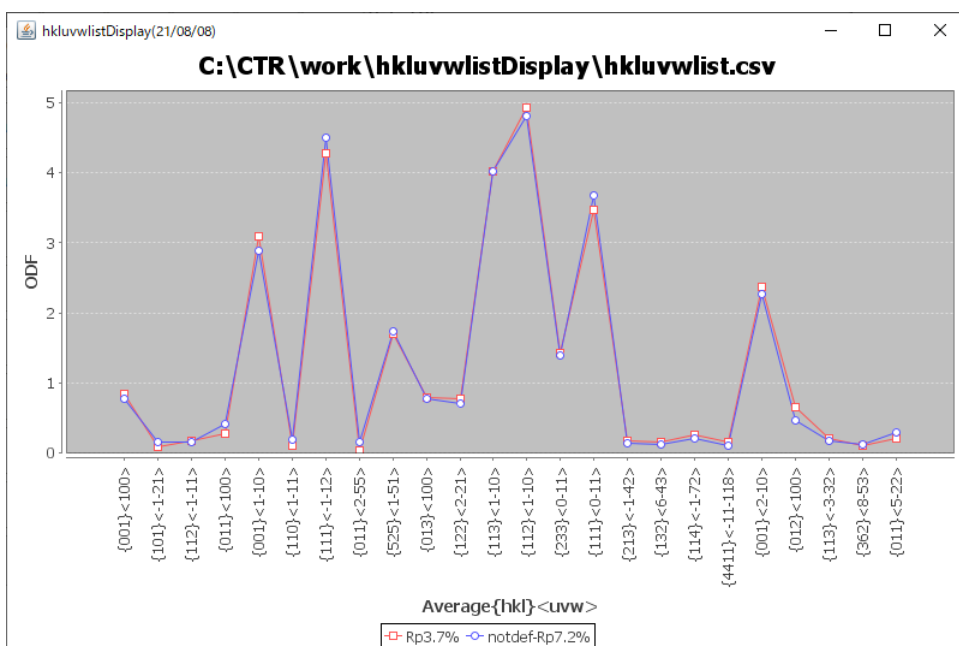


この材料に含まれる `random` は defocus 補正あり (18.6%) から defocus 補正なし (16.3%) と計算結果が異なります。Ghost が多すぎて評価できません。

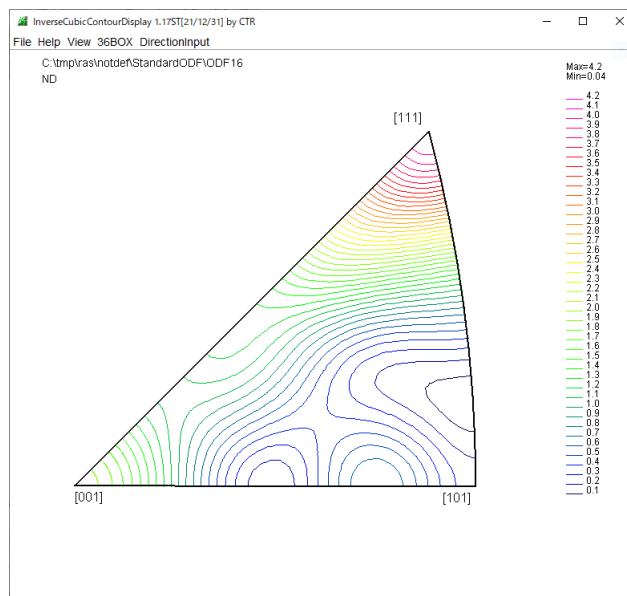
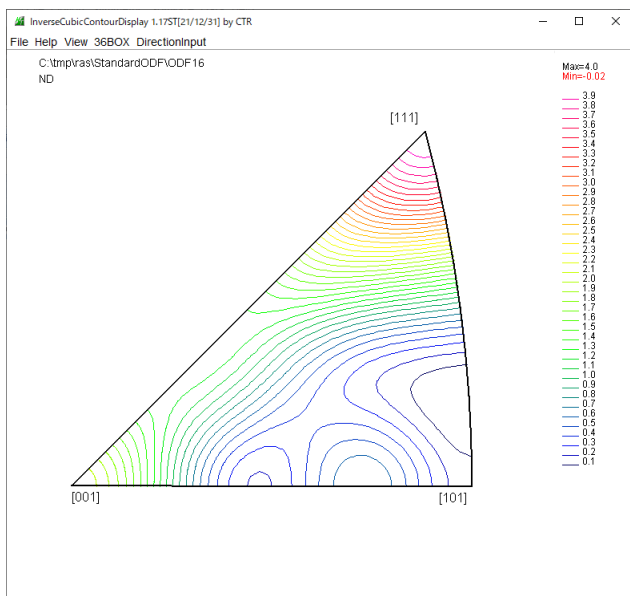
## f e f o c u s 補正なしの方位密度リスト



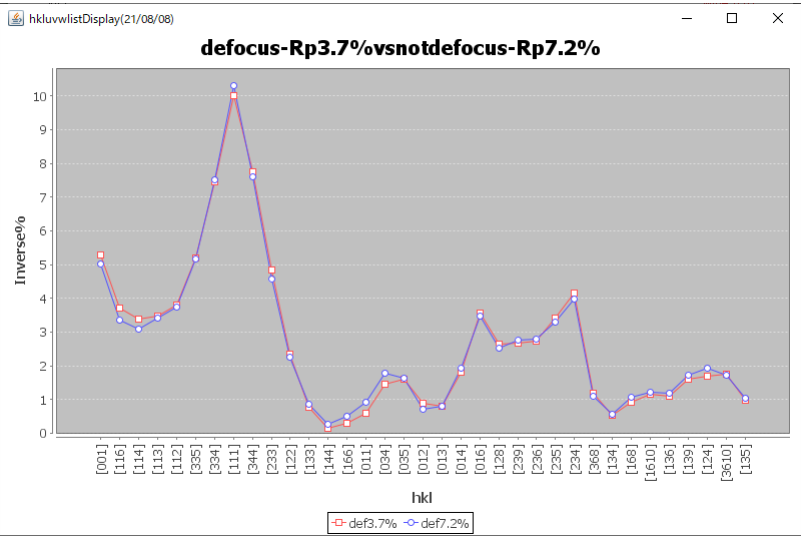
## d e f o c u s 補正ありなしの方位密度比較



## 逆極点図比較



defocus補正ありなしのND方向36Box方位密度比較



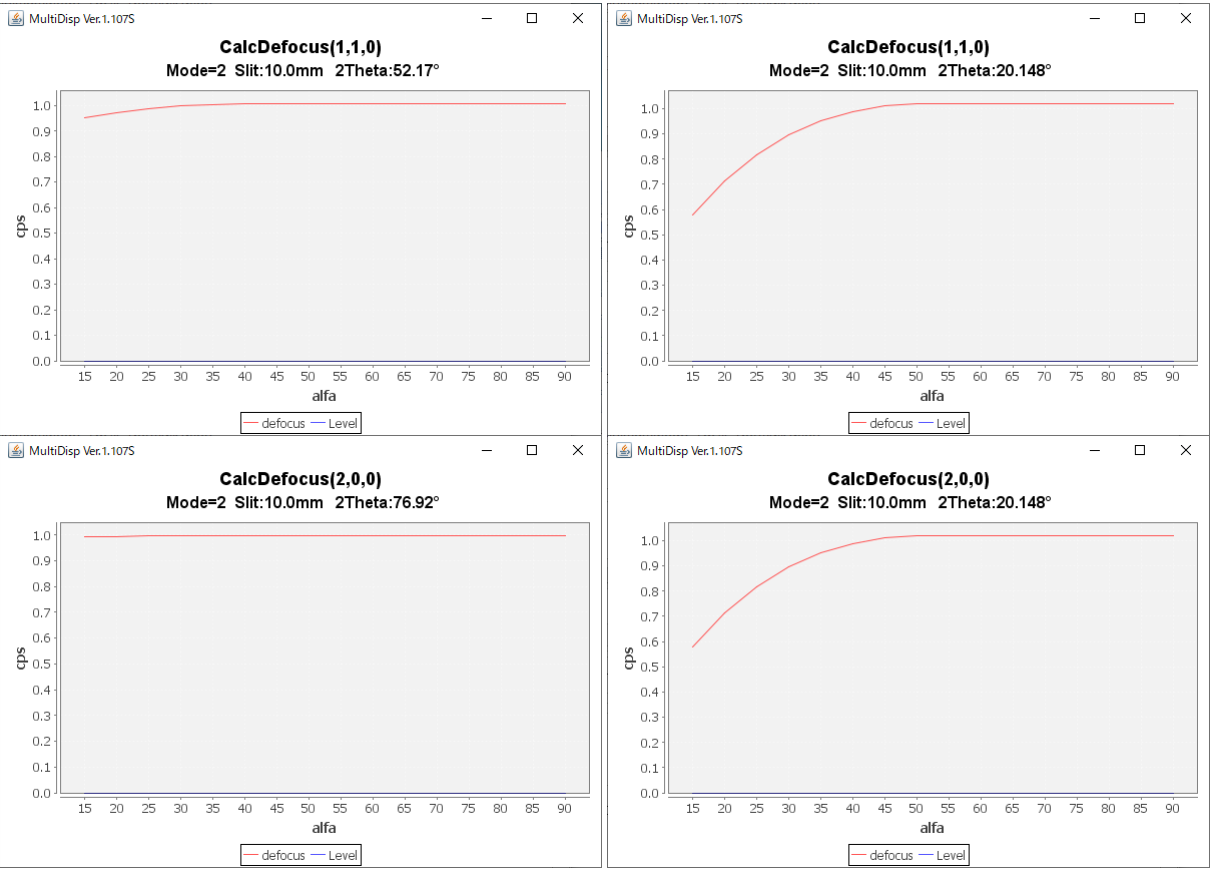
まとめ

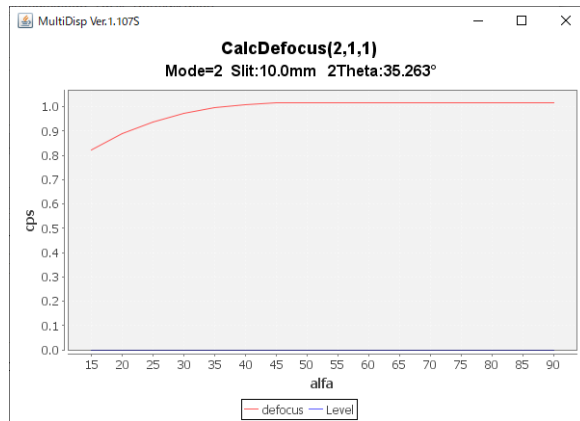
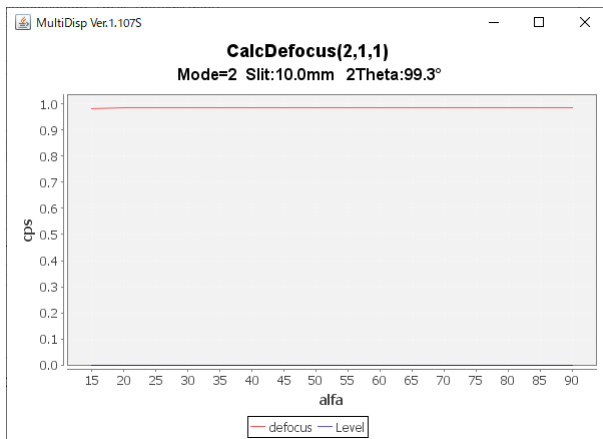
defocus補正ありなしで大きな違いはありません。(C oターゲット使用)

本データはC oターゲットを用いて測定したデータです。

defocus極点図は、測定2θに依存しています。

内部計算したdefocus曲線をC oターゲット (左) とM oターゲット(右)で比較



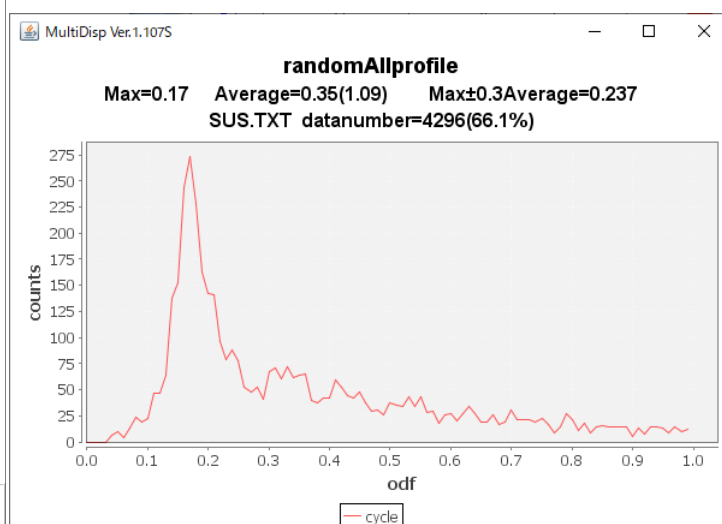
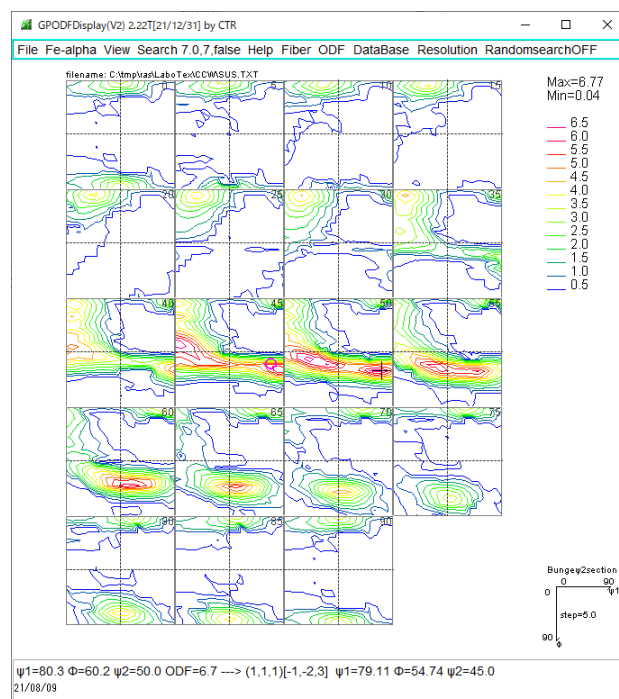
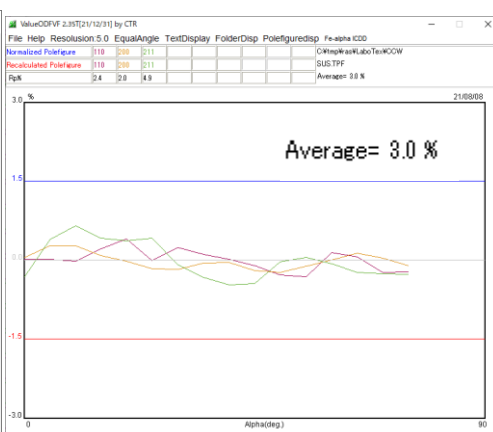
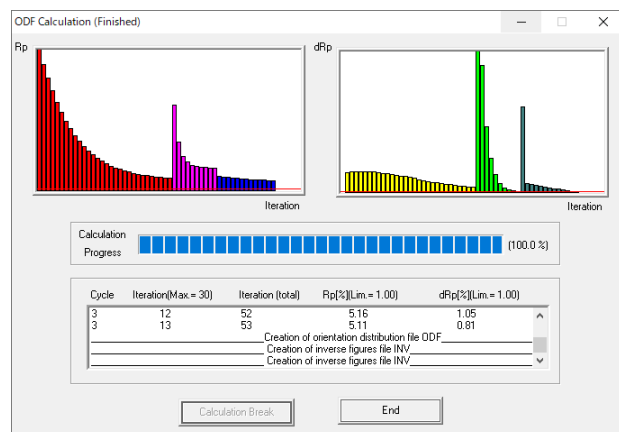


d e f o c u s 曲線は、受光スリット幅、測定  $2\theta$  角度に影響を受けます。  
内部で計算可能であるが、実際の r a n d o m 試料による補正を勧めます。

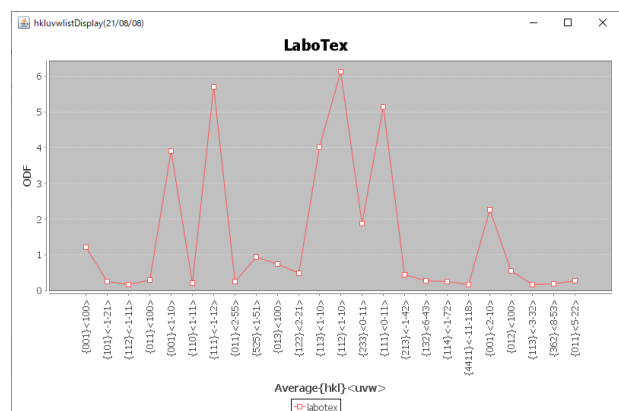


## 付録

## LaTeXで解析



Random レベルは0. 2 3 7 で r a n d o m は 1 7 %



## MTEXで解析

Import Wizard

Crystal Reference Frame  
Crystal Symmetry

Mineral  
☒ Indexed ☐ Not Indexed  
 mineral name:    
 plotting color:

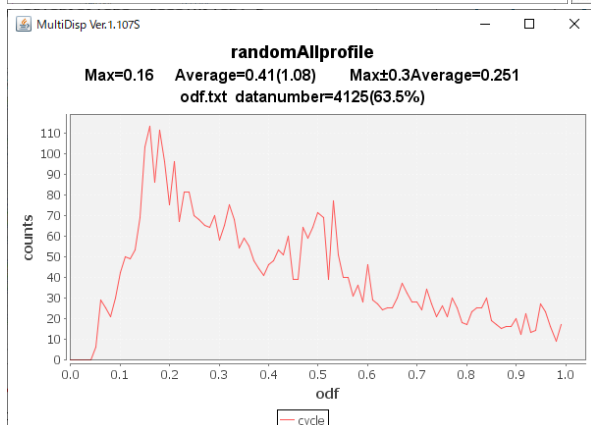
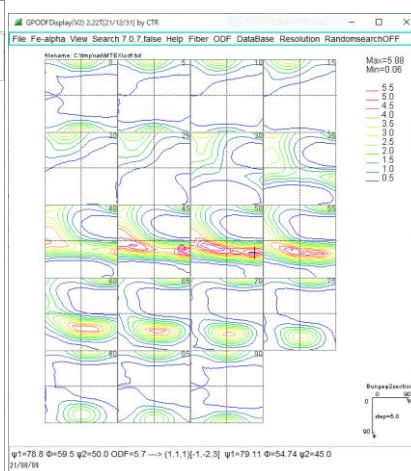
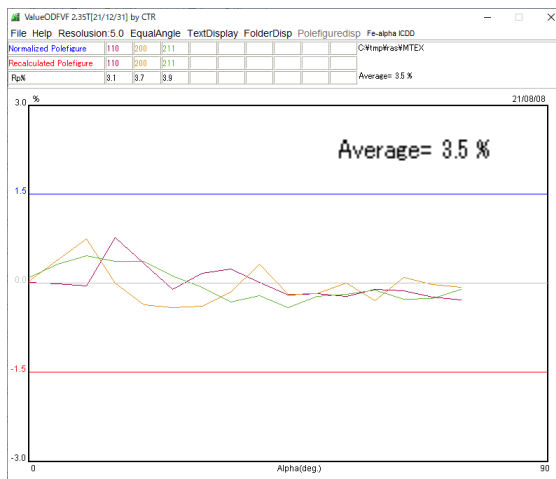
Crystal Coordinate System  
 Point Group:   
 Axis Length: a:  b:  c:   
 Axis Angle: alpha:  beta:  gamma:

Radially symmetric portion:

kernel: de la Vallee Poussin, halfwidth 5°

center: 4956 orientations, resolution: 5°

weight: 1



r a n d o mレベル (含有 random%) M a x 比較

StandardODF= 1 6 %

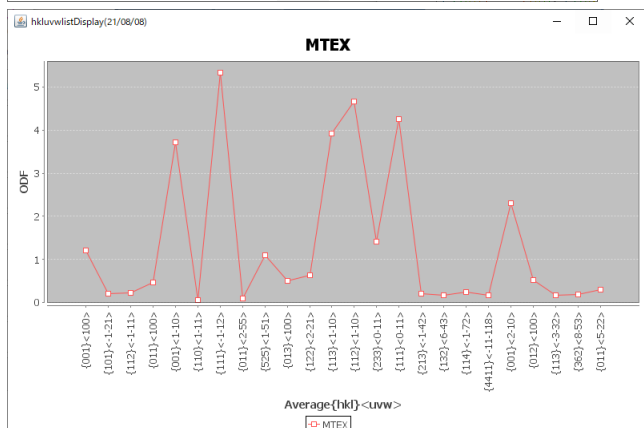
LaboTex= 1 7 %

MTEX= 1 6 %

各種補正を正確に行えば、random 含有量も計算可能

各種評価を行った結果、比較的G h o s t が少ない

L a b o T e x の結果が信頼できます。

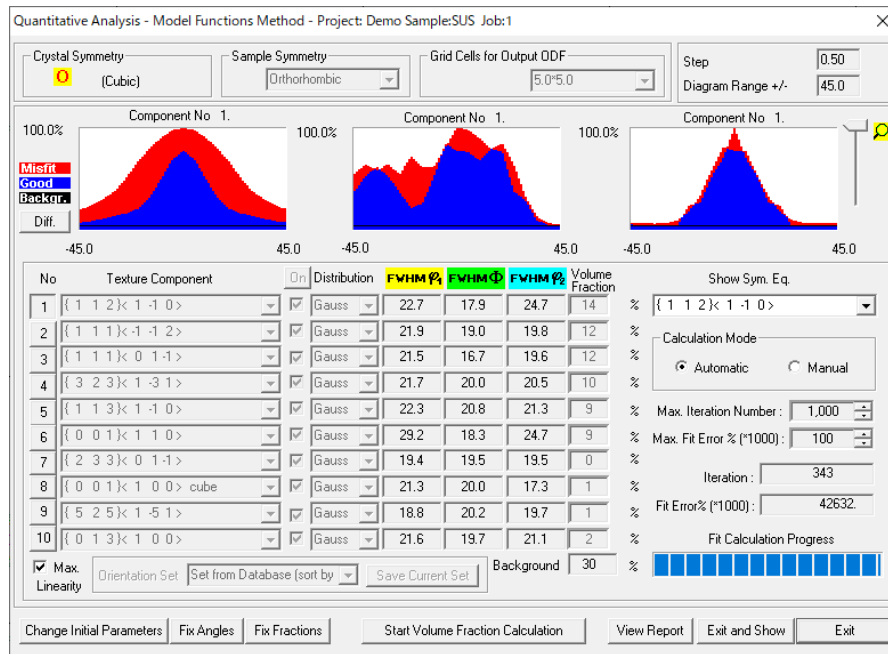


この r n d o m は、平滑化により最小密度レベルが上昇した為と判明、r a n d o m 定量時は平滑を行わない  
 (2022年07月29日追加)

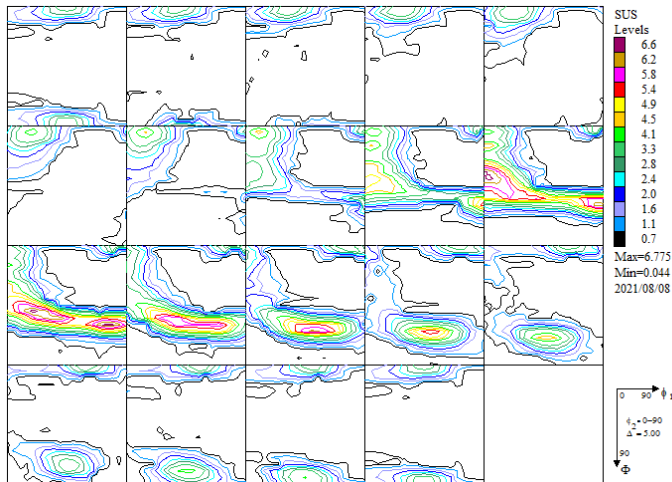
randomレベルの活用

方位の定量時、Other内のrandom量が把握できます。

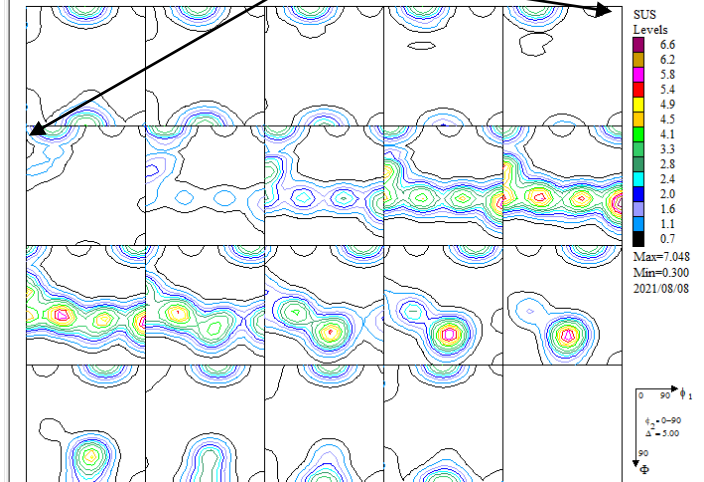
以上のデータの VolumeFraction を求めると



Background 30%=Other+random レベル



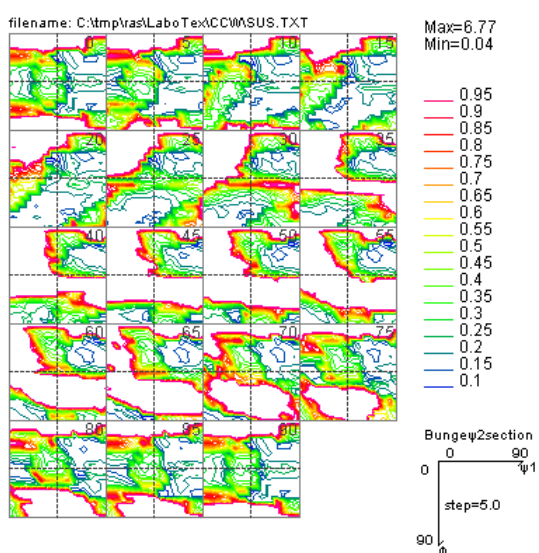
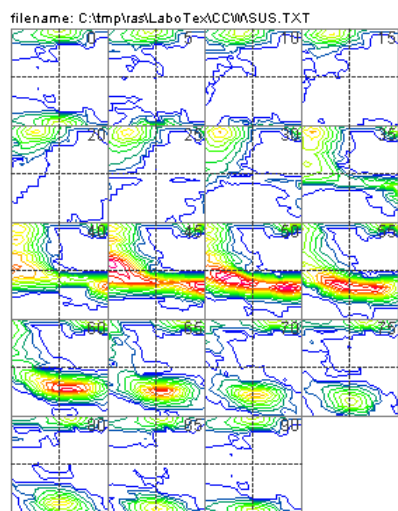
Other としては、この辺りが考えられます



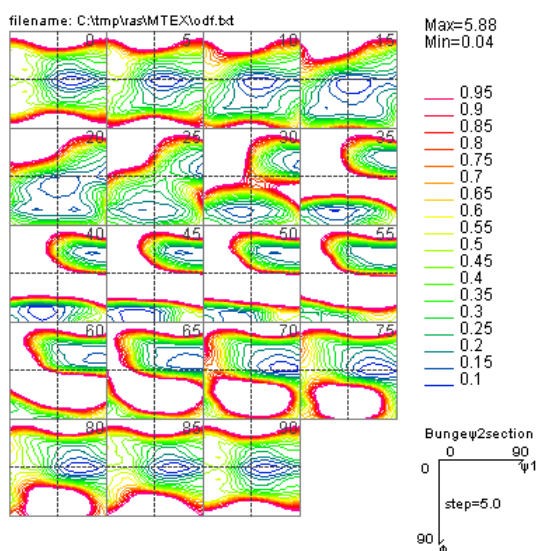
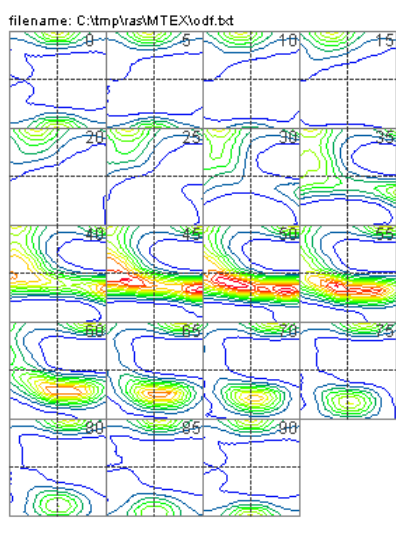
しかし、指定できる方位数に限界があるので、完全な定量は難しい

## ODF 比較

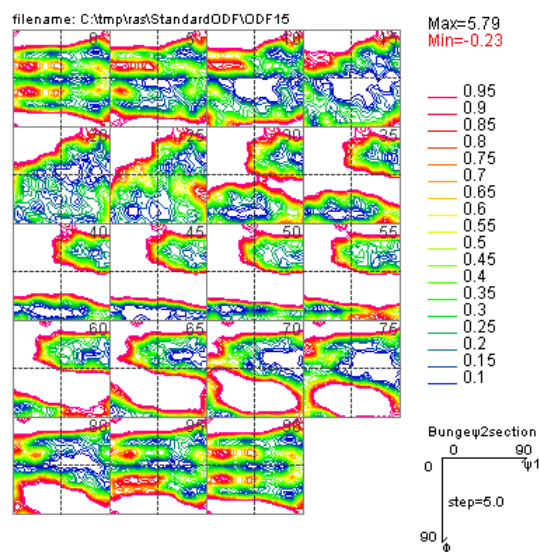
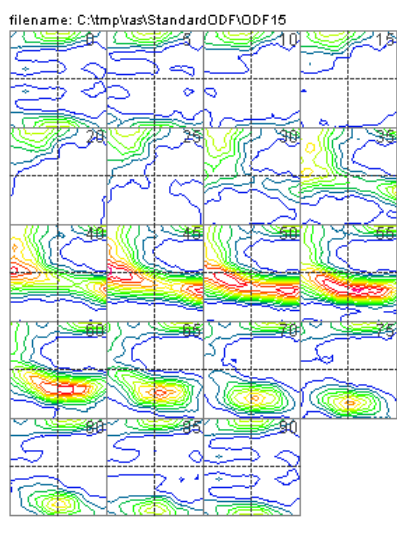
等高線 0>1 step=0.05 で描画



LaboTex



MTEX



Standard

MTEX と StandardODF の最大密度は LaboTex に比べ下がり Ghost が増えています。