SmartLabのrasファイルからODF解析

2021年08月08日 *HelperTex Office* SmartLabでは、測定時rasファイルとAscファイルの作成を行っていたが、最近は バイナリファイル rasXが登録される。

このrasXはリガクデータコンバータでrasファイルとAscに変換が可能であるが、 Ascファイルにバックグランドデータが登録されていない。

本資料では、randomがないsusの解析をras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

rasからAscデータ変換はRasPFtoAscソフトウエア

M ODFPoleFigure2 3.97T[21/*	12/31] by CTR	
File Linear(absolute)3D	ToolKit Help InitSet BGMode N	Measure Condition Free OverlapRevision MinimumMode
Files select ASC(RINT-PC) ~	PFtoODF3	
Calcration Condition	SoftWare	
Previous Next	ImageTools	
Backgroud delete mode	PopLATools	
O Double Mode OS⊪	ODFAfterTools	Nothing BG defocus DSH12mm+Schul2+RSH5mm Trans blinds angle 30.0
Peak slit 7.0 mm BG SI	PoleOrientationTools	G Scope 80 deg. 90 deg. Set Disp
AbsCalc	DataBaseTools	
Ref Trans Schu	FiberTools	ange Absorption coefficien 133.0 1/cm Thickness 0.2
Defect 1) function	StandardODFTools	
Make defocus fur	DefocusTools	✓ Normalization degree of a polynomial 0
	ClusterTools	
O Defocus(3) function	InverseTools	BB185mm V Limit Alfa Defocus value
Defocus(2) function	MeasureDatatoASCTools	SmartLab-DSH2mm-Schulz ~ Search minimum Equal

MeasureDatatoASC 1.08T[21/1. File Help	2/31] by CTR	- 🗆 X
SmartLab measure data Ras Format Data(N)	RasPFtoASC	ASC Format Data
Bruker data Uxd Format Data(N)	UxdtoASC	ASC Format Data
RINT Inplane ,other data Asc Format Data(N)	PluralAsctoAsc	ASC Format Data
PANalytical pole figure data TXT,xdrml Data(N)	PANatoAsc	ASC Format Data
FullPoleFigure Asc Format(Trans-Ref)	PFTRSeparate	TransPF,ReflectPF ASC data
β smAsc Asc Format (N)	PoleFigureAsctoSMAsc	ASC Format Data
PANalytical data CSV format (N)	PANaCSVtoASC	ASC Format Data
RigakuOldData Asc format(N)	Rad2050HpFilter	ASC Format Data
PANalytical T/T data xrdml Data(N)	PANaTTDatatoAsc	ASC Format Data
PCAsc Asc format(N)	PCAsctoUNIXAsc	UNIXAsc Format
Asc Asc format(N)	AscThicknessMUEditor	ASC Format Data

入力データの選択



r a sファイルにバックグランドデータの登録を確認





Created files name	chback4.asc 211_ref_sus-chback4.asc	
	ОК	
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	RINT2000774-	16 KB
200_ref_sus-chback4.asc	2021/08/08 5:05	RINT2000774-	16 KB
🖳 211_ref_sus-chback4.asc	2021/08/08 5:05	RINT200077+-	16 KB

バックグランドデータ

🧾 110_ref_sus-chback4.asc - 义モ帳

極点処理



As cデータにバックグラ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



▶2.内部計算データの作成をバックグランドに 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

	21/08/08
ValueODFVF-B	ValueODFVF-A

計算結果の極点図からODF解析結果との比較Rp%の計算

d e f o c u s 補正なしで計算(BG 削除+RD補正+平均化+規格化)





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)





defocus補正ありなしでRp%に変化なし

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+最適R p %+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



• Option	Symmetric	Software	e Data	Help						-		
	laterial A	-Iron-Mea:	sure-Integ	ralData.t	đ					Initialia	e S	itart
Structu	ure Code(Symm	etries afte	Schoenfi	iles)	Cif	7 - 0 (cu	bic)		~	٥ و	etHKL<-	Filename
a 1.0	<=b 1.0	<=c	1.0	alpha	90.0	beta	90.0 g	amm	90.0		AIFIE	Select
PF Hold C:¥	er itmp¥ras											
PF Data	SelectFile	TXT(b.inter	ns).TXT2(a	a.b.intens.))	hk.l	2Theta	AI	pha scope	AlohaS	AlphaE	Select
	110_ref_sus-	chback4_ch	R0B00D2	A510CAS	_2.TXT	1,1,0	52.17	0	.0->75.0	0.0	75.0	
~	200_ref_sus-	chback4_ch	R0B00D2	A510CAS	_2.TXT	2,0,0	76.92	0	.0->75.0	0.0	75.0	\checkmark
2	211_ref_sus-	chback4_ch	R0B00D2	A510CAS	_2.TXT	2,1,1	99.3	0	.0->75.0	0.0	75.0	\checkmark
~						2,1,0	0.0			0.0	0.0	
~						2,1,1	0.0			0.0	0.0	
~						3,1,1	0.0			0.0	0.0	
2						4,0,0	0.0			0.0	0.0	
2						3,3,1	0.0			0.0	0.0	
2						4,2,2	0.0			0.0	0.0	
2						5,1,1	0.0			0.0	0.0	
2						5,2,1	0.0			0.0	0.0	
2						5,3,1	0.0			0.0	0.0	
Comme	ent 110 refs	sus-chback	4 chR0B0	0D2A510	CAS 2.T)	<t 200="" ref="" si<="" td=""><td>us-chback4</td><td>chR0</td><td>B00D2A5100</td><td>DAS 2.TX</td><td>T 211 re</td><td>f sus-cht</td></t>	us-chback4	chR0	B00D2A5100	DAS 2.TX	T 211 re	f sus-cht
			- Center[Data	-1				Labotex(E	PF),popLi	A(RAW)	filename —
Symm	etric type Full		Ave	erage		Epf file	save		labote	x		

LaboTexデータ画面をStandardODFに変更

🎢 Pi	FtoO	DF3 8.52T[21/12/31] by CTR		- 🗆
File	Opt	tion Symmetric Software Data	Help	
ſ		Outside text(Vector) CCW	ralData.txt	lize Start
		Outside CSV(Vector) CCW		
		Inside text CCW	iles) Cif 7 - 0 (cubic)	getHKL<-Filename
		*LaboTex(EPF)CCW	alpha 90.0 beta 90.0 gamm 90.0	AllFileSelect
Ľ		Labotex(EPF) CW		
		Stadard ODF CCW		
[Siemens CCW	a,b,intens.)) h,k,l 2Theta Alpha scope Alpha	s AlphaE Select
		TexTools(txt) CCW	A510CAS_2.TXT 1,1,0 52.17 0.0->75.0 0.0	75.0

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

File Option Symmetr	CTR PFtoODF3 8.52T[21/12/ ic Software Data Help	(31] by CTR 0				
Condition save	A-Iron-Measure-IntegralDa	ta.txt				
Exit				Star	ndardODF 向	ナファイル作成
Symmetric type Full	CenterData Average St	tandardODF text	labotex			
tmp > ras > StandardODF						
名前	^	更新日時	種類	サイズ		
 110_ref_sus-chback4_ch 200_ref_sus-chback4_ch 211_ref_sus-chback4_ch 	R0B00D2A510CAS_2StdODF.TXT R0B00D2A510CAS_2StdODF.TXT R0B00D2A510CAS_2StdODF.TXT	2021/08/08 5:57 2021/08/08 5:57 2021/08/08 5:57	テキスト文書 テキスト文書 テキスト文書	11 KB 11 KB 11 KB		

S t a n d a r d O D F で解析

上記作成したファイルを指定

ODF Calculation を成図データ 極点図データ 面指数 重み マ (100) 1 マ (110) 1 (210) 1 (211) 1 (221) 1 (221) 1 (310) 1 (311) 1 (321) 1 (331) 1 (331) 1 (411) 1 (411) 1 (411) 1 (411) 1 (411) 1 (411) 1 (411) 1 (411) 1 (411) 1 (411) 1 (411) 1 (411)	ファイル名(フルパス) [C¥tmp¥ras¥StandardODF¥200_ref_sus-([C¥tmp¥ras¥StandardODF¥110_ref_sus-([C¥tmp¥ras¥StandardODF¥211_ref_sus-([[[]]]]]]]]]]]]]	参照 方強度: 5.79 最大強度: 5.18 の最大強度: 5.18 の最大強度: 4	Standard O for Windows XP/Me/2000/9 NT4.0/95 Ver.2.4 解析 結晶方位分布関数 展開次数 [22] ゼロ密度領域のしきい値 表示断面 、 シスロ シスロ <th>×</th>	×
□ (511) 1 α max=[75 β角のタイプ C	$\Delta \alpha = 5$ $\beta = 0^{\circ}, 5^{\circ}, 10^{\circ}, \dots, 350^{\circ}, 355^{\circ}$ $\beta = 2.5^{\circ}, 7.5^{\circ}, 12.5^{\circ}, \dots, 357.5^{\circ}$	OK	1/4種点図 C係数 偶数項 0%	奇数項 100%
- 集合組織変換 ・ しない OR	D種点図 → ND-ODF (C TD種点図 →)	ND-ODF	実行(G) 終	7(<u>E</u>)

ODF計算を終了したら、C:¥ODF以下のデータをsaveする。

ØDFPoleFigure2 3.97T[21/*	12/31] by CTR	
File Linear(absolute)3D	ToolKit Help InitSet BGMode	Measure Cond
Files select ASC(RINT-PC) ~	PFtoODF3	
Calcration Condition	SoftWare	
Previous Next	ImageTools	
Backgroud delete mode	PopLATools	(a) North in a
O Minimum(αβ)	ODFAfterTools	Nothing
Peak slit 7.0 mm BG SI	PoleOrientationTools	G Scope 80
AbsCalc	DataBaseTools	
☐ Ref ☐ Trans <u>Schu</u> □ Defocus file Select Trasmiss	FiberTools	ange Absorpt
	StandardODFTools	
Make defocus fur	DefocusTools	V Norr

le Help calc files		
ODF15 etc.	StandardODFExportInport	Export Inport
binary to txt ODF15	ODF15toTXT	ODF15 TXT format
TXT2 TXT2Format files	MakeODF13	ODF13,OutMax.TXT
EVNCOEF StandardODFFormat	EvncoeftoODF	ODF,Pollefigure,Inverse
Export files StandardODFExortfiles	StandardODFDsiplay	RecalcPoleFigure,ODF,Inverse

退避するホルダを選択、ODF 入力ホルダを選択

StandardODFExportInport 1.03ST[21/17/31] by	CTR	_		×
Work Export(ODF>Target) StandardODF Dir CrODF Target C:¥tmp¥ras¥StandardODF	O Inport(Target-	->ODF)		
Comment	Сору	Outm	ax Disp	

StandardODFExportInport 1.03ST[21/12/31] I	by CTR	_		Х
File Help				
_ work				
Export(ODF>Target)	○ Inport(Target>	ODF)		
StandardODF Dir				
C:\ODF				
_ Target				
C¥tmp¥ras¥StandardODF				
_execute				
StandardODF PFDATA delete	Сору	Outm	ax Disp	
Comment				
Copy 13 files				
1				

- Event files		3
Export mes		
StandardODFExortfiles	StandardODFDsiplay	RecalcPoleFigure,ODF,Inverse

ホルダを選 /	 援 沢			
MandardODFDisplay 1.045	[[21/12/31] by CTR			\times
File Help			ウイン	/ドウのf
StandardODFExpor	tInport			
C:¥tmp¥ras¥S	StandardO DF			
ValueODFVF	GPPoleDisplay	GPInverseD	isplay	
ODFDisplay2	GPODFDisplay	hkluvwlistD	isplay	
hkllistDisplay				

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—>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。











この材料に含まれる r a n d o mは defocus 補正あり(18.6%)から d e f o c u s 補正なし(16.3%) と計算結果が異なります。G h o s t 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







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

d e f o c u s 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。 d e f o c u s 極点図は、測定 2 θ に依存しています。







defocus曲線は、受光スリット幅、測定2 θ 角度に影響を受けます。 内部で計算可能であるが、実際のrandom試料による補正を勧めます。

L a b o T e x で解析







付録

MTEXで解析



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。

Quantitative Analysis - Model Functions Method - Project: Demo Sample:SUS Job:1 Grid Cells for Output ODF - Crystal Symmetry Sample Symmetry-0.50 Step Orthorhombic 5.0×5.0 (Cubic) -Diagram Range +/-45.0 Component No 1. Component No 1. Component No 1. 100.0% 100.0% <mark>م</mark> ل 100.0% Misfit Backgr. Diff. -45.0 45.0 -45.0 45.0 -45.0 45 O On Distribution <mark>FWHM % FWHM Ф FWHM %</mark> Volume Fraction Г Gauss V 22.7 17.9 24.7 14 No Texture Component Show Sym. Eq. 1 {1 1 2} 1 -1 0> ▼ 🔽 Gauss ▼ 22.7 17.9 24.7 % {112}<1.10> • 12 2 {1 11}<-1 -1 2> ▼ 🔽 Gauss 💌 21.9 19.0 19.8 % Calculation Mode ▼ IV Gauss ▼ 21.5 ▼ IV Gauss ▼ 21.7 16.7 19.6 12 % 3 {1 1 1 k 0 1 1 x C Manual Automatic 10 {323k1-31 4 20.0 20.5 % ▼ 🔽 Gauss ▼ 22.3 {113} 1-10> 20.8 21.3 9 Max. Iteration Number : 1,000 ≑ 5 % 👻 🗹 Gauss 💌 29.2 18.3 24.7 {001}<10> 9 6 % Max. Fit Error % (*1000) : 100 🕂
 ▼
 ✓
 ✓
 ✓
 ✓
 ✓
 10.0

 ▼
 ✓
 ✓
 ✓
 19.4
 19.5

 ▼
 ✓
 ✓
 ✓
 21.3
 20.0

 ▼
 ✓
 ✓
 ✓
 18.8
 20.2
 19.5 0 % 7 343 Iteration : 8 {001}<100> cube 17.3 % Fit Error% (*1000) : 42632. 9 { 5 2 5 }< 1 -5 1 > 19.7 1 % 2 10 {013} 100> ▼ Gauss ▼ 21.6 19.7 21.1 Fit Calculation Progress ° Drientation Set Set from Database (sort by V Save Current Set Background 30 Max. * Linearity Change Initial Parameters Fix Angles Fix Fractions Start Volume Fraction Calculation View Report Exit and Show Exit

以上のデータの VolumeFraction を求めると





Other としては、 <u>この辺りが考えられます</u>

×



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



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