

汎用極点図データ処理

ODF Pole Figure 2 ソフトウェア

Ver.3.64YM

従来、曲線データの Error 評価は、ODF 解析後、ValueODFVF で確認していましたが Ver3.42 以降、本ソフトウェア内で、最適な Rp% の補正処理が行えるようになりました。

Defocus 曲線を作成時、規格化なしで作成した時の defocus ファイル名は DEFOCUS\_NOTNORM\_F になり、このファイルを用いる場合、配向試料の計算結果の再規格化あり、なしを選択出来ます。しかし、規格化なしでは Rp % の最適化は行えません。必ず、規格化ありとして下さい。

2017年07月29日



HelperTex Office

<http://www.geocities.jp/helpertex2>

Pole/ODFPoleFigure2

## 目次

1. 概要
2. 特徴
3. データの流れ
4. プログラムの使い方
5. 主な機能
6. 配向評価総合パッケージ CTR ソフトウェアとの連動
7. A S C デモデータによる動作確認
  7. 1 処理データ選択
  7. 2 測定データ評価
  7. 3 測定バックグラウンド強度の修正
    7. 3. 1 A S C 変換されたバックグラウンド
  7. 4 平滑化
  7. 5 R D 補正
  7. 6 吸収補正
  7. 7 D e f o c u s 補正
    7. 7. 1 T X T 2 ファイル指定による d e f o c u s 補正ファイル作成
    7. 7. 2 r a n d o m 試料との強度比較を行う場合
    7. 7. 3 登録 defocus 曲線を変更する
  7. 8 規格化
    7. 8. 1 内部計算規格化強度の計算
    7. 8. 2 規格化モードの切り替え
  7. 9 一括データ処理を行う。
  7. 10 定型化処理の簡素化
  7. 11 相互に重なりあう極点図の分離
  7. 12 強制バックグラウンド処理
  7. 13 同時に表示する極点図 Max 強度を絶対、相対の選択
8. B r u k e r 社データの読み込み
  8. 1 U x d フォーマットの場合、予め U x d から A S C フォーマットに変換する方法
  8. 2 U x d フォーマットを直接変換方法
  8. 3 M u l T e x t 3 データの場合
  8. 4 G ADD S p o p L A ( r a w ) の場合
9. P A N a l y t i c a l 社データの読み込み
  9. 1 予め、 t x t 、 x r d m 1 フォーマットから A S C フォーマットに変換する方法
  9. 2 予め、 C S V フォーマットから A S C フォーマットに変換する方法
  9. 3 直接変換方法
10. Rp%の最適化
11. 極点図の 3 D 表示、等高線表示

## 付録 (データフォーマット)

- F - 1 R i g a k u 社 A S C データ
- F - 2 B r u k e r 社 U x d データ 1

- F-3 Brucker社、Uxdデータ2
- F-4 Brucker社 Multex3 popLA (raw)
- F-5 Brucker社 GADDS popLA (raw) データ
- F-6 PANalytical社 TXTデータ
- F-7 PANalytical社 xdm1ファイル
- F-8 PANalytical社 CSVデータ

## 1. 概要

本ソフトウェアは、当社で開発した配向評価総合パッケージ CTR ソフトウェアの中核となるソフトウェアであり、国内外 X 線メーカの測定データに各種補正を行い、世界で最もポピュラーな ODF 解析ソフトウェアを手軽に使えるよう配慮してあります。データ処理内部は全て c p s 単位で扱われています。

測定ファイル名の先頭は指数としてください。

## 2. 特徴

すべてのプログラムが java で記述されている。(Windows のどの OS 上でも動作)

サポートされていない測定データでも簡単に取り込める (簡単に追加可能)

複数の測定データを一括データ処理

データ処理

バックグランド削除、バックグランド修正、平滑化、RD 補正、吸収補正、defocus 補正、規格化

処理のビジュアル化

極点図の 3D, 等高線表示

バックグランドプロファイルの確認と修正バックグランドの確認

平滑化処理画面を参考に適切値を選択

RD 補正処理画面を参考に適切値を選択

吸収補正量画面を表示

Defocus 補正量を表示 (補正量の大きな場合、補正量により、作成する極点図に制限)

Defocus 補正量の変更

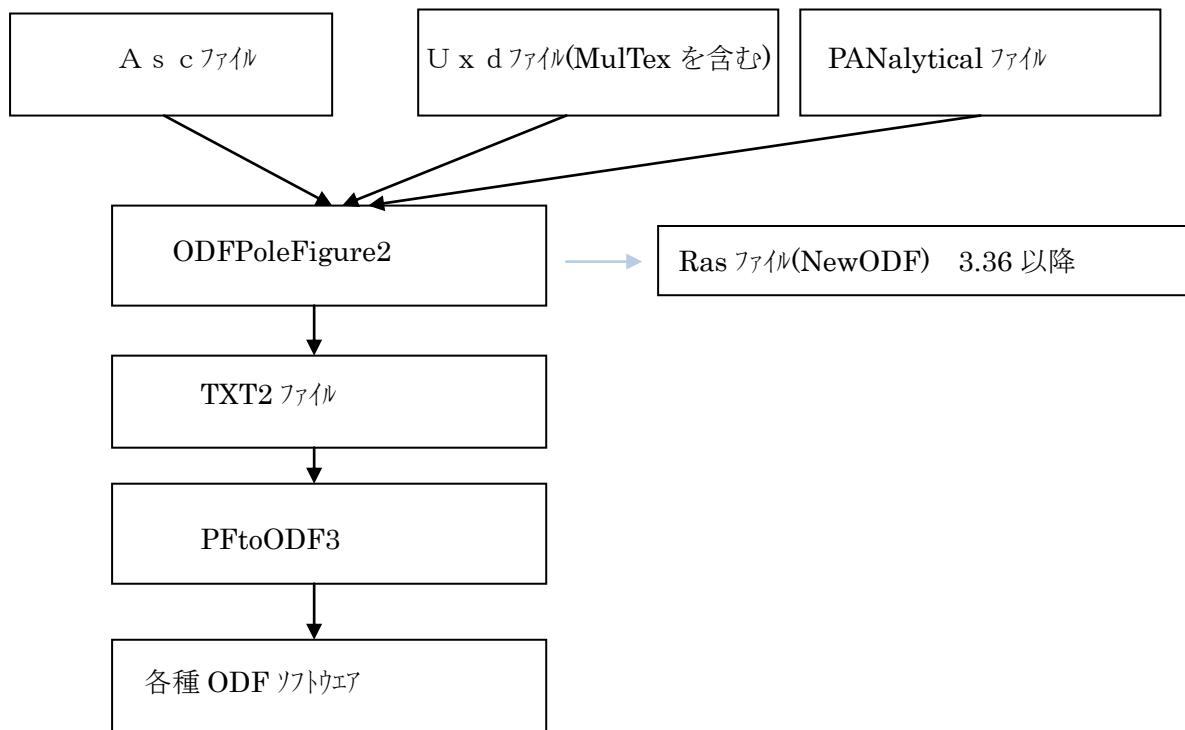
入力極点図と処理後の極点図を同時表示

処理条件を lock により、常に同一条件による処理を可能にする。(ルーチンワーク)

利用目的が品質管理用なら、ファイル選択、一括処理で、ODF 入力データ作成は 10 秒以内で終了

## 3. データの流れ

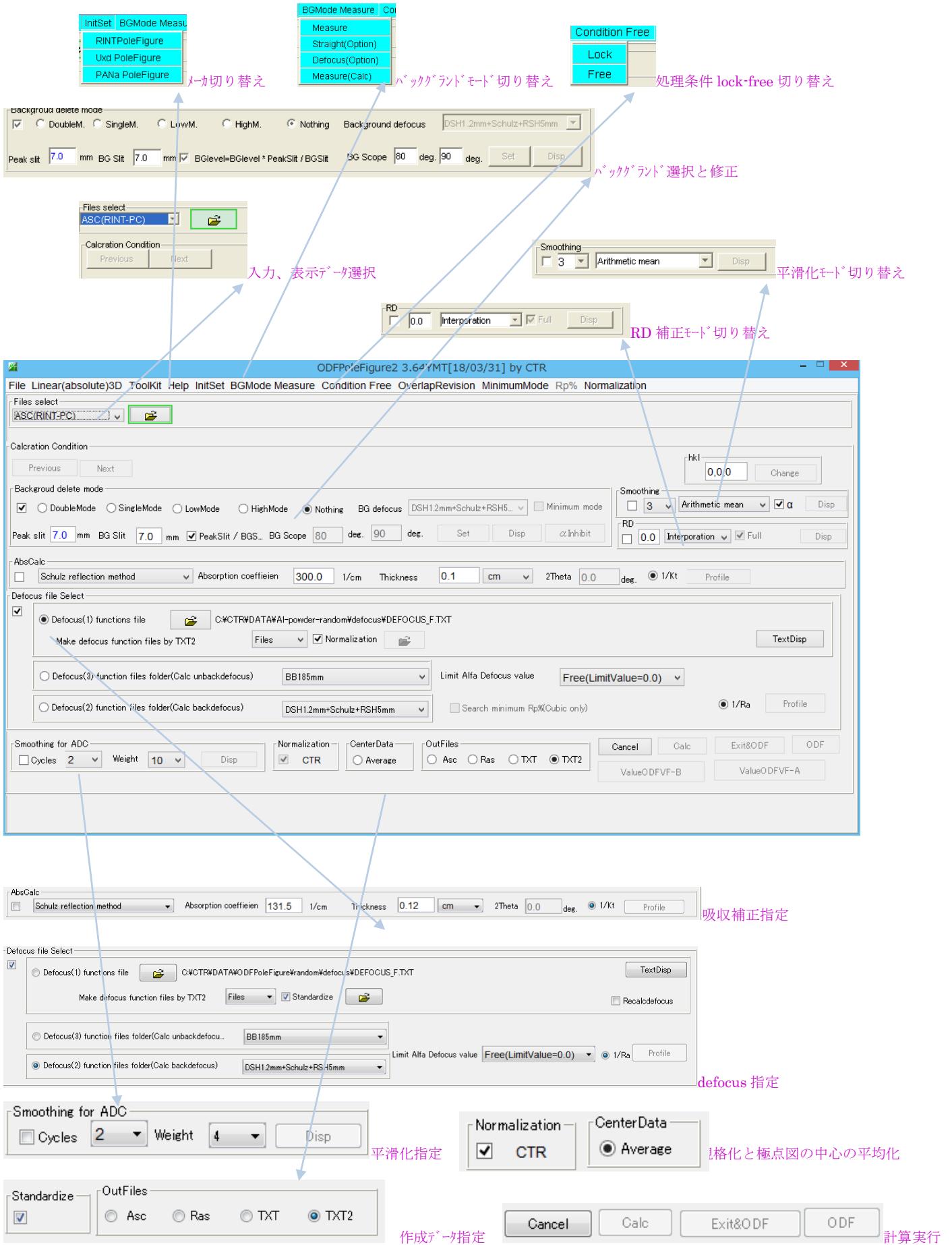
測定データファイル名の先頭に指数を配置する事



## 4. プログラムの使い方

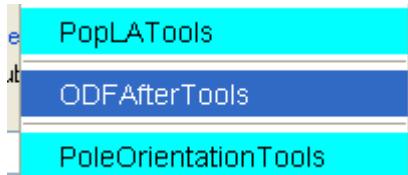
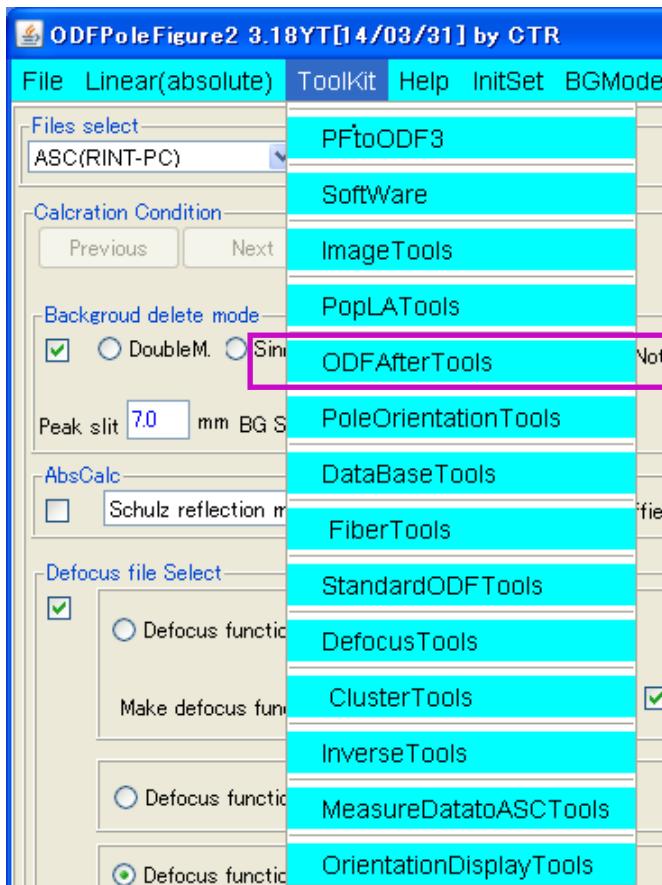
C:\¥CTR\¥bin\¥ODFPoleFigure2.jar ファイルをマウスでクリック

## 5. 主な機能

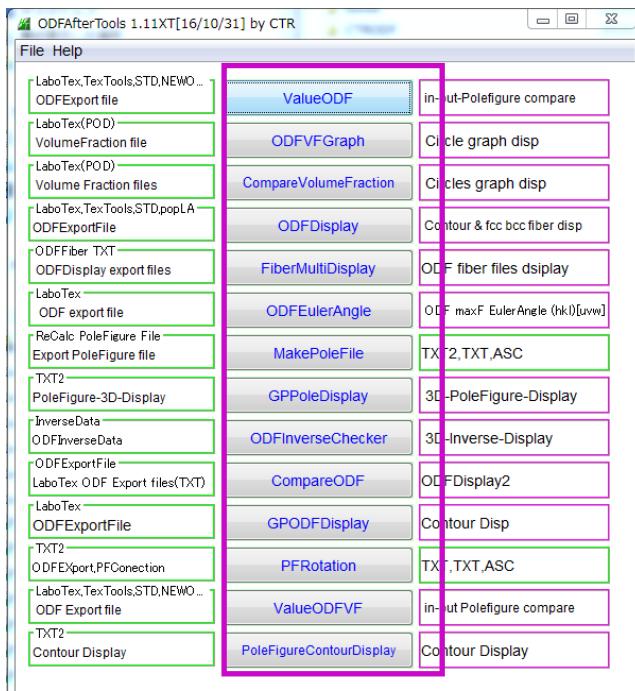


## 6. 配向評価総合パッケージ CTR ソフトウェアとの連動

メニューの ToolKit から以下のカテゴリ ラダーメニューを表示、選択で別の画面が表示される。



たとえば、 では

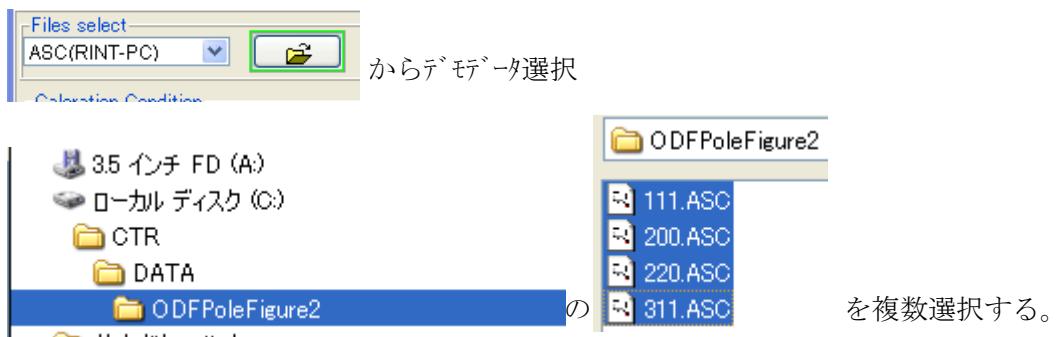


が表示され

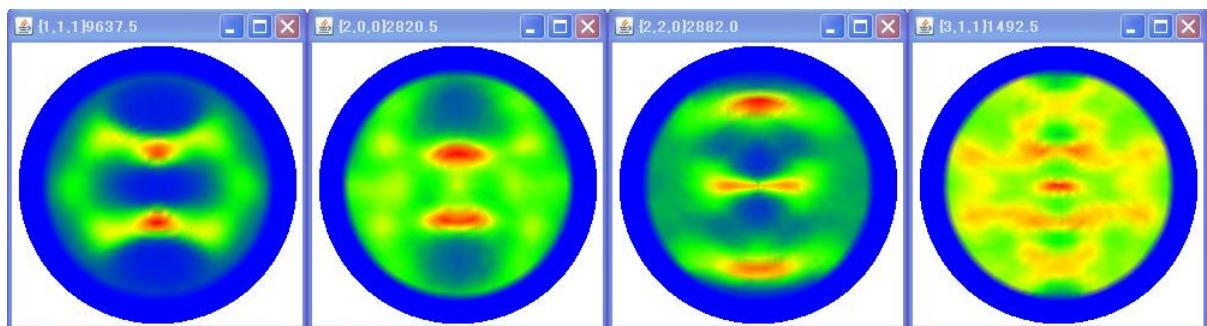
更に中央のアプリケーション名を選択すると、各種ソフトウェアが動作します。

## 7. A S C デモデータによる動作確認

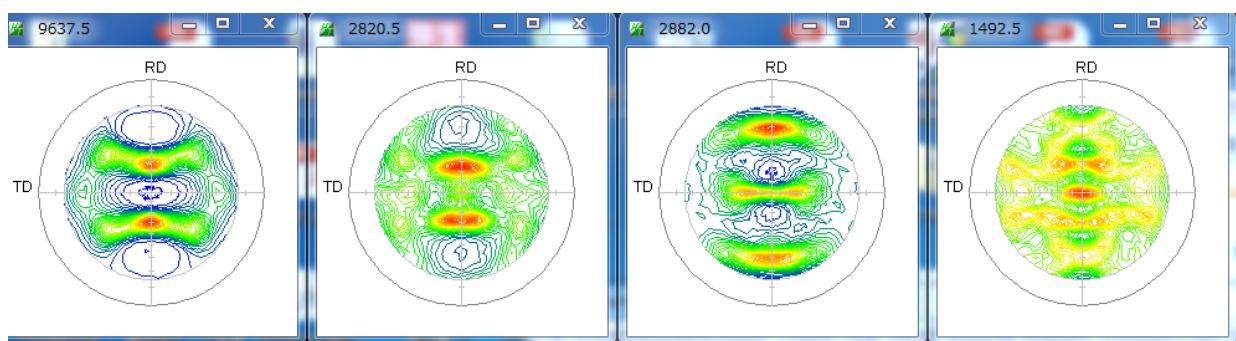
### 7. 1 処理データ選択



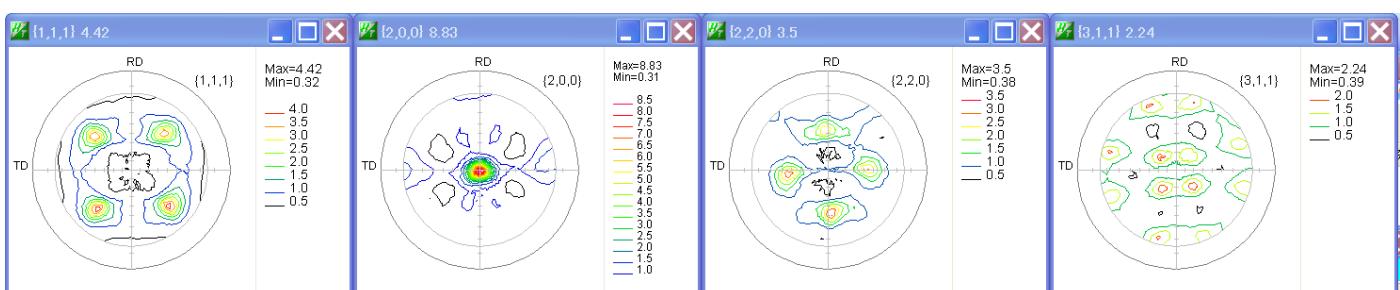
選択した測定データを表示します。指数と最大強度が表示



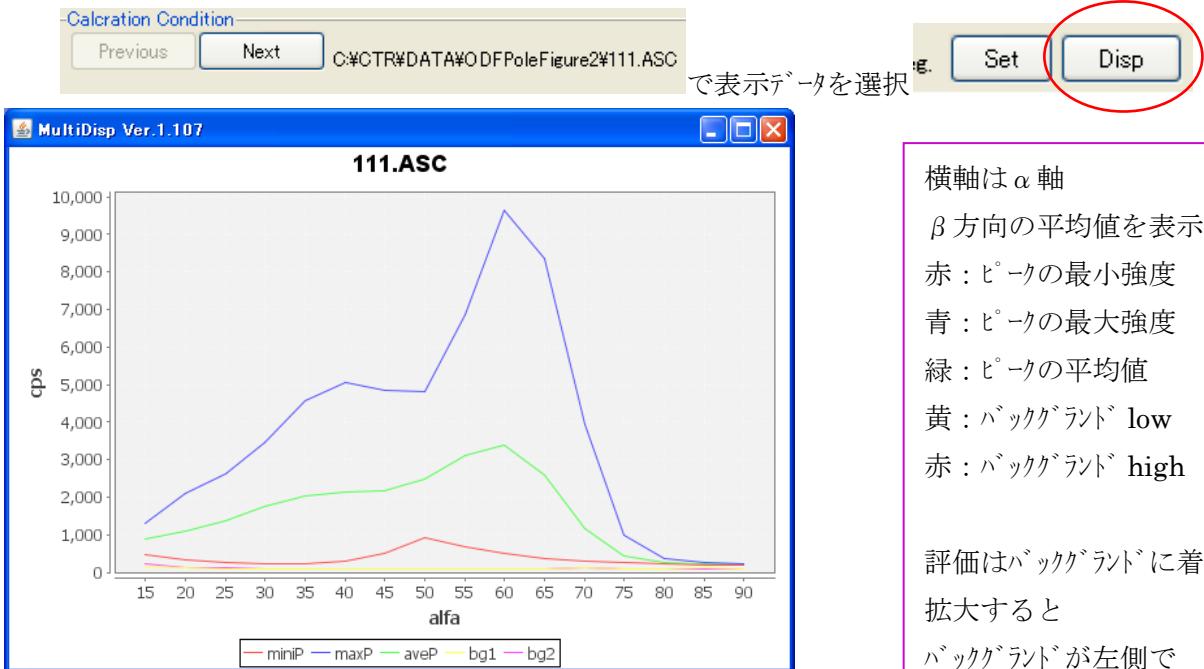
描画を等高線に切り換えると



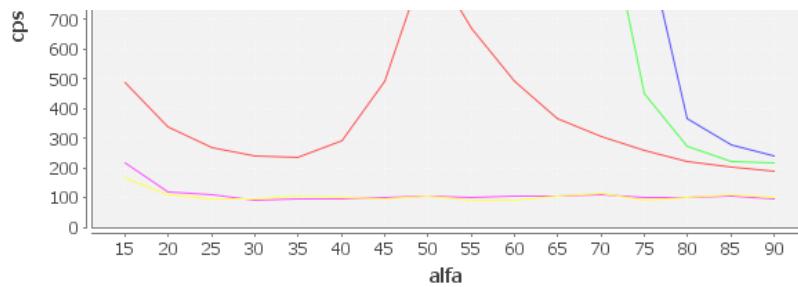
Calc で極点処理を行うと、GPPoleDisplay で等高線レベル表示が可能になります。



## 7. 2 検定データ評価



拡大



## 7. 3 検定バックグランド強度の修正

$\alpha$  軸に対するバックグランド強度プロファイルは、defocus 曲線と同じような傾向があり、通常極点図の外側になるに従って、強度が減衰します。メニューの BGMode から defocus を選択

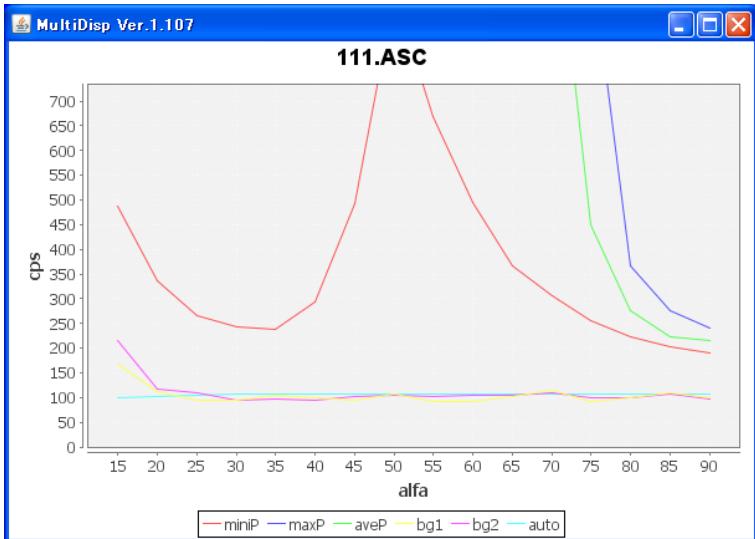


defocus を選択後、再度 DISP から拡大する。

バックグランドの修正は、反射極点で、極点図の中心まで測定されているデータに限ります。

評価はバックグランドに着目  
拡大すると  
バックグランドが左側で  
ピークと同じ動きを示す。

バックグランド測定  $2\theta$  角度が  
ピーク角度に近い為  
修正の必要がある。



Auto 曲線は極点図の  
中心付近の 3 点の平均値  
から計算されます。  
修正可能モード  
Straight (Option)  
Defocus(Option)

水色:Auto 曲線が表示される。この曲線をバックグランド強度として修正されます。

#### Auto 曲線の変更

{220} 極点図を拡大すると



$\alpha$  軸で平均値を計算する  
範囲を指定する。  
45 度から 60 度が最適と  
した場合

|          |    |      |    |      |            |      |
|----------|----|------|----|------|------------|------|
| BG Scope | 45 | deg. | 60 | deg. | <b>Set</b> | Disp |
|----------|----|------|----|------|------------|------|

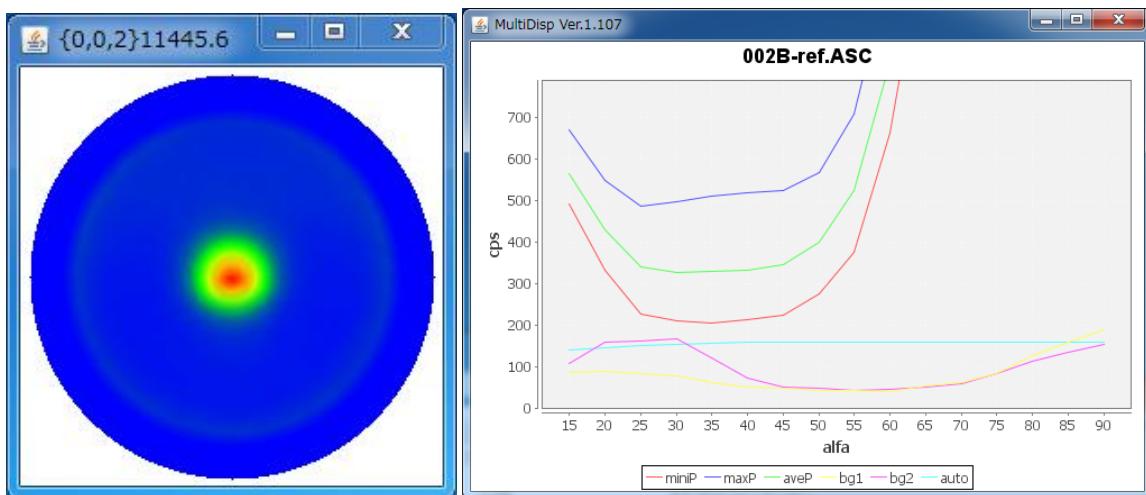
45 度から 60 度を入力し Set する。

再度 DISP と拡大で



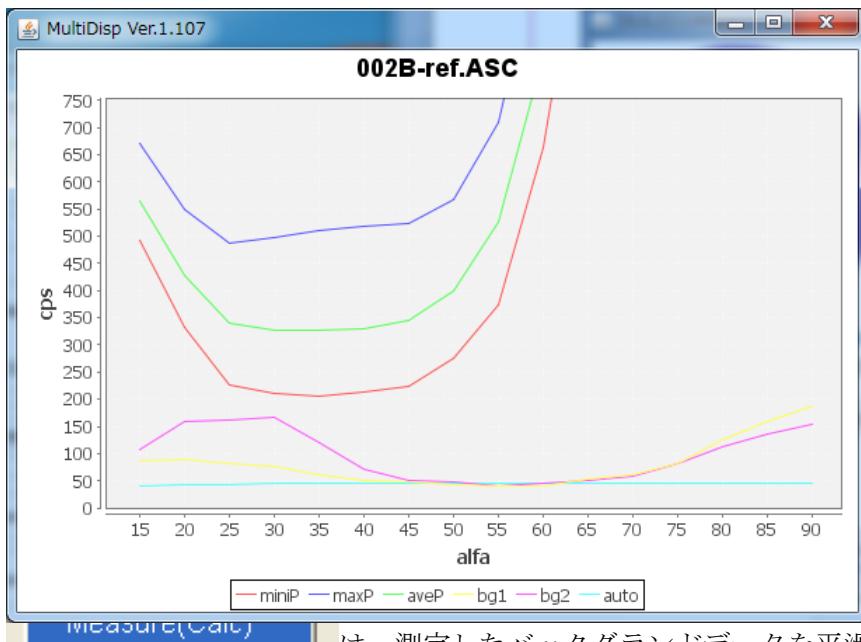
修正は可能ですが、  
測定時のバックグランド測定  
2θ 角度をピーク角度から  
3 度位離して測定すると  
良い結果が得られる。

この修正機能は、マグネシウムなどに見られる極点図の中心付近の「バックグラウンド」対策に有効になります。

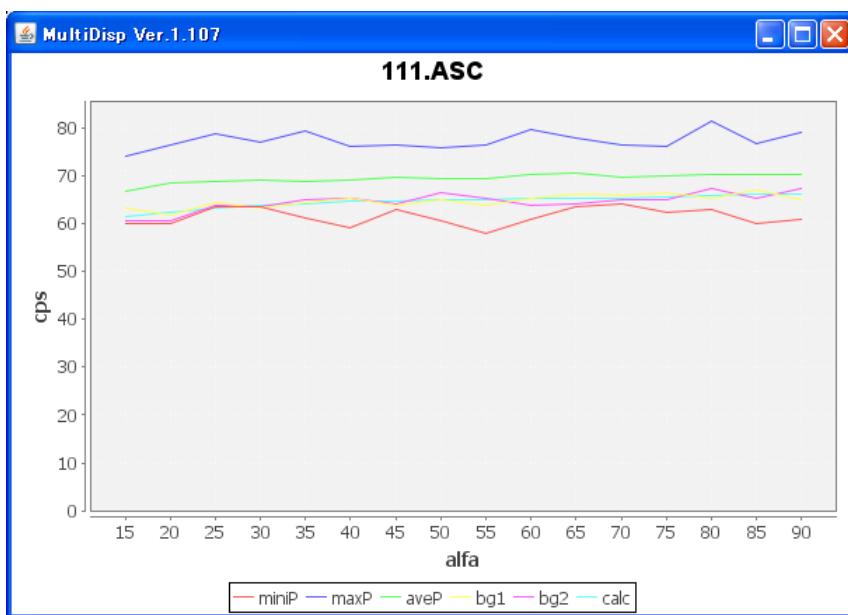


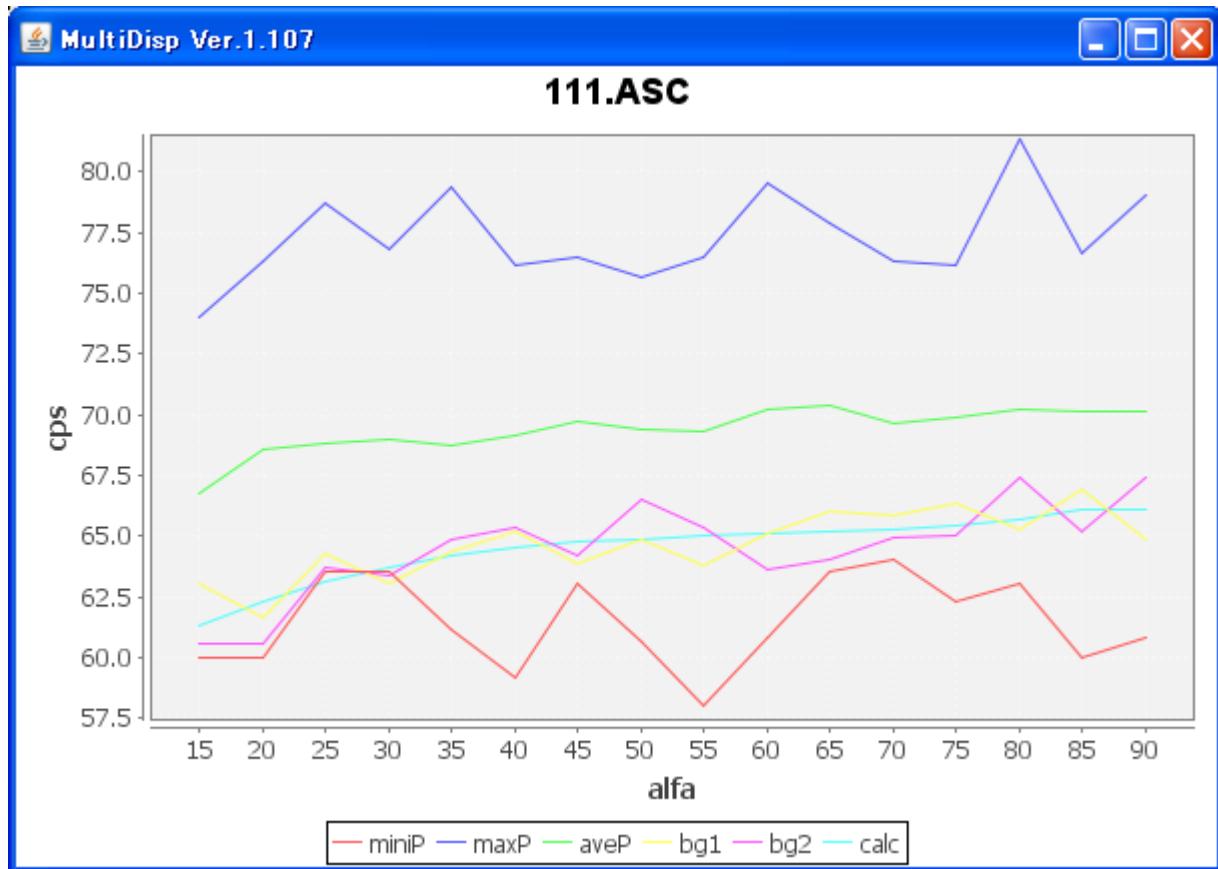
α 軸 50 度から 65 度で平均値を算出

BG Scope 50 deg. 65 deg. Set Disp



は、測定したバックグラウンドデータを平滑化する。





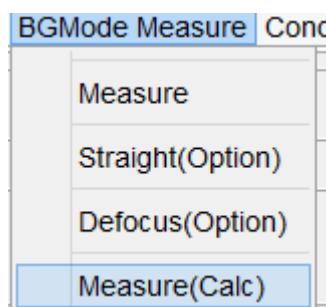
黄色、紫色の変動の大きいバックグラウンドに対し、平滑化を行っている。

例えば、15度から90度を5度間隔で測定した場合、 $\alpha$ 軸 15, 20, 25度の平均値をS  
80, 85, 90度の平均をEとした場合、 $\alpha$ 軸 20, 25, ..., 80, 85, 90のデータを

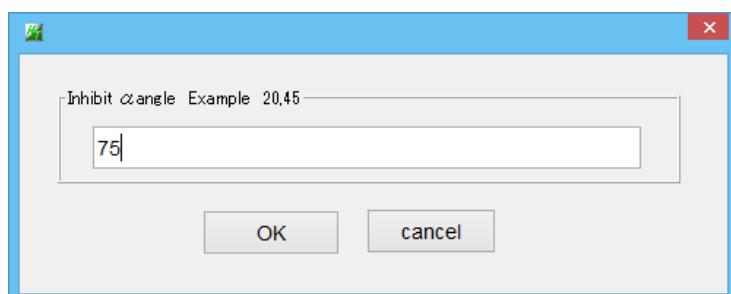
20, 25, 30, ..., 80, 85, 90

S、測定データ、E、E、Eとし、3次関数に Fitting を行い、  
15、から80度データは Fitting データとし、85, 90度データは、  
80, 85, 90の平均値とした。  
バックグラウンドの凸凹で処理を行うと Fibre 要素が混入します。

バックグラウンドを Measure(Calc) で計算する



バックグラウンドの平滑化と特異点を Inhibit で削除が可能



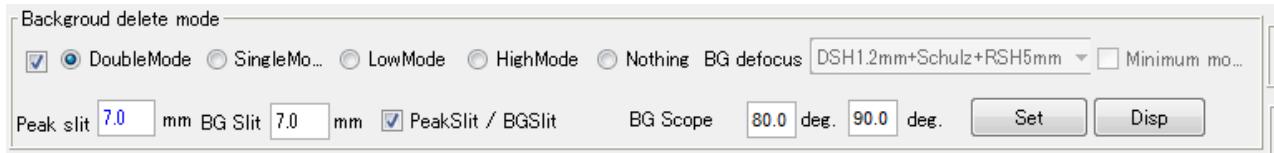
$\alpha = 75$  データを削除する場合

### 7. 3. 1 A S C変換されたバックグランド

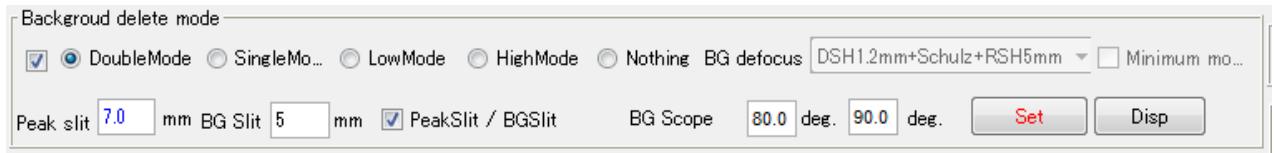
測定で、ピーク積分測定とバックグランド積分測定の受光スリット幅を変えて測定した場合、  
A S C変換されたデータには、バックグランドの受光スリット幅は登録されていません。

例えば、

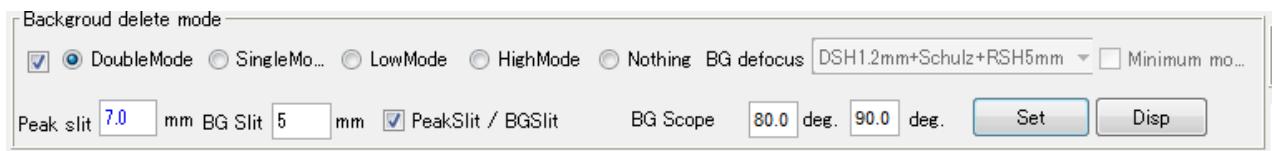
ピーク積分測定の受光スリット幅を7 mm、バックグランド積分測定に受光スリットを5 mmで  
測定した場合、



と表示されます。

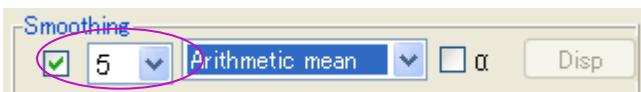


バックグランドスリット幅を5 mmと入力し、Setボタンでデータ変更してください。



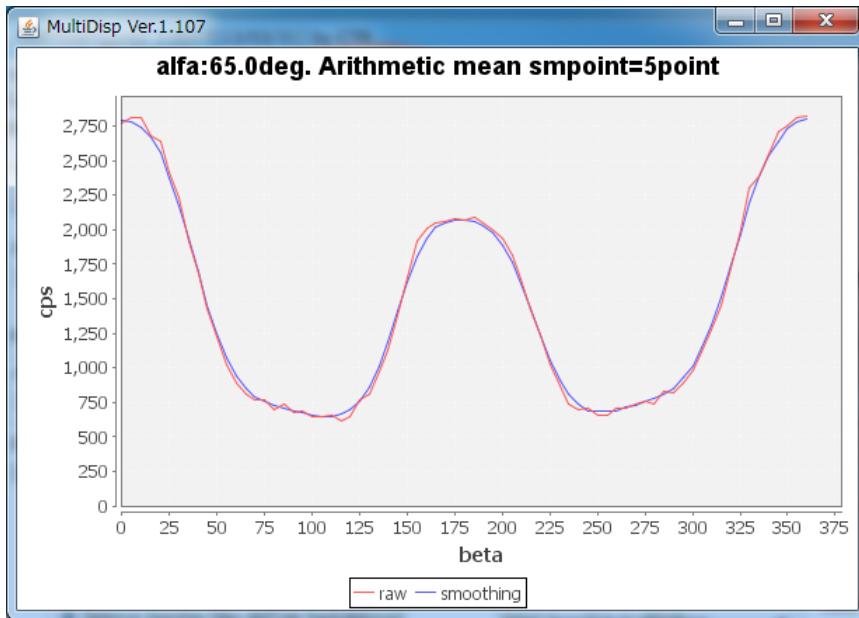
## 7. 4 平滑化

結晶粒が荒い場合、測定データに一粒毎のピークが現れます。大きなピークが残ると、ODFなどの解析結果に影響します。平滑化の手法と平滑化点数を選び、最適化を行う。



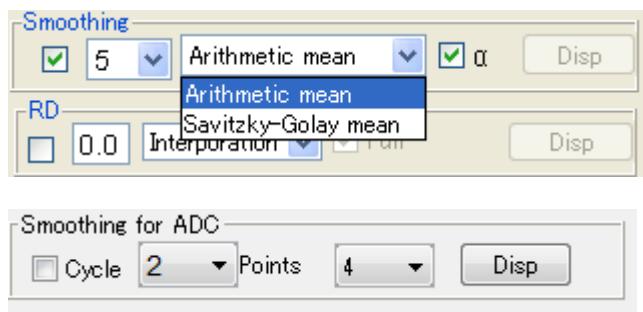
Disp では選択されているデータの最大強度が存在する  $\alpha$  軸位置の  $\beta$  軸方向のプロファイルと、平滑化を行ったプロファイルが表示される。平滑化方向は  $\alpha$  軸と  $\beta$  軸双方に平滑化を行っている。

例えば、{200}極点図を選択 で DISP



平滑化パラメータは全ての極点図で共通です。

平滑化の手法は



### Arithmetic

指定した点数の移動平均

$\alpha$  方向は選択

### Savitzky-Golay

重み付き移動平均、 $\alpha$  方向は選択  
(Rigaku 正極点と同じ)

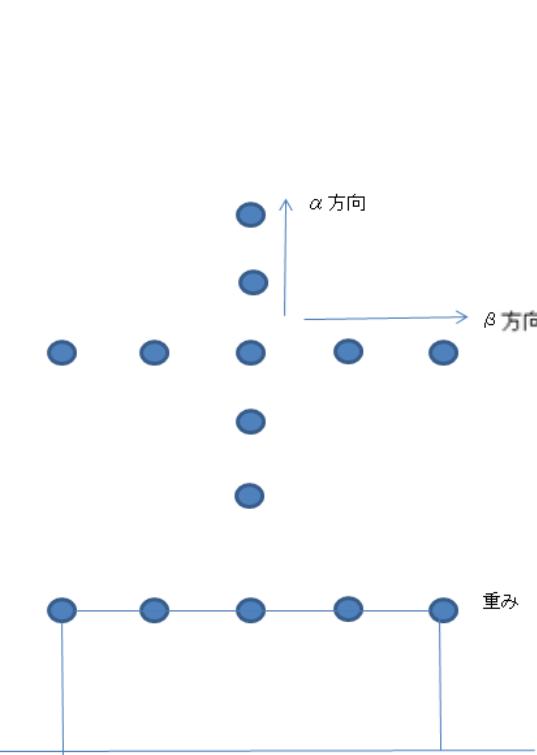
### Smoothing for ADC

平面 5 点の重み付き移動平均  
を繰り返す  
大きな平滑化が行えるが、  
最大強度が下がります。  
 $\alpha$  方向と  $\beta$  方向に対し同時平滑

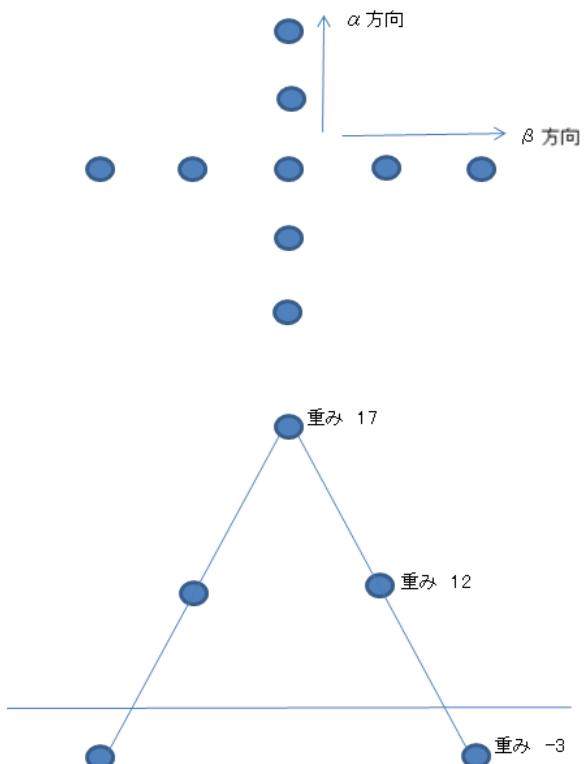
平滑化は、ADC 手法がより良い平滑化と思われます。

## 平滑化5点の重み

Arithmetic mean



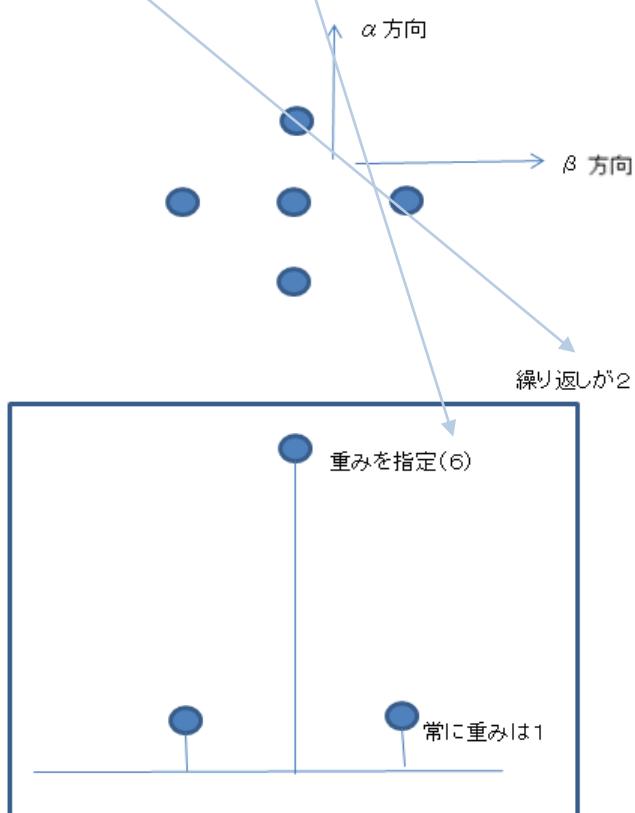
Savitzky-Golay mean



Smoothing for ADC

Cycles 2

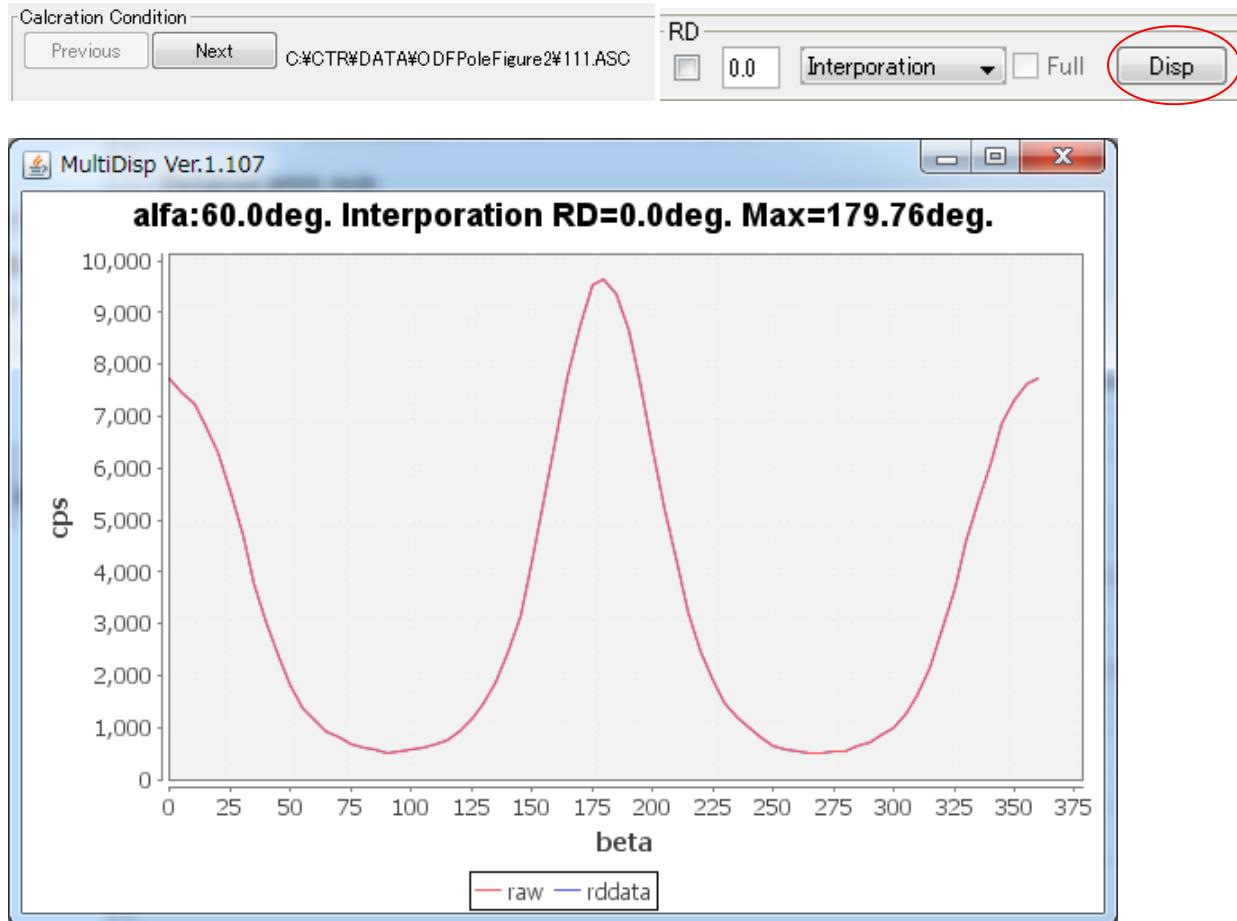
Weight 6



## 7. 5 RD補正

RD (Rolling Direction) は圧延された材料がはき出される方向であるが、その方向を極点図測定時にシステムで決まった方向に取り付ける。しかし、この取り付けが曲がっていると、回転した極点図として測定される。RD-マックス RD ラインに対し、回転により対称極点図にする機能である。

RD-DISP は、選択されている極点図の最大強度の  $\alpha$  軸角度における  $\beta$  軸方向のプロファイルを表示する。例えば、{111}極点図を選択し DISP では



ピークプロファイルがシャープな極点図を選択し、最大強度の  $\beta$  角度を確認

最大強度角度が、0, 45, 90 のよう角度を示す極点図で決定する。

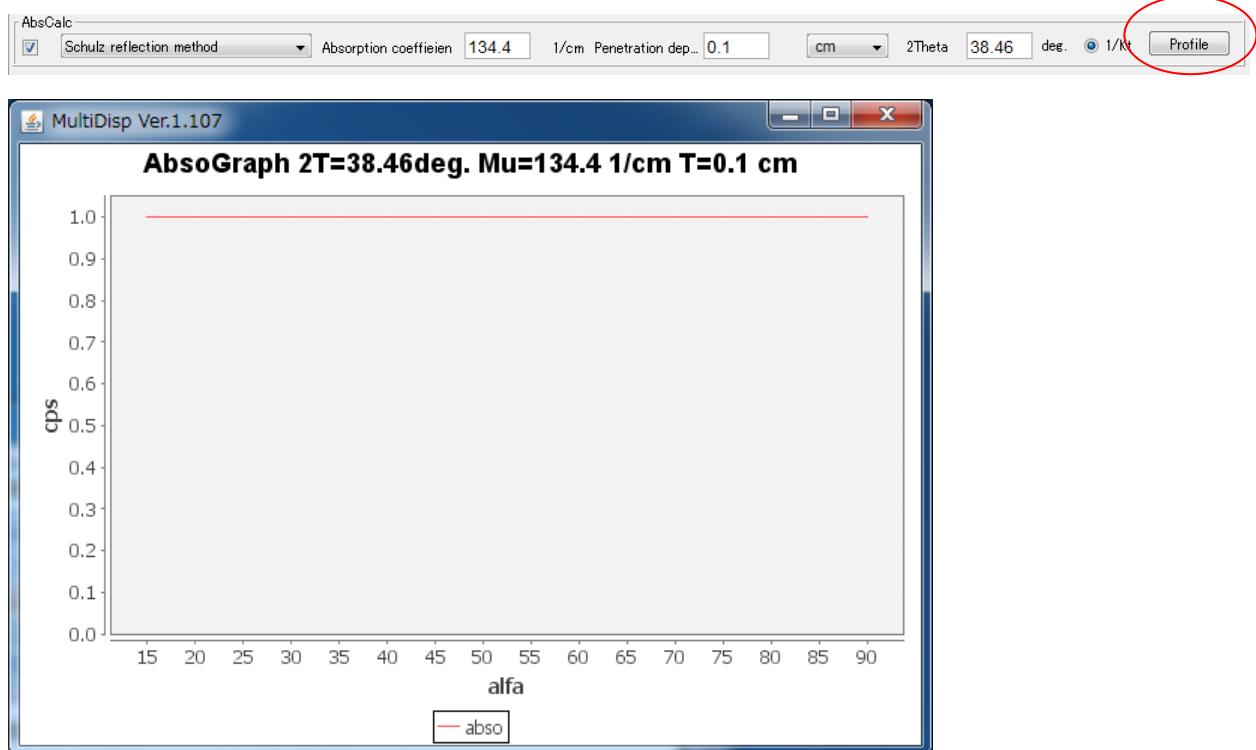
このパラメータも全ての極点図に対して共通に使われる。

## 7. 6 吸収補正

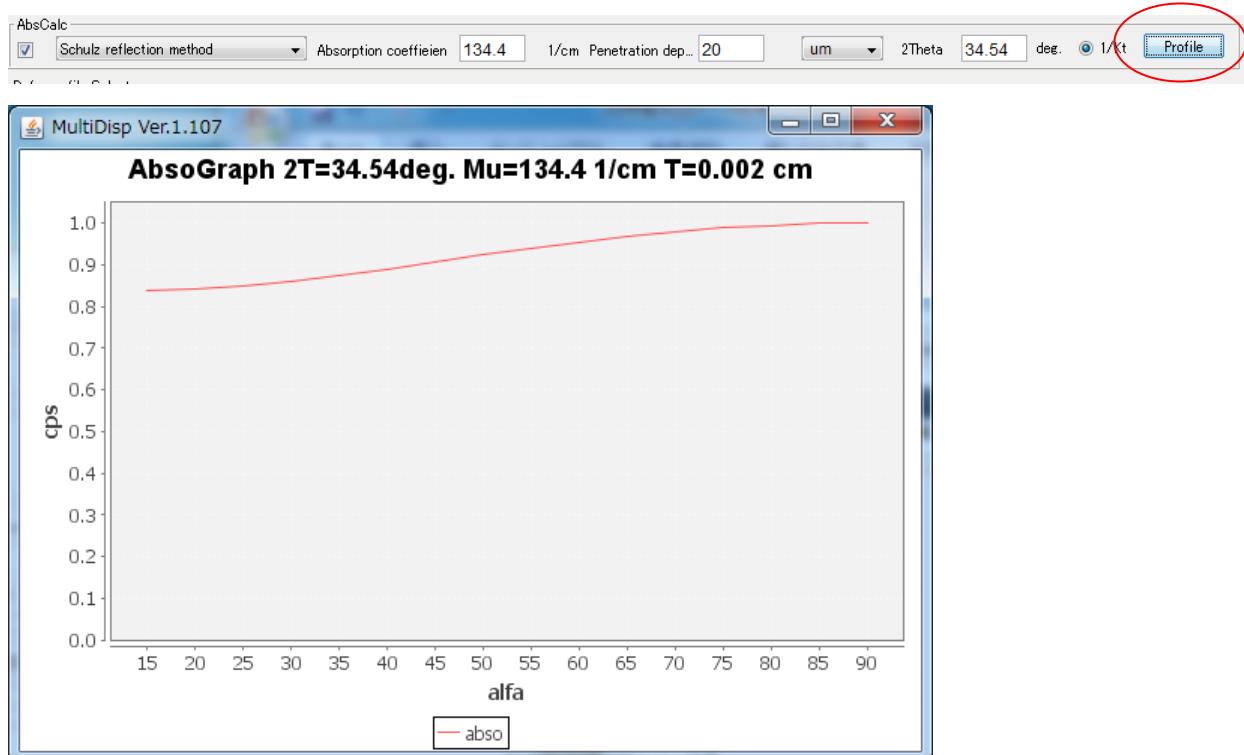
XRDによる方位測定ではEBSDに比べ、若干深さ方向の方位も測定されていると言われています。吸収が少ない材料では、より深い位置からの反射があり、この影響はDefocusと区別がし難くなります。しかし吸収の大きな試料における反射法極点図測定では、吸収の影響は少ない。

透過法では、吸収係数と試料厚さを掛け合わせた値が1.0に近いと吸収の影響は少なくなります。

アルミニウム1mmをCu管球で測定した吸収補正曲線



厚さを20μmとした場合

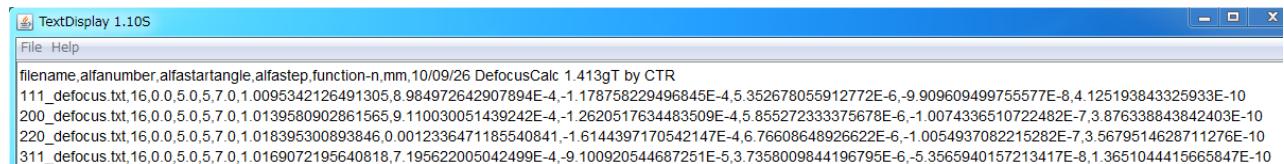


このプロファイルは補正量であり、表示している係数を測定した極点図に掛け合わせます。

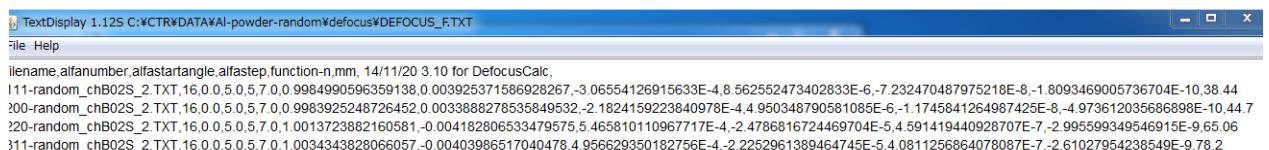
## 7. 7 Defocus 補正

反射法極点図測定では、X線ビームに対し、試料を煽って測定を行う。煽り方向には Schulz スリットで制限しているが、多少の広がりがある。この為、この広がりが試料を煽ることで、回折線も広がり有限な受光スリットからはみ出し、回折強度の低下が生じる。この現象が Defocus であり、測定  $2\theta$  角度が低角度、受光スリットが狭い場合、大きく落ち込み、補正量が大きくなる。

補正曲線は、測定試料と同じ材質の無配向試料を測定して補正する。被検試料測定時、受光スリット幅は無配向試料測定と同一でなければならない。無配向試料が得られない場合、計算で求める。



受光スリット幅変更で defocus 曲線再計算用 TABLE (TABLE に  $2\theta$  角度が含まれている)

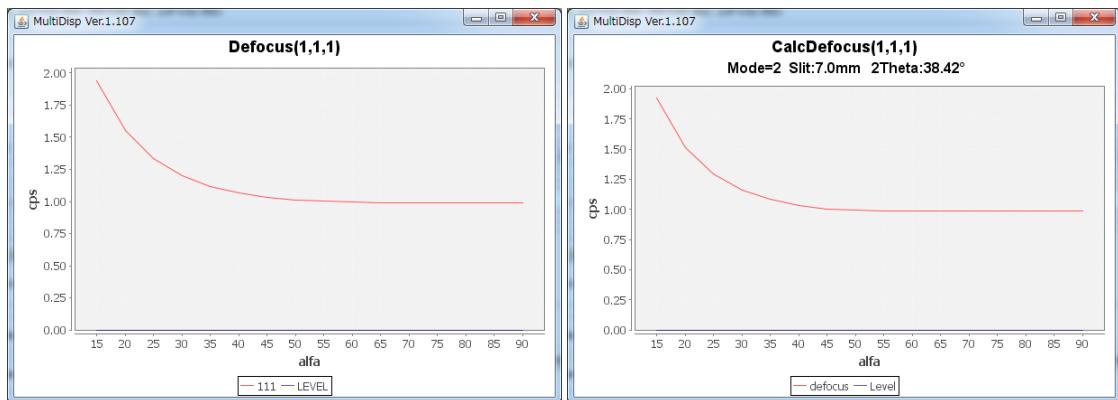


受光スリット幅を変更して新しい defocus 曲線を用いた場合、NEWDEF ホルダに新しい補正曲線が作成されている。この新しい補正曲線をマージするには、AddDefocusFile ソフトウェアを利用すれば可能



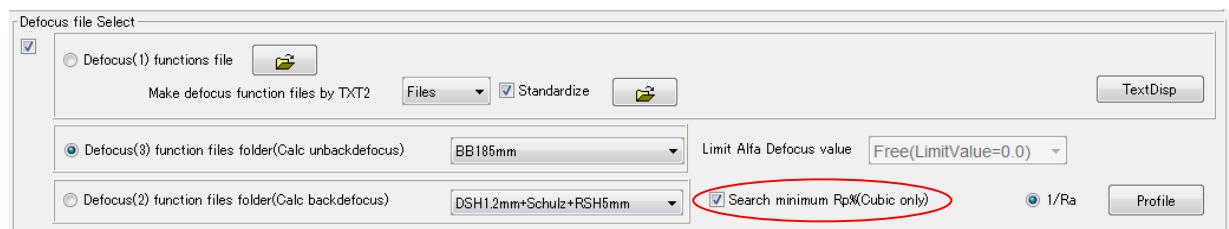
## 多項式

## 計算



ほぼ同一の補正曲線が得られる。測定  $2\theta$  が高角度になれば、補正量が少なくなる。

## R p %最適化による d e f c u s 補正



R p %は、ODF解析時、入力極点図と再計算極点図の差から計算される評価値で、  
入力極点図の整合性が評価されます。

本、ソフトウェアでは Cubic 材料に対し、疑似的に ODF 解析を行い、  
最適な d e f o c u s 補正を試みます。

## 7. 7. 1 T X T 2 ファイル指定による d e f o c u s ファイル作成

d e f o c u s 曲線を作成する場合、ファイル名の先頭に指数を付けたファイルを作成する。

S c h u l z n 反射法では、d e f o c u s 曲線は予測出来るが、2次元ディテクタを用いた場合、材料を傾けると、同じ $2\theta$ 角度でもd e f o c u s プロファイルが変化する。同一 $2\theta$ 角度を用いたファイル名は、111-,222-,333-として区分けする。又、ファイル内に登録する指数もファイル名と同じように指数を変える。

| 名前             | サイズ   | 種類               | 更新日時             |
|----------------|-------|------------------|------------------|
| 110-10Zcut.asc | 74 KB | RINT2000アスキーファイル | 2012/05/24 15:27 |
| 200-10Zcut.asc | 60 KB | RINT2000アスキーファイル | 2012/05/24 15:27 |
| 211-10Zcut.asc | 53 KB | RINT2000アスキーファイル | 2012/05/24 15:27 |
| 220-50Zcut.asc | 98 KB | RINT2000アスキーファイル | 2012/05/24 15:27 |
| 400-50Zcut.asc | 70 KB | RINT2000アスキーファイル | 2012/05/24 15:27 |
| 422-50Zcut.asc | 58 KB | RINT2000アスキーファイル | 2012/05/24 15:27 |

このデータは、ファイル名指数とファイルに登録されている指数が異なるため、ファイル内の指数を書き換える。

111-10zcut.asc,220-50zcut.asc

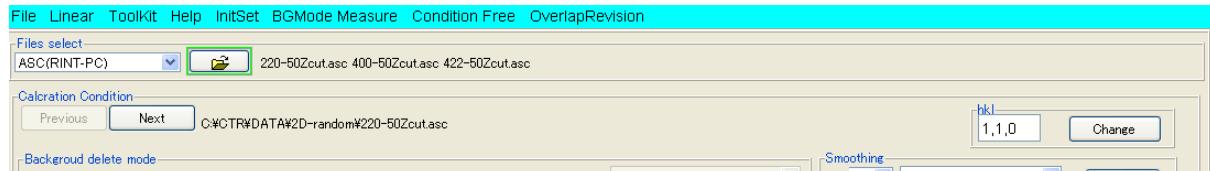
200-10zcut.asc,400-50zcut.asc

211-10zcut.asc,422-50zcut.asc

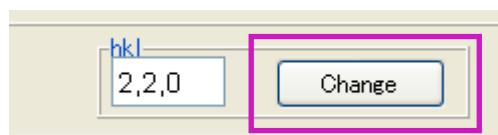
のファイルに登録されている指数が同じになっているため、以下の操作で

ファイル名の指数とファイルに登録されている指数と同じにしてA S C ファイルを作成する。

220-50zcut.asc ファイルのファイル内は1,1,0 が登録されているので



指数を 2,2,0 に変更して Change する。



400-50zcut,asc,422-50zcut.asc も同様に変更する。

変更したら、データ処理は一切行わないで Asc ファイル作成する。

| OutFiles                        | Cancel                                     | Calc                             | Exit&ODF         | ODF |
|---------------------------------|--------------------------------------------|----------------------------------|------------------|-----|
| <input type="radio"/> TXT(Pole) | <input checked="" type="radio"/> Asc(Pole) | <input type="radio"/> TXT2(Pole) |                  |     |
| 110-10Zcut.asc                  | 74 KB                                      | RINT2000アスキーファイル                 | 2012/05/24 15:27 |     |
| 200-10Zcut.asc                  | 60 KB                                      | RINT2000アスキーファイル                 | 2012/05/24 15:27 |     |
| 211-10Zcut.asc                  | 53 KB                                      | RINT2000アスキーファイル                 | 2012/05/24 15:27 |     |
| 220-50Zcut.asc                  | 98 KB                                      | RINT2000アスキーファイル                 | 2012/05/24 15:27 |     |
| 400-50Zcut.asc                  | 70 KB                                      | RINT2000アスキーファイル                 | 2012/05/24 15:27 |     |
| 422-50Zcut.asc                  | 58 KB                                      | RINT2000アスキーファイル                 | 2012/05/24 15:27 |     |
| 220-50Zcut_ch.asc               | 129 KB                                     | RINT2000アスキーファイル                 | 2013/04/18 14:20 |     |
| 400-50Zcut_ch.asc               | 88 KB                                      | RINT2000アスキーファイル                 | 2013/04/18 14:20 |     |
| 422-50Zcut_ch.asc               | 85 KB                                      | RINT2000アスキーファイル                 | 2013/04/18 14:20 |     |

変更されたA s c ファイル

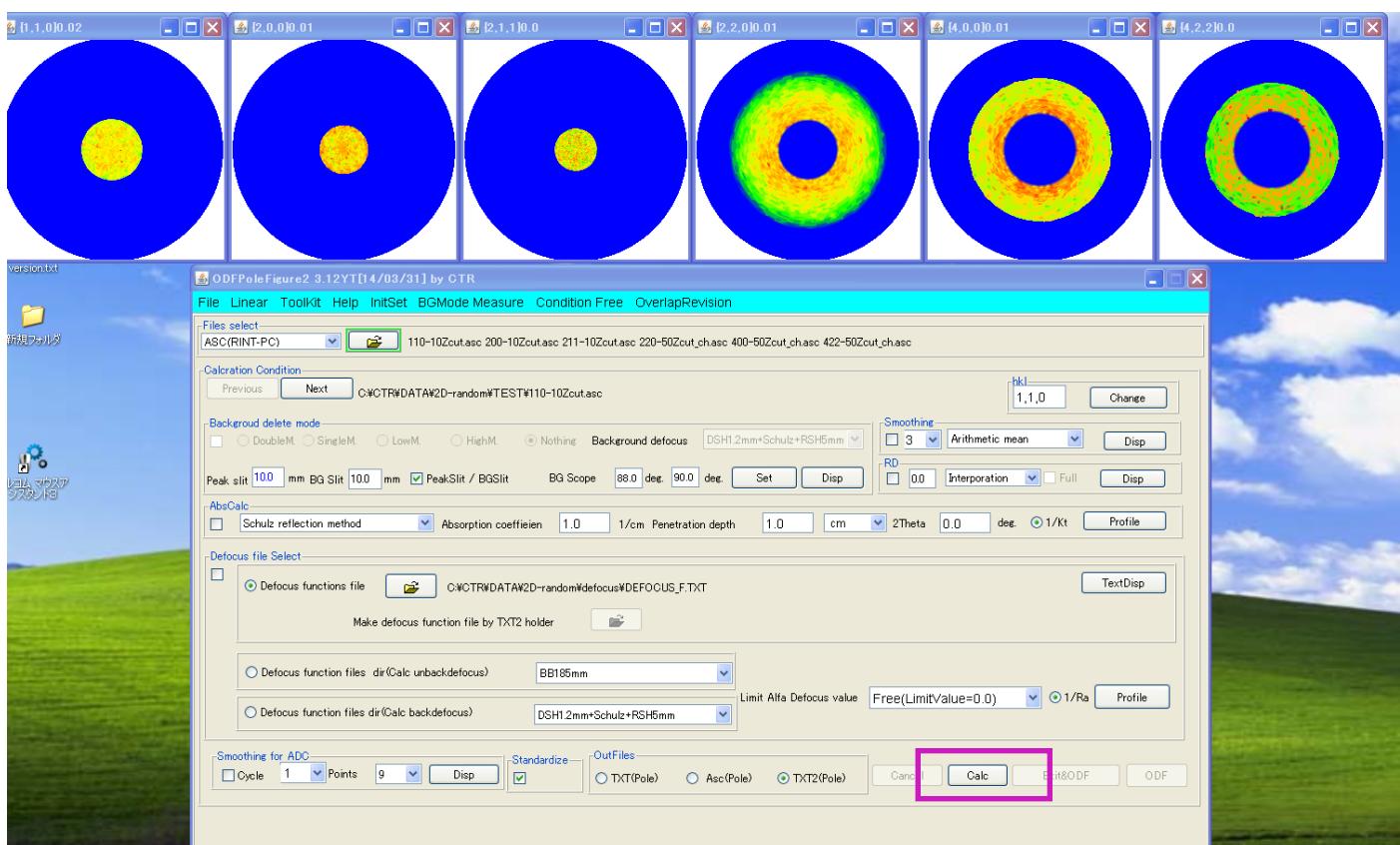
ファイル名のファイル内に登録された指標が同じになったので、

|                   |        |              |                  |
|-------------------|--------|--------------|------------------|
| 110-10Zcut.asc    | 74 KB  | RINT2000アスキー | 2012/05/24 15:27 |
| 200-10Zcut.asc    | 60 KB  | RINT2000アスキー | 2012/05/24 15:27 |
| 211-10Zcut.asc    | 53 KB  | RINT2000アスキー | 2012/05/24 15:27 |
| 220-50Zcut.asc    | 98 KB  | RINT2000アスキー | 2012/05/24 15:27 |
| 400-50Zcut.asc    | 70 KB  | RINT2000アスキー | 2012/05/24 15:27 |
| 422-50Zcut.asc    | 58 KB  | RINT2000アスキー | 2012/05/24 15:27 |
| 220-50Zcut_ch.asc | 129 KB | RINT2000アスキー | 2013/04/18 14:20 |
| 400-50Zcut_ch.asc | 88 KB  | RINT2000アスキー | 2013/04/18 14:20 |
| 422-50Zcut_ch.asc | 85 KB  | RINT2000アスキー | 2013/04/18 14:20 |

defocus の動作確認の為、TEXT ホルダを作成し、ファイル名指標と登録指標が同じファイルを TEST ホルダにコピーする。



TXT2 ファイルを作成する。(TEST ホルダの上のホルダを指定)

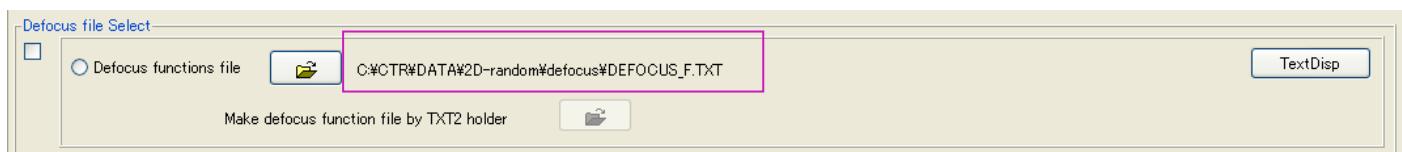
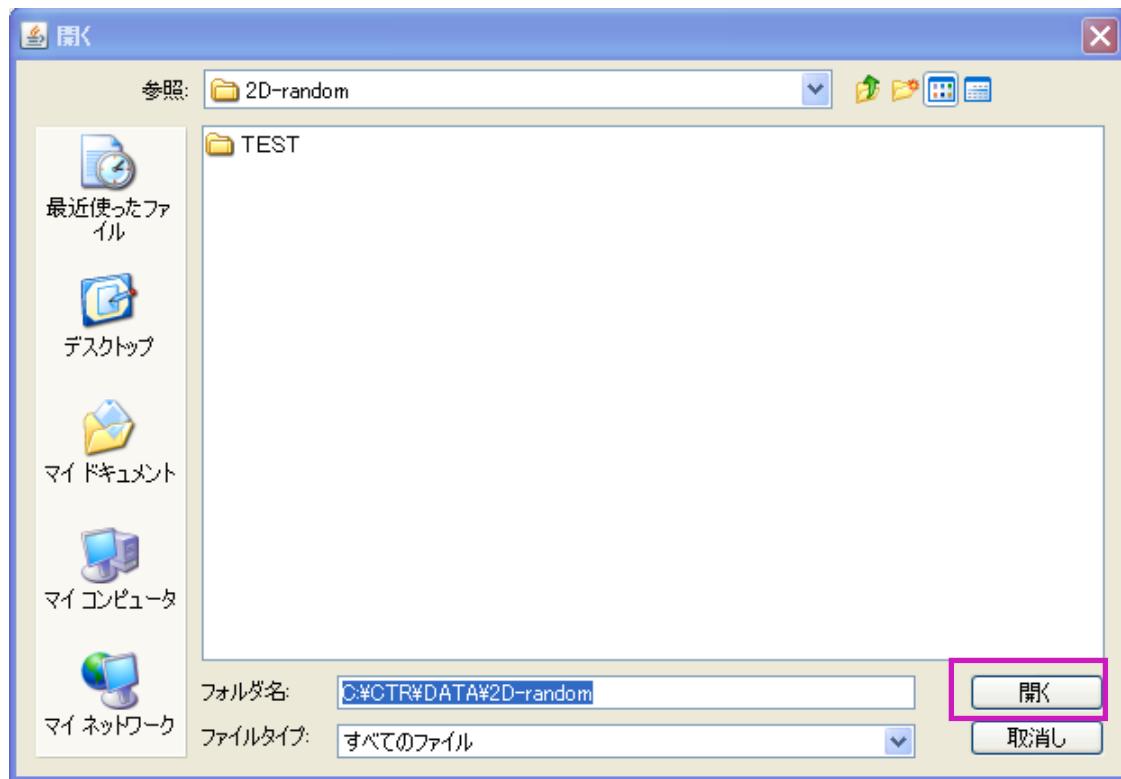


defocus 補正を行わないで、Calc で TXT2 ファイルを作成

関係のない TXT2 ファイルが同一ホルダに存在しないようにして下さい。

Defocus functions file が表示されている場合、非選択で表示をなくす。

DefocusTXT2 Holder で作成した TXT2 ホルダを指定



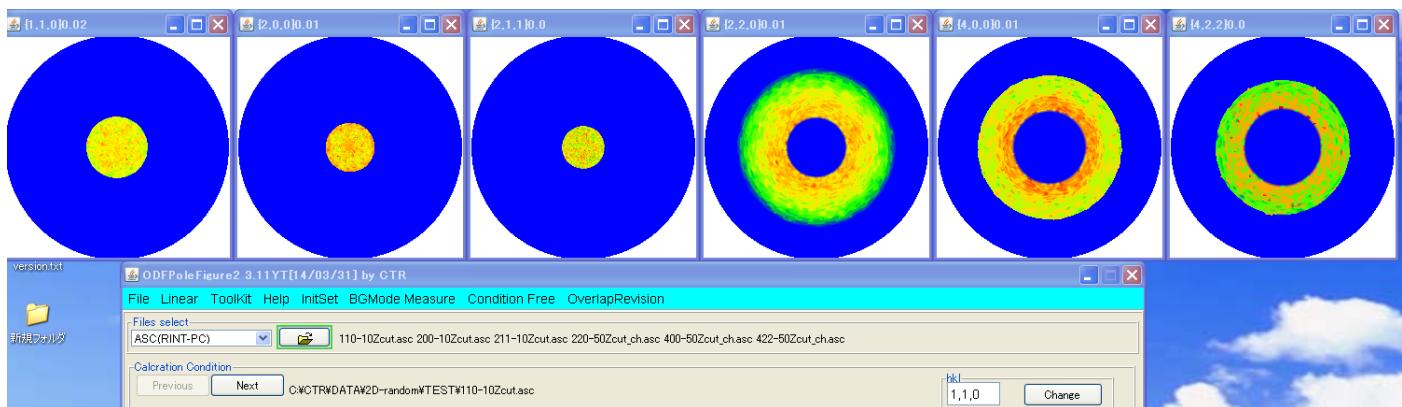
多項式近似式ファイルが表示される。

TextDisp で

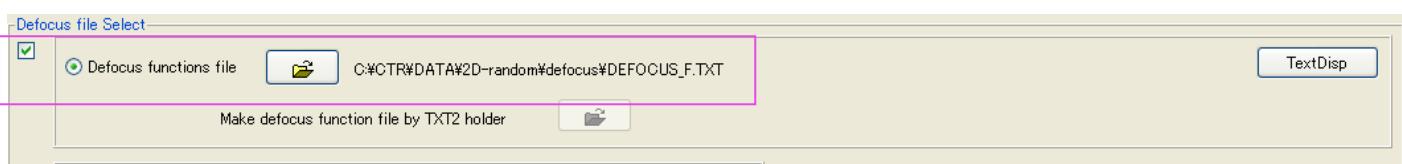
```
filename,alfanumber,alfastartangle,alfastep,function-n,mm, 13/04/18 3.10 for DefocusCalc,  
110-10Zcut_chS_2.TXT,31,0,0,1,0,5,1,0,1,0040661619731068,0,003442768673125065,-0,003036413474887437  
200-10Zcut_chS_2.TXT,25,0,0,1,0,5,1,0,1,006157539262177,0,0019599331210058257,-0,001782656111757175  
211-10Zcut_chS_2.TXT,22,0,0,1,0,5,1,0,1,0024814354941622,-0,01732047204549961,0,006801914717419526,-  
220-50Zcut_ch_chS_2.TXT,41,30,0,1,0,5,1,0,2,1655659983420623,-0,19978133466348624,0,011862841623337:  
400-50Zcut_ch_chS_2.TXT,29,36,0,1,0,5,1,0,115,26874426146864,-12,950983920527575,0,5764885049590572  
422-50Zcut_ch_chS_2.TXT,24,38,0,1,0,5,1,0,117,4372704492457,-12,2973794634932,0,5148113663300319,-0,0
```

以上で、TXT2 から defocus 近似式を作成出来た。

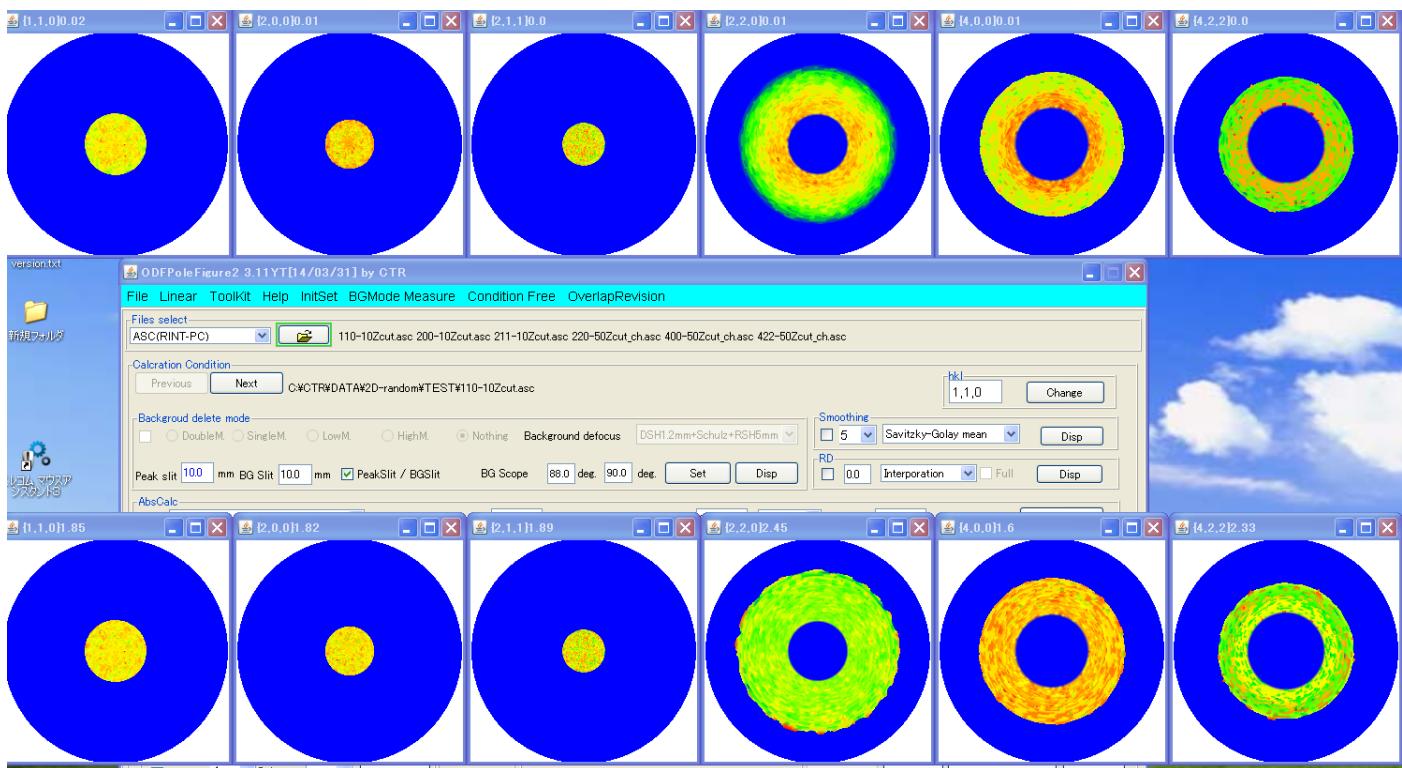
確認の為、先ほど作成した TEXT データを補正してみます。



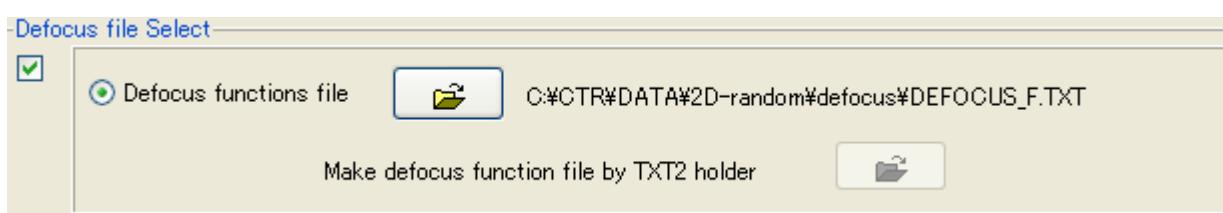
d e f o c u s 補正を



で c a l c してみると



ほぼフラットになる事が確認できます。



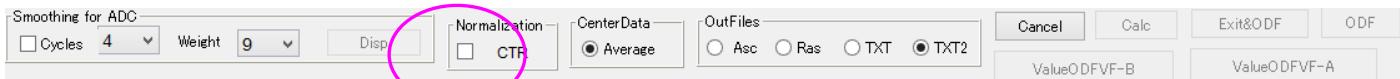
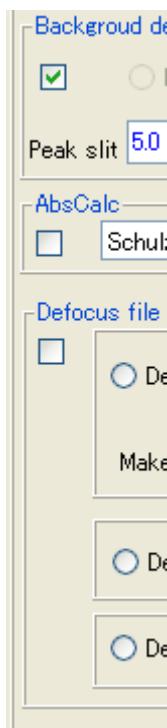
以降、

表示があれば、そのまま d e f o c u s 補正出来ます。

表示されていない場合、計算された DEFOCUS\_F.TXT を直接指定する。

## 7. 7. 2 random試料との強度比較を行う場合

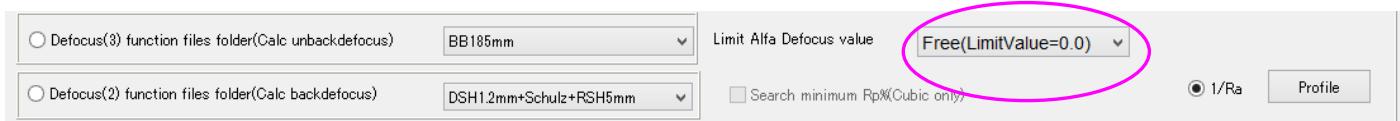
極点図間の相対強度を計算する場合、`defocus`データは強度の規格化は行わない  
 TXT2を作成する時も、バックグラウンド除去のみ行い、疑似規格化は行わない



`defocus`ファイル作成時も疑似規格化は行わない。(通常の場合は行う)

`defocus`補正を行わないで疑似規格化の場合、内部計算規格化値(`cps`)で表示

(PoleDisplayTXT2 の Version 1.311 以降で対応)

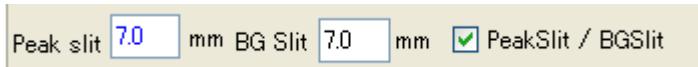


疑似規格化を行わない `defocus` 曲線に対し、極点図の範囲制限機構は動作させないで下さい  
 (0. 0とする)

### 7. 7. 3 登録 defocus 曲線を変更する

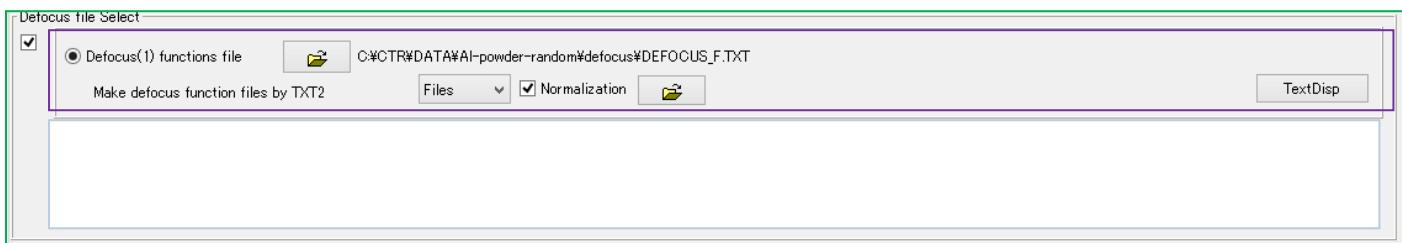
S l i t 幅を変更すると、補正曲線を変更する事が出来ます。

通常は測定スリット幅が表示されています。



変更は、PeakSlit 幅と BGSlit 幅と同じ値に変更してください。

表示スリット幅より小さくすると、補正量が大きくなり、大きくすると、補正量が小さくなります。



内部 TABLE から計算されます。

T e n c k o f f の計算式を使った計算が行われます。

### 8. 8 規格化

極点図の重み付き平均値で規格化を行う。 R I N T と同じ

更に、極点図の中心と外側の重みを 1 / 2 とする方法がある。(CTR)

R I N T と同じ計算にするには、"C:\CTR\work\stdNORM\stdNORM.txt" ファイルを作成して "RINT" と書きこむ

規格化の方法は以下の 3 方法があります。

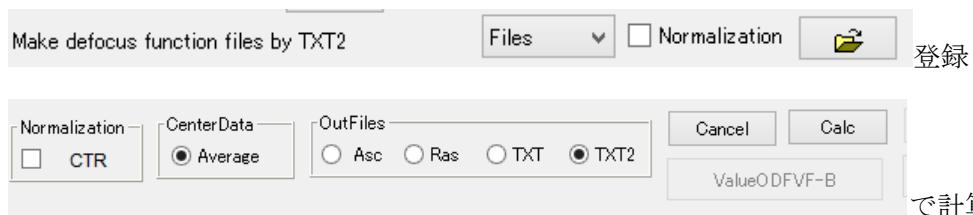
内部計算規格化、 random 規格化 (強度比)、 random 規格化 + 疑似規格化

内部計算規格化

d e f o c u s 指定なし、 Standardize ON

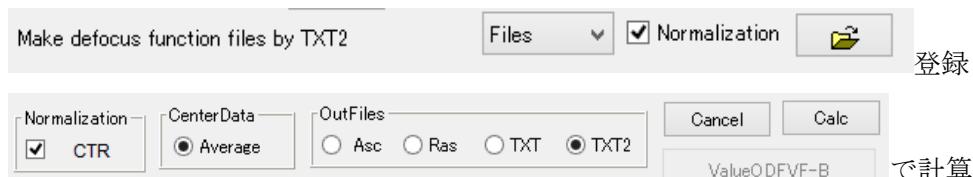
Random 規格化 (強度比)

Defocus データをバックグラウンド削除、 Standardize OFF で TXT2 作成し



で計算

random 規格化 (双方の規格化)



で計算

内部計算規格化で

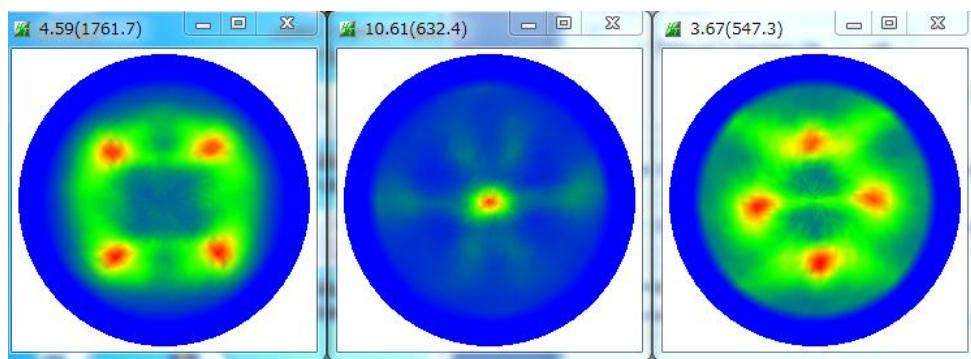
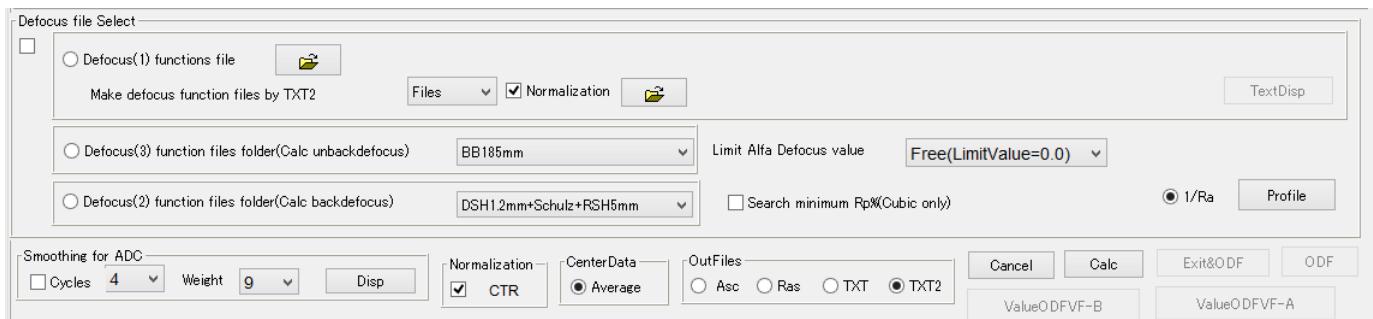


で計算すると

極点図の中心を平均値とした最大強度を表示します

## 7. 8. 1 内部計算規格化強度の計算

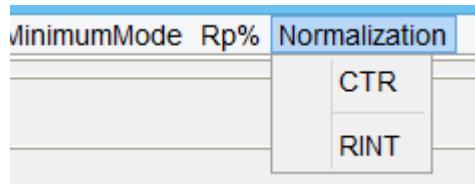
defocus 補正を行わないで疑似規格化を行うと内部計算規格化を行い規格化平均強度を表示します。



内部規格化の場合、指数なしで、規格化強度と内部計算規格化平均強度(cps 単位)を表示  
PoleDisplayTXT2.jar ソフトウェアで実現している。10

## 7. 8. 1 規格化モードの切り替え

規格化の計算方法は各種存在します。

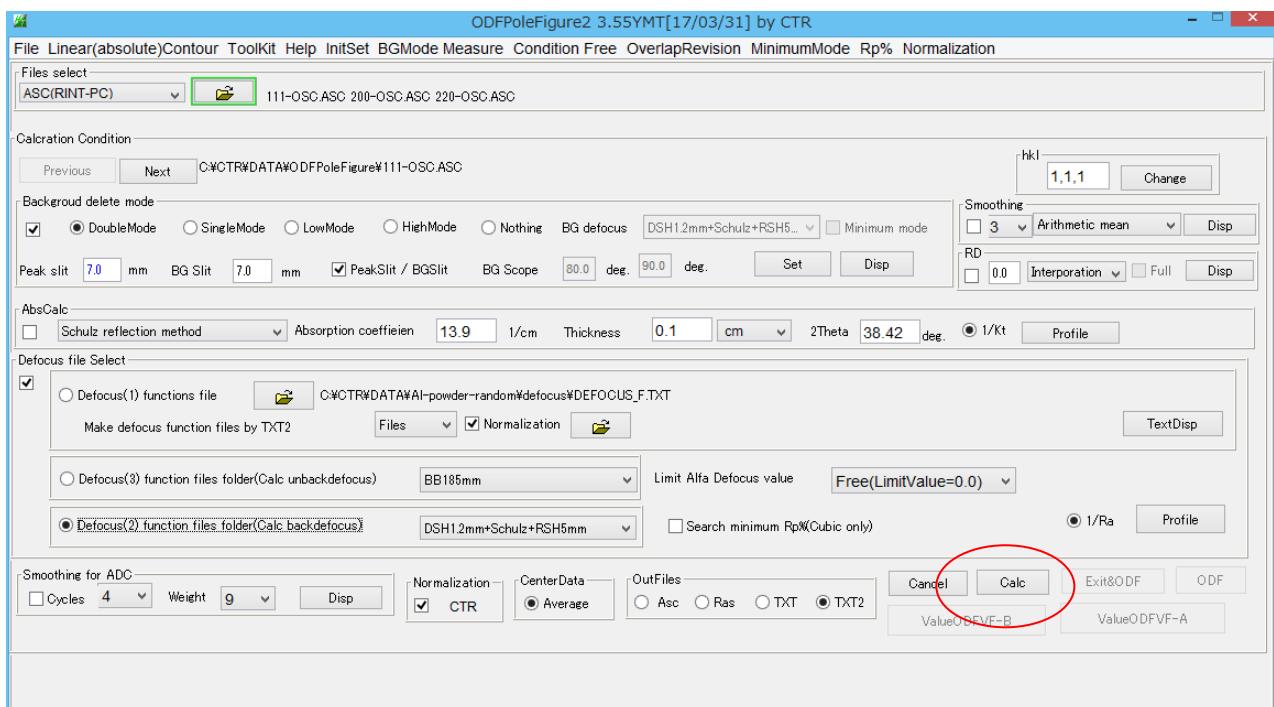


CTRは、ODF解析ソフトウェアで内部規格化される値に近い規格化

RINTはリガク正極点ソフトウェアと同一の計算方法

通常はCTRが適当と思われます。

## 7. 9一括データ処理を行う。



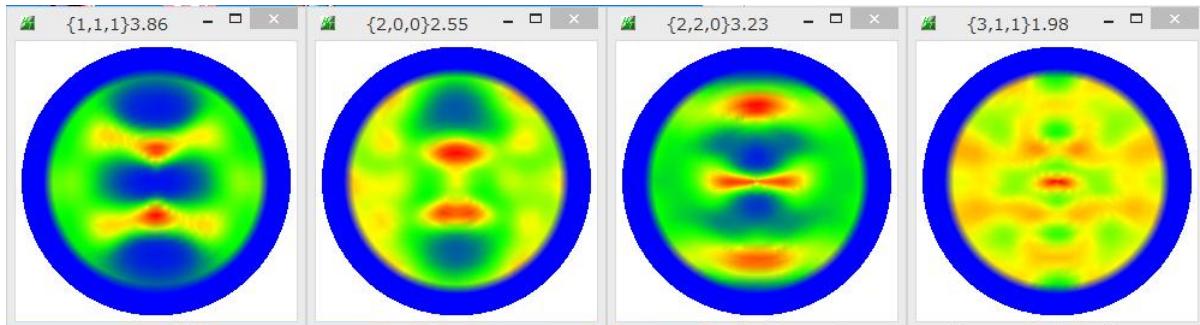
バックグラウンドは、{200}のみ、 $\alpha$ 軸 40 度から 55 度でバックグラウンドを計算

平滑化は移動平均 3 点

Defocus は計算による方法を選択



強度の疑似規格化を行い



処理結果を描画、強度が規格化極密度に変わり

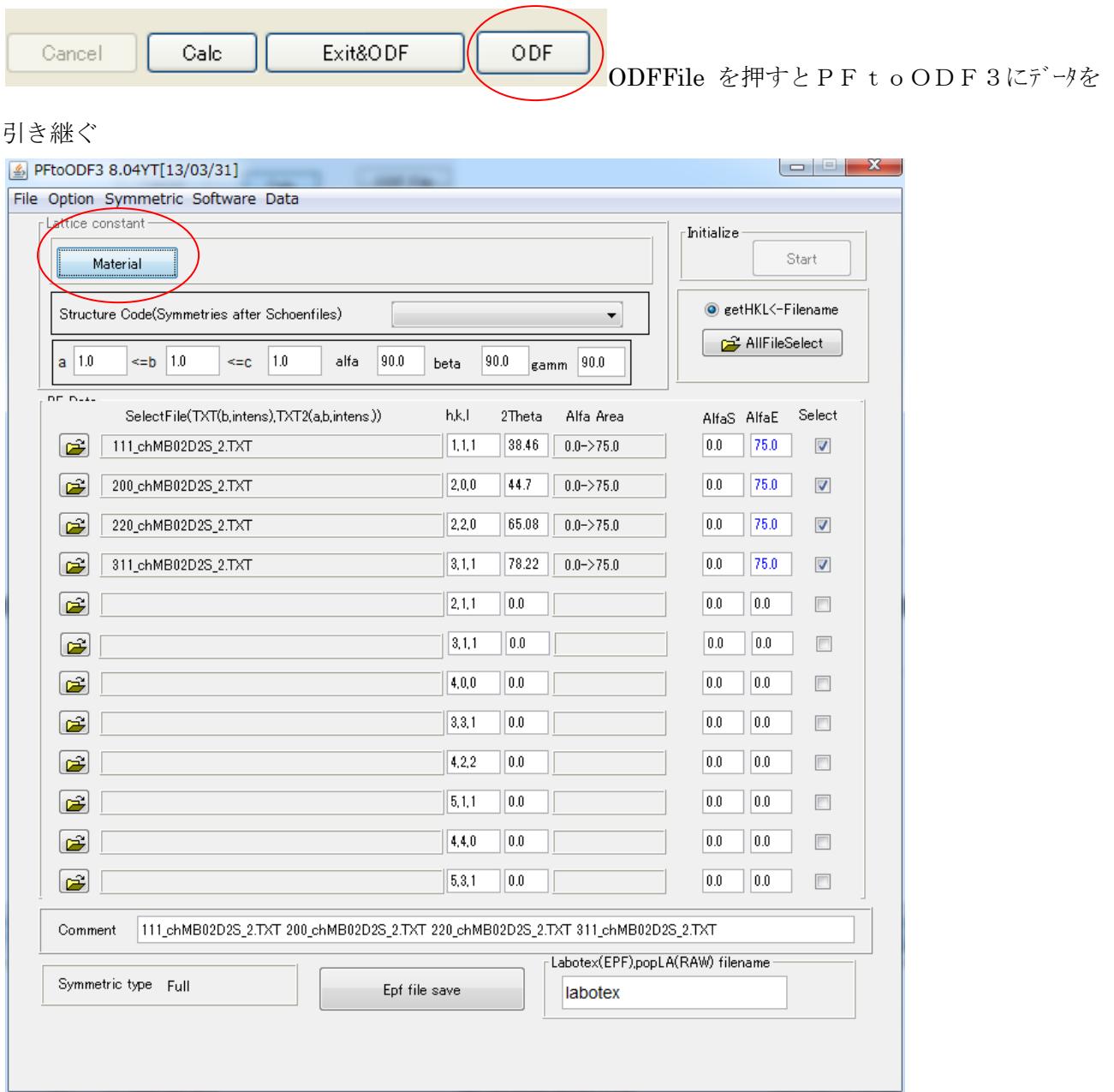


ODFFile ボタンが押せる状態に変化

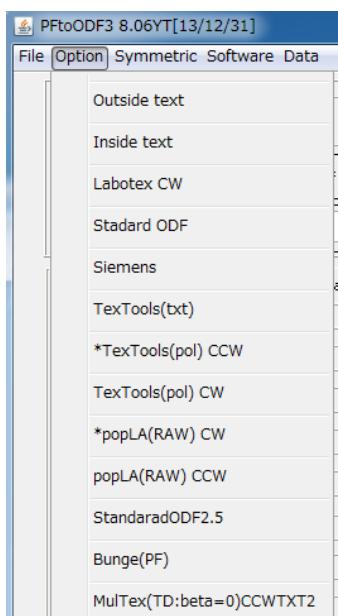
一方測定データのディレクトリを覗くと

|                 |                  |          |       |
|-----------------|------------------|----------|-------|
| 200.ASC         | 2012/07/25 10:15 | ASC ファイル | 22 KB |
| 220.ASC         | 2012/07/25 10:15 | ASC ファイル | 22 KB |
| 311.ASC         | 2012/07/25 10:15 | ASC ファイル | 22 KB |
| 111.ASC         | 2012/07/25 10:15 | ASC ファイル | 22 KB |
| 111_chMB02D2S_2 | 2012/09/19 18:27 | テキスト文書   | 22 KB |
| 200_chMB02D2S_2 | 2012/09/19 18:27 | テキスト文書   | 22 KB |
| 220_chMB02D2S_2 | 2012/09/19 18:27 | テキスト文書   | 22 KB |
| 311_chMB02D2S_2 | 2012/09/19 18:27 | テキスト文書   | 22 KB |

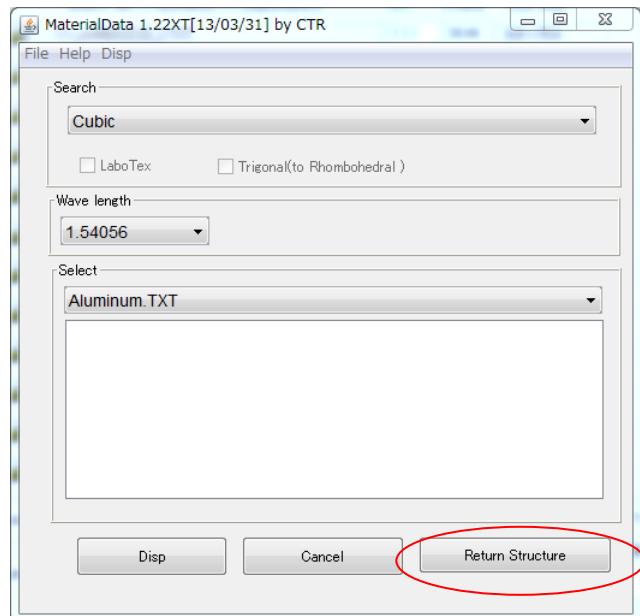
処理結果の \_ch 以降の英数字はデータ処理の内容を表示しています。



Option から ODF を選択



Material から材料選択



Structure Code(Symmetries after Schoenflies) 7 - O (cubic)

|       |         |         |           |           |           |
|-------|---------|---------|-----------|-----------|-----------|
| a 1.0 | <=b 1.0 | <=c 1.0 | alfa 90.0 | beta 90.0 | gamm 90.0 |
|-------|---------|---------|-----------|-----------|-----------|

LaboTex のパラメータを取得

PFtoODF3 8.24MT[17/03/31] by CTR

File Option Symmetric Software Data Help

Lattice constant  
Material Aluminum.txt Initialize Start  
Structure Code(Symmetries after Schoenflies) 7 - O (cubic)  
a 1.0 <=b 1.0 <=c 1.0 alfa 90.0 beta 90.0 gamm 90.0  
getHKL<-Filename AllFileSelect

PF Data

| SelectFile(TXT(b,intens),TXT2(a,b,intens)) | h,k,l | 2Theta | Alfa Area | AlfaS | AlfaE | Select                              |
|--------------------------------------------|-------|--------|-----------|-------|-------|-------------------------------------|
| 111_chMB02D2S_2.TXT                        | 1,1,1 | 38.46  | 0.0->75.0 | 0.0   | 75.0  | <input checked="" type="checkbox"/> |
| 200_chMB02D2S_2.TXT                        | 2,0,0 | 44.7   | 0.0->75.0 | 0.0   | 75.0  | <input checked="" type="checkbox"/> |
| 220_chMB02D2S_2.TXT                        | 2,2,0 | 65.08  | 0.0->75.0 | 0.0   | 75.0  | <input checked="" type="checkbox"/> |
| 311_chMB02D2S_2.TXT                        | 3,1,1 | 78.22  | 0.0->75.0 | 0.0   | 75.0  | <input checked="" 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"/>            |

Comment 111\_chMB02D2S\_2.TXT 200\_chMB02D2S\_2.TXT 220\_chMB02D2S\_2.TXT 311\_chMB02D2S\_2.TXT

Symmetric type Full CenterData Labotex(EPF),popLA(RAW) filename  
 Average Epf file save labotex

SelectFile(TXT(b,intens),TXT2(a,b,intens)) h,k,l 2Theta Alfa Area AlfaS AlfaE Select

|                     |       |       |           |     |      |                                     |
|---------------------|-------|-------|-----------|-----|------|-------------------------------------|
| 111_chMB02D2S_2.TXT | 1,1,1 | 38.46 | 0.0->75.0 | 0.0 | 75.0 | <input checked="" type="checkbox"/> |
| 200_chMB02D2S_2.TXT | 2,0,0 | 44.7  | 0.0->75.0 | 0.0 | 75.0 | <input checked="" type="checkbox"/> |
| 220_chMB02D2S_2.TXT | 2,2,0 | 65.08 | 0.0->75.0 | 0.0 | 75.0 | <input checked="" type="checkbox"/> |
| 311_chMB02D2S_2.TXT | 3,1,1 | 78.22 | 0.0->75.0 | 0.0 | 75.0 | <input checked="" type="checkbox"/> |

極点図の指数チェックを行い、正常であることを表す。

Epf file save Labotex(EPF),popLA(RAW) filename  
 labotex

ファイル名を入力して Epffilesave を行えば、ODF 向けファイルが作成できる。

## 作成されたファイルを表示

```
TextDisplay 1.13M C:\CTR\DATA\ODFPoleFigure2\LaboTex\CW\labotex.epf
File Help
111_chMB02D2S_2.TXT 200_chMB02D2S_2.TXT 220_chMB02D2S_2.TXT 311_chMB02D2S_2.TXT

Structure Code a b c alfa beta gamma
7 1.0 1.0 1.0 90.0 90.0 90.0
4
2Theta alf-s alf-e d-alf bet-s bet-e d-bet index H K L P/B
38.46 0.0 75.0 5.0 0.0 355.0 5.0 0 1 1 1 1
44.7 0.0 75.0 5.0 0.0 355.0 5.0 0 2 0 0 1
65.08 0.0 75.0 5.0 0.0 355.0 5.0 0 2 2 0 1
78.22 0.0 75.0 5.0 0.0 355.0 5.0 0 3 1 1 1

0.059700 0.059700 0.059700 0.059700 0.059700 0.059700 0.059700
0.059700 0.059700 0.059700 0.059700 0.059700 0.059700 0.059700
0.059700 0.059700 0.059700 0.059700 0.059700 0.059700 0.059700
0.059700 0.059700 0.059700 0.059700 0.059700 0.059700 0.059700
0.059700 0.059700 0.059700 0.059700 0.059700 0.059700 0.059700
0.059700 0.059700 0.059700 0.059700 0.059700 0.059700 0.059700
0.059700 0.059700 0.059700 0.059700 0.059700 0.059700 0.059700
0.059700 0.059700 0.059700 0.059700 0.059700 0.059700 0.059700
0.059700 0.059700 0.059700 0.059700 0.059700 0.059700 0.059700
0.059700 0.059700 0.059700 0.059700 0.059700 0.059700 0.059700
0.085700 0.085800 0.083000 0.083400 0.081700 0.081200 0.077100 0.078200
```

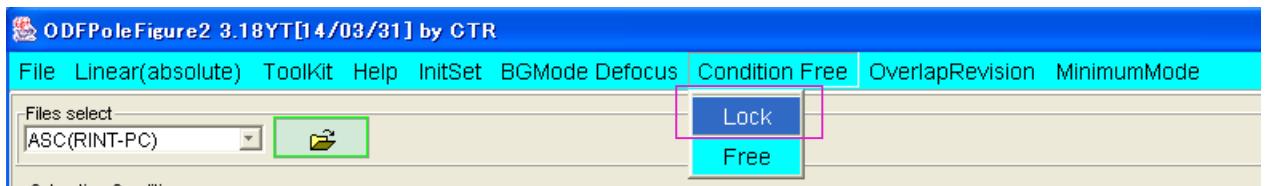
ODF 別のディレクトリの下にファイルが作成される。

| LaboTex         |  | 2012/09/19 18:45 | ファイル フォル...    |
|-----------------|--|------------------|----------------|
| 200.ASC         |  | 2012/07/25 10:15 | ASC ファイル 22 KB |
| 220.ASC         |  | 2012/07/25 10:15 | ASC ファイル 22 KB |
| 311.ASC         |  | 2012/07/25 10:15 | ASC ファイル 22 KB |
| 111.ASC         |  | 2012/07/25 10:15 | ASC ファイル 22 KB |
| 111_chMB02D2S_2 |  | 2012/09/19 18:27 | テキスト文書 22 KB   |
| 200_chMB02D2S_2 |  | 2012/09/19 18:27 | テキスト文書 22 KB   |
| 220_chMB02D2S_2 |  | 2012/09/19 18:27 | テキスト文書 22 KB   |
| 311_chMB02D2S_2 |  | 2012/09/19 18:27 | テキスト文書 22 KB   |

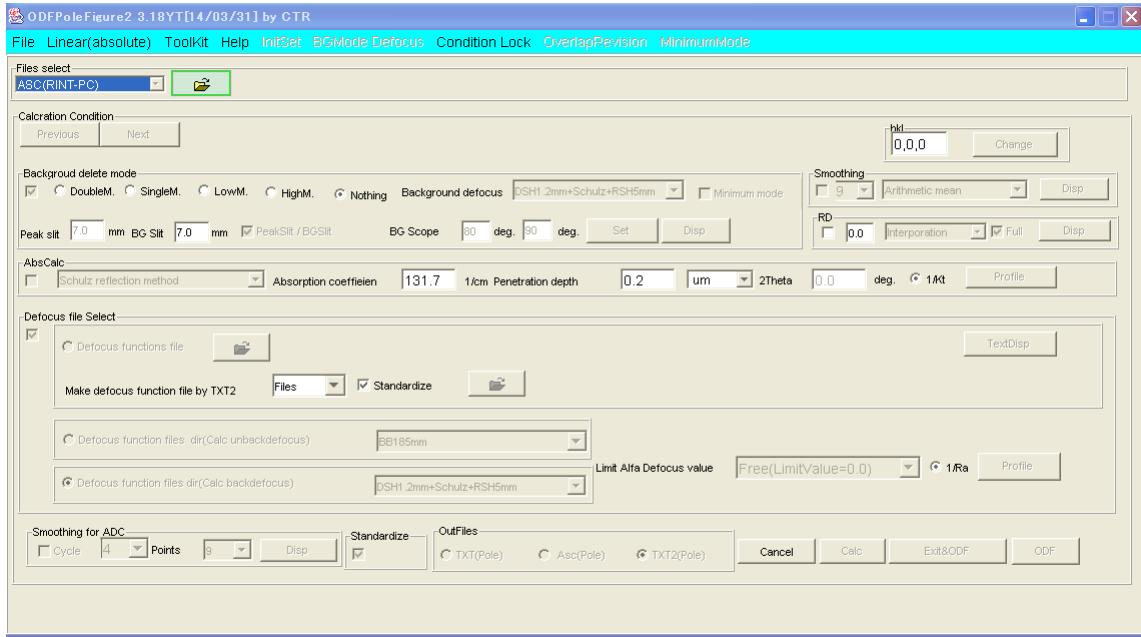
## 7. 10 定型化処理の簡素化

日常、製品管理などの作業では、毎日同一処理条件でデータ処理を行うケースがある。

このような場合、処理条件を Lock する事が出来ます。



Lock を選択すると、



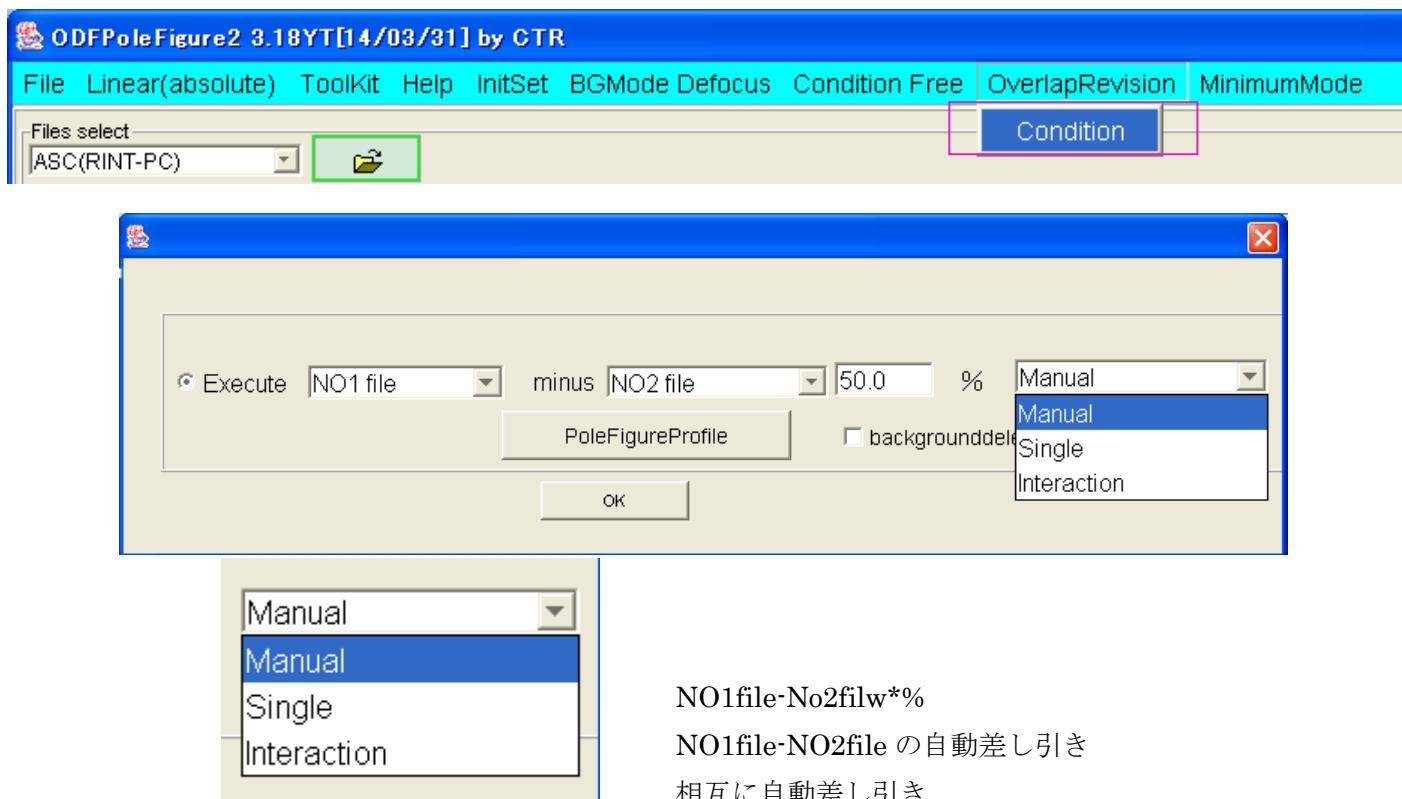
個々のデータに関係するデータ以外変更出来ない設定になります。

## 7. 1.1 相互に重なりあう極点図の分離

高分子材料などでは、近接回折線の影響が極点図に現れる事があります。

このような場合、測定条件を変更して再測定しなければなりませんが、簡易的に一方の極点図から他方を差し引く方法と相互に差し引く方法を提供します。

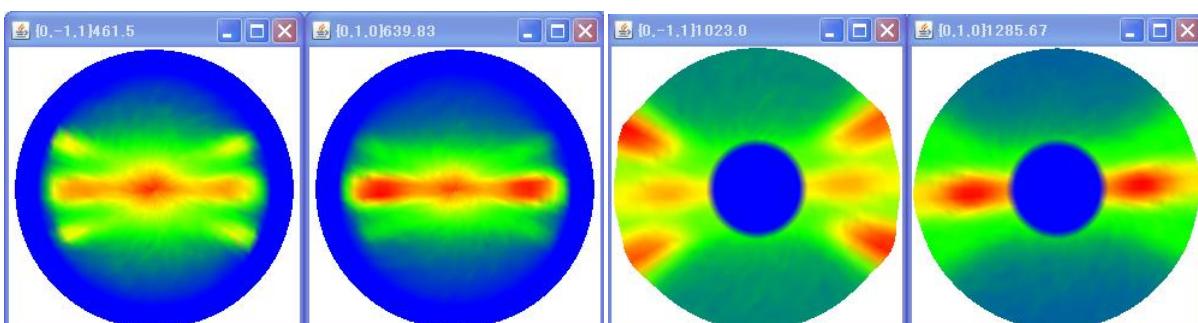
極点図を分離する手段を提供します。(PoleFigureDifference ソフトウェアで TXT2 対応)



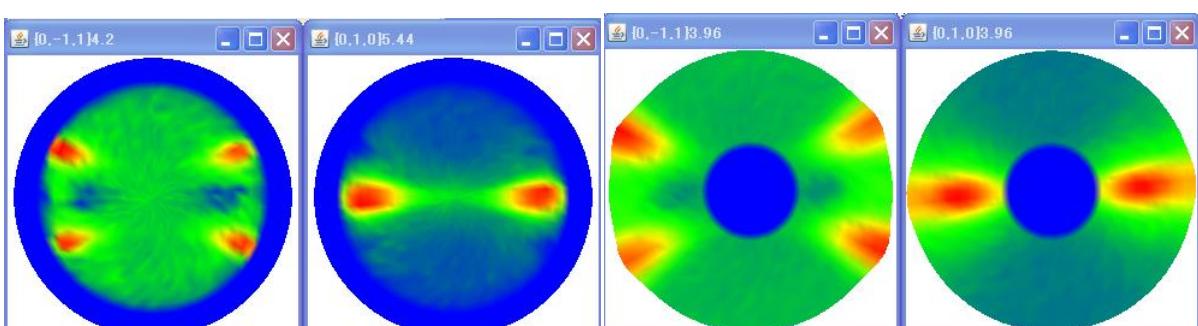
注意：相互に差し引く場合、極点図の最大極密度が極点図に現れている条件の元に動作します。

PET の Interaction モードの実施例

測定データ



処理後

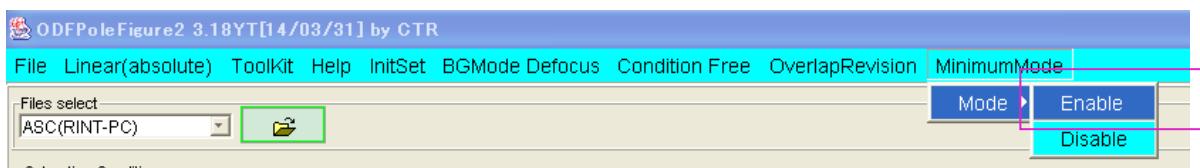


## 7. 1.2 強制バックグランド処理

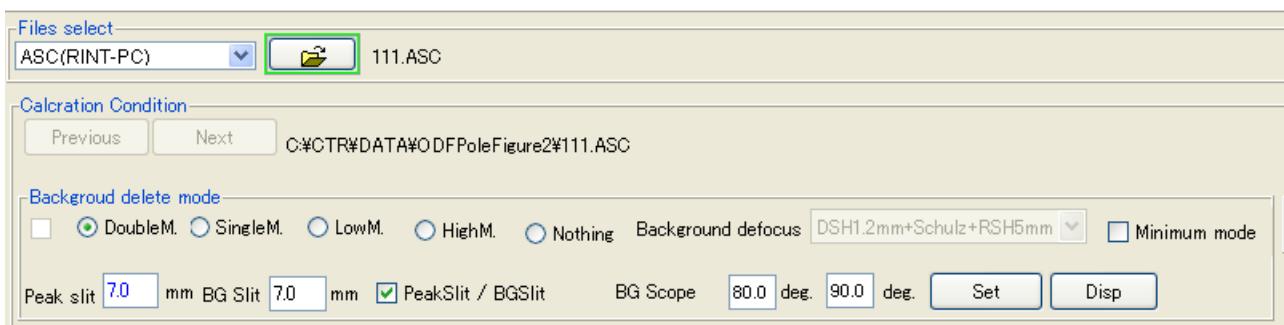
反射法と透過法を接続する場合、バックグランドの影響で接続部分が不連続になる事がある。

バックグランド処理を行った後、 $\beta$ プロファイルを一定の値シフトする事を狙い、

各 $\alpha$ に対し、 $\beta$ プロファイルの最低値を0.0までシフトします。



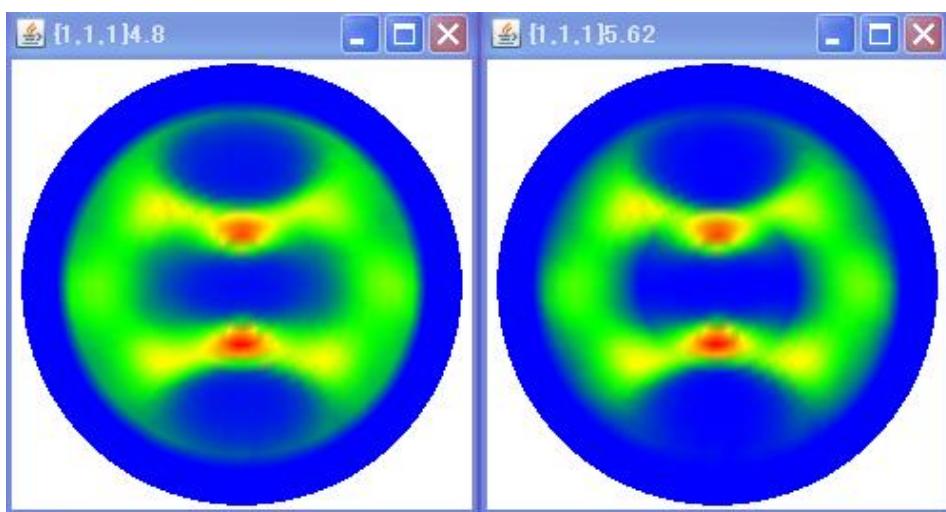
MinimumMode を Enable とする。



ファイルを指定して Minimum mode を S E T する。

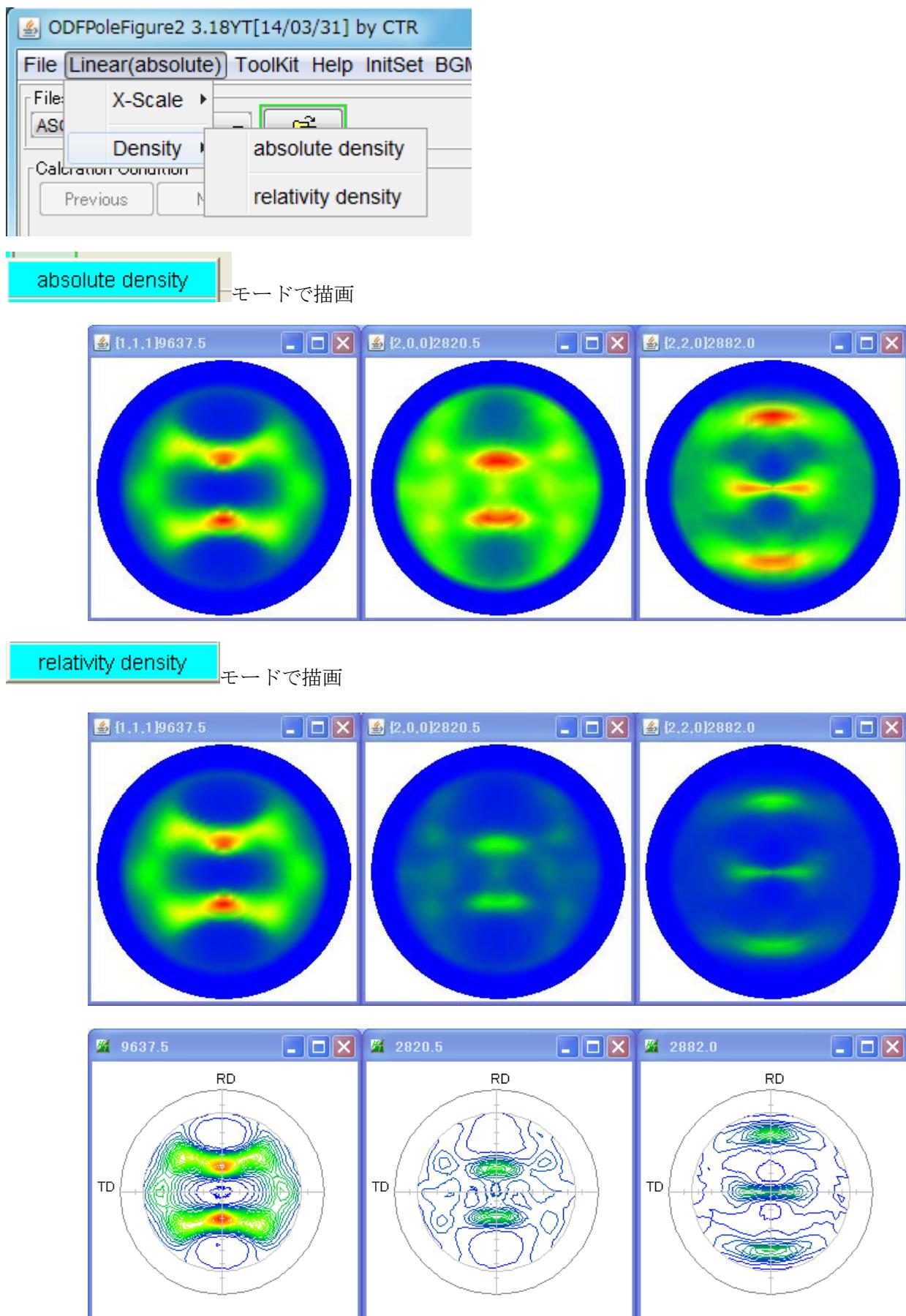


同一条件で、Minimum mode を指定すると、バックグランドレベルが低下した分、極密度がアップしています。



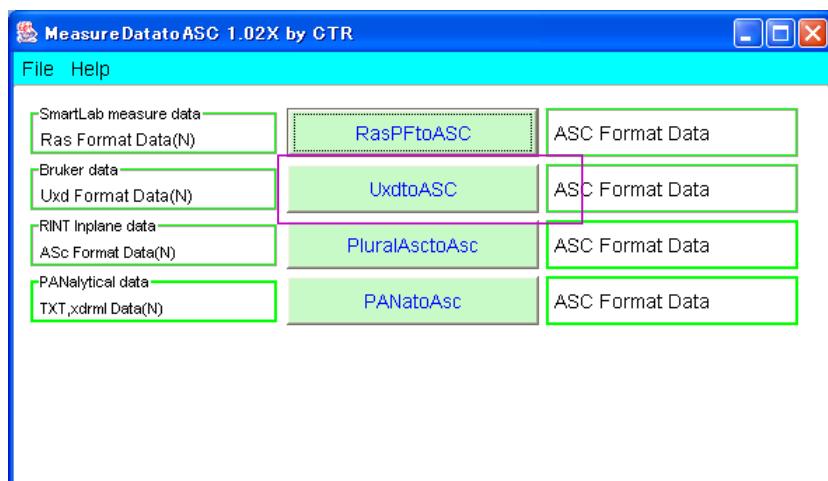
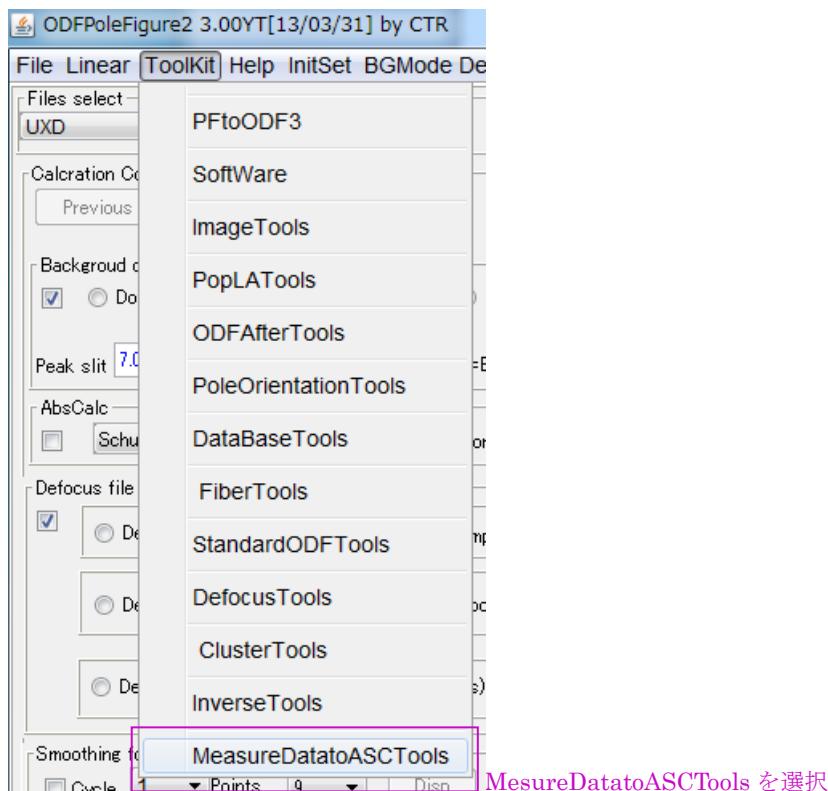
### 7. 1.3 同時に表示する極点図 Max 強度を絶対、相対の選択

通常、極点図の最大強度は、指標毎に最大強度を算出しているが、複数の極点図で最大強度を算出し、共通で最大強度で描画する事が出来ます。

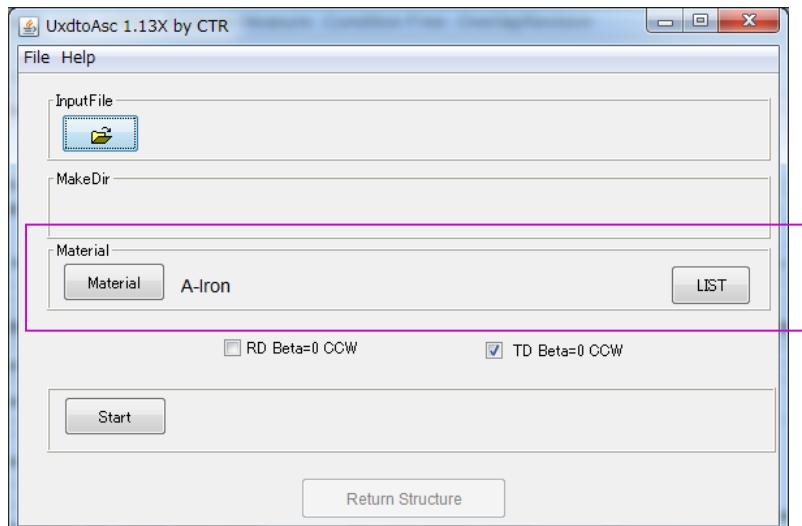


## 8. Bruker社データの読み込み

### 8. 1 Uxd フォーマットの場合、予め Uxd から ASC フォーマットに変換する方法 (F-2,F-3 データ)



UxdtoASC を選択

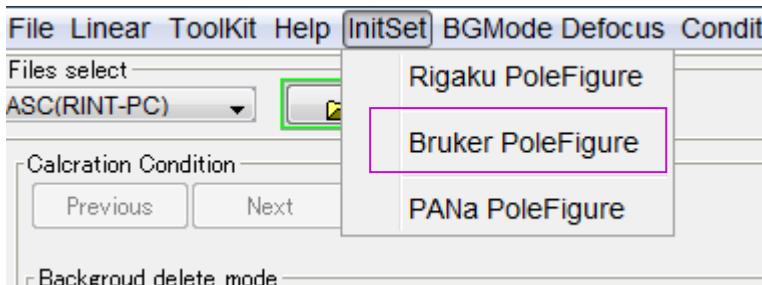


入力 Uxd ファイルに指標が登録されていません。  
Asc ファイルでは指標の項目があります。自動指標付けを行う上で材料を明確にして下さい。

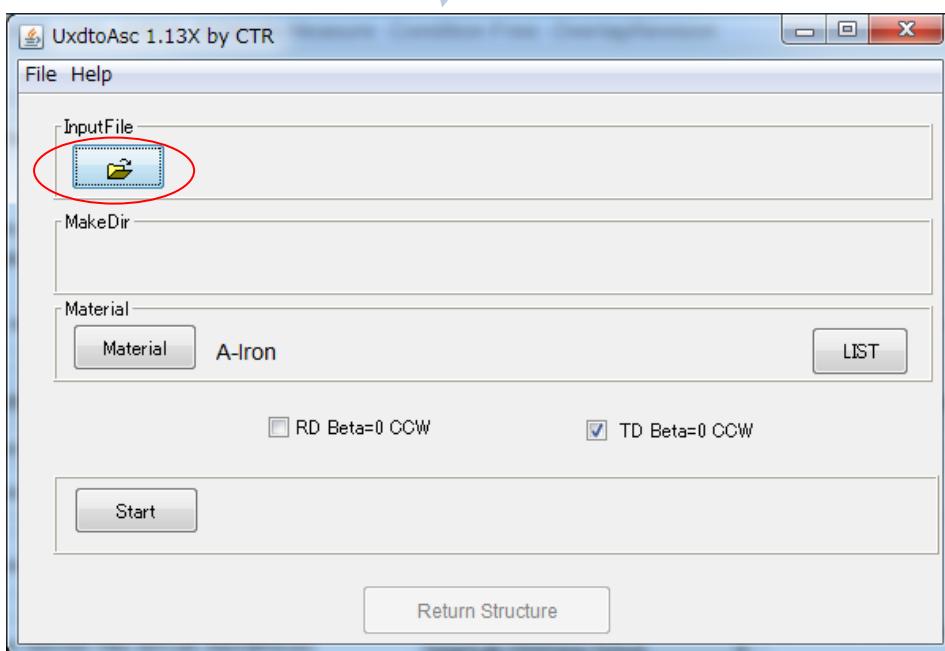
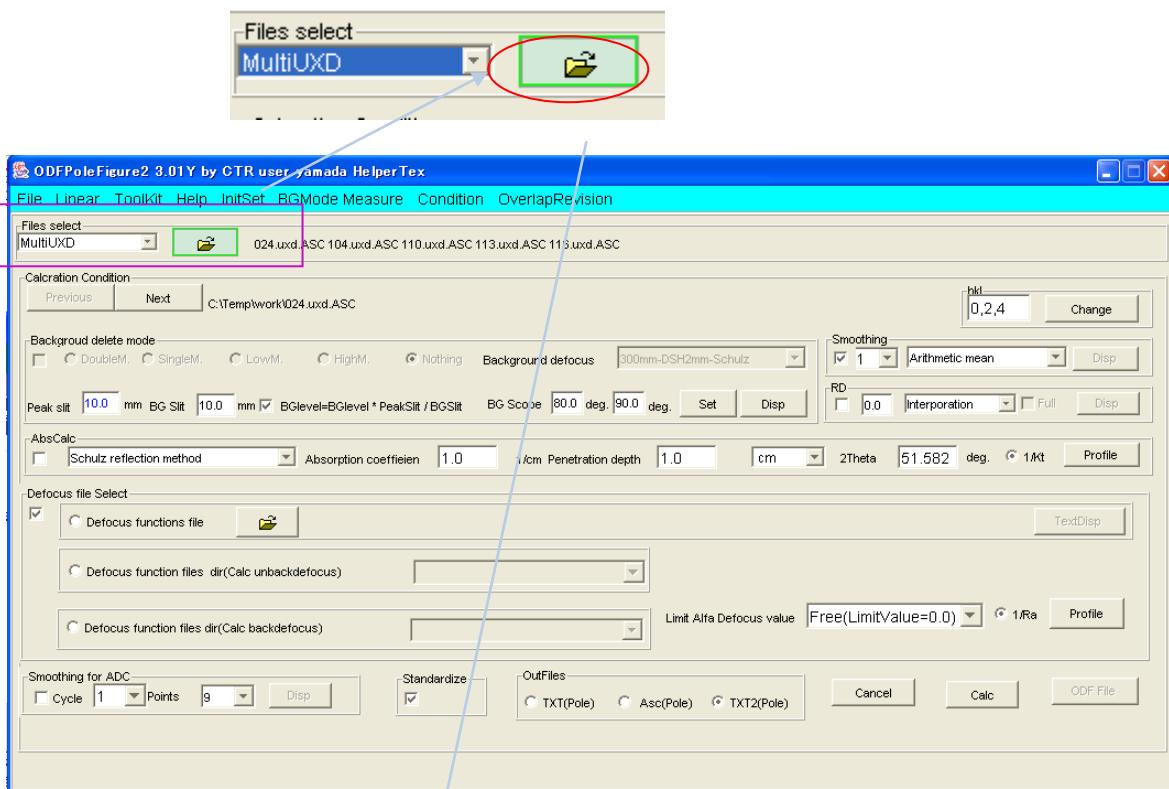
Uxd ファイル選択、  
Start で Asc ファイルに変換します。

## 7. 2 Uxd フォーマットを直接変換方法(F-2 データ)

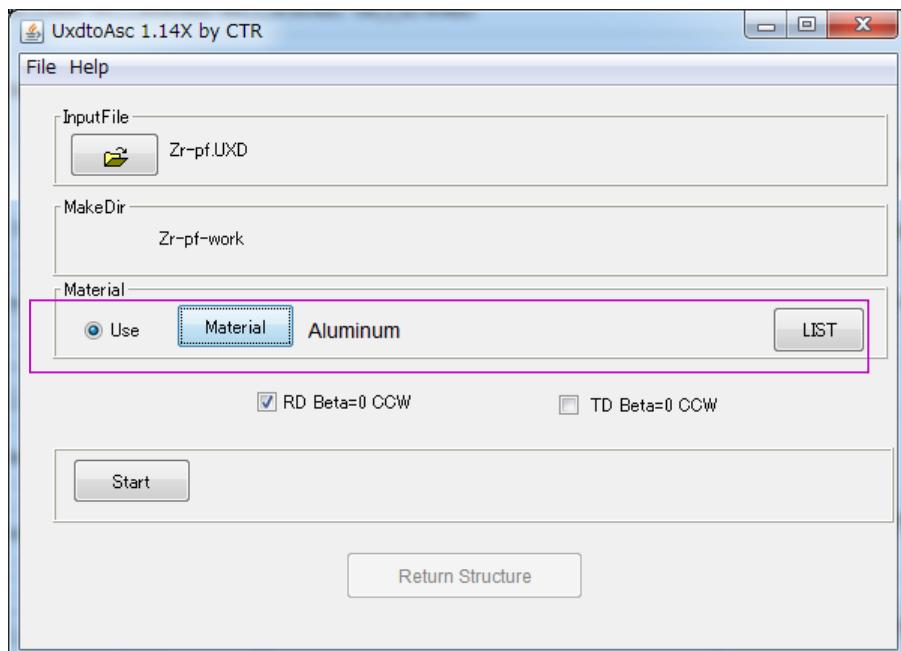
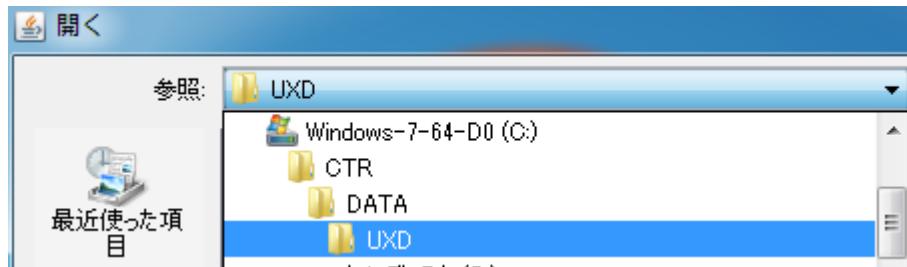
1 つのファイルに複数の極点図が登録されている測定データ



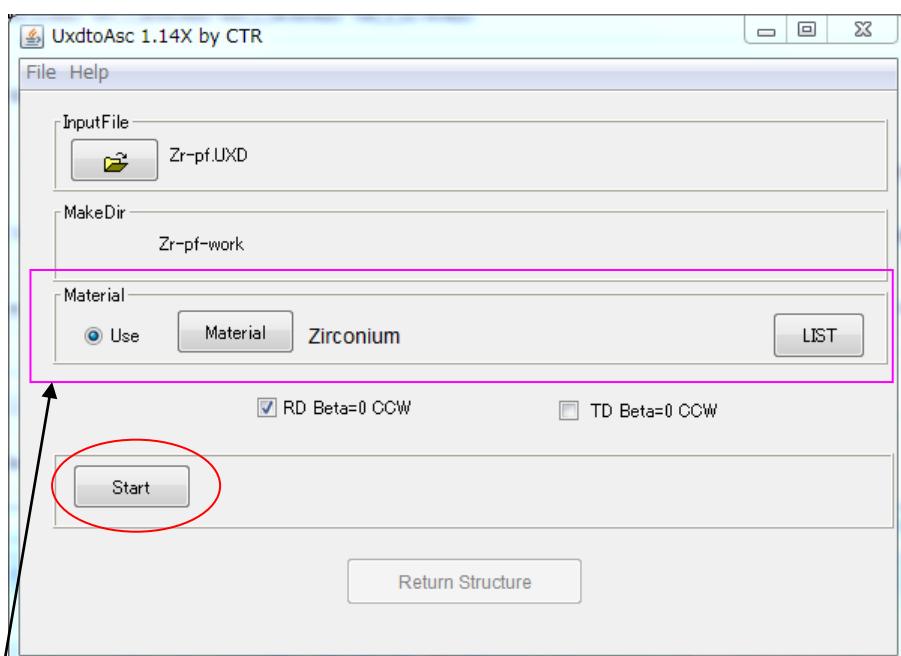
InitSet->Bruker PoleFigure を選択



Uxd ファイルを選択

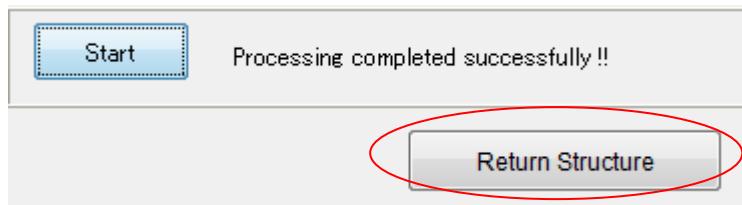


Material を Zirconium に変える。



Start で Asc ファイル変換開始

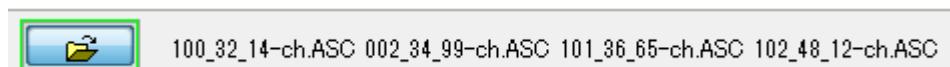
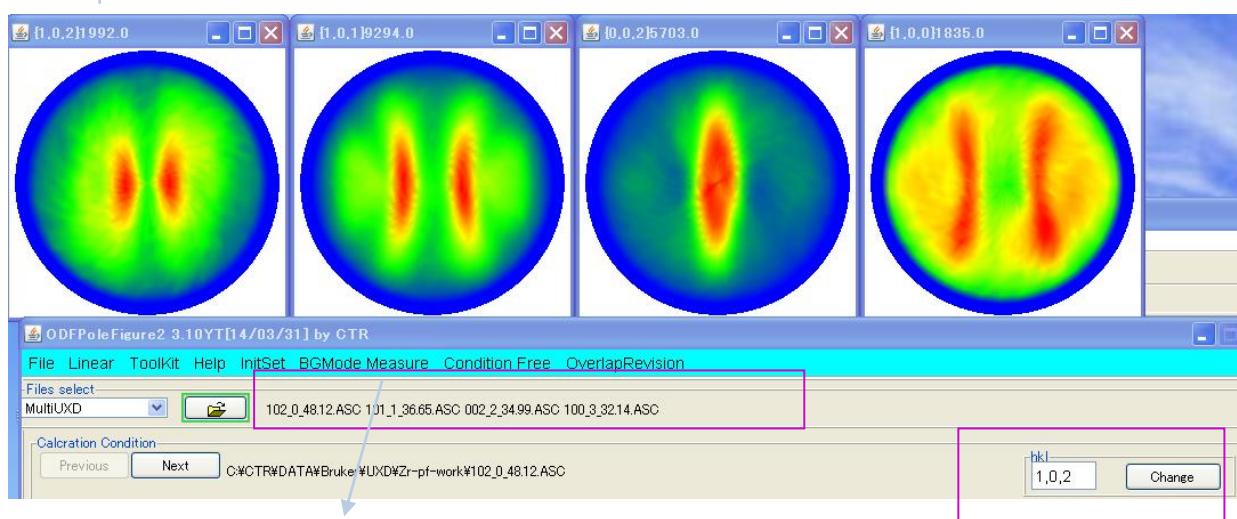
自動指数付けを行う



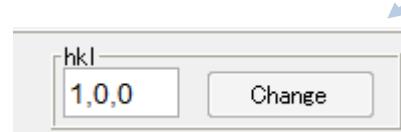
変換終了したら、ReturnStructure で終了



各極点図のタイトルに指標と最大強度を表示しています。指標の確認してください。指標が間違っている場合、前の画面で Material の指定を確認して下さい。



選択した Uxd ファイルから、複数の Asc ファイルが作成されています。ファイル名は指標 + 測定  $2\theta$  角度を表しています。



Asc ファイル内の指標が登録されている部分を表示しています。

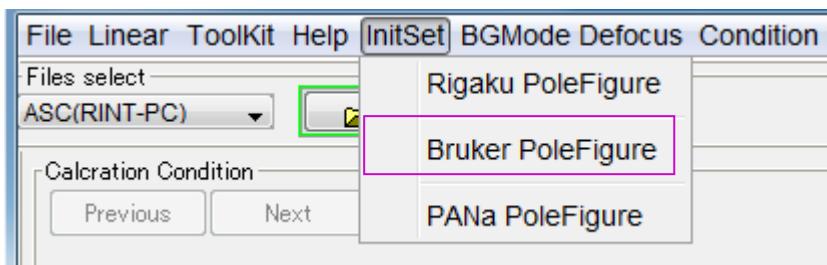
この部分は、defocus 多項式近似式のサブに使われる重要な情報です。

以降は Asc ファイルの操作と同じ

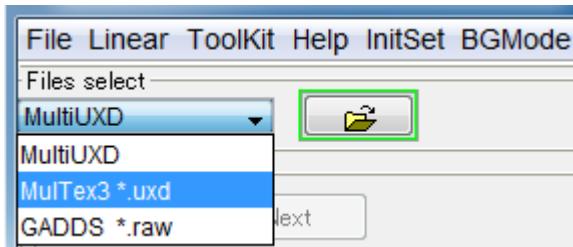
### 8. 3 Mu1TeX3データの場合（データ処理結果）(F-3 データ)

Mu1TeX3データの場合、ファイルは極点図毎に別々で、既にバックグラウンドは削除されている。

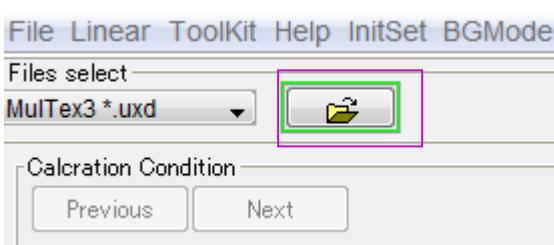
ファイルの選択は



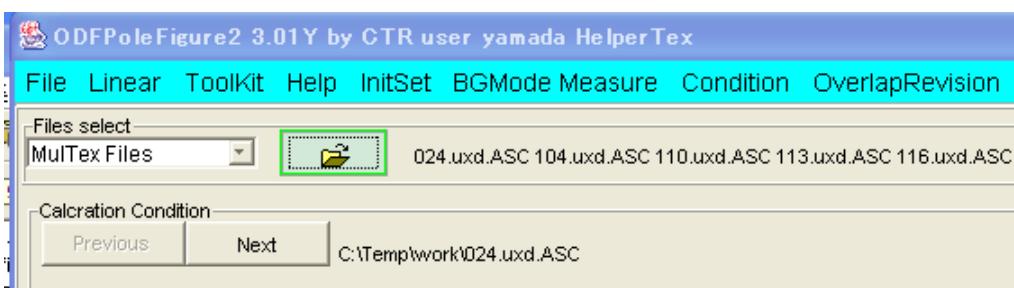
Bruker PoleFigure を選択



MulTex3 \*.uxd を選択



Uxd ファイルを複数選択



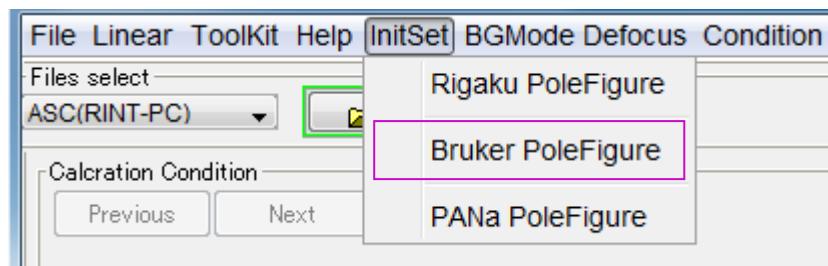
選択したファイルから ASC 変換したファイル名が表示、ASC ファイルは、選択した Uxd ディレクトリに work ディレクトリが作成され、

そのディレクトリに作成される。極点図で表示している反射指数はファイル名から取得している。

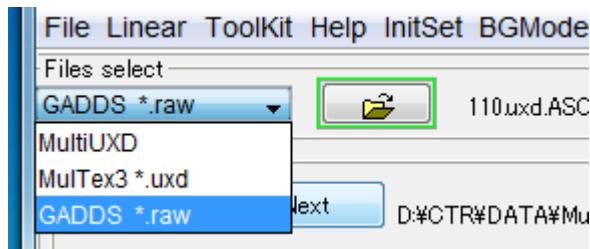


後は、ASC ファイル選択と同様の処理を行う。

#### 8. 4 GADDS pop LA (raw) の場合(F-4,F-5 データ)



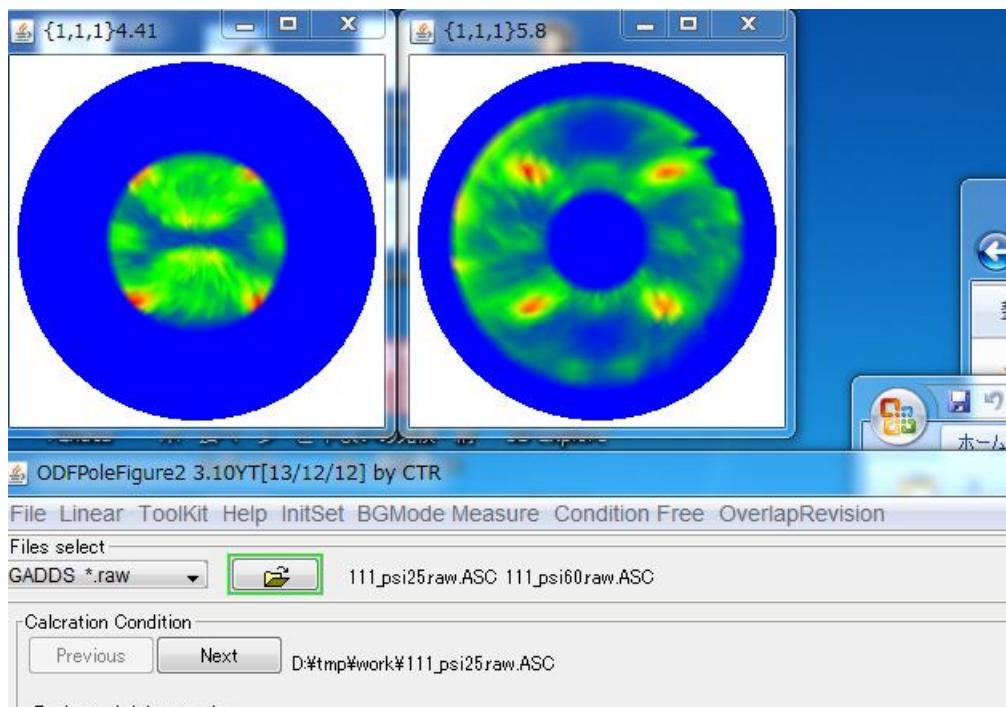
Bruker PoleFigure 選択



GADDS \*.raw を選択



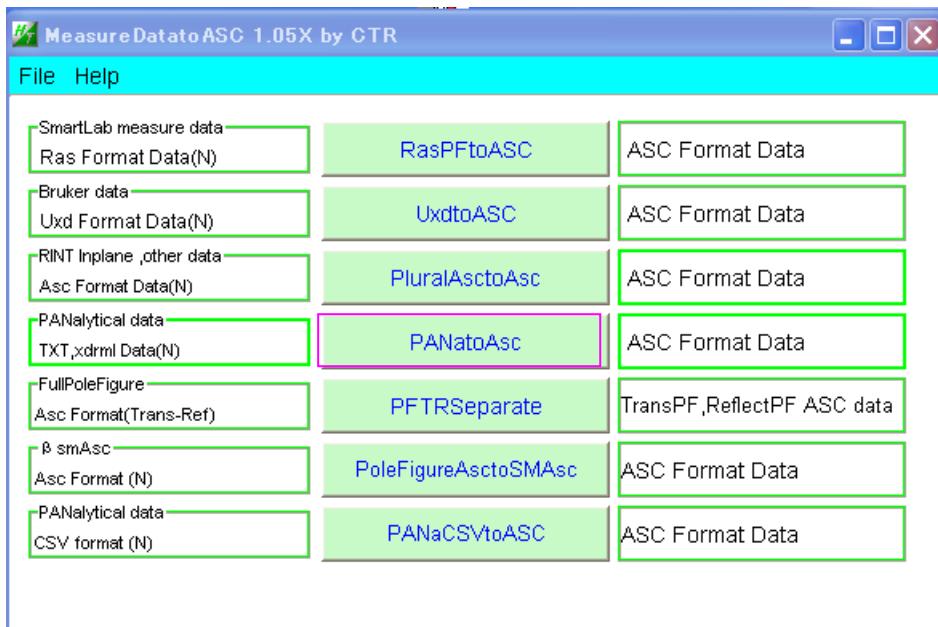
raw ファイルを選択



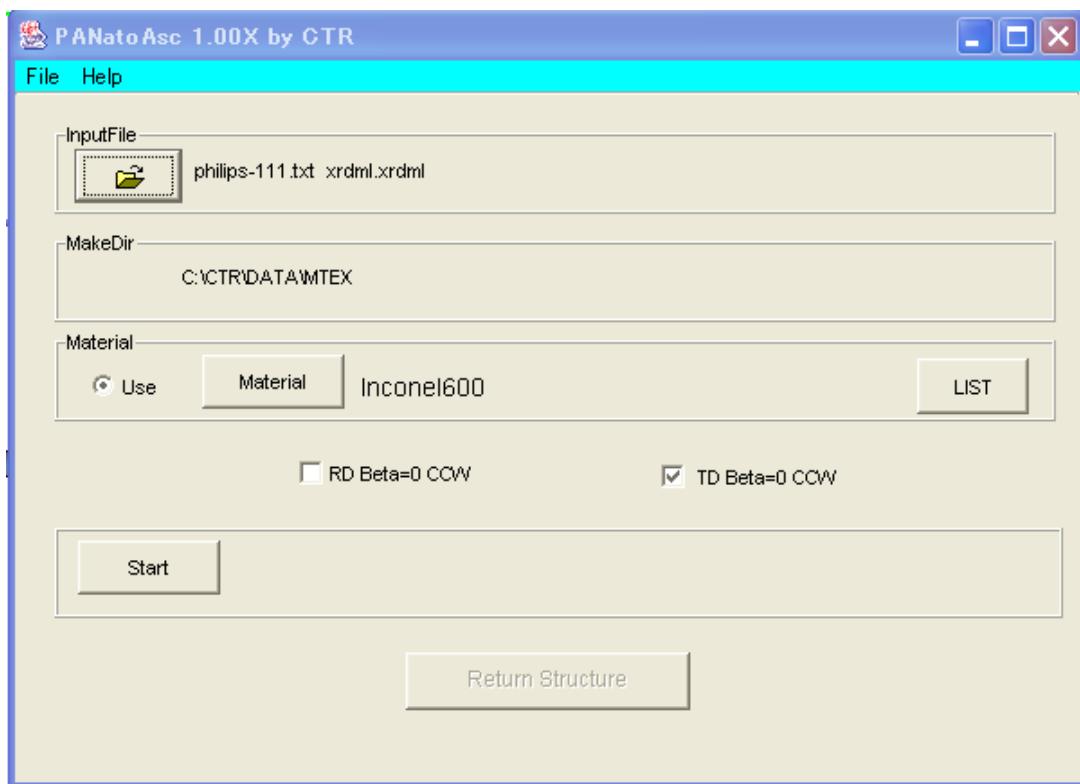
Raw データ選択で、work ディレクトリが作成され、work ディレクトリに ASC ファイルに変換されたファイルが作成される。  
以降、ASC ファイルを選択したモードで動作します。

## 9. PANalytical社データの読み込み(F-6,F-7データ)

### 9. 1 予め、txt、xrdmlファイルからASCフォーマットに変換する方法



PoleFigure2->ToolKits->MeasureDatatoASC->PANatoAsc



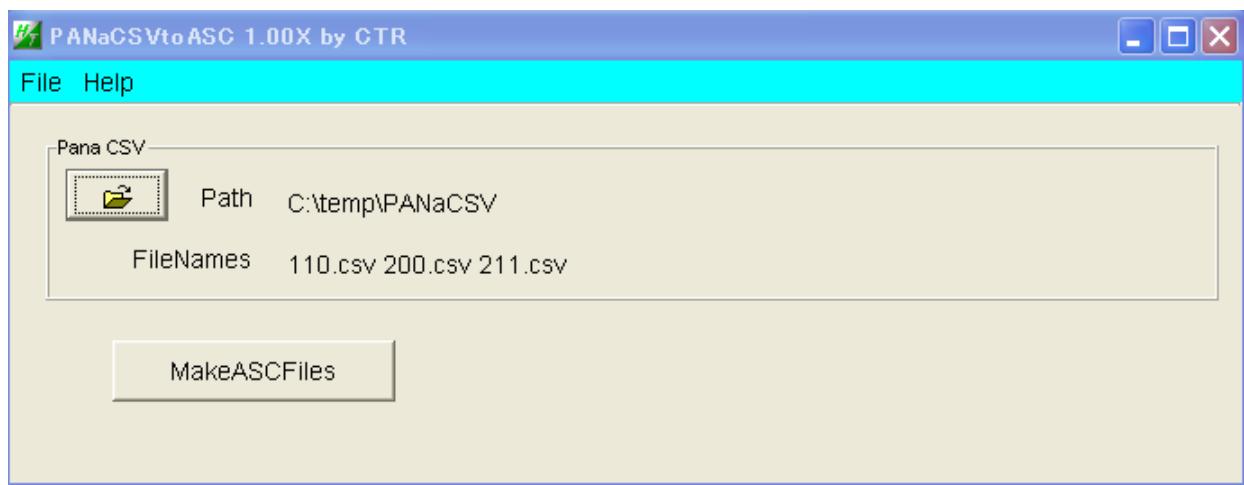
複数のTXT, xrdmlファイルを選択し、



StartでASCファイルを作成

## 9. 2 予め、CSVフォーマットからASCフォーマットに変換する方法

PoleFigure2->ToolKits->MeasureDatatoASC->PANaCSVtoASC

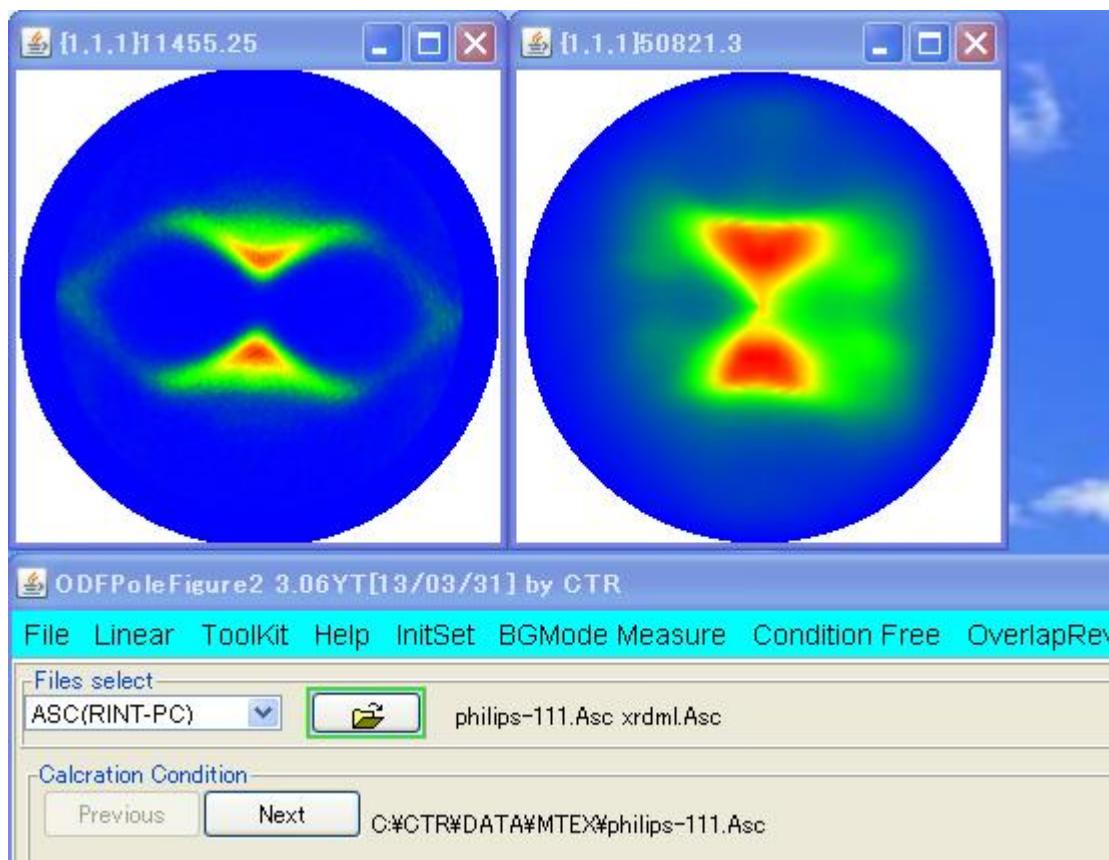


複数の CSV データを選択し、MakeASCFiles で ASC ファイルが作成される。

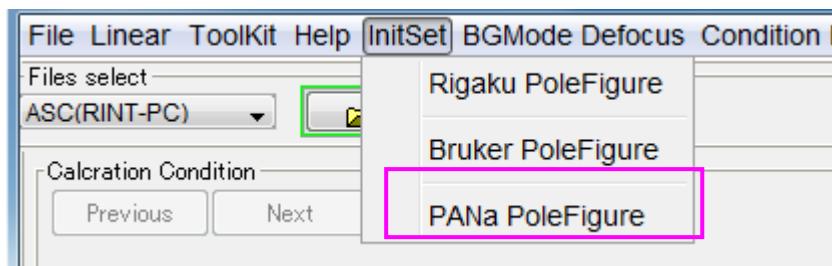
MakeASCFiles

It succeeded in the ASCII file preparation.

ODFPoleFigure2 ソフトウェアでASCとして読み込む

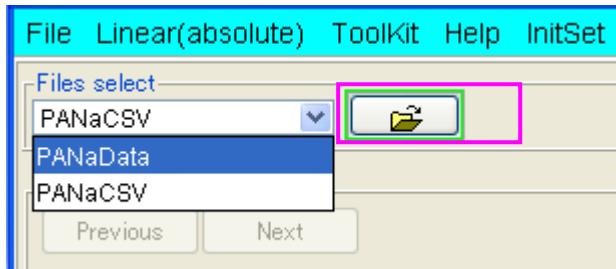


## 9. 3 直接読み込む

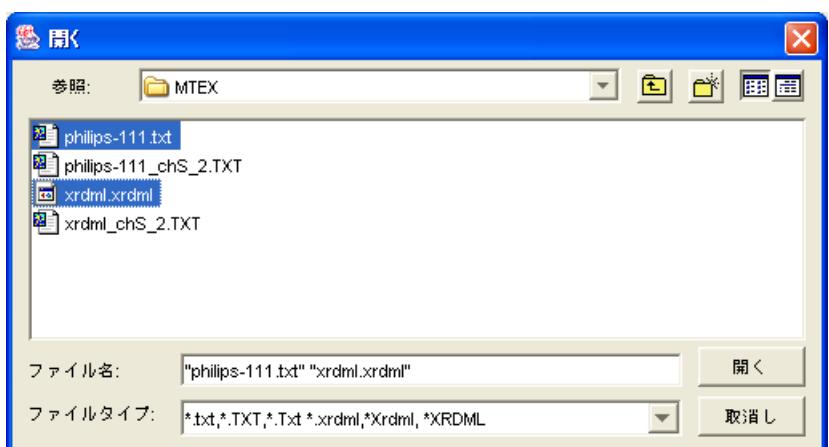
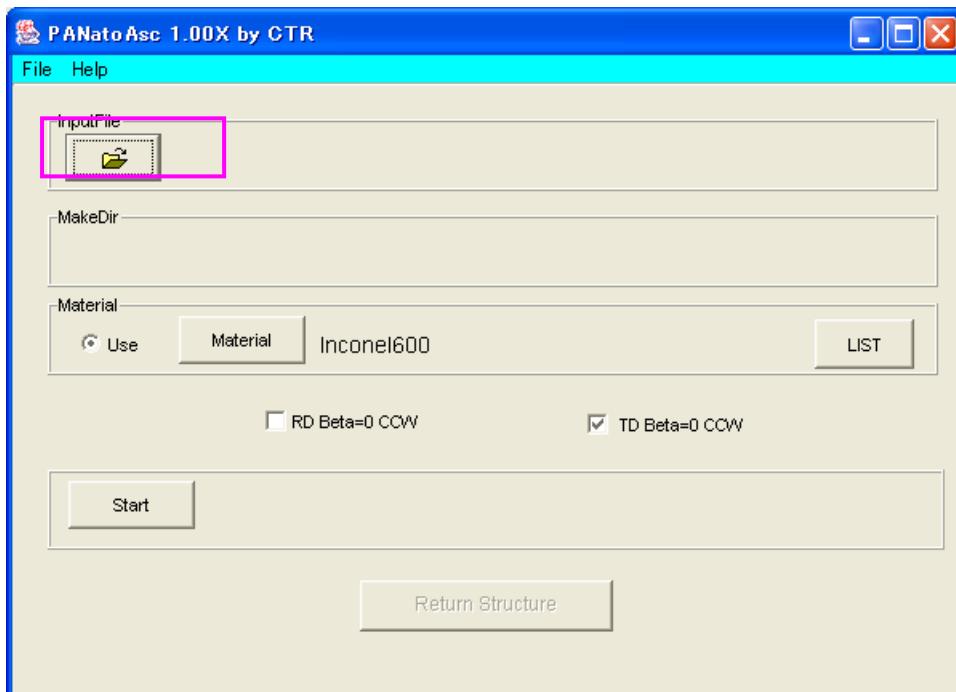


InitSet で PANA PoleFigure を選択

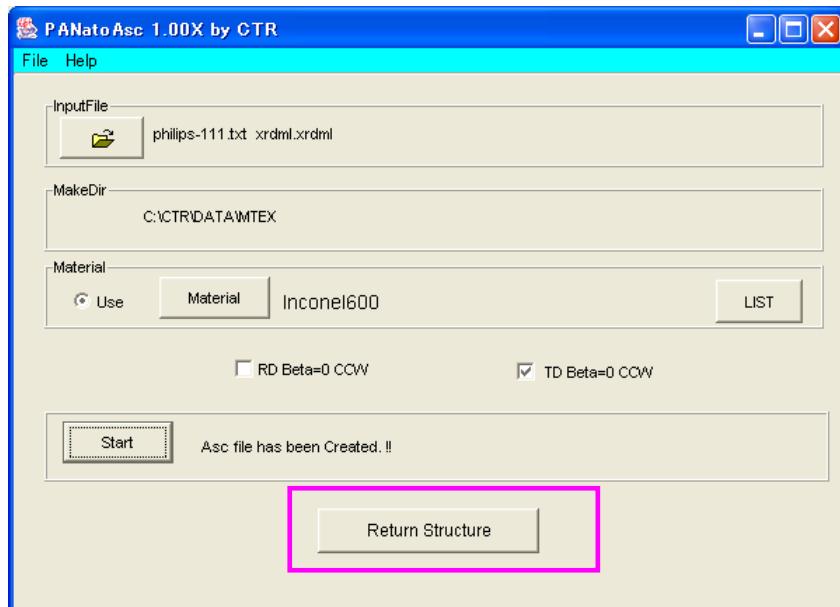
### 9. 3. 1 TXT や drml ファイルの場合



ファイルを選択 (PANatoAsc が立ち上がる)

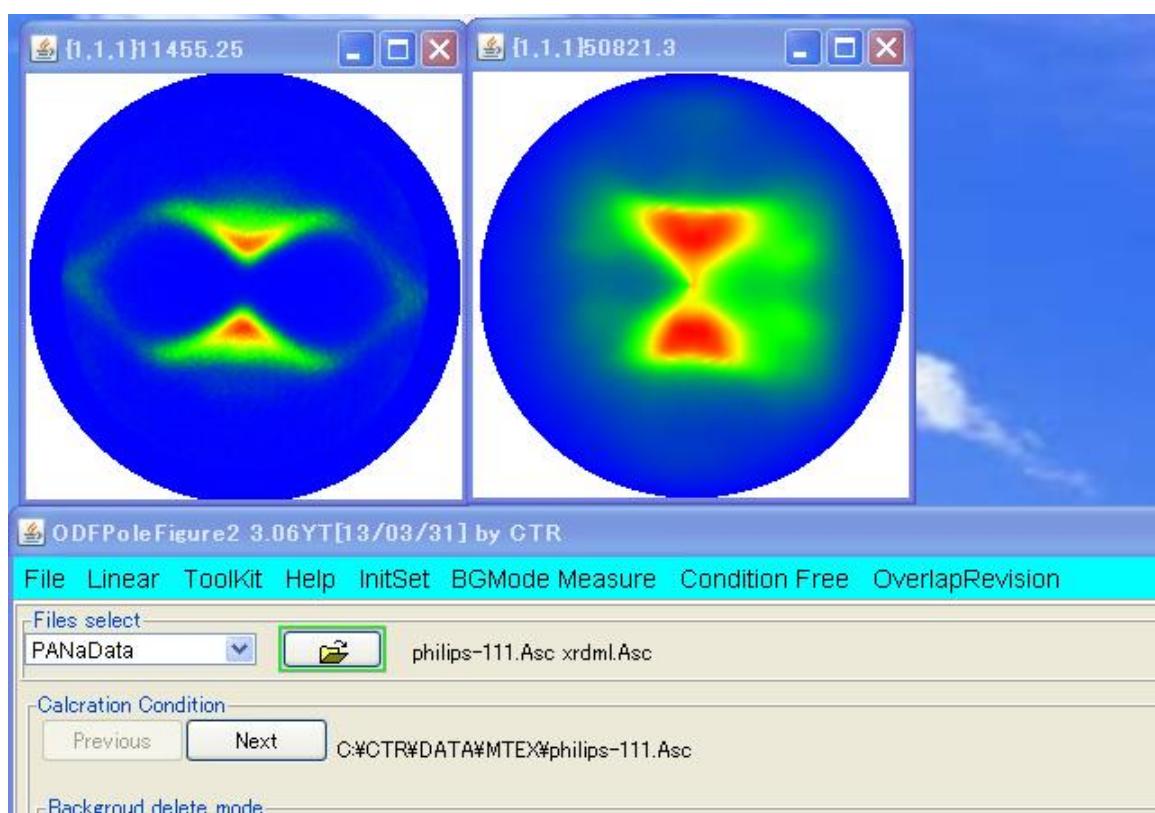


TXT と xrdml ファイルを選択

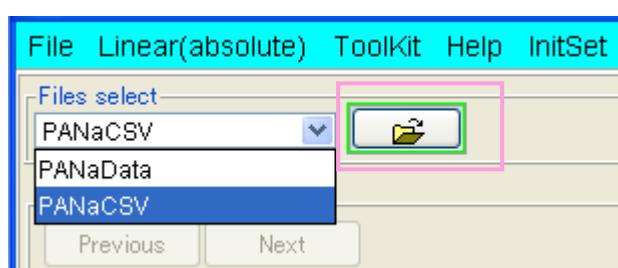


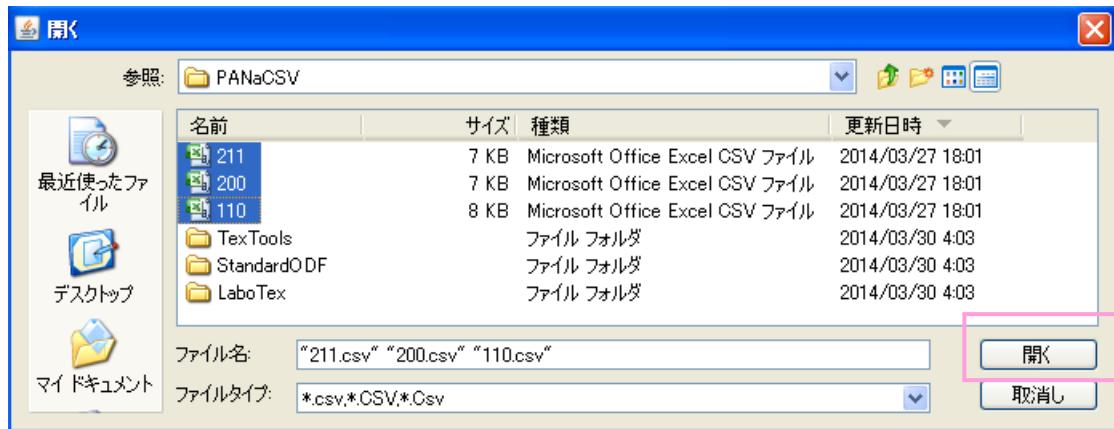
Start で Asc ファイルに変換、Return Structure

ASC ファイルが load される。

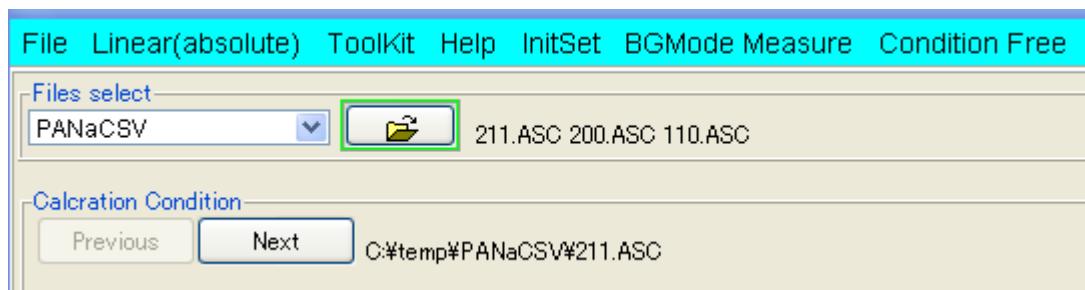


### 9. 3. 2 CSV ファイルの場合





複数の CSV データを選択

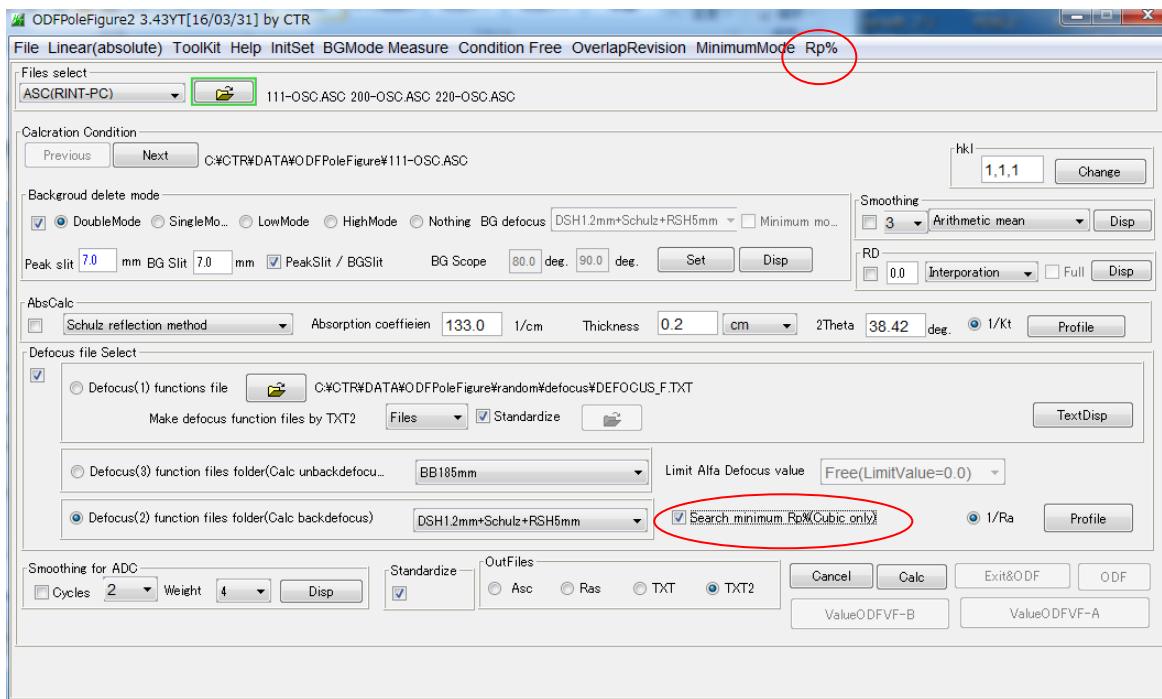


CSV から ASC に変換されたデータが load される。

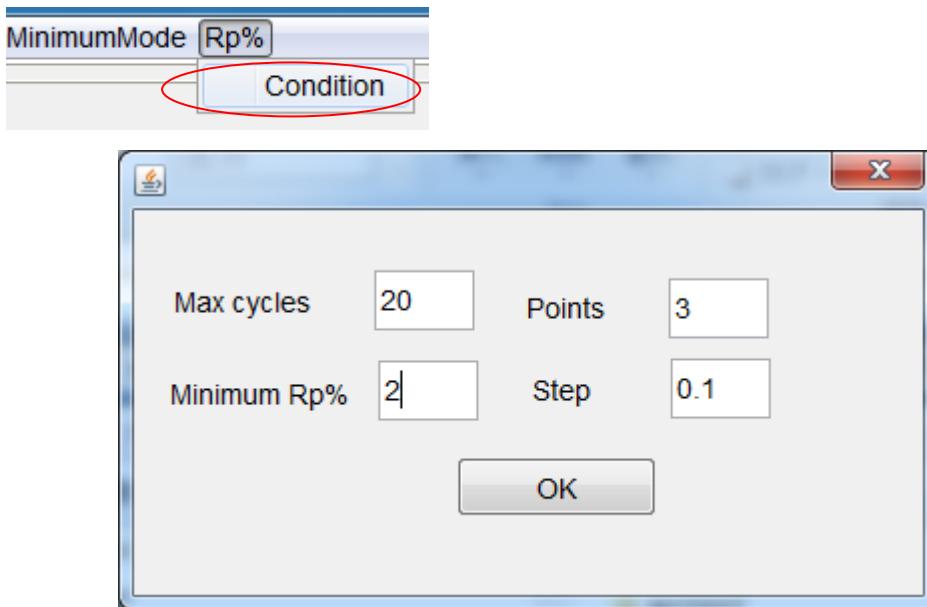
10. Rp%の最適化(Ver3.42以降のソフトウェアに検索ソフトウェアが必要、Cubic限定)

Schulzスリット光学系用です。

追加機能



10.1 Rp%検索条件



random試料から作成された Defocus 曲線を Tenckoff の式に Fitting し、比例定数を算出する。  
或いは、DefocusTABLE から再計算を行う。

各極点図に対し、各々、

簡易 ODF 計算から算出された Rp%曲線の極点図外周部の Points の積算から方向を決める。

外周部分が補正される方向に Step 分スリット幅を変更し再度 Rp%を計算する。

上記を Max cycle 繰り返す。

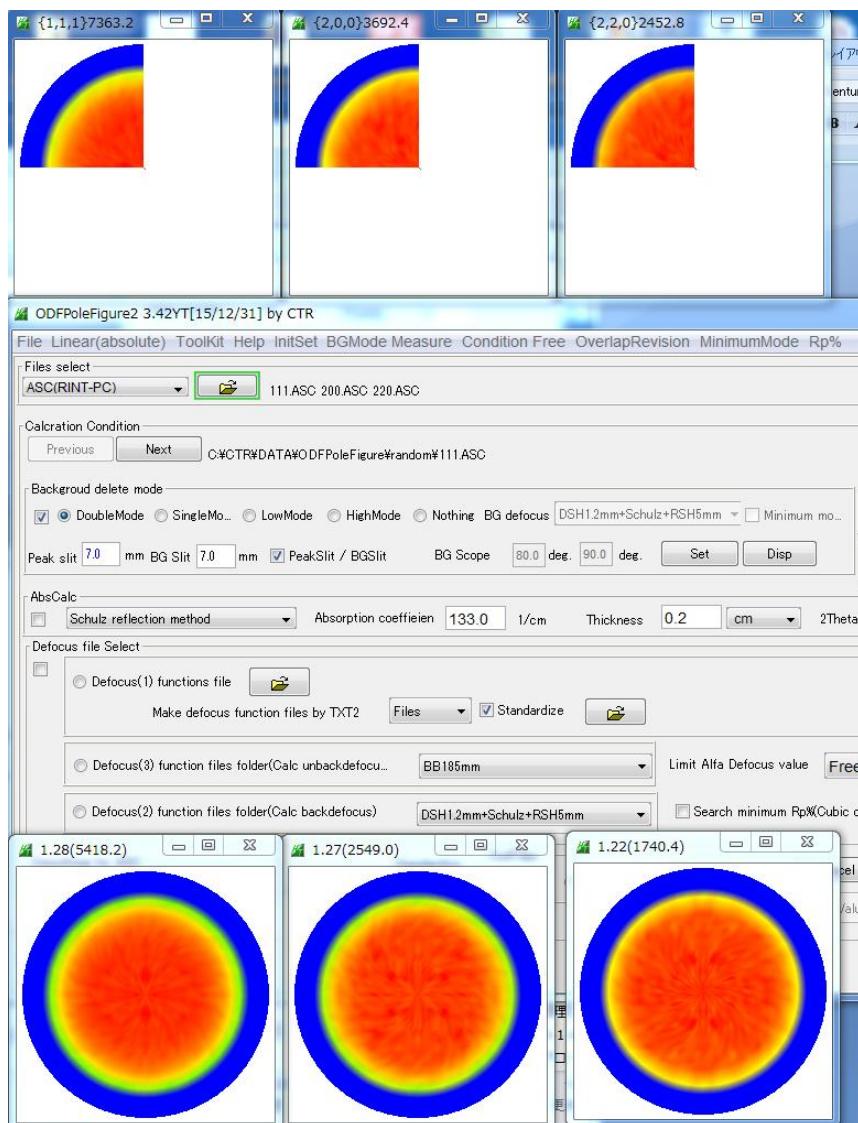
若し、Minimum Rp%になるか、Rp%が逆方向になれば、Minimum Rp%にかかわらず中止し、  
最少な Rp%とする。

上記データをパラメータ変更すれば、結果は異なります。

処理出来る極点データは測定間隔 5deg、全ての極点図範囲が同一であること

## 10.2 使用例 defocus データの作成

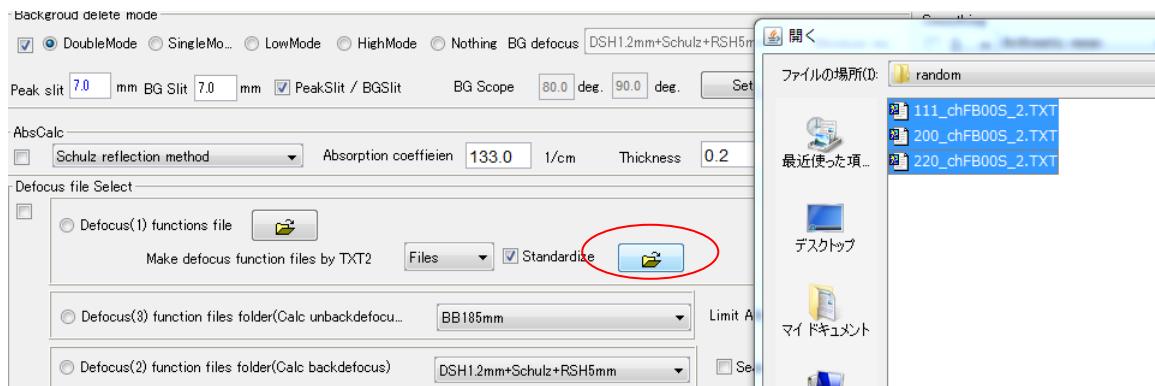
CTR¥DATA¥ODFPoleFigure¥random データを用いる



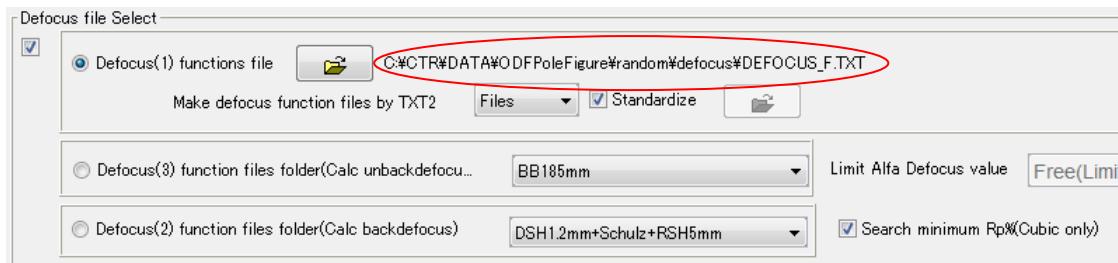
Defocus 補正無しで処理を行い。

|                   |                 |              |       |
|-------------------|-----------------|--------------|-------|
| 111.ASC           | 2014/03/13 7:40 | RINT2000アスター | 17 KB |
| 200.ASC           | 2014/03/13 7:40 | RINT2000アスター | 17 KB |
| 220.ASC           | 2014/03/13 7:40 | RINT2000アスター | 17 KB |
| 111_chFB00S_2.TXT | 2015/10/07 9:24 | テキスト文書       | 22 KB |
| 200_chFB00S_2.TXT | 2015/10/07 9:24 | テキスト文書       | 22 KB |
| 220_chFB00S_2.TXT | 2015/10/07 9:24 | テキスト文書       | 22 KB |
| SLITTHETAFILE     | 2015/10/07 9:24 | ファイル         | 1 KB  |

TXT2 データを選択

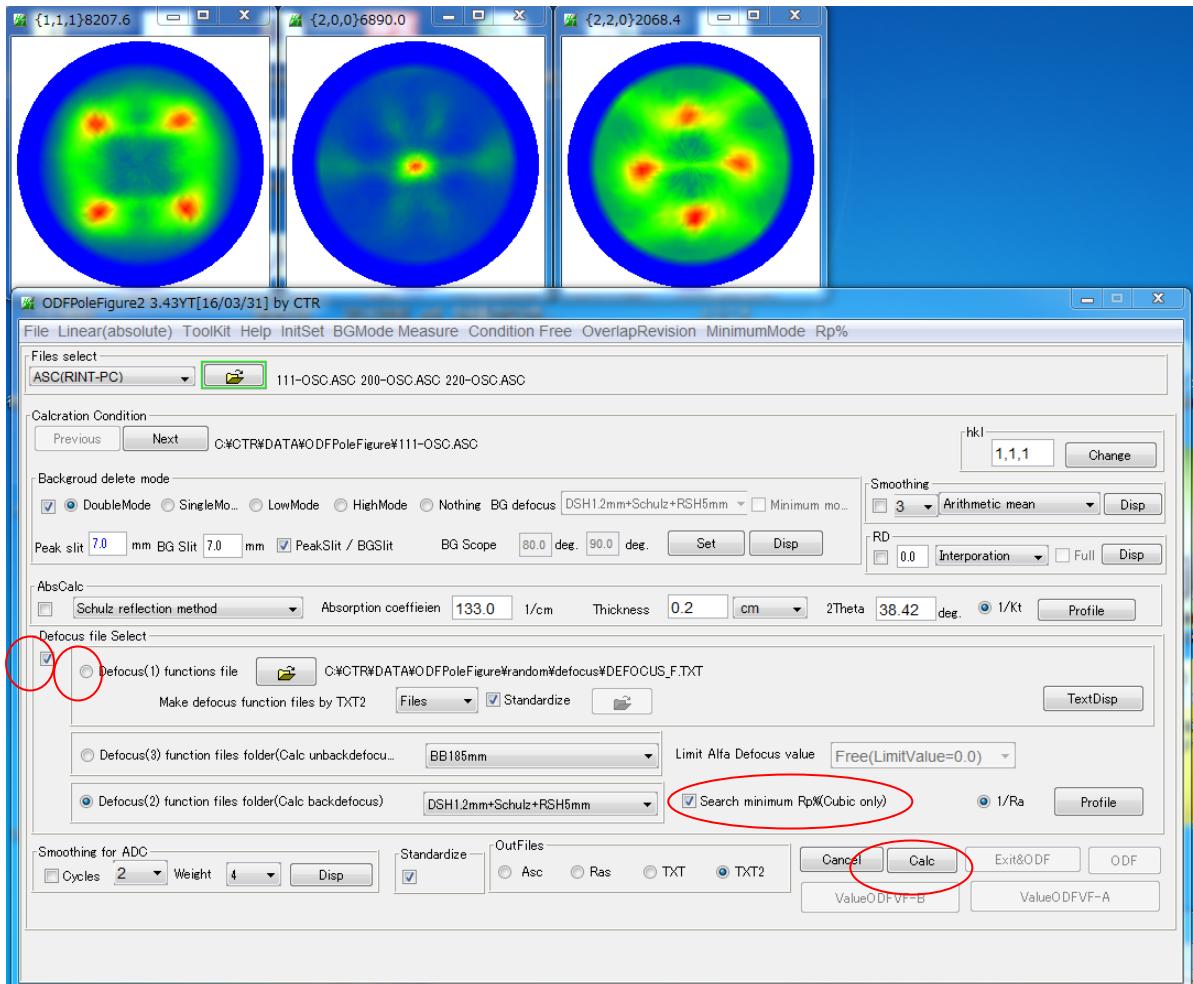


選択により DEFOCUS ファイルが作成され、登録される。

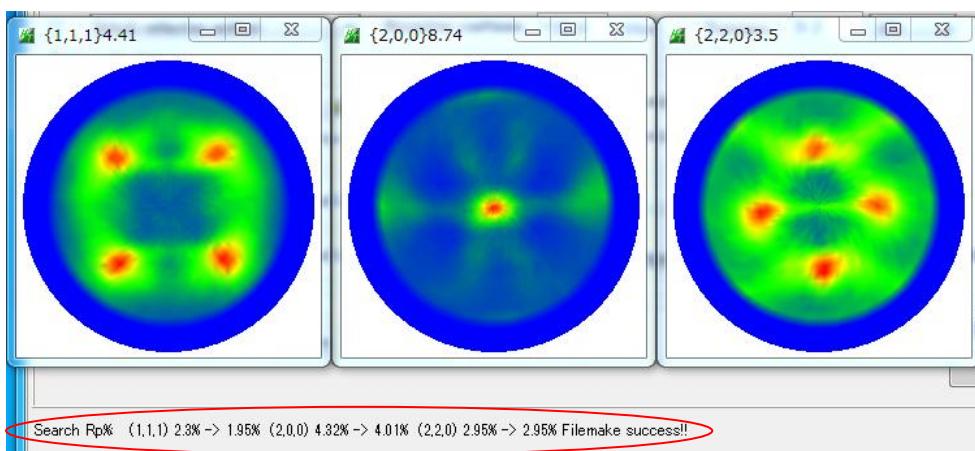


Defocus ファイルが登録されたので、配向データを選択

CTR¥DATA¥ODFPoleFigure データを選択



最適な Rp%検索モードに設定し、計算を行う。

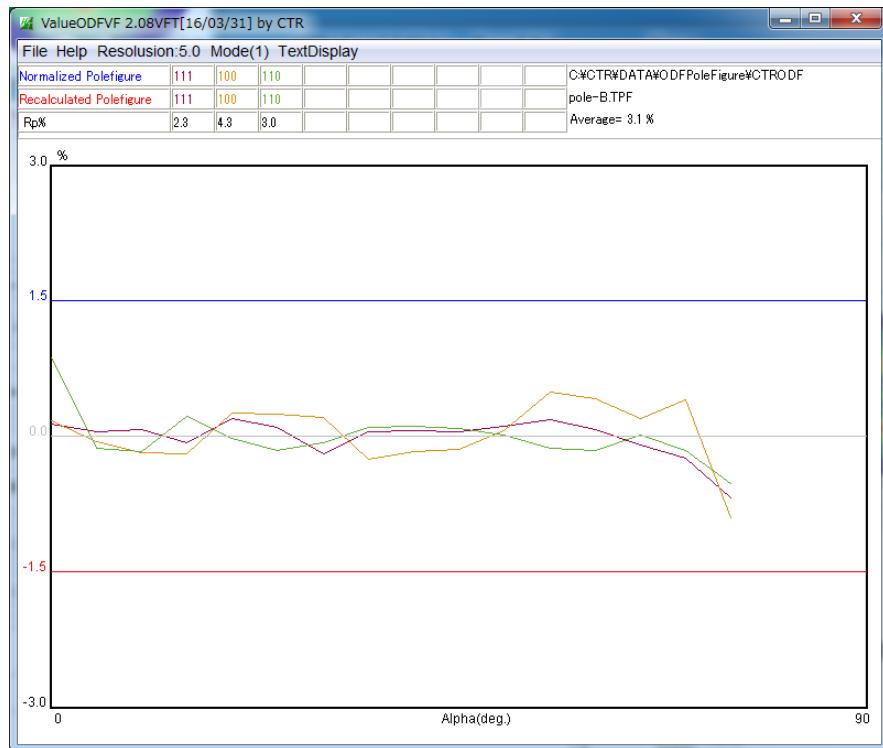


最適化された Rp%が表示される。

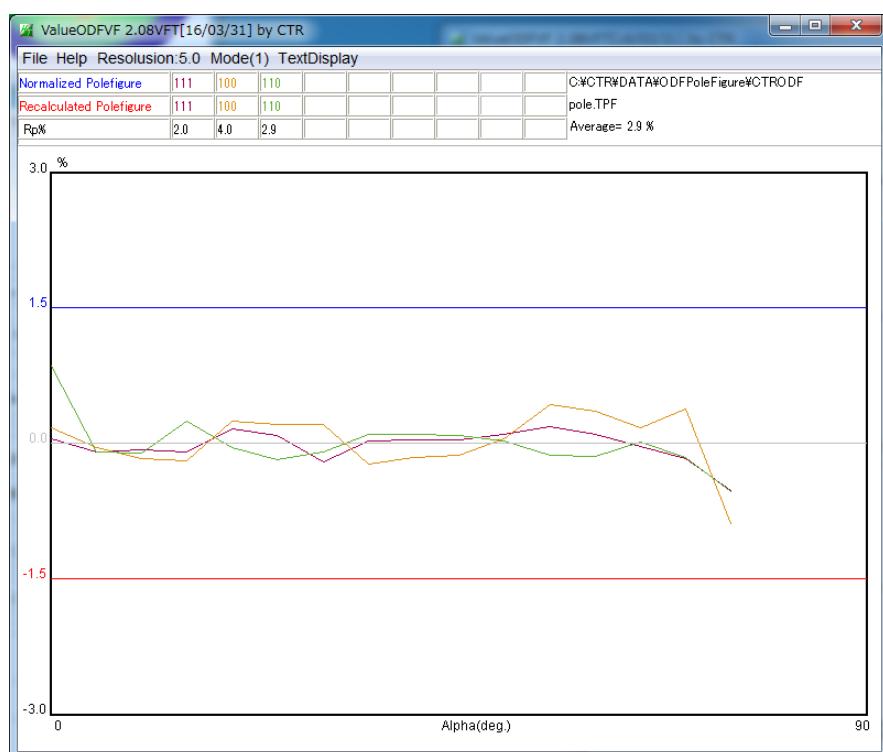
結果の確認は、ValueODVVF で行えます。



Before



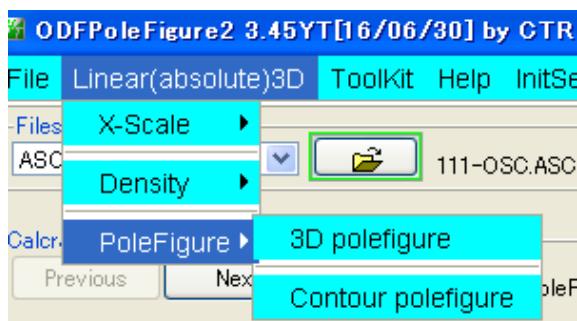
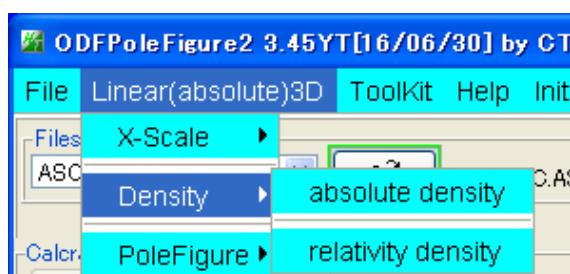
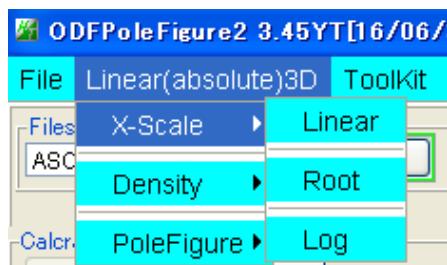
After



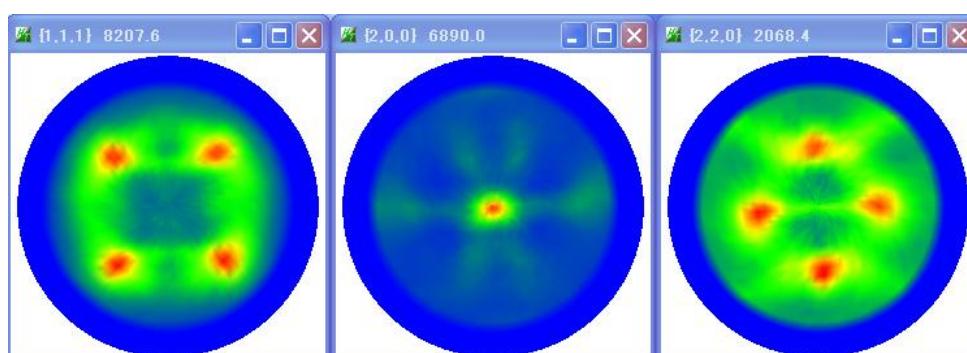
外部 defocus ファイルで最適化 Rp% 時、CTR\work\ODFPoleFigure2 に再計算 Defocus ファイルが作られます。

## 1.1. 極点図の3D表示、等高線表示

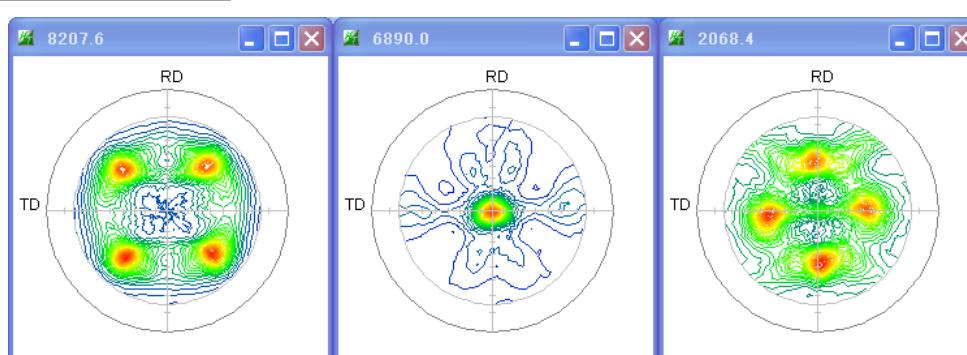
### 極点図表示切り替え部



Linear(absolute)3D



Linear(absolute)Contour



## 付録 (データフォーマット)

### F - 1 Rigaku社ASCデータ

---

```

*TYPE          = Raw
*CLASS         = Polefig
*SAMPLE        =
*COMMENT       = 反射α=15.000
*FNAME         = 111-7mm.raw
*DATE          = 22-Feb-11 08:22

*GROUP_COUNT   = 1
*GONIO         = RINT2000 広角コニオメータ, 185
*ATTACHMENT    = 極点用多目的試料台
*ASC           = 0, 0, 0.000000, 0.000000
*FILTER        = K βフィルタ
*SLIT_NAME     = 0, 発散スリット
*SLIT_NAME     = 1, 散乱スリット
*SLIT_NAME     = 2, 受光スリット
*SLIT_NAME     = 3, 発散縦制限スリット
*COUNTER        = シンチレーションガラス, 0
*POS_FORMAT    = 0
*SCAN_AXIS     = beta
*MEAS_MODE     = Continuous Scanning
*TARGET         = 29
*XRAY_CHAR     = K-ALPHA1
*WAVE_LENGTH1  = 1.54056
*WAVE_LENGTH2  = 1.5444
*THICKNESS     = 0, 0.000000
*MU             = 0, 0.000000
*SCAN_MODE     = beta
*SPEED_DIM     = sec./step
*XUNIT          = deg.
*YUNIT          = counts
*SCALE_MODE    = 1
*REP_COUNT     = 1
*SE_COUNT       = 0
*STD_MATERIAL  = Unknown, Unknown, 0.000000, 0.000000, 0.000000, 0.000000, 0.000000
*LATT_CONS     = 0, Cubic, Unknown, 0.000000, 0.000000, 0.000000, 0.000000, 0.000000
*SEC_COUNT     = 16
*TSPEC_SIZE    = 0
*EXTRA_SIZE    = 0
*PF_MEASUR     = Coaxial circle scan

*SPEED_DIM     = sec./step
*XUNIT          = deg.
*YUNIT          = counts
*SCALE_MODE    = 1
*REP_COUNT     = 1
*SE_COUNT       = 0
*STD_MATERIAL  = Unknown, Unknown, 0.000000, 0.000000, 0.000000, 0.000000, 0.000000
*LATT_CONS     = 0, Cubic, Unknown, 0.000000, 0.000000, 0.000000, 0.000000, 0.000000
*SEC_COUNT     = 16
*TSPEC_SIZE    = 0
*EXTRA_SIZE    = 0
*PF_MEASUR     = Coaxial circle scan
*PF_DATATYPE   = Integral intensity
*PF_METHOD     = 0, Unknown
*PF_METHOD     = 1, Schulz reflection method
*PF_PCOUNT    = 0, 0
*PF_PCOUNT    = 1, 16
*PF_ASTART     = 0, 0.000000
*PF_ASTART     = 1, 15
*PF_ASTOP      = 0, 50
*PF_ASTOP      = 1, 90
*PF_ASTEP      = 0, 5
*PF_ASTEP      = 1, 5
*PF_ASPEED     = 0, 0.000000
*PF_ASPEED     = 1, 0.000000
*PF_GAMMA      = 0, 20
*PF_GAMMA      = 1, 20
*PF_2THANGLE   = 0, 17.5
*PF_2THANGLE   = 1, 38.46
*PF_2THSTART   = 0, 0.000000
*PF_2THSTART   = 1, 0.000000
*PF_2THSTOP    = 0, 0.000000
*PF_2THSTOP    = 1, 0.000000
*PF_2THSTEP    = 0, 0.000000
*PF_2THSTEP    = 1, 0.000000
*PF_ASPEED     = 0, 0.000000
*PF_ASPEED     = 1, 0.000000
*MEMO          =

```

## F-2 Bruker社 UXDデータ

```

FILEVERSION=2↓
SAMPLE='Zr'↓
SITE='Japan'↓
USER='Administrator'↓
GONIOMETER_CODE=3348↓
; D8 Theta/2Theta; Special↓
SAMPLE_CHANGER_CODE=0↓
ATTACHMENTS_CODE=0↓
GONIOMETER_RADIUS=300.000000↓
FIXED_DIVSLIT=0.000000↓
FIXED_SAMPLESLIT=0.000000↓
SOLLER_SLITS='N'↓
FIXED_DETSLIT=0.000000↓
MONOCHROMATOR=0↓
None↓
THIN_FILM='N'↓
BETA_FILTER='N'↓
FIXED_ANTISLIT=1.000000↓
ANALYZER_CODE=0↓
None↓
DATEMEASURED='07-Oct-2008 13:17:26'↓
WL_UNIT='A'↓
WL=1.540600↓
WL2=1.544390↓
WL3=1.392220↓
WL_RATIO=0.500000↓
ANODE='Cu'↓
; (Data for Range number 1)↓
DRIVE='PHI'↓
STEPTIME=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↓
DETECTORSPLIT='out'↓
AUX1=0.000000↓
AUX2=0.000000↓
AUX3=0.000000↓
TIMESTARTED=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↓     483      465      516      532      498      522      551
    500      589↓     530↓     547      537      554      523      513      529
    540      589↓     530↓     547      537      554      523      513      529
    562      547      537      554      523      513      566      529      523
    555      530↓     546      547      537      554      523      513      529
    521      546      502      505      491      521      566      529      529
    543      544↓     544↓     550      557      565      558      561      617
    548      550      557      565      558      561      617      602
    555      577↓     558      577      530      602      627      581      574
    532      558      530      586↓     543      505      548      501      518
    574      586↓     530      577      543      505      548      501      529
    557      577      543      577      543      505      548      501      518
    525      503↓     503↓     502      502      505      548      501      529
    502      502↓     502↓     502      502      505      548      501      529
; (Data for Range number 2)↓

```

F-3 Brucker社、Uxdデータ(データ処理結果)

```

LSAMPLE= MultTex Area to *.uxd: 111.uxd↓
WL=0=↓
WL=1=↓
WL=2=↓
; (Data for Range number 1)↓
DRIVE='PHI'↓
STEP SIZE=5.000000↓
START=0.000000↓
2THETA=43.431953↓
THETA=21.715976↓
KHI=0.000000↓
PHI=0.000000↓
COUNTS↓
  8241    8241    8241    8241    8241    8241    8241    8241↓
  8241    8241    8241    8241    8241    8241    8241    8241↓
  8241    8241    8241    8241    8241    8241    8241    8241↓
  8241    8241    8241    8241    8241    8241    8241    8241↓
  8241    8241    8241    8241    8241    8241    8241    8241↓
  8241    8241    8241    8241    8241    8241    8241    8241↓
  8241    8241    8241    8241    8241    8241    8241    8241↓
  8241    8241    8241    8241    8241    8241    8241    8241↓
  8241    8241    8241    8241    8241    8241    8241    8241↓
; (Data for Range number 2)↓
DRIVE='PHI'↓
STEP SIZE=5.000000↓
START=0.000000↓
2THETA=43.431953↓
THETA=21.715976↓
KHI=5.000000↓
PHI=0.000000↓
COUNTS↓
  7689    7502    7876    7414    7984    7496    7764    7625↓
  7998    7388    7512    7461    7853    7842    7591    7670↓
  7761    7546    7927    8359    8391    8420    8110    7922↓
  7604    6980    7143    7354    7553    7392    7327    7092↓
  7184    7204    7361    7459    7801    7758    8424    8229↓
  8977    8577    9616    8058    9761    8442    9771    8248↓
  9333    9292    9518    9776    9506    9631    9333    9119↓
  9320    9236    9244    9120    9210    8836    8833    8831↓
  9029    8592    8727    8239    8310    8105    7663    7695↓
; (Data for Range number 3)↓
DRIVE='PHI'↓
STEP SIZE=5.000000↓
START=0.000000↓
2THETA=43.431953↓
THETA=21.715976↓
KHI=10.000000↓
PHI=0.000000↓
COUNTS↓
  8054    8216    7189    7239    7453    8359    6686    8312↓
  8207    8509    8359    10330   9806    10322   10280   10734↓
  11166   10653   10903   10876   10771   10221   10369   10243↓
  10345   8894    9462    9483    9304    8821    8777    7556↓
  7469    6735    7575    7763    8170    8455    9249    8885↓
  9476    10168   11077   11919   11735   13064   12765   13096↓
  13150   13145   13319   13402   13401   13374   13265   13726↓
  13783   13291   13099   13098   13174   12863   12637   12187↓
  12035   11587   11211   10269   9744    9356    8553    8064↓
; (Data for Range number 4)↓
DRIVE='PHI'↓
STEP SIZE=5.000000↓
START=0.000000↓
2THETA=43.431953↓
THETA=21.715976↓
KHI=15.000000↓
PHI=0.000000↓
COUNTS↓
  8285    7958    7752    8144    8931    9065    9812    11311↓
  11651   12940   13843   13650   14221   13748   14304   13516↓
  14414   14065   14537   13890   13913   13692   13886   13672↓
  13489   13134   12981   12520   11461   10304   9728    8640↓
  8149    6250    8376    7945    8147    8246    10028   10499↓
  12232   12810   14499   15018   15046   15464   15275   16325↓
  15744   15162   15309   14705   14749   14744   14518    14626↓
  14970   14884   15032   15289   15434   15504   15458   15115↓
  14710   14015   13102   12014   10848   9526    8592    7982↓

```

F-4 Brucker社 Multex3 popLA (raw)

測定されていない領域に0、あるいは1が登録されている。

F-5 Brucker社 GADDS popLA (raw) データ

測定されていない領域に0、あるいは1が登録されている。

↓  
[EOF]

F-6 PANalytical社 TXTデータ

|                           |                                                    |        |       |       |       |       |       |       |       |        |       |       |  |  |
|---------------------------|----------------------------------------------------|--------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|--------|-------|-------|--|--|
| File:                     | X:\David\Freiberg\NIR700-111\XpertData\n70111c.rw1 |        |       |       |       |       |       |       |       |        |       |       |  |  |
| Sample:                   | DG-NiWR-700-C/1h                                   |        |       |       |       |       |       |       |       |        |       |       |  |  |
| Created:                  | 21-Jul-2006 21:30                                  |        |       |       |       |       |       |       |       |        |       |       |  |  |
| Type:                     | Raw pole figure                                    |        |       |       |       |       |       |       |       |        |       |       |  |  |
| Origin:                   | Exported by X'Pert SW; hkl:111                     |        |       |       |       |       |       |       |       |        |       |       |  |  |
| Goniometer radius (mm):   | 320                                                |        |       |       |       |       |       |       |       |        |       |       |  |  |
| Sample stage:             | Other                                              |        |       |       |       |       |       |       |       |        |       |       |  |  |
| Receiving slit (mm):      | 1.00                                               |        |       |       |       |       |       |       |       |        |       |       |  |  |
| Divergence slit (mm):     | 0.00                                               |        |       |       |       |       |       |       |       |        |       |       |  |  |
| Distance focus mask (mm): | 145                                                |        |       |       |       |       |       |       |       |        |       |       |  |  |
| X-ray tube anode:         | Unknown                                            |        |       |       |       |       |       |       |       |        |       |       |  |  |
| Tube focus:               | Generator (kV):                                    |        |       |       |       |       |       |       |       |        |       |       |  |  |
| Generator (kV):           | 40                                                 |        |       |       |       |       |       |       |       |        |       |       |  |  |
| Generator (mA):           | 40                                                 |        |       |       |       |       |       |       |       |        |       |       |  |  |
| Wavelength (Å):           | 1.5406                                             |        |       |       |       |       |       |       |       |        |       |       |  |  |
| Psi:                      | Start                                              | End    | Step  |       |       |       |       |       |       |        |       |       |  |  |
|                           | 0.00                                               | 75.00  | 2.50  |       |       |       |       |       |       |        |       |       |  |  |
| Phi:                      | 0.00                                               | 360.00 | 2.50  |       |       |       |       |       |       |        |       |       |  |  |
| hkl:                      | 111                                                |        |       |       |       |       |       |       |       |        |       |       |  |  |
| 2Theta (-):               | 44.0830                                            |        |       |       |       |       |       |       |       |        |       |       |  |  |
| Time per step (s):        | 0.80                                               |        |       |       |       |       |       |       |       |        |       |       |  |  |
| Sample oscillation (mm):  | 0                                                  |        |       |       |       |       |       |       |       |        |       |       |  |  |
| Phi\Psi                   | 0.00                                               | 2.50   | 5.00  | 7.50  | 10.00 | 12.50 | 15.00 | 17.50 | 20.00 | 22.50  | 25.00 | 27.50 |  |  |
| 1.25                      | 2.45                                               | 2.45   | 7.20  | 3.61  | 5.00  | 17.11 | 24.20 | 51.20 | 96.80 | 90.31  | 28.80 | 20.00 |  |  |
| 3.75                      | 5.00                                               | 1.25   | 7.20  | 8.45  | 7.20  | 16.20 | 40.61 | 72.20 | 63.01 | 110.45 | 63.01 | 17.11 |  |  |
| 6.25                      | 3.61                                               | 6.05   | 2.45  | 6.05  | 9.80  | 21.01 | 54.45 | 63.01 | 63.01 | 112.81 | 76.05 | 24.20 |  |  |
| 8.75                      | 6.05                                               | 6.05   | 6.05  | 7.20  | 13.61 | 20.00 | 39.20 | 45.00 | 80.00 | 110.45 | 48.05 | 30.01 |  |  |
| 11.25                     | 6.05                                               | 5.00   | 6.05  | 8.45  | 11.25 | 12.80 | 22.05 | 78.01 | 92.45 | 99.01  | 63.01 | 35.11 |  |  |
| 13.75                     | 3.61                                               | 5.00   | 5.00  | 1.25  | 12.80 | 17.11 | 27.61 | 46.51 | 92.45 | 84.05  | 57.80 | 30.01 |  |  |
| 16.25                     | 5.00                                               | 2.45   | 1.25  | 7.20  | 13.61 | 16.20 | 32.51 | 64.80 | 74.11 | 82.01  | 57.80 | 31.25 |  |  |
| 18.75                     | 3.61                                               | 3.61   | 3.61  | 6.05  | 13.61 | 25.31 | 48.05 | 56.11 | 63.01 | 59.51  | 66.61 | 51.20 |  |  |
| 21.25                     | 1.25                                               | 9.80   | 2.45  | 13.61 | 15.31 | 21.01 | 42.05 | 54.45 | 49.61 | 70.31  | 36.45 | 42.05 |  |  |
| 23.75                     | 6.05                                               | 5.00   | 2.45  | 2.45  | 12.80 | 25.31 | 37.81 | 49.61 | 40.61 | 52.81  | 40.61 | 33.80 |  |  |
| 26.25                     | 2.45                                               | 2.45   | 5.00  | 2.45  | 6.05  | 15.31 | 32.51 | 43.51 | 36.45 | 28.80  | 54.45 | 28.80 |  |  |
| 28.75                     | 5.00                                               | 2.45   | 3.61  | 8.45  | 6.05  | 12.80 | 49.61 | 66.61 | 54.45 | 43.51  | 35.11 | 27.61 |  |  |
| 31.25                     | 5.00                                               | 2.45   | 3.61  | 7.20  | 8.45  | 8.45  | 33.80 | 45.00 | 43.51 | 78.01  | 40.61 | 35.11 |  |  |
| 33.75                     | 5.00                                               | 3.61   | 3.61  | 3.61  | 9.80  | 20.00 | 36.45 | 66.61 | 36.45 | 36.45  | 42.05 | 61.25 |  |  |
| 36.25                     | 1.25                                               | 5.00   | 6.05  | 7.20  | 11.25 | 13.61 | 31.25 | 57.80 | 63.01 | 88.20  | 40.61 | 35.11 |  |  |
| 38.75                     | 3.61                                               | 3.61   | 11.25 | 11.25 | 8.45  | 17.11 | 39.20 | 63.01 | 82.01 | 66.61  | 48.05 | 36.45 |  |  |

## F-7 PANalytical xdm1ファイル

```
<?xml version="1.0" encoding="UTF-8"?>
<xrdMeasurements xmlns="http://www.xrdml.com/XRDMeasurement/1.2" xmlns:xsi="http://www.w3.org/2001/XMLSchema-instance" xsi:schemaLocation="http://www.xrdml.com/XRDMeasurement/1.2 http://www.xrdml.com/XRDMeasurement/1.2/XRDMeasurement.xsd" status="Completed">
    <comment>
        <entry>Configuration=MRD SW - All Optics, Owner=User-1, Creation date=9/5/2005 1:49:22 PM</entry>
        <entry>Goniometer=PW3050/65 (Theta/2Theta); Minimum step size 2 Theta:0.001; Minimum step size Omega:0.001</entry>
        <entry>Sample stage=MRD Cradle; Minimum step size Phi:0.01; Minimum step size Psi:0.01; Minimum step size X:0.01; Minimum step size Y:0.01; Minimum step size Z:0.001</entry>
        <entry>Diffractometer system=XPERT-PRO</entry>
        <entry>Measurement program=Cu-111 Standard Tex-Pol-C 3degree, Owner=User-1, Creation date=9/16/2005 2:29:49 PM</entry>
    </comment>
    <sample type="To be analyzed">
        <id>Copper</id>
        <name>Cu Texture Standard</name>
        <preparedBy>PANalytical BV</preparedBy>
    </sample>
    <xrdMeasurement measurementType="Texture pole figure" status="Completed" measurementStepAxis="Psi">
        <comment>
            <entry/>
        </comment>
        <usedWavelength intended="K-Alpha 1">
            <kAlpha1 unit="Angstrom">1.5405980</kAlpha1>
            <kAlpha2 unit="Angstrom">1.5444260</kAlpha2>
            <kBeta unit="Angstrom">1.3922500</kBeta>
            <ratioKAlpha2KAlpha1>0.5000</ratioKAlpha2KAlpha1>
        </usedWavelength>
        <incidentBeamPath>
            <radius unit="mm">320.00</radius>
            <xRayTube id="1010048" name="PW3373/10 Cu LFF DK147424">
                <tension unit="kV">45</tension>
                <current unit="mA">40</current>
                <anodeMaterial>Cu</anodeMaterial>
                <focus type="Line">
                    <length unit="mm">12.0</length>
                    <width unit="mm">0.4</width>
                    <takeOffAngle unit="deg">6.0</takeOffAngle>
                </focus>
            </xRayTube>
        </incidentBeamPath>
    </xrdMeasurement>

```

## F-8 PANalytical CSVファイル