

PANalytical社極点データからODF解析

2014年05月18日



HelperTex Office

山田 義行

odftex@ybb.ne.jp

概要

PANalytical社xrdmlデータからODF解析する場合、バックグランド除去とDefocus補正が必要になる。入手したxrdmlファイルでは、極点図本体であるピーク極点図とバックグランドデータは別のファイルとして提供された。

極点測定では、入射X線に対し、試料を徐々に傾けながら、試料を回転し測定を行う。

傾ける軸を α 軸（或いは χ 、 ϕ ）、回転軸を β 軸として、

ピーク極点図では、 α 軸の範囲は85度、 β 軸の範囲は360度測定されている。(73点)

しかし、バックグランドでは、 β 軸は1点測定であった。

このような事から、xrdmlファイルをASCデータに変換し、ピーク極点図とバックグランドの結合を行えば、従来处理が利用でいる。この処理方法を説明する。

試料名とファイル名

試料の区別はホルダ名、指数をファイル名とする。

例えば、アルミニウムA材料とアルミニウムrandom材料が合った場合、

ホルダ名はAl-AとAl-randomとし、

ピーク極点図は、111,200,220,バックグランドは111BG1,200BG1,220BG1

バックグランドをピーク位置の両側で測定する場合111BG2,200BG2,220BG2を追加

Al-A/

111.xrdml

200.xrdml

220.xrdml

111BG1.xrdml

200BG1.xrdml

220.BG1.xrdml

Al-random

111.xrdml

200.xrdml

220.xrdml

111BG1.xrdml

200BG1.xrdml

220.BG1.xrdml

若し、ファイル名に材料名を追加する場合、指数の後に材料名追加する。

111Al-A.xrdml

200Al-A.xrdml

220Al-A.xrdml

111Al-ABG1.xrdml

200Al-ABG1.xrdml

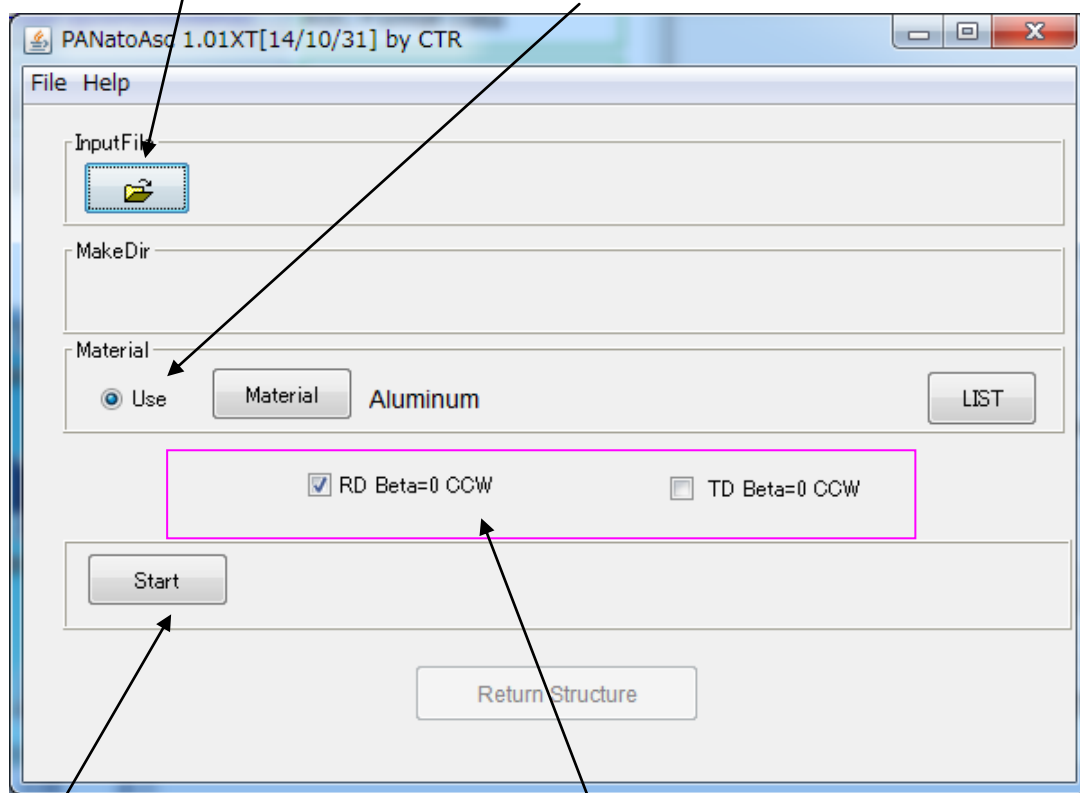
220Al-ABG1.xrdml

xrdmlファイルからASCデータ作成

PANatoAscソフトウェアにより変換

複数のxrdmlファイルを選択

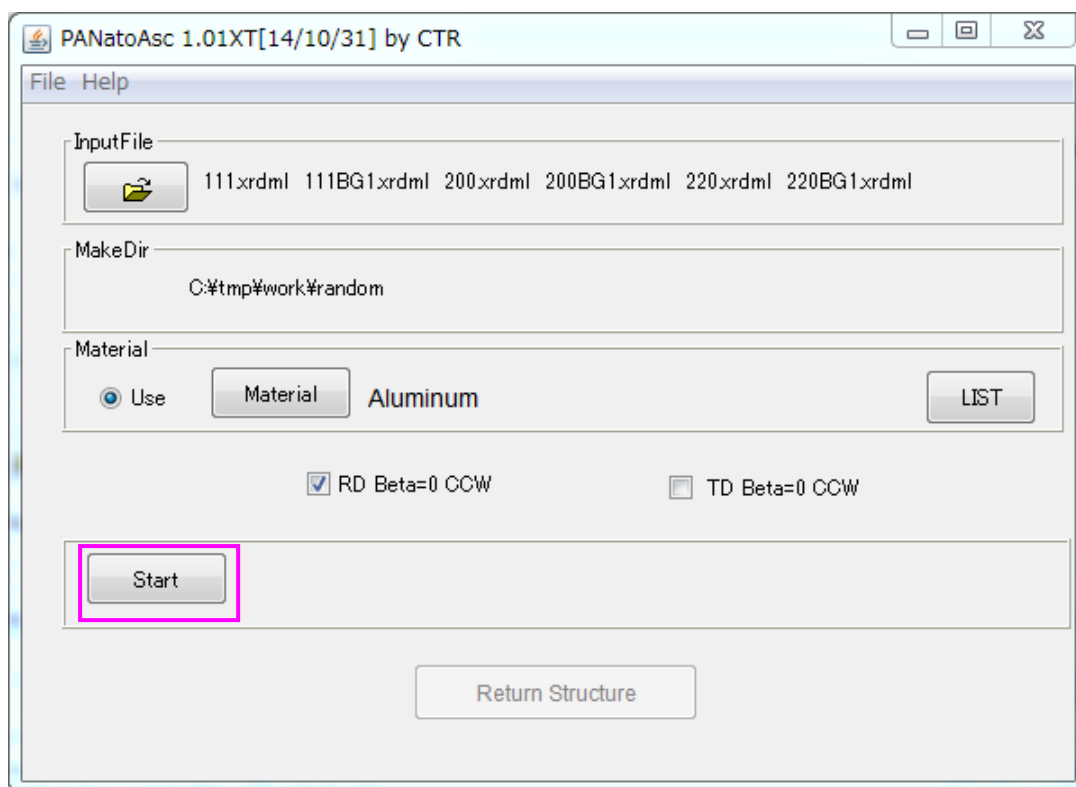
ファイルに指数等登録がされていない場合選択



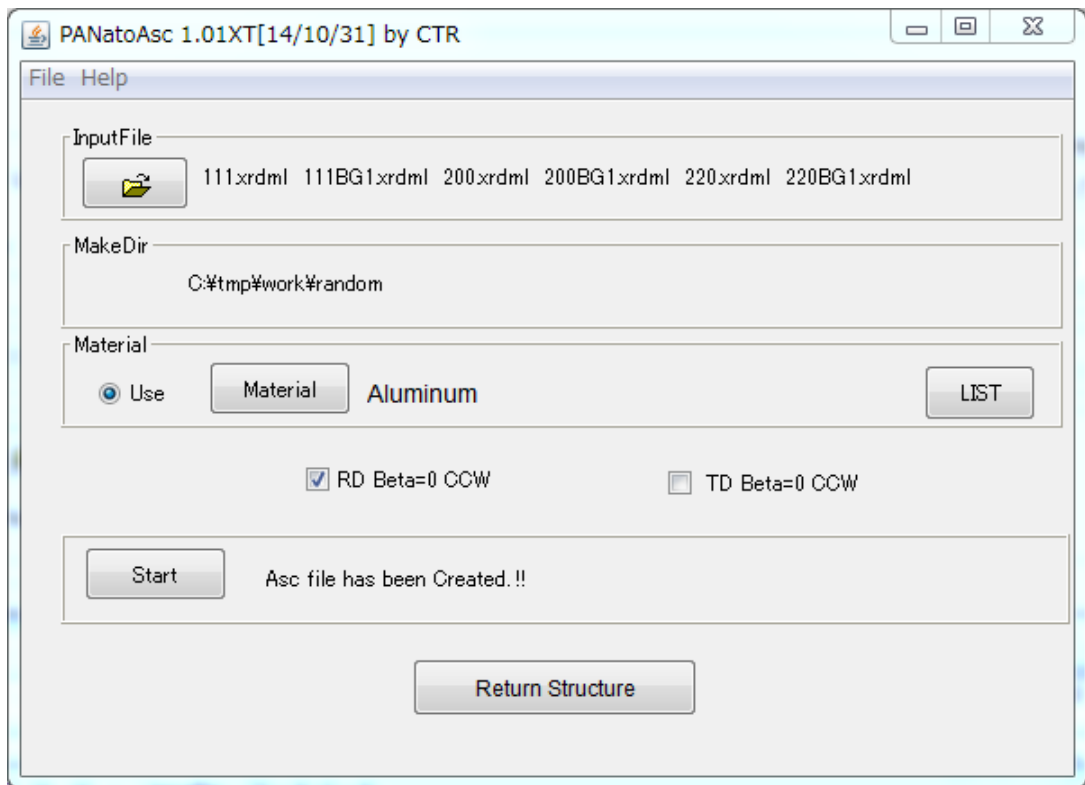
一括変換

極点図により、RD方向を選択

randomデータ



変換を開始する。



C:\tmp\work\random¥111.xrddl
 C:\tmp\work\random¥111BG1.xrddl
 C:\tmp\work\random¥200.xrddl
 C:\tmp\work\random¥200BG1.xrddl
 C:\tmp\work\random¥220.xrddl
 C:\tmp\work\random¥220BG1.xrddl

入力データ

C:\tmp\work\random¥111.Asc
 C:\tmp\work\random¥111BG1.Asc
 C:\tmp\work\random¥200.Asc
 C:\tmp\work\random¥200BG1.Asc
 C:\tmp\work\random¥220.Asc
 C:\tmp\work\random¥220BG1.Asc

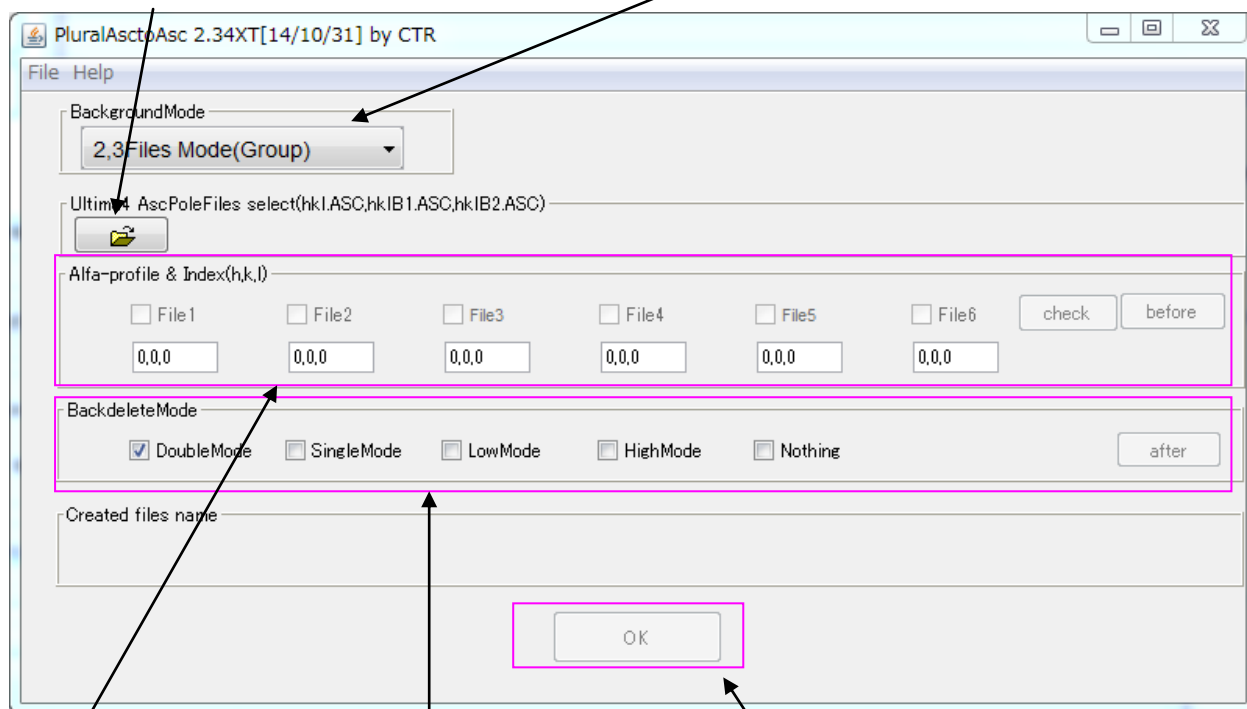
変換データ

ピーク極点データとバックグラウンドデータの結合

PluralAsctoAscソフトウェアで結合する。

複数のASCデータを選択

変換モード選択

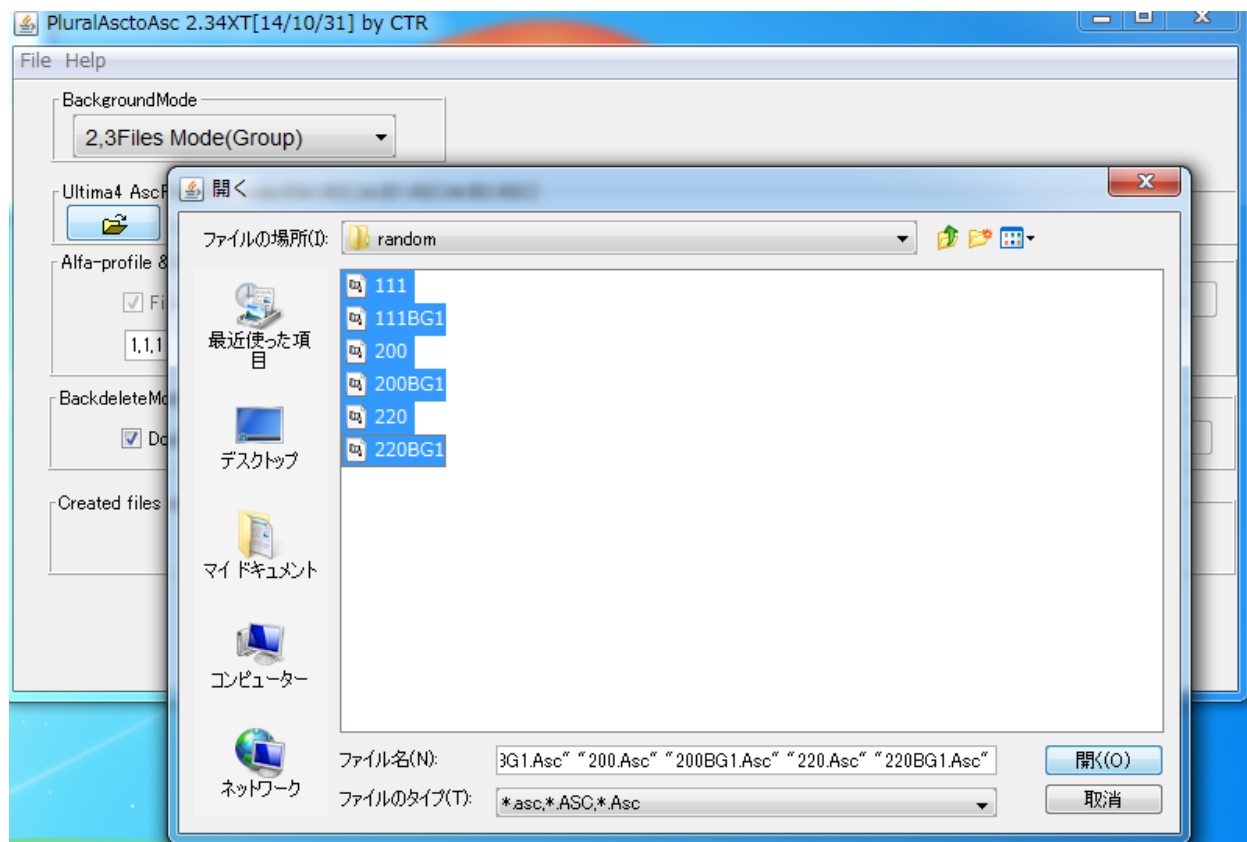


結合状態の確認

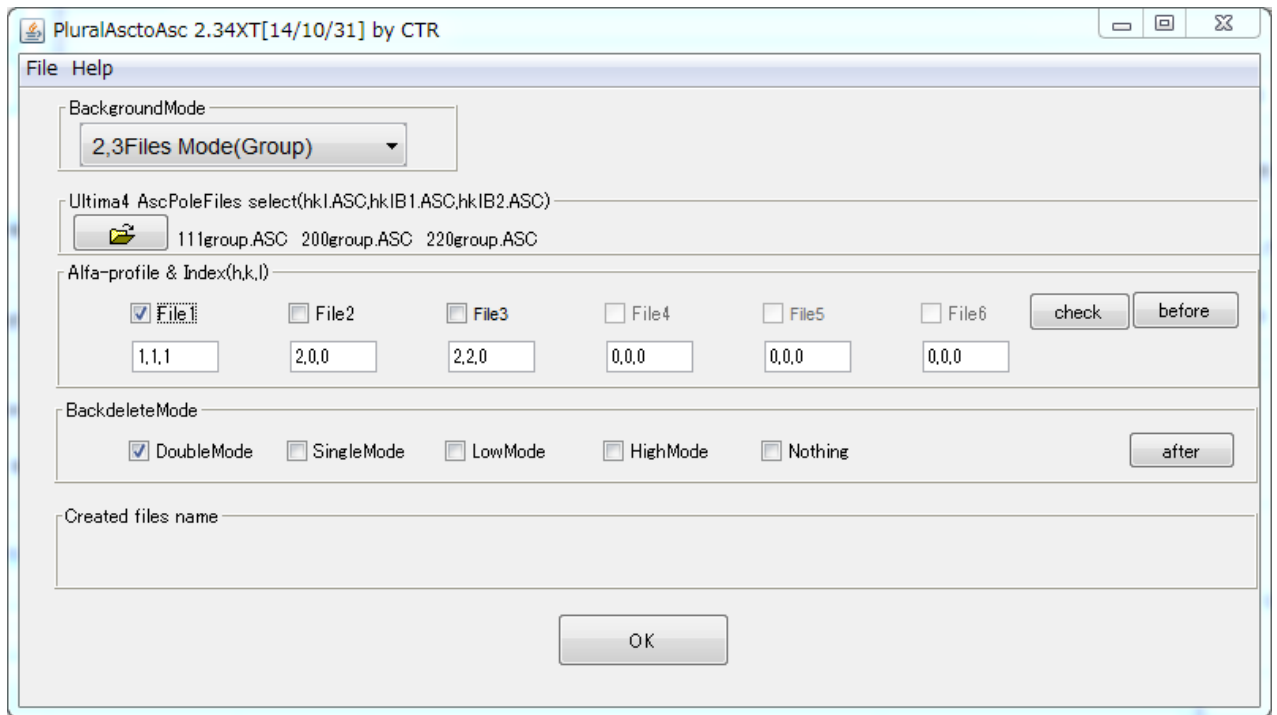
バックグラウンド除去選択

実行

ASCファイルを選択



ピーク極点図とバックグラウンドが結合される。



```

C:\tmp\work\random¥111.Asc
C:\tmp\work\random¥111.xrdml
C:\tmp\work\random¥111BG1.Asc
C:\tmp\work\random¥111BG1.xrdml
C:\tmp\work\random¥200.Asc
C:\tmp\work\random¥200.xrdml
C:\tmp\work\random¥200BG1.Asc
C:\tmp\work\random¥200BG1.xrdml
C:\tmp\work\random¥220.Asc
C:\tmp\work\random¥220.xrdml
C:\tmp\work\random¥220BG1.Asc
C:\tmp\work\random¥220BG1.xrdml
C:\tmp\work\random¥group¥111group.ASC
C:\tmp\work\random¥group¥200group.ASC
C:\tmp\work\random¥group¥220group.ASC

```

結合 (Group) 化されたASCファイル

randomデータから補正曲線を作成

ODFPoleFigure1.5 ソフトウェアでバックグラウンドを削除したTXT2ファイルを作成
Al-A データも同様に ASCGroup 化ファイルを作成。

ODFPoleFigure1.5(ODFPoleFigure2)ソフトウェアでバックグラウンド削除、
defocus 補正を行いTXT2ファイルを作成

ODF 向けファイル

PFtoODF2(PFtoODF3)ソフトウェアでTXT2から

LaboTex, TExTools, StandardODF, popLA等
ODF 向けファイルを作成する。

Defocus 曲線を見ると、極点図の外側付近の補正量が大きすぎる為、

PFtoODF3 ソフトウェアで極点図の範囲制限をしてODF 向けデータ作成を勧めます。

ここまで説明したソフトウェアはCTRパッケージソフトウェア群に含まれています。