

PANalytical XRDで測定されたxrdmlデータの扱い

2015年07月04日

HelperTex Office

山田 義行

odftex@ybb.ne.jp

目次

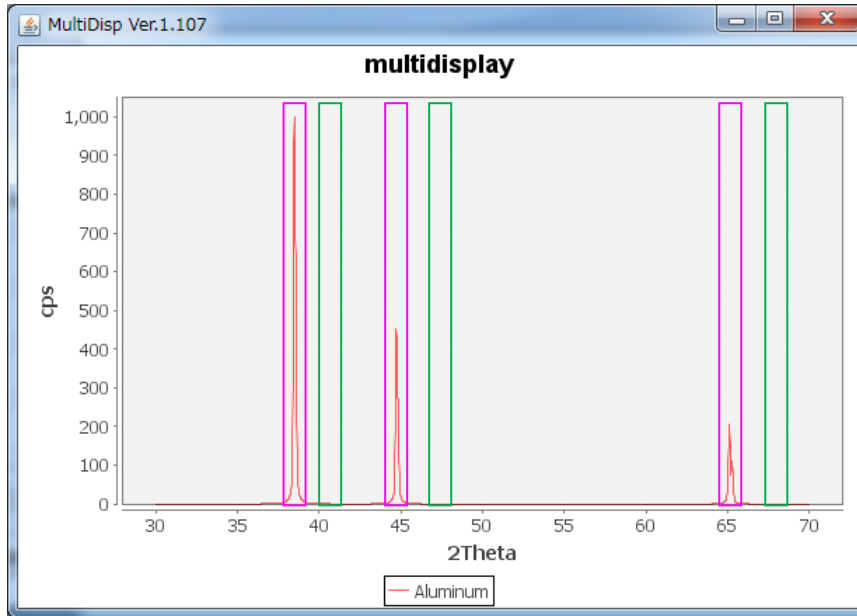
1. 概要
2. x r d m l ファイルの A S C 変換
3. 極点図のピーク極点図とバックグラウンド極点図の結合
4. ODFPoleFigure2 ソフトウェアで処理
5. d e f o c u s ファイルの作成

1. 概要

PANalytical社のXRDによる極点図測定はX線レンズを用いた光学系が一般的である。この光学系で極点図を測定する場合、バックグラウンド削除とdefocus補正は必要です。又、光学系的には完全極点図が測定出来る仕様であるが、吸収補正やdefocus補正量から考えると処理する範囲には制限が必要になります。

粉末試料を用いてバックグラウンド削除とdefocus補正法を説明します。

極点図測定角度（紫）とバックグラウンド測定角度（緑）



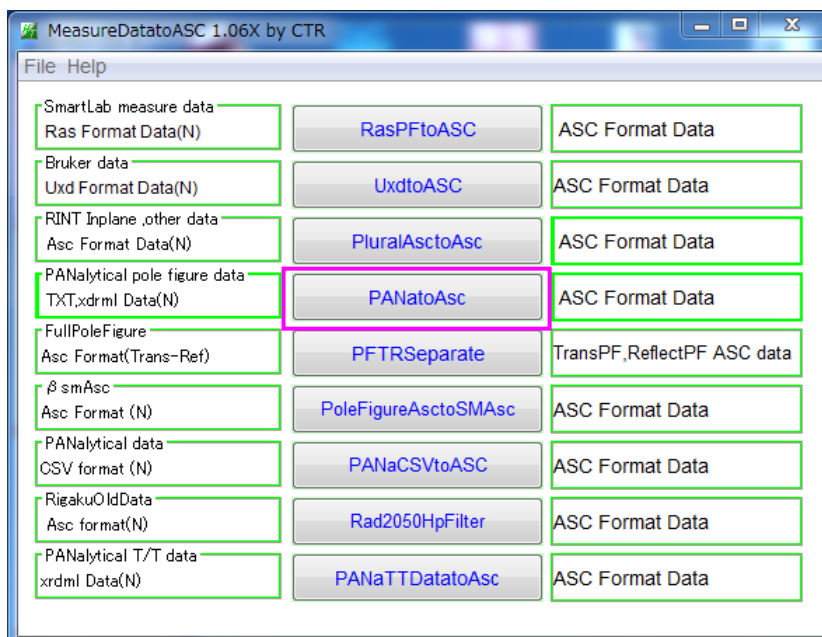
defocus極点では、 β 方向を1点以上測定する。

測定データ（バックグラウンドファイル名は、極点図ファイル+BG1（BG2）とします）

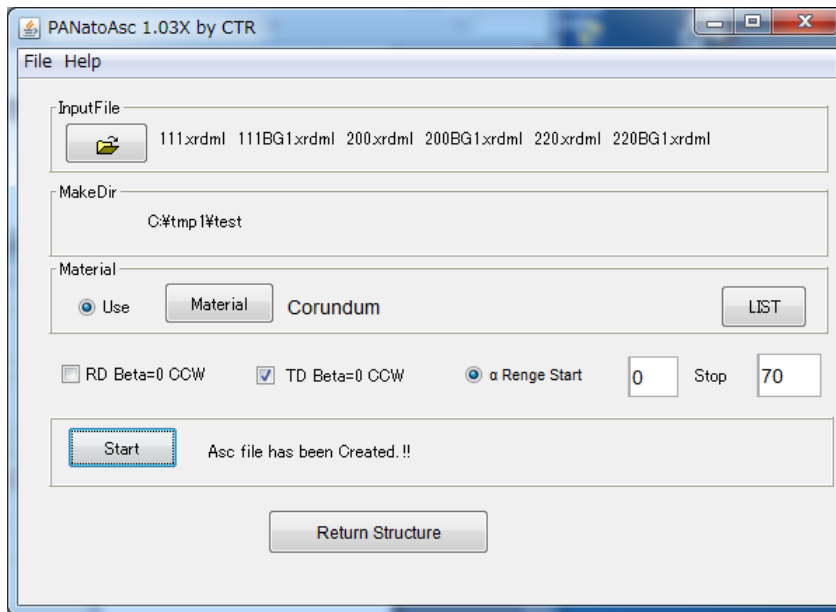
111.xrdml	111BG1.xrdml
200.xrdml	200BG1.xrdml
220.xrdml	220BG1.xrdml

2. xrdmlファイルのASC変換

ODFPoleFigure2->TooKit->MeasureDatatoASCTools->PANatoAsc ソフトウェアで変換



A S C変換では一括変換を行う。

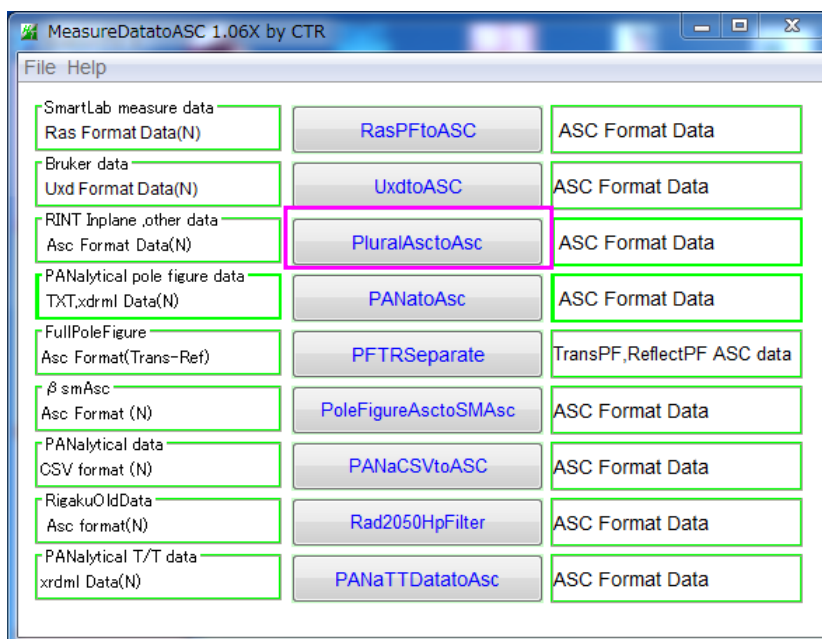


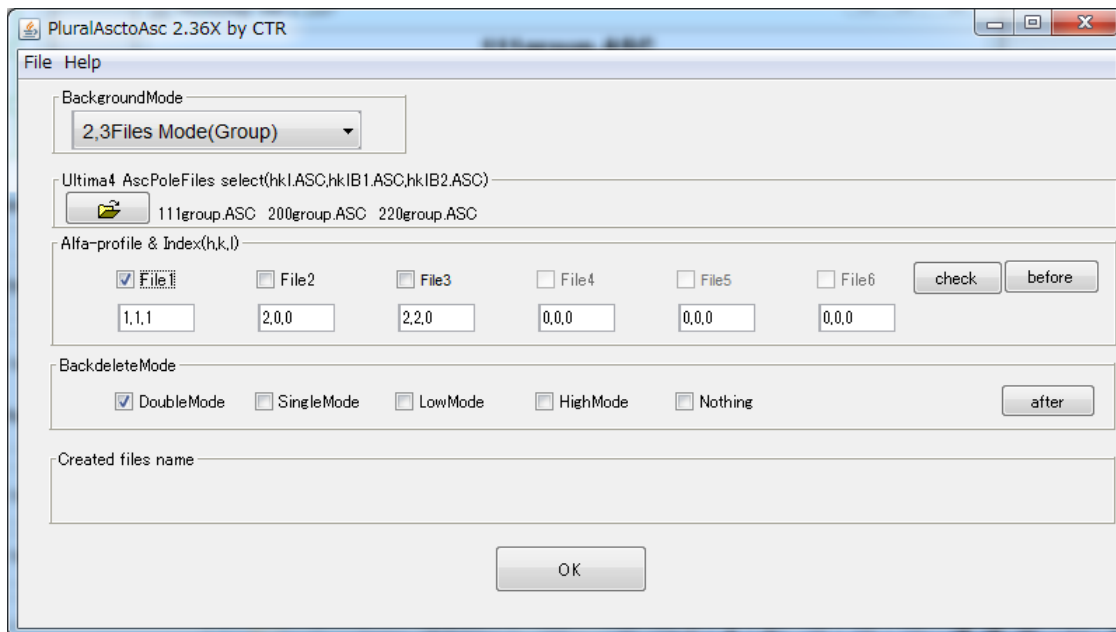
Schulz スリット無しでは、 α 範囲は70度以下と考えられます。

111.Asc	2015/07/04 8:10	RINT20007ｽｷｰ	6 KB
111BG1.Asc	2015/07/04 8:10	RINT20007ｽｷｰ	6 KB
200.Asc	2015/07/04 8:10	RINT20007ｽｷｰ	6 KB
200BG1.Asc	2015/07/04 8:10	RINT20007ｽｷｰ	6 KB
220.Asc	2015/07/04 8:10	RINT20007ｽｷｰ	6 KB
220BG1.Asc	2015/07/04 8:10	RINT20007ｽｷｰ	6 KB
111.xrdml	2014/05/09 17:42	XRDML ファイル	29 KB
111BG1.xrdml	2014/05/09 17:42	XRDML ファイル	29 KB
200.xrdml	2014/05/09 17:42	XRDML ファイル	29 KB
200BG1.xrdml	2014/05/09 17:42	XRDML ファイル	29 KB
220.xrdml	2014/05/09 17:42	XRDML ファイル	29 KB
220BG1.xrdml	2014/05/09 17:42	XRDML ファイル	29 KB

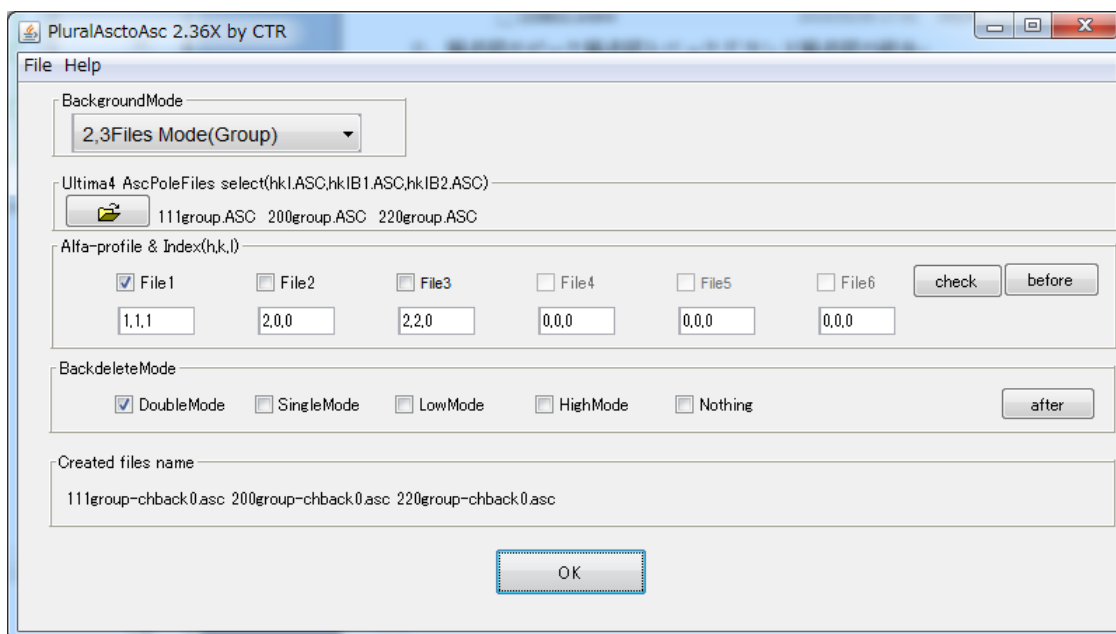
3. 極点図のピーク極点図とバックグラウンド極点図の結合

ODFPoleFigure2->TooKit->MeasureDatatoASCTools->PluralAsctoAsc で結合

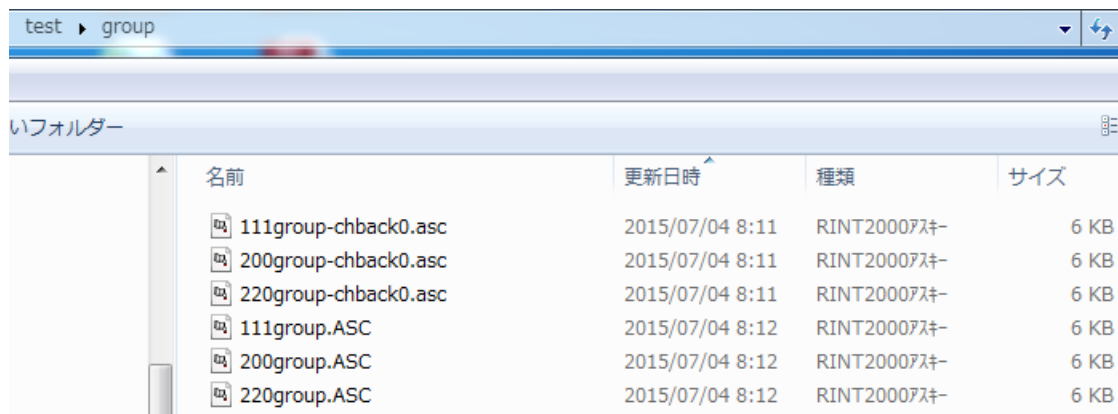




複数のファイルを一括選択し、File1などをチェックし、OKで変換

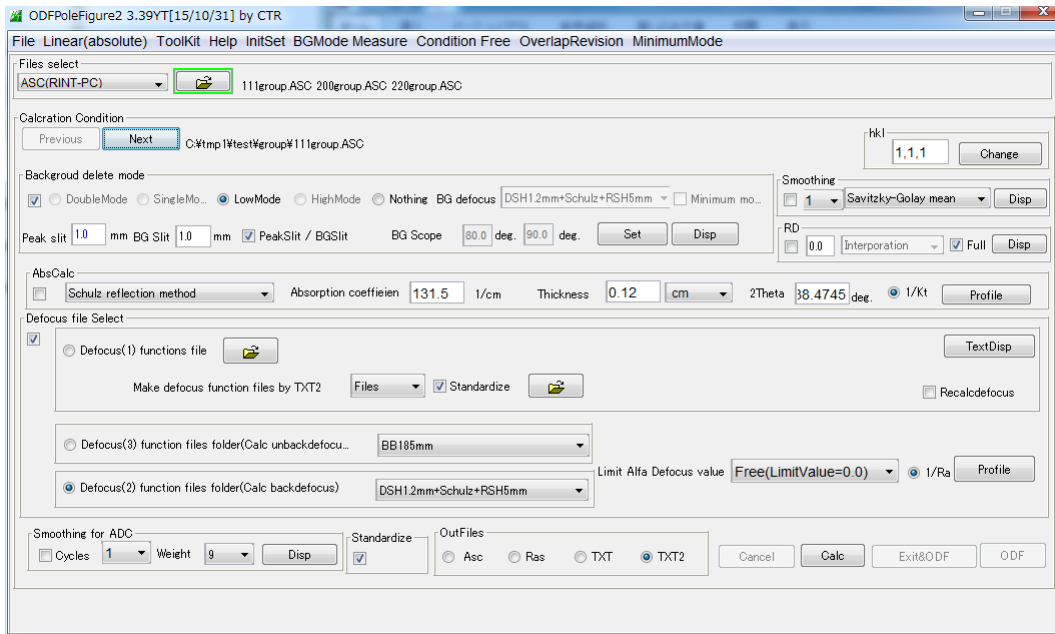


Groupホルダで変換したファイルが作成される。

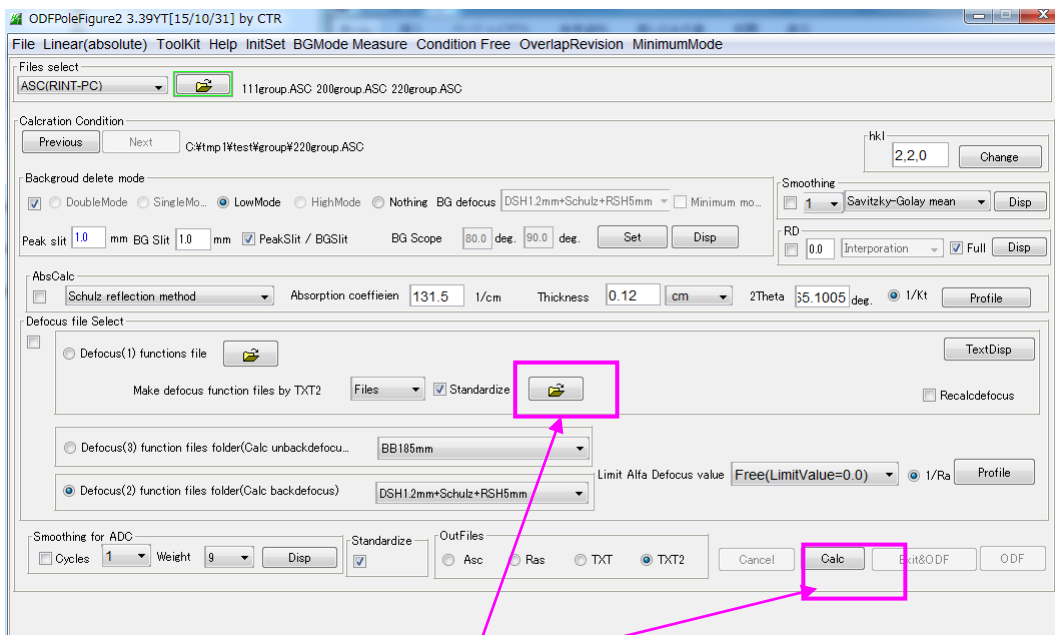


111group.ASCは結合ファイル、111group-chback0.ascはバックグラウンド処理結果

4. ODFPoleFigure2 ソフトウェアで処理



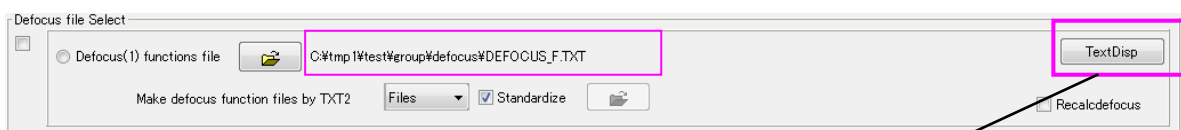
5. defocusファイルの作成



バックグラウンド処理を行う。以下のファイルが作成される

	111group_chFB20S_2.TXT	2015/07/04 9:40	テキスト文書	1 KB
	200group_chFB20S_2.TXT	2015/07/04 9:40	テキスト文書	1 KB
	220group_chFB20S_2.TXT	2015/07/04 9:40	テキスト文書	1 KB

defocus 部分にファイルを登録



多項式に近似されたファイルが作成され、表示します。

