PANalyticalXRD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. xrdmlファイルのASC変換
- 3. 極点図のピーク極点図とバックグランド極点図の結合
- 4. ODFPoleFigure2 ソフトウエアで処理
- 5. defocusファイルの作成

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defous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)とバックグランド測定角度(緑)



 $d e f o c u s 極点では、<math>\beta$ 方向を1 点以上測定する。

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

| 111.xrdml | 111BG1.xrdml |
|-----------|----------------|
| 200.xrdml | 200 BG1. xrdml |
| 220.xrdml | 220 BG1. xrdml |

2. xrdmlファイルのASC変換

ODFPoleFigure2->TooKit->MeasureDatatoASCTools->PANatoAsc ソフトウエアで変換

| MeasureDatatoASC 1.06X by | CTR | |
|---------------------------------------------------|----------------------|----------------------------|
| File Help | | |
| 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 |
| ி sm Asc 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 |
| | 5 | - <u> </u> |

ASC変換では一括変換を行う。

| ANatoAsc 1.03X by CTR | |
|------------------------------------------------------------------------------------|---------|
| File Help | |
| InputFile I11xrdml 111BG1xrdml 200xrdml 200BG1xrdml 220xrdml 220BG1: MakeDir | xrdml |
| C:¥tmp1¥test | |
| Material Orundum | LIST |
| ☐ RD Beta=0 CCW | Stop 70 |
| Start Asc file has been Created. !! | |
| Return Structure | |

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 | RINT200077+- | 6 KB |
|--------------|------------------|--------------|-------|
| 🖳 111BG1.Asc | 2015/07/04 8:10 | RINT2000774- | 6 KB |
| 🔤 200.Asc | 2015/07/04 8:10 | RINT200077+- | 6 KB |
| 🔄 200BG1.Asc | 2015/07/04 8:10 | RINT200077+- | 6 KB |
| 🛯 220.Asc | 2015/07/04 8:10 | RINT200077+- | 6 KB |
| 🖼 220BG1.Asc | 2015/07/04 8:10 | RINT200077+- | 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ンド極点図の結合

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

| MeasureDatatoASC 1.06X by | CTR | <u> </u> |
|---------------------------------------------------|----------------------|----------------------------|
| File Help | | |
| 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 |
| βsmAsc 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 |
| | | |

| 🛃 Plural File Hel | AsctoAsc 2.36X b p | y CTR | | | | |
|----------------------|--------------------------------------------------------|-----------------|------------------|------------|---------|--------------------|
| Back 2 Ultir | kgroundMode 2,3Files Mode(Gr na4 AscPoleFiles se | oup) | ASC,hkiB2.ASC) — | | | |
| | 🗃 111group.AS | SC 200group.ASC | 220group.ASC | | | |
| Alfa | -profile & Index(h,k,l) | I | | | | |
| | V File1 | E File2 | File3 | File4 | File5 | File6 check before |
| | 1,1,1 | 2,0,0 | 2,2,0 | 0,0,0 | 0,0,0 | 0,0,0 |
| Back | deleteMode | 🔲 Single Mode | LowMode | 🔲 HighMode | Nothing | after |
| Crea | ted files name | | | | | |
| | | | | ОК | | |

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

| 🛓 PluralA | AsctoAsc 2.36X b | y CTR | | | | | |
|----------------|-------------------------------------|----------------------|-------------------|------------|-----------|-------|--------------|
| File Help |) | | | | | | |
| Back(| eroundMode 3Files Mode(Gr | oup) 👻 | | | | | |
| Ultim | a4 AscPoleFiles se | lect(hkI.ASC,hkIB1./ | ASC,hkIB2.ASC) — | | | | |
| | 🗁 111group.AS | SC 200group.ASC | 220group.ASC | | | | |
| Alfa-p | profile & Index(h,k,l) | I | | | | | |
| | 🔽 File1 | File2 | File3 | File4 | File5 | File6 | check before |
| | 1,1,1 | 2,0,0 | 2,2,0 | 0,0,0 | 0,0,0 | 0,0,0 | |
| Backo | deleteMode | | | | | | |
| | 🔽 DoubleMode | 🔲 Single Mode | LowMode | 🔲 HighMode | 🔲 Nothing | | after |
| Create 111g | ed files name roup-chback0.asc 2 | 00group-chback0.a: | sc 220group-chbac | k0asc | | | |
| | | | | ОК | | | |

Groupホルダで変換したファイルが作成される。

| test 🕨 group | | | | • 4 ₂ |
|--------------|----------------------------------------------------------------------------------------------|--------------------------------------------------------------------------|--------------------------------------------------------------|------------------------------|
| いフォルダー | | | | |
| | 名前 | 更新日時 | 種類 | サイズ |
| | 백 111group-chback0.asc 백 200group-chback0.asc 백 220group-chback0.asc 백 111group.ASC | 2015/07/04 8:11 2015/07/04 8:11 2015/07/04 8:11 2015/07/04 8:12 | RINT200073‡- RINT200073‡- RINT200073‡- RINT200073‡- | 6 KB 6 KB 6 KB 6 KB |
| | 200group.ASC | 2015/07/04 8:12 2015/07/04 8:12 | RINT200073+- RINT200073+- | 6 KB 6 KB |

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

4. ODFPoleFigure2 ソフトウエアで処理

| M ODFPoleFigure 2.3.9YT[15/10/31] by CTR | × |
|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|------|
| File Linear(absolute) ToolKit Help InitSet BGMode Measure Condition Free OverlapRevision MinimumMode | |
| Files select ASC(RINT-PC) Illeroup ASC 200group ASC 220group ASC | |
| Calcration Condition Previous Next O#tmp1¥test¥eroup¥111eroup ASC | e |
| Backgroud delete mode |)isp |
| Peak slit 10 mm BG Slit 10 mm Ø PeakSlit / BGSlit BG Scope 80.0 deg. 90.0 deg. Set Disp | lisp |
| AbsCalc Schulz reflection method Absorption coefficien 131.5 1/cm Thickness 0.12 cm 2Theta 38.4745 deg. 1/Kt Profile | |
| Defocus (1) functions file TextDisp | |
| Make defocus function files by TXT2 Files 🔻 🖉 Standardize 🚘 💿 Recalcdefocus | |
| Defocus(3) function files folder(Calc unbackdefocuBB185mm Limit Alfa Defocus value Free(LimitValue=0.0) I/Ra Profile | |
| Defocus(2) function files folder(Calc backdefocus) DSH12mm+Schulz+RSH5mm T | |
| Smoothing for ADC Cycles 1 V Weight 9 V Disp Asc Res TXT OTXT Cancel Calc Exit&ODF O |)F |
| | |

5. defocusファイルの作成

| r celect | e OverlapRevision MinimumMod | le | |
|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-------------------------------------------------------------------|-------------------------------------------------------------|-----------------------|
| C(RINT-PC) T 111group ASC 200group ASC 200group ASC | | | |
| | | | |
| Previous Next Officer Management 2000 and SC | | _ hkl | |
| U.*tmp1+test+group+220group.hoC | | | 2,2,0 Change |
| ckgroud delete mode | DSH12mm+Schulz+RSH5mm = Mini | Smoothing | -Golay mean - Dion |
| | | | |
| ak slit 1.0 mm BG Slit 1.0 mm IV PeakSlit / BGSlit BG Scope 80.0 di | eg. 90.0 deg. Set Disp | 0.0 Interport | ation 🚽 🗹 Full 🛛 Disp |
| bsCalc | | | 1 |
| Schulz reflection method Absorption coefficien 131.5 1/cm | Thickness 0.12 cm | 2Theta 35.1005 deg. | I/Kt Profile |
| locus file Select | | | |
| O Defocus(1) functions file | | | TextDisp |
| Make defocus function files by TXT2 Files 💌 🗹 Standardiz | e 🗃 | | Recalcdefocus |
| | | | |
| Defocus(3) function files folder(Calc unbackdefocu BB185mm | - | | |
| Defeaue(2) function files folder(Cale to the terms) | Limit Alfa Defocus val | ue Free(LimitValue=0.0) | ▼ |
| Derocus(2) function mes folger(calc backderocus) DSH12mm+Schulz+RSH | lbmm - | | |
| moothing for ADC | | | |
| Cycles 1 Veight 9 Disp | Ras OTXT @ TXT2 | Cancel Calc | Exit&ODF ODF |
| | | | |
| / | | | |
| | | | |
| / | | | |
| ックグランド処理を行う。以下のファ | イルが作成される | 5 | |
| ックグランド処理を行う。以下のファ | イルが作成される | 3 | |
| ックグランド処理を行う。以下のファ | イルが作成される | 5 〒±2ト文書 | 1 KB |
| ックグランド処理を行う。以下のアア 111group_chFB20S_2.TXT のコンロックトFB20S_2.TXT | イルが作成される 2015/07/04 9:40 | テキスト文書 | 1 KB |
| ックグランド処理を行う。以下のアア 型 111group_chFB20S_2.TXT 型 200group_chFB20S_2.TXT | イルが作成される 2015/07/04 9:40 2015/07/04 9:40 | 5 テキスト文書 テキスト文書 | 1 KB 1 KB |
| ックグランド処理を行う。以下のアア 111group_chFB20S_2.TXT 110group_chFB20S_2.TXT 1200group_chFB20S_2.TXT | イルが作成される 2015/07/04 9:40 2015/07/04 9:40 2015/07/04 9:40 | 5 テキスト文書 テキスト文書 テキスト文書 テキスト文書 | 1 KB 1 KB 1 KB |
| ックグランド処理を行う。以下のファ 111group_chFB20S_2.TXT 111group_chFB20S_2.TXT 1200group_chFB20S_2.TXT 1200group_chFB20S_2.TXT | イルが作成される 2015/07/04 9:40 2015/07/04 9:40 2015/07/04 9:40 | 5 テキスト文書 テキスト文書 テキスト文書 テキスト文書 | 1 KB 1 KB 1 KB |
| ックグランド処理を行う。以下のファ 111group_chFB20S_2.TXT 110group_chFB20S_2.TXT 220group_chFB20S_2.TXT 220group_chFB20S_2.TXT efocus部分にファイルを登録 | イルが作成される 2015/07/04 9:40 2015/07/04 9:40 2015/07/04 9:40 | 5 テキスト文書 テキスト文書 テキスト文書 テキスト文書 | 1 KB 1 KB 1 KB |
| ックグランド処理を行う。以下のファ 111group_chFB20S_2.TXT 200group_chFB20S_2.TXT 220group_chFB20S_2.TXT e f o c u s 部分にファイルを登録 | イルが作成される 2015/07/04 9:40 2015/07/04 9:40 2015/07/04 9:40 | 5 テキスト文書 テキスト文書 テキスト文書 | 1 KB 1 KB 1 KB |
| ックグランド処理を行う。以下のファ 111group_chFB20S_2.TXT 200group_chFB20S_2.TXT 220group_chFB20S_2.TXT e f o c u s 部分にファイルを登録 xus file Select | イルが作成される 2015/07/04 9:40 2015/07/04 9:40 2015/07/04 9:40 | 5 テキスト文書 テキスト文書 テキスト文書 テキスト文書 | 1 KB 1 KB 1 KB |
| ックグランド処理を行う。以下のファ 111group_chFB20S_2.TXT 200group_chFB20S_2.TXT 220group_chFB20S_2.TXT e f o c u s 部分にファイルを登録 cus file Select O Defocus(1) functions file | イルが作成される 2015/07/04 9:40 2015/07/04 9:40 2015/07/04 9:40 | 5 テキスト文書 テキスト文書 テキスト文書 テキスト文書 | 1 KB 1 KB 1 KB |
| ックグランド処理を行う。以下のファ 副 111group_chFB205_2.TXT 副 200group_chFB205_2.TXT 副 220group_chFB205_2.TXT 会 focuss部分にファイルを登録 cus file Select の Defocus(1) functions file C+tmp litest\@roup\defocus\DE Make defocus function files by TXT2 Files VS | イルが作成される 2015/07/04 9:40 2015/07/04 9:40 2015/07/04 9:40 | 5 テキスト文書 テキスト文書 テキスト文書 | 1 KB 1 KB 1 KB |
| ックグランド処理を行う。以下のファ 副 111group_chFB2OS_2.TXT 副 200group_chFB2OS_2.TXT 副 220group_chFB2OS_2.TXT 留 220group_chFB2OS_2.TXT e focus Sile Select Defocus(1) functions file Make defocus function files by TXT2 Files VS | イルが作成される 2015/07/04 9:40 2015/07/04 9:40 2015/07/04 9:40 | 5 テキスト文書 テキスト文書 テキスト文書 | 1 KB 1 KB 1 KB |
| ックグランド処理を行う。以下のファ 111group_chFB20S_2.TXT 200group_chFB20S_2.TXT 220group_chFB20S_2.TXT 220group_chFB20S_2.TXT effocus file Select Defocus(1) functions file C+tmp l¥test¥eroup¥defocus¥DE Make defocus function files by TXT2 Files ママS | イルが作成される 2015/07/04 9:40 2015/07/04 9:40 2015/07/04 9:40 | 5 テキスト文書 テキスト文書 テキスト文書 | 1 KB 1 KB 1 KB |
| ックグランド処理を行う。以下のファ 副 111group_chFB2OS_2.TXT 副 200group_chFB2OS_2.TXT 副 220group_chFB2OS_2.TXT 副 220group_chFB2OS_2.TXT e f o c u s 部分にファイルを登録 xcus file Select O Defocus(1) functions file Make defocus function files by TXT2 Files 『 Make defocus function files by TXT2 Files 『 国式に近似されたファイルが作成され | イルが作成される 2015/07/04 9:40 2015/07/04 9:40 2015/07/04 9:40 | 5 テキスト文書 テキスト文書 テキスト文書 | 1 KB 1 KB 1 KB |
| ックグランド処理を行う。以下のファ 副 111group_chFB2OS_2.TXT 副 200group_chFB2OS_2.TXT 副 220group_chFB2OS_2.TXT e f o c u s 部分にファイルを登録 xcus file Select O Defocus(1) functions file Make defocus function files by TXT2 Files 『 Make defocus function files by TXT2 Files 『 Select 』 | イルが作成される 2015/07/04 9:40 2015/07/04 9:40 2015/07/04 9:40 | 5 テキスト文書 テキスト文書 テキスト文書 | 1 KB 1 KB 1 KB |
| ックグランド処理を行う。以下のアア 副 111group_chFB2OS_2.TXT 副 200group_chFB2OS_2.TXT 副 220group_chFB2OS_2.TXT 副 220group_chFB2OS_2.TXT e focus s部分にファイルを登録 xcus file Select ① Defocus(1) functions file Make defocus function files by TXT2 Files 『 『 国式に近似されたファイルが作成され extDepley 1.125 C:\tmp1\test\group\defocus\DEFOCUS_FTXT Help | イルが作成される 2015/07/04 9:40 2015/07/04 9:40 2015/07/04 9:40 | 5 テキスト文書 テキスト文書 テキスト文書 | 1 KB 1 KB 1 KB |