

X線回折データの変換プログラム(XFER)の使用方法

1. 測定したX線回折強度をプログラム PFLS で読み込み可能な形式に変換する方法

(1) X線回折装置で測定したデータを装置付属のツール・ソフトウェアを用いてアスキー形式(ASCII またはテキスト形式とも呼ぶ)に変換します。一般的には、下記に示すような測定条件が数行にわたり、次に2 θ とプロファイル強度の2列のデータというテキストファイルが作成されます。

(例) 理学電機社製 RINT のアスキー形式データの場合

Sample, No. 1 mix5	}	測定条件
Comments, 標準試料		
Filename, C:\Windmax\DATA\qpa4\mix5-1.raw		
Goniometer, RINT2000 広角コンテオメータ		
Attachment, 6 サンプルチェンジャー S 型		
Monochromater, 固定モノクロメータ		
ScanningMode, 2theta/theta		
ScanningType, FT		
X-Ray, 40kV/200mA		
発散スリット, 1°		
発散縦制限スリット, 10mm		
散乱スリット, 1°		
受光スリット, 0.15mm		
モノクロ受光スリット, 0.6mm		
Start, 10		
Stop, 90		
Step, 0.02		

10, 569 ←ここから、2 θ と強度の2列データとなる

10.02, 511

10.04, 574

10.06, 545

10.08, 514

10.1, 512

10.12, 514

10.14, 516

10.16, 534

10. 18, 536

以下省略

(2) 「改訂版 PRO-FIT, WPPF および関連プログラムの使用法」 p. 30 の 付録1) プロファイル強度データ に示されているデータフォーマットに変換します。

変換用のプログラム **XFER** (ファイル名: xfer.exe) を分析分科会のホームページに掲載しましたので、それを利用してデータフォーマットを変換してください。変換の手順を下記に示します。

①アスキー形式ファイルの測定条件のデータ行を削除して、 2θ と強度の2列データのみのファイルを作成します。なお、アスキー形式ファイルからの測定条件の削除は、テキストエディターやWordのようなワードプロセッサを用いて行います。

下記のような 2θ と回折強度のみの2列データファイルにします。

10, 569

10. 02, 511

10. 04, 574

10. 06, 545

10. 08, 514

10. 1, 512

****以下省略****

②プログラム**XFER**を例えば、Cドライブの¥xbinフォルダ (またはディレクトリと呼ぶ) にコピーした後、WindowsXPであれば、「スタート」→「すべてのプログラム」→「アクセサリ」→「コマンドプロンプト」を選択します。コマンドプロンプトを実行した後、cd c:¥xbin と入力して、カレントディレクトリをCドライブの¥xbinフォルダに切り替えます。そして、c:¥xfer と入力してプログラム**XFER**を実行します。

③プログラム **XFER** の実行例を下記に示します。アンダーライン部分を入力します。

Microsoft Windows XP [Version 5.1.2600]

(C) Copyright 1985-2001 Microsoft Corp.

c:¥xbin>xfer ←プログラム**XFER**を実行します。

Input X-Ray Raw Intensity Data File name =

mix5-1.txt ←測定条件を取り除いたアスキー形式ファイルの名前を入力します。

Input Start Angle =

10 ←X線回折データの測定開始角度を入力します。この例では 10°

Input Stop Angle =

90 ←X線回折データの測定終了角度を入力します。この例では 90°

Input Step Width =

0.02 ←X線回折データの走査ステップ幅を入力します。この例では 0.02°

Input Fixed Time =

2 ←X線回折データの計数時間（各ステップ毎の測定時間）を入力します。この例では 2 秒

Input WPPF type format Intensity data file name =

mix5-1.dat ←解析プログラム用データに変換するファイルの名前を入力します。

Input comment for data file

guidance mix5-1 ←解析プログラム用データのコメントを入力します。（空白可）

Stop - Program terminated.

④変換後のデータを下記に示します。

guidance mix5-1

0 0 0 11

1.540562 1.544390 0.497000 10.000 90.000 0.020 2.000

0.00000

569. 511. 574. 545. 514. 512. 514. 516. 534. 536.

539. 551. 529. 545. 482. 486. 523. 498. 514. 537.

****以下省略****

2. その他

装置付属のアスキー変換にて、 2θ と回折強度の 2 列データの作成ができない、プログラム XFER を用いてもデータ変換ができない等、X線回折データの変換が困難な場合は、下記へお問い合わせください。できる限り対応させていただきます。

【問い合わせ先】

三重県工業研究所窯業研究室 林 茂雄

〒510-0805 三重県四日市市東阿倉川 788

電話(059)331-2381

FAX(059)331-7223

E-mail : hayass03@pref.mie.jp