

平成20年6月16日

平成20年度知的基盤部会分析分科会 共同研究（粉末X線回折）の手引き書

はじめに

このたびは、X線回折の共同研究にご参加くださりましてありがとうございます。
まず、はじめにこの手引き書を必ずお読みください。

1. 共同研究の内容

参加者が事務局から配布される非晶質相が含まれる未知試料のX線粉末回折強度を測定し、その測定データを解析して、未知試料の相組成分析（定量分析）を行います。ここで、解析方法はリートベルト法を用いることとします。

なお、未知試料には非晶質相として溶融シリカが含まれており、それ以外に結晶相が複数存在します。なお、非晶質相を内部標準法にて定量分析するので、配布します未知試料にはあらかじめ内部標準物質としてコランダム (α - Al_2O_3) が20wt%添加してあります。（残りの相の合計が80wt%になります。）

今年度は、この手引き書の他に、種々のガイダンスを準備しましたので、それらをご参考にしていただいて解析を行ってください。解析結果や測定条件等は、別紙の分析結果報告シートにて報告を行ってください。

2. 共同研究の配布物

(1) 未知試料

1 種類

(2) 手引き書等（分析分科会のホームページに掲載されますので、そこからダウンロードしてください。）

①粉末パターンフィッティング法の解析ソフトウェアのインストールと実行について

リートベルト法のためのプログラム PFLS 等を名古屋工業大学のホームページからダウンロードする方法を示します。

・ファイル名：解析ソフトウェアのダウンロードとインストール方法の手順書.pdf

②X線回折データの変換プログラム(XFER)の使用法

X線回折データをプログラム PFLS で読み込めるデータ形式に変換するプログラム(XFER)の使用法を示します。

・ファイル名：X線回折データの変換プログラム(XFER)の使用法.pdf

③リートベルト法を用いた定量法（非晶質相を含む）に関する手引き書

リートベルト法のためのプログラム PFLS を用いて非晶質相を含む試料を定量分析

する方法を示します。

- ・ファイル名：リートベルト法を用いた定量法に関する手引き書(H20).pdf

④報告書に添付するデータファイル等の作成方法

今回の報告書と共に送付していただく、リートベルト法の解析結果データファイルとパターンフィッティング図の画像データファイルの作成方法について示します。

- ・ファイル名：報告書に添付するデータファイル等の作成方法(H20).pdf

⑤International Tables for Crystallography Vol. A Space-Group Symmetry の一部

- ・ファイル名：SPACE-GROUP SYMMETRY. PDF

(注意) 著作権の関係上、共同分析に参加される方が閲覧するだけに留めてください。(再配布は禁止です。)

⑥プログラム SPACEG の実行例

- ・ファイル名：プログラム SPACEG の実行例.pdf

⑦プログラム ASFT の実行例

- ・ファイル名：プログラム ASFT の実行例.pdf

⑧プログラム ATOMS の実行例

- ・ファイル名：プログラム ATOMS の実行例.pdf

⑨プログラム REFLEX の実行例

- ・プログラム REFLEX の実行例.pdf

⑩プログラム PFLS の実行例

- ・プログラム PFLS の実行例.pdf

(3) 配布ソフトウェア等

分析分科会のホームページから、下記の①から③をダウンロードしてください。

①プログラム DISP の修正版

- ・ファイル名：disp.exe

名古屋工業大学のホームページからダウンロードするプログラム DISP には、WindowsXP 等の一部の OS では、印刷をするとエラーがでるという不具合がありません(プログラムのバグではありません。コンパイラーが WindowsNT 用であったのが問題でした。)ので、今回配布する“disp.exe”をご利用ください。すなわち、今回配布した disp.exe を例えば“C:\¥xbin”へコピー(または上書き)してください。

②プログラム PFLS の修正版

- ・ファイル名：pflsxe.exe

名古屋工業大学のホームページからダウンロードするプログラム PFLS (プログラム名:pflsx.exe) は、Windows システムで実行する際、実行時エラーが発生して、解析を継続することができない場合があります。プログラム PFLS は UNIX システムで開発されており、UNIX 上で使用する場合は実行時エラーが発生しても計算は

継続されて、最終解が得られるのに対して、Windows システムではコンパイラの仕様にて実行時エラーが発生するとプログラムが終了してしまうのが原因です。

それゆえ、解析途中で実行時エラーが発生して解析が終了してしまう場合は、今回配布する“pflsxe.exe”をご利用ください。(今回配布した pflsxe.exe を例えば“C:\¥xbin”へコピーしてください。)なお、今回配布したプログラムはWindows システム上で発生する実行時エラーをある程度回避して、UNIX システムで実行する場合と同じ解析結果を得られるように修正を行ったものです。

- ③ X線回折データをプログラム PFLS で読み込めるデータ形式に変換するプログラム
・ファイル名：XFER.exe

- (4) 報告書(分析分科会のホームページに掲載されますので、そこからダウンロードしてください。)

- ① 報告書(Microsoft Word 形式)

- ・ファイル名：H20 報告書.doc

- (5) その他(ご参考までに：分析分科会のホームページに掲載されますので、そこからダウンロードしてください。)

- ① 第47回(H16年度)分析技術共同研究検討会の説明資料

- ・第47回分析技術共同研究検討会(三重県：林).pdf

- ② 第48回(H17年度)分析技術共同研究検討会の説明資料

- ・第48回分析技術共同研究検討会(三重県：林).pdf

- ③ 第49回(H18年度)分析技術共同研究検討会の説明資料

- ・第49回分析技術共同研究検討会(三重県：林).pdf

- ④ 第50回(H19年度)分析技術共同研究検討会の説明資料

- ・第50回分析技術共同研究検討会(三重県：林).pdf

3. 報告書の書き方

報告書(Microsoft Word 形式ファイル、ファイル名：報告書.doc)のシート1からシート3までをご記入ください。

シート1：参加証などを発行しますので、分析担当者の氏名を必ず正確にご記入ください。

シート2：各事項を記入してください。選択肢は、該当するものの□部分を■など、チェックをしてください。

シート3：ご質問やご意見がございましたらご記入願います。

4. 報告書の提出方法、期限および提出先

- (1) 報告書提出方法と期限

解析結果等を記載した分析結果報告シート、リートベルト法の解析結果データファイ

ル、最終パターンフィッティング図の画像データファイル、及びX線回折データを下記の提出先へ電子メールにてお送りください。

なお、電子メールの表題には、先頭に『共同分析（X線回折）』と記述し、次に機関名と氏名を記述願います。（下記の例をご参考にしてください。）

表題の記載例：共同分析（X線回折）三重県工業研究所窯業研究室：林茂雄

提出期限は、平成20年8月29日（金）までとします。ご協力をお願いいたします。

(2) 報告書提出先

送付先：E-mail：bb_kai@m.aist.go.jp