

## JADE の使用例(19) RIR 法による簡易定量のバッチ処理

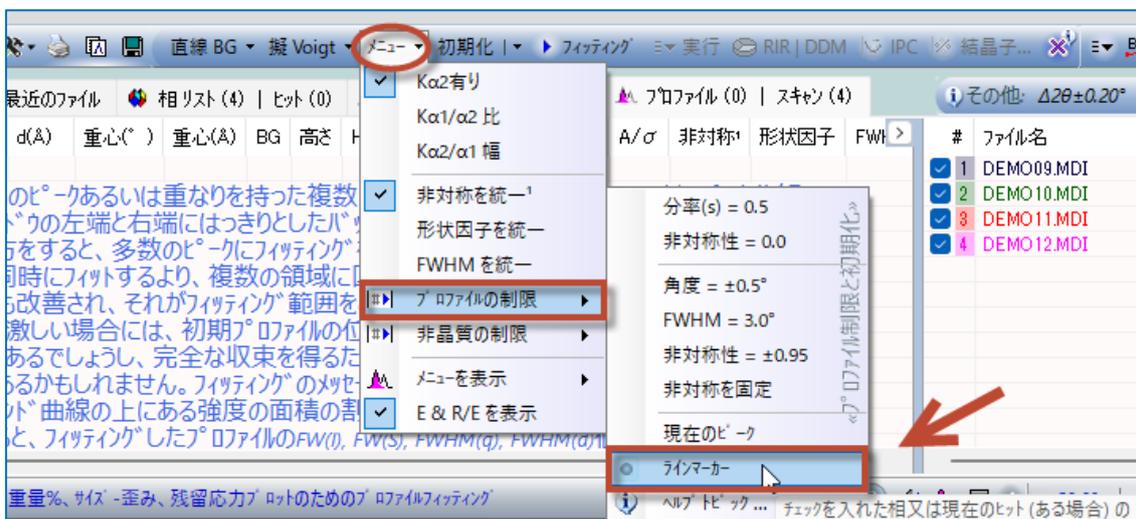
JADE ではさまざまな解析のバッチ処理が可能ですが、RIR 法による簡易定量についてもバッチ処理を行います。同じ設定を適用できるデータなら、一括して処理を行います。まず、1 つのデータに対して処理を行い、次にほかのすべてのデータに対して同じ設定を適用し、バッチ処理を行います。

具体的な操作は、以下の通りです。

1. RIR 法のバッチ処理で解析を行いたい複数のデータを JADE に読み込み、ツールバーの「S/M」ボタンをクリックし、結晶相の同定を行います。結晶相を選ぶときに、必ずデータベースで「RIR 値」(I/Ic 値)が分かっている相を選択する必要があります。

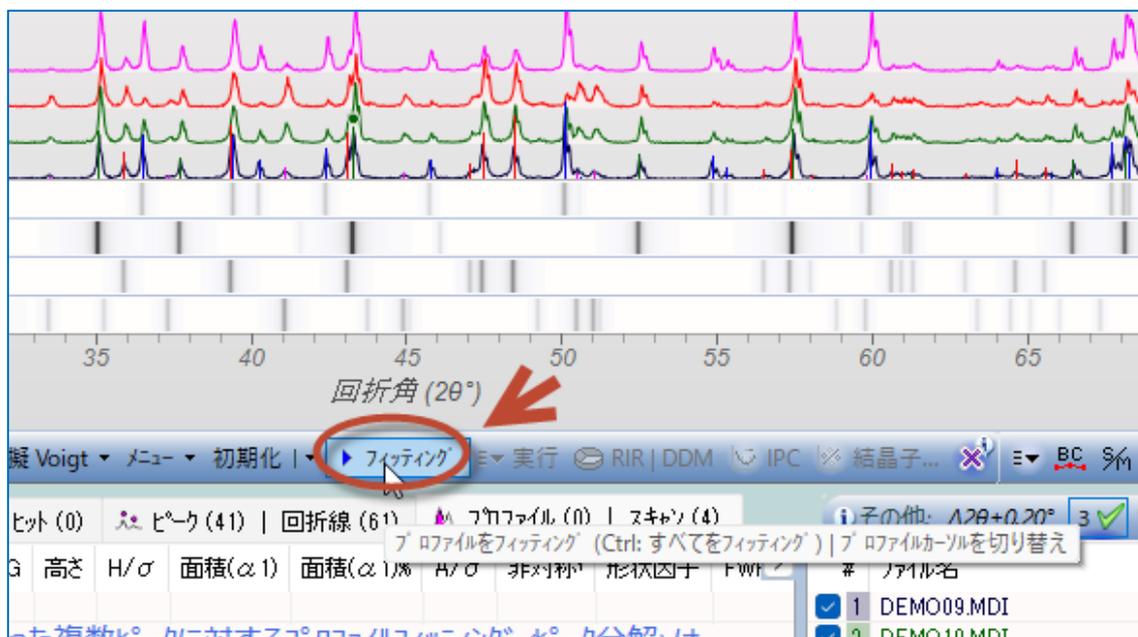


2. プロファイルフィッティングを行い、ピーク強度を求めます。「プロファイル」タブを選び、ツールバーの「メニュー」から「プロファイルの制限」→「ラインマーカー」を選ぶと、「相リスト」タブのデータのピーク位置にピークが存在するものとして、プロファイルフィッティングを行うことができます。



3. 「フィッティング」ボタンをクリックし、プロファイルフィッティングを行います。

このとき、キーボードの「Ctrl」キーを押しながら「フィッティング」ボタンをクリックすると、ピークごとに領域を分割し、すべてのピークに対して一括してフィッティングを行うことができ、便利です。



4. プロファイルフィッティングの結果が表示されます。「RIR」ボタンをクリックし、定量を行います。



5. 同定した結晶相ごとに、定量に利用するピークを選びます。画面の上側のエリアで相を選び、下側で「フィットされたピーク」タブを選び、その相に属し定量の計算に利用したいピークにチェックを付けます。ほかのピークと重なりがなく、フィッティングの結果が良好なピークを利用するほど、定量結果の精度が上がります。

参照強度比 (Reference Intensity Ratio; RIR) による定量分析 [DEMO09.MDI]

閉じる Wt% All PS: 0 RIR: 4.12 Wt% 47.1 1 IS 1+S 1-A SiO2

相 ID (4)	化学式	RIR	$\rho$	$\mu$	Wt%	体積%	NP	PDF-#
Quartz	SiO <sub>2</sub>	4.12	2.648	91.2	47.1 (2.7)	50.8 (3.4)	1	98-000-0369
Corundum	Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	1.00	3.988	124.2	18.0 (1.0)	12.9 (0.9)	6	98-000-0174
Calcite	CaCO <sub>3</sub>	2.91	2.711	192.3	25.7 (1.5)	27.0 (1.8)	2	98-000-0141
Dolomite	MgCa(CO <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	2.20	2.859	134.1	9.3 (0.5)	9.3 (0.6)	2	98-000-0200

フィットされたピーク 重量%図

回折角(°)	d(Å)	FWHM(°)	高さ	面積(α1)	面積(α1)%	I% <sub>r</sub>	(h k l)
<input type="checkbox"/>	20.796	4.2679	0.109 (0.002)	785.5 (19.9)	120.0 (3.4)	19.5 (0.6)%	18.8 (1 0 0)
<input type="checkbox"/>	21.966	4.0432	0.242 (0.053)	5.6 (2.0)	1.8 (0.7)	0.3 (0.1)%	2.2 (1 0 1)
<input type="checkbox"/>	22.994	3.8647	0.129 (0.007)	89.6 (7.6)	17.8 (1.5)	2.9 (0.3)%	18.4 (0 1 2)
<input type="checkbox"/>	23.980	3.7080	0.193 (0.024)	16.4 (3.2)	4.6 (0.9)	0.8 (0.1)%	12.6 (0 1 2)
<input type="checkbox"/>	25.497	3.4906	0.178 (0.003)	172.8 (6.1)	33.8 (1.4)	5.5 (0.2)%	57.3 (0 1 2)
<input checked="" type="checkbox"/>	26.577	3.3513	0.107 (0.001)	4137.3 (46.4)	614.8 (8.0)	100.0 (1.3)%	100.0 (0 1 1)
<input type="checkbox"/>	29.330	3.0426	0.117 (0.002)	1584.6 (31.6)	282.1 (7.0)	45.9 (1.1)%	100.0 (1 0 4)
<input type="checkbox"/>	30.894	2.8921	0.132 (0.004)	430.1 (15.3)	83.4 (3.6)	13.6 (0.6)%	100.0 (1 0 4)
<input type="checkbox"/>	31.377	2.8486	0.204 (0.015)	32.2 (4.1)	8.2 (1.3)	1.3 (0.2)%	2.0 (0 0 6)
<input type="checkbox"/>	33.479	2.6744	0.120 (0.015)	32.5 (4.9)	5.9 (1.1)	1.0 (0.2)%	4.6 (0 0 6)
<input type="checkbox"/>	35.091	2.5552	0.107 (0.003)	338.9 (13.6)	56.0 (2.6)	9.1 (0.4)%	91.9 (1 0 4)
<input type="checkbox"/>	35.902	2.4993	0.135 (0.008)	118.1 (8.6)	24.6 (2.2)	4.0 (0.4)%	12.0 (1 1 0)
<input type="checkbox"/>	36.484	2.4608	0.099 (0.003)	314.0 (12.5)	44.2 (2.1)	7.2 (0.3)%	8.0 (1 1 0)
<input type="checkbox"/>	37.327	2.4071	0.264 (0.025)	13.1 (2.1)	3.7 (0.8)	0.6 (0.1)%	8.4 (1 1 0)
<input type="checkbox"/>	37.711	2.3834	0.105 (0.005)	141.7 (8.9)	23.1 (1.7)	3.7 (0.3)%	40.0 (1 1 0)
<input type="checkbox"/>	39.359	2.2874	0.132 (0.007)	281.0 (61.8)	54.9 (8.8)	8.9 (1.4)%	24.8 (1 1 3)
<input type="checkbox"/>	39.422	2.2838	0.074 (0.015)	170.2 (70.7)	18.8 (7.2)	3.1 (1.2)%	7.7 (1 0 2)
<input type="checkbox"/>	40.285	2.2396	0.102 (0.004)	148.3 (8.7)	23.3 (1.6)	3.8 (0.3)%	3.5 (1 1 1)

参照強度比 (Reference Intensity Ratio; RIR) による定量分析 [DEMO09.MDI]

閉じる Wt% All PS: 0 RIR: 1.00 Wt% 18.0 1 IS 1+S 1-A Al2O3

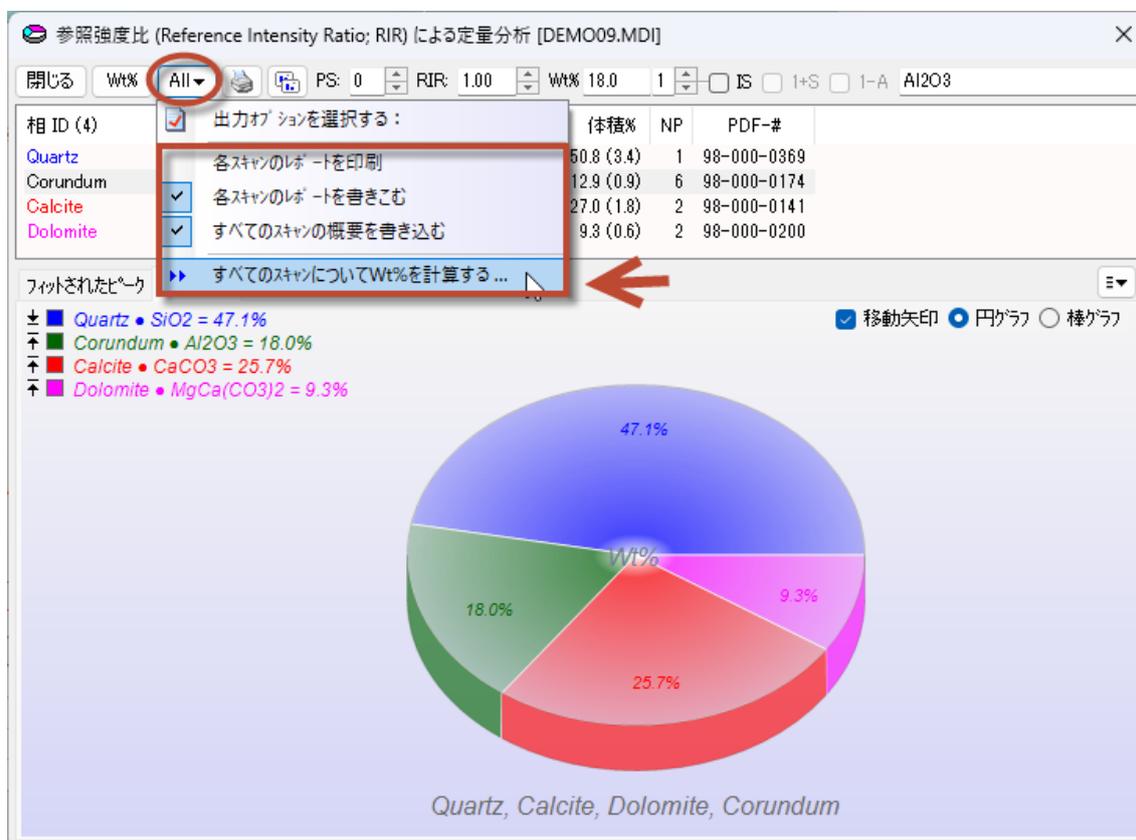
相 ID (4)	化学式	RIR	$\rho$	$\mu$	Wt%	体積%	NP	PDF-#
Quartz	SiO <sub>2</sub>	4.12	2.648	91.2	47.1 (2.7)	50.8 (3.4)	1	98-000-0369
Corundum	Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	1.00	3.988	124.2	18.0 (1.0)	12.9 (0.9)	6	98-000-0174
Calcite	CaCO <sub>3</sub>	2.91	2.711	192.3	25.7 (1.5)	27.0 (1.8)	2	98-000-0141
Dolomite	MgCa(CO <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	2.20	2.859	134.1	9.3 (0.5)	9.3 (0.6)	2	98-000-0200

フィットされたピーク 重量%図

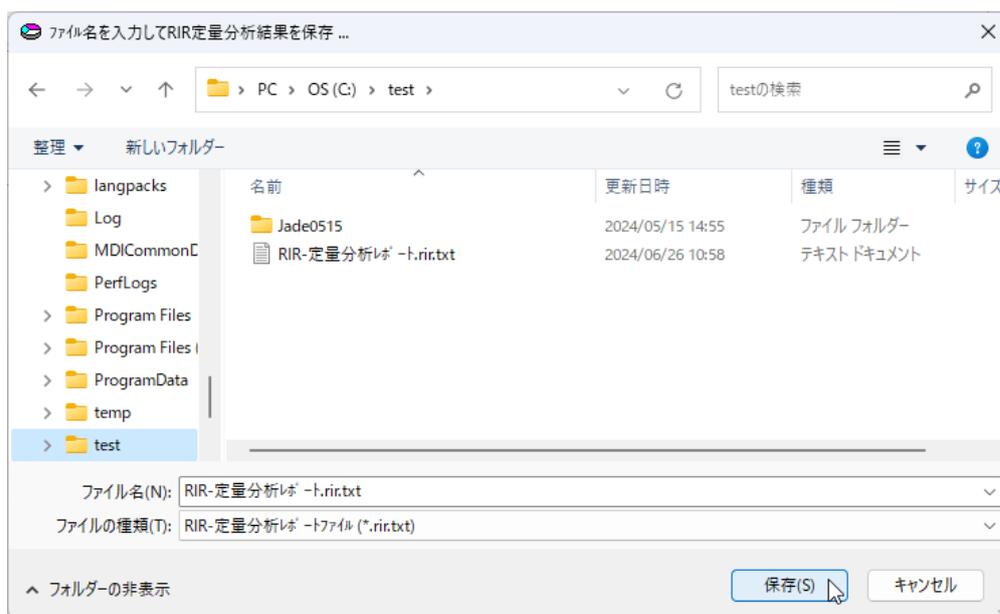
回折角(°)	d(Å)	FWHM(°)	高さ	面積(α1)	面積(α1)%	I% <sub>r</sub>	(h k l)
<input type="checkbox"/>	20.796	4.2679	0.109 (0.002)	785.5 (19.9)	120.0 (3.4)	19.5 (0.6)%	18.8 (1 0 0)
<input type="checkbox"/>	21.966	4.0432	0.242 (0.053)	5.6 (2.0)	1.8 (0.7)	0.3 (0.1)%	2.2 (1 0 1)
<input type="checkbox"/>	22.994	3.8647	0.129 (0.007)	89.6 (7.6)	17.8 (1.5)	2.9 (0.3)%	18.4 (0 1 2)
<input type="checkbox"/>	23.980	3.7080	0.193 (0.024)	16.4 (3.2)	4.6 (0.9)	0.8 (0.1)%	12.6 (0 1 2)
<input type="checkbox"/>	25.497	3.4906	0.178 (0.003)	172.8 (6.1)	33.8 (1.4)	5.5 (0.2)%	57.3 (0 1 2)
<input checked="" type="checkbox"/>	26.577	3.3513	0.107 (0.001)	4137.3 (46.4)	614.8 (8.0)	100.0 (1.3)%	100.0 (0 1 1)
<input type="checkbox"/>	29.330	3.0426	0.117 (0.002)	1584.6 (31.6)	282.1 (7.0)	45.9 (1.1)%	100.0 (1 0 4)
<input type="checkbox"/>	30.894	2.8921	0.132 (0.004)	430.1 (15.3)	83.4 (3.6)	13.6 (0.6)%	100.0 (1 0 4)
<input type="checkbox"/>	31.377	2.8486	0.204 (0.015)	32.2 (4.1)	8.2 (1.3)	1.3 (0.2)%	2.0 (0 0 6)
<input type="checkbox"/>	33.479	2.6744	0.120 (0.015)	32.5 (4.9)	5.9 (1.1)	1.0 (0.2)%	4.6 (0 0 6)
<input checked="" type="checkbox"/>	35.091	2.5552	0.107 (0.003)	338.9 (13.6)	56.0 (2.6)	9.1 (0.4)%	91.9 (1 0 4)
<input type="checkbox"/>	35.902	2.4993	0.135 (0.008)	118.1 (8.6)	24.6 (2.2)	4.0 (0.4)%	12.0 (1 1 0)
<input type="checkbox"/>	36.484	2.4608	0.099 (0.003)	314.0 (12.5)	44.2 (2.1)	7.2 (0.3)%	8.0 (1 1 0)
<input type="checkbox"/>	37.327	2.4071	0.264 (0.025)	13.1 (2.1)	3.7 (0.8)	0.6 (0.1)%	8.4 (1 1 0)
<input checked="" type="checkbox"/>	37.711	2.3834	0.105 (0.005)	141.7 (8.9)	23.1 (1.7)	3.7 (0.3)%	40.0 (1 1 0)
<input type="checkbox"/>	39.359	2.2874	0.132 (0.007)	281.0 (61.8)	54.9 (8.8)	8.9 (1.4)%	24.8 (1 1 3)
<input type="checkbox"/>	39.422	2.2838	0.074 (0.015)	170.2 (70.7)	18.8 (7.2)	3.1 (1.2)%	7.7 (1 0 2)
<input type="checkbox"/>	40.285	2.2396	0.102 (0.004)	148.3 (8.7)	23.3 (1.6)	3.8 (0.3)%	3.5 (1 1 1)

6. 「All」ボタンから「すべてのスキャンについて Wt%を計算する」を選ぶと、最初に解析したデータの結果と同じ設定を使い、重ねがきしている回折パターンに対してプロファイルフィッティングが行われ、RIR 法による簡易定量のバッチ処理を行うことができます。

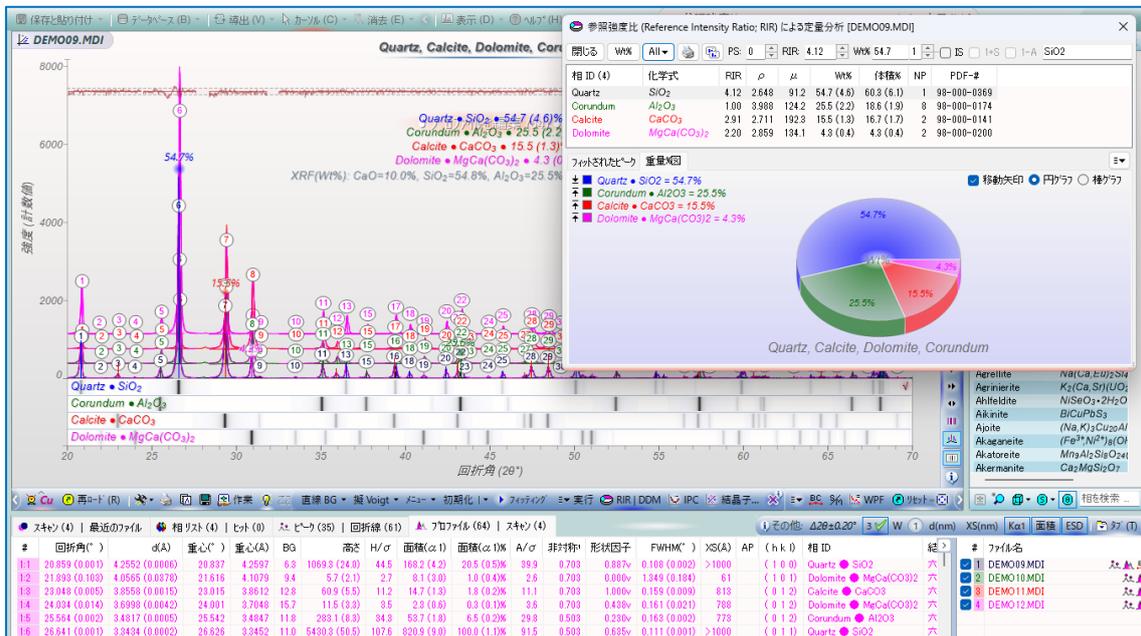
※ 出力結果のオプションもこのメニューで選ぶことができます。



7. テキストファイルとして結果が出力されます。保存先を選び、出力するファイルの名前を決めてください。



8. 結果が出力されます。



RIR-定量分析レポート.rir.txt

File: C:\ProgramData\Materials Data\Jade-X\demo\DEMO09.MDI  
 Iden: Quartz, Calcite, Dolomite, Corundum  
 Scan: 20.0° /70.0° /0.02° /2(s), I(ρ)=5171.0/4.0, Cu, 2001年5月31日, 13:43

相 ID (4)	化学式	RIR	ρ	μ	Wt%	体積%	NP	PDF-#
1	Quartz SiO2	4.12	2.648	91.2	46.9 (2.8)	50.6 (3.6)	1	98-000-0369
7	Corundum Al2O3	1.00	3.988	124.2	18.3 (1.1)	13.1 (0.9)	7	98-000-0174
2	Calcite CaCO3	2.91	2.711	192.3	25.6 (1.6)	27.0 (1.9)	2	98-000-0141
6	Dolomite MgCa(CO3)2	2.20	2.859	134.1	9.3 (0.6)	9.3 (0.7)	2	98-000-0200

XRF(Wt%): CaO=17.1%, SiO2=46.9%, Al2O3=18.3%, MgO=2.0%, CO2=15.7%

---

File: C:\ProgramData\Materials Data\Jade-X\demo\DEMO10.MDI  
 Iden: Quartz, Calcite, Dolomite, Corundum  
 Scan: 20.0° /70.0° /0.02° /2(s), I(ρ)=3070.0/3.0, Cu, 2001年5月31日, 13:43

相 ID (4)	化学式	RIR	ρ	μ	Wt%	体積%	NP	PDF-#
1	Quartz SiO2	4.12	2.648	91.2	28.5 (1.4)	31.8 (1.7)	1	98-000-0369
7	Corundum Al2O3	1.00	3.988	124.2	24.6 (1.2)	18.2 (1.0)	7	98-000-0174
2	Calcite CaCO3	2.91	2.711	192.3	28.9 (1.4)	31.4 (1.7)	2	98-000-0141
6	Dolomite MgCa(CO3)2	2.20	2.859	134.1	18.0 (0.9)	18.6 (1.0)	2	98-000-0200

XRF(Wt%): CaO=21.7%, SiO2=28.5%, Al2O3=24.6%, MgO=3.9%, CO2=21.3%

---

File: C:\ProgramData\Materials Data\Jade-X\demo\DEMO11.MDI  
 Iden: Quartz, Calcite, Dolomite, Corundum  
 Scan: 20.0° /70.0° /0.02° /2(s), I(ρ)=3186.0/4.0, Cu, 2001年5月31日, 13:43

相 ID (4)	化学式	RIR	ρ	μ	Wt%	体積%	NP	PDF-#
1	Quartz SiO2	4.12	2.648	91.2	11.8 (0.6)	13.1 (0.8)	1	98-000-0369
7	Corundum Al2O3	1.00	3.988	124.2	21.3 (1.1)	15.7 (1.0)	7	98-000-0174
2	Calcite CaCO3	2.91	2.711	192.3	41.0 (2.2)	44.5 (2.7)	2	98-000-0141
6	Dolomite MgCa(CO3)2	2.20	2.859	134.1	25.9 (1.4)	26.7 (1.6)	3	98-000-0200

XRF(Wt%): CaO=30.8%, SiO2=11.8%, Al2O3=21.3%, MgO=5.7%, CO2=30.4%

---

File: C:\ProgramData\Materials Data\Jade-X\demo\DEMO12.MDI  
 Iden: Quartz, Calcite, Dolomite, Corundum  
 Scan: 20.0° /70.0° /0.02° /2(s), I(ρ)=6793.0/7.0, Cu, 2001年5月31日, 13:43

行 1, 列 1 | 2,535 文字 | 100% | Windows (CRLF) | UTF-8