JADE の使用例(2) 回折パターンのピーク分離(プロファイルフィッティング)の基本

プロファイルフィッティングはピーク分離とも呼ばれ、ピークの特性を分析するために必 須のツールです。ピークの正確な面積、半値幅(FWHM)のようなピークの幅の情報、ピー ク位置などを得るために使われます。RIR 法による結晶相の定量分析、結晶子サイズと歪み 分析、表面残留応力分析などに利用できます。

プロファイルフィッティングの基本操作

1. 「プロファイルフィッティング」ツールバーを表示

Jade に回折パターンを読み込み、「スタート」メニューから「プロファイルのフィッティン グ」を選ぶか、「プロファイル」タブを選ぶと、プロファイルフィッティングの実行や設定 を行える「プロファイルフィッティング」ツールバーが表示されます。



「プロファイル」タブと「プロファイルフィッティング」ツールバー

「初期化」ボタンで初期パラメータの設定、「フィッティング」ボタンでフィットの実行が できます。



2. 調べたい範囲を拡大表示する

マウスのドラッグ操作でプロットウィンドウを拡大し、調べたいピーク(1 つまたは複数の ピーク)を表示します。プロファイルフィッティングをうまく行うには、平らなバックグラ ウンドと少数のフィットパラメータを持つようにセグメント化されたデータ範囲を指定し、 良い初期パラメータ(初期モデル)を与えることが重要です。

回折パターンにたくさんのピークが存在する場合、データの全範囲に対してプロファイル フィッティングを行うのではなく、重なりのない複数のセグメントに分けて実行すること で速度と結果が向上します。

(フィッティング範囲をどのように分割するかということには絶対的な決まりはなく、解析 者次第です)



3. 初期パラメータを設定

「初期化」ボタンをクリックすると、プロファイルフィッティングの初期パラメータが設定 されます。このときフィット範囲も固定され、その後、表示範囲を変更してもフィット範囲 は変わりません。フィット範囲を変更したい場合は、キーボードの[Ctrl]キーを押しながら 「初期化」ボタンをクリックします。

| , | Low | | |
|-------------------------------------|---|--|--|
| 597Å) | 55(1.668Å) <i>回折角</i> | 56(1.641Å) (20°) | 57(1.614Å) |
| ×=1- • M | 初期化 > フィッティンク | ■★実行 😂 RIR 🔽 II | PC 🖄 結晶子 🗙 |
|) ヒット <mark>(</mark> 0) . B 高さ | たた <u>ちない</u> 現在の範囲の7 面積(ロ1) 面積(ロ | <u>*9 (n) か. プロファイル (0</u> ^ ロファイルを初期化 (Ctrl: リセ リ 非メリ ポジス区団 |) 色付什 (0) ット) 範囲を保存 + vv Hivi() へら(Å) |

「初期化」ボタンの上で右クリックして「現在の範囲を保存」を選ぶと、フィット範囲の設 定を保存できます。保存したフィット範囲を呼び出す場合も「初期化」ボタンを右クリック します。より一貫した結果を得るために同じ範囲に合わせる必要がある場合に便利です。

| ~ | | | | hand | | | | |
|------------|--------|-------------|--------------|------|-----|-----------------------|------------------------|----------|
| | 53(1.) | 726Å) | 54(1.69 | 97Å) | 1 | 55(1.66 | 58Å) <i>回折角</i> (20 | €°) |
| ٥ | | 現在の範 | 囲を保存 | Ν | Mŧ | 刀期化 ▶ 7 | <i>ላፇ፹ላን⁄ን</i> ′ ≣▼ | 。 (実) |
|) | M | 20 <52.5 | i8° / 58.2°> | N | (0) | ^ታ ጁ | 6) 回折線(| (0) |
|) (| • | プロファイル: | カーソルのヒント | | 高さ | 面積 <mark>(α1</mark>) | 面積 <mark>(α1)</mark> | |

4. プロファイルフィッティングの実行

「フィッティング」ボタンをクリックすることでプロファイルフィッティングが実行され ます。「プロファイル」タブにそれぞれのピークの中心、高さ、面積、半値幅などの値が表 示されます。

回折パターンに多数のピークが存在する場合、測定した範囲全体に対してまとめてプロフ ァイルフィッティングを行うより、複数の重ならないセグメントに分けて実行することで、 プロファイルフィッティングの速度と結果が向上します。

フィッティング範囲をどのようにセグメント化するかは、解析者次第です。



プロファイルフィッティングの詳細については、JADE PRO/Standard のヘルプファイルの 「Profile Fitting and More」のページをご覧ください。

※JADE のメインメニューの「ヘルプ」から「ヘルプトピック」を選ぶとヘルプファイルを 開けます。「目次」タブで「Data Processing & Analysis」→「Profile Fitting and More」と選 んでください。