JADE の使用例(14) プロファイルフィッティングのバッチ処理

類似の複数の回折パターンに対して同じ設定を使い、一度にまとめてプロファイルフィッ ティングを行うことができます。

- ① 複数の回折パターンを開き、プロットウィンドウに表示する
- ② 最初に1つの回折パターンに対してプロファイルフィッティングを行う
- ③ メニューからバッチ処理を実行

という流れで処理を行います。



操作方法

- ① プロファイルフィッティングの準備
- 1. プロファイルフィッティングを行いたい回折パターンのデータをすべて開き、プロッ トウィンドウに重ねがきします。



 最初に1つの回折パターンに手動でプロファイルフィッティングを行います。このと きと同じ設定が、バッチ処理を行うときに使われます。 複数の回折パターンが開かれている状態でプロファイルフィッティングを行うと、「ス キャン」タブのいちばん上にあるデータ(プロットウィンドウではいちばん下に表示さ れているパターン)に対して処理が行われます。



② プロファイルフィッティングの実行

 「プロファイル」タブを開き、実際にプロファイルフィッティングを行います。「初期 化」ボタンをクリックすると、ピーク位置に JADE がプロファイルを挿入します。
 ※「初期化」ボタンをクリックせずに、プロットウィンドウのピーク位置でマウスをク リックし、手動でプロファイルを挿入しても構いません。



2. 「初期化」ボタンで挿入されたプロファイルを手動で修正できます。以下の操作で修正 できますので、必要に応じて修正してください。



💆 Cu ▼ 🙆 😓 💀 📳 😰 💡 // 直線 BG ▼ 擬 Voigt ▼ ノニュー ▼ 🫝 初期化 🕨 フィラティング 💷 実行 😂 RIR 🔄 IPC 🗵 結晶子... 🛞 💷 🕰 🎋 💹 🕗



フィッティングの結果をご確認ください。実測のパターンに対してフィット結果が良好でない場合、「初期化」ボタンをクリックして初期プロファイルを修正したり結果をすべて削除するなどし、納得いく結果が得られるまでフィッティングをやり直してください。



フィッティングを行うとプロットウィンドウの上部に残差が表示されるので、この情 報も参考にしてフィッティングを行ってください。



③ バッチ処理の実行

 「実行」ボタンから「すべてのスキャンを含む 1 つのリストファイルを作成」を選ぶ と、開いているすべての回折パターン(プロットウィンドウに表示されているすべての パターン)に対して、プロファイルフィッティングが行うことができます。

1 10	1000 c						1 K 1		15 - 1
	········		\sim		~			Akaganeite	(<i>Fe</i>
							•	Akatoreite	Mn ₉
	~	_		7 ⁽⁸⁾ (9) 6	_			Akermanite	Ca ₂
	5)mmmmmmm	6	2		2		_	Akhtenskite	MnC
			-		-	-		Akimotoite	SIM
	30			35 40			更	Akrochordite	(Mn
<u> </u>	7 <i>折角</i> (2θ°)						(i)	AL 11	b for I
		1					~	<	
- 👻 🗛 🚈 🕮	1/k > 744747	2 E	- 5	E行 PERR VS IDC VS 結果子 🗙 =→ BC S	ia Ne	№ -15	15	💿 o 📶 🖓	ഭ∙ി
JHC 17374	116 7 747747	~			11	0.0	<u> </u>		
- LA - F (0) - I		A.		すべてのスキャンに現在のBG点を使用	1.	2/1 d/p	m)	VS(nm) bikil	CDC EST
C-9(8)	回折線(の			すべてのスキャンに最初のプロファイルを使田		2/1 u(n	iny -	və(nin) nikli	CF5 ESL
高さ	面積(α,1)	귵	-	STOCONTOLERADON ANTIMEDEND		h k 🔁	#	ファイル名	
007.0 (0.0)	1010(007)			フィッティング したブ ロファイルを次のスキャンに使用					
267.3 (9.0)	191.0 (7.7)			7キャン毎にプロファイルを雨初期化			\leq	demo3dsbin	
62.8 (10.8)	334.1 (9.3)		_				\square	2 demo3dsbin	
127.4 (6.0)	1459.8 (103.4)	11	~	すべてのスキャンについてフィッティングしたプロファイルを表示			$\mathbf{\nabla}$	3 demo3dsbin	
21.1 (16.1)	844.0 (13.0)	11	2	バッチフノッテンンガ後に知期プロファイルを保持				🚛 demo3dsbin	
33.4 (6.4)	16.7 (4.1)			1 7/71/71/77 18 (C10)#07 H771/m2 (K19				i demo3dsbin	
41.5 (5.3)	27.9 (4.6)			2キャン毎のビークリストファイルを作成				demo3dsbin	
68.6 (7.6)	36.0 (6.0)				_			/ demo3dshin	
1185 (7.4)	728(74)		₩.	すべてのスキャンを含む1つのリストファイルを作成				demo3ds bin	
100.5 (5.5)	50.0 (4.9)			すべてのフォャンの専約リフトファイル				demo0debin	
100.0 (0.0)	09.0 (4.3)			91100017003009701771#					
4X N (411)	25.1.03.10			リストファイルをXMLフォーマットで記述 Ctrl+追	豊沢: ^	ッチフィッティ	ングを	さすにファイルを書き	授え

バッチ処理を行うときの設定を、下記の 3 つのオプションから選ぶことができます。 上から順に、

- 最初の設定をすべての測定データに適用するオプションで、同じ角度範囲に似たピ
 ークを持つ場合にお勧め
- 1つ前のフィット結果を次のデータに順々に適用していくオプションで、格子定数 の変化(例えば組成や温度の変化など)によりピークがずれていく場合にお勧め
- データごとに毎回 JADE がプロファイルを初期化してフィットを行うオプションです(lazy man's option)。似ていないデータに一気にバッチフィットを行いたい場合に利用するオプションですが、全自動でピーク検索とバックグラウンドの定義がうまくいくようなデータでないと良好な結果が得られません。



バッチ処理の結果を保存するフォルダとファイル名を指定するダイアログが表示されるので、それぞれ指定します。「保存」をクリックすると、バッチ処理が始まります。

── ファイル名を入力してビー	끼자を保存					×
← → ~ ↑ □.	< OS (C:) → Progra	ımData → Materials Da	ata > Jade-X > demo	ٽ ~	♀ demoの検索	
整理 ▼ 新しいフォノ	レダー					III 🔹 🔹 🕐
PC	^ 名前	^	更新日時	種類	サイズ	
🧊 3D オブジェクト			検索条件に一致する項	目はありません。		
🖊 ダウンロード						
📃 デスクトップ						
■ ピクチャ						
。						
- US(C:)						
🥣 ネットワーク						
- (1.50)	A 487 285 1 4 4 4					
ノアイル名(N):	>-//供安.pkS.txt	1.1.0				~
ノア1ルの裡類(I): E	-99,7779 774. (*.p	(KS.TXT)				~
ヘ フォルダーの非表示					保存(S)	キャンセル

処理が終わると結果が表示されます。プロットウィンドウにはこのようにフィット結果が図で表示されます。



数値の結果は「プロファイル」タブに表示されます。「#」欄に回折パターンの番号とピ ーク番号が表示されています。例えば「1:4」と表示されているのは「1 つめのパターン のピーク 4」のフィット結果という意味です。

• Z ⁴	キャン(12) 最近	መንァイル	🚯 相	リスト (Otrl:	S/M (J&(0	💐 ድ ኃ (8)	回折線 (0)	🛝 ጋ°ロファイル (10)	X7+V)	(12)	その他: <u>∆20±0</u>	.20° 3 \	1 2/	1 d(n
#	回折角(゜)		d(Å)	重心(*)	重心(d)	BG	高さ	面積(α1) 面積(α1)%	非対称"	形状因子	FWHM(*)	XS(Å)	AP	(>
1:1	20.853 (0.007)	4.2564	(0.0028)	20.850°	4.2569Å	5.7	267.3 (9.0)	191.0 (7.7) 13.1 (0.5)%	0.020	0.774v	0.501 (0.012)	172		
1:2	21.995 (0.005)	4.0379	(0.0020)	21.993*	4.0384Å	5.6	462.8 (10.8)	334.1 (9.3) 22.9 (0.6)%	0.020	0.750v	0.508 (0.008)	169		
1:3	25.007 (0.174)	3.5580	(0.0486)	25.007*	3.5580Å	5.4	127.4 (6.0)	1459.8 (103.4) 100.0 (7.1)%	0.000	1.000v	10.000 (0.330)	8		
1:4	26.655 (0.005)	3.3416	(0.0011)	26.653°	3.3419Å	5.3	1221.1 (16.1)	844.0 (13.0) 57.8 (0.9)%	0.020	0.723v	0.488 (0.004)	178		
1:5	28.453 (0.030)	3.1344	(0.0064)	28.450°	3.1347Å	5.2	33.4 (6.4)	16.7 (4.1) 1.1 (0.3)%	0.020	0.000v	0.469 (0.042)	187		
1:6	31.445 (0.022)	2.8426	(0.0039)	31.443°	2.8428Å	5.0	41.5 (5.3)	27.9 (4.6) 1.9 (0.3)%	0.020	1.000v	0.437 (0.048)	204		
1:7	36.083 (0.037)	2.4872	(0.0050)	36.081*	2.4873Å	4.6	68.6 (7.6)	36.0 (6.0) 2.5 (0.4)%	0.020	0.351v	0.428 (0.037)	212		
1:8	36.527 (0.025)	2.4580	(0.0032)	36.524°	2.4581Å	4.6	118.5 (7.4)	72.8 (7.4) 5.0 (0.5)%	0.020	0.643v	0.449 (0.028)	201		
1:9	39.456 (0.010)	2.2820	(0.0011)	39.454°	2.2821Å	4.4	100.5 (5.5)	59.8 (4.3) 4.1 (0.3)%	0.020	0.725v	0.430 (0.018)	213		
1:10	40.277 (0.017)	2.2373	(0.0018)	40.275°	2.2375Å	4.3	43.6 (4.0)	25.1 (3.0) 1.7 (0.2)%	0.020	0.171v	0.511 (0.025)	176		
2:1	20.844 (0.007)	4.2581	(0.0027)	20.842*	4.2587Å	6.4	268.7 (8.7)	181.7 (7.1) 13.1 (0.5)%	0.021	0.628v	0.498 (0.010)	173		
2:2	21.981 (0.006)	4.0404	(0.0021)	21.979°	4.0408Å	6.2	401.0 (10.5)	295.2 (9.3) 21.2 (0.7)%	0.021	0.887v	0.495 (0.010)	174		
2:3	25.046 (0.172)	3.5526	(0.0481)	25.046°	3.5526Å	5.6	121.4 (5.4)	1391.1 (96.3) 100.0 (6.9)%	0.000	1.000v	10.000 (0.330)	8	•	
2:4	26.654 (0.005)	3.3417	(0.0012)	26.652°	3.3420Å	5.2	1213.7 (15.7)	835.2 (12.6) 60.0 (0.9)%	0.021	0.671v	0.495 (0.004)	176		
2:5	28.440 (0.032)	3,1358	(0.0068)	28.438°	3.1360Å	4.9	32.1 (6.6)	17.5 (4.5) 1.3 (0.3)%	0.021	0.507v	0.422 (0.055)	211		
2:6	31.479 (0.024)	2.8396	(0.0042)	31.477*	2.8399Å	4.3	38.7 (4.9)	28.5 (4.6) 2.0 (0.3)%	0.021	1.000v	0.478 (0.051)	185		
2:7	36.087 (0.043)	2.4869	(0.0057)	36.085*	2.4871Å	3.3	61.0 (8.7)	38.6 (6.8) 2.8 (0.5)%	0.021	0.888v	0.426 (0.046)	212		
2:8	36.528 (0.026)	2.4579	(0.0033)	36.526°	2.4580Å	3.2	106.6 (6.9)	61.8 (6.5) 4.4 (0.5)%	0.021	0.278v	0.486 (0.026)	184		
2:9	39.455 (0.009)	2.2820	(0.0011)	39.453°	2.2821Å	2.6	100.5 (5.5)	59.3 (4.1) 4.3 (0.3)%	0.021	0.701v	0.429 (0.017)	213		
2:10	40.291 (0.016)	2.2366	(0.0017)	40.289°	2.2367Å	2.4	48.6 (4.9)	29.4 (3.9) 2.1 (0.3)%	0.021	0.944v	0.417 (0.034)	221		
3:1	20.854 (0.007)	4.2562	(0.0030)	20.851*	4.2569Å	5.8	266.8 (8.3)	202.9 (7.5) 14.2 (0.5)%	0.022	0.632v	0.561 (0.011)	152		
3:2	21.986 (0.006)	4.0395	(0.0022)	21.983*	4.0400Å	5.7	363.6 (10.0)	265.9 (8.7) 18.6 (0.6)%	0.022	0.761v	0.513 (0.010)	167		
3:3	25.033 (0.186)	3.5543	(0.0518)	25.033°	3.5543Å	5.3	124.9 (5.7)	1427.7 (100.9) 100.0 (7.1)%	0.000	1.000v	9.961 (0.333)	8	•	
3:4	26.653 (0.005)	3.3419	(0.0012)	26.650*	3.3422Å	5.1	1256.6 (15.9)	869.0 (12.8) 60.9 (0.9)%	0.022	0.661v	0.499 (0.004)	174		
3:5	28.529 (0.047)	3,1262	(0.0102)	28.526*	3.1265Å	4.9	21.6 (6.0)	12.7 (4.4) 0.9 (0.3)%	0.022	0.000v	0.552 (0.067)	157		
3:6	31.492 (0.022)	2.8385	(0.0038)	31.490°	2.8387Å	4.5	39.2 (5.6)	24.1 (4.5) 1.7 (0.3)%	0.022	1.000v	0.399 (0.049)	226		
3:7	36.026 (0.035)	2.4910	(0.0046)	36.024°	2.4911Å	3.9	48.9 (6.8)	25.5 (4.9) 1.8 (0.3)%	0.022	0.665v	0.378 (0.043)	244		
3:8	36.510 (0.018)	2.4591	(0.0024)	36.507*	2.4593Å	3.9	116.6 (6.0)	76.7 (6.2) 5.4 (0.4)%	0.022	0.488v	0.509 (0.023)	175		×
<															>
🐥 ħ-У	い: 左クリックしてブロ	77小を移	動又は挿	入 (Ctrl: 正	確な位置に)、右	がリックして除去、	スクロールして変更	_	-	1) il 🛄	< <24.5°>	δ=0.05°	1=4	326.0

プロファイルフィッティングの結果はテキストファイルとしても保存されます。

ビ −/概要.pks.txt - メモ帳	– 🗆 🗙
1ル(F) 編集(E) 書式(O) 表示(V) ヘルブ(H) le: C:¥ProgramData¥Materials Data¥Jade-X¥demo¥demo3ds.bin m: Quartz & Cristobalite an: 17.0°/41.5°/0.05°/1(s), I(p)=2000.0/20.0, Cu, 2013年8月30日, 11:28	^
回折角(°) d(Å) 重心(°) 重心(d) BG 高さ 面積(α 1) 20.853 (0.007) 4.2564 (0.0028) 20.850° 4.2569Å 6.2 267.3 (9.0) 21.995 (0.005) 4.0379 (0.0020) 21.993° 4.0384Å 6.1 463.0 (10.8 25.010 (0.174) 3.5575 (0.0487) 25.010° 3.5575Å 5.9 127.0 (6.0) 26.655 (0.005) 3.3416 (0.0011) 26.653° 3.3419Å 5.7 1221.3 (16. 28.453 (0.030) 3.1344 (0.0064) 28.450° 3.1347Å 5.6 33.4 (6.4) 31.445 (0.022) 2.8426 (0.0039) 31.443° 2.8428Å 5.3 41.5 (5.3) 36.083 (0.037) 2.4872 (0.0050) 36.081° 2.4873Å 5.0 68.6 (7.6) 36.527 (0.025) 2.4580 (0.0032) 36.524° 2.4581Å 4.9 118.5 (7.4) 39.456 (0.010) 2.2820 (0.0011) 39.454° 2.2821Å 4.7 100.4 (5.5) 40.277 (0.017) 2.2373 (0.0018) 40.275° 2.2375Å 4.7 43.5 (4.0)	$面積(\alpha 1)$ 190.8 (7. 3) 334.4 (9. 1455.3 (10 1) 844.2 (13 16.7 (4.1) 27.9 (4.6) 36.0 (6.0) 72.7 (7.4) 59.7 (4.2) 24.9 (3.0)
43パラメータでフィッティングした10プロファイル R=4.73%,面積=97.14% 晶化度 = 52.49(4.15)% ● AP: 非晶質ピーク(全面積=3062.7、非晶質面積=1455.3)	
e: C:¥ProgramData¥Materials Data¥Jade-X¥demo¥demo3ds.bin m: Quartz & Cristobalite an: 17.0°/41.5°/0.05°/1(s), I(p)=2000.0/19.0, Cu, 2013年8月30日, 11:28	
回折角(°) d(Å) 重心(°) 重心(d) BG 高さ 面積(α1) 20.844 (0.007) 4.2581 (0.0027) 20.842° 4.2587Å 6.4 268.7 (8.7) 21.981 (0.006) 4.0404 (0.0021) 21.979° 4.0408Å 6.2 401.0 (10.5 25.046 (0.172) 3.5526 (0.0481) 25.046° 3.5526Å 5.6 121.4 (5.4) 26.654 (0.005) 3.3417 (0.0012) 26.652° 3.3420Å 5.2 1213.7 (15. 28.440 (0.032) 3.1358 (0.0068) 28.438° 3.1360Å 4.9 32.1 (6.6)	面積(α1); 181.7 (7. 295.2 (9.; 1391.1 (9); 7) 835.2 (12 17.5 (4.5

■ 結果リストに表示する項目の変更方法

「プロファイル」タブに表示する項目は変更可能です。下図のようにヘッダ部分の「…」を クリックすると、各項目の表示/非表示を切り替えられます。チェックを外した項目は表示 されなくなります。また、初期状態では表示されない「積分幅」の項目にチェックを付ける ことで、積分幅を表示することもできます。

バッチ処理の結果をテキストファイルとしても出力する場合、そのテキストにデータに含まれる項目は、「プロファイル」タブに表示されている内容と同じです。

g c	u -	0 실 🕻	A 🖪 😰	♀ 左/右川	リック又直線	BG	▼ 擬 Voig	gt ▼ X=1	- ▼ ⚠ 初期	化 🕨	フィッティング	■▼ 実行 😂	RIR 🛛
	ب ر ا	キャン(12) 揖	最近のファイル	🚯 相りス	th (Ctrl: S∕M	しない) たと	<u>*</u> _ク(8)	回折線(0)	A	7 በንァイル (1	0) スキャン(1	2)
	#	回折角(*)	重心(*)	面積(α1)	積分幅(゜)	AP	(h k 🌔		回折角(°)	-			
1	:1	20.853	20.852°	195.2	0.728				2π/d				
1	:2	21.995	21.993*	326.6	0.711				4(8)				
1	:3	24.994	24.994°	1533.3	11.452	•			d(A)	2			
1	:4	26.655	26.653°	835.6	0.686			~	重心(°)	•			
1	:5	28.452	28.450°	16.4	0.485				重心(d)	-FU			
1	:6	31.445	31.443°	29.7	0.712				±,	5			
1	:7	36.086	36.084°	38.4	0.560				BG	ř			
1	:8	36.524	36.522°	76.4	0.642				高さ	2			
1	:9	39.454	39.453°	63.1	0.619				面待(~1)	6T			
1	:10	40.279	40.278°	26.4	0.591				щite(cti)	5			
2	51 👘	20.845	20.843°	185.5	0.687				面積(α1)%	10			
2	:2	21.981	21.979°	286.5	0.721				非対称性	IJ			
2	:3	24.997	24.997°	1463.6	11.452	•			形法用之	10 Alle			
2	-4	26.654	26.652°	827.6	0.684				자자쓰구	40 11			
	43/	ラメータでフィッティ	ィング した10プ	¤ファイル R=	:5.92%, 面積:	= 100.0	00%		FWHM(°)	ΔĘ			
								~	秸 分幅(°)				
									No(1)				
									XS(A)				
								~	AP				
								~	(h k l)				
										-			

表示される数値の桁数や ESD の表示/非表示などは、下図のツールバーで変更できます。桁 数の変更は、各設定ボタンの上でマウスホイールを回転させてください。

					🤣 < 🔹 >	
イッティング	≣▼ 実行 😂 R	IR 💆 IP	C 🖄 結晶:	7 💥 💷 ♬	🕰 🐜 🔽 💽 👌 🖹 🗭 🗐 - ⑤ - 🛞 相を検索	
R (0) 🌙	🛝 ጋ°ロファイル (10)	スキャン	(12)	の他: <u>Δ20±0.2</u>	0° <mark>3 ダ</mark> 2/1 d(nm) XS(nm) h k l CPS ESD 🕃 タブ(1	D)
酤積(α1)	面積(α1)%	非対称"	形状因子	FWHM(*)	XS(20) AP (hkl)	>
90.8 (7.7)	13.1 (0.5)%	0.020	0.773v	0.501 (0.012)	角度値リストの小数点以下桁数	
34.4 (9.3)	23.0 (0.6)%	0.020	0.753v	0.508 (0.008)	クリックして固定と自動を切り替え、スクロールして変更	
8 (103.5)	100.0 (7.1)%	0.000	1.000v	10.000 (0.332)	8 •	
4.3 (13.0)	58.0 (0.9)%	0.020	0.724v	0.488 (0.004)	178	
16.7 (4.1)	1.1 (0.3)%	0.020	0.000v	0.469 (0.042)	187	

■ 結果リストの表を Excel などにコピーする方法

「プロファイル」タブに表示された結果を、Excel などに表としてコピーすることができま す。結果リストの上(表の左の方)で右クリックし、「リストのコピー」を選ぶと、バッチ処 理の結果すべてをコピーできます。

特定のデータのフィット結果のみをコピーしたい場合は、右クリックメニューから「リスト をコピー」を選ぶときに、キーボードの[Ctrl]キーを押しながら選択してください。

. 😰	. 💡 ここを左列	ックしてスタ	- 协 直線 BG ▼	擬 Voigt •	¥⊒а-	· • / M. 初期化	; 🕨 フィッティンク
ا م •	キャン(12) 最近	:の7ァイル	🚯 相リスト (Ctr	: S/M Utar	2	・ ビーク(8)	回折線(0)
#	回折角(゜)				BG	高さ	面積(α)
1:1	20.853 (0.007)	4. 🕮	リストをコピー	<u>9</u> Å	6.2	267.2 (9.0)	190.8 (7.3
1:2	21.995 (0.005)	4.(🔳	リストを保存	4Å	6.1	463.0 (10.8)	334.4 (9.3
1:3	25.010 (0.174)	3.5 🔊	リストを印刷	Ctrl: 各자	ゃッから	選択したプロファ	(ルをコピー 103.5
1:4	26.655 (0.005)	3.3		9Å	5.8	1221.4 (16.1)	844.3 (13.0
1:5	28.453 (0.030)	3. 12	>E -9921	-7Å	5.6	33.4 (6.4)	16.7 (4.1
1:6	31.445 (0.022)	2.8 🧫	スカを除く	.8Å	5.4	41.5 (5.3)	27.9 (4.6
1:7	36.527 (0.025)	2.4 🔨	CIPERAN	11Å	5.0	118.5 (7.4)	72.7 (7.4
1:8	36.083 (0.037)	2.4 🛝	ブロファイルを除去	'3Å	5.0	68.6 (7.6)	36.0 (6.0
1:9	39.456 (0.010)	2.2 α.ž	Kα2をすべて除去	:1Å	4.8	100.4 (5.5)	59.7 (4.2
1:10	40.277 (0.017)	2.2	赤米大田中	'5Å	4.7	43.4 (4.0)	24.9 (3.0
2:1	20.844 (0.007)	4.: 🗹	変数を固定	• 17Å	6.5	268.7 (8.7)	181.7 (7.)
	. .	記録 そころを左列 # 回折角(*) 1:1 20.853 (0.007) 1:2 21.995 (0.005) 1:3 25.010 (0.174) 1:4 26.655 (0.005) 1:5 28.453 (0.030) 1:6 31.445 (0.022) 1:7 36.527 (0.025) 1:8 36.083 (0.037) 1:9 39.456 (0.010) 1:10 40.277 (0.017) 2:1 20.844 (0.007)	 スキャン(12) 最近のファイル オキャン(12) 最近のファイル ロ折角(*) 20.853 (0.007) 4. 回 21.995 (0.005) 4.(日) 25.010 (0.174) 3.(日) 25.010 (0.174) 3.(10) 25.010 (0.174) 3.(10) 28.453 (0.030) 3.(10) 28.453 (0.030) 3.(10) 31.445 (0.022) 2.(10) 36.527 (0.025) 2.(10) 36.083 (0.037) 2.(10) 39.456 (0.010) 2.(10) 39.456 (0.010) 2.(10) 30.456 (0.010) 2.(10) 31.10 40.277 (0.017) 2.(10) 21 20.844 (0.007) 4.(10) 	 ス+ャン(12) 最近のファイル 体相リスト(Ctrl) エートン(12) 最近のファイル 体相リスト(Ctrl) ロ所角(*) ロ所角(*) ロバトクロ(*) ロバトクロ(*)<!--</th--><th> スキャン(12) 最近のファイル スキャン(12) 最近のファイル 相リスト(Ctrl: S/M しな) ロ折角(*) ロ万方(*) ロ(*) </th><th> スキャン(12) 最近のファイル オーロ折角(*) ロ折角(*) ロがってスタート> ロがって、ロシック ロジェークリスト ロシック ロシック ロシック ロシック ロシック ロシック ロシック ロジェーク ロシック ロシック ロシック ロシック ロジェーク ロシック ロシック</th><th> スキャン(12) 最近のファイル 加折角(*) ロが角(*) ロがかくのののののののののののののののののののののののののののののののののののの</th>	 スキャン(12) 最近のファイル スキャン(12) 最近のファイル 相リスト(Ctrl: S/M しな) ロ折角(*) ロ万方(*) ロ(*) 	 スキャン(12) 最近のファイル オーロ折角(*) ロ折角(*) ロがってスタート> ロがって、ロシック ロジェークリスト ロシック ロシック ロシック ロシック ロシック ロシック ロシック ロジェーク ロシック ロシック ロシック ロシック ロジェーク ロシック ロシック	 スキャン(12) 最近のファイル 加折角(*) ロが角(*) ロがかくのののののののののののののののののののののののののののののののののののの

バッチ処理のすべての結果をコピーし、Excel に貼り付けると下図のようになります。

B2	Ŧ	: ×	✓ f _x	[C:¥Pro	gramData	Materials	Data¥Jade	-X¥demo¥	demo3ds.t	oin] Quartz	& Cristoba	alite				
	A	В	С	D	E	F	G	н	1	J	К	L	M	N	0	Р
1																
2		[C:¥Progra	amData¥N	laterials Da	ita¥Jade-X	¥demo¥de	emo3ds.bin] Quartz &	Cristobalit	е						
3																
4		#	回折角(°)d(Å)	重心(°)	重心(d)	BG	高さ	面積(α1)	面積(α1)9	非対称 ¹	形状因子	FWHM(°	XS(Å)	AP	(h k l)
5		1:01	20.853 (0.	4.2564 (0.	20.850°	4.2569Å	6.2	267.2 (9.0	190.8 (7.7)	13.1 (0.5)9	0.02	0.773v	0.501 (0.0	172		
6		1:02	21.995 (0.	(4.0379 (0.	(21.993°	4.0384Å	6.1	463.0 (10.	334.4 (9.3)	23.0 (0.6)9	0.02	0.753v	0.508 (0.00	169		
7		1:03	25.010 (0.	3.5576 (0.	25.010°	3.5576Å	5.9	127.0 (6.0	1454.8 (10	100.0 (7.1)	0	1.000v	10.000 (0.3	8	•	
8		1:04	26.655 (0.	(3.3416 (0.	26.653°	3.3419Å	5.8	1221.4 (16	844.3 (13.	58.0 (0.9)9	0.02	0.724v	0.488 (0.00	178		
9		1:05	28.453 (0.	(3.1344 (0.	28.450°	3.1347Å	5.6	33.4 (6.4)	16.7 (4.1)	1.1 (0.3)%	0.02	0.000v	0.469 (0.04	187		
10		1:06	31.445 (0.	(2.8426 (0.	(31.443°	2.8428Å	5.4	41.5 (5.3)	27.9 (4.6)	1.9 (0.3)%	0.02	1.000v	0.437 (0.04	204		
11		1:07	36.527 (0.	(2.4580 (0.	36.524°	2.4581Å	5	118.5 (7.4	72.7 (7.4)	5.0 (0.5)%	0.02	0.639v	0.449 (0.02	201		
12		1:08	36.083 (0.	(2.4872 (0.	36.081°	2.4873Å	5	68.6 (7.6)	36.0 (6.0)	2.5 (0.4)%	0.02	0.349v	0.428 (0.03	211		
13		1:09	39.456 (0.	(2.2820 (0.	(39.454°	2.2821Å	4.8	100.4 (5.5	59.7 (4.2)	4.1 (0.3)%	0.02	0.718v	0.430 (0.03	212		
14		1:10	40.277 (0.	(2.2373 (0.	(40.275°	2.2375Å	4.7	43.4 (4.0)	24.9 (3.0)	1.7 (0.2)%	0.02	0.146v	0.512 (0.02	175		
15		2:01	20.844 (0.	4.2581 (0.	20.842°	4.2587Å	6.5	268.7 (8.7	181.7 (7.1)	13.1 (0.5)9	0.021	0.628v	0.498 (0.03	173		
16		2:02	21.981 (0.	(4.0404 (0.	21.979°	4.0408Å	6.2	401.0 (10.	295.2 (9.3)	21.2 (0.7)9	0.021	0.887v	0.495 (0.0	174		
17		2:03	25.046 (0.	3.5526 (0.	(25.046°	3.5526Å	5.6	121.4 (5.4	1391.1 (96	100.0 (6.9)	0	1.000v	10.000 (0.3	8	•	
18		2:04	26.654 (0.	(3.3417 (0.	26.652°	3.3420Å	5.2	1213.7 (15	835.2 (12.	60.0 (0.9)	0.021	0.671v	0.495 (0.00	176		
19		2:05	28.440 (0.	(3.1358 (0.	(28.438°	3.1360Å	4.9	32.1 (6.6)	17.5 (4.5)	1.3 (0.3)%	0.021	0.507v	0.422 (0.0	211		
20		2:06	31.479 (0.	(2.8396 (0.	(31.477°	2.8399Å	4.3	38.7 (4.9)	28.5 (4.6)	2.0 (0.3)%	0.021	1.000v	0.478 (0.0	185		
21		2:07	36.528 (0.	(2.4579 (0.	36.526°	2.4580Å	3.2	106.6 (6.9	61.8 (6.5)	4.4 (0.5)%	0.021	0.278v	0.486 (0.02	184		
22		2:08	36.087 (0.	(2.4869 (0.	(36.085°	2.4871Å	3.3	61.0 (8.7)	38.6 (6.8)	2.8 (0.5)%	0.021	0.888v	0.427 (0.04	212		
23		2:09	39.455 (0.	(2.2820 (0.	(39.453°	2.2821Å	2.6	100.5 (5.5	59.3 (4.1)	4.3 (0.3)%	0.021	0.701v	0.429 (0.0	213		
									/	/			/			

B2		• : ×	√ f _x	[C:¥Pro	gramData ³	¥Materials	Data¥Jade	-X¥demo¥	demo3ds.t	pin] Quartz	: & Cristoba	lite					
	А	В	С	D	E	F	G	Н	1	J	K	L	М	N	0	Р	Q
1																	
2		[C:¥Progra	amData¥N	laterials Da	ata¥Jade-×	(¥demo¥de	emo3ds.bin] Quartz &	Cristobalit	te							
3																	
4		#	回折角(°)d(Å)	重心(°)	重心(d)	BG	高さ	面積(α1)	面積(α1)	9非対称	形状因子	FWHM(°	XS(Å)	AP	(h k l)	
5		1:02	21.995	4.0379	21.993°	4.0384Å	6.1	463	334.4	23	0.02	0.753v	0.508	169			
6		2:02	21.981	4.0404	21.979°	4.0408Å	6.2	401	295.2	21.2	0.021	0.887v	0.495	174			
7		3:02	21.986	4.0395	21.983°	4.0400Å	6	363.7	266	18.7	0.022	0.762v	0.513	167			
8		4:02	21.976	4.0413	21.978°	4.0410Å	4.6	312.7	231.4	17.5	-0.015	0.787v	0.515	167			
9		5:02	21.981	4.0405	21.985°	4.0398Å	4.1	277.1	193.1	14.3	-0.031	0.545v	0.527	163			
10		6:02	21.979	4.0408	21.982°	4.0403Â	0	249.8	180.8	13.6	-0.023	0.824v	0.497	173			
11		7:02	21.985	4.0397	21.988°	4.0392Å	0	162.4	112.9	8.7	-0.021	0.593v	0.517	166			
12		8:02	21.985	4.0397	21.980°	4.0406Å	5.1	117.7	87.7	7.3	0.036	0.877v	0.504	171			
13		9:02	21.965	4.0434	21.966°	4.0431Å	0	62.7	45.6	3.8	-0.009	0.501v	0.562	152			
14		10:02	21.985	4.0397	21.987°	4.0393Å	0	47.8	30	2.5	-0.022	0.895v	0.423	208			
15		11:02	21.981	4.0405	21.975°	4.0415Å	3.9	19.6	25	2.3	0.024	0.812v	0.902	92			
16		12:02	21.905	4.0544	21.905°	4.0543Å	0	10.6	3.2	0.3	-0.007	0.910v	0.207	515			
17																	
18																	

下図は1つのデータファイルの結果のみコピーし、Excelに貼り付けたものです。