

SmartLab Studio II

X線分析統合ソフトウェア

X線分析のすべてをこなす統合ソフトウェア



Rigaku

POWERING NEW PERSPECTIVES

SmartLab Studio IIは、全自動多目的X線回折装置 SmartLabによる測定、および得られたデータの解析を行う統合ソフトウェアです。SmartLab Studio IIは、調整・測定・解析・レポート作成まで、X線分析のすべての作業をサポートします。プラグインテクノロジーの採用により、SmartLabに必要な機能がいくつかのプラグインに分割されています。測定プラグインには、リガクの熟練者のノウハウを結集した「パーツアクティビティ*1」が用意されており、初心者の方でも、常に最高のデータを得ることができるよう設計されています。解析プラグインでは、用意されたフローバーに沿って誰でも簡単に解析を進めることができます。熟練者はソリューションツリーを使用して、一段上の解析を容易に行うことができます。



データベースを用いてあらゆる情報を一括管理

SmartLab Studio IIは、材料情報やユーザー情報だけでなく、測定データや解析結果、解析条件などあらゆる情報を、SmartLab Studio II独自のデータベースで管理することで、情報の管理を容易にします*2。バックアップ/リストアも簡単に行うことができ、装置管理者の負担を軽減します。

詳細なユーザー管理機能

SmartLab Studio IIでは、ユーザーが属するグループを設定し、グループに対して、詳細な権限設定を行うことができます。SmartLab Studio IIは、非常に多くの機能を備えているため、ユーザーによっては使用しない機能や使用させたくない機能があります。これをユーザー権限の設定によって、いわば「隠す」ことによって、使い易いソフトウェアに変身させることができます。

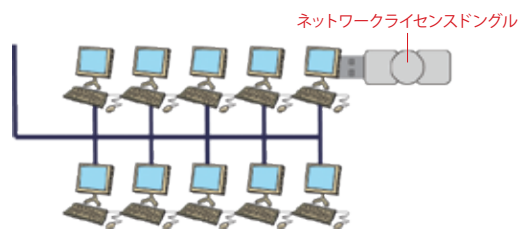
ER/ESモードと監査証跡

SmartLab Studio IIは、21 CFR Part 11などの電子記録/電子署名に関する規制に対応するためのER/ESモードと監査証跡機能を備えています（オプション）。ER/ESモードでログインすれば、すべてのデータはデータベースで管理され、すべての操作が監査証跡として保存されます。医薬品製造・販売での利用にとどまらず、データのトレーサビリティやインテグリティ（完全性）が必要な場面でも、ER/ESモードをお使いいただくことをお勧めします。

※2023年1月現在、対応しているプラグインは、XRD Measurementプラグイン、Data Managerプラグイン、Powder XRDプラグイン、XRD-DSCプラグインの4つのみです。

ネットワークライセンスに対応

1つのUSB dongleで、同一ネットワーク上にある10台までのPCでSmartLab Studio IIを同時に使用することができます*3。使用するPCにdongleを挿し直したりする煩わしさはもうありません。さらに、複数の人がSmartLab Studio IIを使用しても、測定データや解析結果はもとより、ユーザー情報や材料情報などを、データベースで一元管理しておくことができ、非常に便利です。



ログ表示機能

SmartLab Studio IIに表示されるメッセージは、ログとしてリスト表示されます。何か不具合が出た場合でも、ログを見れば解決できます。すべてのプラグインからのログが、1つのリストにまとめて表示されるため、ユーザーは、Loggingプラグインを確認するだけで事態を把握することが可能です。

分析データシステムLabSolutionsへの接続機能

SmartLab Studio IIは、島津製作所製のLabSolutions DB/CSと接続できます（オプション）。装置管理者は、LabSolutions対応の他装置とリガクX線装置のデータを一括して管理でき、各種規制に沿ったデータの信頼性を確保できるようになります。

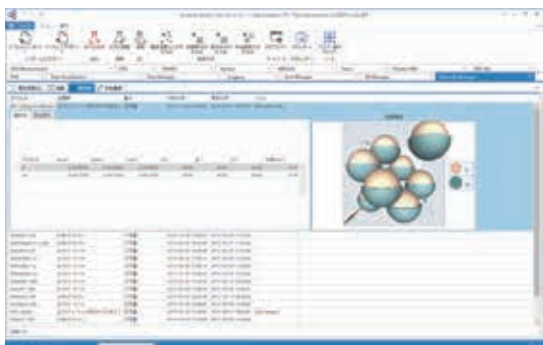
※2023年1月現在、対応しているプラグインは、XRD Measurementプラグイン、Data Managerプラグイン、Powder XRDプラグイン、XRD-DSCプラグインの4つのみです。

*1 スキャンや軸の移動を駆使して行われるひとまとまりの測定を「パーツアクティビティ」と呼びます。光学系調整/パーツアクティビティ、試料位置調整/パーツアクティビティ、反射率測定/パーツアクティビティなどがあります。
*2 これまで通り、Windows®のファイルシステムへの保存も可能です。
*3 ネットワーク10ライセンスの場合。ネットワーク5ライセンスの場合は5台になります。

なす統合ソフトウェア

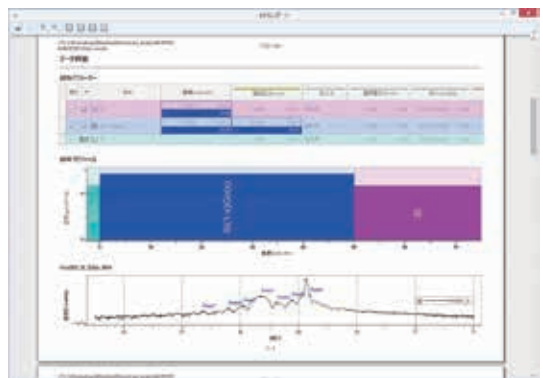
統一された材料データベース

従来、アプリケーションごとに用意されていた材料データベースは、4つのカテゴリーに分類され、1つのプラグインとしてまとめられました。複数のPCで使用する場合も、1つのデータベースをサーバーPCに作成し、ネットワークライセンスを使ってアクセスすれば、いつも同じ材料情報を使用できます。



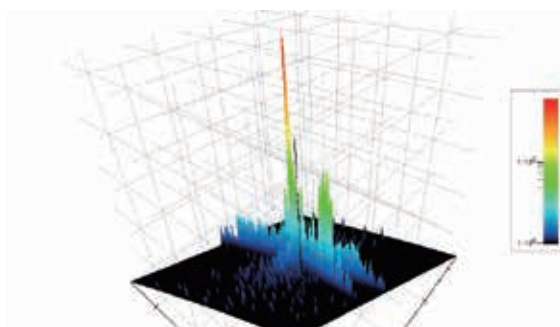
レポート作成ツール

レポートの作成は、フローバーもしくはリボンメニューから行います。レポートのコンテンツは、解析の内容に応じて予めいくつか用意されており、必要なコンテンツをダイアログボックスで選択します。また、決まったフォーマットでの簡易レポートを作成することもできます。



統一されたチャートコントロール

データを表示したり、グラフや3Dマップを表示したりするのは、チャートコントロールの役目です。チャートコントロールは、すべてのプラグインで同じものが使われており、どのグラフでも、どのマップでも、拡大／縮小などのマウス操作は全く同じです。色の変更、線の太さや軸ラベルのフォントなどは、チャートオプションによって自由に設定できます。チャートコントロールは、DirectXを使用して開発されており、きれいなグラフィックを実現しています。また、パフォーマンス性に優れているため、ストレスなく、グラフやマップを表示することができます。



フローバーによる解析のナビゲーション

X線分析初心者でも簡単に解析を進められるよう、解析プラグインには手順を示すフローバーが導入されています。フローバーに従って解析を進めれば、データの読み込みから結果の保存、レポート作成までを簡単に行うことができます。



その他の多彩な機能

- 自由な画面レイアウトの変更
- Undo / Redo機能
- CSVファイルへの出力 (有償にてカスタマイズに対応)
- 多重起動
- 表示言語の変更 (日本語 / 英語 / 中国語)
- XMLフォーマットに対応した新データフォーマット (RASX)



X線の専門家が作り上げた測定パッケージ

先進的な「ユーザーガイドンス」

SmartLabシリーズで好評であるガイドンス機能を搭載しました。測定に最適な光学系の選択は専門的な知識を必要としますが、ユーザーガイドンスは、専門家に代わって、装置にセットされている光学素子を自動認識し、目的とするアプリケーションに適しているかを判断します。さらに、より最適な光学系がある場合にはそれを提案して、光学素子の取り替えを指示します。アニメーションに従って操作するユーザーガイドンス機能により、装置の使用経験が少ない方でも光学系の変更を必要とする様々なアプリケーションを利用でき、熟練者と同様の測定を行うことができます*4。



測定フローの実行中に表示されるユーザーガイドンスの指示 (SmartMessage) に従って、光学素子を取り替えます。

光学系・試料位置調整の自動化

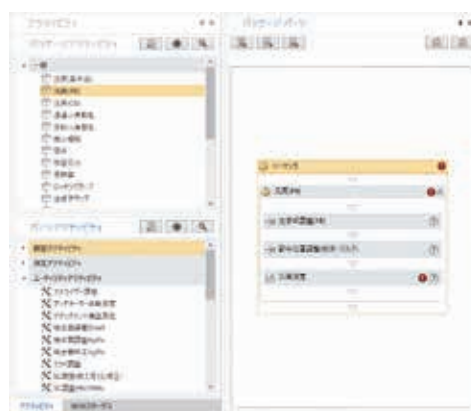
光学素子と試料位置の調整は、高精度の測定を行うために非常に重要であり、かつ、経験を必要とする作業です。XRD Measurementプラグインでは、複雑な調整作業が自動化されており、常に最高の精度で測定を行うことができます。調整結果は光学系とアタッチメントごとに保存されるため、光学系を変更した場合でも、調整された配置に容易に復元することができます。



調整結果は、光学系とアタッチメントごとに保存され、切替が可能です。

測定フローの作成と測定の自動化

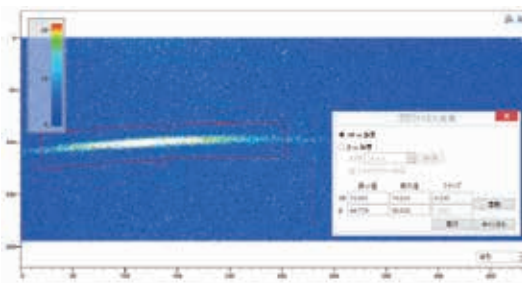
測定の手法ごとに、光学系調整、試料位置調整、データ測定が1つにまとまった、「パッケージアクティビティ」が用意されています。この「パッケージアクティビティ」を実行することで専門的な知識を必要とせずに、調整・測定を行うことができます。また、ユーザー自身によるフローのカスタマイズも容易に行うことが可能です。基本機能を組み合わせることで、独自の測定や自動メンテナンスのフローを作成することもできます。



「パッケージアクティビティ」を開くと、調整から測定までのフローが展開されます。

2次元検出器 HyPixに対応

ハイブリッド2次元ピクセル型検出器HyPixにより2次元回折データを取得することができます。HyPixはソフトウェアで切り替えるだけで1次元、0次元検出器としても使用できるため、測定の手法ごとに検出器を取り替える必要がありません。測定された2次元回折データは、XRD Measurementプラグインで、表示（拡大/縮小）、1次元プロファイルへの変換などを行うことができます。



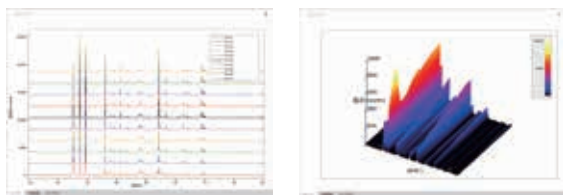
XRD Measurementプラグインで、2次元回折データの表示（拡大縮小）、1次元プロファイルへの変換が可能です。

Data Manager データ表示・処理・演算

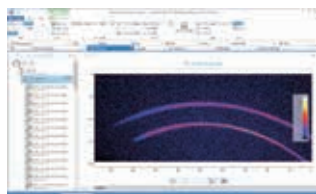
データの表示・処理・演算を簡単な操作で実現

データの表示

Data Manager プラグインは、測定で得られた複数のデータを比較するのに便利です。1次元プロファイルデータは、オフセット表示やマップ表示が可能です。2次元回折データの場合は、スライドショー機能により、データの変化を容易に追うことができます。



1次元プロファイルデータのオフセット表示とマップ表示



2次元回折データの表示

簡単なデータ処理

Data Manager プラグインでは、平滑化およびバックグラウンド除去により、データを加工することができます。また、ピークサーチも行うことができます。これらの機能は、1次元、2次元データともに共通の機能です。



ピークサーチ

データの演算

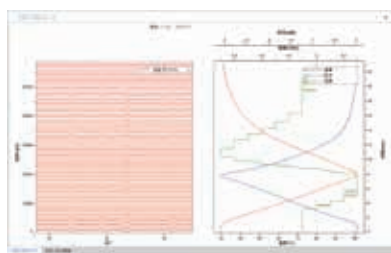
データの加算、減算、強度の定数倍など、簡単な演算を行えるほか、指定したX軸位置での強度または指定したピーク強度によるデータの規格化、データの切り出しなどの機能も備わっています。

XRD-DSC XRD-DSC解析

XRDとDSCの同時測定で得られたデータの簡単解析ツール

XRD-DSCデータの表示

XRDとDSCの同時測定で得られたデータは、XRD Measurement プラグインでも簡易表示できますが、XRD-DSCプラグインはカスタマイズ機能が充実しており、表示する温度範囲の変更や、データの間引き表示などが可能です。

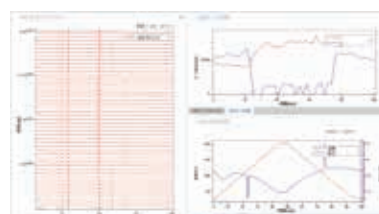
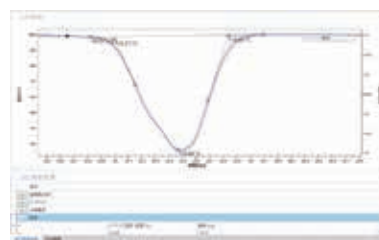


XRDデータの変化とDSCチャートの変化とのリンク

X線回折パターンの変化と、DSC測定による熱的な変化の関係を同時に可視化することができます。着目した回折ピークのパターンや強度などの変化を、DSCのチャートと並べて表示することで、材料の構造変化に対する知見を得ることができます。

DSC解析

従来はDSC解析するための専用ソフトウェアが必要でした。SmartLab Studio IIのXRDDSCプラグインには、DSCチャートの解析を行う機能が備わっており、融点や相転移点などのほか、溶解・凝固熱などの吸熱・発熱量を見積もることができます。



最新の統合粉末X線解析パッケージ

ハイブリッドサーチマッチにより定性能力が向上

ピーク位置およびプロファイル形状に基づいた結晶相検索の特長を融合させた「ハイブリッドサーチマッチ」により、結晶相検索の精度が飛躍的に向上しました。選択配向した結晶相や、複雑に格子変形した結晶相も同定できます。

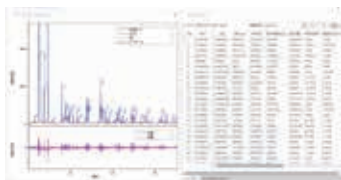
リートベルト解析をより身近なものに

データベースからの結晶構造パラメーター取得、解析条件設定、結晶構造表示、定量結果表示まで簡単に操作できるインターフェースが用意されていますので、どなたでも簡単にリートベルト解析を行うことができます。

基本パッケージ

▶ 全自動プロファイルフィッティングによる迅速な結果算出

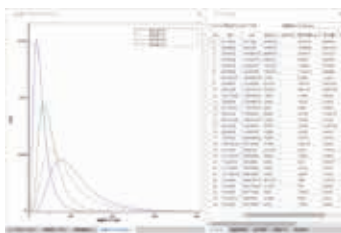
測定データを読み込むだけで、全自動プロファイルフィッティングが行われ、ピーク位置、半値幅、積分強度、Scherrer法による結晶子サイズなどが直ちに算出されます。



ピークリスト
プロファイルフィッティングより得られる詳細な処理結果の一覧を表示します。

▶ 結晶子のサイズ分布評価も可能

ファンダメンタルパラメーター法 (FP法) を用いれば、測定時の光学系情報から理論的なピーク形状が計算され、結晶子サイズの分布など、より詳細な解析結果が得られます。



結晶子サイズ分布
回折ピークの形状から結晶子サイズとサイズのばらつき (サイズ分布) を解析できます。

DD法パッケージ (オプション)

▶ DD法での定量が可能

DD法に基づいて各結晶相の化学組成とピーク強度の総和を用いた定量が可能です。未知の不純物や非晶質相の定量値の推定に利用できます。また、単相プロファイルが測定できれば、その測定プロファイルを用いて混合相の定量ができます。

定量パッケージ (オプション)

▶ 検量線作成が簡単に

定量オプションでは各種検量線法 (外部標準法、内部標準法、標準添加法) を利用できます。ソフトウェア上でピーク強度の抽出とデータプロットができ、簡単に検量線を作成・利用できます。検量線法による定量分析は、特定の結晶相の定量・管理に便利です。

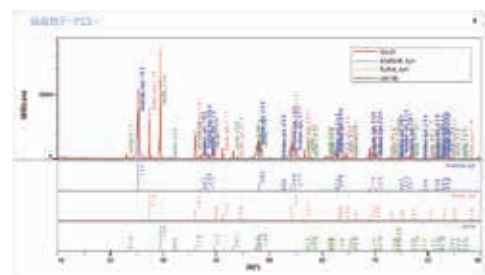
定性パッケージ (オプション)

▶ ハイブリッドサーチマッチによる柔軟な検索

リガク独自の「ハイブリッドサーチマッチ」では、複雑な格子変形を検出できるピークベース定性の長所を活かし、同定困難とされる固溶相も容易に同定できます。また、分離されたピーク強度を用いて選択配向の有無も判定するため、既存のプロファイルベース定性にはない、柔軟な検索を実現しました。



配向試料や固溶体でも 分離されたピーク強度を用いて、選択配向の有無や複雑な格子変形を自動判定します。



段書き表示 段書き表示で同定相の比較も容易です。

応用解析パッケージ (オプション)

▶ 多彩な解析も思いのまま

測定データの読み込みと同時にされる全自動プロファイルフィッティングの結果から、結晶子サイズと格子歪、格子定数、結晶化度といった応用解析結果が直ちに得られます。これらの応用解析結果は構造と物性との相関を調べたり、試料間での結果比較などに役立ちます。

リートベルト解析パッケージ (オプション)

▶ 結晶相同定結果の利用

試料に含まれている相が不明な場合は、結晶相を同定した後、リートベルト解析に進みます。リートベルト解析に必要なパラメーターの初期値は、結晶相同定の直後に測定データから自動的に見積もられるため、初めての方でも簡単にリートベルト解析を行えます。

▶ リートベルト法による定量分析

検量線法では試料に標準物質を混合して検量線を作成する必要がありますが、リートベルト法では被検試料の測定結果から、直接、定量結果が得られます。

▶ WPPF法による格子定数精密化

リートベルト法または全パターン分解法 (Pawley法) による格子定数の精密化は、測定ピークの位置だけでなく、形状にも基づいて行われます (WPPF法)。内部標準相や外部標準試料による角度補正を行い、より正確な値を求めることができます。

▶ FP法による理論ピークプロファイル計算

測定時の光学系および結晶子サイズ分布を考慮した理論ピークプロファイルを計算するファンダメンタルパラメーター法 (FP法) は、セメント試料など、多数の結晶相が含まれる試料の解析に威力を発揮します。



FP法によるリートベルト解析

構造決定パッケージ (オプション)

▶ 未知結晶構造解析に必要な機能を集結

未知結晶構造解析の初期構造の決定では、一つの手法だけでは初期構造が得られない場合があります。構造解析オプションでは、パラレル・テンパリング法による直接空間法やチャージフリッピング法の他に、未知結晶構造解析に定評があるEXPO2014との連携による直接法やシミュレートド・アニーリング法による直接空間法も使うことができ、幅広い解析手法の選択肢を提供しています。

※指数付けと構造精密化には、リートベルト解析パッケージが必要です。

※EXPO2014は、構造決定パッケージに含まれます。EXPO2014の使用には、使用に関する承諾書に同意する必要があります。

▶ OChemDBの情報を束縛条件に利用

粉末構造解析では、リートベルト解析を行うと、原子間距離や結合角度が合理的な値から離れてしまうことがあります。構造決定パッケージでは、OChemDBの情報をリートベルト解析時の束縛条件として設定することができます。これにより、未知の結晶構造でも、合理的な構造を保ったまま、リートベルト解析を行うことができます。

※OChemDBは、CNR ICのグループにより作成された、原子間距離などの情報が納められた、インターネット上で公開されているデータベースです。

※OChemDBを使用するには、インターネット環境が必要です。また、データベースサーバーのメンテナンス等により、予告なく使用できなくなる場合があります。



有機物の結晶構造精密化

Powder XRDプラグインで使用できるデータベース一覧 (2019年8月1日現在)

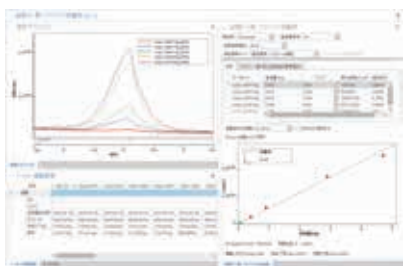
データベース名	エントリー内容	エントリー数	構造パラメーター
ICDD PDF-2	主に無機化合物	311,500+	無し
ICDD PDF-4+	主に無機化合物	426,000+	75%有り
ICDD PDF-4/Minerals	無機化合物 (鉱物)	47,000+	80%有り
ICDD PDF-4/Organics	主に有機化合物	538,500+	20%有り
ICDD PDF-4/Axiom	無機化合物	92,600+	40%有り
COD	無機20%、有機80%	308,000	有り
日本結晶学会DB	無機化合物	11,000	有り
リガクセメントDB	セメント化合物	72	有り

※ネットワークライセンスには対応していません。使用するPCの台数分、ご購入ください。

法令に準拠した スマートな定量処理を実現

遊離けい酸・アスベスト定量オプション

粉じん中の遊離けい酸やアスベストの定量を行う分析業界では、試料数が非常に多く、操作の簡便さや解析時間の短縮が求められます。SmartLab Studio IIでは測定から解析までを簡単かつ迅速に行うことができます。このオプションでは、フィルター捕集した粉じんの捕集前後でピーク強度を比較し、基板のピークから集じん量を補正する、基底標準法に基づいて定量分析を行います。被検相の指定は基本部の定性分析と同様にグラフィカルに行われ、ピークの積分処理範囲も簡単に設定できます。計算や出力形式はJIS法やNIOSH規格に準拠しており、簡単に切り替えが可能です。また、レポートフォーマットはカスタマイズ可能であり、「データセットパラメータ情報」を編集し任意の列データを表に取り入れることができます。これらの条件はテンプレートとして登録することができ、作業効率の向上が期待できます。

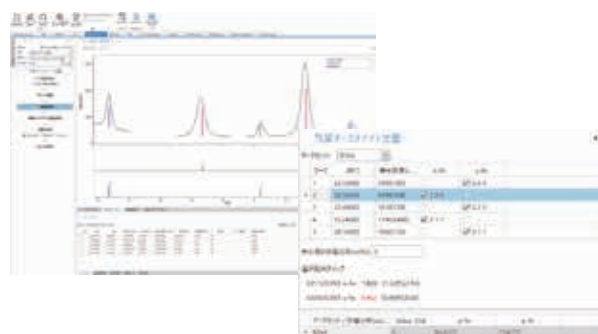


規格ASTM-E975に準拠した 残留オーステナイト定量

残留オーステナイト定量オプション

炭素鋼を焼入れする際、高温域で安定なオーステナイトが冷却過程でマルテンサイト変態せずに残ったものを残留オーステナイトと呼び、この残存量が鋼材の硬さあるいは加工性に大きく影響します。

このオプションでは、XRDデータから鋼材表層に存在するオーステナイトの定量分析が行えます。規格ASTM-E975に準拠して、マルテンサイト相 (α') とオーステナイト相 (γ) の複数回折ピークの積分強度比から γ 相の体積分率を算出することができます。鉄炭化物が同定される場合は、炭化物相の体積分率を入力して定量値を再計算することも可能です。また、 α' 相および γ 相の特定回折ピークの相対強度比 ($I_{\alpha 211} / I_{\alpha 200}$ 、 $I_{\gamma 220} / I_{\gamma 200}$) から、選択配向の有無を簡易的に評価できます。

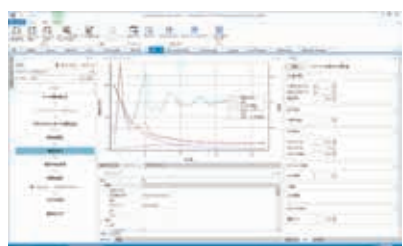


PDF PDF解析

非晶質材料の解析に貢献

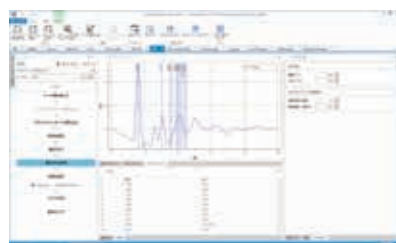
RDF,PDFの算出

測定で得られたX線回折パターンから、試料と容器（セル）の吸収を加味して試料のみの散乱強度を抽出後、コンプトン散乱強度を含む強度を補正することで $S(Q)$ （構造因子）が得られます。 $S(Q)$ のフーリエ変換によってPDF（二体分布関数）やRDF（動径分布関数）を導出します。



PDFの短距離領域を使った補正（リップル除去）

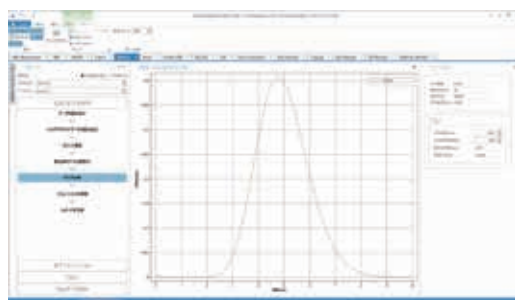
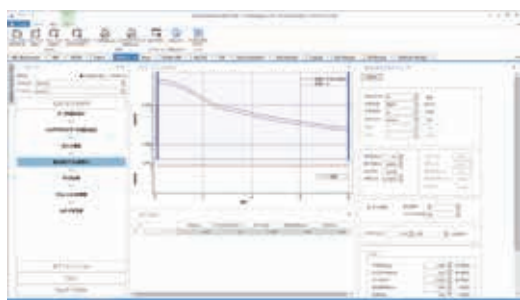
測定から得られた $S(Q)$ をフーリエ変換したPDFでは、原子間の最近接距離よりも短い距離にピークが現れることがあります。PDFプラグインでは、原子間の最近接距離とこの短距離のピークを加味した $S(Q)$ の補正機能を搭載しており、PDFでの不自然なピークを合理的に除去できます。これにより、不自然なピークを気にすることなく、結晶構造から計算される原子間距離との対比から、非晶質における原子配列を検討することもできます。



ナノオーダーからサブミクロンの粒径・空孔径分布を簡単に算出

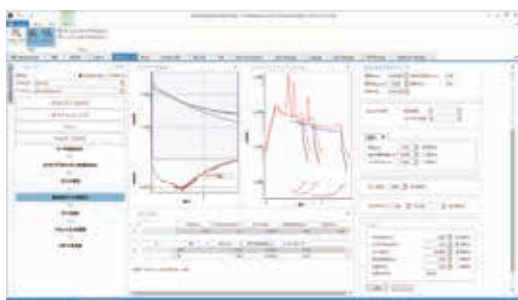
粒径・空孔径分布解析

小角散乱データに基づいて、粉末、バルク、薄膜、液体中に存在する1～100nm程度の粒子や空孔のサイズ分布を解析します。さらに、超小角 (U-SAXS) 光学系で測定すれば、1000nm程度のサイズまで解析できます。球、コアシェル、円筒、回転楕円体と言った様々な形状の粒子や空孔を解析できるほか、特定の形状を取らない場合でも解析できるデバイモデルを搭載しています。加えて、粒子・空孔が高密度に存在する場合の構造因子も考慮して、より正確なサイズ分布を算出することができます。



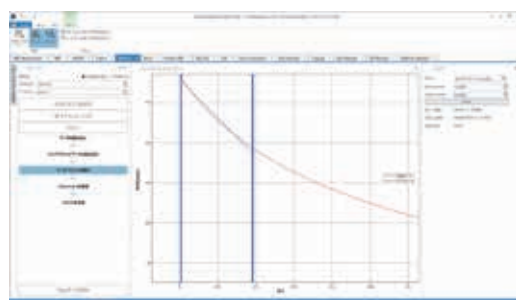
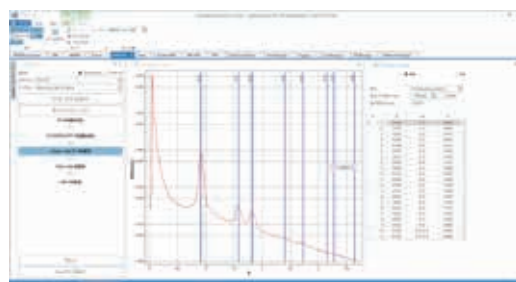
薄膜中の粒径・空孔径分布をより精密に解析

薄膜試料における粒子・空孔のサイズ分布は、薄膜表面および界面のラフネスによる散乱を考慮することで、より精密に解析できます。本手法は、特に粒子や空孔の絶対量が少ない場合や、サイズが小さい場合などに威力を発揮します。XRD測定プラグインでは、本解析を行うために必要なデータを収集するためのパーツアクティビティが用意されており、試料に関するいくつかの情報を入力するだけでデータ収集も簡単に行えます。



格子シミュレーションとギニエ/クラツキプロット

最小二乗法を用いた粒径・空孔径分布解析だけでなく、簡単な方法で1次元または2次元格子による回折線位置のシミュレーションを行えます。ギニエプロットによる慣性半径の算出も、簡単な手順で行えるようになっています。



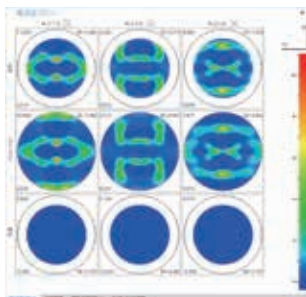
スリット補正

小角散乱データは、特にアンブレラ効果の影響を大きく受けるため、得られる散乱強度パターンは大きく歪んでいます。これを補正するのが「スリット補正」です。MRSAXSプラグインでは、リガク独自のアルゴリズムで、正確な散乱強度パターンを再現し、より正確なサイズ分布解析を行います。

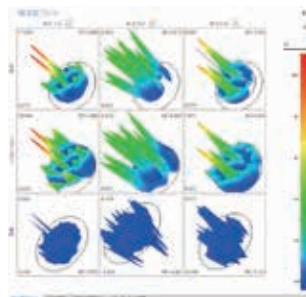
フローバーによるステップ方式で結晶方位分布図を簡単に計算

極点図作成と表示

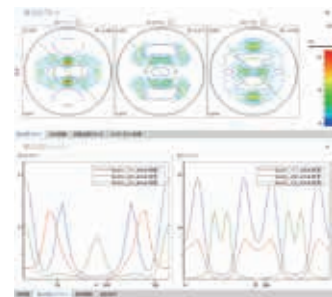
Texture プラグインでは0次元もしくは2次元検出器で測定された極点図からODF解析 (Orientation Distribution Function) を行うことができます。極点図のデフォーカス補正、吸収補正などの補正の機能はもちろんのこと、平滑化、回転、リグリッド等の極点図処理、極点図の接続機能も備わっています。2次元回折データから極点図を作成するための機能も搭載されており、2次元回折データに対する偏光補正、吸収補正も可能です。また、極点図を様々な形式で表示することができます。



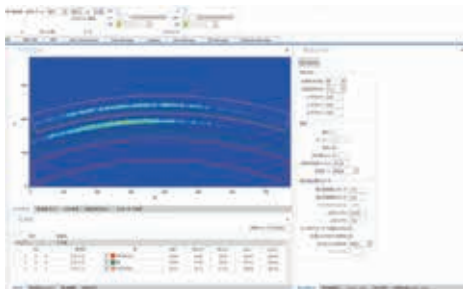
ステレオ投影図



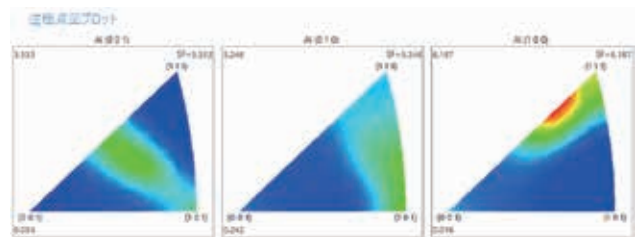
極点図3D表示



極点図 カットライン



2次元回折データからの極点図作成

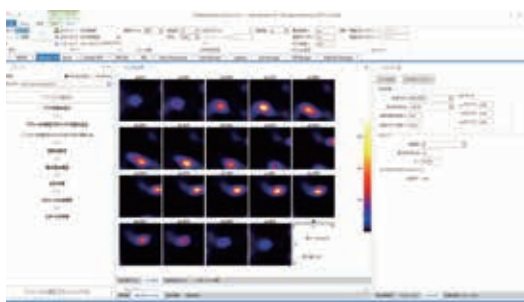


逆極点図

ODF計算 (オプション)

ODF計算ではWIMV^{*5}とコンポーネント近似の2つの解析手法を選択することができ、両手法で結晶方位分布図の計算、また、任意の指数に対する全極点図の再計算が可能です。コンポーネント近似には2つの最適化アルゴリズムがあり、その1つである遺伝的アルゴリズムを用いると、パラメータを実測極点図に前もって合わせることなく解析を行うことができます。得られた結晶方位分布図から逆極点図も作成可能です。

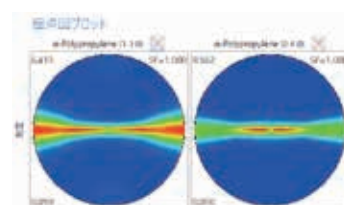
*5 Williams-Imhof-Matthies-Vinel (WIMV) method [Williams 1968, Imhof 1982, Matthies et Vinel 1982]



結晶方位分布図

配向関数の算出

透過・反射極点による極点図の接続、もしくはODF解析による再計算全極点図により配向関数を算出することができます。極点図の「情報」を、配向度合いを示す「数値」として比較、管理できます。製造法の違いなどによる物性値やパフォーマンスの差異を、極点図からの配向関数とリンクさせて評価可能です。



極点図プロット ODF結果 逆極点図プロット コンポーネント結果

配向関数

結晶相: *m*-Polystyrene (1.10) 計算に使用する極点図: 測定 (1)

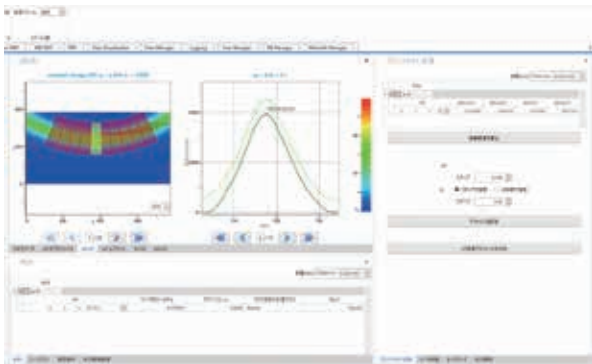
Direction	h <i>h</i> 0	RD	TD	Intd	Intd	Intd
[1 1 0]	0.406	0.079	0.518	0.109	-0.382	0.278
[0 4 0]	0.555	0.032	0.414	0.332	-0.413	0.121
a軸	0.382	0.105	0.513	0.072	-0.342	0.269
b軸	0.555	0.032	0.414	0.332	-0.413	0.121
c軸	0.054	0.685	0.061	-0.418	0.327	-0.409

配向関数の算出

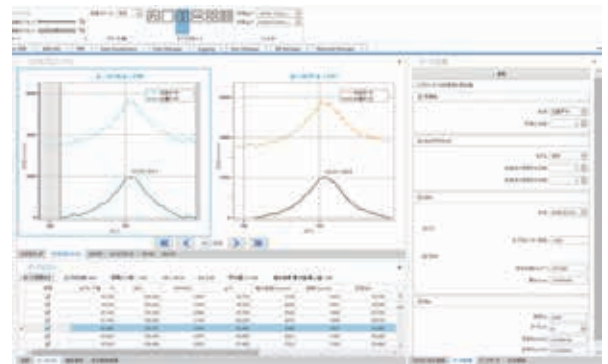
品質管理から研究開発まで幅広い目的に対応する応力解析プラグイン

残留応力解析

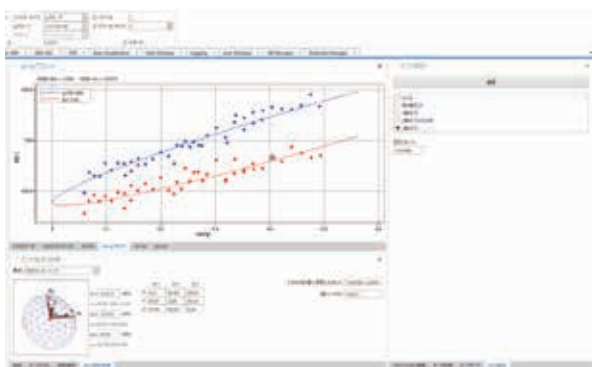
Stressプラグインでは、多結晶材料の残留応力状態をX線回折データから定量的に評価することができます。一般的な $\sin^2\psi$ 法による応力解析だけでなく、平面応力状態 ($\sigma_{11}, \sigma_{22}, \sigma_{12}$) あるいは3軸応力状態 ($\sigma_{11}, \sigma_{22}, \sigma_{33}, \sigma_{12}, \sigma_{23}, \sigma_{13}$) を仮定した応力テンソルや主応力の解析を行うことができます。また、薄膜材料の応力解析に有効な手法として、異なる回折格子面の歪み ε^{hkl} から膜の平面応力状態を解析するMultiple-hkl法も搭載されています。データ処理機能としては、0次元、1次元および2次元検出器で測定された各データを読み込み可能で、2次元回折データの切り出しや1次元プロファイルのピーク処理（スムージング・バックグラウンド除去・LPA補正・ $K\alpha_2$ 除去・ピークサーチ、または、プロファイルフィッティング）を簡単に行うことができます。その他、豊富な材料データベースを基に、測定に使用する結晶格子面の無歪み回折角 $2\theta_0$ やX線の弾性定数 (E, ν, K, S_1, S_2) の計算機能などを備えています。微結晶粒子間相互作用 (grain interaction) の計算モデルには、Reuss (粒子間で応力一定)、Voigt (粒子間で歪み一定)、Neerfeld-Hill (Reuss-Voigtの相加平均)、およびKröner (多結晶母相中に弾性異方性を有する球状単結晶粒が介在) の各種モデルを任意に選択できます。高い操作性と充実した機能により、品質管理から研究開発まで幅広い目的に応じた応力解析が可能です。



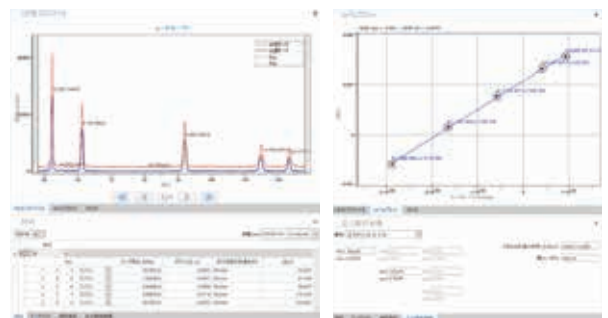
2次元回折データの切り出しと分割強度積算された1次元プロファイル



1次元プロファイルのピーク処理



3軸応力解析と $2\theta - \sin^2\psi$ 線図の ψ スプリット



Multiple-hkl法による薄膜応力解析

シンプルな膜厚解析から詳細な多層膜構造解析まで対応するX線反射率解析ソフトウェア

反射率プラグインはX線反射率測定データの解析プラグインです。このプラグインを使うことで、多様な多層薄膜の膜厚、密度および表面・界面のラフネスを解析することができます。

各種プラグインと共通のフローバーインターフェースを備え、フローに従って作業することで、反射率解析の手順に不慣れな初心者でも、プロと同様のデータ解析が行えます。

従来の非線形最小二乗法による反射率解析では、ローカルミニマムが解として求まり、解析初期モデルやオペレーターの技量に依存して、最終解が異なるという問題が起ることがあります。本反射率プラグインでは、多数の解を自動的に探索する最新のフィッティングアルゴリズムを使用することで、初期モデル、オペレーター依存性のない解析が可能になります。

最新フィッティングアルゴリズム

反射率解析に特化した遺伝的アルゴリズムを用いて、真の解(グローバルミニマム)を見つけることにより、オペレーター依存性を最小化します。また、このアルゴリズムを用いることで、初期モデルが最終解から大きく離れている場合でも、解を効果的に見つけることができます。

デュアルフィッティングアルゴリズム

より精密な解析のために、デュアルフィッティングアルゴリズム(遺伝的アルゴリズムと最小二乗法)を搭載しています。遺伝的アルゴリズムでグローバルミニマムを見つけた後、最小二乗法を用いて、さらに精密なフィッティング解析を行います。またこの際、膜構造パラメーターの下限、上限を設定したり、パラメーター間に多様な束縛をかけることで、解析精度を向上できます。

拡張フーリエ膜厚解析

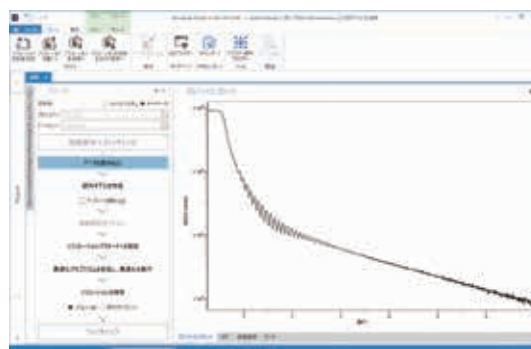
拡張フーリエ膜厚解析を用いることで、フィッティング解析をせずに膜厚情報の概算が可能です。また、膜厚概算値をフィッティングモデルに適用することで、より最終解に近い初期モデルを作成でき、解析時間を短縮できます。

多彩なモデリング機能

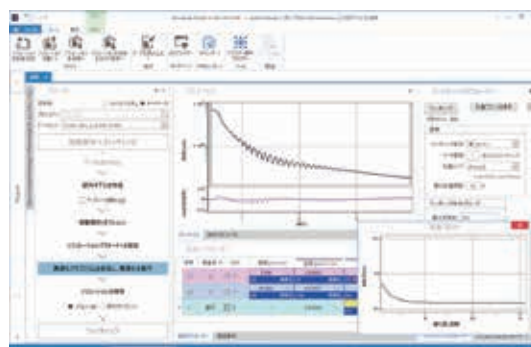
1つの層内部に密度傾斜を設定できるほか、超格子構造についても密度・膜厚傾斜を設定できます。界面拡散などの複雑な構造や、不均一な多層膜の解析にも対応します。

測定に使用したX線光学系モデルを設定し、フィッティング解析の際に光学系の分解能を考慮することで、より精密な解析ができます。

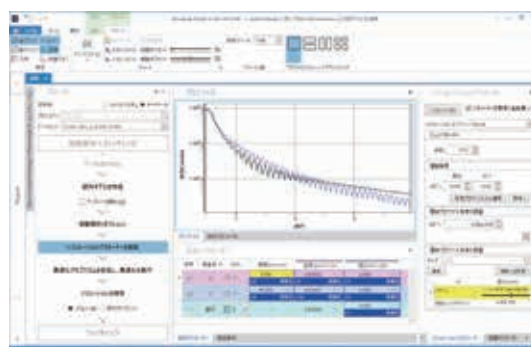
解析結果の試料パラメーターはテンプレートとして保存することで次回以降の解析に利用できます。複雑な膜構造の解析もスムーズに開始することが可能です。



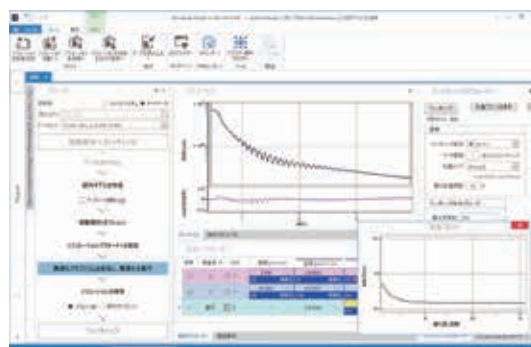
フローバーは測定データの読み込みから始まります。



モデルの作成、拡張フーリエ膜厚解析による膜厚の概算を行います。



フローバーに従って、フィッティングモデルを作成します。



フィッティング解析の際には、パラメーターの下限、上限、束縛など、必要に応じて詳細な設定が可能です。

エピタキシャル薄膜評価のための逆格子マップ・ 高分解能ロックンングカーブ統合プラグイン

逆格子マップと高分解能ロックンングカーブの解析を1つのプラグインで実現しました。化合物半導体などのエピタキシャル薄膜の解析において、結晶方位やひずみ状態を評価する逆格子マップ解析から、膜厚や組成比評価のための高分解能ロックンングカーブ解析まで、シームレスな解析が行えます。

最新の材料系に対応

試料面内の2方向の方位を指定する「アンカーパラメーター」の導入により、面内異方性のある基板材料を用いたエピタキシャル薄膜の解析に対応しました。これにより、面内非等方な応力場における、エピタキシャル薄膜の非等方弾性変形を解析することができます。例えば110面のシリコン基板やr面のサファイア基板などに成膜したエピタキシャル薄膜など、最先端材料への適用が可能です。

優れたピークサーチ・画面表示機能

逆格子マップデータの解析時に頻繁に使用する機能を簡略化しました。逆格子マップデータのゴニオメーター座標・逆空間座標の表示切替や、2次元回折データにも適用できる高度なピークサーチ機能が1クリックで実行され、正確な逆格子点座標が簡単に求められます。試料モデルから計算されるシミュレーションを測定データ上に重ねて表示する機能により、測定結果の解釈も容易です。

多様な膜構造モデルに対応

複雑な多層膜構造を有する試料でも、パラメーターの層間リンク機能や超格子モデリング機能により、構造モデルをスムーズに作成することができます。歪状態を記述するパラメーターとしては、面内2方向の緩和率・面内歪・格子ミスマッチの3つから選択可能です。多層膜の方位ずれ（傾き・ねじれ）の設定、モザイク性の評価機能も追加しました。

各パラメーターの値はスライダーバーによる微調整が可能です。試料プロファイルチャートでは表示色を結晶相ごとに設定することで、複雑な試料構造も視覚的にわかりやすく表示できます。

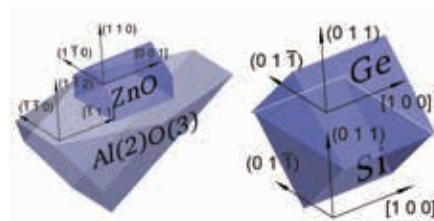
複数データの同時フィッティング機能

1つの膜構造モデルに対して、反射指数の異なる複数の測定データを、同時にフィッティングする機能を備えました。解析に使用した各測定データ・膜構造モデルは、データ間の関連付けを行った状態でプロジェクトとして保存されるため、解析条件と解析結果の管理が容易です。

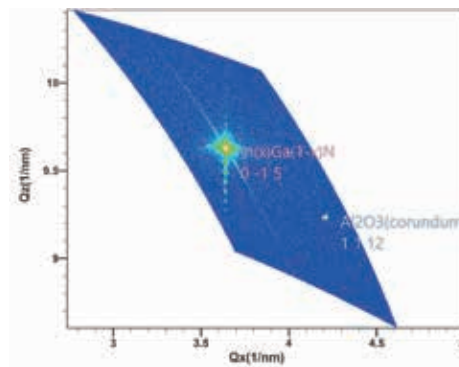
正確・迅速なフィッティング解析

フィッティングアルゴリズムとして遺伝的アルゴリズムと最小二乗法を採用しました。束縛条件や上下限設定を行うと、多数のパラメーターを同時にフィッティングしても値が発散しにくく、安定した解析結果が得られます。

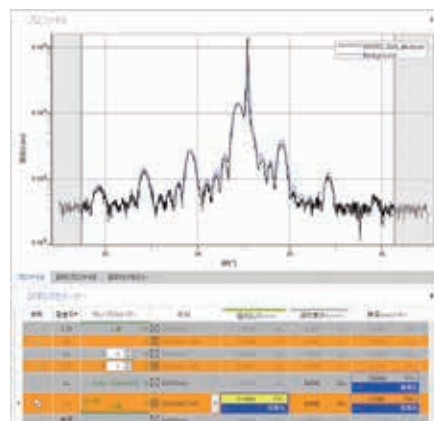
理論プロファイル計算に4波近似・再帰マトリクス理論などを取り入れることで、すれすれ入射の配置での測定や、完全緩和・部分歪・完全歪といったエピタキシャル薄膜の歪状態が、より正確に再現されます。



面内異方性のあるエピタキシャル薄膜モデル



逆格子マップ測定データと指数表示



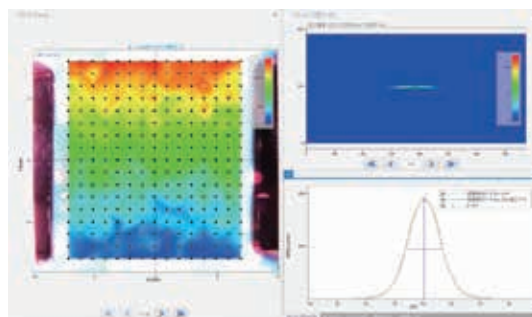
超格子膜のロックンングカーブ解析

大量データ解析の超効率化

高速検出器の出現により、短い時間で大量のデータを収集することが可能になりました。Data Visualizationプラグインでは、温度変化測定などオペランド測定で収集した数千個のデータを、効率的に処理し、結果をわかりやすく表示します。

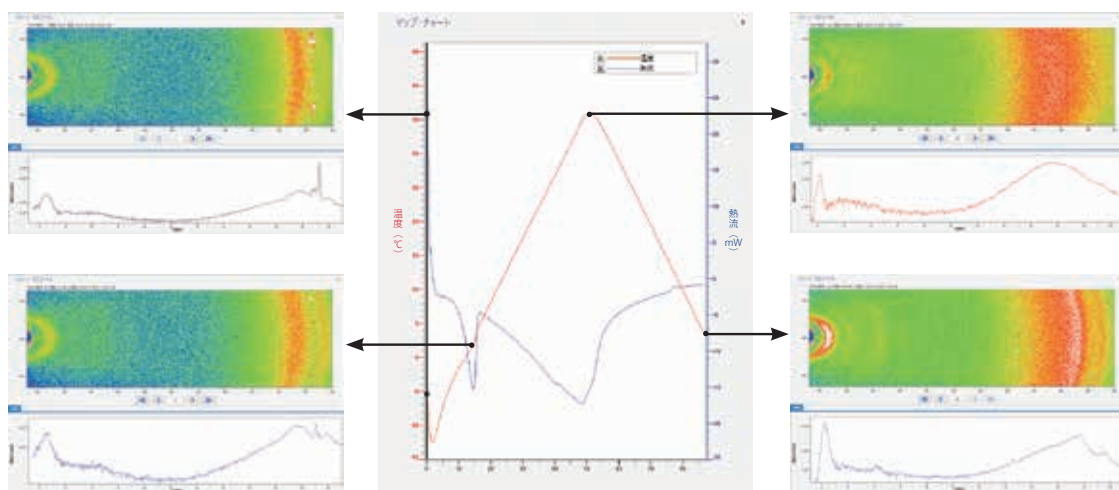
XYマッピング

XRD測定プラグインで用意されたXYマッピング測定パーツアクティビティを使用すれば、簡単な設定でXYマッピング測定を行います。各データには測定位置(XY座標)が記録されるので、試料画像に、X線回折測定データから得られる物理量を簡単にマッピング表示できます。マッピングできる物理量は、ピーク情報(位置、FWHM、高さ、積分強度など)のほか、結晶相の重量比(定量結果)、結晶子サイズ、 $\sin^2\psi$ 法による応力解析結果、などです。



オペランド測定

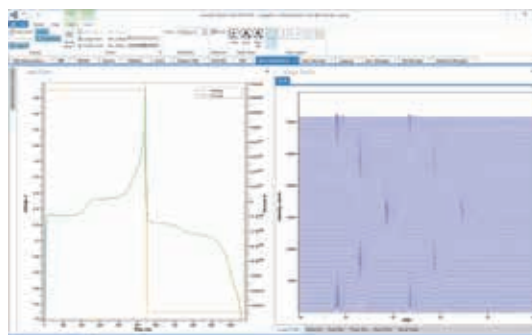
温度や湿度などを変化させながら、X線回折測定などを行い、温度や湿度とともにX線回折パターンが変化する様子を簡単に確認することができます。ウィンドウの左側に温度や湿度のグラフ、右側にX線回折パターンが表示されます。左側のグラフで、ある温度や湿度を指定(クリック)すると、その温度や湿度でのX線回折パターンが右側に表示されます。スライドショーを表示することもでき、X線回折パターンの変化を簡単に視覚的に把握することが可能です。



試料:生クリーム

測定開始の同期とテキスト読込機能

本ソフトウェアでサポートされていないアタッチメントでも、デジタル信号と同期したX線回折測定ができます。Data Visualizationプラグインでは、外部アタッチメントで出力される時間vs物理量のテキストファイルがあれば、それを読み込んで、オペランド測定と同様の表示が可能です。



Cluster Analysis クラスター解析

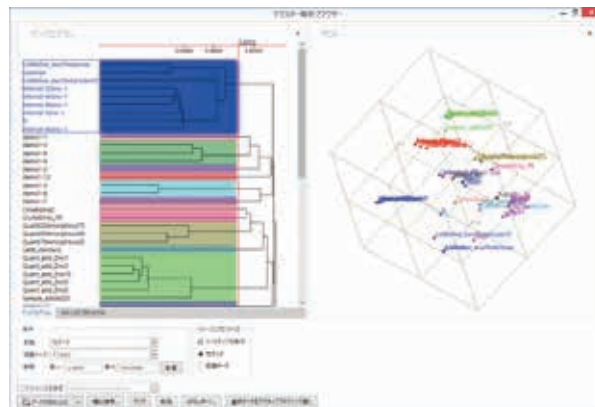
多数のデータの分類と抽出に

デンドログラムと主成分分析

クラスター解析モジュールでは、データの種類や次元を問わず、クラスタリング（類似度で分類）することができます。クラスタリングされたデータは、デンドログラム（樹形図）で表示され、類似度の閾値を変えることによって、自由にクラスターの数を変化させることができます。また、主成分分析により、類似データ間の相関をPCAビューにてわかりやすく表示します。

基準データに類似したデータを抽出

あらかじめ基準データ（レファレンスデータ）を設定しておくことで、指定したフォルダーに含まれるデータから、基準データに類似したデータのみを抽出できます。過去のデータを検索する場合などに便利な機能です。



動作環境

OS	Microsoft® Windows® 10 Pro (64-bit版) (日本語または英語 (米国))
CPU	Intel® 第2世代 Core™ i5 (第5世代Core i5 以上を推奨)
ビデオアダプター	Microsoft® DirectX® 10.1とシェーダーモデル4.0をサポート ビデオメモリ512 MB (1 GB以上を推奨)
ネットワーク	Ethernetアダプター・通信速度100Mbps (1Gbps以上推奨)*6
ディスプレイ	解像度 1920×1080 ドット以上 (96 dpi以下を推奨)
メモリ	8 GB 以上 (16 GB以上を推奨)
ストレージ容量	3 GB以上の空き容量*7
USBポート	装置制御用PC、および、USB dongleを装着するPCの場合に、一つ以上 (USB1.1またはUSB2.0対応)
その他	DVDドライブ、Adobe® Acrobat Reader (ユーザーマニュアル表示用)

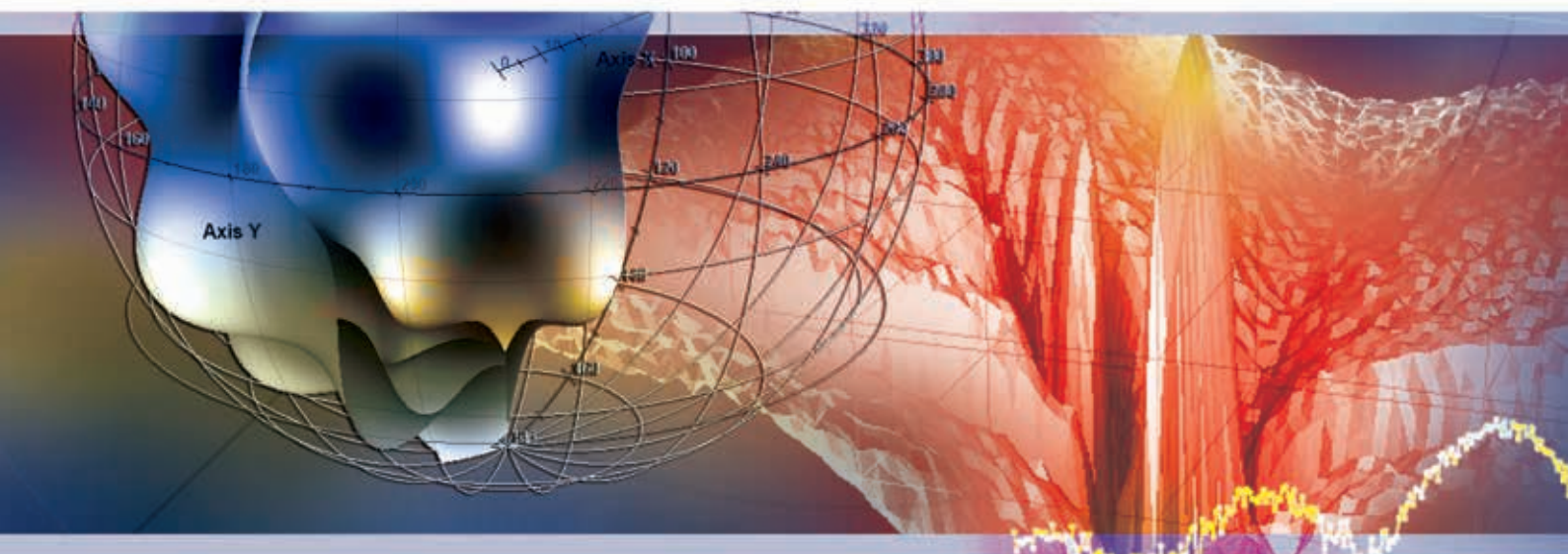
*6 データベースやライセンス認証をネットワーク経由にする場合。

*7 SmartLab Studio II 本体以外の容量を含んでいません。ICDD PDF-2等をインストールする場合、そのデータベースが必要とするストレージの空き容量が必要となります。各データベースが必要なストレージ容量は、各データベースの仕様を確認してください。

SmartLab Studio II

X線分析統合ソフトウェア

www.Rigaku.com



*カタログ中に掲載されている性能上の数値は、株式会社リガクによるテスト結果であり、他の環境下で常に同様の結果となることを保証するものではありません。

*Microsoft、Windows、DirectXは、米国Microsoft Corporationの米国およびその他の国における登録商標または商標です。

*Adobeは、Adobe Systems Incorporated(アドビ システムズ社)の米国およびその他の国における登録商標または商標です。

*IntelおよびIntel Core i5は、Intel Corporationの米国およびその他の国における登録商標または商標です。

*カタログ中の社名、製品名は各社の商標および登録商標です。

*このカタログに掲載されている製品は、外国為替および外国貿易法の安全保障輸出管理の規制品に該当する場合がありますので、輸出する場合、または日本国外に持ち出す際は、日本国政府への輸出許可申請等、必要な手続きをお取りください。

製品改良にともない、やむをえず仕様・外観などを予告なく変更させていただく場合があります。ご了承ください。

株式会社リガク 〒196-8666 東京都昭島市松原町3-9-12
☎(042)545-8111(代表電話案内) FAX.(042)544-9795

東京支店 / 〒151-0051 渋谷区千駄ヶ谷5-32-10 ☎(03)5312-7077 FAX.(03)5312-7078

大阪支店 / 〒569-1146 高槻市赤大路町14-8 ☎(072)696-3387 FAX.(072)694-5852

東北営業所 / 〒980-0804 仙台市青葉区大町1-2-16 ☎(022)264-0446 FAX.(022)223-1977

名古屋営業所 / 〒461-0002 名古屋市東区代官町35-16 ☎(052)931-8441 FAX.(052)931-2689

九州営業所 / 〒802-0005 北九州市小倉北区堺町2-1-1 ☎(093)541-5111 FAX.(093)541-5288

URL <https://www.rigaku.com>