

# 統合X線回折ソフトウェア SmartLab Studio II

## 一測定から解析まですべてをこなす 統合X線回折ソフトウェア



SmartLab Studio IIは、全自動多目的X線回折装置SmartLab 3による測定、および得られたデータの解析を行う統合X線回折ソフトウェアです。ひとつのプラットフォーム上で、測定から解析、データの表示、結果のレポートまで、X線回折のすべての作業をサポートします。初心者でも、簡単にX線回折システムを使いこなせるよう工夫が施されています。以下に、そのいくつかの機能について紹介します。

### 1. ユーザーガイド機能

X線回折測定を行うためには、分析目的に必要な光学素子を取り付け、測定条件を設定する必要があります。測定の前には、光学系調整や試料位置調整が必要になることもあります。しかしながら適切な光学素子の選択や調整、測定条件の設定を行うためには知識や経験が必要です。SmartLab Studio IIのユーザーガイド機能は、これらをすべてサポートします。ユーザーは、表示されるメッセージに従って光学素子を取り付け、OKボタンをクリックするだけで、熟練者が測定した場合と同等のデータを得ることができます。万一誤った光学素子を取り付けた場合は、光学系自動認識機能が正しい光学素子に交換するようガイドンしてくれま。

### 2. フローバーによるナビゲーション

測定も解析も、フローバーによりその手順がナビゲートされます。測定は、①光学系調整(または切替)⇒



図1. 光学素子の交換を指示するメッセージ。

②試料をマウント⇒③試料位置調整⇒④各種データ測定、の順序で行われます。この手順が、フローとして表示されており、保存データ名などわずかな情報を入力するだけで、測定を開始しデータを得ることができます。また、データの解析に対しては、アプリケーションごとにその手順を示すフローバーが用意されています(図2)。ユーザーは、フローバーのボタンを上から順にクリックしていくことで、①データの読込⇒②データの解析⇒③レポートの作成⇒④解析結果の保存までを、手順を間違えずに行うことができます。各ボタンには1-2行の説明が表示され、各ステップにおける処理内容を理解しながら解析を進められます。

### 3. 充実した機能を持つチャートコントロール

1次元プロファイルデータや2次元画像データの表

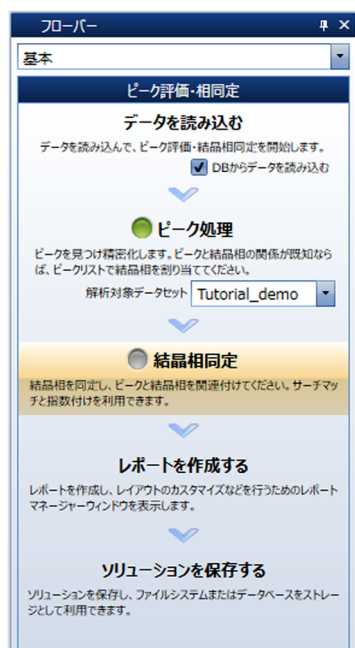


図2. 解析プラグインのフローバー。

示だけでなく、マップ表示やその他の3D表示など、様々なグラフィック表示が可能なチャートコントロールを備えました。DirectXを用いて、高速で、きれいなグラフィック表示を実現しています(図3)。また、すべてのアプリケーションで同じチャートコントロールを使用しているため、どのグラフィック表示においても全く同じ操作で使用することができます。

#### 4. レポートマネージャー

コンテンツやレイアウトのカスタマイズを、マウス操作だけで実現したレポートマネージャーが用意されました。レポートに「何を」「どこに」出力するかは、レポートのプレビューウィンドウで行うことができます。表示・非表示も、項目ごとに簡単に設定できます。作成したレポートは、印刷するだけでなく、PDF, RTF, XLSX, JPGなど様々なファイルフォーマットで保存することができます。

#### 5. 情報の一元管理

従来は、アプリケーションごとに用意しなければならなかった材料情報が、ひとつにまとめられ、独自の

SQLデータベースで管理できるようになりました。材料情報だけでなく、ユーザー管理情報やログ情報、さらには測定データや解析結果、マクロなどすべての情報を同じSQLデータベースで一括管理することができます。複数のユーザーが使用する場合でも、ユーザーごとに情報を抽出したり、全ユーザーで情報を共有したりするなど、想定される様々な場面に応じた管理が可能です。ネットワークライセンスを用いれば、同一ネットワーク(LAN)に居る複数のユーザーで、ひとつのSQLデータベースを共有することも可能であり、共通利用システムとして導入された場合などは非常に便利です。また、SQLデータベースを用いることで、データの管理(セキュリティ管理)が非常に容易となり、FDA 21 CFR Part 11など、各種規制にも柔軟に対応することができます。

#### 6. アプリケーションや機能の分割

SmartLab Studio IIの機能は、目的に応じて、いくつかの「プラグインモジュール」に分割されています。必要なプラグインのみをロードして使用することもできます。表1に示す1つの測定プラグインと7つの解析プラグイン、その他いくつかの共通プラグインが用意されています。たとえば、共通プラグインのひとつであるオートメーションプラグインでは、測定や解析の機能がいくつかの部品に分割されており、これらの部品を並べてあらかじめ条件を設定しておくことで、いつも同じ条件で、自動で測定・解析を行うことができます。作業効率を大幅に向上させるだけでなく、工程管理にも使える大変便利な機能です。

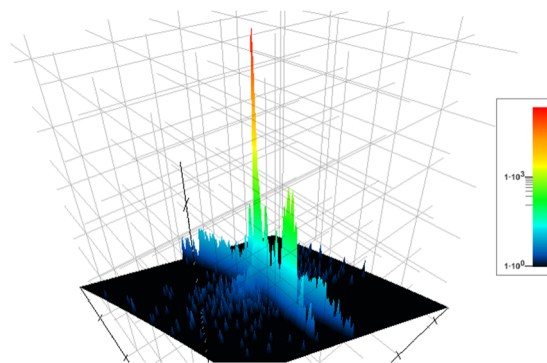


図3. チャートコントロールでの3D表示。

表1. 測定・解析プラグイン。

| プラグイン名          | 説明                                                |
|-----------------|---------------------------------------------------|
| XRD Measurement | SmartLab 3での各種測定を行います。                            |
| Data Manager    | 1D/2Dデータの表示、データ処理・演算などを行います。                      |
| Powder XRD      | 定性、定量、リートベルト解析などの粉末解析を行います。                       |
| XRR             | 薄膜試料の反射率から、膜厚・密度・粗さなど膜構造を評価します。                   |
| HRXRD           | エピタキシャル薄膜試料のロッキングカーブや逆格子マップから、膜厚・組成・格子緩和などを評価します。 |
| Texture         | 極点図・ODF解析から、試料の配向度・結晶方位などを評価します。                  |
| MRSAXS          | 小角散乱データから、ナノ粒子の形状やサイズ分布を評価します。                    |
| Stress          | 1D/2Dデータから、試料の残留応力を評価します。                         |