



文部科学省マテリアル先端リサーチインフラ (ARIM)

# ARIM

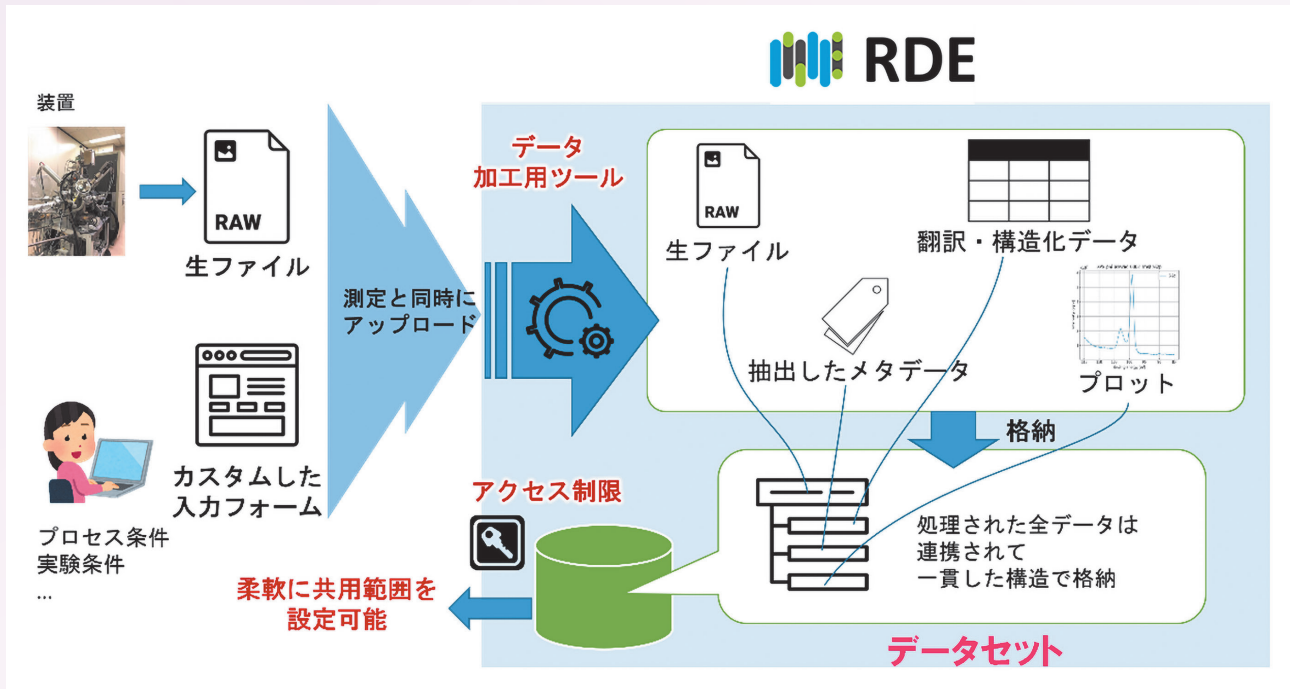
## データリファレンスガイド

データ利活用のための推奨測定条件・選定メタデータ

粉末X線回折装置:リガク編

## データリファレンスガイドのご案内

材料研究における新たなアプローチとして、データ駆動型材料研究が注目されています。この手法は、大量のデータを活用し、材料の特性や挙動を解析・予測するもので、従来の実験や理論に基づく研究に加え、データの力を活用して研究の効率化や新材料の発見を目指すものです。こうしたデータ駆動型材料研究の推進に向けて、ARIM 事業では先端的な材料計測装置の共用化を進め、得られたデータを将来的に広くシェア・活用できる基盤（システム名：RDE）を構築しました。



しかし、異なるメーカーやユーザーによって取得されるデータを有効に利用するためには、データ取得方法や装置メタデータの共通化が重要です。データの記録項目が不足していたり、装置ごとの設定が異なると、データの比較や再利用が難しくなります。そこで、各メーカーの装置ごとに、推奨される測定方法や記録項目のガイダンスとなる「データリファレンスガイド」を作成いたしました。

このガイドに基づいて取得されたデータは、異なる装置で得たデータとも統合しやすく、データ駆動型材料研究の基盤として役立つことが期待されます。

なお、本リファレンスガイドはマテリアル先端リサーチインフラ（ARIM）に参画する機関が保有する装置に限って作成されており、限定された装置のみに適用されます。

## 用語の定義

### • 推奨測定条件：

データ利用を行う際に、対象の材料に応じた測定が行えるように設定された推奨の測定条件（例：試料サイズ、前処理、計測条件のほか装置の設定条件など）

### • ARIM 登録ファイル：

さまざまな測定装置で出力・保存可能なデータフォーマットのうち、ARIMにおいてRDEへ登録するときの指定フォーマット（拡張子）。

### • 手入力データ：

RDEでユーザーが直接入力する画面において表示される試料に関する詳細情報（例：試料の前処理方法や測定の補助情報など）。

基本情報	
記入年月日	2023-02-16 JST
装置	原子分析電子顕微鏡
データ投入者(所属)	MATSUNAMI, Shigeyuki (NIMS)
データ所有者(所属)	[Redacted]
データ名	[Redacted]
実験ID	実験IDを入力してください。
規格	Resolution check at 80 kV

固有情報	
TEM像の種類(BF/DF/..)	[TEMの場合] TEM像の種類を選択してください
照射半角	[TEMの場合] 照射半角を入力してください mrad
対物鏡半角 (半角)	[TEMの場合] 対物鏡半角 (半角) を入力してください mrad
STEM像の種類 (BF/ABF/ADF/HAADF/..)	BF
収束半角	18 mrad
取り込み半角 (内側)	0 mrad
取り込み半角 (外側)	5 mrad
電子銃	Schottky emission gun
プローブ電流	5 pA
検出枚数	1
検出方位	検出方位がわかれば記入してください
測定温度	測定温度を記入してください °C

電子ラボノートのような記録フォームで便利!



データ登録者

実験固有情報/  
装置固有情報

• 試料の前処理条件  
• 測定の補助情報  
など

図：RDEにおける手入力データの入力画面

### • 選定メタデータ：

第三者による再現性の確保やデータ解析において特に重要な計測条件および装置情報に関するメタデータ。

### • 選定メタデータのjsonスキーマ：

選定メタデータをRDEで取り込むためのjson形式によるスキーマ定義で、metadata-def.jsonで規定。

```
{
  "comment": {
    "name": "コメント",
    "ja": "コメント",
    "en": "Comment",
    "schema": {
      "type": "string"
    },
    "description": "コメント/Comment",
    "uri": "http://nims.go.jp",
    "variable": 1
  },
  "dateTime": {
    "name": "測定日時",
    "ja": "測定日時",
    "en": "Measurement_Time",
    "schema": {
      "type": "string",
      "format": "date-time"
    },
    "description": "測定日時/Measurement_Time",
    "uri": "http://nims.go.jp",
    "variable": 1,
    "action": "get_datetime(dateTime)"
  },
  "operator": {
    "name": "オペレーター作成者",
    "ja": "オペレーター作成者",
    "en": "Operator_Name",
    "schema": {
      "type": "string"
    },
    "description": "オペレーター作成者/Operator_Name",
    "uri": "http://nims.go.jp",
    "variable": 1
  }
}
```

```
{
  "constant": {},
  "variable": [
    {
      "comment": {
        "value": "Sample"
      },
      "dateTime": {
        "value": "2019-03-04T11:25:43"
      },
      "operator": {
        "value": "semi_stu"
      },
      "instrument": {
        "value": "JSM-6510"
      },
      "acceleratingVoltage": {
        "value": 20.0,
        "unit": "kV"
      },
      "magnification": {
        "value": 4000
      },
      "signal": {
        "value": "SEI"
      },
      "stagePositionX": {
        "value": -12.836,
        "unit": "mm"
      },
      "stagePositionY": {

```

図：RDEにおける選定メタデータの定義スキーマとそれから得られる出力メタデータ

## 概 要

装置名	粉末X線回折装置
(製造)メーカー	株式会社リガク
製造モデル	SmartLabシリーズ、MiniFlexシリーズ、RINT-Ultimaシリーズ
対象物	半導体、金属、絶縁体、有機、高分子材料など、様々な材料に適用可能。
測定対象	粉体、固体、(薄膜)
試料調整	(粉末試料) 平均粒径：数 $\mu\text{m}$ 程度の微粉末 (その他) 基本、非破壊
測定環境	(雰囲気) 空気、真空、 $\text{N}_2$ 、 $\text{O}_2$ 、Ar、Heなど(アタッチメントに依存) (温度) 4 ~ 1773 K (アタッチメントに依存) (圧力) 1気圧
測定情報	結晶相同定・結晶構造・結晶化度・歪量などの解析用情報



## 保有機関

機関名	機器ID	ARIM装置名	モデル
産業技術総合研究所	AT-070	X線回折装置(XRD)	RINT-UltimaIII
千歳科学技術大学	CT-015	X線回折装置(XRD)	RINT2000
東京科学大学	IT-029	X線回折装置	SmartLab
京都大学	KT-310	X線回折装置	SmartLab
九州大学	KU-514-1	X線回折装置群	SmartLab
分子科学研究所	MS-209	粉末X線回折	RINT-UltimaIII
物質・材料研究開発機構	NM-204	多目的X線回折装置_Cu_SSL	SmartLab 9kW
物質・材料研究開発機構	NM-210	温度可変型粉末X線回折装置_Cu1_NTS	SmartLab 9kW
物質・材料研究開発機構	NM-211	高速・高感度型粉末X線回折装置_Cu_ASC_NS3	SmartLab 3
物質・材料研究開発機構	NM-212	卓上型粉末回折計_Cu_ASC_NC1	MiniFlex 600
物質・材料研究開発機構	NM-213	卓上型粉末回折計_Cu_ASC_NC2	MiniFlex 600
物質・材料研究開発機構	NM-214	卓上型粉末回折計_Cr_SCR	MiniFlex 600_Cr
物質・材料研究開発機構	NM-215	卓上型X線回折計_Cu_SMF	MiniFlex 600
奈良先端科学技術大学院大学	NR-301	X線構造解析装置	SmartLab 9kW/IP/HY/N
名古屋大学	NU-002	X線粉末回折装置	SmartLab 3kW 1D/2D/DSC
名古屋大学	NU-266	全自動X線回折装置	SmartLab 9kW
信州大学	SH-005	試料水平型強力X線回折装置	SmartLab 9kW
東北大学	TU-515	高出力全自動水平型多目的X線回折装置	SmartLab 9kW
電気通信大学	UE-004	DSC粉末X線同時測定装置	RINT-UltimaIII DSC
電気通信大学	UE-018	精密構造解析用X線回折装置	SmartLab R/K $\alpha$ 1/RE
東京大学	UT-202	高輝度 In-plane 型X線回折装置	SmartLab 9kW
東京大学	UT-203	粉末X線回折装置	SmartLab 3kW
東京大学	UT-204	粉末X線回折装置	SmartLab K $\alpha$ 1
東京大学	UT-451	粉末X線回折装置	SmartLab K $\alpha$ 1

## 装置の特長・目的

### ■目的

粉末X線回折装置 (Powder X-Ray Diffraction, PXRD) は、結晶性材料の構造解析を目的とした装置です。X線を試料に照射し、各原子層から回折された回折線パターンを解析することで、試料の結晶構造や相同定、結晶子サイズ、格子ひずみなどの重要な化学・物理的特性を調べることができます。

PXRDは、簡便且つ非破壊的に結晶性試料の原子配列構造を明らかにすることができる為、半導体やエネルギー材料をも含む材料科学、化学、物理学、鉱物学など物質を扱うあらゆる研究において不可欠なツールで、産業界においても物質の同定や品質管理に幅広く利用されています。

### ■特長

#### 1. 高精度な相同定

当装置は高い角度分解能を持ち、正確な回折角を測定することができます。これにより、結晶性材料の精密な結晶構造や相同定を可能にし、複数相を含む試料でも各相を正確に識別できます。また、結晶子サイズや格子ひずみの評価も高精度で行えます。

#### 2. 非破壊測定

PXRDは非破壊的な手法であり、試料を破壊することなく測定が可能です。そのため、貴重な試料や複雑な形状を持つ材料の解析に適しています。微量の試料や粉末状の試料でも高感度でデータを取得できる点も大きな特長です。

#### 3. 幅広い材料への適応

金属、セラミックス、ポリマー、無機化合物、有機材料など、さまざまな結晶性材料の分析が可能です。また、ナノ材料や複合材料の研究にも広く応用されています。特に、材料の結晶相同定や結晶構造の変化を追跡することに優れており、新素材開発や品質管理に役立ちます。

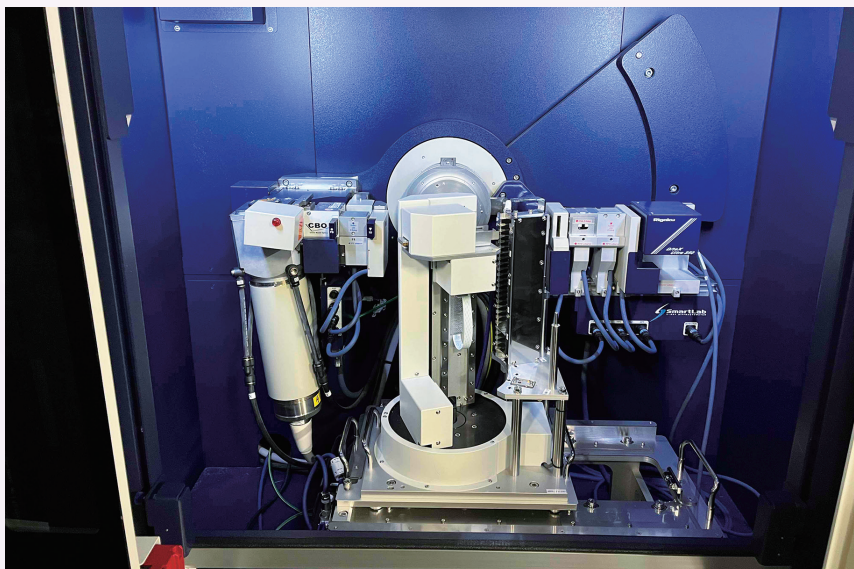
#### 4. 高精度な結晶構造解析

高精度なデータが得られるために、そのデータを基に結晶構造中の各原子の規則配列 (結晶構造) の解析が行えます。この結果から各材料物質の特性 (物性) の発現機構を解明し、材料物質の特性向上化への重要な知見を得ることができます。

#### 5. 温度・環境制御オプション

PXRD装置には温度や雰囲気制御するオプションがあり、特定の環境下での結晶構造の変化をリアルタイムで追跡できます。これにより、材料の熱的安定性や相転移を調べることができ、応用範囲がさらに広がります。

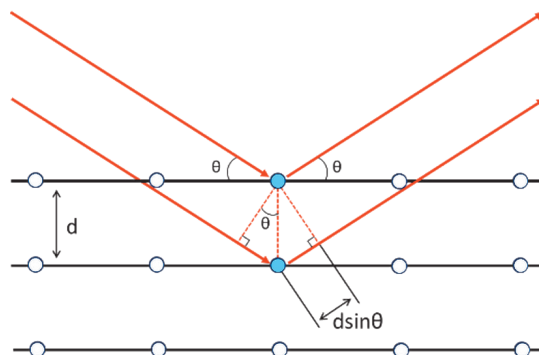
## 装置外観



# 1 装置編

## 計測原理

当該装置は、粉末またはバルク試料に特定波長のX線を照射し、回折現象を利用して試料の結晶相の同定、結晶構造解析用などのデータを収集します。X線が試料に入射すると、結晶内の原子によって散乱され、Braggの条件 ( $2d \sin \theta = n\lambda$ ,  $d$ : 格子面間隔、 $\theta$ : 回折角、 $n$ : 自然数で通常は1、 $\lambda$ : 入射X線波長) を満たす特定の角度で、回折X線が観測されます。



(Braggの回折条件の模式図)

引用: <https://ja.wikipedia.org/wiki/X線回折>. CC BY 3.0

## 推奨測定条件

### • 試料サイズ:

試料ホルダー (例: 角型試料ホルダー 17 × 20 × 0.5 mm) に充填できることが推奨されます。試料量が少ない場合は、試料ホルダーからのバックグラウンドや回折線を低下させ、より純粋な回折強度を得る為に、Si単結晶などを使用した無反射試料板をご利用ください。

### • 前処理:

試料はメノウ製などの乳鉢と乳棒を用いて粉体化してください。理想的な平均粒子径は数 $\mu\text{m}$ であり、粒子サイズが均一であることが望ましいです。ただし、有機物や合金系の試料では、粉体化の過程で分子構造や結晶性が損なわれることがありますので注意が必要です。

このような場合、試料合成時に急冷処理 (クエンチ) などを行い、粒成長を抑制する対策が適切です。或いは、粉体処理後にはアニール処理などを行い、結晶性を回復させることも有効です。この際、アニール温度や時間には十分注意が必要で、最適条件でない場合、逆に粒成長が促進される可能性があるため、慎重に設定してください。

### • 計測条件:

SmartLab Guidance / MiniFlex Guidance / SmartLab Studio II などのソフトウェアの【推奨測定条件】ボタンをクリックするか、【おまかせ条件】を選択して計測条件を設定してください。

### • 推奨実験条件:

走査条件やスリット条件は、使用する装置や試料に応じた標準的な推奨設定に従って調整してください。表1、表2を参照することにより、正確で再現性の高いデータを取得できます。

表 1：粉末回折測定における推奨走査条件

①集中法光学系（測定法： $2\theta/\theta$ ）の場合

試料形状	データ収集モード	測定開始角度 ( $2\theta, ^\circ$ )	測定終了角度 ( $2\theta, ^\circ$ )	走査ステップ ( $^\circ$ )	走査速度 ( $^\circ/\text{min}$ )
無機物質	0D(連続) ※1	5	90	0.02	4
	1D(走査) ※2	5	90	0.02	10
有機物質	0D(連続) ※1	2	60	0.02	4
	1D(走査) ※2	2	60	0.02	10
鉱物	0D(連続) ※1	2	70	0.02	4
	1D(走査) ※2	2	70	0.02	10
金属	0D(連続) ※1	15	120	0.02	4
	1D(走査) ※2	15	120	0.02	10
不明	0D(連続) ※1	2	90	0.02	4
	1D(走査) ※2	2	90	0.02	10

②平行ビーム光学系（測定法： $2\theta/\theta$ ）の場合

試料形状	データ収集モード	測定開始角度 ( $2\theta, ^\circ$ )	測定終了角度 ( $2\theta, ^\circ$ )	走査ステップ ( $^\circ$ )	走査速度 ( $^\circ/\text{min}$ )
無機物質	0D(連続)	5	90	0.02	4
有機物質	0D(連続)	2	60	0.02	4
鉱物	0D(連続)	2	70	0.02	4
金属	0D(連続)	15	120	0.02	4
不明	0D(連続)	2	90	0.02	4

表 2：リガク製標準ガラス試料板（有効幅：20 mm）における推奨スリット条件

集中法光学系（測定法： $2\theta/\theta$ ）の場合

ゴニオ半径 (mm)	測定開始角度 ( $2\theta, ^\circ$ )	入射スリット ( $^\circ$ )	散乱スリット SS ( $^\circ$ )※3	受光スリット RS (mm)※3
150	2	※1	※2	0.03
185	2	※1	※2	0.03
285 / 300	2	※1	※2	0.03
150	5	0.25	※2	0.03
185	5	1/4	※2	0.03
285 / 300	5	1/6	※2	0.03
150	15	1	※2	0.03
185	15	3/4	※2	0.03
285 / 300	15	1/2	※2	0.03



## 平行ビーム光学系 (測定法: $2\theta/\theta$ ) の場合

ゴニオ半径 (mm)	測定開始角度 ( $2\theta, ^\circ$ )	入射スリット (mm)	散乱スリット SS (mm) <sup>※3</sup>	受光スリット RS (mm) <sup>※3</sup>
285 / 300	2 / 5 / 15	1	Open	Open

※1: 測定開始角度を  $2^\circ$  (もしくはそれ以下) とした場合、測定開始角度を  $5^\circ$  の場合と比較して、より狭い幅のスリット (およそ半分以下) を使用してください。定量しない場合、測定開始角度が  $5^\circ$  の時と同じ入射スリットを使って差し支えありません。

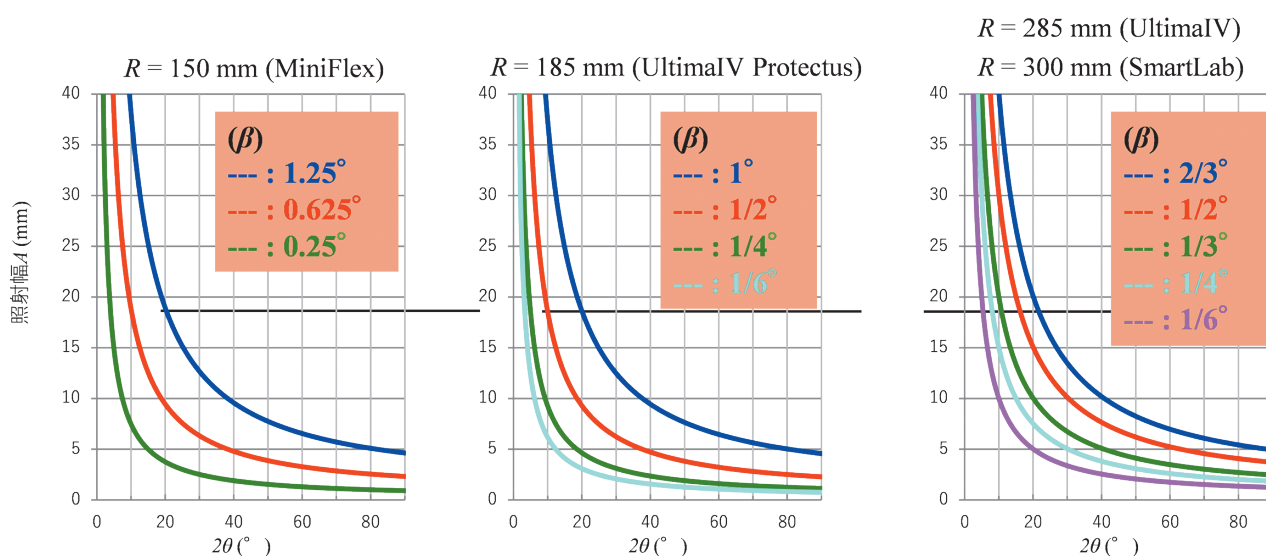
※2: X線検出器が OD 型 (シンチレーション型など) もしくは多次元型における OD モード利用の場合は入射スリットと同じ幅にしてください。X線検出器が多次元型の場合は原則 Open としてください。

※3: 受光スリット名称は、以下のごとく装置によって異なりますので、注意が必要です。

RINT-Ultima / MiniFlex	SmartLab
散乱スリット (SS)	受光スリット1 (RS1)
受光スリット (RS)	受光スリット2 (RS2)

### 【参考資料】

集中法における、入射スリットの幅とゴニオ半径の違いによる試料位置での X 線の照射幅



$$\text{照射幅 } 2A = \left[ \frac{1}{\sin(\theta + \beta/2)} + \frac{1}{\sin(\theta - \beta/2)} \right] \cdot R \sin(\beta/2)$$

$\theta$  : 入射角 (回折角  $2\theta \div 2$ ) ( $^\circ$ )  
 $\beta$  : 入射スリットの発散角 ( $^\circ$ )  
 $R$  : ゴニオメーター半径 (mm)

### 【推奨記録条件】

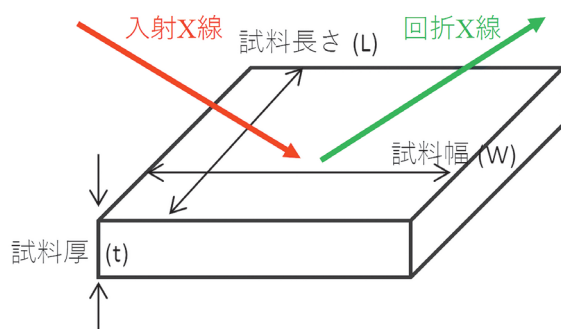
以下の情報を記録することを推奨します。これらのデータはPXRD測定において重要な条件を示し、再現性やデータの正確性を確保するために必要です。特に装置の設定や試料の寸法に関する情報は、今後の解析や比較に役立ちます。

項目	説明
装置名称	SmartLab、Ultima IIIなど使用した装置の名称を記載してください。
ゴニオ半径	試料から受光スリット (RS) までの距離を mm 単位で記載してください。
焦点幅	X線管球のフィラメントの幅に0.1を乗じた値 (実効焦点サイズ) を mm 単位で入力してください。
焦点長さ	X線管球のフィラメントの長さを mm 単位で記載してください。
入射スリットDSの開口角	入射スリット (DS) の開口角を° 単位で記載してください。
散乱スリットSSの開口角	散乱スリット (SS) の開口角を° 単位で記載してください。
受光スリットRSの幅	受光スリット (RS) の幅を mm 単位で記載してください。
受光スリットRSの長さ	受光スリット (RS) の長さを mm 単位で記載してください。
入射ソーラスリットの角度	入射ソーラスリットの角度を° 単位で記載してください。ソーラスリットを使用していない場合は「Open」または「無し」と記載してください。
受光ソーラスリットの角度	受光ソーラスリットの角度を° 単位で記載してください。ソーラスリットを使用していない場合は「Open」または「無し」と記載してください。
試料幅 (W)	試料の幅を mm 単位で記載してください。【試料のディメンジョンについて】を参照してください。
試料長さ (L)	試料の長さを mm 単位で記載してください。【試料のディメンジョンについて】を参照してください。
試料厚 (t)	試料の厚さを mm 単位で記載してください。【試料のディメンジョンについて】を参照してください。
線吸収係数または試料の化学組成	試料の線吸収係数を記載してください。単位は $1/\text{cm}$ です。* <sup>1</sup> 線吸収係数が不明な場合は、試料の化学組成* <sup>2</sup> を記載してください。* <sup>3</sup>

※1：PDXLもしくはSmartLab Studio IIのPowder XRDプラグインでは、試料の組成を入力すると、線吸収係数が自動で計算され、表示されますので、この値を入力してください。別のソフトウェアなどで線吸収係数を計算した場合は、粉末充填率0.35を乗じた値をここに入力してください。

※2：PDXL、SmartLab Studio II Powder XRDプラグインをお使いでない場合は、試料を構成する化合物の平均組成を入力してください。たとえば、酸化チタン $\text{TiO}_2$ と酸化亜鉛 $\text{ZnO}$ の1:1混合物の場合、組成は、 $\text{TiO}_2 \cdot \text{ZnO}$ 、すなわち $\text{TiZnO}_3$ となります。

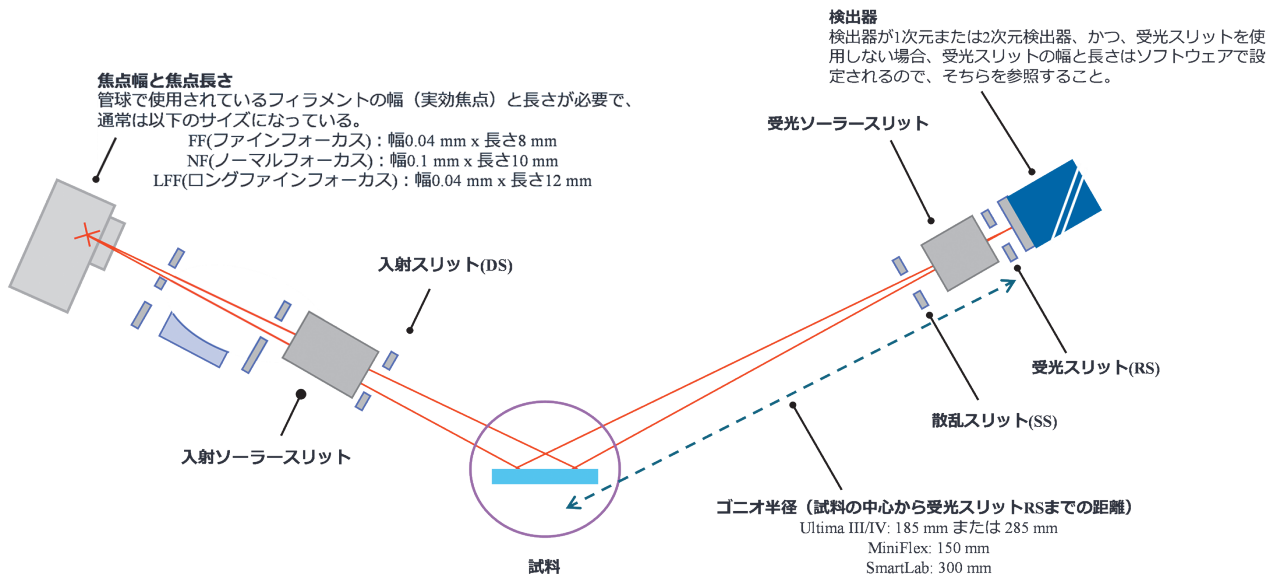
※3：試料の組成が秘密事項の場合、主な成分の化学組成で代用しても構いません。また、およその組成でも構いません。硫黄Sよりも重い元素についてはできるだけ省略せずに入力してください。



### 【試料のディメンジョンについて】

試料板自体の大きさではなく、粉末試料を充填している窪みの大きさ (長さL、幅W、深さt) を正確に記載してください。これにより、測定条件の再現性や結果の信頼性を確保することができます。

## 【回折装置の各部の名称について】



## 校正 / キャリブレーション

項目	説明
標準試料	Si (NIST製SRM640シリーズ)を使用してください。
実施者	各装置の担当者が校正を行ってください。
実施頻度	1か月に1回の頻度で校正を行うことを推奨します。
校正方法	校正は室温で行い、毎回同じ標準試料を用いてください。最大2θ角145°まで、step幅は0.02°で測定を行います。この際、X線の出力は装置の定格最大出力（もしくは毎回、同一出力）、スキャン速度も毎回、同一で行うことが肝要です。この測定結果に基づき、X線源の寿命予測や各軸の変位を校正します。

## 運用条件 (主な消耗品)

主たる消耗品 (X線発生部のみ) について示します。定期的なメンテナンスを行うことで測定条件の再現性や結果の信頼性を確保することができます。

### 回転式対陰極型の場合

部品	消耗箇所	交換時期の目安
フィラメント	X線発生に不可欠な部品であり、使用時間や強度に応じて劣化します。	フィラメントの交換時期は通常、使用時間が約1,000時間に達した時が目安です。
ターゲット本体	X線の生成に使用されるため、ターゲット表面が損耗します。	必要に応じて約1年ごとの交換を推奨します。
各種ポンプ系	冷却や真空の維持に使用されるポンプ類も定期点検が必要です。	ポンプのオイルは6か月ごとに交換し、ポンプ自体は約2年ごとに交換するのが一般的です。
冷却水	冷却水はX線発生部を冷却し、安定なX線発生を行うために重要です。	定期的な水質チェックを行い、6か月ごとに水を交換してください。

### 【2】封入管型の場合

部品	消耗箇所	交換時期の目安
冷却水	冷却水はX線発生部を冷却し、安定なX線発生を行うために重要です。	定期的な水質チェックを行い、6か月ごとに水を交換してください。
封入管本体	使用中に高電圧や熱が加わるため、経年劣化や繰り返し使用によって内部のガスやターゲットの状態が変化し、X線出力の低下や安定性の不具合が発生することがあります。	封入管の寿命は、使用条件や頻度によって異なりますが、通常は約2年ごとに交換が必要です。



# 2 データ編

## 登録ファイル

	機種	登録ファイル
ARIM 登録ファイル	SmartLab / MiniFlexシリーズ	.ras (.rasxはARIMでは非対応です)
	RINT-Ultimaシリーズ	.raw (.ascおよび.txt形式はARIMでは非対応です)

### 出力フォーマット：

リガク社のXRD出力フォーマットには、.ras, .rasx, .raw, .asc, .txt などがありますが、ARIM事業においては、使用する機種に応じて、上記のフォーマットのファイルを登録するものとします。  
また、RINT-Ultimaシリーズでは.raw ファイルをリガク社のコンバーター（非公開）で.rasへ変換します。その変換された.rasに含まれるファイルからメタデータ等を抽出しています。

## 手入力データ

“装置編”の【推奨記録条件】をデータ構造化システム (RDE) のデータ登録時に画面で記録できるようにしています。

手入力 パラメータ	日本語語彙	英語語彙	入力条件	単位
sample_width	試料幅(W)	Sample width	試料の幅をmm単位で入力	mm
sample_length	試料長さ(L)	Sample length	試料の長さをmm単位で入力	mm
sample_thickness	試料厚(T)	Sample thickness	試料の厚みをmm単位で入力	mm
linear_absorption_ coefficient	線吸収係数	Linear absorption coefficient	組成から計算される線吸収係数ではなく、その試料の線吸収係数。 不明な場合は、組成から計算される線吸収係数に0.3を乗じる。	1/cm
goniometer_radius	ゴニオ半径	Goniometer radius	(一般値) MiniFlex : 150 mm SmartLab, Ultima, RINTシリーズ : 300mm	mm
focus_width	焦点幅	Focus width		mm
focus length	焦点長さ	Focus length		mm
aperture_angle_of_ divergence_slit_DS	入射スリットDSの開口角	Aperture angle of Divergence slit DS	Ultima, RINTシリーズでは記載する	deg
aperture_angle_of_ scattering_slit_SS	散乱スリットSSの開口角	Aperture angle of Scattering slit SS	Ultima, RINTシリーズでは記載する	deg
aperture_angle_of_ receiving_slit_RS	受光スリットRSの幅	Aperture angle of Receiving slit RS	Ultima, RINTシリーズでは記載する	mm
length_of_receiving_ slit_RS	受光スリットRSの長さ	Length of Receiving slit RS	Ultima, RINTシリーズでは記載する	mm
soller_slit_angle_for_ incident_side	入射ソーラーズリットの角度	Soller slit angle for Incident side	Ultima, RINTシリーズでは記載する	deg
soller_slit_angle_for_ receiving_side	受光ソーラーズリットの角度	Soller slit angle for Receiving side	Ultima, RINTシリーズでは記載する	deg

## 選定メタデータのjsonスキーマ

ARIMのメタデータ取得にかかる選定メタデータのmetadata-def.jsonは、以下のように定義されています。

### 【共通選定メタデータ】

出力計測パラメータ	日本語語彙	英語語彙	単位
*MEASUREMENT_DATE	測定日	Measurement Date	
*FILE_COMMENT	コメント	Comment	
*FILE_MEMO	メモ	Memo	
*FILE_SAMPLE	試料名	Sample Name	
*HW_ATTACHMENT_NAME	アタッチメント	Attachment Name	
*HW_COUNTER_PIXEL_SIZE	検出器のピクセルサイズ	Detector Pixel Size	mm
*HW_COUNTER_SELECT_NAME	検出器名称	Selected Detector Name	
*HW_XG_TARGET_NAME	管球ターゲット	X-ray Target Material	
*HW_XG_WAVE_LENGTH_ALPHA1	K $\alpha$ 1線波長	K_alpha_1 Wavelength	Angstrom
*HW_XG_WAVE_LENGTH_ALPHA2	K $\alpha$ 2線波長	K_alpha_2 Wavelength	Angstrom
*HW_XG_WAVE_LENGTH_BETA	K $\beta$ 線波長	K_beta Wavelength	Angstrom
*MEAS_COND_OPT_ATTR	光学系属性	Optics Attribute	
*MEAS_COND_XG_CURRENT	X線管電流	X-ray Tube Current	mA
*MEAS_COND_XG_VOLTAGE	X線管電圧	X-ray Tube Voltage	kV
*MEAS_COND_XG_WAVE_TYPE	波長種別	Wavelength Type	
*MEAS_DATA_COUNT	データ点数	Number of Data Points	
*MEAS_SCAN_AXIS_X	走査軸	Scan Axis	
*MEAS_SCAN_MODE	走査モード	Scan Mode	
*MEAS_SCAN_SPEED	走査速度	Scan Speed	deg/min
*MEAS_SCAN_START	走査開始位置	Scan Starting Position	deg
*MEAS_SCAN_START_TIME	走査開始日時	Scan Starting Date Time	
*MEAS_SCAN_END_TIME	走査終了日時	Scan Ending Date Time	
*MEAS_SCAN_STEP	走査ステップサイズ	Scan Step Size	deg
*MEAS_SCAN_STOP	走査終了位置	Scan Ending Position	deg
*MEAS_SCAN_UNIT_X	走査軸単位	Scan Axis Unit	
*MEAS_SCAN_UNIT_Y	X線強度単位	Intensity Unit	

### 【温度可変アタッチメント装着】(例：NM-204)

出力計測パラメータ	日本語語彙	英語語彙	単位
*ATMOSPHERE_TEMP_START	開始温度	Starting Temperature	°C
*ATMOSPHERE_TEMP_END	終了温度	Ending Temperature	°C
*ATMOSPHERE_TEMP_UNIT	温度単位	Temperature Unit	°C

### 【スリット情報】SmartLab シリーズ

出力計測パラメータ	日本語語彙	英語語彙	単位
*MEAS_COND_AXIS_POSITION-XX	入射ソーラスリット	Incident Soller Slit	
*MEAS_COND_AXIS_POSITION-XX	入射スリット	Incident Silt	
*MEAS_COND_AXIS_POSITION-XX	長手制限スリット	Length Limiting Silt	
*MEAS_COND_AXIS_POSITION-XX	受光ソーラスリット	Receiving Soller Slit	
*MEAS_COND_AXIS_POSITION-XX	受光スリット1	Receiving Slit 1	
*MEAS_COND_AXIS_POSITION-XX	受光スリット2	Receiving Slit 2	
*MEAS_COND_AXIS_POSITION-XX	受光素子	Receiving Optics	

(※) 機種によりスリットのメタデータを定義する「MEAS\_COND\_AXIS\_POSITION」の番号が異なるため、ここでは「\*MEAS\_COND\_AXIS\_POSITION-XX」と表記しています。

### 【スリット情報】MiniFlex シリーズ

出力計測パラメータ	日本語語彙	英語語彙	単位
*MEAS_COND_AXIS_POSITION-XX	入射ソーラスリット	Incident Soller Slit	
*MEAS_COND_AXIS_POSITION-XX	発散スリット	Divergence Slit	
*MEAS_COND_AXIS_POSITION-XX	高さ制限スリット	Length Limiting Slit	
*MEAS_COND_AXIS_POSITION-XX	受光ソーラスリット	Receiving Soller Slit	
*MEAS_COND_AXIS_POSITION-XX	受光スリット	Receiving Slit	

(※) 機種によりスリットのメタデータを定義する「MEAS\_COND\_AXIS\_POSITION」の番号が異なるため、ここでは「\*MEAS\_COND\_AXIS\_POSITION-XX」と表記しています。

## 謝辞

リガク社には、推奨実験条件ならびに試料ホルダーへのセッティング方法について、貴重なご助言をいただきました。厚くお礼申し上げます。



# ARIM データリファレンスガイド

## (粉末X線回折装置：リガク編)

---

発行日 2025年1月(第1版)

編集・発行 国立研究開発法人物質・材料研究機構  
マテリアル先端リサーチインフラセンターハブ

〒305-0047 茨城県つくば市千現 1-2-1

URL : [https://nanonet.mext.go.jp/data\\_service/](https://nanonet.mext.go.jp/data_service/)

E-Mail : [arim\\_data@ml.nims.go.jp](mailto:arim_data@ml.nims.go.jp)