

DIFFRAC.EVA 한글메뉴얼



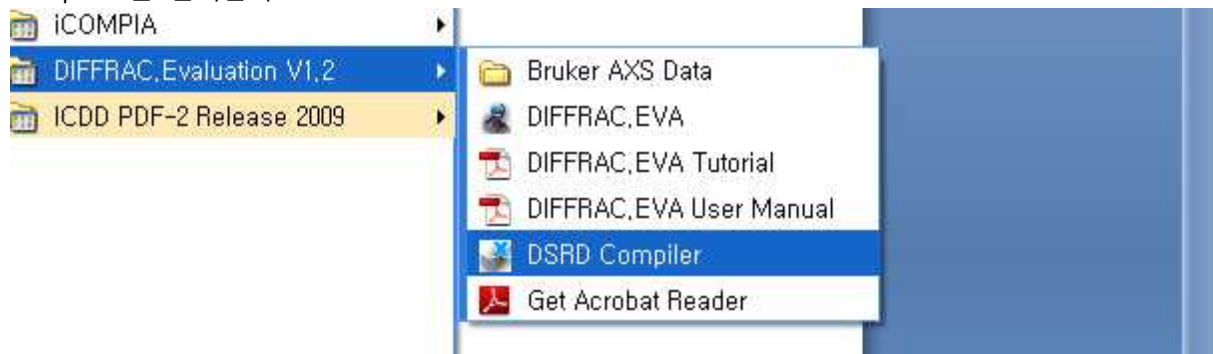
By Bruker AXS Korea

[목 차]

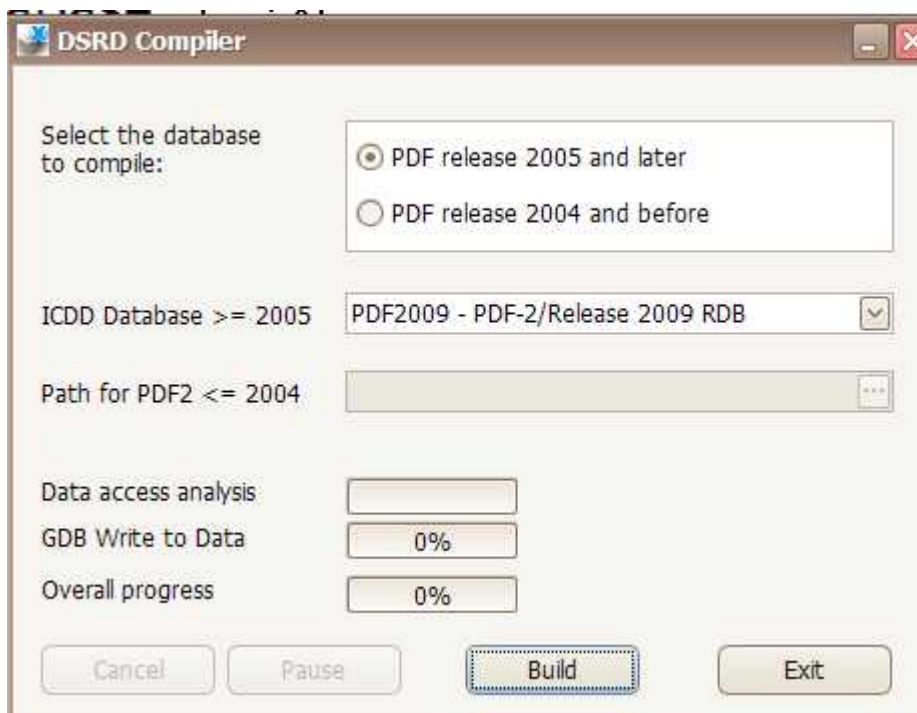
1. PDF 데이터, COD 데이터, File Exchange 설치방법
2. 메인 화면구성
3. Tool Menu
4. Peak Search 및 D값 및 2theta 값의 표시
5. Search/match
6. Area menu를 이용한 Crystallite Size 계산 및 Peak 면적계산
7. XRF 데이터를 이용한 정량분석
8. 결정화도 계산
9. User Data Base 제작 및 활용
10. Offset plot

1-1 PDF 데이터베이스 설치방법

EVA CD를 넣으면 EVA는 자동으로 설치된다. 윈도우 시작메뉴에서 EVA 폴더에 가면 DSRD Compiler 를 선택한다.



아래 그림과 같이 PDF 2005버전 이전과 이후로 나뉘는데 가지고 있는 데이터 베이스에 따라 선택 후 아래 'Build'를 선택하면 자동으로 EVA와 데이터 베이스가 연동된다.



1-2. COD(Crystallograph Open Database) 설치방법

EVA CD안에 COD 폴더에 가면 COD폴더가 있다.

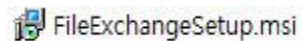


위 그림과 같은 실행 파일을 클릭하면 자동으로 Eva에 COD데이터가 설치된다.

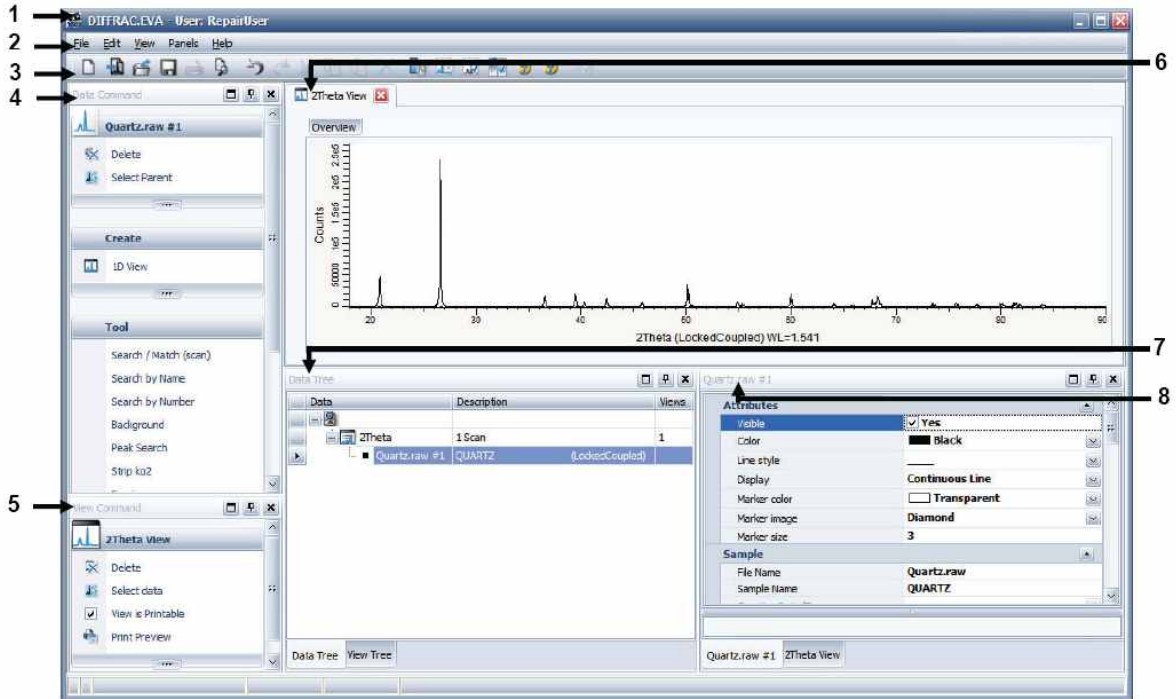
**DIFFRAC.EVA는 여러 가지 데이터 베이스를 동시에 사용 가능하다. 따라서, PDF데이터 설치 후에도, COD또한 설치하여 사용할 수 있다.

1-3. File Exchange 설치

File Exchange는 raw데이터를 ASCII파일로 전환할 때 필요한 변환 프로그램으로, EVA CD안에 있다. CD안에 File Exchange 폴더에 가서 실행 파일을 클릭하면, file Exchange 가 설치된다.



2. 메인 화면 구성



- | | | | |
|---|--------------------|---|--------------------------|
| 1 | Title bar | 5 | View command panel |
| 2 | Menu bar | 6 | View window |
| 3 | Toolbar | 7 | Data/view tree panel |
| 4 | Data command panel | 8 | Data/view property panel |

-Title bar

-**Menu bar**: File, Edit, View, help로 구성된다. 저장 및 설정, 윈도우 구성을 할 수 있다.

-**Toolbar**: Menu의 기능 중 가장 많이 사용되는 기능을 정리하여 놓은 곳이다.



Create Eva New Document: 문서를 새로 열 때 사용한다.



Import a raw file: 측정데이터(brml or raw)를 불러올 때 사용한다.



Save : 현재까지 작업된 Eva의 문서를 저장한다.



Print Preview : 프린트 될 작업을 미리 볼 때 사용한다.



ICDD RDB Database : 설치되어 있는 RDB 포맷의 PDF데이터를 확인한다.



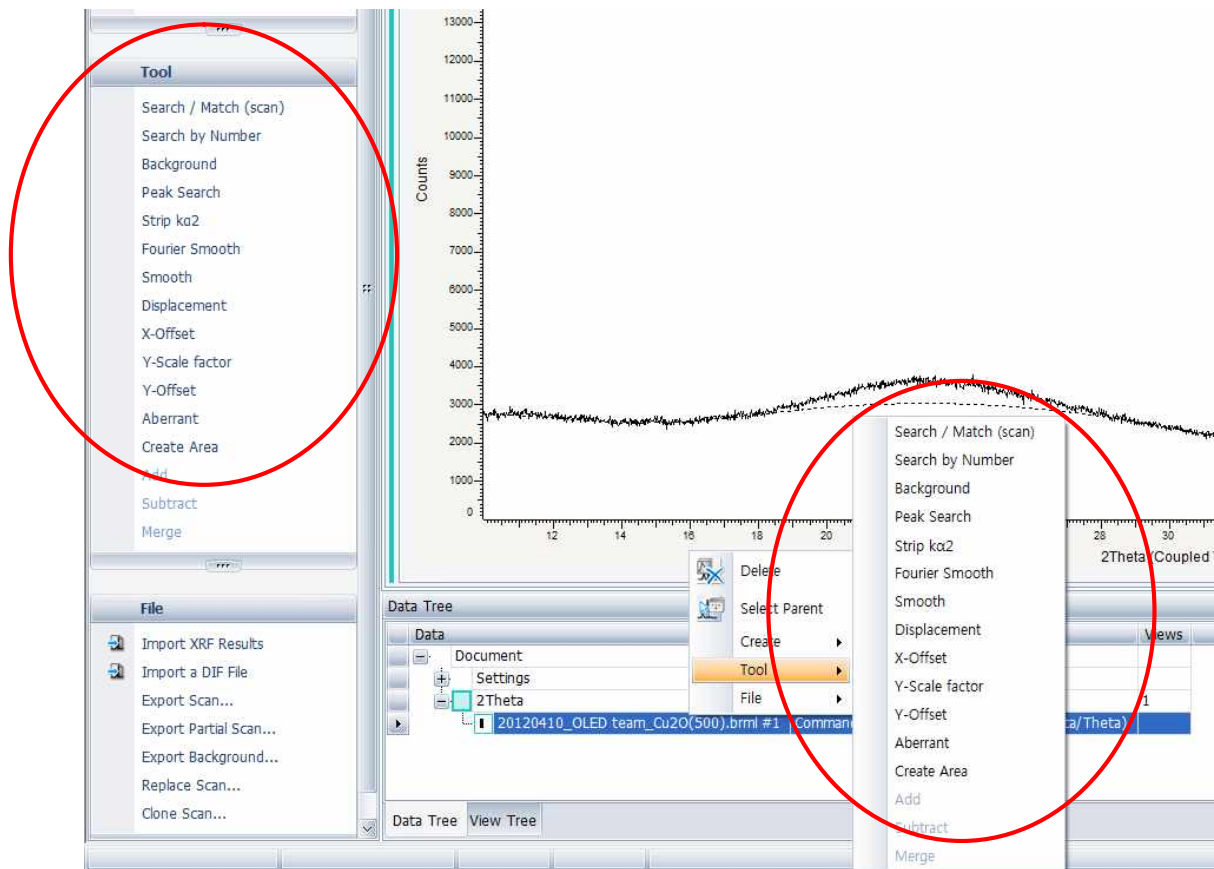
Setting : 프로그램의 각종 옵션과 Default 값을 정의할 수 있다.

- **Data Command Panel** : Tool 메뉴 등 가장 기본적인 작업이 들어 있는 창이다.
- **View Command Panel** : 불러온 Peak나 작업 내역 등을 출력하거나 지우기, 혹은 한 차수 내리기, 올리기 등의 작업을 수행하는 창이다.
- **View Window** : 데이터를 불러오면 실제 측정 데이터가 나타나는 창이다.
- **Data/view tree panel** : 실제 Eva의 작업 창으로 가장 중요한 창이다. 현재 작업하고 있는 내용과, 불러온 file등에 대한 내용이 Tree형식으로 보여진다.
- **Data/view property panel** : Data/view tree panel 안의 작업내용이나, 불러온 파일을 클릭하면 그 특성이나, 내용들에 대한 종합적인 정보가 나타나는 창으로 가장 중요한 창중 하나이다. 또한 이 창에서 여러 가지 작업들을 수행 하게 된다.

실제 Eva운용시에 위의 여러 가지 panel 중 **Data/view tree panel과, **Data/view property panel** 이 두 가지만 사용하여도 Eva사용에 지장이 없다.

3. Tool Menu

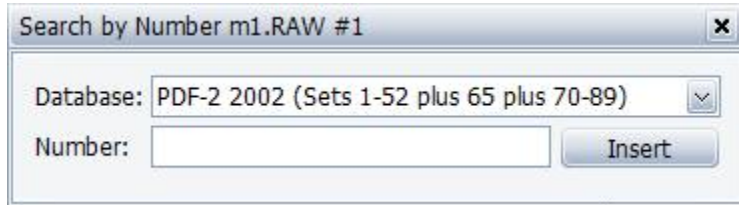
EVA의 핵심 기능이 들어있는 곳으로 Data command panel에서 볼 수 있으며, 혹은 data command panel을 사용하지 않더라도, Data/view Tree panel 안의 측정 파일 (brml or raw file)을 클릭한 후 마우스 우클릭 -> Tool을 선택하면, 메뉴를 사용 할 수 있다.



- Search/match(Scan)

측정된 파일을 불러온 후 설치된 데이터 베이스로부터 유사한 패턴이 있는지 검색할 수 있는 도구이다. 단, 설치된 데이터베이스가 없다면 메뉴상에 나타나지 않는다.

- Search by number

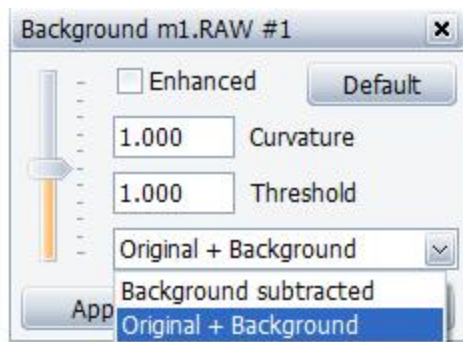


이 메뉴는 이미 알고 있는 데이터 베이스 넘버가 있으면 Search/match과정을 실행하지 않고 곧 바로 데이터를 peak에 매치하고자 할 때 사용한다.

Number 란에 알고 있는 데이터 베이스 넘버를 넣고 'Insert'를 누르면 바로 데이터가 삽입된다.

- Background

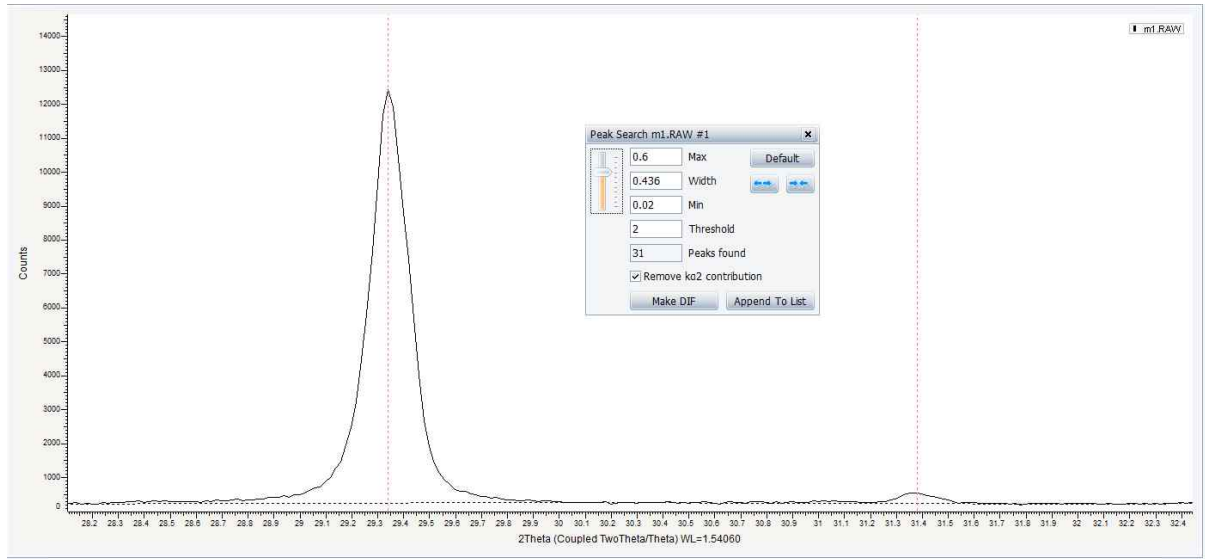
이 메뉴를 클릭하면, Background 상태를 조절하거나 그림상에서 background curve만큼 빼줄 수 있다.



'Original+Background'는 오리지널 raw 데이터에 Background커브를 남겨두고 표시하는 방법이고, Background substrate는 화면상에 보여지는 Background만큼 그림상에서 빼주는 방법이다. 실행 후 그대로 창을 닫으면 바로 적용된다.

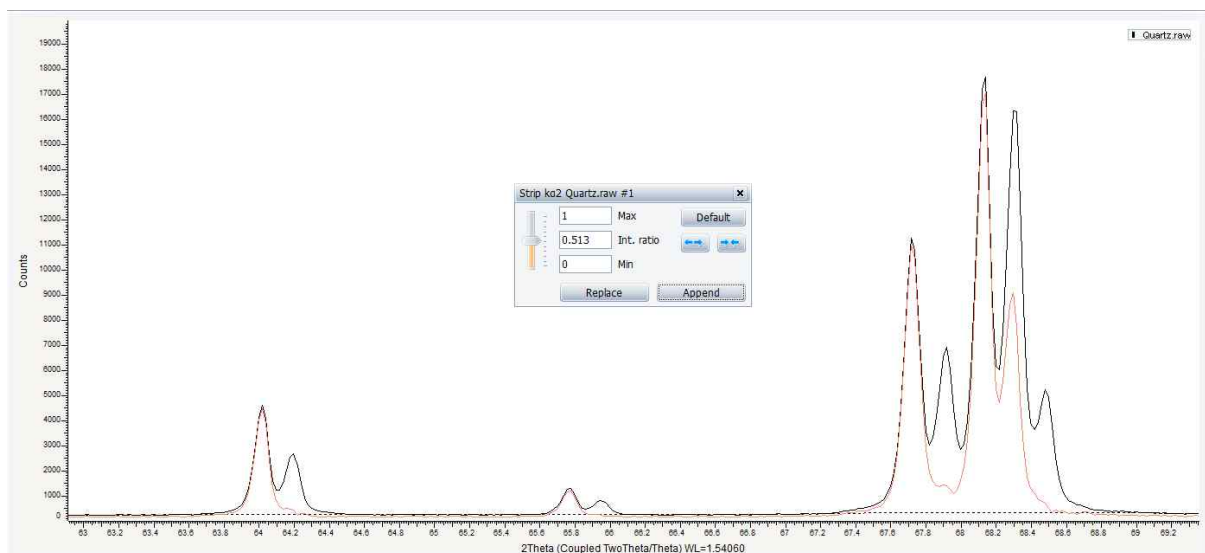
- Peak Search

이 메뉴는 화면상에 컴퓨터가 S/N비를 인지하여 peak를 나타내는 작업을 수행한다.



Threshold 와 width 바를 적절히 이용하여 peak를 서치한 후 Append to list를 클릭하면 화면상에 Peak Search결과가 표시된다. 혹은 Make DIF 를 클릭할 경우 현재 search된 위치를 기준으로 Diffraction Pattern이 생성되어 저장하거나 기타 다양한 작업을 할 수 있다.

-Strip Ka2

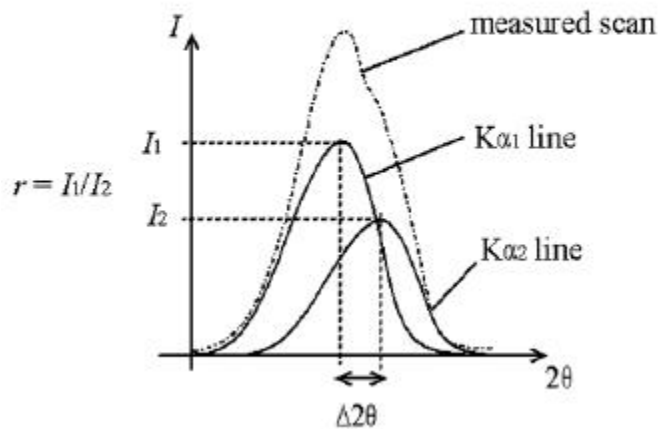


이 메뉴는 튜브로부터 나오는 순수한 Ka2영역을 분리하여 주는 메뉴다. 일반적인 Powder XRD장

비는 튜브로부터 Ka1과 Ka2두가지 파장이 나오게 되는데 결정성이 좋은 샘플은 그림과 같이 확연하게 두 개의 파장으로부터 분리된 peak가 나타난다. Peak가 분리가 결정성에 의해 분리되어

보이든지, 하나로 오버랩되어 보이든지 간에 Strip ka2명령은 계산에 의해 Ka2 파장에 기인하는 peak의 면적을 아래와 같이 계산에 의해 적분하여 빼준다.

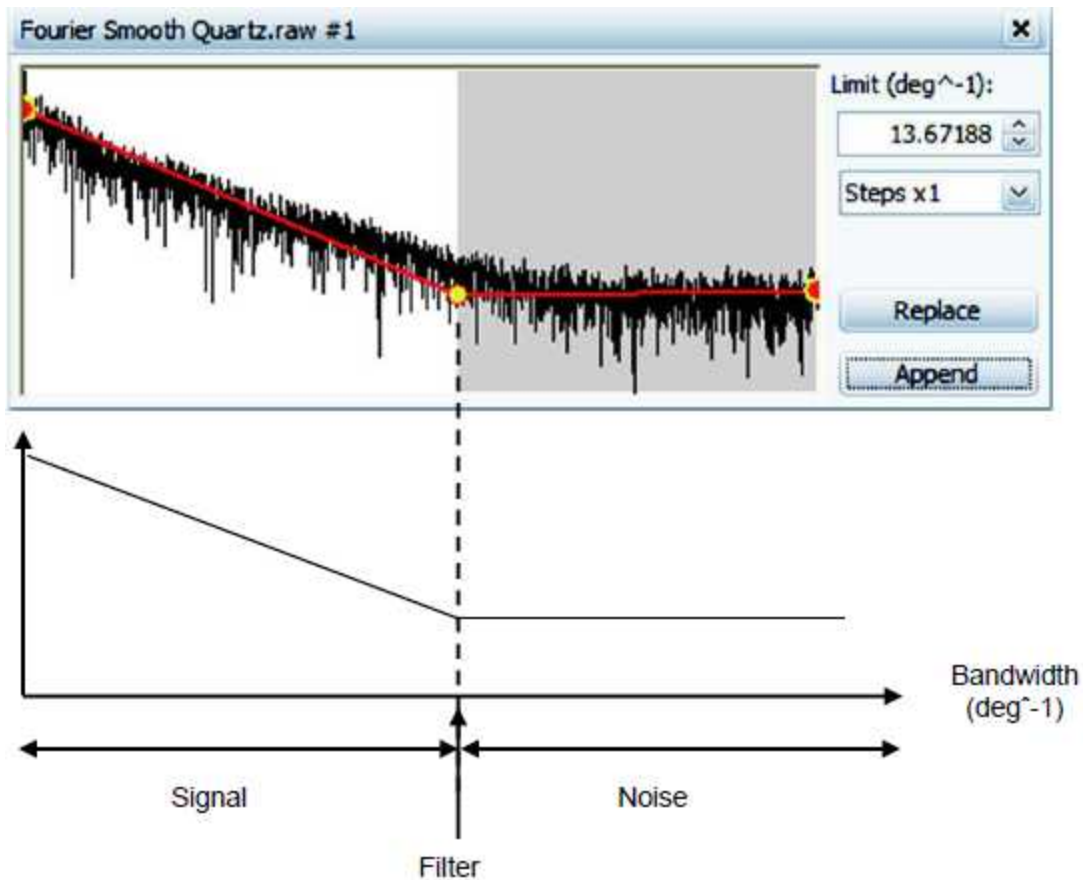
$$\Delta 2\theta = 2 \cdot \tan \theta \cdot \frac{\Delta \lambda}{\lambda}$$



-Fourier Smooth

이 명령어는 Signal과 noise 를 컴퓨터가 계산에 의해 판단하여 smoothing 해주는 작업이다.

아래 그림과 같이 Noise영역까지를 선택하여 Append 혹은 Replace해주면 가장 적절한 Smoothing 포인트를 제시 할 수 있다.



-Smooth

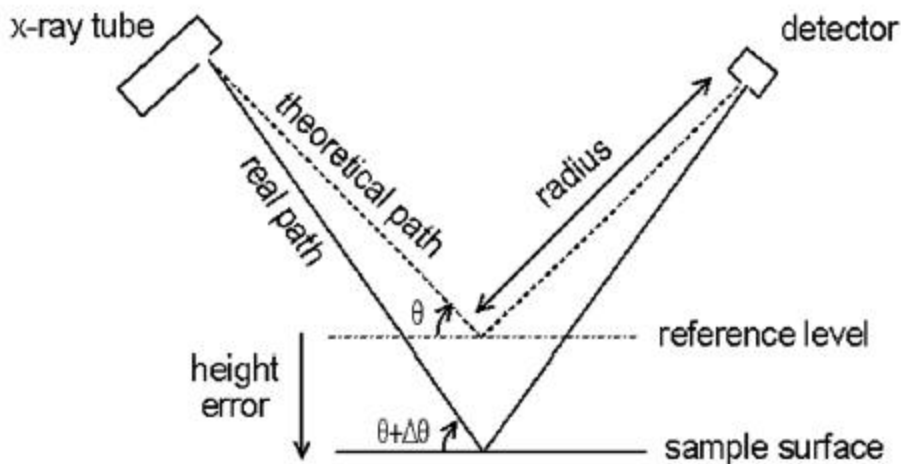
Fourier Smooth 와 달리 Smooth명령어는 Smoothing factor를 눈으로 보고 판단하여 찾는 작업이다. 위와 같이 적절한 Smoothing포인트를 컴퓨터가 인지하지 못할 때 사용하는게 일반적인데, 고급적 Fourier Smooth를 더 권장한다.



- Displacement

이 옵션은 측정 시 발생한 2theta 에러를 보정하기 위한 옵션이다.

실제 height error가 발생하였을 경우 이 옵션을 선택하면 peak의 2theta 위치를 움직여 줄 수 있다.



- X-offset

이 옵션 역시 peak의 2theta를 움직일 수 있는 옵션이나 위의 displacement과 달리 장비의 Zero Error를 보정하는 옵션으로 효과는 displacement 옵션과 비슷하다.



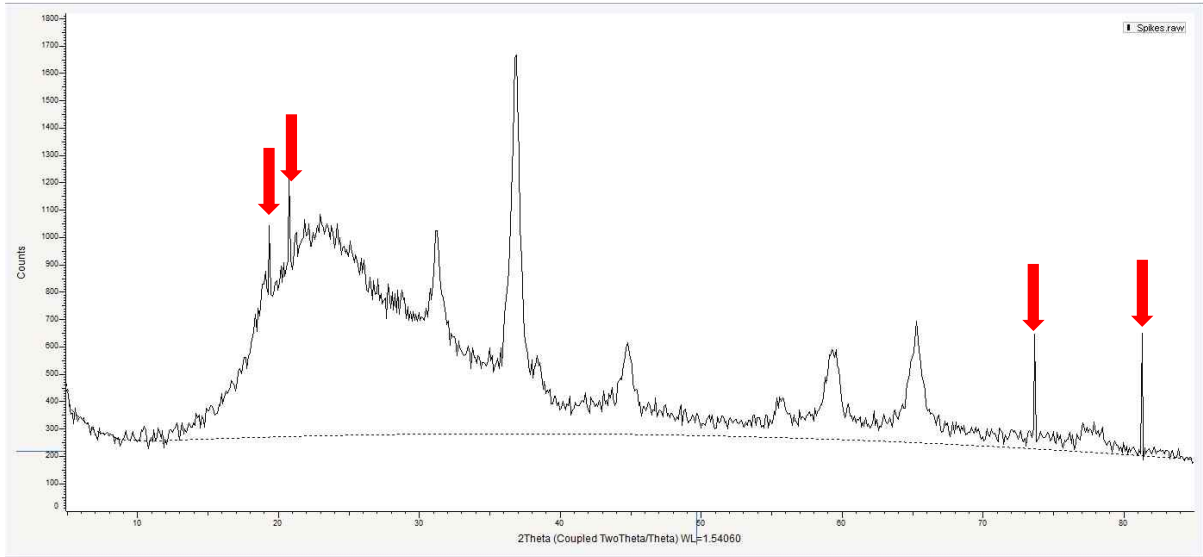
- Y-scale and Y-offset

이 옵션은 peak의 Intensity를 올려주거나 여러 개의 Scan을 동시에 불러왔을 때 offset 값을 주고 data를 plot하고자 할 때 사용하는 옵션으로 보통은 잘 사용하지 않는 옵션이다.

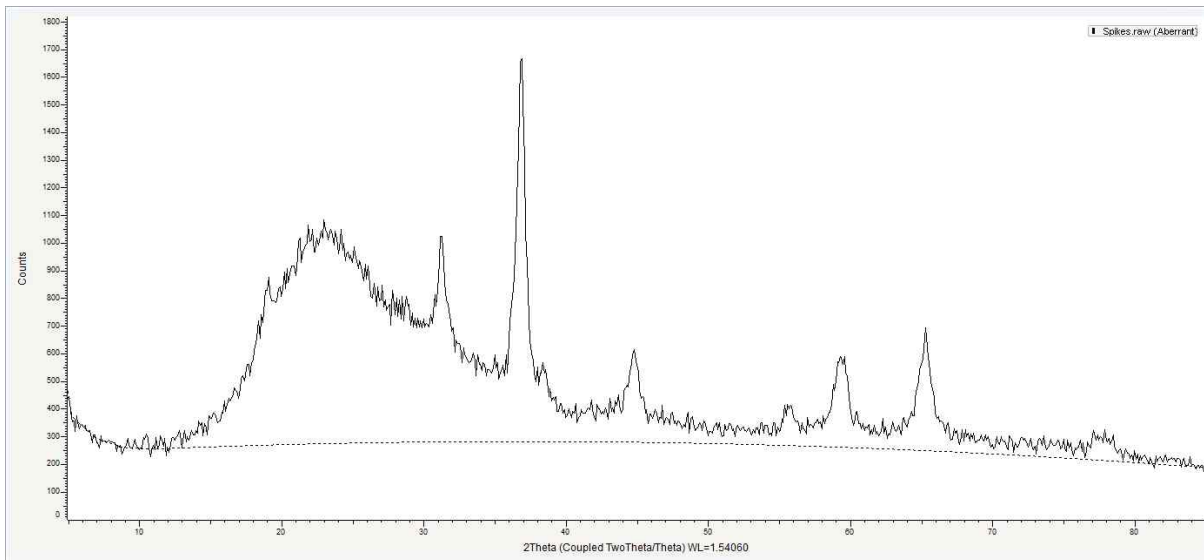
-Aberrant

데이터 측정 중 측정데이터가 중간에 튀는 peak가 나타날 때 이 옵션을 사용하면 자동으로 튀는

peak(parasitic signal)를 선택하여 제거하여 준다.



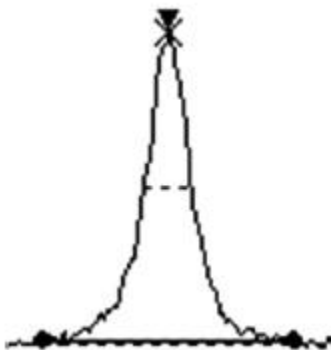
Aberrant 실행 후



- Create Area

이 명령은 peak 하나에 대한 적분을 수행할 수 있으며, 이를 통하여 peak의 면적, d값, Crystallite size등을 수행할 수 있다.

Angle (deg.)		Intensity (cps)	
Left Angle	32.316	Left Int.	18.3
Right Angle	34.056	Right Int.	15.6
Obs. Max	33.184	Gross Int.	229
FWHM	0.316	Net Height	212
Chord Mid.	33.183	Scherrer evaluation	
I. Breadth	0.385	Crystallite Size (Å)	291.6
Gravity C.	33.162	Use FWHM	<input checked="" type="radio"/>
Area (cps x deg.)		Use I. Breadth	<input type="radio"/>
Raw Area	110.9	K =	1
Net Area	81.40	Instr. Width =	0
<input type="button" value="Select an Area"/>		<input type="button" value="Append this Area"/>	



A base line at the area bottom

A dashed line at the half maximum value (shows **FWHM** and the chord)

A cross representing the gravity center position

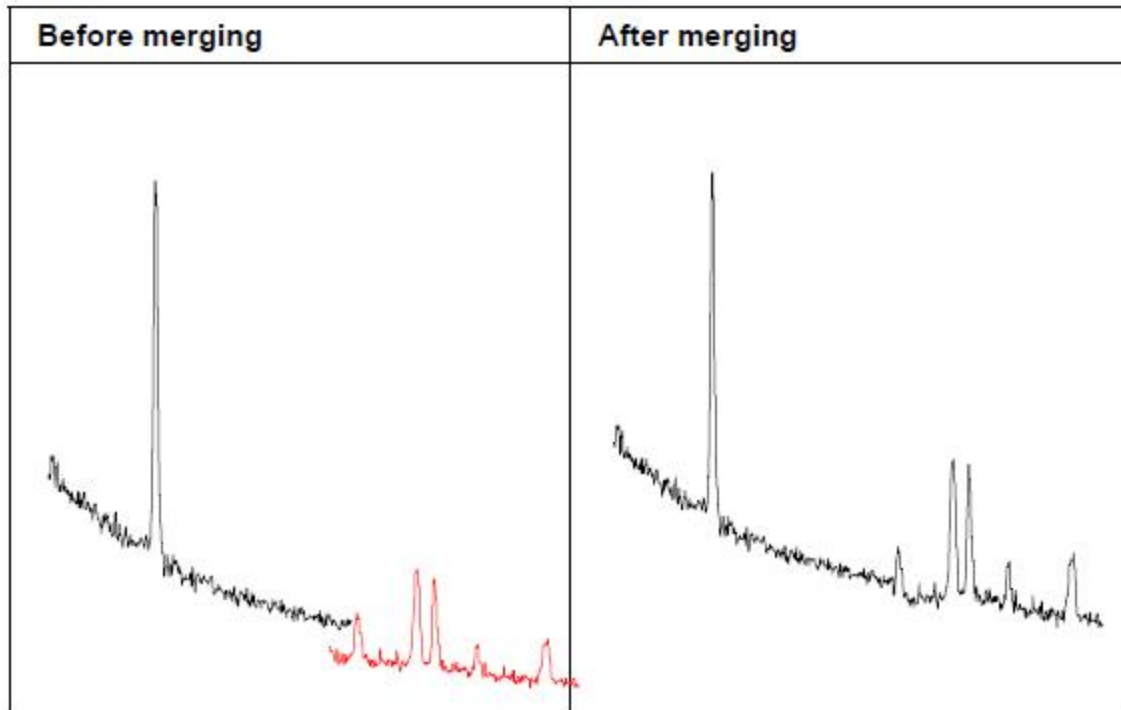
A vertical arrow representing the maximum position

Item	Description
Angle	
Left/Right Angle	Ends of the computation: angles. The input is rounded to the closest data point in X while the input is retained in Y
Obs. Max	Angle corresponding to the maximum intensity
FWHM	Full Width at Half Maximum value
Chord Mid.	Middle of the chord drawn between the mean values of the crossing points used to determine FWHM
I. Breadth	Net area (in cps×scan units) divided by the net height (in cps). It is the breadth of a rectangle having the same net height and the same surface as the peak. Given in scan unit
Gravity C.	Third estimate for the peak location. It is the center of gravity of the net peak. It is the mean of each X position in the interval weighted by the net intensity. It is also given in d (Å) if the scan is 2θ
Area (cps×deg)	
Raw area	Computed with the trapeze method and given in cps×scan units (cps×degrees for angular scans)
Net area	
Intensity (cps)	
Left/Right Int.	Left/right height given in cps
Gross Int.	Gross intensity
Net Height	Self-explanatory
Scherrer evaluation	
Crystallite Size	Crystallite size in Angstroms (Å)
Use FWHM	Select this option if you want to use the FWHM for the calculation of the crystallite size
Use I. Breadth	Select this option if you want to use the Intensity Breadth for the calculation of the crystallite size
K =	Scherrer constant for the calculation of the crystallite size with the Scherrer formula usually taken as 1 or 0.89. The default value is 1
Instr. Width =	Instrumental FWHM (FWHM for a material that exhibits no broadening beyond the instrument contribution) used for the calculation of the crystallite size with the Scherrer formula. The default value is 0

- ADD/merge/substrate

이 세가지 메뉴가 활성화 되기 위해서는 최소한 아래와 같이 두 개의 Scan이 있어야 가능하다. 각각의 명령에 의해 peak를 더하거나 빼거나, merge할 수 있다.

Merge의 경우 활용도가 가장 많으며, 측정구간이 다른 두 개의 scan파일을 하나로 합치는데 사용한다.

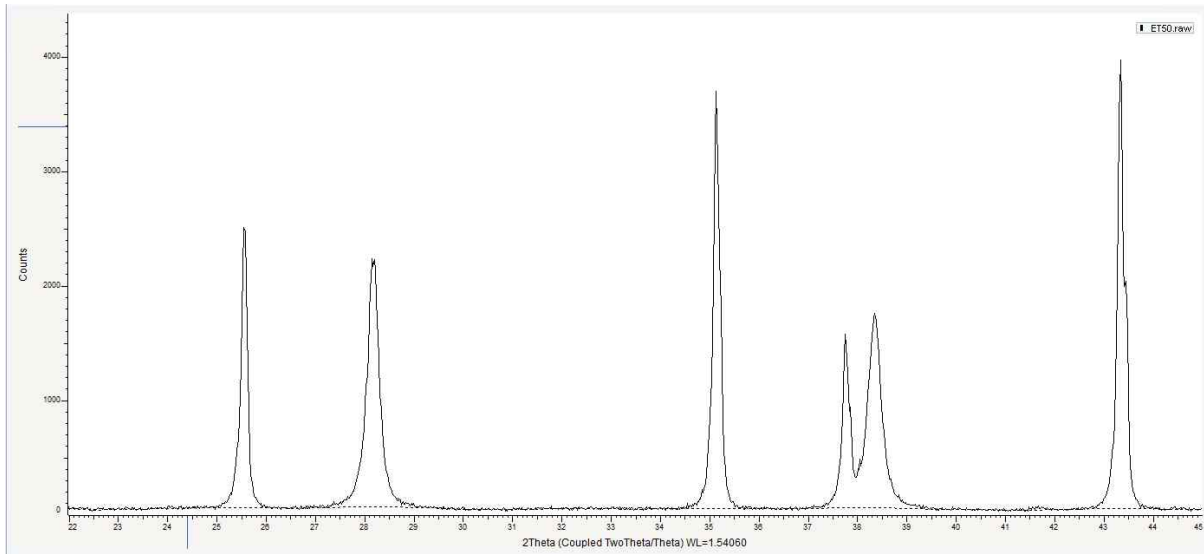


** merge를 수행하기 위해서는 최소한 peak의 baseline이 조금이라도 겹쳐야 가능하다.

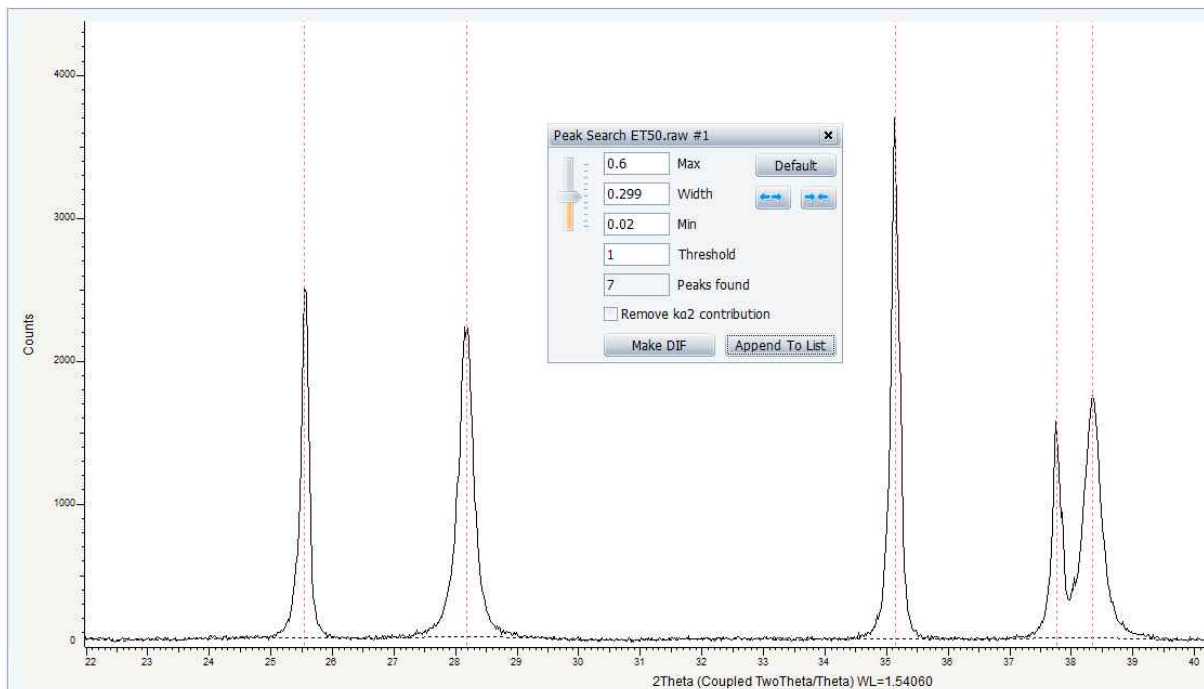
4. Peak Search 및 D값 및 2theta 값의 표시

Step 1 : 분석하고자 하는 peak를 불러온다.

(file -> import scan)

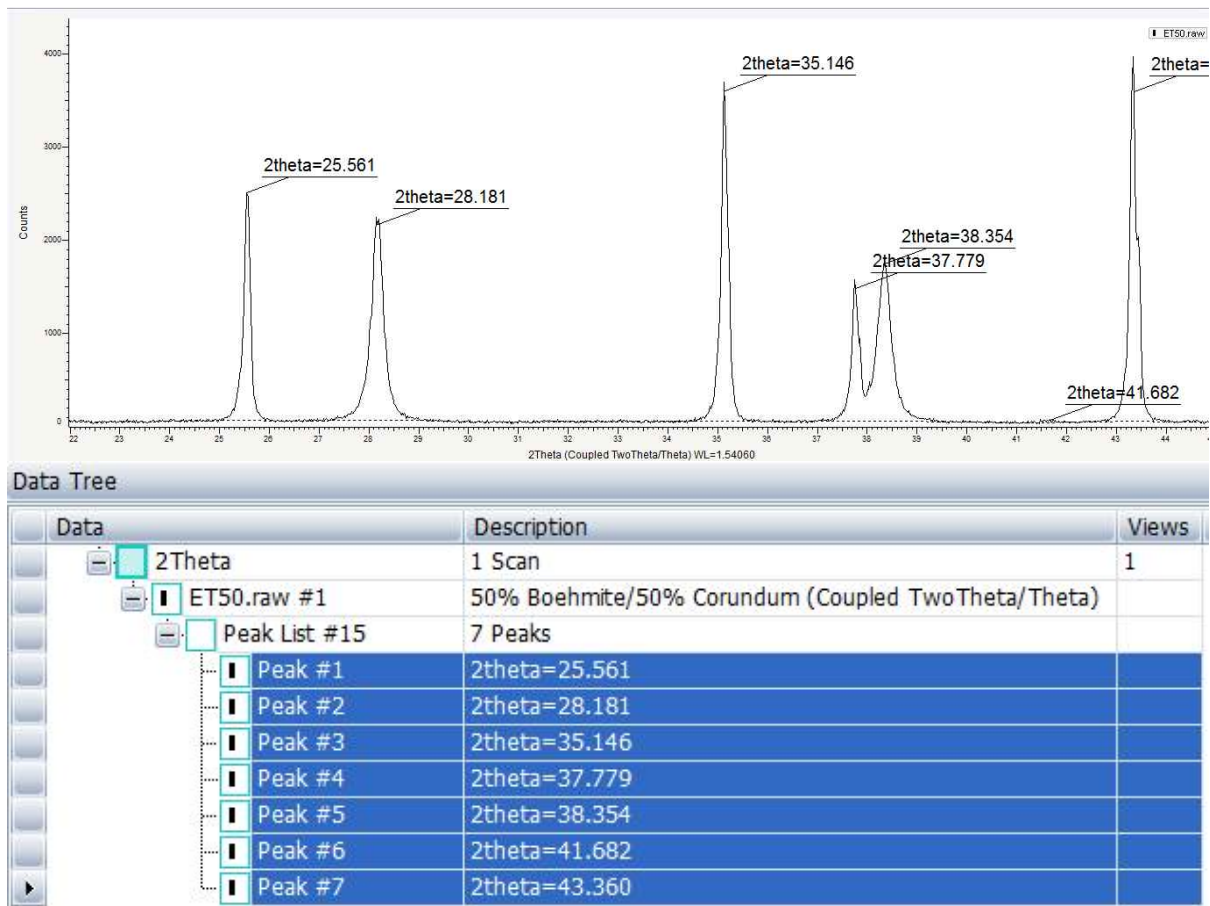


Step 2 : Tool->Peak search를 클릭한다.

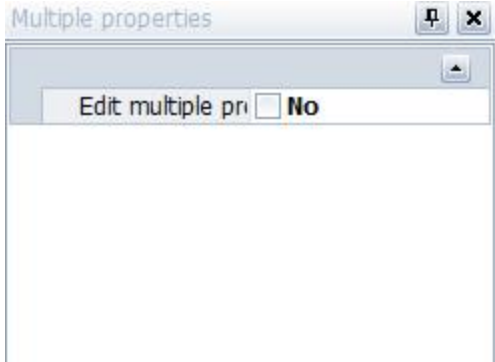


Step 3 : 적절히 Treshold와 width를 조절하여 GOST line을 보고 peak가 잡힐 위치를 선택한 후 'Append To List'를 클릭한다.

Step 4 : 그림과 같이 peak가 선택되어지면 data tree창에 아래와 같이 peak list창이 생성되어진다. Peak list 밑에 peak들이 나열된다.

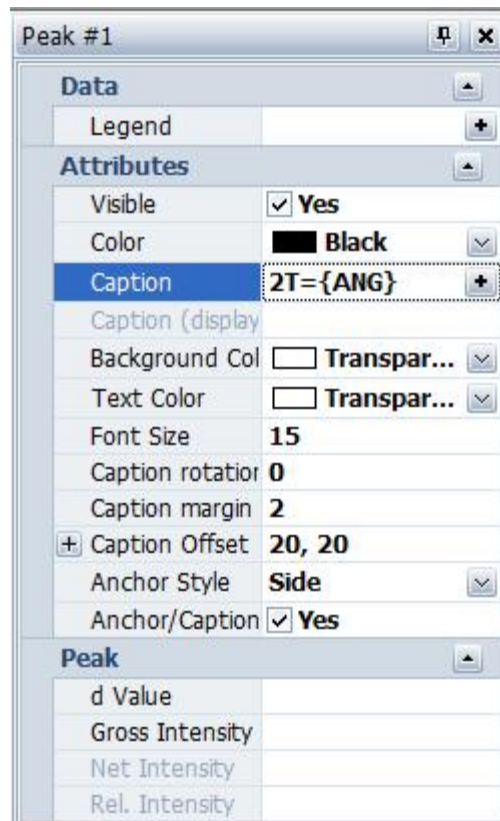
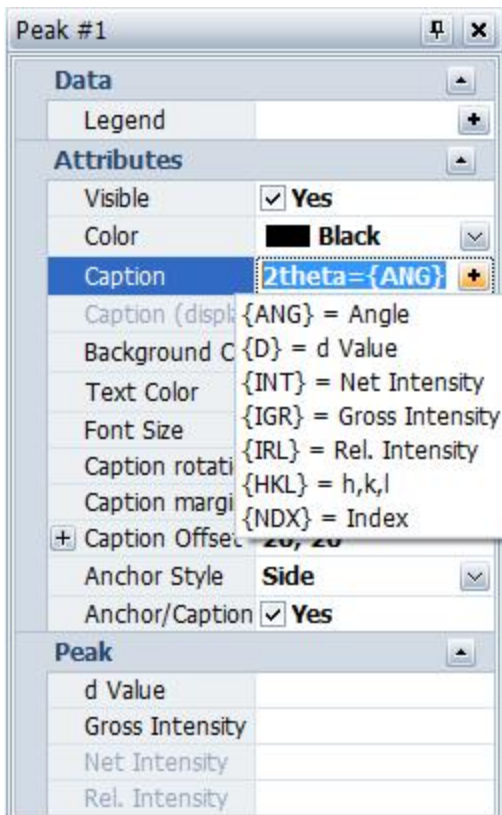


위 그림과 같이 peak들을 모두 선택한 후 data property창으로 이동하여 보면, multiple property 라는 창으로 바뀌어진다. 아래 메뉴에서 'Edit multiple property'에 체크하면 모든 peak들을 한번에 조절할 수 있다.



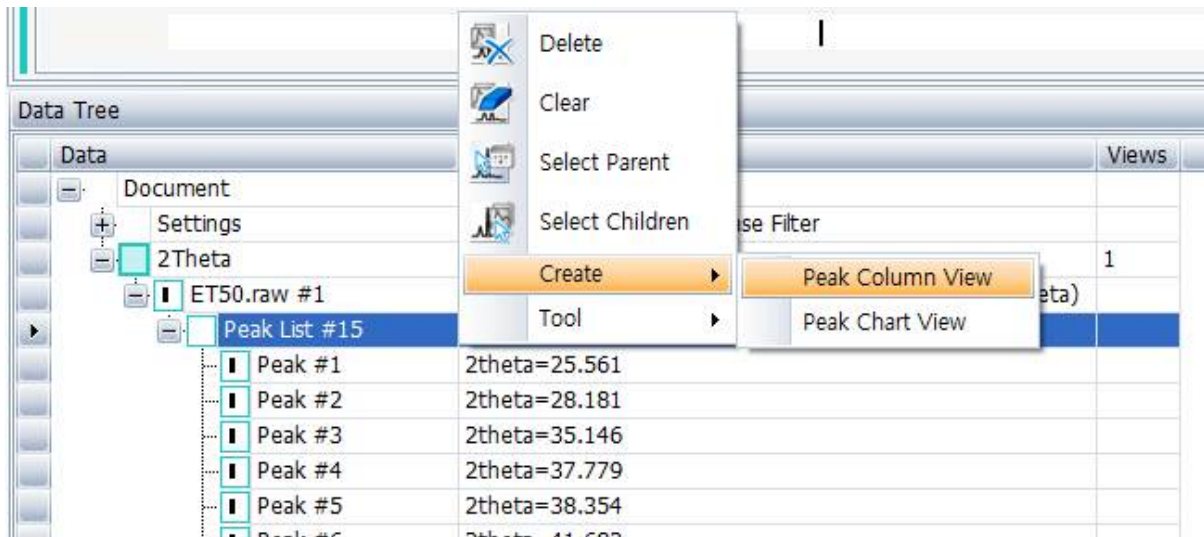
Step 5 : Edit multiple property를 클릭하면 아래그림과 같은 창이 나오는데, 이중 caption 메뉴에서 화면상에 marking할 성분을 선택할 수 있다.

캡션 오른쪽 +메뉴를 클릭하면 선택할 수 있는 성분이 나오는데 여기에 나타나는 메뉴 이외의 모든 표시, 글자는 모두 text로 화면상에 들어가게 된다.



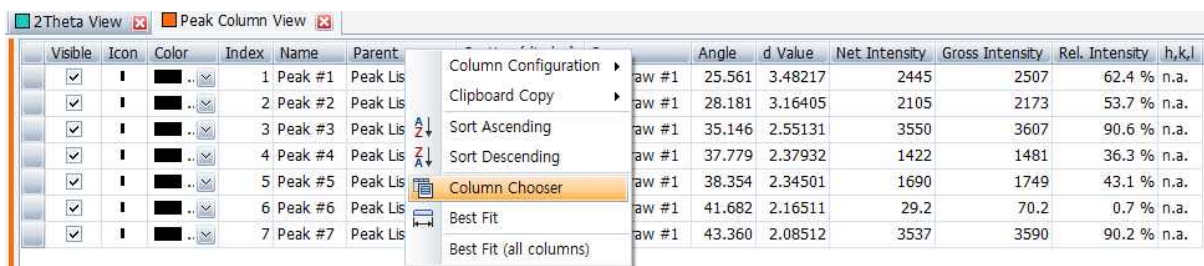
따라서, 화면상에 2T='Angle' 로 표현하고 싶다면 Caption에서 {ANG}선택 후 캡션 창에서 {ANG} 앞에 '2T=' 을 직접 넣으면 2T=Angle 값으로 표현되어 진다. 이외에 D값, Intensity, 상대강도 등도 이와 같은 방법으로 선택하면 된다.

Step 6 : Data Tree창에서 Peak List 클릭->마우스 우클릭 -> Create -> Peak column view 클릭



Step 7 : 이제 peak list들에 대한 컬럼이 생성되었다. 이제 입맛에 맞게 컬럼들을 마우스로 끌어다가 배치하거나 불필요한 항목들은 column chooser를 이용하여 버릴 수 있다.

Column chooser는 컬럼 제목들에 마우스를 갖다 대고 우클릭하면 찾을 수 있다.



5. Search/match

tool안에 들어있는 이 메뉴를 클릭하면, Search/match Option창이 새로 나타나게 되는 데 이를 활용하여 search/match를 수행 할 수 있다.

Search/match 창은 크게 네 가지 창으로 나뉜다.

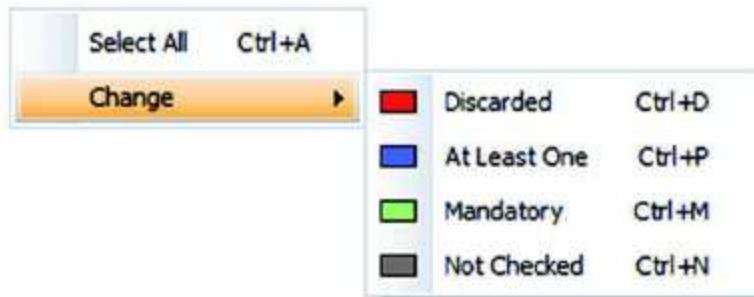
Chemical filter : Search/match 옵션에서 필요한 원소와 불필요한 원소를 screening 하는 곳으로 해당 원소를 클릭 혹은 전체원소를 마우스 드래그로 선택하여 마우스 우클릭 하면 회색, 파란색, 녹색, 빨간색 네 가지 색상을 선택할 수 있다.

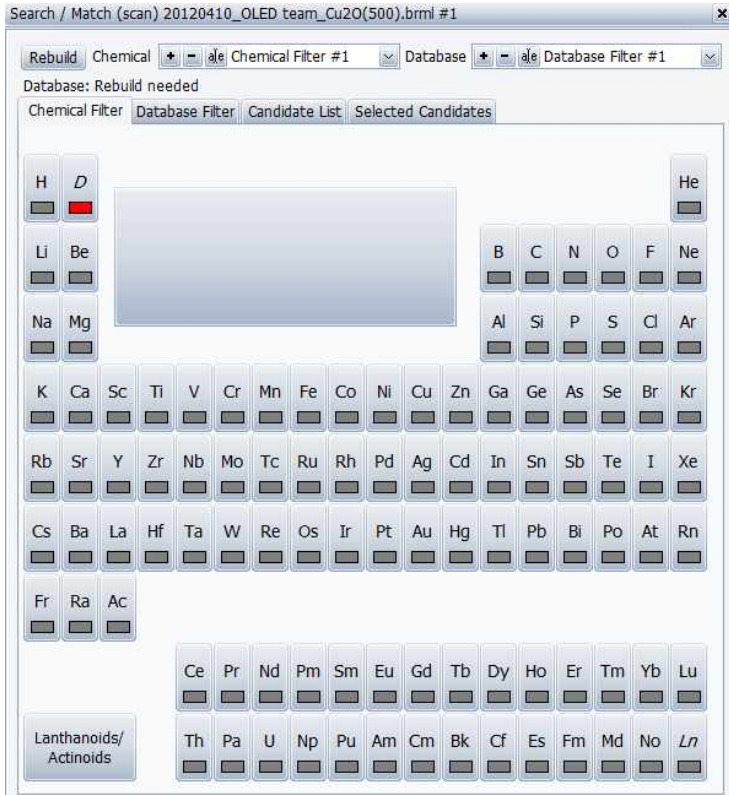
회색은 결합이 존재할 가능성이 있음,

파란색은 결합이 존재할 가능성이 있으며 주요원소(Major)로 존재

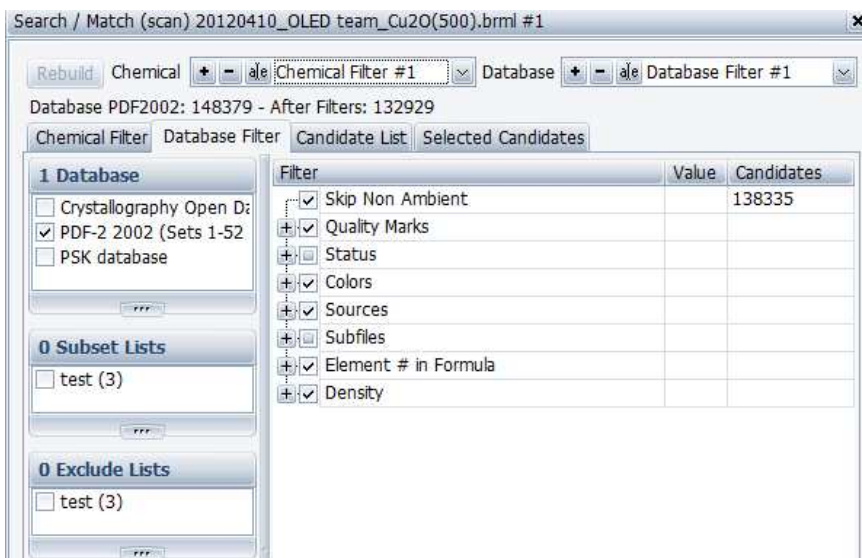
녹색은 반드시 이 원소를 포함한 결합이 있음을 의미.

빨간색은 검색에서 제외됨을 의미한다.





Database filter : Search/match 옵션에서 PDF 데이터 베이스가 설치되어 있다면 보다 다양한 방법으로 screening이 가능하다. 또한 여러 가지 데이터베이스가 존재할 경우 (가령 COD, PDF가 둘 다 설치되어 있는 경우) 모두 사용 혹은 한가지만 선택하여 사용 가능하다.



Filter	Description
Skip Non Ambient	Reject the patterns measured at a non-ambient temperature.
Quality marks	Reject patterns with a defined quality mark.
Status	Reject patterns with a defined status from the search.
Colors	Limit the possible color(s) of the compound searched for.
Sources	Select the sources to use for the search.
Subfiles	Limit the subfiles of the database to search in.
Element # in formula	Define a minimum and/or maximum number of elements in the compound formula.
Density	Define a minimum and/or maximum density for the compound formula.

Mark	Description
Low precision	Low precision pattern
Indexed	Good quality pattern with indexed lines
Blank	Pattern not meeting the Star, Indexed, or Low-Precision criteria
Star (*)	High quality pattern
Calculated	Pattern computed from single-crystal structural parameters
Rietveld	Pattern resulting from a Rietveld refinement
Hypothetical	Pattern calculated theoretically from an isostructural compound
Prototyping	Quality given to patterns which structural data was assigned by an editorial action of this Linus Pauling File (not recovered from the primary literature). This quality mark is specific to PDF-4

Status	Description
Primary	Pattern recommended by the PDF editorial board
Alternate	Pattern of reasonable quality which has been flagged as a duplicate of a primary pattern
Deleted	Pattern which has an improved replacement (a primary pattern). Its use is not recommended by the PDF editorial committee

**일반적으로 subfile을 screening에 많이 사용하며, organic인지 inorganic 인지 mineral인지 선택할 수 있다.

Candidate list

위에 선별조건에서 선택된 조건으로 peak search/match를 수행하는 창이다.

오른쪽 하단에 'Match' 버튼을 누르면 chemical Filter와 'Database Filer' 에서 현재 선택된 조건에 의해 검색을 수행하게 된다.

Search / Match (scan) m1.raw #1

Rebuild Chemical + - a/e Chemical Filter #1 Database + - a/e Database Filter #1

Database PDF2002: 148379 - After Filters: 132929

Chemical Filter Database Filter Candidate List Selected Candidates

Index #	Name	Formula	%	Source	ID
1	Calcite	Ca C O3	90	PDF2002	PDF 7
2	Calcite, syn	Ca C O3	69	PDF2002	PDF 0
3	Calcite	Ca C O3	69	PDF2002	PDF 4
4	Calcite	Ca C O3	34	PDF2002	PDF 2
5	Calcium Carbonate	Ca C O3	30	PDF2002	PDF 8
6	Carlinite, syn	Tl2 S	34	PDF2002	PDF 2
7	Magnesium calcite, syn	(Mg0.03 Ca0.97) (C O3)	15	PDF2002	PDF 8
8	Calcite	Ca C O3	77	PDF2002	PDF 0
9	Strontium Germanium Oxide	Sr Ge O3	44	PDF2002	PDF 4
10	Aragonite	Ca C O3 / Ca O · C O2	10	PDF2002	PDF 0
11	Aragonite, syn	Ca C O3	11	PDF2002	PDF 0
12	Calcite	Ca C O3 / Ca O · C O2	16	PDF2002	PDF 0

Group Duplicates Matched 38359 / 132929 Candid...

Search / Match

Whole Range Subrange Criterion: 2: Neutral

Auto Match

Search / Match Search by Name Filter Lists

Candidate list 에 나타나는 결과들의 컬럼에 대한 정의를 아래에 정의하였다..

Index #	Name	Formula	%	Source	ID
1	Calcite	Ca C O3	90	PDF2002	PDF 7
2	Calcite, syn	Ca C O3	69	PDF2002	PDF 0

Column Description

Index # : Rank number of the given pattern during the search run

FOM (Figure Of Merit) : the higher this number, the better the match. Patterns are sorted by decreasing figures of merit (FOM)

Mtc : Number of reference pattern lines matching the unknown in the displayed range

nM : Number of reference pattern lines not matching the unknown in the displayed range

% : Actual Y-Scale percentage

Source : Name of the original database

ID : Pattern number in the database

Q : Quality mark

S : Pattern status

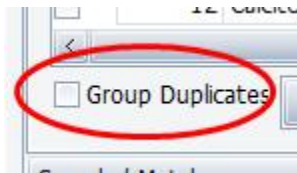
I/Icor : I/Icor is the ratio I/I_{cor} between the intensities of the strongest line of the compound of interest and the strongest line of corundum, both measured from a scan made of a 50-50 mixture, as stored in the PDF database

Mineral : Mineral compound or not

Name : Compound name as written in the database

Formula : Chemical formula

Selected candidate 창 왼쪽 중간의 'Group Duplicate'는 클릭할 경우 중복된 화합물들은 하나로 묶어 표기한다.



Ex: 체크를 하지 않을 경우;

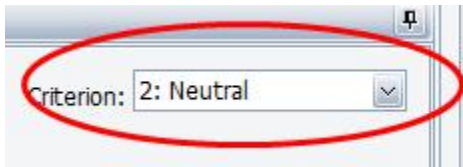
Index #	Name	Formula	%	Source	ID
<input type="checkbox"/>	1 Calcite	Ca C O3	90	PDF2002	PDF 7
<input type="checkbox"/>	2 Calcite, syn	Ca C O3	69	PDF2002	PDF 0
<input type="checkbox"/>	3 Calcite	Ca C O3	69	PDF2002	PDF 4
<input type="checkbox"/>	4 Calcite	Ca C O3	34	PDF2002	PDF 2
<input type="checkbox"/>	5 Calcium Carbonate	Ca C O3	30	PDF2002	PDF 8
<input type="checkbox"/>	6 Carlinite, syn	Tl2 S	34	PDF2002	PDF 2
<input type="checkbox"/>	7 Magnesium calcite, syn	(Mg0.03 Ca0.97) (C O3)	15	PDF2002	PDF 8
<input type="checkbox"/>	8 Calcite	Ca C O3	77	PDF2002	PDF 0
<input type="checkbox"/>	9 Strontium Germanium Oxide	Sr Ge O3	44	PDF2002	PDF 4
<input type="checkbox"/>	10 Aragonite	Ca C O3 / Ca O · C O2	10	PDF2002	PDF 0
<input type="checkbox"/>	11 Aragonite, syn	Ca C O3	11	PDF2002	PDF 0
<input type="checkbox"/>	12 Calcite	Ca C O3 / Ca O · C O2	16	PDF2002	PDF 0

Duplicate에 체크할 경우;

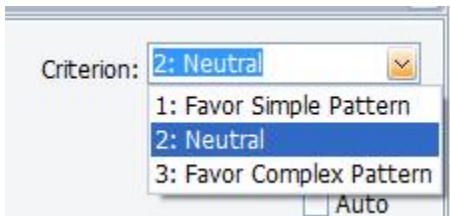
Index #	Name	Formula	%	Source	ID
<input checked="" type="checkbox"/>	(+3) 1 Calcite	Ca C O3	90	PDF2002	PC
<input type="checkbox"/>	4 Calcite	Ca C O3	34	PDF2002	PC
<input type="checkbox"/>	6 Carlinite, syn	Tl2 S	34	PDF2002	PC
<input checked="" type="checkbox"/>	(+2) 7 Magnesium calcite, syn	(Mg0.03 Ca0.97) (C O3)	15	PDF2002	PC
<input type="checkbox"/>	8 Calcite	Ca C O3	77	PDF2002	PC
<input type="checkbox"/>	9 Strontium Germanium Oxide	Sr Ge O3	44	PDF2002	PC
<input type="checkbox"/>	10 Aragonite	Ca C O3 / Ca O · C O2	10	PDF2002	PC
<input checked="" type="checkbox"/>	(+2) 11 Aragonite, syn	Ca C O3	11	PDF2002	PC
<input type="checkbox"/>	12 Calcite	Ca C O3 / Ca O · C O2	16	PDF2002	PC
<input type="checkbox"/>	13 Rubidium Iron Selenate	Rb Fe (Se O4)2	42	PDF2002	PC
<input type="checkbox"/>	15 Arsenic Iodide Telluride	As5 Te7 I	73	PDF2002	PC
<input type="checkbox"/>	16 Aragonite	Ca C O3	11	PDF2002	PC

따라서 Group Duplicate를 사용하면 보다 넓은 범위에서 화합물 결합을 한눈에 파악하기 용이하다.

Selected candidate 창 오른쪽 하단에 Criterion메뉴는 search를 수행할 때 어떤 기준에 의해 search를 수행 할 지를 결정한다.



여기에는 3가지 메뉴를 선택할 수 있다.



Simple pattern의 경우 측정결과에서 나타나는 pattern의 수가 적은 경우 에 선택한다.

Complex pattern의 경우 나타나는 pattern의 수가 매우 많을 경우 선택하면 유리하다.

대부분의 경우 unknown에서 search를 수행할 경우 **Neutral**로 선택하면 대부분 큰 무리 없이 search를 수행하므로, 특별한 경우가 아니면, Neutral을 권장한다.

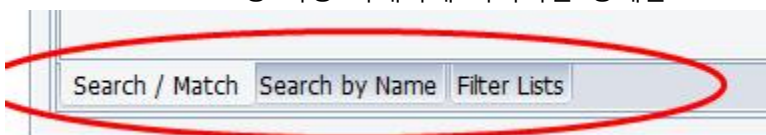
Selected candidate 창 오른쪽 하단에 'Auto' 메뉴(V.2.0이상부터 가능)는 search뿐만 아니라 match 과정도 컴퓨터가 수행을 하여 결과까지 내어 준다.



Auto에 체크 할 경우 사용자는 search결과창에 나타난 여러 화합물 중 어떤 화합물을 선택할 것인지에 대한 고민을 할 필요가 없어진다. 컴퓨터가 이 과정까지 모두 수행해 주기 때문이다.

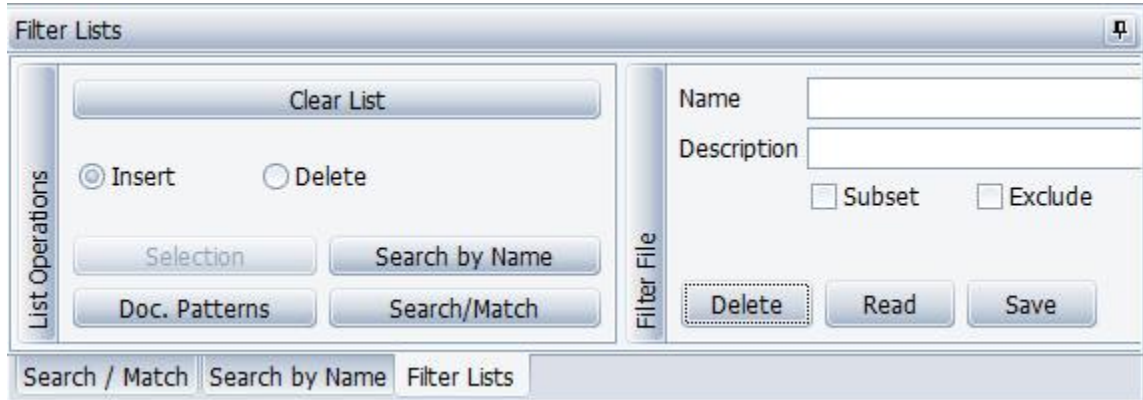
그러나, Auto를 쓰고자 할 때는 검색조건에 대하여 Screening을 잘해야 하며, 너무 많은 line들이 서로 중복되는 복잡한 화합물에는 사용하지 않는 것이 바람직하다.

Selected candidate 창 가장 아래쪽에 나타나는 창에는 Search by name과 Filer list가 있다.



Search by name은 검색조건에 의해 부합되는 것을 찾기 어려울 때 알고 있는 화합물명으로 검색 검색 볼 때 사용한다.

Filter List를 클릭하면 Search결과 창이 아래와 같이 나타난다.



왼쪽 LIST operation창에 나타나는 메뉴들의 정의는 아래와 같다.

Selection : Patterns selected in the candidate list. Only the Delete operation can be applied to this selection

Doc. Patterns : All the patterns of the current document

Search by Name : All the patterns from the current Search by Name results

Search/Match : All the patterns from the Search/Match results

오른쪽 Filter List창은 검색옵션에 의해 검색된 결과를 Subset 혹은 Exclude Range로 만들어 검색 조건에 추가 혹은 제거 할 수 있는 기능을 가졌다. 쉬운 이해를 위해 아래 예제를 살펴보자.

우선 Calcite, aragonite, Brucite가 들어있는 화합물을 Search/match에 의해 검색하였다고 가정하면 이 검색조건을 Filer list 에 등록하여 다른 비슷한 화합물 측정 결과에서 검색조건에 이전에 했던 작업을 다시 수행하지 않고 추가하는 작업을 하고자 할 때 이 Filter List를 사용한다.

Step 1 : 화합물을 Search한다.

Search / Match (scan) m1.raw #1

Rebuild Chemical a/e Chemical Filter #1 Database a/e Database Filter #1

Database PDF2002: 148379 - After Filters: 132929

Chemical Filter Database Filter Candidate List Selected Candidates

Index #	Name	Formula	%	Source	ID
<input checked="" type="checkbox"/>	1 Calcite	Ca C O3	90	PDF2002	PDF 7
<input type="checkbox"/>	2 Calcite, syn	Ca C O3	69	PDF2002	PDF 0
<input type="checkbox"/>	3 Calcite	Ca C O3	69	PDF2002	PDF 4
<input type="checkbox"/>	4 Calcite	Ca C O3	34	PDF2002	PDF 2
<input type="checkbox"/>	5 Calcium Carbonate	Ca C O3	30	PDF2002	PDF 8
<input type="checkbox"/>	6 Carlinite, syn	Tl2 S	34	PDF2002	PDF 2
<input type="checkbox"/>	7 Magnesium calcite, syn	(Mg0.03 Ca0.97) (C O3)	15	PDF2002	PDF 8
<input type="checkbox"/>	8 Calcite	Ca C O3	77	PDF2002	PDF 0
<input type="checkbox"/>	9 Strontium Germanium Oxide	Sr Ge O3	44	PDF2002	PDF 4
<input checked="" type="checkbox"/>	10 Aragonite	Ca C O3 / Ca O · C O2	10	PDF2002	PDF 0
<input type="checkbox"/>	11 Aragonite, syn	Ca C O3	11	PDF2002	PDF 0
<input type="checkbox"/>	12 Calcite	Ca C O3 / Ca O · C O2	16	PDF2002	PDF 0

Group Duplicates Matched 38359 / 132929 Candid...

Search / Match

Whole Range Subrange Criterion: 2: Neutral

Auto

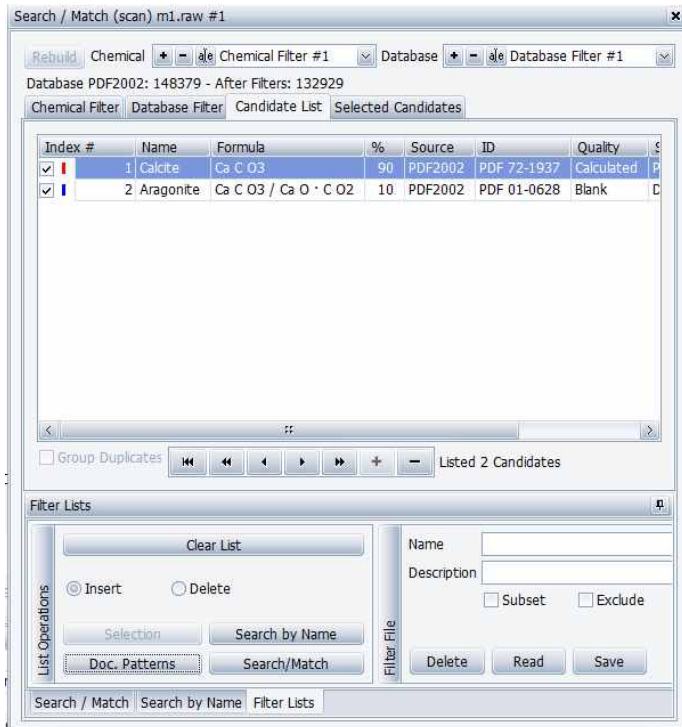
Match

Search / Match Search by Name Filter Lists

알맞은 화합물을 위 그림과 같이 선택한다.

Step 2: Filter List에 들어간다.

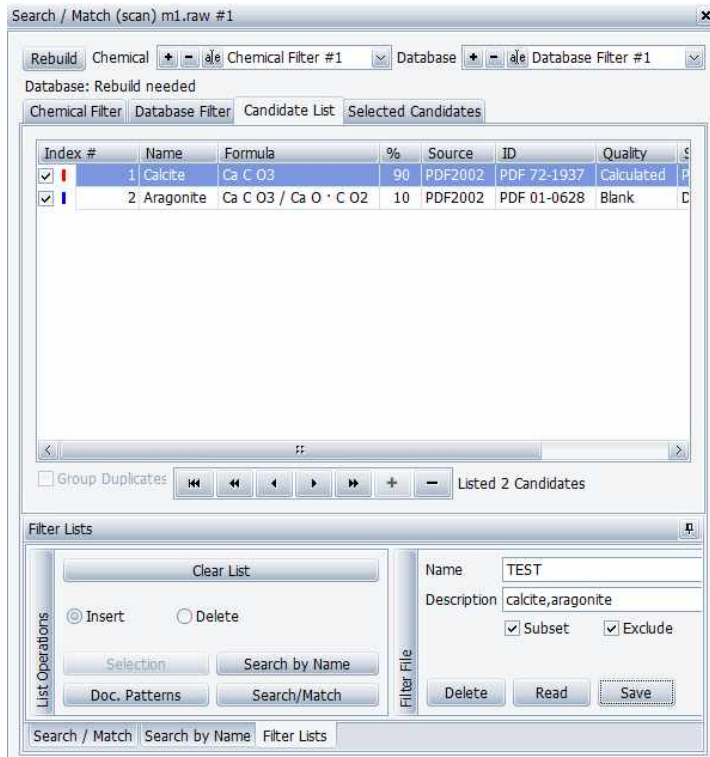
Step 3: List operation 창에서 'DOC.Pattern' 을 클릭한다.



선택된 패턴이 Filter List창에나타내어진다.

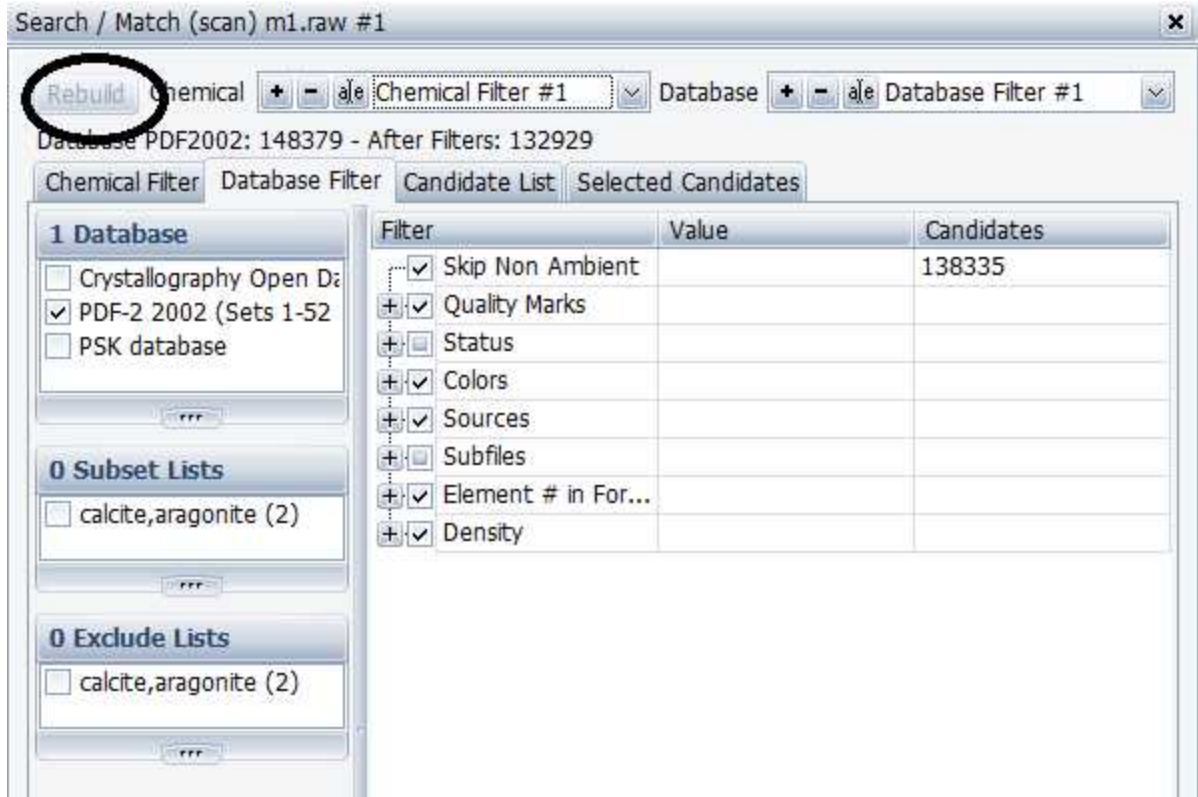
Step 4. 이제 오른쪽 Filter file에서 선택된 패턴을 저장할 수 있다. 이때 subset, exclude 에 체크하면 선택된 패턴을 저장할 수 있다.

Name 란에 저장할 이름을 쓰고 Save를 수행하면 선택된 파일이 subset, exclude에 저장이 된다. 불러올 때 Name에 저장했던 이름 그대로를 치고, Read를 클릭하면 불러올 수 있다.



위 그림과 같이 TEST란 이름으로 저장할 경우 다음 번에 Filter list에서 Name란에 TEST를 입력 후 Read를 클릭하면 다시 불러올 수 있다. 아래 Description에 타이핑한 문자는 Database filter에서 이름으로 나타난다. 저장된 filter list는 다시 불러온 후 'delete'를 클릭하면 삭제할 수 있으며, filter list에서 삭제하면, database filter에서도 삭제된다.

Step 5 : 저장된 pattern list는 Database filter에서 Rebuild를 클릭하면 추가적인 filter 데이터로 사용이 가능하다.



Search / Match (scan) m1.raw #1

Rebuild Chemical + - ale Chemical Filter #1 Database + - ale Database Filter #1

Database PDF2002: 148379 - After Filters: 132929

Chemical Filter Database Filter Candidate List Selected Candidates

Filter	Value	Candidates
<input checked="" type="checkbox"/> Skip Non Ambient		138335
<input checked="" type="checkbox"/> Quality Marks		
<input type="checkbox"/> Status		
<input checked="" type="checkbox"/> Colors		
<input checked="" type="checkbox"/> Sources		
<input type="checkbox"/> Subfiles		
<input checked="" type="checkbox"/> Element # in For...		
<input checked="" type="checkbox"/> Density		

1 Database

- Crystallography Open Da
- PDF-2 2002 (Sets 1-52)
- PSK database

0 Subset Lists

- calcite,aragonite (2)

0 Exclude Lists

- calcite,aragonite (2)

Subset list는 검색 시 추가하는 조건이며, exclude list는 검색 시 제외하는 조건으로 들어가게 된다.

Selected candidate

Candidate list에서 선택된 패턴들은 여기서 다시 한번 조절할 수 있다.

조절 옵션으로 Y-scale조절과 Residu 설정이 있다.

Residu 설정은 현재 선택된 pattern 외 찾지 못한 패턴을 검색하고자 할 때, 사용하며,

Residu 창에서 선택된 패턴을 클릭 후 오른쪽 하단에 'Apply'버튼을 클릭하면, 선택된 패턴은 다음 검색조건에서 제외된다.

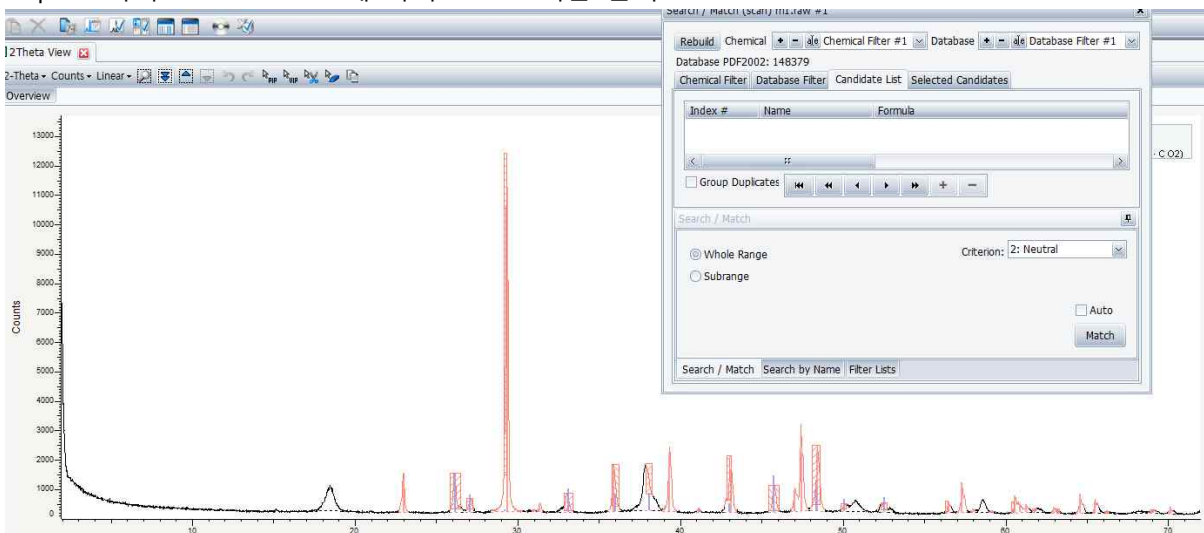
Title	Value
Database	PDF2002
Pattern Number	PDF 72-1937
Formula	Ca C O3
Mineral Name	Calcite
Name	Calcium Carbonate
Quality	Calculated
Status	Primary
I/Icor	3.31
System	Rhombohedral
Space Group	R-3c (167)
a	4.994
c	17.081
Volume	368.93
Molecular Weight	100.09
Z	6
Density (calculated)	2.702
F(N)	999.9 (0.0001,30)
Subfiles	Inorganic, Mineral, Data source structure databases
Comments	
ICSD Collection Code	020179
Temperature Factor	ATF
Remark From ICSD/CSD	REM M PDF 5-586
Structure	
Publication	Dokl. Akad. Nauk SSSR
Detail	volume 245, page 1099 (1979)
Authors	Borodin, V.L., Lutin, V.I., Ilyukhin, V.V., Belov, N.V.
Primary Reference	
Publication	Calculated from ICSD using POWD-12++

만일 search 를 수행하여도 못 찾은 pattern이 있다면 select candidate에서 Residu 를 사용하여 검색하여 보자.

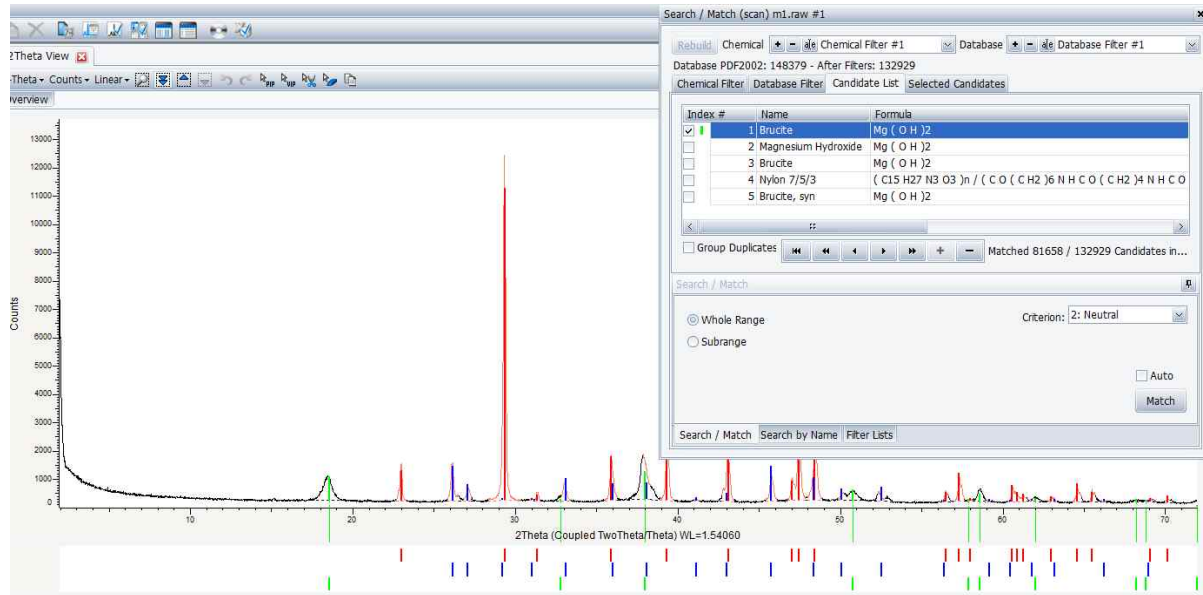
Step 1 : Candidate List에서 검색 -> Selected candidate

Step 2 : 패턴 클릭 -> Residu 에서 Apply

Step 3 : 다시 Candidate List에 와서 Match 버튼 클릭

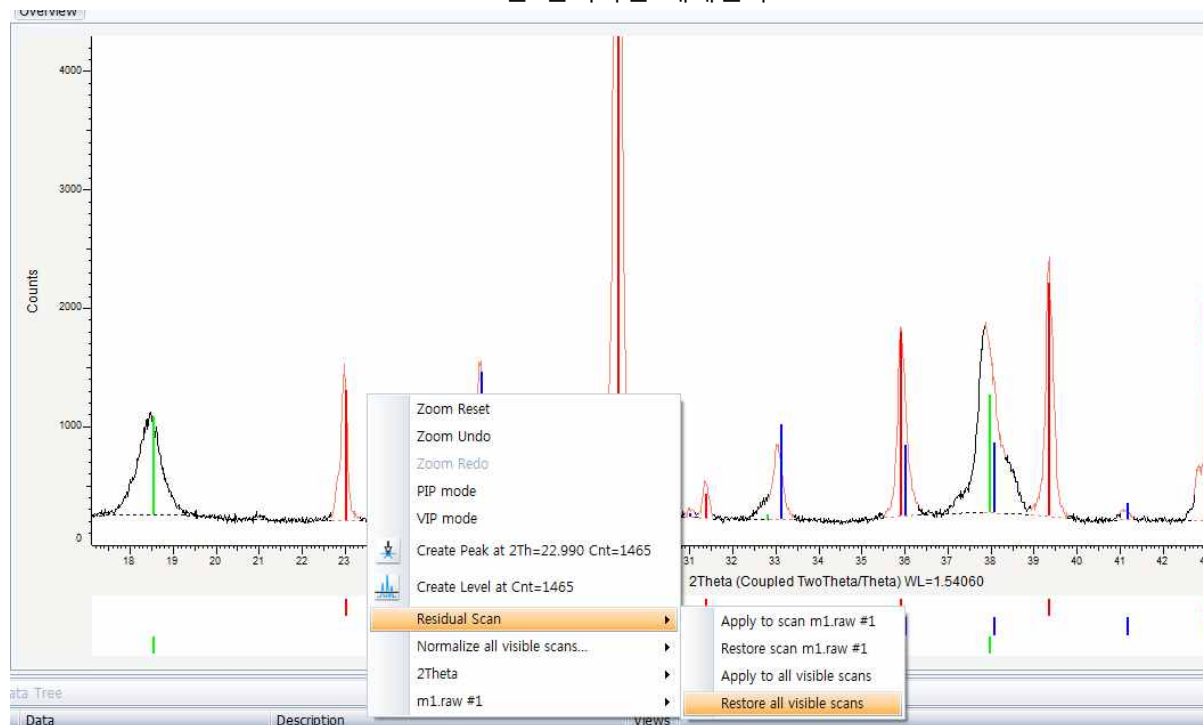


Step 4 : 후보들 중 맞는 패턴을 다시 검색



Step 5 : 화면상에서 Residu 구간해제

Residu 설정이 되어 있는 화면상의 peak위치(보통 옅은 분홍색으로 표시됨)에서 마우스 우클릭후 Residual Scan -> Restore all visible scans를 클릭하면 해제된다.



6. Area menu를 이용한 Crystallite Size 계산 및 Peak 면적계산

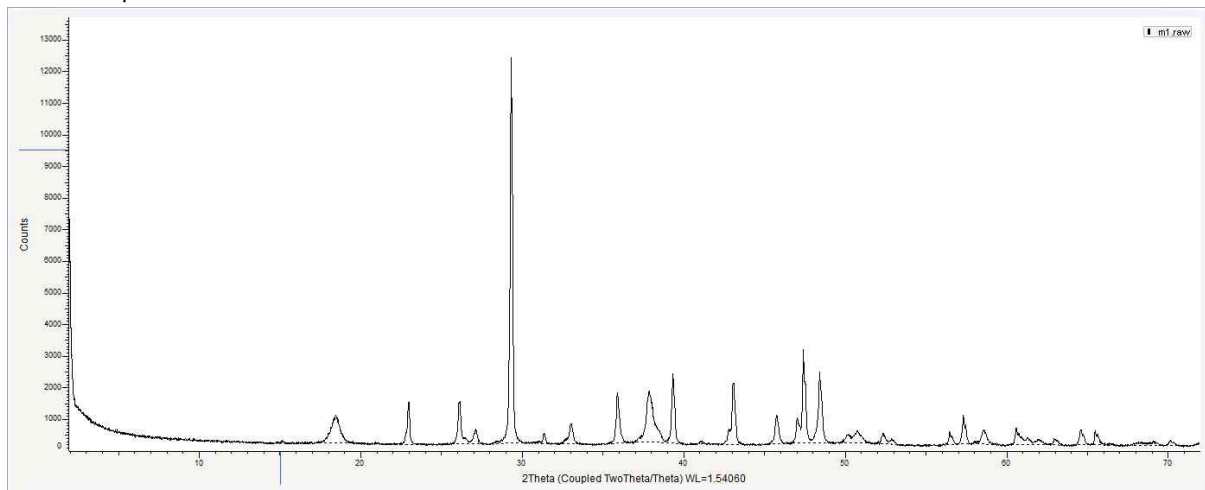
일반적으로 crystallite size를 구하는 데는 scherrer 공식을 이용하는데 Area명령어에서는 곧바로 적용된다. 이때 상수 K값을 결정해야 하는 데 일반적으로, 0.89혹은 1을 사용한다.

FWHM 을 사용할 경우 0.89를, I.Breadth 를 이용할 때는 1을 선택한다.

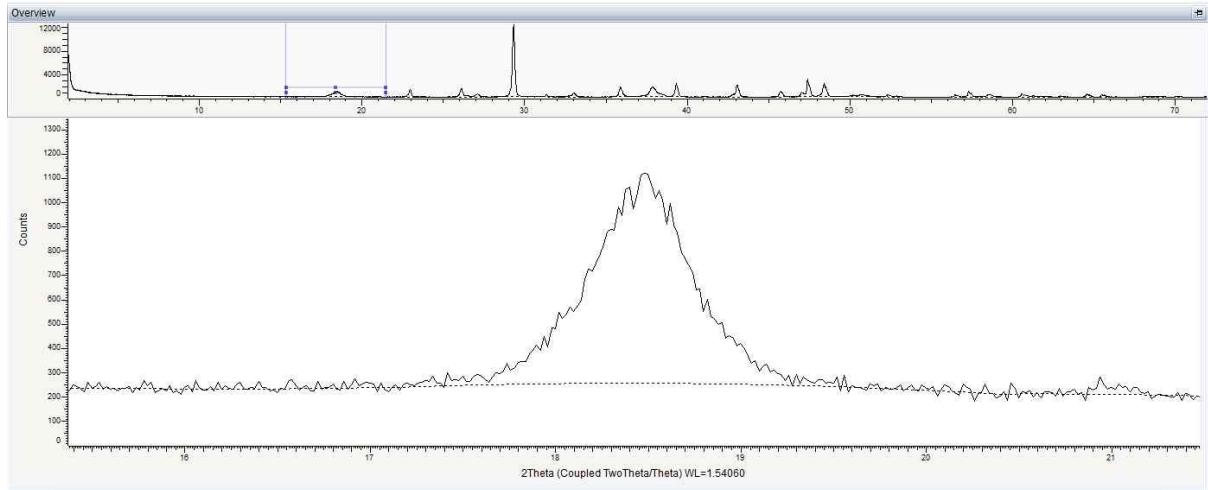
Instr.width 는 디폴트 값이 0 으로 설정되어 있으며, 결정사이즈가 1um이상이 표준물질을 사용하여 broadening을 측정한 값을 여기에 집어 넣으면 된다. 대표적인 물질로 LaB6(NIST 660)등이 있다.

Step 1: scan file을 불러온다.

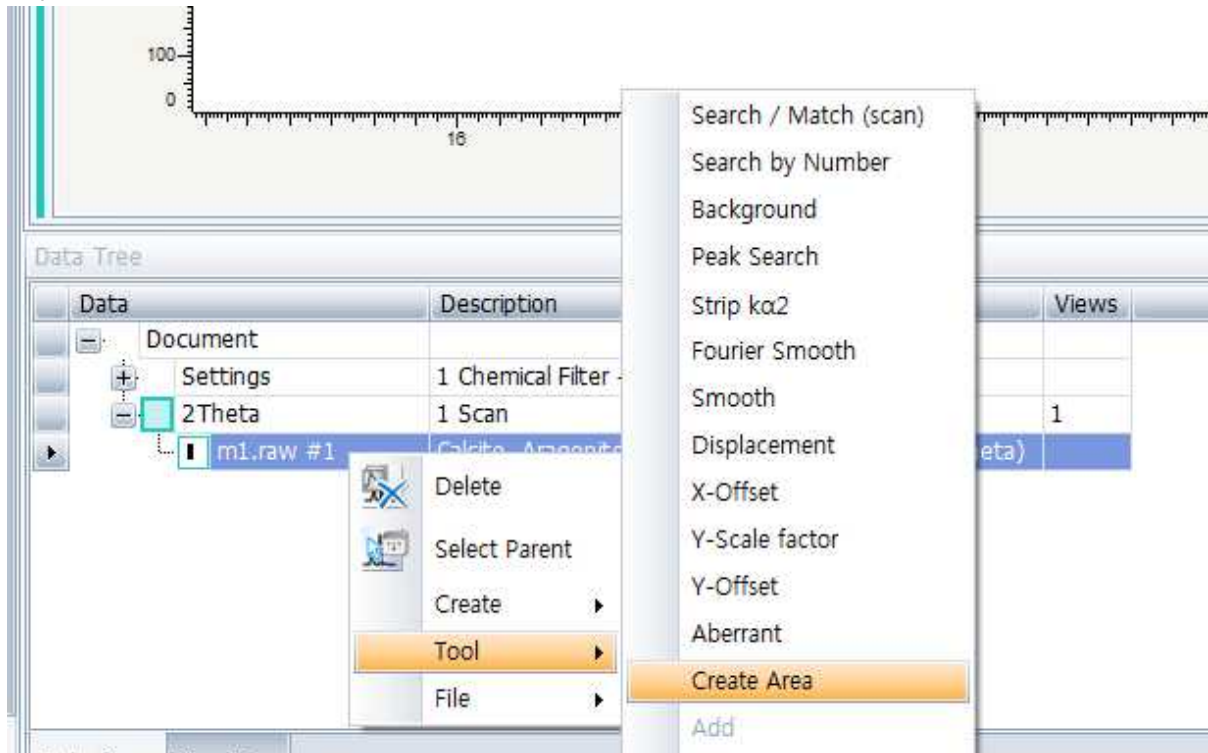
File -> import scan



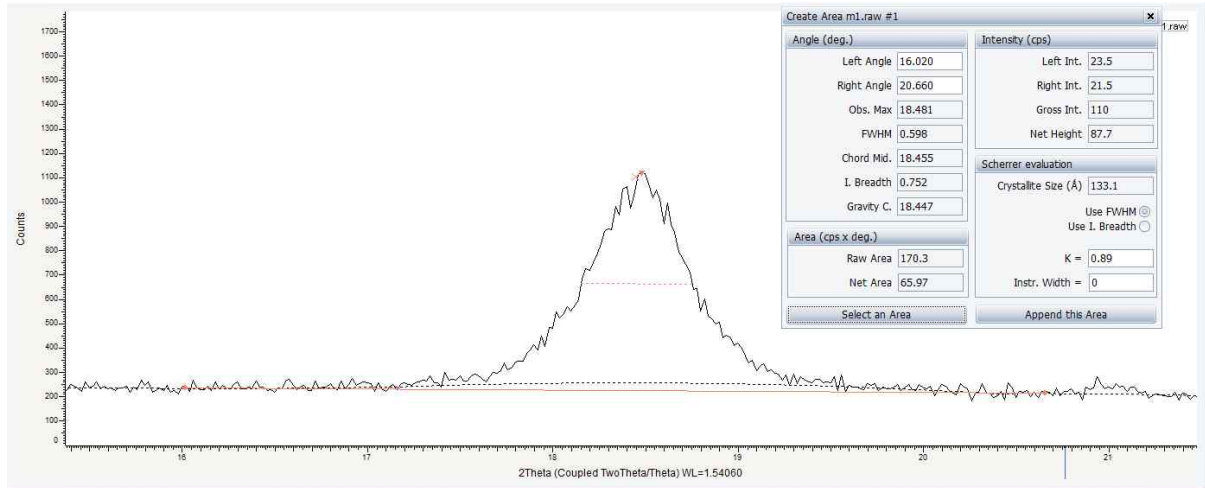
Step 2 : Area 를 구할 위치를 확대한다.



Step 3 : Data Tree에서 scan file클릭후 마우스 우클릭->Tool->Create Area 를 클릭한다.



Step 4: Create Area창에서 Select an Area클릭후 좌측에서 우측까지 적절한 영역의 Background 위치를 선정하여 마우스로 드래그 한다.



Step 5 : Area 가 선택되어 지면, Append the Area를 클릭한다.

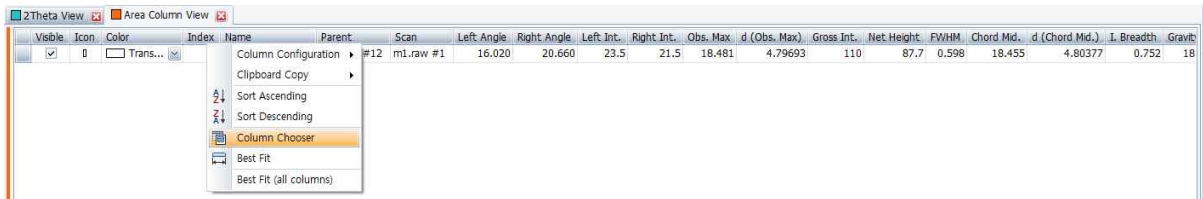
그럼 Data tree창에 'Area list'가 생성되며, 하위 트리에 선택된 Area정보가 첨부된다.

Step 6 : Data Tree창에서 'Area list'에 클릭 후 마우스 우클릭 -> create -> Area column view 클릭

Data	Description	Views
Document		
Settings	1 Chemical Filter - 1 Database Filter	
2Theta	1 Scan	1
m1.raw #1	Calcite, Aragonite, Brucite (Coupled Two Theta/Theta)	
Area List #12	1 Area	

Step 7 : 이제 Area에 대한 column이 생성되었다.

Area column에 가서 각 컬럼들 제목에 마우스 우클릭 후 column chooser를 선택하여 불필요한 정보들은 마우스 드래그로 끌어다가 던지면 나만의 맞춤형 컬럼으로 셋팅할 수 있다.



7. XRF 데이터를 이용한 정량분석

정량분석은 Semi-quantitative 로 이루어지며, 데이터베이스가 있어야 가능하다.

일반적으로 XRD를 이용한 반정량분석은 데이터베이스 상의 I/Ic 데이터를 이용하기 때문에 내 샘플과 데이터 베이스 상의 Intensity강도가 상이하다면, 화합물간의 정량분석은 잘 맞지 않는다. 하지만, chemical analysis(XRF 결과와 같은)에서 원소의 정량적 값이 주어진다면, XRD상의 정량분석에 꽤 유용하게 이용될 수 있다.

Step 1 : 분석하고자 하는 화합물의 원소분석을 수행한다. 일반적으로 XRF가 있다면 그 샘플을 그대로 XRD에 이용할 수 있기 때문에 용이하다.(glass bead 샘플 제외)

데이터 form은 아래와 같이 주고 txt파일로 만들면 된다.

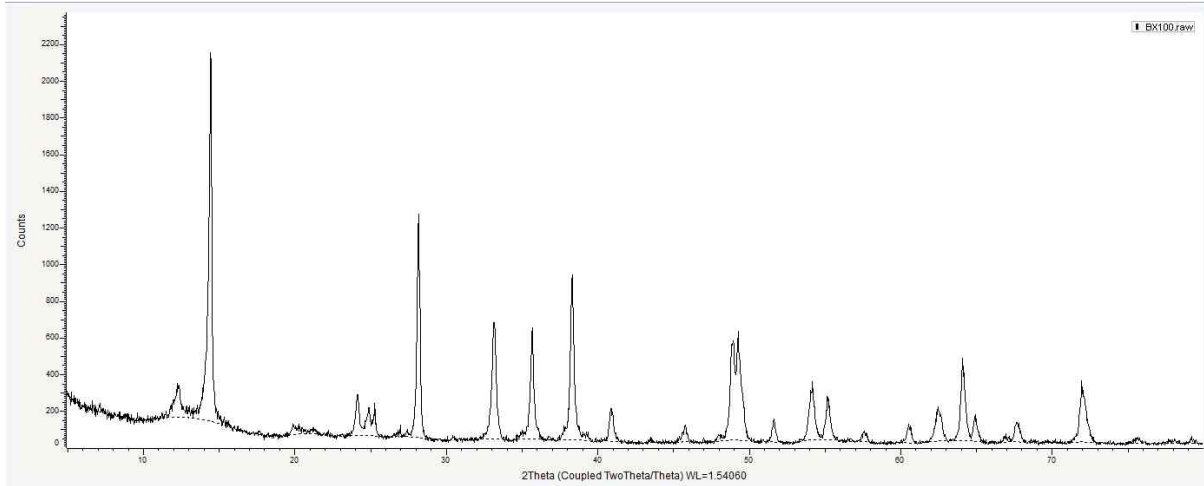
Example of valid lines:

CaO 0.40	(means "40% of calcium oxide")
"CaO" "0.40"	
SiO2 60,0%	(the separator is a tabulation)
Ti=120ppm comment	(the second separator is a tabulation)

혹은 아래와 같은 form도 허용된다.

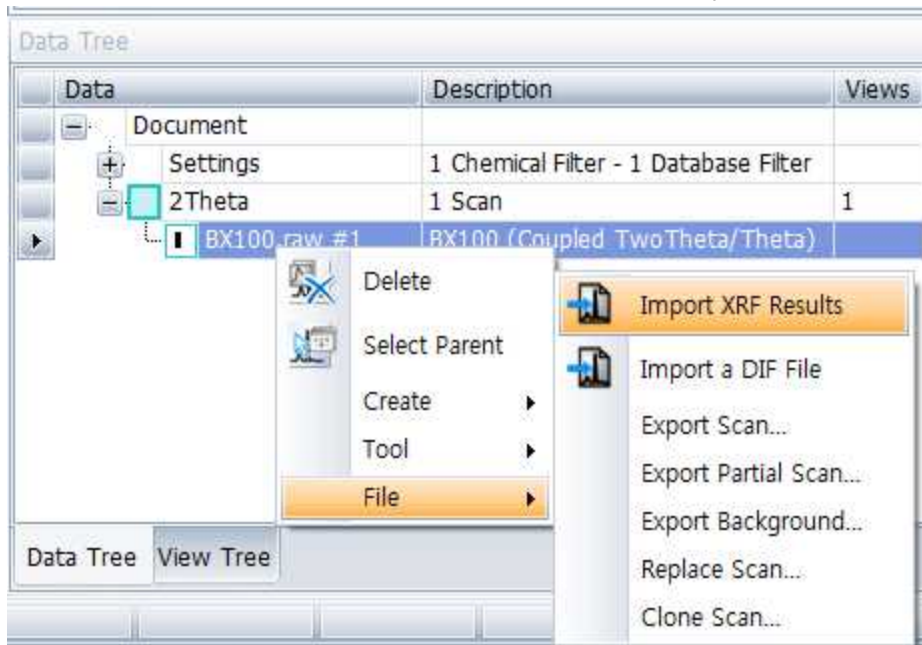
```
O | 42.3%
Al | 32.5%
Fe | 18.3%
Si | 3.92%
Ti | 1.61 %
```

Step 2 : XRD측정후 얻은 데이터를 Eva에서 import scan으로 불러온다.

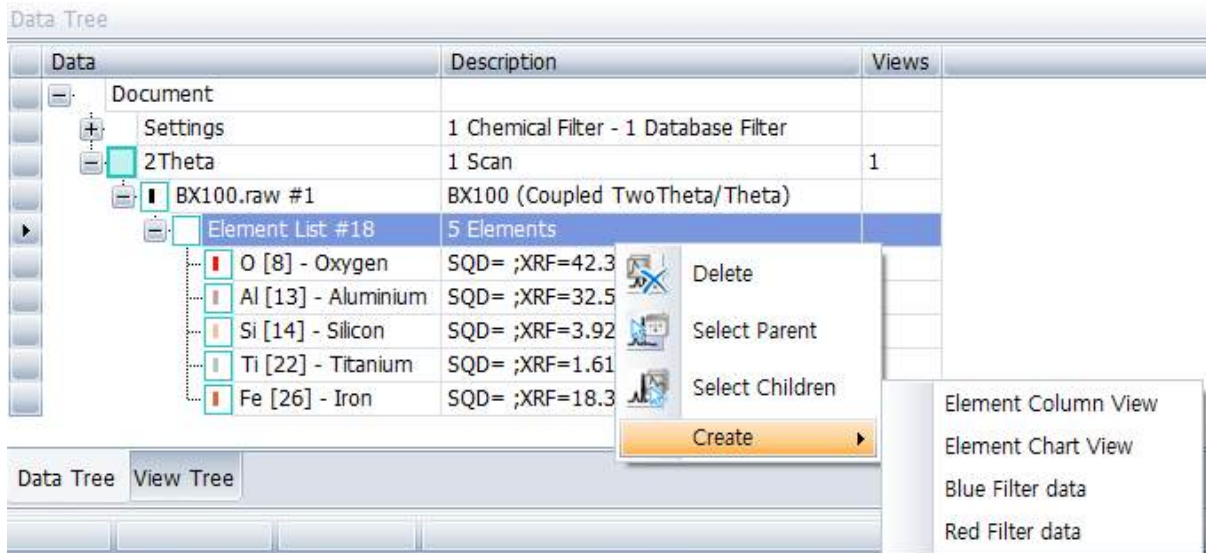


Step 3: chemical Analysis data를 불러온다.

Data tree -> scan file클릭 -> 마우스 우클릭 -> file -> import XRF result



Step 4 : Data tree -> Element list 클릭 -> 마우스 우클릭 -> Create -> Blue(or Green) Filter data



** Blue filter data를 선택하면 search/match에서 chemical filter내에 XRF결과로 선택된 원소들이 파란색으로, 나머지 선택되지 않은 원소는 회색으로 표기된다.

** Red filter data를 선택하면, chemical filter내에 선택한 원소들이 회색으로 나머지 원소들은 빨간색으로 표기된다.

초기에는 여러 화합물이 존재하며, 혹시 실제 결합에 존재하지만 원소분석에서 나타나지 않은 원소가 있을 가능성이 있으므로 blue filter data를 선택한다. 만일 원소분석이 정확하며, 다른 원소가 존재할 가능성이 없다면, Red filter data를 선택하도록 한다.

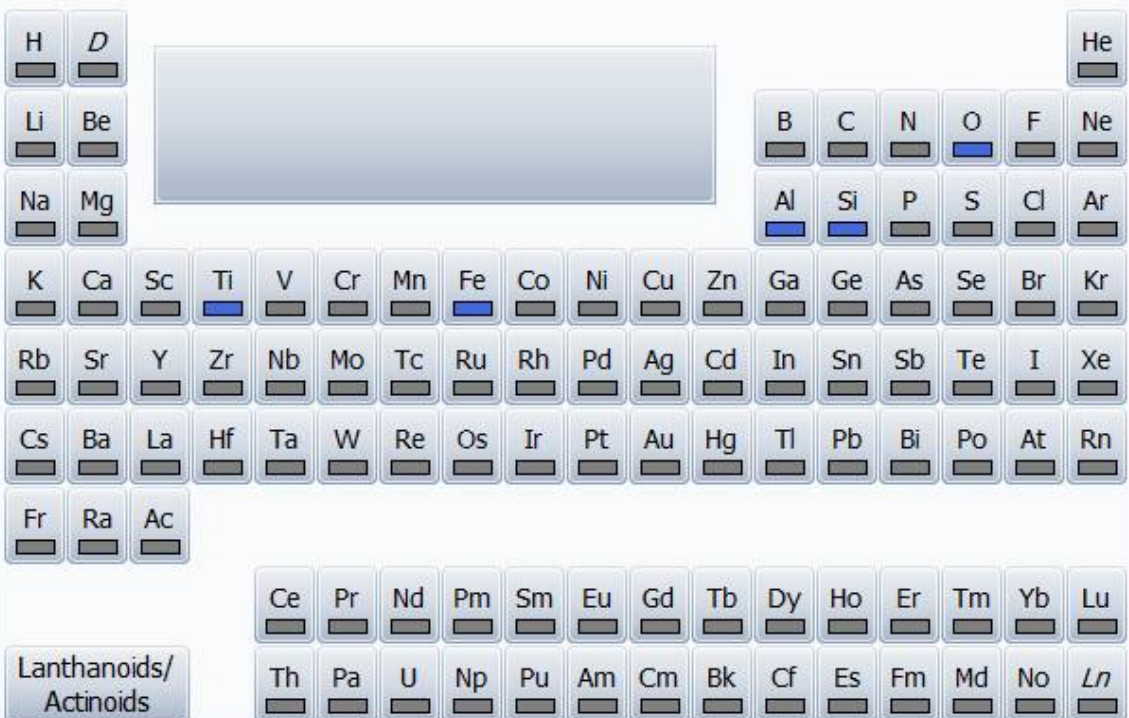
Step 5 : Data tree -> scan file 클릭 -> 마우스 우클릭 -> search/match 클릭

Search / Match (scan) BX100.raw #1

Rebuild Chemical a|e BX100.raw #1 Blue O ... Database a|e Database Filter #1

Database PDF2002: 148379

Chemical Filter Database Filter Candidate List Selected Candidates



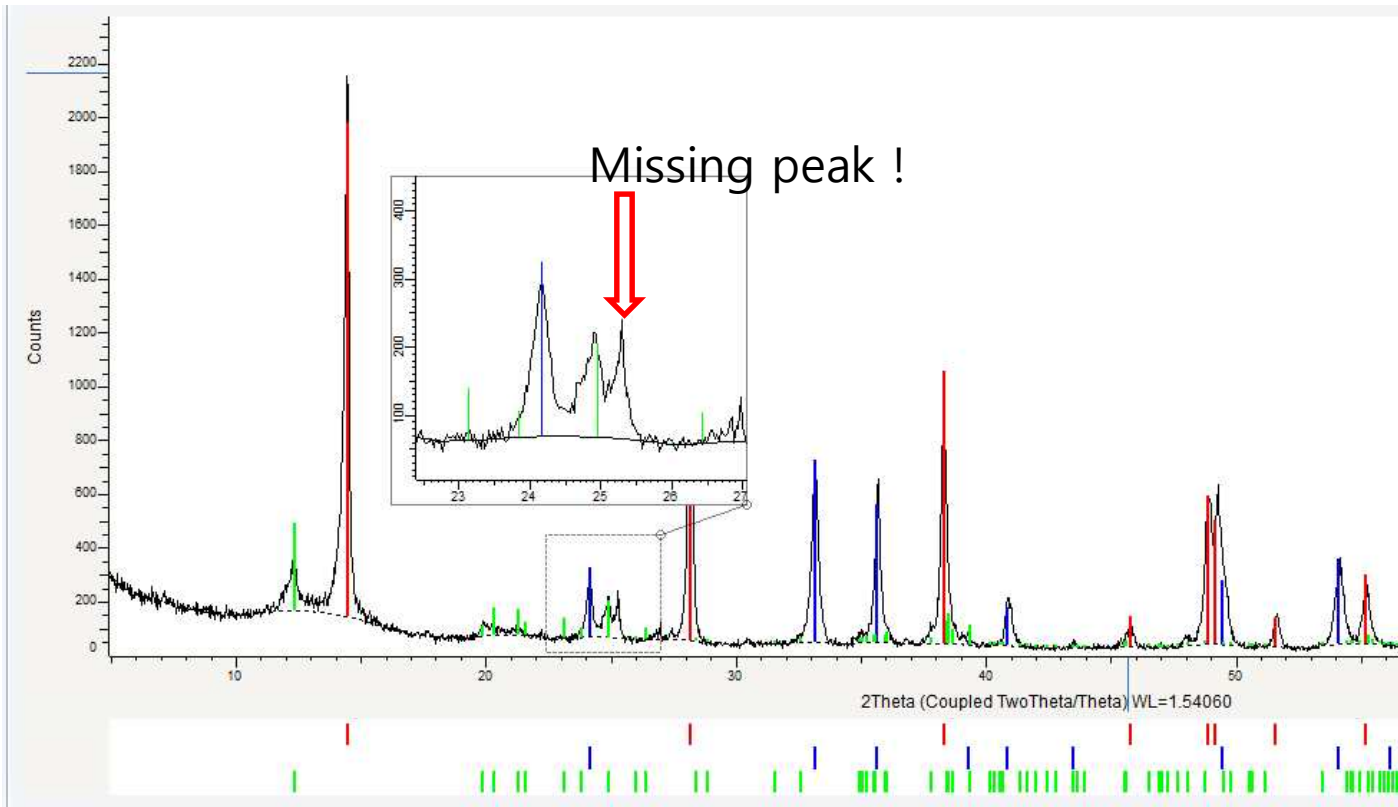
Periodic table elements shown:

- H, D, He
- Li, Be, B, C, N, O, F, Ne
- Na, Mg, Al, Si, P, S, Cl, Ar
- K, Ca, Sc, Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni, Cu, Zn, Ga, Ge, As, Se, Br, Kr
- Rb, Sr, Y, Zr, Nb, Mo, Tc, Ru, Rh, Pd, Ag, Cd, In, Sn, Sb, Te, I, Xe
- Cs, Ba, La, Hf, Ta, W, Re, Os, Ir, Pt, Au, Hg, Tl, Pb, Bi, Po, At, Rn
- Fr, Ra, Ac
- Ce, Pr, Nd, Pm, Sm, Eu, Gd, Tb, Dy, Ho, Er, Tm, Yb, Lu
- Th, Pa, U, Np, Pu, Am, Cm, Bk, Cf, Es, Fm, Md, No, Ln

Lanthanoids/Actinoids

Step 6 : search/match 창에서 candidate List에서 match를 클릭하여 화학적 결합을 XRF결과로부터 스크리닝 된 조건으로 찾는다.

찾은 후 missing된 peak가 없는지 확인한다.



Step 7 : missing된 peak가 있다면 search된 화합물 중 없는 원소가 무엇인지 체크하여 Element list 에서 해당원소를 클릭한 후 마우스 우클릭 한다.

Element list -> 마우스 우클릭 -> filter -> Green filter data 선택

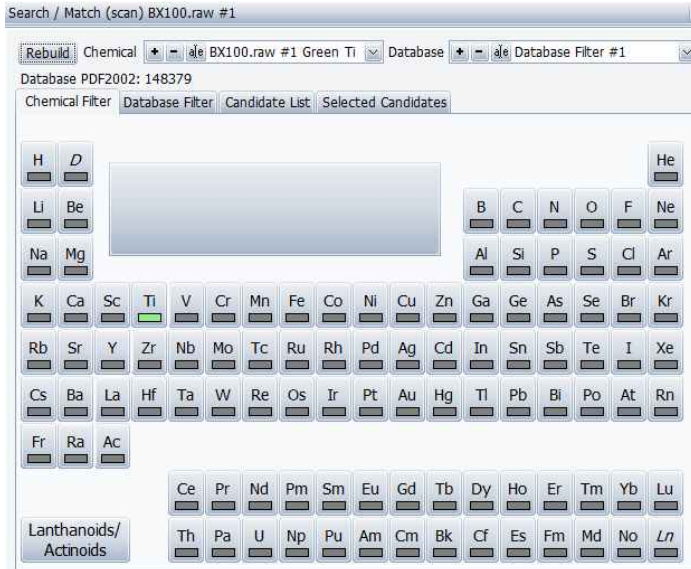
Data	Description	Views
H [1] - Hydrogen	SQD=1.508 % ;XRF=n.a.; delta=-1.508 %	
O [8] - Oxygen	SQD=51.429 % ;XRF=42.300 %; delta=-9.129 %	
Al [13] - Aluminium	SQD=37.889 % ;XRF=32.500 %; delta=-5.389 %	
Si [14] - Silicon	SQD=2.568 % ;XRF=3.920 %; delta=1.352 %	
Ti [22] - Titanium	SQD= ;XRF=1.610 %; delta=1.610 %	
Fe [26] - Iron	SQD=6.607 % ;XRF=18.300 %; delta=11	
Pattern List #19	3 Patterns	
PDF 21-1307	Bohmite, syn	
PDF 89-0599	Hematite, syn	
PDF 75-1593	Kaolinite #1A	

Context menu for Fe [26] - Iron:

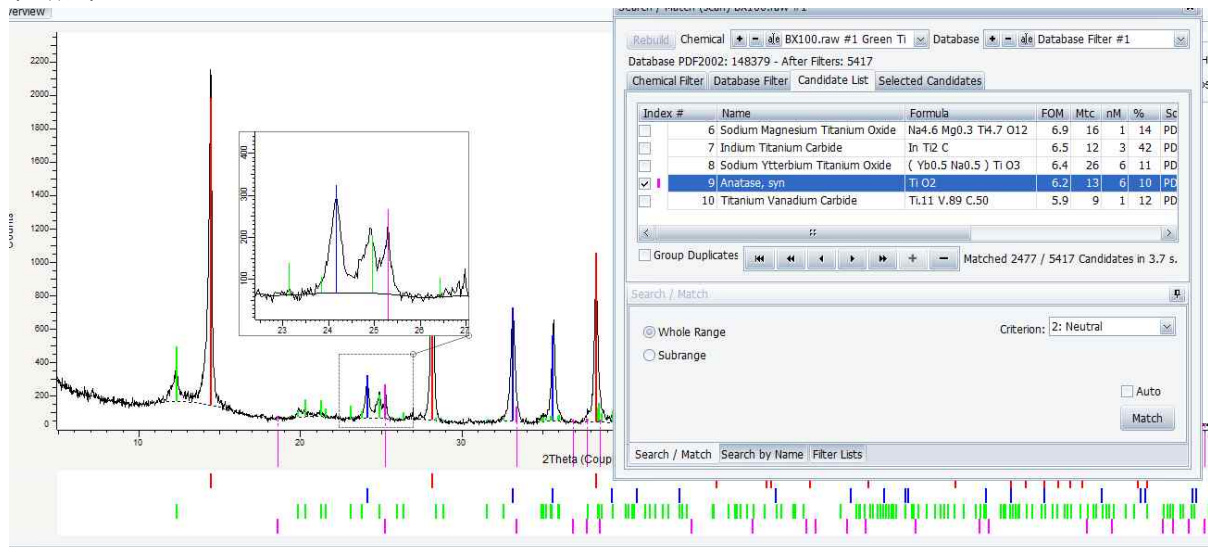
- Select Parent
- Create
- Green Filter data

원소를 클릭하여 Green filter data를 선택할 경우 해당원소가 초록색으로, 나머지 모든 원소는 회색으로 자동설정되어 search실행을 하면 해당원소와 결합 가능성이 있는 모든 원소를 search한다.

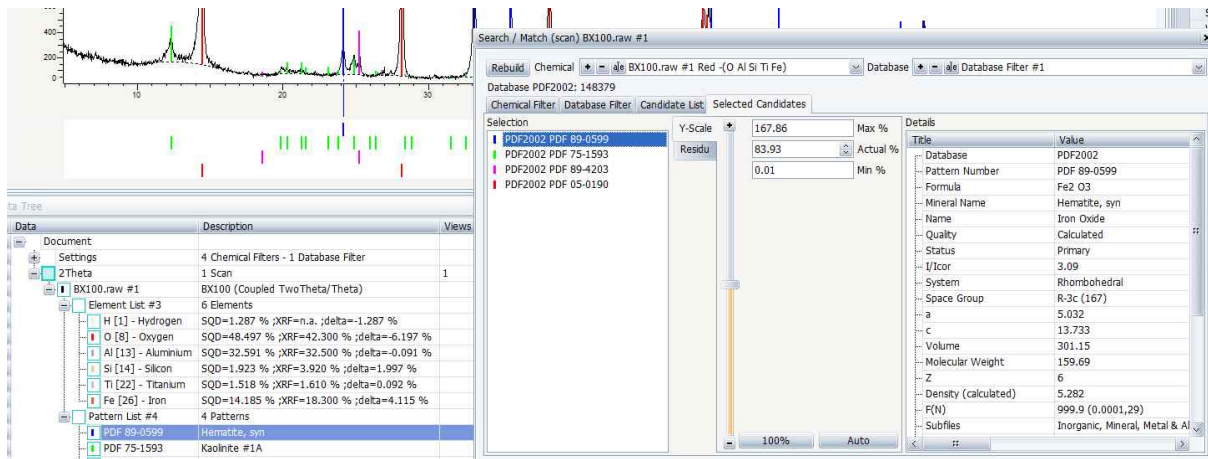
Step 8 : Data tree에서 Scan file 선택-> 마우스 우클릭->tool->search/match클릭



Step 9 : candidate list에서 match를 클릭하여 missing peak 위치와 잘 맞는 화합물을 찾는다.
만일 여의치 않으면 기 search된 화합물을 residu 조건을 걸고 검색을 하는 것도 좋은 방법이 될 수 있다.

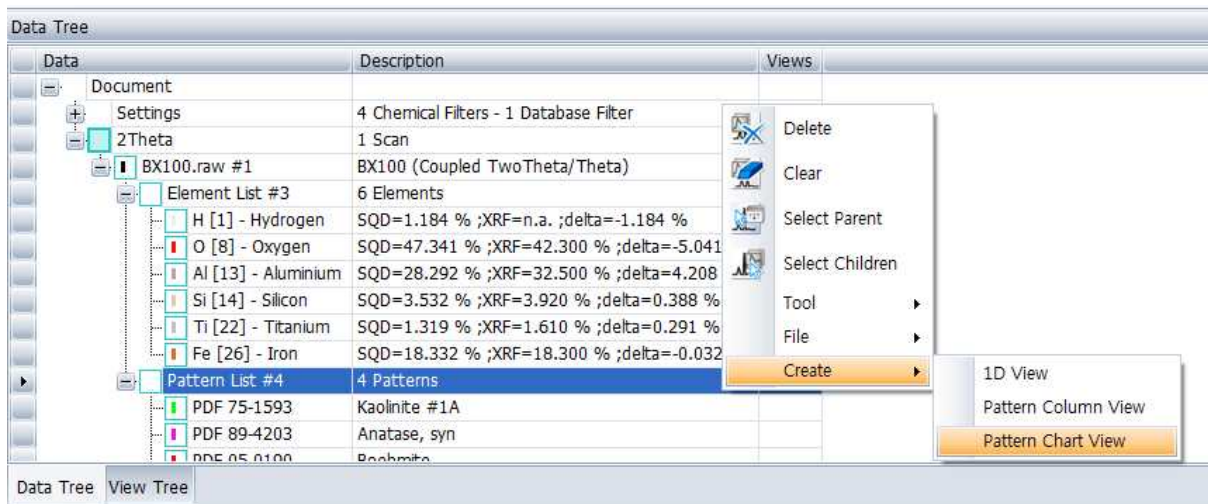


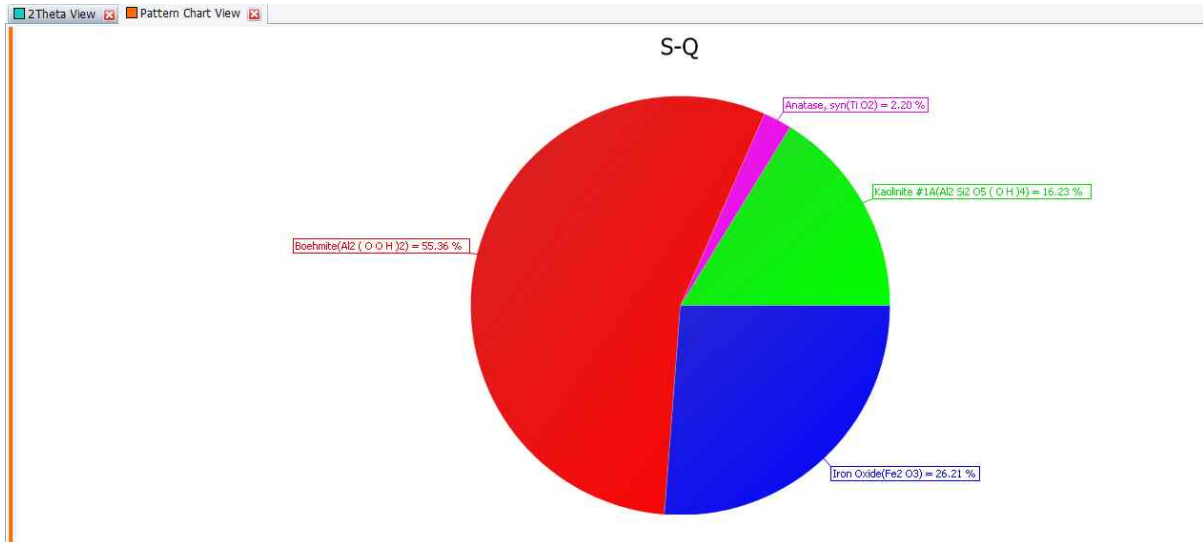
Step 10 : 모든 화합물을 검색하였으면, 이제 search 박스의 candidate list로 와서, 선택되어진 pattern 들을 Y-scale을 적절히 조절하여 Element list 상의 delta값이 상호 최소가 되는 지점으로 선택하여 준다. 여러 화합물이 중복되는 경우 정확히 맞추는 것이 상당히 어려우므로 peak의 높이를 우선 먼저 맞춘 후 아주 조금씩만 Y-Scale을 조절하고 delta값은 참고로 보면 된다. 만일 peak높이를 모두 맞추었는데도 delta값이 상당히 상이하다면, 같은 화합물의 다른 패턴이 있지는 않은지 혹은 I/Ic가 다른 후보를 선택하여 매치해 보는 것도 하나의 방법이다.



Step 11 : 높이를 맞추고, delta값의 최소화 까지 고려하였다면, 이제 파이 차트를 만들어 정량 데이터를 내보낼 수 있다.

Data tree -> Pattern List클릭후 마우스 우클릭 -> Create -> Pattern chart view



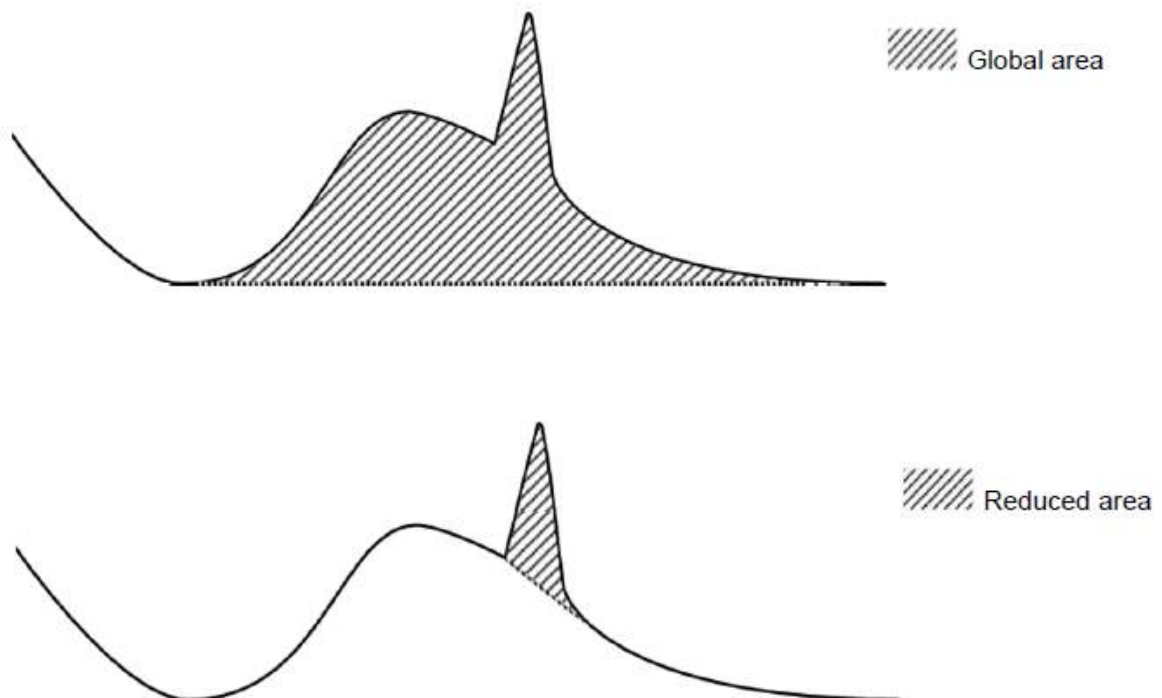


데이터 컬럼을 출력할 때는 create -> pattern column view를 클릭하면, S-Q값이 파이차트에 나온 값과 동일한 값이다. 나머지 불필요한 데이터는 column chooser를 이용하여 버린다.

Show	Icon	Color	Index	Parent	Scan	Compound Name	Formula	Y-Scale	I/Ic DB	I/Ic User	S-Q	Added Reference	Wavelength	System	Space Group	a
<input checked="" type="checkbox"/>		Lime	1	Pattern List #4	BX100.raw ...	Kaolinite #1A	Al ₂ Si ₂ O...	33.0835 %	1.190		16.23 %		1.5406 Cu KA1	Triclinic	C1 (1)	5.14000
<input checked="" type="checkbox"/>		Magenta	2	Pattern List #4	BX100.raw ...	Anatase, syn	TiO ₂	18.9984 %	5.040		2.20 %		1.5406 Cu KA1	Tetragonal	P42/mmm (136)	3.78500
<input checked="" type="checkbox"/>		Red	3	Pattern List #4	BX100.raw ...	Boehmite	Al ₂ (O(OH) ₂)	94.8039 %	(1)		55.36 %		1.5406 Cu KA1	Orthorho...	Cmcm (63)	2.86800
<input checked="" type="checkbox"/>		Blue	4	Pattern List #4	BX100.raw ...	Iron Oxide	Fe ₂ O ₃	44.8861 %	(1)		26.21 %		1.5406 Cu KA1			

8. 결정화도계산

결정화도 계산은 EVA에서 매우 손쉽게 이루어진다. 전체 peak의 면적(Crystal의 면적 + Amorphous scattering의 면적)에서 Crystalline의 회절된 적분강도를 제외한 면적을 계산한 후 이를 100%에서 빼주면 결정화도가 계산이 되며, 아래 그림과 같이 전개된다.



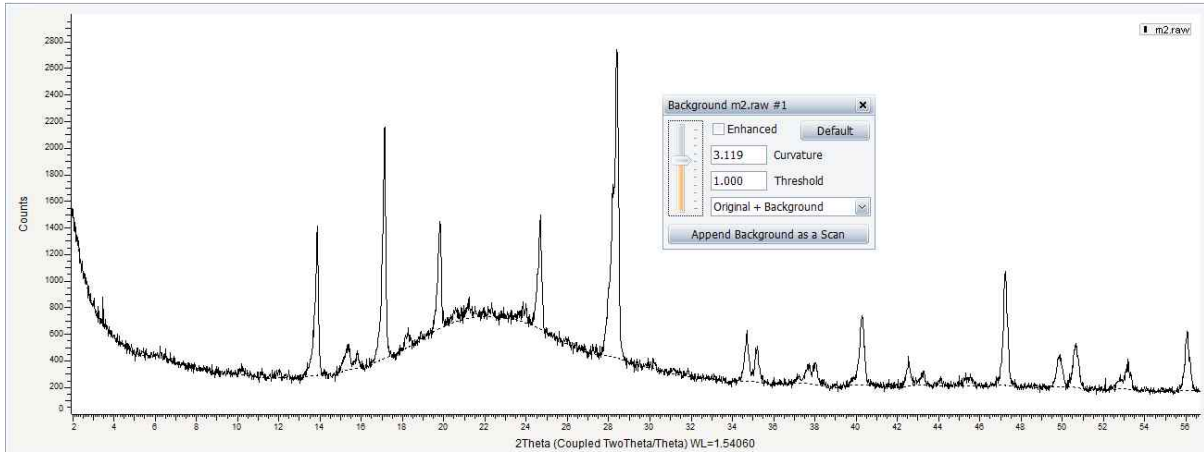
$$\%Amorphous = \frac{\text{Global area} - \text{Reduced area}}{\text{Global area}} \times 100$$

$$\%Crystallinity = 100 - \%Amorphous$$

Step 1 : 결정화도를 구하기 위해 적절한 조건으로 측정된 데이터를 import를 통해 불러온다.

Step 2 : Data tree 안의 scan file을 클릭 -> 마우스 우클릭 -> tool -> background

Step 3 : Background를 Crystalline peak영역에 정확히 맞도록 조절하여 준다.



m2.raw #1 Property

Sample rotation speed 0.000

Environment

Humidity n.a.
Temperature 25 (Room)

Wavelength

Anode Cu
ka1 1.54060
ka2 1.54443
ka2 Ratio 0.51400
kβ 1.39222
Wavelength for display 1.54060

X-Ray Generator

Generator kV n.a.
Generator mA n.a.

Detector

Detector Name

Slits

Primary Soller slit 2.000
Secondary Soller slit 2.000
Divergence Slit n.a.
Antiscatter Slit n.a.
Slit Mode Fixed
Simul. Slit Mode

Corrections

Displacement 0.000
X-Offset 0.000
Y-Scale Factor 1
Y-Offset 0

Background

Display Original + Backgrou...
Curvature 3.119
Threshold 1.000
Enhanced No
Color Transparent

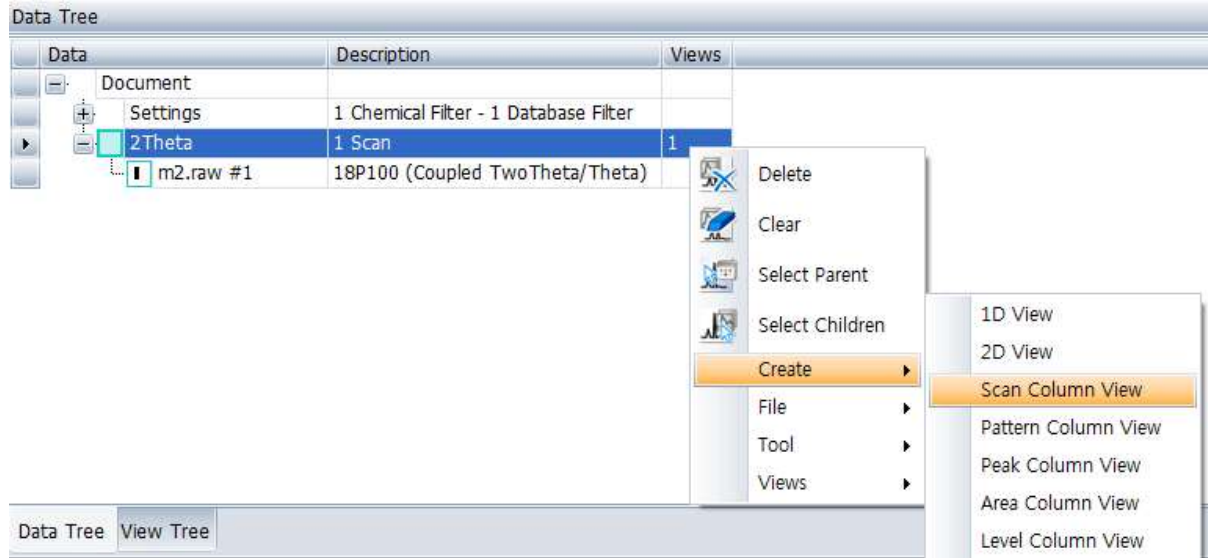
Crystallinity

Compute Crystallinity Yes
Crystallinity - From 2.000
Crystallinity - To 56.700
%-Crystallinity 39.7 %
%-Amorphous 60.3 %
Global Area 2878
Reduced Area 1142

Step 4 : Data property panel 의 가장 아래쪽을 보면 Crystallinity 항목을 찾을 수 있다. 'Compute Crystallinity' 에 체크하면 % Crystallinity 값을 볼 수 있다.

Step 5 : Crystallinity 을 data로 출력하기 위해 아래와 같은 경로로 컬럼을 만든다.

Data tree -> 2theta 폴더 선택 후 마우스 우클릭 -> create -> scan column view 선택



Step 6 : 이제 scan에 대한 컬럼이 생성되었고 여기에 Crystallinity 정보를 볼 수 있다. 불필요한 항목은 column chooser를 이용하여 버리고 원하는 항목만 남겨 놓는다.

Size	Time per Step	Anode	ka1	ka2	ka2 Ratio	kβ	Curvature	Compute Crystallinity	Crystallinity - From	Crystallinity - To	%Crystallinity	%Amorphous	Global Area	Reduced Area	Creation Date/Time
.020	3.0	Cu	1.54060	1.54443	0.51400	1.39222	3.119	<input checked="" type="checkbox"/>	2.000	56.700	39.7 %	60.3 %	2878	1142	1986-11-26 오후 3:20:1

9. User Data Base 제작 및 활용

종종 연구실에서 자주 얻어내는 결정들의 패턴이 데이터 베이스에 없거나, 혹은 상이한 경우, 자주 검색되는 데이터베이스의 경우, 나만의 데이터베이스를 남겨두고 이를 활용하고자 할 때 User data base를 제작하면 유용하게 이용할 수 있다.

Step 1 : 저장하고 싶은 패턴을 생성 (peak search후 make DIF를 이용하면 생성이 되.) 혹은 데이터 베이스를 search한다.

Data	Description	Views
Document		
Settings	1 Chemical Filter - 1 Database Filter	
2Theta	1 Scan	1
m1.RAW #1	Calcite, Aragonite, Brucite (Coupled TwoTheta/Theta)	
Pattern List #10	3 Patterns	
PDF 01-071-3699 (Tune Cell)	Calcite, syn	
PDF 00-001-0628	Aragonite	
PDF 04-011-5938	Brucite, syn	

Step 2 : 검색된 혹은 만들어진 패턴을 클릭한 후 마우스 우클릭 -> tool -> User database 클릭

Data Tree

Data	Description	Views
Document		
Settings	1 Chemical Filter - 1 Database Filter	
2Theta	1 Scan	2
m2.raw #1	18P100 (Coupled TwoTheta/Theta)	
Pattern List #15	1 Pattern	
DIF (m2.raw)	18P100	

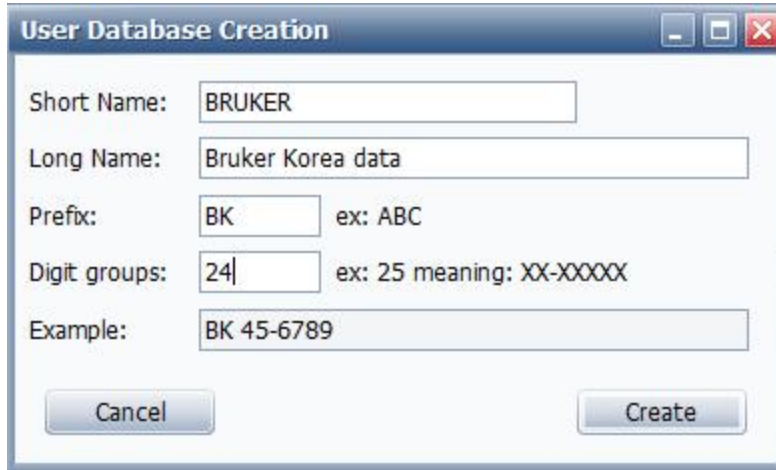
- Delete
- Select Parent
- Tool**
 - Search / Match (pattern)
 - Search by Number
 - d x by
 - Residue
 - Make Sticks
 - Make Peaks
 - Auto-scale
 - User Database**
- Create
- File

Data Tree View Tree

Step 3 : User Data Base 창이 나타나게 되는데 원하는 이름과 화학식(모를 경우 dummy 삽입)을 넣은 후 오른쪽 User Database 아래 + 표시를 클릭한다.

Step 4 : User Database Creation 창이 나타난다.

Short Name 과 Long Name을 작성한다. 이 이름은 한번 작성하면 데이터베이스를 지워버리기 전에는 변경이 안되므로 한번 작성할 때 꼭 사용할 수 있는 이름으로 작성하길 권장한다. 특히 Long Name의 경우 search창에 데이터 베이스의 이름으로 나타난다.



The 'User Database Creation' dialog box contains the following fields and values:

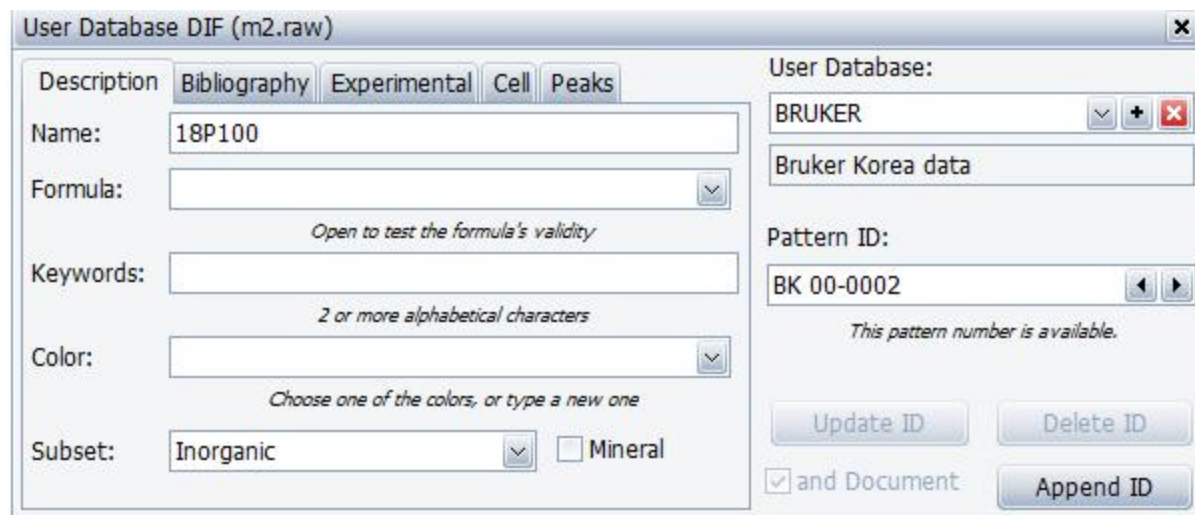
- Short Name: BRUKER
- Long Name: Bruker Korea data
- Prefix: BK (example: ABC)
- Digit groups: 24 (example: 25 meaning: XX-XXXXX)
- Example: BK 45-6789

Buttons: Cancel, Create

Prefix는 data base번호 맨 앞에 붙는 이름이고, 'Digit group'은 데이터베이스 번호가 붙는 형식을 지정하여 준다. 따라서, Prefix에 BK라고 쓰고 Digit group에 34를 쓰면 데이터 베이스는 순차적으로 BK 000-0001 로 표현된다.

Step 5 : 오른쪽 하단에 Create 를 클릭하면 데이터베이스 형식이 저장된다.

Step 6 : Create 후 다시 User Database창으로 넘어오게 되는데, 아래 Pattern ID에 내가 현재의 패턴에 지정할 번호를 결정할 수 있다.



The 'User Database DIF (m2.raw)' dialog box has the following configuration:

- Description: Bibliography, Experimental, Cell, Peaks
- Name: 18P100
- Formula: (empty)
- Keywords: (empty)
- Color: (empty)
- Subset: Inorganic (checked), Mineral (unchecked)
- User Database: BRUKER (dropdown), Bruker Korea data (text)
- Pattern ID: BK 00-0002 (dropdown)
- Buttons: Update ID, Delete ID, Append ID
- Checkbox: and Document

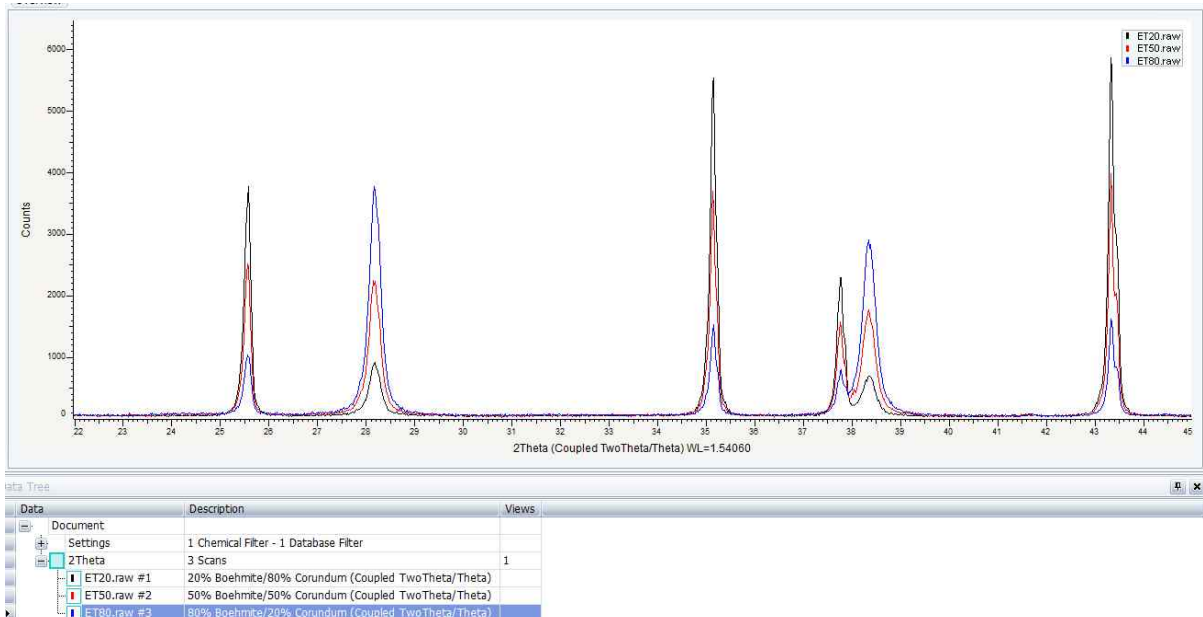
이외 추가적으로 왼쪽에 더 기입할 정보가 있으면 기입한다. 예를 들어 Mineral인 경우 Mineral에 check 하여주고 subfile을 지정하거나 Color를 지정하는 등 다양한 정보를 넣어 줄 수 있다.

Step 7 : 최종적으로 모든 결정이 끝났다면, Append ID를 클릭하게 되면, 지정된 Pattern ID번호로 저장이 되게 된다.

10. Offset plot

종종 몇 개의 scan데이터를 논문에 투고하고자 할 때, 혹은 보고서를 작성하고자 할 때 data끼리 한 화면에 비교하기 위한 그림을 만들 때 엑셀이나, 오리진 등에서 작성하곤 한다. EVA는 이러한 plot방법을 Y-Offset을 이용하여 매우 손쉽게 가능하다.

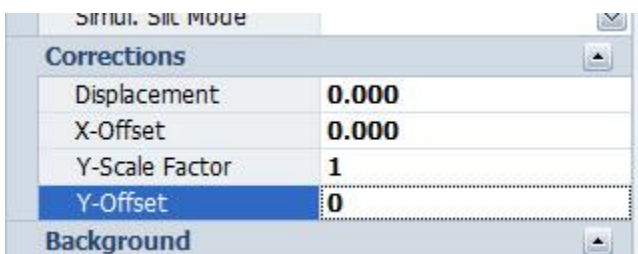
Step 1 : 비교하고자 하는 Scan data를 모두 한번에 불러온다. 예를 들어 아래그림과 같이 3개의 Scan data를 한번에 불러온다.



Step 2 : 첫 번째 Scan에는 Y-offset을 줄 필요가 없다.

따라서 두 번째 Scan을 선택한다.

Data Tree -> Scan 선택 -> data property panel 에서 Y-offset에 높이 차를 주고 싶은 만큼의 Y scale의 count를 선택하여 준다.

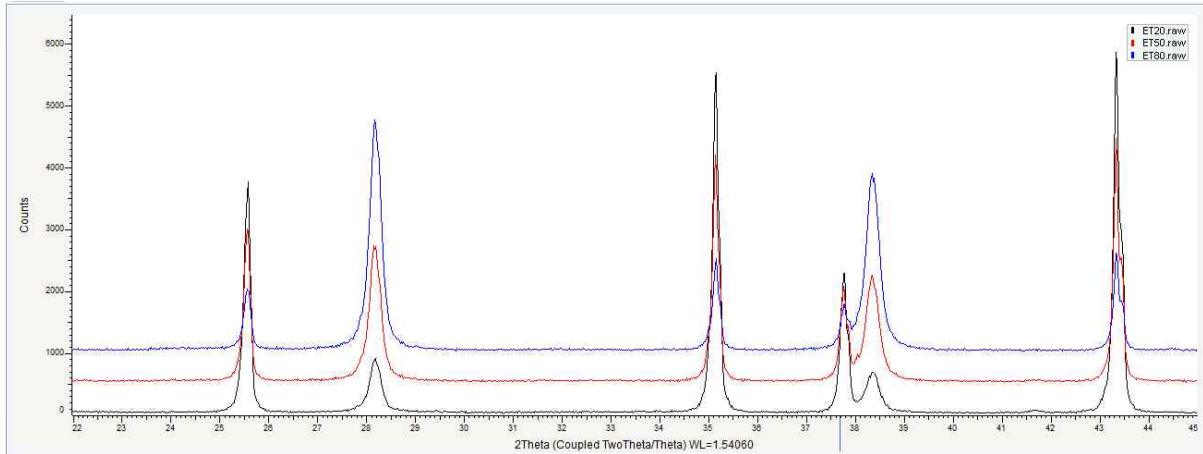


Step 3: 세 번째 스캔을 선택한다.

Data Tree -> Scan 선택 -> data property panel 에서 Y-offset값을 두 번째 스캔보다 두 배를 더 준다.

예를 들어 두 번째 스캔에 Y-offset을 500을 주었으면 세 번째 스캔을 1000을 주면 된다.

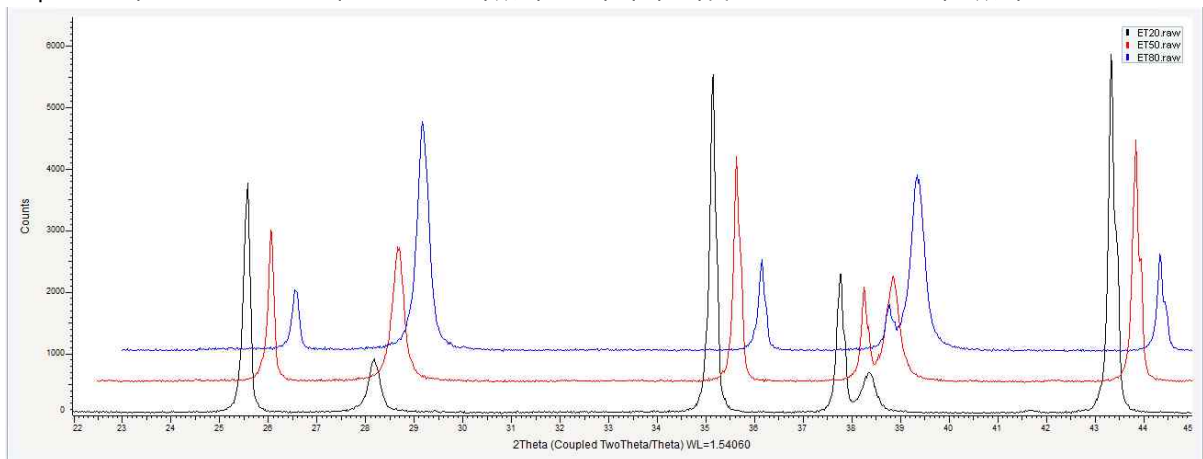
Step 4 : Y-offset 값을 모두 설정하였으면 아래 그림과 같이 비교할 수 있는 그림을 얻을 수 있다.



Step 5 : X축 방향으로 역시 offset 값을 주면 psudo-3D plot이 가능하다.

X축에 offset을 주는 방법은 Y-offset을 주는 방법과 똑같은데, 주위 할 점은 X축 값이 2theta이므로 간격을 주고 싶은 만큼 2theta degree 값으로 간격을 주어야 한다.

Step 6 : X축 offset도 정상적으로 설정하였다면 아래와 비슷한 그림을 얻을 수 있다.



**위 그림은 X축 방향으로 0.5도씩 offset을 주어 얻어진 그림이다.