

# MATLAB 语言在 X 射线衍射谱图处理中的应用

赵 琢 王潮卿<sup>a</sup> 彭金利<sup>a</sup> 刘建阔<sup>a</sup>

(天津出入境检验检疫局 天津市迎水道 3 号 300191)

<sup>a</sup>(天津创业环保股份有限公司 天津市卫津南路 76 号 300381)

**摘 要** 利用 MATLAB 语言编写了 X 射线衍射数据处理程序, 使之能够导入到 Materials Studio 软件, 进行粉末晶面指标化以及粉末精修等后续处理。处理程序简单易懂, 可作为其他测试数据格式转换程序的参考。

**关键词** X 射线衍射, MATLAB 程序, Materials Studio, 数据处理

中图分类号: O 434 13; O 722 文献标识码: B 文章编号: 1004-8138(2008)06-1287-05

## 1 前言

X 射线衍射 (XRD) 是广泛使用的晶体结构和物相分析技术。可以用于晶体结构分析, 物相定性和定量分析, 还可以利用 Scherrer 方程计算纳米材料平均晶粒度的大小。

Scherrer 方程:  $D_{hkl} = \frac{k\lambda}{\beta \cos \theta_{hkl}}$

$\beta$  为半峰宽度, 即衍射强度为极大值一半处的宽度, 单位以弧度表示;  $D_{hkl}$  代表晶面法线方向的晶粒大小, 与其他方向的晶粒大小无关;  $k$  为形状因子, 对球状粒子  $k = 1.075$ , 立方晶体  $k = 0.9$ , 一般要求不高时就取  $k = 1$ 。测定范围 3—200nm。

指标化试验粉末图是由粉末衍射数据确定晶体结构最具挑战性的一步。Materials Studio 软件提供了 Reflex 和 Reflex Plus 工具包。Reflex 工具包提供了三种著名的指标化算法: TREOR 90<sup>[1]</sup> 和 DICVOL 91<sup>[2]</sup> 以及 ITO<sup>[3]</sup>。也提供了包括粉末 XRD 精修等诸多功能。然而并非所有的 XRD 数据都能够导入到 Materials Studio 软件中。本文使用 MATLAB 语言为工具, 对由  $2\theta$  峰强度  $I$  组成的 XRD 测试数据文件进行转换, 生成 Materials Studio 内置的 XRD 谱图文件, 扩展名为 xcd。可用于任何 XRD 衍射仪产生的数据文件转换。

## 2 Materials Studio 介绍

Materials Studio 是 ACCEL RYS 公司专门为材料科学领域研究者所涉及的一款可运行在 PC 上的模拟软件。可以帮助解决当今化学、材料工业中的一系列重要问题, 能更方便的建立三维分子模型, 深入的分析有机、无机晶体、无定形材料以及聚合物。支持 Window s98、NT、Unix 以及 Linux 等多种操作平台。在粉末晶体方面提供了 Reflex 和 Reflex plus 工具包。

Reflex 模拟晶体材料的 X 光、中子以及电子等多种粉末晶体衍射图谱, 提供了完整的计算工具, 包括粉末衍射模拟, 粉末指标化, 以及根据试验数据对候选结构进行精修, 帮助确定晶体的结

联系人, 手机: (0)13821112865; E-mail: zhuozhao@mail.nankai.edu.cn

作者简介: 赵琢(1978—), 男, 太原市人, 博士, 工程师, 主要从事仪器分析研究工作。

收稿日期: 2008-08-29; 接受日期: 2008-09-05

构, 解析衍射数据并用于验证计算和试验结果。

Materials Studio 支持多种粉末衍射试验的测试数据格式。比如 Bruker, Philips, Scintag, Rigaku 等 XRD 产品测试产生的二进制或者文本文件。可是由 Rigaku analytical X-ray, D/max-2500 测试得到的扩展名为 `??a` 或者由此转换的 `dat` 文件在导入过程中并不被支持。考虑到各种 XRD 衍射仪测试得到的数据均可以由仪器公司自带的软件转换为  $2\theta$  峰强度  $I$  组成的文本文件。因此开发一个可以将  $2\theta$  峰强度  $I$  组成的文本文件和 Materials Studio 内置 XRD 谱图格式转换的程序, 就可以彻底解决这一问题。

### 3 程序设计

#### 3.1 开发环境与操作环境

软件环境: windows2000/2003/xp, MATLAB R2006a

硬件环境: 奔 III 以上兼容机, 内存 512MB, 硬盘容量 20GB

#### 3.2 开发软件

MATLAB 语言是一种高性能的数值计算的科学计算语言, 具有程序开发环境简洁直观、数值稳定性好、函数资源丰富的特点。它用更直观的, 符合人们思维习惯的代码代替 C 和 FORTRAN 语言的冗长代码, 使更多的工程技术人员摆脱了烦琐的编程工作, 能够将注意力集中在专业技术研究的核心问题上<sup>[4,5]</sup>。

#### 3.3 设计思路

源文件格式是由  $2\theta$  峰强度  $I$  组成的 XRD 测试数据文件, 目标文件格式是 Materials Studio 内置的文件格式 `xcd` 文件。下面我们查看并对比一下这两种文件的异同点:

源文件: 3, 229

3 02, 269

.....

`xcd` 文件: `< ? xml version= "1.0" encoding= "latin1" ? >`

`< ! DOCTYPE XCD [ ] >`

`< XCD Version= "3.2" NumCharts= "1" >`

`< CHART- 2D >`

`< DATA - 2D NumSeries= "2" >`

`< SERIES- 2D UniqueID= "0" Name= "sample" NumPoints= "6851" >`

`< POINT- 2D XY= "3, 229" />`

.....

从 `xcd` 文件我们可以看出, 文件开头 5 行是对版本等信息的描述, 和测试数据无关。第 5 行是说明 `xrd` 数据为 2 列, 第 6 行为数据点行数, 第 7 行以后为数据段。但格式与源文件不同。文件末尾包括 `xrd` 衍射图中搜索到的峰位置和强度等 5 行数据, 具体数据可以省略, 格式内容保留, 导入 Materials Studio 软件后峰位置和强度可以自动或者手动寻峰获得。文件最后 10 行是 `xcd` 文件的显示设置, 可以不用更改。由以上信息, 本文建立了 `xcd` 的标准文件 `standard_xcd`, 从中可以存放前 5 行信息, 第 6, 7 行提供格式参考和后 15 行不需要更改的信息。然后建立程序, 把前 5 行读入, 再按照第 6, 7 行格式把源文件数据读出把格式转换为目标文件格式, 然后再把后 15 行读出, 把转换好的数据写入到目标文件。本程序还可以在 MATLAB 环境中设计图形界面, 限于篇幅, 不再赘述。

### 3.4 程序代码

在MATLAB R2006a 菜单建立test.m 文件,将上述standard.xcd 文件放入同一目录下。打开test.m 文件,将如下代码输入,编译。待转换文件名为111.txt。转换后文件名为new.xcd。

```

fid= fopen('standard.xcd','r'); % 用只读方式打开标准文件
InputText- 1= textscan(fid,'%s',5,'delimiter','\n'); % 读入前五行信息
Title= InputText- 1{1};
InputText- temp= textscan(fid,'%s',2,'delimiter','\n'); % 读入第6,7行数据作为格式
参考
InputText- end= textscan(fid,'%s',15,'delimiter','\n'); % 读入最后15行数据
TextEnd= InputText- end{1};
fclose(fid); % 关闭文件
fid = fopen('111.txt','r'); % 打开源文件,文件名为111.txt
Inputdat= textscan(fid,'%f,%f','delimiter','/t'); % 读入所有数据
Datadat= cell2mat(Inputdat); % 转换为矩阵
[NumRows,NumCols]= size(Datadat); % 计算矩阵大小,得到数据行列数
Numbers= NumRows;
Text6 = ['< SER IES - 2D Unique D = " 0" Name = " sample" NumPoints = "' int2str
(Numbers) "'>']; % 调整第6行格式和数据
fclose(fid); % 关闭源文件
dlmwrite('new.xcd','','delimiter',''); % 准备写入目标文件new.xcd
I= 1; % 顺序写入前5行
while (I< 6)
dlmwrite('new.xcd',Title{I,1},'- append','delimiter','','new line','pc');
I= I+ 1;
end
dlmwrite('new.xcd',Text6,'- append','delimiter','','new line','pc'); % 写入第6行,数
据的行数
fid= fopen('new.xcd','a'); % 以附加方式打开目标文件
I= 1; % 按照格式写入所有数据
while (I< Numbers+ 1)
    fprintf(fid,'%s','< POINT- 2D XY= ');
    fprintf(fid,'%g,%g',Datadat(I,1),Datadat(I,2));
    fprintf(fid,'%s/n','"/> ');
    I= I+ 1;
end
I= 1; % 写入最后15行数据
while (I< 16)
dlmwrite('new.xcd',TextEnd{I,1},'- append','delimiter','','new line','pc');
I= I+ 1;
end

```

```
fclose(fid);
type new. xcd; % 查看目标文件
```

## 4 应用实例

我们以高铁酸钾粉末样品的XRD 衍射数据转换为例。由Rigaku analytical X-ray, D/max-2500 测试得到 sample. dat, 通过测试程序自带的软件将其转换为 sample. dat 文本文件。此文件包含两列数据 2 $\theta$  和峰强度。打开MATLAB R2006a, 在如图 1 的目录区中, 将 sample. dat 改名为 111. txt 文件放入到 test. m 文件同一目录下。双击 test. m 文件, 会在右侧如图 2 的编辑器打开文件, F5 快捷键“执行”。在目录区即可生成转换好的文件 new. xcd。此文件在安装 Materials Studio 软件之后, 双击即可自动调用到 Materials Studio 中。这里要注意的是, Materials Studio 不支持中文路径。因此 new. xcd 文件不可放在中文路径下。

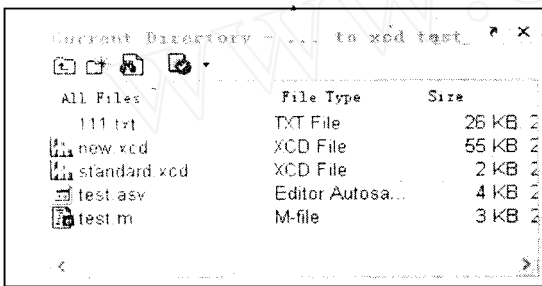


图 1 MATLAB 目录区

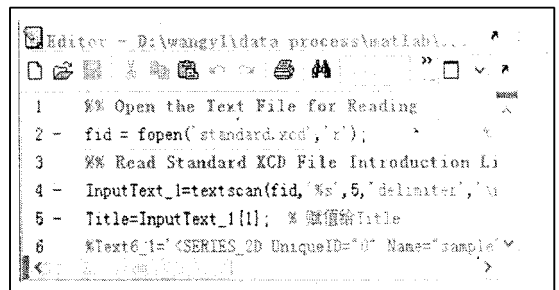


图 2 MATLAB 编辑器

接下来就可以在 Materials Studio 的 Reflex 工具包中, 点击 Power indexing, 在 peaks 项目单中“search”自动寻峰, 或者使用工具栏中的寻峰工具手动寻峰。然后在 setup 项目单中选择晶系, 可多选; 选择计算程序“TREOR 90”, “DICVOL 91”, “ITO 15”或者“X-cell”。再选择入射光波长, 点击“index”按钮。即可获得 sample. xcd 的指标化结果。本例中, sample. xcd 的得到的指标化结果为: 正交晶系,  $a = 10.337$ ,  $b = 9.333$ ,  $c = 7.697$ , 晶胞体积 742.68。衍射峰均已指标化, 如图 3 所示。

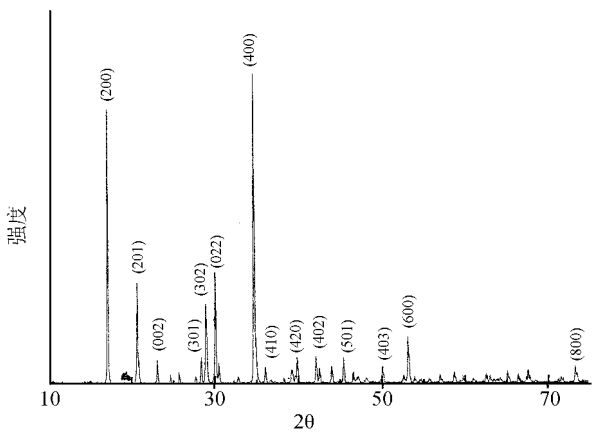


图 3 指标化后的高铁酸钾的XRD 衍射图谱

## 5 结论

本文使用MATLAB 语言编写了数据格式转换工具。可以将任何X 射线衍射仪测试得到的由2 $\theta$  峰强度I 的文本文件, 转换为Materials Studio 内置的XRD 数据格式 xcd 文件, 为晶体指标化和数据解析提供了方便。也为其他数据格式转换提供了源码参考。

## 参考文献

- [1] Werner P E, Eriksson L, Westdahl M. Treor, a Semi-Exhaustive Trial-and-Error Powder Indexing Program for All Symmetries [J]. *J. Appl. Cryst.*, 1985, 18(5): 367—370

[2] Boulitfa A, Louer D. Indexing of Powder Diffraction Patterns for Low-Symmetry Lattices by the Successive Dichotomy Method [J]. *J. Appl. Cryst.*, 1991, 24(6): 987—993

[3] Visser J W. A Fully Automatic Program for Finding the Unit Cell from Powder Data [J]. *J. Appl. Cryst.*, 1969, 2(3): 89—95

[4] 楼顺天, 于卫, 闫华梁编著. Matlab 程序设计语言[M]. 西安: 西安电子科技大学出版社, 1997.

[5] 刘卫国, 张昭平, 张颖编著. Matlab 程序设计及应用[M]. 北京: 高等教育出版社, 2002

## Application of MATLAB Language in Data Processing for X-ray Diffraction

ZHAO Zhuo WANG Han-Qing<sup>a</sup> PENG Jin-Li<sup>a</sup> LU Jian-Guo<sup>a</sup>

(Tianjin Entry-Exit Inspection and Quarantine Bureau, Tianjin 300191, P. R. China)

<sup>a</sup>(Tianjin Capital Environmental Protection Company Limited, Tianjin 300381, P. R. China)

**Abstract** Data processing program for x-ray diffraction was compiled using MATLAB language, by which the data format can be converted and imported to materials studio for the following powder indexing and powder refinement. The program is succinct and easily understandable, which can be used as a reference program in the format conversion of other measured data.

**Key words** X-Ray Diffraction, MATLAB Language, Materials Studio, Data Processing

本期论文发表周期一览表

(出版日期: 2008 年 11 月 25 日)

论文作者	论文接受日期	论文发表周期	论文作者	论文接受日期	论文发表周期
张振荣等	2008-06-16	5 个月又 9 天	刁海鹏等	2008-05-07	6 个月又 18 天
包玉敏等	2008-10-16	1 个月又 9 天	卞 疆等	2008-05-12	6 个月又 13 天
徐吉勇等	2008-06-16	5 个月又 9 天	沙木嘎等	2008-06-24	5 个月又 1 天
李好祥等	2008-06-18	5 个月又 7 天	吴 捷等	2008-06-05	5 个月又 20 天
徐丽君等	2008-06-17	5 个月又 8 天	买买提·吐尔逊等	2008-06-21	5 个月又 4 天
顾 瑾等	2008-06-27	4 个月又 28 天	黄晓东等	2008-09-28	1 个月又 27 天
陶建中等	2008-06-27	4 个月又 28 天	王晓晖等	2008-07-03	4 个月又 22 天
姚文杰等	2008-06-23	5 个月又 2 天	王 齐等	2008-07-14	4 个月又 11 天
范利平等	2008-11-10	15 天	姜小莹等	2008-07-14	4 个月又 11 天
王 霞等	2008-11-05	20 天	胡晓娟等	2008-07-14	4 个月又 11 天
李晓波等	2008-05-19	6 个月又 6 天	邹建军等	2008-09-19	2 个月又 6 天
姚伯龙等	2008-11-10	15 天	赵金金等	2008-07-15	4 个月又 10 天
王菊香等	2008-08-30	2 个月又 25 天	娜仁图雅等	2008-07-28	3 个月又 27 天
盛 丽等	2008-04-28	6 个月又 27 天	孙宗花等	2008-09-26	1 个月又 29 天
李振国等	2008-04-28	6 个月又 27 天	帕丽达·牙合甫等	2008-09-31	1 个月又 25 天
顾正荣等	2008-04-30	6 个月又 25 天	何宏山	2008-05-26	5 个月又 29 天
侯玉霞等	2008-04-30	6 个月又 25 天	刘延福等	2008-05-21	6 个月又 4 天
姜小莹等	2008-04-28	6 个月又 27 天	步海燕等	2008-08-31	2 个月又 25 天
谢红兵等	2008-10-11	1 个月又 14 天	仓金顺等	2008-09-19	2 个月又 6 天
孟志芬等	2008-06-10	5 个月又 15 天	张碰元等	2008-08-25	3 个月
丁 飞等	2008-10-06	1 个月又 19 天	何宏山等	2008-07-15	4 个月又 10 天
侯振雨等	2008-08-04	3 个月又 21 天	项智锋等	2008-07-15	4 个月又 10 天
张莉莉等	2008-04-21	7 个月又 4 天	李淑梅等	2008-08-04	3 个月又 21 天
张芙蓉等	2008-10-05	1 个月又 20 天	刘金鹏等	2008-06-23	5 个月又 2 天
尹德媛等	2008-09-18	2 个月又 7 天	丁宗博等	2008-08-18	3 个月又 7 天
高 媛	2008-04-28	6 个月又 27 天	李金梅等	2008-08-18	3 个月又 7 天
蒋惠亮等	2008-04-30	6 个月又 25 天	李 涛等	2008-07-28	3 个月又 27 天
林桂凤等	2008-05-26	5 个月又 29 天	陈泓钧等	2008-08-28	2 个月又 27 天
罗 阳等	2008-06-12	5 个月又 13 天	陈光登等	2008-08-04	3 个月又 21 天
朱 虹等	2008-05-26	5 个月又 29 天	席海山等	2008-08-25	3 个月
魏刚才等	2008-06-23	5 个月又 2 天	张 力等	2008-11-09	16 天
梁文君等	2008-06-12	5 个月又 13 天	赵 琢等	2008-09-05	2 个月又 20 天
李翠霞等	2008-07-06	4 个月又 19 天	刘亚萍	2008-08-04	3 个月又 21 天
赵小峰等	2008-07-07	4 个月又 18 天			