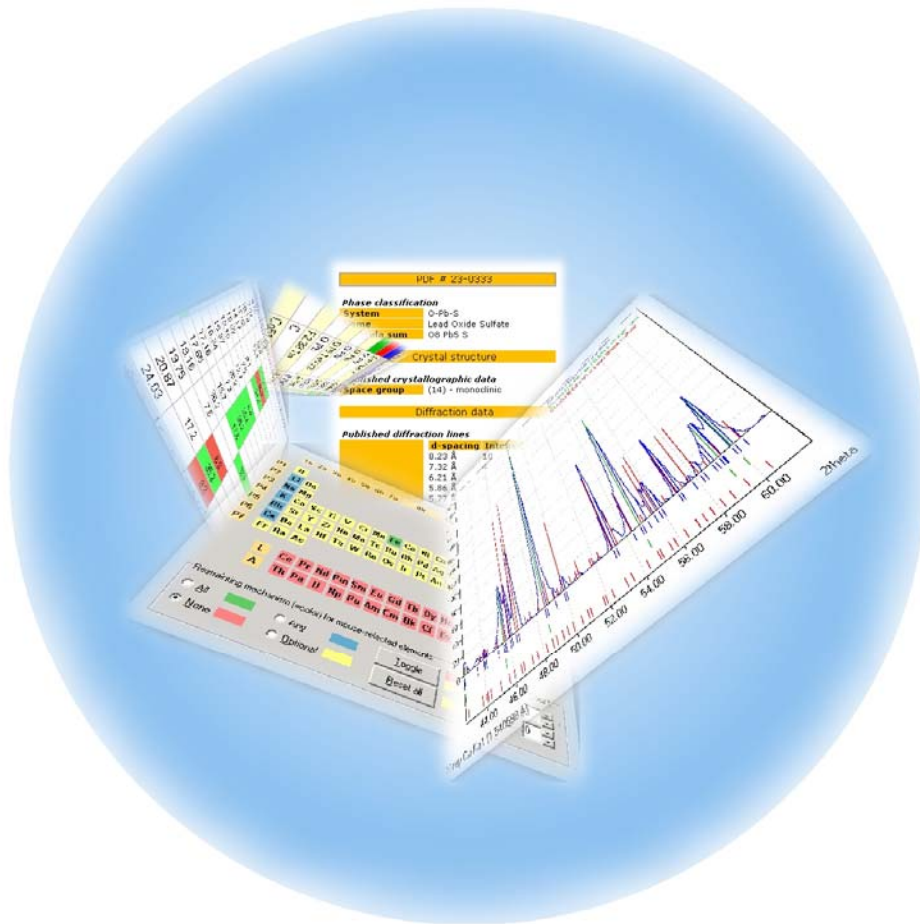


# MATCH!

Phase Identification from Powder Diffraction



クイックスタートガイド



## 目次

Welcome!.....	3
リファレンスデータベース .....	4
ヘルプの使い方.....	4
Match! の動作環境.....	5
インストール手順 .....	5
Tutorial チュートリアル .....	6
セッション 1： 簡単な相同定.....	6
セッション 2： 複数の相の扱い .....	11
セッション 3： データベース検索.....	15

- ※ すぐに Match! の機能を試したい場合は、Match! をインストール後、チュートリアル  
のセッション 1~3 の操作手順をお試しください。Match! の概要、使い方がすぐに  
わかります
- ※ 結晶構造を解析するさまざまな過程の中で、Match! でどのような処理が  
できるのかを知りたい場合は、Welcome! (p.3) をご覧ください

更に詳細な利用方法に関しては、Match!(Crystal Impact 社製品)体験版 CD-ROM の日本語マニュアルを参照してください。また、月に 1 回のペースで、(株)ライトストーン本社内のセミナー  
ルームにて、Crystal Impact 社製品の基本的な使い方を学べる講習会も行っております。詳しくはホームページをご参照ください。

お問い合わせ先

株式会社ライトストーン

Tel : 03-5600-7201

Fax : 03-5600-6671

e-mail : sales@lightstone.co.jp

<http://www.lightstone.co.jp/crystal>



詳しくはホームページで！

## Welcome!

X 線粉末回折データから結晶の相同定を行うことは、今日では材料科学の研究者には日常的な業務となっていますが、**Match!** はその同定作業を行う、使いやすいソフトウェアです。

一般的に、未知試料／粉末から相同定を行う手順は次のようになります。

1. できるだけ高い精度、S/N 比で未知試料の X 線回折パターンを測定します。その結果は、**raw** データと呼ばれている「強度 vs.  $2\theta$ 」のデータを含むファイルになります（データによっては、実験条件の情報も含まれます）
2. 回折データを **search-match** ソフトウェアにインポートします
3. 回折データは **raw(profile)** データのまま、「**raw** データプロセッシング」と呼ばれる処理が行われます。以下のような処理が含まれます
  - $\alpha 2$  線除去（存在する場合）
  - データのスモーキング（平滑化）
  - バックグラウンド除去
  - ピークサーチ
  - プロファイルフィッティング
  - エラー補正

ゴールはできるだけ高精度のピークリスト( $2\theta$  と積分強度の値)を得ることです。このステップ 3 をできるだけ精密に実行することは、このあとの **search-match** プロセスで適切な結果を得るために非常に重要です

4. 試料についての追加情報(化学的な分類、化学式、組成、密度、色など)があれば活用します。**search-match** の計算を縛る条件として利用します
5. ピークリストが利用可能になったら、実際の **search-match** のプロセスを実行できます。**search-match** ソフトウェアは、リファレンスパターンデータベースの回折パターンと未知試料の回折パターンを比較します。**FoM (figure-of-merit)** と呼ばれる一致度を表す数値を計算します
6. **search-match** が終了したら、**FoM** 値によって“**candidate entries**”と呼ばれる候補リストがランクづけされます。**FoM** 値がもっとも高い登録データが、試料に含まれる相として有望です。ランクづけされたリストがユーザに対して提示されます。
7. ユーザは、候補となっている登録データのリストをいちばん上から検討していき、もっとも合致すると思われるデータを選びます
8. 最後に、マッチングの結果選ばれた相をオリジナルの **raw (profile)** データに対して、リートベルト法による精密化を行うべきでしょう。一般的に、精密化に成功したということが、相の同定が正しく完了したということの裏付けになります

次の章以降のチュートリアルでは、**Match!**を使ってこれらのステップを実行する方法を学びましょう！（実際にはステップ 2 から 7 までを実行します）

## リファレンスデータベース

Match! は、試料の粉末回折パターンと既知の物質のリファレンス回折パターンを比較することで、相の同定を行います。そのため、Match! での相同定にはリファレンスパターンを提供する「リファレンスデータベース」が必要になります。

CD-ROMからMatch!体験版をインストールすると「AMCSD」という無償で利用できるリファレンスデータベースも自動的にインストールされます。“American Mineralogist Crystal Structure Database(AMCSD<sup>1</sup>)”から採用した粉末回折パターンです。

また、Match!のCD-ROMから“IUCr/COD/AMCSD”という無償のリファレンスデータベースをインストールすることもできます。IUCrジャーナル<sup>2</sup> から提供された結晶構造データから計算した粉末回折パターン、“Crystallography Open Database(COD<sup>3</sup>)”およびAMCSDから採用した粉末回折パターンが収録されています。

ここでデータの利用を許可していただいた Pete Strickland(IUCr)、Armel Le Bail(COD)、そして Bob Downs(AMCSD)の各氏に厚く感謝いたします。

“IUCr/COD/AMCSD”の現行バージョンには約 66,300 のデータが用意されています。これらのデータはすべて粉末回折パターンから計算した原子の座標情報です。さらに I/lc 値も計算されていますので、擬似的な定量的分析も行えます。具体的な操作手順は本マニュアルのチュートリアル「複数の相の扱い」(p.11~)をご参照ください。リファレンスデータベースのデータ量と質の両方が相同定の結果に非常に大きな影響を与えるということをよく覚えておいてください。リファレンスデータベースに十分一致するデータの登録がないと相を同定できません。

## ヘルプの使い方

Match! の操作方法についてわからないことがあったら、キーボードの[F1]キーを押してください。Match! のオンラインヘルプが表示されます。Match! のオンラインヘルプはとても詳しく書かれていますので、ぜひご参照ください。

オンラインヘルプは以下の操作でも表示できます。

- 操作や内容のわからないダイアログやウィンドウがあった場合、その画面を表示した状態でキーボードの[F1]キーを押します。該当する内容のヘルプが表示されます
- 特定の操作方法などについてではなく、ヘルプをより深く続けて読みたい場合は“Help”メニューから“Help Contents”を選んでください
- オンラインヘルプの目次を活用すると、項目ごとに詳しい内容を調べられます
- オンラインヘルプはキーワード検索できます

<sup>1</sup> R.T. Downs, M.Hall-Wallace, “The American Mineralogist Crystal Structure Database”, American Mineralogist 88, 247-250(2003). <http://rruf.geo.arizona.edu/AMS/amcsd.php>

<sup>2</sup> International Union of Crystallography, 5 Abbey Square, Chester CH1 2HU, United Kingdom. <http://journals.iucr.org/>

<sup>3</sup> <http://www.crystallography.net/>

## Match! の動作環境

- OS : Windows 98/Me、NT 4.0/2000/XP/Vista のいずれかであること
- Microsoft Internet Explorer 5.01 以上がインストールされていること
- RAM : 128M バイト以上 (256MB 以上を推奨)
- HDD : 600MB 以上の空き容量があること
- 画面表示 : 1024×768 ピクセル、32,768 色以上の解像度
- PC が OS の動作条件を満たしていること

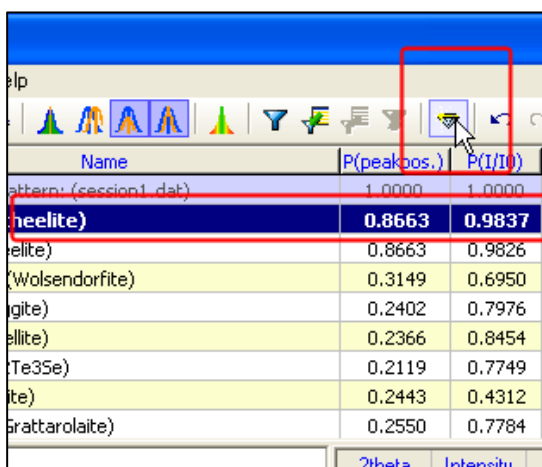
また、Match!のインストール前に**エラー! ブックマークが定義されていません**。ページ以降の使用許諾に同意していただく必要があります。

## インストール手順

1. Match!の CD-ROM ドライブを CD-ROM ドライブにセットし、しばらく待ちます
2. インストールメニューが自動的に表示されますので、Match!のインストールを選んでください。画面に表示される指示にしたがってインストールを完了してください。  
※ インストールメニューが自動的に表示されない場合は、製品 CD-ROM の Match!のフォルダの中にある「Install.exe」をダブルクリックして直接実行してください
3. Match! のインストール後、必要に応じて IUCr/COD/AMCSD のリファレンスデータベースも同じメニューからインストールしてください。

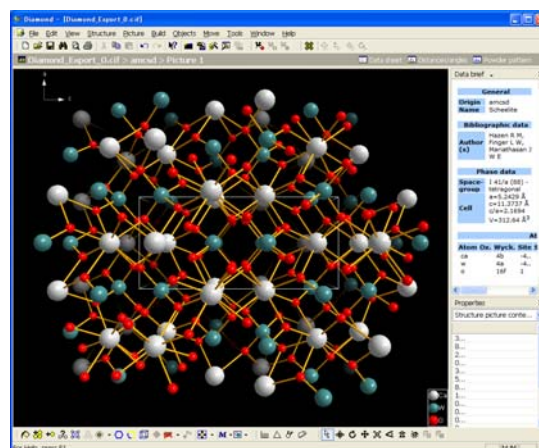
## Diamond 体験版との連携で結晶構造を直感的に理解 !

Match! 体験版と同じ CD-ROM の中に Diamond と Endeavour の体験版も収録されています。Match! と同様の手順で Diamond 体験版をインストールすると、Match!で同定した結晶構造データを、ボタンを押すだけですぐに立体図として表示し、直感的に構造を理解できます。Diamond に読み込んだ結晶構造データは、自由に視点を変えていろいろな方向から眺めたり、拡大/縮小表示したり、表示モデルを変化させるなどして、構造を考察できます。



Name	P(peakpos.)	P(I/I <sub>0</sub> )
attern: (session1.dat)	1.0000	1.0000
<b>heelite)</b>	<b>0.8663</b>	<b>0.9837</b>
elrite)	0.8663	0.9826
(Wolsendorfite)	0.3149	0.6950
gite)	0.2402	0.7976
ellite)	0.2366	0.8454
Te3Se)	0.2119	0.7749
te)	0.2443	0.4312
Grattarolaite)	0.2550	0.7784

Match! の同定結果



Diamond で可視化 !

## Tutorial チュートリアル

ここからは Match! を実際に操作して、相同定を行う方法を説明します。手順に沿って操作するだけで、簡単に X 線粉末回折データから相同定を行えます。

チュートリアルセッションに入る前に Match! の設定をデフォルト値に戻してください。設定が異なると、チュートリアルと同じように操作できない可能性があります。設定方法はまず Match! を起動します。次に“Tools”メニューから“Restore factory settings”コマンドを選択してください。これですべての設定値はデフォルトの状態に戻ります。

すべてのチュートリアルセッションは AMCSD を参照データベースとして使用した状態で実行されています。IUCr/COD/AMCSD, ICDD PDF, あるいはユーザ固有の回折データが使用されている状態では結果が異なる可能性がある点にご注意ください。

### Session 1: Let's Start Easy

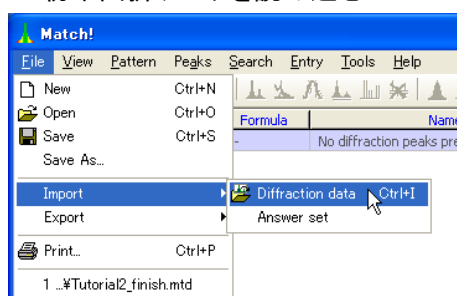
#### セッション 1： 簡単な相同定

このセッションでは比較的簡単な相同定の問題を例に操作を実行します。Match! の概略イメージをつかんでいただくのが狙いです。相同定した結晶構造を Diamond 体験版で立体図にします。

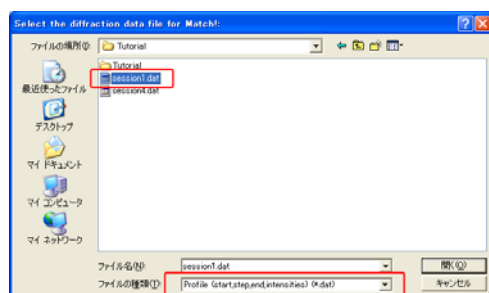
- ・ 回折データ (Tutorial¥session1.dat) をインポートし、Match! にお任せで相同定を行う
- ・ 「session1.dat」のデータ形式は Profile(start, step, end, intensities)形式
- ・ 粉末回折実験に利用した X 線は波長 1.541874Å (Cu Kα)

#### セッション 1 の操作手順

##### 1. 粉末回折データを読み込む



##### 2. 回折データを指定する

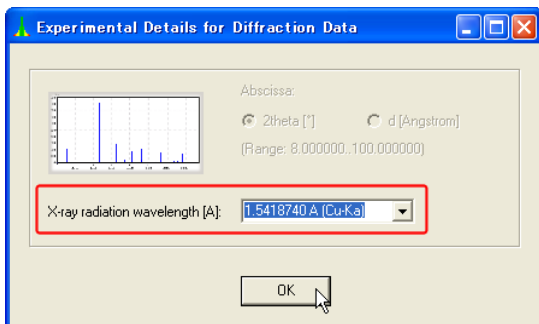


Match! を起動して、

「File」メニューから→「Import」→「Diffraction data」  
と選びます。

回折データを指定する画面が開きます。今回は「session1.dat」(Match! をインストールしたフォルダの「Tutorial」フォルダ内にあります)を使います。ファイルの種類で「Profile(start, step, end, intensities)(\*.dat)」を選び、「session1.dat」を開いてください。

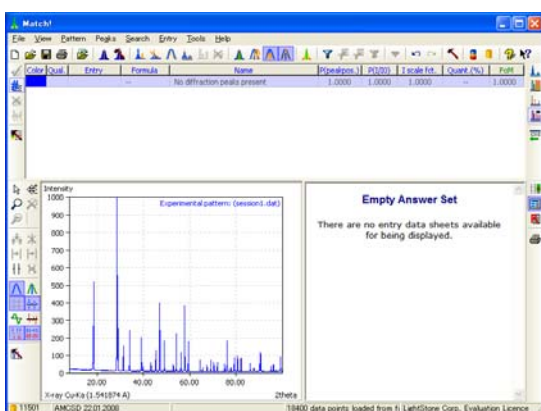
### 3. 測定に使った X 線の波長を入力



回折実験で使ったX線の波長を選び「OK」ボタンを押します。今回は波長  $1.541874\text{\AA}$  (Cu K $\alpha$ ) という条件なのでデフォルトのままにします。

※ 今回読み込む Profile(start, step, end, intensities)形式のデータには、回折実験に利用した X 線の波長のデータが含まれていません。そのため、データを読み込むときに左図の画面が表示されます。データファイルに波長データが含まれる場合は表示されません。

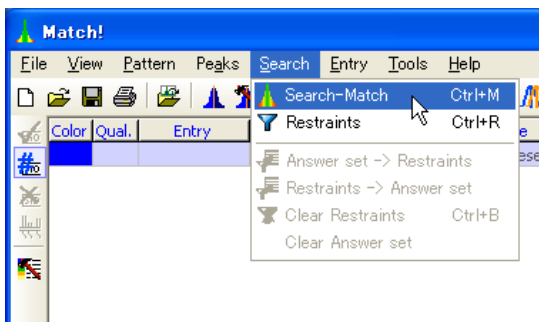
### 4. 回折パターンが表示される



Match! が回折データを読み込み、ウィンドウの左下のエリアに回折パターンが表示されます。

ここからは、バックグラウンドの除去、ピーク検出、誤差の補正、search-match (サーチマッチ: 実験で得られた回折パターンを、データベースのリファレンスパターンと比較して、相を特定する) と行っていきます。

### 5. Search-Match を実行

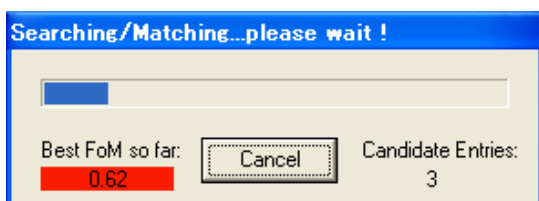


細かい設定は行わず、Match! にすべて任せる形で search-match を実行します。

「Search」メニューから「Search-Match」を選んでください。

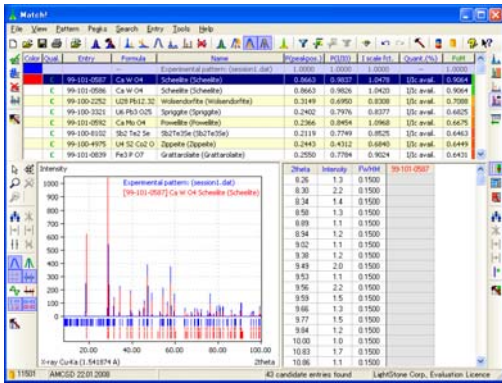
※ 今回のデータは簡単に相を同定できるデータになっています。このような簡単な例では Match! にお任せで search-match プロセスを実行できます。

### 6. パターンの比較が終わるまで待ちます

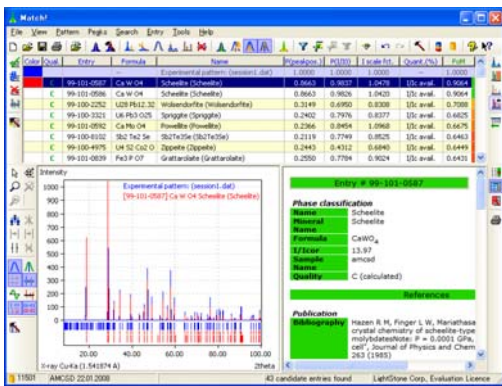


search-match の進捗具合が表示されます。データの内容や PC の処理速度により、数秒で終わることから数分間かかる場合までさまざまです。終了まで待ちます。

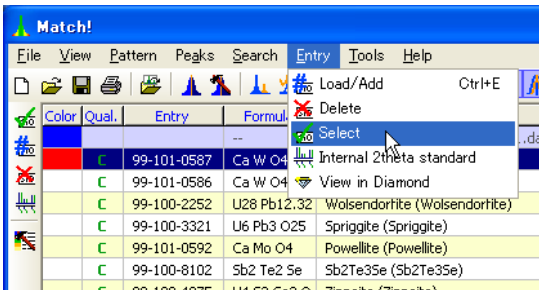
## 7. パターンの一致度を確認



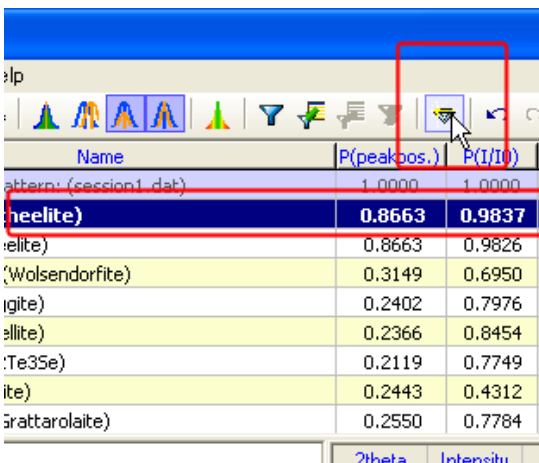
## 8. データシートをチェックする



## 9. 相を決定する




## 10. Diamond で立体構造を表示する



search-match 計算が終わると、画面の上に「結果リスト」が表示されます。パターンの一致度が高いものが、上から順に並んでいます。

リストのいちばん上をマウスで選択すると、ウィンドウの左下に選んだ相の回折パターンが赤く追加されます。また、右下にはこのリファレンスパターンのピークリストが追加されます。


選んだ相の詳細なデータを見ることができます。ウィンドウ

の右端にあるボタンを押すか、「View」メニューから「Data Sheet」を選ぶと表示できます。確認しましょう。

このデータシートをチェックしても特に否定的な要素がないので、この候補をマッチングが取れたものとして採択していいでしょう。

「Entry」メニューから「Select」を選ぶと、候補の中から選んだエントリが採択されます。

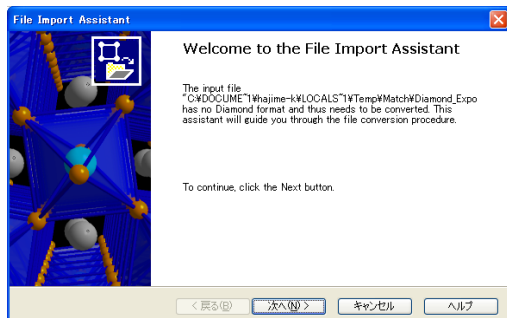
これで相を同定できましたが、この結晶相の詳細について文字でしか情報がわかりません。ツールバーの

Diamondのボタンを押すと、選んだデータが

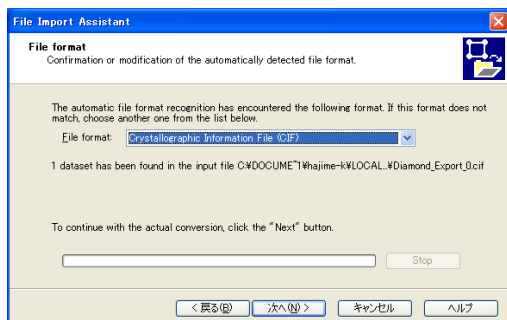
Diamondに送られ、結晶構造を立体図として表示できます。

※ 同じPCにDiamond（体験版でも可）がインストールされていれば、Match! から直接にDiamondにデータを送ることができます。

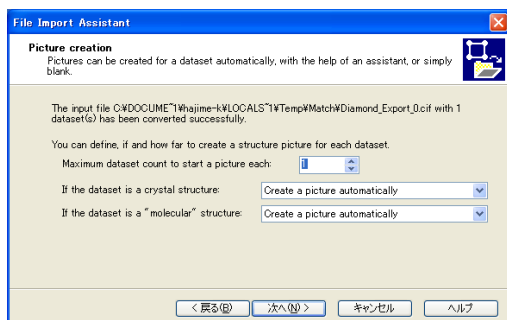
## 11. Diamond での表示形式を決めます



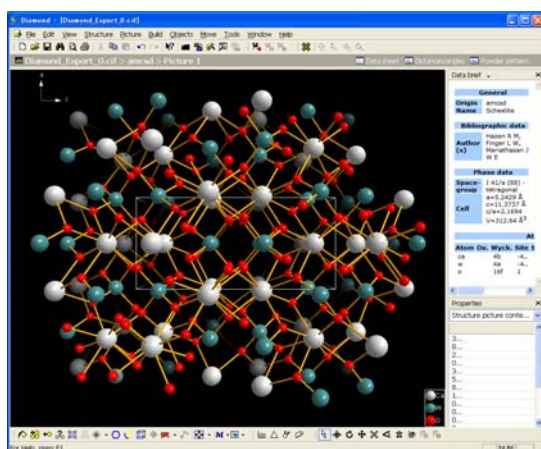
## 12. ファイル形式を選択



## 13. 結晶構造図の表示形式を指定



## 14. 結晶構造が立体表示されます



Diamond で結晶構造を表示するときの表示方法を、ウィザードを使って決められます。

細かく設定することもできますが、簡単に自動で作図することもできます。今回は自動設定で結晶構造を可視化してみましょう。

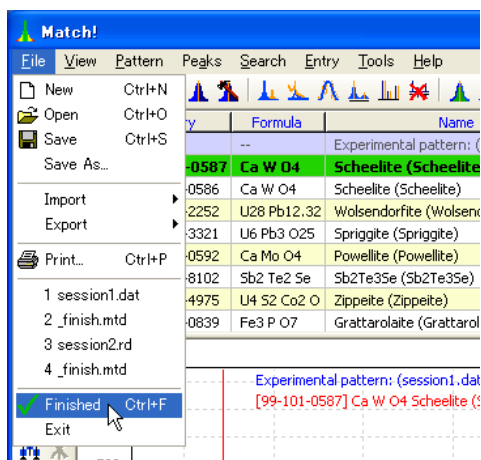
Diamondが自動的にデータ形式を判断します。この画面では設定を変えずに、「次へ」ボタンを押して次の画面に進みます。

結晶の立体構造図を自動で作図するか、手動で設定を指定するか決めます。今回は自動で作図するので、「If the dataset is a crystal structure」の設定で「Create a picture automatically」を選択して、「次へ」ボタンを押します。

Match! で選択したエントリの結晶構造が、立体構造図で表示されます。マウスでドラッグするだけで見たい角度から見るができますし、拡大/縮小、表示モデルの変更なども簡単に可能です。

Diamond の操作の詳細を知りたい場合は、Match! 体験版の CD-ROM の中にある「Diamond」フォルダに、マニュアルや簡単な使い方のガイドの PDF ファイルがありますので参照してください。

## 15. Match! を終了します



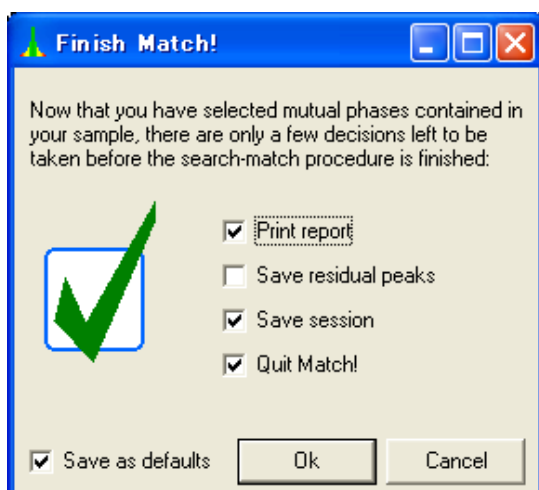
Match! に戻ります。CaWO<sub>4</sub> のピークは、サンプルデータのパターンに非常によく一致するので、ほかの主要な化合物が見落とされた可能性は低いと考えられます。同定ができたので Match! を終了します。

同定した結果は、ファイルとして保存できるほか、見やすい形式でプリントアウトすることもできます。

終了前に記録を残しておきましょう。

まず、「File」メニューから「Finished」を選びます。

## 16. 終了するときの処理を選びます



終了を確認する画面で、結果のプリントアウトやデータを保存することを指示できます。今回は、データをファイルとして保存し、プリントアウトも行います。

「Print report」「Save session」「Quit Match!」にチェックをつけて「OK」を押すと、選んだオプションが実行されます。

## Session 2: Multiple Phases

### セッション 2： 複数の相の扱い

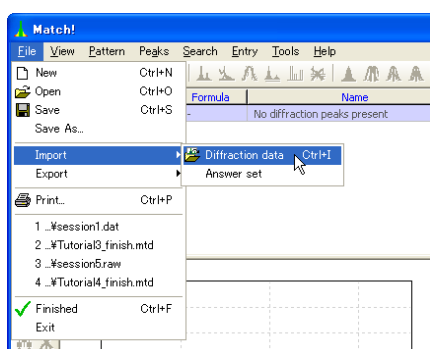
Match! では、複数の相を含むサンプルも分析できます。ここでは、その操作を実際に行ってみましょう。

このセッションでは複数の相を含んだサンプルを分析します。以下の条件で分析します。

- 回折データは「Tutorial\session2.rd」(PANalytical RD 形式)
- 「session1.dat」のデータ形式は Profile(start, step, end, intensities)形式
- 実験データは  $2\theta$  の範囲が  $85^\circ$  までしか測定されていない

### セッション 2 の操作手順

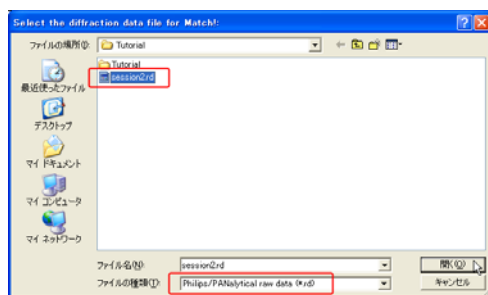
#### 1. インポートを実行



Match! を起動して、新規文書を開き、

「File」メニューから「Import」→「Diffraction data」  
と選びます。

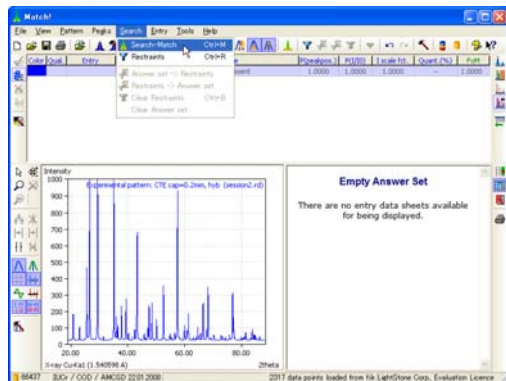
#### 2. 回折データを読み込みます



回折データを指定する画面が開きます。今回は「session2.rd」(Match! をインストールしたフォルダの「Tutorial」フォルダ内にあります)を使います。

ファイルの種類で「Philips/PANalytical RAW data (\*.rd)」  
を選び、「session2.rd」を開いてください。

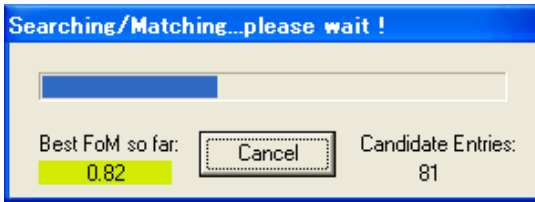
#### 3. search-match を開始!



セッション 1 と同じように細かい設定は行わず、search-match を実行します。

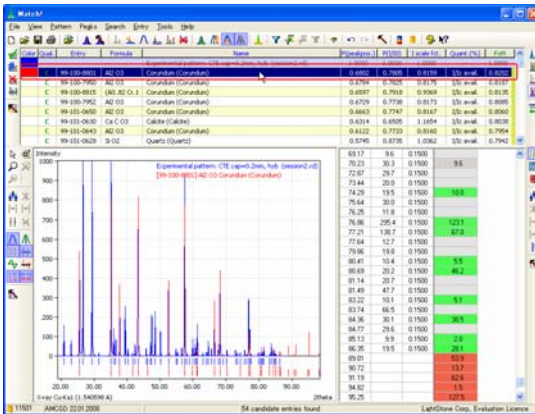
「Search」メニューから「Search-Match」を選んでください。

#### 4. 終了まで待つ




search-match の進捗具合が表示されます。終了するまで待ちます。

#### 5. 結果リストの 1 番目を選択

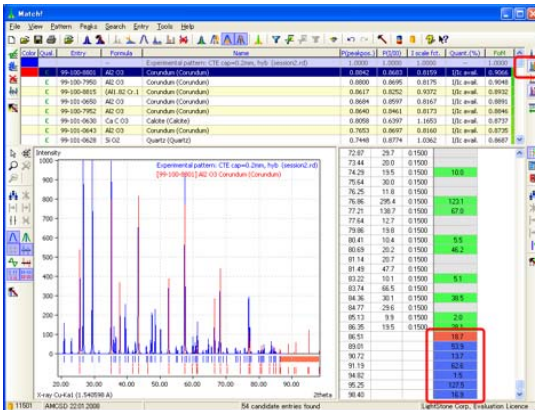


結果リストに、この試料の回折パターンと一致度が高いリファレンスパターンから順に表示されます。結果リストのいちばん上に表示された候補をクリックして選んでみましょう。右下にピークリストが表示され

ます (表示されない場合は  ボタンを押す)。


パターンの一致は良好ですが、 $2\theta$  の大きい部分で一致していない部分があります。

#### 6. 測定していない $2\theta$ の範囲を無視する

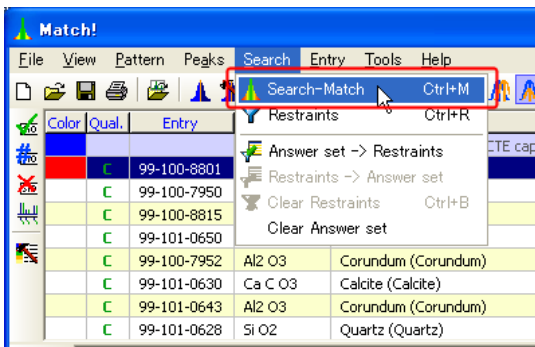


角度が大きい部分で一致していないのは、リファレンスパターンが  $100^\circ$  までデータがあるのに、測定データには  $85^\circ$  までしかデータがないためです。そのため、 $85^\circ$  以下の部分の一致がよくても FoM 値 (一致度のようなもの) は下がってしまいます。

そこで、「Restrict to experimental range」オプションを使って測定データの無い部分は無視します。

右端の  ボタンを押してください。

#### 7. search-match の再計算




$2\theta$  の角度の大きい部分は無視するように設定したので、FoM 値の算出にも影響します。この条件で search-match をやり直した方がいいでしょう。

「Search」メニューから「Search-Match」を実行しましょう。

### 8. 各相のエントリを1つに絞り込む



相同定を行ったときに、同じ相（例えば $\text{Al}_2\text{O}_3$ ）の候補がいくつも表示される状態になっているので、1つに絞り込むようにします。

「automatic residual searching」という機能を使います。ウィンドウ右端の  ボタンを押して、この機能を有効にします。

### 9. $\text{Al}_2\text{O}_3$ を選択する



結果リストの1位の $\text{Al}_2\text{O}_3$ を、マッチングが取れたものとして選択します。リストのいちばん上にある  $\text{Al}_2\text{O}_3$  の列をダブルクリックします。

※ automatic residual searchingの機能を有効にしているため、リストに存在したほかの「 $\text{Al}_2\text{O}_3$ 」のデータが消えます。

### 10. $\text{CaCO}_3$ を選択する



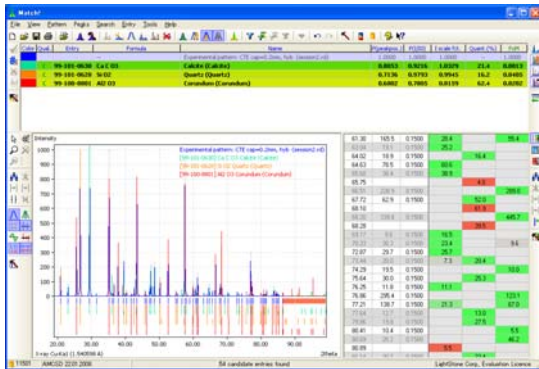
結果リストに残った候補を見れば、2番目の相が $\text{CaCO}_3$ だというのは明らかでしょう。リストの上から2列目にある「 $\text{CaCO}_3$ 」の列でダブルクリックして、 $\text{CaCO}_3$ を採用します。

### 11. $\text{SiO}_2$ を選択する

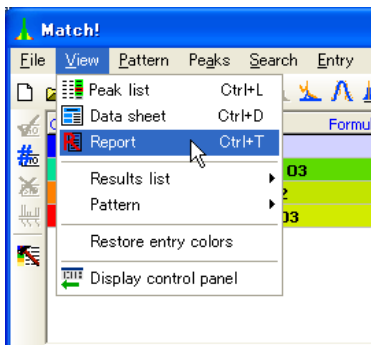


残っている未照合の相の上位を $\text{SiO}_2$ が占めています。 $\text{SiO}_2$ も含まれているものと判断し、 $\text{SiO}_2$ のいちばん上のエントリをダブルクリックして採用しましょう。

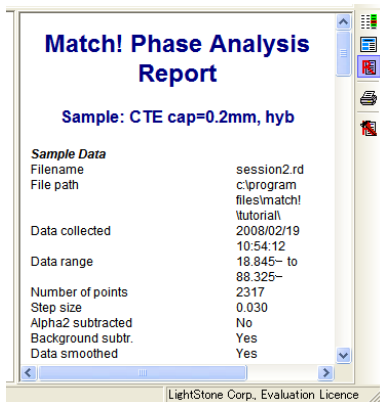
## 12. すべての相を同定完了!



## 13. 結果を出力する



## 14. プリントアウトも可能



残りの候補は存在しなくなりました。サンプル中に含まれるすべての相を同定できたと考えられます。

同定したすべてのエントリに I/Ic 値がセットされていたため、サンプル中の各相の重量比が「Reference Intensity Ratio 法」で準定量的に算出されています。

「Quant.(%)」の列を見ると、Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>が 62.7%、CaCO<sub>3</sub>が 21.3%、SiO<sub>2</sub>が 16.1%と示されています。

「View」メニューから「Report」を選ぶと Match! のウィンドウの右下に、今回の分析結果がまとめられた形で表示されます。

「File」メニューから「Print」を選ぶと、印刷したい項目を指定するダイアログが表示されます。

「Report」を選んで「OK」ボタンを押すと、左のような内容をプリントアウトできます。

## Session 3: Database Retrieval

### セッション 3： データベース検索

相同定の重要な側面の 1 つは化学組成や密度といった追加の情報をうまく活用することです。候補エントリの一覧を絞り込む上で利用できる情報は何でも利用するのが良い方法です。このセッションでは Match! がサポートしている条件付きデータベース(DB)検索機能について学習します。

以下の条件を満たす結晶構造を、Match!と AMCSD データベースを使って検索します。

- ケイ素、酸素、ある種のアルカリ土類金属を含む
- 名称が「European」で始まる論文誌に掲載されている

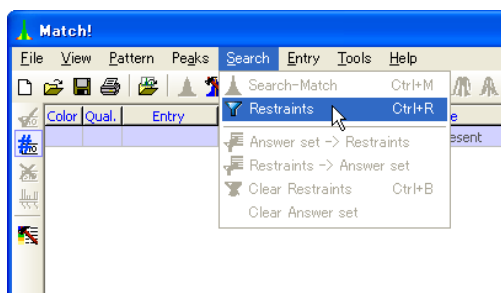
この 2 つの条件で検索したあと、さらに以下の条件で絞り込みます。

- 空間群は P 1 21/c 1
- 密度は 2.5~2.6 g/cm<sup>3</sup> の間

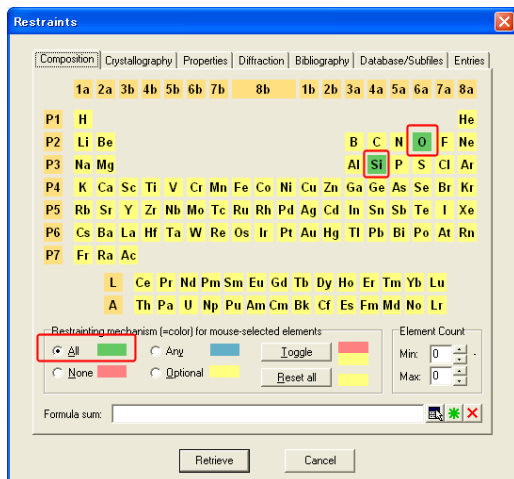
ケイ酸塩について研究している折、ケイ素とアルカリ土類金属を含む興味深いネットワークを形成するアルカリ土類ケイ酸塩(earth alkaline silicate)に関する論文を読んだことがあることをあなたは思い出します。論文誌の名前は“European ...”でしたが、残りの部分は思い出せません。この化合物のある種の性質が現在の研究にも重要な意味を持つかも知れないことから、あなたはこの結晶構造について詳しく調べてみることを決断します。

### セッション 3 の操作手順

#### 1. 検索条件を指定する画面を開く



#### 2. ケイ素と酸素の条件を設定



Match! を起動して「File」メニューから「New」を選んで新規文書を開きます。

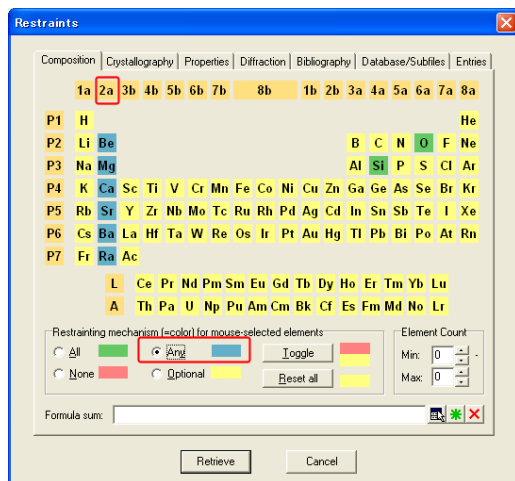
次に「Search」メニューから「Restraints」を選ぶと、検索条件を入力する画面が開きます。

目的の化合物には「ケイ素」と「酸素」が含まれているということがわかっていますので、まずその条件を指定します。

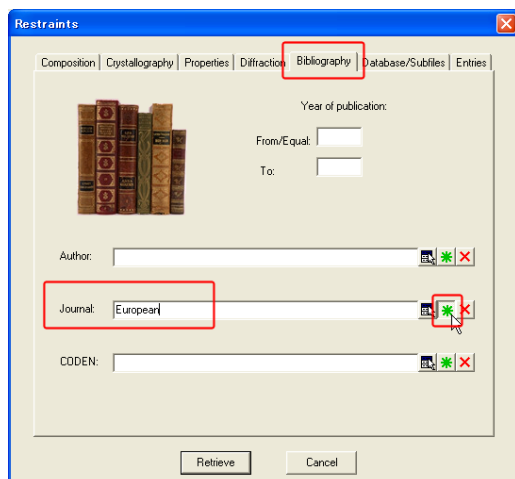
必ず含まれていなくてはならない元素を指定するときには、まず「All」に印をつけます。その状態で、「Si」と「O」をクリックすると、2 つの元素が緑色に変わります。

この状態は「Si」と「O」を必ず含んでいるということを示しています。

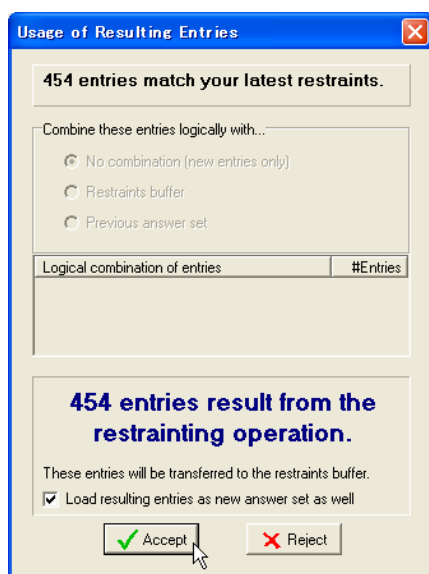
### 3. アルカリ土類金属の条件を設定



### 4. 論文誌についての条件を設定



### 5. 検索結果が表示されます



目的の化合物は、アルカリ土類金属の元素を含んでいることはわかっていますが、どの元素かということまでは特定できていません。そこで「Any」を使います。「選択した元素のうちのどれかを含む」と指定するオプションです。

「Any」に印をつけてから「2a」をクリックします。周期表の「2a」の列が青色に変わり、アルカリ土類金属を一括して選択できます。「青色に塗られた元素のどれかを含んでいる」と条件を設定できました。

「Bibliography」タブを選ぶと、目的の化合物が掲載されていた論文の情報で検索条件を絞り込めます。

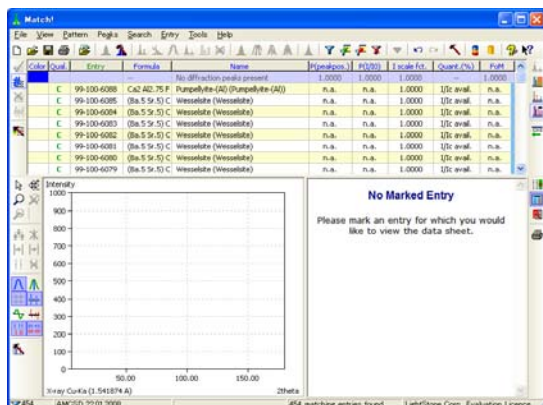
「European」で始まる論文誌に掲載されていたことがわかっているので、まず「Journal」の欄に「European」と入力します。完全に論文誌名と一致するわけではなく「European」という文字が含まれているというだけなので、右側にある緑色の星マークのボタンも押します。

これで条件がすべて設定できたので「Retrieve」ボタンを押して、検索を実行します。

検索の結果、設定した条件に合致するデータが 454 個あるということがわかり、表示されました。

「Accept」ボタンを押して、実際に合致したデータを見てみましょう。

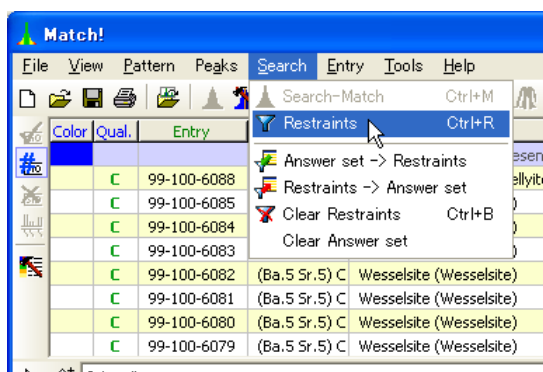
## 6. 結果リストに表示



検索結果は、search-match のときに使った結果リストの画面に表示されます。リストの中から見たいデータをクリックして選ぶと、回折パターンや詳細データを見ることができます。

候補が 454 個もある状態では目的の化合物を特定できないので、さらに条件を追加して絞り込みます。

## 7. Restraints を再度実行



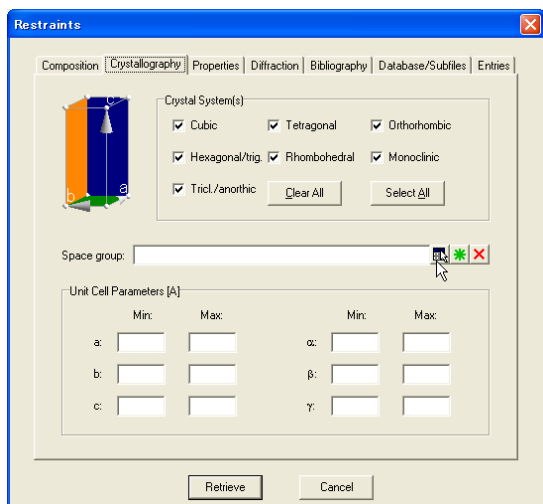
「Search」メニューから「Restraints」を選びます。

検索結果の絞り込みができます。

以下の条件を追加します


- 空間群は「P 1 21/c 1」
- 密度は 2.5~2.6g/cm<sup>3</sup>

## 8. 空間群の条件を設定

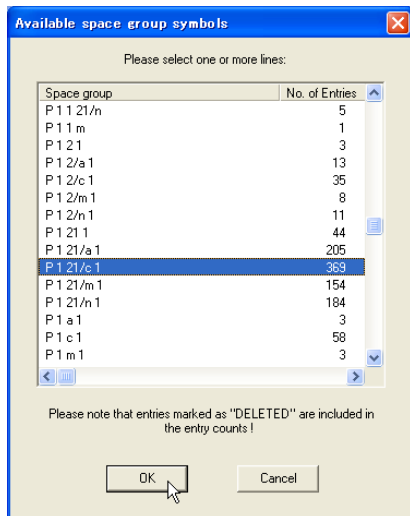


「Restraints」タブを選ぶと、空間群を設定できます。

「Space group」の欄に入力します。直接キーボードで入力するのは難しいので、一覧表の中から選ぶことにしましょう。

 ボタンを押すと空間群の一覧が表示されます。

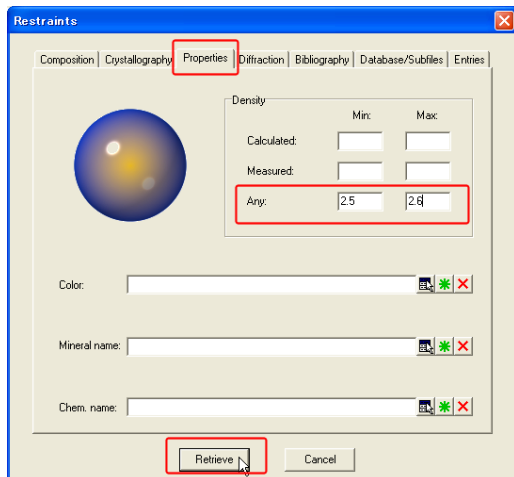
### 9. 「P 1 21/c 1」を選ぶ



空間群の一覧の中から「P 1 21/c 1」を選び、「OK」ボタンを押して確定します。

元の「Restrains」ダイアログに「P 1 21/c 1」と書き込まれます。

### 10. 密度を設定



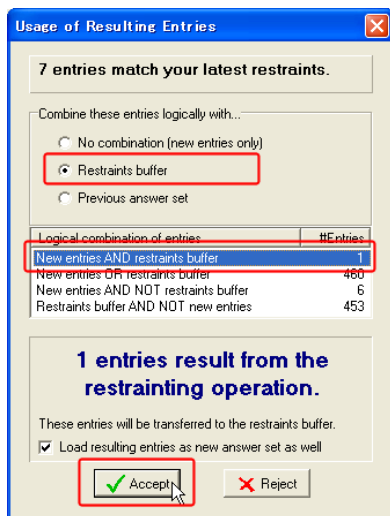
続けて「Properties」タブを選びます。この画面の「Density」欄で密度の範囲を設定できます。

今回は、計算値か測定値かに関わらず「2.5～2.6g/cm<sup>3</sup>」であればいいという条件にします。

そこで「Any」欄の「Min」に「2.5」を、「Max」の欄には「2.6」を入力します。

これで追加条件がすべて設定できたので「Retrieve」ボタンを押して検索を開始します。

### 11. 両方の検索結果を満たすデータを表示

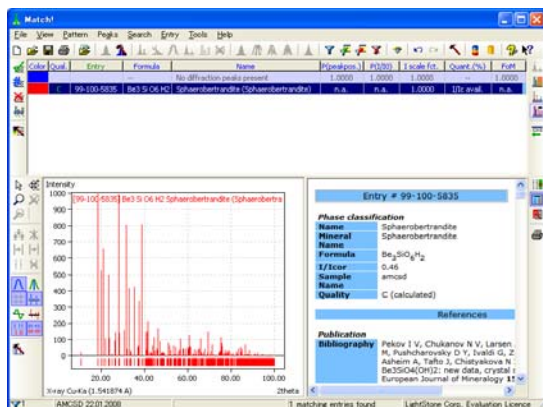


AMCSDデータベース全体の中で、空間群と密度の条件を満たすデータは7件だと表示されました。

このあとに検索結果の一覧を表示するのですが、最初に設定した元素や論文誌の条件と両方を満たす結果だけを表示するのか(AND)、どちらか一方を満たす結果を表示するのか(OR)などの条件を指定できます。

今回は両方の条件を満たす結果を知りたいので、「New entries AND restraints buffer」を選んだ状態で「Accept」ボタンを押します。

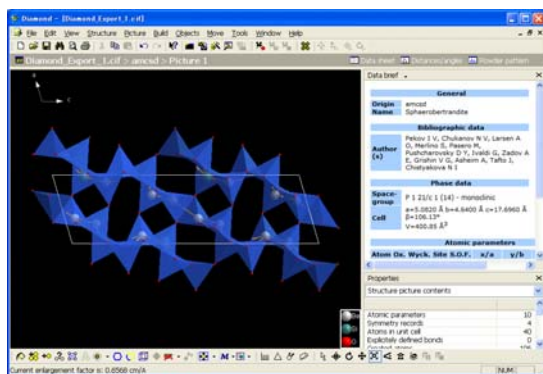
## 12. データシートを表示




4つの条件（組成、論文誌、空間群、密度）のすべての条件を満たすデータは1つだけでした。目的の化合物が特定できたので、詳しいデータを見ましょう。

「View」メニューから「Data sheet」を選ぶと、ウィンドウの右下に、AMCSDデータベースに収録されている詳細データが表示されます。

## 13. 結晶構造をDiamondで確認



Diamond (体験版でも可。Diamond 体験版は、Match! の CD-ROM からインストールできます) をインストールしてある PC なら、立体構造を視覚化できます。Match! のツールバーにあるダイヤモンドのマークのボタン  を押し、作図方法などを指定すると、Diamond が起動します。立体構造を直感的に理解できます！

セッション 3 の例では、AMCSD データベース全体を対象として検索を行いました。相同定を行うときに候補を絞り込むツールとして、このセッション 3 で紹介した **Restraints** 機能を組み合わせて使うことも可能です。

Match! などの Crystal Impact 社のソフトウェアの情報は、ライトストーンの Web サイトでもご提供しています。以下の Web ページもご参照ください。

Crystal Impact 社製品のページ

<http://www.lightstone.co.jp/crystal>