JADE の使用例(4) 粉末回折パターンに指数付けを行う方法(Pattern Indexing)

指数付けの実行

粉末回折パターンのデータを読み込み、「スタート」メニューから「ピークの指数付け」を 選ぶと、「パターン指数付け」ウィンドウが開き、指数付けを実行できます。



JADE は指数付けのためにピークリストを作成します。ピークにプロファイルフィッティン グを行うと、ピークリスト内のプロファイルがフィットで得られた値に置き換えられます。

ø	パターン指	数付	l t • ;	未知/	× 9-20	の単	位胞とミ	ラ−指数を	探索する	õ										Х
×	閉じる 👩	┛探	索(S)	¥⊏1-	-(M) -	- 3	2間群=	? - 20:	=67.4°	δ±0.20°	C=30/	å <i>fm=</i> 6	0 n=	3 🗷				:	8	•
ø	結晶系	fm	fn	Ρ	R	空間]]]]]]]]]]]]]]]]]]]]]]]]]]]]]]]]]]]]]]	a (Å)	Ь (Å)	c (Å)	a	β	γ	体積	シフト(x)	R%				
	メモ: バター 題になる [;] あれば、ノ 入力でき	-ンの打 場合も 1%ーン ます。	皆数付 5ありま の指数 WPF	けが) す。打 数付け 法(は)	うまくい。 皆数付 りの際() 単位脆	くかを (けを こ(よす 風の料	5決める朝 試みる前 1-りを付(春密化の	要因として 前に、表示 けたビーク。 目的では	こは、ビー されてい より優先 は優れてい	り位置、特)るマーりの(されます。 , \るだけで)	射に低角 付いたヒ [®] 下のコント なく使い ³	ご~クの位 ~クを見直 ロールを使 やすい面が	置が決 してくた えば d	宅的は ざさい。 J <mark>(hkl)</mark> マ す。	重要です プロファイルフ ンーカーを計	。余分 バッティン 算する;	なビークの がのされ ための単	Dある たと [。] - に位胞	ことが問 りがもし データを	
立7	5晶系 、	∕ (P:	23 (19	5) 🗸	2	5.0)	5.0	5.0	90	.0	90.0	90.0	0.0)	 審密化	(1) 単	創立的	回を指定	する。
#	回折角	(0)	回折角	角 (c)	ô(*)	(h k l)) d(o)	d(c)	δ(Å)	高	5 面積	% F'	WHM						^
1	25.5	78			-			3.479	8		2104.	0 51.9	\$ 0.1	72*						
2	35.1	48			-			2.551	2		3272.	0 86.1	\$ 0.1	73°						
3	37.7	84			-			2.379	0		1560.	0 36.1	\$ 0.1	63°						
4	43.3	49			-			2.085	6		3624.	0 100.0	\$ 0.1	80°						
5	46.1	87			-			1.963	9		260.	0 1.0:	% 0.1	15°						
6	52.5	46			-			1.740	2		1752.	0 47.3	¥ 0.1	88°						
7	57.5	02			-			1.601	4		3196.	0 95.5	% 0.1	98°						
8	59.7	41			-			1.546	7		308.	0 1.8:	\$ 0.1	68°						~
10/			4+30	e	l m+c		N##	2/91	erina											
10/	221回の指	<u></u> 数1寸	1) 9 30	9	凹切	「線の	リ致 <(D()> <	-0(A)>	(回) 抹茶	$\epsilon(\mathbf{Q}):\mathbf{C}$	AINONA	甲口丛服	3						

初期設定では、JADE は最初の 16 個のピークを指数付けに利用します。

「角度リミット」の設定を変更することで、より多くのピークを含めるか除外するか変更で きます。「角度リミット」の表示(下図)を、マウスで右クリックや左クリックすることで設 定値を変更できます。

Ø	パターン打	旨数付	l) (未知	n" 9-)	の単位胞	د ٤٤	−指数を	探索する	5						
×	閉じる」	🗊 探察	索(S))=1	-(M)	▼ 空間	¥ =?	- 20	=67.4°	δ±0.20°	C=30	DÅ fm:	=60 n:	=3 💽		
ø	結晶系	fm	fn	Ρ	R	空間群((#)	a (Å)	b (A)5	c (Å)	α	β	γ	体積	971(x)	R%
	メモ: ハタ 題になる	ーンの打 場合も	皆数付 うありま	がます。 ます。	うまく() 指数(,バかを決め 寸けを試み)る男 (る前	駆因としう (に、表示	cは、ビ <mark>ル</mark> Fiざれした	ADE 指数 E/右クリック	(付けと) またはス	単位胞料 クロール (C	書密化の trl: リセッ)角度则 、Shift:	ット 微調整)	余分 ツテ心
	あれば、 入力でき	パターン きます。	の指述 WPF	数付(法は	ナの隣 単位	約にはマークを 胞の精密(E付け とのI	けたビーク 目的では	より優先 は優れてい	されます。 いるだけで	下のコン なく使い	トロールを いやすい値	使えば(oがありま	d(hkl)マ ます。	ーカーを計:	算する
立	方晶系	✓ P2	3 (19)5) 🔨	/ 2	5.0		5.0	5.0	90	.0	90.0	90.0	0.0	- <u>1</u>	

角度リミットの設定値は、下図のようにメインウィンドウの回折パターン上にもわかりや すく表示されます。



「探索」ボタンをクリックすると、指数付けが始まります。



「パターン指数付け」ウィンドウ上部のヒットリスト(下図の赤い囲いの部分)に候補の一覧 が表示されます。候補の中からどれか1つを選ぶと、ダイアログ下部のピークリスト(下図 の青い囲いの部分)に(hkl)などが表示されます。

ø	n" 9-2	指数付	t t ● ₹	⊧知∽	\$->0,)単位	胞とミ	7−指	数を探	索する									×
×	閉じる	📴 探	索(S))/ ⊥ 1-	(M) -	空間	間群=	? •	20=71	.4° δ±0	0.20°C=	:30Å fn	n=60 n	=3	0		li 🖯	52	•
ø	結晶系	ξ fm	fn	Р	R	空間	群(#)	a (Å)	Ь (Å)	c (Å)	α		β	γ	体積	971(x)	R%	^
六方	晶系	14	82	0	2	R-3c	: (167)*	4.7587	4.7587	12.9973	90.00°	90.0)0°	120.00°	254.9	0.004		
単彩	倡系	32	44	0	5	P2/n	(13)	ĸ	4.5428	2.3796	4,1215	i 90.00°	107.5	57°	90.00°	42.5	0.002		
単彩	椙系	32	51	0	5	P2/c	(13)	ĸ	4.5430	2.3793	5.1308	90.00°	130.0)2°	90.00°	42.5	-0.001		
単彩	晶系	35	123	0	6	C2/r	n (12))*	6.9971	4.7587	2.5643	90.00	95.8	35°	90.00°	84.9	0.001		
単金	182	96	10	n	9	<u>/</u>		inik:	0.0016	# 7601	15644	00.00*	100.0	10*	00.00*	010	0 000	_	
六方	晶系	∼ R	-3c (16	67 ~	6	4.75	87	4.78	587	12.9973	90.0	90.0	120.0)	0.0044	精密化	🤃 単位	立胞を	を指え
#	回折角	角(o)	回折角](c)	ô(*) (hk)	d(o)	d(c)	δ(Å)	高さ	面積%	F۷	VHM				^
1	25	.578	25.	578	0.0	01 (013	2) 8	3.4798	3.4804	0.0005	2104.0	51.9%	0.11	72*				
2	35	.148	35.	146	-0.0	02 (104	i) 2	2.5512	2.5516	0.0004	3272.0	86.1%	0.13	73°				
3	37	.784	37.	783	-0.0	01 (110)) 2	2.3790	2.3794	0.0003	1560.0	36.1%	0.10	63°				
4	43	.349	43.	356	0.0	06 (113	3) 2	2.0856	2.0855	-0.0001	3624.0	100.0%	0.18	80°				
5	46	.187	46.	183	-0.0	04 (203	2) 1	1.9639	1.9642	0.0003	260.0	1.0%	0.1	15°				
6	52	.546	52.	551	0.0	05 (024	I) 1	1.7402	1.7402	0.0000	1752.0	47.3%	0.18	88°				
7	57	.502	57.	492	-0.0	10 (110	5) 1	1.6014	1.6018	0.0004	3196.0	95.5%	0.19	98°				
8	59	1.741	59.	748	0.0	07 (2.1	1) 1	1.5467	1.5466	-0.0001	308.0	1.8%	0.10	68°				
9	61	.301	61.	284	-0.0	17 (018	3) 1	1.5110	1.5115	0.0005	504.0	12.5%	0.33	35°				
10	66	i.509	66.	520	0.0	11 (214	D 1	1.4047	1.4046	-0.0001	1328.0	37.5%	0.2	12°				
11	68	.217	68.	218	0.0	00 (301)) 1	1.3737	1.3737	0.0001	1920.0	57.0%	0.21	09°				¥
11/2	22個の打	旨数付	けするビ	-7	30回	折線	<δ(°)> (0.0121	<δ(Å)>	0.00024	④ 探索	₹(Q) : CH	ITON	/IA 単位脱	2			

また、メインウィンドウでもピーク位置にスティックと(h k l)が表示されます。



ヒットリストの「fm」列は、Figure-of-Merit(性能指数)を表しています。fm の値が小さい ものほど成績が良いことを表しており、デフォルトでは fm 値が低い順に結果が表示されま す。fm の値は、5 から 95 の範囲で算出されます。

ø	パターン指	数付け	∀● 未	:知バ	9-20	の単位	対応と	287-	指数を探	索する		Ν					
×	閉じる 🖻	9 探索	₹(S) →	/ニュ-	(M) •	空	間群	≢=?	<i>2θ</i> =69	.1° δ±0	0.20°C=	30Å fn	n=60 n:	=3 🗷			Ēa 🖯
ø	結晶系	fm	fn	Р	R	空間	郡	(#)	a (Å)	Ь (Å)	c (Å)	α	6	3	γ	体積	971(x)
六方	晶系	12	98	0	2	R-3	c (1	67)*	4.7575	4.7575	12.9935	90.00°	90.0	0° 120	.00*	254.7	-0.026
単鈴	晶系	37	40	0	6	P2/	n (1	3)*	4.5419	2.3784	4.1208	90.00°	107.6	1° 90	.00°	42.4	-0.036
単鈴	晶系	37	114	0	6	C2/	'm (1	2)*	6.9973	4.7564	2.5641	90.00°	95.8	5° 90	.00*	84.9	-0.025
六方	晶系	38	40	0	10	R-3	m (1	66)*	4.7575	4.7575	12.9935	90.00°	90.0	0° 120	.00*	254.7	-0.026
六方	晶系	38	12	0	10	R-3	(14	8)*	4.7592	4.7592	13.0062	90.00°	90.0	0° 120	.00°	255.1	0.000
単彩	倡系	39	19	0	6	C2/	(m (1	2)*	9.0986	4.7593	2.5657	90.00°	130.0	4° 90	.00*	85.1	0.021
六方	晶系 ~	R-3	3c (16	7 ~	2	4.79	575	4	.7575	12.9935	90.0	90.0	120.0	-0.02	!6	精密化	🛈 単位
#	回折角(o) [回折角	(c)	δ(*)	(h}	< 1)	d(o)	d(c)	δ(Å)	高さ	面積%	FWHM			
1	25.5	43	25.5	555	0.0	111	(0)	12)	3.4844	3.4794	-0.0050	1246.4	48.7%	0.166*			
2	35.1	39	35.1	126	-0.0	13	(1)	(4)	2.5518	2.5509	-0.0009	2430.9	84.7%	0.147°			
3	37.7	74	37.7	762	-0.0	112	(1)	10)	2.3796	2.3788	-0.0008	1069.1	36.3%	0.144°			

結果がたくさん表示される場合は、「性能指数のカットオフ」の設定で一定以上の fm 値を 持つ結果を表示しないように絞り込むことができます。



「fn」列は、同等の Smith-Snyder 性能指数を示しています。fn 値が高いほど成績が良く、 999 が最大です。

圓 パタ−ン指	数付け	₩ ● 未	知パ	9-20	の単位胞とミラ−指	自数を探索	懐する								
🗙 閉じる 🙍	× 閉じる 圓 探索(S) メニュ-(M) ▼ 空間群=? ▼ 2θ=69.1° δ±0.20° C=30Å fm=60 n=3 🕗														
🗊 結晶系	fm	fn	Ρ	R	空間群 (#)	a (Å)	Ь (Å)	c (Å)	α	β	γ	体積			
六方晶系	12	98	0	2	R-3c (167)*	4.7575	4.7575	12.9935	90.00°	90.00°	120.00°	254.7			
単斜晶系	37	40	0	6	P2/n (13)*	4.5419	2.3784	4.1208	90.00°	107.61°	90.00°	42.4			
単斜晶系	37	114	0	6	C2/m (12)*	6.9973	4.7564	2.5641	90.00°	95.85°	90.00°	84.9			
六方晶系	38	40	0	10	R-3m (166)*	4.7575	4.7575	12.9935	90.00°	90.00°	120.00°	254.7			
六方晶系	38	12	0	10	R−3 (148)*	4.7592	4.7592	13.0062	90.00°	90.00°	120.00°	255.1			
単斜晶系	39	19	0	6	C2/m (12)*	9.0986	4.7593	2.5657	90.00°	130.04°	90.00°	85.1			
単斜晶系	47	7	0	9	C2/c (15)*	5.1026	6.9573	2.7963	90.00°	111.31°	90.00°	92.5			
単斜晶系	55	31	0	14	P2/m (10)*	4.5419	2.3784	4.1208	90.00°	107.61°	90.00°	42.4			
		· · · ·	8												
六方晶系 🗸	R-8	Bc (16	7 ~	2	4.7575 4.7	575	12.9935	90.0	90.0	120.0	-0.026	精密化			
# 同拆鱼(പ്ര	a#f∰	6	80) (64.0	d(a)	d(a)	8(8)	查:t	両珪火 ロ	WUM				

ある程度の予備知識がある場合は、 ツールバーのメニューから結晶系や空間群、単位胞の 体積などで結果を絞り込むことができます。

Ø	パターン指導	数付け	け● 未知ハ	ターンの単	位胞とミラー	指数を探	索する					\times
×	閉じる 🖪	探索	ē(S) ≯=⊒-	(M) - 3	2間群=?	• == P2 (3)	J J	^ C	=30Å fm	=60 n=	=3 💽	•
ø	結晶系	•	すべての	空間群	63	P21 (4	4) 1	(Å)	α	6	3	γ ^
六方	晶系		中心空間	聞群のみ	指	数付けのた	。 とめに空間	群を指定	する 指定	しない	0° 120	.00*
単彩	相系 🔤		非中心の)空間群	തൿ 🔚	Cm (8	0	.120	8 90.00	107.6	1° 90	.00*
単彩	14晶系				. 7.	$\operatorname{Cc}(9)$	í	.564	1 90.00°	95.8	5° 90	.00*
六方	晶系		Sohncke	空間群(りみ	P2/m	(10)	.993	5 90.00°	90.0	0° 120	.00* 🗸
<	-	_				P21/n C2/m	n (11) (12)	v 📃				>
六方	品系 ∨	R-3	3c (167 🗸	2 4.	7575	1.7575	12.9935	90.0	90.0	120.0	-0.02	6 精
		_										
#	回折角(o) [回折角(c)	δ(°)	(hkl)	d(o)	d(c)	δ(Å)	高さ	面積%	FWHM	^
#	回折角() 25.54	o) [0 13	回折角(c) 25.555	ව(°) 0.011	(hkl) (012)	d(o) 3.4844	d(c) 3.4794	රි(Å) -0.0050	高さ 1246.4	面積% 48.7%	FWHM 0.166°	^
# 1 2	回折角() 25.54 35.13	o) [43 39	回折角(c) 25.555 35.126	δ(°) 0.011 -0.013	(hkl) (012) (104)	d(o) 3.4844 2.5518	d(c) 3.4794 2.5509	∂(Å) -0.0050 -0.0009	高さ 1246.4 2430.9	面積% 48.7% 84.7%	FWHM 0.166° 0.147°	
# 1 2 3	回折角(25.54 35.13 37.77	o) [0 13 39 74	回折角(c) 25.555 35.126 37.762	δ(*) 0.011 -0.013 -0.012	(hkl) (012) (104) (110)	d(o) 3.4844 2.5518 2.3796	d(c) 3.4794 2.5509 2.3788	δ(Å) -0.0050 -0.0009 -0.0008	高さ 1246.4 2430.9 1069.1	面積% 48.7% 84.7% 36.3%	FWHM 0.166° 0.147° 0.144°	
# 1 2 3 4	回折角(25.54 35.13 37.73 43.34	o) [0 13 39 74	回折角(c) 25.555 35.126 37.762 43.337	δ(*) 0.011 -0.013 -0.012 -0.003	(hkl) (012) (104) (110) (113)	d(o) 3.4844 2.5518 2.3796 2.0860	d(c) 3.4794 2.5509 2.3788 2.0850	∂(Å) -0.0050 -0.0009 -0.0008 -0.0010	高さ 1246.4 2430.9 1069.1 2947.5	面積% 48.7% 84.7% 36.3% 100.0%	FWHM 0.166° 0.147° 0.144° 0.144°	
# 1 2 3 4 5	回折角(25.54 35.13 37.77 43.34 52.53	o) [13 39 74 10 39	回折角(c) 25.555 35.126 37.762 43.337 52.535	δ(°) 0.011 -0.013 -0.012 -0.003 -0.003	(hkl) (012) (104) (110) (113) (024)	d(o) 3.4844 2.5518 2.3796 2.0860 1.7404	d(c) 3.4794 2.5509 2.3788 2.0850 1.7397	δ(Å) -0.0050 -0.0009 -0.0008 -0.0010 -0.0007	高さ 1246.4 2430.9 1069.1 2947.5 1393.9	面積% 48.7% 84.7% 36.3% 100.0% 46.8%	FWHM 0.166° 0.147° 0.144° 0.144° 0.143°	~

すべてのメニューを表示させたツールバーです。最大の単位胞の大きさや体積で絞り込む こともできます。

回 nº 9-2	指数付け●	未知バターンの	単位胞とミラー指	数を探索す	5							×
🗙 閉じる	🗐 探索(S)	א=⊐-(M) ד	空間群=? ▼	<i>2</i> θ=67.4°	δ±0.20°	C=30Å	100 - 500Å ³	fm=60	n=3 💽	li 🖯	<u>85</u>	3

ICDD の PDF データベースとの連携

「パターン指数付け」ダイアログの右上にあるボタンから、ICDD の PDF データベースを 検索する画面を呼び出し、類似のセルを検索することができます。

ø	パターン指	数付け	t● ŧ	≂知バ	9-20)単位胞とミ	ラ−指数	を探察	索する						5		×
×	ສືບລີ 🙍	探索	₹(S)	у <u>⊏</u> 1-	(M) -	空間群=	? + 2	θ=67.	4° δ±0	.20° C=	30Å fm	n=60 n:	=3 🕐			T P	ā 🖻
ø	結晶系	fm	fn	Ρ	R	空間群 (#) a	(Å)	Ь (Å)	c (Å)	α	6	3	γ	体積	971(X)	R% ^
六方	晶系	10	82	0	1	R-3c (167)* 4.	7587	4.758	12.9973	3 90.00	° 90.0	0° 120	.00° :	254.9	0.00 P	DF データ
六方	晶系	34	59	0	8	R-3m (16	6)* 4.	7587	4.758	7 12.9973	3 90.00	° 90.0	0° 120	1.00° (254.9	0.004	
六方	晶系	34	12	0	8	R-3 (148)	* 4.	7581	4.758	1 12.9952	2 90.00	° 90.0	0° 120	1.00° (254.8	0.000	
単斜	晶系	42	8	0	- 7	C2/c (15)	* 6.	9796	4.758	3.4894	4 90.00	° 94.3	3* 90	.00*	115.6	0.000	
直方	晶系	46	6	0	11	Pbcn (60)	2.	3829	10.204	9 4.7581	1 90.00	° 90.0	IO* 90	.00*	115.7	0.000	
直方	晶系	49	6	0	13	Pbam (55)	* 2.	3829	10.204	9 4.7581	1 90.00	° 90.0	IO* 90	.00*	115.7	0.000	
直方	晶系	50	8	1	9	Pbca (61)	2.	3829	10.204	9 4.7581	1 90.00	° 90.0	IO* 90	1.00°	115.7	0.000	×
六方	晶系 ~) R-3	3c (16	7 ~	2	4.7587	4.7587	7	12.9973	90.0	90.0	120.0	0.004	4 精	密化	🚺 単位	胞を指決
#	回折角(o) [回折角	(c)	δ(*) (hk) d((o)	d(c)	δ(Å)	高さ	面積%	FWHM				^
1	25.5	78	25.	578	0.0	01 (01:	2) 3.4	798	3.4804	0.0005	2104.0	51.9%	0.172°				
2	35.1	48	35.	146	-0.0	02 (10)	l) 2.5	512	2.5516	0.0004	3272.0	86.1%	0.173°				
3	37.7	84	37.	783	-0.0	01 (11))) 2.31	790	2.3794	0.0003	1560.0	36.1%	0.163°				
4	43.3	49	43.3	356	0.0	06 (11)	3) 2.03	856	2.0855	-0.0001	3624.0	100.0%	0.180°				
5	46.1	87	46.	183	-0.0	04 (20)	2) 1.9	639	1.9642	0.0003	260.0	1.0%	0.115°				
6	52.5	46	52.	551	0.0	05 (02)	l) 1.7	402	1.7402	0.0000	1752.0	47.3%	0.188°				
7	57.5	02	57.	492	-0.0	10 (11)	6) 1.6	014	1.6018	0.0004	3196.0	95.5%	0.198°				
0	50.7	11	E0.1	740	0.0	07 (0.1	1) 1 E.	167	1 6466	_0.0001	0000	1.00/	0.160*				

[「]PDFの検索」のダイアログで条件を指定すると、下部に候補の一覧が表示されます。

🖏 元素/化	学や単位胞デー	タ、品質記号、強い反	射の位置などによる	PDFの検索		×
元素化学	単位胞等 •	RDB-M	1inerals (21337, 2)	~ 🖪 🙆 A	ミング (加える) 閉じ	i3
結晶系 二 三科。 二 単科。 一 直方。 一 正方。 一 二方。 一 二方。 一 二方。 一 二方。 一 二方。 二 二 二 二 二 二 二 二 二 二 二 二 二 二 二	晶系 晶系 晶系 晶系 晶系 晶系	格子系 単純格子 底心格子 体心格子 面心格子 NA: 0	- データのソース(□ 回折計(□ 計算した □ デンシトメー □ フィルム/視 □ その他(* 粉末ハラーン	S)* 品 D)	督記号 (Q)] 共通 (+)] 中間の相] 普通ではない(?)] 原子座標を持つ 意のサフやラス 〜	-
単位胞-a 4.28 5.23 三強線d値	a 単位胞-b ↓ 4.28 ↓ ↓ 5.23 ↓ ġ(Å): 0.0	単位胞-c c/a 11.70 ♀ 0.00 14.30 ♀ 0.00 0.0 0.0	(体積 2	密度 RIR値 .000 ♀ 0.0 .000 ♀ 0.0 ↓ I%(r) 0.10	值 空間群	• •
相 ID (214個	副 のヒット)	化学式	-= Ø	空間群] PDF番号	\$
Hematite		Fe ₂ O ₃		hR-3c (167)	00-001-1053	
Corundum	a-Al2O3	AI_2O_3		hR-3c (167)	00-005-0712	
Geikielite, s	yn	MgTiO₃		hR-3 (148)	00-006-0494	
Eskolaite, s	yn green cinr	haba Cr_2O_3		hR-3c (167)	00-006-0504	
Tistarite, sy	'n	TI2O3		hR-3c (167)	00-010-0063	
Corundum, s	syn ruby, sap	phir Al ₂ O ₃		hR-3c (167)	00-010-0173	5
Ecandremsit	te svn	ZnTiOs		hR-3 (148)	00-026-1500	Ŧ

指数付けされた単位胞の全パターンフィッティング(Whole Pattern Fitting)

「パターン指数付け」ダイアログの右上にあるボタンから「全パターンフィッティング」ダ イアログを呼び出し、指数付けされたセルの精密化を行うことができます。

ボタンを押したときにヒットリストで選択されているセルの情報が「全パターンフィッテ ィング」ダイアログに送られます。

			×
		-	
	_		
γ	体積	97K(x)	F8 ^
20.00°	254.9	0.004	全バターンフィッティング (Ctrl: すべてのヒットをフィットする)
20.00*	254.9	0.004	
20.00*	254.8	0.000	
)0.00°	115.6	0.000	
0.00°	115.7	0.000	

「精密化」ボタンで精密化を実行できます。

🔄 全バターンフィッティング (WPF)とRietveld 解析 [DEMO08.MDI ● Demo	08: Corundum] X
× 閉じる 設定 - 保存 - ト 精密化 = 実行 全 - 20190221.wpf	ixml 🕅 ④ 加える 🏢 相片ユー・ 🖹 レイアウト 🔷
R=% P% かうフ ~	▲ 相 ID (1) 化学式 Ø PDF-# 重量%(の) RIR μ
椿密化を開始 (F5) 制御ファイルを保存	└── 六方晶系 ● R-3c (167) / ハウーン指数付け 100.0 (0.0) (1.0) 0.0
	T ⁴ .
● 精密化)	▼ 六方晶系 • R-3c (167): 4.759\4.759\12.997A (構造情報無し) [ハターン指数付け]
	相データ 回折線 重量%+XRF 20.0 ÷ P 0.0 Z: 0.0 ÷
	UC 4.75873 4.75873 12.99726 90.0 90.0 120.0
	□ 1% (esd) (esd) (esd) 八方晶系 R-3c (167) ● 5
	- 強度スケール因子、温度因子、選択配向補正 TF @ H
- 宿田に和田之殿間に、ハックファント バッティンク ――――	V SF 41.2462 (lesd) IF 0.0 (lesd)
	- すべての7 ¹ 774/形状関数(PSF)と制約パラケー
● ZO -0.10174 0.25 ≑ 2 ℓ 22.0	
O SD 0.0 (esd)	✓ f0 0.14383 ✓ s0 0.1 ✓ p0 0.5
O DS 0.0 (esd)	✓ f1 0.0 ✓ s1 0.0 ✓ p1 0.0
α 2 0.5 (esd) ρ 2.5 0.0% # 1 +	✓ f2 0.0
■ MC 1.0 ? (esd) # 制御により複数の非晶質のこふが7小可能ですが、内	
□ ビームのはみ出す角度 - 2 €0.0 あるいは密度から非晶質重	
↓ 非対称すぎやん IBA(UU) 量数が見積もられるときには不 メモンデータの15° レノ下と 90° レノトの 要です。	ドント:このながのほとんどのパラメーターはスケールボイールで変更できて、CtrlまたはShift
領域にはっきりしたビークが現れ、主相 の格子定数を精密化しなければ(LC	キーを押したままにすれば粗い調整あるいは細かい調整(5倍)ができます。もし多く の鋭いヒーケを持つ高分解能パターンの場合には通常のようにフロットウィントウ中の
ボックスをアンチェック)、ZO パラメーターと SD パラメーターも一緒に精密化できるか	スームとパンで作業をするよりこのダイアログの回折線リストから選択してフィットを確認す る方が容易です。リスト中の一つの回折線をダブルクックしてスームインをしてください。
もしれません。	他の回折線を選択してJADEに自動ハツをさせてください。
😵 Q=1 ┃ ▶ P=47 ┃ E=5.91% ┃ R=15.36% ┃ [+] 六方晶系 ● R-3c (167): 4	.759¥4.759¥12.997Å

結果が表示されます。

🔛 Whole Pattern Fitting (WPF) and	Rietveld Refinement [DEMO08.	MDI 🔵 D	emo08: Co	orundum	1				\times
X Close Setup • Save • • Refine	e ≣ ▼ Run 塗 ▼ 20190221.wpf.:	xml			M	🔁 Add	Ph	ases 🝷 🖻 Layout	t ᅌ
R=15.4%	R%-Plot 🗸	🛔 Pha	se ID (1)		Chemical	Formula	ø	PDF-#	Wt:
2=11.9%		Hexa	agonal 🔶 F	R-3c (1	Al ₂ O ₃			Pattern Indexing	; 10
4=5.8%		<							>
		▼ Hexa	αonal ● R	-3c (167): • Al2(03(Structu	eless)	[Pattern Index	kinal
34444 C		🔯 Pha	se ⊞ d-	I List 🤇	→ Wt%+XRI	F 20.0	÷ P 3	.9881 Z: 6.0	A
		⊡ LC	4.75829	4.75829	12.9899	6 90.0	90.0) 120.0 🦸	Ð
	E=5.91%	1%	0.00018	0.00018	0.00055	i Hexa	onal: R	-3c (167) 🌒 🚦	5
	R=0.00%	-Scale	Factor, Ter	nperature	Factor, Pr	<mark>eferr</mark> ed Ori	entatior	TF — 💽 🗄	_
Refinement Converge	ed (R/E=0.96) 💿	🗹 SF	59.5565	0.74	977	TF (1.0	(esd)	
-Refinement Range & Threshold, Bac	kground Fitting — 🔃 🕢	PO	1.0	(esc	l)	TS [1.0	(esd)	
2 θ (* <mark>20.0 ÷</mark> 100.0 ÷ ≡▼	💠 Show 🧧 🖨 ε 0.5 🌲	March	Function:	0 🗘 0	÷ 0 ÷	Spher	ical Ha	rmonic 📃 Spinne	r
Refinable Polynomial-B 🗸 😭 🛛 C	- C- Sth-Order 🗸 🔻	- Profile	Shape Fur	nction (PS	SF) and Co	nstraint Pa	rameter	rs for All 💽 – 🖉	<u> </u>
- Zero Offset & Displacement 🗷 -	- Amorphous Humps - 🔊	Individu	ual FWHM I	Curvi 🗸	PSF: pseu	do-Voig ∨	Q	Constant FWHM =	~
● ZO -0.11447 0.0024	🗹 2.θ 22.0	☑ f0	0.21848		⊠ s0 0.4	4904	_ ⊠ I	0.26246	_
○ SD 0.0 (esd)	✓ HT 0.0	⊡ f1	-0.13829		⊠ s1 <u>-0.</u>	14788		p1 0.30639	_
O DS 0.0 (esd)	✓ FW 6.0		0.07351	1	⊻ s2 _0.	13385		p2 0.0	
α 2 0.5 (esd)	₽ 2.5 0.0% # 1 💌		n(UVW) [] FW(r)		ial Skews		Individual Lorentzi Na Causa Cuma	ans
MC 1.0 ? (esd)	Multiple amorphous humps	50 -	rwonny t		Limit to Pro	ves irol file Proadu	ど 🛄 🕐	No Convex Curve Refine 1% (r) of Lin	
Beam Spill-Off below 0.0	with the # control, but not		2.00 👻	opper					55
Asymmetric Scan - IBA(0.0 Note: ZO & SD parameters might	standard phase is used, F otherwise, amorphous Wt%	larger o scrolling	r smaller in s. If you ha	most para horement ve a high	ameters on (5x) by ho res patter	this tab w Iding Ctrl o m with mar	r Shift I y sharp	key while peaks, it's	
Q=1 P=47 E=5.91% R=5.66%	🐥 Round=4, Iter=3, P=46, R=	5.66%							