回折パターンの重ねがき(回折パターンの比較)

1. 複数の回折パターンの取り扱い

JADE では、一度に複数の粉末回折パターンを表示することができますが(回折パターンの 多重書き)、ほとんどの回折パターン処理と解析はその中の1つの回折パターンのみが対象 となります。具体的には、「スキャン」タブで最初に表示されるプライマリパターンに対し て行われます。回折パターンの2Dまたは3D表示、バッチ処理については、複数の回折パ ターンが対象となります。

回折パターンの多重書きは、1つのファイルに複数の回折パターンを含む形式にも対応しま す。このような形式のデータファイルを読み込むと、ファイルに含まれているすべての回折 パターンが「スキャン」タブに表示されます。また、メインプロットウィンドウには回折パ ターンが(2*θ* – 強度)のプロットとして表示されます。

のツーレ	<u> くまゃンリスト</u>		ヽ) 🟃 ピーク (5) 回折線 (0) 🗼 プロファイル (0)	🚯 相リスト (Ctrl: S/M しない)	iャン <mark>(12)</mark> 最近のファイル	• 져
ム자빈	≣ ▼ 77ル	シフト <mark>(1)</mark>	スキャンパラメーター	スキャン / サンフ ^ゥ ル ID	ファイル名	#
		0%	17.0°/41.5°/0.05°/1(s), I(p)=2000.0/15.0, Cu	Quartz & Cristobalite	demo3ds.bin 🤼	☑ 1
		7%	17.0°/41.5°/0.05°/1(s), I(p)=2000.0/17.0, Cu	Quartz & Cristobalite	demo3ds.bin	☑ 2
		14%	17.0°/41.5°/0.05°/1(s), I(p)=2000.0/15.0, Cu	Quartz & Cristobalite	demo3ds.bin	🗹 <mark>3</mark>
		20%	17.0°/41.5°/0.05°/1(s), I(p)=2000.0/16.0, Cu	Quartz & Cristobalite	demo3ds.bin	☑ 4
		27%	17.0°/41.5°/0.05°/1(s), I(p)=2000.0/15.0, Cu	Quartz & Cristobalite	demo3ds.bin	☑ 5
		34%	17.0°/41.5°/0.05°/1(s), I(p)=2000.0/15.0, Cu	Quartz & Cristobalite	demo3ds.bin	☑ 6
		41%	17.0°/41.5°/0.05°/1(s), l(p)=2000.0/16.0, Cu	Quartz & Cristobalite	demo3ds.bin	7
		14% 20% 27% 34% 41%	17.0°/41.5°/0.05°/1(s), I(p)=2000.0/15.0, Cu 17.0°/41.5°/0.05°/1(s), I(p)=2000.0/16.0, Cu 17.0°/41.5°/0.05°/1(s), I(p)=2000.0/15.0, Cu 17.0°/41.5°/0.05°/1(s), I(p)=2000.0/15.0, Cu	Quartz & Cristobalite Quartz & Cristobalite Quartz & Cristobalite Quartz & Cristobalite Quartz & Cristobalite	demo3ds.bin demo3ds.bin demo3ds.bin demo3ds.bin demo3ds.bin	 ✓ 3 ✓ 4 ✓ 5 ✓ 6 ✓ 7



2. データの追加方法

複数のデータファイルの回折パターンを読み込む場合は、ファイルリストで複数のデータ ファイルを選択して開くか、追加したいデータファイルの上で右クリックし「オーバーレイ」 を選び追加します。



ファイルリストからメインプロットウィンドウにドラッグ&ドロップし、回折パターンを追 加することもできます。



また、JADE の中のファイルリストからでなく、ウィンドウズのエクスプローラ上(フォル ダやデスクトップ上など)にあるデータファイルをドラッグ&ドロップして開くこともでき ます。重ねがきする場合は、複数のファイルを同時にドラッグ&ドロップします。あとから 回折パターンを追加する場合は、キーボードの[Ctrl]キーを押しながらドラッグ&ドロップ します。

3. 重ねがきの表示変更

プロット間の間隔の変更

Y軸の左側の領域(赤く囲った領域)をマウスで縦方向にドラッグするだけで、プロット間の シフト量を調整できます。



回折角(20°)

プロットの表示変更

「スキャン」タブの上で右クリックすることで、回折パターンの表示形式を変更するメニュ ーを開くことができます。曲線のスタイル(実線、短いダッシュ、一点鎖線といった線種の 変更など)や、オフセット量(表示間隔)の変更、表示を逆順にするなどの変更が可能です。 また、2つの回折パターンを加算、減算した結果、複数の回折パターンの強度の総和・平均・ 最大値を採用した結果を作成できます。

🔲 😰 💡		• S/M Y-W	l° - •		5	レクリック
スキャン (3)	±	·		™しない)	🤽 է° ታ (50)	
# ファイル名	•	スキャンリストをコピー		(キャンノサン)	ז°µ ID	져
	*	除去 <mark>(</mark> Delete)		uartz, Ca	Icite, Dolomit	20
	=	曲線のスタイル	•	Juartz, Ca	licite, Dolomit	20
	브	大きなステップ゚サイス゛	•			
	<u>~</u>	パターン強度を調節…				
<	٩	スキャンIDを変更				
<u>カラムヘッタ</u>	۲	スキャンのメモを入力 …		~ 最這	丘のテ"ータファイル(のサムネィ
DEMO14.MDI	~	選択を非表示		Corundu	m + Apatites	4
DEMO02.MDI	٠	すべてのスキャンを合併	•	Demo02	: 36-1451 25-	1 5
(223)	۲	オフセットスキャンなど	+	して移動)	d)»	Å2. 🗖

[「]スキャン」タブを開くと、スキャンリストのツールバーが表示されます。

/(1.54Å) 6 7ンクリック分析・	אַרָּאָרָאַ 5(1.43Å) וויי ≣ד ש	70(1.34Å) ₹ \$m 🔛 💽-E		Aluminum Tantal Aluminum Tantal Ammonium Bery <	Al _{0.035} O _{1.2} Al _{0.04} O _{1.21} (NH ₄) ₂ Bel ~ > (1) 相を検索
744	<u>Ⴢリストのツ</u>	-ルバ-: ≡ ▼ ± 4	¢ 4		🛅 🔄 ୨୮ (T)
	971 <mark>(1)</mark>	≡▼ フィルムストリッフ°3	マはファイ	(ルの種類・ここを切っ	ウして切り替え
71 .4. , Cu	0%				
70.0/3.0, Cu	12%				
86.0/4.0, Cu	25%				
				スペースへのスクロール、	右りりりつでメニュー 🌲
:000.0/20.0, Cu	今	C:\Progr	amDa	ta\Materials Data\.	Jade-X\d 🗘
1) 🏃 🛄 <	<50.0°>	NP=2501 I=53	26.1	∓ 🕆 S/M: M	DI-500 (500)*

すべての回折パターンを合併するメニュー

409 🖌	選択を非表示		~ 最	近の
MD 💽	すべてのスキャンを合併 💦 💦	4444	接続する	Poi
MD •	オフセットスキャンなど	~	自動接続On	E
4. <i>t</i> -	(ここを加加)、て前の小や	~	間隙を補間する	を展
.0/2	(CCC)////O CB30///C	Σ	これらを総和	
		Ŧ	平均計数値	
		Ŧ	最大値を採る	

オフセット量の調整するためのメニュー

E/Æ	ヨクリ	ック又はスクロ	ヨールレてツー	-⊮/*` – ወ/\°	° 5,4-4	9を変更 (Ctrl+夘)	りで1つを
) [最近	£ወ7ァイル	🧐 相り2	₹ <mark>\ (Ctrl:</mark> S		シフト(l) = 0.0	a 19
名:	ŧ	リストの終れ	טט			∍շՒ <mark>(I) = 5%</mark>	1691
0	1	スキャンリスト	€IL°-		•	∻շՒ(I) = 10%	n <u>C</u>
0	×	除去 <mark>(De</mark> l	lete)			∋շ⊧(I) = 25% ։	רו 🔍
0		曲絶のつね	λı.			יאָק וּ(ו) = 50% ט	איייייייייייייייייייייייייייייייייייי
	н.	本きなった	יזע י⊐°#4∡ס°			›フト <mark>(l) = 100%</mark>	
-	_	7,6/8,7/	// ///		ŧ	スケール <mark>(I) = 1.0</mark>	
	<u>~</u>	ハッターン強度	夏を調節 			スケール (I) = CPS	(4±)
	Ŷ.	スキャンロを	変更			スケール <mark>(I)</mark> =自動	- G
- 5	27	スキャンのパ	Eを人力 ナー			スケール <mark>(I)</mark> = 時間	-
D	~	選択を非る	表示		i)	スケール <mark>(l)</mark> = ピー-り	신 :0
)ir 🕻	•	すべてのス	キャンを合併	f 🕨	٩	シフト <mark>(x)</mark> = ピーク	Ś.
D	•	オフセットスキ	iもンなど	Þ	A	色の再設定	
た		(Z	こをクリックし	て前のメッセ	۲	逆順多重書き	iller ا

4. 2Dと3D表示

プロットウィンドウに 3 つ以上の回折パターンがある場合、Y 軸の上部に表示されている ファイル名をクリックすることで、3D プロットを表示することができます。



3D プロットは、JADEのメインウィンドウとは別の専用のダイアログに表示されます。





3D プロットの背景の部分をマウスでドラッグすると、表示角度などを自由に変更できます。

3D プロットのダイアログ右上にマウスポインタを合わせると、下図のようなマークに表示 が変わる領域があります。そこでマウスのホイールを回転させると、特定のプロットのみハ イライト表示させることができます。



3D プロットのダイアログで「2D」ボタンをクリックすると、2D 表示(コンター図)に変更 できます。JADE のメインウィンドウでサーチマッチを行っていれば、コンター図の下部に リボンプロットを表示することもできます。

