サーチマッチ(結晶相同定)

粉末 X 線回折の解析で相同定(サーチマッチ)は、WPF(Whole Pattern Fitting)による精密化と並び、JADE の中心機能の 1 つです。そのため、JADE のユーザインターフェイスはこれらの解析が使いやすいように最適化されています。

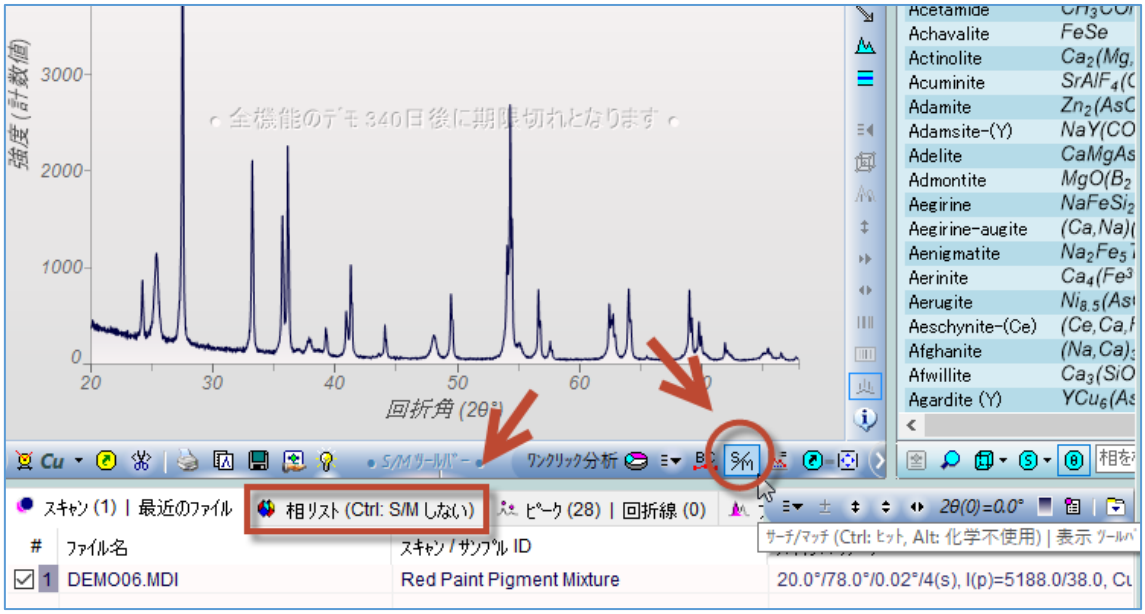
●サーチマッチ(相同定)の実行

回折パターンのファイルをプロットウィンドウに開いた状態で、

・「相リスト」タブをクリックするか、

・ツールストリップの「S/M」ボタンをクリックする

だけで、候補となる相のリストが「相リスト」タブに表示されます。

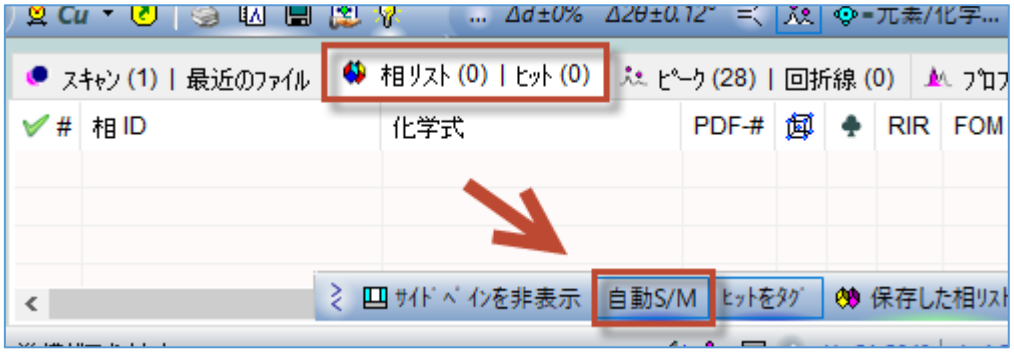


※「相リスト」タブを開いたときに自動でサーチマッチが始まらないようにしたい場合

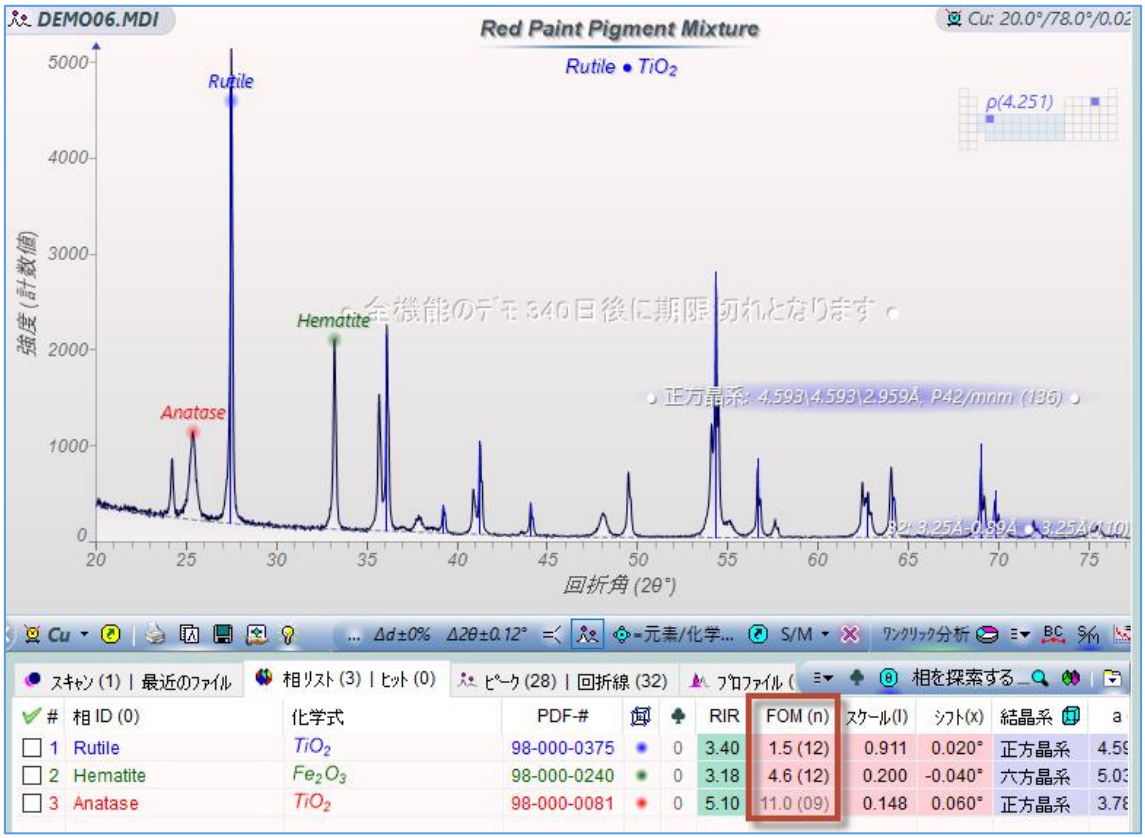
・キーボードの[Ctrl]キーを押しながら「相リスト」タブを開く

・「相リスト」タブ下部にある「自動 S/M」の設定をオフにする(下図)

のどちらかを行っておくことで無効にできます。



ヒットした相は、FOM(性能指数)でソートされます。FOM は 0 から 100 の値を取り、値が小さいほど一致度が高いと JADE がみなした相です。FOM に明確なしきい値はありませんが、一般的に FOM が 10 未満の場合は真剣に検討する必要があります。



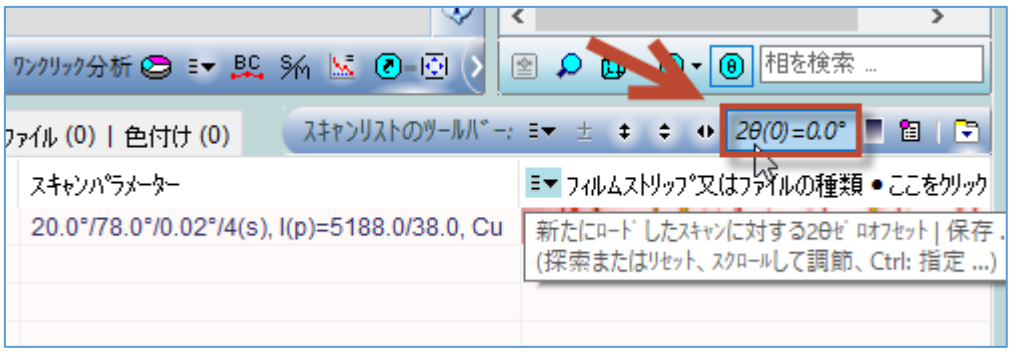
伝統的に、ICDD の PDF のような d-I リストのデータベースに対して、測定したピークのリストを使いサーチマッチが行われてきました。今日ではコンピュータの高速化と検索アルゴリズムの向上により、測定した回折パターン全体を利用したプロファイルベースのサーチマッチが採用されています。JADE でもプロファイルベースのサーチマッチが採用されています。

プロファイルベースのサーチマッチでは、通常バックグラウンドのフィッティングと削除が必要ですが、バックグラウンドが非常に低レベルな場合とサーチマッチの対象とするデータの範囲を単一または少数のピークにする場合は例外となります。

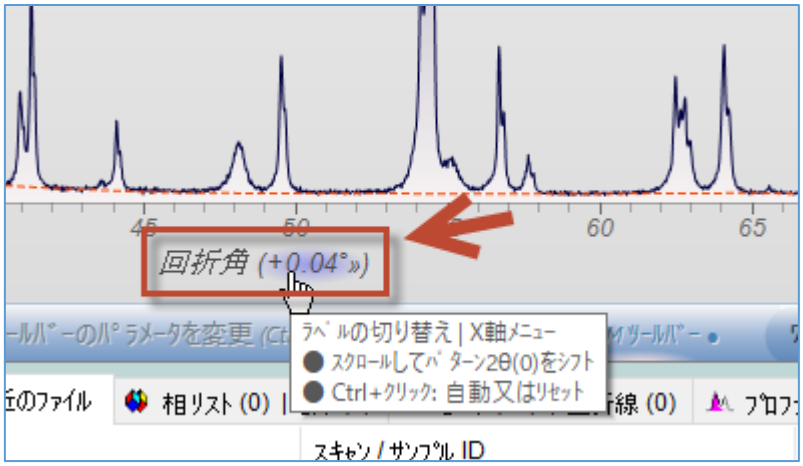
見やすくするためにバックグラウンドの除去を行う場合は、想定外のヒットを減らすためにバックグラウンドの除去と共に Kα2 ピーク除去を行います。視覚的にピークを識別するのが困難でない限り、回折パターンのスムージングは必要ありません。

●ゼロオフセット

「スキャン ｜ 最近のファイル」リストのタブを開くと、右上に下図のツールバーが表示されます。「2θ(0)＝ ●●° 」のボタンの上にマウスポインタを合わせてホイールを回転させると、手動でゼロオフセットを行えます。



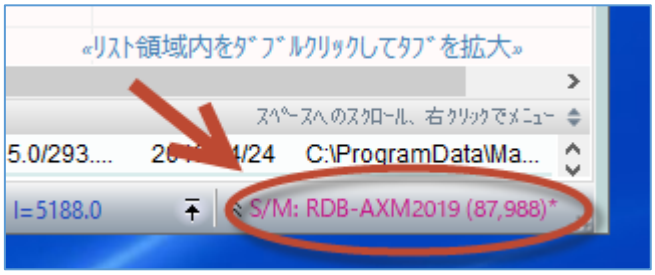
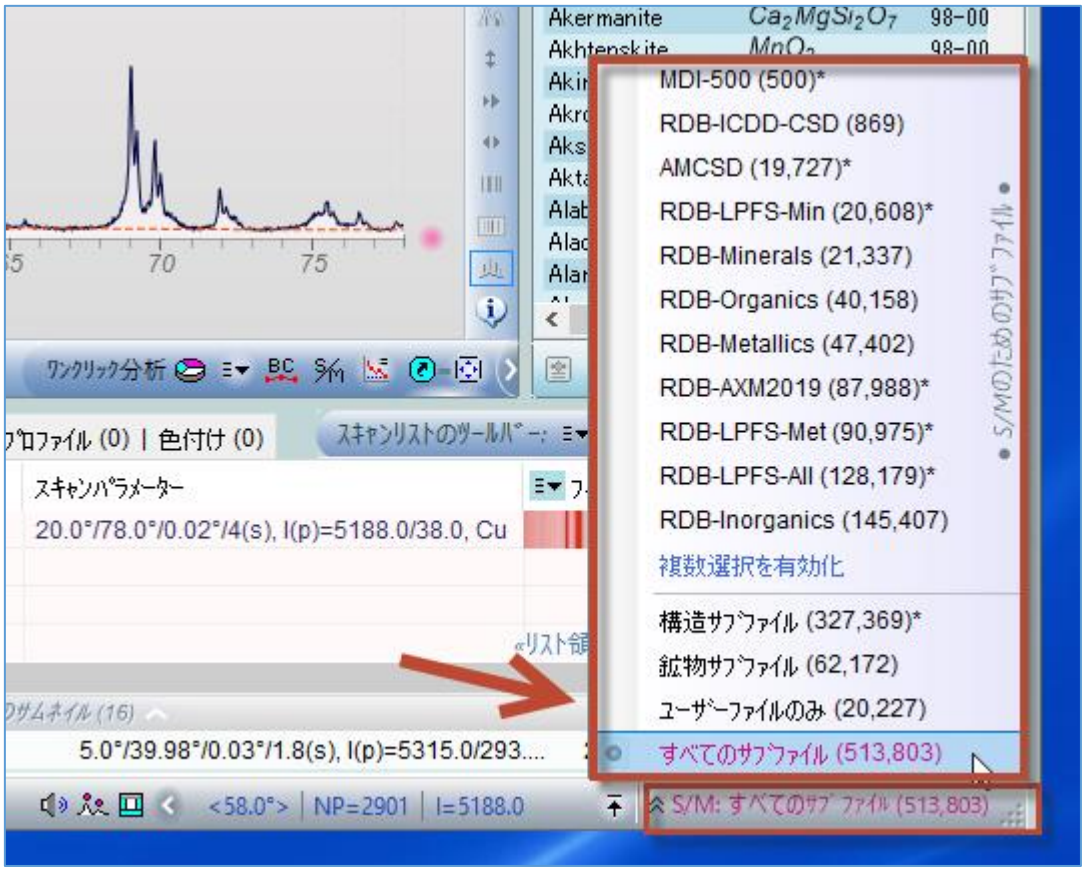
また、プロットウィンドウのＸ軸にある「回折角（2θ）」にマウスポインタを合わせてホイールを回転させる方法でも、手動でゼロオフセットを行えます。



●サーチマッチに使用するデータベース(サブファイル)の選択

JADE のウィンドウの右下(ステータスバーの右端)に、サーチマッチに使用するデータベース(サブファイル)を表示する項目があります。

この部分をクリックすると、JADE で利用可能なサブファイルの一覧が表示され、どのサブファイルをサーチマッチに使用するか選択できます。



すべてのサブファイルを使用したい場合は、「すべてのサブファイル」を選びます。
複数のサブファイルを選択する場合は、「複数選択を有効化」にチェックを付け、その後、使用したい複数のサブファイルを選びます(チェックを付けます)。