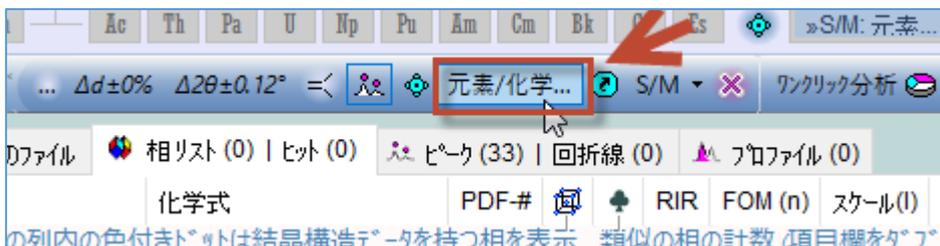


サーチマッチ(結晶相同定 2) フィルタによる絞り込み

サーチマッチを行うときに、元素や単位胞情報を指定して候補を絞り込むことができます。

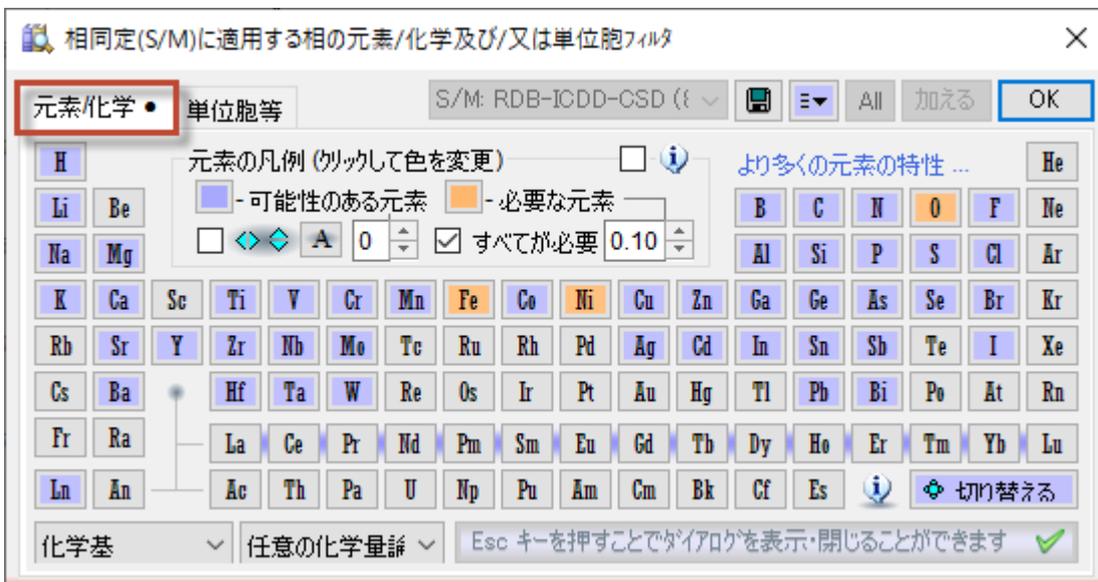
●元素/化学フィルタによる絞り込み

「相リスト」タブを開くと、それに連動してサーチマッチ用のツールバーが表示されます。そのサーチマッチツールバーの「元素/化学」ボタンをクリックすると、元素/化学フィルタを設定するダイアログを開くことができます。



個別に元素を指定

「元素/化学」タブには周期表が表示されます。各元素のボタンをクリックすることで、元素の種類でフィルタを設定できます。元素のボタンをクリックするごとに、可能性がある元素/必要な元素/無指定の状態に切り替えられます。



元素の族などのグループで指定

元素を1つずつクリックしてフィルタの条件を指定してだけでなく、下図のように「アルカリ金属」「アルカリ土類金属」「軽元素」といった族やグループを選び、一度にまとめて元素を指定することもできます。



結晶系や大きさなど単位胞の条件でフィルタを設定

「単位胞等」タブでは、結晶系や単位胞の大きさ、密度、空間群などをフィルタの条件として設定できます。



元素/化学フィルタのオン・オフの切り替え

サーチマッチを行うときに、「元素/化学フィルタ」ダイアログで設定した内容を適用するか適用しないかを1クリックで切り替えられます。「元素/化学」と書かれているボタンの左隣のアイコンをクリックするとオン・オフを切り替えられます。

リセットすると再設定するのに手間がかかる場合などに役立ちます。

・「元素/化学」フィルタを適用する場合

「元素/化学」ボタンの左隣のアイコンが押された状態(四角い線で囲われた状態)にして、サーチマッチを実行します。



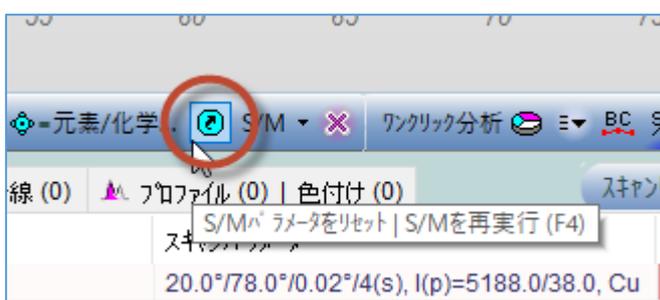
・「元素/化学」フィルタを適用しない場合

「元素/化学」ボタンの左隣のアイコンが押されていない状態(四角い線で囲われていない状態)にして、サーチマッチを実行します。



●サーチマッチのパラメータをリセットする方法

さまざまなサーチマッチの設定をリセットしたい場合は、下図の「S/M パラメータをリセット」ボタンを左クリックします。



左クリックするとリセットされます。「S/Mのパラメータをデフォルト値にリセットしました」というメッセージがポップアップし、確認できます。

