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かできます。



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。

総 相同定(S/M)に適用する相の元素/化学及び/又は単位胞フィルタ					
元素化学• 単位胞等	S/M: RDB-ICDD-CSD (E 🗸	🛃 🖃 All 加える 🗌	OK		
元素の凡例(かックして色	を変更)	り多くの元素の特性 …	He		
Li Be - 可能性のある元素	: ■- 必要な元素 図 すべてが必要 0.10 ÷	B C N O F	Ne		
Na mg K Ca Sc Ti V Cr Mn	Fe Co Ni Cu Zn G	AI 51 P 5 U Ga Ge As Se Br	Ar Kr		
Rb Sr Y Zr Nb Mo Tc	Ru Rh Pd Ag Cd I	In Sn Sb Te I	Xe		
Cs Ba Hf Ta W Re	Os Ir Pt Au Hg 1	Tl Pb Bi Po At	Rn		
Fr Ra La Ce Pr Nd	Pm Sm Eu Gd Tb D	Dy Ho Er Tm Yb	Lu		
In An Ac Th Pa U	Np Pu Am Cm Bk (Cf Es 🤨 🗢 切り替	える		
化学基 🗸 任意の化学量論 🗸 Esc キーを押すことでダイアログを表示・閉じることができます 🏏					

<u>元素の族などのグループで指定</u>

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いくだけでなく、下図のように「ア ルカリ金属」「アルカリ土塁金属」「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。

᠍ ╣ 相同定(S/M)に適用する相の元素/化学及び/又は単位胞フィルタ					
元素化学 • 単位胞等	S/M: RDB-ICDD-CSD (E 〜 🖳 💽 All 加える	OK			
H 元素の凡例 (ウリックし Li Be - 可能性のある: Na Mg □ ◇ ◇ A 0	・必要な元素 ・ ・ ・ ・ <td>He Ne Ar</td>	He Ne Ar			
K Ca Sc Ti V Cr Rb Sr Y Zr Nb Mo Cs Ba Hf Ta W Fr Ra La Ce Pr Ln An Ac Th Pa H2O - 水和物 単体	Mn Fe Co Ni Cu Zn Wi 7000 mm Tc Ru Rh Pd Ag Cd B 後金属 Re Os Ir Pt Au Hg Nd Pm Sm Eu Gd Tb U Np Pu Am Cm Bk ✓ A: 0.0 ↓ B: 0.0 ↓ C 希ガス	Rn Lu える。			

<u>結晶系や大きさなど単位胞の条件でフィルタを設定</u>

「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。

試相同定(S/M)に適用する相の元素/化学及び/又は単位胞フィルタ ×				
元素化学• 単位胞等	S/M: R	DB-ICDD-CSD ({ 🗸 📙 🤇	All 加える OK	
結晶系 三斜晶系 単斜晶系 直方晶系 正方晶系 六方晶系 立方晶系 	格子系 □ 単純格子 □ 底心格子 □ 体心格子 □ 面心格子 NA: 0 ♀ F	データのソース (S)* □ 回折計 (D) □ 計算した (C) □ デンシトメーター (F) □ フィルム視覚化(V) □ その他 (X) *粉末ヵ'ター>	品質記号 (Q) □ 共通 (+) □ 中間の相 □ 普通ではない(?) □ 原子座標を持つ 任意のサブウラス ~	
単位胞-a 単位胞-b 0.00 ↓ 0.00 ↓ 0.00 ↓ 0.00 ↓ 三強線d値(Å): 0.0	単位胞-c c/a 0.00 ÷ 0.00 0.00 ÷ 0.00 0.00 • 0.00	体積 密度 I ↓ 0.0 ↓ 0.000 ↓ ↓ 0.0 ↓ 0.000 ↓ ↓ 0.0 ↓ 0.000 ↓ ↓ 0.0 ↓ 0.000 ↓ ↓ 0.0 ↓ 0.000 ↓	RIR値 空間群 0.0 ♀無し ∨ 0.0 ♀ 0 ♀ -Z# 0.10 ♀ -20 誤差 (±)	

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」ボタンの左隣のアン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。

... Δd±0% Δ2θ±0.12° =< 🎗 ۞ 元素/化学... ⑧ S/M ▼ 💥

・「元素/化学」フィルタを適用しない場合

「元素/化学」ボタンの左隣のアン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。

.... Δd±0% Δ2θ±0.12° =< 找 췋=元素/化学... ⑧ S/M ▼ 💥

●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。

