JADE の使用例(8) サーチマッチ(結晶相同定3) 指定範囲のピークのみで同定

サーチマッチのときに役立つ機能をご紹介します。

JADE のサーチマッチの機能では、測定した粉末回折パターンのデータ全体を利用して同定 を行うだけでなく、ユーザが指定した20の範囲のピーク情報だけを使い同定を行うことが できます。この範囲指定は、1つのピークのみまで絞り込みが可能です。

JADE はサーチマッチを行うときに、解析対象としてプロットウィンドウ内に表示されているピークに注目します。

プロットウィンドウに切り取られた外側のピークは、相が存在する可能性の FOM を評価す る際にあまり注意を払われません。JADE はプロットウィンドウの中にあるピークに強線が 一致する相のみを、上位の候補として取り上げます。

サーチマッチの際に、JADE はそのときのプロットウィンドウの中の最大スケールを基準に ピーク強度を再正規化します。この再正規化により、回折パターンの中で少量成分があたか も主要成分かのように扱うことができます。

● 20の範囲を絞ってサーチマッチ

JADE ではプロットウィンドウでマウスのドラッグやホイールの回転操作により、自由自在 にズームやパンを行うことができます。それらの操作によりプロットウィンドウで表示範 囲を調整することで、より簡単に多相の同定を行えます。



プロットウィンドウで表示する範囲を絞ったあと、「S/M」ボタンをクリックするか、「相リ スト」タブを選び、サーチマッチを行います。







● 1つのピーク情報のみで(シングルピーク S/M)

1つのピークの情報のみを利用してサーチマッチを行うこともできます。

実行方法は、プロットウィンドウで着目するピークを拡大表示し、そのピークの上でクリッ クするだけです。まず目的のピークをマウスでドラッグし、拡大します。



ピークの上にマウスポインタを近づけると、通常は矢印マークが手のマークに変わります。 手のマークに変わった状態でピークをクリックすると、そのピークの情報だけを使い、サー チマッチが行われます。





「相リスト」タブに候補の一覧が表示されます。