JADE の使用例(9) サーチマッチ(結晶相同定 4)

サーチマッチに役立つ表示設定や類似の相データを表示する機能など、知っていると解析 がはかどる便利な機能をご紹介します。

●リボンプロットの表示(実測値とデータベースのピークを比較)

「相リスト」タブの候補リストでチェックをつけて選択した相のピーク情報を、プロットウ ィンドウに表示される実測の粉末回折パターンの下部に表示できます(リボンプロット)。実 測のパターンと一緒に見ることで、どの程度一致しているかわかります。

リボンプロットでは、各相のピーク位置と強度を把握できます。データベースでピーク強度 が大きい位置には色が濃い線、ピーク強度が小さい位置には色が薄い線が表示されます。







●リボンプロットの強度を線の高さ(長さ)で表現

リボンプロットの強度の表示を、色の濃さではなく線の高さで表現することもできます。 設定を変更するには、リボンプロットの表示/非表示を切り替えるアイコンの上で右クリッ クし、「リボン On」を選びます。

※「リボン Off」はリボンプロット自体を非表示にする設定です。







## ●リボンプロットの高さを変更

リボンプロットの枠(高さ)を変更するには、リボンプロットのアイコンの上にマウスポイン タを合わせ、マウスのホイールを回転させます。最大 30 ピクセルまで拡大できます。



●主要ピークのズーム機能

相リストで候補の相をクリックしたときに主要ピークを拡大表示するように設定できます。 「相リスト」タブ下部の「S/M ピークカットアウト」アイコンをクリックし、ボタンが押 された状態にしておき、候補の相をクリックすることで下図のように拡大できます。



●類似候補の表示

サーチマッチを行うと、「相リスト」タブに候補となる相のリストが表示されますが、クロ ーバーマークの欄に値が表示される相に関しては、データベースに類似データが存在しま す。表示される値は、類似の相データの数です。

● スキャン(1) 最近のファイル		🗳 相リスト (14)   ヒッ	🏃 ピーク (28)   回折線 (32) 🗼 プ					
<b>∀</b> #	相 ID (0)	化学式	P	DF-#	餌	٠	RIR	FOM (n)
1	Rutile	TiO <sub>2</sub>	98-0	00-0375	٠	27	3.40	1.5 (12)
2	Hematite	Fe <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	98-0	00-0240	٠	57	3.18	4.6 (12)
3	Chromium Titaniu	CrTiSbO <sub>6</sub>	00-0	50-0179	$\odot$	3		6.5 (10)
4	Hematite-proto	Fe <sub>1.9</sub> H <sub>.06</sub> O <sub>3</sub>	98-0	00-3251	٠	2	2.21	9.1 (11)
5	Anatase, syn	Ti <sub>0.72</sub> O <sub>2</sub>	01-0	86-1157	٠	14	3.60	11.9 (07)
6	Periclase	MgO	98-0	00-5761	٠	29	3.27	14.0 (03)
7	Lithium Manganes	Li <sub>0.25</sub> Ti <sub>0.5</sub> Mn <sub>0.5</sub> O	04-0	16-9150	٠	5	2.74	17.2 (04)
	Iron Titanium Anti	Tin enFen anSbn ar	04-0	20-5994		2	4 21	18.6 (09)

類似の相データを表示するには、「相リスト」タブで相を選び、クローバーマークのアイコ ンをクリックします。

	Δd±0% Δ2θ±0.12° ≕	ጲ �=元素/化学	🗷 S/	/M 👻 🕺 9599	ック分	析 🗧	) 💌	🕰 ¾ 🖄	<b>8</b> 💿	0	0 🗊 • 🗊 •	<ul><li>  ●   相を  </li></ul>	食索
<ul> <li>자</li> </ul>	● スキャン (1)   最近のファイル 🏼 相リスト (25)   ヒット (0) 🤽 ピーン (28)   回折線 (41) 🛝 プロファイル (0)   色付けっつ 🗐 💽 相を探索する _ 🔍 😻 🖸								🔲   💌				
<b>∀</b> #	相 ID (0)	化学式		PDF-#	餌	•	RIR	FOM (n)	スケール <mark>(I)</mark>	971(X)	結晶系 🗐	a (Å)	b ^
1	Rutile	TiO <sub>2</sub>		04-003-0648	٠	27	3.61	2.0 (13)	1.000	0.0:20 \$	頁似の相を表示	  詳細を表決	7
2	Hematite	Fe <sub>2</sub> O <sub>3</sub>		98-000-0240		57	3.18	4.6 (12)	0.400	-0.040	ヒットリストを入れ	いかえるための	Dスクロール
3	Chromium Titanium Ant	CrTiSbO <sub>€</sub>		00-050-0179	۲	3		6.5 (10)	0.580	0.060°	正方晶系	4.5909	4.5
4	Hematite-proto	Fe <sub>1.9</sub> H <sub>.06</sub> O <sub>3</sub>		98-000-3251	٠	0	2.21	9.1 (11)	0.340	-0.080°	六方晶系	5.0258	5.0
5	Hematite-proto	Fe <sub>1.9</sub> H <sub>.06</sub> O <sub>3</sub>		98-000-3252	٠	2	2.10	9.7 (10)	0.390	0.020°	六方晶系	5.0410	5.04
6	Hematite	Fe <sub>2</sub> O <sub>3</sub>		00-001-1053	$\odot$	0		10.3 (10)	0.160	-0.020°	六方晶系	5.0280	5.0

「相リスト」タブが左右に二分割され、右側に「ヒットリスト」欄ができ、データベースの 類似データが表示されます。ヒットリストの項目をダブルクリックしたり、ドラッグ&ドロ ップすることで「相リスト」に追加できます。

<ul> <li>자</li> </ul>	+>>(1)   最近のファイル – 🇳	相リスト (25)   ヒット (27)	🏃 ピーク (28)   回折線	(32) 🍌 プロファ⁄	イル <mark>(0)  </mark> 色	と付け (0) 🛛 💷 🔶	④ 相を探索する	5_9 🔅 🖻
<b>∀</b> #	相 ID (0)	化学式	PDF-# ^	相 ID (27)		化学式	PDF-#	FOM (n) \land
1	Rutile	TiO <sub>2</sub>	04-003-064	Rutile	N	TiO <sub>2</sub>	98-000-0375	1.5 (12)
2	Hematite	Fe <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	98-000-024	Rutile	3	TiO <sub>2</sub>	98-001-1857	1.7 (13)
3	Chromium Titanium Ant	CrTiSbO <sub>6</sub>	00-050-017!	Rutile		TiO <sub>2</sub>	98-000-6595	1.7 (13)
4	Hematite-proto	Fe <sub>1.9</sub> H <sub>.06</sub> O <sub>3</sub>	98-000-325	Rutile		TiO <sub>2</sub>	98-001-4284	1.8 (13)
5	Hematite-proto	Fe <sub>1.9</sub> H <sub>.06</sub> O <sub>3</sub>	98-000-325:	Rutile		TiO <sub>2</sub>	98-001-1305	1.8 (13)
	Hematite	Fe <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	00-001-105:	Rutile		TiO <sub>2</sub>	98-001-1023	1.9 (13)
7	Anatase, syn	Ti <sub>0.72</sub> O <sub>2</sub>	01-086-1157	Rutile		Ti <sub>.992</sub> O <sub>2</sub>	98-000-2757	1.9 (12)
8 🗌	Periclase	MgO	98-000-576 <sup>-</sup>	Rutile		Ti <sub>.91</sub> Al <sub>.08</sub> Nb <sub>.01</sub> Cr <sub>.01</sub> O <sub>2</sub>	98-000-2756	2.1 (12)

●ピークにラベル表示1(データベースの情報をピークのラベルとして表示する方法) 同定した相のデータベースの情報を、プロットリストの各ピークにラベルとして表示する ことができます。表示できる情報は、以下の項目です。フォントサイズや文字の角度などの スタイルも変更できます。

- ・相 ID(Rutile、Hematite などの相の名前)
- ・化学式(TiO2、Fe2O3 など)
- ・相番号(1、2、3…)やアルファベット(A、B、C…)、記号などの相を識別する情報
- ・ピーク番号、回折角(2 $\theta$ )、d 値(Å)、(h k l)、ピークの強度(%)



1			A	Magnetite	10	3~4
		d(Â)	Text	Oxy-schorl	Ale	.741B3Ca0.0
		(hkl)		Perovskite	Ca	O <sub>3</sub> Ti
		74	<b>X</b>	Sb11F43,mP108,.	. F <sub>43</sub>	Sb11
		强度%	6	Sb2F7,mP36,11	F <sub>7</sub> :	Sb <sub>2</sub>
	~	回折角		Sb2F7,mP36,11	F <sub>7</sub> :	Sb <sub>2</sub>
	~	うわ番号	$ \psi$	Sb2F7,mP36,11	F <sub>7</sub> :	Sb <sub>2</sub>
		71283		Sh2E7 mP36 11	- F-,	Sb <sub>2</sub>
		点など ▶	~	<b>100%</b> ドット		Sb <sub>4</sub>
3			~	点~重量%	1	Sb <sub>4</sub>
2		<del></del> 0		···· ±-		Sb <sub>4</sub>
Ē		相番号	~	(hki) / hki	4	Sb <sub>4</sub>
59		アルファヘジット	~	<mark>(hkl)上</mark> の横線		Sb7
		****	~	<u> </u> ታットのフェート・イン	8	5D Sh
315		A s+T	~	文字のハロー	1-1	Sb
2					8	Va
ě		相ID	±	フォントサイズ (9)	69	V <sub>4</sub>
		化学式	∡	フォントの傾き <mark>(90°)</mark>		V <sub>4</sub>
		マーカーOff	18	l%閾値 (0)	5	V <sub>4</sub>
	▣	凡例 ▶	X	短縮化ID (0)	思	ルするか±キーを打
	_		-		10	
Я 😂	Ξ₹.,	🕰 SM 🔚 💽-1	0	表示をリセット	Ť	相を検索



●ピークにラベル表示2(ピークサーチの結果情報をラベルとして表示する方法)
 データベースの情報ではなくピークサーチの結果をラベルとして表示することもできます。
 データベースに収録されているd値や2θを表示するのではなく、実測のデータのピーク位置などをラベルとして表示したい場合などにこの機能を使います。

「ピーク」タブを開き、ツールバーの「タグ」メニューをクリックし、ピークのラベルとし て表示したい項目を選びます。下図のようにラベルが表示されます。



●結晶構造の図の表示

「相リスト」タブに表示された候補が結晶構造のデータを持っている場合、プロットウィン ドウに結晶構造の図を表示することができます。



表示された図は、マウスでドラッグすることで図を回転させることができ、ホイールを回転 させることで大きさを変えられます。また、図の上で右クリックすると、図の表示スタイル を変更できます。

