

JADE の使用例(10) サーチマッチ(結晶相同定 5) 類似候補の表示

サーチマッチを行うと、「相リスト」タブに候補の相が表示されますが、それらの相の類似データをデータベースから一括して呼び出すことができます。

●類似候補の表示

サーチマッチを行うと、下図のように「相リスト」タブに候補の一覧が表示されますが、クローバーマークの欄に 1 より大きい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。

✓ #	相 ID (0)	化学式	PDF #	クローバ	RIR	FOM (n)
1	Rutile	TiO_2	98-000-0375	27	3.40	1.5 (12)
2	Hematite	Fe_2O_3	98-000-0240	57	3.18	4.6 (12)
3	Chromium Titanium...	$CrTiSbO_6$	00-050-0179	3		6.5 (10)
4	Hematite-proto	$Fe_{1.9}H_{0.6}O_3$	98-000-3251	2	2.21	9.1 (11)
5	Anatase, syn	$Ti_{0.72}O_2$	01-086-1157	14	3.60	11.9 (07)
6	Periclase	MgO	98-000-5761	29	3.27	14.0 (03)
7	Lithium Manganes...	$Li_{0.25}Ti_{0.5}Mn_{0.5}O$	04-016-9150	5	2.74	17.2 (04)
8	Iron Titanium Anti...	$Ti_{0.99}Fe_{0.16}Sb_{0.11}O_3$	04-020-5994	0	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(「類似の相を表示」機能)をクリックします。

✓ #	相 ID (0)	化学式	PDF #	クローバ	RIR	FOM (n)	スケール(I)	シフト(X)	類似の相を表示	詳細を表示	ヒットリスト	結晶系	a (Å)	b (Å)
1	Rutile	TiO_2	04-003-0648	27	3.61	2.0 (13)	1.000	0.020*	類似の相を表示	詳細を表示	● ヒットリスト	正方晶系	4.5909	4.5100
2	Hematite	Fe_2O_3	98-000-0240	57	3.18	4.6 (12)	0.400	-0.040*				六方晶系	5.0258	5.0350
3	Chromium Titanium Ant...	$CrTiSbO_6$	00-050-0179	3		6.5 (10)	0.580	0.060*				六方晶系	5.0258	5.0350
4	Hematite-proto	$Fe_{1.9}H_{0.6}O_3$	98-000-3251	0	2.21	9.1 (11)	0.340	-0.080*				六方晶系	5.0410	5.0350
5	Hematite-proto	$Fe_{1.9}H_{0.6}O_3$	98-000-3252	2	2.10	9.7 (10)	0.390	0.020*				六方晶系	5.0410	5.0350
6	Hematite	Fe_2O_3	00-001-1053	0		10.3 (10)	0.160	-0.020*				六方晶系	5.0280	5.0350

「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。これらを「相リスト」に追加するには、追加したいものをダブルクリックするか、「相リスト」のスペースにドラッグ&ドロップします。

✓ #	相 ID (0)	化学式	PDF #	相 ID (27)	化学式	PDF #	FOM (n)
1	Rutile	TiO_2	04-003-0648	Rutile	TiO_2	98-000-0375	1.5 (12)
2	Hematite	Fe_2O_3	98-000-0240	Rutile	TiO_2	98-001-1857	1.7 (13)
3	Chromium Titanium Ant...	$CrTiSbO_6$	00-050-0179	Rutile	TiO_2	98-000-6595	1.7 (13)
4	Hematite-proto	$Fe_{1.9}H_{0.6}O_3$	98-000-3251	Rutile	TiO_2	98-001-4284	1.8 (13)
5	Hematite-proto	$Fe_{1.9}H_{0.6}O_3$	98-000-3252	Rutile	TiO_2	98-001-1305	1.8 (13)
6	Hematite	Fe_2O_3	00-001-1053	Rutile	TiO_2	98-001-1023	1.9 (13)
7	Anatase, syn	$Ti_{0.72}O_2$	01-086-1157	Rutile	$Ti_{0.992}O_2$	98-000-2757	1.9 (12)
8	Periclase	MgO	98-000-5761	Rutile	$Ti_{0.99}Al_{0.08}Nb_{0.01}Cr_{0.01}O_2$	98-000-2756	2.1 (12)