JADE PRO/Standard のユーザデータベースに CIF ファイルを登録する方法

結晶構造データ(格子定数や原子座標など)を持つ CIF ファイルを用意することで、JADE の ユーザデータベース(ユーザ CSD)に登録し、d-I%リストを計算して相同定に利用したり、 WPF/Rietveld 精密化の計算に利用することができます。 具体的な設定や登録は、以下の手順のように行ってください。

1. JADE の「データベース」メニューから「ユーザ CSD を作成」を選びます。



2. ユーザデータベースは複数作成して分類することができます。 ここでは新しいユーザデータベースを作成するので、「新しい CSD」をクリックします。



3. 作成するユーザデータベースに名前を付けます。ほかのデータベースと同じ名前にな らないように、名前を付けてください。

新しい JCSD を作成する	×
このJCSDデータベースを作成する上での名前を入力します (「ファイルを追加]ボタンで追加される構造エントリーのインデックスファイル のセットを作成する際に使用され、ウィントウ上のJCSDのリストと相同 定可能サブファイルの中に表示されます)…	OK 🖌 キャンセル
ICSD2020	

 データベースに登録するデータの内部的な管理番号の開始番号を決めます。JADE に最 初から組み込まれている MDI-500 というデータベースと番号が重複しないようにする ため、「1000」以上の番号を指定してください。

新しい JCSD を作成する	×
このデータベースの最初のCSD番号を入力 メモ: 1000未満の番号を使用すると、MDI-500と干渉して相 の同定用に作成するd-Iリストのサブファイル内に重複したPDF 番号を作成する可能性があるので、避けてください。	OK 🖌 tryzil
1000	

5. あらかじめ用意しておいた CIF ファイルを、下図のようにユーザデータベースの管理 画面の左側のエリアにドラッグ&ドロップします。複数のファイルやフォルダをドラッ グして、一括登録することができます。



6. CIF ファイルのデータがユーザデータベースに登録されます。

」 カスタム化した構造データベーフ	スマネージ ャー [C:¥ProgramData¥Materials Data	¥Jade-X¥csd¥ICSD2020.csd]			×
× 閉じる メニュー(M) ▼ Ⅲ 77/1#の追加 ▼ 新しいCSD 日▼ ICSD2020.csd (3結晶構造 @2020/06/26 11:06)				🙂 🖻	② ≎
村 ID (3) Titanium oxide Iron Oxide Silicon Oxide	です。 です。 です。 です。 です。 のってi のってi のってi のってi のってi のってi のってi のってi のってi のってi のってi のってi のってi のってi のってi のってi のってi のってi のった。 のってi のった。 のった。 のった。 のった。 のった。 のった。 のった。 のった。 のった。 のった。 のった。 のった。 のった。 のった。 のった。 のった。 のった。 のった。 のった。 のった。 のった。 のった。 のった。 のった。 のった。 のった。 のった。 のった。 のった。 のった。 のった。 のった。 のった。 のった。 のった。 のった。 のった。 のった。 のった。 のった。 のった。 のった。 のった。 のった。 のった。 のった。 のった。 のった。 のった。 のった。 のった。 のった。 のった。 のった。 のった。 のった。 のった。 のった。 のった。 のった。 のった。 のった。 のった。 のった。 のった。 のった。 のった。 のった。 のった。 のった。 のった。 のった。 のった。 のった。 のった。 のった。 のった。 のった。 のった。 のった。 のった。 のった。 のった。 のった。 のった。 のった。 のった。 のった。 のった。 のった。 のった。 のった。 のった。 のった。 のった。 のった。 のった。 のった。 のった。 のった。 のった。 のった。 のった。 のった。 のった。 のった。 のった。 のった。 のった。 のった。 のった。 のった。 のった。 のった。 のった。 のった。 のった。 のった。 のった。 のった。 のった。 のった。 のった。 のった。 のった。 のった。 のった。 のった。 のった。 のった。 のった。 のった。 のった。 のった。 のった。 のった。 のった。 のった。 のった。 のった。 のった。 のった。 のった。 のった。 のった。 のった。 の の の の の の の の の の の の の	Fer Fer Or	★方感来 • P3221 (154): 4 914	414.91415.406	2 51 ^

登録したデータを相同定などで利用できるようにするため、d-I%リストを計算します。
 「メニュー」から「d-I%リストを計算する」を選びます。



8. 計算が終わると下図のようなメッセージが表示されます。



9. JADE のウィンドウの右下などから、作成したユーザデータベースを利用できるように なります。選択すると、相同定にこのユーザデータベースを利用できます。



 追加したユーザデータベースを選択した状態で、ツールバーの「S/M」ボタンから相同 定を行い、「WPF」ボタンで WPF/Rietveld 解析を行うと、ユーザデータベースを使い 解析を行うことができます。

