

Powder Diffractionの検索方法

『Powder Dffraction』はPDF-2 Database Sets 1-51粉末X線解析による物質の同定に使用するデータ集です。

-----目次-----

[検索メニューについて](#)

[検索方法について](#)

[検索例1（含有元素による検索）](#)

[検索例2（物質名による検索）](#)

[検索例3（高度な検索）](#)

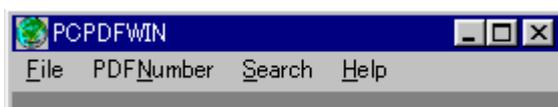
[検索例4（三強解析線による検索）](#)

[検索の注意点](#)

[検索結果の印刷について](#)

検索メニューについて

1 メインメニューの概要



「File」

プログラムの終了（Exit）、デフォルト値の設定（Permanent Setup）を行います。

「PDF Number」

PDF Numberによる検索を行います。

「Search」

上記以外の検索を行います。

「Help」

2 Searchメニューの概要



「Search Files」

デフォルト値の設定 (Permanent Setup) を行います。

「Logical Operators」

検索に使用する演算子の指定を行います。デフォルトは「And」です。

「Sub Files」

検索対象とするサブファイル (有機、無機、ポリマーなど) の指定を行います。
デフォルトは全てのサブファイルです。

「Elements」

元素名による検索を行います。検索方式を指定すると周期律表が現れます。希望の元素名のボタンをクリックすることにより検索条件の設定を行います。「Number of Elements」により構成元素数を制限することもできます。

*元素名A&B&Cを指定した場合

「Only」: A&B&Cのみを構成元素とする化合物を検索。

「Inclusive」: A,B,Cのうちどれか一つ以上を含む化合物を検索。

「Just」: A,B,Cの組み合わせのみを構成元素とする化合物を検索。

「Just with Lo Z Elements」: 「Just」に元素番号10以下の元素を加えた組み合わせ。

「Name」

物質名による検索を行います

「Misc」

三強回析線、格子定数、融点、色などの各条件による検索を行います。

「Search Result」

ウィンドウに検索結果の概要を表示します。

「Delete」

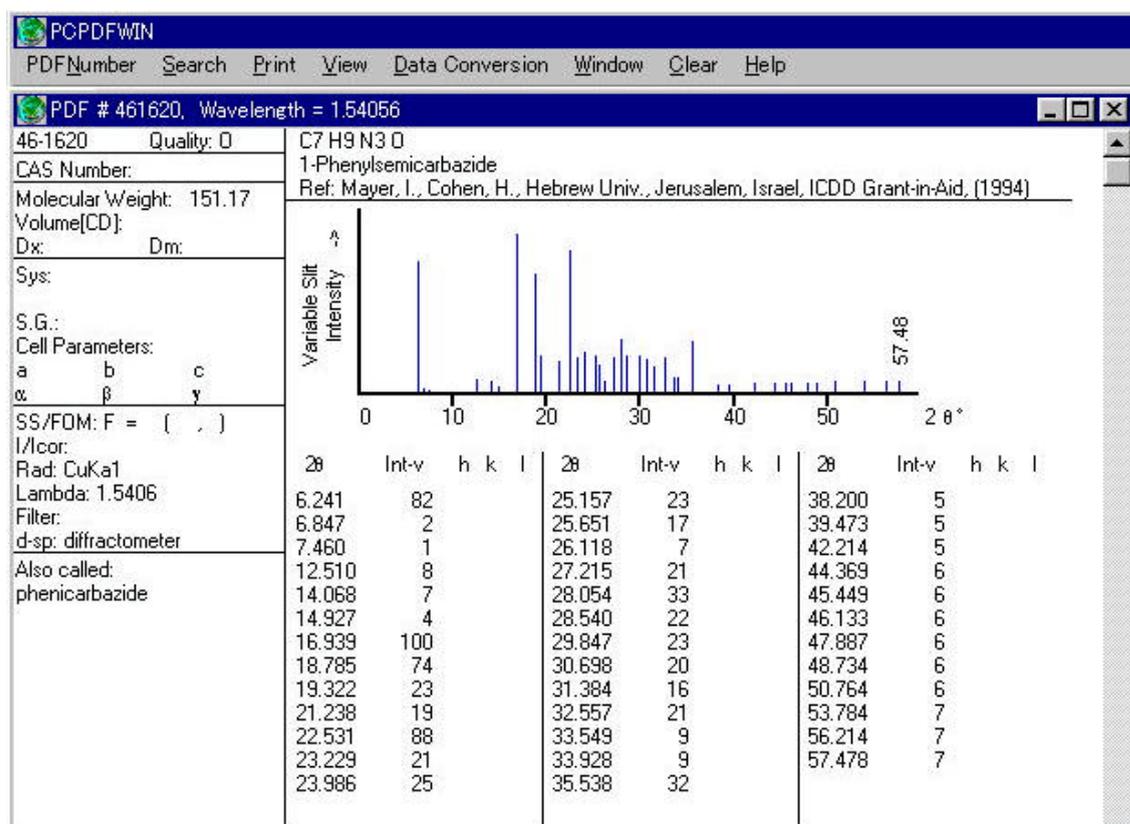
ウィンドウ内の選択された検索項目を削除します。

「Back」

現在使用中のウィンドウを閉じます。

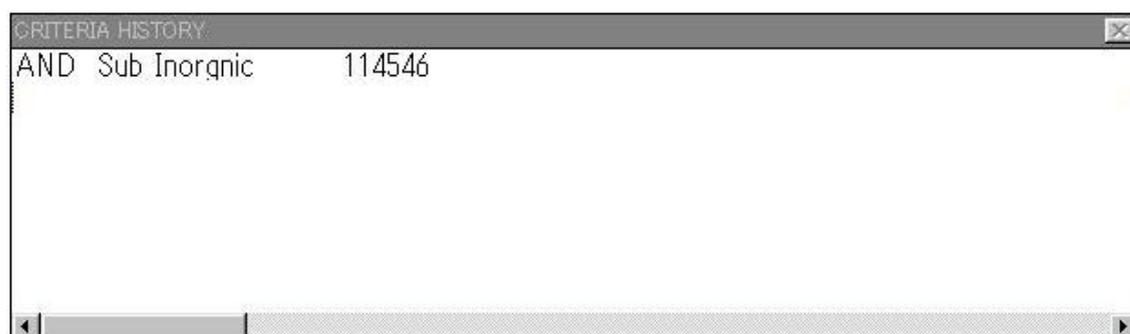
「Help」

3 Pattern Displayの概要



最終的な検索結果 (PDF Pattern) はPattern Display ウィンドウ内に表示されます。 Pattern Displayウィンドウの各メニューを使ってデータの表示形式を変更することができます。例えば面間隔の変わりにユーザーが希望するX線の波長(ターゲット元素)を指定して回折角を表示させることができます。

4 CRITERIA HISTORYの概要



このウィンドウには「Search メニュー」によって与えられた条件と見つかったデータ数が表示されます。左側の演算子、真中が条件右側の数字が検索数です。(上の図では「無機物」が条件です。)

検索方法

A . PDF numberによる検索

「PDF number」を選択します。

PDF numberを入力します。(図1)

ウィンドウ内に[PDF pattern](#)が現れます。

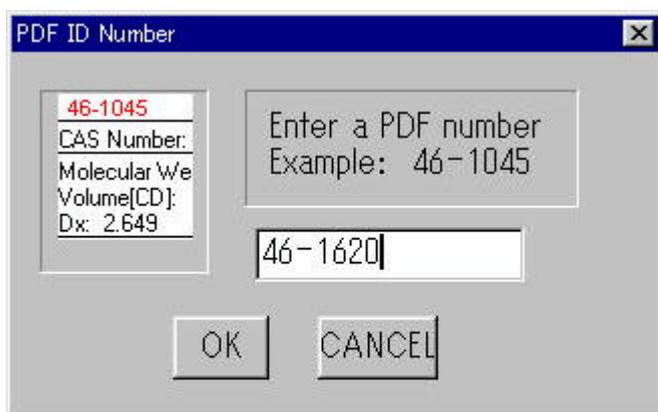


図1

b . いろいろな条件による検索

(詳しくは[検索例1](#)、[検索例2](#)、[検索例3](#)、[検索例4](#)をご覧ください)

「Search」を選択します。

「Search」ウィンドウのメニューを利用して検索を行います。

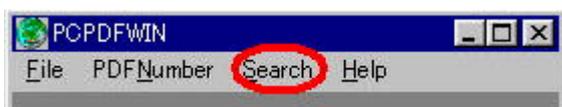
「CRITERIA HISTORY」ウィンドウ上で必要な検索項目を選択し、「Search Result」を選択。

検索結果が表示されたら、タイトルを選択すると[PDF Pattern](#)が現れます。

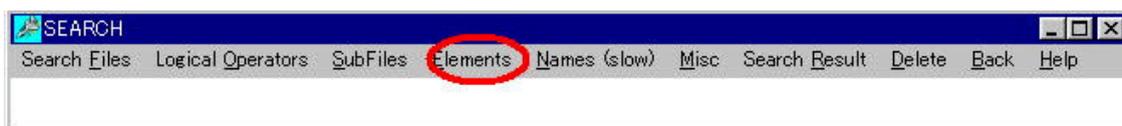
検索例1 (含有元素による検索)

例えばBi-Sr-Ca-Cu-O化合物を検索する場合、下記の手順でメニューを選択をします。

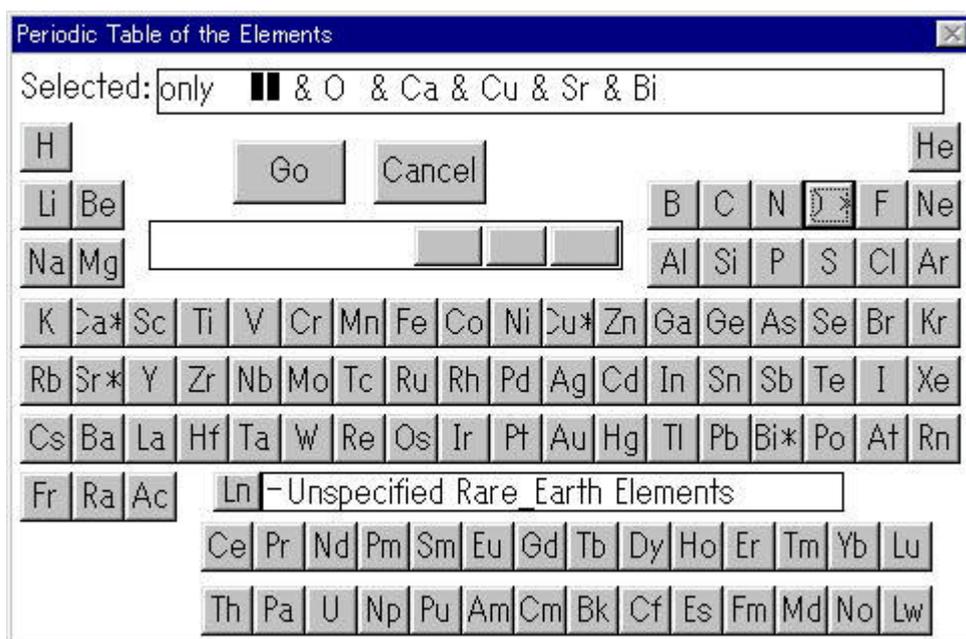
- a. メインメニューウィンドウから"Search" をクリックします。



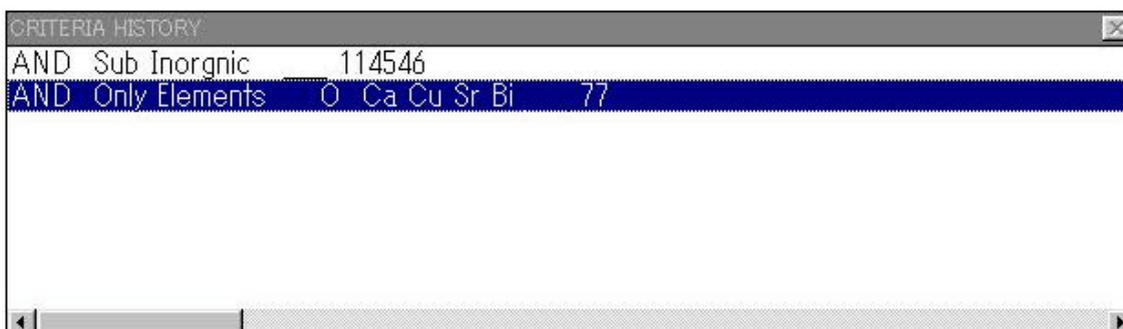
- b. [Elements]-[Select Elements]-[Only] (指定した元素のみ) を選ぶと画面に周期律表が表示されます。



- c. 希望の元素名 (Bi、Sr、Ca、Cu、O) をクリックした後、「Go」をクリックします。



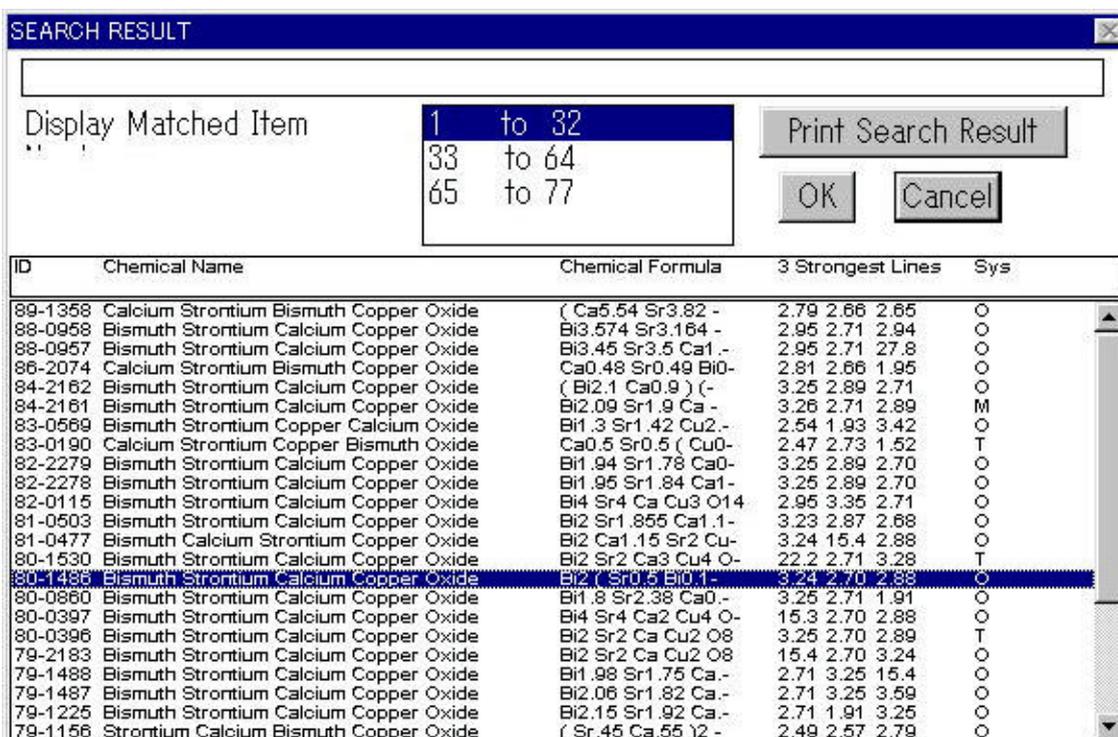
d. "CRITERIA HISTORY" ウィンドウに条件と見つかったデータが表示されます。



e. 「Search Result」をクリックするとウィンドウに検索結果の概要が表示されます。



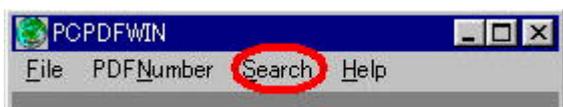
f. 検索結果の中から調べたい物質選択し、「OK」をクリックすると [Pattern Display](#) が開かれます。



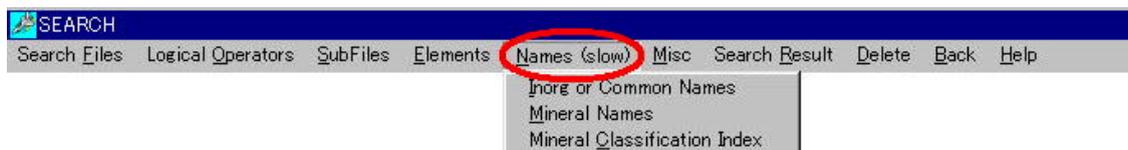
検索例2 (物質名による検索)

例えば物質名に「copper iron antimony oxide」というキーワードを持つ物質を検索するとします。

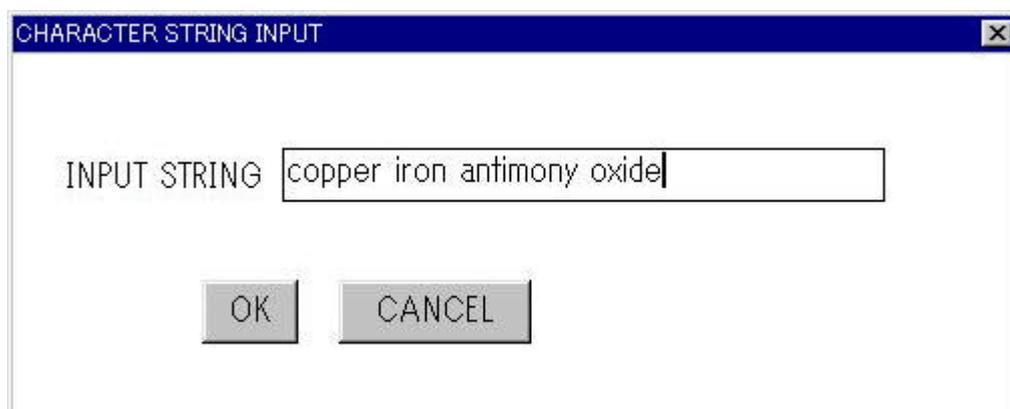
- a. メインメニューウィンドウから "Search" をクリックします。



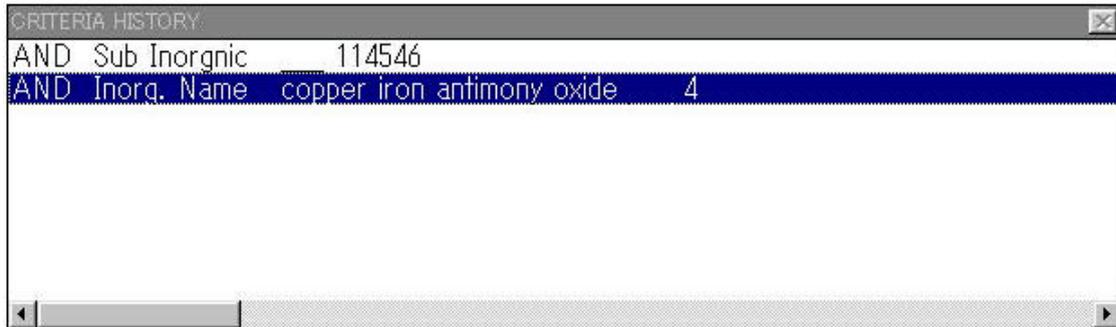
- b. [Names(slow)]-[Inorg or Common Names] を選ぶと画面に物質名入力画面が表示されます。



- c. 物質名のところにキーワード「copper iron antimony oxide」を記入し、OKをクリックする。



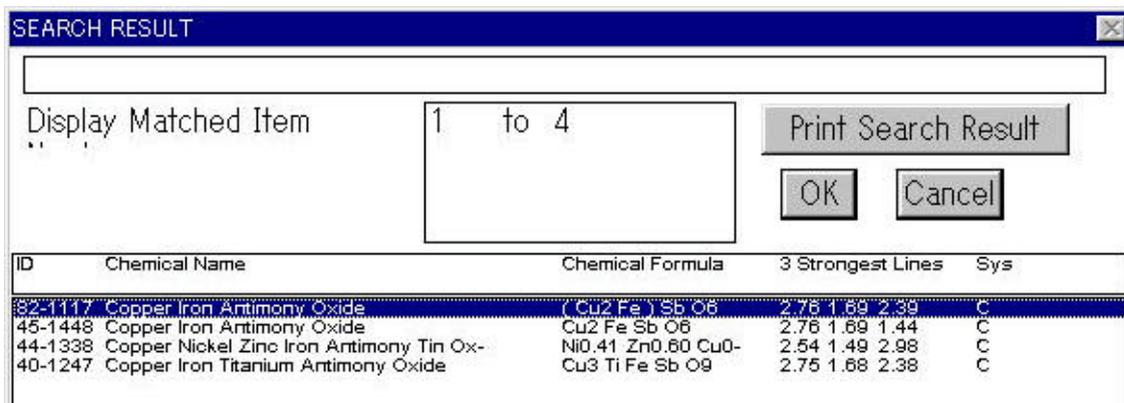
d. " CRITERIA HISTORY " ウィンドウに条件と見つかったデータが表示されます。



e. 「Serch Result」をクリックするとウィンドウに検索結果の概要が表示されます。



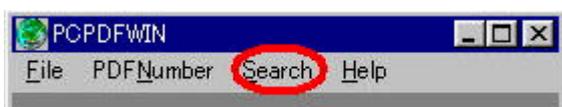
f. 検索結果の中から調べたい物質選択し、「OK」をクリックすると[Pattern Display](#)が開かれます。



検索例 3 (高度な検索)

例えば「ポリマー系」かつ「赤い」、または「融点1000度以上」の物質を検索するとします。

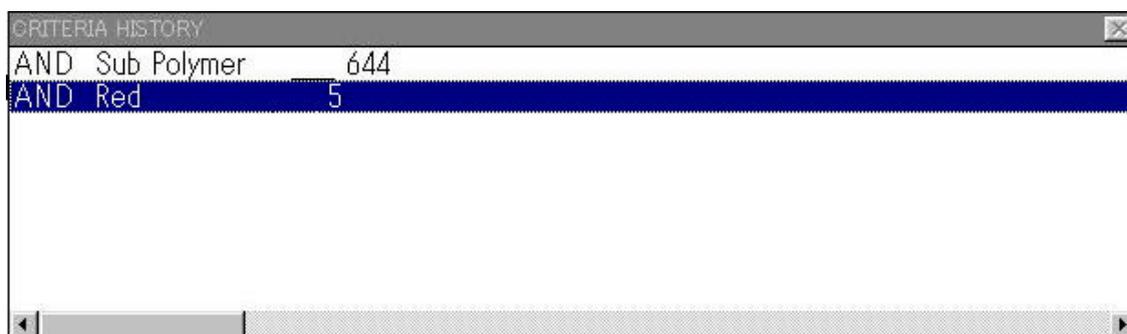
a. メインメニューウィンドウから "Search" をクリックします。



b. [SubFilis]-[polymer] を選択すると "CRITERIA HISTORY" ウィンドウに条件 (ポリマー系) が表示されます。



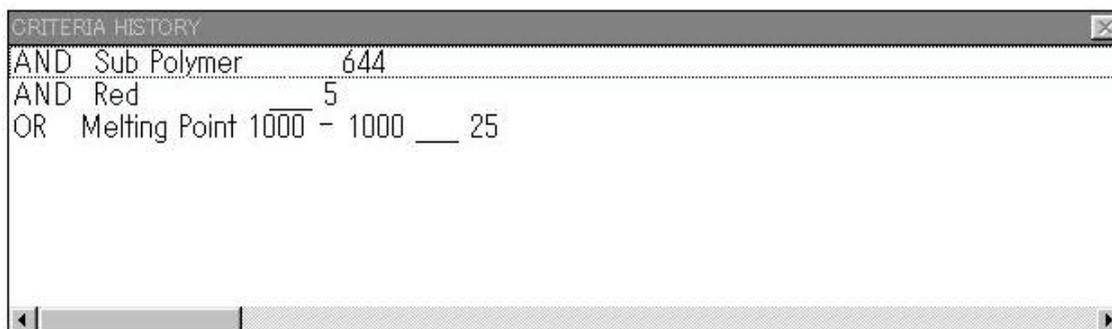
c. 次に[Misc]-[color]-[red]を選択すると "CRITERIA HISTORY" ウィンドウに条件 (赤い) が表示されます。



d. [Logical Operators]-[or]を選択します。



e. [Misc]-[Melting Point]を選択し、融点の温度(例 1000度)を入力すると 'CRITERIA HISTORY' ウィンドウに新しい条件が追加されます。



f. 「Search Result」をクリックするとウィンドウに検索結果の概要が表示されます。



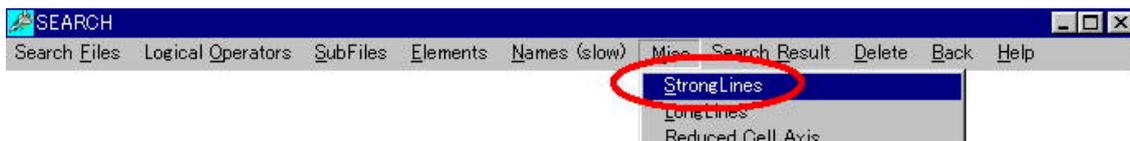
検索例 4 (三強解析線による検索)

例えばもっとも強い解析線が3本、面間隔1.93 , 1.54 , 3.57 に相当する位置に現れる物質を検索するとします。

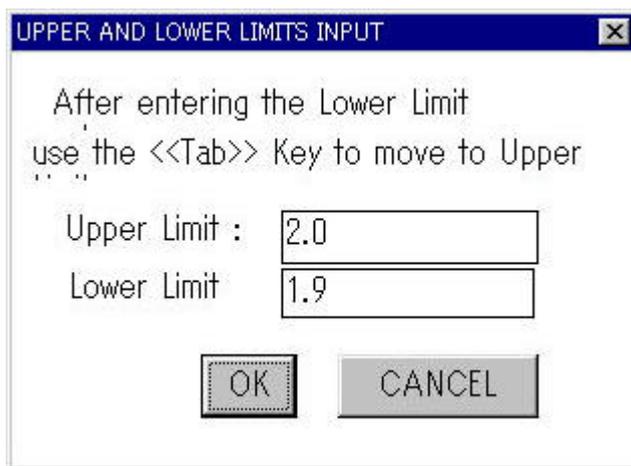
a. メインメニューウィンドウから "Search" をクリックします。



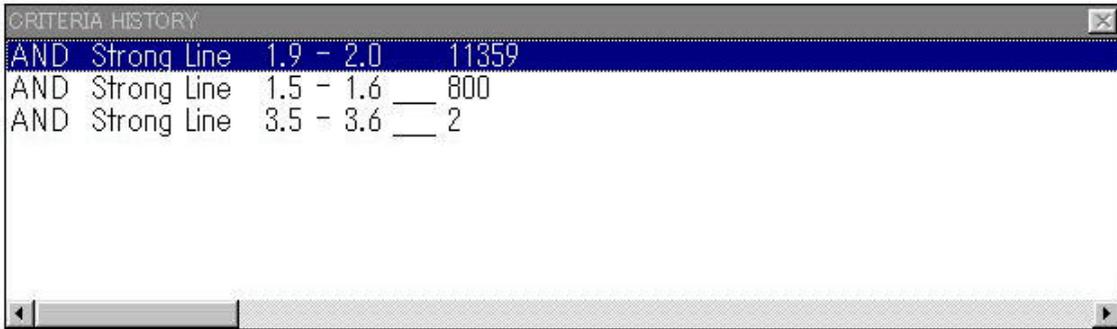
b. [Misc]-[Strong Lines] を選択すると面間隔入力画面が表示されます。



c. 目的の面間隔 (1.93) の上下の適当な値を入力します。



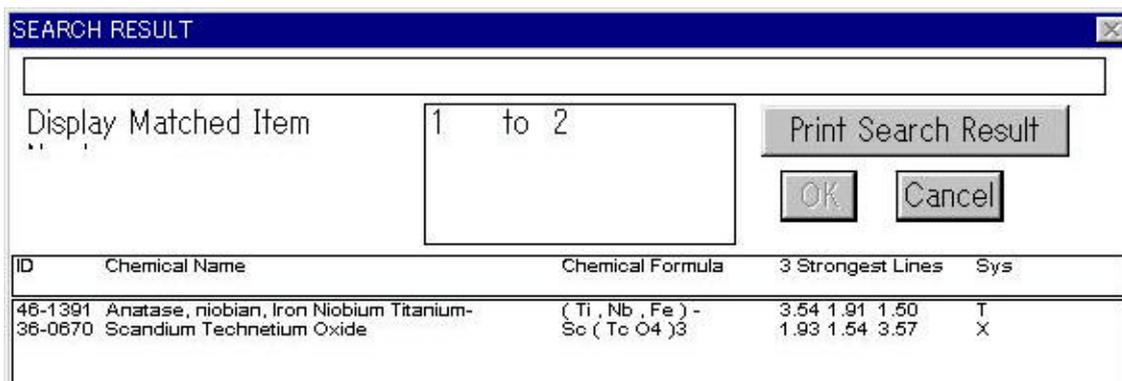
d. 続いて1.54、及び3.57 についても繰り返し3個の面間隔の指定を行います。



e. 「Search Result」をクリックするとウィンドウに検索結果の概要が表示されます。



f. 検索結果の中から調べたい物質選択し、「OK」をクリックすると [Pattern Display](#) が開かれます。

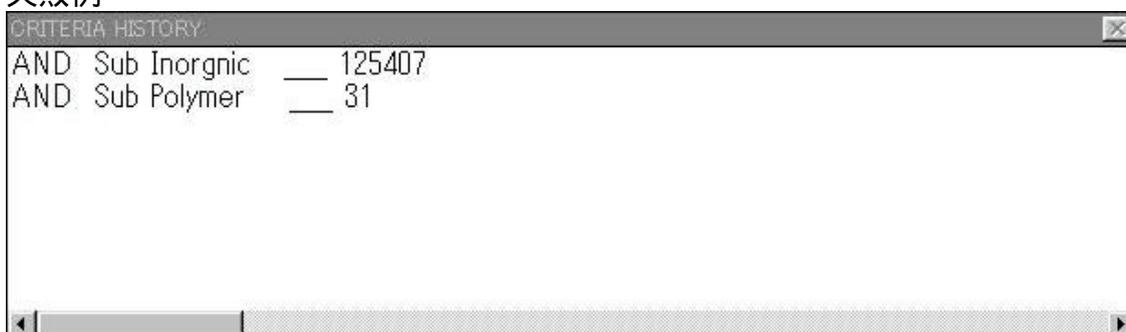


検索の注意点

” CRITERIA HISTORY ” 内の検索履歴の消し忘れのため、うまく検索が出来ないことがあります。

例えば、「無機物」を検索し、続いて新しく「ポリマー」を検索した場合、失敗例として次のような ” CRITERIA HISTORY ” になります。

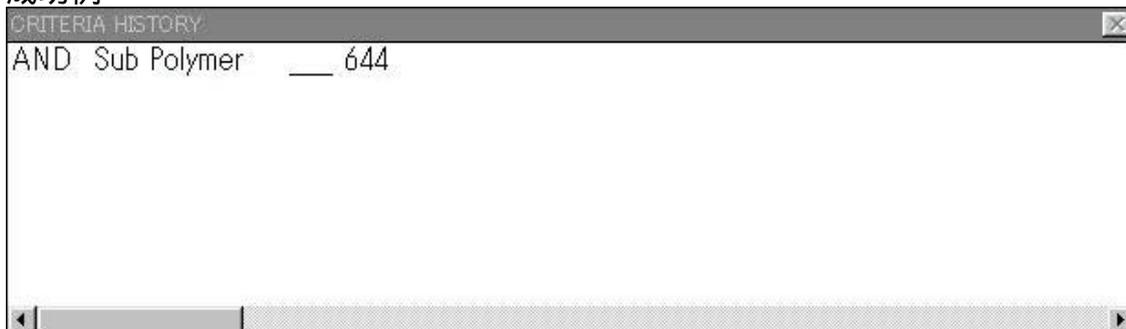
失敗例



この場合、「無機物」かつ「ポリマー」になってしまいます。
このような失敗をなくす検索の手順として、新しい検索を始める場合には「searchメニュー」の「Delete」をクリックして履歴を消してください。

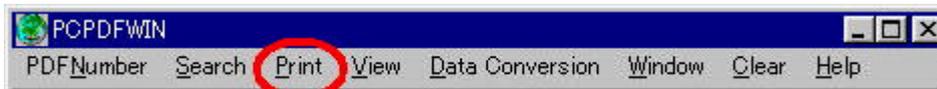


成功例



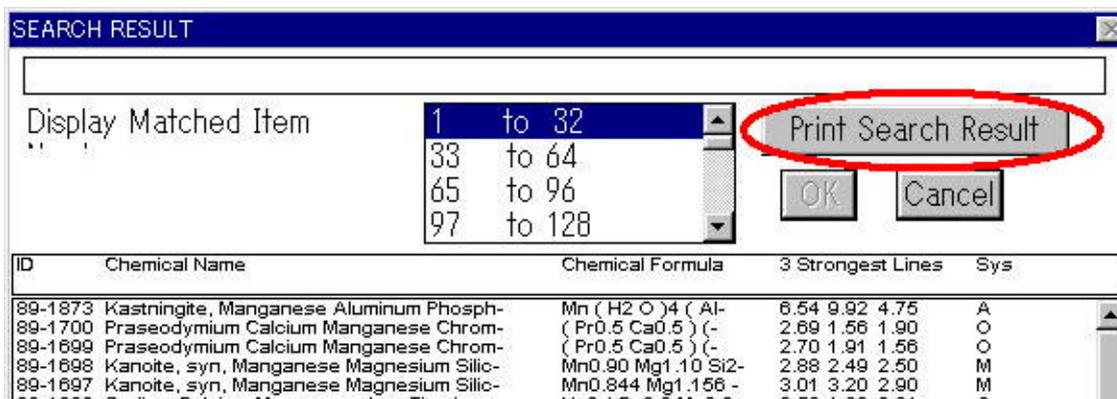
検索結果の印刷について

- a. 「PDF Pattern」の印刷 (注) グラフは表示されません。



- ・ウィンドウ内で「Print」をクリックします。
- ・プリントの設定を確認したら「OK」をクリックします。

- b. 「Search Result」の印刷



- ・ウィンドウ内で「Print Search Result」をクリックします。
- ・プリントの設定を確認したら「OK」をクリックします。

- c. その他

フロッピーへの保存はできません。