

WebPDF-4+ /PDF-4+ データベース DDViewer+ソフトウェア

簡易マニュアル

A. おもな検索方法(絞り込み)

1. PDF 番号
2. 名称(物質名、鉱物名)
3. 回折線(ロングライン、ハナワルトインデックス)
4. 元素記号と構成元素記号数
5. 結晶情報
6. データの出典
7. サブファイル

B. 検索／演算

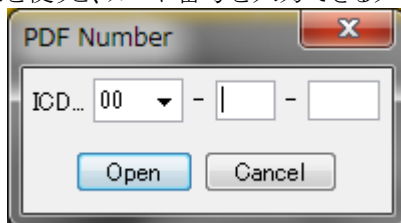
C. 検索結果の表示

D. PDF カードの印刷と保存

A. おもな検索方法(絞り込み)

1. PDF 番号

File メニューの Open PDF Cards...を使うと、カード番号を入力できるダイアログボックスが表示される:



データコレクション元の分類:

00 - 従来からの ICDD が収集した実測パターン(Sets 1-60)

01 - ICSD(FIZ)の結晶座標データからの計算によるパターン(Sets 70-89)

03 - NIST の計算パターン(Set 65)

04 - LPF(Linus Pauling File) の結晶座標データからの計算によるパターン(Sets 1-14)

*02 は Cambridge Crystal Data Center の座標データから計算されたパターンに充てられ、すべて PDF-4/Organic に収容されています。

入力例:

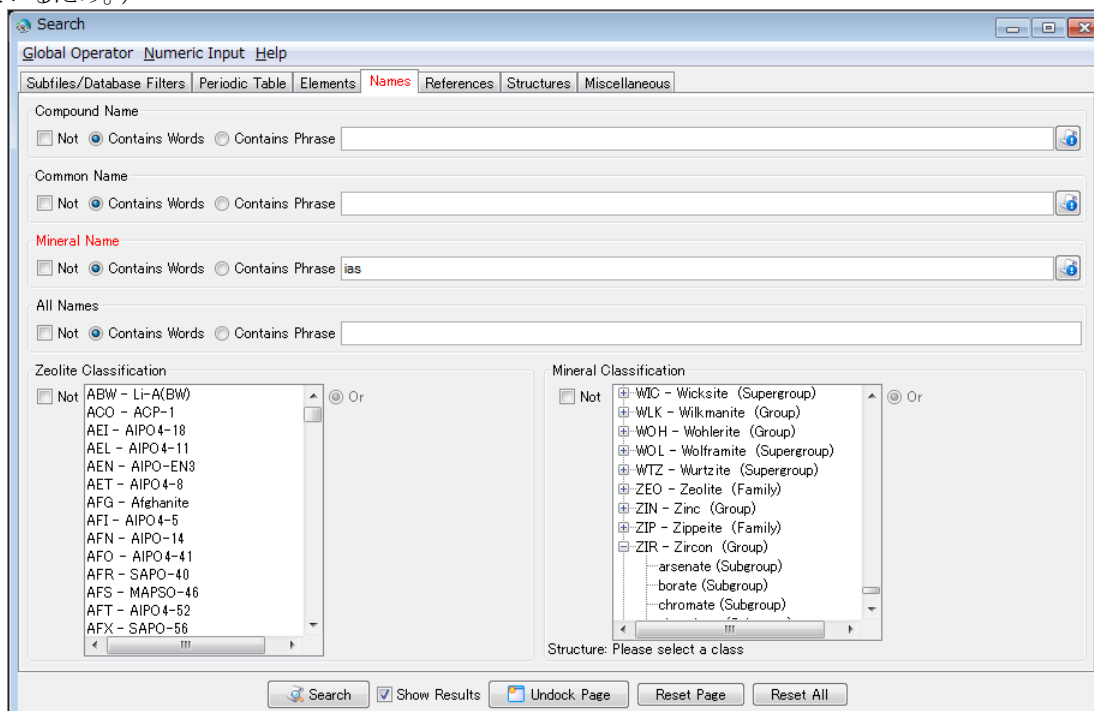
00-025-1376

2. 名称(物質名、鉱物名)

大文字小文字が区別されます。入力された文字列はすべて部分一致として検索されます。ワイルドカードは使用できません。

*物質名を入力するよりも、元素記号を使った掛け合わせ検索を推奨(使用している命名法が元素名を羅列する方法のため)

*"Iron Oxide"でも"Oxide Iron"でも同じ検索結果になる。(プログラムがアルファベット順に並べ替えてから検索しているため。)



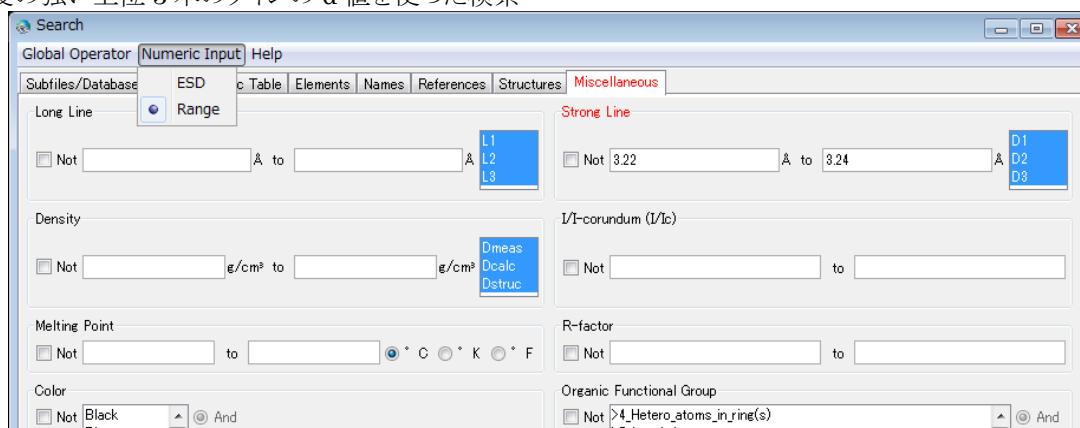
入力例:

Mineral Name: Magnetite

Compound Name: Iron Oxide

3. 回折線(ロングライン、ハナワルトインデックス)

強度の強い上位 3 本のラインの d 値を使った検索



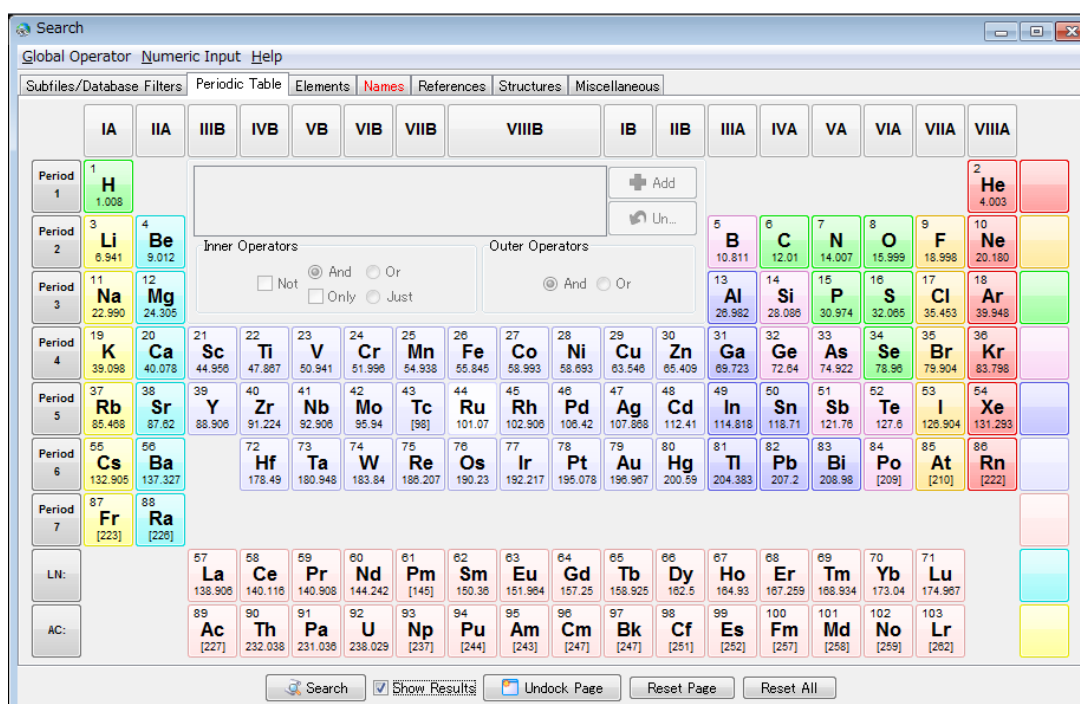
入力例:

左側のボックスに 3.22 (上位 3 本のいずれかが 3.22)

左側のボックスに 3.22、to の右側のボックスに 3.23(上位 3 本のいずれかが 3.22~3.23 の範囲にある)

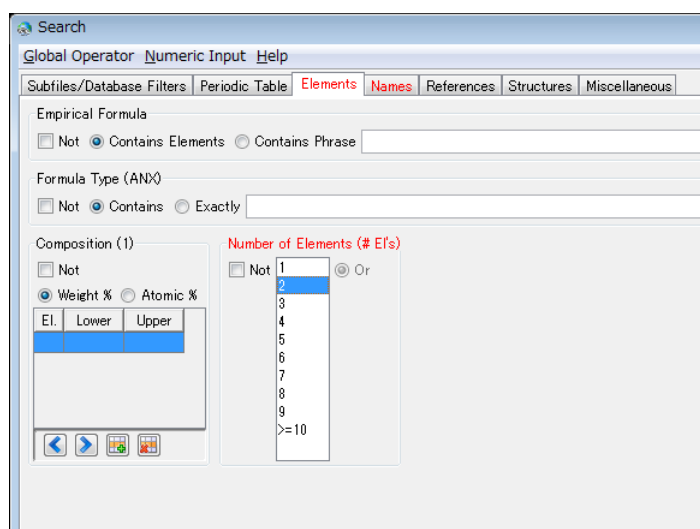
4. 元素記号と構成元素記号数

元素記号(複数選択も可能)また、同族列を選択して検索



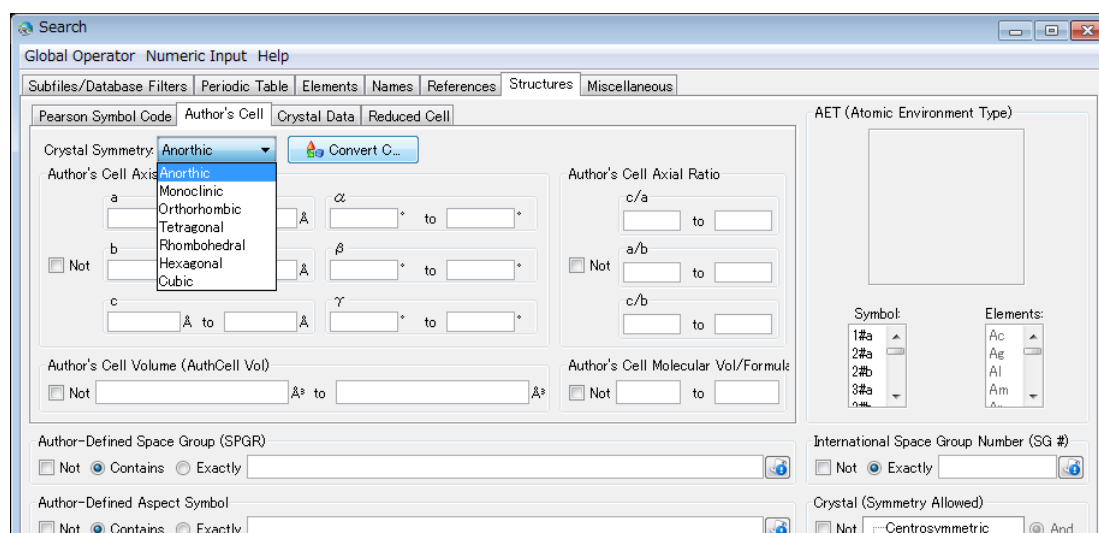
検索結果に不要な物質が含まれないように、構成元素記号の数で絞り込みが可能:

例えば、酸化鉄だけが必要なときに、元素記号で Fe と O を選択すると、Fe、O 以外の元素記号を含むカードが検索結果に含まれる。これらを除外するために、下図の Number of Elements で 2 を指定



5. 結晶情報

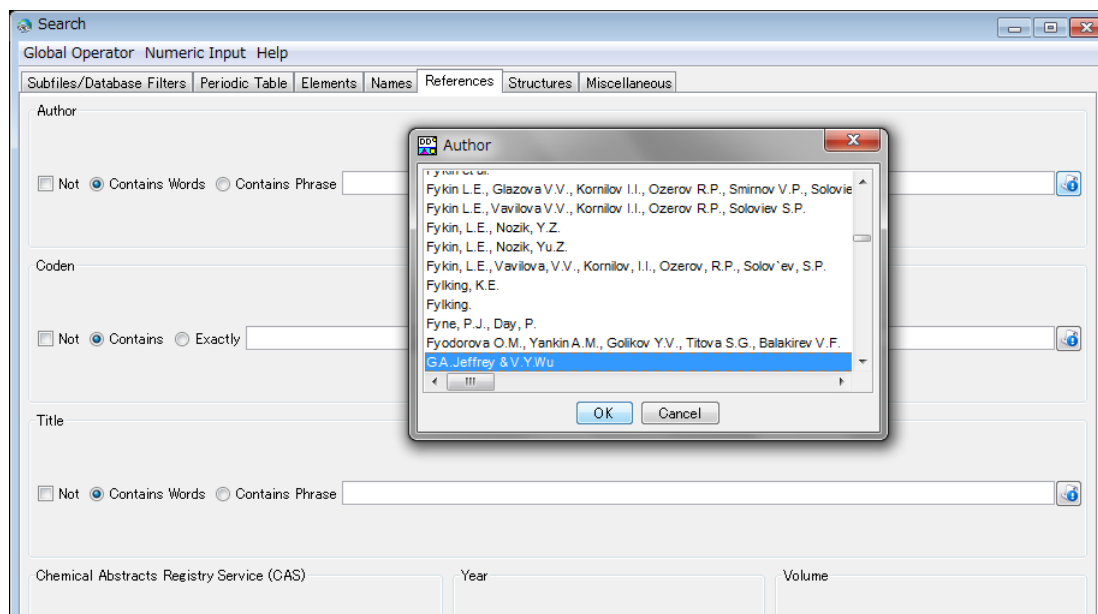
結晶系、格子パラメータ、ピアソンコードなどから検索



6. データの出典

出典文献の著者名、CODEN コードからの検索

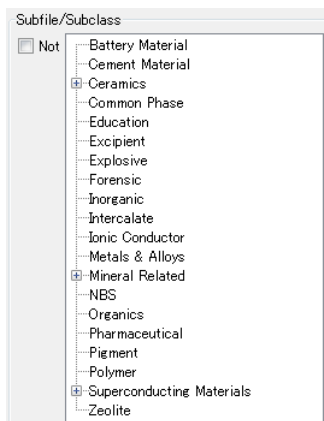
著者のミドルネームの扱い、雑誌名などマニュアル入力が煩わしいので、ボックス右端のボタン()を利用。



7. サブファイル

無関係と思われる物質を検索対象から除外できる。

* データベースの各エントリーに Inorganics と Organics 以外にサブファイル ID が付けられている。例えば、Magnetite(00-019-0629)の表示では” Primary Pattern, Forensic, Inorganic, Common Phase, Mineral Related (Mineral , Synthetic), NBS Pattern, Educational Pattern, Metals & Alloys, Pigment/Dye”となっている。このうち、Primary Pattern 以外がサブファイルに該当。



B. 検索／演算

PDF 番号以外は掛け合わせの対称となる。タブページで条件を設定し、最後に Search ダイアログ下部の Search ボタンをクリックすると、検索を実行できます：



カレントのタブページの条件設定を消去するには、Reset Page ボタンを、検索条件全体を消去するには Reset All ボタンを使用。

C. 検索結果の表示

検索結果のカードリストの D1、D2、D3 は強度上位の 3 本(ハナワルトインデックスに使われる)がり、パターンの大凡の確認ができる。Results ダイアログの最下行には実行された検索式がされる。

PDF #	QM	Chemical Formula	Compound Name	D1	D2	D3	SYS
00-001-1111	B	Fe3 O4	Iron Oxide	2.530000	1.480000	1.610000	C
00-002-1035	B	Fe3 O4	Iron Oxide	2.540000	1.480000	1.610000	C
00-003-0862	O	Fe3 O4	Iron Oxide	2.530000	1.490000	1.100000	C
00-003-0863	O	Fe3 O4	Iron Oxide	2.530000	1.480000	2.960000	X
00-007-0322	B	Fe O · Fe2 O3	Iron Oxide	2.530000	1.484000	2.970000	C
00-011-0614	B	Fe3 O4	Iron Oxide	2.530000	1.614000	1.483000	C
00-019-0629	S	Fe +2 Fe2 +3 O4	Iron Oxide	2.532000	1.484500	2.967000	C
00-025-1376	B	(Fe , Mg) (Al , Cr , Fe , Ti)2 O4	Magnesium Iron Aluminum Chromium ...	2.510000	1.600000	2.950000	C

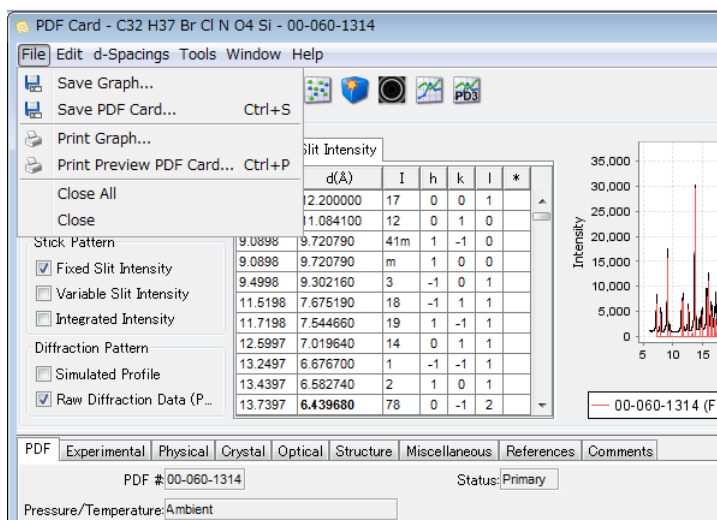
Search Description: (Database (ICDD (00))) And (Mineral Name Contains Words 'magnetite')

Calculations: Mean: Median: ESD:

Results リストのカード番号をダブルクリックすることにより、カードの内容を表示できる。(ややレスポンスに難あり)

D. PDF カードの印刷と保存

PDF Card のスクリーン上の File メニューから、グラフ部分は jpeg として保存でき、カード内容は xml フォーマットとして保存できます。



E. データカードの表示(例)

PDF タブ

PDF Number

Powder Diffraction File(PDF)パターンの ID 番号

Status

パターンが **Active**、**Deleted**、**Alternate**、**Rejected**、**Primary** であるかのステータス(Alternate は Additional Pattern があることを示す)

QM

PDF データのクオリティ

*

I

C

R

Chemical Formula

Structural Formula

分子における原子数と原子と原子群の結合状況を示す構造式

Empirical Formula

各原子数を示す構造式

Weight%

重量百分率で表現される構造式

Atomic%

原子百分率で表現される構造式

ANX

Compound name

物質名

Mineral Name

鉱物名、[NR]は International Mineralogical Association にまだ承認されていないことを示す。

Experimental タブ

Radiation

線源と波長

CuK α 1=1.54056 Å、CuK α avg=1.54184 Å、CrK α 1=2.2897 Å、FeK α 1=1.93604 Å、CoK α 1=1.78898 Å、MoK α 1=0.7093 Åの6種類が一般的

Filter

単色化に使われた物質

d-Spacing

面間隔値の計測方法

Cutoff

最小の 2θ に対応する最大の d 値

Intensity

強度計測に使われた方法

I/Ic

パターンの最強線と 50/50 の重量混合におけるコランダムの最強線の強度との比率

Camera Diameter

計測に使われたカメラの直径

Physical タブ

SYS

結晶系

Space Group

空間群と番号

Aspect

Author's Cell

著者作成のセルパラメータ

軸の長さ(a, b, c)

内面角(α , β , γ)

SQLAIDS プログラムで作成された単位セルの体積

標準偏差が括弧内に与えられる

Z

単位セル当たり化学式単位数

Author' Cell Axial Ratio

Author のセル軸長の比率

Dcalc.

SQLAIDS プログラムで計算された密度

Dmeas.

実測の密度

Dstruct.

構造密度

SS/FOM

スミスシュナイダー性能指数

Melting Point

融点

R-factor/Error

構造精密化の R 因子

Crystal タブ

SQLAIDS プログラムによって決定された結晶データ

Space Group

3次元空間群記号

Z

単位セル当たり化学式単位数

Molecular Weight

Cell Parameters

Crystal Data

Author's Cell

セルパラメータ

軸の長さ(a, b, c)

内面角(α , β , γ)

Crystal Data Axial Ratio

結晶の軸の比率

Volume

Reduced Cell

既約セルの軸の長さ(a, b, c)内面角(α , β , γ)

Optical タブ

$\varepsilon \alpha$, $\pi \omega \beta$, $\varepsilon \gamma$

屈折率

Sign

中間屈折率と最大最小屈折率の関係の指標

2V

双軸結晶における光学軸間の角度

Structure タブ

TDP Type

熱変位パラメータ

Origin

単位セルの原点

Atomic Coordinates

原子座標

原子、番号、ワイコフ記号、対称性、x、y、z、サイト占有率、同位体熱変位パラメータ、原子配置

SG Symmetry Operators

空間群対称要素

Anisotropic Thermal Displacement

Miscellaneous タブ

CAS

Chemical Abstracts Registry Number

Pearson

ピアソンコード

Prototype Structure

プロトタイプ構造

LPF Prototype Structure

ライナスポーリング プロトタイプ構造

Mineral Classification

鉱物グループコード

(アルファベティカルインデックスの Mineral Classification Index)

Zeolite Classification

ゼオライト分類

(アルファベティカルインデックスの Zeolite Classification Index)

Subfile(s)

サブファイル

Entry Date

Last Modification