

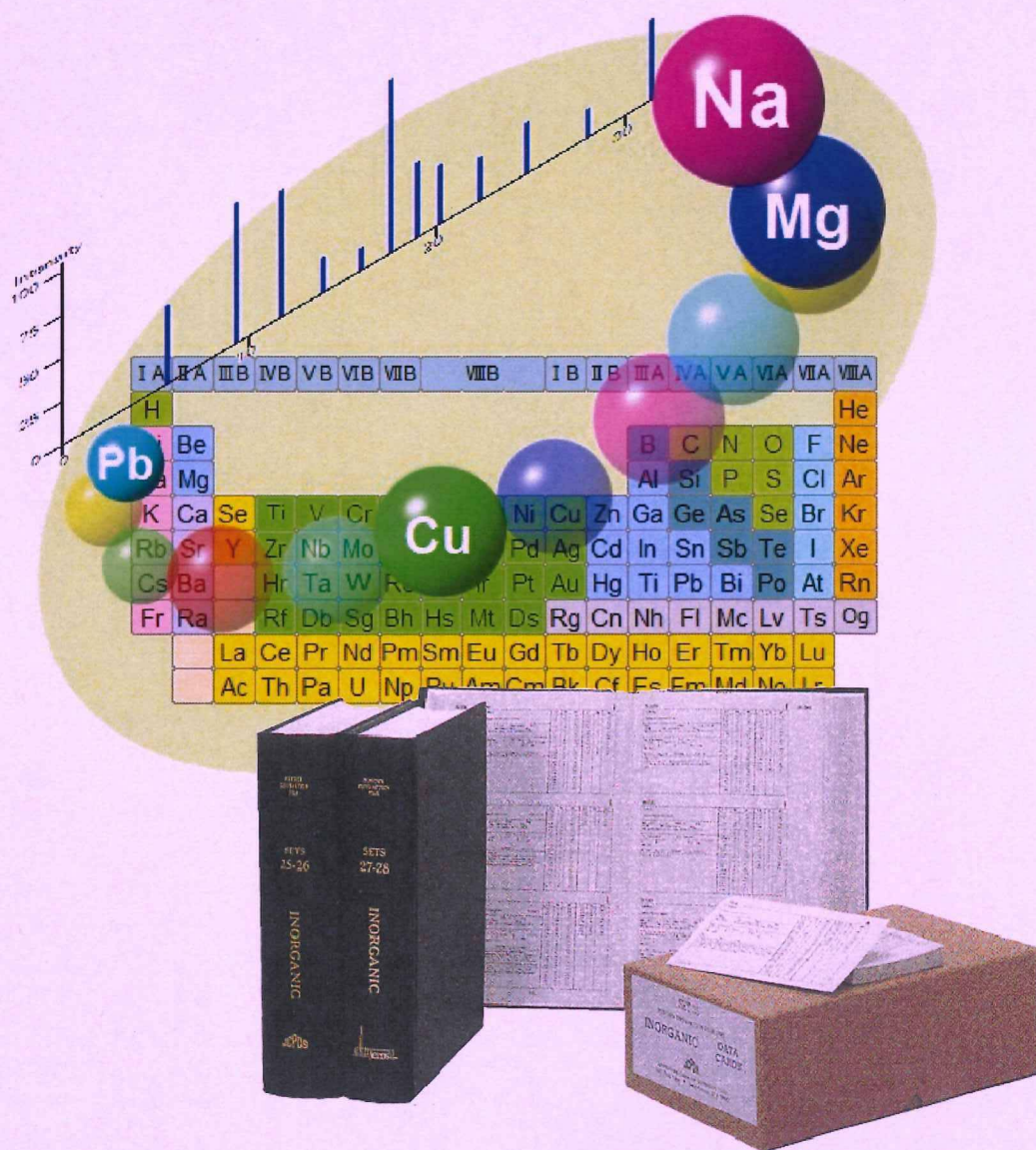
JCPDS-ICDD  
PDF-5+ データベース パターンマッチング システム

# XSearch for Windows

VERSION 2.0.7.1. for Release 2024

## 操作マニュアル

(Revised Oct. 12. 2023)

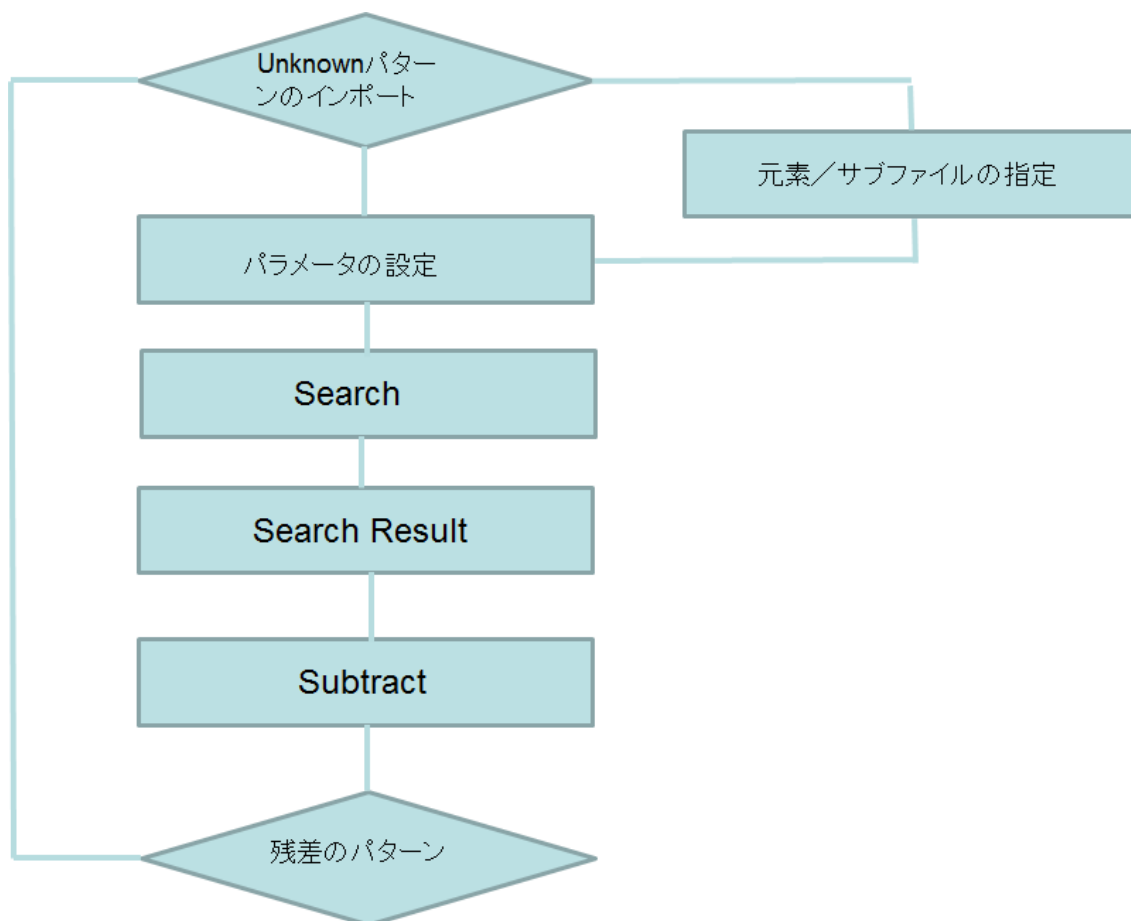


株式会社デジタルデータマネジメント  
東京都中央区日本橋茅場町 1-11-8 紅萌ビル  
TEL:03(5641)1771 FAX 03(5641)1772  
E-mail tech@ddmcorp.com  
URL <http://www.ddmcorp.com>

1. XSearch の概要.....	2
2. XSearch の起動.....	4
3. Unknown パターンの準備.....	5
3.1 マニュアルによるデータ入力.....	5
3.2 ピークデータ(Supported Format)のロード.....	6
3.3 ピークデータ(Unsupported Text Format)のロード.....	8
3.4 ピークデータの保存.....	11
4. User Library .....	12
4.1 User Library 作成のためのインポート.....	12
4.2 User Library 作成のためのインポートファイル(*.smc)の仕様.....	14
4.3 「User Library」の保守.....	14
4.4 「検索用インデックスファイル」の作成.....	17
5. Search の条件設定と実行.....	18
5.1 データの絞込み.....	18
5.2 パラメータの設定.....	20
5.3 グラフィック上でのderror の調整.....	22
5.4 ピーク位置の補正.....	23
5.5 ユーティリティ.....	25
6. Search (検索)の実行.....	26
6.1 Search (検索).....	26
6.1 検索結果のテーブルのヘッダー.....	27
6.3 どの候補がよさそうか?.....	28
6.4 候補リストの操作.....	28
7. Match/Subtract と残差パターンの Search.....	31
7.1 マッチング.....	31
7.2 Subtract (サブトラクト).....	32
7.3 引き算 (サブトラクト)のキャンセル.....	34
7.4 マッチングレポート.....	34
7.5 XSearch の終了.....	34
8. Any Peaks Search.....	35
8.1 Search.....	35
9. Statistics.....	40
9.1 画面構成.....	40
9.2 視覚的表現の操作.....	41
9.2.1 表現形式の種類.....	41
9.2.2 表現形式の選択.....	41
9.2.3 一元素を含む化合物の収録数を知るための元素の指定.....	41
9.2.4 二元素を含む化合物の収録数を知るための元素の指定.....	41
9.2.5 三元素を含む化合物の収録数を知るための元素の指定.....	41
9.2.6 収録数の範囲を限定して表示する方法.....	42
9.3 数値表現の操作.....	42
10. Raw データ (PDF5+データベース).....	43
10.1 Raw データの表示.....	43
11. ファイルのフォーマット.....	45
12. チュートリアル (サンプルデータを使った検索例).....	46

## 1. XSearch の概要

XSearch は未知混合物の回折パターンを PDF-2/4 データベースで検索し、可能性のあるデータベースパターンと照合し、該当する成分が見つければ、未知のパターンからデータベースのパターンを引き算し、残差のパターンをさらにデータベースで検索して該当する成分のパターンを引き算する反復検索のパターンマッチングシステムです。



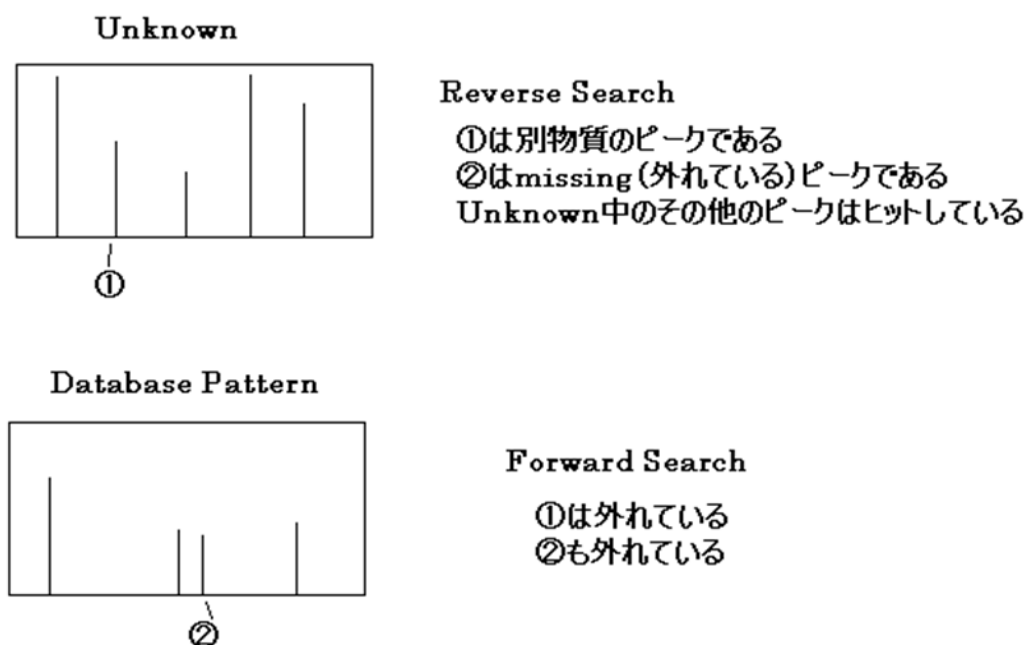
(図 1: Search/Match のフロー)

PDF-2/4 データベースは  $d$  値と 0~100 の相対強度 (一部、0~1000) からなるバーグラフのため、XSearch での検索には未知データパターンの  $d$  値と相対強度 (ピークデータ) が必要です。ピークデータの横軸が 20 単位であれば、XSearch に取り込んだ後に線源を指定し、 $d$  値に変換しなければなりません。

XSearch は未知パターンが混合物であることを想定しています。混合物を検索するためにリバースサーチと呼ばれる考え方を使われます。複数の成分が混在している未知物に対してデータベースのパターンは単一成分からのパターンです。そこでデータベース成分が未知物に含まれていれば、当然データベースパターンに存在するラインはすべて未知物のパターンにも存在しなければなりません。そして、未知物パターンに存在しないラインがデータベースパターンに存在すれば、別のデータベース成分からのラインと考えることができます。

一方、フォワードサーチと呼ばれる考え方もあります。これは未知物のパターンが純成分である

ことを想定した考え方です。データベースパターンに存在するラインはすべて未知物のパターンに存在し、そして未知物のパターンに存在するラインはすべてデータベースパターンにも存在しなければならないという考えに基づきます。

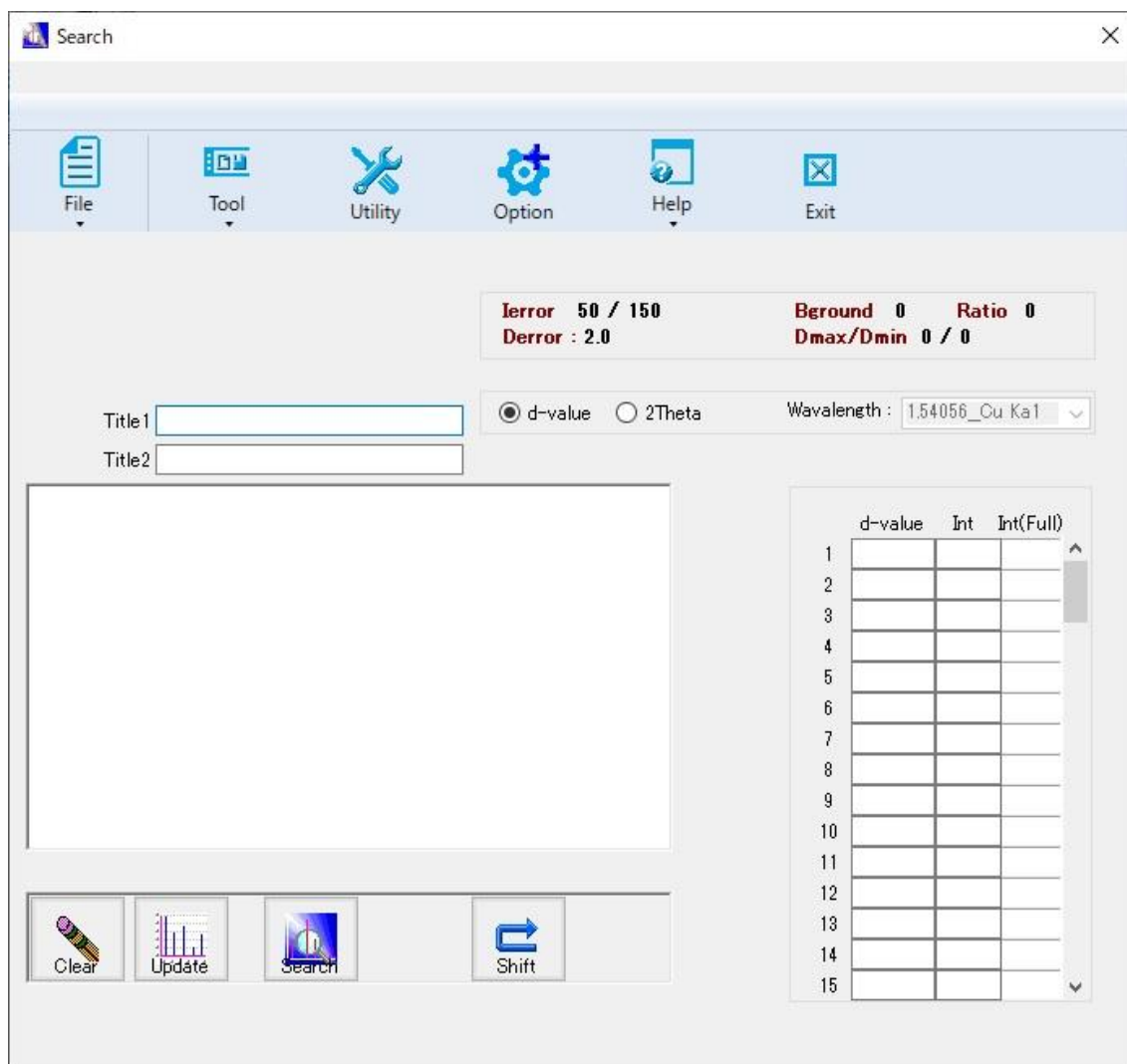


(図 2:リバース検索とフォワード検索)

X 線回折データベースはピーク位置と相対強度のデータベースであり、分光データの波形のライブラリーのように全領域同士を引き算するわけにはいきません。質量分析データのようにデータベースパターンのそれぞれのライン(ピーク)に一致具合を計算し、それらを合計した評価点が一般に使われます。XSearchは効率的に検索を実行するために、まずデータベースパターンから最大 24 本のラインを使って一致する可能性があるパターンに絞り込むプリサーチを実行します。その後、データベースの全ラインを使って、未知物パターンのラインと詳細な一致具合を計算し、Score を計算して集合を作ります。集合に存在するすべてのデータベースパターンから上位 200 件が最終的な一致の候補として Candidate List が作成されます。

## 2. XSearch の起動

PDF2plusX のメニューバー[Option]\_[XSearch]を選択して起動すると、XSearch のサーチフォームが表示されます。



(図 3:Search Form)

サーチフォームのグラフエリアの横軸単位はつねに **d** 値です。マニュアルまたはコピーペーストされたパターンは **Update** ボタンを押すまでグラフに表示されません。

### 3. Unknown パターンの準備

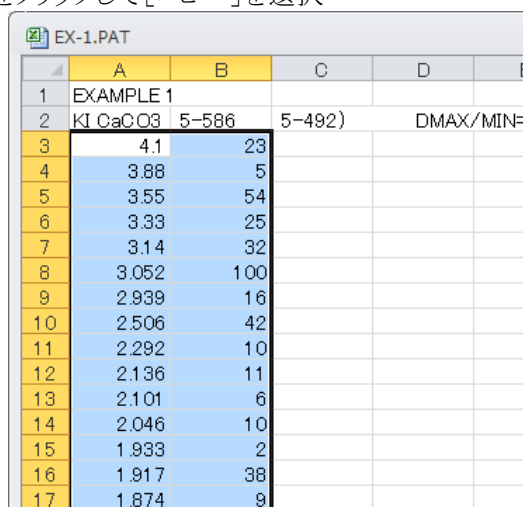
#### 3.1 マニュアルによるデータ入力

##### 3.1.1 手入力

タイトル、d値、強度をサーチフォームにマニュアルで入力できます。横軸のデフォルトは d 値ですが、2theta ボタンをクリックすると、2θ 値でも入力できます。

##### 3.1.2 データの貼り付け

- ① Excel などに入力された2列のデータ(2theta または d 値, 強度)を選択
- ② マウスの右ボタンをクリックして[コピー]を選択

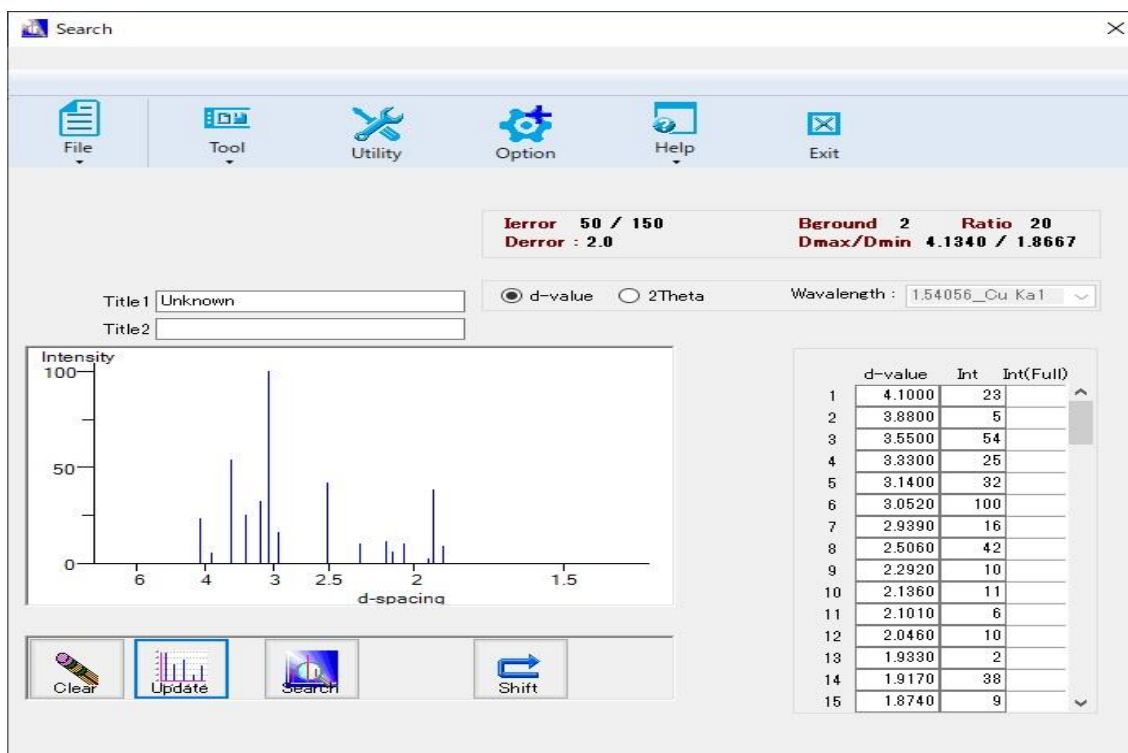


The screenshot shows an Excel spreadsheet titled "EX-1.PAT". The spreadsheet has columns A through E and rows 1 through 17. Row 1 contains "EXAMPLE 1". Row 2 contains "KI CaCO3 5-586 5-492) DMAX/MIN=". Rows 3 through 17 contain numerical data in columns A and B, which are highlighted in blue. The data in column A ranges from 4.1 to 1.874, and the data in column B ranges from 23 to 9.

	A	B	C	D	E
1	EXAMPLE 1				
2	KI CaCO3	5-586	5-492)	DMAX/MIN=	
3	4.1	23			
4	3.88	5			
5	3.55	54			
6	3.33	25			
7	3.14	32			
8	3.052	100			
9	2.939	16			
10	2.506	42			
11	2.292	10			
12	2.136	11			
13	2.101	6			
14	2.046	10			
15	1.933	2			
16	1.917	38			
17	1.874	9			

(図 4: d 値または 2theta と強度値のコピー)

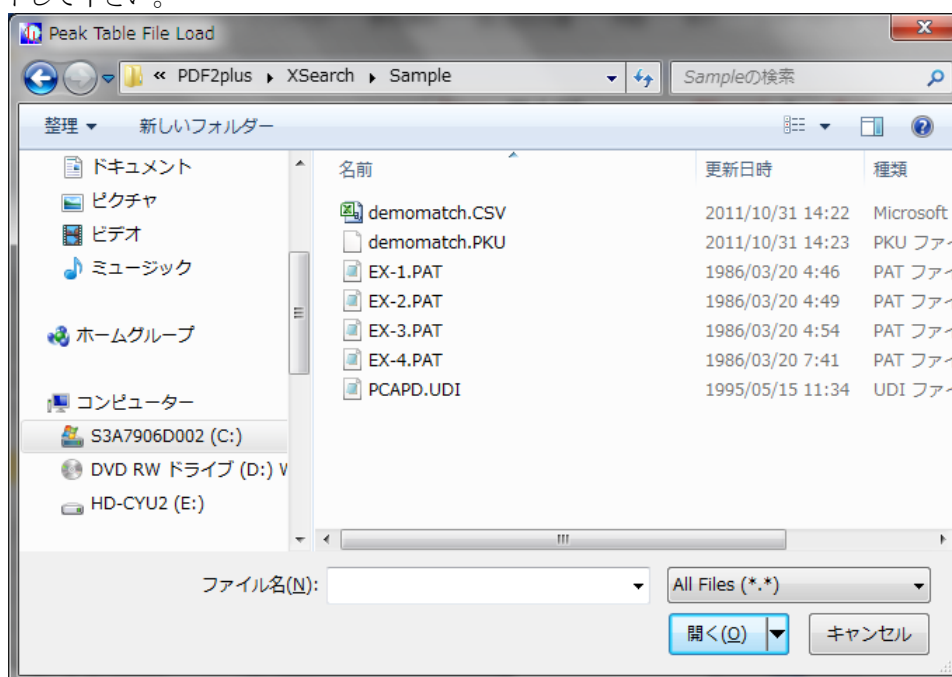
- ③ サーチフォームのメニューバー[Tool]\_[Paste Unknown] を選択して下さい([2theta] または[d-value]については、貼り付ける前に選択しておかなければなりません)。
- ④ 入力されたデータ(2theta または d 値, 強度)が、サーチフォーム上のテキストボックスに貼り付けられます。
- ⑤ [Update]ボタンをクリックすると、手入力または貼り付けられたユーザーパターンが d 値に変換され、ディフラクトグラムが表示されます。



(図 5: Search Form でのパターンと d/I テーブル)

### 3.2 ピークデータ(Supported Format)のロード

- ① ピークデータがすでにあれば、そしてXSearchがサポートしているフォーマットであれば、メニューバー[File]\_[Load]\_[Peak Data]を選択し、ピークデータファイルを選択してロードして下さい。



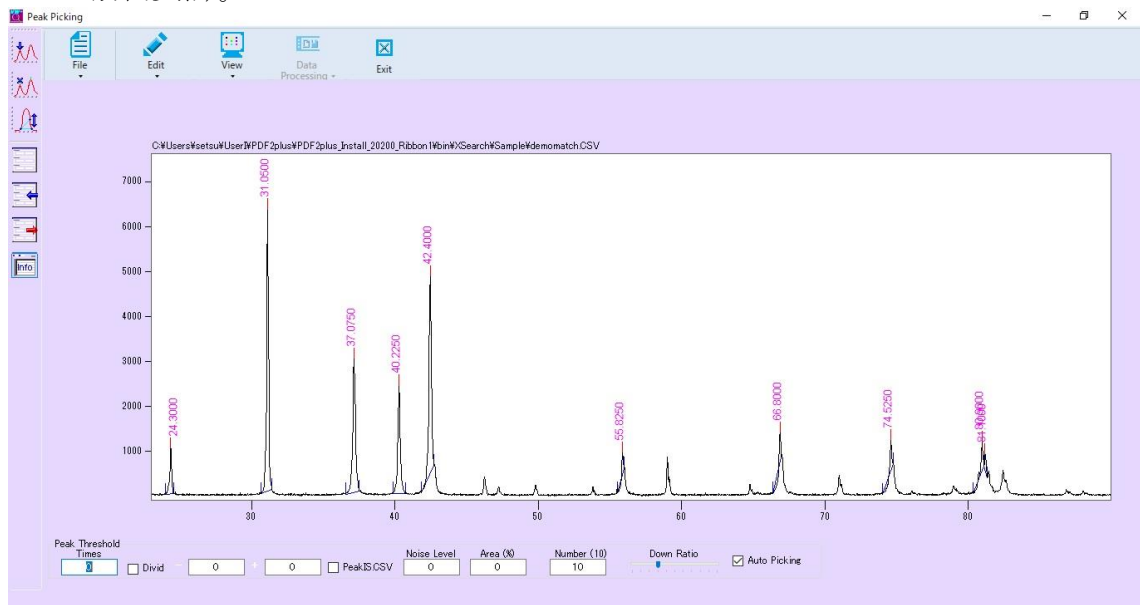
(図 6: XSearch でサポートされたファイルを選択)

- ② 生データおよびピークデータの両方が揃っていれば、メニューバー[File][Load][Raw Data & Peak Data]を選択し、生データファイルを選択した後、ピークデータファイルを選択して、ロードできます。デフォルトの拡張子は、生データが「CSV」、ピークデータが「PKU」です。



(図 7:生データファイルの選択)

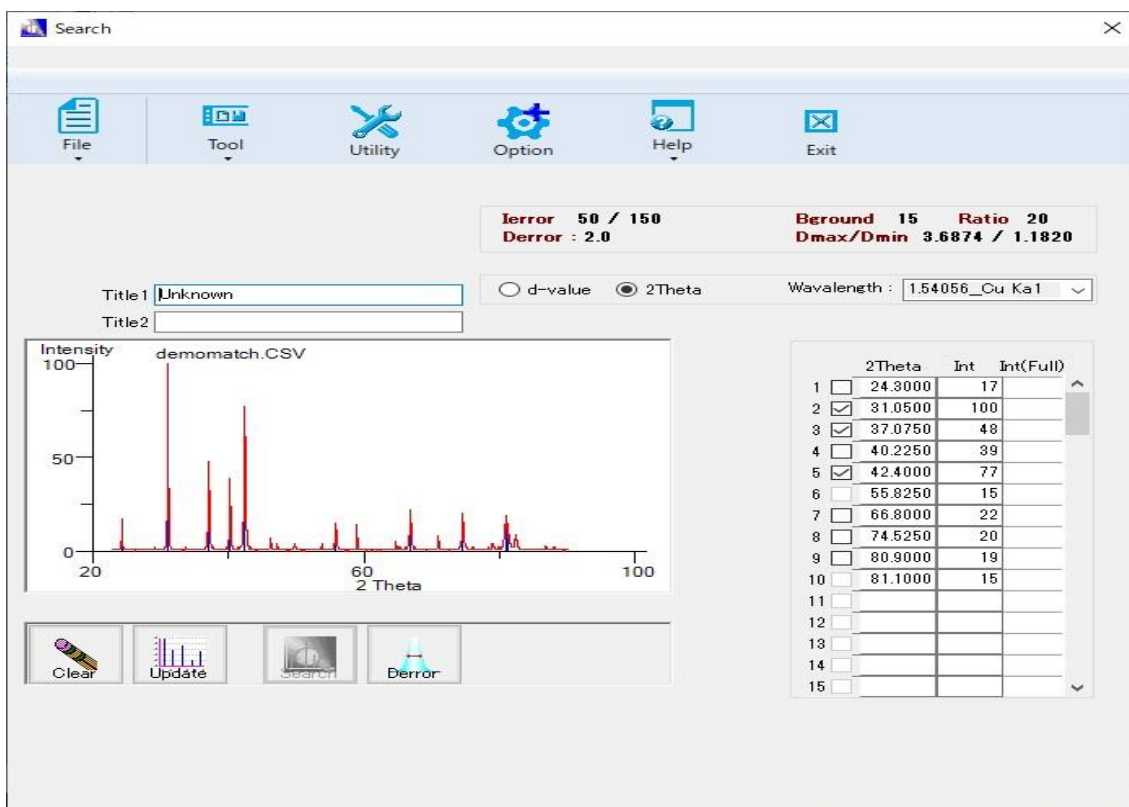
- ③ 画面上で生データを表示して任意にピークデータを追加削除するには、別プログラム“XViewer”を使用できます。メニューバー[File][Load][Raw Data]を選択し、生データファイルを選択すると、“XViewer”画面が表示されます(“XViewer”の操作方法は別紙参照)。



(図 8:XViewer での生データ)

“XViewer”のメニューバー[File][Back to XSearch]を選択すると、XSearch 画面に戻り、選択された生データファイルおよび検索されたピークデータが表示されます。

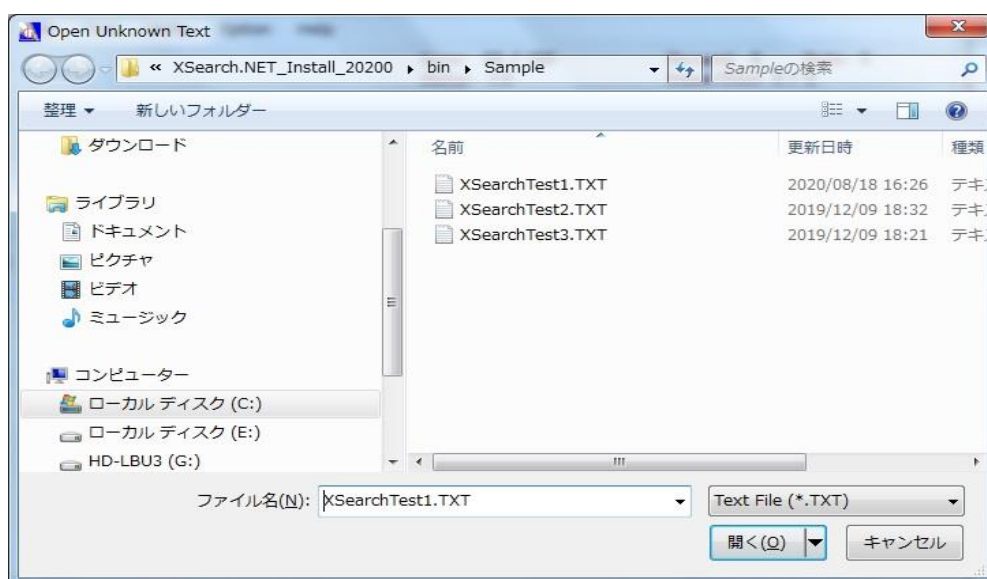




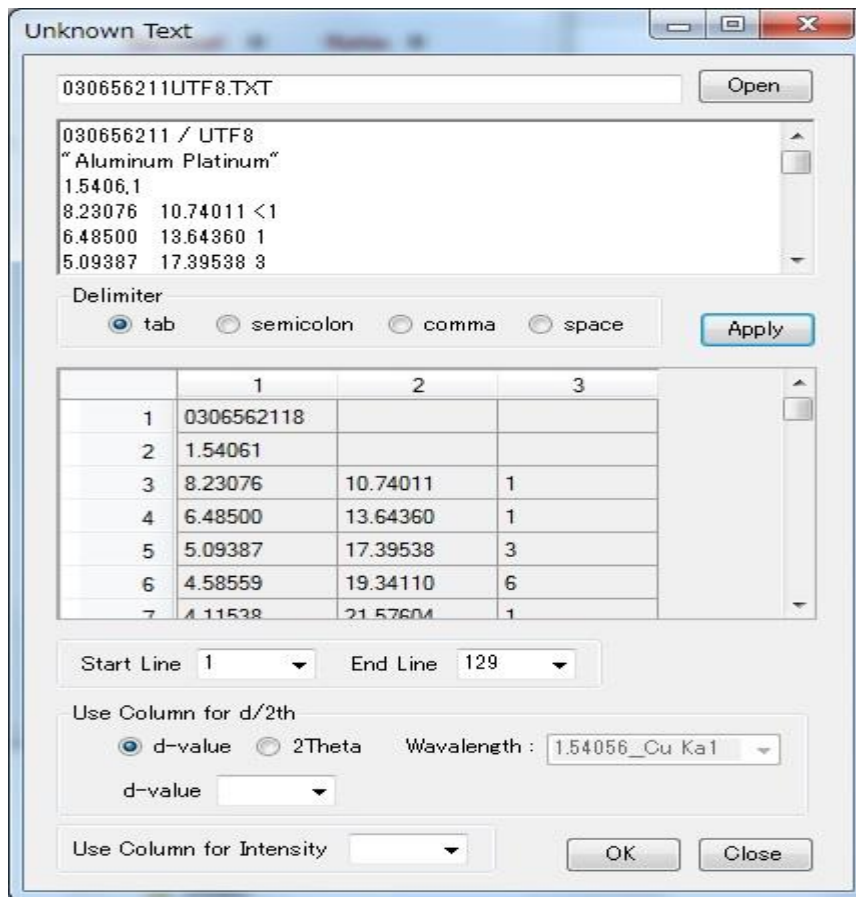
(図 9:XSearch での生データとピークデータ)

### 3.3 ピークデータ(Unsupported Text Format)のロード

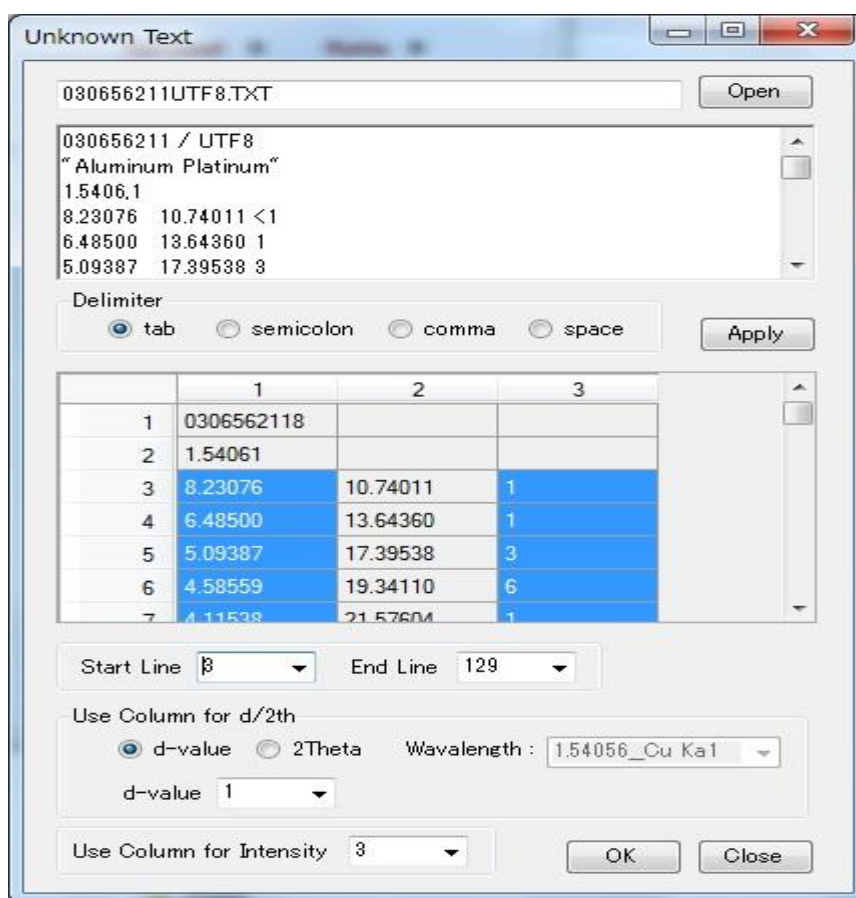
- ① ピークデータファイル(テキストファイル)のフォーマットについて、XSearch でのサポートの有無が不明の場合は、メニューバー[File]\_[Load]\_[Unknown Text]を選択し、ピークデータファイルを選択して下さい。



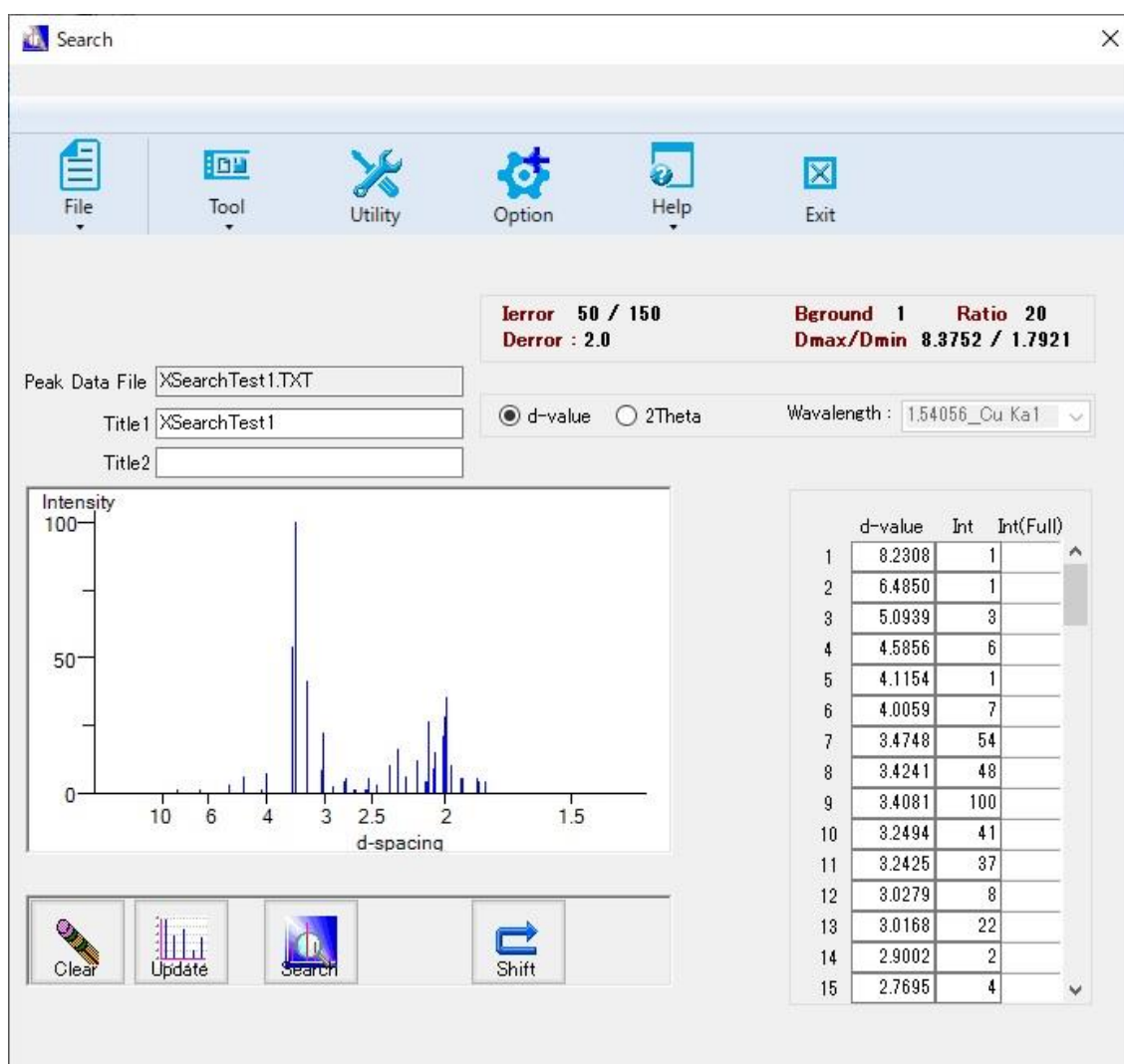
- ② ピークデータファイルを選択すると、[Unknown Text]画面の上部ボックスにデータが貼り付けられ、区切り記号を選択して[Apply]ボタンをクリックすると、選択した記号で区切られたデータが下部ボックスに表示されます。



- ③ 必要データの範囲を選択するため、[Start Line (行)], [End Line (行)], [d-value (列)], [Intensity (列)]をそれぞれ指定し、[OK]ボタンをクリックすると、選択された範囲内の d-value および Intensity がサーチフォームに表示されます。

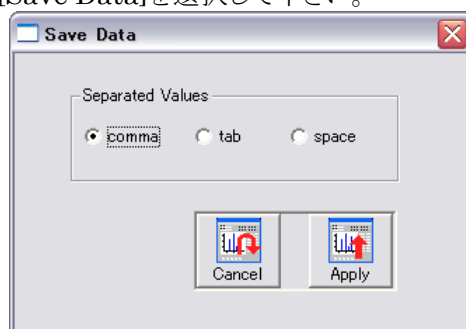


- ④ サーチフォームでデータを確認し、[Close]ボタンをクリックすると、[Unknown Text]画面を閉じることができます。 [Open]ボタンをクリックすると、新たに別のピークデータファイルを読み込んで表示することができます。（[Unknown Text]画面を閉じるまでは、サーチフォーム画面上での操作を行うことはできません。）



### 3.4 ピークデータの保存

- ① メニューバー[Tool]\_[Save Data]を選択して下さい。



(図 10: Save Data ダイアログ)

- ② データ間の区切り記号(デリミッター)を選択して下さい。
- ③ [Apply]ボタンをクリックすると、名前を付けて保存できます。

## 4. User Library

検索対象データベースには、「PDF-2/4 データベース」および「User Library」があります。「User Library」は、ユーザーが任意にデータを追加・変更・削除して作成することができるデータベースです。

### 4.1 User Library 作成のためのインポート

「User Library」は、データをインポートすることにより作成され、XSearch の画面上のデータをインポートする方法、選択したファイルからデータをインポートする方法、選択したフォルダー内のすべてのファイルからデータをインポートする方法があります。

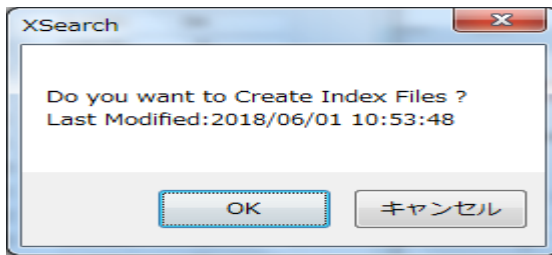
#### 4.1.1 画面上のデータをインポート

The screenshot shows the XSearch software interface. The 'File' menu is open, and the 'User Library' option is selected, which has opened a sub-menu with 'Import' selected. The 'Import' sub-menu is also open, showing 'Current Data', 'Select File', and 'Select Folder' options. The main window displays a peak data table and a d-spacing plot.

	d-value	Int	Int(Full)
1	4.1000	23	
2	3.8800	5	
3	3.5500	54	
4	3.3300	25	
5	3.1400	32	
6	3.0520	100	
7	2.9390	16	
8	2.5060	42	
9	2.2920	10	
10	2.1360	11	
11	2.1010	6	
12	2.0460	10	
13	1.9330	2	
14	1.9170	38	
15	1.8740	9	

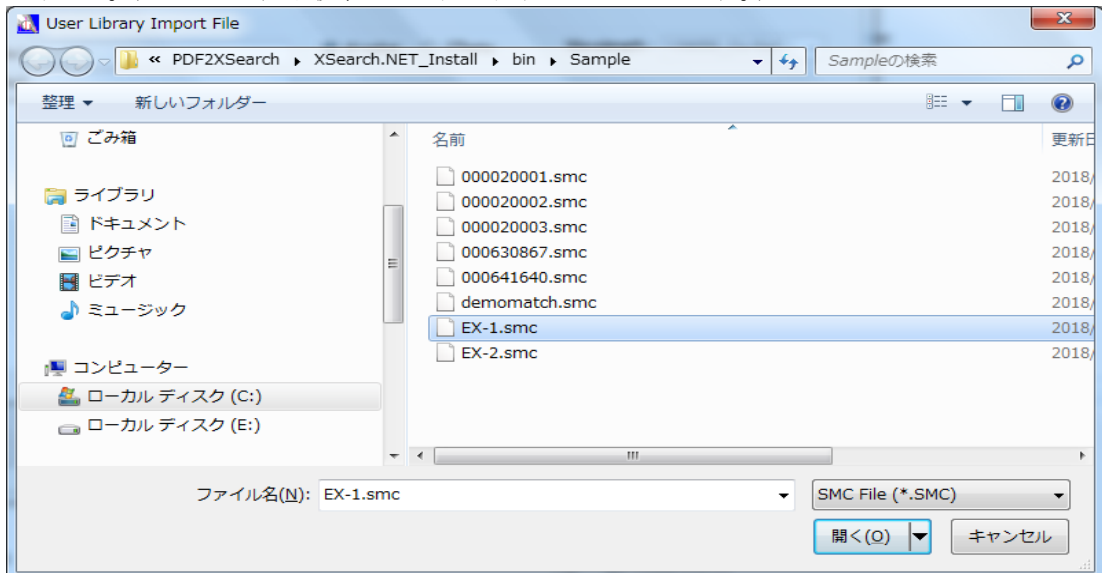
メニューバー[File]\_[User Library]\_[Import]\_[Current]を選択し、XSearch の画面上に表示されているピークデータを、「User Library」にインポートします。

インポート終了後、「User Library 検索用インデックスファイル」の作成(再作成)実行の有無についてのダイアログボックスが表示されますので、[OK]ボタンをクリックして作成を実行して下さい。 [キャンセル]ボタンをクリックすると「User Library 検索用インデックスファイル」が最新データに基づいて作成されず、インポートしたデータは検索結果に反映されません。 キャンセルして後で一括して作成される場合は、メニューバー[File]\_[User Library]\_[Create Index File]を選択して、「検索用インデックスファイル」を作成して下さい。



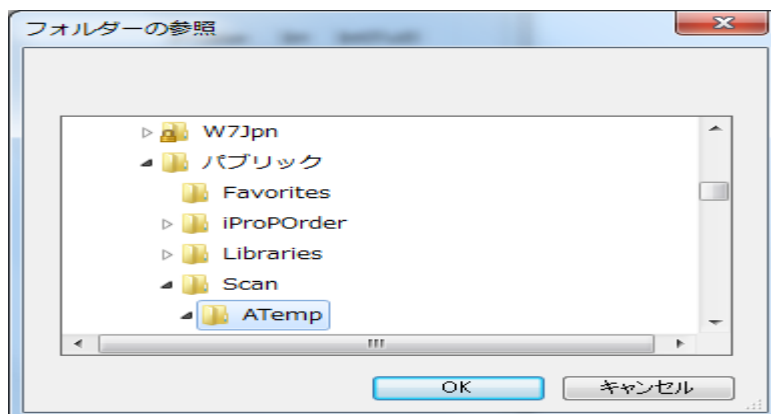
#### 4.1.2 単一のデータファイルをインポート

メニューバー[File][User Library][Import][Select File]を選択し、インポートファイル(\*.smc)を選択して、画面上に表示されたピークデータを「User Library」にインポートします。インポート終了後、「User Library 検索用インデックスファイル」の作成(再作成)実行の有無についてのダイアログボックスが表示されますので、[OK]ボタンをクリックして作成を実行して下さい。(インポート終了後、データ表示画面はクリアされます。)

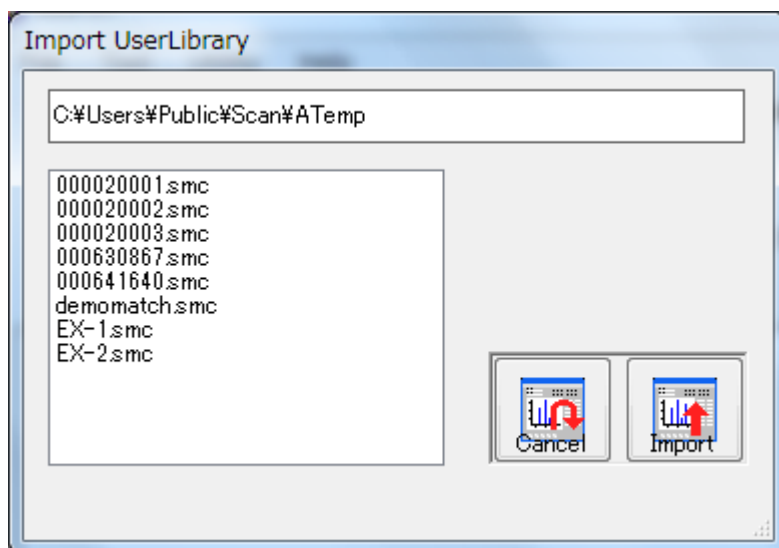


#### 4.1.3 フォルダー内のデータファイルを一括してインポート

メニューバー[File][User Library][Import][Select Folder]を選択し、フォルダーを選択してフォルダー内のインポートファイル(\*.smc)を表示します。



[Import]ボタンをクリックし、表示されたすべてのインポートファイル(\*.smc)を「User Library」にインポートします。インポート終了後、「User Library 検索用インデックスファイル」の作成(再作成)実行の有無についてのダイアログボックスが表示されますので、[OK]ボタンをクリックして作成を実行して下さい。



#### 4.2 User Library 作成のためのインポートファイル(\*.smc)の仕様

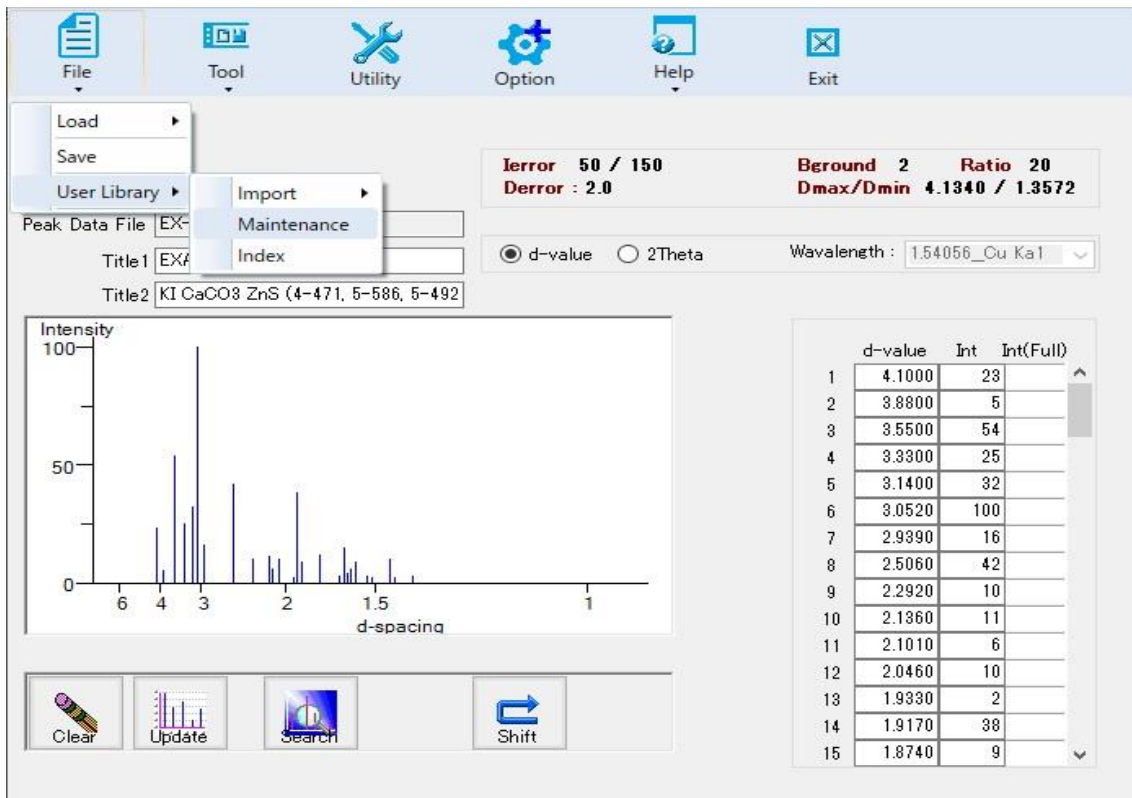
Title1		ヘッダー(何行でも可)
Title2		
.....		
<Peak>		データの開始:<Peak>の記述が必須
3.550,	54	面間隔値, 強度
3.330,	25	
3.140,	32	
3.052,	100	
2.939,	16	
.....		空白行:ファイルの終了

なお、「面間隔値」および「強度」のデータの直前に<Peak>の記述行が存在しない場合は、読み取りエラーとなり、インポートすることができません。

また、インポートするデータは、「ヘッダー」および「ピーク」のみとなり、<Peak>の記述行以前のデータはすべて「ヘッダー」とみなされ、以後のデータはすべて「ピーク」とみなされます。「ヘッダー」および「ピーク」ともに行数の制限はありません。

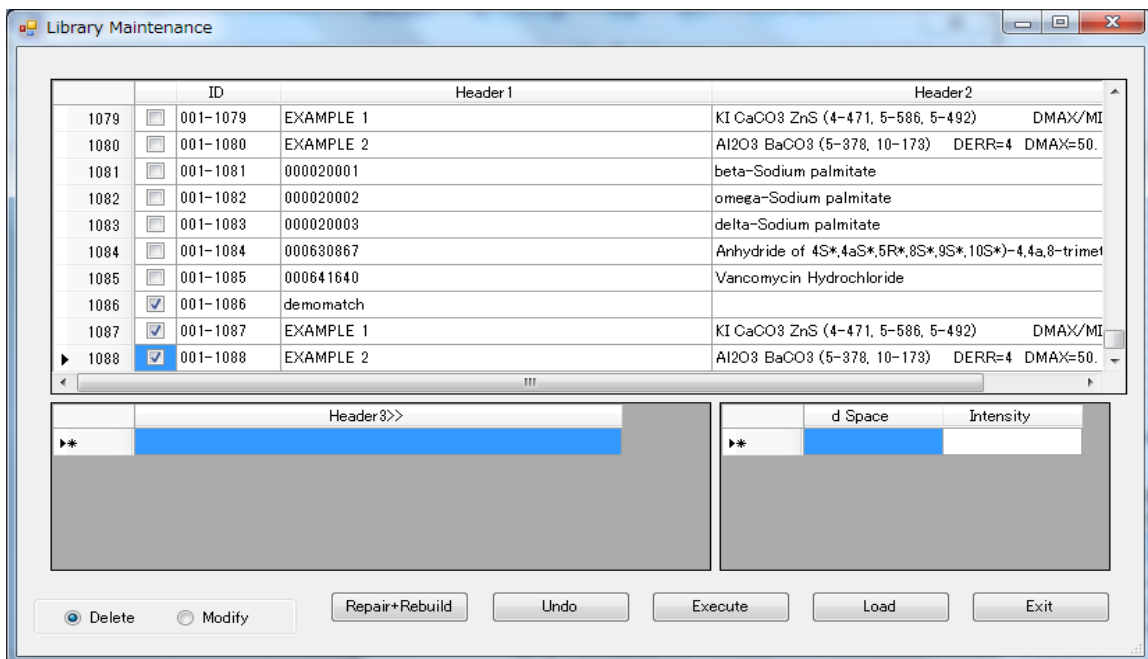
#### 4.3 「User Library」の保守

メニューバー[File]\_[User Library]\_[Maintenance]を選択して、「User Library」データの[削除]および[変更]を実行することができます。



#### 4.3.1 「User Library」データの削除

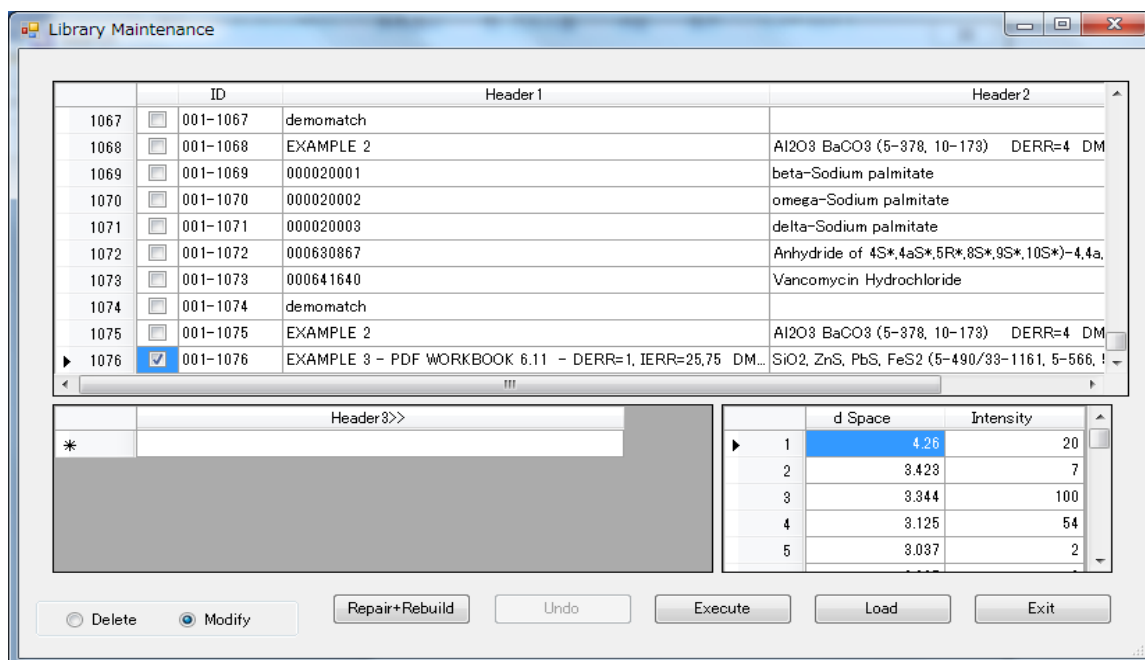
画面左下の[Delete]ボタンを選択し、削除するデータ行のチェックボックスをチェックして、[Execute]ボタンをクリックすると、「User Library」から削除されます(複数データの削除も可能です)。実行後は「User Library 検索用インデックスファイル」が再作成されます。





#### 4.3.2 「User Library」データの変更

画面左下の[Modify]ボタンを選択し、変更するデータ行のチェックボックスをチェックすると、[Header1(1行目)],[Header2(2行目)],[Header3(3行目以降)],[d値],[Intensity値]が表示されます。変更入力後、[Execute]ボタンをクリックすると、「User Library」は変更された内容に更新されます。実行後は「User Library 検索用インデックスファイル」が再作成されます

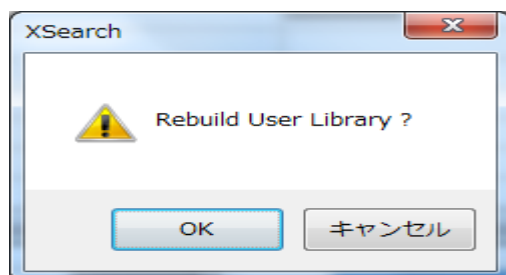


#### 4.3.3 [削除]および[変更]処理の取消し

[Undo]ボタンをクリックすると、「User Library」のデータが、[削除]および[変更]処理の直前の内容に戻ります(取消しは直前処理1回のみ可能です)。実行後は「User Library 検索用インデックスファイル」が再作成されます。

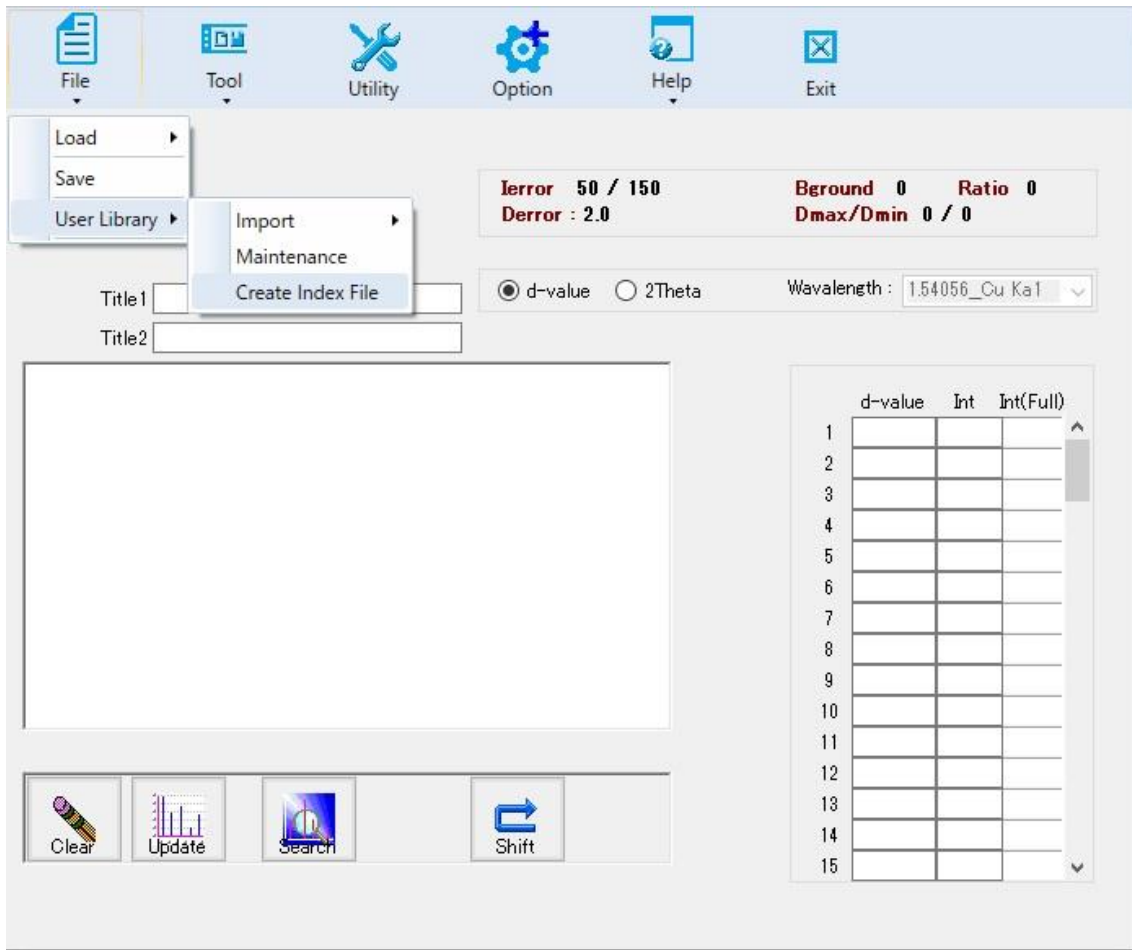
#### 4.3.4 「User Library」データの[修復]および[再編成]処理

[Repaire + Rebuild]ボタンをクリックすると、まず、「User Library」データを照合し、不整合なデータなどについては[修復]を試みます。[修復]処理終了後、「User Library」データの[再編成]処理実行の有無についてのダイアログボックスが表示され、[OK]ボタンをクリックすると[再編成]処理が実行されて「User Library 検索用インデックスファイル」が作成されます。[キャンセル]ボタンをクリックすると、[再編成]処理は実行されませんが、「User Library 検索用インデックスファイル」は再作成されます。



#### 4.4 「検索用インデックスファイル」の作成

メニューバー[File]\_[User Library]\_[Create Index File]を選択して、「User Library」を対象とした「検索用インデックスファイル」を作成(再作成)します。



## 5. Search の条件設定と実行

### 5.1 データの絞込み

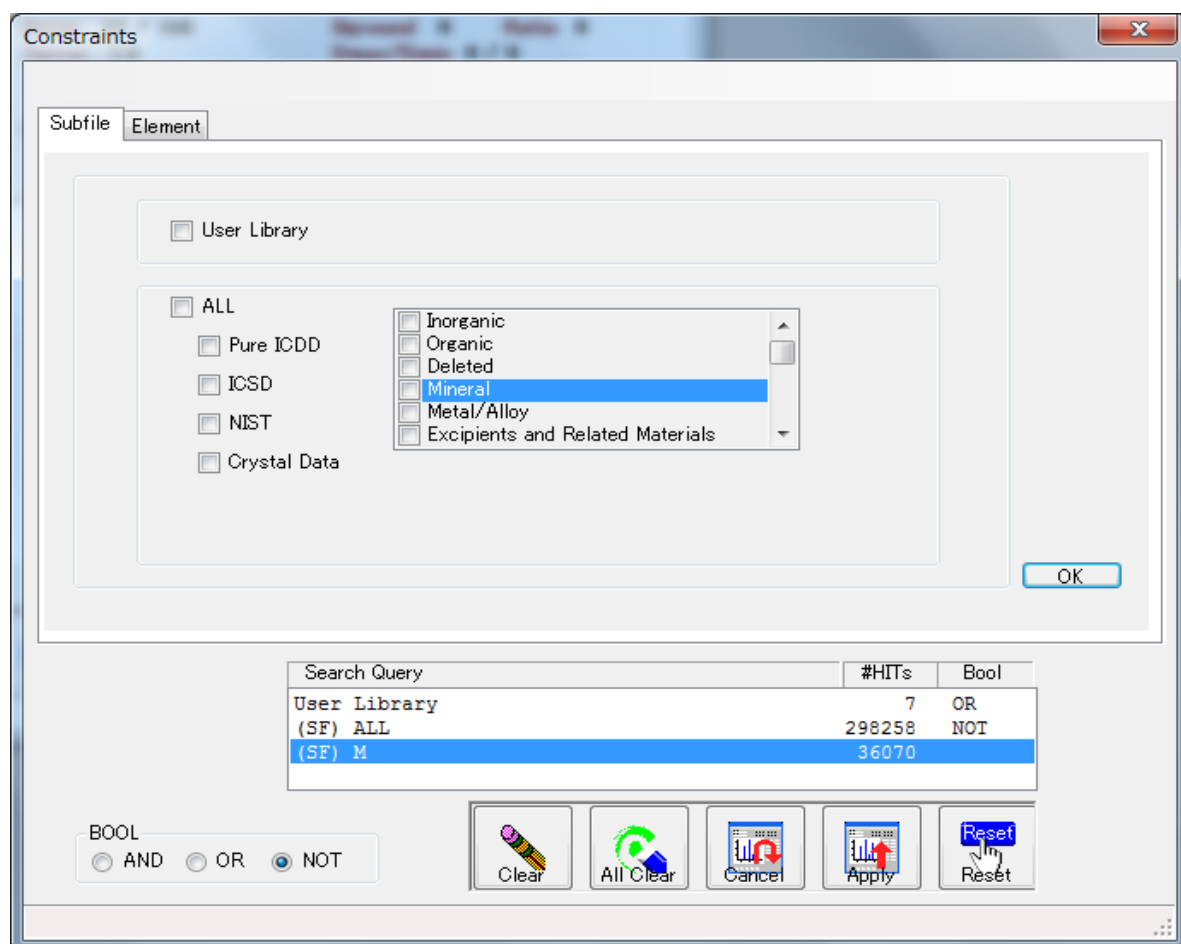
PDF-2/4 データベースには ICDD が収集した実測パターン(一部計算パターンも)以外に、結晶座標データから計算で作成されたパターン(ICSD、MDS-Pauling File)も含まれています。また、ICSD と MDS のコレクションに収集された物質の多くは ICDD の実測データと重複します。

PDF-2/4 には Inorganic、Organic の大きなサブファイルの他に、Mineral、Zeolite、Superconductive materials などの比較的小さなサブファイルがあります。データベースの各エントリーには Inorganic または Organic のサブファイル ID と共に、他のサブファイルの ID もアサインされ、複数持つ場合があります。

コレクション、サブファイルを選択することにより、関心のない物質が検索に含まれることを妨げることができます。

メニューバー[Tool]\_[Constraint]を選択します。

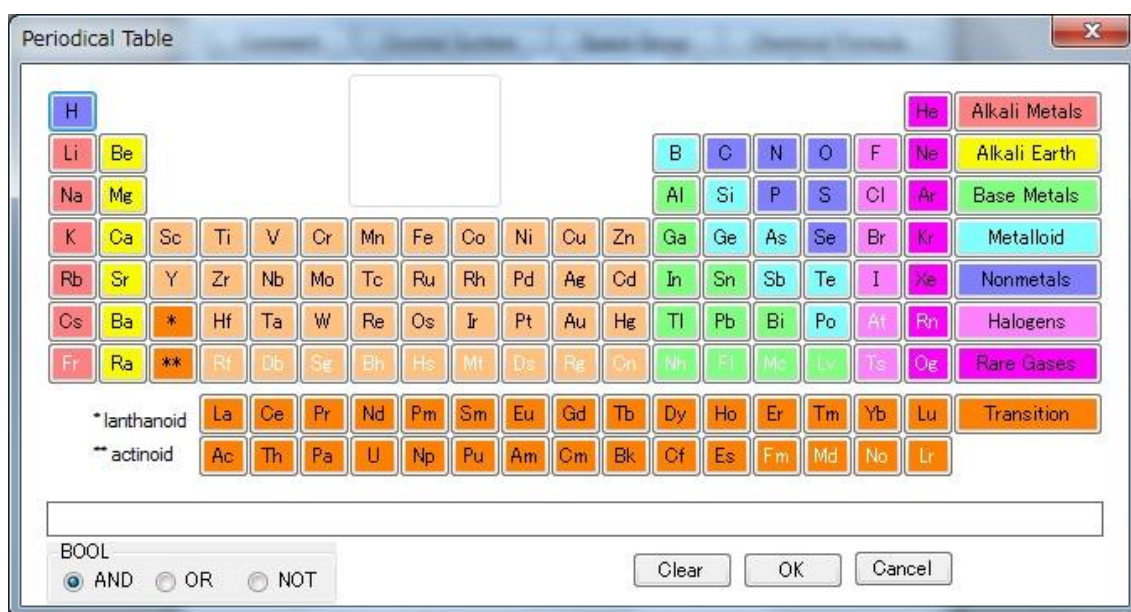
#### ① サブファイルによる絞込み



(図 11:Subfile タブ)

サブファイルを選択し、[OK]ボタンをクリックします。なにもチェックをいれなければ(デフォルトで)、**User Library** ファイル以外のすべてが選択されています。特定のサブファイルを除外するときに、**All** のチェックボタンが役立ちます。例えば、**ALL** と **Mineral** をチェックして、**Bool** 演算子を **AND** から **NOT** に変更すると、**Mineral** だけを除外して **Search/Match** を実行できます。(なお、**User Library** ファイルについては、選択時に常にリストの1行目に **User Library** のデータ件数が表示されます。)

## ② 元素記号による絞り込み



(図 12: Element タブ)

- ◆ 同族列元素と第Ⅲ族遷移元素の集合を選択できます。選択肢は
  - Alkali Metals (アルカリ金属)
  - Alkali Earth (アルカリ土類金属)
  - Base Metals (卑金属)
  - Metalloid (半金属)
  - Nonmetals (非金属)
  - Halogens (ハロゲン)
  - Rare Gases (希ガス)
  - Transitions (ランダノイド、アクチノイド)

周期表の元素記号をクリックすると、条件式のボックスに書き込まれます。周期律表の右下にある[OK]ボタンを選ぶと周期表が閉じ、Search ダイアログの OK ボタンをクリックすると、各元素記号の検索を実行できます。

蛍光 X 線による元素情報を持っていれば、その情報を検索に反映させることができます。元素記号を選択し、クリックして下さい。存在する元素、存在するかもしれない元素、存在しない元素にはそれぞれ、AND、OR、NOT 演算子で対応できます。

### ③ ブール演算子の使い方



(図 13:ブール演算子の変更)

ブール演算子を選択し、複数条件を指定した後、[Apply]ボタンをクリックして絞込みを行います。

#### ・条件式の削除

[Clear]ボタンを押すと、条件式を行単位で削除できます。

[All Clear]ボタンは、全ての条件式を削除でき、クエリーを白紙に戻すことができます。

#### ・演算子について

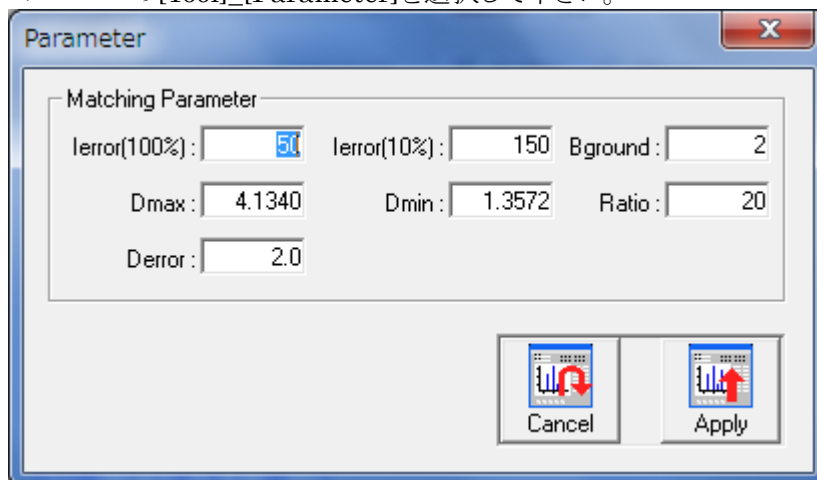
条件式を結合させる演算子は、BOOL オプションのボタンで演算子(AND/OR/NOT)を選びます。検索を実行すると、その演算子が[条件式]の[Bool]に書き込まれます。

また、[条件式]中の[Bool]演算子を直接変更する場合は、その行を選択して右クリックすると演算子メニューが表示され、他の演算子に変更できます。

## 5.2 パラメータの設定

サーチ・マッチで使用するパラメータを設定します。横軸方向のエラーウィンドウ(derror)、縦軸方向のエラーウィンドウ(Ierror)、プリサーチに使用するラインの閾値(Ratio)、検索領域の設定(dmax/dmin)、ノイズレベルの設定(background)があります。

### ① メニューバーの[Tool]\_[Parameter]を選択して下さい。

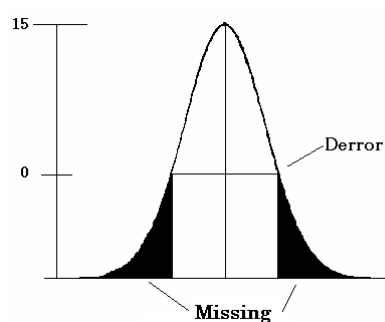


(図 14:Parameter ダイアログ)

## パラメータの内容

### derror

未知パターンのラインと該当するデータベースパターンのラインを照合するときに使われる横軸方向の誤差ウィンドウを設定できます。d 値のインデックスファイルには各パターンの最大 24 本の強いラインが  $1000/d$  が入っています。例えばデータベースパターンの、 $d=3.0000$  のラインは 333.33 としてインデックスされています。derror が 2.0 に設定されれば、XSearch は未知パターンの  $d=3.0000$  のラインと一致するラインを 331.34~335.33 の範囲で探します。d=2.0 の誤差ウィンドウは  $2\theta$  角度の 10 度で約  $\pm 0.1$  度となります。未知パターンのラインを中心に derror を半値幅とした正規分布を想定して一致度を測ります。分布の中央にデータベースパターンの該当するラインが位置すれば、高い点が与えられ、中心から離れるに連れて、点が低くなり、半値幅位置でゼロになります。それ以上離れていれば(つまりラインは一致していない)マイナスの点数が与えられます。



(図 15: derror 分布: 半値幅で 0)

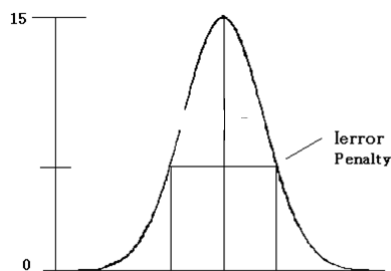
### Ierror

縦軸方向の誤差ウィンドウを設定できます。相対強度 10%と 100%でのウィンドウ幅を設定することにより全強度範囲を可變的に設定できます。しかし、例えば 200%に設定すると、相対強度 10%の小さなラインではウィンドウは-10%から 30%となり、現実的な範囲ではなくなります。そこで XSearch では幾何中心をウィンドウを使っています。

$$\frac{I}{I_{min}} = \frac{I_{max}}{I}$$

$$I_w = I_{max} - I_{min}$$

ここで、I は相対強度、 $I_{max}$ と $I_{min}$ は誤差ウィンドウの上限と下限です。 $I_w$ はウィンドウ幅であり、Ierror の倍の値が入ります。例えば、相対強度 10%での誤差ウィンドウは 2.4~42.4 に設定されます。強度が大きく変化することもありますので、Ierror は derror ほど厳しくなく、マイナスの点が与えられることはありません。



(図 15: Ierror 分布)

## Ratio

プリサーチに使用するラインの閾値を設定します。ここで設定された値以上の相対強度を持つラインがデータベースパターンに 80%以上の強度を持っていれば、一致する候補と見做されます。データベースのパターンが未知パターンに混合していれば、その成分の最強ラインは当然相対強度 100%以下であり、またその他のラインもそれなりに縮小された比率で未知パターンに含まれているはずですが、このような状況を考慮に入れながら、**Ratio** の値を操作しなければなりません。あまり低い値は多くの候補の中に真の候補が埋もれるかもしれません。20 からスタートするのが無難な選択と思います。

## Background

バックグラウンドを設定し、この値よりも低い相対強度を持つラインはノイズと見做され、検索には反映されません。デフォルトで未知パターンの最小強度のラインの値が与えられます。

## Dmax と Dmin

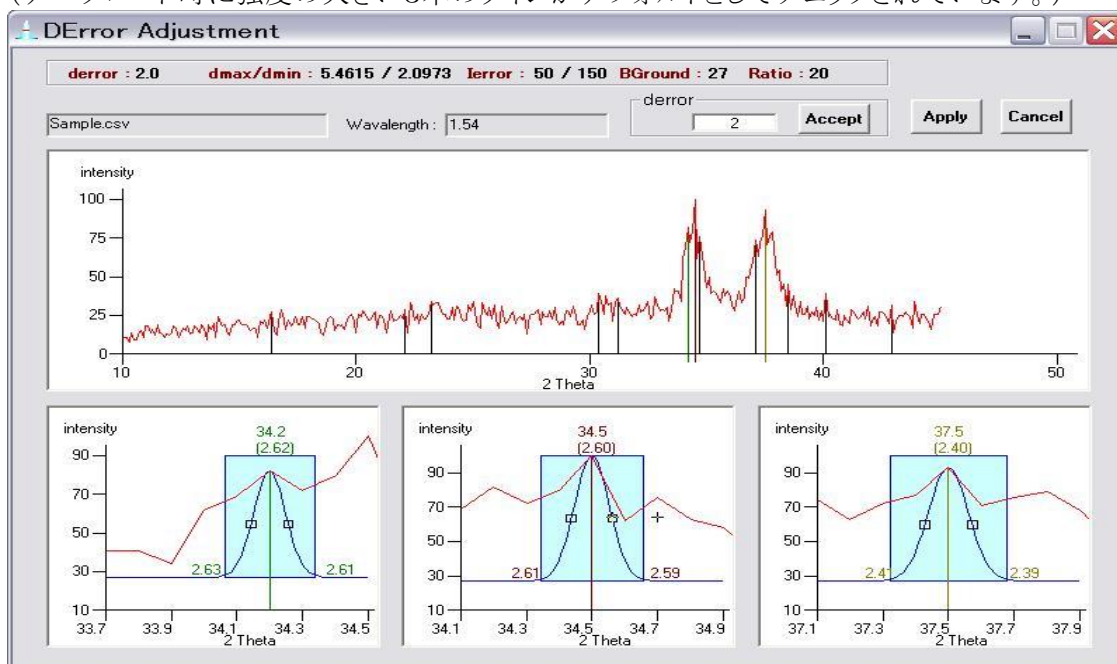
検索の対象となる範囲を設定できます。デフォルトで未知パターンの最大と最小の領域が設定されます。

- ② [Apply] ボタンをクリックし、パラメータを設定します。

### 5.3 グラフィック上での derror の調整

生データを参照しながら、「derror」を変更できます。

- ① メニューバー [File]\_ [Load]\_ [Raw Data & Peak Data] を選択し、生データファイルおよびピークデータファイルを選択してロードします。
- ② 「derror」を変更する際に参照したいラインを、最大3本までチェックし、メニューバー [Tool]\_ [Define derror] を選択すると、次図の画面が表示されます。なお、強度の値が「Background」の値以下のラインは、チェックできません。(データロード時に強度の大きい3本のラインがデフォルトとしてチェックされています。)



(図 16: Derror Adjustment ダイアログ)

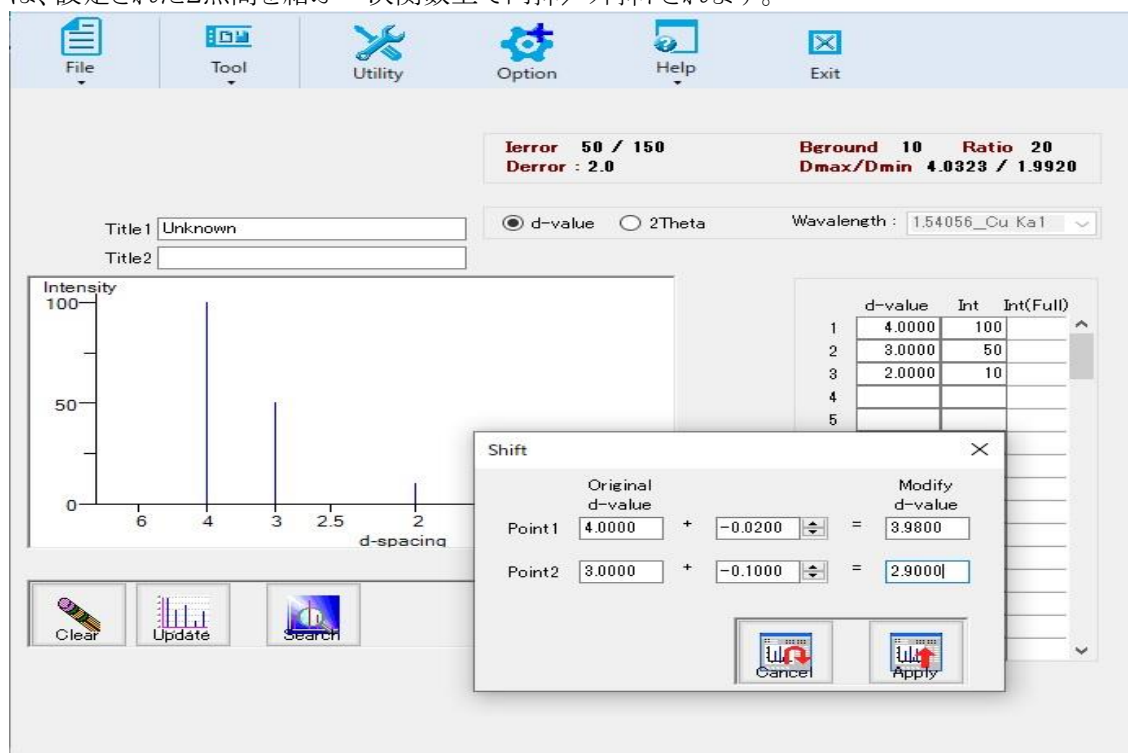
- ③ 上部画面にピークデータおよび生データ、下部画面にチェックしたライン、生データ、「d error」の範囲(青色)が表示されます。「derror」の範囲は、ピークをもとにガウス関数により描かれた正規分布曲線の $3\sigma$ (シグマ)の範囲内です。
- ④ 曲線上のボックス内をクリックして左右にドラッグすると、「derror」の範囲が増減し、増減後の「derror」が上部テキストボックスに表示されます。
- ⑤ 「derror」を直接入力して変更することもできます。上部テキストボックスに設定したい「d error」を入力して[Accept]ボタンをクリックすると、下部画面に入力された「derror」の範囲が表示されます。
- ⑥ [Apply]ボタンをクリックすると、「derror」の変更が確定されて、サーチフォームに戻ります。[Cancel]ボタンをクリックすると、「derror」は変更されず、サーチフォームに戻ります。

#### 5.4 ピーク位置の補正

- ① メニューバー[Tool]\_[Shift]を選択して下さい。
- ② シフト画面より、シフトの幅を入力できます。

[Original d-value]にシフト前のd値を入力し、[Modify d-value]にシフト後のd値を入力、または中間のボックスにシフトの幅を入力して下さい。

d 値は横軸等間隔ではありませんので、等間隔の 20 でシフト値を計算後に d 値に戻しています。1ポイントのみ入力した場合、すべてのd値がシフトされます。2ポイント設定の場合、d値は、設定された2点間を結ぶ一次関数上で内挿/外挿されます。



(図 17:Shift ダイアログ)



- ③ 設定後、シフトされたデータおよびチャートが表示されます。[Cancel]ボタンをクリックすると、シフト実行の直前に戻ります。[Search]後に[Subtract]を実行すると、シフトの実行もキャンセルも不可となります。(Searchを実行してもSubtractしていなければ、シフトの実行もキャンセルも可能です。)

The screenshot shows the Search dialog box with the following details:

- Menu Bar:** File, Tool, Utility, Option, Help, Exit
- Status Bar:** Error 50 / 150, Bground 10, Ratio 20, Dmax/Dmin 4.0129 / 1.8726
- Input Fields:** Title1: Unknown, Title2: (empty)
- Radio Buttons:**  d-value,  2Theta
- Wavelength:** 1.54056\_Cu Ka1
- Plot:** Intensity vs d-spacing. Peaks are visible at d-spacing values of approximately 3.98, 2.90, and 1.88.
- Table:**

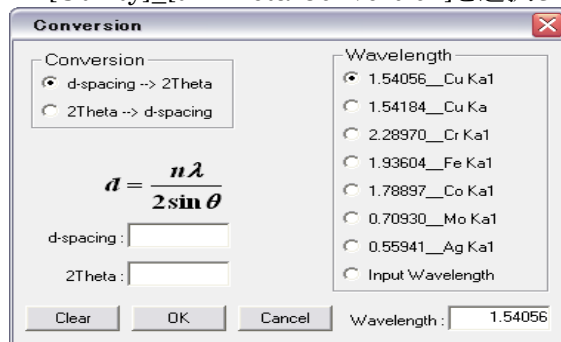
	Modify d-value	Original d-value	Int	Int(Full)
1	3.9800	4.0000	100	
2	2.9000	3.0000	50	
3	1.8798	2.0000	10	
4				
5				
6				
7				
8				
9				
10				
11				
12				
13				
14				
15				
- Buttons:** Clear, Update, Search, Shift, Cancel

(図 18:Shift から戻った Search ダイアログ)

## 5.5 ユーティリティ

d 値と 2θ 間の変換するカリキュレータです。PDF2plusX for Windows に付けられた機能と同じものです。

- ① メニューバー[Utility]\_[d/2Theta Conversion]を選択して下さい。



(図 18: Conversion ダイアログ)

- ② 変換すべき値に応じて、[d-spacing→2Theta]または[2Theta→d-spacing]のいずれかのボタンをクリックして下さい。
- ③ デフォルトは **CuKa1** です。これ以外の線源の値を使用するのであれば、波長を選択して下さい。リストされた線源以外を使用するのであれば、[Wavelength]ボックスに任意の波長を入力できます。
- ④ 変換元の数値を上側のボックスに入力し、[OK]をクリックします。  
変換された数値が下側のボックスに表示されます。

## 6. Search(検索)の実行

### 6.1 Search(検索)

元素情報/サブファイルの指定とパラメータの設定が終われば、検索の準備が整いました。Search ボタンをクリックして下さい。ユーザーの未知パターンを使って類似するデータベースパターンを検索できます。検索対象のデータベースは、[ICDD (PDF-2/4)],[User Library],[Both (ICDD & User Library)]から選択することができます。

Search Form interface showing search parameters and results.

Peak Data File: EX-1.PAT  
Title1: EXAMPLE 1  
Title2: KI CaCO<sub>3</sub> ZnS (4-471, 5-586, 5-492)

Wavelength: 1.54056\_Cu Ka1

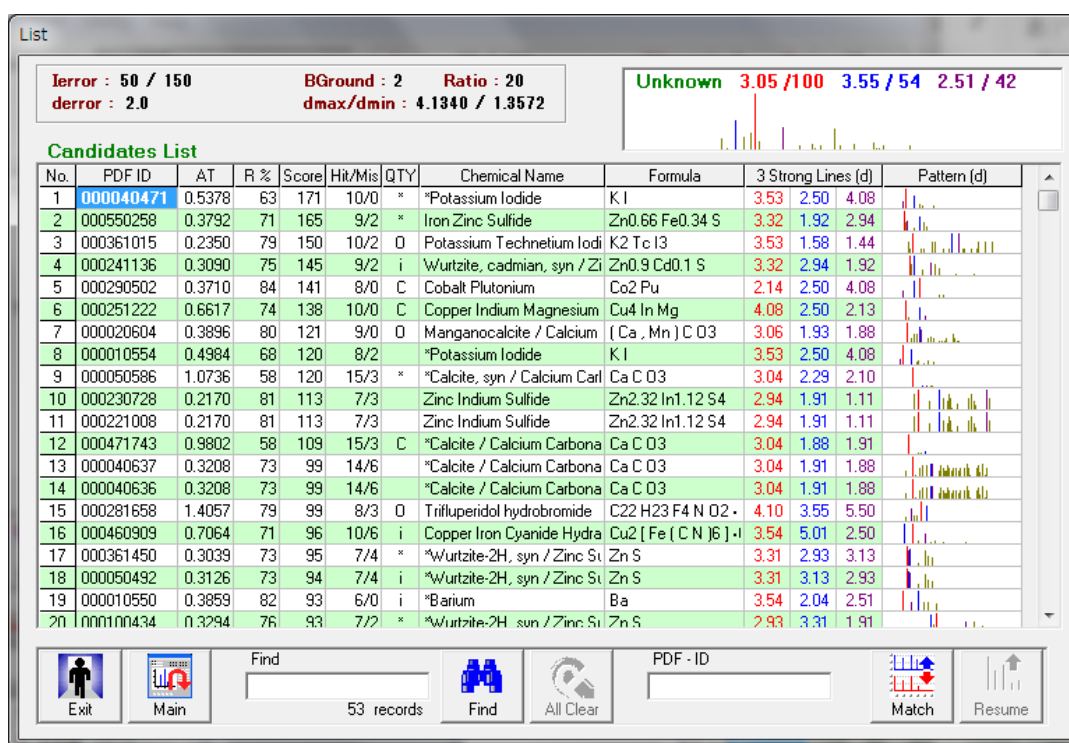
Intensity vs d-spacing graph.

	d-value	Int	Int(Full)
1	4.1000	23	
2	3.8800	5	
3	3.5500	54	
4	3.3300	25	
5	3.1400	32	
6	3.0520	100	
7	2.9390	16	
8	2.5060	42	
9	2.2920	10	
10	2.1360	11	
11	2.1010	6	
12	2.0460	10	
13	1.9330	2	
14	1.9170	38	
15	1.8740	9	

Search Object : 122611.  
'ICDD'

(図 19:Search Form)

プログレスバーが数秒間表示された後、Candidates List(候補リスト)が表示されます。



(図 20: Candidates リスト)

## 6.1 検索結果のテーブルのヘッダー

### AT%

Attenuation の意味であり、データベースパターンを未知物のパターンに照合するときに、XSearch が最善と判断したスケールファクターです。

### Score

未知パターンとデータベースパターンを照合し、データベースパターンのライン 1 本 1 本の点数を計算し、総和した値です。Candidate List はこの Score 順にリストされます。

### Hit/Miss

パターンの照合の結果、データベースパターンの該当するラインの本数／該当しないラインの本数を示します。該当する本数が少ない(または無い)ことに越したことはありませんが、バックグラウンドを若干上回る程度の相対強度のラインが多数 Missing としてカウントされることもあります。上記の Score を一致する Hit の本数で割った値が大きければ、未知パターンのデータ量の多くを説明していると考えられます。

### Names

候補のデータベースパターンの化学名／鉱物名( / を挟んで)がリストされます。データベースパターンが Common Phase サブファイルに含まれる物質であれば、名称の先頭に\*(アスタリスク)が付けられます。未知物の主成分が普遍的な物質である場合に、Common Phase の物質が目安として活用できます。

### 6.3 どの候補がよさそうか？

検索結果のリストには最大 200 件が入っています。リストは **Score** の値の順にならんでいます。しかし、**Score** が大きいに越したことはありませんが、最大のものが即ち一番可能性の高い候補と言うわけではありません。データベースパターンにはライン(ピーク)本数の多いエントリーもあれば、少ないものもあります。データベースのパターンの強度の低いラインがマッチングに多く使われていれば、**Score** もそれなりにおおきくなります。そこで、

- 1) ライン一本あたりの **Score** が大きい候補
- 2) **AT%**の大きい候補(70~120%が好ましい)
- 3) **Hit/Miss** の右側の数字(**Missing**)が少ない候補

に、注目すべきです。1)は使われているラインの帰属をできるだけ大きく解決していることになり、2)は強度のなるべく大きなラインから解決をはかるべきであり、3)は外れているラインが少ないことを意味します。

### 6.4 候補リストの操作

候補が多い場合、リスト検索用のテキストボックスに任意のテキストを入力し、**[Find]**ボタンをクリックすると該当するデータのみ表示されます。

リストからの検索の対象フィールドは**[PDF ID]**、**[Chemical Name]**、**[Chemical Formula]**で、検索方法は部分一致検索です。

#### ① 行サイズおよび列サイズの変更

リストの行サイズ(高さ)を変更する場合には、**Shift**キーを押しながら1列目の**No.**項目上を、マウスを上下にドラッグして下さい。列サイズ(幅)を変更する場合には、**Shift**キーを押しながら1行目のヘッダー項目上をマウスを左右にドラッグして下さい。

#### ② ラインマッチング

ラインマッチングさせるには、**[PDF ID]**をクリックして下さい。選択された**[PDF ID]**の表示が青色に変化します。複数の**PDF**を選択することも可能です。選択された**[PDF ID]**をもう一度クリックすると選択が取り消されます。

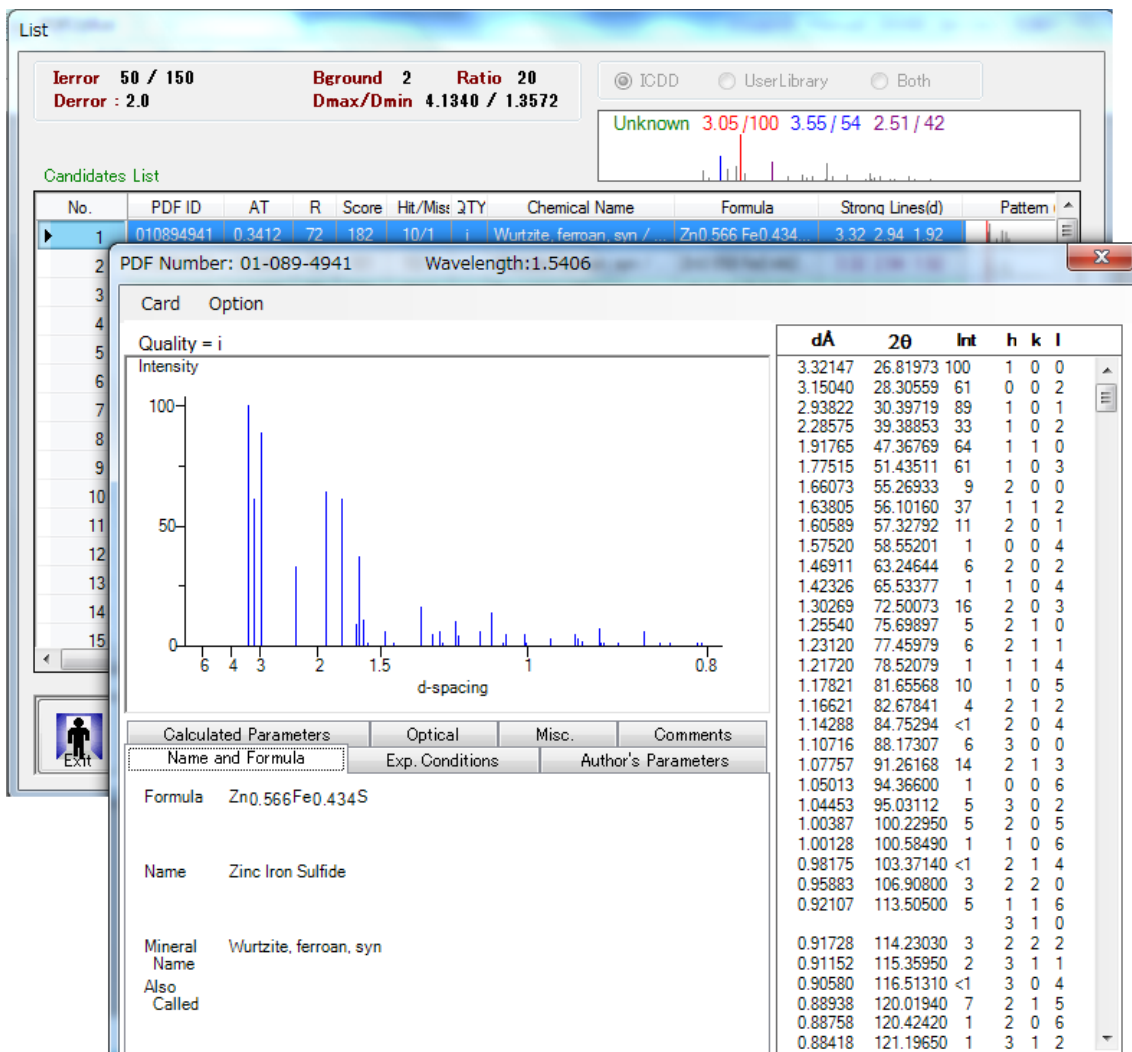
#### ③ 候補に入っていないデータベースパターンとの比較

想定していた物質が **Candidate List** に入っていないとき、**[PDF-ID]**ボックスからマッチング用 **PDF** を直接入力して **Score** を計算して確認できます。

入力後の **PDF** の扱いは、候補リストフォームから**PDF**を選択した場合と同様です。なお、**PDF**を直接入力した場合は、マッチングレポートフォームに表示される **PDF** データは直接入力したデータのみとなります。

#### ④ **PDF** カードの表示

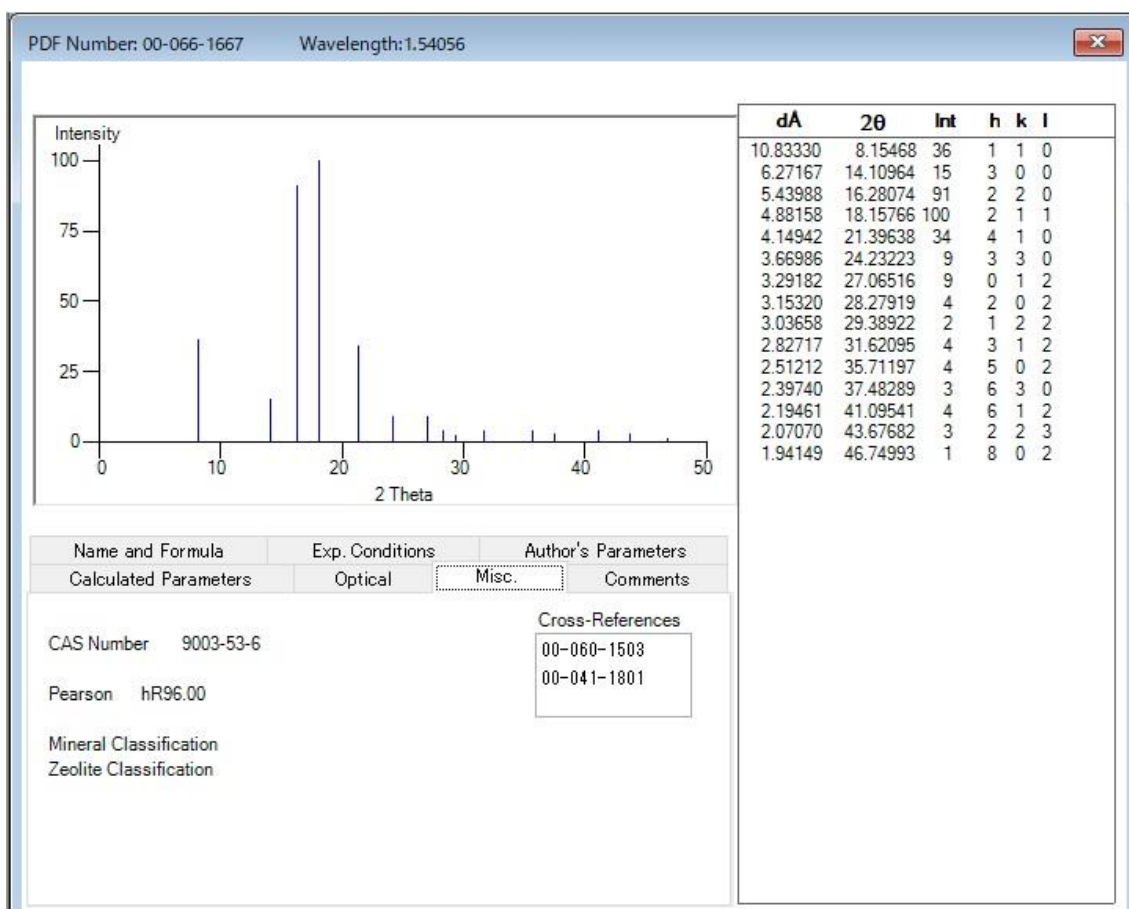
リストの**[No.]**をダブルクリックすると**PDF**カードが表示されます。



(図 21: PDF カードのディスプレイ)

⑤ Cross-Reference の表示

PDF Card によっては、Cross-Reference 情報が存在するデータがあります。  
この Cross-Reference を使って Delete された古いカードを参照できます。



⑥ [AtomWork]へのリンク

AtomWorkはPauling FileのJST/NIMS版というべき存在です。Pauling FileにはスイスのMPDS(Material Phases Data System)によって文献から抽出された結晶構造、状態図、物性データが収録されています。Pauling FileはJSTの資金によってデータ収集がおこなわれてきましたが、10年程前にいったん収集活動が中断されました。著作権はスイスのPaulingとJSTの両方にあります。その後、各々別個にデータを充実させており、粉末回折パターンを追加し、AtomWorkの名称で維持されています。JSTの権利がNIMSに移管され現在に至っています。

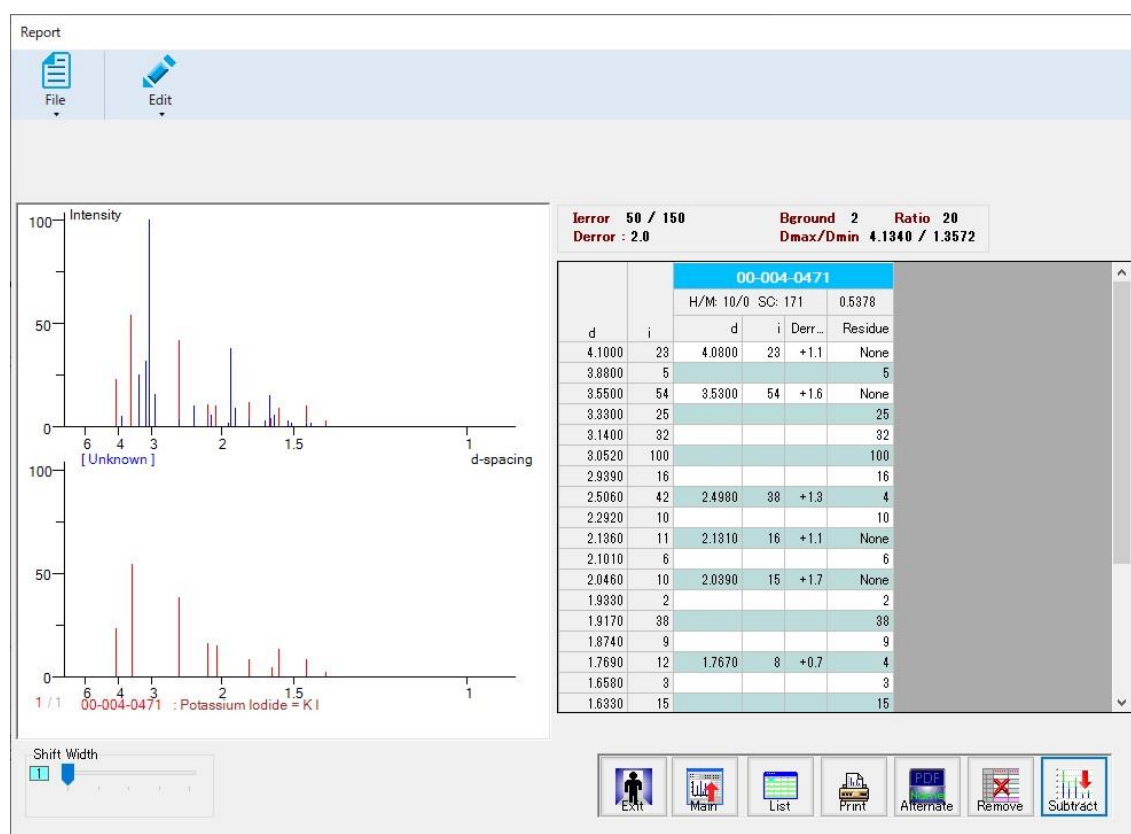
AtomWorkにリンクするには、Internet Explorerがコンピュータにインストールされ、インターネットに接続されていなければなりません。データカードのメニューバー[Option]\_ [AtomWork]を選択し、[Search by Elements]または[Search by Formula]を選択すると、データカードの元素記号または分子式を引数としてAtomWorkデータベースを検索します。

## 7. Match/Subtract と残差パターンの Search

ユーザーの未知パターンと PDF データベースパターンをグラフィックとテーブルでマッチさせ比較されます。

### 7.1 マッチング

候補リストフォームからPDF番号を選択またはマニュアル入力後、[Match]ボタンをクリックすると、下図のように表示されます。

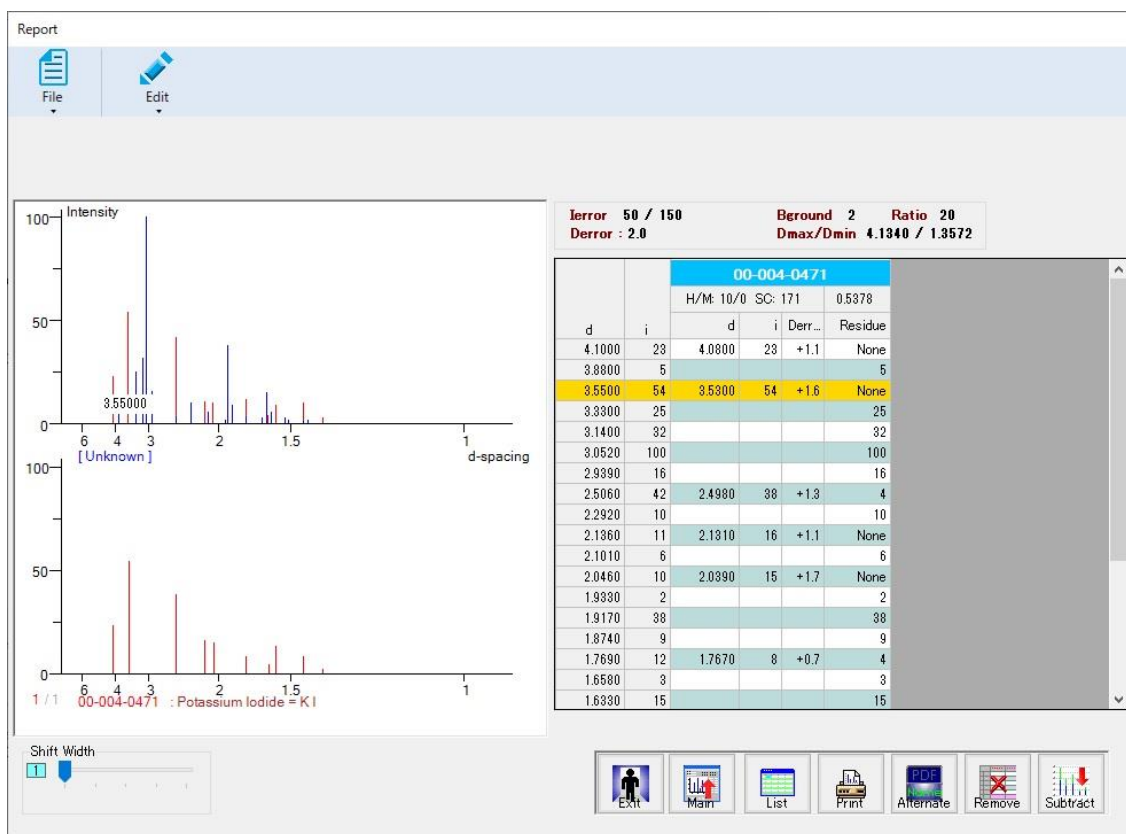


(図 22: Report ウィンドウ)

スクリーンの右側には、マッチングレポートフォームが表示され、マッチングの状況の詳細がディスプレイされます。Unknown のグラフでは、データベースパターンと一致するラインは赤で示され、マッチングに使われていないラインは青のまま残ります。

ピクチャー領域をクリックすると垂直のカーソルが描かれ、ピークとカーソルが重なるとグリッドの行が山吹色に変わります。





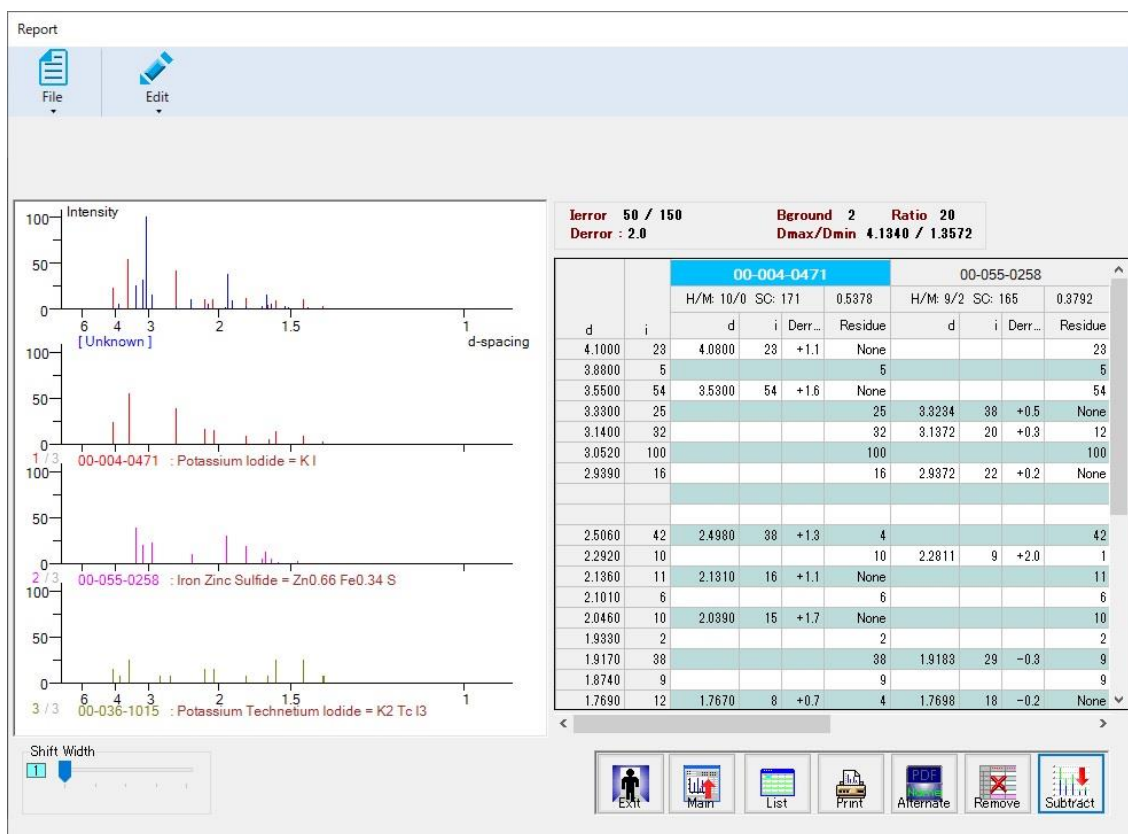
(図 23:オーバーラップしたカーソル)

## 7.2 Subtract (サブトラクト)

ユーザーパターンと PDF パターンの d 値が **derror** の範囲内で一致する場合、ユーザーパターンの強度から、データベースパターンの強度を差し引きます。**derror** の範囲より外にしか存在しなければ、外れている(**missing**)ことになります。引き算は行われず、強度値はそのまま残り、マイナスとして一致の点が与えられます。

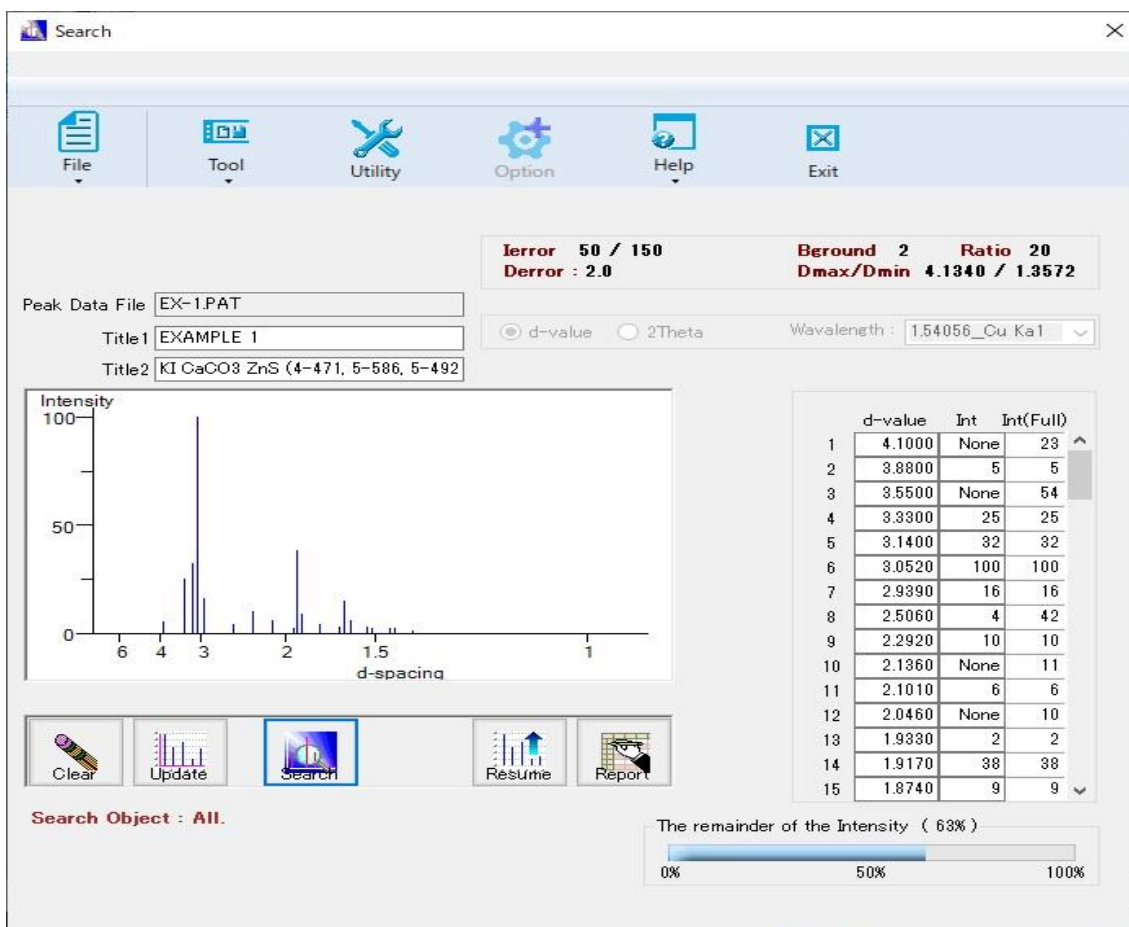
サーチマッチ及びサブトラクトは繰り返し行うことができます。サブトラクトされたパターンではサブトラクトされて強度ゼロになったラインは **Previous removed** のフラグが与えられます。残りのパターンを再検索したとき、データベースパターンに該当するラインが存在し、照合すべきラインの強度がない場合、**XSearch** は **previous removed** のフラグを見て、外れている(**missing**)とは判断せず、マイナスのポイントが与えられることはありません。

(複数表示されている場合があるため) サブトラクトすべき PDF ID を選択しなければなりません。



(図 24: サブトラクトするカードを選択)

[Subtract]ボタンをクリックするとサーチフォームに戻り、サブトラクト前およびサブトラクト後の強度と残存割合が表示されます。



(図 25: 残差パターンの Search Form)

この例ではまだ、元のパターンの63%が残っています。次の成分を検索すべきです。強いライン、特徴的なラインの強度が消し込まれるまでこの Search/Match/Subtract 操作を繰り返すことができます。これはコーディングシートを使ったマニュアル作業をシミュレートしていることとなります。

### 7.3 引き算(サブトラクト)のキャンセル

[Resume]ボタンをクリックすると、直近のサブトラクトをキャンセルし、サブトラクト直前の状態に復帰できます。

### 7.4 マッチングレポート

[Report]ボタンをクリックすると、サーチマッチ結果のサマリーを作成できます。ユーザーパターンのチャートは、サブトラクト後に残っているラインは濃い青色、サブトラクトされて消されたラインは薄い青色で描画されます。

### 7.5 XSearch の終了

メニューバー[File]\_[End]を選択すると XSearch が終了し、PDF2plusX の画面に戻ります (XSearch を終了せずに PDF2plusX を終了すると、XSearch も自動的に終了します)。

## 8. Any Peaks Search

[Option]メニューの[Any Peaks]を選択すると、「d 値」および「強度」のみを使用した検索をすることができます。スペクトル検索(回折データ)の最も直観的な方法は、どのあたりにどれくらいの大きさのピークがあるかの条件を繰り返し使用して、候補を絞り込むことです。これは 3 強線、8 強線、ハナワルトなどとは全く関係のない、いたって原始的な手法ですが、該当するカードを確実に見つけ出すことができる手段です。

### 8.1 Search

- ① 検索したい d 値の範囲(From~To)および強度の範囲(From~To)を入力して[Add]ボタンをクリックすると、入力した検索条件に合致する PDF Card が何件あるかについて、検索条件ごとの結果が[Hits]項目に、1行目から各行までの掛け合わせ条件の結果が[Candidates]項目に表示されます。

Narrow down

d:  from  to  Intensity:  from  to

d	Intensity	Hits	Candidates			
3.04000	3.05000	60	100	6218	6218	AND
2.51000	2.52000	20	60	13314	363	AND
2.30000	2.31000	20	70	13404	45	AND
1.99000	2.15000	20	80	147639	34	

(1000 > Candidates)

- ② [Delete All]ボタンをクリックすると全ての行の検索条件を削除し、[Delete Row]ボタンをクリックすると選択した行の検索条件のみを削除します。

The screenshot shows the 'Any Peaks' window with a search filter section and a table of results. The table has columns for 'd', 'Intensity', 'Hits', and 'Candidates'. The third row is highlighted in blue.

d	Intensity	Hits	Candidates
3.04000	3.05000	60	6218
2.51000	2.52000	20	363
2.30000	2.31000	20	45
1.99000	2.15000	20	34

Buttons: Delete All, Delete Row, Current, Final. Compare Unknown (1000 > Candidates). Close button at the bottom right.

- ③ [Delete Row]ボタンにより選択した行の検索条件のみを削除した場合、1行目から最終行までの掛け合わせ条件の結果が[Candidates]項目に再表示されます。

The screenshot shows the 'Any Peaks' window after the third row has been deleted. The table now has 3 rows. The 'Candidates' value for the last row has changed to 246.

d	Intensity	Hits	Candidates
3.04000	3.05000	60	6218
2.51000	2.52000	20	363
1.99000	2.15000	20	246

Buttons: Delete All, Delete Row, Current, Final. Compare Unknown (1000 > Candidates). Close button at the bottom right.

- ④ [Current]ボタンをクリックすると、選択した行の検索条件に合致する PDF Card の詳細が検索結果リスト画面に表示されます。

The screenshot shows the 'Any Peaks' window with the following data in the search results table:

d	Intensity	Hits	Candidates
3.04000	3.05000	60	100
2.51000	2.52000	20	60
1.99000	2.15000	20	80

The main table below shows the search results for the selected row (No. 1):

No.	PDF ID	Chemical Name	Chemical Formula	Strong Lines(d)	SYS	QTY	D
1	000010077	Ammonium Borate Hydrate Oxide	N H4 H B4 O7 · 3 H2 O	8.50 5.80 3.39		O	
2	000010371	Tartaric acid	C4 H6 O6 · H2 O	4.34 3.04 2.52		O	
3	000010444	Urea	N H2 · C O · N H2	4.00 3.04 3.61	T		
4	000010835	Sodium Iron Oxide	Na2 Fe O4	3.04 2.64 2.70		O	
5	000020226	DL-tyrosine	C9 H11 N O3	4.45 4.90 4.14		O	
6	000020613	Pyrophyllite / Aluminum Silicate Hydrox...	Al2 Si4 O10 (O H)2	3.04 4.57 9.14	M	i	
7	000020614	Anthophyllite / Magnesium Iron Silicate	(Mg , Fe +2) Si O3	3.04 3.23 8.20	O	i	
8	000030241	Torbemorte, syn / Calcium Silicate Hy...	4 Ca O · 5 Si O2 · 5 H2 O	4.22 3.05 3.14		O	
9	000030451	Albite / Sodium Aluminum Silicate	Na Al Si3 O8	3.30 4.20 3.86	A		
10	000030591	Rdx	C3 H6 N6 O6	3.04 6.75 5.10		O	
11	000040627	DL-B-asparagine hydrate	C4 H8 N2 O3 · H2 O	3.05 3.53 4.91		O	
12	000050200	DDT	C14 H9 Cl5	5.89 4.97 4.45		O	
13	000060348	Wherryite / Copper Lead Chloride Hydr...	Pb C O3 - Pb S O4 - Cl - ...	3.05 4.57 3.14		O	
14	000060370	Arojadite-(KFe) / Sodium Iron Mangan...	(Na , K , Ca )2 ( Fe +2 , ...	3.04 2.72 3.22	M	i	

- ⑤ [Final]ボタンをクリックすると、1行目から最終行までの掛け合わせ条件に合致する PDF Card の詳細が検索結果リスト画面に表示されます。

The screenshot shows the 'Any Peaks' window with the following data in the search results table:

d	Intensity	Hits	Candidates
3.04000	3.05000	60	100
2.51000	2.52000	20	60
1.99000	2.15000	20	80

The main table below shows the search results for the selected row (No. 1):

No.	PDF ID	Chemical Name	Chemical Formula	Strong Lines(d)	SYS	QTY	D
1	000010077	Ammonium Borate Hydrate Oxide	N H4 H B4 O7 · 3 H2 O	8.50 5.80 3.39		O	
2	000010835	Sodium Iron Oxide	Na2 Fe O4	3.04 2.64 2.70		O	
3	000020226	DL-tyrosine	C9 H11 N O3	4.45 4.90 4.14		O	
4	000020613	Pyrophyllite / Aluminum Silicate Hydrox...	Al2 Si4 O10 (O H)2	3.04 4.57 9.14	M	i	
5	000020614	Anthophyllite / Magnesium Iron Silicate	(Mg , Fe +2) Si O3	3.04 3.23 8.20	O	i	
6	000030241	Torbemorte, syn / Calcium Silicate Hy...	4 Ca O · 5 Si O2 · 5 H2 O	4.22 3.05 3.14		O	
7	000030451	Albite / Sodium Aluminum Silicate	Na Al Si3 O8	3.30 4.20 3.86	A		
8	000030591	Rdx	C3 H6 N6 O6	3.04 6.75 5.10		O	
9	000040627	DL-B-asparagine hydrate	C4 H8 N2 O3 · H2 O	3.05 3.53 4.91		O	
10	000050200	DDT	C14 H9 Cl5	5.89 4.97 4.45		O	
11	000060348	Wherryite / Copper Lead Chloride Hydr...	Pb C O3 - Pb S O4 - Cl - ...	3.05 4.57 3.14		O	
12	000070192	Bismuth Niobium Titanium Oxide	Bi3 Nb Ti O9	3.05 1.20 1.92	O		
13	000080071	Arcanite, ammonian / Ammonium Pota...	(K , N H4)2 S O4	2.92 4.21 3.04	O	i	
14	000080727	beta-1-Stearyl-2-myristyl-3-lauryl-glycerol	C47 H90 O6	4.62 3.83 19.3		O	

⑥ 検索結果リスト画面の[行No.]項目をダブルクリックするとカードが表示されます。

The screenshot shows the 'Any Peaks' window with a search results table. The table has columns: No., PDF ID, Chemical Name, Chemical Formula, Strong Lines(d), SYS, and QTY. Row 14 is selected, showing PDF ID 000080727 and Chemical Name beta-1-Stearyl-2-myristyl-3-lauryl-glycerol.

Below the table, a detailed card for the selected peak is displayed. It includes a graph of Intensity vs. 2 Theta, a list of d-spacings (dÅ) and their corresponding 2θ values, and calculated parameters for the formula (Mg, Fe+2)SiO3. The card also lists the Name (Magnesium Iron Silicate), Mineral Name (Anthophyllite), and other relevant data.

⑦ 検索結果が 1000 件未満の場合に表示される[Compare Unknown]ボタンをクリックして選択した未知物パターンのピークデータと、検索結果リスト画面上に表示されているデータベースパターンとを照合し、データベースパターンのライン 1 本 1 本の点数を計算して総和した Score 値を表示することができます。

The screenshot shows the 'Any Peaks' window with the search results table. The 'Compare Unknown' button is visible. A 'Load Unknown Data' dialog box is open, showing a file explorer view of the 'Sample' folder. The file 'demomatch.txt' is selected. The dialog box also shows the file name field and the file type set to 'Text File (\*.TXT)'. The 'Open' button is highlighted.

- ⑧ Score 値が算出されると、検索結果リスト画面上のデータベースパターンが、[Score]項目の降順に再表示されます。

Any Peaks

Unknown 3.70/100 3.66/61 2.59/34

Narrow down

d:  from  to  Intensity:  from  to  Add

d	Intensity	Hits	Candidates
3.04000	3.05000	60	100
2.51000	2.52000	20	60
1.99000	2.15000	20	80

Delete All  
Delete Row  
Current  
Final

Compare Unknown  
(1000 > Candidates)

No.	PDF ID	Score	Chemical Name	Chemical Formula	Strong Lines(d)	SYS
1	010832253	113	Chalconatronite, syn / Sodium Copper ...	Na2 Cu (C O3)2 (H2 O)3	6.89 4.17 5.16	M
2	010844512	104	Calcium Tellurium Oxide Nitrate Hydrate	Ca5 Te4 O12 (N O3)2 (...)	10.4 3.33 3.04	M
3	010733614	96	Cobalt Zinc Phosphate Hydrate	Co Zn2 (P O4)2 (H2 O)4	2.85 9.13 4.56	O
4	010806144	55	Hopeite, cobaltian, syn / Cobalt Zinc P...	(Zn2.68 Co0.32) (P O4)...	2.85 9.15 3.39	O
5	010788254	48	Chalconatronite, syn / Sodium Copper ...	Na2 (Cu (C O3)2) (H2 ...)	6.89 4.16 5.16	M
6	010811121	26	Sodium Nitrosyl Iron Cyanide Deuterate	Na2 (Fe (C N)5 (N O)) ...	4.11 2.87 4.70	O
7	010811122	26	Sodium Nitrosyl Iron Cyanide Deuterate	Na2 (Fe (C N)5 (N O)) ...	4.11 2.87 4.70	O
8	010765842	23	Methylammonium trichlorostannate	((C H3) N H3) (Sn Cl3)	5.71 2.86 2.59	M
9	000240833	19	Potassium Antimony Chloride	K3 Sb Cl6	2.63 3.64 5.86	M
10	010800120	18	Barium Lanthanum Silver Sulfide	Ba2 La Ag5 S6	3.05 3.24 2.79	M
11	010849647	16	Barium Copper Chloride Hydroxide Van...	Ba2 Cl Cu (O H) (V2 O7)	3.04 3.60 2.84	O
12	010840660	9	Potassium Tin Bromide Sulfate	K3 Sn2 Br (S O4)3	3.07 3.05 2.96	H
13	010772499	4	Lithium Gallium Iodide	Li Ga I4	3.26 3.27 3.47	M
14	010788547	3	Copper Magnesium Yttrium	Y5 Cu5 Mg13	2.57 2.69 9.64	O

Close



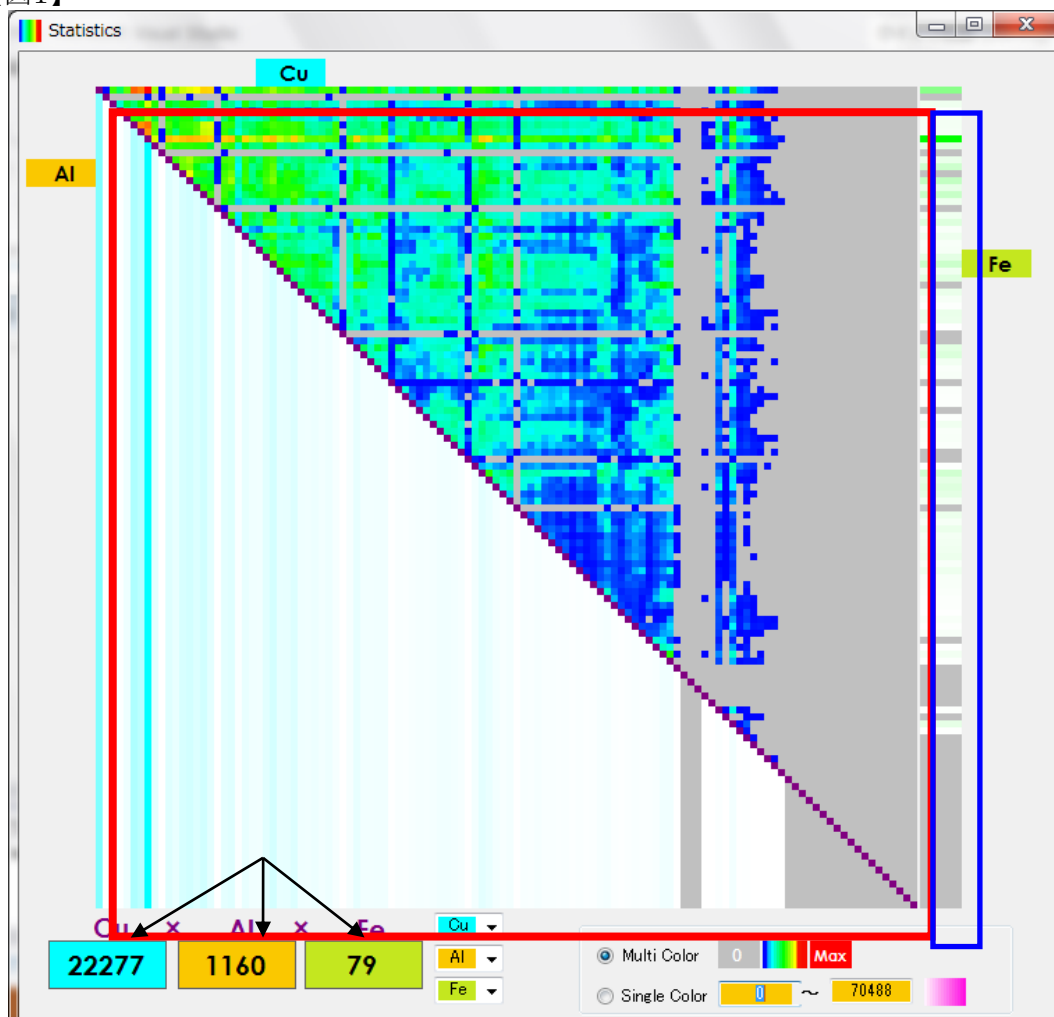
## 9. Statistics

[Help]メニューの[PDF Statistics]を選択すると、PDF データベース内に、任意の元素を含んだ化合物がどの程度収録されているかを視覚的に表現します。

### 9.1 画面構成

- (A) 赤色正方領域は 118 列、118 行のマトリックスセルで構成され、上からの行相対番号、左からの列相対番号は原子番号に対応しています。
- (B) 青色矩形領域は 118 行、118 個のセルで構成され、上からの行相対番号は原子番号に対応しています。
- (C) 収録数を表示する[収録数表示ボックス]です。
- (D) 現在選択されている元素の元素名を表示する[元素名表示ラベル]です。
- (E) 収録数を視覚的に表現する場合のカラー形式を指定する[カラーボタン]です。
- (F) 元素を選択する[元素選択ボックス]です。

【図1】



## 9.2. 視覚的表現の操作

収録数を色により表現するためには次の操作を行います。

### 9.2.1 表現形式の種類

- ◆ マルチカラー形式  
最大数が赤色、1が青色でその間は収録数の降順に赤系、黄色系、緑系、シアン系、青系の5段階で表現し、収録数ゼロは“0”と表示されたボックスの背景色で表します。
- ◆ シングルカラー形式  
単色の濃淡で収録数の数を表現します。色が濃い程収録数は多くなります。

### 9.2.2 表現形式の選択

【図1】(E)の[カラーボタン]で選択します。

### 9.2.3 一元素を含む化合物の収録数を知るための元素の指定

- ◆ 【図1】(A)領域の行番号が列番号より大きい領域(Left Down Area)上でカーソルを左右に移動(列移動)します。そして、現在のカーソルが示すセルが特定されたセルになります。
- ◆ 特定されたセルの列の位置に対応する元素が指定された元素と看做され、その元素を含む化合物の収録数が(C)青色[収録数表示ボックス]に表示されます。ボックスの上、及び青色の[元素名表示ラベル]には指定された元素の名称が表示されます。

### 9.2.4 二元素を含む化合物の収録数を知るための元素の指定

- ◆ 【図1】(A)領域の行番号が列番号より小さい領域(Right Upper Area)上でカーソルを上下左右に移動(行・列移動)してセルを特定します。
- ◆ 特定されたセルの行の位置に対応する元素と、列の位置に対応する元素が指定されたと元素と看做され、これら二元素を含む化合物の収録数が、(C)黄色[収録数表示ボックス]に表示されます。ボックスの上、及び青色の[元素名表示ラベル]には列で特定された元素の名称、黄色の[元素名表示ラベル]には二つ目の元素の名称が表示されます。

### 9.2.5 三元素を含む化合物の収録数を知るための元素の指定

- ◆ 8.1.4 の操作でセルを特定し、マウスの左ボタンをクリックします。
- ◆ 特定されたセル及びその上下左右 5 個のセルの色が茶色になり、それ以降の【図1】(A)領域でのカーソルの移動は無効となります。
- ◆ 次に、【図1】(B)領域上でカーソルを上下に移動してセルを特定します。特定されたセルの行番号で第三の元素が決定されます。
- ◆ 青色の[元素名表示ラベル]には一個目の元素の名称が、青色の[収録数表示ラベル]には一個目の元素を含む化合物の収録数が表示されます。

- ◆ 黄色の[元素名表示ラベル]には二個目の元素の名称が、黄色の[収録数表示ラベル]には一個目の元素と二個目の元素を含む化合物の収録数が表示されます。
- ◆ 緑色の[元素名表示ラベル]には三個目の元素の名称が、緑色の[収録数表示ラベル]には選択された3個の元素を含む化合物の収録数が表示されます。
- ◆ セルの特定を解除し、【図1】(A)領域でのカーソルの移動を有効にするためには再度マウスの左ボタンをクリックします。

### 9.2.6 収録数の範囲を限定して表示する方法

表示形式がシングルカラー形式の場合、収録数の範囲を限定して表示することができます。以下その方法です。

- ◆ [カラーボタン]の「Single Color」を選択します。
- ◆ ボタンの右側のテキストボックスに表示する収録数の最小値、最大値を入力します。  
[100]~[200]と入力した場合は、100 以上 200 以下の収録数が単色(マゼンダ)のグラデーションで表示されます。

### 9.3 数値表現の操作

収録数を数値で表現する場合は次の操作をおこないます。

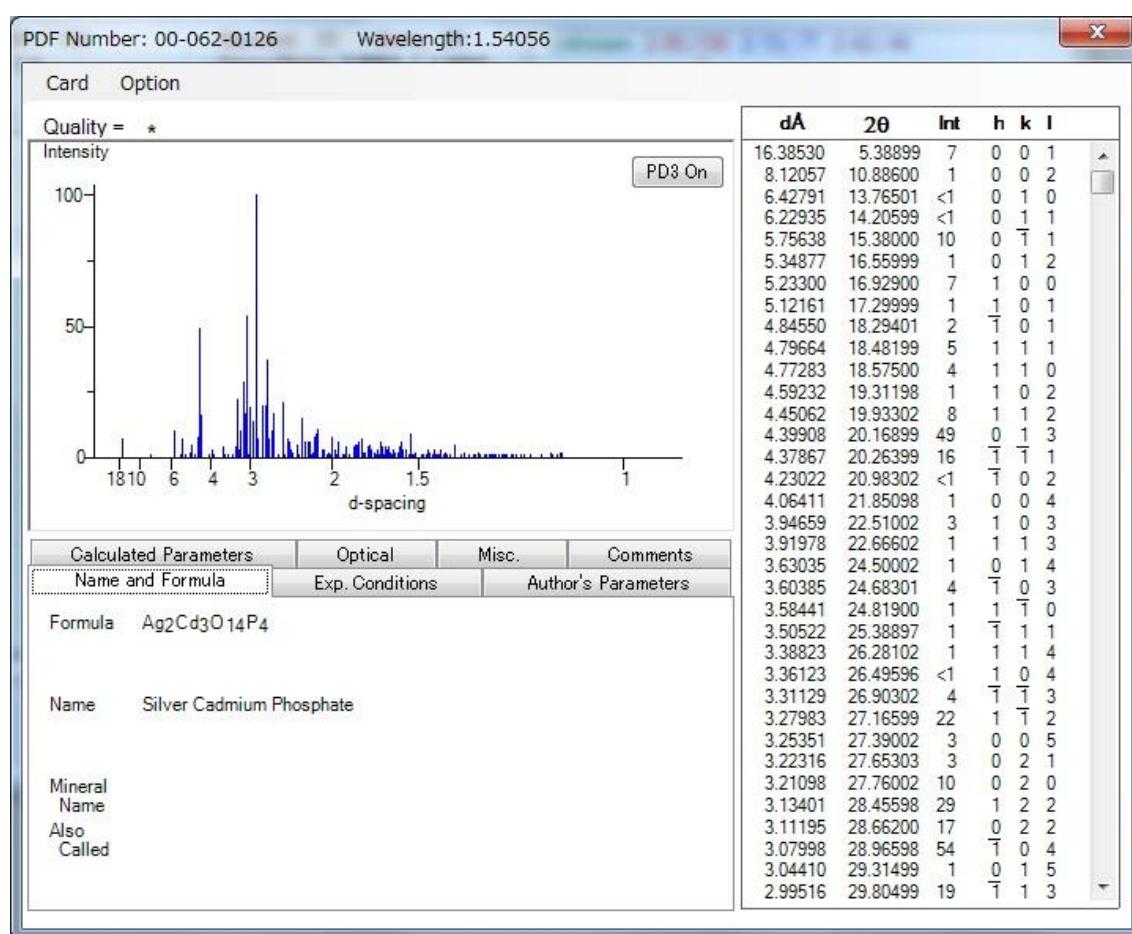
- ◆ 【図1】(F)青色[元素選択ボックス]より第一元素を選択します。  
選択した元素を含む化合物の収録数が【図1】(C)青色[収録数表示ボックス]に表示されます。
- ◆ 【図1】(F)黄色[元素選択ボックス]より第二元素を選択します。  
前項①で選択した元素かつ(∧)ここで選択された元素を含む化合物の収録数が【図1】(C)黄色[収録数表示ボックス]に表示されます。
- ◆ 【図1】(F)緑色[元素選択ボックス]より第三元素を選択します。  
前項①、②で選択した二元素かつ(∧)ここで選択された元素を含む化合物の収録数が【図1】(C)緑色[収録数表示ボックス]に表示されます。

## 10.Raw データ (PDF5+データベース)

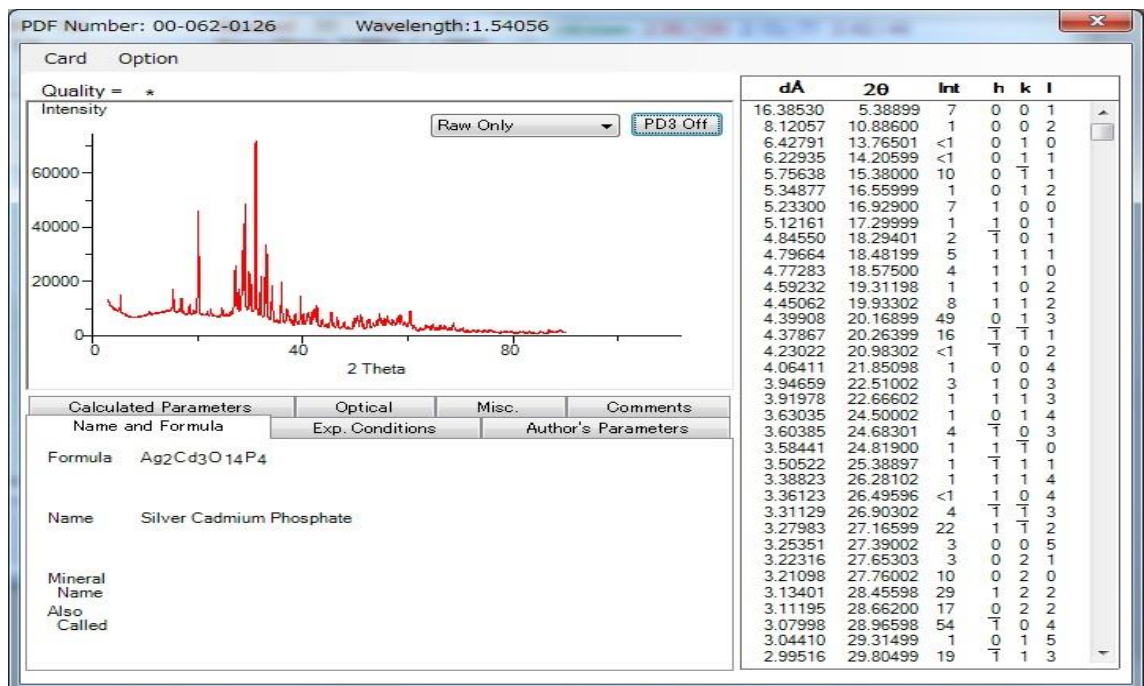
PDF5+データベースをご使用の場合は、PDF Card によっては、Raw データが存在するデータがあります。Raw データは、PDF4のプロジェクトがスタートする前に、PDF3プロジェクトとして計測された Raw データが収集されました。

### 10.1 Raw データの表示

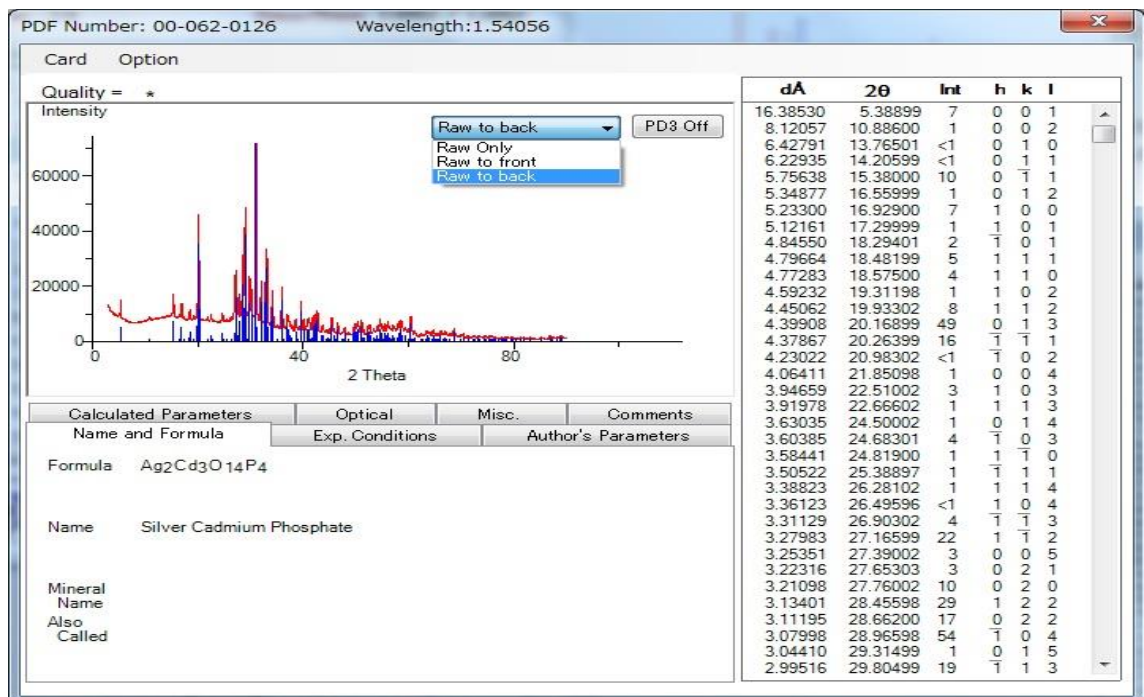
- ① Raw データが存在する場合は、カードのバーグラフ画面に[PD3 On]ボタンが表示されます。



- ② [PD3 On]ボタンをクリックすると、まず Raw データのみが表示されます。



- ③ プルダウンメニューをクリックすると、[Raw Only (Raw データのみ)] ・[Raw to front (Raw データ前面表示)] ・[Raw to back (バークラフ前面表示)]のなかから表示形式を選択することができます。



## 11. ファイルのフォーマット

現在のところ、XSearch がインポートできるピークデータファイルは PANALYTICA X'Pert の \*.UDI (テキスト) と島津製作所の \*.TXT のみです。しかし、バイナリーであっても、テキストであっても必要な情報 (フォーマットの仕様とサンプルデータ) があれば、無償で対応します。

(拡張子“PAT”の例)

```
Title1          ヘッダー1
Title2          ヘッダー2
3.880,         5      '面間隔値/角度,   強度
3.550,         54
3.330,         25
3.140,         32
3.052,         100
..... ファイルの終了まで
```

(拡張子“PKU”または“TXT”の例)

```
Title1          ヘッダー1
Title2          ヘッダー2
1.54056,      0 '左側の数字が波長, 右側の数字が d/2θ のスイッチ (0:dSpace/1:2:Theta)
3.880,         5      '面間隔値/角度,   強度
3.550,         54
3.330,         25
3.140,         32
3.052,         100
..... ファイルの終了まで
(*.PKU ファイル)は XViewer (XSearch の姉妹品) が作成するピークデータファイルです。
```

## 12. チュートリアル(サンプルデータを使った検索例)

XSearch にはいくつかのサンプルデータが付いています。EX-1.PAT は擬似的に作成した 004-0471、005-0586、005-0492 の混合物です。このサンプルは¥PDF2plus¥Sample フォルダの下に存在します。XSearch の[File]\_[Load]\_[Peak Data]からロードして下さい。

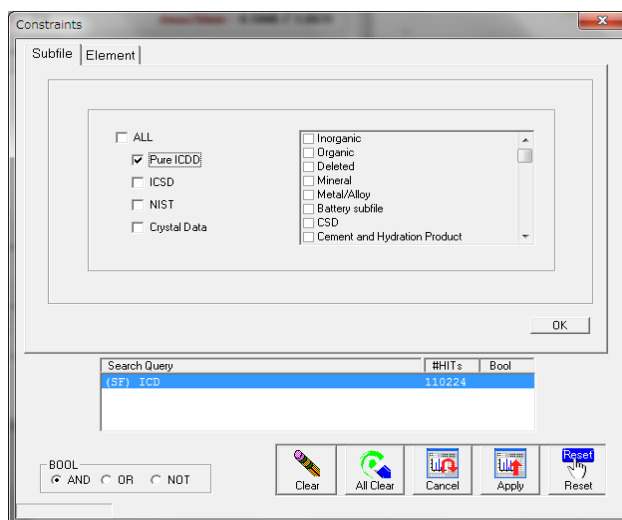
Peak Data File: EX-1.PAT  
 Title1: EXAMPLE 1  
 Title2: KI CaCO<sub>3</sub> ZnS (4-471, 5-586, 5-492)

Wavelength: 1.54056\_Cu Ka1

	d-value	Int	Int(Full)
1	4.1000	23	
2	3.8800	5	
3	3.5500	54	
4	3.3300	25	
5	3.1400	32	
6	3.0520	100	
7	2.9390	16	
8	2.5060	42	
9	2.2920	10	
10	2.1360	11	
11	2.1010	6	
12	2.0460	10	
13	1.9330	2	
14	1.9170	38	
15	1.8740	9	

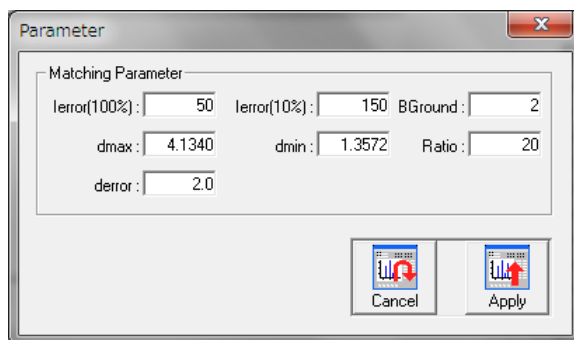
(図 26: EX-1.PAT の Search Form)

まず、検索対象を ICDD の実測データに限定します。(同じ物質が ISCD や MPDS にも重複して存在するため結果のリストを見やすくするために限定しています。しかし、ICDD データコレクションにも Deleted データが残っているため、同じ物質がリストにあらわれます。)[Tool]\_[Constraint]で表示される下記のダイアログで PureICDD をチェックして下さい。



(図 27: PureICDD をチェック)

検索パラメータの設定はデフォルトをまず使って下さい。[Tool]\_[Parameter]で下記のダイアログが表示されます。



(図 28: Parameter ダイアログ)

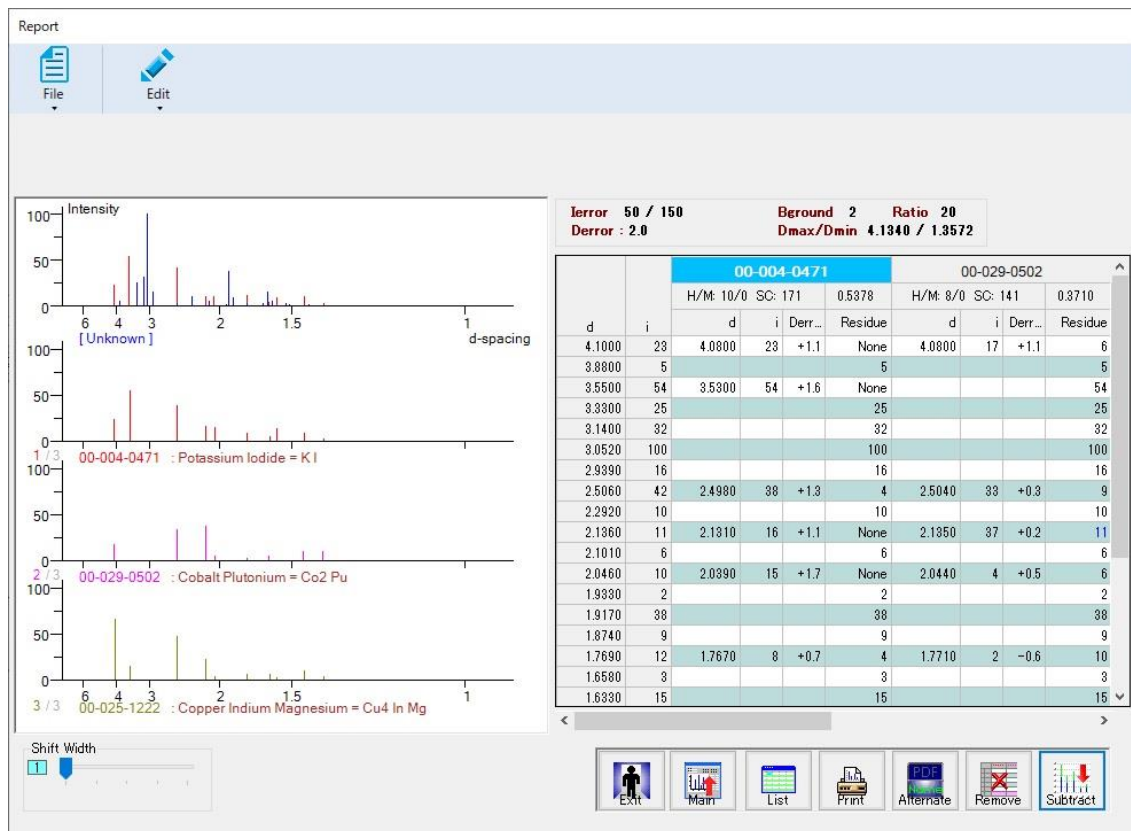
条件設定が終わりましたので、Search フォームのボタンバーにある Search ボタンをクリックして下さい。XSearch は Ratio の 20 を使って、プリサーチを実行した後、すべてのラインを使った Matchingを行います。10 秒程度で結果のリストが表示されます。

No.	PDF ID	AT	R %	Score	Hit/Mis	QTY	Chemical Name	Formula	3 Strong Lines (d)	Pattern (d)
1	000040471	0.5378	63	171	10/0	*	*Potassium Iodide	K.I	3.53 2.50 4.08	[Pattern]
2	000550258	0.3792	71	165	9/2	*	*Iron Zinc Sulfide	Zn0.66 Fe0.34 S	3.32 1.92 2.94	[Pattern]
3	000361015	0.2350	79	150	10/2	0	Potassium Technetium Iodide	K2 Tc I3	3.53 1.98 1.44	[Pattern]
4	000241136	0.3090	75	145	9/2	i	*Wurtzite, cadmian, syn / Zn	Zn0.9 Cd0.1 S	3.32 2.94 1.92	[Pattern]
5	000290502	0.3710	84	141	8/0	C	Cobalt Plutonium	Co2 Pu	2.14 2.50 4.08	[Pattern]
6	000251222	0.6617	74	138	10/0	C	Copper Indium Magnesium	Cu4 In Mg	4.08 2.50 2.13	[Pattern]
7	000020604	0.3896	80	121	9/0	0	Manganocalcite / Calcium	[Ca, Mn] CO3	3.06 1.93 1.88	[Pattern]
8	000010554	0.4984	68	120	8/2	*	*Potassium Iodide	K.I	3.53 2.50 4.08	[Pattern]
9	000050586	1.0736	58	120	15/3	*	*Calcite, syn / Calcium Carbonate	Ca C O3	3.04 2.29 2.10	[Pattern]
10	000230728	0.2170	81	113	7/3		Zinc Indium Sulfide	Zn2.32 In1.12 S4	2.94 1.91 1.11	[Pattern]
11	000221008	0.2170	81	113	7/3		Zinc Indium Sulfide	Zn2.32 In1.12 S4	2.94 1.91 1.11	[Pattern]
12	000471743	0.9802	58	109	15/3	C	*Calcite / Calcium Carbonate	Ca C O3	3.04 1.88 1.91	[Pattern]
13	000040637	0.3208	73	99	14/6	*	*Calcite / Calcium Carbonate	Ca C O3	3.04 1.91 1.88	[Pattern]
14	000040636	0.3208	73	99	14/6	*	*Calcite / Calcium Carbonate	Ca C O3	3.04 1.91 1.88	[Pattern]
15	000281658	1.4057	79	99	8/3	0	Trifluoperidol hydrobromide	C22 H23 F4 N O2 ·	4.10 3.55 5.50	[Pattern]
16	000460909	0.7064	71	96	10/6	i	Copper Iron Cyanide Hydrate	Cu2 [Fe (C N 6)] ·	3.54 5.01 2.50	[Pattern]
17	000361450	0.3039	73	95	7/4	*	*Wurtzite-2H, syn / Zinc Sulfide	Zn S	3.31 2.93 3.13	[Pattern]
18	000050492	0.3126	73	94	7/4	i	*Wurtzite-2H, syn / Zinc Sulfide	Zn S	3.31 3.13 2.93	[Pattern]
19	000010550	0.3859	82	93	6/0	i	*Barium	Ba	3.54 2.04 2.51	[Pattern]
20	000010434	0.3294	76	93	7/2	*	*Wurtzite-2H, syn / Zinc Sulfide	Zn S	2.93 3.31 1.91	[Pattern]

(図 29: データベースパターンの選択)



Score が上位(ライン一本あたりの点数も 10 以上)で、AT%がそこそこであり、Missing ラインがゼロのデータベースパターンを比較してみましょう。リスト No.1、5、6、7 をクリック(5 と 7 は AT%がやや低い)が参考として)すると PDFID のセルが青に変化するので、List ダイアログの右下隅の Match ボタンをクリックして下さい。

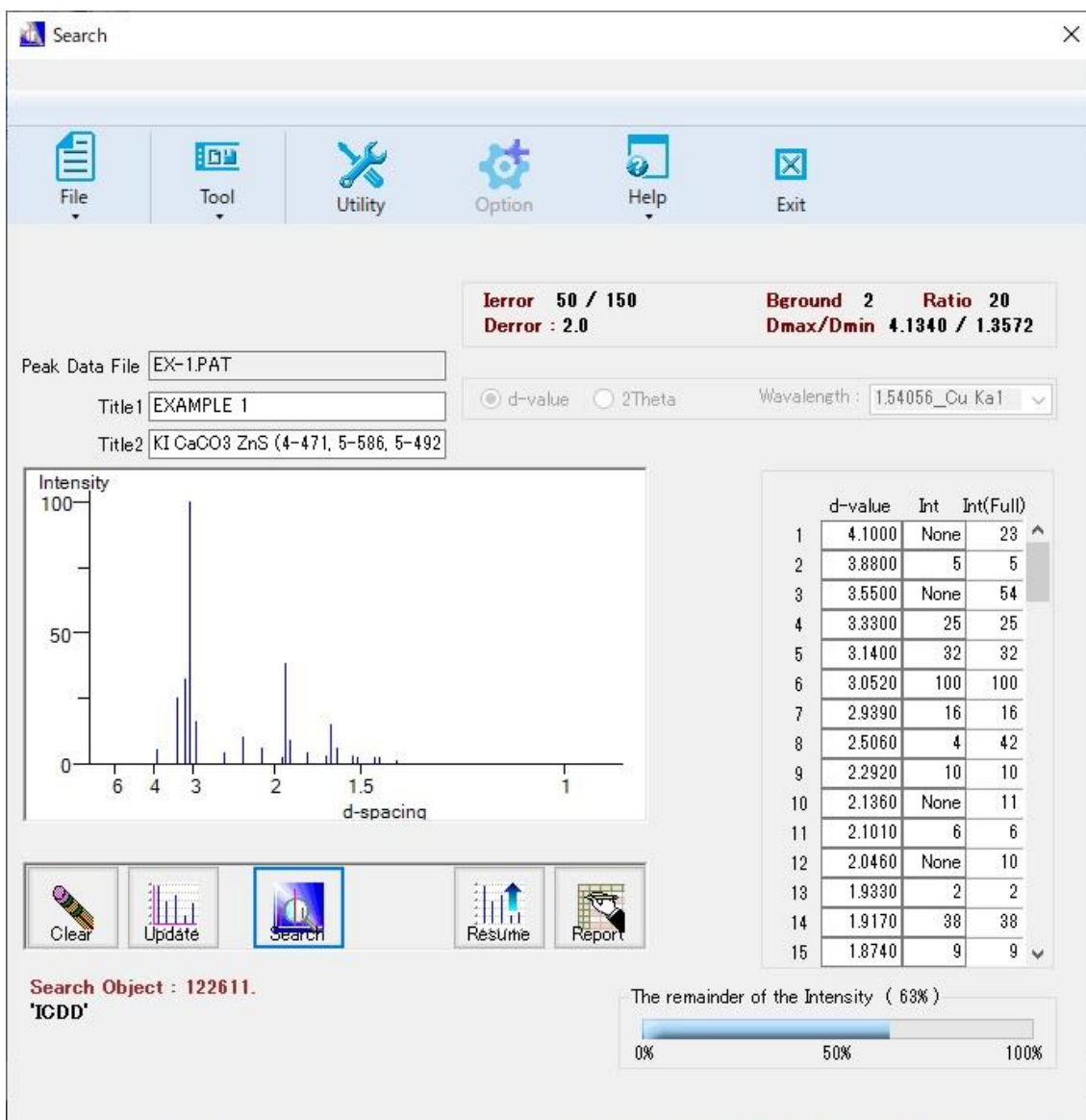


(図 30: データベースパターンとの比較)

左側のグラフの Unknown は選択した 4 件の最も上位の 4-471 と比較され、パターンは一致するラインが赤で表示され、Matching に使われていないラインは青のまま残ります。Report ダイアログの右側のテーブルで右隣の PDF 番号をクリックすると、左側のグラフは Unknown と 5-586 との比較されたグラフに変わります。(グラフの色はピンクと青に変化します。ピンクは 2 件目の色です。)

これらの結果を見比べると、4-471 との比較では 3.052 の 100%のラインと 1.917 の 38%のラインは使われずに残りますが、4.1 の 23%、3.55 の 54%、2.506 の 42%のラインがバランスよく Match し、さらに 2.136 や 2.046 もバランスの良い強度で消し込めます。一方、29-0502 では 3.55 の 100%を使わず、目立ったラインでは 2.506 の 42%が使われていますが、他は強度の低いラインばかりです。また、25-1222 では 3.55 の 100%のラインは使われず、4.1 の 23%、2.506 の 42%、2.136 の 11%などが使われていますが、4-471 には劣ると判断できます。

4-471 が最も一致すると思われるので、テーブルで 4-471 の列をクリックして右下のボタンバーの Subtract ボタンをクリックして下さい。残差のパターンが表示されます。

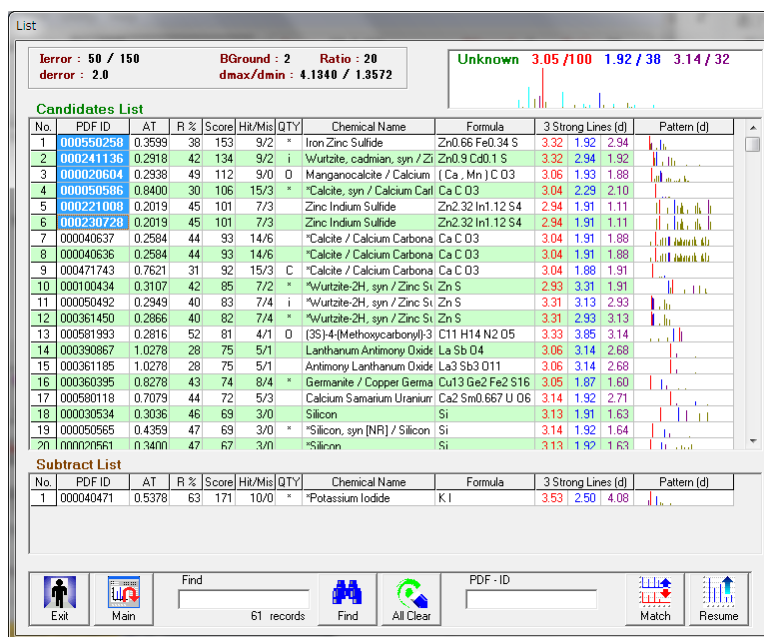


(図 31:00-004-0471 を引き算した残差パターン)

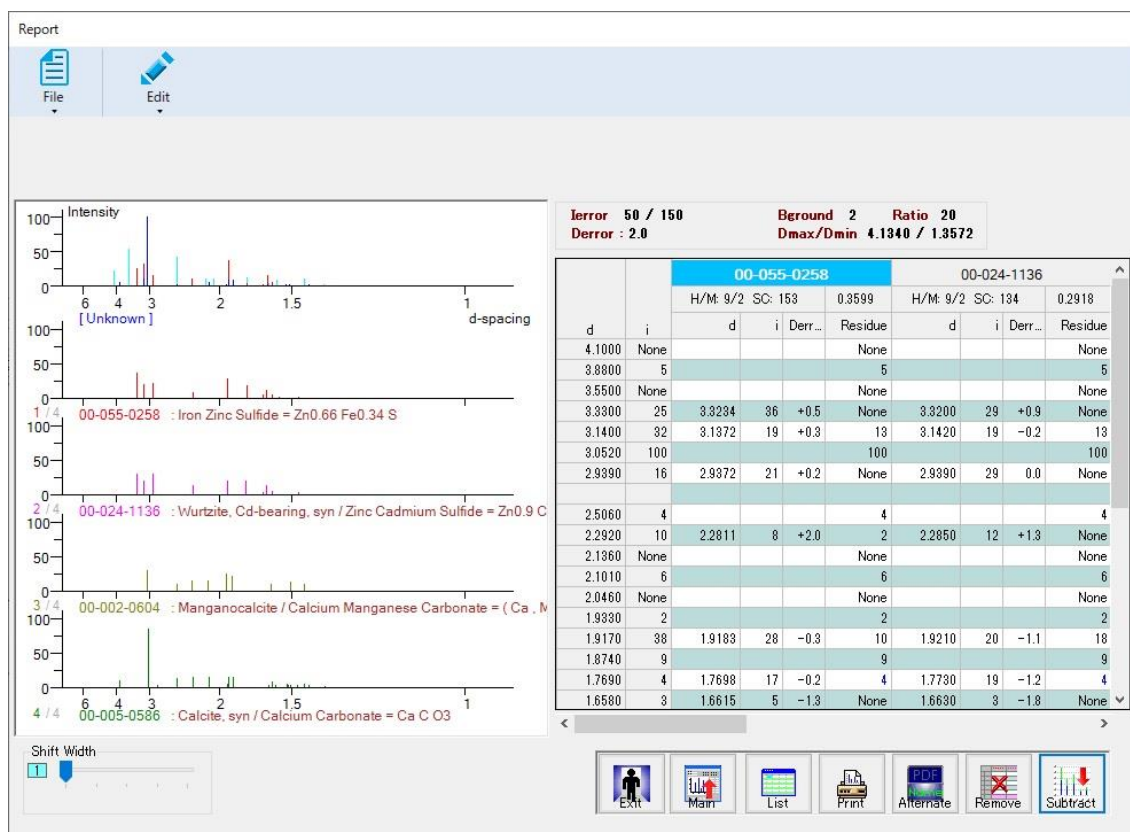
3.052 の 100% のライン他、まだパターンの 63% も残っているので、さらに検索を続行しなければなりません。同様の検索システムではこの残差のパターンをプリサーチ結果の集合に対して検索を実行することが多いようです。これは検索時間の節約(現在の PC では考慮する必要はありませんが)以外に、2 番目や 3 番目の成分が含まれている可能性が高いため、効率的とも考えられます。

XSearch はサブトラクトした PDF 番号にフラグを付け(この場合、4-471)、サブトラクトして消されたラインを Previous removed として記憶します。そして残差のパターンをデータベース(この場合、PureICDD)に戻して検索を再実行します。

Search フォーム左下のボタンの XSearch ボタンをクリックして下さい。検索結果の Candidates List が表示されます。今度は Score のライン一本当たりのポイントが 6~7 に下がっています。上位の何件(ここでは 6 件)をクリックして Match ダイアログで検証しなければなりません。



(図 32: 残差の検索結果)



(図 33: 残差の検索結果)

55-258、24-1136、2-604 などが上位にあります、Match のグラフを見ても一長一短です。むしろまず 3.052 のラインを解決しておきたいところです。このラインを含むデータベースパターンが上

位にくるのが少なく、ユニークさを持つラインかも知れません。この 6 件のなかでは 2-604 と 5-586 の 2 件ですが、5-586 の方が他のラインとのバランスもよさそうです。サブトラクト後の残差も 6 件の中で最も少ないので、2 成分目として 5-586 を選択します。

テーブルで PDFID をクリックして Subtract ボタンをクリックして下さい。

Search

File Tool Utility Option Help Exit

**Error 50 / 150**      **Bground 2**      **Ratio 20**  
**Error : 2.0**      **Dmax/Dmin 4.1340 / 1.3572**

Peak Data File: EX-1.PAT  
 Title1: EXAMPLE 1  
 Title2: KI CaCO<sub>3</sub> ZnS (4-471, 5-586, 5-492)

d-value     2Theta    Wavelength: 1.54056\_Cu Ka1

	d-value	Int	Int(Full)
1	4.1000	None	23
2	3.8800	None	5
3	3.5500	None	54
4	3.3300	25	25
5	3.1400	32	32
6	3.0520	16	100
7	2.9390	16	16
8	2.5060	None	42
9	2.2920	None	10
10	2.1360	None	11
11	2.1010	None	6
12	2.0460	None	10
13	1.9330	None	2
14	1.9170	24	38
15	1.8740	None	9

Search Object : 122611.  
 'ICDD'

The remainder of the Intensity ( 30% )

0%      50%      100%

(図 34:2 個のデータベースパターンを引き算した残差)

残差はまだ 30%あり、残っているラインも多くありますので、さらに検索を進めます。Search ボタンをクリックして下さい。

List

Error : 50 / 150      BGround : 2      Ratio : 20  
 derror : 2.0      dmax/dmin : 4.1340 / 1.3572      Unknown 3.14 / 32 3.33 / 25 1.92 / 24

Candidates List

No.	PDF ID	AT	R %	Score	H/Mis	QTY	Chemical Name	Formula	3 Strong Lines (d)	Pattern (d)
1	000590258	0.3132	8	137	9/2	*	Iron Zinc Sulfide	Zn <sub>0.66</sub> Fe <sub>0.34</sub> S	3.32 1.92 2.94	
2	000100434	0.2774	10	105	7/2	*	*Wurtzite-2H, syn / Zinc Sulfide	Zn S	2.93 3.31 1.91	
3	000241136	0.2529	12	103	9/2	i	*Wurtzite, cadmian, syn / Zinc Cadmium Sulfide	Zn <sub>0.9</sub> Cd <sub>0.1</sub> S	3.32 2.94 1.92	
4	000050492	0.2632	8	95	7/4	i	*Wurtzite-2H, syn / Zinc Sulfide	Zn S	3.31 3.13 2.93	
5	000361450	0.2559	8	93	7/4	*	*Wurtzite-2H, syn / Zinc Sulfide	Zn S	3.31 2.93 3.13	
6	000230729	0.1845	14	85	7/3		Zinc Indium Sulfide	Zn <sub>2.32</sub> In <sub>1.12</sub> S <sub>4</sub>	2.94 1.91 1.11	
7	000221008	0.1845	14	85	7/3		Zinc Indium Sulfide	Zn <sub>2.32</sub> In <sub>1.12</sub> S <sub>4</sub>	2.94 1.91 1.11	
8	000580118	0.6292	12	83	5/3		Calcium Samarium Uranium	Ca <sub>2</sub> Sm <sub>0.667</sub> U <sub>0.6</sub>	3.14 1.92 2.71	
9	000505655	0.3643	15	77	3/0	*	*Silicon, syn [NR] / Silicon	Si	3.14 1.92 1.64	
10	000261481	0.3770	16	74	4/0	*	*Silicon	Si	3.14 1.92 1.64	
11	000271402	0.3770	16	74	4/0	*	*Silicon, syn / Silicon	Si	3.14 1.92 1.64	
12	000020561	0.2842	15	73	3/0	*	*Silicon	Si	3.13 1.92 1.63	
13	000190463	0.4267	16	73	6/1	i	Europium Oxide	Eu <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	2.93 1.74 3.07	
14	000030534	0.2537	16	72	3/0		Silicon	Si	3.13 1.91 1.63	
15	000581993	0.3923	17	69	4/1	O	(3S)-4-(Methoxycarbonyl)-3	C <sub>11</sub> H <sub>14</sub> N <sub>2</sub> O <sub>5</sub>	3.33 3.85 3.14	
16	000600394	0.3692	15	69	4/1	*	*Rudashkevskite / Iron Zinc	(Fe, Zn)S	3.13 1.92 1.63	
17	000341593	0.2828	16	68	3/1	O	Nickel chloride bis(N,N-di	C <sub>38</sub> H <sub>30</sub> Cl <sub>2</sub> N <sub>6</sub> Ni	7.24 2.94 3.16	
18	000060344	0.3840	16	68	3/1	*	*Nantokite, syn / Copper Chloride	Cu Cl	3.13 1.92 1.63	
19	000060343	0.4014	16	67	3/1	*	Copper Fluoride	Cu F <sub>2</sub>	3.13 1.92 1.63	
20	000260652	0.4305	17	61	3/1	*	Copper Nickel Tin Sulfide	Cu <sub>2</sub> Ni <sub>5</sub> S <sub>4</sub>	3.13 1.92 1.64	

Subtract List

No.	PDF ID	AT	R %	Score	H/Mis	QTY	Chemical Name	Formula	3 Strong Lines (d)	Pattern (d)
1	000040471	0.5378	63	171	10/0	*	*Potassium Iodide	K I	3.53 2.50 4.08	
2	000050686	0.8400	30	106	15/3	*	*Calcite, syn / Calcium Carbonate	Ca C O <sub>3</sub>	3.04 2.29 2.10	

Exit Main Find 39 records Find All Clear PDF-ID Match Resume

(図 35: 2 個のデータベースパターンを引き算した残差の検索結果)

上位 5 件を選択して、Match ボタンを押して下さい。

Report

File Edit

Intensity

d-spacing

1 / 4 00-055-0258 : Iron Zinc Sulfide = Zn<sub>0.66</sub>Fe<sub>0.34</sub>S

2 / 4 00-010-0434 : Wurtzite-2H, syn / Zinc Sulfide = Zn S

3 / 4 00-024-1136 : Wurtzite, Cd-bearing, syn / Zinc Cadmium Sulfide = Zn<sub>0.9</sub>Cd<sub>0.1</sub>S

4 / 4 00-005-0492 : α-Wurtzite-2H, syn / Zinc Sulfide = Zn S

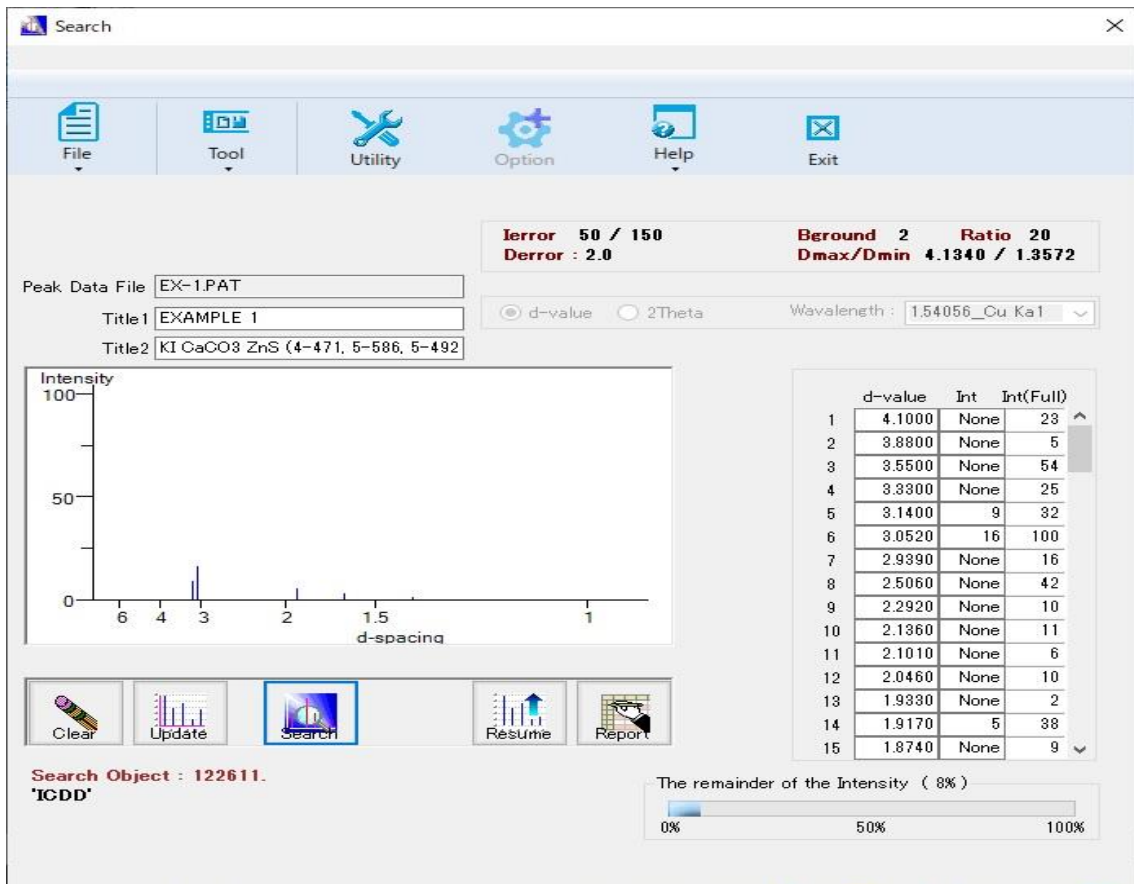
Error 50 / 150      Bground 2      Ratio 20  
 Derror : 2.0      Dmax/Dmin 4.1340 / 1.3572

d	i	00-055-0258			00-010-0434		
		H/M	9/2	SC	H/M	7/2	SC
4.1000	None						0.2774
3.8800	None						
3.5500	None						
3.3300	25	3.3234	31	+0.5	3.3100	26	+1.8
3.1400	32	3.1372	17	+0.3	3.1300	14	+1.0
3.0520	16				16		16
2.9390	16	2.9372	18	+0.2	2.9250	28	+1.6
2.5060	None				None		None
2.2920	None	2.2811	7	+2.0	None		None
2.1360	None				2.2730	11	+3.6
2.1010	None				None		None
2.0460	None				None		None
1.9330	None				None		None
1.9170	24	1.9183	24	-0.3	1.9110	18	+1.6
1.8740	None				None		None
1.7690	4	1.7698	15	-0.2	1.7640	17	+1.6
1.6580	3	1.6615	4	-1.3	1.6540	4	+1.4

Exit Main List Print Alternate Remove Subtract

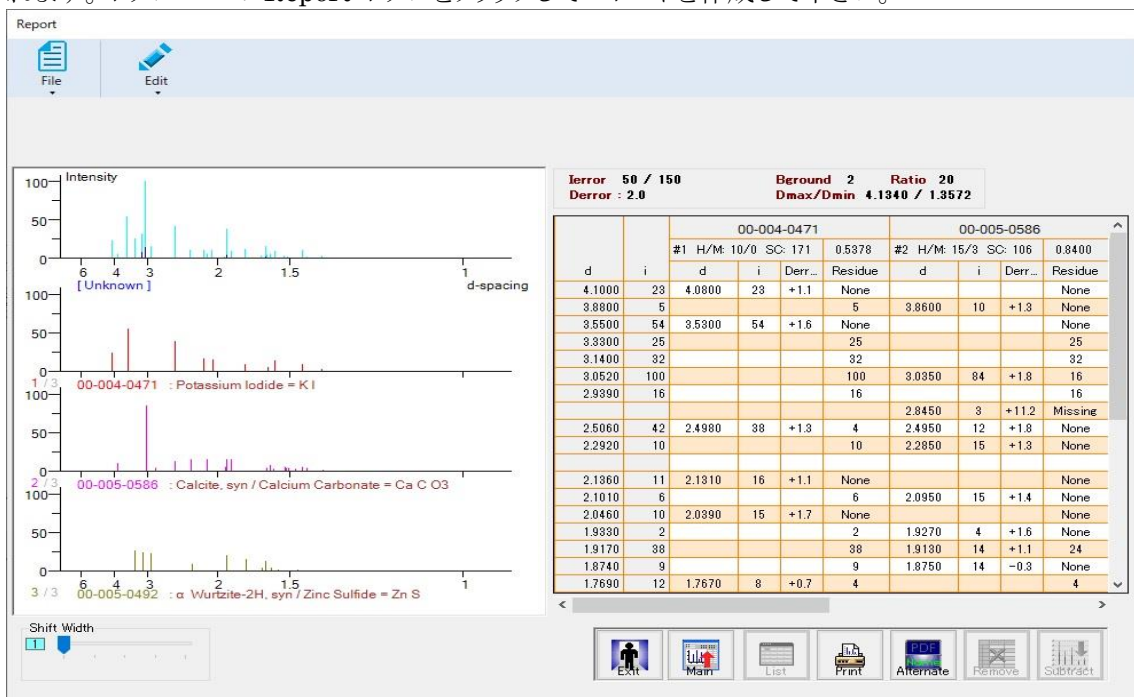
(図 36: 3 番目の物質の検証)

2 件目以降はすべて Wurtzite であり、1 件目の 55-258 を含めてもともと同様なパターンなので、ピークマッチングだけで決定できません。サブトラクトした残りが最も少ない(8%)し、元の情報から 5-492 を選択したと仮定します。Subtract ボタンを押して下さい。



(図 37:3 物質を引き算した残差)

元のパターンの 8%しか残らず、残りのラインの本数も少ないので、これ以上の解析は無理と考えられます。ボタンバーの Report ボタンをクリックしてレポートを作成して下さい。



(図 38: Summary Report の作成)