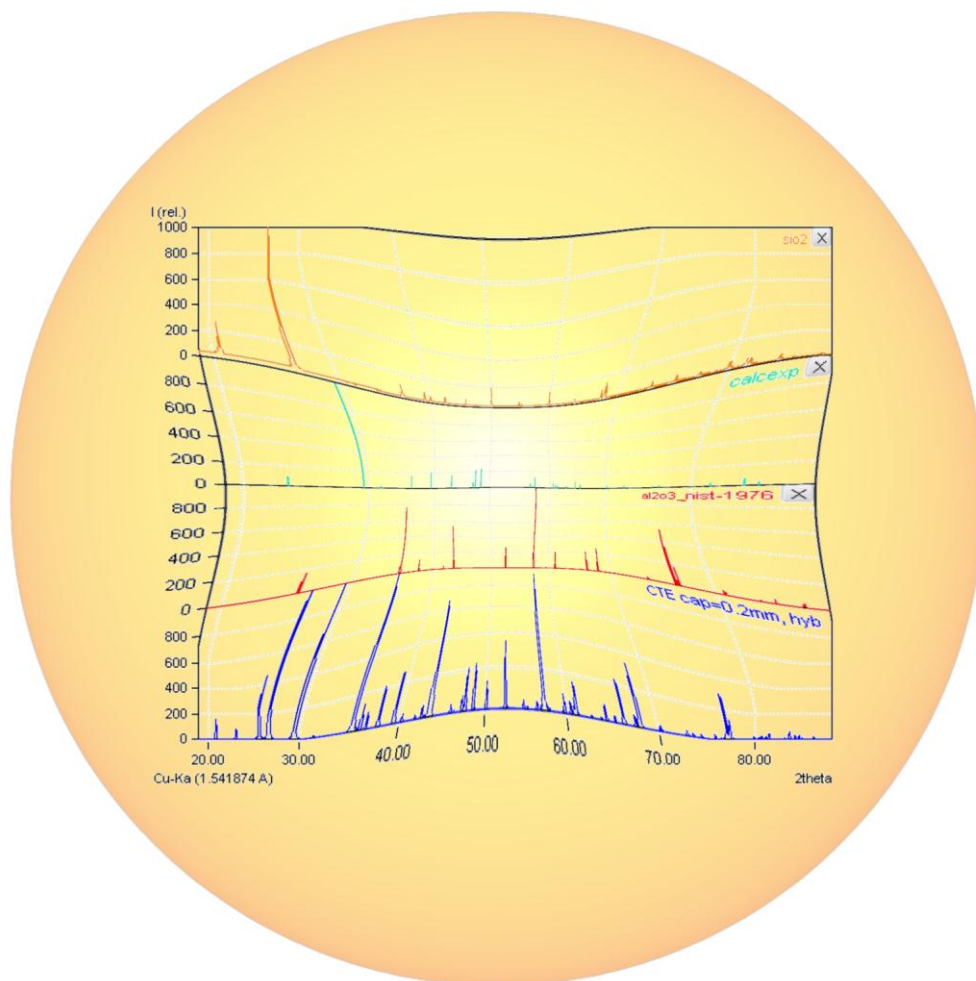




# MATCH!

Phase Identification from Powder Diffraction - Version 2



チュートリアル ハンドブック



Dr. Holger Putz



Phase Identification from Powder Diffraction - Version 2

チュートリアル ハンドブック

Version 2.0



## Match! – Phase Identification from Powder Diffraction – Version 2

著者: Dr. Holger Putz, Crystal Impact, Bonn, Germany.

Copyright © 2003-2012 by CRYSTAL IMPACT

Dr. H. Putz & Dr. K. Brandenburg & GbR

Kreuzherrenstr. 102

D-53227 Bonn

Germany

E-mail: [info@crystalimpact.com](mailto:info@crystalimpact.com)

World Wide Web: <http://www.crystalimpact.com>

ソフトウェア Match!、付属の印刷物、ソフトウェア製品のコピー全ての著作権は Crystal Impact 社とその販売店に所属します。無断転載を禁じます。

本マニュアルのいかなる箇所も、事前に著作権所有者の許可なく、どのような形式や状態であっても、複製したり、情報検索システムに保存または送信してはいけません。

ソフトウェア Match! 製品は著作権法と国際条約規定で守られています。よって、ソフトウェア Match! は他の著作権のあるものと同じように扱ってください。ただし、ソフトウェア Match! は純粋にバックアップ及びアーカイブ目的でのみ、1つだけコピーの作成を許可します。

このソフトウェアは「そのまま」提供され、明示または言外に付けられた、商品性や特定の目的にかなっているということを含み、いかなる保証もいたしません。ソフトウェア製品の品質と性能に関するリスクは利用者にあります。

Crystal Impact はソフトウェア製品の機能がユーザの必要条件に見合うことや、ソフトウェアの動作が中断したりエラーが無いことを保証しません。

Match! バージョン 2 は Qt ライブラリを使います。Qt は複数のプラットフォームのアプリケーション開発に使う C++ ツールキットです(コピーライト (C) 2010 Nokia Corporation と/またはその子会社にあります)。詳しくは、次の Web ページをご覧ください。

Match! は LGPL v.2.1 ライセンス条件のもとで Qt ライブラリを使用しています

(<http://www.gnu.org/licenses/lgpl-2.1.html>)。ライセンスの § 4 でリクエストされているように、Match! は Qt を共有ライブラリとして使用します。Qt ライブラリのソースコードは、Crystal Impact 社のウェブサーバ (<http://www.crystalimpact.com/download/match/Qt/qt-everywhere-opensource-src-4.7.3.zip>) からダウンロードできます。

Mac は Apple Inc. の商標で、本社は Cupertino, CA, U.S.A. にあり、アメリカ合衆国と他の国々で登録されています。

Microsoft と Windows は Microsoft Corp. の登録商標で、本社は Redmond, WA, USA. にあります。

## 目次

|  |                        |
|--|------------------------|
| <b>Welcome!</b> .....                  | <b>1</b>               |
| <b>Match! バージョン 1 ユーザへの新機能紹介</b> ..... | <b>2</b>               |
| ツールバーとメニュー .....                       | 2                      |
| Windows に加え、Mac と Linux でも動作可能 .....   | 2                      |
| バッチ処理と自動化 .....                        | 2                      |
| 複数の回折パターンの表示と比較 .....                  | 4                      |
| 特定の相/エントリを素早く検索 .....                  | 4                      |
| 追加情報を瞬時に使用 .....                       | 7                      |
| 選択項目の保存 .....                          | 8                      |
| バックグラウンドの快適な定義 .....                   | 9                      |
| ズームとトラッキング機能の充実 .....                  | 10                     |
| 候補リストの統一 .....                         | 11                     |
| 多相サンプルで個別分量を手動で調整する .....              | 11                     |
| 2 $\theta$ シフトの調整をマウスで行う .....         | 11                     |
| 色、線のスタイル、フォントの選択 .....                 | 11                     |
| X 軸のスケール .....                         | 12                     |
| <b>ソフトウェアのメンテナンス</b> .....             | <b>13</b>              |
| Match! のインストールと起動 .....                | 13                     |
| ダウンロード版のインストール .....                   | エラー! ブックマークが定義されていません。 |
| DVD-R からインストール .....                   | エラー! ブックマークが定義されていません。 |
| スキルレベルの調節 .....                        | 15                     |
| オンラインアップデート .....                      | 15                     |
| Match! アンインストールする .....                | 15                     |
| Windows .....                          | 15                     |
| Mac OS X .....                         | 16                     |
| Linux (32-bit) .....                   | 16                     |
| <b>チュートリアル</b> .....                   | <b>17</b>              |
| 簡単な例題 .....                            | 17                     |
| <b>粉末から相同定を行うヒント</b> .....             | <b>23</b>              |
| <b>リファレンスパターンデータベース</b> .....          | <b>25</b>              |
| 概略 .....                               | 25                     |
| リファレンスデータベースライブラリ .....                | 26                     |
| 新しいリファレンスデータベースを作成する .....             | 28                     |
| PDF-4 または PDF-2 .....                  | 29                     |
| 古い形式の PDF-2 .....                      | 31                     |
| ユーザデータや ICSD/Retrieve .....            | 33                     |
| リファレンスデータベースを選ぶ .....                  | 35                     |
| リファレンスデータベースを追加する .....                | 35                     |
| リファレンスデータベースの名前を変更する .....             | 35                     |
| PDF-2 リファレンスデータベースをシフトする .....         | 36                     |
| リファレンスデータベースを削除する .....                | 36                     |
| ユーザデータベース .....                        | 37                     |
| 概略 .....                               | 37                     |
| ユーザデータベースを作成する .....                   | 37                     |
| 著作権について .....                          | 56                     |

|                                 |    |
|---------------------------------|----|
| 付録.....                         | 57 |
| スクリプトを利用してソフトウェアをコントロールする ..... | 57 |
| マウスボタンとキーの組み合わせ一覧表.....         | 59 |
| キーボードショートカットとファンクションキーの一覧表..... | 63 |
| サポート .....                      | 66 |
| 索引.....                         | 67 |



## Welcome!

このチュートリアルでは新しい Match! バージョン 2 を紹介します。ソフトウェアの中で最も重要な内容を順番に紹介していくので、すぐにご自身のプロジェクトで使えるようになるでしょう。

ソフトウェア Match! バージョン 2 へようこそ！この冊子はソフトウェアを初めて使う時の助けになる、多くの重要な情報を掲載しています。あまりお時間を取らないので、ぜひ読んでください。

まず、ソフトウェアのセットアップ（インストールやアンインストール）については p.13 の「ソフトウェアのメンテナンス」に載っています。ソフトウェアがマシンに正しくセットアップできたら、p.17 から始まるチュートリアルセクションを通してこのソフトウェアの基本的な使い方を学んでください。

旧バージョン、Match! バージョン 1 をすでに使っている方は p.2 から始まる「Match! バージョン 1 ユーザへの新機能紹介」も、ぜひご覧ください。この章ではバージョン間の主な変更点を簡単に確認できます。また、この章はソフトウェアの高度な機能を学びたいユーザにもお勧めです。

あなたが熟練者で、ソフトウェアの操作方法を手早く知りたい時は、付録内の p.59 にある「マウスボタンとキーの組み合わせ一覧表」をご覧ください。

その中でも 2 つほど、特に覚えておいていただきたいキーボードショートカットがあります。

- F1 (Mac では「Cmd+?」) キーを押すとオンラインヘルプの目次が開きます。これを使って必要な情報や、問題の解決策を検索できます。
- 「Ctrl+J<sup>1</sup>」はマウスの操作や使用可能なキーボードショートカットの一覧を表示します。

この 2 つのショートカットを使えば、ほとんどの問題や質問に対する答えを見つけることができるでしょう。

---

<sup>1</sup> Mac では「Cmd+J」と操作してください。

## Match! バージョン 1 ユーザへの新機能紹介

ここでは、Match! バージョン 1 とバージョン 2 の特筆すべき違いを紹介していきます。この章はバージョン 1 をご利用いただいたユーザ向けに書いてありますが、Match! の高度な機能を学びたい新規ユーザもぜひ読んでください。

### ツールバーとメニュー

まず、グラフィックパターンや候補リスト等の多くのツールバーはコンテキストメニューに置き換えられました。それぞれ対応するコンテキストメニューを開くには、画面上の対応するエリアで**右クリック**してください。

### Windows に加え、Mac OS X と Linux でも動作可能

旧バージョンのように、Match! バージョン 2 は Windows で動作します。そして今回、Mac OS X や Linux のプラットフォームでもご利用いただけるようになりました。ソフトウェアを購入する時にどの OS のものにするか決める必要はありません。Match! 2 の DVD-ROM には、3 つのプラットフォーム全てのインストールパッケージが含まれているので、どのプラットフォームでも Match! 2 をインストールできます。Match! 2 をインストールできるコンピュータの台数はご購入いただいたライセンス形態（シングル、サイト、キャンパスライセンス）およびライセンス数の制限に依存します。

ソフトウェアは Intel ベースの Mac OS X (10.5 "Leopard"、10.6 "Snow Leopard"、10.7 "Lion"、Linux (Intel 32 ビット)、Windows XP、Vista、Windows 7 で動作のテスト済みです。

ただし、Mac OS X と Linux では、Match! と連携して動作するソフトウェアやデータベースの対応 OS によって制限があります。ICDD PDF-4 と 2005 年以降の PDF-2 のデータベースは Mac と Linux に対応していません。

### バッチ処理と自動化

この機能を最初に紹介するのは少し不思議かもしれませんが、ソフトの初回起動時にすぐ違いに気が付くでしょう。

以前の Match! バージョン 1 と同様に、Match! バージョン 2 は複数の処理の自動化機能を備えています。プログラムに対して、あるステップが先に完了した時、次に行うべきステップの定義もできます。例えば、Match! に生データをインポートした直後に処理を開始するように定義することも可能です。



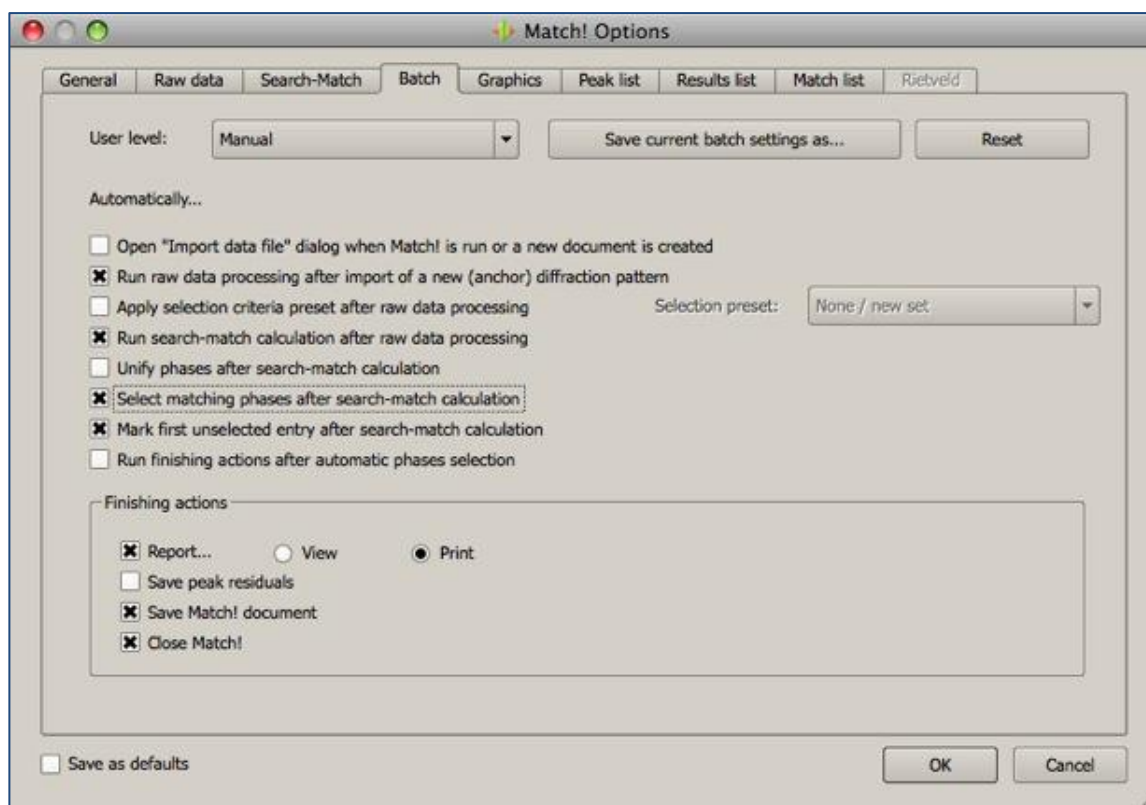


図 1：この"Options"ダイアログ ("Tools"メニューから開きます) では、自動化作業の順番を細かく定義できます。

新バージョンでは、これらのオプションが拡張されてより充実しました。バージョン 2 では、自動的に複数のマッチング相を 1 度を選択できるので（バージョン 1 では 1 度にできるのは 1 つのみでした）、プログラムは（原則として）自動的に結晶質の相を持つ化合物の構成要素を算出することができます。しかし、経験則からこの手法では少量の相を見逃しやすいことも分かっています。また、ソフトウェアでは対応できない問題も起こるでしょう。

オプションをステップごとに設定する他に、"Tools/Options"ダイアログの"Batch"オプションタブの上部では"ユーザレベル (User Levels)"を設定できます。ユーザレベルはユーザの熟練度に合わせて予め自動化するオプション項目を選択するものです。例えば、"Automatic"レベルは全自動で相同定の過程を行い、"Expert"レベルは各ステップを手動で実行するようになります。また、必要に応じてバッチオプションを個別に設定し、新しいユーザレベルとして保存することもできます。

デフォルトでは、"Beginner" モードに設定されています。これは、初期ステップがほぼ自動化してある状態です。ユーザが実際に行うことは、分析したい回折ファイルを選択するだけです（ソフトウェアが開始すると同時にファイルを選択するポップアップが表示されます）。

その後、Match!は自動的に生データを処理し、ピークを特定してサーチマッチの演算を行います。この後、残っている手順はマッチングする相を選び（候補リストから該当するエントリをダブルクリックかドラッグで左側のマッチ (Match) リストに移動する）、最後に、マッチした相のリストや任意分量を示したレポート ("View/Report"から選択できます) を表示します。

あなたが熟練のユーザで、更に複雑なサンプルを計測したい時に上記の方法が適しているとは言えません。よって、バッチモードの項目を選択から外したり、別のものを選んだりできます。操作としては、"File import"ダイアログを"cancel"し（または、演算が終わるまで待つ）、メニューから"Tools/Option"と操作します。"Options"ダイアログの"Batch"タブでご自身のレベルに合ったものをお

選んでください。レベルはデフォルトの"Beginner"モードから全てのステップを手動で行う"Expert"モードまであります。もちろん、必要に応じて個別のバッチステップも選択できます。

最後に、Match! の新バージョンは外部のプログラムからバッチスクリプトを利用して Match! をコントロールできます。このバッチスクリプトのファイル名は Match! の実行ファイル (exe ファイル) を実行する時に"command line parameter"として作成する必要があります。詳細は付録の 57 ページをご覧ください。

## 複数の回折パターンの表示と比較

旧バージョンの Match! では、1 回あたり 1 つの実験回折パターンしかインポートできませんでした。この新バージョンでは、追加パターンのインポートができ (「Ctrl+I」を押す)、メインの実験パターンの上に表示できます。例えば、この機能は複数のデータセットを集めた祭に、ある特定のピークの有無を確認する場合などに役立ちます。また、マウスカーソルを使い垂線を引く (「Ctrl+X」を押す) こともでき、ピークの位置を正確に比較できます。

## 特定の相/エントリを素早く検索

この新機能は多くの場面でとても役立ちます。新バージョンでは以下のタスクを素早く実行できます。

- 例えば、サンプル内に存在する 1 つ以上の相が分かっている時に、その分かっている相を素早く同定してから残りの相同定を行うことができます。
- また、特定の化合物がサンプル内に存在する可能性がある場合、それを調べるために関連するリファレンスパターンを素早く確認できます。
- $2\theta$  エラーの補正のための内部標準として利用するために、特定の相を素早く見つけてハイライトできます。
- 特定の化合物のデータシートを簡単かつ素早く表示することができます。

操作としては、「Ctrl+F」を (Mac では「Cmd+F」) 押し、(または、ツールバーの右側にある新しい"Find phases/entries"フィールドをクリックし) 名前、化学式、エントリ番号を 1 つないし複数入力して「Enter」(あるいは「Return」) を押します。

Match! は該当するエントリを画面下部にある候補リストに表示します。そして、各項目 (名前、化学式など) で最も良くマッチするものをハイライトします。そして、対応する回折パターンがパターン画像として上のエリアに表示されます。

この時点で、次のことを行う準備が整いました。

- リファレンスパターンと実験で得られたパターンを視覚的に比較できます。(また、自動的に算出する figure-of-merit (FoM、性能指数) 値を確認できます。)
- マッチングした相を"matching phase"としてマッチングリストに追加するにはスペースキーを押します。
- 特定の 1 つのエントリのデータシートを「Ctrl+D」(Mac では「Cmd+D」) で表示できます。

- ハイライトしたエントリを内部基準として  $2\theta$  エラーを訂正するには「Ctrl+T」（Mac は「Cmd+T」）を押します。

例題を 1 つ紹介します。実験回折データをインポートし、生データの処理を行います。その後、最初のサーチマッチを行って候補エントリの figure-of-merit (FoM) を計算します。これで、実際に相同定を行う準備が整いました。画面は、図 2 のようになります。

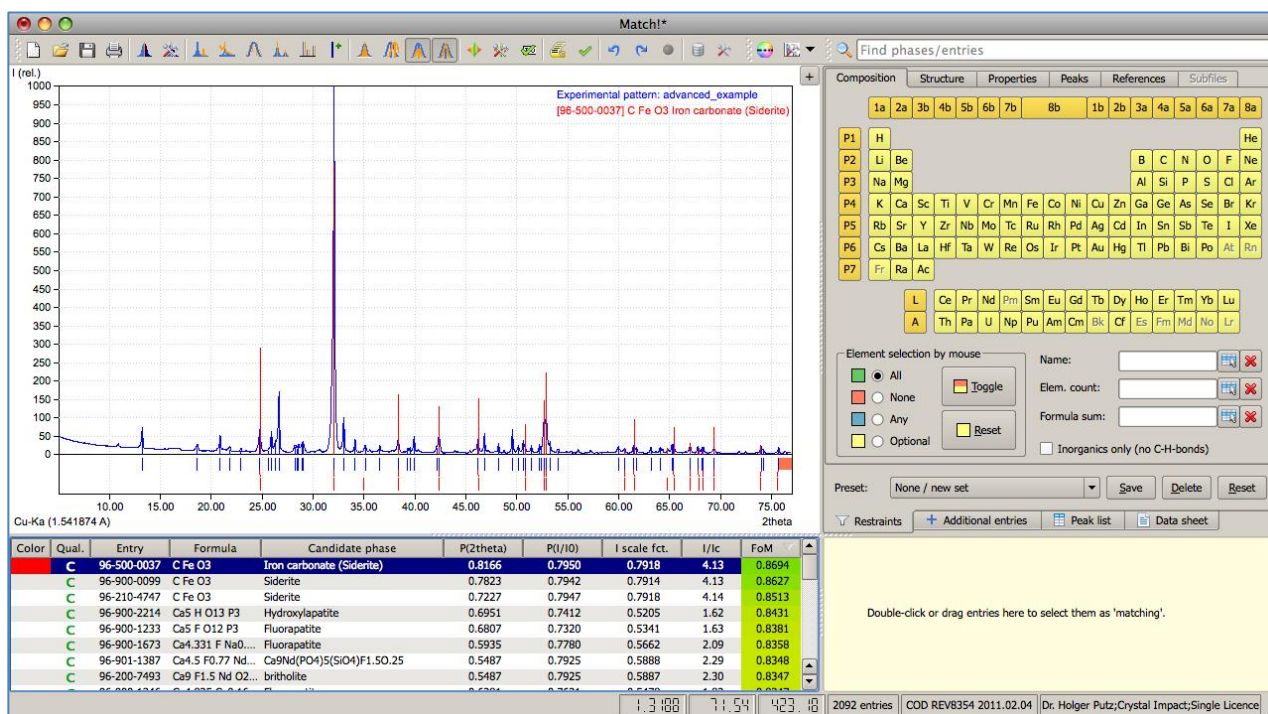


図 2：生データをインポート後に処理を行い、サーチマッチ計算を行うと、このような画面になります。

では、クォーツ (quartz) の回折パターンを見つけ、表示しましょう。キーボードで「Ctrl+F」（Mac では「Cmd+F」）を押します。そして、カーソルが検索ボックスに動いたところで「quartz」と入力し「Enter」を押します。最も良くマッチしたクォーツのエントリは候補リスト上でハイライトされ、回折パターンを表示します (図 3)。



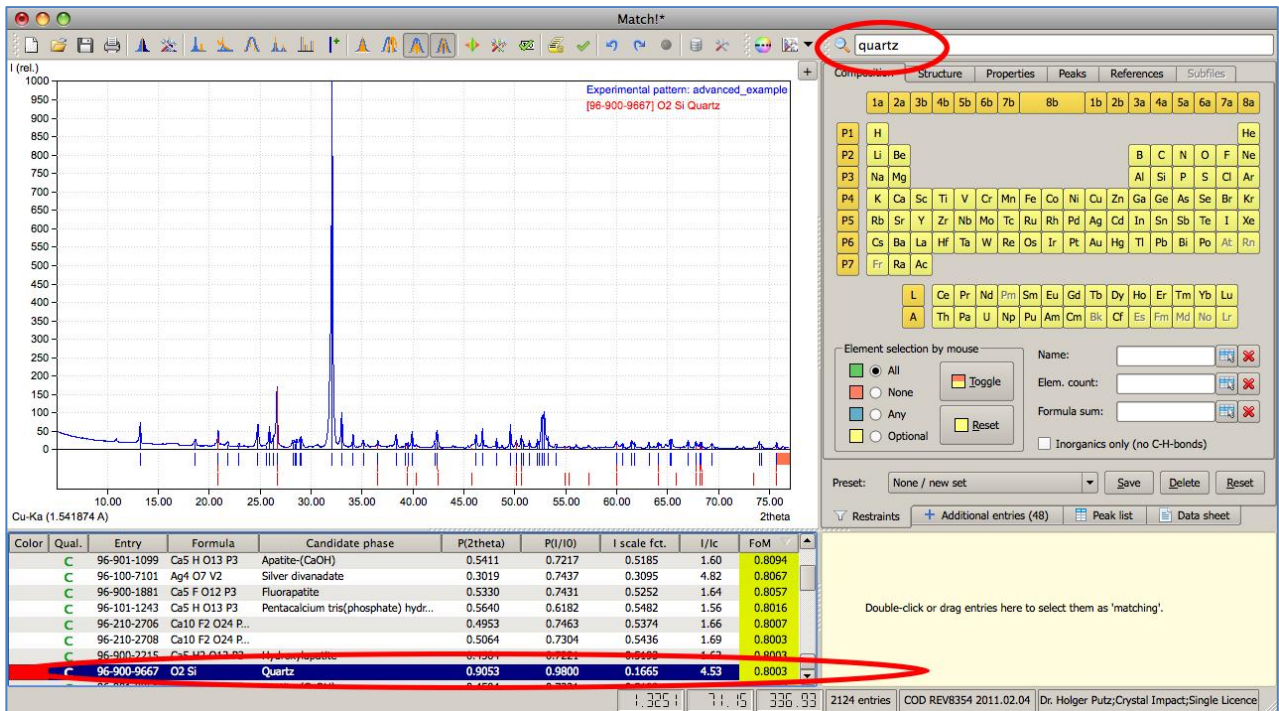


図3: 「Ctrl(Cmd)+F」を押して選択項目を入力した後(この例では"quartz")に、最もマッチするエントリが候補リスト内で自動的にハイライトされます。

最も良くマッチするエントリは候補リスト内ですでに選択されているので、すぐに内部基準として  $2\theta$  エラーを修正するのに使用できます。修正を行うには、「Ctrl+T」を押します。実験ピークの新しい(修正した)  $2\theta$  値は、自動的に全ての表示に反映され、候補リストが自動的に更新されます。

修正をかけたので、実験結果とクォーツのリファレンスパターン間の重なりがより鮮明になり、この相およびエントリの figure-of-merit (FoM) 値が大きくなりました。結果として、候補リスト内で先ほどよりも上部に配置されます(図4)。

| Color | Qual. | Entry       | Formula | Candidate phase                           | P(2theta) | P(I/I0) | I scale fct. | I/Ic | FoM    |
|-------|-------|-------------|---------|---|-----------|---------|--------------|------|--------|
|       | C     | 96-500-0037 | C Fe O3 | Iron carbonate (Siderite)                 | 0.8229    | 0.7950  | 0.7918       | 4.13 | 0.8583 |
|       | C     | 96-900-0099 | C Fe O3 | Siderite                                  | 0.7898    | 0.7942  | 0.7914       | 4.13 | 0.8519 |
|       | C     | 96-210-0189 | O2 Si   |   | 0.9359    | 0.9925  | 0.1663       | 4.76 | 0.8511 |
|       | C     | 96-900-9667 | O2 Si   | Quartz                                    | 0.9339    | 0.9923  | 0.1665       | 4.53 | 0.8508 |
|       | C     | 96-901-2601 | O2 Si   | Quartz                                    | 0.9342    | 0.9925  | 0.1664       | 4.75 | 0.8508 |
|       | C     | 96-901-3322 | O2 Si   | Quartz                                    | 0.9311    | 0.9926  | 0.1663       | 4.74 | 0.8502 |
|       | C     | 96-101-1173 | O2 Si   | Silicon oxide $\beta$ -alpha (Quartz low) | 0.9283    | 0.9926  | 0.1665       | 4.64 | 0.8497 |
|       | C     | 96-101-1098 | O2 Si   | Silicon oxide $\beta$ -alpha (Quartz low) | 0.9271    | 0.9929  | 0.1662       | 4.43 | 0.8494 |

図4: 候補リスト内で最も良いマッチとして、クォーツ (quartz) を自動的に選択します。

では、クォーツのエントリをマッチしたとして選択します。候補リスト内でハイライトされたままなので、そのままキーボードのスペースキーを押してください。エントリが右側にあるマッチリストに移動すると、候補リストは瞬時に更新され、次のマッチ候補物質をハイライトします(この例では菱鉄鉱 (Siderite) です)(図5)。

| Color | Qual.       | Entry   | Formula                                   | Candidate phase | P(2theta) | P(I/I0) | I scale fact. | I/Ic   | FoM | Color | Entry | Formula | Matched phase | Quant.(%) |
|-------|-------------|---------|---|-----------------|-----------|---------|---------------|--------|-----|-------|-------|---------|---------------|-----------|
| C     | 96-500-0037 | C Fe O3 | Iron carbonate (Siderite)                 | 0.8229          | 0.7950    | 0.7918  | 4.13          | 0.8583 |     |       |       |         |               |           |
| C     | 96-900-0099 | C Fe O3 | Siderite                                  | 0.7898          | 0.7942    | 0.7914  | 4.13          | 0.8519 |     |       |       |         |               |           |
| C     | 96-210-0189 | O2 Si   | Quartz                                    | 0.9359          | 0.9925    | 0.1663  | 4.76          | 0.8511 |     |       |       |         |               |           |
| C     | 96-900-9667 | O2 Si   | Quartz                                    | 0.9339          | 0.9923    | 0.1665  | 4.53          | 0.8508 |     |       |       |         |               |           |
| C     | 96-901-2601 | O2 Si   | Quartz                                    | 0.9342          | 0.9925    | 0.1664  | 4.75          | 0.8508 |     |       |       |         |               |           |
| C     | 96-901-3322 | O2 Si   | Quartz                                    | 0.9311          | 0.9926    | 0.1663  | 4.74          | 0.8502 |     |       |       |         |               |           |
| C     | 96-101-1173 | O2 Si   | Silicon oxide $\beta$ -alpha (Quartz low) | 0.9283          | 0.9926    | 0.1665  | 4.64          | 0.8497 |     |       |       |         |               |           |
| C     | 96-101-1098 | O2 Si   | Silicon oxide $\beta$ -alpha (Quartz low) | 0.9271          | 0.9929    | 0.1662  | 4.43          | 0.8494 |     |       |       |         |               |           |

図5: 最も良いマッチであるクォーツが"マッチ"として選択されます。

実際の操作では、候補リスト内の物質を比較し、スペースキーを押して選択するとマッチ欄に移動します。この操作を繰り返して最終的にサンプル内の全ての相を同定します。

## 追加情報を瞬時に適用

Match! 2 では、サンプルに関する追加情報（例えば、含まれる元素など）を直接、簡単に入力できます。バージョン 1 のように、"Restrains"ダイアログを開く必要はありません。対応するコマンドは、右側上部の"Restrains"または"Additional entries"のタブに全てあり、結果は瞬時に画面下部の候補リストに反映されます。（もちろん、サーチマッチ計算中のエントリにも反映されます。）このテクニックは"perpetual restraining"（リアルタイムで検索結果を反映させる機能）と呼ばれ、"Pearson's Crystal Data"のような別のソフトウェアでも使われています。

例えば、酸素元素（O）がマッチする全ての相に存在すると分かっているとしましょう。この情報を使うには、右側上部にある元素周期表で該当する元素をクリックします。Match! は即座にこの情報を現在の結果（画面下部の候補リスト）に反映します（図 6）。

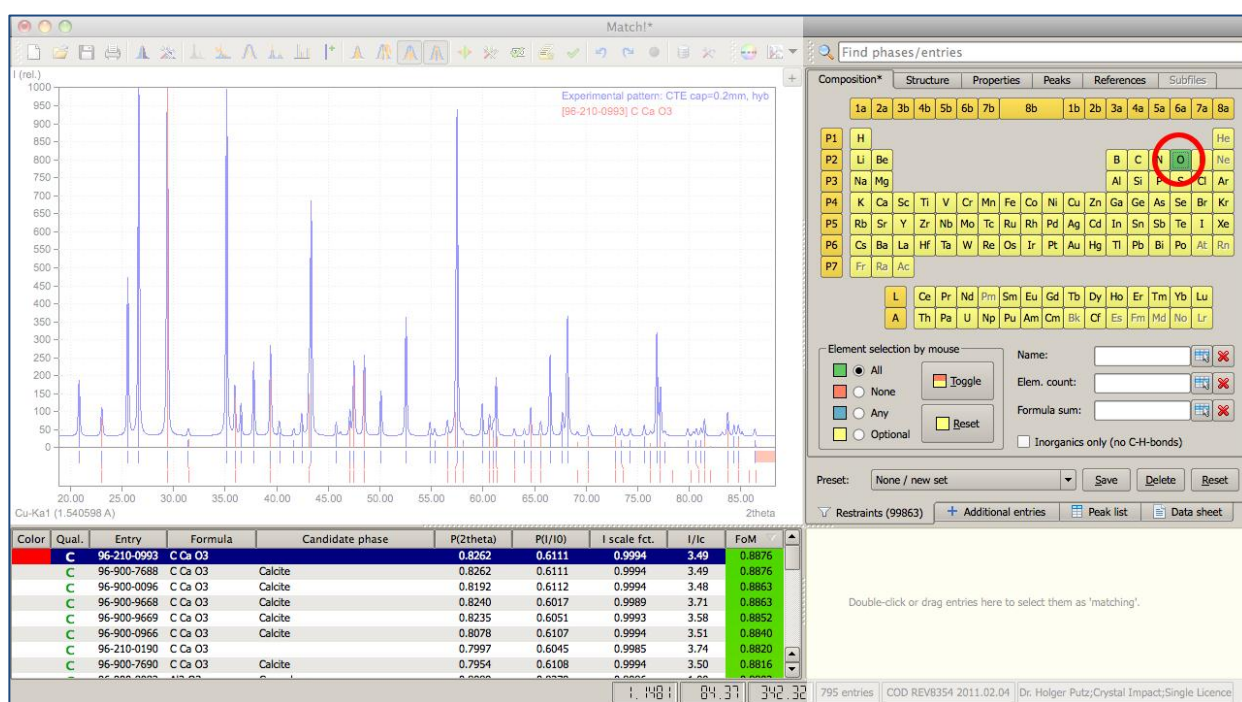


図 6：「O」のボタンを右側上部の元素周期表で選択すると、選択した項目が左側の候補リストですぐに使用されます。

ご覧のように、Match! バージョン 2 は"Pearson's Crystal Data"と同じく、選択した内容をリアルタイムで反映する仕組みを採用していることが分かります。絞り込む項目を入力中に変更する時でも、その変更はリアルタイムで反映されるので、表示結果のエントリが変わっていきます。

例えば、ケイ素（元素記号 Si）がこの化合物に含まれるという情報を追加します。この操作は右側上部にある、元素周期表の「Si」をクリックして行います。すると、画面下部にある候補リストは瞬時に更新され、それまでリスト上にあった方解石（ $\text{CaCO}_3$ ：カルサイト）の情報がなくなります。これで選択した項目にマッチする数（"Restrains"とあるタブの右側に表示される数字）が大幅に削減されました（この例では 99863 から 7913 になりました、図 7）。



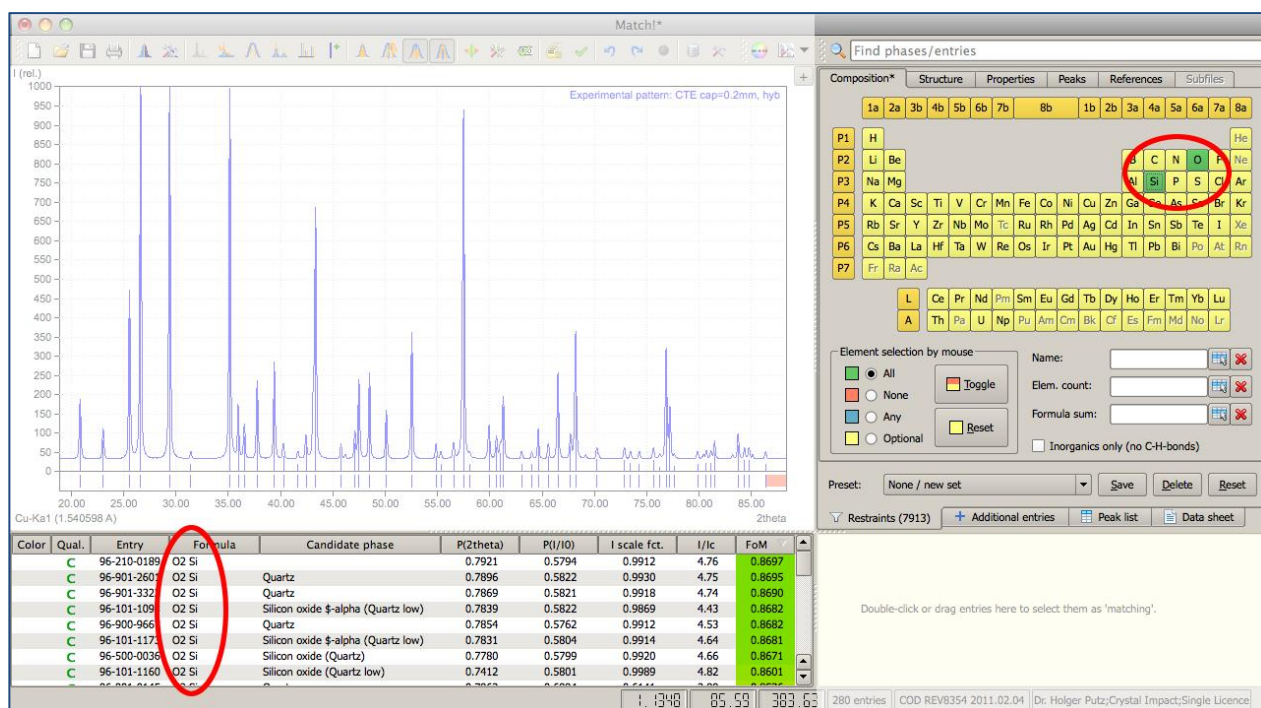


図7: 2つ目の元素「Si」をクリックすると、シリコンと酸素（SiとO）の両方を含む候補のみリストに残ります。

同じように、特定のエントリを候補リストに追加することもできます。"Additional entries"のタブをクリックしてください。すると、色は変化しますが"Restrains"と同じ項目のタブシートが表示されます。このタブでは、"Restrains"に入力した項目とは関係なく、必要な情報を追加できます。

## 選択項目の保存

Match! バージョン 1 と同じ制限（選択項目）を頻繁に使用しているなら、すぐにこの機能について思い当たるでしょう。新バージョンでは現在の選択条件を簡単に保存でき、それをわずか 2 クリックで再び利用できます。もちろん、複数の選択項目セットを保存できます。

対応する操作に必要なボタンなどは"Restrains"（と"Additional Entries"）エリアの下部、"Preset"の右にあります（図8）。

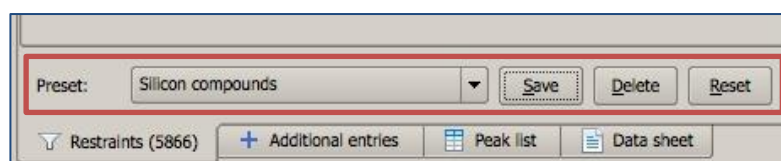


図8: 元素周期表の下にあるボタンで制限や追加のエントリ設定を簡単に保存および呼び出しできます。

現在の選択項目を保存するには、単純に"Save"ボタンをクリックします。その後に各設定を見分けるために名前を付けてください（図8の例では"Silicon compounds"となっています）。

選択項目はパーソナルセッティング（例えば、Windows のレジストリ）に保存されます。他の人が同じコンピュータを使用している時、ユーザーごとに設定を保存できます（ただし、これはそれぞれ別のアカウントを使用していると仮定しています）。

保存した選択項目のうち特定のものを開く時は、単純にコンボボックスの矢印ボタンをクリックします。そして開くリストから目的の名前の付いた選択項目を選びます。

それだけです。目的の選択項目セットはすぐに適用され、候補リストの項目を変更します。また、サーチマッチの計算中に検証されるエントリに関しても同様です。

## バックグラウンドの快適な定義

旧バージョンの **Match!** はバックグラウンドの定義に対して弱みがあり、自動的に定義されるバックグラウンドを変更できませんでした。多くの場合、この自動定義のバックグラウンドで問題はありませんが、たまにバックグラウンドを正しく定義しないこともありました。

バージョン 2 では、バックグラウンドの対応をより柔軟に出来るように改良しました。バージョン 1 のように、回折データをインポートした時にバックグラウンドを自動で定義します。その後、バックグラウンド曲線の形を変更できるようになり、表示されるバックグラウンドの曲線をドラッグ移動するだけで変えることができます。また、コントロールポイントの追加や削除は目的の位置で右または左クリックを 1 回するだけで行えます (図 9)。

この操作には、まず、バックグラウンドの曲線を表示する必要があります。ディスプレイのバックグラウンド曲線は、回折パターンを右クリックし、コンテキストメニュー内から "Background" を選べば表示と非表示を切り替えられます。

バックグラウンドが表示されたら、曲線上に表示される小さい四角形に注目してください。これらの四角形は "バックグラウンドコントロールポイント (background control point)" と呼ばれています。このポイントは、マウスのカーソルを目的の四角形の上に移動し、ドラッグして動かします。

コントロールポイントを追加する時 (例えば、ある一定範囲のバックグラウンドをより正確にしたい時) は、まずカーソルをバックグラウンド曲線上の目的の位置に移動します。すると、そのカーソルが変化します (カーソルの左上に "+" が表示されます)。カーソルが変わってから 1 回クリックをすると、クリックした位置にコントロールポイントを追加します。

コントロールポイントを削除するにはその上にマウスを移動し、右クリックしてください。

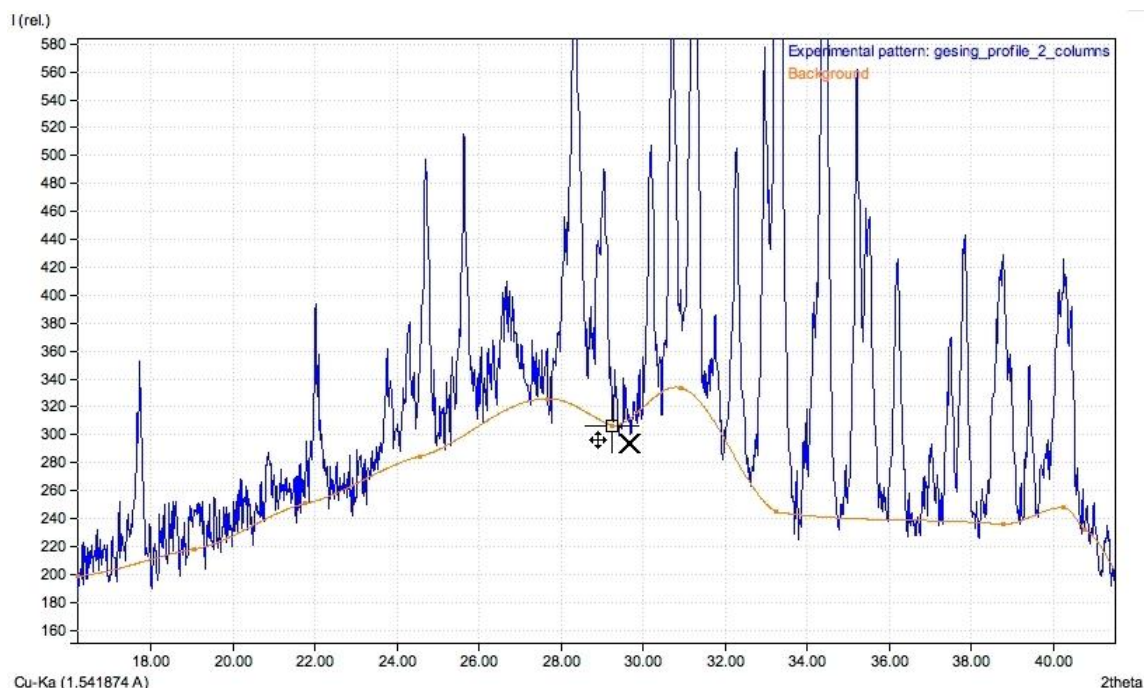


図 9 : マウскарソルが示すように、カーソルが上にあるコントロールポイントを変更できます。移動するにはコントロールポイントをクリックしてドラッグ、消去するにはコントロールポイント上で右クリックしてください。

## ズームとトラッキング機能の充実

Match! バージョン 1 では、とても簡単にズームできました。シンプルに、詳細を確認したい  $2\theta$  範囲を選択すれば、ソフトが自動的に回折パターンを指定の  $2\theta$  範囲に狭め、強度軸(縦軸)も自動的に設定されました。この仕様は分かりやすかったのですが、柔軟性に乏しいという欠点がありました。

バージョン 2 では、この機能が大幅に改善されました。旧バージョンのように回折パターン画像の中でマウスを使って特定の範囲を選べば、Match! はその範囲を拡大して表示します。その時、 **$2\theta$  範囲のみならず、強度軸の範囲も同時に選択できる**、という大きな違いができました。つまり、回折パターン画像の中に四角形をドラッグして描けば、Match! はその範囲を拡大します。

また、単純に**ダブルクリック**でマウскарソルの周辺を拡大できます。元の画面に戻るにはもう 1 度ダブルクリックしてください。

他に、**マウスホイールを使って拡大**できるようになりました。回折パターン内で拡大したいエリアにマウскарソルを移動します。マウスホイールを上（奥）に向かって回転させると**カーソル位置に向かってズーム**していきます（逆に、縮小するにはホイールを下（手前）に向かって回転させてください）。

1 度回折パターンにズームしたら、**Shift キー**（または、マウスの中央ボタンおよびホイール）を押しながら(**Shift キーの場合はマウスのボタンを押さずに**)マウスを移動させます。するとその拡大率で画面を移動できます（これは、トラッキングと呼ばれます）。

最後に、表示する範囲（強度と  $2\theta$ ）を定義することもできます。対応するダイアログが新たに提供されています（メニューから"View/Define zoom area..."と操作します）。



## 候補リストの統一

Match! バージョン 2 は、新機能として"Unify phases" (相統一) を導入しました。このコマンド ("Entries"メニューから"Unify phases"を選ぶか、「Ctrl(Cmd)+U」を押してください) は候補リスト内で同じ相を表しているものにチェックを付けます。このような、重複エントリ ("duplicate entries") が見つかったら、Match! はその中で最も良くマッチするもの以外をリストから除外します。比較するための情報として、Match! はその相の構成と粉末回折パターン (R 因子) を同じように利用します。

特にこのコマンドは、特定の相ブロックの複数エントリを表示しないようにするので、相のマッチング前に行うと便利です。

## 多相サンプルで個別分量を手動で調整する

旧バージョンの Match! で半定量的な分量を計算するには、その物質に対応する自動判別の強度スケールを元に行っていました。バージョン 2 からこの強度スケールの因子を手動で変更できるようになります (つまり、個別の相の分量も同じように変更できるようになります)。この操作は 2 通りの手順で行えます。

- 1 つ目はその分量を調節したい相またはエントリをマッチリストの右側で印を付けることです。それから、マウスのカーソルを回折パターン画像で対応するピークのところに移動し、クリック&ドラッグでマウスを上下に移動します。マークの付いたエントリまたは相の分量 (強度スケールの要素) はそのマウスの動きに合わせて変化します。マウスを上には動かせば印の付いた分量は増加し、マウスを下には動かせばその分量は減少します。印のついていない相の分量は自動で調整されます。
- あるいは、相またはエントリをマッチリスト内で選択し (上記オプションと同じように操作します)、その目的のエントリでマッチリスト内にある列"Quant.%"にマウスカーソルを移動します。そして、マウスホイールを使用してこの相の分量を変更します。

## 2θ シフトの調整をマウスで行う


バージョン 2 では、実験回折パターンの 2θ シフトはマウスを使いながら手動で変更できるようになります (バージョン 1 での対応する関数"Pattern"メニューから変更する以外の方法です)。

実験回折データを 2θ (X) 軸でシフトするにはマウスを回折パターン画像内に移動し、「Ctrl」と「Alt」キーを押します (Mac では「Cmd」と「Alt」キーを押します)。カーソルは垂線と左右に広がる矢印に変わります。そのまま「Ctrl」(「Cmd」) と「Alt」キーを押したまま、マウスホイールを上 (奥) に向かって回すと、実験データを大きい 2θ 値にシフトします。反対にマウスホイールを下 (手前) に回すと、より小さい角度にシフトします。この変更は候補リストとリファレンス回折パターンのピーク相関にも自動的に適用されます。


元の 2θ 値に戻すにはマウスホイールをクリックします。

## 色、線のスタイル、フォントの選択

Match! 2 では実験回折データ、計算で求められたパターン、リファレンスパターンなどの色や線のスタイルを個別に設定できます。また、回折パターンに付けるテキストラベルやダイアログの要素 (ボタンやダイアログウィンドウのテキスト等) のフォントも変更できます。

これらの変更は"Tools"メニューから"Colors and line styles"を選択するか、ツールバーで対応するボタンをクリックすると開くダイアログで変更できます。このダイアログの変更をデフォルトとして保存するにはダイアログの下にある、"Save as defaults"のチェックを付けてください。

## X 軸のスケール

新バージョンでは、回折パターン画像の  $2\theta$  値と  $d$  値だけではなく、 $1/d$  も X 軸に表示できます。変更するには、"Tools/Options"ダイアログ内の"Graphics"ページから操作するか、キーボードショートカットである、「Ctrl」+「Alt」+G (Mac では「Cmd」+「Alt」+G) を押すか、対応するツールバーボタンを押すとダイアログを表示します。

# ソフトウェアのメンテナンス

## Match! のインストールと起動

### Windows 版

始めに、システム条件を確認してください。

- Microsoft Windows XP、Vista、Windows 7 を搭載した PC
- 1GB 以上の RAM
- 1.5GB 以上の空き容量を持つ HDD
- 最低 1024x768 ピクセルの画像解像度（1280x800 ピクセル以上推奨）

※インストール方法の詳細については、製品に同梱されている Match! 2 のインストールガイドもご参照ください。

Match! 2 をインストールするには、Match! 2 のプログラム DVD からインストーラーを実行してください。Windows 用インストーラーの最新版を次のリンクからダウンロードすることもできます。

<http://www.crystalimpact.com/match/download.htm>

Microsoft Vista および Windows 7 の OS を使用する場合、管理者としてインストーラー（アンインストール時を含む）を実行する必要があります。「管理者として実行」するには、インストーラーのアイコンを右クリックし、コンテキストメニューから「管理者として実行」を選択します。

"End User License Agreement" の内容はインストーラーダイアログの第 2 画面に表示されます。

インストール終了後、インストールしたディレクトリ（初期設定では、"C:\Program Files\Match! 2"）の"Match!.exe"をダブルクリックすると Match! が起動します。あるいは、デスクトップに作成されるショートカットアイコン"Match!" をダブルクリックするか、Windows の"スタート"ボタンをクリックし、"Match2/Match!" を選んでも、同じように起動できます。

### Mac OS X 版

Match! のインストールと起動の前に、次のシステム条件を確認してください。

- Intel プロセッサと Mac OS X 10.5.8 "Leopard"以降を搭載した Macintosh
- 1GB 以上の RAM
- 1.5GB 以上の空き容量を持つハードディスク
- 最低 1024x768 ピクセルの画像解像度（1280x800 ピクセル以上推奨）

Mac OS X 用の Match! 2 をインストールするには、DVD の"Mac OS X"のインストーラーを実行します（その際、管理者のパスワードの入力を求められます）。インストーラー実行中はその指示に従って

ください。"End User License Agreement" の内容がインストーラーのダイアログの第 2 画面に表示されます。インストーラーの最新版を次の URL からダウンロードして、使用することもできます。

<http://www.crystalimpact.com/match/download.htm>

インストールが終了したら、Match! を起動します。起動するにはデスクトップに作成されるアイコンをダブルクリックするか、Finder を使用して実行します（デフォルトフォルダ "Application/Match2"）。

### Linux (32-bit)

Match! のインストールと起動の前に、次の最低システム条件を確認してください。

- PC の OS が Linux（Intel 32-bit 版）であること（openSUSE、Ubuntu、Fedoranado など）
- 1GB 以上の RAM
- 1.5GB 以上の空き容量を持つハードディスク
- 最低 1024x768 ピクセルの画像解像度（1280x800 ピクセル以上推奨）

インストールするには、DVD の"Linux"ディレクトリ内にあるのインストーラーを使用します。また、インストーラーの最新版を次の URL からダウンロードして、使用することもできます。

<http://www.crystalimpact.com/match/download.htm>

インストーラーをハードディスクの一時的なディレクトリにコピーします。そして、ファイルへのアクセス権限を確認してからインストーラーを実行します。実行権限がない場合、次のコマンドを実行してください。

```
chmod a+x Match-2.0-linux-installer.run <Return>
```

更に、ソフトウェアを root 権限（管理者権限）でインストールする必要があります。これにはインストーラー(ファイル "Match-2.0-linux-installer.run")を実行する前に"su"コマンドを実行するか、"sudo"コマンドを実行時に使用してください（下記参照）。

```
sudo Match-2.0-linux-installer.run <Return>
```

インストーラー実行中はスクリーンの指示に従ってください。"End User License Agreement"がインストーラーの第 2 画面に表示されます。

インストールの終了後、デスクトップのアイコンをダブルクリックすると Match!が起動します。または、"(Computer/)Applications/Other/ Match!"と操作するか、ソフトウェアをインストールしたディレクトリ（デフォルトでは"/opt/Match2" です）内で"Match.sh"というスクリプトで実行します。

### ライセンスのインストール

ダウンロードパッケージからメインとなるソフトウェアのインストールが終了すれば、Match! は評価版として起動します。評価版はインストールから 60 日間使用できます。その後、ライセンスをインストールして評価版ではなく製品版（無期限のもの）に切り替える必要があります。

ライセンスをインストールする方法は、Match! 2 のライセンス CD に保存されている"yourlicense.lic" というファイルをプログラムディレクトリ内にコピーするだけです。ソフトウェアがインストールされるディレクトリはデフォルトでは以下のようになっています。

- **Windows:** C:¥Program Files¥Match! 2
- **Mac OS X:** /Applications/Match2
- **Linux:** /opt/Match2

このタスクを実行するには、管理者権限が必要になることもあります。

コピーした後、正しいディレクトリにライセンスがコピーできたことを確認してから Match! を起動してください。取得したライセンスは、プログラムがスタートする時の画面（スプラッシュ画面）の下部、ステータスバーの右側（プログラムウィンドウの下部）、ヘルプメニューの"About Match!"ダイアログやシステムメニューで確認できます。

## スキルレベルの調節

Match! はデフォルトで"Beginner"設定で起動するようになっており、多くのステップを自動で行います。ソフトウェアが起動してから、まずはインポートする回折データファイルの選択をするように促されます。選択すると Match!は自動的に生データの解析とサーチマッチを行います。

このバッチ機能は変更および無効化できます。設定を変更するには"File import"ダイアログを"cancel"し（または、自動操作が終わるまで待ち）、メニューから"Tools/Options"と操作します。"Options"ダイアログの"Batch"タブではスキルレベル（デフォルトである"Beginner"から全てのステップを手動で行う"Expert"まで）を変更できます。もちろん、必要に応じて自動化するバッチ処理のステップを選択できます。

## オンラインアップデート

デフォルトでは、起動時に Crystal Impact 社の Web サーバーに Match! の最新版が存在するか、自動で確認します。最新版がある時は、ユーザに情報を伝えるダイアログが開きます。最新版をダウンロードできる Web ページに移動し、最新版のインストーラーをダウンロードできます。

手動で最新版の有無を確認することもできます。操作としては"Help"メニューから"Check for updates..."を選びます。その後の操作は自動アップデートと同じように操作します。

## Match! をアンインストールする

### Windows

Match! をアンインストールする場合、Windows の"スタート"ボタンをクリックし、"すべてのプログラム"の中から"Match! 2"のフォルダを選びます。そのフォルダ内にある"Uninstall Match!"を選択すればアンインストールできます。

Microsoft Vista か Windows 7 を使っている場合、アンインストーラーを実行する時に「管理者として実行」を選ぶのを忘れないでください。「管理者として実行」するには、"Match! 2"のフォルダ内にあ

る"Uninstall Match!"のアイコン上で右クリックを行い、コンテキストメニューから「管理者として実行」を選択します。

あるいは、Windows の"スタート"メニューから"コントロールパネル"を選びます。それから"ソフトウェア" (OS によっては"プログラムの追加と削除"および"プログラムと機能"と表記されます) を選ぶと、Windows のソフトウェアのアンインストールダイアログが表示されます。"Match! 2"を選び、"変更/削除"を選びます。(OS により、表記が異なる可能性もあります。) アンインストールのプログラムが起動したら"OK"を選びます。

### Mac OS X

Match! をアンインストールしたい場合、Finder を使用して"Applications/Match2"フォルダ内にある"uninstall"をダブルクリックしてください。

### Linux (32-bit)

Match! をアンインストールしたい場合、root 権限("su"または"sudo"コマンドを使用)に切り替えてから、Match! のプログラムディレクトリ内の"uninstall"を選択 (例えば"/opt/Match2/uninstall"とある) してください。

## チュートリアル

このチュートリアルでは、新しいソフトウェア Match! バージョン 2 の紹介をします。ソフトウェアの中で最も重要な内容を順番に紹介していくので、すぐにご自身のプロジェクトで使えるようになるでしょう。

あなたは今 Match! を使って相同定を始めたいと、うずうずしているのではないのでしょうか。本章のセッションは Match! の最も重要な機能をカバーしているので、一読された後であればすぐにでもご自身の相同定の課題に着手できるはずです。

チュートリアルセッションに入る前に Match! の設定をデフォルト値に戻しておいてください。同僚の方が設定を変更してしまっている可能性もあるからです。そのためにはまず Match! を起動します。次に "Tools" メニューから "Restore factory settings" コマンドを選択してください。これですべての設定値はデフォルトの状態に戻ります。また、"Tools" メニューから "Save as defaults" コマンドを選択すると、その状態が恒久化されます。これで Match! はインストールされたときと同じ状態で動作することになります<sup>2</sup>。

すべてのチュートリアルセッションは COD-Inorganics を参照データベースとして使用しています。ICDD PDF のような他のデータベースやご自身で作成した回折データを使用する場合、結果が異なります。また、同じ COD-Inorganics を使用していても、データベースのバージョンによりデータの収録内容は異なりますので、ご自身の環境での結果に置き換えてチュートリアルを読んでください。

追加情報：この「チュートリアル ハンドブック」内のスクリーンショットは Mac OS X でキャプチャされました。他の OS では、基本的なキャプチャ内の内容は差異ありません。ただ、ウィンドウのフレームは異なる可能性があります。

### 簡単な例題

この一番初めのチュートリアルセッションでは、シンプルな相同定の例題に挑戦します。この章の目的は、基本的なソフトの操作方法と機能についての知識（パターンインポート、サーチマッチ、相選択、定量分析、レポート印刷）を身に付けていただくことです。

まずは相同定の問題ではなく、Match! の使用法に集中するために、とても簡単な例から始めましょう。この場合、操作が必要なのは分析したい回折データファイルを選択するだけで、Match! が残りの作業を自動でやってくれます。

それでは始めましょう。ここでは、鉱物サンプルの高品質な粉末回折パターンを入手したと仮定して作業を進めて行きます。

まだ Match! を起動していないなら、今起動してください<sup>3</sup>。すると、ほぼ空のスクリーンと共に、"File/Open" ダイアログを表示します（図 10）。

<sup>2</sup> もちろんインデックスファイルの再作成は必要ありません。なお、現在の参照データベースに対する設定は変化しない点に注意してください。

<sup>3</sup> インストールの方法または起動の仕方が分からない場合は p.13 の「Match! のインストールと起動」を参照してください。



Match! のスクリーンは 4 つの部分に分かれています。左側上部の大きなパネルには回折パターンを表示します。その下には候補エントリー一覧 ("候補リスト") を表示します。右側には項目制限用の元素選択タブ (元素周期表) をデフォルトで表示します。この部分は現在選択している "ピークリスト" および "データシート" を表示する領域でもあります。右側下部ではマッチしたエントリの表 ("マッチリスト") を表示します。

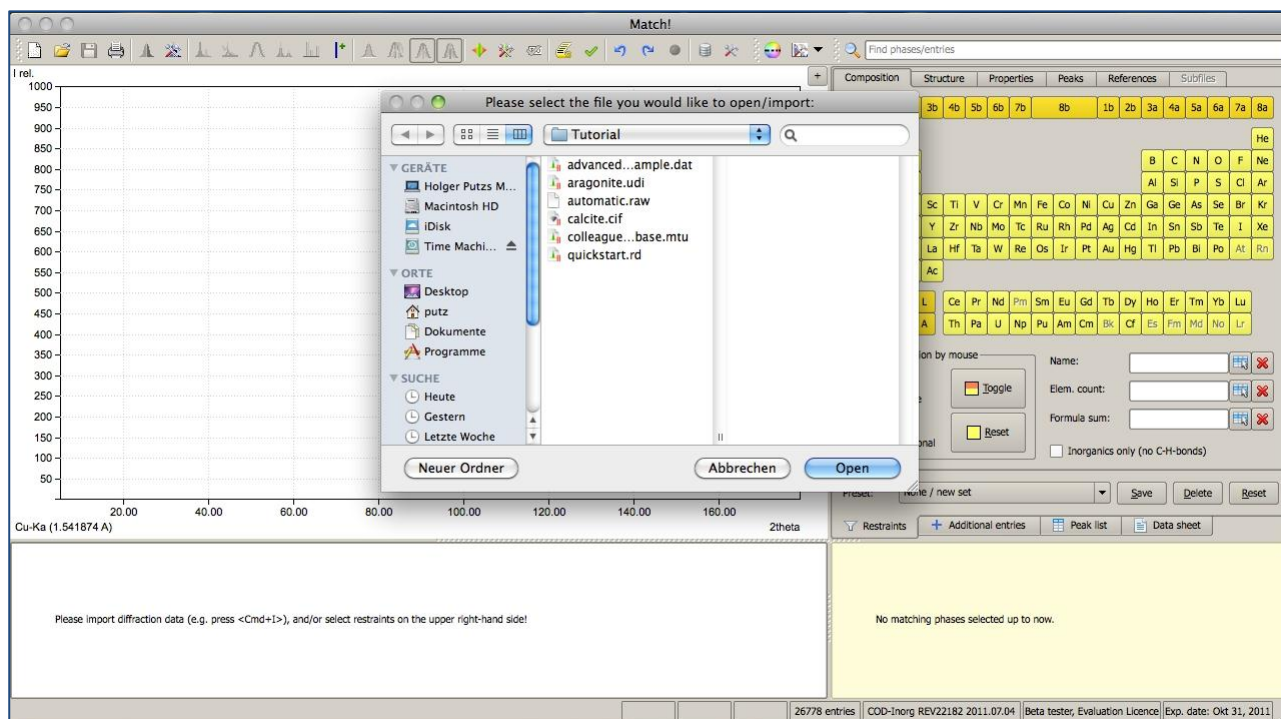


図 10 : Match! 起動直後の画面です。デフォルトの "Beginner" 設定では、分析を行う回折データを選択するダイアログを表示します。

まずやることは、インポートする回折データファイルを選択することです。Match! プログラムディレクトリ内のサブフォルダ、"Tutorial" 内にある "quickstart.rd" を選択し、"Open" をクリックします。

Match! は次のステップを自動的に実行します。

- 1) 選択したファイルから回折データをインポートします。
- 2) インポートした生データを加工します。具体的には X 線放射による  $K\alpha 2$  の除去、生データのスムージング、ピークの検出、 $2\theta$  エラーのチェックおよび修正を行います。
- 3) サーチマッチの計算を行います。

スクリーンは図 11 と似たようになっているはずです。



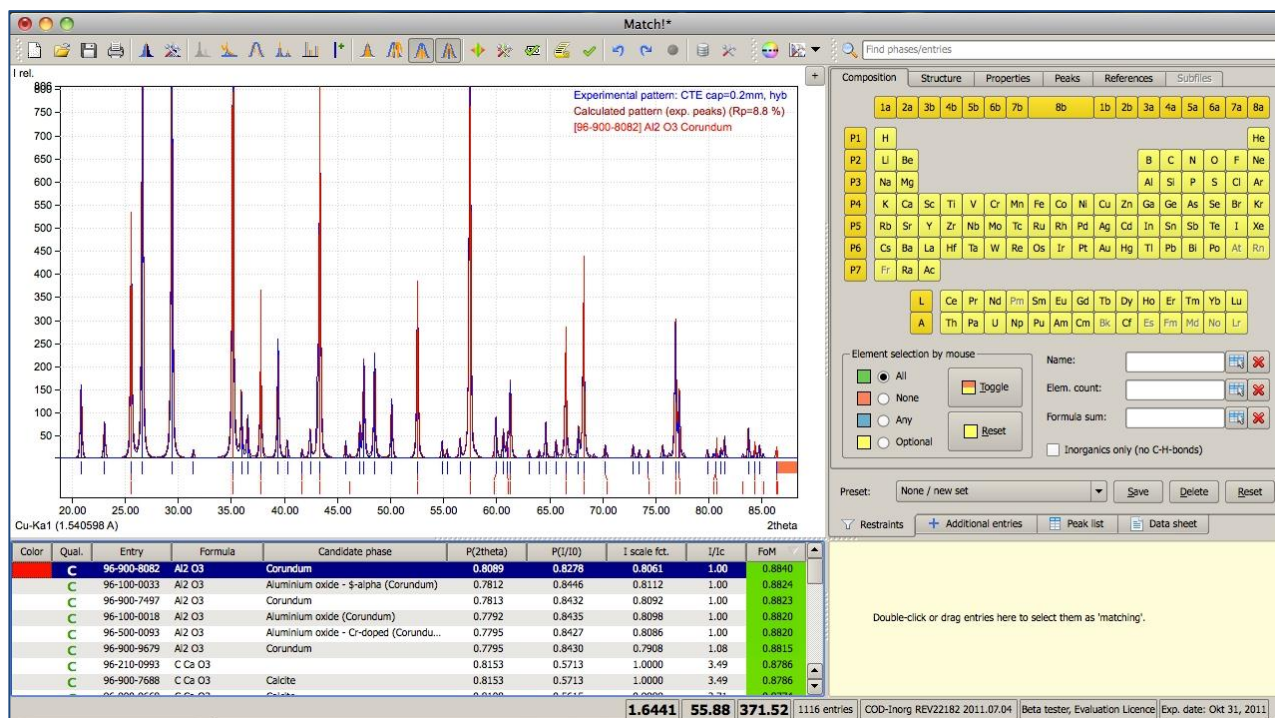


図 11 : Match! は生データの加工と共にサーチマッチの計算も自動で行いました。

最も良い（大きい）"figure-of-merit" (FoM、性能指数) のエントリが左側下部の候補リスト内で上部に表示され、すでに選択してあります。つまり、実験の回折パターンとの整合性を左側上部の画面で判定できます。

この後は、サンプル内に存在すると推測できるエントリを"figure-of-merit" (FoM) 値と視覚的な実験結果との当てはまり具合から判断します。

図から分かるように、最も良い（大きい）"figure-of-merit" (FoM) を持つエントリは、 $\text{Al}_2\text{O}_3$ （コランダム、Corundum）の相です。（ご利用いただくデータベースにより、結果が多少変化してきます。）候補リストの右側にある、"I/Ic"の列を見てください。ここには、対応するエントリが（半）定量相分析に必要なパラメータ I/Ic を含んでいるか表します。COD（Match! のソフトウェアと共にインストールされるデータベース）をリファレンスデータベースとして使用している時、パラメータ I/Ic はすべてのエントリで使用可能です。これはデータインポートの際に回折パターンの計算と共に計算されているからです。しかし、ICDD PDF や他のリファレンスパターンを参照している時は、パラメータ I/Ic を含まないエントリもあるかもしれません。このようなエントリは半定量相分析には向いていません。

1 番目のエントリを適合しているとして選択するには、1 番目の  $\text{Al}_2\text{O}_3$ （コランダム）が候補リスト内でハイライトされている時にスペースキーを押します。他の方法として、そのエントリをダブルクリックするか、候補リストからマッチリスト領域にドラッグしてもマッチングとして選択可能です。選択したエントリは右側のマッチリストに表示されます。

選択したエントリと同じ相に属するエントリは全て候補リストから消えます。これは、選択したエントリによってマッチするピークが使用済みになるからです（図 12）。

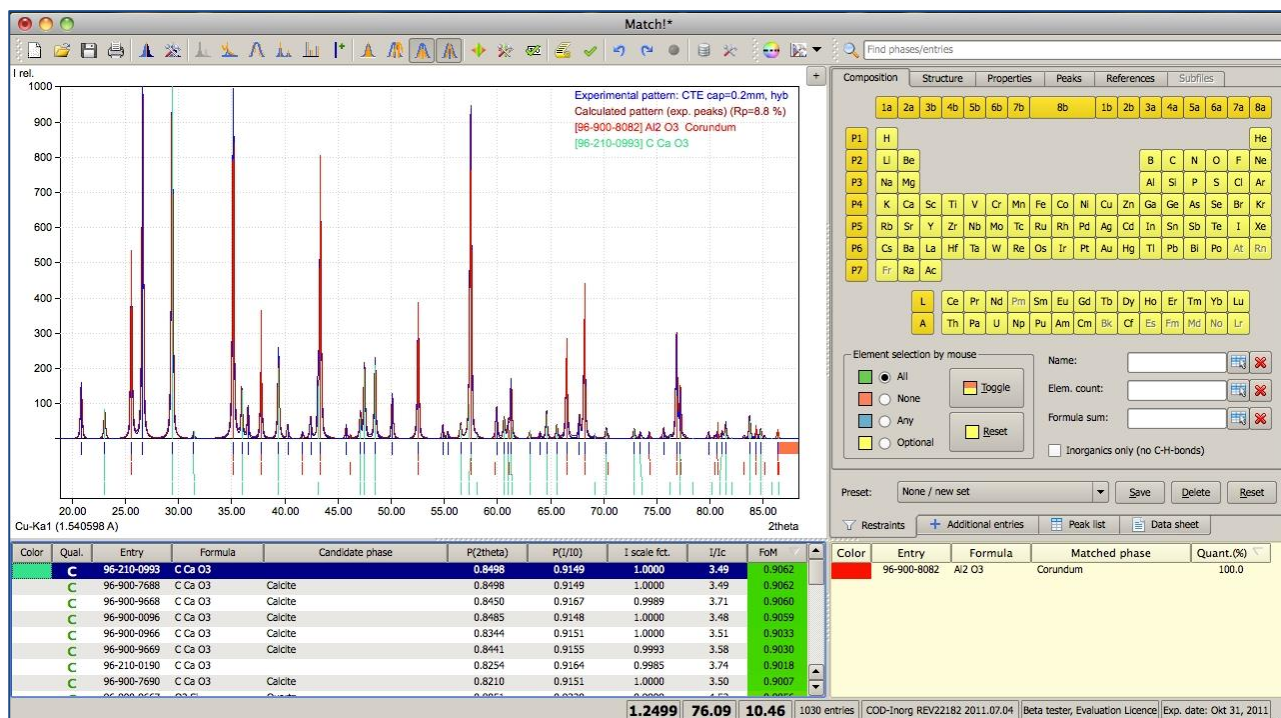


図 12 : 1 番目の相 (Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>、コランダム) をマッチングとして選択します。

候補リストには、まだ良い（高い）figure-of-merit (FoM) 値を持つエントリがあります。どうやらサンプル内には他の相があるようです。次の候補エントリは自動的にハイライトされるので、2 番目の相が CaCO<sub>3</sub>、方解石 (Calcite) であることが分かります。先程のコランダムと同じように、スペースキーを押してマッチリストに移動しましょう。

候補リスト内で次の行はクオーツ (SiO<sub>2</sub>) を表しています。視覚的に実験パターンと比較してみて、十分にマッチしているなら、スペースキーを押して選択してください。

下図 (図 13) を見ると分かるように、次のエントリは幾分低い figure-of-merit (FoM) 値を示しています (右側の列がオレンジ色になっているので分かります)。つまり、この相がサンプル内にある可能性は低いということが分かります。よって、サンプル内に多く含まれている主要な相は全て同定されたとみなすことができます。

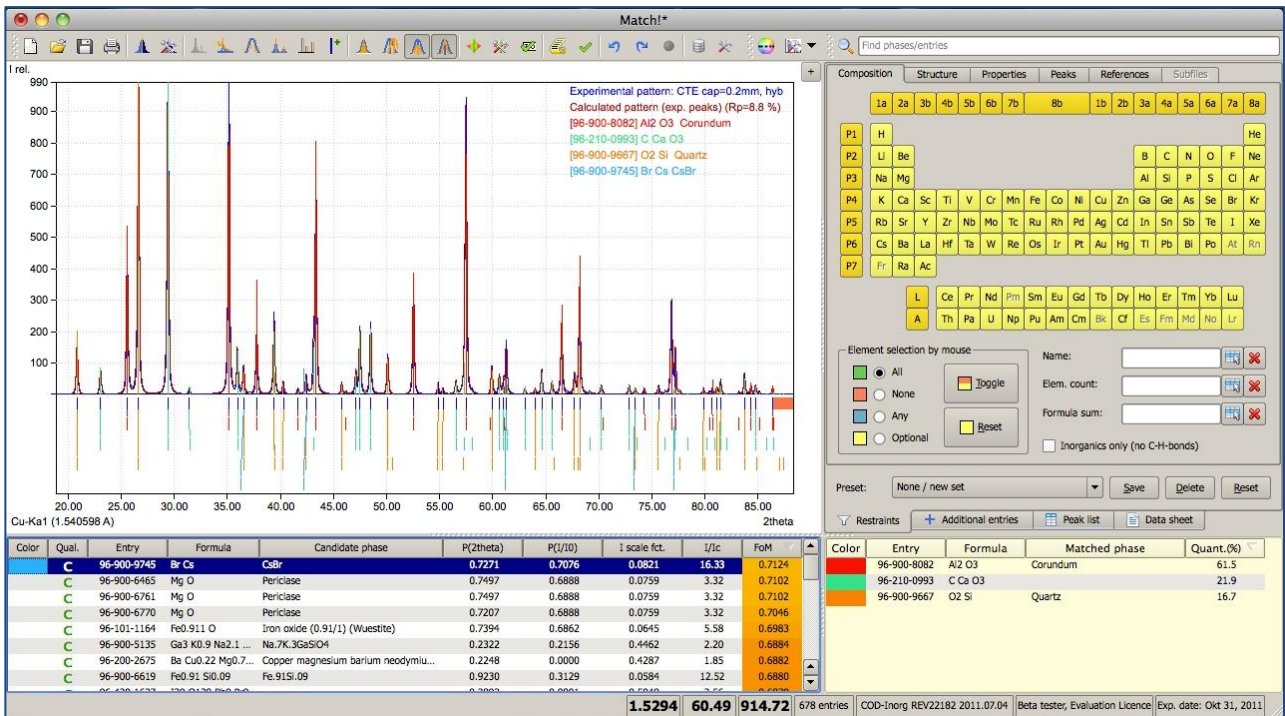


図 13 : 不明なサンプルの相同定は完了しました。マッチリスト内の列、"Quant. (%)"にはサンプル内の各相の重量パーセントを示します。

この時点で、半定量相分析も完了します。マッチリスト内の"Quant. (%)"をご覧ください。この表から、サンプル内には 61%（重量パーセント）のコランダム、22%の方解石、17%のクォーツが含まれてる、と言えます。

ここまで来たら、残りはレポートを表示だけです。レポートは「Ctrl+R」のキーボードショートカット（Mac では「Cmd+R」）を押す、対応するツールバーのボタンをクリックする、"View"メニューから"Report"を選択する、のいずれかでできます。これらの操作の内どれかを行うと、図 14 のようなダイアログが表示されます。



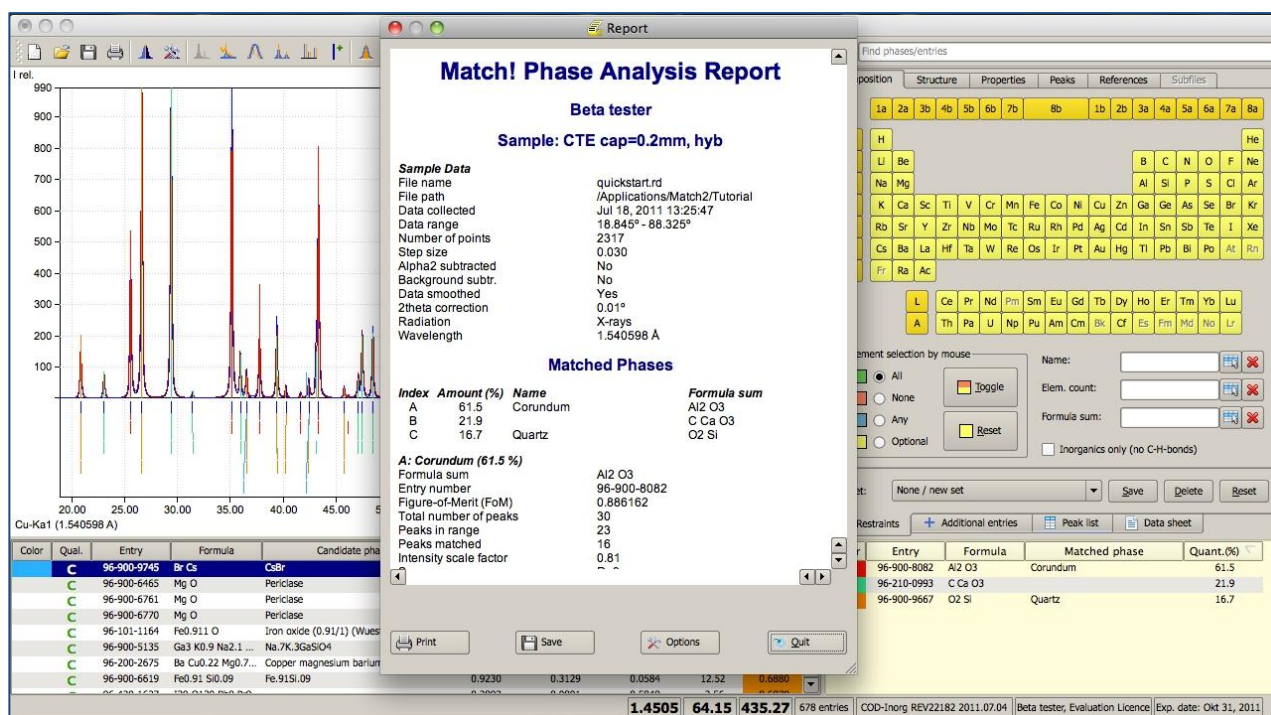


図 14：候補リスト内からマッチする相を選び終えたら、レポートを表示してみてください。レポートには、回折の詳細な結果がまとめられています。

ご覧のように、レポートには細部にわたる解析結果が表示されます。最も重要な情報は"Matched Phases"セクションの一番上にまとめられています。ここではマッチした相のリスト、つまりサンプル内にある可能性が非常に高い相を確認できると共に、それに対応する重量パーセント（半定量分析に基づく）も表示されます。このサンプルには、61%のコランダム（ $\text{Al}_2\text{O}_3$ ）、22%の方解石（ $\text{CaCO}_3$ ）、17%のクォーツ（ $\text{SiO}_2$ ）が含まれています。

これで操作についてのチュートリアルは終了です。このレポートは、印刷や保存することが可能です。これらの操作は Report ウィンドウの下に表示される各ボタンをクリックしてください。

もちろん、この例題は手を加えてきれいに整えてあります。実際に相同定を行う実験のデータ等はこのような整えられたものではありません。ここで1つ忘れないで欲しいのは、Match! はデフォルトで"Beginner"のバッチ設定になっています。このモードは、可能な限り多くのステップを自動化しています。熟練のユーザにはソフトウェアをより手動で操作、つまりユーザレベルをより高いレベルに設定することをお勧めします。設定を変更するにはレポートを閉じ（"Quit"をクリックします）、"Tools"メニューから"Options"コマンドを選択します。（Mac では"Match!"のプログラムメニューから"Preferences..."を選んでください。）"Options"ダイアログが表示されたら"Batch"タブを選択し、ダイアログ上部にある"user level"を選択してください。または、その下にあるオプションから各ステップを個々に自動化するかどうか選ぶことができます。最後に、ダイアログ下にある"Save as defaults"のチェックボックスにチェックを付けて、変更をデフォルトとして保存することを忘れないでください。

## 粉末から相同定を行うヒント

Match! を使用する際に忘れてはいけないことは、結果の精度は最初の"生データ加工"によって抽出されるピークデータの質に大きく影響されることです。例えば、ピークのデータが  $2\theta$  エラー（サンプルの変位や検出器の  $2\theta$  シフトにより、引き起こされる）を含んでいる場合や生データにノイズが多すぎてとても多くのピークを検出ししてしまう場合などには、良い結果は得られません（結果自体が得られない可能性もあります）。

相同定の過程の最初のステップとして、まず、ピークのデータのみがリファレンスデータベースに照会されるようにすることがあります。これは、リファレンスデータベース（PDF や COD 等）自体もピークのデータのみで構成されているためです。つまり、良い結果をもたらすには、ピークデータの精度が最も大切だと分かるでしょう。

実際に分析するときにはどのような影響が出てくるのでしょうか。Match! ではピークデータの判別を自動で行うこともできますが、コンピュータは粉末回折専門家である熟練者の「目」にはかないません。専門家の方がノイズとピークを見分けることには長けています。つまり、時間を割いて生データとピークデータの精度を厳密に評価する方が良いことになります。Match! は、この手順を快適に行えるよう、複数の機能を準備しています。

スムーズに作業する流れとして参考にしてください。

- 生の回折データをインポートしたら、必要に応じて  $K\alpha 2$  除去を行います（メニューから、"Pattern/Subtract  $\alpha 2$ "）。パターンがでこぼこしていたら、「生データのスムージング（メニューから"Pattern/Raw data smoothing"）」を 1、2 回行うのもいいでしょう。この時の注意点として、あまりスムージングをやりすぎると小さいピークまで消してしまう可能性があります。その結果、少数相を見落としてしまうこともあり得るので、気を付けてください。
- バックグラウンドの放射線が強い場合、自動的に検出されたバックグラウンドの曲線の確認と修正を行う必要があります。そのために、まずはバックグラウンド曲線が回折パターンに表示されているか確認しましょう。操作としては、パターンのグラフィックコンテキストメニュー（パターン画像エリア内で右クリックすると開きます）から選びます。そして、マウスを使ってバックグラウンドのコントロールポイント（バックグラウンド曲線状の小さな四角形）を移動したり増やしたりできます。マウスを使ってバックグラウンドコントロールポイントを変更する詳細は付録の p.59 の"マウスボタンとキーの組み合わせ一覧表"をご覧ください。
- 特にパターンに問題が無い場合、ピークサーチ（peak search）（メニューから"Pattern/Peak searching"と選択）かプロファイルフィッティング計算（メニューから"Pattern/Profile fitting"と選択）を行い、最初のピークデータを入手します。
- では、データを詳しく見ていきましょう。まずはピーク画像の左側、低  $2\theta$  エリアにズームします。そして、そのピークの位置や大きさなどを調べながらゆっくりと右へ、高  $2\theta$  エリアに移動していきます。Match! はズームやトラッキングに関する、多くのキーボードショートカットやマウス機能のオプションを備えています。詳細については p.59 の"マウスボタンとキーの組み合わせ一覧表"をご覧ください。この拡大したパターンを見ながらピークの追加や削除を行い、各ピークをプロファイルデータに当てはめて正確な強度の値を入手します。

- 生データの中の最大値で本物のピークだと推定できるものは、実際には多くのピークが重なっています。同時に、可能な限り少ないピークを使っています。ピーク間にある"何もない"空間はマッチする相を探す時はもちろんですが、マッチしていない相を判別する時にも重要になります。つまり、本当に自信のあるピークだけを使っていくとサーチマッチ計算の分離力も強化できます。
- 全てのパターンを検査し終わり、選択したピークに納得したら、"**Pattern**"メニュー内の当てはまるコマンドを使用し、必要に応じて資料の変位エラーやゼロポイントの確認及び修正を行ってください。修正値についてはヒストグラムを使用しながら判断できます。もしサーチマッチが納得できる結果を出さなかった場合、1度戻って別の修正を行ってください。
- $2\theta$  エラーの可能性を修正するのに、既知の相がサンプル内にあることが分かっている前提で、内部基準を使うことができます。その際は「**Ctrl+F**」（Macでは「**Cmd+F**」）を押し（またはツールバーの右上部にある"**Find phases/entries**"をクリックし）、分かっている相の名前、化学式あるいはエントリ番号を入力して「**Enter**」を押します。**Match!** は対応するエントリを画面下部にある候補リストに表示します。そして、項目（名前か化学式）にマッチするエントリを自動的にハイライトします。結果として対応する回折パターンの画像が上の画面に表示されます。これで、 $2\theta$  軸をハイライトされた内部基準に合わせて変更するには、「**Ctrl+T**」（Macでは「**Cmd+T**」）を押します。
- ここまでくれば、あとはサーチマッチ計算を行い、結果のエントリを検証し、マッチする相を選ぶだけです。

# リファレンスパターンデータベース

## 概略

本マニュアルの紹介で伝えている通り、Match! は相同定を行う際、粉末回折パターンを既知のリファレンスパターンと照会しています。つまり、Match! はリファレンスパターンを提供する"リファレンスデータベース"を必要とします。Match! はリファレンスデータベースにはとても柔軟に対応出来るので、データベースの入手および使用に関してはいくつか選択肢があります。

- "Crystallography Open Database" (COD) <sup>4</sup>を元にした無料のリファレンスデータベースは Match! をインストールした時に自動的にインストールされるので、インストール後直ぐに使用できます<sup>5</sup>。このデータベースは "Crystallography Open Database"(COD) <sup>4</sup>の結晶データから計算された粉末回折パターンをまとめてあります。COD 自身も IUCr journals<sup>6</sup>や "American Mineralogist Crystal Structure Database"(AMCSD)<sup>7</sup>等に結晶構造データを発表しています。ここでデータの無料配布を許可していただいた **Pete Strickland(IUCr)**、**Armel Le Bail** と **Saulius Grazulis (COD)**、そして **Bob Downs(AMCSD)**の各氏に厚く感謝いたします。COD リファレンスデータベースから得たエントリは全て原子座標を含み、それを元に粉末回折パターンは計算されます。これとは別に、全てのエントリに対して I/Ic 値が計算されているので、半定量分析を行えます。追加またはアップデートされたリファレンスデータベースを無料でダウンロードするには次の URL にアクセスしてください。

<http://www.crystalimpact.com/match/download.htm#refdb>

- 伝統のあるリファレンスパターンデータベースは ICDD<sup>8</sup>によって提供された、**"PDF"データベース**と呼ばれています。PDF データベースには複数の種類 (PDF-2、PDF-4+、PDF-4/Organics、PDF-4/Minerals) があり、そのすべてを Match! で使用できます<sup>9</sup>。開発者の認識では PDF が最も大きいデータベースで、最も分かりやすいリファレンス回折パターンを提供しています。

---

<sup>4</sup> <http://sdpd.univ-lemans.fr/cod>

<sup>5</sup> Match! のデモ版を使用している場合、COD 内の"無機物"サブセットのみをインストールしています。COD の全てのデータベースをダウンロードしてインストールするのは Match! の Web ページから行うか、ECM-や IUCr-カンファレンス等で配布している Crystal Impact の DVD にあります。

<sup>6</sup> International Union of Crystallography, 5 Abbey Square, Chester CH1 2HU, United Kingdom. <http://journals.iucr.org>

<sup>7</sup> R.T. Downs, M. Hall-Wallace, "The American Mineralogist Crystal Structure Database", American Mineralogist 88, 247-250 (2003). <http://rruff.geo.arizona.edu/AMS/amcsd.php>

<sup>8</sup> International Centre for Diffraction Data, 12 Campus Boulevard, Newtown Square, PA 19073-3273, U.S.A. Phone: +1-610-325-9814; Fax: +1-610-325-9823; E-mail: [info@icdd.com](mailto:info@icdd.com), Internet: [www.icdd.com](http://www.icdd.com)

<sup>9</sup> ICDD のリレーショナルデータベース製品 (PDF-4、PDF-2) は Windows のプラットフォームでのみ提供されています。ただし、Mac OS X や Linux では、有効なライセンスがあれば PDF-2 の「古い」データベース (2005 年以前の物) を使用できます。

- また、1993-2002 年の間にリリースされた ICSD/Retrieve 版をお持ちの場合、これも利用できます<sup>10</sup>。Match! は ICSD/Retrieve のエントリをユーザデータベース内にインポートし、それから粉末回折パターンの計算を 1 ステップで実行可能です (p.39)。
- 多くのユーザは (まだ) COD や PDF のデータベースにない、自身の研究に使用する回折パターンを持っているでしょう。その場合、これらのパターンを「通常の」リファレンスパターンと共に相同定で使うことができます。これには「ユーザデータベース (user database)」を使います。 (p.37)

今まで紹介してきたリファレンスデータベースの質を評価するために、複数のテストを行いました。

伝統と格式のある ICDD PDF データベースを使用した場合と比べると、無料の COD データベースを使った時の方がややばらけた結果となりました。鉱物のサンプルを調査したところ、結果はとても良く、AMCSD (COD 内に含まれている) の情報がしっかりしているためであると考えられます。鉱物以外でも、ほとんどの場合で正しく相を同定できていました。しかし、ごく少数のサンプルでは COD 内にそのデータが無かったため、主相を判別できませんでした。ICDD PDF-2 を使用した時は、全ての相同定が問題なく行われました。

開発者の経験から、COD データベース (最近のエントリを多く含んでいる) と ICSD/Retrieve データベース (「古い」エントリを多く含んでいる) の両方を組み合わせて使うのが最も良い結果を生みます。この方法が、最近の ICDD PDF データベースを持っていない場合に最適な結果をもたらします。

つまり、鉱物や似たようなサンプルを分析している時は、無料の COD データベースで十分でしょう。それ以外のユーザは ICSD/Retrieve のリファレンスパターンを COD データベースと組み合わせて使用するか、ICDD PDF-2 または PDF-4 の使用をお勧めします。

リファレンスデータベースを選ぶ際は、常にサンプル内に予測できない相が含まれている可能性があることを忘れないでください。大きなデータベースを使用すると回折パターンの中でも特徴的な (または、不思議な) 相が組み込まれているので、取りこぼしの可能性は低くなります。

## リファレンスデータベースライブラリ

Match! と共にインストールされたリファレンスデータベース (一般的に COD か COD のサブセットである "Inorganics") とは別のリファレンスデータベースを適用したい時は、まず「リファレンスデータベースライブラリ」に追加する必要があります。図のように、現在ユーザが利用できる全てのリファレンスデータベースを表形式にまとめてあります。表の行はそれぞれ 1 つのリファレンスデータベースを表し、名前、エントリ数、データベースやインデックスファイルのパスおよび場所を表示します。表は 2 種類あり、1 つは全てのユーザにご利用いただけるもの、もう 1 つは現在のユーザにのみアクセスいただけるものです (図 15)。

<sup>10</sup>もちろん、ICSD/Retrieve を使用するには有効なライセンスが必要です。ライセンスが有効か、確認が必要な方は FIZ Karlsruhe (Germany) (e-mail:crysdata@fiz-karlsruhe.de)までお問い合わせください。



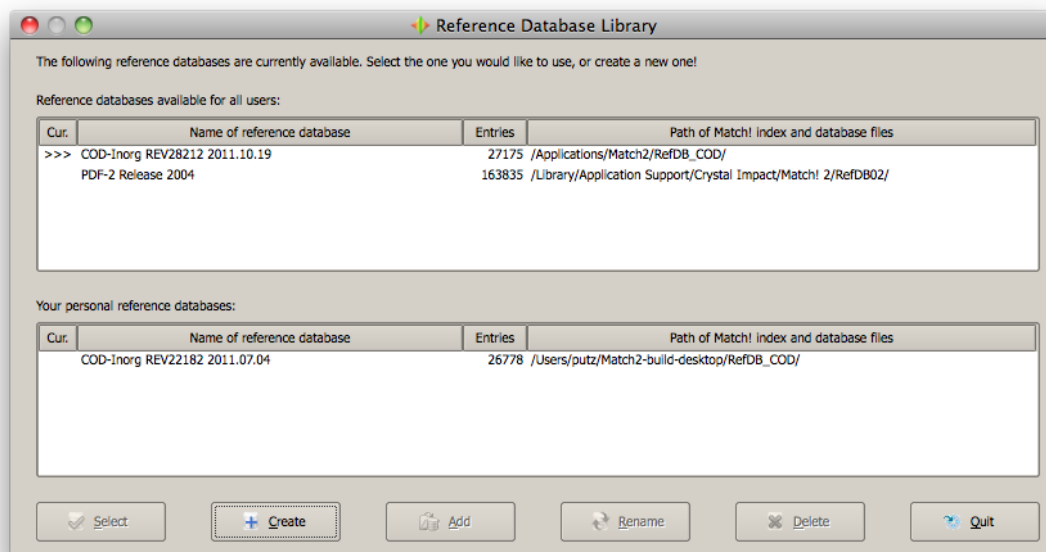



図 15 : リファレンスデータベースライブラリ ("Reference Database Library") を使うと、様々なリファレンスパターンデータベースを PC 上で管理できます。図の場合、COD データベース (REV28212) がこの PC を使用する全てのユーザに対して設定されていて (上の表)、相同定の時に使用されています ("Cur."列参照)。これ以外に「PDF-2 Release 2004」も全てのユーザが使用可能です。そして、もう 1 つの COD バージョン (REV22182) は現在のユーザのみが使用できます。

このリファレンスデータベースライブラリのおかげで Match! は複数のリファレンスパターンデータベースを 1 度に扱うことができます。メモリ内に回折データを残したまま (インデックスファイルを作成した) リファレンスデータベースを切り替えることも可能です。つまり、複数のリファレンスデータベースの相同定結果を比較できます。もちろん、切り替えを行う時にリファレンスデータベースのインデックスファイルを作り直す必要はありません。

"Reference Database Library"ダイアログは Match! と共にリファレンスデータベースをインストールしていない場合に、Match! を起動すると自動的にダイアログが表示されます。また、"Tools"メニューから

"Select Reference Database"と選択するか、ツールバーのボタン  をクリックしてダイアログを開く方法もあります。

既に述べられている通り、リファレンスデータベースライブラリは現在のユーザが利用可能な全てのリファレンスデータベースのリストを表示します (以下参照)。リファレンスデータベースごとに名前、エントリ数、データベースの保存場所を表示します。使用中のデータベースは、左側に">>>"で印を付けられます。

複数のユーザが共同で利用する PC では、ユーザごとのリファレンスデータベースを作成できます。これは、一般のユーザ (管理者権限のないアカウント) がリファレンスデータを作成できます。もちろん、一般のユーザがリファレンスデータベースを作成すると、自分自身 (作成したアカウントのみ) でしか使用できません。管理者権限のあるアカウントでは全ユーザのためのリファレンスデータベースを作成できます。全ユーザが使用できるデータベースは、先ほどのウィンドウの上の表に表示されます。この表に記載してあるデータベースは、一般ユーザでは変更および削除できません。

リファレンスデータベースの管理は"Reference Database Library"ダイアログの下にあるボタンを利用します。各ボタンの機能は下記の通りです。

- **Select** サーチマッチやデータベース検索のために、別のリファレンスデータベースを選択します（その際に新たなインデックス作成を行う必要はありません）。新しいリファレンスデータベースを選択すると、現在の候補リストは更新されます。これは、例えば 1 つのデータベースにはあるけれど、もう片方にはエントリが無いという問題が起こらないようにするためです。
- **Create** 新しいリファレンスデータベースを作成します（例えば、既存の Match! ユーザデータベースから作る<sup>11</sup>、エントリデータを cif ファイルまたは ICSD からインポートする<sup>11</sup>）。
- **Add** 特定のディレクトリ内で"ready for usage"（使用準備完了）に保存してあるリファレンスデータベースを追加します<sup>11</sup>。
- **Rename** 既存のリファレンスデータベースの名前を変更します<sup>11</sup>。
- **Shift** 印をつけたリファレンスデータベースで使用中の PDF-2 データベースの位置を新しいディレクトリに変更します。
- **Delete** 既存のリファレンスデータベースを削除します。
- **Quit** "Reference Database Library"を閉じます。

## 新しいリファレンスデータベースを作成する

Match! はパターンの元、つまり PDF や COD を直接参照する訳ではありません。これらのデータを使用するには"インデックスファイル"と呼ばれるものが必要です。このファイルは、元のデータから抽出してソートした情報を格納し、より速く回折パターンの参照および検索を行えるようにしています。別の言い方をすると、新しいリファレンスデータベースを作成することは元となるデータベースの新しいインデックスファイルを作成するということです。

新しいリファレンスデータベースを作成する場合、Reference Database Library ダイアログの"Create"ボタンをクリックします。すると、"Create Reference Database"ダイアログが表示されるので、粉末回折パターンのソースデータを選びます。また、新しいリファレンスデータベースの名前を設定し、このリファレンスデータベースに関係するファイルを保存するフォルダを選択できます（図 16）。

<sup>11</sup> 現在のバージョンではまだご利用いただけません。

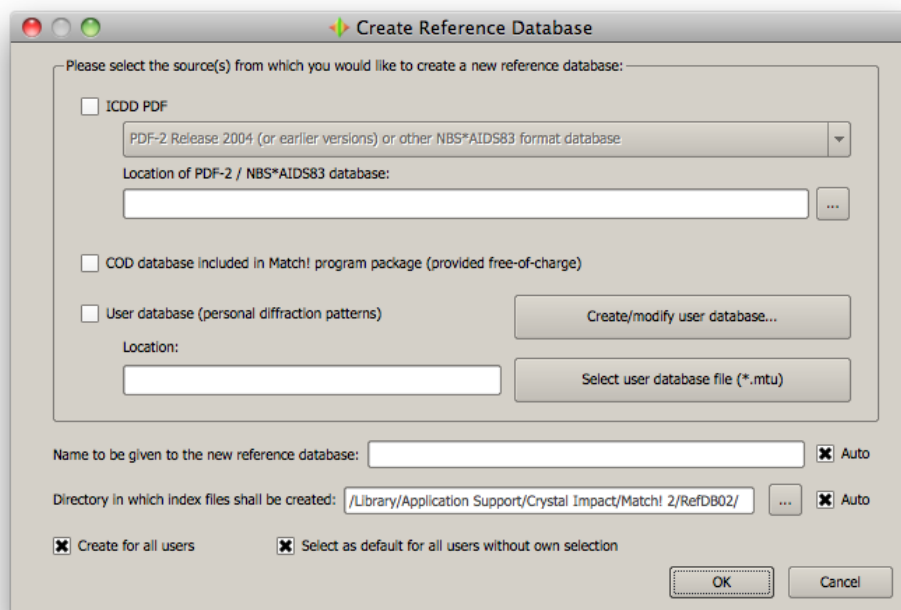


図 16 : このダイアログを使うと、Match! で使える新しいリファレンスデータベースを作成できます。

設定方法の詳細についてはインデックスファイルを作成するデータベースにより異なります。次の章で該当する箇所をご覧ください。

#### PDF-4 または PDF-2

現在、ICDD PDF-4 と PDF-2 データベースは Windows でのみ提供されています。Mac および Linux で Match! をインストールした方はご利用いただけませんのでご注意ください。この章では、既存の ICDD PDF-4 または PDF-2 を Match! のリファレンスデータベースに設定する方法を、Windows の PC を使って説明します。

では、ICDD PDF4+ Release 2010 データベース（先に PC にインストールしておく必要があります）をリファレンスデータベースに追加しましょう（PDF-2 を設定する際の手順もこれから説明するものと同じです）。

先程説明したように Reference Database Library ダイアログで "Create" ボタンをクリックすると、Match! は PDF 関連の製品（PDF-4+ または PDF-2）の有無を自動的に検索します。最低 1 つの PDF リファレンスデータベースが見つかり、ダイアログ上部の "ICDD PDF" のチェックボックスにチェックが付きます。1 番に見つかった PDF は "ICDD PDF" のドロップダウンボックス内ですでにハイライトされています。別の PDF のバージョンを選びたい時は、ドロップダウンボックスをクリックして当てはまる行をハイライトしてください。例の場合、ICDD PDF4+/Release 2010 を使いたいのですでにハイライトされています（図 17）。

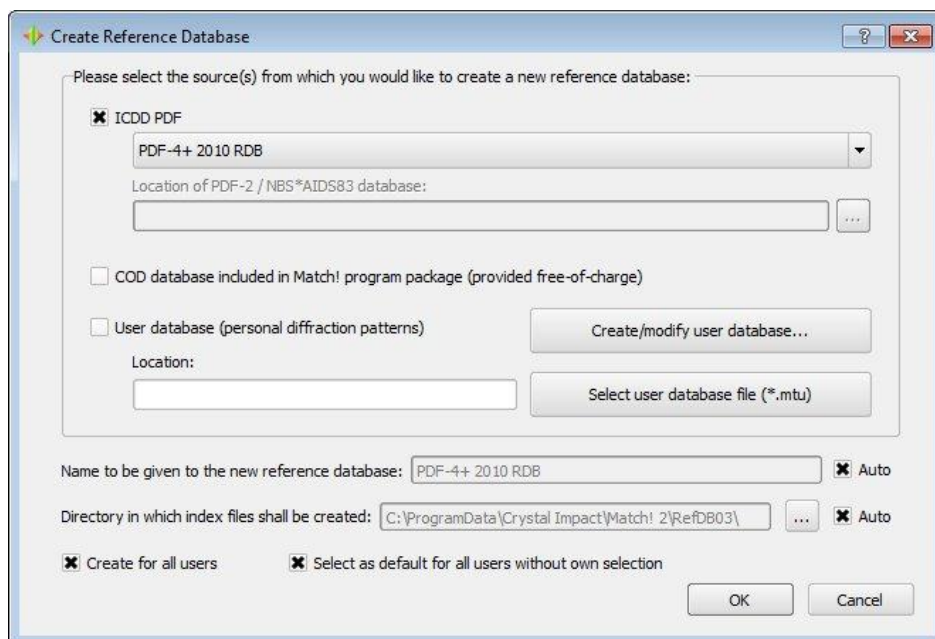


図 17 : ICDD PDF4+ Release 2010 データベースを Match! のリファレンスデータベースとして選択すると図のようになります。

新しいリファレンスデータベースの名前を変更するにはダイアログの下部で行えます（その際、"Automatic"のチェックボックスのチェックを外してください）。また、その新しいリファレンスデータベースのインデックスファイルを保存する場所（ディレクトリ）も変更できます。通常、Match! は自動で最適な名前とディレクトリを設定します。

管理者権限を持っている場合、その PC の全てのユーザが使用できるリファレンスデータベースに（または、個人用に）設定することも、リファレンスデータベースを使う新規ユーザのデフォルトリファレンスデータベースに設定することもできます。

選択をしてからダイアログ下部の"OK"ボタンをクリックすると、インデックスファイルの作成を開始します。インデックス作成の経過を表す小さなウィンドウが表示されます（図 18）。大量のデータを読み込み保存しないといけけないので<sup>12</sup>、インデックスファイル作成には時間がかかります。この手順はハードディスクへのアクセススピードと使用している PC の処理速度に大きく左右されますが、30 分から 1 時間、場合によってはそれ以上の時間がかかるでしょう。インデックス作成が終了すると、それを示すメッセージを表示します。その後、新しいリファレンスデータベースは「リファレンスデータベースライブラリ」のリストに表示され、選択できるようになります（図 19）。

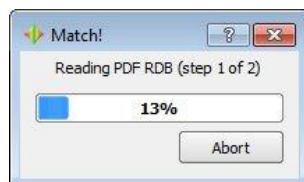


図 18 : このウィンドウはインデックスファイル作成の進捗を表示します。

<sup>12</sup> PDF-4+ Release 2010 は 300,000 以上のエントリを有しています。

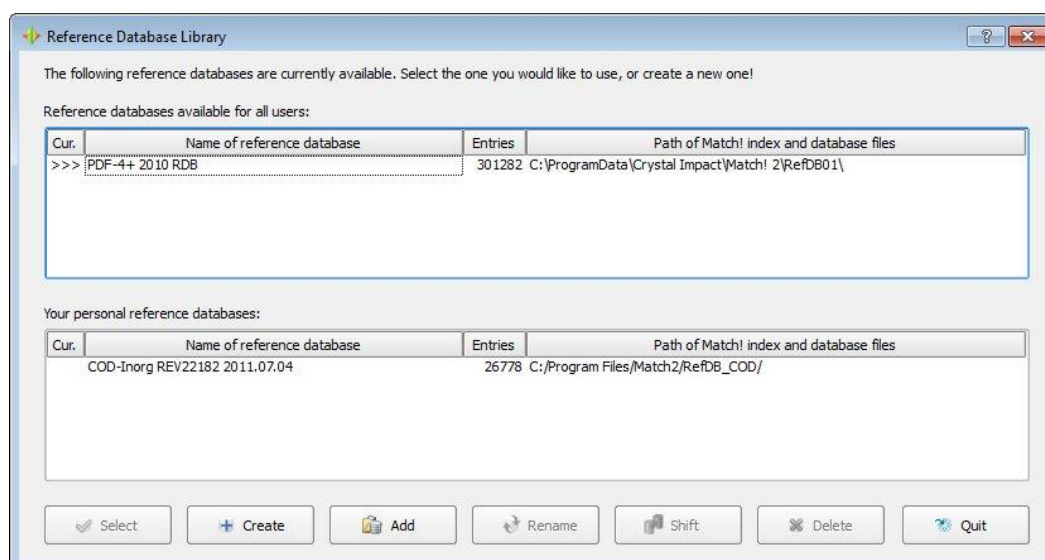


図 19 : "PDF-4+ 2010 RDB"リファレンスデータベースは全てのユーザに利用可能なリストに追加されました。

"Reference Database Library"内で新しいリファレンスデータベースがただ 1 つ利用可能なデータベースならば、それを自動的に使用するように選択されます。複数のデータベースが利用可能な場合、新しいデータベースを手動で選んでください。表の中で使用したいリファレンスデータベースの行をクリックして、ダイアログ下部の"Select"ボタンをクリックします。例えば PDF データベースのライセンスにチェックが付いている状態で、新しいリファレンスデータベースを選択したと印を付けます。その印は、行の左側にある">>>"で表わされます。

ここまで設定が終われば、"Quit"をクリックして Reference Database Library を閉じます。すると、PDF-4+のリファレンスデータベースを使用して相同定やデータベース検索が行われます。

PDF-2 やその他の現行の ICDD PDF データベース製品を使用したい時は、今まで説明した PDF-4+と同じように設定できます。

### 古い形式の PDF-2

ICDD PDF-2 の古い形式（2005 年以前にリリース）の物をリファレンスデータベースとして使用したい時は次のように設定してください。

現行の PDF-2 や PDF-4 バージョンのように、まず、ICDD PDF データベースを使用するので"Create Reference Database"ダイアログ内の上部にある"ICDD PDF"を選びます。それから"ICDD PDF"の下にある、"PDF-2 Release 2004 (or earlier versions)"の行をクリックします（図 20）。

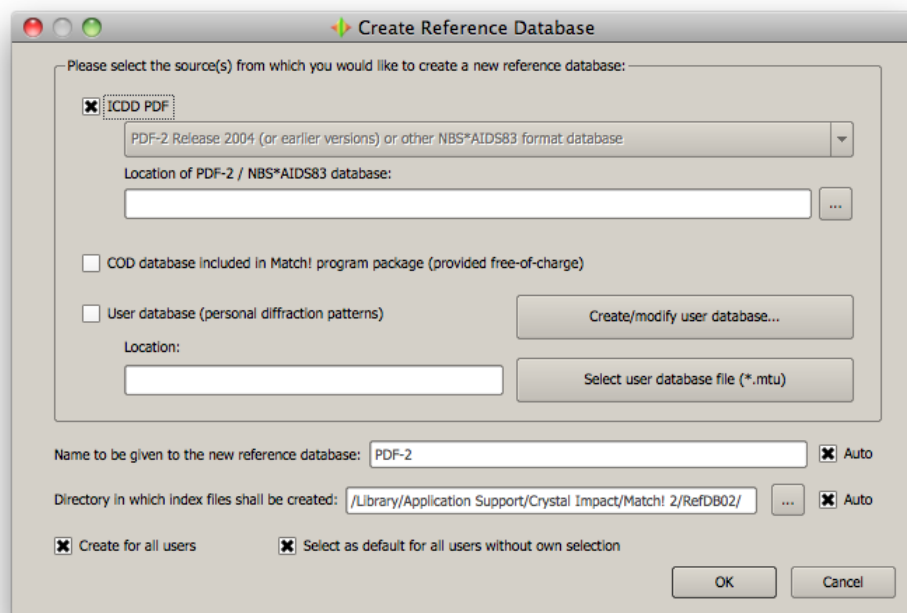


図 20 : この図では 2005 年以前にリリースされた ICDD PDF-2 データベースをリファレンスデータベースとして登録します。

次に、PDF-2 データベース ("pdf2.dat" のような名前のファイル) が保存してあるディレクトリを "Location of PDF-2 / NBS\*AIDS83 database" の下にある入力ボックスに入力します。このファイルおよびディレクトリの選択には「...」をクリックすればブラウズして選択できるようになるので便利です。

ディレクトリ内にある "pdf2.dat" のような名前のファイルを選択すると "File Open" ダイアログを表示します。その後、ファイルやディレクトリを選択するために "Open" をクリックします。別のダイアログが開き、これから使う PDF-2 の有効なライセンスを保有しているかを確認します。ライセンスの有効性が確認されると、PDF-2 のデータベースが保存してある場所が入力ボックスに表示されます。

新しいリファレンスデータベースの名前は変更することができ、操作はダイアログの下部で行えます（その際、"Automatic" のチェックボックスのチェックを外してください）。また、その新しいリファレンスデータベースを保存する場所（ディレクトリ）も変更できます。通常、Match! は自動で適切な名称とディレクトリを設定します。

管理者権限を持っている場合、その PC の全てのユーザが使用できるリファレンスデータベースに（または、個人用に）設定することも、リファレンスデータベースを使う新規ユーザのデフォルトリファレンスデータベースに設定することもできます。

選択をした後ダイアログ下部の "OK" ボタンをクリックすると、インデックスファイル作成を開始します。インデックス作成の進捗は小さなウィンドウで表示されます（図 21）。この手順には数分を要します。インデックス作成が終了すると、それを示すメッセージが表示され、新しいリファレンスデータベースは Reference Database Library のリストに表示され、選択できるようになります。



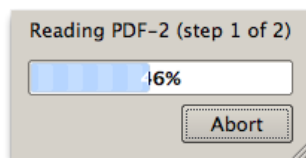


図 21 : このウィンドウはインデックスファイル作成の進捗を表示します。

"Reference Database Library"内で新しいリファレンスデータベースがただ 1 つ利用可能なデータベースならば、それを自動的に使用するように選択します。それ以外なら、新しいデータベースを手で選んでください。表の中で使用したいリファレンスデータベースの行をクリックして、ダイアログ下部の"Select"ボタンをクリックします。PDF データベースのライセンスにチェックが付いている状態で、新しいリファレンスデータベースを選択したと印を付けます。その印は、行の左側にある">>>"で表わされます。

ここまで設定が終われば、"Quit"をクリックして"Reference Database Library"を閉じます。そして、PDF-2 のリファレンスデータベースを使用して相同定やデータベース検索を行います。

### ユーザデータや ICSD/Retrieve

ご自身の回折パターンや ICSD/Retrieve データベースを相同定に使用することも可能です。リファレンスデータベースとして登録する前に、必要な回折パターンまたは結晶構造を保存および変換する必要があります。これは"User Database Manager"ダイアログ<sup>13</sup>を使い、"User database"ファイル（拡張子.mtu）として保存します。

まだファイルを保存していないなら、先に p.37 の手順に従い mtu ファイルをデータから作成します。その後、改めてこの場所まで戻ってきて読み進めてください。

既存のユーザデータベースファイル（.mtu）をリファレンスデータベースとして利用する操作は古いバージョンの PDF-2 を使った時と似ています。まず、ユーザデータベースを利用することを Match! に伝えるため、"Create Reference Database"ダイアログの中央にある"User database"オプションを選択します。そして"Location:"の入力ボックス右隣にある、"Select user database file (\*.mtu)"をクリックして mtu ファイルの保存場所を指定します。

"File Open"ダイアログが表示され、保存している mtu ファイルを選択します。そして、"Open"をクリックしファイルやディレクトリを指定して"Create Reference Database"ダイアログに戻ります。入力ボックスには選択した mtu ファイルのパスが表示されます（図 22）。

<sup>13</sup> "User Database Manager"ダイアログは直接、開くことができ、"Create/modify user database..."のボタンをクリックするか、"Tools"メニューから"User Database Manager"と操作します。

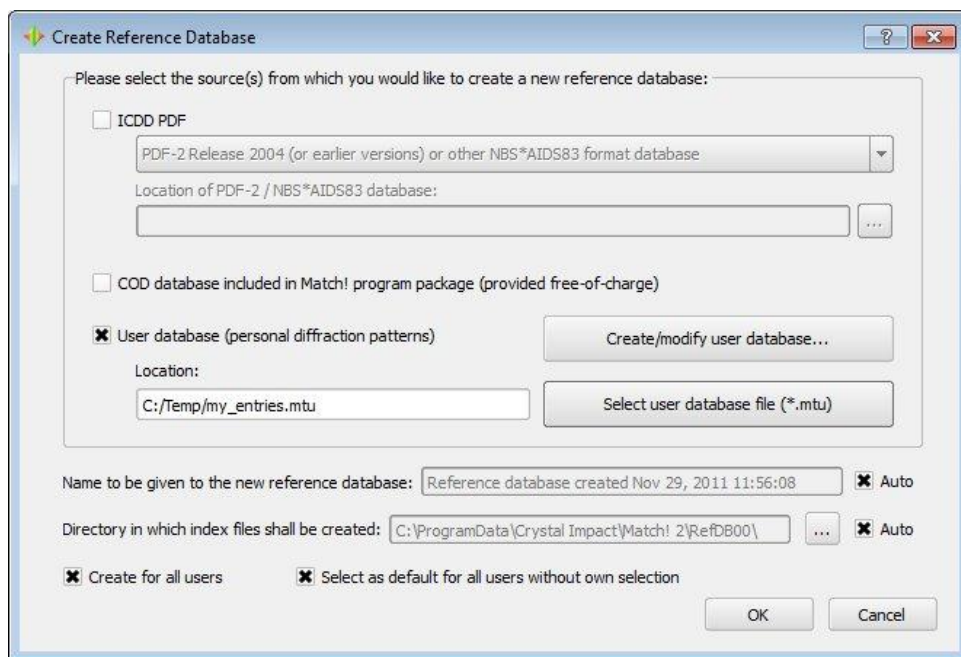


図 22 : 新しいリファレンスデータベースを作成するのに使うデータベースファイルの選択が完了しました。

新しいリファレンスデータベースの名前は変更可能です。その操作はダイアログの下部で行います（その際、"Automatic"のチェックボックスのチェックを外してください）。また、その新しいリファレンスデータベースを保存する場所（ディレクトリ）も変更できます。通常、Match! は自動で適切な名称とディレクトリを設定します。

既存のユーザデータベース（mtu ファイル）を元に新しいリファレンスデータベースを作成する時に選択した mtu ファイルは、インデックスファイルを保存するフォルダにコピーされます。つまり、後程、元のユーザデータファイルを変更したり消去しても、リファレンスデータベースには影響ありません。

管理者権限を持っている場合、その PC の全てのユーザが使用できるリファレンスデータベースに（または、個人用に）設定することも、リファレンスデータベースを使う新規ユーザのデフォルトリファレンスデータベースに設定することもできます。

選択した後はダイアログ下部の"OK"ボタンをクリックすると、インデックスファイルの作成を開始します。インデックス作成の経過は小さなウィンドウで表示されます（図 23）。インデックスファイル作成の工程は、エントリ数、ハードディスクへのアクセススピード、使用している PC の処理速度に大きく左右され、数分の時間を要します。インデックス作成が終了すると、それを示すメッセージが表示されます。その後、新しいリファレンスデータベースは"Reference Database Library"のリストに表示され、選択できるようになります。

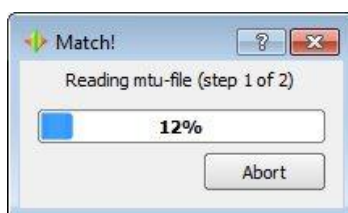


図 23 : このウィンドウはインデックスファイル作成の進捗を表示します。



"Reference Database Library"内で新しいリファレンスデータベースがただ 1 つ利用可能なデータベースならば、そのデータベースを使用するように自動的に設定されます。複数のデータベースが登録されている場合、新しいデータベースを手動で選んでください。表の中で使用したいリファレンスデータベースの行をクリックして、ダイアログ下部の"Select"ボタンをクリックします。選択されたデータベースは、行の左側に">>>"マークが表示されます。

ここまで設定が終われば、"Quit"をクリックして"Reference Database Library"を閉じます。その後は、新しく選択したリファレンスデータベースを使用して相同定やデータベース検索が行われます。

## リファレンスデータベースを選ぶ

既存のリファレンスデータベースをサーチマッチや検索で使用するには、目的のデータベースを Reference Database Library ダイアログで選びます。それから、ダイアログ下部にある"Select"ボタンをクリックします。選択したデータベースが PDF-2（2004 年以降のリリース）または PDF-4+なら、ライセンスの有効性が確認されます。最終的に選択したリファレンスデータベースには、行の左側に">>>"マークが表示されます。

次の事柄に注意してください:

- "Reference Database Library"を開くときに候補リスト内にエントリがある場合、別のリファレンスデータベースを選ぶとその候補リストは更新されます。これは、あるリファレンスデータベースにあるエントリは、他のリファレンスデータベースに無い可能性が高いためです。
- 現在選択中のリファレンスデータベースの名前は Match! ウィンドウの下にある、ステータスバーに表示します。この名前は、"Reference Database Library"を閉じると更新されます。

## リファレンスデータベースを追加する

リファレンスデータベースのバックアップを作成するには、リファレンスデータベースインデックスを直接コピーするだけです。リファレンスデータベースの保存場所は Reference Database Library ダイアログの最も右側の列に表示されます。

バックアップコピーを後程使うか復元するには、そのコピーを正しいディレクトリにコピーします。そして、Reference Database Library ダイアログの"Add"ボタンをクリックします。"File Open"ダイアログが開くので、"Match! Reference Database"ファイル(MatchRefDBInfo.mtn)を選びます。このファイルには同じディレクトリのインデックスファイルを使用するのに必要な情報が入っています。"MatchRefDBInfo.mtn"のファイルを選択して"Open"をクリックします。

管理者権限を持っている場合、その PC を使用する全てのユーザが新しいリファレンスデータベースを使用できるように（または、個人用に）設定することもできます。そして、新しいリファレンスデータベースは Reference Database Library ダイアログに表示され、すぐに使用できるようになります。

## リファレンスデータベースの名前を変更する

既存のリファレンスデータベースの名前を変更したい時は、まず、Reference Database Library ダイアログでそのデータベースを選択します。そして、ダイアログ下部にある"Rename"ボタンをクリックします。開く入力ウィンドウに新しい名前を入力し、"OK"を押すとリファレンスデータベースライブラリのリストの名前が更新されます。

次の事柄に注意してください:

- 一般ユーザ（管理者権限の無いアカウント）の時は"Your personal reference databases"リスト内のリファレンスデータベースしか名前の変更はできません。
- 現在選択中のリファレンスデータベースは Match! のウィンドウの下部分のステータスバーに表示されます。この名前はリファレンスデータベースライブラリを閉じると更新されます。

## PDF-2 リファレンスデータベースを移動する

現在使用中のリファレンスデータベース内に PDF-2 の"古い"形式のものがある場合、該当する PDF-2 データベースファイルを別の場所に移動できます。まず、該当するファイル ("pdf2.dat"または、似た形式のもの) を新しい場所に移動またはコピーします (Windows のエクスプローラーやファイルマネージャーを使って該当するフォルダを選択し、"pdf2.dat"をその場所を選びます)。Match! はこのファイルの内部リファレンスを更新するのでデータの読み込み中にどのフォルダを参照すればいいのかわかる仕組みになっています。その情報は、エントリのデータシート等に表示されます。

## リファレンスデータベースを削除する

リファレンスデータベースをコンピュータ上から削除するには、Reference Database Library ダイアログで目的のリファレンスデータベースを選択します。そして、ダイアログ下部にある"Delete"ボタンをクリックします。警告メッセージが表示されたら、「物理的」に該当するインデックスファイルを削除するか尋ねられます。"No"を選択すると、"Add"ボタンを使えば同じリファレンスデータベースを後で復元できます。"OK"を選ぶと、目的のリファレンスデータベースはリファレンスデータベースライブラリのリストから削除されます。

一般ユーザ（管理者権限の無いアカウント）の場合は、"Your personal reference databases"リスト内のリファレンスデータベースしか削除できません。

## ユーザデータベース

### 概略

本マニュアル内で既に説明したように、粉末回折データからの相同定には"リファレンスパターンデータベース"が必要になります。ICDD の PDF 製品が最も有名で、リファレンスパターンといえは多くの場合このデータベースを指していました。しかし、他にもリファレンスパターンとなるデータベースがあります。例えば、Match! に付属している COD データベース、初期の ICSD(Retrieve)データベース、ご自身の回折データなどが使えます。ご自身の回折データは特に、まだ回折データや結晶構造が出版されていない新しい物質をラボなどで生成した場合に有効です。


COD リファレンスデータベースは Crystal Impact 社の Web ページから無料かつ、すぐに使える状態でダウンロードできます。ICSD/Retrieve あるいはご自身の回折パターンを Match! で使うには、まず、"ユーザデータベースエントリ"にインポートしてください。

ユーザデータベースのエントリは複数のソースからインポートできます。

- ICSD/Retrieve データベース (1993-2002 リリース)
- 結晶構造データ (一般的に CIF ファイル形式)
- 実験室の回折計で計測した化合物
- 発表された論文
- 同僚のユーザデータベース

これらのユーザ回折パターンは"ユーザデータベース" (拡張子.mtu) に保存する必要があります。その後"Create Reference Database"ダイアログ (p.33) で選び、リファレンスデータベースとして使用します。このセクションでは、上記の元データからユーザデータベース (.mtu ファイル) の作成方法をご紹介します。

### ユーザデータベースを作成する

ユーザデータベースの作成と管理の中心を担うツールは"User Database Manager"と呼ばれます。(メイン) ツールバーのボタン  をクリックする、"Tools"メニューから"User Database Manager"を選択する、"Create Reference Database"ダイアログ内の"Create/modify user database..."ボタンをクリックする、のいずれかの操作で開きます。

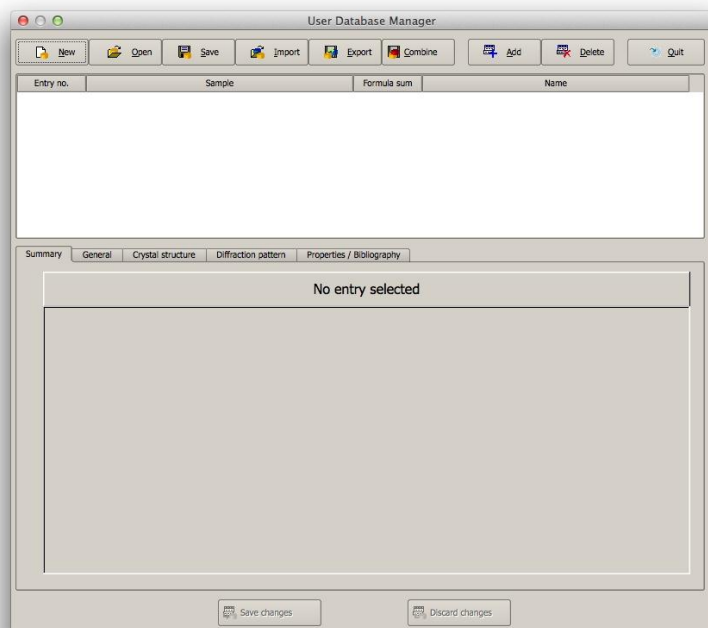


図 24 : これは空のユーザデータベースです。

"User database manager"ウィンドウ（図 24）は3つの部分に分かれています。一番上には9個のボタンがあり、基本的な操作（インポートやエントリの追加、等）を行うことができます。その下、ウィンドウの上半分は現在のエントリリストを表示します。最後に、下半分には"tabsheet"（タブシート）があり、上記のエントリを表示して編集できます。各タブシートへの切り替えは目的のタブシートヘッダをクリックすることで行えます。

最初のタブシート、"Summary"は他のデータベースフィールドの抜粋を表示します。ここではデータを閲覧するだけで、編集は行えません。2番目のタブシート"General"では、結晶相の情報、例えば化学式や化学名などが表示されます。3番目のタブシート、"Crystal structure"は結晶構造のデータを入力でき、その次の"Diffraction pattern"を計算できます。"Diffraction pattern"タブでは、単に回折パターンを計算して見るだけでなく、回折パターンをピークリストファイルとしてインポート（または、エクスポート）できます。また、回折データを手動で入力することもできます。最後に、"Properties / Bibliography"タブシートは例えば、密度などの物理的性質と文献データベースの情報にアクセスできます。

以下のサブセクションでは、実際にユーザデータベースを作成する中でデータベースにデータを入力する様々な例を紹介します。データを追加したら、変更したユーザデータベースは **mtu** ファイルとして保存してください。"Quit"ボタンをクリックして User Database Manager ダイアログを閉じると、ユーザデータベースの保存を確認するダイアログが表示されます。ダイアログを開いている最中に保存するには、ダイアログウィンドウの上部にある"Save"ボタンをクリックします。

### ICSD/Retrieve からインポートした結晶構造を元にパターンを計算する

1993-2002 年にリリースされた ICSD/Retrieve の有効なライセンス<sup>14</sup>がある場合、結晶構造データを ICSD から追加費用無くインポートすることで強力なリファレンスデータベースを作成できます。このインポート手順の中で、粉末回折パターンと定量分析に必要な I/Ic 値は自動的に計算されます。

User database manager ダイアログ上部の"Import"ボタンをクリックしてください。すると、cif (crystallographic information files) 形式、他の Match! のユーザデータベース、ICSD 形式のどのデータをインポートするか尋ねるダイアログが表示されます (図 25)。

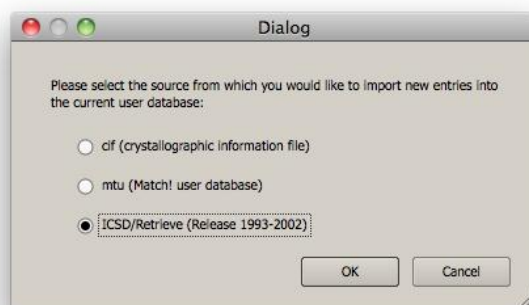


図 25: このダイアログでは、インポートするデータの元形式を選択します (cif-ファイル、Match! ユーザデータベースファイル、ICSD)。

図 25 のように"ICSD/Retrieve"のオプションに印を付けて"OK"をクリックします。次に、ICSD/Retrieve データベース ("ICSD.NEW"ファイル) が保存してあるディレクトリを選択します。"File Open"ダイアログが表示されるので、"ICSD.NEW"ファイルを選びましょう。一般的に、このファイルは ICSD/Retrieve プログラムディレクトリ内の"INDEX"サブディレクトリにあります。"ICSD.NEW"ファイルを見つけて選択したら、"Open"をクリックしてください。

新しいダイアログが表示されるので、インポートする ICSD/Retrieve バージョンに対して有効なライセンスを持っていることを認証してください (図 26)。認証はプロトコルのログファイルに記載されます。



図 26 : ICSD/Retrieve データベースのインポートおよび使用前に有効なライセンスの確認が必要です。

<sup>14</sup> ライセンスが有効か確認したい方は、FIZ Karlsruhe (Germany) (e-mail: crysdata@fiz-karlsruhe.de)までお問い合わせください。



有効なライセンスを持っていることが確認されると、新たなダイアログが表示されて回折パターンの計算に関する設定を調整できます。放射線タイプ（X 線および中性子線）、波長、最大  $2\theta$  角度、データベースに入れるピークの最大数を設定できます（図 27）。この方法で中性子回折のリファレンスデータベースを簡単に作成できます。

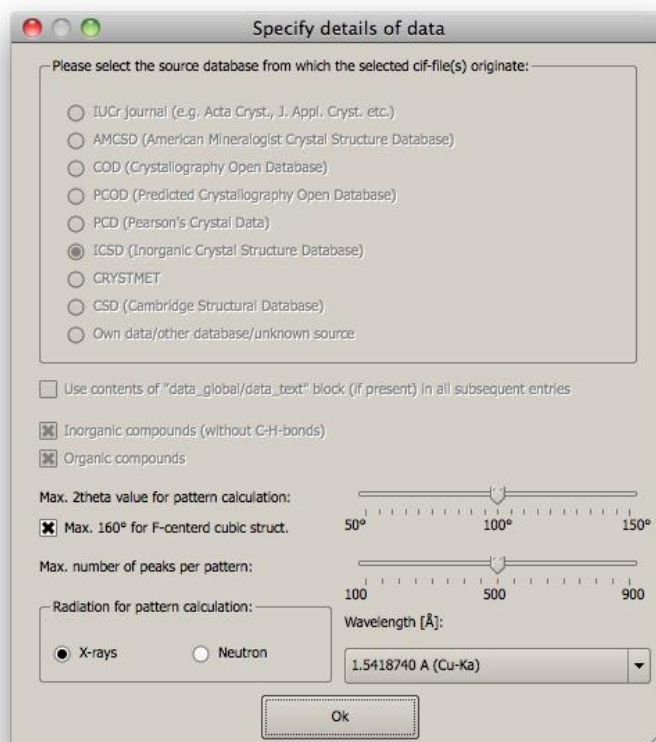


図 27：複数のオプションを使ってリファレンスの粉末回折パターンの計算を調整できます。調整できるパラメータには例えば波長や  $2\theta$  上限などがあります。

必要な箇所を調整したら、「OK」をクリックします。これで設定は終了です。選択した ICSD/Retrieve データベースからエントリのインポートを開始します。進捗は小さなウィンドウに表示されます。

ICSD/Retrieve データベースに含まれるエントリの数と PC の処理速度によりますが、このインポートには丸 1 日、あるいはそれ以上の時間を要することもあります。インポートが終了したら、新しいエントリは自動的にユーザデータベースに追加されるので、エントリリストには数秒後に反映されます。インポート中にエラーがあるとテキストエディタに表示されます。

インポートが終了したらユーザデータベースマネージャ上部の「Save」ボタンをクリックし、インポートしたデータを「ユーザデータベースファイル」（拡張子.mtu）として保存してください。既にお伝えしたように、このユーザデータベースファイルは「Create Reference Database」ダイアログで選択でき、新しい ICSD/Retrieve リファレンスデータベースを Match! に付属している COD リファレンスデータベースと組み合わせて作成できます。

### cif ファイルの結晶構造からパターンを計算する

最も簡単にユーザデータベースにエントリを追加する方法は cif ファイルの結晶構造データをインポートする方法です。インポートすると、そのエントリの粉末回折パターン（と定量分析の際に必要な I/Ic 値）が自動的に計算されます。

User database manager ダイアログ上部の"Import"ボタンをクリックしてください。すると、cif (crystallographic information files) 形式、他の Match! のユーザデータベース、ICSD 形式のどのデータをインポートするか尋ねるダイアログが表示されます (図 28)。

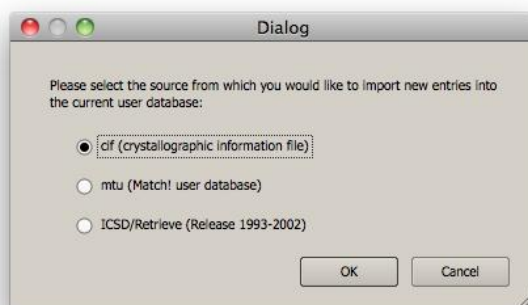


図 28 : このダイアログでは、インポートするデータの元形式を選択します (cif-ファイル、Match! ユーザデータベースファイル、ICSD)。

"cif"オプションを選択し、"OK"をクリックしてください。すると、新しいダイアログが表示され、インポートする cif ファイルが保存してあるディレクトリを選択するよう求められます<sup>15</sup>。ここでは Match! プログラムディレクトリ内の"Tutorial"サブディレクトリを選択し (図 29) 、"OK"をクリックし、サンプルデータをインポートしてみましょう。



図 29 : ここでは目的の cif ファイルを保存しているディレクトリを選択します。

再度新しいダイアログが開き、そのディレクトリ内にあるすべての cif ファイルが表示されるので (これは、サブディレクトリにあるものも含みます)、目的の cif ファイルを選びます。この例では、"calcite.cif"<sup>16</sup>を選択して"OK"をクリックします。

再び新しいダイアログが表示され、COD や AMCSDB など、cif ファイルのデータソース (cif ファイルを提供したデータベース) を選びます。また、回折パターンの計算を調整する設定もここで行えます。放射線タイプ (X 線および中性子線)、波長、最大  $2\theta$  角度、データベースに入れるピークの最大数を設定できます。この方法で中性子回折のリファレンスデータベースを簡単に作成できます。

<sup>15</sup> Windows を使用する場合、この「ファイルを開く」ダイアログには既知のバグのため、使用できません。

<sup>16</sup> この cif ファイルは American Mineralogist Crystal Structure Database に収録されていたものです (<http://www.geo.arizona.edu/AMS/amcsd.php>)。

このケースでは、このエントリはオリジナルの AMCSD のデータを直接使用しているので、次の図 (図 30) のように設定を行い"OK"をクリックしてください。

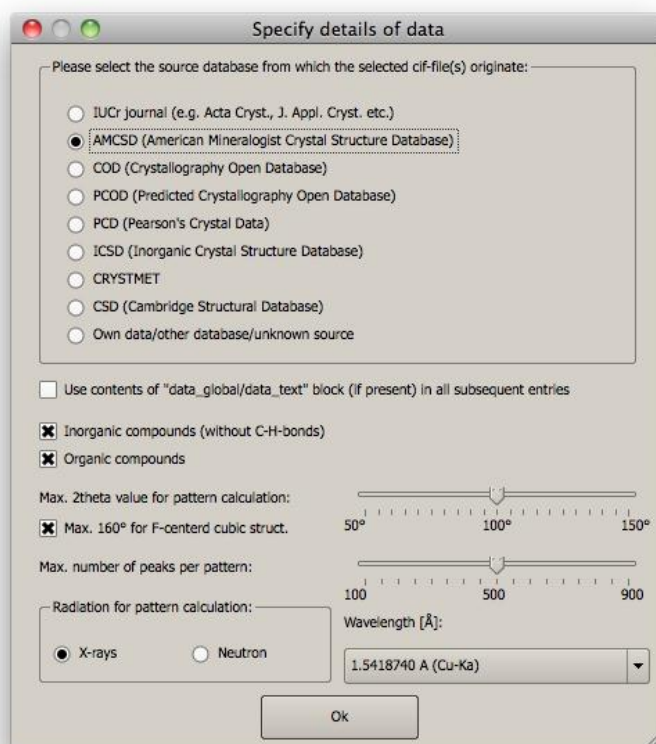


図 30 : インポートしたいエントリは AMCSD から直接入手したものです。

これで操作完了です。この後については、Match! が自動的に処理します。新たなエントリを作成し、cif ファイルからのデータは該当するデータフィールドにインポートします。そして、インポートした結晶構造データから回折パターン、密度、I/Ic 値を計算します。新しいエントリはユーザデータベースに自動的に追加されるので、エントリリストには数秒後に反映されます<sup>17</sup> (図 31)。

<sup>17</sup>もちろん、単位格子が大きなものならば、回折パターンの計算にはもっと時間がかかります。

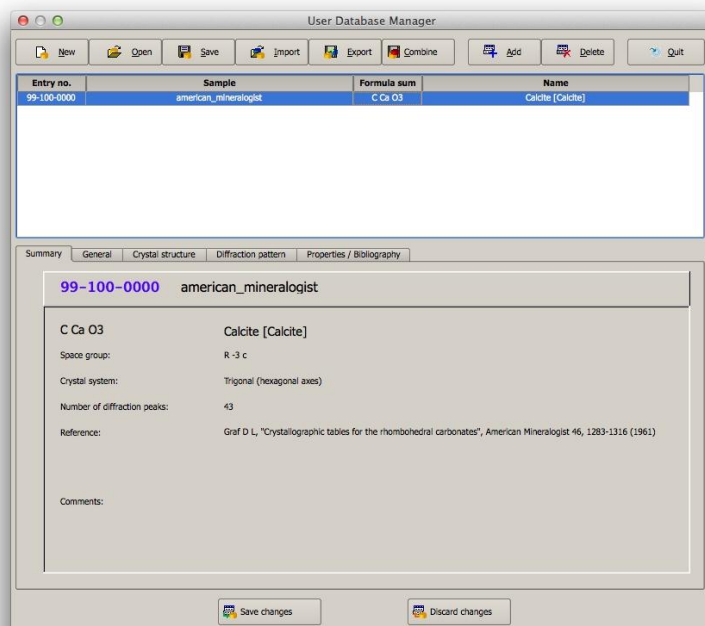


図 31 : "American Mineralogist Crystal Structure Database"から cif ファイルでインポートした新しいエントリ "Calcite"を表示します。

既に説明しているように、一度に複数の cif ファイルをインポートできます。その場合は、「Shift」か「Ctrl」キーを押しながら目的のファイルをクリックして複数選択しましょう。すると、すべての選択したファイルが順次自動でインポートされます。一度に複数の cif ファイルをまとめてインポートする場合、最後のファイルのインポートが完了してから警告とエラーのレポートを 1 度だけ表示します。一方、ファイルを 1 つずつインポートする時には警告とエラーはその都度、表示されます。複数の cif ファイルをインポートする機能は強力で、Crystal Impact 社では実際に COD リファレンスデータベースを作成するのに 177,000 エントリの COD cif ファイルをインポートしました。

### 回折データのインポート

Match! のユーザデータベースに回折データをインポートする他の方法は、それぞれのピークデータファイルをインポートすることです。現在、3 種類のピークデータファイルをサポートしています。

- Stoe ピークファイル (\*.pks)
- Philips/PANalytical ピークデータファイル (\*.udi)
- Endeavour ピークリストファイル (2 列:  $2\theta$  および  $d$  値による強度; \*.dif)

通常のピークデータファイルには、例えば、混合物のような詳しい情報を組み込んでいないので、これらのデータは手動で入力する必要があります。では、回折データのインポートから開始し、この結晶相の情報を後から入力しましょう。

この例では、鉱物アラレ石 (Aragonite) の回折パターンが Philips/PANalytical のピークデータ形式 (aragonite.udi) で手元にあるとします。このデータをユーザデータベースに追加しましょう。この操作は簡単なので、実際に試してください。

"User Database Manager"が開いていることを確認してください。そして、ダイアログ上部にある、"Add"ボタンをクリックします。"General"タブシートが自動的にアクティブになり、カーソルは初めの入力エリア、"Sample name" に配置されます。今回は回折データを先にインポートして、後から相情報の詳細を入力するので、"Diffraction pattern"タブヘッダをクリックしてそのタブを開きます（図 32）。

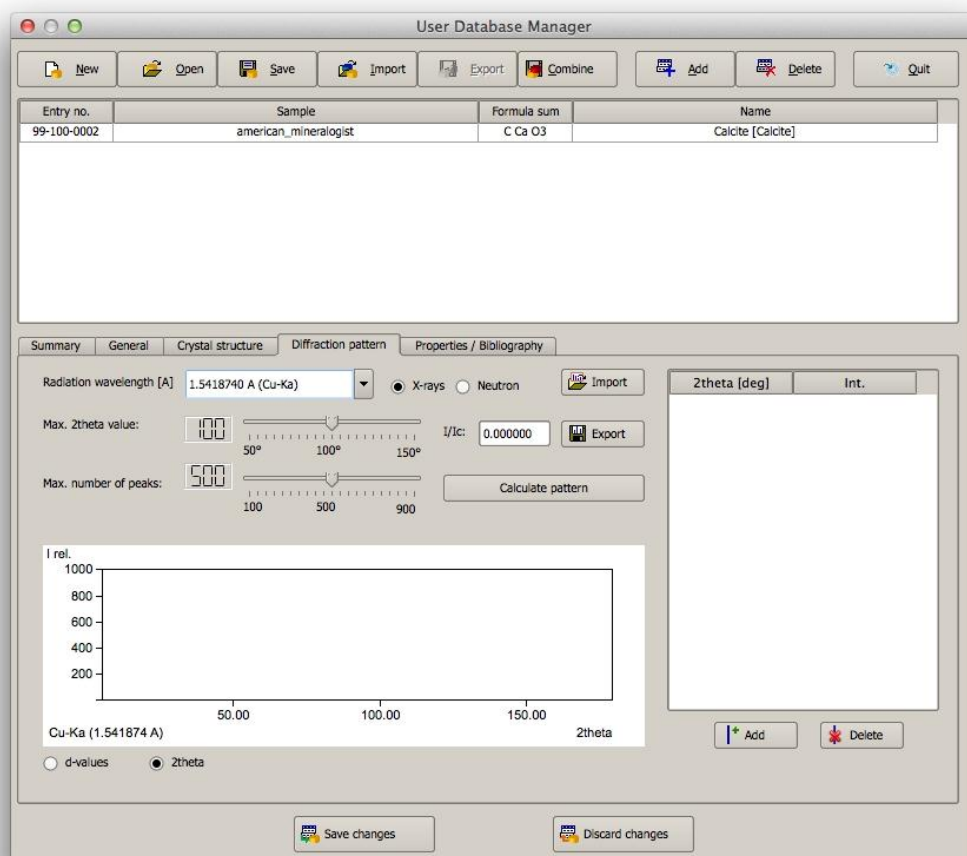


図 32 : "Diffraction pattern"のタブシートはまだ空の状態です。

ピークデータ表の左側にある"Import"ボタンをクリックします。ダイアログが開き、目的の回折データファイルを選択します。ダイアログ下部にある"File type"には"Philips/PANalytical Peak data (\*.udi)"を選んでいただき、Match! プログラムディレクトリ ("C:\Program Files\Match2\Tutorial") 内の "Tutorial"にある"aragonite.udi"を選択します。そして、"Open"をクリックしてください。回折データは"Diffraction pattern"タブシートに表示されます。このとき、回折パターンの図とピークリストの表 ( $2\theta$  または  $d$  値/強度) の両方が表示されます（図 33）。



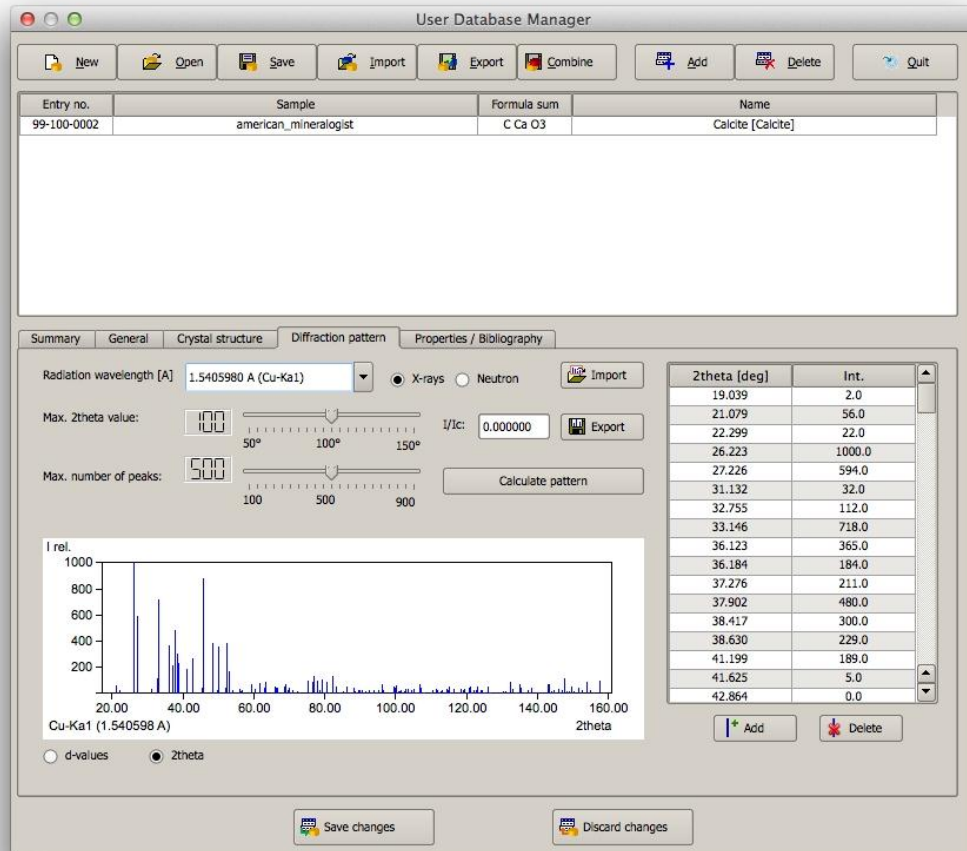


図 33 : アラレ石 (Aragonite) の回折パターンが"aragonite.udi"からインポートされました。

あとは結晶相の情報を"General"タブシートに入力するだけなので、"General"タブシートを開きます。"Sample name"エリアに「Aragonite」と入力し、「Tab」キーを押して"Formula sum" (化学式) の入力エリアに進みます。そのエリアに「Ca C O3」と入力します (この際、元素と元素の間に半角スペースを入力するのを忘れないでください)。入力後再び「Tab」キーを押して"Chemical name" (化学名) に「Calciumcarbonate」 (炭酸カルシウム) と入力してから「Tab」キーを押して"mineral name" (鉱物名) に移動してから「Aragonite」 (アラレ石) と入力します。

最後に、このデータの品質を評価しましょう。例題の場合、回折パターンはとても品質の良いものなので、左下の"Quality"ボックス内で"\* (excellent)"を選びましょう。それから、タブシートの下部にある、"Save changes"ボタンをクリックします。

これで、作業は完了です。回折データエントリはユーザデータベースに追加されたので、上部のエントリリストに追加されました (図 34)。

The screenshot shows a window titled "User Database Manager". At the top is a toolbar with buttons: New, Open, Save, Import, Export, Combine, Add, Delete, and Quit. Below the toolbar is a table with the following data:

| Entry no.   | Sample                | Formula sum | Name                         |
|-------------|-----------------------|-------------|------------------------------|
| 99-100-0002 | american_mineralogist | C Ca O3     | Calcite [Calcite]            |
| 99-900-0003 | Aragonite             | Ca C O3     | Calciumcarbonate [Aragonite] |

Below the table is a detailed form for the selected entry (99-900-0003). The form has tabs: Summary, General, Crystal structure, Diffraction pattern, and Properties / Bibliography. The "General" tab is active, showing the following fields:

Phase Description

Sample name: Aragonite      Formula sum: Ca C O3

Chemical name: Calciumcarbonate      Mineral name: Aragonite

Quality

☒ \* (excellent)  
☐ C (calculated)  
☐ R (Rietveld)  
☐ I (Indexed)  
☐ B (none)  
☐ O (doubtful)  
☐ D (deleted)

Comments

At the bottom of the form are two buttons: "Save changes" and "Discard changes".

図 34 : アラレ石の回折パターンがユーザデータベースに追加されました。

### 回折データを手で入力する

少々面倒ですが、おそらく、回折データを入力する際に最も柔軟に対応できる方法はデータを手で入力することでしょう。ときにはこの方法しかデータを入力できないこともあります。情報が印刷された書籍にのみ載っていることもあるでしょう。これから、簡単なエントリを何もないところから実際に入力して手順を確認しましょう。

次にあるデータは、架空の学術論文から得た情報です。

Title: Common Salt

Formula Sum: NaCl

Chemical name: Sodiumchloride

Mineral name: Halite

List of peaks (d Int.):

|        |        |
|--------|--------|
| 3.2447 | 82.5   |
| 2.8100 | 1000.0 |
| 1.9870 | 616.9  |
| 1.6945 | 17.7   |
| 1.6224 | 186.5  |
| 1.4050 | 76.8   |
| 1.2893 | 7.9    |
| 1.2567 | 192.4  |
| 1.1472 | 134.3  |
| 1.0816 | 8.1    |

この鉱物のデータをユーザデータベースに手入力します。User Database Manager ウィンドウの上部にある "Add" ボタンをクリックし、新しいエントリをユーザデータベースに入力していきましょう。"General" タブシートは自動的にアクティブになり、カーソルはあらかじめ "Sample name" に配置されます。

"General" タブシート内の "Phase Description" とグループ分けされている 4 つのフィールドは結果リストから特定のエントリを探すのに使用するので、きちんとデータを入力することをお勧めします。

この例では、サンプル名として出版タイトル (publication title) を入力するので、「Common Salt」(カギ括弧内の文字だけです、うっかりカギ括弧も入力しないでください) と入力して「Tab」キーを押し、次の入力エリア (formula sum、化学式) に移動します。

ここには化学式 NaCl を入力します。その際に気を付けてほしいのは、**CIF-や PDF-の基準に合わせて忘れずに元素と元素の間に半角スペースを入力してください。**つまり、「Na Cl」と入力してから「Tab」キーを押し、"Chemical name" (化学名) の欄に移動します。

化学名 (chemical name) には「Sodiumchloride」(塩化ナトリウム) と入力してから「Tab」キーで "Mineral name" (鉱物名) に移動し、「Halite」(岩塩) と入力します。最後に "Quality" で左側にある "\*" (excellent) のラジオボタンを選びましょう。これで、図 35 のような画面になっているはずです。

User Database Manager

New Open Save Import Export Combine Add Delete Quit

| Entry no.   | Sample                | Formula sum | Name                         |
|-------------|-----------------------|-------------|------------------------------|
| 99-100-0002 | american_mineralogist | C Ca O3     | Calcite [Calcite]            |
| 99-900-0003 | Aragonite             | Ca C O3     | Calciumcarbonate [Aragonite] |

Summary General Crystal structure Diffraction pattern Properties / Bibliography

Phase Description

Sample name: Common Salt Formula sum: Na Cl

Chemical name: Sodiumchloride Mineral name: Halite

Quality

☒ \* (excellent)

☐ C (calculated)

☐ R (Rietveld)

☐ I (indexed)

☐ B (none)

☐ O (doubtful)

☐ D (deleted)

Comments

Save changes Discard changes

図 35 : 塩化ナトリウムのデータが"General"タブシートに入力されました。

先程の論文のデータで入力していないのは回折データだけです。では、"Diffraction pattern"のヘッダをクリックしてタブシートを表示します。ピークの d 値を入力するので、最初に左下角にある"**d-values**"のラジオボタンをクリックします。

それから、ピークのデータ表の右側下にある"Add"ボタンをクリックして初めのピークの d 値 (3.2447) を入力し、「Tab」キーを押して 2 列目"Int."に移動します。それに対応する強度の値 (82.5) を入力して「Enter」キーを押します。これで、最初のピークの入力が終わり、入力したピークの回折パターンを左側に表示します。

同じように、2 つ目のピーク (2.81, 1000.0) も入力します。入力後に「Tab」キーを押して次の入力エリア (Int.) に移動することを忘れないでください。2 番目のピークが回折パターンに表示され、スクリーンは図 36 のようになります。

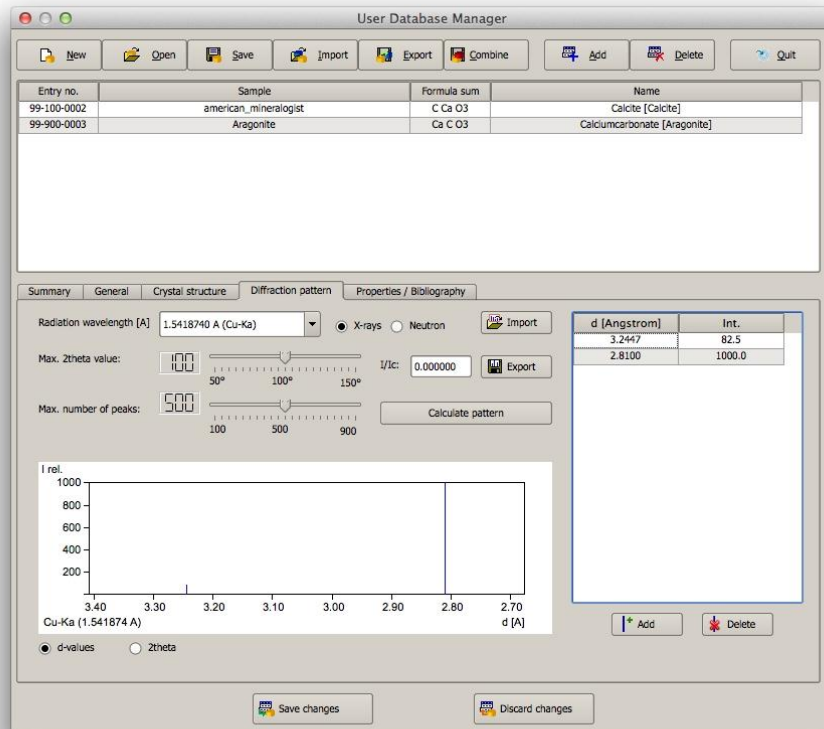


図 36 : 初めの 2 つのピークのデータが入力できた状態です。

残りの 8 つのピーク情報も同じ要領で入力してください。

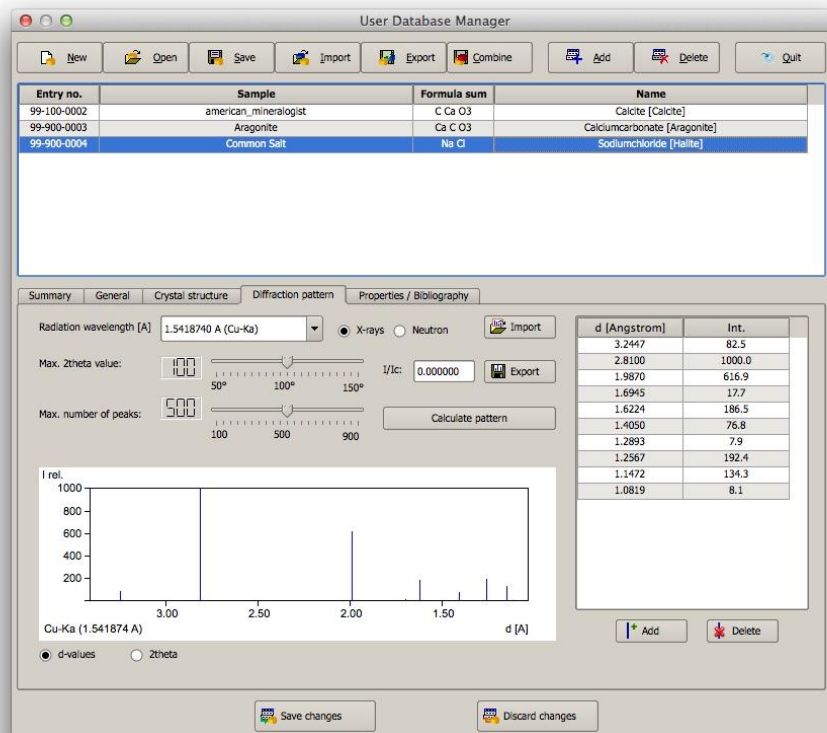


図 37 : 全てのピーク情報を入力できたので、この新しいエントリは保存しました。



これまでの作業でデータの入力はできましたが、このデータはまだ保存されていません（エントリが **User Database Manager** ウィンドウの上部に表示されていません）。保存するには、**User Database Manager** ウィンドウの下にある"Save changes"ボタンをクリックします。すると、このエントリがウィンドウ上部のリストに追加され、スクリーンは図 37 のようになっているはずです。

ユーザデータベースで使用するエントリ番号は、ICDD PDF のナンバリング方式に則って自動的に割り振られます。ユーザはこの番号を変更できません。  
 エントリ番号はデータの出所によって変わります。エントリが COD から入手された場合、エントリ番号は「960000000 + COD ファイル番号 + 1」として割り振られます。例えば、COD の cif ファイル名が 9000000.cif である場合、エントリ番号は「96-900-0001」となります。エントリが ICSD からインポートされた場合、エントリ番号は「980000000 + ICSD Collection Code (COL)」で算出されます。例えば、ICSD の COL が 68860 のエントリ番号は「98-006-8860」となります。手入力されたエントリ番号は「99-900-0000」から始まる番号が順番に割り当てられます。

### 結晶構造データを手入力する

出版物に化合物の粉末回折パターンが載っておらず、代わりに結晶構造データが掲載されている場合、その情報を入力して回折パターンを計算する方法があります。これから、例題として"Quartz"を追加してやり方の確認を行います。

学術論文から得た情報は次の通りです。

Title: alpha-quartz

Formula Sum: SiO<sub>2</sub>

Chemical name: Silicondioxide

Mineral name: Quartz

Crystal structure data:

Crystal system: trigonal

Space group: P 32 2 1

Unit cell: a= 4.914 c = 5.405 alpha = 90.0 gamma = 120.0

Atomic coordinates:

Si 0.4698 0.0000 0.6667

O 0.4145 0.2662 0.7856

Reference: G. Smith, L.E. Alexander, Acta Cryst. 16(6), 462 (1963)

User Database Manager に次のように入力します。新しいエントリを入力するために、ウィンドウ上部の"Add"ボタンをクリックします。今までの例題のように、カーソルが"Sample name"に配置された状態で、"General"タブシートがアクティブになります。

タイトルにある、"alpha-quartz"をサンプル名として入力し、「Tab」キーを押して"Formula sum"(化学式)のエリアに移動します。化合物は  $\text{SiO}_2$  なので、「Si O2」（Si と O の間の半角スペースに注意して）と入力してから「Tab」キーをもう 1 度押します。

そして、"Chemical name"（化学名）には「Silicondioxide」と入力して「Tab」キーを押し、鉱物名（mineral name）には"Quartz"と入力しましょう。最後に、この回折パターンは結晶構造データから計算されるので、"Quality"（品質）を"C(calculated)"にします（図 38）。

| Entry no.   | Sample                | Formula sum | Name                         |
|-------------|-----------------------|-------------|------------------------------|
| 99-100-0002 | american_mineralogist | C Ca O3     | Calcite [Calcite]            |
| 99-900-0003 | Aragonite             | Ca C O3     | Calciumcarbonate [Aragonite] |
| 99-900-0004 | Common Salt           | Na Cl       | Sodiumchloride [Halite]      |

Summary General Crystal structure Diffraction pattern Properties / Bibliography

Phase Description

Sample name:  Formula sum:

Chemical name:  Mineral name:

Quality

☐ \* (excellent)  
☒ C (calculated)  
☐ R (Rietveld)  
☐ I (Indexed)  
☐ B (none)  
☐ O (doubtful)  
☐ D (deleted)

Comments

図 38 : "General"タブシートに入力する情報は、全て入力しました。

次に論文から入力する情報は結晶構造です。ウィンドウの"Crystal structure"タブをクリックしてタブシートを表示します。最初に入力するのは結晶系である、三方晶（trigonal）です。タブシート内の左上にある"Crystal system"グループの"Trig./hexag."ラジオボタンをクリックします。

次に、コンボボックスから空間群（space group）を選びます。このコンボボックス内には、先程設定した結晶系に属する空間群だけが表示されます。この論文内で提示されている空間群は"P 32 2 1"なので、コンボボックスの右側にある下矢印をクリックし、リストから"P 32 2 1 (154)"（かっこ内の数字は"International Tables of Crystallography"に掲載されています）を選びます。

結晶系と空間群を選択したら、格子定数を入力します。結晶系と空間群が先に設定されているので、少量のパラメータの入力で大丈夫です。例題の場合、a には「4.914」を、c には「5.405」と入力してください。

ここで原子パラメータ (atomic parameters) を入力する準備が整いました。右側にある原子パラメータ表の下に "Add" ボタンをクリックし、「si」と入力して「Tab」キーを押します。カーソルは次の列、"X" に移動します。x には「0.4698」、y には「0.0」、z には「0.6667」と入力します（入力欄を移動するには「Tab」キーを押してください）。原子変位因子 Bi (isotropic displacement factor Bi) と占有率 (site occupation factor) "Occ." についての情報は載っていないので、「Enter」キーを押してシリコンの原子パラメータ入力を終了します。

次に酸素の座標を入力します。原子パラメータ表の下にある "Add" ボタンをクリックします。そして、元素 (element) には「o」、x には「0.4145」、y には「0.2662」、z には「0.7856」と入力します。最後に「Enter」を押して、原子パラメータの入力を終了します (図 39)。

The screenshot shows the 'User Database Manager' window. At the top is a menu bar with 'New', 'Open', 'Save', 'Import', 'Export', 'Combine', 'Add', 'Delete', and 'Quit'. Below this is a table with columns: Entry no., Sample, Formula sum, and Name. The table contains three entries: 99-100-0002 (american\_mineralogist, C Ca O3, Calcite [Calcite]), 99-900-0003 (Aragonite, Ca C O3, Calciumcarbonate [Aragonite]), and 99-900-0004 (Common Salt, Na Cl, Sodiumchloride [Halite]).

Below the table are tabs: Summary, General, Crystal structure, Diffraction pattern, and Properties / Bibliography. The 'Crystal structure' tab is selected. It contains a 'Crystal system' section with radio buttons for Tricl. (anorthic), Tetragonal, Cubic, Monoclinic, Trig. (rhomb.), Trig. (hexag.), Orthorhombic, and Hexagonal. The 'Trig. (hexag.)' option is selected. Below this is a 'Space group' dropdown set to 'P 32 2 1 (154)' and a 'Z' input field. The 'Unit cell parameters' section has input fields for a, b, c, alpha, beta, and gamma. The values are: a = 4.914000 A, b = 4.914000 A, c = 5.405000 A, alpha = 90.000000 °, beta = 90.000000 °, and gamma = 120.000000 °.

On the right side of the 'Crystal structure' tab is a table for atomic parameters with columns: Element, X, Y, Z, Bi, and Occ. The table contains two entries: Si (0.46980, 0.00000, 0.66670, 1.000, 1.000) and O (0.41450, 0.26620, 0.78560, 1.000, 1.000). Below this table are 'Add' and 'Delete' buttons. At the bottom of the window are 'Save changes' and 'Discard changes' buttons.

図 39 : 全ての結晶構造詳細 (結晶系、空間群、格子定数、原子パラメータ) の情報を入力できました。

これで結晶構造情報の入力完了したので、回折パターンを計算を行います。"Diffraction pattern" タブシートのヘッダをクリックして表示し、"Calculate" ボタンをクリックします。少し待つと、回折パターンが表示されます (図 40)。半定量相同定に必要な I/Ic 値も自動的に計算されます。

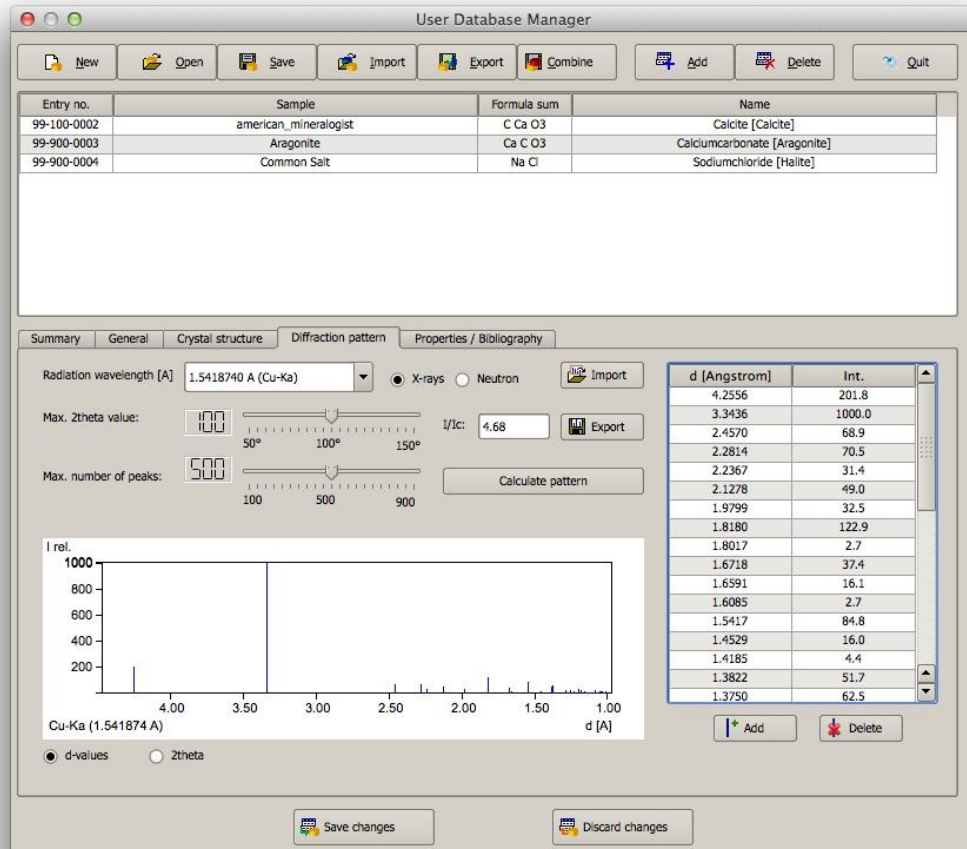


図 40 : 粉末回折パターン（と、 $I/I_c$  値に密度）が入力した結晶構造データから計算されました。

最後に、出典情報を入力します。"Properties / Bibliography"タブシートを選び、"Authors"の右にある入力ラインにカーソルを合わせ、「G. Smith, L.E. Alexander」と入力します。「Tab」キーを2回押しで"Journal"の入力列に移動し、「Acta Cr」と入力します。Match! は入力した物に一致する論文誌名を自動的に表示します。「r」まで打ち込むと、正しい論文誌名、"Acta Crystallographica (1,1948-23,1967)"と表示されます。

「Tab」キーを2回押しで（CODEN は自動的に"ACCRA9"に設定されます）、"Volume"入力欄まで移動し、「16(6)」と入力します。「Tab」キーを押して、"Page(s)"の欄には「462」と入力しましょう。最後に、「Tab」キーで"Year"まで移動し、「1963」と打ち込みます。

この時点で論文からの情報は全て入力できました。実際に入力したあなたのタブシートは図 41 のようになっているはずです。

The screenshot shows the 'User Database Manager' window. At the top is a menu bar with buttons: New, Open, Save, Import, Export, Combine, Add, Delete, and Quit. Below this is a table with four columns: Entry no., Sample, Formula sum, and Name. The table contains three entries:

| Entry no.   | Sample                | Formula sum | Name                         |
|-------------|-----------------------|-------------|------------------------------|
| 99-100-0002 | american_mineralogist | C Ca O3     | Calcite [Calcite]            |
| 99-900-0003 | Aragonite             | Ca C O3     | Calciumcarbonate [Aragonite] |
| 99-900-0004 | Common Salt           | Na Cl       | Sodiumchloride [Halite]      |

Below the table are tabs for Summary, General, Crystal structure, Diffraction pattern, and Properties / Bibliography. The 'Properties / Bibliography' tab is active, showing a form for inputting physical properties and bibliographic information.

**Physical properties:**

Density (calc.): 2.648144 g/cm<sup>3</sup>      Density (meas.): 0.000000 g/cm<sup>3</sup>      Color:

**Bibliography:**

Authors:

Title:

Journal:

CODEN:       Volume:       Page(s):       Year:

At the bottom are buttons for 'Save changes' and 'Discard changes'.

図 41 : 出典情報を入力しました。それ以外の情報は、結晶構造から密度が計算されています。

あとは、実際にエントリのデータをユーザデータベースに追加するだけです。今までの例のように、タブシートの下にある"Save changes"ボタンをクリックすれば追加できます。新しいエントリはウィンドウ上部にあるエントリリストに追加されます。

### 他のユーザデータベースからエントリを追加する

あなたの所属先に複数の Match! ユーザがいる場合、他の研究者が作成したリファレンス回折パターン、つまりユーザデータベースエントリを共有することは決して珍しいことではありません。Match! は他のユーザのデータベースを自分のデータベースにも登録できます。その方法を見ていきましょう。

まずは、同僚のユーザデータファイル (\*.mtu) をあなたのコンピュータにコピーします。そして、User Database Manager ウィンドウ上部にある、"Import"ボタンをクリックします。すると、インポートするデータのタイプが"cif" (crystallographic information files) か、あるいは、Match! のユーザデータベース (mtu ファイル) か選択するダイアログを表示します。その画面で、"mtu(Match! user database)"のオプションを選択し (図 42)、OK をクリックします。すると、"File Open"ダイアログが表示されます。

このチュートリアルのために、(小さな) デモユーザデータベースを Match! プログラムディレクトリ内の"Tutorial"に準備してあるので、このままインポートに進んでください。





図 42 : このダイアログでは、インポートするデータの出所 (cif ファイル、Match! ユーザーデータベース、ICSD/Retrieve) を選択します。

Match! プログラムファイル内の "Tutorial" サブディレクトリ (デフォルトだとパスは "C:\Program Files\Match2\Tutorial") にある、"colleague-database.mtu" を選択します。それから、"Open" をクリックしましょう。

9 つのエントリがインポートされたというメッセージが表示されます。"OK" をクリックしてそのダイアログを閉じると、エントリリストに新しいエントリが表示されます (図 43)。

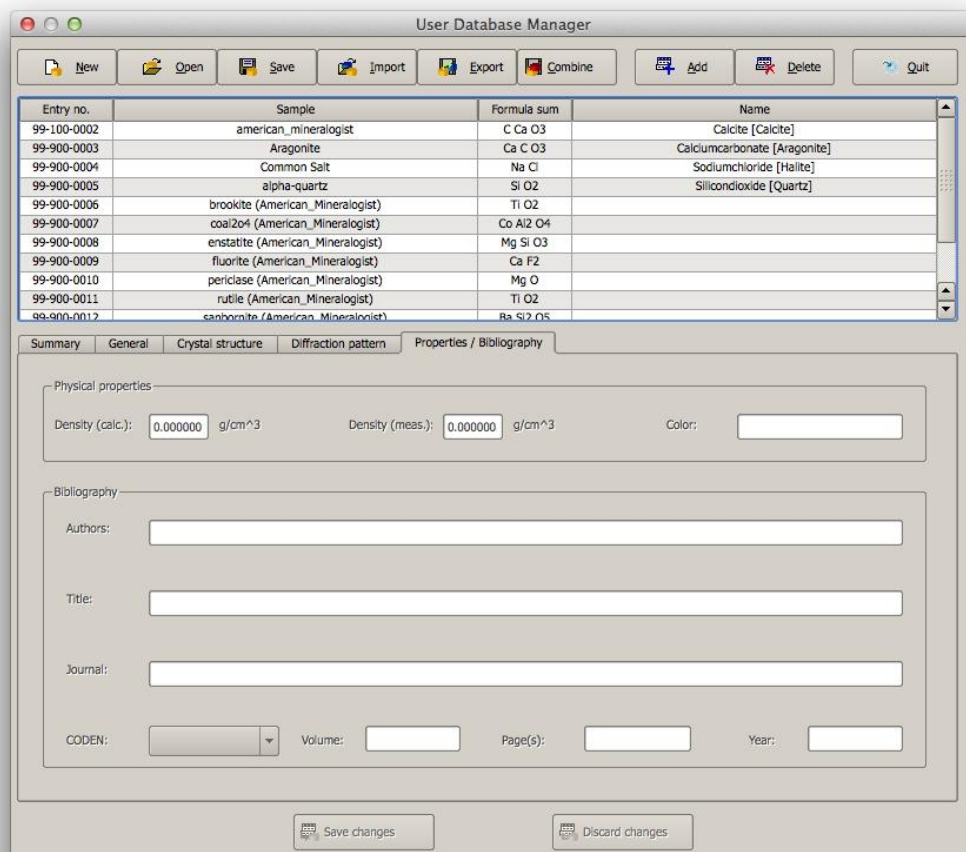


図 43 : 同僚のユーザーデータベース ("colleague's user database") 内の 9 つのエントリがユーザーデータベースに追加されました。

同僚のユーザデータベース ("colleague's user database")からインポートしたエントリには自動的にエントリ番号が割り振られます。同僚が使用していた番号をそのまま使い続けることはできません。これは、番号の重複を避けるために行われています。

## 著作権について

Match! では、様々なところから集められたデータ（例えば、インターネットからダウンロードした ICSD/Retrieve や cif ファイル）を自分のリファレンスパターンデータベースとして利用できます。しかし、実際に使う前に元データの著作権を侵害しないことを確認してください。Crystal Impact 社は Match! ユーザの著作権違反に関して責任を負うことはありません。著作権侵害をしないように、Match! で作成したユーザデータベースは、Match! がインストールしてあるコンピュータ上で開いてください。

他のユーザにも興味がありそうなリファレンスデータ（のデータソース）がある場合は Crystal Impact 社または株式会社ライトストーンまでご一報ください（p.66）。

## 付録

### スクリプトを利用してソフトウェアをコントロールする

Match! では、目的のバッチスクリプトのコマンドを、Match! 内部の"File"メニューの操作で実行できます。以下に現時点で使用可能なコマンドをすべて記載したサンプルバッチスクリプトを掲載します。バッチスクリプトに対応するファイルは一般的なテキストエディタ（メモ帳など）として作成し、例えば"batchscript.mbf"として保存します。

```
MATCH!_2_BATCH
set_default_wavelength(1.541874)
set_default_abscissa(2theta)
import("/Users/putz/Match/Samples/quickstart.rd")
!import_answerset("/Users/putz/Documents/ergebnis.mta")
!add_peak(26.62,1000.0,0.15)
strip_K_alpha2
subtract_background_automatic
smooth_exp_raw_data
find_peaks_normal(0.1,40.0,1)
!find_peaks_profile(0.1,96.0,1)
!correct_2theta_shift_automatic
!correct_2theta_spec_displ_automatic
!correct_2theta_shift(-0.14)
!correct_2theta_spec_displ(0.001)
!automatic_raw_data_processing
internal_standard(961011173)
!selection_preset("Silicon compounds")
search-match
!add_entry(96-900-7499)
!unify
!mark_first_entry
!import_selection_criteria("/Users/putz/Documents/selcrit.mss")
!select_matching_automatic
!select_first_entry_as_matching
!finish
!set_sample_id("TestID")
!set_sample_date_time("02.12.2010, 15:12 Uhr")
!view_report
!save_peak_residuals("/Users/putz/Documents/residuals.dif")
!save_document("/Users/putz/Documents/testdoc.mtd")
!close
!export_pattern_graphics("/Users/putz/Documents/pattern.jpg",JPG,1024,768,false)
!export_profile_data("/Users/putz/Documents/testprofile.dat")
!export_background("/Users/putz/Documents/testbackground.dat")
```

```
!export_entry_data(96-900-7499, "/Users/putz/Documents/entry_969007499.txt", TXT)
!export_reference_pattern(96-900-
7499, "/Users/putz/Documents/entry_969007499.pks", PKS)
!export_resultslist("/Users/putz/Documents/resultslist.pdf", PDF)
!export_matchlist("/Users/putz/Documents/matchlist.htm", HTML)
!print_pattern_graphics(1024, 768, 1)
!print_peaklist
!print_entry_data(96-900-7499)
```







「!」記号で始まる行はコメントなので、コマンドとして実行されません。











## マウスボタンとキーの組み合わせ一覧表

直接、回折パターン画像上で多くの操作を行うには、マウスを使用します。場合により、目的の操作を行う時にマウスの他にもキーボードのキーを押す必要があります。回折パターン画像上でマウスを使いながら行えることの概要を記載します。




**メモ：**マウスカーソルやプログラムが想定した動きをしない場合、回折パターンの何もないところをクリックして、回折パターン画像に入力フォーカスがあることを確認してください。その後、もう一度操作を試してください。


**Mac** を使う時は"**Ctrl**"を"**Cmd**"に置き換えてください。

| 効果・目的                     | 回折画像内でのカーソル位置                         | キーボードボタン | カーソルの形   | マウスのアクション                                |
|---------------------------|---------------------------------------|----------|--|--|
| バックグラウンドモード：コントロールポイントの移動 | バックグラウンド曲線コントロールポイント（小さな四角形）の上（表示中のみ） | -        |    | マウスの左ボタンを押しながらドラッグ                       |
| バックグラウンドモード：コントロールポイントの削除 | バックグラウンド曲線コントロールポイント（小さな四角形）の上（表示中のみ） | -        |  | カーソル下のバックグラウンドコントロールポイントを取り除くには右クリック     |
| バックグラウンドモード：コントロールポイントの追加 | バックグラウンド曲線上（表示中のみ）                    | -        |  | カーソルの下に新しいバックグラウンドコントロールポイントを追加するには左クリック |
| 1つのピークに印をつける              | ピーク頂上のすぐ下（表示中のみ）                      | -        |  | カーソルの下のピークに印をつけるには左クリック（他のピークの印は削除）      |
| 選択したピークに印をつける             | ピーク頂上のすぐ下（表示中のみ）                      | Ctrl     |  | カーソルの下のピークに印をつけるには左クリック（他のピークの印はそのまま）    |
| 2θ軸に沿ってピークを移動する           | ピーク頂上のすぐ下（表示中のみ）                      | -        |  | 右クリックし続けながら右または左にドラッグ                    |

| 効果・目的           | 回折画像内でのカーソル位置          | キーボードボタン | カーソルの形   | マウスのアクション                                       |
|-----------------|------------------------|----------|--|---|
| 範囲内のピークに印をつける   | 範囲内の最も左にあるピークの左側       | Ctrl     |    | 左クリックしながらカーソルを右にドラッグし、印をつけたい範囲のピークを選択           |
| 1つのピークに印をつける    | ピーク頂上（表示中のみ）           | -        |    | カーソルの下のピークを左クリックして印をつける（すでに印が付いているものに追加）        |
| 選択したピークに印をつける   | ピーク頂上（表示中のみ）           | Ctrl     |    | カーソルの下のピークを左クリックして印をつける（すでに印が付いているものに追加）        |
| ピークを追加する        | どこでも                   | Ctrl     |   | 右クリックで現在のカーソル位置にピークを追加                          |
| 2θ軸に沿ってピークを移動する | ピーク頂上のすぐ下（表示中のみ）       | -        |  | 右クリックしながら右または左にドラッグ                             |
| ピークの強度と位置を修正する  | ピーク頂上（表示中のみ）           | -        |  | 右クリックしながら全方向にドラッグ                               |
| 選択範囲を除外する       | どこでも                   | Alt      |  | 左クリックしながら右にドラッグし、FoM 計算から除外したい範囲を選択             |
| 範囲除外マークを消す      | 除外する範囲内（灰色のバックグラウンド表示） | -        |  | 除外した範囲内で右クリックして再びこの範囲を使用（除外範囲の消去・灰色のバックグラウンド表示） |
| （選択範囲の）ズーム      | どこでも                   | -        |  | ズーム範囲の選択を始めた位置で左クリックし、そのままドラッグして範囲を選択           |
| ズーム             | どこでも                   | -        |  | ズームしたい位置にカーソルを移動し、マウ                            |



| 効果・目的               | 回折画像内のカーソル位置 | キーボードボタン | カーソルの形  | マウスのアクション   |
|---------------------|--------------|----------|---|---|
|                     |              |          |   | スホイールを上（自分から離すように）操作しズームイン（または、下に操作しズームアウト）                     |
| ズーム                 | どこでも         | -        | どれでも  | ズームしたい位置で左ダブルクリック（完全にズームアウトしている時のみ有効、次の項目参照）                    |
| ズームアウト              | どこでも         | -        | どれでも  | 右クリックでコンテキストメニューを開き、<br>"Full pattern"か<br>"Previous zoom"を選択   |
| ズームアウト              | どこでも         | -        | どれでも  | 左ダブルクリック  |
| トラッキング（ズーム範囲の移動）    | どこでも         | Shift    |  | 画像にズームしたら、キーボードの Shift キーかマウスホイールを押しながら、マウスを移動                  |
| マウスカーソル位置に垂線を引く     | どこでも         | Ctrl+X   | どれでも  | キーボードで「Ctrl+X」を押すとカーソル位置に垂線を引く（ピーク位置の比較等に使用）                    |
| ゼロ位置移動              | どこでも         | Ctrl+Alt |   | キーボードで「Ctrl+Alt」を押しながらマウスホイールを動かすと、ピークと生データを 2θ 軸上で移動           |
| プロットの大きさ・高さの違いを調整する | 2θ / d-軸     | -        |  | カーソルを 2θ または d 値軸（x 軸）に移動（カーソルが変わる所）して左クリックし、上に（自分から遠ざけるように）移動し |

| 効果・目的            | 回折画像内でのカーソル位置      | キーボードボタン | カーソルの形   | マウスのアクション   |
|------------------|--------------------|----------|--|---|
|                  |                    |          |  | て差異プロットを開く・大きくする（または、下に移動してプロットを閉じる・小さくする）                                |
| 強度スケール要素を手動で調整する | マッチリスト内で選択したピークの頂上 | -        |  | マッチリスト内で選択してあるピークの上にカーソルを移動（カーソルが変化）し、左クリックで上下にドラッグして選択した相の強度スケール要素（量）を修正 |

## キーボードショートカットとファンクションキーの一覧表

Match! で使用するコマンドや操作の多くは特定のキーボードのキーを押すと実行できます。一般的にキーボードショートカットと呼ばれるもので、特によく使うものを覚えると、Match! での作業をスピードアップできます。次の表は、Match! 内で使用できるショートカットの一覧です。

Mac を使う時は"Ctrl"を"Cmd"に置き換えてください。

| キー                  | 効果  | メニュー操作                                       |
|---------------------|---|--|
| <b>Ctrl+A</b>       | 自動生データ処理  | Pattern/Automatic/Autom. raw data proc.      |
| <b>Ctrl+B</b>       | 現在の選択項目（追加項目）をクリア   | Search/Reset restraints/additional entries   |
| <b>Ctrl+C</b>       | ゼロポイントエラー（ $2\theta$ シフト）の修正                                | Pattern/Correct zero-point error             |
| <b>Ctrl+D</b>       | 候補リストまたはマッチリスト内で選択したエントリシートのデータを表示                          | View/Data sheet                              |
| <b>Ctrl+E</b>       | エントリ番号からエントリをロード（Ctrl+F と同じ操作）                              | Entries/Load/add entry                       |
| <b>Ctrl+F</b>       | 入力した検索項目に最もマッチするエントリを探して表示                                  | Search/Find phase/entry(s)                   |
| <b>Ctrl+G</b>       | 次のエントリを探す（"Find"（Ctrl+F）の後に使用）。または、候補リストで検索項目に当てはまる次の候補を探す。 | Search/Find next                             |
| <b>Ctrl+Shift+G</b> | 前のエントリを探す（"Find"（Ctrl+F）の後に使用）。または、候補リストで検索項目に当てはまる前の候補を探す。 | Search/Find previous                         |
| <b>Ctrl+I</b>       | 別の回折パターンファイルをインポート  | Pattern/Insert/overlay...                    |
| <b>Ctrl+J</b>       | オンラインヘルプのマウス操作とキーボードショートカットを表示                              | Help/Keyboard shortcuts and mouse operations |
| <b>Ctrl+K</b>       | 従来の方法（二次微分）を使ってピーク検索を行う                                     | Pattern/Peak searching/Peak search           |
| <b>Ctrl+L</b>       | 全ての実験とリファレンスパターンのピークの概要の表を表示                                | View/Peak list                               |
| <b>Ctrl+M</b>       | 新しいサーチマッチの計算を実行   | Search/Search-Match                          |

| キー            | 効果  | メニュー操作                                       |
|---------------|---|--|
| <b>Ctrl+N</b> | 新しい（空の）Match! 文書・セッションを作成                                     | File/New                                     |
| <b>Ctrl+O</b> | Match! のドキュメントをファイルから開く。または、初めの回折データファイルをインポート。               | File/Open                                    |
| <b>Ctrl+P</b> | "Print"ダイアログを開き、プリントしたいものを選択                                  | File/Print...                                |
| <b>Ctrl+Q</b> | Match! を閉じる   | File/Quit (Mac: Match!/Quit)                 |
| <b>Ctrl+R</b> | 相分析レポートを表示  | View/Report                                  |
| <b>Ctrl+S</b> | 現在のセッション（Match! 文書）を保存  | File/Save                                    |
| <b>Ctrl+T</b> | 現在候補リストで選択中のリファレンスパターンとの最適なピークの重なるのために、実験パターンを $2\theta$ 上で移動 | Entries/Internal standard                    |
| <b>Ctrl+U</b> | 候補リスト内で特定の相のエントリが複数ある場合、その相で最もマッチしているエントリ（FoM 値が高い）以外を取り除く    | Entries/Unify phases                         |
| <b>Ctrl+W</b> | Tool/Options ダイアログに定義したアクションの実行を終了して、Match! を終了する             | File/Finish                                  |
| <b>Ctrl+X</b> | 回折パターン内でカーソル位置に表示する垂線を移動（ピーク位置比較の時などに）                        | View/Pattern/Cursor position                 |
| <b>Ctrl+Y</b> | 以前の「元に戻す」を繰り返す  | Edit/Redo                                    |
| <b>Ctrl+Z</b> | 直前の操作・コマンドを元に戻す   | Edit/Undo                                    |
| <b>Del</b>    | 現在選択中のアイテム（例えば、ピークや候補リストのエントリ）を削除                             | Edit/Delete                                  |
| <b>F1</b>     | ヘルプウィンドウを開く   | Help/Index                                   |
| <b>F2</b>     | ピークサーチの精度を上げる   | Pattern/Peak searching/ Increase sensitivity |
| <b>F3</b>     | ピークサーチの精度を下げる   | Pattern/Peak searching/ Reduce sensitivity   |

| キー                        | 効果   | メニュー操作  |
|---------------------------|--|---|
| <b>F4</b>                 | 実験と計算したパターンの重なりが良くなるよう、ピークサーチの精度を最適化               | Pattern/Peak searching/<br>Optimize sensitivity |
| <b>F5</b>                 | プロファイルフィットを行う                                      | Pattern / Profile fitting / Profile<br>fit      |
| <b>F6</b>                 | プロファイルフィット中に $2\theta$ 値のフィットを適用する・非適用にする          | Pattern / Profile fitting / Fit<br>2theta       |
| <b>F7</b>                 | プロファイルフィット中に強度値のフィットを適用する・非適用にする                   | Pattern / Profile fitting / Fit<br>intensity    |
| <b>F8</b>                 | プロファイルフィット中に FWHM 値のフィットを適用する・非適用にする               | Pattern / Profile fitting / Fit<br>FWHM         |
| <b>Ctrl+Alt+A</b>         | 自動生データ処理のステップを設定するダイアログを開く                         | Pattern / Automatic /<br>Configure...           |
| <b>Ctrl+Alt+G</b>         | 回折パターン画像を調整するオプションのダイアログを開く                        | Tools / Diffraction pattern<br>options...       |
| <b>Cursor<br/>up/down</b> | 候補リストのライン印を上下に移動（入力フォーカスがある時）                      | -   |
| <b>Space</b>              | 候補リスト内の現在のエン트리（入力フォーカスがあるとき）をマッチングにする（マッチリストに移動する） | Entries / Select as matching                    |
| <b>Shift</b>              | パターン内にズームした後、表示している回折パターンをマウス操作で動かす（トラッキング）        | -   |
| <b>Shift+Del</b>          | 現在の実験パターン内にあるピークを全て消去                              | Peaks / Delete all peaks                        |

## サポート

Match! 使用中にトラブルに見舞われた場合、次のヒントを参考にしてください。

- ダイアログ内で操作がよく分からない時は、ウィンドウの内容をよく読んでみてください。ボタン、入力エリア、リスト等の機能を理解してみましょう。いくつかの機能が枠でグループ分けされているので、そのグループのタイトルから分かるかもしれません。
- 操作が分からないところで F1 キーMac では「Cmd+?」) を押すとオンラインヘルプが開くので、それも確認してみてください。特に **Note:**と **See also:**に記されている内容も良く確認してください。**Web** ブラウザのリンクのように下線が引いてある「ヘルプジャンプ」で表示される関連項目も確認してください。
- ヘルプ索引や、テキスト検索も使いオンラインヘルプ内を検索してみましょう。
- コマンドが見つからない場合、**Help Index** (Match! Application Help ウィンドウ内の **Index** タブ) を使い、アルファベット順に並んでいる検索アイテム一覧から探すこともできます。
- 下記 URL から、Match! の Web ページもご覧ください。

Crystal Impact 社

<http://www.crystalimpact.com/match/update.htm>

この Web ページは最新のオンラインヘルプファイル、サンプルファイル、ソフトウェアのパッチなどを載せています。

- Web ページに回答が見つからない時やバグによって引き起こされたトラブル、またはインストールおよび操作方法についてのご質問などがある場合は、下記の株式会社ライトストーンのテクニカルサポートまでご連絡ください。

<テクニカルサポート>

株式会社ライトストーン

東京都港区南青山 3-1-10 株式会社ライトストーン 5F

TEL 03-3864-5212

FAX 03-3865-0050

e-mail [tech@lightstone.co.jp](mailto:tech@lightstone.co.jp)

また、ライトストーンのページでも Match! についての情報を提供しています。

ライトストーンのページ (日本語)

<http://www.lightstone.co.jp/crystal/match.htm>



## 索引

### 1

1/d スケール ..... 12

### 2

2  $\theta$  エラー修正 ..... 66  
 2  $\theta$  値のフィット ..... 67  
 2  $\theta$  値のフィットの移動 ..... 67  
 2  $\theta$  軸の移動 ..... 63  
 2  $\theta$  軸をシフト ..... 11  
 2  $\theta$  シフト修正 ..... 65

### A

AMCSD リファレンスデータ ..... 26

### B

Beginner モード ..... 3  
 Beginner ユーザレベル ..... 23

### C

cif のインポートエラーのレポート ..... 44  
 cif ファイルのインポート ..... 41  
 COD リファレンスデータベース ..... 26

### D

Diamond ..... 2  
 dif ファイル ..... 44

### E

Endeavour ピークデータファイル ..... 44  
 Expert モード ..... 4

### F

FWHM 値のフィット ..... 67  
 FWHM フィットの移動 ..... 67

### I

I/Ic 計算 ..... 43  
 I/Ic 値 ..... 26  
 ICDD PDF-2 ..... 30  
 ICDD PDF-2 インデックス作成 ..... 32  
 ICDD PDF-2 リリース 2005 以前 ..... 32  
 ICDD PDF-4 ..... 30  
 ICDD PDF データベース ..... 26  
 ICDD PDF のナンバリング ..... 51  
 ICDD コンタクト情報 ..... 26  
 ICSD.NEW ..... 40  
 ICSD/Retrieve ..... 27, 34  
 ICSD/Retrieve からインポート ..... 40  
 IUCr リファレンスデータ ..... 26

### L

Linux ..... 2  
 Liunx 版インストールと起動 ..... 14, 16

### M

Mac OS X ..... 2  
 Mac OS X 版インストールと起動 ..... 13, 15  
 Match! のアップデート ..... 17  
 Match! のアンインストール ..... 17  
 Match! の終了 ..... 66  
 Match! のドキュメントを開く ..... 66  
 Match! のドキュメントをロードする ..... 66  
 Match! バージョン 2 の紹介 ..... 18  
 Match! を閉じる ..... 66  
 Matched Phases (レポート内) ..... 23  
 MatchRefDBInfo.mtn ..... 36

### N

Nokia Corporation ..... 3

### O

Options ダイアログ ..... 3, 23

### P

PDF-2 ..... 2, 30  
 PDF-2 インデックス作成 ..... 32  
 PDF-2 の古い形式 ..... 32  
 PDF-4 ..... 2, 30  
 PDF データベース ..... 26  
 Philips/PANalytical ピークデータ ..... 44  
 pks ファイル ..... 44  
 Preferences ダイアログ ..... 23  
 print ダイアログ ..... 66

### Q

Qt ライブラリ ..... 3

### R

Redo コマンド ..... 66  
 R 因子 ..... 11

### S

Stoe ピークファイル ..... 44

### U

udi ファイル ..... 44  
 Undo コマンド ..... 66  
 Unify phases (相の統一) ..... 11, 66  
 User Database Manager ダイアログ ..... 34

**W**

Windows 版インストールと起動..... 13, 15

**X**

X 軸のスケール..... 12

X 線回折..... 41, 42

**Y**

yourlicense.lic..... 14

**あ**

新しいセッション..... 66

新しいデータベース..... 29

新しいバックグラウンドコントロールポイント..... 61

新しい文書の作成..... 66

新しい文書を開く..... 66

新しいリファレンスデータベース..... 29, 36

新しいリファレンスデータベースの作成..... 29

**い**

一般ユーザ..... 28

色..... 12

印刷..... 66

インストール..... 13, 18

インストールのパス..... 14

インデックスの作成..... 29

インデックスファイル..... 29

インデックスファイルのディレクトリ..... 31

インデックスファイルの場所..... 31

インポートエラーのレポート..... 44

**え**

エントリがマッチした..... 67

エントリデータシートの表示..... 65

エントリ番号..... 51

エントリ番号からロード..... 65

エントリ番号のナンバリング..... 51

エントリを番号か名前を探す..... 65

**お**

オンラインアップデート..... 17

オンラインヘルプ..... 66

**か**

カーソル位置..... 66

カーソル位置に垂線を引く..... 63

カーソル位置の垂線を移動..... 66

回折データのインポート..... 44

回折データの追加..... 65

回折データの手入力..... 47

回折パターン画像のオプション..... 67

回折パターンのインポート..... 65

回折パターンの計算..... 40

回折パターンのロード..... 65

回折パターンを計算する..... 41

概略..... 26

画像のオプション..... 67

簡単な例題..... 18

管理者権限のあるユーザ..... 28

**き**

キーボードショートカット..... 65

起動..... 13

強度のフィット..... 67

強度フィットの移動..... 67

**く**

クオリティマーク..... 46

繰り返す..... 66

**け**

結晶構造から計算..... 41

結晶構造データの手入力..... 51

**こ**

鉱物サンプル..... 27

候補リストの前後..... 67

候補リストの統一..... 11

項目の保存..... 8

**さ**

サーチマッチ..... 65

サーチマッチの実行..... 65

作業の流れ..... 24

サポート..... 68

サンプル内の相..... 23

**し**

自動化..... 2

自動化ステップ..... 23

自動操作..... 18

自動生データ処理..... 65

自動生データ処理のオプション..... 67

手動でバックグラウンドを定義..... 24

ショートカット..... 65

**ず**

ズーム..... 10

ズームアウト..... 63

ズーム範囲..... 10

ズーム範囲の移動..... 63

ズーム範囲を定義..... 10

スキルレベル..... 16

スキルレベルの調節..... 16

スクリーン..... 19

スクリプト..... 59

全てのピークを削除..... 67

**ぜ**

制限の保存..... 8

|                   |    |
|-------------------|----|
| セッションの保存.....     | 66 |
| ゼロ位置移動.....       | 63 |
| ゼロポイントエラーの修正..... | 65 |
| 選択項目のクリア.....     | 65 |
| 選択項目の保存.....      | 8  |
| 選択項目のリセット.....    | 65 |
| 選択した物を削除.....     | 66 |
| 線のスタイル.....       | 12 |
| 全パターン表示.....      | 63 |

## そ

|                |    |
|----------------|----|
| 相の定量を調整する..... | 11 |
|----------------|----|

## た

|               |    |
|---------------|----|
| 高いユーザレベル..... | 23 |
|---------------|----|

## ち

|             |        |
|-------------|--------|
| 中性子線回折..... | 41, 42 |
| 著作権.....    | 3      |

## つ

|                |    |
|----------------|----|
| 次のエントリを探す..... | 65 |
|----------------|----|

## て

|                        |        |
|------------------------|--------|
| 定量分析.....              | 23, 26 |
| データシートの表示.....         | 65     |
| データの調査.....            | 24     |
| データの著作権.....           | 58     |
| データの品質.....            | 46     |
| データベースの作成.....         | 29     |
| データベースの選択.....         | 29     |
| データベースの名前.....         | 31     |
| データベースライブラリ.....       | 27     |
| デフォルトのプログラムディレクトリ..... | 14     |

## と

|                   |        |
|-------------------|--------|
| 特定の相/エントリを検索..... | 4      |
| トラッキング.....       | 10, 63 |

## な

|                   |    |
|-------------------|----|
| 内部基準修正.....       | 66 |
| 何もない空間.....       | 25 |
| 生データ処理（自動）.....   | 65 |
| 生データ処理のオプション..... | 67 |
| 生データのインポート.....   | 65 |
| 生データのフィット.....    | 67 |

## は

|                            |        |
|----------------------------|--------|
| パターン画像のオプション.....          | 67     |
| パターン計算の波長.....             | 41, 42 |
| バックグラウンドコントロールポイントの削除..... | 61     |
| バックグラウンドコントロールポイントの追加..... | 61     |
| バックグラウンドのコントロールポイント.....   | 9      |
| バックグラウンドの修正.....           | 24, 61 |
| バックグラウンドの定義や変更.....        | 9      |

|               |        |
|---------------|--------|
| バッチ処理.....    | 2      |
| バッチスクリプト..... | 59     |
| バッチステップ.....  | 23     |
| 半定量分析.....    | 23, 26 |

## ひ

|                    |    |
|--------------------|----|
| ピーク検索.....         | 65 |
| ピークサーチの精度.....     | 66 |
| ピークサーチの精度の最適化..... | 67 |
| ピークサーチの精度を上げる..... | 66 |
| ピークサーチの精度を下げる..... | 66 |
| ピークに印をつける.....     | 61 |
| ピークの位置の移動.....     | 62 |
| ピークの強度.....        | 62 |
| ピークのシフト.....       | 62 |
| ピークの範囲に印をつける.....  | 62 |
| ピークの範囲を選ぶ.....     | 62 |
| ピークリストを探す.....     | 65 |
| ピークを決める.....       | 65 |
| ピークを探す.....        | 65 |
| ヒント.....           | 24 |

## ふ

|                   |        |
|-------------------|--------|
| ファンクションキー.....    | 65     |
| フォント.....         | 12     |
| 複数のエントリを取り除く..... | 66     |
| 複数の回折パターン.....    | 4      |
| 複数ユーザの環境.....     | 28     |
| 付録.....           | 59     |
| プログラムディレクトリ.....  | 14     |
| プロファイルフィット.....   | 67     |
| 粉末回折データベース.....   | 27     |
| 粉末回折パターンの計算.....  | 40, 51 |
| 分量の調整.....        | 11     |

## へ

|               |    |
|---------------|----|
| ヘルプウィンドウ..... | 66 |
|---------------|----|

## ま

|                             |        |
|-----------------------------|--------|
| マウス位置.....                  | 63     |
| マウスの位置に線.....               | 63     |
| マウスホイール.....                | 11, 61 |
| マウスホイールでズーム.....            | 62, 63 |
| マウスボタンの使い方.....             | 61     |
| マウスを使って 2 $\theta$ シフト..... | 11     |
| 前のエントリを探す.....              | 65     |
| マッチングとして選択.....             | 67     |

## み

|           |    |
|-----------|----|
| 密度計算..... | 43 |
|-----------|----|

## め

|                     |    |
|---------------------|----|
| メインウィンドウのレイアウト..... | 19 |
|---------------------|----|

## も

元に戻す ..... 66

## や

矢印の上下 ..... 67

## ゆ

ユーザデータベース ..... 27, 34, 38

ユーザデータベースからエントリを追加 ..... 56

ユーザデータベースのインポート ..... 56

ユーザリファレンスデータベースの作成 ..... 34

ユーザレベル ..... 16, 23

ユーザレベルの設定 ..... 23

## ら

ライセンスのインストール ..... 14

ライセンスファイルのインストール ..... 14

## り

リファレンスデータベースのアップデート ..... 26

リファレンスデータベースのコピー ..... 36

リファレンスデータベースの削除 ..... 29

リファレンスデータベースの作成 ..... 29

リファレンスデータベースの選択 ..... 36

リファレンスデータベースの追加 ..... 29, 36

リファレンスデータベースの名前 ..... 31, 36

リファレンスデータベースの名前変更 ..... 29, 36

リファレンスデータベースのバックアップ ..... 36

リファレンスデータベースの復元 ..... 36

リファレンスデータベースライブラリ ..... 27

リファレンスデータベースを削除 ..... 37

リファレンスデータベースを選択 ..... 29

リファレンスデータベースをダウンロード ..... 26

リファレンスパターンデータベース ..... 26

## れ

レポート ..... 23, 66

レポートの印刷 ..... 23

レポートの表示 ..... 66

レポートの保存 ..... 23



正規国内代理店

**株式会社ライトストーン**

〒%\$%SS' %

TEL: 0' !' , \* (!) &%% FAX: 0' !' , \*) !SS) S

E-mail: sales@lightstone.co.jp (営業担当)

URL: <http://www.lightstone.co.jp/>

---