

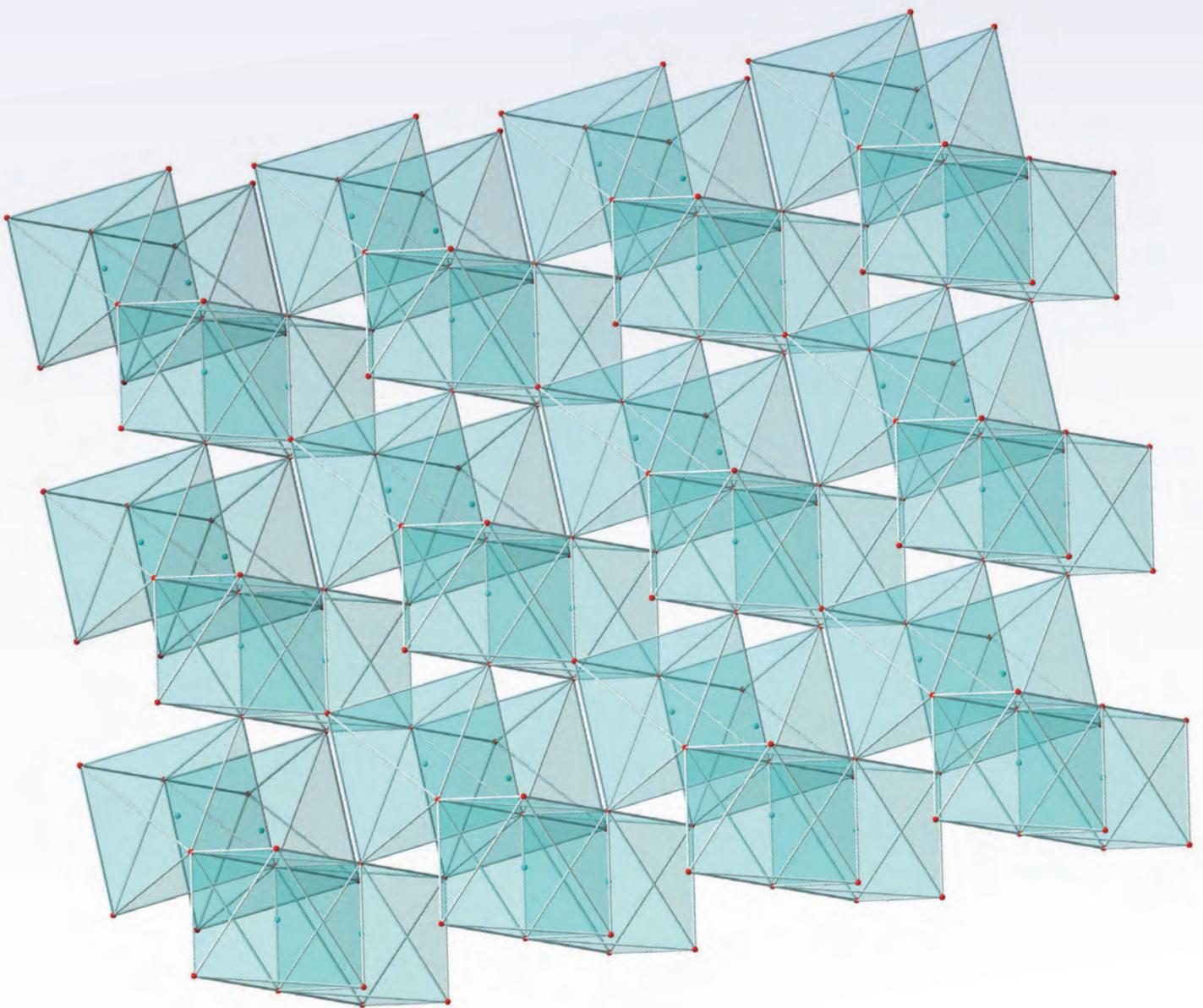
粉末X線回折から結晶構造解析 可視化を行うためのソフトウェア

DIAMOND ENDEAVOUR MATCH!

結晶構造可視化

構造モデルの決定

結晶相の同定



体験版をダウンロードできます

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



粉末回折パターンから結晶相を同定



Phase Identification from Powder Diffraction

X線回折(XRD)の回折パターンから結晶相を同定することは、材料科学者の日常的な仕事になりました。Match!は、その相同定を行うためのソフトウェアです。測定で得られた粉末回折パターンと、結晶相を同定するためのリファレンスパターンが含まれているデータベースを比較し、結晶相を同定します。ピークデータやRAW(プロファイル)データをもとに、単相だけでなく多相も同定できます。

代表的なRAWデータに対応

粉末回折パターンを測定するX線回折装置は、日本だけでなく欧米も含め様々なメーカーから販売されています。Match!は、リガク、Bruker、PANalyticalといった代表的なX線回折装置メーカーのRAWデータを直接読み込み、解析を行うことができます。

Match!で利用可能なデータ形式

ASCII profile, Bruker/Siemens raw (*.raw), Bruker/Siemens DIFFRAC AT peakデータ(*.dif), DBWS (*.rfl, *.dat), ENDEAVOR peakリスト(*.dif), Inel raw(*.dat), Itai Structures raw(*.esg), Jade/MDI/SCINTAG raw(*.mdi), JEOL ASCII Export raw(*.txt), PANalytical XRDML Scan raw(*.xrdml), PANalytical/Philips peakデータ(*.udi), PANalytical/Philips raw(*.rd, *.udf), Rigaku raw(*.raw), SCINTAG raw(*.raw, *.rd), Shimadzu raw(*.raw), Siemens(*.uxd), Sietronics XRD scanデータ(*.cpi), Stoe raw(*.raw), Stoe peak(*.pks)

結果の絞り込みが簡単

相同定を行うときには、回折パターンとリファレンスパターンを比較するだけでなく、様々な条件を加味して結果を導き出します。例えば、測定したサンプルに含まれる元素や含まれてはいけない元素の情報、密度の情報などです。

Match!では、これらの条件指定を簡単に行えます。回折パターンや一致度の高いデータを表示するメイン画面の右上の周期表などで、絞り込み条件をすぐに指定でき、即座に同じ画面上で絞り込み結果を見ることができます。

また、結果の絞り込みを行う設定は、名前を付けて保存しておくことができます。一度保存した絞り込み条件は、ドロップダウンリストに登録されます。次回以降、同じ条件で同定結果を絞り込むときに、わずか2クリックするだけで簡単に絞り込み条件を読み出し、適用することができます。同定作業を効率よく行うことができます。

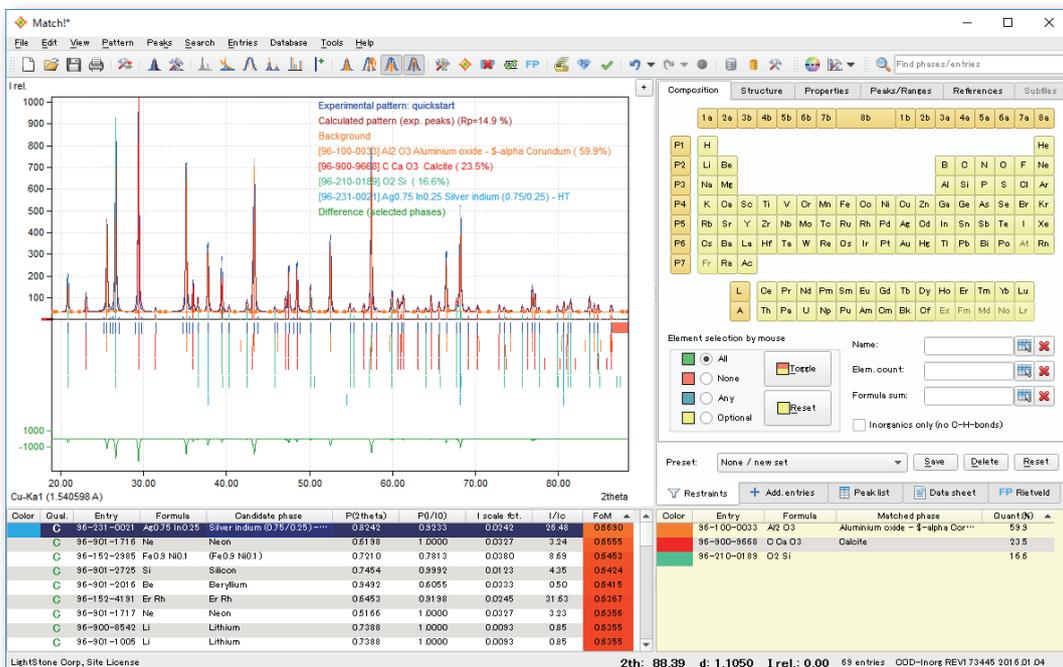
無償のデータベースが付属

相同定を行う際には、既知の粉末回折パターンデータベースが必要ですが、Match!には無償のデータベースが含まれています。別途、粉末回折パターンのデータベースを用意することなく、すぐに相同定を行うことができます。

Match!で利用できる無償のデータベース

- Crystallography Open Database (COD) : 361,249件
- COD無機化合物のみ : 67,020件
- セメント化合物 : 73件

※ 2016年7月公開のデータベースの件数です。データベースは、年に1~2回程度アップデートされ、データが追加されます。



粉末回折パターンと相同定を行った結果の候補リストの表示と、結果の絞り込みを行う条件入力を1つのウィンドウで行うことができます。結果の絞り込みは、条件を指定すると即座に候補リストに反映されます。

粉末回折から構造解析



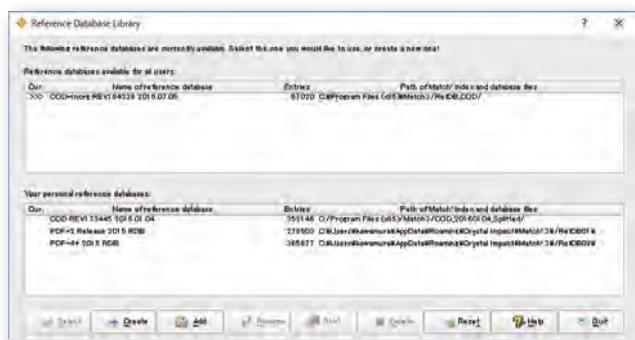
ENDEAVOUR

Structure Solution from Powder Diffraction

ICDDのデータベースに対応

ICDD (International Centre for Diffraction Data)のPDF-4とPDF-2データベースに対応しており、リファレンスデータベースとして使用できます。PDF-4/PDF-2に収録されたデータはICDDのスタッフによる4段階の厳しい審査を通過しており、高い精度と品質を備え、世界中で利用されています。

※ ICDDは粉末回折データを収集、編集、公開、配布することを目的とする約75年の歴史を持つ非営利科学組織です。



Rietveld解析

おもにヨーロッパで広く使われているリートベルト解析を行うフリーのプログラム「FullProf」と連携し、リートベルト精密化を行えます。別途FullProfをインストールし、Match!でFullProfがインストールされているフォルダを指定するだけでリートベルト精密化を実行できます。

Windows、Mac、Linuxに対応

Windows版のほか、Mac OS X版、Linux版(PC用インテル32bit、64bit)も用意されています。3つのOSのどれでもMatch!をネイティブに動作させることができます。もちろん、作成したドキュメントファイルは他のプラットフォームで使用できます。

動作環境

Match!を動作させるには、以下の環境が必要です。

Windows版: Windows 10/8.1/8/7/Vista

Mac OS X版: Intel版Mac OS X 10.6(Snow Leopard)以降

Linux版: Intel 32bit/64bit版Linux(openSUSE、Ubuntu等)

RAM: 2GB、HDD: 500MB以上の空き容量

画面解像度:最低1024x768ピクセル(1280x800ピクセル以上推奨)

※ OSのシステム条件を満たす環境が必須

Endeavourは、X線回折などの粉末回折パターンデータから結晶構造を解くソフトウェアです。リートベルト法により結晶構造の精密化計算を行うためには、かなり実際の構造に近い構造モデルがなければ解析できません。Endeavourは、その初期結晶構造モデルを求めるソフトウェアです。小～中サイズの結晶構造を解析でき、有機/無機物質の両方に対応します。

解析に必要な情報はわずか3つ

解析を行うために必要な情報は、以下の3つだけです。

1. 測定で求めた粉末回折のピークデータ
(2θまたはd値 vs 強度、放射線の波長)
 2. 結晶の格子定数
(単位格子の結晶軸3辺の長さa,b,c、軸間角度 α,β,γ)
 3. 単位格子中に含まれる原子/分子の種類とそれぞれの数(組成)
- これらの情報を画面上に表示されるガイドに従って入力していくだけで、結晶構造データベースに回折パターンが収録されていない結晶の構造モデルでも計算で求めることができます。

空間群の情報を考慮して解析

空間群が分かっている場合、空間群の情報を考慮して計算を行い、解析時間を短縮できます。未知の場合は空間群P1とみなして解析を行い、解析後にSymmetry Finderという機能を使って、空間群を求めることもできます。

動作環境

Endeavourを動作させるには、以下の環境が必要です。

OS: Windows 10/8.1/8/7/Vista

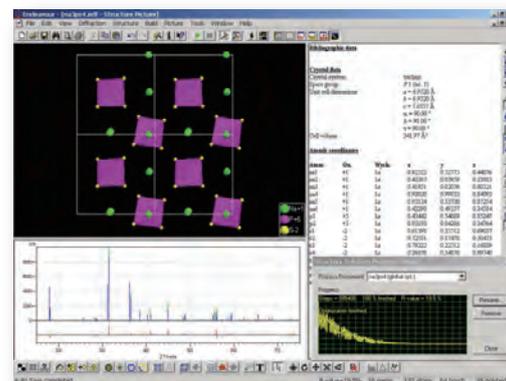
RAM: 64MB以上

HDD: 100MB以上の空き容量

ビデオ: 1024x768以上の解像度、32,768色以上

※ Microsoft Internet Explorer 5.01以上が必須

※ OSのシステム条件を満たす環境が必須



解析結果が数値と3Dの図として表示されるため、構造を直感的に把握できます。

結晶・分子構造の可視化

DIAMOND Crystal and Molecular Structure Visualization

Diamondは、CIF形式などの結晶構造データファイルや文献の結晶構造データから、結晶・分子の立体構造を可視化するソフトウェアです。代表的な結晶構造データのほとんどを自動的にインポートし、可視化できます。また、図やアニメーションを作成・編集できるだけでなく、結晶構造を考察することもできます。

直感的な編集機能

結晶構造データファイルや手動入力したデータから3Dの結晶構造図を作図できます。原子間の結合の有無は、原子間距離により一括定義できます。平面や直線、ベクトル、ラベルなどを図に追加し、結晶の特徴や性質が直感的にわかる図を作成できます。

可視化した図に対し、マウス操作でズーム、回転、移動を行うことができ、結晶構造を直感的に把握できます。アニメーションを作成し、動画ファイルとして保存することもできます。

様々な結晶構造データに対応

代表的な結晶構造データファイルをそのままインポートできます。

インポートできるファイル形式

CIF、Cambridge Structural Database FDAT、CRYSTIN (ICSD、CRYSTMET)、Brookhaven Protein Data Bank、SHELX-93、SYBYL MOL、MOL2、Cerius2 (CSSR)、MDL MOL、XYZ など

豊富なサンプルデータ

COD(Crystallography Open Database)の結晶データを検索し、Diamondにデータを読み込み、結晶構造図を3D可視化できます。データベースに含まれる約15万6000件のデータを活用できます。

動作条件

Diamondを動作させるには、以下の環境が必要です。

OS: Windows 10/8.1/8/7/Vista

CPU: IntelまたはAMDのx86命令セットを採用するプロセッサ

RAM: 1GB以上

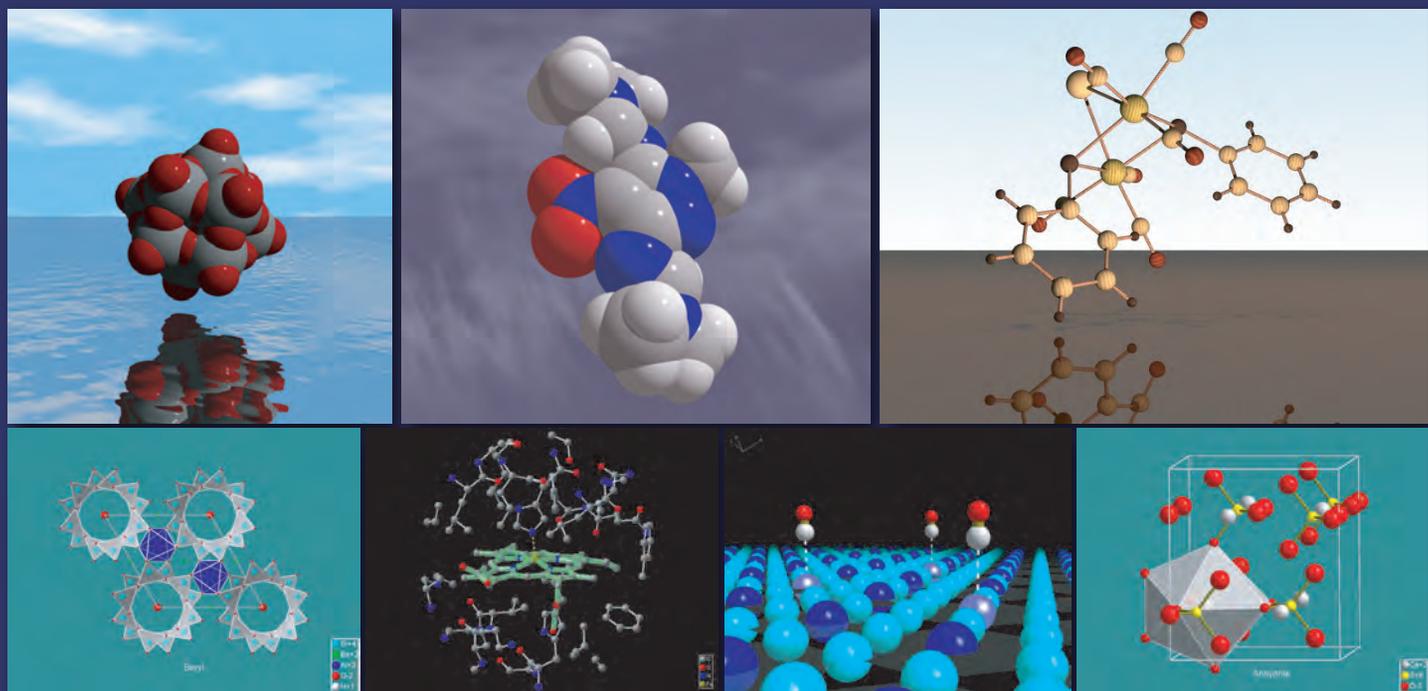
HDD: 3.8GB以上の空き容量(インストール時に6GBを使用)

ビデオ: 解像度1024×768(1280×800以上を推奨)、32,768色以上

※ Microsoft Internet Explorer 8以上が必須

※ OSのシステム条件を満たす環境が必須

● Diamondでの作図例



お問い合わせ先:

 LightStone
株式会社 ライトストーン

〒101-0031
東京都千代田区東神田2-5-12 龍角散ビル7F
TEL 03-3864-5211 FAX 03-3865-0050
Email sales@lightstone.co.jp (営業担当)
URL <http://www.lightstone.co.jp/>

