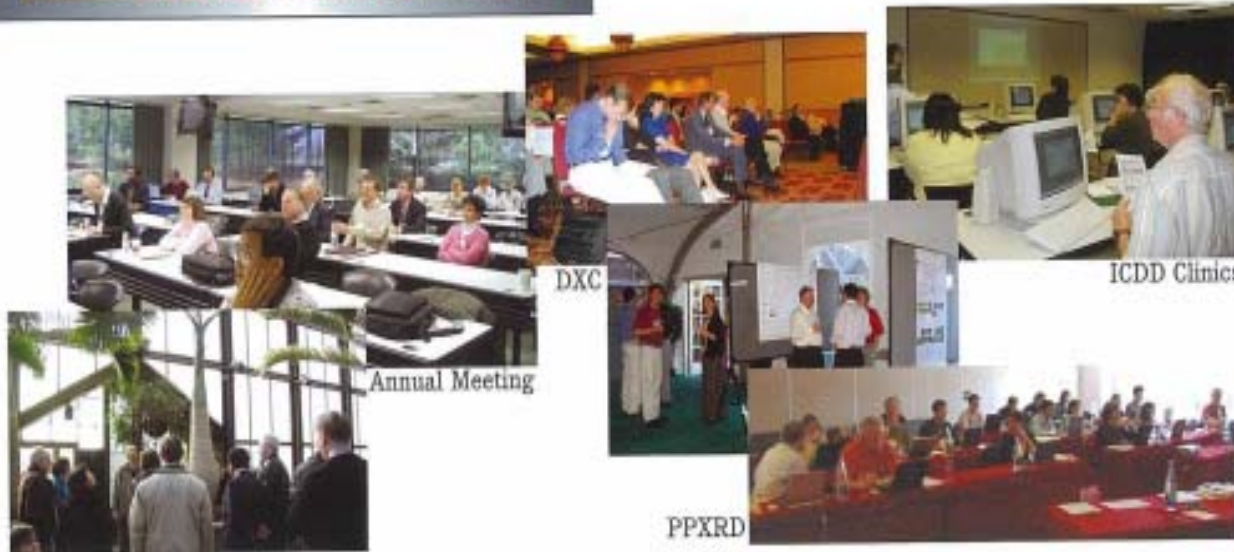


PDF-2データベース検索 (Powder Diffraction Datafile)

- PDF-2plus for Windows
(データブックの置き換わり)
- X-Search
(未知物判別)

作成:(株)デジタルデータマネジメント

ICDD Headquarter
(PA, USA)
Non-Profit
Organization



International Centre for Diffraction Data (ICDD)

formerly: Joint Committee for Powder Diffraction Standards (JCPDS)

2007/11/15

PDFデータベース

(ASTM Card、JCPDSカードとも呼ばれる)

- **ICDD(JCPDS)**
実測パターンデータ約99,000件(Set 1-56)
(無機物、有機物)
- **ICSD(International Crystal Structure Database – Fiz)**
結晶データからの計算パターン約59,500件(Set 70-89)
(無機物)
- **NIST(National Institute of Science and Technology)**
約2,000件(Set 65)
- **CSD(Cambridge Crystallographic Data Center)**
結晶データからの計算パターン約191,000件
(有機物、有機金属)
- **Linus Pauling File**
ポーリングの物性データベースに納められた結晶データベースからの
計算パターン(無機物)

PDF Database - Level (Powder Diffraction File)

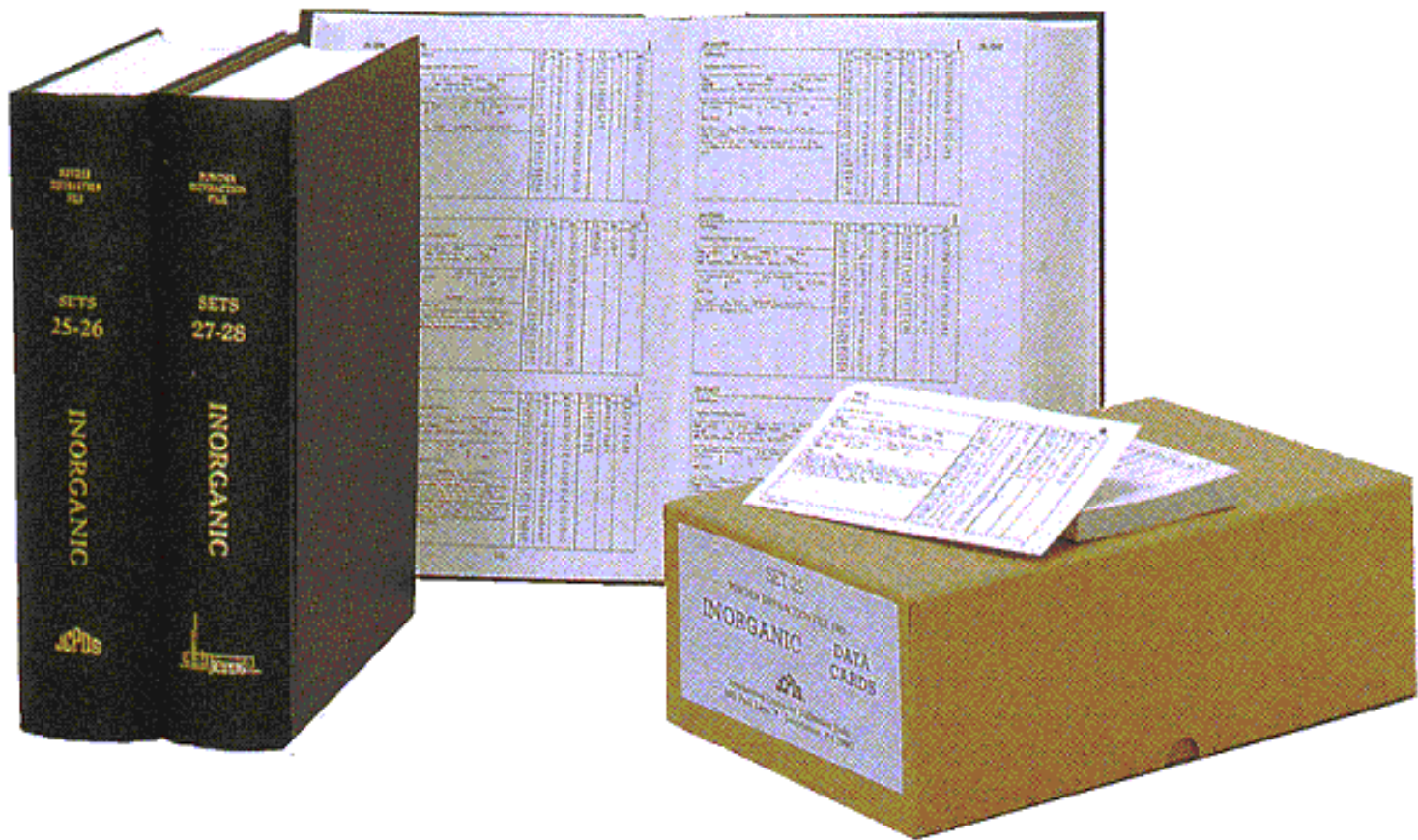
- Level -1(PDF-1)
 - d、I、ID情報まで
(古い装置などに内臓)
- Level - II(PDF-2)
 - カード内容(CD-ROM/DVD)および書籍
- Level - III(PDF-3)
 - カード内容プラス
 - 回折波形
- Level -IV(PDF-4)
 - RDB
 - 2005からLinus Pauling Fileの結晶座標データから計算されたパターンも追加

Level-II(PDF-2)とLevel-IV(PDF-4)

- **総容量**640MB(PDF-2) / 4GB(PDF-4)
- **タイムロック**
 - 1/3/5年間単位(PDF-4)
 - ロックなし(PDF-2)
- **データ量の違い**
 - PDF-2/Experiment+NIST+ICSD
 - PDF-4/Experiment+NIST+ICSD+Pauling

Level-IV(PDF-4) Products

- Full File 2006
 - Experiment(I+O), NIST, ICSD, Pauling
- Organics 2006
 - Experiment(O), Cambridge
- Minerals 2006
- Metals & Alloys(Discontinued)



PDF Card

C ₆ H ₈ O ₇				dÅ	Int	hkl	dÅ	Int	hkl
Citric acid				10.7	2	001	2.736	2	412
				6.27	35	201	2.727	<1	113
				5.97	2	200	2.718	<1	021
				5.34	18	002	2.706	4	121
				5.09	2	110	2.672	8	004
Rad. CuKα ₁ λ 1.5405 Filter d-sp Guin. -114.6 Cut off 50.0 Int. Densitometer I/I _{cor.} 0.60 Ref. de Wolff, P., Technisch Physische Dienst, Delft, The Netherlands, ICDD Grant-in-Aid				4.98	35	011	2.664	10	203
Sys. Monoclinic S.G. P2 ₁ /a (14) a 12.81 b 5.624 c 11.46 A 2.2777 C 2.0377 α β 111.21 γ Z 4 mp Ref. Ibid.				4.89	100	111	2.639	6	401
				4.56	25	201	2.564	2	221
D _x 1.658 D _m SSTOM F ₃₀ =45(,016,42) CAS#: 77-92-9. PSC: mP84. To replace 1-251. Plus 33 additional reflections to 1.769.				4.09	10	210	2.544	10	220
				4.00	4	112	2.489	25	022
				3.87	2	012	2.471	8	312
				3.73	12	212	2.448	18	222
				3.71	4	203	2.408	6	213
				3.56	12	003	2.390	6	411
				3.43	25	112			
				3.42	35	202			
				3.25	2	310			
				3.23	2	312			
				3.19	4	401			
				3.16	2	113			
				3.13	<1	402			
				3.09	30	213			
				2.986	4	400			
2.881	6	311							
2.858	45	313							

22-153

d	2.70	1.91	2.72	3.82	CaTiO ₃	CaO·TiO ₂	★				
I/I ₁	100	50	40	14	Calcium Titanium Oxide	(Perovskite)					
Rad. CuKα ₁ λ 1.54056 Filter Mono. Dia. Cut off I/I ₁ Diffractometer I/I _{cor.} =2.6 Ref. National Bureau of Standards, Mono. 2S, Sec. 9, 17 (1971)						d Å	I/I ₁	hkl	d Å	I/I ₁	hkl
Sys. Orthorhombic S.G. Pnma (62) a ₀ 5.4405 b ₀ 7.6436 c ₀ 5.3812 A 0.7118 C 0.7040 α β γ Z 4 D _x 4.036 Ref. Ibid.						3.824	14	101,020	1.719	2	301
						3.423	3	111	1.710	3	222,141
εα nωβ ≈2.4 εγ Sign 2V D mp Color Yellowish-white Ref. Ibid.						2.719	40	200	1.703	2	103
						2.701	100	121,002	1.676	3	311
Pattern taken at 25°C. Internal Standard: W Distorted perovskite type. Prepared by mixing equimolar amounts of CaO + TiO ₂ and pelletizing at 5000lb/in. ² . The pellets were heated to 1000-1200°C for 4 hours in an oxidizing atmosphere. See following card.						2.563	1	210	1.663	1	113
						2.428	1	201	1.567	14	321
						2.413	2	102	1.563	16	240
						2.313	4	211	1.557	25	042
						2.303	7	031	1.529	<1	232
						2.217	6	220	1.4978	<1	142,203
						2.201	4	022	1.4702	1	051,213
						2.121	2	131	1.4663	<1	033
						2.050	2	221	1.4246	1	331
						2.040	1	122	1.3603	3	400
						1.911	50	040	1.3522	11	242
						1.860	2	230	1.3455	5	004
						1.856	3	212	1.3393	2	410
1.757	1	231	1.3190	<1	401						
1.752	1	132	1.3056	<1	104						
1.746	1	013	1.2938	1	251						

**Hanawalt
Index**

3 Strongest Line

+

5 major lines

dI	Strongest Reflections					PSC	Chemical Formula	Mineral Name-Common Name	POF#	IL
1.75	2.62	3.62	2.96	2.75	2.96	2.95	LiFePO ₄		25-1149	
1.75	2.62	4.16	1.81	3.23	1.74	3.90	LiFePO ₄		24-623	
1.75	2.62	3.76	2.43	1.69	1.71	1.67	LiFePO ₄		23-149	
1.75	2.62	2.65	2.96	2.96	2.16	1.86	LiFePO ₄		25-18	
1.75	2.62	3.17	1.92	3.71	2.29	1.89	C ₂ Al ₂ O ₅		53-206	
1.75	2.62	4.16	4.22	2.84	3.21	3.75	LiFePO ₄		35-1114	
1.75	2.62	3.76	2.66	2.62	2.16	1.86	LiFePO ₄		22-412	
1.75	2.62	2.16	3.76	3.76	2.43	1.86	LiFePO ₄		26-308	
1.75	2.62	3.17	2.21	2.91	2.49	1.62	LiFePO ₄		33-228	
1.75	2.62	3.17	1.86	1.61	1.74	3.67	LiFePO ₄		24-338	
1.75	2.62	3.17	1.69	1.69	1.42	1.26	LiFePO ₄		25-1009	
1.75	2.62	1.69	1.74	1.74	1.56	1.46	LiFePO ₄		28-497	
1.75	2.62	3.17	2.18	1.69	2.43	1.86	LiFePO ₄		33-1468	1242
1.75	2.62	1.69	1.69	1.62	2.16	1.67	LiFePO ₄		26-732	
1.75	2.62	2.16	1.69	1.69	1.69	1.69	LiFePO ₄		15-14	
1.75	2.62	1.69	1.23	2.26	1.69	2.16	LiFePO ₄		18-1117	
1.75	2.62	1.69	1.74	1.69	1.69	1.69	LiFePO ₄		23-1211	
1.75	2.62	1.69	1.69	1.69	1.69	1.69	LiFePO ₄		35-1121	
1.75	2.62	1.69	1.69	1.69	1.69	1.69	LiFePO ₄		62-308	
1.75	2.62	1.69	1.69	1.69	1.69	1.69	LiFePO ₄		35-138	
1.75	2.62	1.69	1.69	1.69	1.69	1.69	LiFePO ₄		33-606	
1.75	2.62	1.69	1.69	1.69	1.69	1.69	LiFePO ₄		45-442	
1.75	2.62	1.69	1.69	1.69	1.69	1.69	LiFePO ₄		45-108	
1.75	2.62	1.69	1.69	1.69	1.69	1.69	LiFePO ₄		22-1000	
1.75	2.62	1.69	1.69	1.69	1.69	1.69	LiFePO ₄		15-161	
1.75	2.62	1.69	1.69	1.69	1.69	1.69	LiFePO ₄		33-606	
1.75	2.62	1.69	1.69	1.69	1.69	1.69	LiFePO ₄		18-237	240
1.75	2.62	1.69	1.69	1.69	1.69	1.69	LiFePO ₄		26-412	
1.75	2.62	1.69	1.69	1.69	1.69	1.69	LiFePO ₄		28-1282	
1.75	2.62	1.69	1.69	1.69	1.69	1.69	LiFePO ₄		43-346	
1.75	2.62	1.69	1.69	1.69	1.69	1.69	LiFePO ₄		32-1201	
1.75	2.62	1.69	1.69	1.69	1.69	1.69	LiFePO ₄		23-314	
1.75	2.62	1.69	1.69	1.69	1.69	1.69	LiFePO ₄		18-418	
1.75	2.62	1.69	1.69	1.69	1.69	1.69	LiFePO ₄		46-730	
1.75	2.62	1.69	1.69	1.69	1.69	1.69	LiFePO ₄		23-501	
1.75	2.62	1.69	1.69	1.69	1.69	1.69	LiFePO ₄		25-1192	
1.75	2.62	1.69	1.69	1.69	1.69	1.69	LiFePO ₄		24-1278	
1.75	2.62	1.69	1.69	1.69	1.69	1.69	LiFePO ₄		31-116	
1.75	2.62	1.69	1.69	1.69	1.69	1.69	LiFePO ₄		38-120	1.64
1.75	2.62	1.69	1.69	1.69	1.69	1.69	LiFePO ₄		31-314	472
1.75	2.62	1.69	1.69	1.69	1.69	1.69	LiFePO ₄		33-1188	
1.75	2.62	1.69	1.69	1.69	1.69	1.69	LiFePO ₄		42-411	
1.75	2.62	1.69	1.69	1.69	1.69	1.69	LiFePO ₄		26-187	
1.75	2.62	1.69	1.69	1.69	1.69	1.69	LiFePO ₄		46-606	
1.75	2.62	1.69	1.69	1.69	1.69	1.69	LiFePO ₄		28-714	
1.75	2.62	1.69	1.69	1.69	1.69	1.69	LiFePO ₄		31-606	
1.75	2.62	1.69	1.69	1.69	1.69	1.69	LiFePO ₄		33-1188	
1.75	2.62	1.69	1.69	1.69	1.69	1.69	LiFePO ₄		43-102	
1.75	2.62	1.69	1.69	1.69	1.69	1.69	LiFePO ₄		33-394	
1.75	2.62	1.69	1.69	1.69	1.69	1.69	LiFePO ₄		27-1209	
1.75	2.62	1.69	1.69	1.69	1.69	1.69	LiFePO ₄		15-469	
1.75	2.62	1.69	1.69	1.69	1.69	1.69	LiFePO ₄		26-448	
1.75	2.62	1.69	1.69	1.69	1.69	1.69	LiFePO ₄		25-429	
1.75	2.62	1.69	1.69	1.69	1.69	1.69	LiFePO ₄		37-364	
1.75	2.62	1.69	1.69	1.69	1.69	1.69	LiFePO ₄		25-679	
1.75	2.62	1.69	1.69	1.69	1.69	1.69	LiFePO ₄		34-606	
1.75	2.62	1.69	1.69	1.69	1.69	1.69	LiFePO ₄		45-108	
1.75	2.62	1.69	1.69	1.69	1.69	1.69	LiFePO ₄		25-1129	
1.75	2.62	1.69	1.69	1.69	1.69	1.69	LiFePO ₄		43-670	
1.75	2.62	1.69	1.69	1.69	1.69	1.69	LiFePO ₄		26-714	1.30
1.75	2.62	1.69	1.69	1.69	1.69	1.69	LiFePO ₄		23-247	
1.75	2.62	1.69	1.69	1.69	1.69	1.69	LiFePO ₄		36-386	
1.75	2.62	1.69	1.69	1.69	1.69	1.69	LiFePO ₄		18-348	
1.75	2.62	1.69	1.69	1.69	1.69	1.69	LiFePO ₄		38-1122	
1.75	2.62	1.69	1.69	1.69	1.69	1.69	LiFePO ₄		33-603	
1.75	2.62	1.69	1.69	1.69	1.69	1.69	LiFePO ₄		45-11	
1.75	2.62	1.69	1.69	1.69	1.69	1.69	LiFePO ₄		15-388	
1.75	2.62	1.69	1.69	1.69	1.69	1.69	LiFePO ₄		4-411	
1.75	2.62	1.69	1.69	1.69	1.69	1.69	LiFePO ₄		46-108	
1.75	2.62	1.69	1.69	1.69	1.69	1.69	LiFePO ₄		45-911	
1.75	2.62	1.69	1.69	1.69	1.69	1.69	LiFePO ₄		2-102	
1.75	2.62	1.69	1.69	1.69	1.69	1.69	LiFePO ₄		43-412	
1.75	2.62	1.69	1.69	1.69	1.69	1.69	LiFePO ₄		26-339	
1.75	2.62	1.69	1.69	1.69	1.69	1.69	LiFePO ₄		46-1182	
1.75	2.62	1.69	1.69	1.69	1.69	1.69	LiFePO ₄		45-190	
1.75	2.62	1.69	1.69	1.69	1.69	1.69	LiFePO ₄		21-309	
1.75	2.62	1.69	1.69	1.69	1.69	1.69	LiFePO ₄		47-144	
1.75	2.62	1.69	1.69	1.69	1.69	1.69	LiFePO ₄		25-59	
1.75	2.62	1.69	1.69	1.69	1.69	1.69	LiFePO ₄		56-127	2.00
1.75	2.62	1.69	1.69	1.69	1.69	1.69	LiFePO ₄		34-394	
1.75	2.62	1.69	1.69	1.69	1.69	1.69	LiFePO ₄		26-391	
1.75	2.62	1.69	1.69	1.69	1.69	1.69	LiFePO ₄		36-12	
1.75	2.62	1.69	1.69	1.69	1.69	1.69	LiFePO ₄		46-1119	
1.75	2.62	1.69	1.69	1.69	1.69	1.69	LiFePO ₄		36-388	
1.75	2.62	1.69	1.69	1.69	1.69	1.69	LiFePO ₄		33-412	
1.75	2.62	1.69	1.69	1.69	1.69	1.69	LiFePO ₄		23-128	
1.75	2.62	1.69	1.69	1.69	1.69	1.69	LiFePO ₄		43-121	
1.75	2.62	1.69	1.69	1.69	1.69	1.69	LiFePO ₄		45-564	
1.75	2.62	1.69	1.69	1.69	1.69	1.69	LiFePO ₄		33-606	
1.75	2.62	1.69	1.69	1.69	1.69	1.69	LiFePO ₄		33-71	
1.75	2.62	1.69	1.69	1.69	1.69	1.69	LiFePO ₄		34-318	9.23
1.75	2.62	1.69	1.69	1.69	1.69	1.69	LiFePO ₄		36-128	
1.75	2.62	1.69	1.69	1.69	1.69	1.69	LiFePO ₄		24-148	
1.75	2.62	1.69	1.69	1.69	1.69	1.69	LiFePO ₄		33-503	
1.75	2.62	1.69	1.69	1.69	1.69	1.69	LiFePO ₄		36-103	
1.75	2.62	1.69	1.69	1.69	1.69	1.69	LiFePO ₄		43-108	
1.75	2.62	1.69	1.69	1.69	1.69	1.69	LiFePO ₄		45-412	
1.75	2.62	1.69	1.69	1.69	1.69	1.69	LiFePO ₄		33-445	4.41



データの品質

Quality Mark

*	信頼性が高い
i	そこそこ信頼性がある
o	精度が低い / 不純物が混在
C	計算によるパターン
	iでもoでもない(ブランク)
R	リートベルト法で得られたパターン

データソース(出典)

- 公開文献(Journal)
- データ提供
- 座標データ (Fiz、Cambridge、LPF)

データパターンが得られる方法

- 目視(Visual)
 - <デンストメータ(Densitometer)
 - <回折計(Diffractmeter)
 - <リートベルト(Rietvelt)

Hematite:13-0534 33-0664 (強度計測の方法の記述の有無のためReplaced)

検索ソフトウェアの種類 1

- **カードイメージを再現するタイプ**

(Card Retrieval)

検索条件を与え、条件に見合ったPDFカードを
従来から慣れ親しんだデータカードのイメージ
としてスクリーン上および印刷出力

- PDF2plus for Windows
- DDView
- MacPDF

検索ソフトウェアの種類 2

- 未知パターンから成分を判別
(Search/Match)
 - 回折装置に内臓
 - 理学電機(Johnson-Vand)
 - 島津製作所(Johnson-Vand)
 - フィリップス(SANDMAN)
 - 3rd Party製のシステム
 - Micro-PDSM(no longer available)
 - Micro-ID JADE (Material Data Inc.)
 - PDF2plus for Windows(X-Search Add-in)

PDF2plus for Windows

- **プログラムの仕組み**

検索プログラムと検索用インデックスファイルが一体になったシステム。最終的なデータカードを表示するときにCD-ROMを参照し、カード内容を再現。CD-ROMのデータベース(PDF2.DAT)をハードディスクにコピーするとデータベースへのアクセスが速くなる。

- **おもな検索条件**

- カード番号
- 物質名(有機物、無機物、鉱物名)
- 元素記号
- 3強線(Hanawalt Index)、8強線(Fink Index)
- サブファイル

Search

Comment	Crystal System	Space Group	Chemical Formula	
Subfile	Chemical Name	Element	Numeric	Reference

Inorganic Organic Mineral Inorganic Fragments

diamond

OK

Search Query	#HITs	Bool

BOOL

AND OR NOT

All Clear Clear OK Cancel

Search

Comment Crystal System Space Group Chemical Formula

Subfile Chemical Name Element Numeric Reference

Organic Chemical Elements
 Number of Elements
 Chemical Elements

Reference(B)...

Search Query

BOOL
 AND OR NOT All Cl...

Periodical Table

H																	He
Li	Be											B	C	N	O	F	Ne
Na	Mg											Al	Si	P	S	Cl	Ar
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe
Cs	Ba	*	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn
Fr	Ra	**															
		* lanthanoid	La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu
		** actinoid	Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr

Clear OK Cancel

Results: (CE) Fe AND (CE) O AND (CE) 2

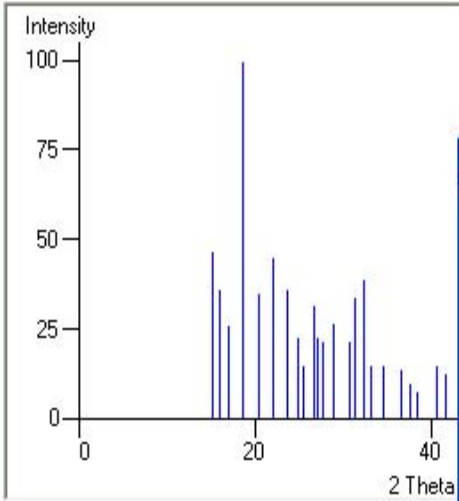
Card Cancel Copy Save Print Align Back

177 / 177

(BLANK) Extract

PDF ID	Chemical Name	Chemical Formula	3 Strong Lines	SYS	QTY	DEL
130458	Maghemite / Iron Oxide	Fe ₂ O ₃	2.51 2.94 2.08	T		D
130534	Hematite, syn / Iron Oxide	Fe ₂ O ₃	2.69 1.69 2.51	R		D
150615	Maghemite, syn / Iron Oxide	Fe ₂ O ₃	3.75 2.95 2.52	T		D
160653	Iron Oxide	Fe ₂ O ₃	2.73 1.38 2.98	M		
160895	Iron Oxide	Fe ₂ O ₃	2.46 1.52 1.47	X		D
190615	Iron Oxide	Fe ₂ O ₃	1.66 3.85 2.35	X		D
190629	Magnetite, syn / Iron Oxide	Fe +2 Fe ₂ +3 O ₄	2.53 1.48 2.97	C	*	
210920	Iron Oxide	Fe ₂ O ₃	3.60 6.01 4.36	X		
240072	Hematite / Iron Oxide	Fe ₂ O ₃	2.70 2.52 1.70	R	C	D
240081	Maghemite-C, syn / Iron Oxide	Fe ₂ O ₃	2.52 1.48 2.95	C		D
251402	Maghemite-Q, syn / Iron Oxide	Fe ₂ O ₃	2.51 1.47 2.95	T	i	
261136	Iron Oxide	Fe ₃ O ₄	2.44 1.43 1.56	C		
280491	Iron Oxide	Fe ₃ O ₄	2.60 1.40 2.03	M		
320469	Iron Oxide	Fe ₂ O ₃	2.71 1.66 1.42	C	C	D
330664	Hematite, syn / Iron Oxide	Fe ₂ O ₃	2.70 2.52 1.69	R	*	
390238	Iron Oxide	Fe ₂ O ₃	2.71 1.66 1.42	C	i	
391088	Iron Oxide	Fe _{0.98} O	2.08 2.52 2.38	H	i	
391346	Maghemite-C, syn / Iron Oxide	Fe ₂ O ₃	2.52 2.95 1.48	C	*	
401139	Iron Oxide	Fe ₂ O ₃	2.87 2.65 11.9	H	i	
461312	Wustite / Iron Oxide	Fe O	2.14 2.47 1.51	C		
471409	Iron Oxide	Fe ₂ O ₃	2.36 1.92 1.67	O	O	
491447	Iron Oxide	Fe O	1.69 2.59 2.04	H		
521449	Iron Oxide	Fe ₂ O ₃	2.72 1.52 2.45	O	i	
650390	Iron Oxide	Fe ₂ O ₃	5.89 4.81 2.95	T	C	

00-042-0088 Quality = i Print Save Copy Back



dÅ	2θ	Int	h	k	l
5.8328	15.1894	47	1	0	0
5.5767	15.8914	36	1	1	0
5.2494	16.8892	26	0	1	1
4.7957	18.5004	100	1	0	1
4.3536	20.3982	35	1	2	0

Calculated Parameters	Optical
Name and Formula	Exp. Condition
Formula Cu(SO ₄) _{0.22} (SeO ₄) _{0.77} ·5H ₂ O	
Name Copper Selenate Sulfate Hydrate	
Mineral Name	
Also Called	

00-042-0088 Quality = i

Cu(SO ₄) _{0.22} (SeO ₄) _{0.77} ·5H ₂ O					
Copper Selenate Sulfate Hydrate					
Rad. CuKα	λ 1.54178	Filter Mono.	d-sp D.S.		
Cut off	Int. Diffractometer	I/ cor.			
Ref. Mestres, L., Dept. de Quimica Inorganica, Universidad de Barcelona, Barcelona, Spain., Private Communication (1990)					
Sys. Triclinic			S.G. P $\bar{1}$ (2)		
a 6.193(2)	b 10.831(2)	c 6.056(2)	A 0.5718	C 0.5591	
α 97.61(3)	β 107.14(2)	γ 77.17(2)	Z 2		
mp					
Ref. Mestres, L., Martinez, M., Rodriguez, A., Solans, X., Z. Kristallogr., 180, 179 (1987)					
Dx 2.506	Dm	SS/FOM F ₃₀ =6.(034,141)			
Sample preparation: Crystals were obtained from an aqueous solution of Cu S O ₄ 15 H ₂ O and Cu Se O ₄ 15 H ₂ O. Crystals were obtained by slow evaporation at 30 C, they were separated from the solution and dried at room temperature. External standard used.					

dÅ	2θ	Int	h	k	l
5.8328	15.1894	47	1	0	0
5.5767	15.8914	36	1	1	0
5.2494	16.8892	26	0	1	1
4.7957	18.5004	100	1	0	1
4.3536	20.3982	35	1	2	0
4.0495	21.9484	45	1	1	1
3.7548	23.6950	36	0	2	1
3.5846	24.8376	23	1	2	0
3.5138	25.3463	15	0	3	0
3.3574	26.5481	32	1	1	1
3.2965	27.0478	23	1	3	0
3.2179	27.7215	22	1	2	1
3.0997	28.8010	27	1	2	1
2.9121	30.7006	22	0	3	1
2.8620	31.2516	34	2	2	1
2.7796	32.2028	39	2	2	0
2.6997	33.1830	15	1	1	2
2.5969	34.5370	15	1	4	0
2.4590	36.5403	14	0	2	2
2.3915	37.6097	10	1	2	2
2.3493	38.3114	8	2	0	1
2.2245	40.5523	15	2	3	2
2.1689	41.6395	13	2	4	0
2.1094	42.8711	21	1	5	1
2.0528	44.1143	18	2	3	0
2.0096	45.1142	9	2	4	2
1.9380	46.8784	13	2	5	1
1.8513	49.2156	14	0	2	3
1.8318	49.7749	15	3	3	2
1.7885	51.0654	13	2	3	3
1.7671	51.7292	11	2	4	1

PDF2plusのおもなユーザー

大学 / 官公庁

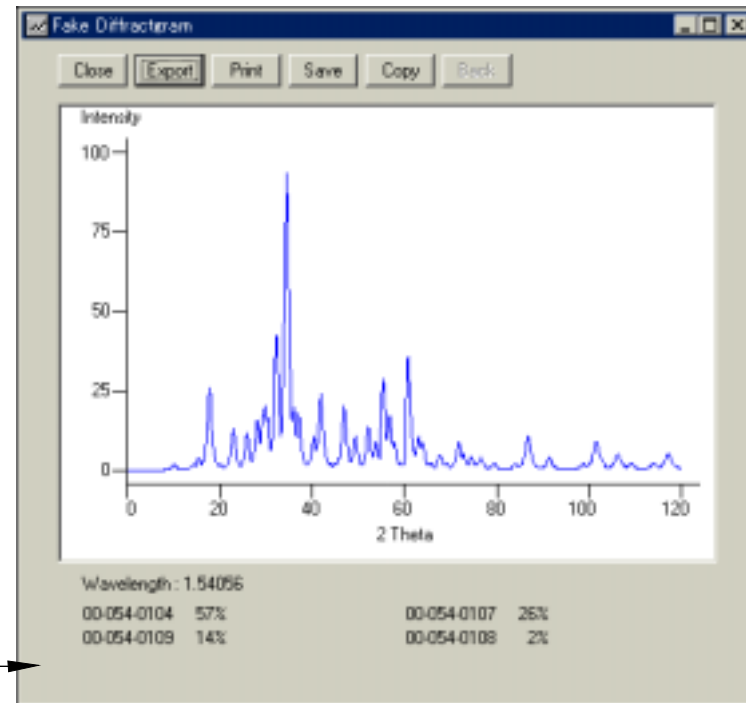
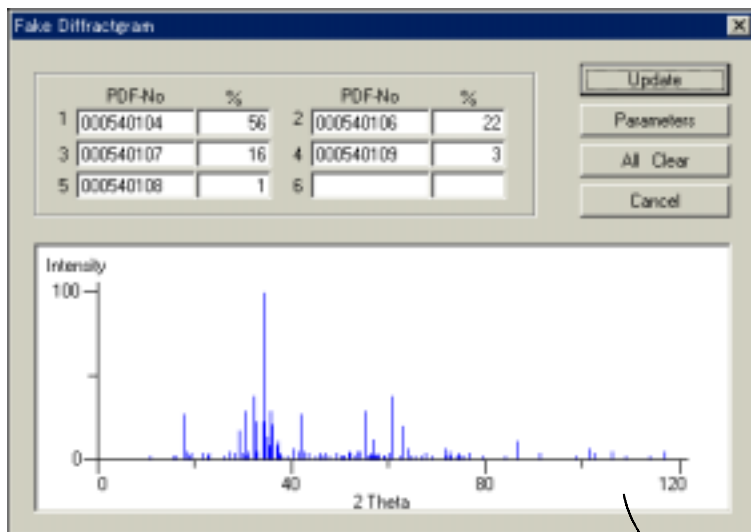
- 名古屋大学(中央図書館)
- 東北大学(金属材料研究所)
- 東京大学(柏の葉)
- 東京工業大学(応用セラミックス)
- 群馬大学(桐生)
- 豊橋技術科学大学(図書館)
- 日本原子力研究所(東海 / 関西)
- 物質材料研究機構(千現 / 並木)
- 高エネルギー加速器機構(筑波)
- 岡山大学(三朝温泉)
- 早稲田大学(考古学)
- 高輝度光科学研究センター(Spring-8)
- カイロ博物館(早稲田大学)

他

民間企業

- 日本電気(筑波 / 川崎 / 相模原)
- 豊田中央研究所
- 三洋電機(枚方)
- 三菱化学(横浜)
- 日立製作所(日立)
- 大日本印刷(コンバート技術)
- 東京エレクトロン(葦崎)
- 京セラ(国分)
- ソニー(保土ヶ谷 / 多賀城)
- 住友化学工業(筑波研究所)
- 秩父小野田セメント(中研)
- 日本放送協会(放送技研)

他



Conversion

d-spacing --> 2Theta

2Theta --> d-spacing

2Theta :

d-spacing :

WaveLength

Cu Ka1_1.54056

Cu Ka__1.54184

Cr Ka1__2.28970

Fe Ka1__1.93604

Co Ka1__1.78897

Mo Ka1__0.70930

Input Wavelength

WaveLength :

Clear OK Cancel

- ユーティリティ
1. ピーク関数の当てはめ
(ガウス/ローレンツ)
 2. Braggの式
($2d \sin \theta = \lambda$)

PDF2plus for Windowsを どのような場合に使用するか？

- 特定のd値(または角度)に存在するラインの帰属を調べたい
(3強線または8強線からの検索)
- パターンのレコーダー出力と蛍光X線での元素情報が判明している
(元素記号からの検索と3強線または8強線からの検索の掛け合わせ)
- 自動検索でカード番号と物質名しか与えられない(古い装置)
(カード番号からの検索)
- 特定の物質名からカードのパターンを見たい
(物質名からの検索)