

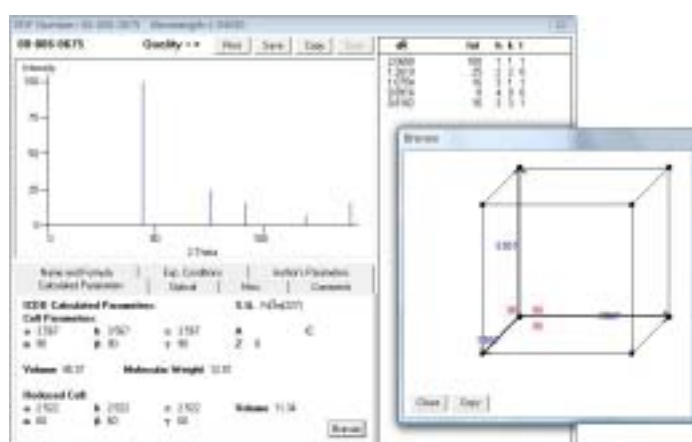
JCPDS-ICDD
PDF2 データベース カード検索システム

PDF2plus for Windows

VERSION 4.1.0 for Release 2007(Set 57+)

操作マニュアル

(Revised Oct. 23, 2007)



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

目次

1 はじめに.....	3
1.1 必要なシステム構成.....	3
1.2 インストール.....	3
1.3 起動.....	6
2 カード検索.....	7
2.1 PDF 番号からの検索[by PDF-No].....	8
2.1.1 化学式からの検索[by Chemical Formula].....	10
2.1.2 名称検索からの検索[by Chemical Name].....	10
2.1.3 コメントデータ検索[by Comment].....	10
2.1.4 結晶系検索[by Crystal System].....	11
2.1.5 元素記号検索[by Element].....	11
2.1.6 数値データ検索[by Numeric].....	12
2.1.7 レファレンスデータ検索[by Reference].....	12
2.1.8 空間群記号検索[by Space Group].....	13
2.1.9 サブファイル検索[by Subfile].....	13
2.2 検索結果のリスト.....	14
2.3 条件式リストの操作.....	15
2.4 検索結果でのリスト操作.....	15
3 カードの表示.....	17
3.1 2 θ /I リストの表示.....	17
3.2 線源の選択、波長の変更.....	17
3.3 その他の操作.....	18
4 バーグラフ.....	19
4.1 バーグラフの操作.....	19
4.2 複数バーグラフの表示.....	19
4.3 ディフракトグラムを作成.....	19
5 コピー / 保存フォーマットの設定.....	22
6 ユーザーパターンの入力およびデータベースパターンとの類似性(Similarity Index)を計算.....	23
6.1 ユーザーパターンの Save (保存) と Load (ロード).....	27
7 ユーティリティー.....	28
d 値から 2 θ または 2 θ から d 値への変換計算.....	28
8 その他の機能.....	29
Appendix A カードデータの保存フォーマット例.....	30
Appendix B カードデータの印刷例.....	32
Appendix C ユーザーパターンのフォーマット例.....	33

Appendix C	PDF と ICDD について.....	34
Appendix D	カードデータの内容	36
Appendix E	動作およびエラーなどに関するメッセージ	42
	Windows Xp にインストール時に発生するエラー	42
	Windows 2000 で制限付きユーザー(Users)として利用するとき	42
	Windows Xp で制限付きユーザーとして利用するとき	42
	インストール後における動作確認の方法.....	43
	PDF2plus for Windows 起動時のエラーメッセージ.....	44

1 はじめに

PDF2plus for Windows を実行するには、少なくとも以下のシステム構成が必要です。

1.1 必要なシステム構成

- ◆ Windows 95/98/Me 日本語版または Windows NT 4.0/2000/Xp/Vista 日本語版が動作する環境
- ◆ CD-ROM または DVD ドライブ
- ◆ 800MB 以上の空き容量を持つハードディスクドライブ
- ◆ VGA(800x600)以上の解像度を持つモニター

1.2 インストール

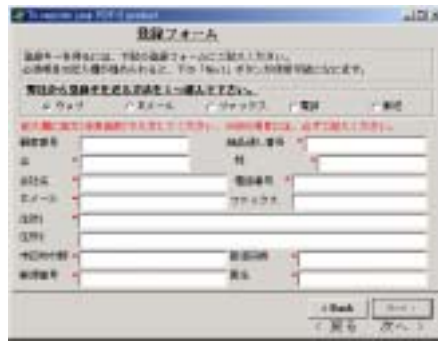
PDF-2 データベースのインストール

PDF2 Release 2007CD(または DVD)をドライブに挿入し、Setup.exe を実行(エクスプローラ上でダブルクリック)して下さい。そしてインストールプログラムの指示に従ってインストール先等を指定して下さい。Setup.exe を完了した後、Setup2.exe も実行して下さい。(Setup.exe は PDF-2 データベースをインストールし、Setup2.exe は SyBase のランタイムドライバーをインストールし、このドライバーが ODBC を介してアプリケーション(PDF2plus for Windows)はデータベースと接続できます。)インストールを完了すると、1 ヶ月間のテンポラリーライセンスが与えられます。この 1 ヶ月の間に ICDD へ Web、E-mail または Fax で Registration すると、5 年間のライセンスが 48 時間以内(Web では瞬時)に送られてきます。

注:Windows NT 4.0/2000/Xp/Vista マシンにインストールするときには、Administrator(コンピュータの管理者)権限が必要です。

プログラムメニューから ICDD PDF-2 Release 2007 の Register ICDD Products を選択すると、以下のダイアログが表示され、PDF-2 のユーザー登録ができます。(この登録も Administrator(コンピュータの管理者)で行って下さい。)





この登録フォームに入力される内容はPDF-2 データベースの License Agreement と同じ内容であることが望めます。研究機関の移転、移動等により、License Agreement から内容に変更がある場合には、弊社に ICDD から内容の確認等の問い合わせが寄せられます。



ICDD に登録情報を送ると、最大 2 日間以内にユーザーさまのもとにライセンスキー（登録キー）が届きます。もう一度 Register ICDD Products を実行し、「弊社からの登録キーを入力します」を選択して、キーを入力して下さい。



ライセンスが正しく働いているためにライセンス情報を確認して下さい。Register ICDD Products の「お手持ちの PDF-2 ライセンス情報を示します」ボタンを選択して下さい。



ライセンスタイプの欄に Full License が記述されます。

PDF2plus for Windows ソフトウェアのインストール

PDF2plus の CD-ROM に含まれているインストールプログラム (SETUP.EXE) は、指定されたハードディスクに新しいディレクトリ (デフォルトでは ¥Program Files¥PDF2plus) を作成し、CD-ROM から一連のファイルをコピーします。

ここでは、Windows 95/98/Me または NT4.0/2000/XP/Vista でインストールを行う場合、PDF2plus の CD-ROM を挿入するドライブを D とした場合について説明しています。D 以外の場合には、適宜変更して下さい。

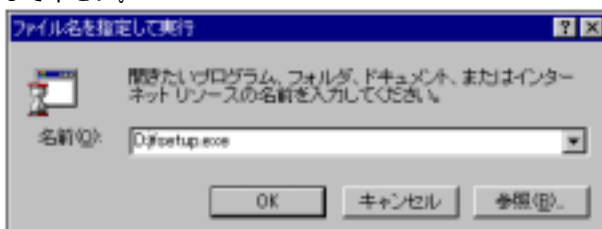
注: Windows NT 4.0/2000/XP/Vista マシンにインストールするときには、Administrator (コンピュータの管理者) 権限が必要です。

空き容量の確認

インストール作業を始める前に、PDF2plus をインストールしようとするドライブに約 800MB 以上の空き領域があることを確認して下さい。データベース以外に PDF2plus が検索に使用するインデックスファイルの WinPDF2.MDB のサイズが約 400MB であり、これは PDF2plus のプログラムと同じディレクトリに存在しなければなりません。Release 2007 では、PDF-2 データベースがバックアップ CD に圧縮された形式で保存されており、ハードディスク上にインストールしなければ PDF2plus for Windows プログラムからアクセスできません。ハードディスク上にインストールされた状態で 540MB 以上になります。

インストールの手順

- 1 Windows 95/98/Me/NT4.0/2000/XP/Vista を起動して下さい。
- 2 PDF2plus の製品ディスクを CD-ROM ドライブに挿入して下さい。
- 3 タスクバーのメニューから「ファイル名を指定して実行」を選択して下さい。
- 4 「ファイル名を指定して実行」ウィンドウの「名前(O)」の項目に「D:¥setup」と入力し、<OK> ボタンをクリックして下さい。D ドライブは CD-ROM ドライブと想定しています。D ドライブ以外の場合には、適宜変更して下さい。



- 5 インストールプログラムが起動します。画面に表示される説明に従って操作して下さい。

注:

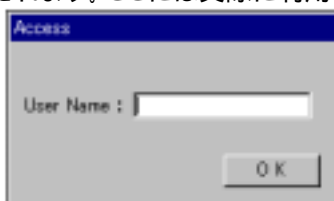
インストールが終了した時点で、UserPDF.mdb と WinPDF2.mdb の 2 つのマイクロソフトアクセスデータベースファイルが ¥Program Files¥PDF2plus に作成されています。Access97 で開けるように

UserPDF.mdb は Access97 のフォーマットですが、WinPDF2.mdb は Access2000 のフォーマットで作成されています。ユーザー側で PDF2plus の使用目的以外に単独で開くことはない想定しています。

1.3 起動

PDF2plus の起動と終了は、以下の手順で行います。

- 1 Windows 95/98/Me/NT4.0/2000/XP/Vista を起動して下さい。
- 2 タスクバーのスタートメニューから「プログラム」を選択し、その中のサブメニューから「PDF2plus」を選択して下さい。
- 3 User Name の入力が必要とされます。ここには実際に利用される方の名前を入力して下さい。



ここで入力された名前、PDF2plus が実行開始された時間、PDF2plus が終了された時間が、マイクロソフトアクセスのテーブルに書き込まれます。ユーザーログを残すことができます。

A screenshot of a Microsoft Access table named "UserPdf". The table has four columns: "Date", "Uname", "Start", and "End". It contains five rows of data.

Date	Uname	Start	End
00/08/24	DMAI	15:19:00	15:21:23
00/08/23	DMAI	13:19:37	13:22:40
00/08/25	DMAI	15:30:45	15:35:40
00/08/29	DMAI	16:33:54	16:40:00
00/08/31	DMAI	15:34:51	

- 4 OK をクリックすると、PDF2plus のタイトルが表示されます。



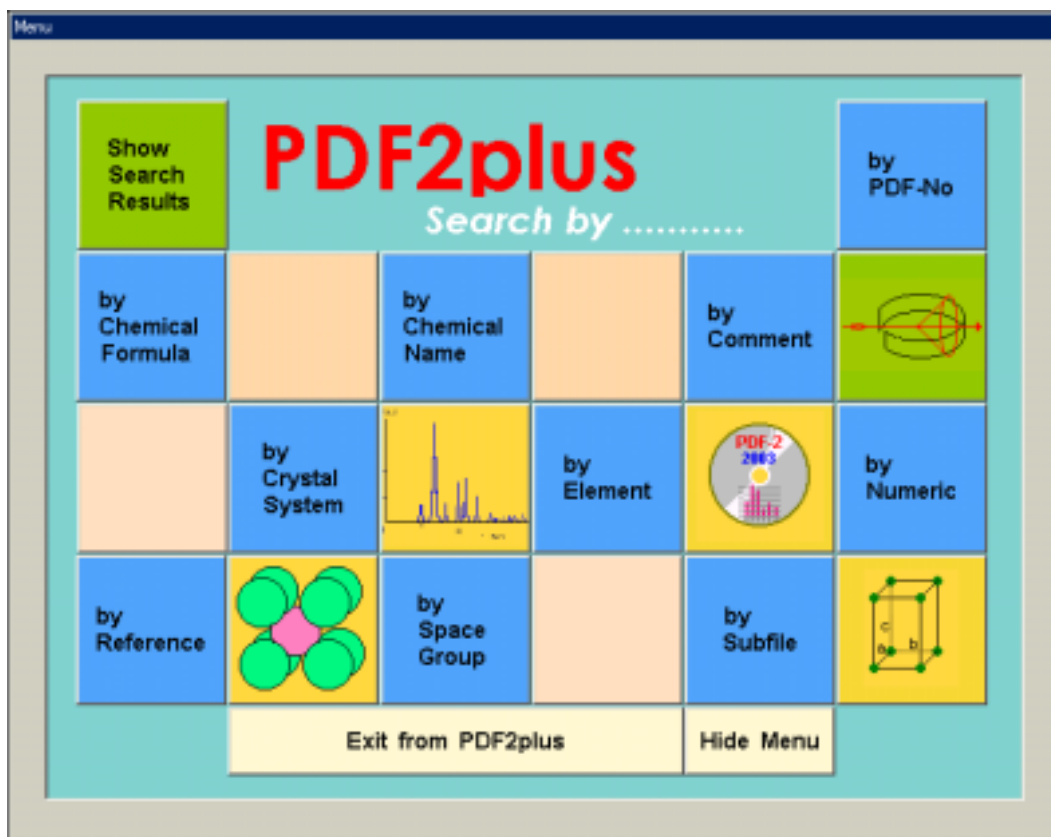
- 5 PDF2plus のスタートアップウィンドウが表示されます。

注

ユーザーログを残す必要がなければ、ConfigPDF2.txt ファイルの UserPDF2=YES を UserPDF2=NO に書き換えてください。マイクロソフトアクセスのテーブルを作成するステップに入ることなく PDF2plus が起動します。

2 カード検索

プログラムの起動時に(または Searchメニューの Searchコマンドを選択するか、ツールバーの()ボタンを選択すると)、カード検索の方法を選択するメニューが表示されます:

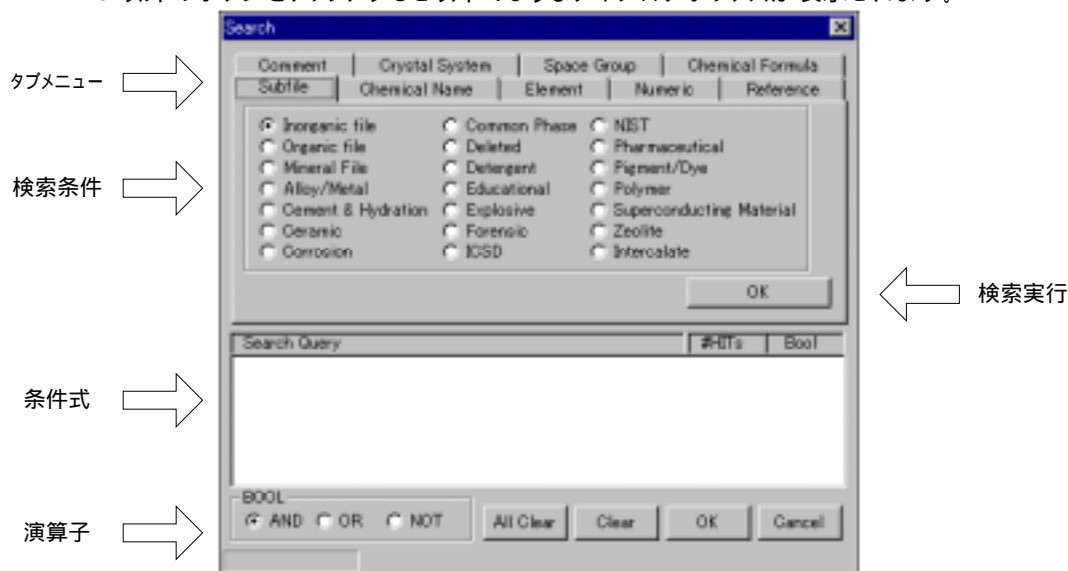


左上隅の[Show Search Result]は検索結果のカードリストを表示します。青いボタンが検索として働きます。右上隅の[by PDF-No]以外はアルファベット順に配置されています。

検索項目(タブ)	詳細な検索条件(選択肢)
Chemical Formula	
Chemical Name	<ul style="list-style-type: none"> ・ Inorganic Name ・ Organic Name ・ Mineral Name ・ Name Fragments
Comment	<ul style="list-style-type: none"> ・ Color ・ CAS Number ・ Mineral Group Code
Crystal System	<ul style="list-style-type: none"> ・ Crystal System Code ・ Lattice Centering Code
Element	<ul style="list-style-type: none"> ・ Organic Chemical Elements ・ Chemical Elements ・ Number of Elements
Numeric	<ul style="list-style-type: none"> ・ 3 Strongest Lines ・ Density ・ 8 Strongest Lines ・ Reduced Cell Volume ・ Reduced Unit Cell Parameters ・ Largest d-spacing
Reference	<ul style="list-style-type: none"> ・ Principal Authors ・ Journal Year ・ Journal CODEN
Space Group	<ul style="list-style-type: none"> ・ Triclinic ・ Trigonal

- Subfiles**
- Monoclinic
 - Orthorhombic
 - Tetragonal
 - Inorganic
 - Organic
 - Mineral
 - Alloy/Metal
 - Cement & Hydration
 - Ceramic
 - Common Phase
 - Corrosion
 - Deleted
 - Detergent
 - Educational
 - Explosive
 - Hexagonal
 - Cubic
 - Forensic
 - ICSD
 - Intercalate
 - NBS
 - NIST
 - Pharmaceutical
 - Pigment/Dye
 - Polymer
 - Pure ICDD(1-55)
 - Superconducting Materials
 - Zeolite

by PDF-No 以外のボタンをクリックすると以下のようなダイアログボックスが表示されます。



- 1 検索条件を入力又は選択してから、[OK]ボタンを押すと検索を実行できます。
- 2 検索結果が下の[条件式]にリスト表示されます。

2.1 PDF 番号からの検索[by PDF-No]

Release 2003 では最終番号が 89-9114 になっていました。Set 90 番台はユーザーのプライベートデータベースに使われており、また Set 65 に NIST の計算パターンを入れているため、Set 54 から Set 64 までしか空きがなく、2 桁で表現されるセット番号に余裕がなくなっていました。そこで Release 2004(Set 54+)以降、セット番号を 3 桁に、そしてデータコレクション元の分類に 2 桁を与え、計 9 桁で PDF データを ID できるように変更されました。

データコレクション元の分類:

- 00 - 従来からの実測パターン
- 01 - ICSD の座標データからの計算によるパターン

03 - NIST の計算パターン

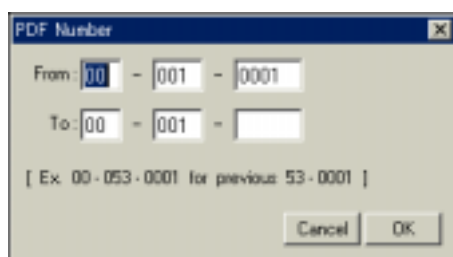
*02 は Cambridge Crystal Data Center の座標データから計算されたパターンに充てられ、すべて PDF-4/Organic に収容されています。

従って、Set 54 のデータは'00-054-0001'から'00-054-2500'となります。

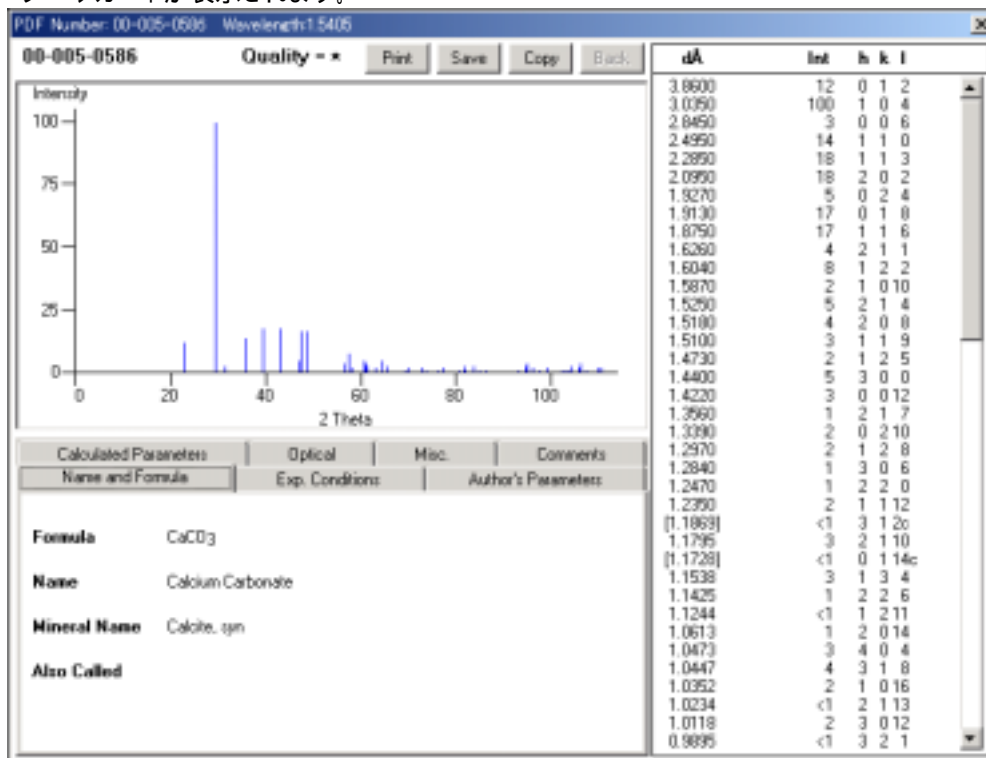
- 1 検索メニューの右上隅の[by PDF-No]を選択して下さい。
- 2 PDF 番号の入力ダイアログが表示されます。
- 3 検索する PDF 番号を入力して下さい。From:に PDF 番号を入力し、OK を押すとその番号のカードが表示され、例えば、From:に 00-052-0001 を、To:に 00-052-0005 を入力し、OK を押すと、00-051-0001 から 00-052-0005 までの 5 枚のカードが表示されます。

セット番号に54を入力すると、先頭の桁に 0 が自動的に充填されます。カード番号にも同様であり、例えば 25 を入力すると自動的に 0025 になります。

ICDD Sets 001-054 : PDF 番号 00-001-0001 ~ 00-054-2500
 NIST Set 065 : PDF 番号 03-065-0001 ~ 03-065-9802
 ICSD Sets 070-089 : PDF 番号 01-070-0001 ~ 01-089-9114



- 4 データカードが表示されます。



パーグラフをデフォルトの表示に入れ、結晶データなどの情報をタブ切り替えで見るように作成しています。書籍と同様のカードイメージをディスプレイするには、[Card][Book Form Style]を選択して下さい。カード表示領域外をクリックして、カードイメージから抜けられない限り、メニュー操作を実行できません。

2.1.1 化学式からの検索[by Chemical Formula]

PDF2 データベースに登録されたままインデックス化されていますので、少々面倒な場合があります。たとえば、00-047-0021 のカードには[Ni_{0.41} Zn_{0.60} Cu_{0.02} Sn_{0.01} Fe_{2.02} La_{0.02} O_{4+x}]のように化学式が入っています。このような場合には、元素記号からの検索の後に、検索結果のリストを使って、ソートまたは抽出するのが便利です。タブダイアログに入力例をいくつか示していますので、参考にして下さい。

古いカード番号には、分子式の情報が入っていない場合もあります。

2.1.2 名称検索からの検索[by Chemical Name]

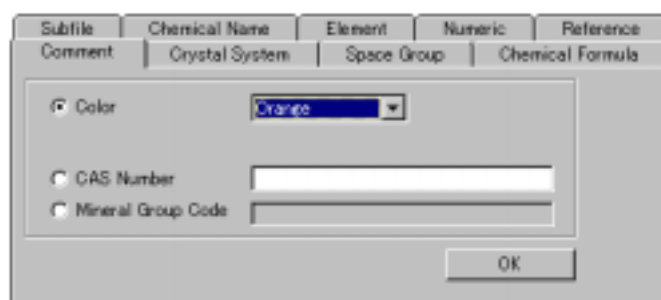
検索する名称の種類に合わせて該当するラジオボタンをクリックし、そして化合物名、鉱物名称など適切な名称を入力して下さい。大文字小文字の区別はありません。

ワイルドカードとして、アスタリスク(*)を使用できます：

- ◆ 完全一致 **Sodium Chloride**
- ◆ 前方一致 **Sodium Chloride***
- ◆ 部分一致 ***Sodium Chloride***

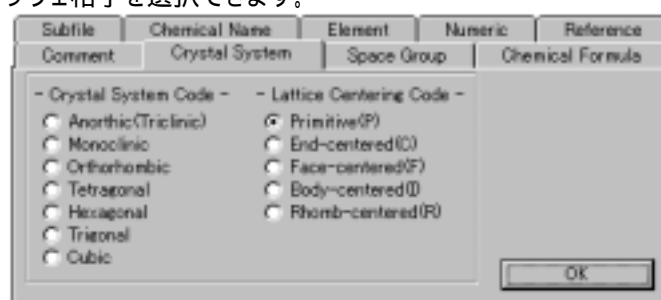
2.1.3 コメントデータ検索[by Comment]

結晶のカラーや CAS 番号など、コメントフィールドに含まれるデータを選択または入力することにより、検索を実行できます。



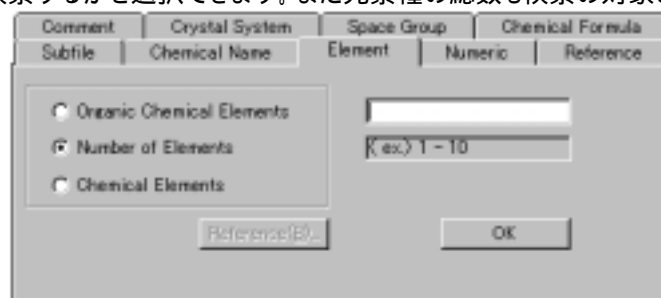
2.1.4 結晶系検索[by Crystal System]

結晶系またはブラヴェ格子を選択できます。

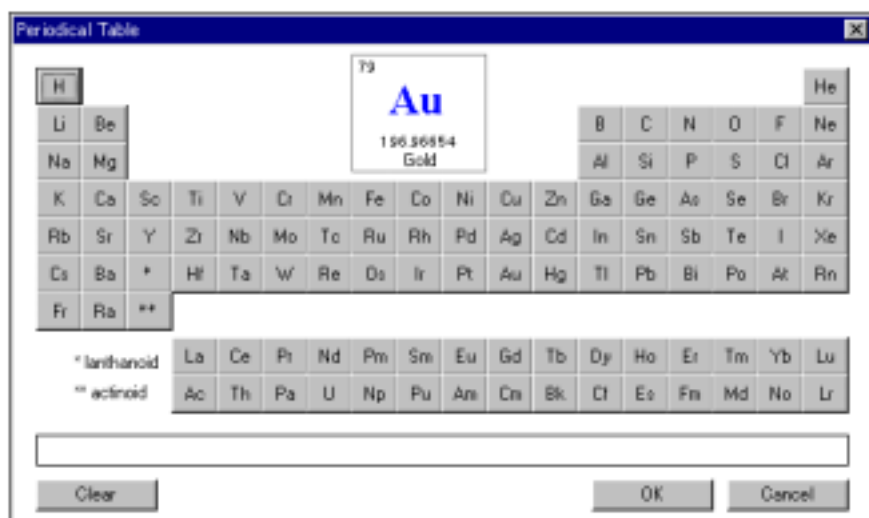


2.1.5 元素記号検索[by Element]

Organic Phase(有機物)と**Inorganic Phase**(無機物)のインデックスファイルはそれぞれ独立して作成されています。元素記号の扱いも有機物の場合には C9 のように数字を伴った形式が許容されていますが、無機物の場合には数字は許容されません。有機物または無機物のいずれかとして元素記号を検索するかを選択できます。また元素種の総数も検索の対象となります。



- ◆ **Organic Chemical Elements**: 元素記号とその数を入力して下さい。
- ◆ **Number of Elements**: 元素種の数を入力して下さい。(1～10まで)
- ◆ **Chemical Elements**: 元素記号を入力できます。**Reference(B)...**を押して周期表が開き、元素記号をボタン選択できるので、操作が容易になります。



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

Search Query	#Hits	Bool
(CE) Al	13335	AND
(CE) Si	13175	

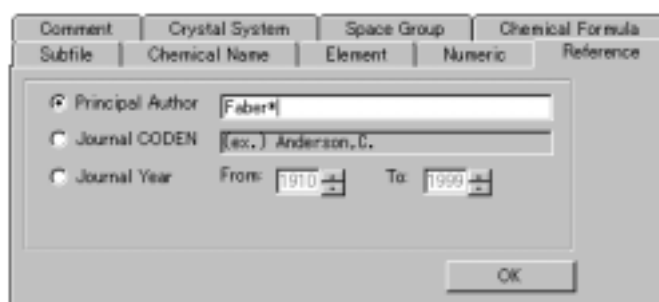
2.1.6 数値データ検索[by Numeric]

3 強線など、数値データの検索範囲を入力できます。

Comment	Crystal System	Space Group	Chemical Formula
Subfile	Chemical Name	Element	Reference
<input checked="" type="radio"/> 3 Strongest Lines (Hanawalt Index) <input type="radio"/> 8 Strongest Lines (Fink Index) <input type="radio"/> Reduced Unit Cell Parameters <input type="radio"/> Density <input type="radio"/> Reduced Cell Volume <input type="radio"/> Largest d-spacing			
From: <input type="text" value="251"/>		To: <input type="text" value="252"/>	
[ex. 47-1475] 2,35			
OK			

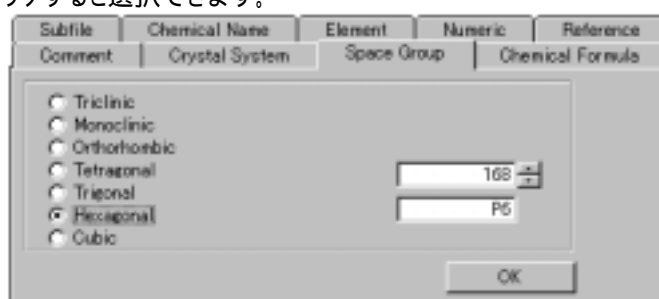
2.1.7 レファレンスデータ検索[by Reference]

データの作成者(著者)、発表された雑誌の CODEN コード、発行年を選択または入力できます。作成者の入力形式には注意が必要です。表示された例を参考にして下さい。また、ワイルドカードのアスタリスク(*)を使用するののも一つの方法です。



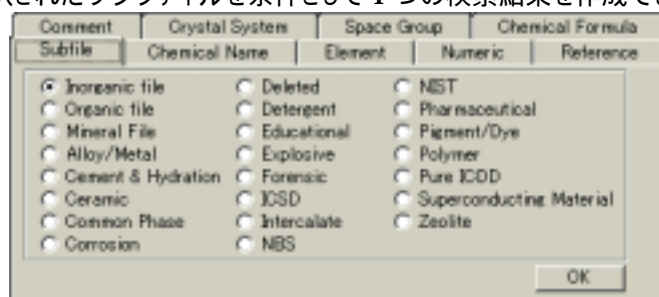
2.1.8 空間群記号検索[by Space Group]

結晶系のボタンをクリックすると、その晶系に属する空間群番号の最小数がボックスに表示され、結晶系の範囲内で空間群番号と空間群記号が表示されます。目的の番号または記号が現れたら、OK ボタンをクリックすると選択できます。



2.1.9 サブファイル検索[by Subfile]

検索するサブファイル名の左側に付けられたラジオボタンをクリックして必要なサブファイルを選択して下さい。選択されたサブファイルを条件として1つの検索結果を作成できます。



Inorganic と Mineral のように、1枚のカードに複数のサブファイルが割り当てられている場合があります。

2.2 検索結果のリスト

クエリーの一覧

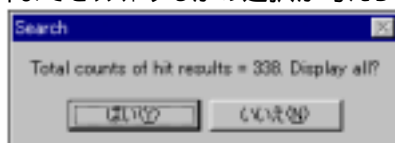
[条件式]の各行をダブルクリックすると、その条件式だけに該当するカードのリストを作成できます。

Search Query	#HITS	Bool
(SF) CER	338	AND
(DE) SI	18175	

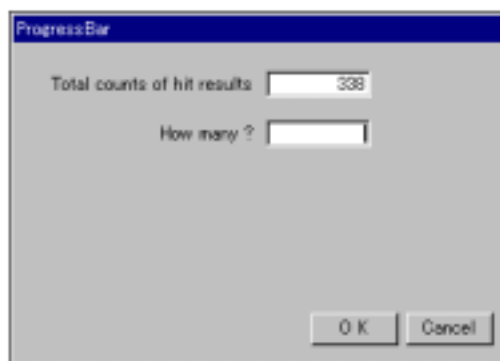


ダブルクリック

カードリストは PDF 番号順で表示されます。検索されたカード全体のリストを作成するか、または先頭の PDF 番号から何件までをリストするかの選択が与えられます。



「はい」をクリックすると、全体のリストが作成され、「いいえ」を選択すると、カードの件数を指定できます。



OK をクリックして下さい。カードリストが、表示されます。このカードリストを使って、ソートと指定した文字列での抽出ができます。

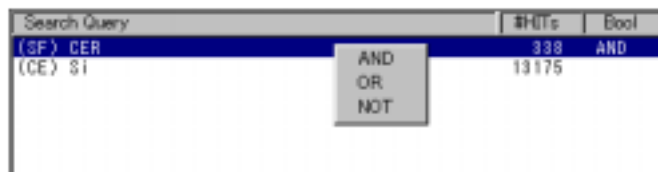
掛け合わせ検索からの一覧

[条件式]の下にある [OK] ボタンを選ぶと、クエリーにリストされた条件式を掛け合わせた結果としての検索を実行できます。

PDF ID	Chemical Name	Chemical Formula	3 Strong Lines	SYS	QTY	OEL
000480006	Lithium Lanthanum Silicate	Li La Si O4	2.90 2.88 1.81	H	*	
000490442	Calcium Silicate	Ca3 Si O5	2.78 2.76 1.77	M	*	
000491672	Calcium Silicate	Ca2 Si O4	2.73 3.01 2.75	O	R	
000491673	Calcium Silicate	Ca2 Si O4	2.79 2.75 2.78	M	R	
000501663	Berezanskyite / Lithium Potassium Titanate	K Li8 Ti2 Si12 O30	3.16 2.90 4.07	H	i	
000530010	Sodium Niobium Silicate	Na - Si - Nb - O	2.95 3.17 6.84		O	
000530055	Yttrium Oxide Borate Silicate	Y9.73 Y6 (Si O4)4.8 (B O4)	2.77 2.68 2.73	H	*	
000530291	Lanthanum Oxide Silicate	La10 (Si O4)6 O3	2.91 2.89 3.30	H	*	
000530525	Sodium Magnesium Silicate	Na2 Mg2 Si2 O7	2.50 2.56 4.34	X	O	
000530626	Sodium Magnesium Silicate	Na2 Mg2 Si2 O7	4.24 2.63 2.58	X	O	
000530536	Strontium Aluminum Nitride Silicate	Sr2 Al2 Si10 N14 O4	3.01 2.98 2.15	O	*	
000530765	Sodium Titanium Silicate	Na2 Ti8 O13 (Si O4)2	5.41 3.41 3.27		O	
000530810	Potassium Aluminum Oxide Silicate	K0.9 Al0.9 S0.1 O2	2.72 1.57 2.32	T	i	
000530811	Potassium Aluminum Oxide Silicate	K0.85 Al0.85 S0.15 O2	2.72 1.57 4.43	O	i	
000530849	Khmaralite / Magnesium Iron Beryllium	Mg5.5 Fe2 Al14 Be1.5 Si5 O4	2.44 2.01 2.83	M	*	

2.3 条件式リストの操作

右クリック



- ◆ 条件式の削除
[Clear] ボタンを押すと、条件式を行単位で削除できます。
[All Clear] ボタンは、全ての条件式を削除でき、クエリーを白紙に戻すことができます。
- ◆ 掛け合わせ検索の実行
[OK] ボタンで、リストの条件式の掛け合わせ検索を実行できます。
- ◆ 演算子について
条件式を結合させる演算子は、BOOL オプションのボタンで演算子(AND/OR/NOT)を選びます。検索を実行するとその演算子が[条件式]の[Bool]に書き込まれます。
また、[条件式]中の[Bool]演算子を直接変更する場合は、その行を選択して右マウスクリックすると演算子メニューが表示され、他の演算子に変更できます。

Search Query 項目の略称について

(SF)Subfile	(IC)Inorganic Name	(OC)Organic Name
(MN)Mineral Name	(IF)Inorganic Fragments	(OC)Organic Name Elements
(CE)Chemical Elements	(L3)3 Strongest Lines	(L8)8 Strongest Lines
(RU)Reduced Unit Cell Parameters	(DN)Density	(RC)Reduced Cell Volume
(LL)Largest d-spacing	(PA)Principal Author	(JC)Journal CODEN
(JY)Journal Year	(CL)Color	(CN)CAS Number
(MC)Mineral Group Code		

2.4 検索結果でのリスト操作

Results: (SF) CER AND (CE) Si

Card Cancel Copy Save Print Align Back 38 / 38

(BLANK) Extract

PDF ID	Chemical Name	Chemical Formula	3 Strong Lines	SYS	QTY	DEL
000480306	Lithium Lanthanum Silicate	Li La Si O4	2.90 2.88 1.81	H	*	
000490442	Calcium Silicate	Ca3 Si O5	2.78 2.76 1.77	M	*	
000491672	Calcium Silicate	Ca2 Si O4	2.73 3.01 2.76	O	R	
000491673	Calcium Silicate	Ca2 Si O4	2.79 2.76 2.78	M	R	
000501663	Berezanskyite / Lithium Potassium Titanate	K L3 T2 Si12 O30	3.16 2.90 4.07	H	i	
000530010	Sodium Niobium Silicate	Na - Si - Nb - O	2.95 3.17 5.84		O	
000530055	Yttrium Oxide Borate Silicate	Y9.73 Y6 (Si O4)4.8 (B O4)	2.77 2.68 2.73	H	*	
000530291	Lanthanum Oxide Silicate	La10 (Si O4)6 O3	2.91 2.89 3.30	H	*	
000530525	Sodium Magnesium Silicate	Na2 Mg2 Si2 O7	2.50 2.56 4.34	X	O	
000530526	Sodium Magnesium Silicate	Na2 Mg2 Si2 O7	4.24 2.63 2.58	X	O	
000530536	Strontium Aluminum Nitride Silicate	Si2 Al2 Si10 N14 O4	3.01 2.98 2.15	O	*	
000530765	Sodium Titanium Silicate	Na2 Ti8 O13 (Si O4)2	5.41 3.41 3.27		O	
000530810	Potassium Aluminum Oxide Silicate	K0.9 Al0.9 Si0.1 O2	2.72 1.57 2.32	T	i	
000530811	Potassium Aluminum Oxide Silicate	K0.85 Al0.85 Si0.15 O2	2.72 1.57 4.43	O	i	
000530849	Khmaralite / Magnesium Iron Beryllium	Me5.5 Fe2 Al14 Be1.5 Si5 O4	2.44 2.01 2.83	M	*	

リスト上で、フィールドのヘッダー (例えば、Chemical Name の名称が付けられているグレーの部分) をクリック (1 回) すると、昇順にソートでされます。もう一度クリックすると、降順にソートされます。すべてのフィールドがソートの対象になっています。

リスト中のセルをダブルクリックすると、セルに対応するフィールドが選択され、セルの内容を使って、リストの中から、該当するカードを抽出してリストを絞込みできます。(ただし、抽出したリストから元のリストに復帰はできません。元のリストが必要な場合には、もう一度検索を実行してください。) **Extract** ボタンをクリックして下さい。

PDF ID	Chemical Name	Chemical Formula	3 Strong Lines	SYS	QTY	DEL
000480006	Lithium Lanthanum Silicate	Li La Si O4	2.90 2.88 1.81	H	*	
000490442	Calcium Silicate	Ca3 Si O5	2.78 2.76 1.77	M	*	
000491672	Calcium Silicate	Ca2 Si O4	2.73 3.01 2.75	O	R	
000491673	Calcium Silicate	Ca2 Si O4	2.73 2.75 2.73	M	R	

◆ リストのフィールド

PDF ID : PDF 番号
 Chemical Name : 物質名
 Chemical Formula : 化学式
 3 Strong Lines : 3強線
 SYS : 結晶系コード
 QTY : クオリティマーク
 DEL : 削除マーク

◆ カードイメージの表示

[Card]ボタンを押すか行をダブルクリックすると、選択行のカードイメージが表示されます。

◆ コピー

[Copy]ボタンを押すと、ページの全項目が CSV 形式でクリップボードにコピーされます。

◆ 印刷

[Print]ボタンを押すと、ページの全項目が印刷されます。

◆ 整列

[Align]をクリックすると、リストの列幅を初期値に戻します。

◆ 検索

[Search]をクリックすると、Search ダイアログを開きます。

◆ 保存

[Save]をクリックすると、Option メニューの Format で設定されたフォーマットで、リスト全体を保存できます。

◆ 抽出

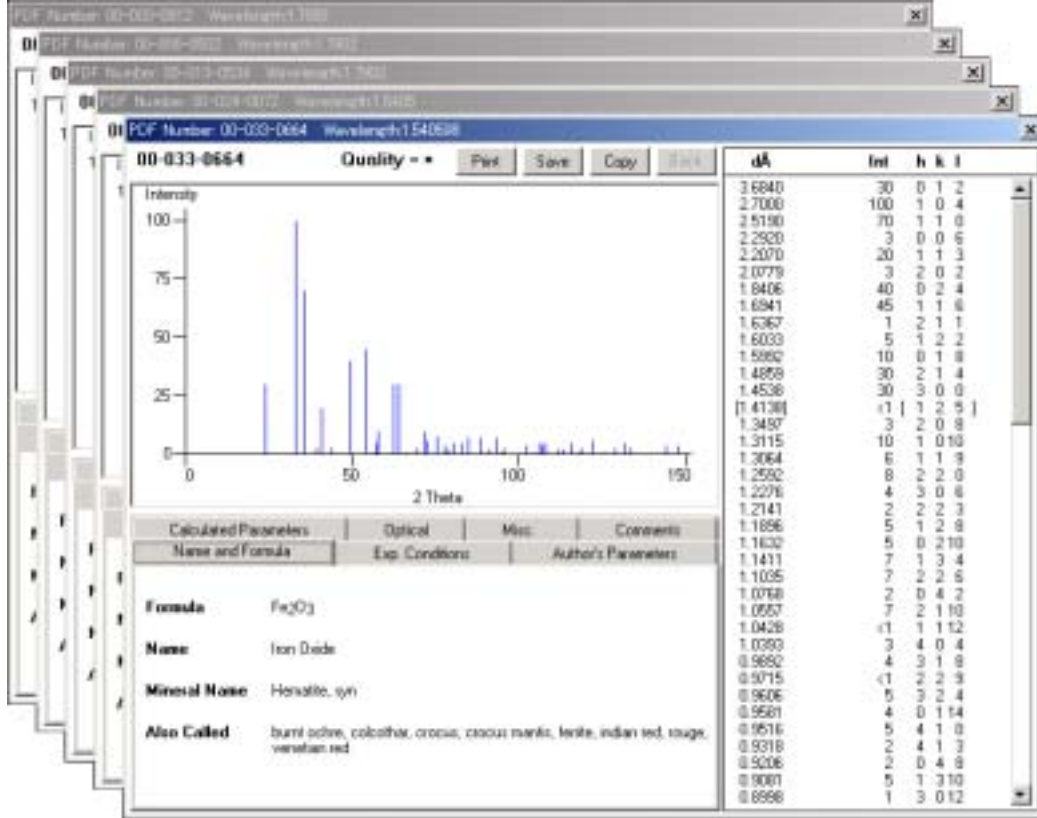
[Extract]をクリックすると、指定されたフィールドと指定された文字列と一致する PDF カードに絞り込みできます。

◆ ソート

フィールドのヘッダーをクリックすると、クリックされたフィールドの内容でリストを昇順で並べ替えでき、もう一度クリックすると、降順に並べ替えできます。

3 カードの表示

カードの d/I テーブルと 2θ/I テーブルの切り換え表示または線源の選択、カードデータのコピー / 保存、従来のカードイメージ表示、NBS*Aids83 フォーマットの表示、等々の機能があります。

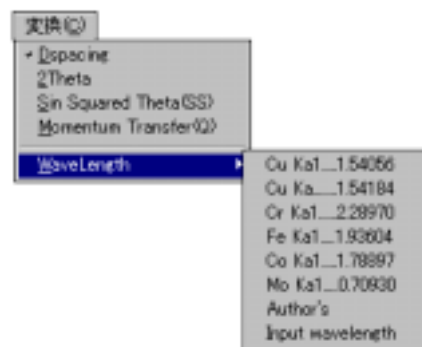


3.1 2θ/I リストの表示

Convert メニューの[Dspacing]がデフォルトとしてチェックされています。[2Theta]を選ぶと2θ をカードの d 値の横に併記できます(マニュアルの表紙を参照)。[Sin Squared Theta(SS)]または[Momentum Transfer(Q)]をクリックすると、それぞれ 2θ の値と入れ替わります。Convert メニューで選択された内容で、カードイメージのテキストに保存とクリップボードにコピーされます。

3.2 線源の選択、波長の変更

メニューの[Convert][Wavelength]で、線源を選択できます。また[Input wavelength]で任意の波長を入力できます。

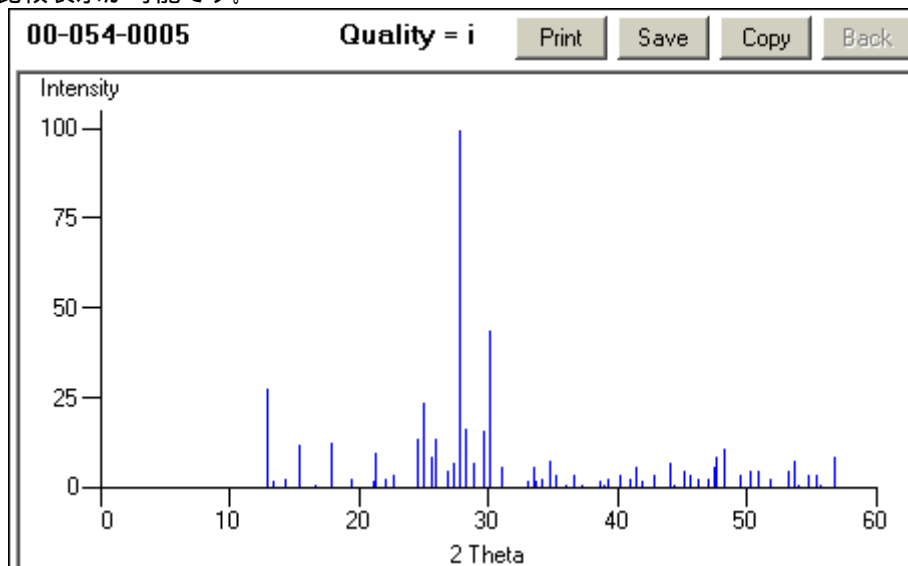


3.3 その他の操作

- ◆ カードデータのコピー
[Edit]メニューの[Copy]を選ぶと、指定のフォーマットでクリップボードにコピーできます。
- ◆ カードデータの保存
[Card]メニューの[Save Card]を選ぶと、[Option]/[Format]で設定されたフォーマットでファイルに保存できます。
- ◆ カードイメージの印刷
[Card]メニューの[Print]を選ぶと、カードイメージとバーグラフを一枚の用紙に印刷できます。
- ◆ カードイメージの表示
[Card]メニューの[Book Form Style]を選択すると、ブックフォームと同じ形式でデータカードを表示できます。
- ◆ カードを閉じる
[File]メニューの[Close Cards]を選択すると、[Current Card]または[All Cards]を閉じることができます。

4 バーグラフ

縦軸強度、横軸 2θ によるバーグラフの表示 / 印刷 / 保存 / コピー、未知パターンのピークデータとの比較表示が可能です。



4.1 バーグラフの操作

左マウスを押さえながら、必要な部分を囲むようにボックスを描いて下さい。点線のボックスが表示され、マウスボタンを離すとズームされます。元のグラフに戻るには Back ボタンをクリックして下さい。ズームの回数だけ、Back が働きます。

- ◆ **Print**
バーグラフを印刷できます。
- ◆ **Save**
バーグラフをビットマップ (*.BMP)、メタファイル (*.WMF)、拡張メタファイル (*.EMF)、GIF (*.GIF)、Jpeg (*.PGF) のフォーマットでファイルに保存できます。
- ◆ **Copy**
バーグラフをビットマップでクリップボードにコピーします。
- ◆ **Back**
ズームを使用すれば、このボタンがアクティブになります。

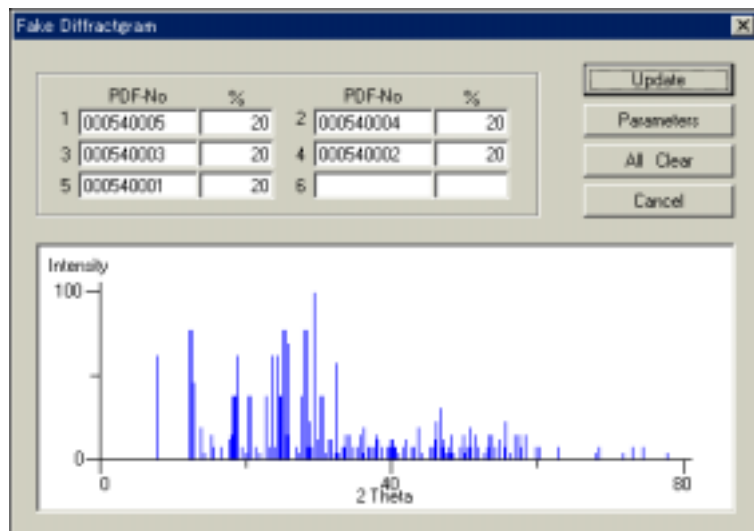
4.2 複数バーグラフの表示

複数個のバーグラフを同時に表紙し、スタックまたはオーバーレイさせるには [Edit] / [User's Pattern] ダイアログボックスを通して下さい。スタックは 5 個、オーバーレイは 8 個までのバーグラフを同時に表示できます。

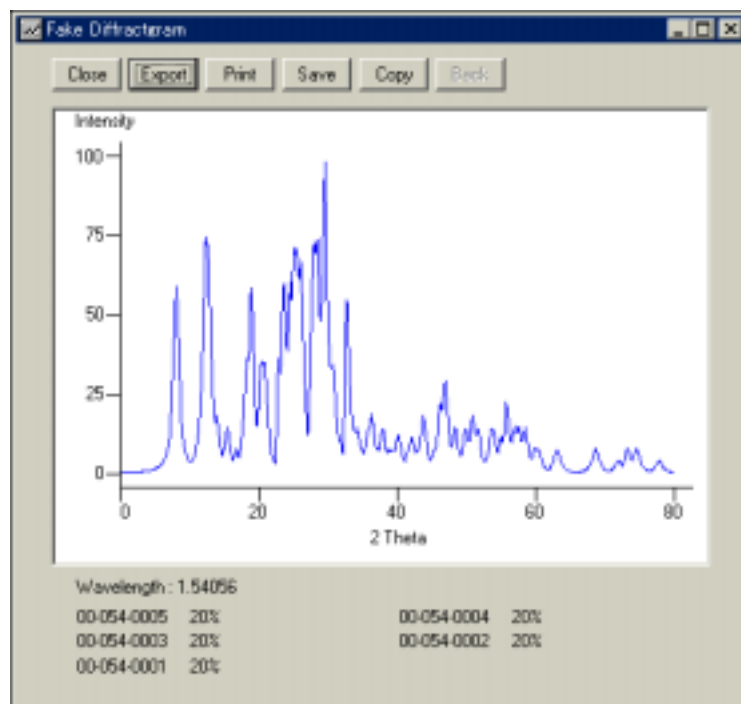
4.3 ディフракトグラムを作成

[Option] の [Fake Diffractgram] を選択すると、ピーク関数 (ガウス関数またはローレンツ関数) と半値幅 ($d=2$ 付近での) を選択することにより回折パターンをシミュレートできます。作成されたパターンでのズーム操作も可能です。

Current と All の選択肢があります。Current を選択すると、カレントのカードが 100%としてリストされ、All を選択すると、開かれたカード(6 件まで)が均等比率でリストされます。



比率を任意に変更し、Update ボタンを押すと混合物質のパターンをシミュレートできます。Parameter ボタンを使うと、Gaussian または Lorentzian のピーク形状や半値幅を選択できます。



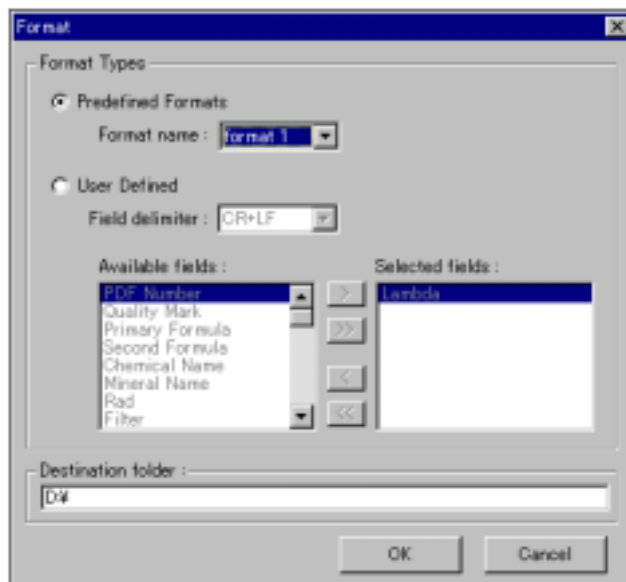
波長の線源が K などの 1 2 が分離されていない場合には、各々33%と 66%に分離または K 1 単独への置き換えオプションが与えられます。

- ◆ Close
回折パターンを閉じます。

- ◆ **Export**
回折パターンを XY 形式のテキストとして CSV ファイルに保存できます。
- ◆ **Print**
バーグラフを印刷できます。
- ◆ **Save**
回折パターンのイメージを BMP 他の画像ファイルに保存できます。
- ◆ **Copy**
回折パターンのイメージを画像としてクリップボードにコピーできます。
- ◆ **Back**
ズーム操作を取り消します。8 回までに限り、ズームの回数分だけボタンを操作できます。

5 コピー / 保存フォーマットの設定

テキスト形式のカードデータをクリップボードにコピー、またはファイルに保存するフォーマットを設定できます。



フォーマット形式指定 (付録 A のフォーマット例を参照)

フォーマット 1	フォーマット 2 (拡張子 TXT)	カードイ メージ テキスト データ	フォーマット 4 (拡張子 CSV)
PDF 番号	PDF 番号		PDF 番号
化合物名	化合物名		化合物名
化学式	波長		波長
結晶系	d 値、強度 (区切りはタブ)		d 値、強度 (区切りはタブ)
空間群記号			
空間群番号			
格子定数 (a/b/c/α/β/γ) (区切りはカンマ)			
d 値、面指数、強度 (区切りはカンマ)			

- ◆ **Predefined Format** (ユーザー定義のフォーマット)
ユーザー定義の自由なフォーマットを作成できます。
 - ◇ フィールド区切り
タブ / セミコロン / カンマ / スペース / CR + LF
 - ◇ フィールド選択
左のリストから必要なフィールドを右に移動して下さい。
- ◆ **Destination** (保存先のフォルダ)
保存するフォルダの場所を指定できます。

6 ユーザーパターンの入力およびデータベースパターンとの類似性(Similarity Index)を計算

Edit メニューの User's Pattern を選択すると、未知パターンのピークデータを入力し、カードパターンとの比較グラフを作成できます。入力データのd値 / 2θ変換、相対強度への正規化、入力データの保存 / 読み込みが可能です。

このユーザーパターンを PDF-2 データベースのカード(すでに開かれているカード)と比較照合し、その一致具合を表す Similarity を計算できます。

Similarity Index はユーザーパターンが混合物であるかもしれないの考えに基づいて計算されます。つまり、データベースパターンに存在するラインはユーザーパターンに存在しなければならず、ユーザーパターンに存在してデータベースパターンに存在しないラインは別成分のラインであると考えます。これはスペクトルデータベース検索でのリバースサーチの考えと同じです。

データベースの各ラインについてユーザーパターンのラインと比較し、どれくらい類似しているかのスコアを、全ラインについてのスコアを合計して得られた値が Similarity Index として得られます。

The screenshot shows the 'User's Pattern' dialog box with the following details:

- Title: EXAMPLE 1
- Title2: [K] CaCO3.ZnS [4-471, 5-586, 5-492]
- Wavelength: Input
- Interplanar Spacings: d-value (selected), 2theta
- Selection: Cu Kα1 (selected), Cu Kα2, Fe Kα1, Fe Kα2, Co Kα1, Co Kα2, Mo Kα1, Mo Kα2, Ag Kα1, Ag Kα2
- Table of d-values and Intensity (Int):

d-value	Int	d-value	Int	d-value	Int			
1	4.1000	23	2	3.8000	5	3	3.9500	54
4	3.3300	25	5	3.1400	32	6	3.0520	100
7	2.9390	16	8	2.5050	42	9	2.2920	10
10	2.1360	10	11	2.1010	6	12	2.0460	10
13	1.9330	2	14	1.9170	38	15	1.8740	9
- Graph: Intensity vs 2 Theta
- Buttons: Save, Load, Update, Clear, OK, Cancel

オプション

Title 1 & 2
Interplanar Spacings
Wavelength
d-value, Int

説明

入力データのタイトルまたはコメントを入力
d 値または 2θ から入力する面間隔を選択
波長を入力または選択
左側に面間隔値を、右側に強度を入力

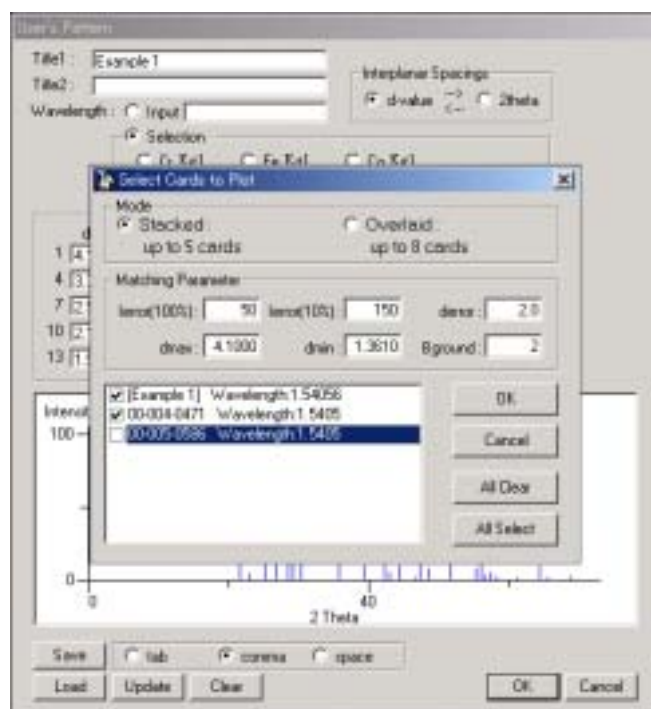
ボタン	説明
-> d-value	2θデータを d 値に変換
-> 2theta	d 値を2θデータに変換
Imax = 100	0-100 の相対強度に正規化
Clear	入力データの消去
Save	入力データの保存
Update	d 値と I 値を入力 / 編集したあと、パターンを表示
Load	入力データのロード

注 6

Format 2 で保存したカードデータを Load できます。その場合、Title 1 には PDF 番号、Title 2 には化合物名が入ります。

OK ボタンを押すと、ユーザーパターンおよび開かれた PDF カードのバーグラフをスタックまたはオーバーレイで表示できます。

ユーザーパターンと PDF 番号の各々 1 件をチェックし、スタック表示を選択した場合にのみ、Similarity が計算されます。それ以外の場合には、Similarity の計算は行われず、パターンの表示だけになります。



Dmax と Dmin

比較照合する範囲を指定できます。ユーザーパターンの両端がデフォルトで入力されます。データベースパターンにあるこの範囲外のラインは照合の対象から外れます。

Error

ユーザーパターンにおける d 値の許容誤差範囲を設定できます。デフォルト値は 2.0 で、大抵の場合、この設定を変更する必要はありません。パラメータ値は誤差範囲が d₂ の 1/1000 に比例し、例えば、Derror がデフォルトの 2.0 であるとき、d 値が 1.0 では $\pm (2.0) \times (1.0)^2 \times 1/1000 = \pm 0.002$ となり、d 値が 2.0 では $\pm (2.0) \times (2.0)^2 \times 1/1000 = \pm 0.008$ のようになります。このように、d 値に対して可変

的な誤差範囲が適用されます。

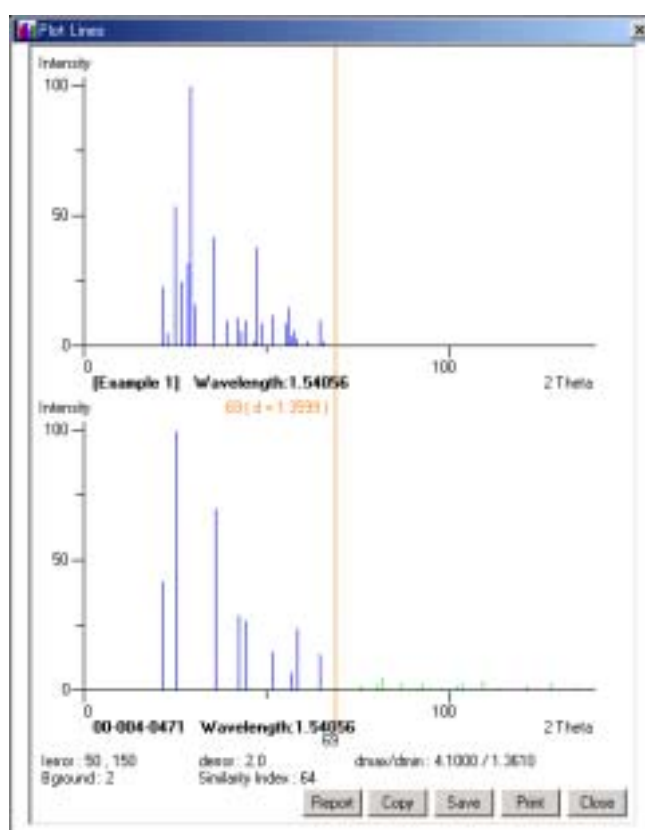
Error

ユーザーパターンの強度値に対する相対比率(%)で誤差範囲を設定できます。強度の 10%付近と 100%付近の 2ヶ所での誤差範囲を設定することにより、強度の弱いラインから強いラインまで可變的に設定できます。強度 10%付近で 200%を設定すると算術的には、10%から 30%の誤差範囲となりますが、強度範囲にマイナスが生じるのを避けるため、10%位置を幾何中心としますが、誤差範囲の幅は維持されています。つまり、強度 10%付近では 10%を幾何中心とし、その誤差範囲は 2.4%から 42.4%となります。

Bground

ノイズレベルの設定であり、デフォルト値はユーザーパターンの最小強度値です。データベースこの値以下の強度を持つラインがあっても、ユーザーパターンに該当するラインがなければ、外れているとはみなされず、無視され Similarity の計算には反映されません。

OK をクリックすると、選択されたスタックでデータベースのパターンとユーザーパターンが表示され、その下に比較照合に使用されたパラメータとその結果である Similarity Index が表示されます。



Similarity はライン 1 本当りの一致具合を積算して得られたスコアを基に、0-100%に基準化した数値が得られます。Similarity Index の数値が高いほどデータベースのパターンに類似します。

ユーザーパターン上で、青いラインがデータベースに存在し、ユーザーパターンにも存在する、つまりヒットしたラインを示します。赤いラインはデータベースに存在するが、ユーザーパターンには存在しない、つまり外れているラインを示します。このラインの存在は Similarity の計算に大きな減点を与えます。データベースパターンにおける緑のラインはユーザーパターンの範囲外であり、パターン比較に使われていないラインです。

Report ボタンを押すと、データベースのラインとユーザーパターンのラインの一致具合をサイドバイ

サイドで見ることができます。

Report

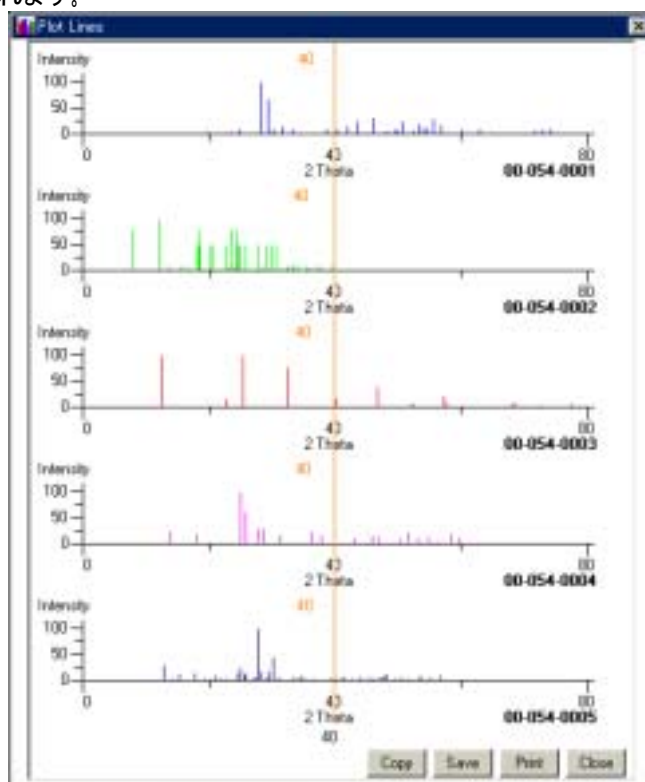
lenor : 50, 150 dsize : 2.0 dmax/dmin : 4.1000/1.3010
 Eground : 2 Similarity Index : 54

00-004-0471

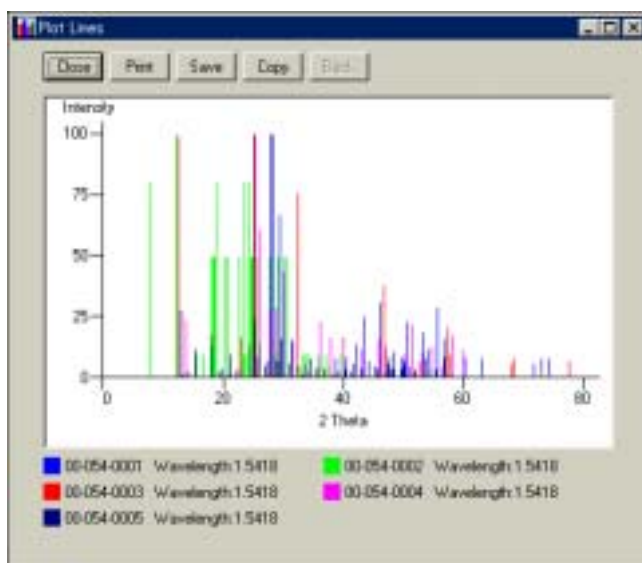
d	i	Use Pattern	i	den
4.0816	23.6	4.1	23	+1.1
3.5311	56.19	3.5511	54	+1.6
2.4991	39.33	2.5063	42	+1.3
2.1313	16.3	2.1363	11	+1.1
2.0392	15.17	2.0462	10	+1.7
1.7671	8.43	1.7693	12	+0.7
1.621	3.93	1.6231	4	+0.8
1.59	13.49	1.592	7	+0.8
1.4422	7.07	1.444	10	+0.9

Print Close

スタックは 5 個、オーバーレイは 8 個までのバーグラフを同時に表示できますが、どちらの場合でも、ユーザーパターン[Unknown]のほかにデータベースパターンを 1 個だけ選択した場合にのみ、Similarity が計算されます。



(スタック)



(オーバーレイ)

左右の矢印キーを使うとワンステップずつカーソルを移動でき、**Shift** キーを抑えながら左右の矢印キーを使うと連続的にカーソルを移動できます。バーグラフのラインと重なると、**2-Theta** 値が表示されます。

- ◆ **Print**
バーグラフを印刷できます。
- ◆ **Save**
バーグラフをビットマップ(*.BMP)、メタファイル(*.WMF)、拡張メタファイル(*.EMF)、GIF(*.GIF)、Jpeg(*.PGF)のフォーマットでファイルに保存できます。
- ◆ **Copy**
バーグラフをビットマップでクリップボードにコピーします。
- ◆ **Close**
バーグラフのダイアログボックスを閉じます。

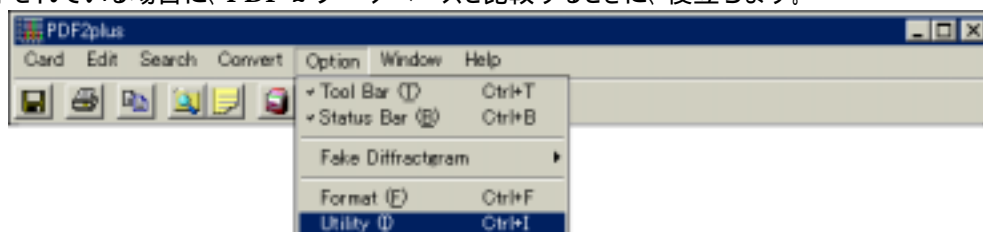
6.1 ユーザーパターンの Save (保存) と Load (ロード)

保存されたユーザーパターンとロードできるファイルのフォーマットは同じであり、ヘッダーが 2 行とその後続く d 値と i 値をコンマまたはタブで区切る単純な ASCII ファイルです。ファイル例については Appendix B のユーザーパターンのフォーマット例を参照して下さい。

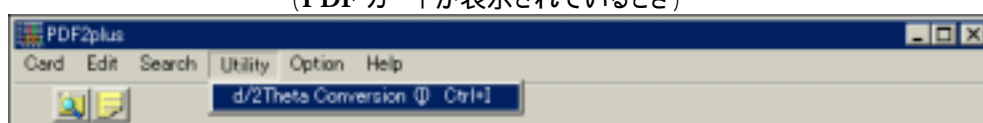
7 ユーティリティー

d 値から 2θ または 2θ から d 値への変換計算

d 値と 2θ 間の変換を計算計算できます。レコーダー出力されたデータに 2θ の数値データが印字されている場合に、PDF-2 データベースと比較するときに、役立ちます。

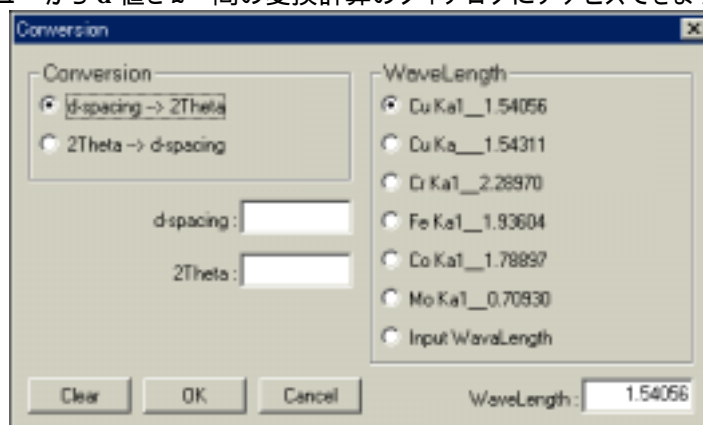


(PDF カードが表示されているとき)



(PDF カードが表示されていないとき)

上記のメニューから d 値と 2θ 間の変換計算のダイアログにアクセスできます。



d-spacing 2θ または 2θ d-spacing のいずれかのボタンをクリックしてください。変換元の数値を上側のボックスに入力し、線源の波長を選択して下さい。Input Wavelength を選択すると、任意の波長を入力できるボックスが表示されます。波長を選択したあと、OK をクリックしてください。変換された数値が下側のボックスに表示されます。

8 その他の機能

◆ カードおよびブックフォーム形式での表示

PDF2plus for Windows の Version 2.xx までのカード表示形式を残しています。バーグラフと d/i リストを同時に表示させたために、逆に付随情報(測定条件、物性データ、コメントなど)がタブ切り替えになっています。[Card]/[Book Form Style]での表示ではこれらの付随情報を同時に表示し見やすくなるメリットがあります。

PDF Number: 00-054-0005 Wavelength: 1.5418				
00-054-0005 Quality = i				
K ₄ CdMo ₃ O ₁₂ K ₄ CdMo ₄ O ₁₃ Potassium Cadmium Molybdenum Oxide		dÅ	Int	h k l
		6.8700	28	2 0 0
		6.6300	2	0 1 1
		6.1800	3	2 0 1
		5.7800	12	2 1 0
				1 1 1
		5.3400	1	0 2 0
				2 1 1
		4.9600	13	1 2 0
		4.5900	3	0 2 1
				3 0 0
		4.2200	2	2 2 0
				2 0 2
		4.1900	10	3 1 1
		4.0400	3	2 2 1
		3.9170	4	2 1 2
		3.6300	14	2 2 1
		3.5640	24	0 3 0
		3.4780	9	3 2 0
				1 2 2
		3.4370	14	4 0 0
				0 2 2
		3.3120	5	4 1 1
				2 2 2
		3.2730	7	4 1 0
		3.2040	100	1 2 2
		3.1600	17	1 3 1
		3.0870	7	2 3 1
				4 0 2
		3.0090	16	3 2 2
		2.9640	44	4 1 2

Rad. CuKα λ 1.5418 Filter Mono. d-sp Dif.
 Cut off Int. Diffractometer I/Cor.
 Ref. Tsyrenova, G., Solodovnikov, S., Zolotova, E., Tsybikova, B., Bazasova, Zh., Zh. Neorg. Khim., 45, 109 (2000)
 Sys. Monoclinic S.G. P2/n(10)
 a 14.119(2) b 10.690(1) c 9.214(1) A 1.3208 C 0.9617
 α β 102.97(1) γ Z 4 mp
 Ref. Ibid.
 Dx 3.670 Dm 3.670 SS/FOM F(3)=14.019,111
 Prepared by reacting appropriate amounts of K₂C O₃, Cd O and Mo O₃ at 350-470 C for 150 hours with intermediate grindings. Cell parameters generated by least squares refinement. Reference reports: a=14.12(2), b=10.64(1), c=9.214(1), β=102.97(1). Silicon used as internal standard. PSC: mP60. Mwt: 749.62. Volume[CD]: 1354.91.

Appendix A カードデータの保存フォーマット例

PDF 番号 00-048-1136 の例:

(フォーマット 1) 000481136
Gadolinium Oxide Phosphate Silicate
Gd₃ Si P O₉
Monoclinic b axes
P21/c
14
6.8041,12.088,9.452,,114.90,
6.99800,0,1,1,20
4.94200,0,2,1,10
4.23700,-1,1,2,40
4.04100,0,1,2,10
3.99800,1,1,1,20
3.46900,1,2,1,10
3.26700,-2,1,1,50
3.04600,-1,1,3,50
3.02200,0,4,0,90
2.96000,-2,2,1,100
2.93500,0,3,2,20
2.91900,1,3,1,20
2.89500,1,1,2,60
2.79100,-1,2,3,40

(フォーマット 2) 000481136
Gadolinium Oxide Phosphate Silicate
1.5405981
6.99800 (tab) 20
4.94200 (tab) 10
4.23700 (tab) 40
4.04100 (tab) 10
3.99800 (tab) 20
3.46900 (tab) 10
3.26700 (tab) 50
3.04600 (tab) 50
3.02200 (tab) 90
2.96000 (tab) 100
2.93500 (tab) 20
2.91900 (tab) 20
2.89500 (tab) 60
2.79100 (tab) 40

(フォーマット3)

00-048-1136										QM=i		
Gd3SiP09												
Gadolinium Oxide Phosphate Silicate												

Rad: CuKa1		Lambda: 1.5405981		Filter: Ge Mono.		d-sp: Diff.						
Cutoff: 8.8		Int: Visual		I/Icor:								
Ref. Herrmann, J., Eysel, W., Mineral.-Petrograph. Inst., Univ. Heidelberg, Germany., ICDD Grant-in-Aid (1996)												

Sys: Monoclinic					S.G.: P21/c (14)							
a: 6.8041(7)		b: 12.088(1)		c: 9.452(1)		A:		C:				
A:		B: 114.90(1)		C:		Z: 4		mp:				
Ref. Ibid.												
Dx: 6.356		Dm:		SS/FOM: F14=72(.005,35)								

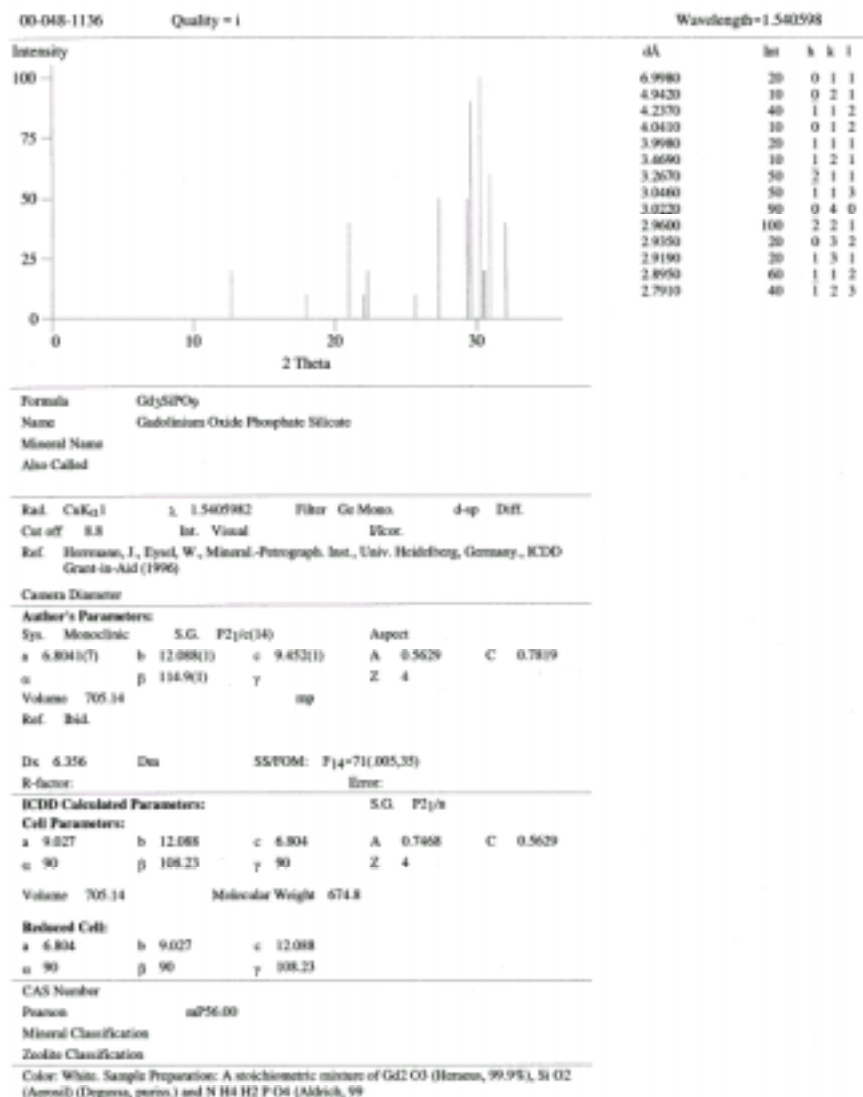
A stoichiometric mixture of Gd2 O3 (Heraeus, 99.9%), Si O2 (Aerosil) (Degussa, puriss.) and N H4 H2 P O4 (Aldrich, 99.999%) was annealed in a sealed Pt tube at 1000 C for 3 days and at 1350 C for 2 weeks. C.D. Cell: a=9.027, b=12.088, c=6.804, beta=108.23, a/b=0.7467, c/b=0.5629, S.G.=P21/n(14). Silicon used as internal standard. PSC: mP56. Mwt: 674.80. Volume[CD]: 705.14.												

d A		Int		h k l		d A		Int		h k l		

6.998		20		0 1 1		2.935		20		0 3 2		
4.942		10		0 2 1		2.919		20		1 3 1		
4.237		40		-1 1 2		2.895		60		1 1 2		
4.041		10		0 1 2		2.791		40		-1 2 3		
3.998		20		1 1 1								
3.469		10		1 2 1								
3.267		50		-2 1 1								
3.046		50		-1 1 3								
3.022		90		0 4 0								
2.960		100		-2 2 1								

Appendix B カードデータの印刷例

PDF 番号 00-048-1136 の例:



Appendix C ユーザーパターンのフォーマット例

(ファイルの例)

Example 1

KI CaCO3 ZnS

1.54056	0
4.1	23
3.88	5
3.55	54
3.33	25
3.14	32
3.052	100
2.939	16
2.506	42
2.292	10
2.136	11
2.101	6
2.046	10
1.933	2
1.917	38
1.874	9
1.769	12
1.658	3
1.633	15
1.623	4
1.607	6
1.582	9
1.528	3
1.512	2
1.424	2
1.361	3

ヘッダー

ヘッダー

(オプション：線源)

d 値、タブ記号、i 値、Enter キー

Appendix C PDF と ICDD について

PDF とは

Powder Diffraction File(PDF)は面間隔値(d)と相対強度(I/I⁰)形式の X 線回折パターンのコレクションであり、原文献への参照情報、ミラー指数、セルデータ、物性なども収録されています。PDF は半世紀以上にわたって使われており、Set 57 の時点で約 100,500 パターンになっており、ドイツの ICSD(International Society for Crystal Data)結晶データベースの原子座標値から POWD12 を使って計算されたパターン(約 89,000 パターン)を Set 70-89 に、NIST(National Institute of Standard and Technology)からのパターン(約 10,000 パターン))を Set 65 に割り当てています。毎年 2,000 パターンが追加されており、そのうち 1,500 パターンが無機物、500 パターンが有機物で構成されています。X 線回折装置およびデータ処理の進歩により精度の高いレファレンスデータが要求され、PDF のレファレンスパターンの見直しも進行しており、逐次古いデータや精度の劣るデータが差し替えられています。

PDF は Set 36 まで 76mm x 12mm のカード、データブック、磁気テープ、マイクロフィッシュなどの媒体で配布され、その後カード形式を廃止し、Set 37 から CD-ROM(Compact Disk Read Only Memory)が登場し、Set 49 でマイクロフィッシュも廃止され、Set 51 から DVD(Digital Video Disk)の新しい媒体が登場しています。Set 54(Release 2004)では、PDF2 データベースは 540MB を超えており、検索用のインデックスファイルを加えると CD-ROM の限界を超えています。

ICDD について

International Centre for Diffraction Data(ICDD)は 1941 年に "Joint Committee on Chemical Analysis and X-Ray Diffraction Methods"として設立されました。当初、公開文献と民間会社の研究所から提供されたファイルから収集し、Pennsylvania State University の Prof. Wheeler P. Davey のオフィスから刊行され、その後ペンシルバニア州フィラデルフィアの American Society for Testing Materials(ASM)からの出版になりました。この経緯から ASTM カードとも呼ばれています。1969 年に、Joint Committee on Powder Diffraction Standards の名称の非営利団体となり、米国外の需要の増加に応じて 1978 年には International Centre for Diffraction Data(ICDD)の名称に変更され、現在では米国近辺、ヨーロッパ、日本を含めたアジアからの需要がほぼ均等となっています。本部はフィラデルフィア郊外のニュータウン市に置かれ、約 70 人が X 線回折 / 結晶解析技術の普及、データの収集 / 評価 / 販売に従事しています。

PDF-2 のデータパターン収録数

Release 2007(Set 1-56+65+70-89)の時点において、データパターンは以下のコレクション構成になっています：

コレクション	(PDF-2, Set 1-57)	(PDF-4, Set 1-57)	PDF-4/Organics
Experimental entries(Sets 1-57 I/O)	100,511	100,511	28,677
ICSD	88,996	66,580	1,644
Cambridge	0	0	282,019
NIST	10,067	5,123	15
Linus Pauling File	0	100,018	0
- Inorganic	172,360	245,016	0
- Organic	30,728	30,979	312,355

CD-ROM などのデータベースには印刷物の Search Manual や黒い装丁のデータブックには含まれていない Deleted パターンも含まれています。各パターンはカードの左上に付けられた PDF 番号で識別され、ハイフンで区切られた左側 2 桁の数字がコレクション番号、中央 3 桁がセット番号、ハイフンの右側 4 桁がセット内のシーケンス番号を表します。セット番号に 1950 を加えた数が出版年度に

なり、例えば、Set 33 は $33+1950=1983$ であり、1983 年の出版とわかります。

PDF の媒体と内容

1980 年代にデータパターンの入力と評価を標準化された NBS*AIDS83 プログラムのもとにデータの品質を計算され、単位セルパラメータから計算された値と実測値を比較され、結晶性も計算からチェックされ、データベース化されています。

PDF は当初 75mm x 125mm のカードで発行されていましたが、データパターン数の増加により、カードの散逸等で保管が難しくなっていました。その結果、カード媒体の利用からマイクロフィッシュやブックフォームの利用へと移っていき、1987 年にカード媒体の出版を中止しましたが、カード形式のイメージはブックフォームに受け継がれています。

印刷物としては新しいデータパターンを収録し毎年発行される赤い装丁のブックフォーム、過去に数年分のデータを集積し Deleted を省いた黒い装丁のブックフォーム、Alphabetical と Hanawalt インデックスの 2 冊に分かれた無機物用サーチマニュアル、Alphabetical と Hanawalt インデックスが 1 冊に収められた有機物用のサーチマニュアル、主要なサブファイル (Minerals, Metals & Alloys, Forensics) にサーチマニュアルを付けたスペシャルコレクションなどがあります。

磁気テープなどのコンピュータ媒体で、回折装置メーカーに混合成分を判別するサーチマッチ用としてデータベースの一部 (d/I リスト、PDF 番号、化学式、化学名、鉱物名) を提供していました。このデータベースは Level-I(PDF-1)と表現されます。

データブック / マイクロフィッシュに加え、PDF の全ての情報を収録したデータベースを 1987 年以降、磁気テープおよび CD-ROM の媒体で提供を開始しました。このデータベースは Level-III(PDF-2) に位置付けられました。PDF-2 の内容に生の回折波形を収録する PDF-3 のプロジェクトも発足しましたが、現時点では発売には至っていません。2004 年発行の Release 2004 では PDF-2 は 540MB を超えてしまい、検索用のインデックスファイルを加えると、CD-ROM の最大 640MB では収まりきれず、DVD(Digital Video Disk)の媒体もオプションとして選択できるようになりました。コンピュータデータベースの進歩に伴い、ICDD のマスターデータベースフォーマットは PDF-2 までに使われていた NBS*AIDS83 からリレーショナルデータベース(RDB)に変更され、PDF-4 と位置付けられています。

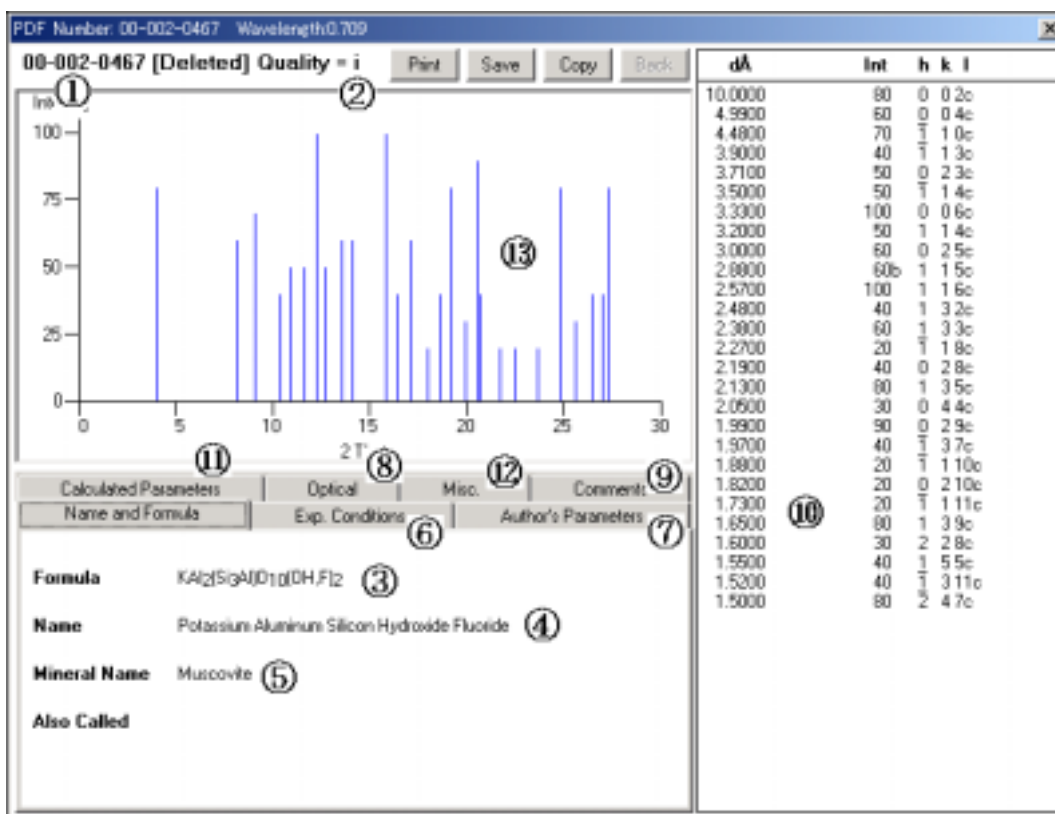
ICDD は上記の ISCD と NIST に加え、Cambridge Crystal Data Center の結晶座標データベースから計算された回折パターンに従来の Organic Phase を加え、PDF-4 Organics として 2002 年から発売しています。この Cambridge のデータコレクションには有機物および有機金属が入っています。

2005 年から、PDF-4 には Linus Pauling File のデータベースから結晶座標データベースを使って計算されたパターンの約 78,700 件が入り、PDF-2 との差別化が図られています。しかし、PDF-4 はユーザーライセンスが契約年数(と更新)によって制限された Time-Lock 商品であるある、一方、PDF-2 はユーザーライセンスが永遠(更新は有料のオプション)に残る商品として位置付けられます。

2005 年の Release 2005(Set 55+)から PDF-2 データベースのフォーマットが PDF-4 と同じリレーショナルデータベース(Sybase)になりました。NBS*AIDS83 フォーマットが無くなったため、PDF2 plus for Windows の File メニューから NBS*AIDS83 コマンドを消去しました。

Appendix D カードデータの内容

Book Form Styleでの表示は下記番号1-10のデータスペースに分割されています。



PDF番号
 信頼性のマーク
 化学式
 物質名
 鉱物名
 測定条件
 物性データ
 光学データ
 コメント
 データ

スペース1:PDF番号

JCPDS-ICDDのPDF(Powder Diffraction File)番号つまりカード番号

スペース2:信頼性のマーク

カード作成の編集者により付けられたパターンデータの信頼性(質)を示すマーク

マークのガイドライン

NBS*AIDS83の評価基準に従い、編集者は信頼性のマークを付けます。回折角数が20個以上のパターンデータについて、90°(2θ)以上は強度5以上のみが評価されています。回折角数が少ないパターンデータについてはこの限りではありません。強度が2以上の回折角が120°(2θ)

以上に10個あれば、すべて対象とされています。また、 180° (2°)以上の回折角は強度にかかわらず、すべて対象とされています。

A) * (アスタリクス)マーク

1. 化学特性が明確なこと
2. 強度は装置などの機械的手段によるものであり、目測によるものは基準にあたらぬ
3. 測定角度の範囲にすぐれ、強度差も明確なこと
4. 擬対称性などの要素が考慮され、パターンデータに完全性があるもの(NposとNobsは完全性の尺度の一つである)
5. d値2.50オングストローム以下のラインは少数点以下3桁以上であり、1.200オングストローム以下のラインは少数点以下4桁以上であること
6. 大きな定誤差がないこと
7. 回折角誤差($|\Delta 2\theta| \leq 0.05$)に不明なラインが存在しない。複数個指数付けされた回折角の場合には、最小の $|\Delta 2\theta|$ のみが採用されている
8. 平均絶対デルタ2θ値($|\Delta 2\theta|$)は 0.03° であること
9. 指数付けされており、空間群が決定され、不純物によるラインがないもの

B) i (アイ)マーク

1. 測定角度の範囲が妥当であり、強度差が明確なこと
2. パターンデータに完全性があるもの
3. d値が2.00オングストローム以下のラインは少数点以下3桁であること
4. 大きな定誤差がないこと
5. 不明なラインが $|\Delta 2\theta| > 0.20^\circ$ にはないこと
6. 平均絶対デルタ2θ値($|\Delta 2\theta|$)は 0.06°
7. 指数付けのないもの、空間群消滅、不純物のラインの数が最大2以下であり、最強8本のラインとは関係しないこと

C) O (オー)マーク

カードデータの編集者が、

1. データの精度が低い
2. 混合物とおもわれる
3. 試料の化学特性が不明確なデータ

などを示すために付けています。単一物質であることを明示していないかぎり、セルデータのないパターンデータに付けられます。エディターは(O)マークを付けた理由を[スペース7]にコメントしています。

D) マークなし

(I)または(O)マークの基準に沿わないパターンデータ

E) C (シー)マーク

(C)マークはパターンデータが構造パラメータから計算されたことを示しています。構造精密因子(Rファクター)は0.10以下であり、Fcalcは $|\sum F_{obs}|$ とチェックされています。また、結合距離と結合角は完全にチェックされているものに限り、もし構造がRietveld法により決定されたものであれば、計算されたパターンデータは例外として受け入れられています。小数点以下の数字は(*)マークと同様の基準が要求されています。

F) R (アール)マーク

リートベルト法によって得られたデータ

スペース3: 化学式

スペース4: 物質名

命名法はIUPAC Nomenclature of Inorganic Chemistryに準じています。カチオンは原子価の昇順に、そして原子価群はアルファベット順とされています。アニオンは O^{2-} 、単一元素、複合元

素、H、OHの順となっています。

a: 単原子アニオンの名称は末尾に[-ide]を持つ元素名となります。

H ⁻	hydride
D ⁻	deuteride
F ⁻	fluoride
Cl ⁻	chloride
Br ⁻	bromide
I ⁻	iodide
O ²⁻	oxide
S ²⁻	sulfide
Se ²⁻	selenide
Te ²⁻	telluride
N ³⁻	nitride
P ³⁻	phosphide
As ³⁻	arsenide
C ⁴⁻	carbide
Si ⁴⁻	silicide
B ³⁻	boride

b: 多原子アニオンの名称は[-ide]で終わる名称を持ちます。

OH ⁻	hydroxide
N ³⁻	azide
NH ²⁻	imide
NH ₂ ⁻	amide
N ₂ H ₃ ⁻	hydraizde
CN ⁻	cyanide
C ₂ ²⁻	acetylde
CN ₂ ²⁻	cyanamide
O ₃ ⁻	ozonide

c: 比例数を表わす接頭語は使用されません。

d: 接尾語[-ate]は酸素を伴うB、C、N、O、F、Si、P、S、Cl、As、Se、Br、Te、I、Atから形成された負イオン錯体で使用されます。接尾語[-ite]は以下の場合にのみ使用されます。

NO ₂ ⁻	
N ₂ O ₂ ²⁻	nitrite
PO ₃ ³⁻	
P ₂ O ₅ ⁴⁻	phosphite
SO ₃ ²⁻	
S ₂ O ₅ ²⁻	
S ₂ O ₄ ²⁻	
S ₂ O ₂ ²⁻	sulfite
As ₂ O ₃ ⁻	arsenite
SeO ₃ ²⁻	selenite
ClO ₂ ⁻	chlorite
ClO ⁻	ハロゲン類

酸化状態 (hypo, perなど) または水分状態 (meta, pyroなど) を示す接頭語は使用されません。

上記にリストされていない多原子アニオンについては、中心な原子名そしてそれに付加する原子と基の順で命名されます。すなわちSiF₆²⁻ (Silicone Fluoride) のように正イオン、付加アニオンの順となります。

アニオンを組み合わせた名称ではSCN (thiocyanate)、CNO (cyanate)、CN (cyanogen)、

CS₃ (thiocarbonate) のようになります。

e: 酸素を含むラジカルは[-yl]で終了する特殊な名称を持ち、これらは以下のように使用されています。

HO	hydroxyl
CO	carbonyl
NO	nitrosyl
NO ₂	nitryl
PO	phosphoryl
VO	vanadyl
SO	sulfinyl
SO ₂	sulfonyl
S ₂ O ₅	sulfureyl
SeO	seleninyl
SeO ₂	selenonyl
CrO ₂	chromyl
UO ₂	uranyl
NpO ₂	neptunyl
PuO ₂	pultonyl (actinide類についても同様)
ClO	chlorosyl
ClO ₂	chloryl (他のハロゲン類についても同様)

上記の多原子ラジカルはつねに化合物の正イオン部分を構成ものとして扱われます。

- f: 2つ以上の元素(1つは酸素)を持つ酸は上記5の接尾語[-ate]の規則により[hydrogen**-ate]と命名されます。
- g: オキシニウムは水和プロトン(H₃O⁺)として使用されます。
- h: アクアは特定のイオンとの水配位結合として使用されます。
- i: 合金名は化学式の元素順にかかわらず、元素名のアルファベット順に並べています。
- j: カチオンを伴うアミンとアクアを除き、水素以外のカチオンはその関連する基の末尾の多原子カチオン原子価の昇順に並べられています。
- k: 各基のカチオンは上記に説明された多原子カチオンを除き、アルファベット順にならべています。
- l: アニオンは以下の順にならんでいます。
- A. O²⁻
 - B. 単原子アニオン(Hを除く)のアルファベット順
 - C. 多原子無機アニオンのアルファベット順
 - D. 有機アニオンのアルファベット順
 - E. H⁻
 - F. OH⁻
 - G. Hydrate

スペース5: 鉱物名

鉱物名は[International Mineralogical Association(IMA)]の命名法に従っています。鉱物名の後ろに[NR]が付いているのは、名称がIMAに承認されていない(not recognized)ことを示します。

スペース6: 測定条件

[Rad]	X線発生源
[]	波長(オングストローム) * 波長に0(ゼロ)としてデータベースに与えられているとき、1.54056(CuK ₁)を使って2を計算し、グラフを作成
[Filter]	単色化の方法(フィルター法: フィルター名、モノクロメータ法: Mono.、半導体検出器: SS Det.)
[d-sp]	面間隔値の測定方法 Guin. = ギニエカメラ D.S. = デバイシェラー Mono. = モノクロメータ Diff. = ディフラクトメータ S.S.Det. = 固体検出器
[Cut off]	使用された装置の最大可能な面間隔(開始角度)
[Int.]	強度の測定方法
[I/I cor]	コランダム最強ラインの強度に対するデータパターンの最強ラインの強度の相対比
[Ref.]	スペースの6と10にリストされたデータの出典

スペース7: 物性データ

[Sys.]	結晶系 Cubic=立方晶系 Hexagonal=六方晶系 Monoclinic=単斜晶系 Orthorhombic=菱面体晶系 Tetragonal=正方晶系 Triclinic=斜方晶系 Trigonal=三斜晶系
[S.G.]	三次元空間群記号、括弧()内は[International Tables for X-ray Crystallography]に記載された空間群数を表わす
[a, b, c]	格子定数(オングストローム)
[A=a/b, C=c/b(正方、六方、菱面体ではc/a)]	結晶データ決定比
[, ,]	、 、 の軸角
[Z]	化学元素については構造の単位あたりの原子数を表わし、化合物については単位セルあたりの化学式数を表わす
[mp]	融点
[Ref.]	スペース7にリストされたデータの出典
[Dx]	NBS*AIDS83プログラムにより計算された密度
[Dm]	実測の密度
[SS/FOM]	Smith-Snyderの性能指数

スペース8: 光学データ

データがなければ、このスペースはディスプレイされません。

[, ,] 、 、 の屈折率

[Sign]	中間屈折率と最大最小屈折率の相関指標
[2V]	2軸結晶における光学軸間の角度
[Ref.]	スペース8にリストされたデータの出典

スペース9:コメント

色、サンプルの化学分析、サンプルの提供元、熱処理、パターンが測定されたときのサンプル温度、結晶データ(スペース5に与えられたデータ以外に)、メルクインデックス番号など関連する付随情報が記載されます。

スペース10:面間隔値、相対強度、ミラー指数のデータ

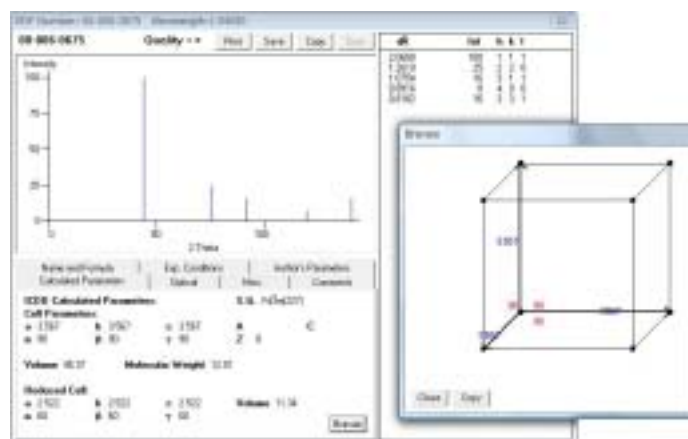
ミラー指数はすべてNBS*AIDS83プログラムで計算されたものであり、データ測定者からのものとは異なることがあります。スペース9では以下の略記号が使用されています。

- [b] ブロード、曖昧、拡散されたライン
- [n] 与えられた空間群では許容されない指数
- [x] ラインの存在または重なりによる強度不明確
- [c] プログラムによって計算されたhkl
- [+] 複数の指数が存在

以上が従来のデータカードおよびブックフォーに記載され、そしてPDF2plus for WindowsのBook Form Styleでの印刷に反映されるデータ情報です。スペース13のグラフは従来から表示されている部分です。スペース10のd とIntおよびスペース6のWavelength値を使って、横軸2Theta(°)のグラフが描かれます。PDF2plus for WindowsのRelease 2005対応から以下のタブを用意しました。

スペース11:ICDDで評価し、計算で作成されたパラメータ

Author's Parametersに対応した内容です。セルパラメータに数値があれば、Bravaisボタンが表示され、Bravaisボタンを押すとブラベー格子の図を表示できます。



スペース12:CAS番号、ピアソン記号、鉱物分類記号、ゼオライト分類記号

従来、スペース9のコメント内に記載されていた内容の一部をMiscのタブに纏めました。

Appendix E 動作およびエラーなどに関するメッセージ

Windows Xp にインストール時に発生するエラー

エラー内容

File not found

原因

日本語のユーザー名でログインして、インストールを実行したとき、Windows Xp が Local Setting の下に存在するユーザー用のディレクトリを正しく認識できないために発生しています。

解消方法

英文字(直接入力による英数字)のみの管理者権限を持つユーザー名で(あるいは作成して)ログインし、インストールを完了後に、元のユーザーに戻して下さい。

Windows 2000 で制限付きユーザー(Users)として利用するとき

エラー内容

ファイル'WinPDF2.mdb'を開くことができません。ほかのユーザーが排他的に開いているか、データを読み取る権限がありません。

原因

Administrator としてのユーザーでプログラムはインストールされ、多数のユーザーが共同利用するため、システムを安全に保てるように一般の User または Guest ユーザーとして PDF2plus for Windows を起動させたときに発生するエラーです。Windows 2000 ではアプリケーションを使用する際には、Power User としてログインすることが推奨されています。しかし、一般の User には Power User ほどの権限がありません。

解消方法

Administrator 権限に戻り、

1.WinPDF2.MDB と UserPDF.MDB それぞれで右クリックし、ポップアップメニューからプロパティを選択し、セキュリティタブで追加をして、リストされたユーザー名から必要な制限付き User を選択し、許可(すべて)のボックスにチェックマークを付けて下さい。そして適用ボタンを押し、さらに OK ボタンを押してプロパティダイアログを終了して下さい。

2.エクスプローラの PDF2plus フォルダー名を右クリックし、ポップアップメニューからプロパティを開き、セキュリティタブを選択し、ユーザーの種類のリストから Users を選択し、アクセス許可の欄にある変更と書き込みのボックスにチェックマークを入れて下さい。そして適用と OK ボタンを押してダイアログを終了して下さい。

制限付きユーザーに入り、PDF2plus for Windows を起動して下さい。

Windows Xp で制限付きユーザーとして利用するとき

エラー内容

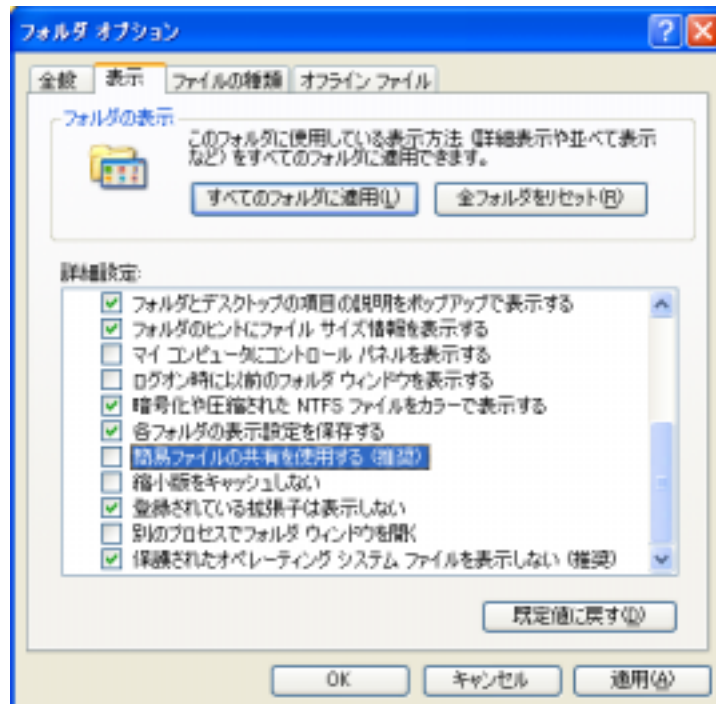
ファイル'WinPDF2.mdb'を開くことができません。ほかのユーザーが排他的に開いているか、データを読み取る権限がありません。

原因

Windows Xp には Windows 2000 とは異なり管理者(Administrator)と制限付きユーザー(User)の2種類しかユーザーの分類がありません。上記の Windows 2000 の場合と同様に、多数のユーザーが共同利用するため、システムを安全に保てるように一般の User または Guest ユーザーとして PDF2plus for Windows を起動させたときに発生するエラーです。

解消方法

- 1.コンピュータの管理者としてログイン
- 2.PDF2plus for Windows で使用しているインストーラは仮想ディレクトリであるデスクトップの下にある共有ドキュメントを想定(サポート)していません。そこでデフォルトでインストール後、PDF2plus フォルダをフォルダごとデスクトップの下にある共有ドキュメントフォルダの下へ移動させて下さい。
- 3.エクスプローラの[ツール] - [フォルダオプション] - [表示タブ]を選択して下さい。[詳細設定]の項目で[簡易ファイルの共有を推奨する(推奨)]がチェックされていますので、おのチェックマークを外して下さい。そして一旦エクスプローラを閉じてください。そしてエクスプローラを開き、共有ドキュメントへ PDF2plus フォルダを移動させてください。



4. WinPDF2.MDBとUserPDF.MDBそれぞれで右クリックし、ポップアップメニューからプロパティを選択し、セキュリティタブで追加をして、リストされたユーザー名から必要な制限付き User を選択し、許可(すべて)のボックスにチェックマークを付けて下さい。そして適用ボタンを押し、さらに OK ボタンを押してプロパティダイアログを終了して下さい。
5. エクスプローラの PDF2plus フォルダ名を右クリックし、ポップアップメニューからプロパティを開き、セキュリティタブを選択し、ユーザーの種類のリストから Users を選択し、アクセス許可の欄にある変更と書き込みのボックスにチェックマークを入れて下さい。そして適用と OK ボタンを押してダイアログを終了して下さい。
- 6.コンピュータの管理者をログアウトして、制限付きユーザーとしてログインして下さい。そして、PDF2plus for Windows を実行して下さい。

インストール後における動作確認の方法

インストール終了および起動時に、ハードディスクにインストールされた Release 2007(Set 57+)の PDF2 データベースを使って、

メニューから PDF Number ボタンを選択して、番号からの検索を実行して下さい:

PDF Number : 00-057-1000

- (1) セット 57 の 1000 番のカードは Set 57+(Release 2007)にのみ存在するので、正しいハードディスクにインストールされたデータベース)を使っていることを確認できません。
- (2) 検索用のインデックスファイル(WINPDF2.MDB)が Set 57+(Release 2007)用として正しく機能していることが確認できます。

PDF2plus for Windows 起動時のエラーメッセージ

エラー内容

FILE READ ERROR(SPLASH)

原因

LICENSE.TXT ファイルが無くなったために、PDF2plus 起動時のユーザー名が入った初期画面を作成できないために発生しています。

解消方法

ウィンドウズの「メモ帳」プログラムを使って、ユーザー名のテキストファイルを作成して下さい。(テキストファイルの例:DDM Corporation)あるいはPDF2plus for Windowsのインストール CD を使って、再インストールして下さい。

エラー内容

WinPDF2.MDB ファイルが見つかりません

原因

PDF2plus for Windows が検索用に使用する WinPDF2.MDB ファイルに読み取り専用のファイル属性がかかっており、このファイルの作成者とユーザー名が異なり、アクセス権がないために発生しています。

解消方法

ウィンドウズのエクスプローラを使って、WinPDF2.MDB ファイルを選択し、右マウスボタンを一回クリックし、ポップアップメニューの「プロパティ」を選択して下さい。表示されたプロパティボックスの左下に存在する属性項目の「読み取り専用」に付いているチェックボックスのチェックマークを外して下さい。