

え、このソフトウェアを利用したことで何か問題が起きたとしても、作者はなんの責任も負いません。

1. Overview 1

1.1. License.....	1
1.2. 必要/推奨動作環境.....	1
2. Main window.....	1
2.3. Main area.....	1
2.1. ファイルメニュー.....	2
2.2. タブメニュー.....	3
2.4. Profile チェックリスト.....	3
2.5. Crystal チェックリスト.....	4
3. Profile parameter.....	4
3.1. Profile チェックリスト.....	4
3.2. Profile processing.....	4
3.3. Axis setting.....	5
3.4. Profile operator.....	5
4. Crystal Parameter.....	5
4.1. Diffraction peak option.....	6
4.2. Crystal チェックリスト.....	6
4.3. Crystal Information.....	6
4.4. Crystal Database.....	7
5. Equation of state.....	7
6. Fitting diffraction peaks.....	7
5.1. Fitting Option.....	8

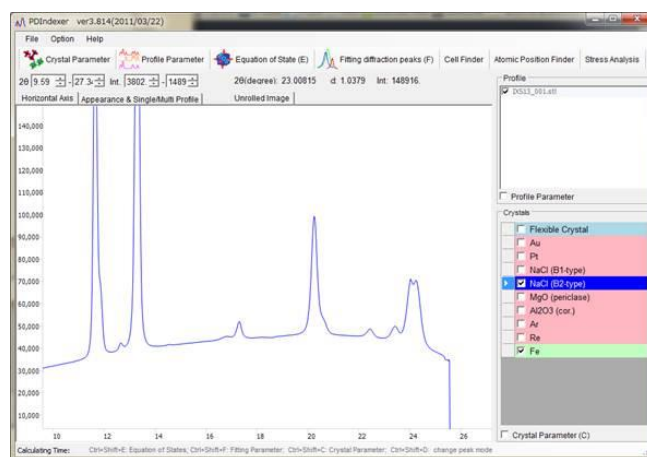
1.2. 必要/推奨動作環境

PDIndexer が動作するための必要環境は、

- .Net Desktop Runtime 6.0 以上が動作する Windows OS です。また、PDIndexer の機能の中には、大きな計算リソースを必要とするものがあります。速度向上のために、できる限りマルチスレッド化や GPU 利用を行っています。快適な使用のためには、以下のスペックを持つような計算能力の高いコンピュータの使用を推奨します。

- Windows 10 64 bit 版
- 16GB 以上のメモリ
- 8 コア以上の CPU

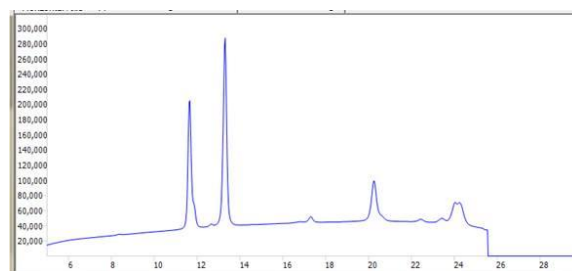
2. Main window



ソフトウェアを起動すると、上のような画面が立ち上がりま

す。

2.3. Main area



プロファイルを表示します。また後に述べる Crystal ボックスで結晶が選択されている場合、回折ピークの位置に線が表示されます。

マウス操作は以下の通りです。

- 左ドラッグ:回折線を移動(結晶の格子定数を変更)
- 右ドラッグ:拡大
- 右クリック:縮小

また横軸・縦軸描画範囲はピクチャーボックス上部の数値を入力することで変更できます。

1. Overview

PDIndexer は一次元粉末 X 線回折パターンの解析を行うソフトです。粉末 X 線回折装置や、デバイシェラー透過光学系で得られた放射光 X 線などで得られた回折プロファイルを表示することが出来ます。また複数プロファイルの表示、既知結晶の回折線との比較、標準物質との比較による温度・圧力の校正・プロファイルフィッティング+最小二乗法による格子定数の精密化機能などを備えています。

ご意見やご要望は GitHub の Issue (<https://github.com/seto77/PDIndexer/issues>)でお知らせ下さい。

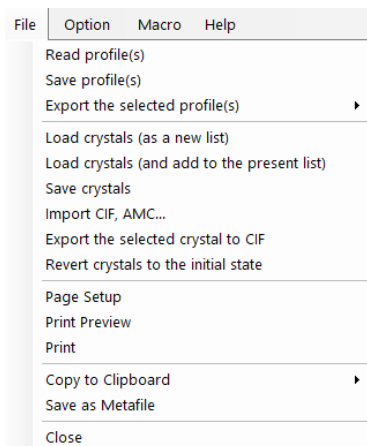
1.1. License

本ソフトウェアは MIT ライセンスの下で配布しています (<https://github.com/seto77/PDIndexer/blob/master/LICENSE.md>)。下記の条件を受け入れていただけるのであれば、誰でも自由に無料で、このソフトウェアを使っていただくことができます。

- このソフトウェアをコピーして使ったり、配布したり、変更を加えたり、変更を加えたものを配布したり、商用利用したり、有料で販売したり、なんにでも自由につかってください。
- 再配布する場合は、このソフトウェアの著作権とこのライセンスの全文を、ソースコードの中やソースコードに同梱したライセンス表示用の別ファイルなどに掲載してください。
- このソフトウェアにはなんの保証もついていません。たと

2.1. ファイルメニュー

File



Read profile(s)

プロファイルデータを読み込みます。読み込み可能な形式は本ソフトの形式である「pdi」のほか、WinPIP の出力である「csv」、Fit2D の出力である「chi」などが読み込めます。これ以外にも角度-強度のテキスト形式で格納されたファイルなら大体読み込めるようにしてあります。

Save profile(s)

プロファイルデータを書き込みます。書き込み可能な形式は本ソフトの形式である「pdi」です。

Export the selected profile(s)

選択中のプロファイルデータをカンマ区切り(角度, 強度)、タブ区切り、あるいは GSAS 形式で出力します。

Load crystals (as a new list)

結晶リストファイル(拡張子 xml)を読み込みます。現在の結晶リストは破棄されます。

Load crystals (and add to the present list)

結晶リストファイル(拡張子 xml)を読み込みます。現在の結晶リストの末尾に追加されます。

Save crystals

結晶リストファイル(拡張子 xml)を書き込みます。

Import CIF, AMC ...

cif 形式の構造データファイル、あるいは amc 形式の構造データファイルをインポートして現在の結晶リストに加えます。

Export the selected crystal to CIF

選択中の結晶を、cif 形式の構造データファイルとして保存します

Revert crystals to the initial state

結晶リストを初期状態に戻します。

Page Setup

プリントのページ設定を行います。

Print Preview

印刷のプレビュー画面を表示します。

Print

印刷します。印刷範囲は現在の角度・強度範囲です。

Copy to clipboard

在描画しているプロファイルをクリップボードにコピーします

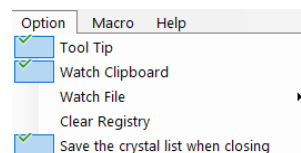
Save as Metafile

現在描画しているプロファイルをメタファイル(ベクトルやフォント情報をそのまま保存する形式)で保存します。EMF(Enhanced Meta File)という形式をサポートしています。保存した「*.emf」ファイルは Power Point や Word で読み込むことができます。

Close

プログラムを終了します。

Option



Tool tip

チェックするとツールチップを表示します。

Watch Clipboard

クリップボード監視し、プロファイルデータや結晶データが更新されると、データを読み込みソフトウェアに取り込みます。

Watch File

指定したディレクトリを監視し、読み込み可能なプロファイルが保存されたら自動で読み込みます。

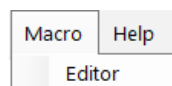
Clear registry

レジストリを削除します。ソフトウェアを再起動が必要です。

Save the crystal list when closing

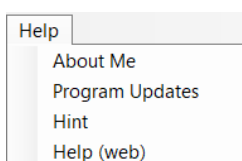
ソフトウェアを終了時に、その時の結晶リストを自動で保存します。次回起動時には、前回終了時の結晶リストが保存されることになります。

Macro



PDIndexer には、マクロ機能があります。詳細は別途記載します。

Help



About me

コピーライトやバージョンアップ履歴、マニュアル(このページ)を表示します。

Program updates

新しいバージョンがリリースされているかをチェック

クし、リリースされている場合はアップデートを行います。

Hint

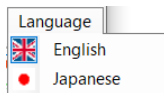
Deprecated.

Help (PDF)

このページを表示します。

Language

言語を切り替えます。現在は英語と日本語のみ対応しています。切り替え後は、再起動が必要です。



2.2. タブメニュー

Horizontal Axis

表示する軸のモードを設定します。ここで設定する情報は、表示上の設定であり、実際の横軸とは関係ありません。(実際の横軸情報は後述の"Profile Parameter"から変更できます。) そのため異なる X 線源を用いた場合でも横軸をそろえて比較することが可能です。たとえば読み込んだプロファイルが Cu の K 線で取得したものであっても、Mo の K 線の波長で取得したように表示することができます。

2θ (degree)

横軸を角度に設定します。X 線の波長を適切に設定してください。

X-ray ラジオボタン

選択すると、横軸は X 線に対する散乱角になります。ドロップダウンリストから特性 X 線源あるいは Custom を選び波長を指定してください。

Electron ラジオボタン

選択すると、横軸は電子線に対する散乱角になります。電子線の加速電圧を指定すると相対論補正をした波長を計算します。

Energy (eV)

横軸をエネルギー(単位 eV)に設定します。EDX デテクタを用いた X 線回折実験の場合に相当します。EDX の取り出し角(Take off angle)を適切に設定してください。

d-spacing (Å)

横軸を d-spacing(面間隔)に設定します。

Appearance & Single/Multi Profile

Scale Line

目もりを表示するかを選択します。

Color

表示する色を設定します。

Single/Multi Profile

プロファイルデータを単一/複数表示するかを決定します。チェックが付いているほうが現在のモードになります。

Single Profile

単一プロファイルモードです。プロファイルを読み込んだとき、あるいはクリップボード経由で IPAnalyzer から送信されてきたとき、古いプロファイルは削除され、新しいプロファイルが描画されます。

Multi Profiles

複数プロファイルモードです。新しいプロファイルは重ねて読み込まれます。

Increasing intensity by a profile

複数データを重ねるとき、データ間の強度の差を設定します。これは表示上の見易さを確保するためで、実際のデータは変更していません。

Change automatically colors

これがチェックされていると、プロファイルの描画色を自動的に変更します。

Vertical axis

縦軸 (強度)を生カウントして表示するか、cps として表示するか指定します。また、縦軸を線形的に表示するか、対数的に表示するかを指定します。

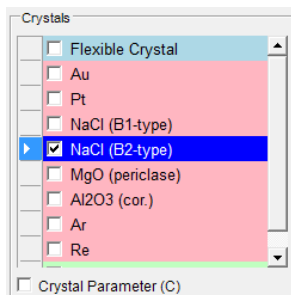
2.4. Profile チェックリスト

読み込んでいるプロファイルを表示/選択します。Single Profile モードのときは無効になっています。

Multi Profile モードのときは読み込んでいるプロファイルが複数表示されます。チェックされているものだけが中央のピクチャーボックスに描画されます。

より詳しいプロファイルの設定はボックス下部の **Profile Parameter** チェックボックスをチェックして設定します(後述)。

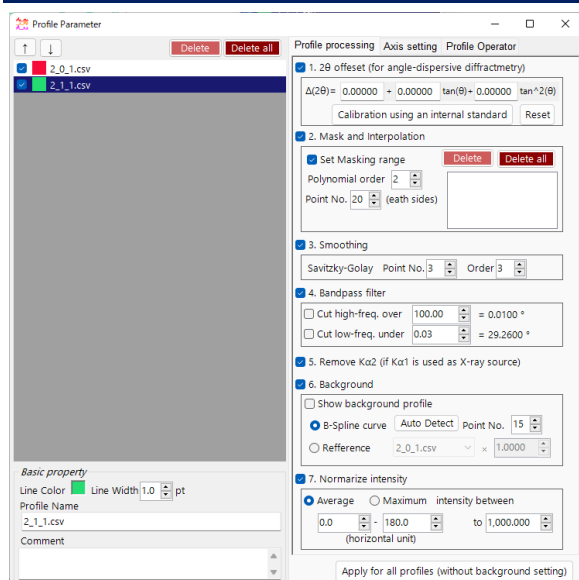
2.5. Crystal チェックリスト



結晶のリストを表示/設定します。リストをチェックすると回折ピークの位置に回折線が表示されます。

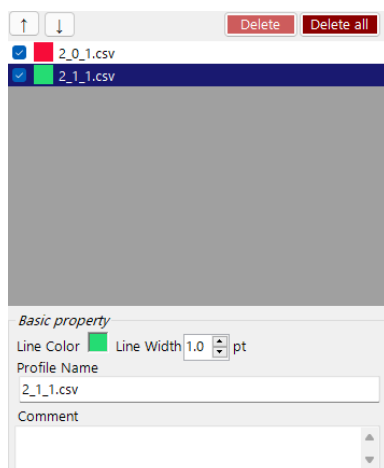
より詳しい結晶の設定はボックス下部の **Crystal Parameter** チェックボックスをチェックして設定します(後述)。

3. Profile parameter



Main window で「Profile parameter」アイコンをクリックすると上のような sub window が立ち上がります。この window では、プロファイルの細かい設定を行います。

3.1. Profile チェックリスト



これはメイン画面の **Profile** チェックリストと同一の情報

を表示します。

上下矢印ボタン

プロファイルの順番を変更します。

Delete ボタン

選択したプロファイルを削除します。

Delete All ボタン

全てのプロファイルを削除します。

Line color

クリックするとリストで選択しているプロファイルの描画色を変更できます。

Line width

プロファイルの線の太さを設定します。

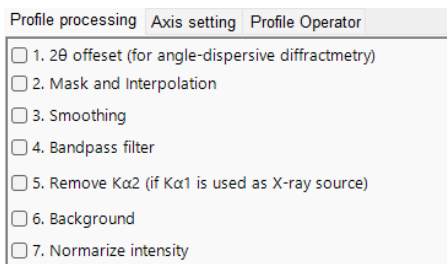
Profile name

プロファイルの名称を設定します。

Comment

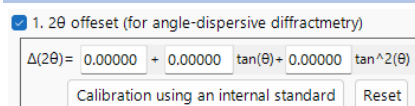
自由コメント欄です。

3.2. Profile processing



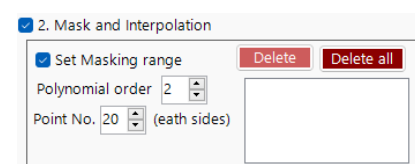
選択したプロファイルに対して様々な処理を施す機能を提供します。

1. 2θ offset



角度分散型のデータに対して、角度の補正をおこないます。補正式は $\tan(\theta)$ に関する二次関数です。内部標準試料(=格子定数が既知の試料)を含んでいるプロファイルの場合は、「Calibration using an internal standard」ボタンを押したのち、メッセージに従って処理をすると二次関数の係数を自動で決定できます。

2. Mask and Interpolation



指定した角度範囲(あるいはエネルギー範囲)をマスクし、マスクした範囲の外側の強度を用いてプロファイルを補完します。

3. Smoothing

☒ 3. Smoothing

Savitzky-Golay Point No. 3 Order 3

選択しているプロファイルに平滑化を施します。平滑アルゴリズムは Savitzky-Golay という方法で、その方法を砕いて言うと 注目している x 位置から \pm Point Number 分のデータに対して Order 次数関数による最小 2 乗法フィッティングを行い、求めた関数 $F(x)$ を改めて x 位置の強度値として採用するという方法です。Order=1 のとき単純移動平均になります。

4. Bandpass filter

☒ 4. Bandpass filter

☐ Cut high-freq. over 100.00 = 0.0100 °

☐ Cut low-freq. under 0.03 = 29,2600 °

指定した周波数より大きい、あるいは小さい成分をカットします。

5. Remove $K\alpha 2$

☒ 5. Remove $K\alpha 2$ (if $K\alpha 1$ is used as X-ray source)

選択したプロファイルが、 $K\alpha 1$ と $K\alpha 2$ を分離していない X 線であり、かつ $K\alpha 1$ を指定して読み込んでいる場合、これをチェックすると $K\alpha 2$ 由来の回折強度が除去されます。

6. Background

☒ 6. Background

☐ Show background profile

☒ B-Spline curve Auto Detect Point No. 15

☐ Reference 2_0_1.csv \times 1.0000

バックグラウンド減算を行います。

B-spline curve

Auto detect を押すと、自動的にバックグラウンドを計算し、減算します。最大でいくつまでのバックグラウンド制御点を自動検索するかを Point No. で設定します。手動でバックグラウンドの制御点を変更することもできます。メイン画面に描かれた丸い制御点をマウスでドラッグして適当な曲線を作ってください。

Reference

選択したプロファイルに対して、別のプロファイルをバックグラウンドとして指定することが出来ます。

7. Normalize intensity

☒ 7. Normalize intensity

☒ Average ☐ Maximum intensity between

0.0 - 180.0 to 1,000,000 (horizontal unit)

指定した横軸範囲の Average あるいは Maximum が、指定した強度になるようにノーマライズします。

Apply for all profiles ボタン

1~7 まで (6. Background を除く) の設定を全てのプロファイルに適用します。

3.3. Axis setting

選択したプロファイルの横軸の単位、入射線の種類、入射

Profile processing Axis setting Profile Operator

Horizontal axis setting

Wave Property

Source ☒ X-ray ☐ Electron ☐ Neutron

Color ☒ Monochrome ☐ Flat White ☐ Custom white

Wave length

Element 0: Custom

Energy 8.05091703 keV

Wavelength 1.54 Å

Horizontal Axis

☒ 2θ (angle) ☐ d-spacing ☐ q (wavenumber) ☐ Energy ☐ Neutron TOF

Unit ☒ option ☐ degree

☐ Shift 0.000 horizontal unit

Vertical axis setting

Exposure Time 0 sec. (for CPS mode)

線のエネルギーの値などを変更します。

Profile processing Axis setting Profile Operator

☐ Average ☐ Profile and value ☒ Two profiles

2_0_1.csv
2_1_1.csv

+ - * /

2_0_1.csv
2_1_1.csv

Output name of the profile

Result #01 Calculate

3.4. Profile operator

複数プロファイルの平均化やプロファイル間の算術演算を行います。計算対象のプロファイルや行いたい演算を指定した後、「Calculate」ボタンを押すと演算結果が新しいプロファイルとして追加されます。

4. Crystal Parameter

Crystal Parameter

Diffraction Peak Option

☒ Show peaks over profiles ☐ Calculate intensity ratio ☐ Scalable intensity

☐ Show peaks under profile ☐ Hide peaks below

☒ Combine adjacent peaks: ☐ Angle threshold 0.010 ☐ Energy threshold 5.0 eV

☒ Show peak indices ☐ All checked crystals ☐ Only selected crystal

Crystal List

Name	Formula	a	b	c	α	β	γ	Crystal System
Kaolinite	Al ₂ Si ₂ O ₅ (OH) ₄	6.65	6.95	13.25	90	104	90	monoclinic
Berkovite	U ₂ O ₇ 12H ₂ O	14.874	11.093	5.888	90	90	90	orthorhombic
MnSi ₂	Mn ₂ Si	3.722	3.722	3.722	90	90	90	cubic
MnB ₂	Mn ₂ B ₃	3.007	3.007	3.037	90	90	120	hexagonal
Mandarinite	Mn ₂ Si ₂	6.91	6.91	4.814	90	90	120	hexagonal
Lechite	Fe ₂ Si ₂	2.684	2.684	5.128	90	90	90	tetragonal
Fe ₂ Si ₂	Fe ₂ Si ₂	4.9452	4.9452	3.0442	90	90	90	tetragonal
Pyrenonite	Ca ₂ Ta ₂ O ₇	11.068	7.505	5.378	90	90	90	orthorhombic
Na ₂ Si ₂ O ₇	Na ₂ Si ₂ O ₇	6.667	6.667	10.854	90	90	120	hexagonal
Montroydite	Hg ₂ O	8.6179	5.5308	3.5219	90	90	90	orthorhombic
Sinole	Si ₂ N ₂ O ₂	8.843	5.478	4.889	90	90	90	orthorhombic
Aurostibite	Au ₂ Sb ₂	6.6583	6.6583	6.6583	90	90	90	cubic

Crystal information

Name:

Formula:

Basic info. Atom info. Ref. EOS

Cell constants: a b c α β γ Crystal System:

Symmetry:

Point Group:

Space Group:

Cell Volume: 0.0000 Å³ Cell Mass: 0.0000 $\times 10^{-21}$ g

Molar Volume: NaN cm³/mol Molar Mass: NaN g/mol

Density: 0.0000 g/cm³ Profile color:

Crystal database

The database is based on "ABCSD". Please be sure to cite the following reference when publishing the data: Downs, R.T. and Hall-Wallace, M. (2003) The American Mineralogist Crystal Structure Database. American Mineralogist 88, 247-250.

Search

Main window で「Crystal parameter」アイコンをクリックす

ると上のような sub window が立ち上がります。この window 上で、回折ピークを表示したい結晶の種類や、回折ピークの表示方法などを設定します。

4.1. Diffraction peak option

回折線の表示に関する設定を行います。

Show peaks over profile

プロファイルデータに重ねて回折線を表示するかどうかを選択します。

Calculate Intensity Ratio

構造データから回折強度(の比)を計算するかどうかを選択します。原子位置が入力されていないとチェック状態にかかわらず計算されません。

Scalable Intensity

強度比を変えずに、回折線全体をスケーリングできるかどうかを選択します。

Show peaks under profile

プロファイル下部に回折ピークを表示するかどうかを設定します。

Peak height

プロファイル下部に表示するピークの高さ(ピクセル単位)を設定します。

Combine adjacent peaks

結晶学的には非等価でも、 2θ が近いピーク、あるいは全く同じになるピークの強度をまとめて表示するかどうかを選択します。たとえば立方晶系では (333) と (115) 面は非等価にもかかわらず全く同じ **d-spacing** を持つため観測上は重なってしまいます。このような場合、このチェックボックスをチェックすることで強度をまとめて表示することが出来ます。

Threshold

どれくらい近いピークならまとめて表示するかを選択します。単位はオングストロームです。

Hide peak below

最強線と比べて低すぎるピークを消去するかどうかを選択します。最強線に対する比率で指定します。

Show peak indices for ...

回折線の指数を、すべてのチェックしている結晶に対して表示するか(All checked crystals)、選択している結晶の

みに表示するか(only selected crystal)を選択します。

4.2. Crystal チェックリスト

これはメイン画面の **Profile** チェックリストと同一の情報を表示します。チェックされている結晶はメイン画面で回折線が表示されます。

上下矢印ボタン

結晶の順番を変更できます。(1-6 個目は EOS のために予約されていて変更できません。)

Add ボタン

右の画面(後述)で設定した結晶をリストに新規に追加します。

Replace ボタン

右の画面(後述)で設定した結晶を現在選択されている結晶と入れ替えます。

Delete ボタン

現在選択されている結晶をリストから削除します。

Delete All ボタン

全ての結晶をリストから削除します。

4.3. Crystal Information

結晶の細かい情報が表示されます。 別途記載。

2万件以上の結晶構造についての検索およびインポート機

Crystal database

The database is based on 'AMCSD'. Please be sure to cite the following reference when publishing the data: Downs, R.T. and Hall-Wallace, M.

2003 The American Mineralogist Crystal Structure Database, American Mineralogist 88, 247-250.

Name	Density	Formula	a	b	c	α	β	γ	Crystal System
Ascorite	6.551	Fe ₂ U ₂ Si ₂ O ₈	13.21	13.21	13.21	90	104	90	monoclinic
Berkovite	3.4028	U ₂ SiO ₂ HfO ₂	14.074	11.093	5.688	90	90	90	orthorhombic
Amesite	6.891	Mn ₂ SiO ₃	5.722	7.722	7.722	90	90	90	orthorhombic
MB2	5.3458	Mn ₂ SiO ₃	3.007	3.007	3.037	90	90	120	hexagonal
Mavlyanovite	5.9885	Mn ₂ SiO ₃	6.91	6.91	4.814	90	90	120	hexagonal
Linhite	5.0353	Fe Si ₂	2.684	2.684	5.128	90	90	90	tetragonal
Ni Ti ₂	4.9132	Ti ₂ N	4.9452	4.9452	3.042	90	90	90	tetragonal
Pyrronite	7.6420	Ca Ti ₂ O ₇	11.068	7.505	5.378	90	90	90	orthorhombic
Nahg2O2	7.5053	Na ₂ Hg ₂ O ₂	6.667	6.667	10.054	90	90	120	hexagonal
Montroydite	11.1887	Hg ₂ O	6.6129	5.5208	3.5219	90	90	90	orthorhombic
Smole	2.8437	SiO ₂	0.943	0.943	5.472	4.035	90	90	orthorhombic
Auerorbite	9.9117	Au ₂ Si ₂	6.6583	6.6583	6.6583	90	90	90	cubic

能を提供します。このデータベースは"American Mineralogist Crystal Structure Database"に基づくものです。この結晶データを使用する際は、<http://rruff.geo.arizona.edu/AMS/amcsd.php> をよく読んで、次の文献を必ず引用してください。

Downs, R.T. and Hall-Wallace, M. (2003) The American Mineralogist Crystal Structure Database. American Mineralogist 88, 247-250.

Table

データベースに含まれている結晶が表示されます。検索条件を入力されている場合は、特定の条件に合った結晶のみが表示されます。

Table 中の任意の結晶を選択すると、Main window の "Crystal information" にその結晶の情報が転送されます。Crystal list"に追加したい場合は、"Add"あるいは"Replace" ボタンを押してください。

Search options

検索条件を入力します。入力した後は“Search”ボタンあるいはエンターキーを押してください。

Name

結晶の名称を入力します。

Element

Periodic Table

may or not include must include must exclude

La lanthanide
Ac: actinide

OK

Periodic Table ボタンを押すと、別ウィンドウが立ち上がります。ここで検索対象の元素を選択します。各元素のボタンは押すごとに状態が切り替わります。ウィンドウ上部の "may or not include", "must include", "must exclude" ボタンを押すと、全元素の状態を切り替えることができます。

Reference

論文名、雑誌名、著者名を入力します。

Crystal system

結晶系を入力します。

Cell Param

格子定数と許容する誤差を入力します。

d-spacing

強度の強い結晶面の d-spacing と許容する誤差を入

力します。

Density

密度と許容する誤差を入力します。

5. Equation of state

Equation of States

Temperature: 300 K T_0 : 300 K

☒ Au (Gold)
 ☒ Pt (Platinum)
 ☒ NaCl (B1)
 ☒ NaCl (B2)
 ☒ MgO (Periclase)
 ☒ Al2O3 (Corundum)
 ☒ Ar
 ☒ Re
 ☒ Mo

Gold

ao 4.07825 Å a 4.07825 Å

Jamieson (82) 0.000 GPa

Anderson (89) 0.000 GPa

Sim (02) 0.000 GPa

Tsuchiya (03) 0.000 GPa

Yokoo (09) 0.000 GPa

Frantidono (21) 0.000 GPa

NaCl B2

ao 0 Å a 2.93 Å

Sata (02) (Pt) 0.000 GPa

Sata (02) (Mg) 0.000 GPa

Ueda+(08) 0.000 GPa

Sakai+(11) BM 0.000 GPa

Sakai+(11) Vinet 0.000 GPa

Periclase

ao 4.2112 Å a 4.2112 Å

Jackson (98) 0.000 GPa

Dewaale (00) 0.000 GPa

Aizawa (06) 0.000 GPa

Tange (09) Vinet 0.000 GPa

Tange (09) BM 0.000 GPa

Platinum

ao 3.9231 Å a 3.9231 Å

Jamieson (82) 0.000 GPa

Holmes (89) 0.000 GPa

Matsui (09) 0.000 GPa

Yokoo (09) 0.000 GPa

Frantidono (21) 0.000 GPa

Corundum

v0 255.894 Å³ v 255.894 Å³

Dubrovinsky (98) 0.000 GPa

Ar

ao 0 Å a 4.0786 Å

Ross et al. (86) 0.000 GPa

Jephcoat (98) 0.000 GPa

Re

v0 29.42795 Å³ v 29.42795 Å³

Zha et al. (04) 0.000 GPa

Anz (##) 0.000 GPa

Sakai. (##) 0.000 GPa

Dub. (##) 0.000 GPa

Mo

v0 31.14 Å³ v 31.14 Å³

Huang+(16)MGD 0.000 GPa

Zhao+ (00) 0.000 GPa

Main window で、「Equation of state」アイコンをクリックすると、上のような画面が立ち上がります。これは標準物質の状態方程式から圧力を計算するためのツールです。画面上部のチェックボックスから圧力を求めたい物質を選択すると、画面下部にその計算結果が表示されます。

直接数値を入力しても出来ますが、メイン画面で回折線を動かしたときも即座に計算結果に反映されます。

FormFitting

☒ Flexible Crystal

☐ Au

☐ Pt

☐ NaCl (B1-type)

☐ NaCl (B2-type)

☐ MgO (periclase)

☒ Al2O3 (cor.)

☐ Ar

☐ Re

☐ Si

☐ Be

☐ C (Graphite)

☐ C (diamond-cub.)

☐ C (diamond-hex.)

Effective digit 5

Save as CSV

Copy to Clipboard

	HKL	Calc X	Func X	Sym PV X Err	FWHM	Intensity	Weight	R
<input checked="" type="checkbox"/>	0 1 2	25.53	Sym PV	25.53	0	0.1	0	0
<input type="checkbox"/>	1 0 4	35.086	Sym PV	35.086	0	0.1	0	0
<input type="checkbox"/>	1 1 0	37.706	Sym PV	37.706	0	0.1	0	0
<input type="checkbox"/>	0 0 6	41.601	Sym PV	41.601	0	0.1	0	0
<input type="checkbox"/>	1 1 3	43.272	Sym PV	43.272	0	0.1	0	0
<input type="checkbox"/>	2 0 2	46.091	Sym PV	46.091	0	0.1	0	0
<input type="checkbox"/>	0 2 4	52.45	Sym PV	52.45	0	0.1	0	0
<input type="checkbox"/>	1 1 6	57.388	Sym PV	57.388	0	0.1	0	0
<input type="checkbox"/>	2 1 1	59.622	Sym PV	59.622	0	0.1	0	0
<input type="checkbox"/>	1 2 2	61.009	Sym PV	61.009	0	0.1	0	0
<input type="checkbox"/>	0 1 8	61.183	Sym PV	61.183	0	0.1	0	0

Fitting option

Search Range ± 0.100 unit

Apply to all

☐ Initial FWHM 0.100 unit

Apply to all

Peak function

Simple Search

Apply to all

☒ Symmetric Pseudo Voigt
 ☐ Split Pseudo Voigt

☐ Symmetric Pearson VII
 ☐ Split Pearson VII

☐ Pattern Decomposition

☐ in each crystal
 ☐ between crystals

Remove peaks

New profile name

2_1_1.csv_new

Remove fitted peaks

Send d-values

Send d-values to CellFinger & AtomicPositionFinder

Optimized cell constants

a 0.000000 \pm NA \AA
 b 0.000000 \pm NA \AA
 c 0.000000 \pm NA \AA
 α 0.00000 \pm NA $^\circ$
 β 0.00000 \pm NA $^\circ$
 γ 0.00000 \pm NA $^\circ$
 V 0.000000 \pm NA \AA^3

Apply to the crystal

Copy to Clipboard

6. Fitting diffraction peaks

このツールはピークプロファイルを適当な関数でフィッティングし、 2θ から d 値をもとめ、最小 2 乗法で格子定数を求めるという一連の作業(以下)を行います。

1. 対象となる結晶をリストから選択しておく。
2. 回折線をマウスでドラッグしてピークになるべく重なるように調節しておく。
3. フィッティングを行いたい回折線の指数をチェックリストボックスから選択する。
4. 独立な指数を何本か選んで最小 2 乗法が計算可能になると、画面右下に最確な格子定数が表示される。
5. **Change** ボタンをおすと格子定数がプログラム本体の結晶に反映される。

5.1. Fitting Option

ピークプロファイルをフィッティングする際の細かい設定が出来ます。

Search range / Initial FWHM

「Search range」はフィッティングする範囲を設定します。すなわち計算上の回折線位置から \pm Search Range 分をフィッティングの対象とします。

「Initial FWHM」は、プロファイル関数の初期半値幅を指定します。

Peak function

Simple Search

現在の計算上の回折線の位置から \pm Search range の範囲でもっとも強度の強いところをピーク位置として認識します。

Symmetric Pseudo Voigt

左右対称の擬似フォークト関数でフィッティングを行います。

Symmetric Pearson VII

左右対称のピアソン(VII)関数でフィッティングを行います。

Split Pseudo Voigt

左右非対称の擬似フォークト関数でフィッティングを行います。

Split Pearson VII

左右非対称のピアソン(VII)関数でフィッティングを行います。

Pattern Decomposition

選択された2本以上の回折線の Search Range に重なり合いがあるとき、ピーク分解を行うかどうかを選択します。

「in each crystal」を選択すると結晶ごとに独立にピーク分解を行います。「between crystal」を選択するとすべての結晶に対してピーク分解を行います。