PDIndexer Manual

Copyright© Yusuke SETO

[1. Overview 1](#_Toc92368273)

[1.1. License 1](#_Toc92368274)

[1.2. 必要/推奨動作環境 1](#_Toc92368275)

[2. Main window 1](#_Toc92368276)

[2.3. Main area 1](#_Toc92368277)

[2.1. ファイルメニュー 2](#_Toc92368278)

[2.2. タブメニュー 3](#_Toc92368279)

[2.4. Profile チェックリスト 3](#_Toc92368280)

[2.5. Crystal チェックリスト 4](#_Toc92368281)

[3. Profile parameter 4](#_Toc92368282)

[3.1. Profile チェックリスト 4](#_Toc92368283)

[3.2. Profile processing 4](#_Toc92368284)

[3.3. Axis setting 5](#_Toc92368285)

[3.4. Profile operator 5](#_Toc92368286)

[4. Crystal Parameter 5](#_Toc92368287)

[4.1. Diffraction peak option 6](#_Toc92368288)

[4.2. Crystal チェックリスト 6](#_Toc92368289)

[4.3. Crystal Information 6](#_Toc92368290)

[4.4. Crystal Database 7](#_Toc92368291)

[5. Equation of state 7](#_Toc92368292)

[6. Fitting diffraction peaks 7](#_Toc92368293)

[5.1. Fitting Option 8](#_Toc92368294)

# 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](https://github.com/seto77/ReciPro/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。たとえ、このソフトウェアを利用したことで何か問題が起こったとしても、作者はなんの責任も負いません。

## 1.2. 必要/推奨動作環境

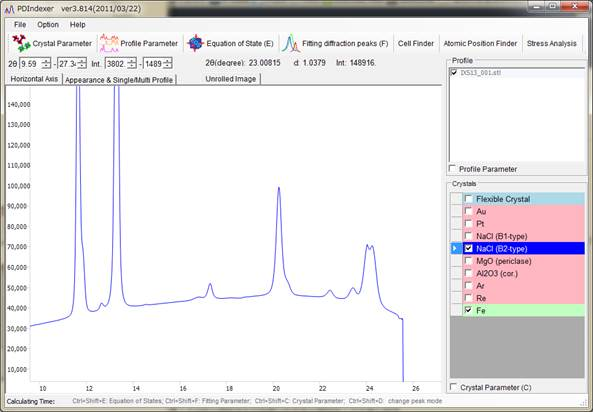
PDIndexerが動作するための必要環境は、

* .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。

## グラフ, ヒストグラム 自動的に生成された説明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。

## 2.1. ファイルメニュー

### グラフィカル ユーザー インターフェイス, テキスト, アプリケーション 自動的に生成された説明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。

### グラフィカル ユーザー インターフェイス, テキスト, アプリケーション 自動的に生成された説明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。

### グラフィカル ユーザー インターフェイス, アプリケーション, Word 自動的に生成された説明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。

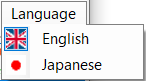
#### Hint

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ディテクタを用いた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)。

# グラフィカル ユーザー インターフェイス, アプリケーション 自動的に生成された説明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。

## グラフィカル ユーザー インターフェイス, テキスト, アプリケーション 自動的に生成された説明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。

## グラフィカル ユーザー インターフェイス, テキスト, アプリケーション, メール 自動的に生成された説明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(θ)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

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Savizky-Glay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±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、求まった関数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

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 Kα2

選択したプロファイルが、Kα1とKα2を分離していないX線であり、かつKα1を指定して読み込んでいる場合、これをチェックするとKα2由来の回折強度が除去されます。

### 6. Background

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して指定することが出来ます。

### 7. Normalize intensity

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。

## グラフィカル ユーザー インターフェイス, アプリケーション 自動的に生成された説明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、入射線のエネルギーの値などを変更します。

## グラフィカル ユーザー インターフェイス, テキスト, アプリケーション 自動的に生成された説明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。

# グラフィカル ユーザー インターフェイス, アプリケーション 自動的に生成された説明4. Crystal Parameter

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。

## テーブル 自動的に生成された説明4.4. Crystal Database

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。

#### パソコンの画面 中程度の精度で自動的に生成された説明Element

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出来ます。

#### 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。

# グラフィカル ユーザー インターフェイス 自動的に生成された説明5. Equation of state

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。

# グラフィカル ユーザー インターフェイス, アプリケーション, テーブル 自動的に生成された説明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±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±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。