Anaconda と Jupyter Notebook を用いた Python プログラミング（5）

※このドキュメントは相互参照型のハイパーテキストを意図しており，Web サイトおよびブックマーク，図表，数式，補足説明へのリンク（参照）を下線付き青文字で表し，（↩）の記号は初出の参照元へのリンクを表す。

5．ICDD PDF-5+ データベースの利用

この節では ICDD PDF-5+ データベースの利用の仕方を示すが，名古屋工業大学で ICDD PDF-5+ データベースを参照できる端末は附属図書館に 1 台設置されているのみなので，学生実験の中で直接 ICDD PDF-5+ を参照する作業は行わない。

5－1　物質と構造のデータベースの利用

物質と結晶構造，回折強度のデータベースとして，国際回折データセンター (International Centre for Diffraction Data; ICDD（アイシーディーディー）) の発行する粉末回折ファイル (Powder Diffraction File; PDF（ピーディーエフ）) を参照することが，国際的には標準的なこととなっている。一方で，ICDD 以外の組織から無料あるいは有料で提供されるデータベースも多く存在する。ICDD は世界で唯一，国際標準化機構 (International Organization for Standardization; ISO) から ISO 9001:2015 認証（品質管理システム quality management system; QMS 認証）を受けたデータベース管理組織であり，ICDD の発行するデータベースは，他のデータベースと比較して情報の信頼性が高いと考えられる面がある。

名古屋工業大学では附属図書館で ICDD PDF-5+（ピーディーエフ・ファイブ・プラス）データベースを利用することができる。（補足 5.1.A）

NIST SRM640d 標準シリコン Si 粉末の格子定数については，NIST の発行した保証書に記載された 22.5°C での値 $a = 5.431\,23 \pm 0.000\,08$ Å と，例えば Bergamin らの報告による線熱膨張係数値 $2.581 \times 10^{-6}\ \mathrm{K}^{-1}$ (Bergamin et al., 1997) を用いて，測定が 22.5°C と異なる温度で行われたのであれば，熱膨張による格子定数変化の補正も施した値を用いる。

この演習では，ICDD PDF-5+ を参照データとして実測の XRD データを解析する方法を学ぶために，PDF-5+ に掲載される PDF 01-086-4266 データ（カード）を用いることとす

る。配布フォルダ “20260726ceramics_practice” 中の “ICDD-PDF” サブフォルダに PDF 01-086-4266 データのコピーを配置する。（補足 5.1.B）

5－2　ICDD PDF-5+ データベースの利用のしかた

ICDD PDF-5+ 2025データベースでは，物質の構造を検索するために多様な方法が提供されているが，化学組成に基づいて検索をするのが基本的な方法である。

PDF-5+ の初期画面では検索 (Search) 画面が Figure 5.2.1 のような状態で表示される（ただし，使用履歴によって異なる状態になる場合もある）。

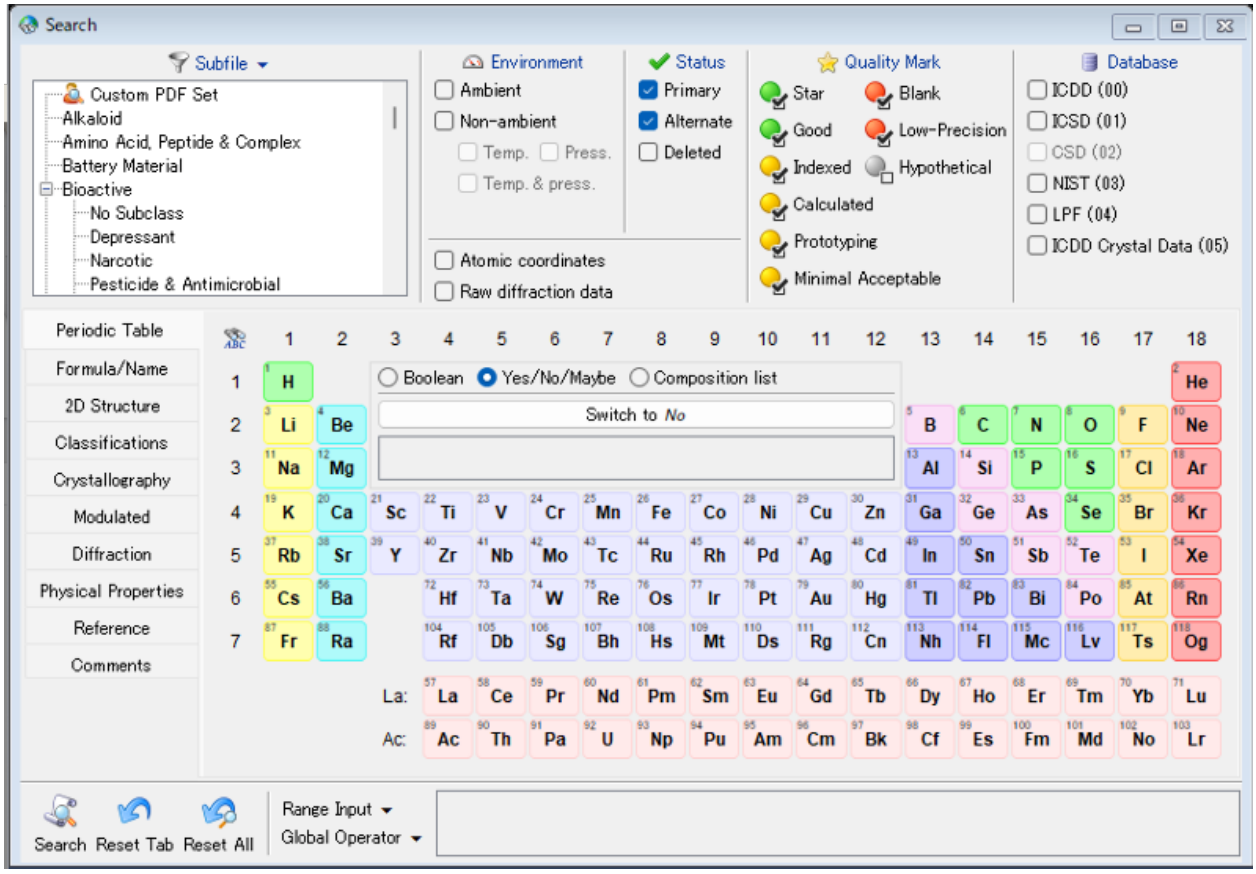


Figure 5.2.1　ICDD PDF-5+ 2024 の初期検索画面（↩）

Figure 5.2.1 に示すような状態から，例えば「シリコン Si のみを含み，他の元素を含まず，常温常圧で測定されたデータ」という条件で検索を行うためには，中央の「◯ Yes/No/Maybe」 ラジオボタンを選択した状態で [Switch to No] ボタンをクリック（タップ）して「すべての元素が選択されない」状態にしてから，周期表の「Si」のセルを２回クリック（タップ）すれば「Si のみが含まれる」という条件を設定できる。さらに画面上部の「Environment」（環境）セクションの 「□ Ambient」にチェックを入れれば「常温常圧で測定されたデータ」と設定される。このとき検索画面は Figure 5.2.2 のように変化す

る。この状態で画面左下の [Search] ボタンをクリック（タップ）すれば目的の条件での検索がはじまる。

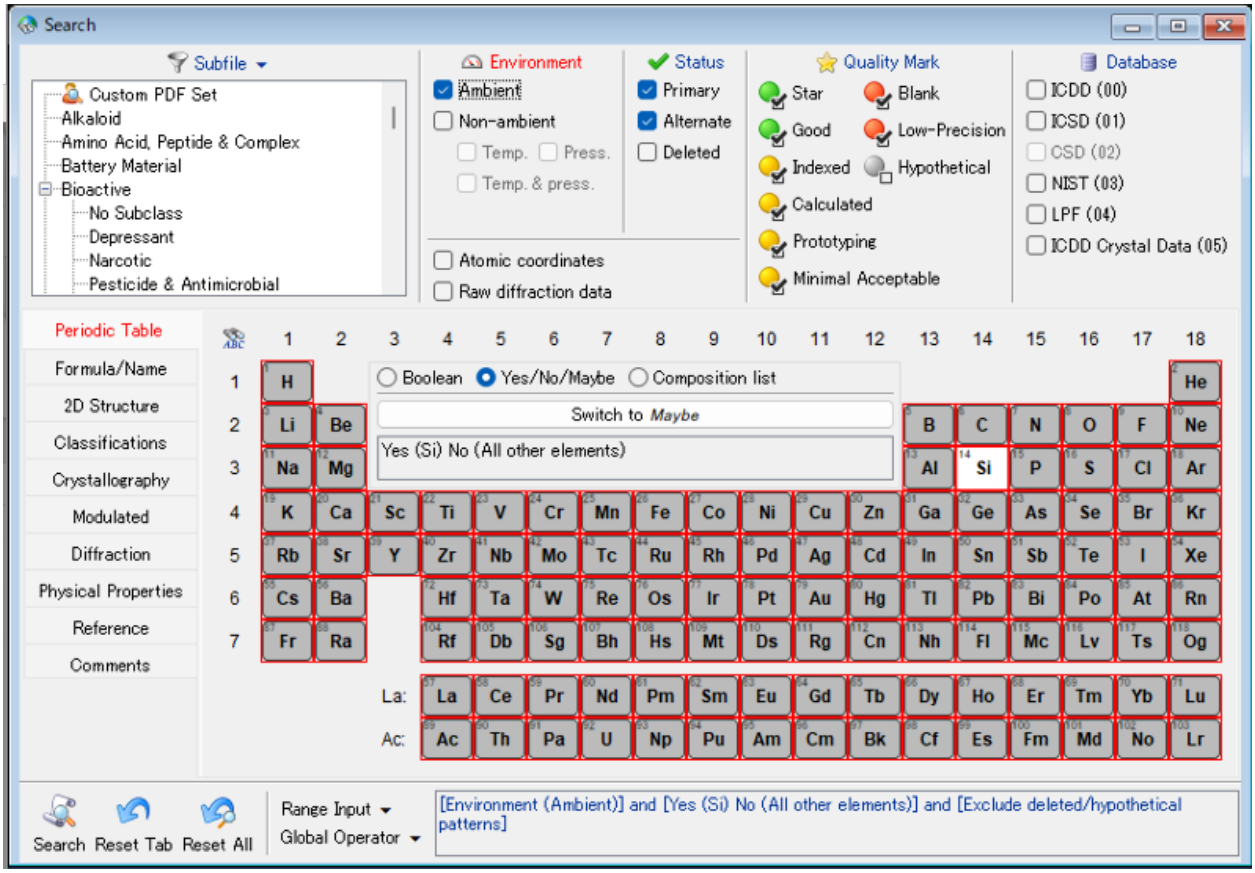
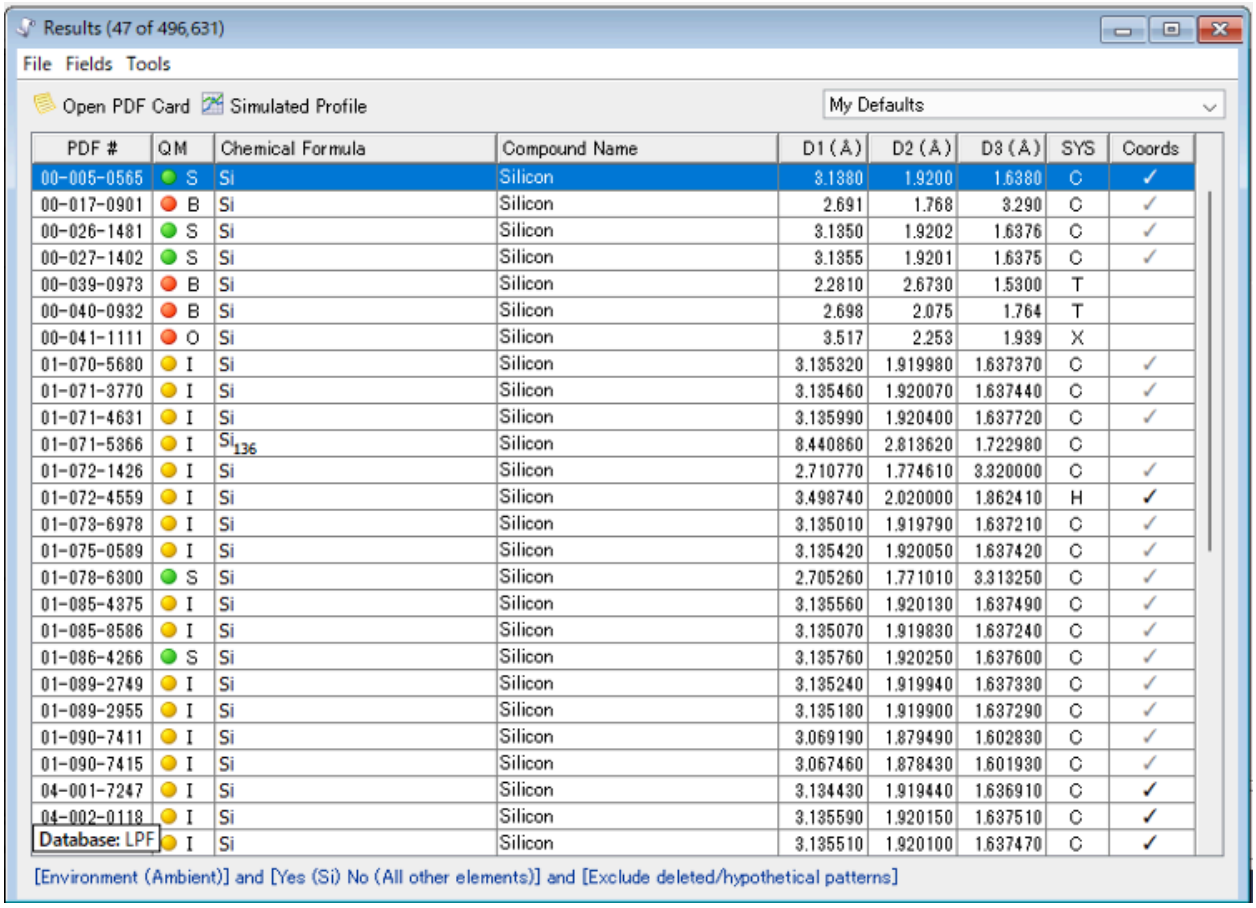


Figure 5.2.2　ICDD PDF-5+ の初期検索画面に検索条件を設定したときの画面（↩）

設定した検索条件での検索が終了すれば，例えば Figure 5.2.3 に示すような「Results (47 of 496,631)」ウィンドウが表示され，検索条件にヒットした 47 件のリストが示される。



Results (47 of 496,631)

File Fields Tools

Open PDF Card | Simulated Profile | My Defaults

PDF #	QM	Chemical Formula	Compound Name	D1 (Å)	D2 (Å)	D3 (Å)	SYS	Coords
00-005-0565	S	Si	Silicon	3.1380	1.9200	1.6380	C	✓
00-017-0901	B	Si	Silicon	2.691	1.768	3.290	C	✓
00-026-1481	S	Si	Silicon	3.1350	1.9202	1.6376	C	✓
00-027-1402	S	Si	Silicon	3.1355	1.9201	1.6375	C	✓
00-039-0973	B	Si	Silicon	2.2810	2.6730	1.5300	T	
00-040-0932	B	Si	Silicon	2.698	2.075	1.764	T	
00-041-1111	O	Si	Silicon	3.517	2.253	1.939	X	
01-070-5680	I	Si	Silicon	3.135320	1.919980	1.637370	C	✓
01-071-3770	I	Si	Silicon	3.135460	1.920070	1.637440	C	✓
01-071-4631	I	Si	Silicon	3.135990	1.920400	1.637720	C	✓
01-071-5366	I	Si_{136}	Silicon	8.440860	2.813620	1.722980	C	
01-072-1426	I	Si	Silicon	2.710770	1.774610	3.320000	C	✓
01-072-4559	I	Si	Silicon	3.498740	2.020000	1.862410	H	✓
01-073-6978	I	Si	Silicon	3.135010	1.919790	1.637210	C	✓
01-075-0589	I	Si	Silicon	3.135420	1.920050	1.637420	C	✓
01-078-6300	S	Si	Silicon	2.705260	1.771010	3.313250	C	✓
01-085-4375	I	Si	Silicon	3.135560	1.920130	1.637490	C	✓
01-085-8586	I	Si	Silicon	3.135070	1.919830	1.637240	C	✓
01-086-4266	S	Si	Silicon	3.135760	1.920250	1.637600	C	✓
01-089-2749	I	Si	Silicon	3.135240	1.919940	1.637330	C	✓
01-089-2955	I	Si	Silicon	3.135180	1.919900	1.637290	C	✓
01-090-7411	I	Si	Silicon	3.069190	1.879490	1.602830	C	✓
01-090-7415	I	Si	Silicon	3.067460	1.878430	1.601930	C	✓
04-001-7247	I	Si	Silicon	3.134430	1.919440	1.636910	C	✓
04-002-0118	I	Si	Silicon	3.135590	1.920150	1.637510	C	✓
Database: LPF	I	Si	Silicon	3.135510	1.920100	1.637470	C	✓

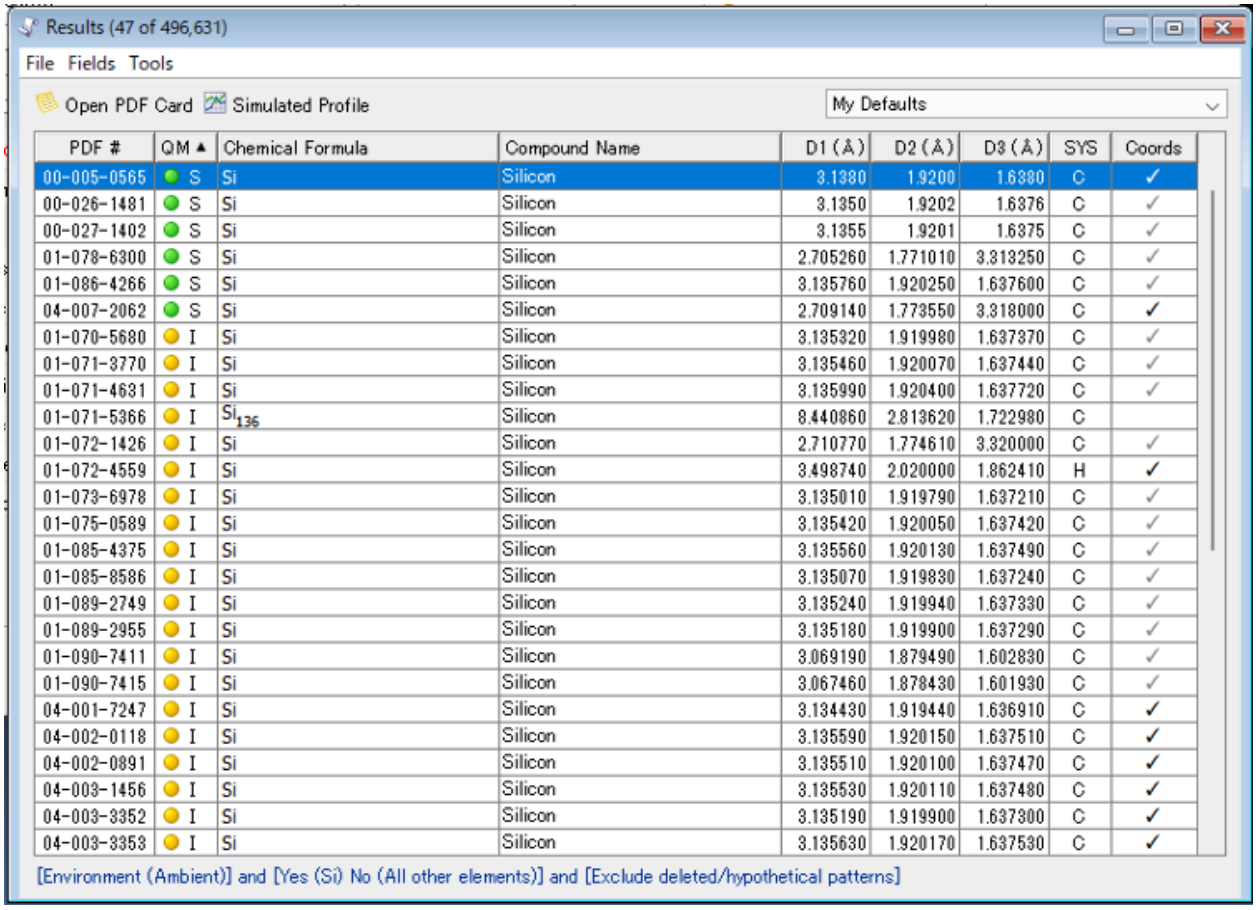
[Environment (Ambient)] and [Yes (Si) No (All other elements)] and [Exclude deleted/hypothetical patterns]

Figure 5.2.3　ICDD PDF-5+ の検索結果の画面の例（↩）

リストタイトル部の | PDF # | QM | Chemical Formula | … などのいずれかをクリック（タップ）すれば，該当する項目について上位順または下位順（降順または昇順）に表示順を変更できる。

検索結果を品質記号 (Quality Mark; QM) 順に並べ替えたリスト表示を Figure 5.2.4 に示す。

Figure 5.2.4 に示した結果から，ICDD PDF-5+ 2024 には，Si の最高品質（星品質） (Star quality; S) データが 6 件掲載されていることがわかる。



Results (47 of 496,631)

File Fields Tools

Open PDF Card Simulated Profile My Defaults

PDF #	QM ▲	Chemical Formula	Compound Name	D1 (Å)	D2 (Å)	D3 (Å)	SYS	Coords
00-005-0565	S	Si	Silicon	3.1380	1.9200	1.6380	C	✓
00-026-1481	S	Si	Silicon	3.1350	1.9202	1.6376	C	✓
00-027-1402	S	Si	Silicon	3.1355	1.9201	1.6375	C	✓
01-078-6300	S	Si	Silicon	2.705260	1.771010	3.313250	C	✓
01-086-4266	S	Si	Silicon	3.135760	1.920250	1.637600	C	✓
04-007-2062	S	Si	Silicon	2.709140	1.773550	3.318000	C	✓
01-070-5680	I	Si	Silicon	3.135320	1.919980	1.637370	C	✓
01-071-3770	I	Si	Silicon	3.135460	1.920070	1.637440	C	✓
01-071-4631	I	Si	Silicon	3.135990	1.920400	1.637720	C	✓
01-071-5366	I	Si_{136}	Silicon	8.440860	2.813620	1.722980	C	
01-072-1426	I	Si	Silicon	2.710770	1.774610	3.320000	C	✓
01-072-4559	I	Si	Silicon	3.498740	2.020000	1.862410	H	✓
01-073-6978	I	Si	Silicon	3.135010	1.919790	1.637210	C	✓
01-075-0589	I	Si	Silicon	3.135420	1.920050	1.637420	C	✓
01-085-4375	I	Si	Silicon	3.135560	1.920130	1.637490	C	✓
01-085-8586	I	Si	Silicon	3.135070	1.919830	1.637240	C	✓
01-089-2749	I	Si	Silicon	3.135240	1.919940	1.637330	C	✓
01-089-2955	I	Si	Silicon	3.135180	1.919900	1.637290	C	✓
01-090-7411	I	Si	Silicon	3.069190	1.879490	1.602830	C	✓
01-090-7415	I	Si	Silicon	3.067460	1.878430	1.601930	C	✓
04-001-7247	I	Si	Silicon	3.134430	1.919440	1.636910	C	✓
04-002-0118	I	Si	Silicon	3.135590	1.920150	1.637510	C	✓
04-002-0891	I	Si	Silicon	3.135510	1.920100	1.637470	C	✓
04-003-1456	I	Si	Silicon	3.135530	1.920110	1.637480	C	✓
04-003-3352	I	Si	Silicon	3.135190	1.919900	1.637300	C	✓
04-003-3353	I	Si	Silicon	3.135630	1.920170	1.637530	C	✓

[Environment (Ambient)] and [Yes (Si) No (All other elements)] and [Exclude deleted/hypothetical patterns]

Figure 5.2.4　ICDD PDF-5+ の検索結果を品質記号順に並べ替えた結果（↩）

検索結果リストに表示する項目は，ユーザーが好みに応じて変更できる。表示項目を変更するためには，「Results」ウィンドウの「Fields」メニューから，追加／削除する項目を選択する。

デフォルト表示項目から追加すると良いものに，「原子座標 (atomic coordinates) を含むデータ」であることを意味する「Coords」がある。この項目は「Results」ウィンドウの「Fields」メニューから「Fileds ▶ ICDD Filters ▶ Coords」と選択すれば有効化／無効化される。原子座標の記載されたデータであれば，国際結晶学連合 (International Union of Crystallography; IUCr) の策定した CIF（シフ）ファイル (Crystallographic Information File) を作成できるので，VESTA3 (Momma & Izumi, 2011) を使えば結晶構造投影図の描画や中性原子モデルでの回折強度の計算もできる。また，Rietveld（リートベルト）最適化手法を用いた定量相組成分析の目的で利用することもできる。

Figure 5.2.4 に示した検索結果から，最高品質データ 6 件のうち，原子位置の記載されたデータは黒字チェック記号 ✓ で表される 1 件あり，他の 5 件は，そのデータ自体は原子座標データを持たないが，原子座標の記載された他のデータへの相互参照 (cross reference) を持つことを意味する灰色チェック記号 ✓ の付けられていることがわかる。

「Results」ウィンドウのリストに表示される D1 (Å), D2 (Å), D3 (Å) の値は第 1，第 2，第 3 最強線の面間隔値 (interplanar distance) を表す。Si の星品質データ 6 件の面間隔値を比較すれば，この 6 件は化学組成は共通だが，結晶構造の異なる 2 種類の多形 (polymorph) に分類されることがわかる。このうち最高強度反射面間隔 $d_1 \sim 2.71$ Å の 2 件は高圧での安定相に相当する II 型の多形であることは，この 2 件のデータ（カード）を表示する行をダブルクリック（ダブルタップ）して開き，内容を見ればわかる。

Si の常温・常圧での安定相である I 型の多形のうち，格子定数 $a = 5.431$ Å とされ，NIST SRM 640d 保証書記載値 $a = 5.431\,23 \pm 0.000\,08$ Å と実質的に一致する PDF 01-086-4266 を参照することとする。

Figure 5.2.4 に示すリストで，PDF 01-086-4266 に相当する行をダブルクリック（ダブルタップ）すれば，Figure 5.2.5 に示すような「Si - 01-086-4266」ウィンドウが表示される。

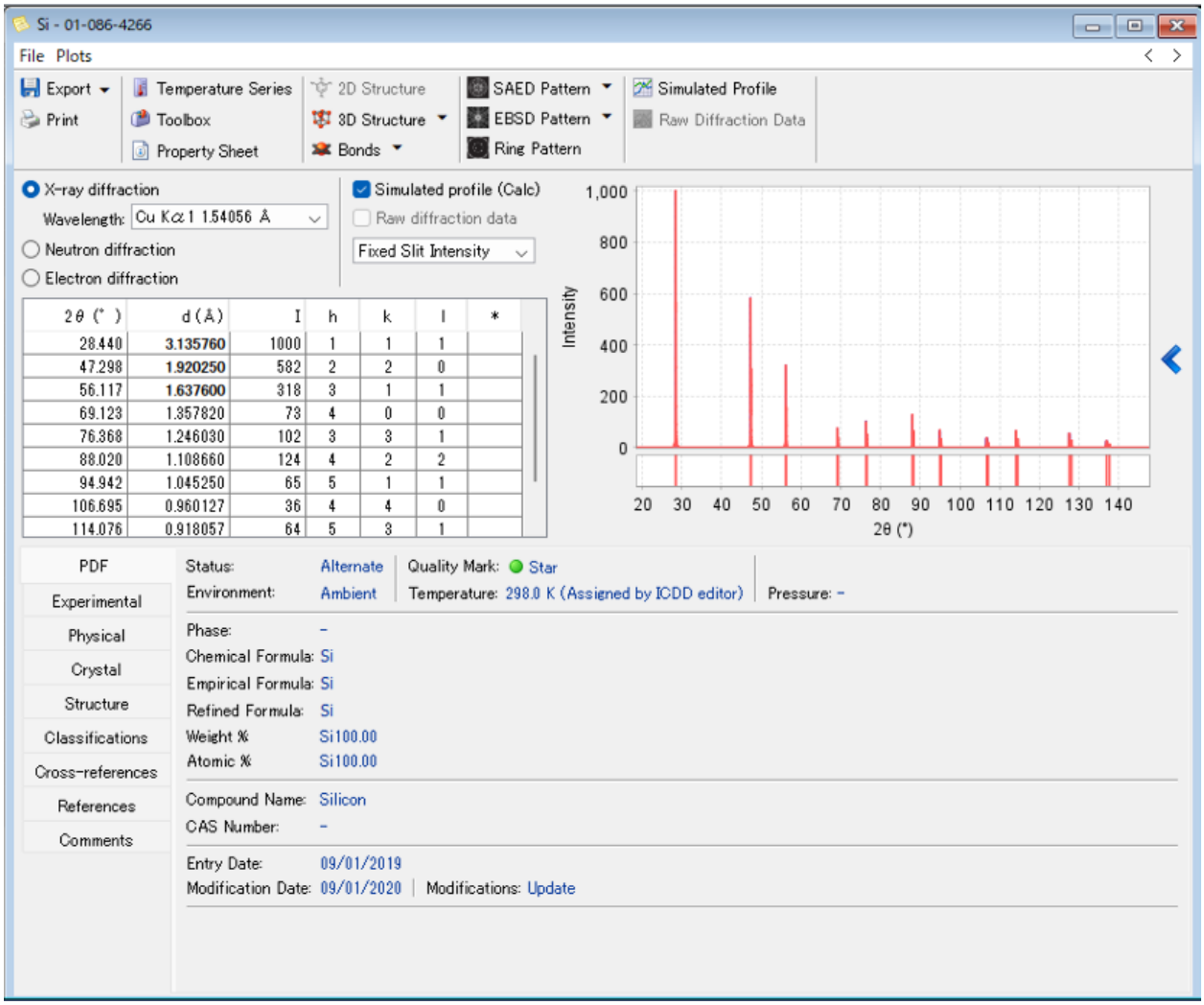


Figure 5.2.5 ICDD PDF-5+ 2024「Si - 01-086-4266」ウィンドウ（↩）

ICDD PDF-5+ データの多くには結晶学的な情報（格子定数と原子座標，原子変位パラメータ）なども記載されるが，回折面の面間隔 (inteplanar distance) の値（d 値（ディー・ち））と回折強度 (diffraction intensity) I を対応づけたリスト「$d-I$ リスト」（ディー・アイ・リスト）が粉末 XRD データを解析するための中核的な情報である。特定の d 値は，結晶構造と反射指数 hkl で特定される回折面に対応づけられ，物質固有の値である。

ブラッグの法則 $\lambda = 2d\sin\theta$ から，用いるX線の波長 λ によって回折ピーク角度 2θ は変化する。Figure 5.2.1 では波長 $\lambda = 1.540\,56$ Å の Cu$K\alpha_1$ 特性X線を用いた場合の回折角 2θ の値を示しているが，画面左上「○X-ray diffraction」ラジオボタンが選択されていれば「Cu Kα1 1.54056 Å」と表示されているプルダウンメニューから，異なる波長のX線を用いる場合の回折角 2θ に表示を変更することもできる。

ICDD PDF-5+ の標準ユーザ・インターフェス「Si - 01-086-4266」ウィンドウの「Export ▼」プルダウン・メニューから，出力ファイルとして

(1) 国際結晶学連合 (International Union of Crystallography; IUCr) の策定した結晶学情報ファイル (Crystallographic Information File; CIF) (*.cif)

(2) ドイツを本拠地とするX線回折装置製造会社 Bruker 社のデータ解析ソフトウェア TOPAS 用の結晶構造情報ファイル (*.str)

(3) ICDD XML ファイル (*.xml)

のいずれかを選択できる。このうち「$d-I$ リスト」を含むのは， XML 形式のファイルに限られる。（補足 5.2.A）

XML 形式のファイルでは， web ページの記述に用いられる HTML 言語 (hyper-text markup language) と同じように，項目ごとに「タグ」を付ける記法が用いられている。Python のコードを使って解読することも特別に困難なことではないが，ここでは「$d-I$ リスト」を含む反射のリストのみを「カンマ区切り値 (comma-separated values; CSV) ファイル」として出力する機能を持つ独立した Python コードを用いることとする。CSV はテキストファイルの形式 (format) のうちの一つで，Jupyter Notebook で内容を閲覧・編集することも， Microsoft Excel などの表計算ソフトによって読み込んでグラフ化することもできる。

5－3　XML-CSV 変換コード xml2csv.py の利用

ICDD PDF-5+ データベースの XML 形式出力から「$d-I$ リスト」を含む反射リストをカンマ区切り値 (CSV) 形式で出力するための Python コードの例 “xml2csv.py” を (Code 5.3.1) に示す。

この Python コードでは，入出力のインターフェスとして「標準入出力 (standard input: stdin, standard output: stdout)」を用いる。文字列処理のために「正規表現 (regular expression)」のライブラリ「re」を用いる。

配布する「20260726ceramics_practice」フォルダと同じように，「 / Documents / 00jikken / 20260726ceramics_practice / ICDD-PDF / Si-01-086-4266 / 」フォルダに PDF-5+ データベースから出力できる “PDF Card 01-086-4266.xml” ファイルが置かれており，「 / Documents / 00jikken / 20260726ceramics_practice / xml2csv /」フォルダに (Code 5.3.1) に示すような Python コードのファイル “xml2csv.py” ファイルが置かれているとする。

(Code 5.3.1) XML-CSV 変換のための Python コード xml2csv.py (↩)

```
##############################################
# xml2csv.py
# Convert ICDD XML file to CSV file
# Coded by T. Ida, Sep. 26, 2022
# Modified by T. Ida, Sep. 28, 2022
# How to use on UNIX:
# ...> cat PDF00-034-0427.xml | python xml2csv.py > PDF00-034-0427.csv
# How to use on Windows 11:
# ...> type PDF00-034-0427.xml | python xml2csv.py > PDF00-034-0427.csv
##############################################
import sys
import re
p = re.compile(r"<[^>]*?>")
lines = sys.stdin.readlines()
print("tt,d,Int,h,k,l")
for line in lines:
    if line.rstrip() == "<intensity>":
        pass
    elif "</theta>" in line:
        dest = p.sub("",line).rstrip()
    elif "</da>" in line:
        dest = dest + "," + p.sub("",line).rstrip()
    elif "</intensity>" in line:
        dest = dest + "," + p.sub("",line).rstrip()
    elif "</h>" in line:
        dest = dest + "," + p.sub("",line).rstrip()
    elif "</k>" in line:
        dest = dest + "," + p.sub("",line).rstrip()
    elif "</l>" in line:
        dest = dest + "," + p.sub("",line).rstrip()
    elif "<F/>" in line:
        print(dest)
    elif line.rstrip() == "</intensity>":
```

```
        pass
```
(↩)

Jupyter Notebook から， Python コード “xml2csv.py” (Code 5.3.1) のように標準入出力 (sdtin, stdout) インターフェスを使うタイプのコンソール・アプリケーションに対してファイル入出力をするためには，例えば以下のようにすれば良い。

ICDD XML ファイルが「 / … / ICDD-PDF / Si-01-086-4266 / 」フォルダに「PDF Card - 01-086-4266.xml」という名称で保存されているとする。「PDF Card - 01-086-4266.xml」 は ICDD PDF-5+ の PDF 01-086-4266 カード画面から「Export…」機能で保存をした場合に，デフォルト設定されるファイル名である。「PDF」と 「Card」，「-」（ハイフン hyphen 記号），「 01-086-4266.xml」 の間に半角スペース記号が挿入されていることに注意する。

「 / … / ICDD-PDF / Si-01-086-4266 / 」フォルダに，例えば “05xml2csv.ipynb” という名称の新規 Notebook を作成する。

コードセルに (Code 5.3.2) のような 1 行のコードを入力して実行する。

（Code 5.3.2）xml2csv.py を利用する Notebook のコードセルの記述の例。ここでは行を折り返して示しているが，コードセルでは改行を入れず，1 行で入力する。（↩）

```
!type "PDF Card - 01-086-4266.xml" | python ../../xml2csv/xml2csv.py >
 PDF01-086-4266.csv
```

(Code 5.3.2) の記述は，Microsoft Windows システムのコマンドプロンプト (cmd.exe) でファイルの内容を表示するために使われる “type” コマンドの出力を python プログラム “xml2csv.py” の標準入力として渡し，さらに “xml2csv.py” の標準出力をテキストファイル “PDF00-086-4266.csv” として保存する意味を持つ。（補足 5.3.A）

Jupyter Notebook のコードセルでは，冒頭の感嘆符記号 (exclamation mark)（エクスクラメイション マーク）「！」は以下が「システムコマンド」あるいは「シェルスクリプト」（Windows 11 の場合にはコマンドプロンプト cmd.exe で用いられるコマンド）であることを示す。縦線記号 (vertical line) 「|」 はパイプ (pipe) と呼ばれ，コマンドの出力を別のコマンドの入力とするときに使う。大なり（だい）記号 (greater than symbol)「＞」は出力リダイレクト (output redirection) と呼ばれることを表すために用いられ，標準出力をコンソール（端末画面）に表示する代わりに，指定した名称のテキストファイルとして保存する場合に使う。

この操作によって，指定した X 線波長での回折角 2θ (°)，面間隔値 d (Å)，相対回折強度 I，反射指数（Laue（ラウエ）指数） h, k, l を CSV 形式で保存した “PDF00-086-4266.csv” という名称のファイル (Output 5.3.1) が作成される。Si では 111 反射から 533 反射まで 11 本の回折ピークの観測されることが予想される。

(Output 5.3.1) XML-CSV 変換 (xml2csv.py) の結果得られる PDF01-086-4266.csv ファイルを Jupyter Notebook で開いたときに表示される画面。ただし古いバージョンの Juputer Notebook では，これと異なる表示になる場合がある。 (↩)

jupyter PDF01-086-4266.csv Last Checkpoint: 56 seconds ago

File Edit View Settings Help

Delimiter: ,

	tt	d	Int	h	k	l
1	28.440	3.135760	1000	1	1	1
2	47.298	1.920250	582	2	2	0
3	56.117	1.637600	318	3	1	1
4	69.123	1.357820	73	4	0	0
5	76.368	1.246030	102	3	3	1
6	88.020	1.108660	124	4	2	2
7	94.942	1.045250	65	5	1	1
8	106.695	0.960127	36	4	4	0
9	114.076	0.918057	64	5	3	1
10	127.524	0.858764	55	6	2	0
11	136.867	0.828265	25	5	3	3

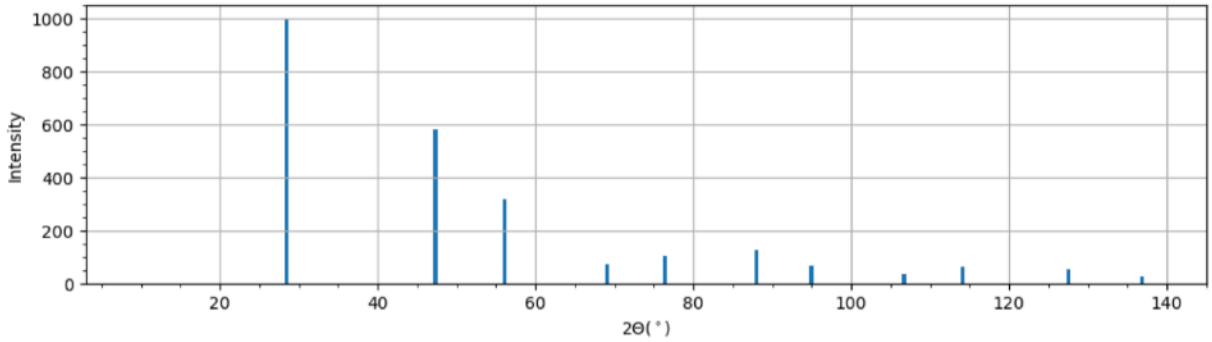
検索

このように作成した *.csv ファイルの内容をグラフに表示するには，例えば以下の (5.3.3) のようなコードを用いれば良い。

(Code 5.3.3) ICDD PDF データのグラフ表示

```
#
# PDF データの表示
#
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
sPDF = 'PDF01-086-4266.csv'
nSkip = 1
source = np.loadtxt(sPDF,dtype='float',delimiter=',',skiprows=1)
fig,ax = plt.subplots(figsize=(12,3))
x,y = source[:,0],source[:,2]
ax.bar(x,y,width=0.5)
ax.set_xlabel(r'$2\Theta (^\circ)$')
ax.set_ylabel('Intensity')
# ax.grid()
ax.minorticks_on()
ax.set_xlim(3,145)
```

(Output 5.3.2) ICDD PDF-5+ データのグラフ表示の例



6 章では，ICDD PDF-5+ データベースから得られた情報を参考にして，実測の Si の回折ピーク位置の解析をし，装置の角度較正（こうせい）を実施することを試みる。

補足

（補足 5.1.A）名古屋工業大学附属図書館での ICDD PDF-5+ データベースの利用のしかた（↩）

名古屋工業大学附属図書館に設置された ICDD PDF-5+ データベースは「シングル・コンピューター・ライセンス」として提供され，名古屋工業大学の教職員と学生は無料で利用することができる。1 階のカウンター前にある「検索用端末」と表示された PC で利用できる。

検索用端末を利用するためには「検索用端末」に備えられた「利用申込書」に必要事項を記入し，カウンターで USB ドングルを借りる。検索結果を持ち帰るためには，USB メモリを持参して，データを持参した USB メモリに保存する方法がわかりやすい。

検索用端末から OneDrive にサインインして，データを OneDrive に保存してからサインアウトする方法もある。（↩）

（補足 5.1.B）NIST 標準 Si 粉末の保証書データと PDF 00-086-4286 データ（↩）

X 線回折装置の角度較正には，本来は PDF 00-086-4286 のデータではなく，標準試料に添付される保証書（サーティフィケイト）(certificate) に記載される回折ピーク角度の参考値 (information values)，あるいは保証された格子定数の値から算出される値を用いるべきだが，NIST SRM640d 保証書記載値と PDF 00-086-4286 データはほぼ一致している。（↩）

（補足 5.2.A）VESTA を用いた回折ピーク位置リストの作成（↩）

ICDD PDF-5+ データベースから結晶学情報ファイル (Crystallographic Information File; CIF（シフ）) (*.cif) 形式のファイルを，例えば “PDF01-086-4266.cif” という名称で出力すれば，可視化ソフトウェア VESTA 3 (Momma & Izumi, 2011) から直接読み込むことができる。

VESTA によって可視化された立体的な結晶構造を確認してから「Utilities」メニューの「Structure Factors…」項目を選択，「Structure Factors」ウィンドウで，Cu $K\alpha_1$ (λ = 1.54059 Å) の場合には

$$d_{\min} = \frac{\lambda}{2} \approx 0.77\ \text{Å}$$

から d(min) (Å) : のテキストボックスに “0.77” を入力，[Calculate] ボタンをクリックして回折ピーク位置のリストを作成すれば，ピーク位置・反射多重度に関して正確な情報が得られる場合が多い。ただしこの方法で得られる回折強度は「中性原子」を仮定した計算により得られるものなので，イオン結晶の場合には実測の強度値に直接対応づけられるわけではない。

ICDD PDF-5+ の [Export ▼] メニューからは *.cif ファイルと *.xml ファイルの両方とも出力して持ち帰るとよい。

さらに ICDD PDF 5+ のウィンドウから [Print] をクリック（タップ）して 「Print Preview」 ウィンドウを開き，「Export」メニュー→「Save As PDF… Ctrl+S」項目を選択すると開かれる「Saving Report into a PDF-File …」ウィンドウの “Filename” テキストボックス [Select File] ボタンをクリックし，該当する *.cif ファイルと *.xml との保存されたフォルダにブラウジングし，適当なファイル名を付けて，印刷形式の PDF (Adobe Portable Document File) *.pdf として保存して持ち帰ることも奨められる。「Saving Report into a PDF-File …」ウィンドウに表示されるファイル名は，前回の [Print] ▶「Export」▶「Save As PDF… Ctrl+S」操作で指定したファイル名がそのまま引き継がれる。新しいカードを参照するたびにファイル名を指定しなおさなければいけないというやや煩雑（はんざつ）な操作が必要となる。（↩）

（補足 5.3.A）Windows の標準的な環境とそれ以外の環境での Jupyter Notebook によるコンソール・アプリケーションの利用のしかた（↩）

Jupyter Notebook のコードセルで文頭に感嘆符記号「!」を付けると，それ以降の記述はシェルスクリプト（シェルコマンド）を表すと解釈される。Windows 11 の場合，シェルスクリプトは「コマンドプロンプト」(cmd.exe) に対応し，macOS や Linux（リナックス）など UNIX（ユニックス）系の環境では「ターミナル」(terminal) に対応する。

ここでは XML ファイル “PDF Card - 01-086-4266.xml” と同じフォルダに Python コードファイル xml2csv.py が置かれているとする。

Windows 11 上の Jupyter Notebook では，コードセルに (Code 5.3.A.1) のように記述する。

(Code 5.3.A.1) Windows 11 コマンドプロンプトでのパイプとリダイレクト（↩）

```
!type "PDF Card - 01-086-4266.xml" | python xml2csv.py > PDF01-086-4266.csv
```

コマンドプロンプトでの「type」は，テキストファイルの内容を標準出力 (stdout / standard output) （デフォルトではコンソール画面）に出力させるコマンドであり，「type A」の記述はファイル A の内容を標準出力に出力させる意味になる。縦線記号「 | 」はパイプ (pipe) と呼ばれ，“A | B” の記述は A の標準出力を B の標準入力とする意味である。「大なり」記号「>」は「出力リダイレクト」(output redirection) と呼ばれ，「B > C」の記述は B の標準出力をファイル名 C のファイルとして保存することを意味する。

Windows 11 のコマンドプロンプトで “PDF Card - 01-086-4266.xml” のように空白文字列を含むファイル名を扱う場合には，(Code 5.3.A.1) のように二重引用符記号 (double quotation marks)「"」でファイル名を囲む。テキスト入力にワードプロセッサを用いると，引用符記号が自動的にスマート引用符「‘」「’」「“」「”」に変換される場合があるが，スマート引用符を使うと Python 言語では文法エラー (syntax error) となるので注意する。

macOS や Linux（リナックス）など UNIX（ユニックス）系の環境では，(Code 5.3.A.2) あるいは (Code 5.3.A.3) のようにする。UNIX 系の環境と Python 言語で空白文字を含む文字列を扱う場合には，二重引用符記号「"」の代わりに単引用符記号 (single quotation marks) 「'」を使うことができる。

(Code 5.3.A.2) macOS と Linux でのパイプとリダイレクト (↩)

```
!cat 'PDF Card - 01-086-4266.xml' | python xml2csv.py > PDF01-086-4266.csv
```

(Code 5.3.A.3) macOS と Linux での入出力リダイレクト (↩)

```
!python xml2csv.py < 'PDF Card - 01-086-4266.xml' > PDF01-086-4266.csv
```

(Code 5.3.A.3)の「小なり」記号「<」は，「入力リダイレクト」(input redirection) と呼ばれ，「A < B > C」の記述は，ファイル B を標準入力とし，ファイル C を標準出力としてコマンド A を実行する意味になる。

UNIX 系のオペレーティング・システムでの cat コマンドは，本来は複数のファイルを連結させる (concatenate) 目的のコマンドだが，単一のテキストファイルの内容をコンソール画面に表示するためにも用いられる。Windows 11 のコマンドプロンプト (cmd.exe) では標準入力のリダイレクトを使えないが，UNIX では「小なり記号」「<」によって入力リダイレクトも使うことができる。

入力リダイレクトを使える方が直感的にわかりやすく，コードも少し短く済ませられるが， Windows 11 コマンドプロンプトは入力リダイレクトを使えない仕様になっている。これらのことは，必ずしも Windows 11 コマンドプロンプトの環境が劣っていることを意味するわけではない。同じ意味の動作をするために複数の方法が存在することは，特に初心者にとっては習得しにくくなるデメリットもある。 (↩)

参考文献

Bergamin, J., Cavagnero, G., Mana, G. & Zosi, G. (**1997**). “Lattice Parameter and Thermal Expansion of Monocrystalline Silicon”, Journal of Applied Physics, **82**, 5396–5400. DOI: https://doi.org/10.1063/1.366308 (↩)

Momma, K. & Izumi, F. (**2011**). “VESTA 3 for three-dimensional visualization of crystal, volumetric and morphology data,” Journal of Applied Crystallography, **44**, 1272–1276. DOI: https://doi.org/10.1107/S0021889811038970 (↩)