

INTERGLAD Ver. 7 における各種 ID リスト

構造情報 Structure

ID 番号	Structure Item (略称)	日本語名称または説明	Structure Item
Spectrum			
(Spectral Curve)		スペクトル	
		(スペクトルデータ)	
01101	IR-Visible (Fig)	赤外～可視域(図)	IR-Visible (Figure)
01102	Visible-UV (Fig)	可視～紫外域(図)	Visible-UV (Figure)
01114	Lumi/IR-Visible (Fig)	発光スペクトル(赤外～可視)(図)	Luminescence/IR-Visible (Figure)
01115	Lumi/Visible-UV (Fig)	発光スペクトル(可視～紫外)(図)	Luminescence/Visible-UV (Figure)
01103	Raman (Fig)	ラマンスペクトル(図)	Raman (Figure)
01104	NMR (Fig)	NMRスペクトル(図)	NMR (Figure)
01105	Moessbauer (Fig)	メスバウアー(図)	Moessbauer (Figure)
01106	ESR (Fig)	ESR(図)	ESR (Figure)
01107	XPS (Fig)	XPS(図)	XPS (Figure)
01108	XAFS (Fig)	XAFS(図)	XAFS, XANES (Figure)
01109	X-Ray (Fig)	X線回折(図)	X-Ray Diffraction (Figure)
01110	Neutron (Fig)	中性子線回折(図)	Neutron Diffraction (Figure)
01111	Calc (MD, MO) (Fig)	計算化学スペクトル(図)	Calculation (MD, MO) (Figure)
01113	Others (Fig)	その他(図)	Others (Figure)
<hr/>			
(Peak or Valley)		(ピーク値または谷値)	
01201	IR-Visible (Peak, Valley)	赤外～可視域(p, v)	IR-Visible (Peak or Valley)
01202	Visible-UV (Peak, Valley)	可視～紫外域(p, v)	Visible-UV (Peak or Valley)
01214	Lumi/IR-Visible (Peak, Valley)	発光スペクトル(赤外～可視)(p, v)	Luminescence/ IR-Visible (Peak or Valley)
01215	Lumi/Visible-UV (Peak, Valley)	発光スペクトル(可視～紫外)(p, v)	Luminescence/ Visible-UV (Peak or Valley)
01203	Raman (Peak, Valley)	ラマンスペクトル(p, v)	Raman (Peak or Valley)
01204	NMR (Peak, Valley)	NMRスペクトル(p, v)	NMR (Peak or Valley)
01205	Moessbauer (Peak, Valley)	メスバウアー(p, v)	Moessbauer (Peak or Valley)
01206	ESR (Peak, Valley)	ESR(p, v)	ESR (Peak or Valley)
01207	XPS (Peak, Valley)	XPS(p, v)	XPS (Peak or Valley)
01208	XAFS (Peak, Valley)	XAFS(p, v)	XAFS (Peak or Valley)
01209	X-Ray (Peak, Valley)	X線回折(p, v)	X-Ray Diffraction (Peak or Valley)
01210	Neutron (Peak, Valley)	中性子線回折(p, v)	Neutron Diffraction (Peak or Valley)
01211	Calc (MD,MO) (Peak, Valley)	計算化学スペクトル(p, v)	Calculation(MD, MO) (Peak or Valley)
01213	Others (Peak, Valley)	その他のスペクトル(p, v)	Others (Peak or Valley)
<hr/>			
Interatomic Information		原子間情報	
02101	RDF etc (Fig)	動径分布関数等(図)	<div style="border: 1px solid black; padding: 5px;"> Radial Distribution Function $4\pi r^2 \rho(r)$ Pair Distribution Function $g(r)$ or $\rho(r) = \rho_0 g(r)$ Cumulative Pair Distribution Function Total Correlation Function $t(r) = 4\pi r \rho(r)$ Differential Correlation Function $d(r) = 4\pi \{ \rho(r) - \rho_0 \}$ Others </div>
02201	Interference Function (Fig)	干渉関数(図)	Interference function (Figure)
02301	S(k) (Fig)	構造因子(図)	Structure Factor (Figure)
02701	Ionic Radius	イオン半径	Ionic Radius
02802	Heterogeneity Radius	不均一性半径	Radius of Heterogeneities
<hr/>			
(1st Interatomic Distance)		(第一原子間距離)	
02401	1st Distance (Typical)	第一結合距離(代表値)	1st Interatomic Distance (Typical)
02402	1st Distance (Ave)	第一結合距離(平均値)	1st Interatomic Distance (Average)
02403	1st Distance (Peak)	第一結合距離(ピーク値)	1st Interatomic Distance (Peak)
02404	1st Distance Variance	第一結合距離分布幅	1st Distance Variance

02405	1st Asymmetric Param	第一非対称性/パラメーター	1st Asymmetric Parameter
(2nd Interatomic Distance)		(第二原子間距離)	
02501	2nd Distance (Typical)	第二結合距離(代表値)	2nd Interatomic Distance (Typical)
02502	2nd Distance (Ave)	第二結合距離(平均値)	2nd Interatomic Distance (Average)
02503	2nd Distance (Peak)	第二結合距離(ピーク値)	2nd Interatomic Distance (Peak)
02504	2nd Distance Variance	第二結合距離分布幅	2nd Distance Variance
02505	2nd Asymmetric Param	第二非対称性/パラメーター	2nd Asymmetric Parameter
(n-th Interatomic Distance)		(第n原子間距離)	
02901	n-th Distance (Typical)	第n結合距離(代表値)	n-th Interatomic Distance (Typical)
02902	n-th Distance (Ave)	第n結合距離(平均値)	n-th Interatomic Distance (Average)
02903	n-th Distance (Peak)	第n結合距離(ピーク値)	n-th Interatomic Distance (Peak)
02904	n-th Distance Variance	第n結合距離分布幅	n-th Distance Variance
02905	n-th Asymmetric Param	第n非対称性/パラメーター	n-th Asymmetric Parameter
(Bond Angle)		(結合角)	
02601	Bond Angle (Typical)	結合角(代表値)	Bond Angle (Typical)
02602	Bond Angle (Ave)	結合角(平均値)	Bond Angle (Average)
02610	Angle Variance (Ave)	結合角分布幅(平均値)	Angle Variance (Average)
02603	Bond Angle (Most Probable)	結合角(最多確率)	Bond Angle (Most Probable)
02604	Angle Variance (Most Probable)	結合角分布幅(最多確率)	Angle Variance (Most Probable)
02605	Bond Angle (1st Peak)	結合角(第一ピーク)	Bond Angle (1st Peak)
02606	Angle Variance (1st Peak)	結合角分布幅(第一ピーク)	Angle Variance (1st Peak)
02607	Bond Angle (2nd Peak)	結合角(第二ピーク)	Bond Angle (2nd Peak)
02608	Angle Variance (2nd Peak)	結合角分布幅(第二ピーク)	Angle Variance (2nd Peak)
02609	Bond Angle Distribution (Fig)	結合角分布図	Bond Angle Distribution (Figure)

Ring Structure

リング構造

03001	Ring Size (Typical)	員環数(代表値)	Ring Size (Typical)
03002	Ring Size (Ave)	員環数(平均値)	Ring Size (Average)
03003	Ring Size (1st Peak)	第一ピーク員環数	Ring Size (1st Peak)
03004	Ring Size (2nd Peak)	第二ピーク員環数	Ring Size (2nd Peak)
03005	2-Membered Ring	2員環の存在比	2-Membered Ring
03006	3-Membered Ring	3員環の存在比	3-Membered Ring
03007	4-Membered Ring	4員環の存在比	4-Membered Ring
03008	5-Membered Ring	5員環の存在比	5-Membered Ring
03009	6-Membered Ring	6員環の存在比	6-Membered Ring
03010	7-Membered Ring	7員環の存在比	7-Membered Ring
03011	8-Membered Ring	8員環の存在比	8-Membered Ring
03012	9-Membered Ring	9員環の存在比	9-Membered Ring
03013	10-Membered Ring	10員環の存在比	10-Membered Ring
03014	Ring Structure Distribution (Fig)	員環数分布図	Distribution of Ring Structure (Figure)

Coordination Number

配位数

04001	Coord No. (Typical)	配位数(代表値)	Coordination Number (Typical)
04002	1st Neighbor Coord No.	第一近接配位数	1st Neighbour Coordination Number
04003	2nd Neighbor Coord No.	第二近接配位数	2nd Neighbour Coordination Number
04004	3rd Neighbor Coord No.	第三近接配位数	3rd Neighbour Coordination Number
04005	Coord No. 1	配位数1の存在比	Coordination Number 1
04006	Coord No. 2	配位数2の存在比	Coordination Number 2
04007	Coord No. 3	配位数3の存在比	Coordination Number 3
04008	Coord No. 4	配位数4の存在比	Coordination Number 4
04009	Coord No. 5	配位数5の存在比	Coordination Number 5
04010	Coord No. 6	配位数6の存在比	Coordination Number 6
04011	Coord No. 7	配位数7の存在比	Coordination Number 7
04012	Coord No. 8	配位数8の存在比	Coordination Number 8
04013	Coord No. 9	配位数9の存在比	Coordination Number 9
04014	Coord No. 10	配位数10の存在比	Coordination Number 10
04015	Coord No. 11	配位数11の存在比	Coordination Number 11

04016	Coord No. 12	配位数12の存在比	Coordination Number 12
04017	Coord No. Distribution (Fig)	配位数分布図	Distribution of Coordination Number (Figure)

Bridging Oxygen Information

(Bridging Oxygen)

05101	NBO/ total O	全酸素中の非架橋酸素の比率	NBO Fraction / [total O]
05102	NBO/ total X	ガラス形成元素 X 一個当たりの非架橋酸素数	NBO Fraction / [total X]
05103	BO/ total O	全酸素中の架橋酸素の比率	BO Fraction / [total O]
05104	BO/ total X	ガラス形成元素 X 一個当たりの架橋酸素数	BO Fraction / [total X]
05105	[O2-]/ total O	全酸素中の孤立酸素の比率	Isolated Oxygen [O ²⁻] / [total O]
05106	[O2-]/ total X	ガラス形成元素 X 一個当たりの孤立酸素数	Isolated Oxygen [O ²⁻] / [total X]
05107	3 Coord O/ total O	全酸素中の三配位酸素の比率	3 Coordinated Oxygen / [total O]
05108	3 Coord O/ total X	ガラス形成元素 X 一個当たりの三配位酸素数	3 Coordinated Oxygen / [total X]

架橋酸素情報

(架橋酸素)

(Qn Distribution)

05201	Q0 / total X	架橋酸素を持たない単位ガラス形成分子構造体の存在比率	Q ⁰ / total X
05202	Q1 / total X	1個の架橋酸素を有する単位ガラス形成分子構造体の存在比率	Q ¹ / total X
05203	Q2 / total X	2個の架橋酸素を有する単位ガラス形成分子構造体の存在比率	Q ² / total X
05204	Q3 / total X	3個の架橋酸素を有する単位ガラス形成分子構造体の存在比率	Q ³ / total X
05205	Q4 / total X	4個の架橋酸素を有する単位ガラス形成分子構造体の存在比率	Q ⁴ / total X

(Qⁿ 分布)

Oxidation Number

06001	Valence No. (Ave)	平均価数	Valence Number (Average)
06002	-6 Valence	-6価の存在比	-6 Valence
06003	-5 Valence	-5価の存在比	-5 Valence
06004	-4 Valence	-4価の存在比	-4 Valence
06005	-3 Valence	-3価の存在比	-3 Valence
06006	-2 Valence	-2価の存在比	-2 Valence
06007	-1 Valence	-1価の存在比	-1 Valence
06008	0 Valence	0価の存在比	0 Valence
06009	+1 Valence	+1価の存在比	+1 Valence
06010	+2 Valence	+2価の存在比	+2 Valence
06011	+3 Valence	+3価の存在比	+3 Valence
06012	+4 Valence	+4価の存在比	+4 Valence
06013	+5 Valence	+5価の存在比	+5 Valence
06014	+6 Valence	+6価の存在比	+6 Valence

酸化数

Structure Model

08001	Structure Model	構造モデル	Structure Model
-------	-----------------	-------	-----------------

構造モデル

Basicity

09001	Optical Basicity	光学的塩基度	Optical Basicity
-------	------------------	--------	------------------

塩基度

Induced Structure

10001	Induced Structure	誘起構造(フェムト秒レーザー等)	Induced Structure (by Femtosec Laser, etc.)
-------	-------------------	------------------	---

誘起構造

Phase Separation

11001	Phase Separation	分相	Phase Separation
-------	------------------	----	------------------

分相

FSDP and Boson Peak

07001	FSDP Q Value	FSDP Q 値	FSDP Q Value
-------	--------------	----------	--------------

FSDP 及びボゾンピーク

07002	FSDP Quasi-Bragg Plane Spacing	FSDP 擬ブラッグ面間隔	FSDP Quasi-Bragg Plane Spacing
07003	Boson Peak	ボゾンピーク	Boson Peak

Raman Data

ラマンデータ

12001	Depolarization Ratio	偏光解消度	Depolarization Ratio
-------	----------------------	-------	----------------------

ESR Data

ESR データ

16001	g Value	g値	g Factor
16002	g Value (perp)	g値の磁場垂直成分	g Value (g \perp)
16003	g Value (para)	g値の磁場平行成分	g Value (g//)
16004	Hyperfine Coupling Const	超微細結合定数	Hyperfine Coupling Constant (hfcc) (A)
16005	perp Hyperfine Coupling Const	同 磁場垂直成分	Hyperfine Coupling Constant (A \perp)
16006	para Hyperfine Coupling Const	同 磁場平行成分	Hyperfine Coupling Constant (A//)
16007	Hyperfine Structure Spacing	超微細構造間隔	Hyperfine Structure Spacing
16008	ESR-FWHM	線幅 (半値幅)	Line Width (FWHM)
16009	Dipolar Hyperfine Coupling Param	双極子超微細結合パラメーター	Dipolar Hyperfine Coupling Parameter
16010	Fermi Contact Interaction Param	フェルミ相互作用パラメーター	Fermi Contact Interaction Parameter

XAFS Data

XAFS データ

13001	Absorption Edge Position	吸収端位置	Absorption Edge Position
-------	--------------------------	-------	--------------------------

NMR Data

NMR データ

14001	Quadrupolar Coupling Const	核四極子結合定数	Quadrupolar Coupling Constant
14002	Asymmetry Param	非対称パラメーター	Asymmetry Parameter
14003	Proportions Present	存在割合	Proportions Present
14004	Chemical Shift	化学シフト	Chemical Shift
14005	Chemical Shift Anisotropy	化学シフト異方性	Chemical Shift Anisotropy
14006	Isotropic Chemical Shift	等方性化学シフト	Isotropic Chemical Shift
14022	2nd-order Quadrupolar Shift	第2次核四極子シフト	Second-order Quadrupolar Shift
14007	Quadrupolar Isotropic Chemical Shift ^{17}O	^{17}O の核四極子等方シフト	Quadrupolar Isotropic Chemical Shift ^{17}O
14008	Shielding Const	遮蔽定数	Shielding Constant
14009	Spin Coupling Const	スピン結合定数	Spin Coupling Constant
14010	Relaxation Time	緩和時間	Relaxation Time
14011	Relaxation Time T1	縦緩和時間 T1	Longitudinal Relaxation Time T $_1$
14012	Relaxation Time T2	横緩和時間 T2	Transverse Relaxation Time T $_2$
14013	Quadrupole Relaxation	核四極子緩和	Quadrupole Relaxation
14021	NMR-FWHM	線幅 (半値幅)	Line Width (FWHM)
14015	Dipole Interaction	双極子相互作用	Dipole Interaction
14016	Quadrupole Interaction	核四極子相互作用	Quadrupole Interaction
14017	Electric Field Gradient	電場勾配テンソル	Electric Field Gradient
14019	2nd Quadrupole Effect	二次の核四極子の効果	Effect of Secondary Quadrupole
14020	Quadrupole Moment	核四極子モーメント	Quadrupole Moment
14023	MQ-Quadrupolar Coupling Param	MQ 核四極子結合パラメーター	MQ-Quadrupolar Coupling Parameter (Product)
14024	Isotropic Dimension	等方性次元	Isotropic Dimension

Moessbauer Data

メスバウアーデータ

15001	Isomer Shift	異性体シフト	Isomer Shift
15002	Quadrupole Splitting	核四極子分裂	Quadrupole Splitting
15003	Moessbauer-FWHM	線幅 (半値幅)	Line Width (FWHM)

Others

その他

99999	Others (O00***)	その他 雑件	Miscellaneous Items
-------	--------------------	-----------	---------------------