

世界最大級の粉末回折データベース



ICDD PDF-4/PDF-2

Release 2016/2017

PDF-4、PDF-2は、結晶質の化合物の同定のために粉末回折データを収集、編集している組織・ICDD(International Centre for Diffraction Data)が作成しているデータベースです。収録されるデータは世界的な規模で集められ、ICDDのスタッフによる4段階の評価過程を通らなければ採用されません。また、収録データは技術の発展とともに再検討され、データが高精度・高品質であるように毎年アップグレードされています。

■ PDF-4 製品 (PDF-4+、PDF-4 Minerals、PDF-4 Organics)

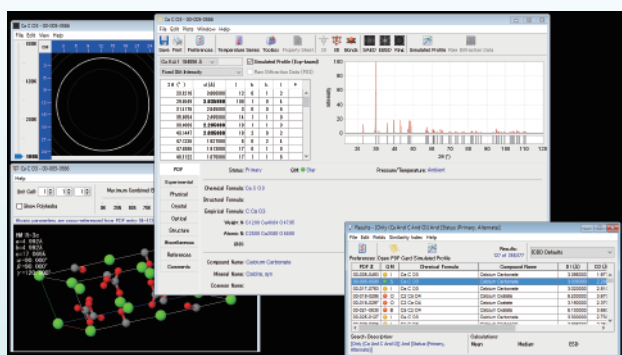
定量分析に最適なデータベース

PDF-4 製品には、PDF-4+ 2016(無機化合物)、PDF-4/Minerals(鉱物)、PDF-4/Organics 2017(有機化合物)の3製品があります。ライセンス期間はすべて1年間で、年次更新によりライセンス期間の延長と最新版のデータをご提供します。

PDF-4 製品には、結晶の原子座標のデータなどPDF-2より多くの情報が含まれています。特に定量分析やリポート精密化を行う際には原子座標の情報が必要になりますので、それらの分析を行う場合にはPDF-4製品が最適です。

PDF-4+ 2016

無機化合物の粉末回折データベースです。データ登録数は384,613件で、単体の製品としては世界最大です。ICDD、MPDS、NIST、FIZのデータが統合されており、回折データ、物理特性、結晶データ、文献情報などを総合的に提供します。



PDF-4では結晶構造を含むデータの3D可視化や電子線回折シミュレーションなど、PDF-2より豊富な機能を利用できます。

■ PDF-2 2016

従来型の粉末回折データベース

PDF-2は、X線回折装置を使った無機材料分析で利用するように設計された粉末回折データベースです。さまざまなX線回折装置メーカーの解析システムに統合され、世界中の研究機関などで利用されています。データベースには、無機材料のデータのほか、一般的な有機材料のデータが含まれています。

PDF-4/Minerals 2016

鉱物の粉末回折データベースです。鉱物と分類される化学種の約95%をカバーしています。PDF-4/MineralsはPDF-4+のサブセットで、PDF-4 MineralsのデータはPDF-4+にすべて含まれています。

PDF-4/Organics 2017

PDF-4/Organicsは有機物としては世界最大の粉末回折データベースです。製薬や化学産業を対象とした材料識別用に設計されており、創薬、触媒作用、法医学、生産に従事する科学者・研究者に役立ちます。データ収録数は516,054件です。

Sleve+ 2016(サポートソフトウェア)

Sleve+は、PDF-4データベースを使い結晶の相同定を行うためのソフトウェアです。同定の手法としては、Hanawalt法、Fink、Long-8を利用できます。すべてのPDF-4製品には、PDF-4データベースに収録されているデータを表示、検索、フィルタリングするためのソフトウェアが組み込まれていますが、相同定を行うためには、Sleve+または別途、相同定ソフトウェアが必要です。

動作条件

PDF-4製品を動作させるには以下の環境です。

HDD容量(NTFSファイルシステムが必須)

PDF-4+ : 9GB / Minerals : 1.5GB / Organics : 19GB

OS : Windows 10/8.1/8/7(SP1)/Vista(32bit SP2)

CPU : Intel Core 2 Duo プロセッサ以上を推奨、RAM : 4GB以上

動作条件

PDF-2 2016を動作させるには、以下の環境が必要です。

HDD: 4GB、RAM: 4GB以上

OS: Windows 10/8.1/8/7(SP1)/Vista(32bit SP2)

CPU: Intel Core 2 Duoプロセッサ以上を推奨

ICDD 2016-2017 Product Summary

● ICDDの各データベースの収録データ数の比較

PDF-4+ 2016/PDF-4 Minerals 2016/PDF-4 Organics 2017/PDF-2 2016 の収録データ数は以下の通りです。

	PDF-4+	PDF-4/ Minerals	PDF-4/ Organics	PDF-2
データ総数	384,613	44,341	516,054	291,119
無機化合物	351,612	44,285	33,943	258,130
有機化合物	42,229	701	505,530	41,386
新規追加	18,736	1,489	14,090	12,616
原子座標を含む	271,449	33,574	96,825	0
I/Icを含む	286,885	33,362	484,021	193,567

● 解析用途別に最適なデータベース

解析対象の結晶やご利用用途により最適なデータベースが異なります。

	PDF-4+	PDF-4/ Minerals	PDF-4/ Organics	PDF-2
おもに無機化合物の解析に利用	○	○		○
おもに有機化合物の解析に利用			○	
おもに鉱物の解析に利用		○		
電子線回折/シンクロトロンデータを解析	○	○	○	
<定量分析>				
・ リートベルト解析	○ 注1	○ 注1	○ 注1	
・ RIR (Reference Intensity Ratio)	○	○	○	○ 注1
・ パターンフィッティング	○	○	○	
原子座標のデータも必要	○	○	○	
データベースの登録件数	384,613	44,341	516,054	291,119
2016年版で新しく追加されたデータ件数	18,736	1,489	14,090	12,616
ライセンス期間	1年	1年	1年	5年
複数年契約	○	○	○	○
サイトライセンス(複数年ライセンス割引)	○	○	○	○

注1：別途、サードパーティ製解析ソフトウェアが必要です。

お問い合わせ先:

 **LightStone®**
株式会社 ライトストーン

Web:
<http://www.lightstone.co.jp/>
Email:
sales@lightstone.co.jp (営業)

(2016年10月14日まで)

〒130-0026

東京都墨田区両国4-30-8
両国YAビル 6F

TEL 03-5600-7201

FAX 03-5600-6671

(2016年10月17日以降)

〒101-0031

東京都千代田区東神田2-5-12
龍角散ビル7F

TEL 03-3864-5211

FAX 03-3865-0050

※ 2016年10月17日以降、移転のため住所・電話・FAX番号が変更になります。