INTERNATIONAL CENTRE FOR DIFFRACTION DATA

粉末X線回折の解析に最適なソフトウェアとデータベース

JADE Pro / Standard

ICDD PDF-5 / PDF-4 / PDF-2

2026 - 2027

ICDD
INTERNATIONAL CENTRE FOR DIFFRACTION DATA

MDI
Materials Data™

粉末X線回折に必要な機能を網羅する解析ソフトウェア

JADEは、粉末X線回折（XRD）データから結晶構造解析を行うためのソフトウェアです。開発元のMaterials Dataは、XRDのアプリケーションに新しい科学的アイデアと新しいアプローチを、常に先駆けて導入してきました。JADE Pro／Standardは、その最新版です。直観的で使いやすいユーザインターフェイスにも定評があり、世界中のラボで広く利用されています。

JADE Pro

サブスクリプションライセンス（年次更新型）

すべての機能を利用できるJADEの最上位版です。年次更新のタイミングで最新版にアップデートされるため、最新機能を利用できます。また、WindowsやICDDのデータベースの最新版にも対応しているため、安心してご利用いただけます。

▶ ネットワークライセンスに対応

複数ユーザがそれぞれ自分のPCでJADE Proを利用できます（同時起動数＝ライセンス数）

JADE Pro 限定のおもな機能

- 1クリック分析
- ピークの指数付け
- 格子定数精密化
- Rietveld法による結晶構造精密化（原子パラメータ）
- Charge Flipping法によるAb Initio計算
- クラスター分析による粉末パターンの分類
- XRDの解析に役立つさまざまな拡張Toolkit

JADE Standard

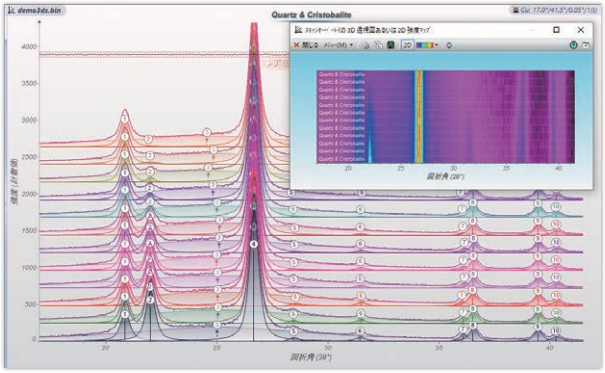
永続ライセンス

	レベル1 JADE Standard Base	レベル2A JADE Standard with S／M	レベル2B JADE Standard with WPF	レベル3 JADE Standard with both S／M&WPF
● 回折パターンデータのインポート・表示 ● バックグラウンドの定義・除去 ● ICDDのデータベースへのアクセス ● プロファイルフィッティングなどの基本機能	○	○	○	○
● 相同定（サーチマッチ）		○		○
● 全パターンフィッティング（WPF／Rietveld）			○	○

JADE Pro／Standard のおもな機能

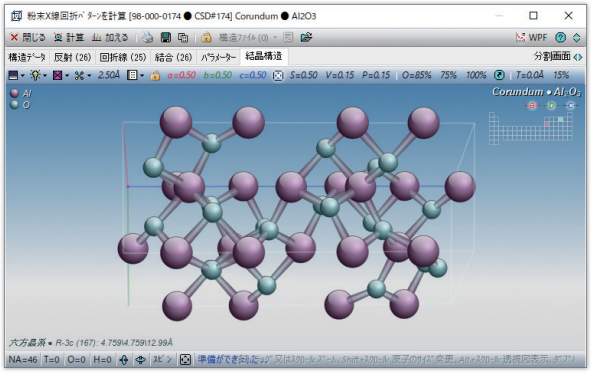
回折データの読み込み

ほとんどのXRD装置メーカのデータ形式に対応しており、RAWデータのままJADEに読み込むことができます。また、複数のデータをJADEにドラッグするだけで重ねがきができ、データの比較も手軽に行えます。



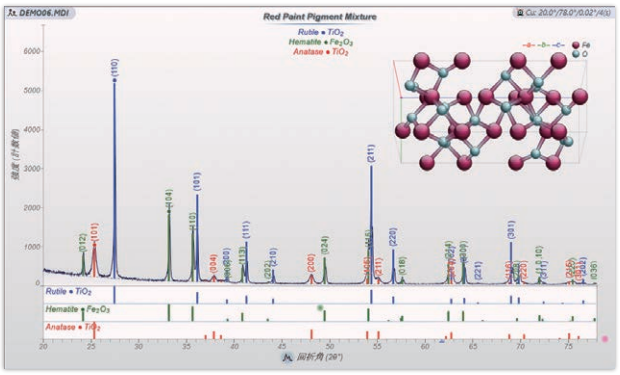
シミュレーションと可視化

結晶構造データファイルや文献などの情報から粉末回折パターンをシミュレートし、ユーザ独自のカスタムデータベースを作成できます。結晶構造の3D可視化を行うこともでき、分析している材料の理解に役立ちます。



定性分析

市販の粉末回折データベース（ICDDのPDF-5／PDF-4／PDF-2など）やユーザデータベースとJADEを連携させることで、結晶相の同定を行えます。元素や単位胞などの条件を指定することで、得られる結果を絞り込めます。



定量分析

結晶相の同定を行ったあと、定量を行い、組成を求めることができます。参照強度比（RIR、I／Ic）を用いた簡易定量、実測パターンの全パターンフィッティングと結晶構造のRietveld精密化を行えます。

その他の分析

格子定数の計算、回折パターンの指数付け、結晶子サイズ／歪み解析、結晶化度の算出など、粉末回折データから求められるさまざまな解析を行えます。

日本語に対応したユーザインターフェイス

JADE Pro／Standardのユーザインターフェイスは多言語（日本語・英語・中国語）に対応しています。メインメニューやダイアログだけでなく、マウスを合わせるとポップアップする使い方のヒントもすべて日本語で表示されます。

さまざまな装置メーカーのデータに対応

JADEは、代表的な粉末X線回折装置メーカーのRAWデータフォーマットに対応しています。JADEを解析に使うことで、複数の装置が混在する環境や、さまざまなメーカー形式のデータを解析する場合でも、いつも同じ操作で解析を行えます。

対応データ　Rigaku、Bruker（Siemens）、Malvern Panalytical（Philips）、ART Thermo Fisher Scientific（Scintag）、Shimadzu、Proto、XOS、X-Yデータ、放射光施設のビームラインからのデータなど多数

システム要件

O　S：Windows 11
CPU：Intel Core i7、 i5、 i3 以上
RAM：8GB
HDD容量：400MB　　24インチ以上のモニター

X線回折装置に付属するPCにもインストールできます。

対応データベース／構造データ

PDF－5+、 PDF－4／Axiom、 PDF－4／Minerals、
PDF－2
AMCSD、 CIFなど

世界最大級の 粉末回折データベース

ISO認証取得

ICDD® INTERNATIONAL CENTRE FOR DIFFRACTION DATA

ICDDのデータベースが選ばれる理由

PDF-5／ 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。ICDDは、結晶学のデータベース機関としては世界で唯一、ISO 9001:2015（品質管理システムの国際規格）認定を取得しており、ICDD の管理するデータベースは、信頼できるデータベースとして安心してご利用いただけます。高品質の実験データをICDDの高品質のリファレンス・データと比較することで、結果としてより低濃度の物質をより多く同定できます。

- 収録データの高い信頼性
- 世界最大級の充実したデータ
- 専門家による評価を収録
- 新しい分野・材料への対応
- 絶え間ないデータの見直し

PDFのデータベースが高品質な理由

Powder Diffraction File（PDF）の収録データは、科学者、研究室、文献調査、助成金プログラムから収集されています。およそ 200の主要科学雑誌から、手作業で粉末回折データが検索され、特許、博士論文、そのほかの公表文献を カバーする追加文献調査も行われています。すべてのデータは、 PDFに収録される前にICDDのスタッフによって検討、評価されます。パターンデータは 4段階の評価過程を通り抜けなければ採用されません。また、技術の発展とともに、基準パターンデータの品質要求事項も発展します。その結果、PDFの情報は精度と品質に対して常に再検討され、高品質に保たれています。

オススメ！

PDF-5+ 2027

データ収録数：1,149,116件

サブスクリプションライセンス（年次更新）

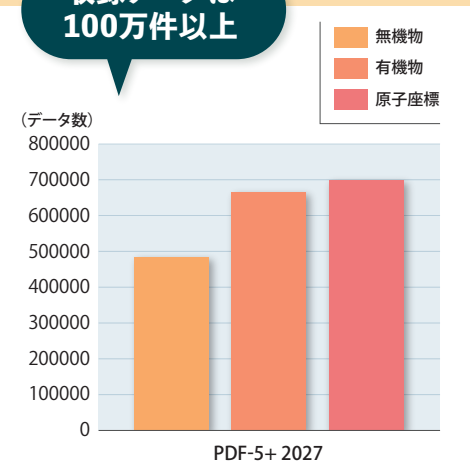
世界最大! 無機・有機物を網羅したデータベース

PDF-5+は、これまでの無機（PDF-4+）と有機（PDF-4 Organics）が統合されたデータベースです。486,125件以上の無機化合物および667,134件以上の有機化合物のデータが含まれており、相同定に必要なデータを包括的に入手できます。

Key Point

- 単体の製品としては世界最大の粉末回折データベース。
- ICDD、MPDS、NIST、FIZ、CCDCのデータを統合。
- 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。
- 結晶質固体、半結晶質固体、非晶質固体材料のデータを含む。
- 全データ中、700,480件は原子座標のデータを持ち、リートベルト解析での使用に最適。
- 年次更新により、毎年、注目されている分野の材料データなど、最新のデータが追加されます。

収録データは100万件以上



PDF-4 Axiom 2027

データ収録数：117,096件

3年ライセンス

ベンチトップ型装置ユーザ向け

Key Point

- ベンチトップ型装置ユーザにおすすめのデータベース。
- 更新なしの 3年ライセンス。
- 無機物と有機物のデータを収録。
- 3ライセンス（PC 3台用）のセット商品もあります。

PDF-4 Minerals 2027

データ収録数：56,162件

サブスクリプションライセンス（年次更新型）

鉱物に特化したデータベース

Key Point

- 鉱物に特化した粉末回折データベース。
- International Mineralogical Association（IMA）で鉱物と分類される化学種の約97%をカバー。

大人気！

PDF-2 2027

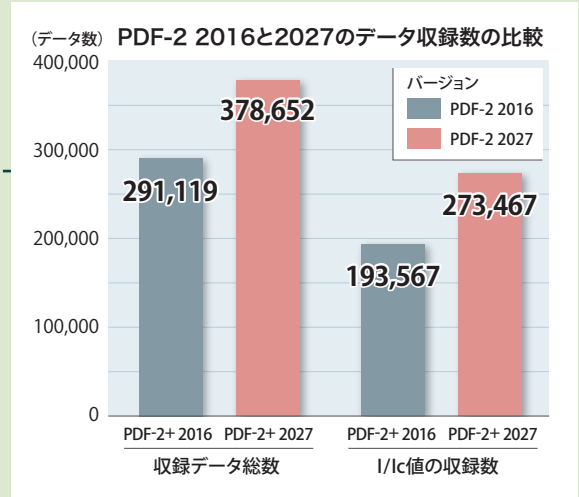
データ収録数：378,652件

5年ライセンス

無機物中心のデータベース

Key Point

- 粉末X線回折システムにも採用されている、実績ある粉末回折データベース。
- 自動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。
- 粉末X線回折装置を開発している各大手メーカーの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。



Sleve+/ Sleve 2027

- PDF-5／ PDF-4／ PDF-2データベースを使い、結晶相を同定するためのソフトウェア。
- 物質の同定方法として、Hanawalt法、Fink、Long-8を利用できます。

※Sleve+は PDF-5／ PDF-4用、Sleveは PDF-2用で、検索・閲覧ソフトのプラグインとしてデータベース本体に含まれています。

※Sleve+/ Sleveの同定機能は簡易的なものです。自動で相同定を行いたい場合など、より高度な解析機能が必要な場合は、別途 JADE Pro／ Standardなどの解析ソフトウェアが必要です。

購入前に収録物質をチェックできる！

Powder Diffraction File（PDF） Search

各データベースに、どの物質が収録されているか検索できるWebページです。
どのデータベースを選べば良いか迷ったときにご利用ください。

詳細はこちら https://www.icdd.com/pdfsearch/

ICDD 各データベースの収録データ数

ICDD 2027	PDF-5+	PDF-4 Axiom	PDF-4 Minerals	PDF-2
データ総数	1,149,116	117,096	56,162	378,652
無機化合物	486,125	103,904	55,494	320,124
有機化合物	667,134	13,358	799	60,156
新規追加	22,903	3,043	1,222	9,378
原子座標を含む	700,480	91,043	48,287	–
I/Icを含む	1,043,897	86,981	44,436	273,467

用途によるデータベース比較表

あなたに最適なデータベースは？

	PDF-5+	PDF-4 Axiom	PDF-4 Minerals	PDF-2
無機化合物の解析に利用	○	○		○
有機化合物の解析に利用	○			
鉱物の解析に利用			○	
電子線回折／シンクロトロンのデータを解析	○	○	○	
定量分析を行う				
リートベルト解析	○注1	○注1	○注1	
RIR（Reference Intensity Ratio）	○	○	○	○
パターンフィッティング	○注1	○注1	○注1	
原子座標のデータも必要	○	○	○	
ライセンス期間	1年	3年	1年	5年
複数年一括契約	○		○	
サイトライセンス（複数ライセンス割引）	○			○

注 1：解析には別途、JADEなどの解析ソフトウェアが必要です。

システム要件

OS：Windows 11
CPU：Intel Core 2 Duoプロセッサまたは同等以上を推奨
RAM：4GB以上

HDD容量
PDF−5 ＋：32GB
PDF−4 Axiom：4GB
PDF−4 Minerals：2GB
PDF−2：5GB

X線回折装置に付属するPCにもインストールできます。装置付属のICDDデータベースの更新はライトストーンで行えます。更新や相談事はライトストーンへ

お見積り&技術サポートのお問い合わせは
正規国内代理店 株式会社 ライトストーンへ！

導入前の「分からない」を解消
オンラインでのデモを実施中！

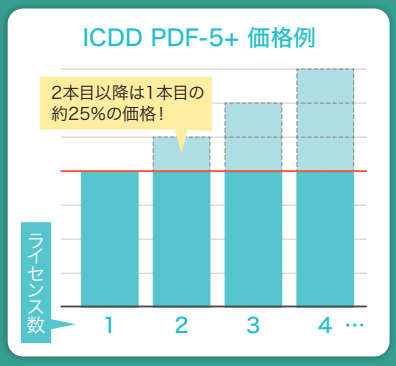
Web会議システムで、実際の操作画面をお見せしながらJADEの概要や基本機能をご紹介します。お客様のサンプルデータを使用したデモも可能です。その場でご質問いただけますので、ご導入前の不安を解消できます。

Materials Data JADE

JADE ProとStandard全種類をお試しできる！
JADEの評価版（30日間）を貸し出ししています
お申込みはこちら
https://www.lightstone.co.jp/jade/evaluate.html

2本以上まとめての導入がおすすめ！
サイトライセンス（複数ライセンス）

JADE、ICDDデータベースともに、複数本まとめて購入するとセット割引が適用されます（サイトライセンス契約）。ご利用場所、必要数をご相談いただければ、最適なご提案をいたします。



Gold Standard!

全国の事業所、同一キャンパス内で使える
ネットワークライセンス！

PDF-5+ ・ JADE Pro
サーバエディション

PDF-5+とJADE Proがセットになったネットワークライセンスです。全国の事業所（一般企業向け）、同一キャンパス内（アカデミック向け）で使用できます。PDF-5+のみのネットワークライセンスもございます（同一拠点内での利用に限定）。

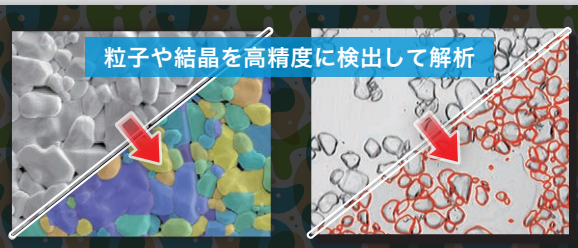
- X線回折装置に付属するPCにも、JADEやICDDのデータベースをインストールできます。
- 当社は正規国内代理店ですので、他社からご購入いただいたライセンスでも、更新・追加購入に対応できます。詳細はお問い合わせください。

関連商品のご紹介

AI画像解析ソフトウェア

MIPAR

Image Analysis Software



従来の画像解析技術とDeep Learningを融合して粒度分布解析、画像1枚からでも学習可能！

新世代AI！

MIPAR Spotlight

全く学習を必要としないゼロショットAI検出
Spotlightオプションをリリース

商品詳細はこちら

プログラミング不要のAI解析プラットフォーム

Multi-Sigma

研究開発の現場に **AIの力を**

ニューラルネットワーク

ベイズ最適化

複数の目的に対して少数データで高精度予測・要因分析・最適化をシームレスに実行可能

マテリアルズ・インフォマティクスの推進にお役立てください

◎先端材料の設計
少量のデータや偏ったデータセットでも高い精度で予測モデルを構築し、材料特性を最適化

◎サロゲートモデルの構築
分子動力学や量子化学計算を用いた材料シミュレーションやモデリングの計算の効率化

◎異常検出と品質管理
品質管理やトラブルシューティングに役立つ異常を発見するモデルを構築

ウェビナー詳細はこちら

ライトストーンでも取り扱いを開始しました！

NIST NATIONAL INSTITUTE OF STANDARDS AND TECHNOLOGY
U.S. DEPARTMENT OF COMMERCE

NIST（米国標準技術研究所）による信頼性の高い標準試料（SRM）

お取り扱い商品（一部）

製品記号	製品名	内容	内容量	目的
640g	Line Position and Line Shape Standard for Powder Diffraction	Si粉末	7.5 g	Line Position, Shape
660c	Line Position and Line Shape Standard for Powder Diffraction	LaB6粉末	6 g	Line Position, Shape
1878b	Respirable Alpha Quartz（Quantitative X-Ray Powder Diffraction Standard）	α-Quartz	5 g	Quantitative Analysis
674b	X-Ray Powder Diffraction Intensity Set（Quantitative Powder Diffraction Standard）	ZnO, TiO_2, Cr_2O_3, CeO_2	10 g	Quantitative Analysis
1976c	Instrument Response Standard for X-Ray Powder Diffraction	焼結アルミナdisc	1 disc	Instrument Response
676a	Alumina Powder（Quantitative Analysis Powder Diffraction Standard）	Alumina粉末	20 g	Quantitative Analysis

商品詳細はこちら

30年以上の経験と実績でお客様をサポートします。

開発元

ICDD® INTERNATIONAL CENTRE FOR DIFFRACTION DATA

MDI Materials Data

Materials Data
https://materialsdata.com/
International Centre for Diffraction Data
https://www.icdd.com/

正規国内代理店

LightStone®
株式会社ライトストーン

Ubiquitous AI Group Company

E-mail：sales@lightstone.co.jp
https://www.lightstone.co.jp/