

世界最大級の粉末回折データベース



ICDD PDF-4/PDF-2

Release 2017/2018

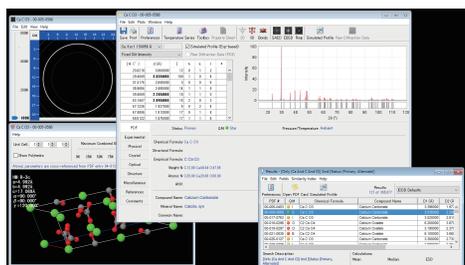
PDF-4、PDF-2は、結晶質の化合物の同定のために粉末回折データを収集、編集している組織・ICDD(International Centre for Diffraction Data)が作成しているデータベースです。収録されるデータは世界的な規模で集められ、ICDDのスタッフによる4段階の評価過程を通らなければ採用されません。また、収録データは技術の発展とともに再検討され、データが高精度・高品質であるように毎年アップグレードされています。

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

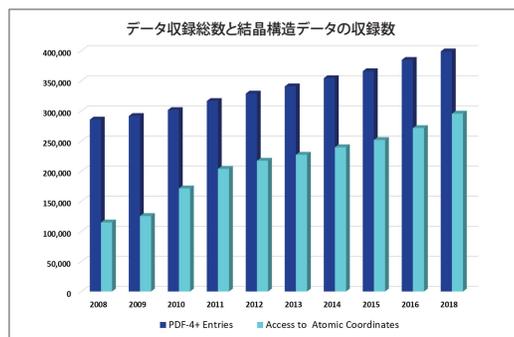
PDF-4 製品には、PDF-4+ (無機化合物)、PDF-4/Minerals (鉱物)、PDF-4/Organics (有機化合物) の3製品があります。ライセンス期間はすべて1年間で、年次更新によりライセンス期間の延長と最新版のデータをご提供します。

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 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-4+ のデータ収録数の推移



PDF-4+ のデータ収録数は、過去10年で10万件以上増加しています。

PDF-4+ 2018

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398,726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/Minerals 2018

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 2018

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526,126件です。

Sleve+ 2018 (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。

動作環境

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、
HDD : PDF-4+ : 10GB / Minerals : 1.5GB / Organics : 19GB

PDF-2 2018

回折装置用の定番データベース

PDF-2は、X線回折による無機材料分析で利用するため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。ライセンス期間は5年間で、PDF-2を使

い続ける場合、5年に一度新しいライセンスを購入していただく形になります。今回のバージョンから、相同定のためのサポートソフト「Sleve」(以前は別売り)が、PDF-2に含まれるようになりました。

動作環境

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、HDD : 4GB

ICDD 2017-2018 Product Summary

● ICDDの各データベースの収録データ数の比較

PDF-4+/Minerals/Organics 2018、PDF-2 2018 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	398,726	45,497	526,126	298,258
無機化合物	365,291	45,441	39,355	264,876
有機化合物	43,515	711	515,458	42,478
新規追加	14,113	1,156	10,072	7,139
原子座標を含む	295,309	37,210	106,369	0
I/cを含む	300,078	34,434	493,521	199,610

● 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
主に無機化合物の解析に利用	○	○		○
主に有機化合物の解析に利用			○	
主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	398,726	45,497	526,126	298,258
2017/2018版で新しく追加されたデータ件数	14,113	1,156	10,072	7,139
ライセンス期間	1年	1年	1年	5年
複数年契約 (新規で契約時に可能な年数)	○(4年/6年)	○(4年/6年)	○(4年/6年)	
サイトライセンス(複数ライセンス割引)	○		○	○

注1：別途、Jade、Match! など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:



〒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

e-mail sales@lightstone.co.jp

https://www.lightstone.co.jp/