

2023-2024

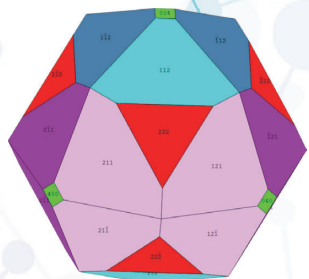
粉末X線回折の解析に最適なソフトウェアとデータベース

JADE Pro / Standard

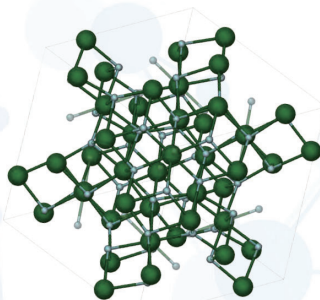
ICDD PDF-5 / PDF-4 / PDF-2

ISO認証取得

ICDDは品質マネジメントシステム ISO 9001:2015認定を取得
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



BFDH Morphology Model



3D Structure



ICDD®
INTERNATIONAL CENTRE FOR DIFFRACTION DATA

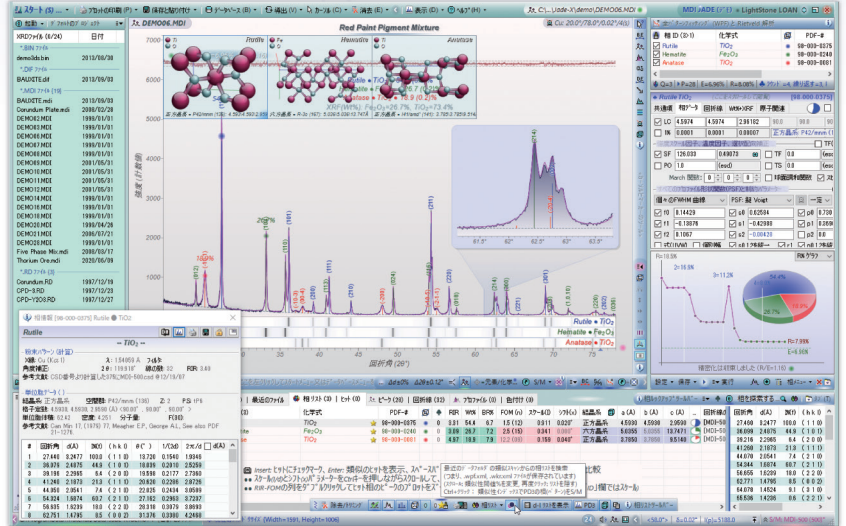
MP
I
Materials Data

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

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、X線粉末回折(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、常に他社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ー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。

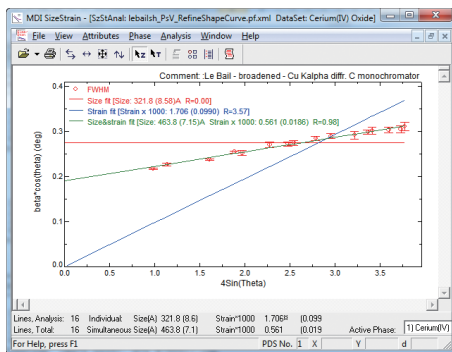


JADE Proのみで利用できるToolkit

JADE Proには、JADE本体の機能のほかにXRDの解析に役立つさまざまな拡張Toolkitが付属しています。より高度な分析を行う場合、JADE Proがお勧めです。

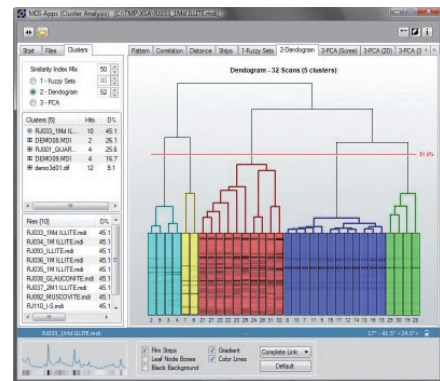
MDI SizeStrain

粉末X線回折データから、結晶子サイズと微小歪みを分析できます。このツールキットは、結晶子サイズの分析にはWarren-Averbach法とWilliamson-Hall法の両方をサポートしています。



Cluster Analysis

クラスター分析により、類似の回折パターンを分類できるツールです。ファジークラスタリングに加えて、主成分分析を使用した階層クラスタリングにより、樹形図を表示します。



おもな Toolkit

XRD Digitizer

XRDの回折像を、JADEで解析できるデジタルフォーマットのデータに変換するツール。画像の欠陥を微調整したり、信号処理や画像処理の過程で発生したノイズなどを除去することもできます。

Microstructure Tool

残留応力と微細構造の欠陥を分析できます。JADEでプロファイルフィッティングの実行後、立方格子(fcc, bcc)に適用できます。このツールによる分析は、David Rafaja教授(ドイツ、フライベルク)の研究に基づいています。

Laue Visualization

ラウエシミュレーション、立体投影、構造の視覚化を行うツール。シミュレーション結果を、AdobePDFファイルとしてエクスポートできます。

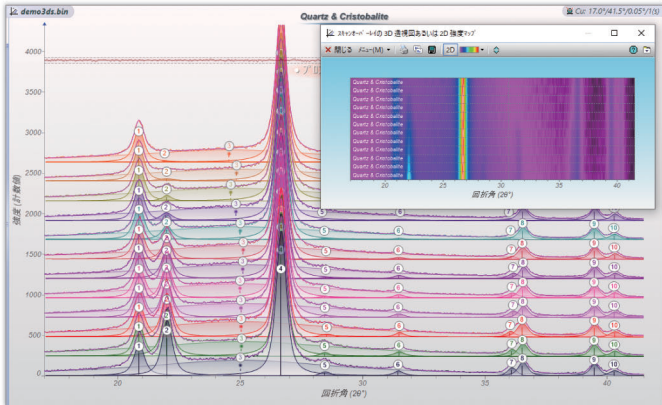
Charge Flipper + Solve Structure

チャージフリップング法を用いた結晶構造解析のためのツール。

JADE Pro/Standard のおもな機能

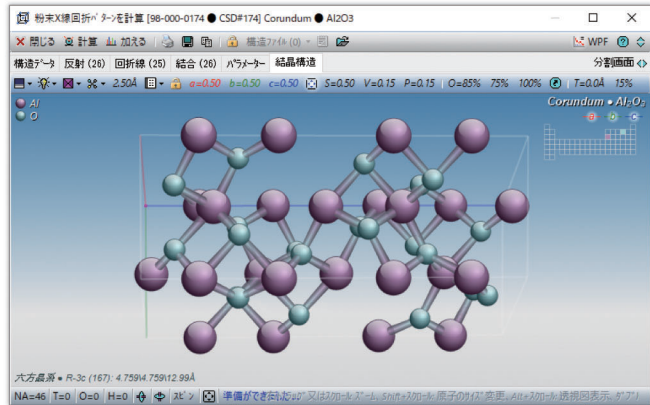
回折データの読み込み

ほとんどのXRD装置メーカー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。



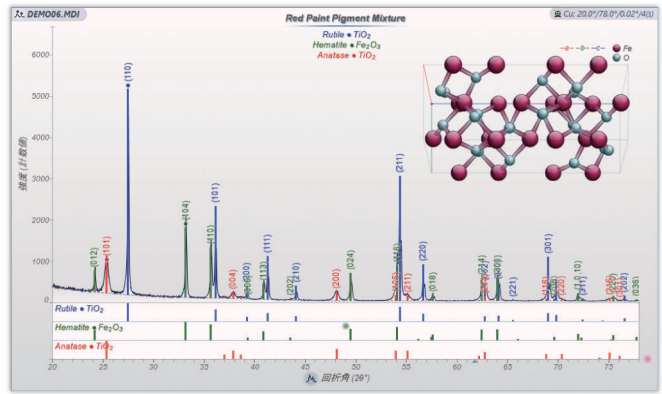
シミュレーションと可視化

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。



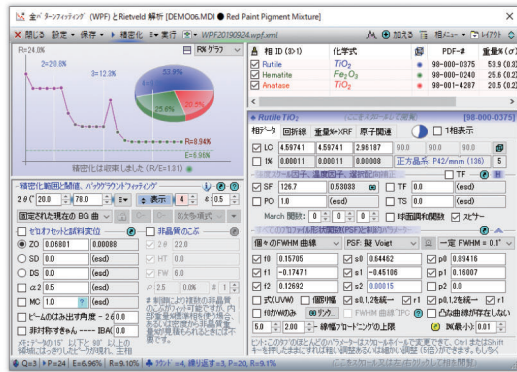
定性分析

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。また、DDM法(Direct-Derivation Method)による定量にも対応しました。



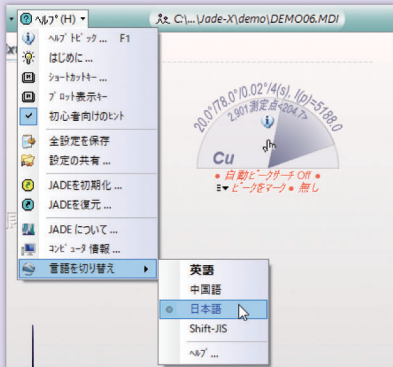
その他の分析

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うことができます。

結晶系	fm	fn	P	R	空間群 (#)	a (Å)	b (Å)	c (Å)	α (°)	β (°)	γ (°)	体積	ρ (g/cm³)	RIR
立方晶系	6	132	0	1	R-3c (197)*	4.7587	4.7587	12.9973	90.00°	90.00°	90.00°	120.00	254.9	0.004
単斜晶系	25	44	0	3	P2/n (19)*	4.5428	2.3796	4.1215	107.57°	90.00°	90.00°	107.57	42.5	0.002
単斜晶系	26	51	0	3	P2/c (19)*	4.5430	2.3793	5.1308	130.02°	90.00°	90.00°	130.02	42.5	-0.001
単斜晶系	29	19	0	4	C2/m (12)*	9.0887	4.7581	2.5646	90.00°	130.03°	90.00°	130.03	84.9	0.000
六方晶系	34	59	0	8	R-3m (166)*	4.7587	4.7587	12.9973	90.00°	90.00°	90.00°	120.00	254.9	0.004
六方晶系	34	12	0	8	R-3 (149)*	4.7581	4.7581	12.9952	90.00°	90.00°	90.00°	120.00	254.8	0.000
立方晶系	46	6	0	11	Fm-3m (60)	2.3829	10.2049	4.7581	90.00°	90.00°	90.00°	115.7	0.000	
立方晶系	49	6	0	18	Fm-3m (55)*	2.3829	10.2049	4.7581	90.00°	90.00°	90.00°	115.7	0.000	
立方晶系	50	8	1	9	Pbcn (61)	2.3829	10.2049	4.7581	90.00°	90.00°	90.00°	115.7	0.000	

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。



ISO認証取得

世界最大級の

粉末回折データベース


ICDD®
 INTERNATIONAL CENTRE FOR DIFFRACTION DATA

ICDDのデータベースが選ばれる理由

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-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。

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、1つ1つ丁寧に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い限り採用されません。また、技術が発展するに従って、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、高い品質に保たれています。

NEW!! PDF-5+ 2024

1年ライセンス(年次更新型)

データ収録数: 1,061,898件


**世界最大! 無機・有機データを
網羅したデータベース**

PDF-5+は、これまで無機(PDF-4+)と有機(PDF-4 Organics)で別々になっていたデータベースが統合された新製品です。

442,600件以上の無機化合物および623,000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。

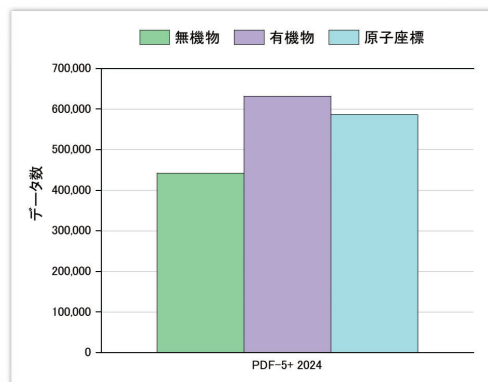


PDF-4+

PDF-4
Organics
**収録データは100万件以上で
旧PDF-4+と同価格帯!**

KeyPoint

- 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、586,704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。





PDF-4 Axiom 2024

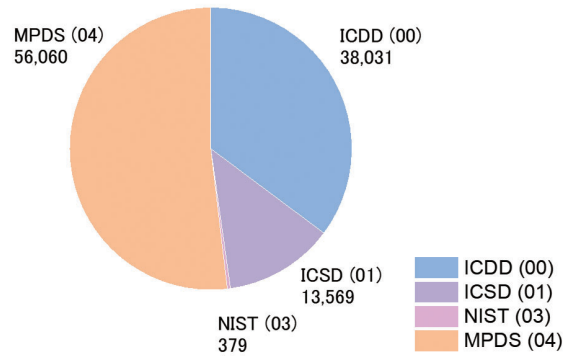
3年ライセンス

データ収録数: 108,039件

ベンチトップ型装置ユーザ向け

KeyPoint

- 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。
- 追加2ライセンスとセットになった割引商品(計PC3台用)もあります。



PDF-4 Minerals 2024

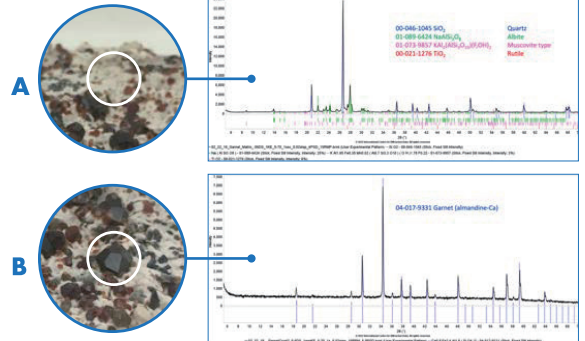
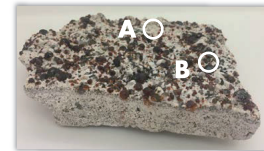
1年ライセンス(年次更新型)

データ収録数: 51,939件

鉱物に特化したデータベース

KeyPoint

- 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。



PDF-2 2024

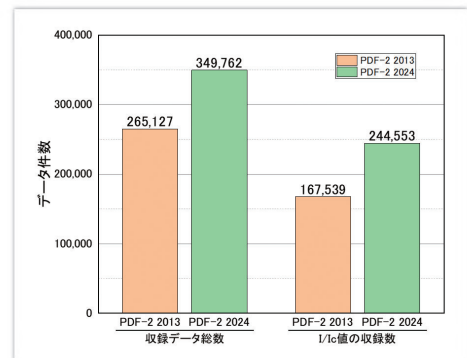
5年ライセンス

データ収録数: 349,762件

無機物中心のデータベース

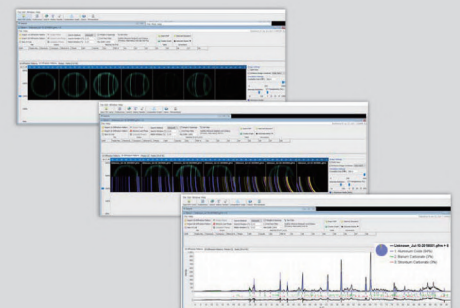
KeyPoint

- 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+ / Sleeve 2024

- 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、それぞれの検索・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+ / Sleeve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。





JADE Pro と JADE Standard

JADE Pro

すべての機能を利用できるJADEの最上位版です。JADE Proの相同定、全パターンフィッティング(WPF)、Rietveld精密化のツールを使用すると、少量成分の定量も日常的に行えます。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、先進的な機能を常に利用できます。

JADE Proのみで利用できるおもな機能

- 1クリック解析(相同定・Rietveld解析)
- 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
- フローティングライセンスによる複数ユーザでのJADEの共有

JADE Standard

必要な機能のみを購入できる永続ライセンスです。利用できる機能の違いにより、4つのレベルの製品があります。

JADE Standardのすべてのレベルで利用できる機能

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を利用できる構成。

	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
回折パターンの基本操作	○	○	○	○
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とJADE Standardのおもな違い

	JADE Pro	JADE Standard
購入形態	年次更新型(サブスクリプション)	買い切り型(永続ライセンス)
フローティングライセンスへの対応	○	対応不可
JADE本体	「JADE Pro」一種類のみ	必要な機能に応じて、4つの構成(レベル)から選択
複数ライセンス割引	○	○
その他割引	複数年一括購入による割引	—

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うことができます。

対応データ

Rigaku、Bruker(Siemens)、Malvern Panalytical(Philips)、ARL 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

OS : Windows 11 / 10
 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

対応データベース/構造データ

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

X線回折装置の付属するPCに追加する形で、JADEやICDDのデータベースをインストール可能です。詳細はお問い合わせください。



ICDD 各データベースの収録データ数

ICDD 2024	PDF-5 +	PDF-4 Axiom	PDF-4 Minerals	PDF-2
データ総数	1,061,898	108,039	51,939	349,762
無機化合物	442,671	95,694	51,300	295,931
有機化合物	632,058	12,483	776	55,228
新規追加	42,081	2,761	989	10,213
原子座標を含む	586,704	78,592	42,772	—
I/lcを含む	956,655	77,567	40,111	244,553

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/シンクロトロンデータを解析	○		○	
定量分析を行う				
リートベルト解析	○※	○※	○※	
RIR (Reference Intensity Ratio)	○	○	○	○
パターンフィッティング	○※	○※	○※	
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
複数年契約	○		○	
サイトライセンス (複数ライセンス割引)	○			○

※ 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

O S : Windows 11 / 10

CPU : Intel Core i7、i5、i3 以上を推奨

RAM : 4GB以上

HDD容量

PDF-5 + : 35GB

PDF-4 Axiom : 3GB

PDF-4 Minerals : 2GB

PDF-2 : 5GB

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!



訪問、 リモートによる デモを実施中!



訪問、またはWeb会議システムを利用したデモにて、実際にJADEがどのように動作するかご覧いただけます。事前にサンプルデータをお送りいただければ、そのデータを使用してデモを行うこともできます。

Materials Data
JADE

JADEの評価版(30日間)の
貸し出しが可能です



お申込みはこちら

<https://www.lightstone.co.jp/pr/ct/jadeicdd24/e.html>

**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もございます。全国の事業所(一般企業向け)、同一キャンパス内(アカデミック版)で使用できます。

PDF-5+のみのネットワークライセンスも選択できます(同一拠点内での利用に限定)。



購入前に収録物質をチェックできる! Powder Diffraction File (PDF) Search

<https://www.lightstone.co.jp/pr/ct/jadeicdd24/s.html>



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(Powder Diffraction File Search)が開設されました。ご購入前に収録物質を調べられます。

- X線回折装置の付属するPCに追加する形で、JADEやICDDのデータベースをインストール可能です。詳細はお問い合わせください。
- 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。

開発元



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

正規国内代理店 **25年以上の経験と実績でお客様をサポートします。**



〒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 <https://www.lightstone.co.jp/pr/ct/jadeicdd24/>
E-mail: sales@lightstone.co.jp(営業) tech@lightstone.co.jp(技術サポート)