

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

Materials Data
JADE



PDF-4 / PDF-2

日本語に対応した
使いやすい
ユーザインターフェイス

世界最大級の
粉末回折データベースの
最新版

一体化した解析ソフトウェアとデータベースに!!

75年以上材料研究・材料開発分野の科学者・技術者のために粉末X線回折データを収集してきたICDDと、30年以上世界で利用されている粉末X線回折の解析ソフトウェアを開発してきたMaterials Dataが合併しました。これにより、これまで別々の立場で開発してきたデータベースと解析ソフトウェアという材料の同定に必須となる2つのツールを、同一の組織で協力し合い、開発することになりました。

最新版では、JADEからPDFの検索画面を開いてデータ検索を行ったり、JADEのプロジェクトを直接PDFの相同定ソフトウェアSieve+で開くことができるなど、これまで以上にデータベース(PDF)と解析ソフトウェア(JADE)を一体のものとして使えるようになりました。



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

Materials Data JADE

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の特徴

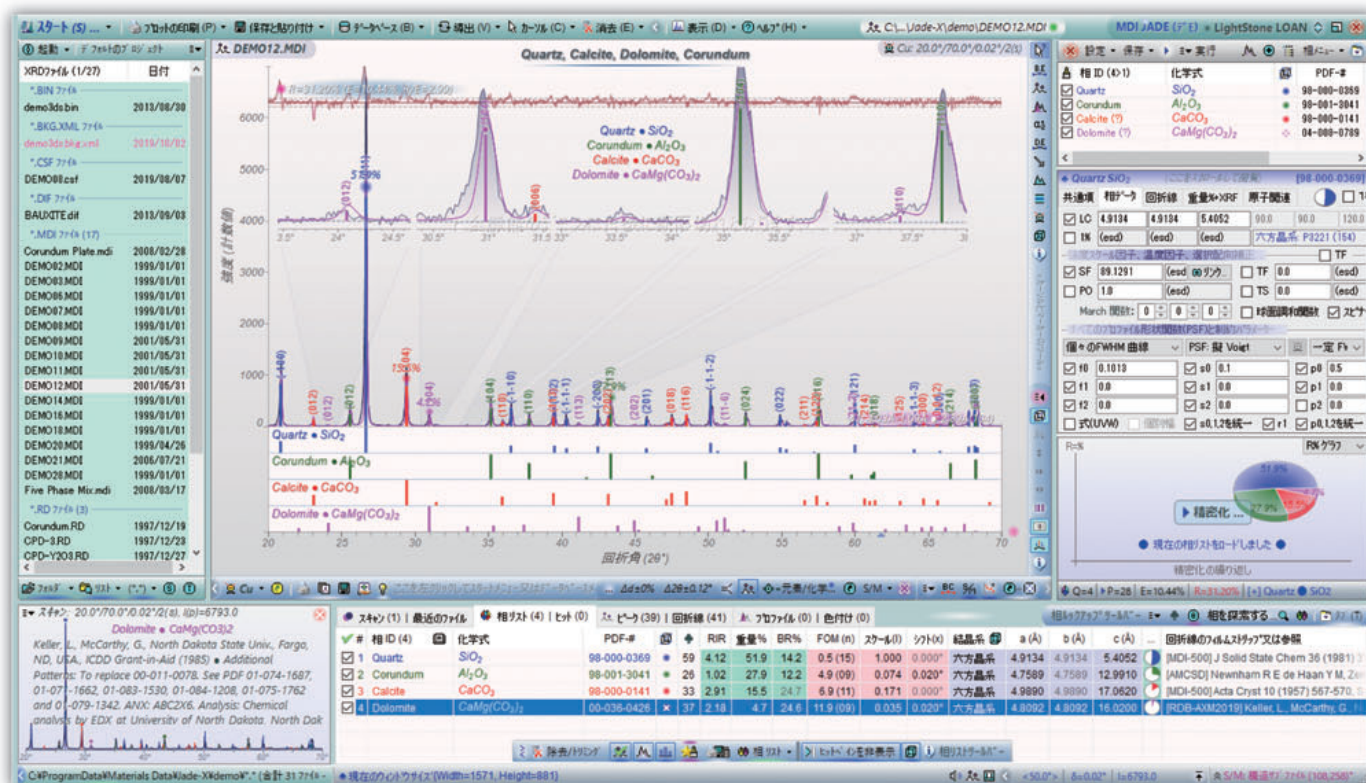
必要な機能を
包括的に提供

直観的で
使いやすい

数多くの
データ形式に対応

日本語ユーザ
インターフェイスに
対応!

メニュー操作で表示言語を日本語/英語/中国語に切り替えられます。
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



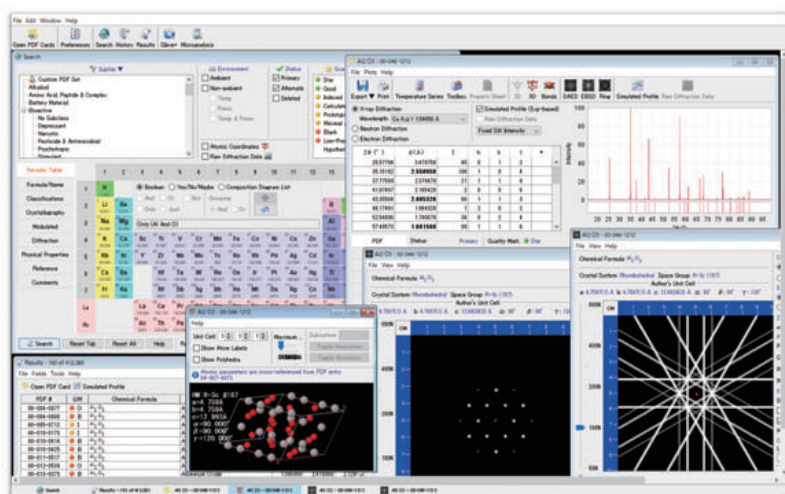
収録データの
高い信頼性

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・
物質への対応

絶え間ない
データの見直し



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は結晶のデータベースとしては世界で唯一、ISOが認証した品質マークと品質レビューを取得しており、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。

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、その他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高まります。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。

PDF-2製品

PDF-2 2021

無機物中心のデータベース

5年ライセンス

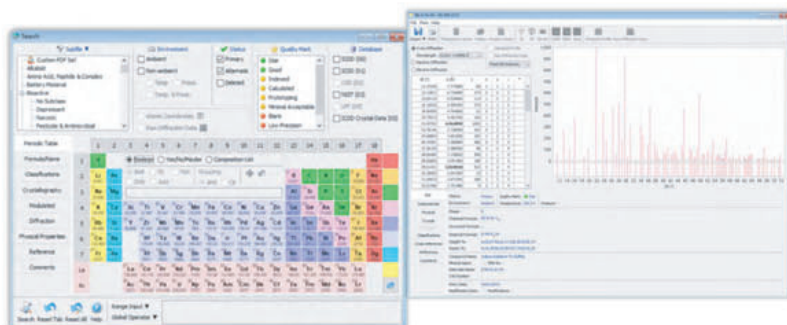
データ収録数: 316,820件

PDF-2は、自動X線回折装置を使った無機材料分析用に設計されたデータベースです。

PDF-2の各登録データには、格子面間隔(d)、相対強度、ミラー指数hkl(回折指数)の情報が含まれています。

また、既知の場合には、化学式、化合物名、鉱物名、構造式、晶系、融点や密度などの物理的特性、測定条件、文献情報なども収録されています。

PDF-2には、収録されているデータを検索、閲覧するためのソフトウェア、相同定を行うソフトウェアとしてICDD製の「Sleeve」が組み込まれています。また、JADEなど、多くの相同定ソフトがPDF-2に対応しています。



PDF-4製品

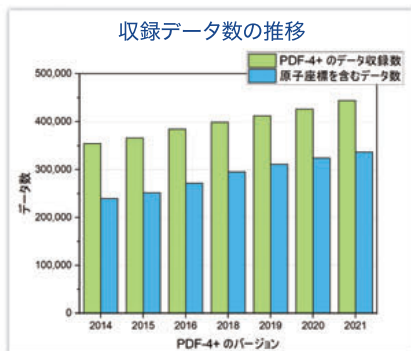
PDF-4 + 2021

世界最大!無機物のデータベース

1年ライセンス(年次更新型)

データ収録数:444,133件

世界最大の無機物の粉末回折データベースです。ICDD、MPDS、NIST、FIZのデータが統合されたもので、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。



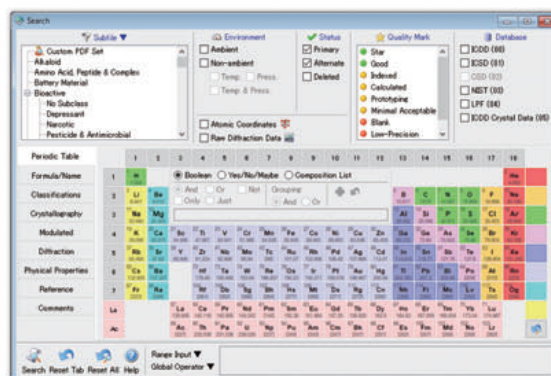
PDF-4 Axiom 2021

ベンチトップ型装置ユーザ向け

3年ライセンス

データ収録数:97,789件

3年ライセンスで無機物と有機物のデータを収録しています。ベンチトップ型装置ユーザにおすすめのデータベースです。



PDF-4 Minerals 2021

鉱物に特化したデータベース

1年ライセンス(年次更新型)

データ収録数:48,946件

鉱物の粉末回折データベースです。International Mineralogical Association (IMA) で鉱物と分類される化学種の約97%をカバーしています。PDF-4 MineralsのデータはPDF-4+にすべて含まれています。



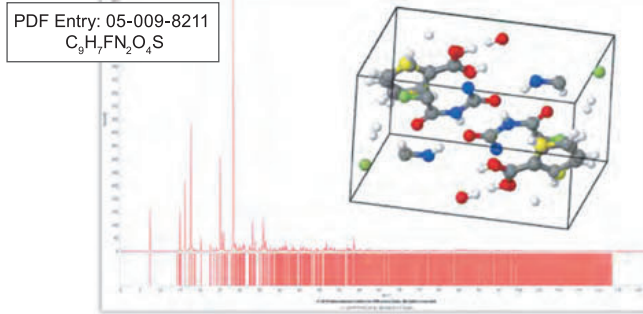
PDF-4 Organics 2021

有機物のデータベース

1年ライセンス(年次更新型)

データ収録数:547,295件

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。



サポートソフトウェア

Sieve 2021 / Sieve+ 2021

PDF-2 / PDF-4データベースを使い相同定を行うためのソフトウェアです。

実験で得られた粉末回折データとPDF-4のデータを比較・照合することにより、物質の同定を行います。検索方法としては、Hanawalt法、Fink、Long-8を利用できます。

SieveはPDF-2用、Sieve+はPDF-4 (PDF-4+ / Minerals / Organics) 用のサポートソフトウェアです。どちらもPDF-2 / PDF-4の検索・閲覧ソフトのプラグインの形で提供されます。SieveはPDF-2本体に含まれており、Sieve+はPDF-4製品とは別売りです。



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の相合同定、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(相合同定・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買い切り型のライセンスです。利用できる機能の違いにより、4つのレベルの商品があります。

レベル 1 JADE Standard Base

回折パターンデータのインポート・表示・重ねがき、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 2A ~ レベル 3 Baseに各機能を追加した構成

| | 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 |
|-------------------|-------------------------------------|-------------------------------------|---|
| 相合同定(サーチ/マッチ) | ○ | | ○ |
| 全パターンフィッティング(WPF) | | ○ | ○ |

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、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 10(Windows 8.1にも対応)
CPU : Intel Core i7、i5、i3 以上
RAM : 8GB
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-4+、PDF-4 Axiom、PDF-4 Minerals、PDF-4 Organics、PDF-2
NIST Crystal Data、AMCSD *.amc、CIF、MOL、PDB
など



ICDD 各データベースの収録データ数

| ICDD 2021 | PDF-4 + | PDF-4 Axiom | PDF-4 Minerals | PDF-4 Organics | PDF-2 |
|-----------|---------|-------------|----------------|----------------|---------|
| データ総数 | 444,133 | 97,789 | 48,946 | 547,295 | 316,820 |
| 無機化合物 | 422,539 | 88,872 | 48,895 | 64,044 | 295,333 |
| 有機化合物 | 47,129 | 11,583 | 733 | 536,317 | 45,548 |
| 新規追加 | 17,944 | 5,184 | 1,777 | 8,791 | 5,259 |
| 原子座標を含む | 336,582 | 69,715 | 40,373 | 126,926 | — |
| I/Icを含む | 343,409 | 70,318 | 37,578 | 513,642 | 216,127 |

用途別に最適なデータベースがわかる比較表

あなたに最適なデータベースは？

| | PDF-4 + | PDF-4 Axiom | PDF-4 Minerals | PDF-4 Organics | 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 | | | | | |
| Rietveld解析 | ○※1 | ○※1 | ○※1 | ○※1 | |
| RIR (Reference Intensity Ratio) | ○※2 | ○※1 | ○※2 | ○※2 | ○※2 |
| パターンフィッティング | ○※1 | ○※1 | ○※1 | ○※1 | |
| データベースに原子座標のデータも 必要 | ○ | ○ | ○ | ○ | |
| データベースの登録件数 | 444,133 | 97,789 | 48,946 | 547,295 | 316,820 |
| 新しく追加されたデータ件数 | 17,944 | 5,184 | 1,777 | 8,791 | 5,259 |
| ライセンス期間 | 1年 | 3年 | 1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) | ○ | | | ○ | ○ |

※1 解析には別途、JADEなどの解析ソフトウェアが必要です。

※2 解析には別途、Sieve+または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 10 / 8.1
CPU : Intel Core i7、i5、i3 以上を推奨
RAM : 4GB以上

HDD容量 PDF-4 + : 10GB
Axiom : 3 GB
Minerals : 1.5GB
Organics : 19GB

PDF-2 : 4GB

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!

リモートによる デモを実施中!

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

デモ後、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/jade/evaluate.html>



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

<https://www.icdd.com/pdfsearch/>



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。

開発元



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



正規販売代理店

～(株)ライトストーンはおかげさまで創業**25**周年を迎えました～

 **LightStone**[®]
株式会社 **ライトストーン**

〒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(営業) tech@lightstone.co.jp(技術サポート)
<https://www.lightstone.co.jp/>