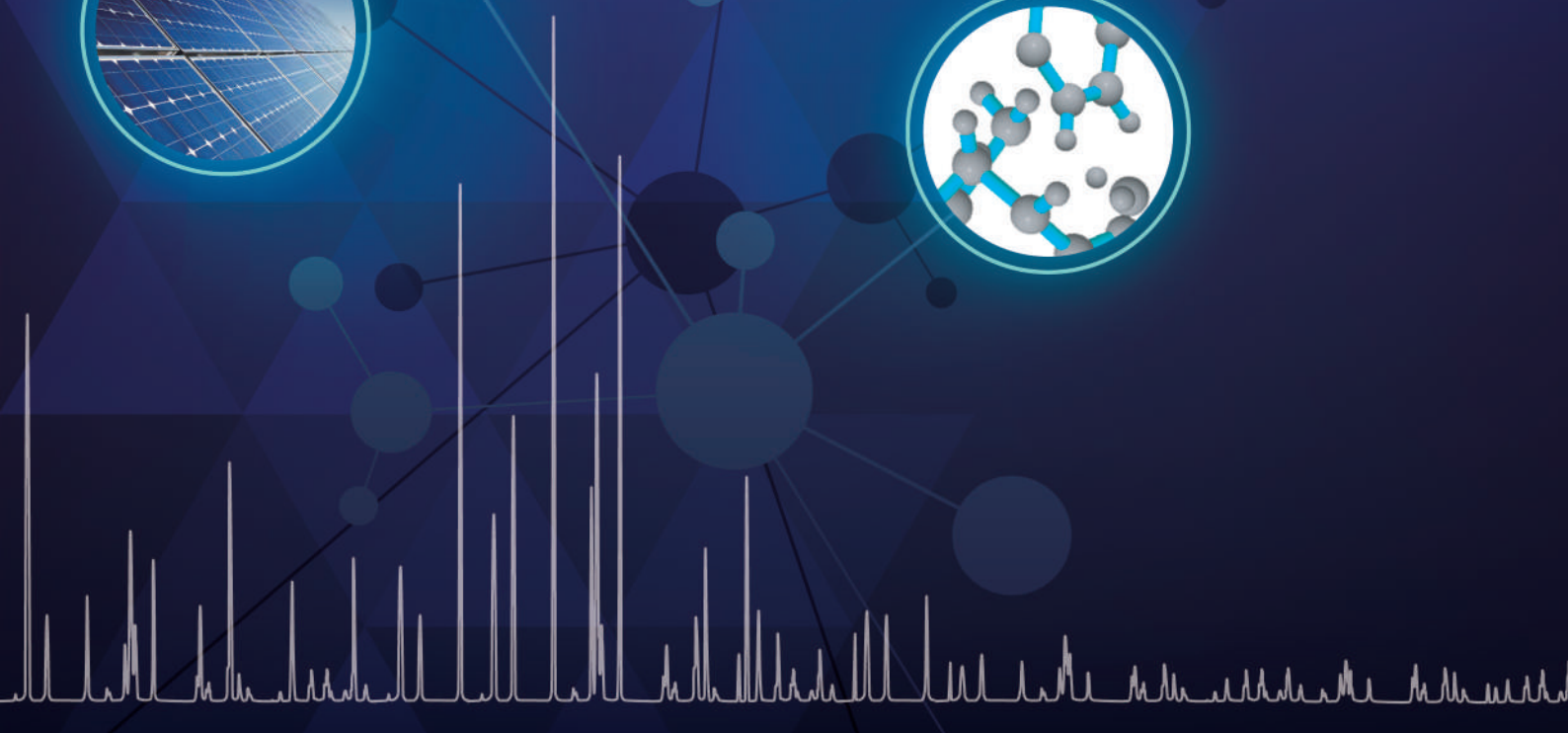
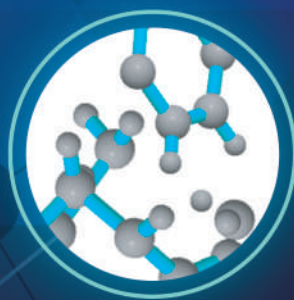




粉末X線回折の解析に最適なソフトウェアとデータベース

# JADE Pro / Standard ICDD PDF-4 / PDF-2

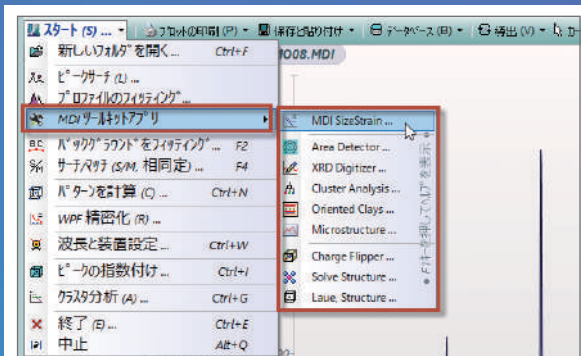


# 粉末X線回折に必要な機能を 網羅する解析ソフトウェア

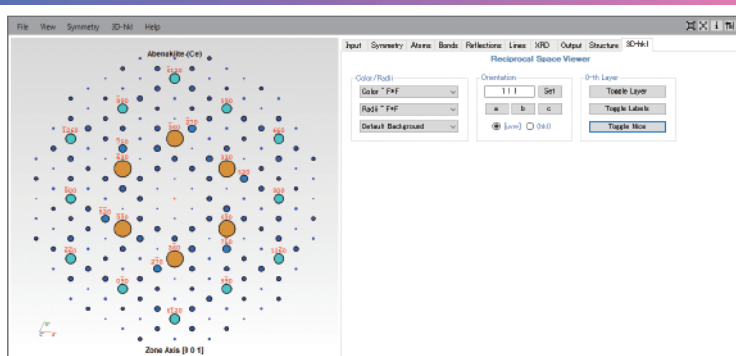


JADEは、X線粉末回折(XRD)データから結晶構造解析を行うためのソフトウェアです。開発元のMaterials Dataは、XRDのアプリケーションに新しい科学的アイデアと新しいアプローチを、常に他社に先駆けて導入してきました。JADE PRO/Standardは、その最新版です。直観的で使いやすいユーザインターフェイスにも定評があり、世界中のラボで広く利用されています。

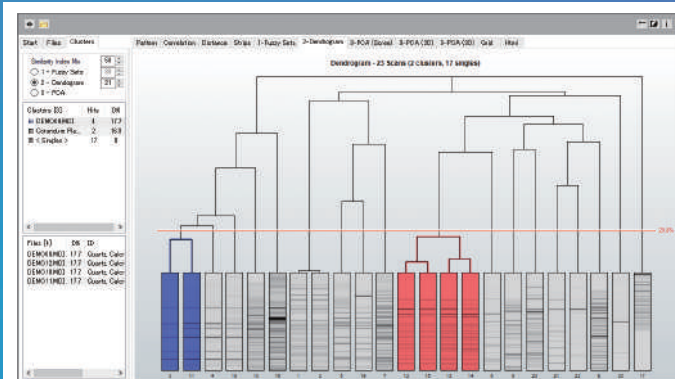
## 新機能



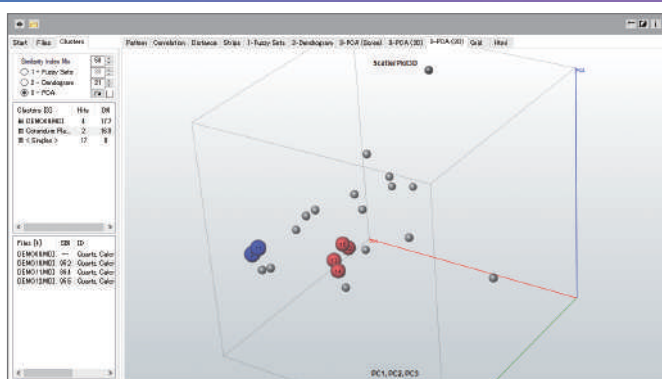
拡張Toolkitのメニュー



Laue Visualizationツール



Cluster Analysisツール



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。最新バージョンでは、このToolkitが大幅に強化されました。Toolkitには、JADEと連携して動作する以下のようなユーティリティが含まれています。

### 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です。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。

### 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。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。

### 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。

### 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。

### Charge Flipper

チャージフリップping法を用いた結晶構造解析のためのツール。

### Solve Structure

チャージフリップping法に必要な入力ファイルを作成するツール。

### Cluster Analysis

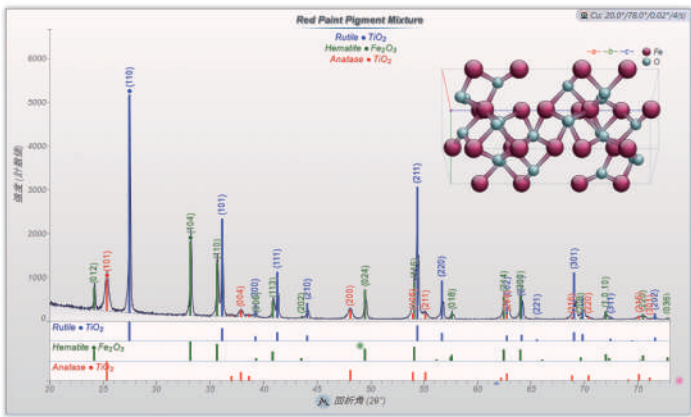
クラスター分析により、類似の回折パターンを分類できるツール。

JADE PRO/Standardのユーザインターフェイスは多言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。



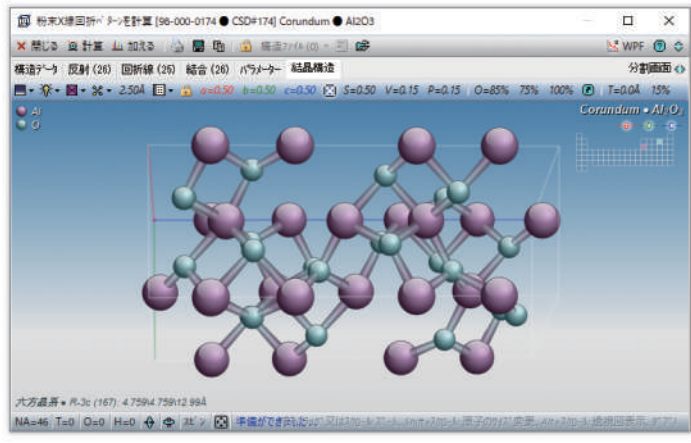
### 定性分析

市販の粉末回折データベース (ICDDの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みます。



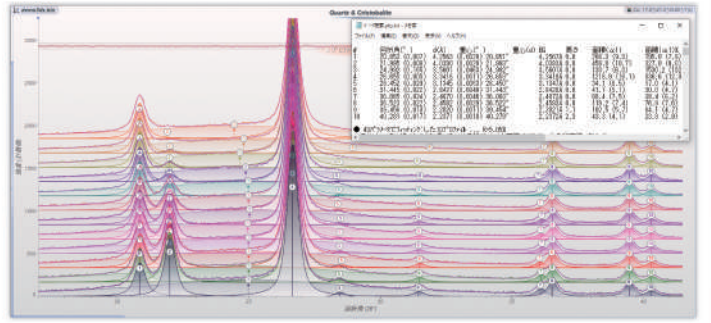
### シミュレーションと可視化

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。結晶構造を3D可視化すれば、分析している材料の理解に役立ちます。



### 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。



### 定量分析

複数の結晶相が存在する回折パターンのデータを同定したあと、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。



ISO認証取得

# 世界最大級の 粉末回折データベース



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高品質のレファレンス・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。

## 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。

## PDF-4製品

PDF-4+ 2022

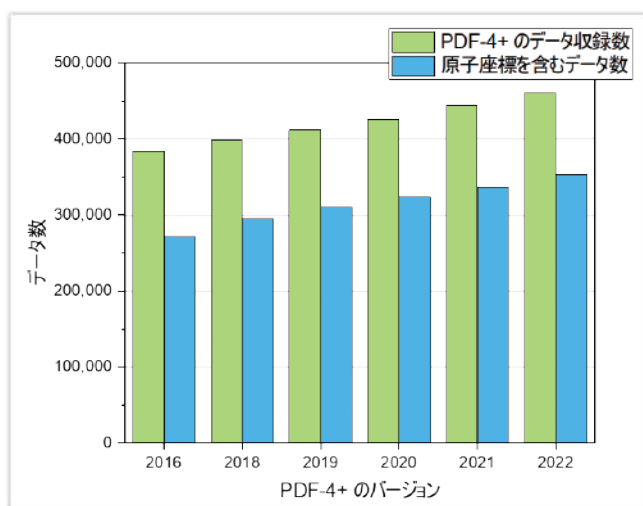
1年ライセンス(年次更新型)

データ収録数: 460,954件

## 世界最大! 無機物のデータベース

### KeyPoint

- 単体の製品としては世界最大の無機物の粉末回折データベース。
- ICDD、MPDS、NIST、FIZ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します。
- 結晶質固体、半結晶質固体、非晶質固体材料のデータを含みます。
- 全データ中、353,330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です。
- 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。



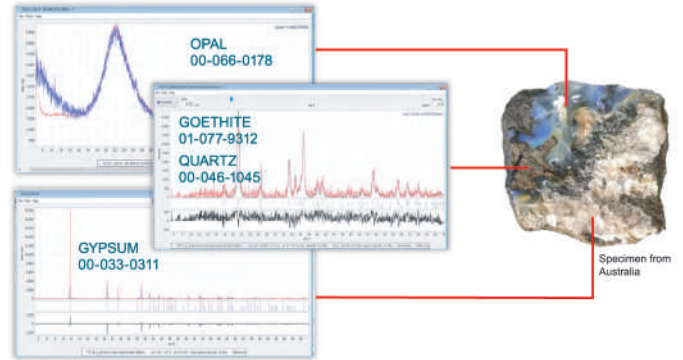


## PDF-4 Minerals 2022

### 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: 49,915件



#### 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-4+と比べてお求めになりやすい価格です。  
※PDF-4/MineralsはPDF4+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。

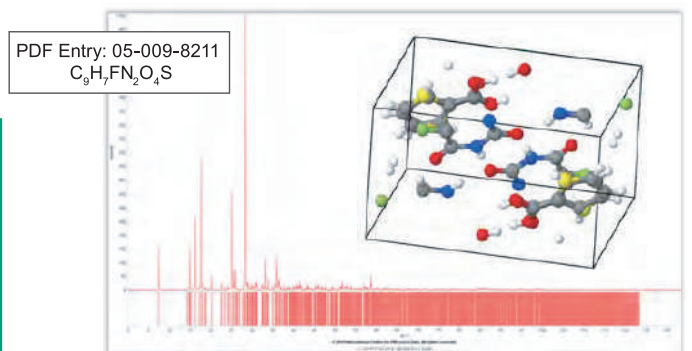


## PDF-4 Organics 2022

### 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: 560,195件



#### KeyPoint

- 有機物としては世界最大の粉末回折データベース。
- 製薬や化学産業を対象とした材料識別用に設計。
- 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。

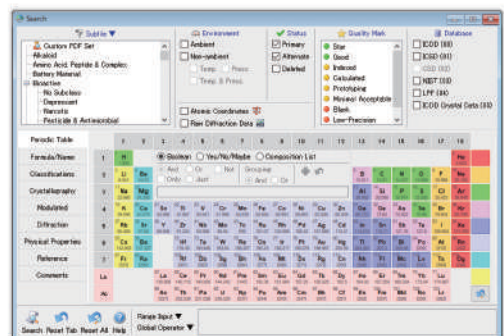


## PDF-4 Axiom 2022

### 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: 101,973件



#### 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です。
- 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。

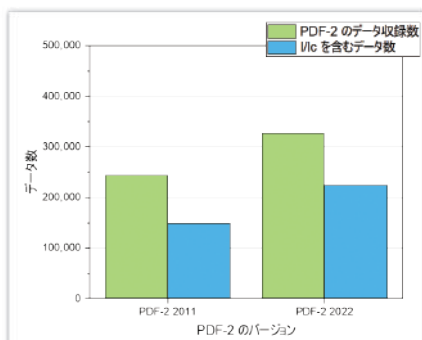
## PDF-2 2022

### 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: 327,624件

- 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 2022 / Sleve+ 2022



PDF-2/PDF-4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-2用、Sleve+はPDF-4(PDF-4+/Minerals/Minerals/Organics)用、それぞれの検索・閲覧ソフトのプラグインです。SleveはPDF-2本体に含まれており、Sleve+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 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

ご所有のX線回折装置に付属のPCにJADEやICDDをインストールしてご利用いただけます。



## ICDD 各データベースの収録データ数

ICDD 2022	PDF-4 +	PDF-4 Axiom	PDF-4 Minerals	PDF-4 Organics	PDF-2
データ総数	460,954	101,973	49,915	560,195	327,624
無機化合物	438,726	92,727	49,861	324,259	305,502
有機化合物	51,414	11,978	732	548,959	49,726
新規追加	16,187	4,184	969	12,900	10,804
原子座標を含む	353,330	71,560	41,376	156,107	—
I/lcを含む	358,223	73,144	38,387	525,705	224,922

## 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-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	○	○	○	○	
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

OS : 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。

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-4+・JADE Pro  
サーバ・エディション

PDF-4+(またはPDF-4 Organics)とJADE Proがセットになったネットワークライセンスが登場。

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。

既存のライセンスをアップグレードする形で、新規ライセンスより価格を抑えることもできます。詳細についてはお問い合わせください。



開発元



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

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 FAX:03-3865-0050 <https://www.lightstone.co.jp/>  
E-mail: [sales@lightstone.co.jp](mailto:sales@lightstone.co.jp)(営業) [tech@lightstone.co.jp](mailto:tech@lightstone.co.jp)(技術サポート)