無機化合物の結晶構造データベース

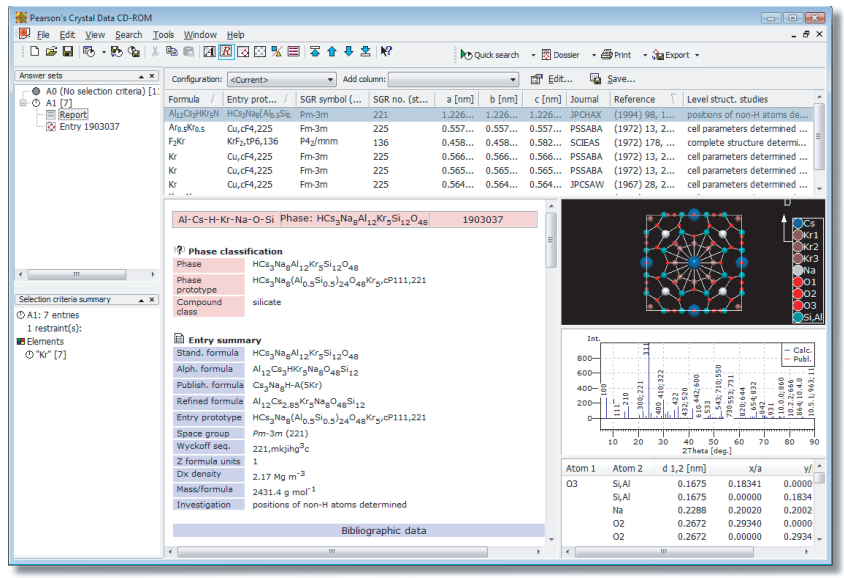
Pearson's Crystal Data

Crystal Structure Database for Inorganic Compounds

Pearson's Crystal Data（PCD）は、無機材料、無機化合物の結晶構造を収録した巨大な結晶のデータベースです。Pierre Villars と Karin Cenzual によって編纂され、ASM International が刊行しています。

おもな機能

- さまざまな情報から検索が可能
  - 結晶の元素組成からの検索
  - 結晶学的データからの検索
  - 文献情報からの検索 など
- 結晶構造情報の表示
- 結晶構造の可視化（3D構造図）
- 回折パターンの表示
- データシートの出力
- データソースへのリンク



Pearson's Crystal Data の特徴

厳しく評価された充実したデータ

最新版のPearson's Crystal Dataリリース2024/25には、約41万件の結晶構造のデータセットが含まれています。このデータの内訳は、約22万5500件の化学式の異なるデータ、約2万2100件の実験で得られた粉末回折パターンなどです。

分かりやすい検索画面

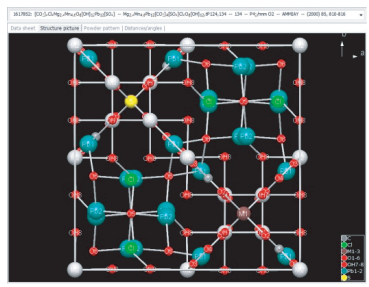
Pearson's Crystal Data の優れた特徴の 1 つが「Quick search」ダイアログです。設定画面 1 ページによく使われる検索項目がまとまっており、初心者が検索を実行する場合でも、簡単な操作で素早く検索を行えます。また、選択項目を入力する度に内部のマッチング項目が更新され、リアルタイムでヒット内容を確認できます。

結晶のさまざまな情報から検索可能

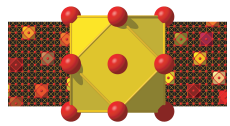
原子間距離、結晶相の情報（晶系、結晶の組成式、鉱物名など）、化学組成、原子の周囲の環境（配位数、原子の座標）、結晶学的なデータと分類、構造の状態データ、処理情報（例えばPDF番号）、図書目録のデータ等、さまざまな情報で結晶データを検索できます。

結晶構造を3次元可視化

Pearson's Crystal Dataでは、検索結果の中に結晶の単位格子の構造図が表示されますが、その構造図は単なる2次元の画像ではありません。結晶の立体構造を可視化する強力な機能が含まれています。検索結果の構造図を回転、移動させたり、表示範囲を変更したり、表示モデル（ball-and-stick、wire、space-filling）を変更するなど、さまざまな変更を加えることができます。



検索したデータを結晶構造可視化ソフトDiamondに直接受け渡し、Diamondで結晶構造図を加工できます。また、図を回転させるなどして構造を検討することもできます。



Pearson's Crystal Dataの動作条件

OS : Windows 11 / 10
RAM : 2GB以上（4GB以上を推奨）
HDD : 8GB以上の空き容量
ビデオ : 1024×768以上の解像度、32,768色以上
※　OSのシステム条件を満たす環境が必須
※※ 動作条件の詳細はホームページをご覧ください

Pearson's Crystal Dataの最新情報はWebで…
https://www.lightstone.co.jp/pearsonscd/

株式会社ライトストーン
ソフトウェア事業部
Email sales@lightstone.co.jp

20260707