

## ICDD (JCPDS)関連 X線回折データベース/ソフトウェア

(一般価格/教育価格——2023年9月から2024年7月末まで有効/消費税込み)

今年のリリースでの大きな変化は2つです。1つはPDF-4 OrganicsがPDF4 Full Fileと統合され、PDF-5になったことです。もう1つはこれまで別料金が必要であったSieve+が無料になり、PDF-4/5に標準装備されることです。

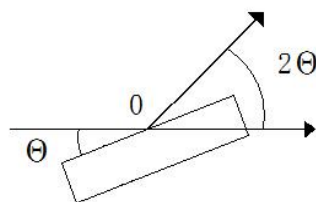
- PDF-4 Mineralsはde-tag データの対かはあっても名称はそのままかわりはありません。
- PDF-1,2,3,4はデータベースのコンテンツがカバーする幅広さを表してきましたが、PDF-5はコレクションの統合による量的なレベルの違いをあわせているだけです。

### PDF-2フルファイルコレクション(ICDD Experimental、ICSD、ICDD Crystal)

PDF2 データベース検索システム—スタンドアロン(DVD または USB)		
PDF2plusX for Windows + DDViewer/Sieve + PDF-2 (5年間ライセンス)システム		
新規購入一式: ¥2,125,200.- (一般) ¥1,790,250.- (教育)		
商品構成	<ul style="list-style-type: none"> <li>* Release 2024 DVD または USB スティック(PDF-2)</li> <li>* PDF2plusX for Windows 検索ソフトウェア(DVD)</li> <li>* DDViewer/Sieve ソフトウェア</li> <li>* システムサポート</li> </ul>	
アップデート/一般(教育)	PDF-2 Release 2023 から	¥519,750.- (¥392,700.-)
	PDF-2 Release 2022 から	¥924,000.- (¥704,550.-)
	PDF-2 Release 2021 から	¥1,328,250.- (¥1,016,400.-)
	PDF-2 Release 2020 から	¥1,732,500.- (¥1,328,250.-)
必要なシステム構成: Windows 8/8.1/10/11/DVDドライブまたはUSBポート		

### PDF-5 コレクション(ICDD Experimental、ICSD、Pouling、Cambridge Crystal、ICDD Crystal)

PDF-5 データベース検索システム—スタンドアロン(DVD または USB)		
DDViewer+ + Sieve+ + X-Search + PDF-5 2024 RDB システム(1年間ライセンス)		
新規購入一式: ¥2,125,200.- (一般) ¥1,790,250.- (教育)		
商品構成	<ul style="list-style-type: none"> <li>* PDF-5 2024 RDB (PDF-4) (DDViewer+/Sieve+ソフトウェア標準装備)</li> <li>* X-Search ソフトウェア(DVD)</li> <li>* X-Viewer データ処理ソフトウェア(DVD)</li> <li>* システムサポート</li> </ul>	
アップデート/一般(教育)	PDF-4 Full File 2023 から	¥519,750.- (¥392,700.-)
	PDF-4 Full File 2022 から	¥924,000.- (¥704,550.-)
	PDF-4 Full File 2021 から	¥1,328,250.- (¥1,016,400.-)
	PDF-4 Full File 2020 から	¥1,732,500.- (¥1,328,250.-)
PDF-2 からの乗換(移行)は可能であり、PDF2plusX for Windows の更新価格と同じです。ただし、PDF-5 から PDF2 への逆移行はできません。		
必要なシステム構成: Windows 8/8.1/10/11/DVDドライブまたはUSBポート		



**【輸入元】**株式会社 デジタルデータマネジメント  
〒103-0025 東京都中央区日本橋茅場町 1-11-8  
紅萌ビル

Tel: 03-5641-1771 Fax: 03-5641-1772

**【販売代理店】**  
株式会社 テクノサイエンス  
〒264-0034 千葉県若葉区原町 929-8  
Tel: 043-206-0155 Fax: 043-206-0188

## インターネットアクセス(Web)

Web PDF-5 データベース検索システム	
DDViewer+ + SLeve++ PDF-5 2024 RDB システム	
新規購入一式: ¥2,125,200.- (一般) ¥1,790,250.- (教育)	
商品構成	<ul style="list-style-type: none"> <li>* PDF-5 2024 RDB in ICDD Via Web (No physical) (DDViewer+, SLeve+ダウンロード)</li> <li>* USB ポート用プロテクトキー</li> <li>* システムサポート</li> </ul>
アップデート	PDF-4 Full File と同じ ¥493,000.- (¥373,000.-)

\*DVD 供給のローカルバージョンと Web アクセスバージョンの違いはデータベースがローカルに設置されているか、ICDD のサーバーに位置するかの違いであり、スクリーン上のイメージは全く同じです。正規のライセンスユーザーであることを示すプラグ( dongleとも言う、Page 6 にイメージ有り)を USB ポートに差し込むと認証されます。

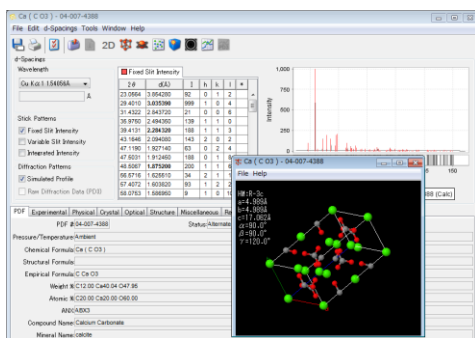
### Web バージョンの利点

- ☆ ドングル(プロテクトキー)を装着した PC が正規の登録ユーザーと見做されるため、ライセンスされた建物内で複数の PC にインストールが可能です。 **Web バージョンの欠点**
- ☆ ドングルを保管しなければならない。紛失=ライセンスの失効カードデータの表示に時間がかかる(インフラによって左右されますが、Win 8.1 マシンで 1 分半ほど要します。)

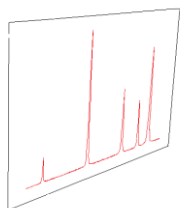
## その他の PDF 商品

### PDF-4 Minerals Subfile 鉱物コレクション

PDF4 データベース検索システム	
Minerals 2024 RDB システム(1 年間ライセンス)	
新規購入一式: ¥462,000.- (一般) ¥334,950.- (教育)	
商品構成	<ul style="list-style-type: none"> <li>* Minerals 2024(PDF-4) (DDViewer+ + SLeve+ソフトウェア内蔵)</li> <li>* システムサポート</li> </ul>
Minerals 2023 からの更新	¥277,200.- (一般) ¥242,550.- (教育)
必要なシステム構成: Windows 8/8.1/10/11 / DVD または USB ポート	



(DDViewer+で PDF5 の Pauling File コレクションからのカード表示と結晶構造)



PDF-2/4/5 商品の形態についての注記：

\*DVD または USB での納品です。Web からのダウンロードも選択できますが、30 日間でダウンロードサイトにアクセスできなくなります。ICDD はバックアップを残すことを推奨しています。であれば、物理媒体での納入の方がお互いに好都合かと思ひ、価格表からは省いております。ご注文の際には納品媒体を指定して下さい。

\*USB メモリーは不安定な媒体であり、読めなくなることがしばしばあります。そのため媒体のご指定が無ければ、DVD での納品として扱います。

★ダウンロードの場合、通関ポイントを通らない輸入(他に、コンサルタント契約などの知的財産など)になり、輸出元法人での源泉所得税納付の証明がない限り、輸入法人が 20%を支払わなければなりません。この分を定価に上乗せしなければならないので、誰も選択しないと考へ、価格を明示していません。WebPDF-5 の場合、USB ドングルの部物理媒体があるため、通常の物品輸入販売になります。

## PDF Statistics 2024

Data Entry Source	PDF-5+ 2024 PDF-5+/Web 2024	PDF-4/ Axiom 2024	PDF-4/ Minerals 2024	PDF-2 2024
00- ICDD	125,448	38,031	13,114	125,448
01- FIZ	96,440	13,569	14,788	213,378
02- CCDC	509,918	0	0	0
03- NIST	2,827	379	229	10,067
04- MPDS	271,047	56,060	23,733	0
05- ICDD Crystal Data	56,218	0	75	869
Total No. of Entries	1,061,898	108,039	51,939	349,762
Subfile Distribution:				
Inorganic	442,671	95,694	51,300	295,9317
Organic	632,058	12,483	776	55,228
New Entries	42,081	2,761	989	10,213
Rietveld—No. with atomic coordinates	586,704	78,592	42,772	0
Reference Intensity Ratio (RIR)—I <sub>c</sub>	956,655	77,567	40,111	244,553
Experimental Digital Patterns	19,434	8,984	203	0

## PDF-2、PDF-4/5 データベース、ライセンスについて

Release 2005(Set55+)以降、データベースフォーマットは PDF-2 および PDF-4 とももとのテキストからリレーショナルデータベース(Microsoft Access→Access 2000→Sybase)フォーマットに変更されています。PDF-4 のユーザーライセンスは 1 年用ライセンスでは 1 年間限り、3 年用ライセンスでは 3 年間限りなどとなっています。ライセンスを継続更新しない限りタイムロックが掛り、データベースにアクセスできなくなります。また、全ての物品を ICDD に返却するという条件が付きます。

ICDD のライセンスは現在、同一の建物内でのみ認められます。同じ建物内であれば、追加ライセンスを新規価格の約 20%で追加購入できます。(これらのライセンスの更新はあくまで基本ライセンスの更新が前提です。なお、

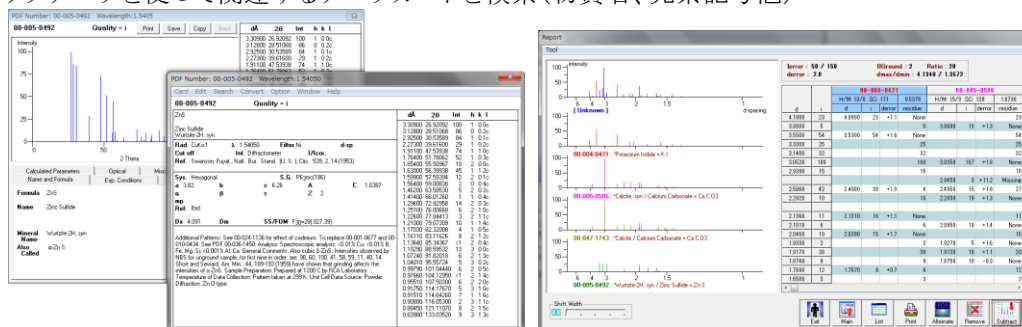
PDF-2 はライセンスに期限は Release 2018 から 5 年に区切られています。(Release 2016 より以前の商品には追加の 5 年間ライセンスがついていましたが、Release 2017 以降、追加の 5 年は廃止になりました。)

この期間内に更新があれば、そこからさらに5年となります。

PDF2plusX for Windows は物質名、強度の大きいラインの d 値、カード番号などのデータベース(データブック)のエントリー情報からデータベースを検索する PDF2plus に加え、Microsoft Excel やテキストファイルから d または 2θ 単位のピークテーブルをコピー/ペーストで取り込み、回折装置の実測の Unknown パターンからデータベースを検索する X-Search を一体化したソフトウェアです。

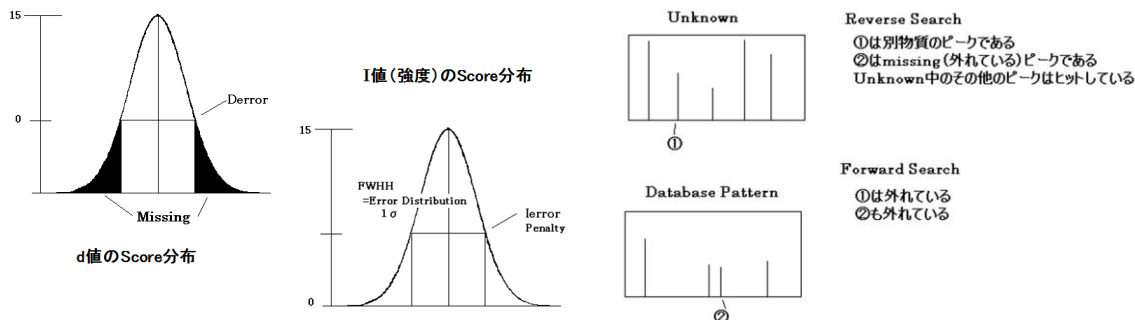
## PDF2plusX for Windows での検索

1. XRD パターンマッチング(X-Search)
2. おおざっぱな回折線の位置と強度でデータベースを探索機(Any Peaks)
3. メタデータを使って関連するデータカードを検索(物質名、元素記号他)



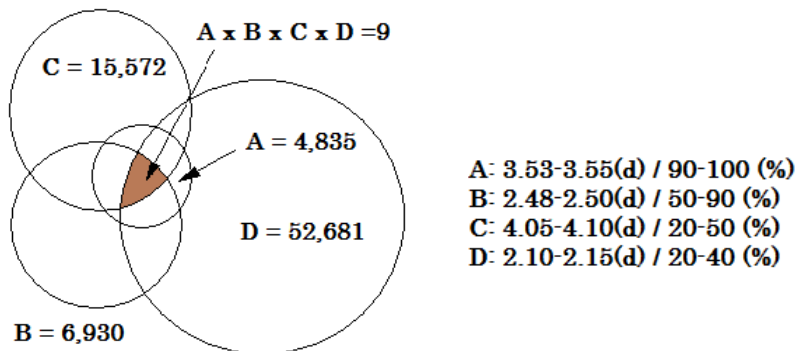
(PDF2plusX for Windows のカードの表示と検索/X-Search のパターンマッチング)

## サーチマッチのアルゴリズムとスコアリングのコンセプト(X-Search は Reverse Search を使用)



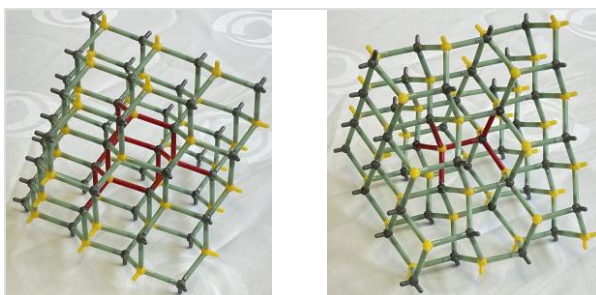
## Any Peaks サーチ(PDF2plus X for Windows と X-Search に搭載)

サーチマッチ(パターンマッチング)はUnknown データの回折線の各々にdとIの正規分布を作り、その分布のどの辺にデータベースパターンの該当する線が位置するかを基に点数付けしています。この方法はUnknown パターンが全体的に一致するのを見つけるのに向いていますが、特定の線の数本にのみ注目してマニュアルでデータベースを探すと、もっと直観的な絞り込みが必要となります。つまり、Unknown のどのあたりにどれくらいの強さの線(例えば、d 値で 3.53 から 3.55 あたりに 50%から 90%くらいの強い線)の条件を繰り返すことがバーグラフ形式のデータベース(他に、マススペクトルでも)に強力な手段です。1%以上の強度を示すすべての線が検索の対象になります。



ここに XRF での元素情報を掛け合わせると目的のデータカードに辿り着けるはずですが。

No.	PDF ID	Chemical Name	Chemical Formula	Strong Lines(d)	SYS	QTY	DEL
1	000010554	Potassium Iodide	KI	3.53 2.50 4.08	C		D
2	000010555	Potassium Iodide	KI	3.53 2.49 1.58	C	O	D
3	000040471	Potassium Iodide	KI	3.53 2.50 4.08	C	*	
4	000541850	[4,5-Bis(4-Formylphenoxy)methyl]benzo...	C60 H64 KO18 -I- C H3 ...	3.53 2.50 4.08	M	*	
5	010705067	Cesium Silicon Selenide	Cs4 Si Se4	3.54 3.09 2.50	C	*	
6	010714685	Potassium Iodide	KI	3.53 2.50 4.08	C	i	
7	010782364	Gadolinium Chloride Nitride	Gd3 Cl6 N	2.63 9.09 2.96	A	*	
8	010881572	Lead Phosphate	Pb2 P2 O7	4.56 3.36 3.20	M	O	D
9	010897757	Zirconium Cobalt Aluminum Hydride	Zr6 Co Al2 H10	2.67 2.65 2.50	H	*	



(閃亜鉛鉱とウルツの単位格子とその周囲)

## ICDD 商品全体に関する注記:

- + PDF-2/PDF-4/5 のインストーラおよびプログラムはマイクロソフトがサポートを続けている Windows 8/8.1/10/11 が動作可能な環境になります。
- + PDF-2 および PDF-4/5 の 5 年間または 10 年間固定のライセンスや、ダウンロードによる商品供給マルチユーザーライセンス(2 ライセンス目以降)、AXION データベースなどは価格表には入れておりません。必要に応じてお問い合わせください。
- + Release 2024 には従来通りの追加を含めた Set 1~67 に加え、ICSD の結晶データベースから計算で作成された回折パターンと NIST から提供された回折パターンが Set 70~89 に入れられています。
- + 2019 のデータベースから、従来インストール時に与えられていた 30 日間のテンポラリーライセンスがなくなりました。すべてのデータベースで、インストール時に Registration が必要になります。
- + 各システムのデモンストレーションにつきましては別途お問い合わせ下さい。
- + 上記のシステムの更新価格はセルフインストール/セルフトレーニングを想定しています。インストールおよび利用者トレーニングは通常有料ですが、新規購入の場合には、PDF-2/PDF-4/5 データベースの理解、PDF2plusX、DDViewer、X-Search ソフトウェアの利用を促進する意味もあり基本的には無料で承ります。ただし遠距離の場合には交通費の請求を相談させていただきます。
- + データベースにつきましては、新規購入の場合には受注(ライセンスアグリーメント受領)後 20~30 日の納期をいただきます。アップデートの場合には 2 週間の納期をいただきます。
- + Sleve には Fink インデックス、ユーザーパターンのインポートなど、DDViewer が持たない機能があります。PDF2plus はこれら両方の機能を持ち、さらにユーザーパターンとデータベースパターンの Matching Quality Index (一致度の評点)を計算する機能も付きます。
- + WebPDF4/5 でライセンスされる際の USB キー (通称、ドングル)



- + 2017 年の Set 67 の発売以降、データブックの刊行はなくなりました。2018 年 8 月からデータブック、インデックスブック、Minerals のデータブックを含め、すべてなくなりました。
- + 教育機関(Academic)価格は学位(学士、修士、博士など)を発行している機関が対象になります。
- + PDF-1 はカード番号、物質名、分子式、d/I だけのデータベースであり、磁気テープで配布され、PC が普及する前のミニコンで使われました。  
PDF-2 は PDF-1 のコンテンツに hkl、格子定数他を加えたデータブックと同じ情報を持ち、CD-ROM で配布されました(現在は DVD または USB)。  
PDF-3 は PDF-2 のコンテンツにディフラクトグラムを加えたものとして計画されたが、製品には至りませんでした。  
PDF-4 は PDF-2/3 のコンテンツに結晶の座標データを加えたもの。  
PDF-5 は PDF-4 の Full File と Organics を統合したものであり、各エントリーのコンテンツは PDF-4 と同じ。
- + 上記の価格はいずれも消費税込みの価格です。

## データの利用に関して、よくある質問と ICDD からの回答

- Q:検索結果として保存または印刷した PDF カードデータの内容を自分の研究室に持ち帰って保管してもよいか?  
A:カードデータの販売と目的して使わない限り、問題はない。
- Q:発表し文献のバックデータとしてデータカードの内容を掲載してもよいか?  
A:自由に掲載してもよいが、出典元として ICDD の名称を記載してくれるのに越したことはない。
- Q:依頼分析のバックデータとして ICDD のカードデータ内容のコピーを添付してもよいか?  
A:依頼分析料の対象は分析技術料としてのものであり、カードデータ内容が料金の対象ではないはずなので、添付してもよい。

\* 上記は ICDD から得た回答ですが、社会情勢の変化により回答が変わってくるかもしれません。また持ち帰ったり、バックデータとしての利用にも件数の限界があるはずで、常識的に微妙に感じる場合、弊社にお問い合わせください。

## 製作元:

PDF2plusX for Windows、X-Search および X-Viewer: Digital Data Management Corporation  
DDViewer、DDViewer+、Sleve および Sleve+: International Centre for Diffraction Data (JCPDS)  
PDF-2 Database: International Centre for Diffraction Data  
PDF-4/5 RDB Database: International Centre for Diffraction Data