

ICDD (JCPDS)関連

X 線回折データベース/ソフトウェア

Release 2021、Full File 2021、Organics 2021、Axiom 2021
(一般価格/教育価格—2020年9月以降有効)

DDViewer または **DDViewer+** は ICDD のデータベース (Axiom を除く) に標準添付されたデータマイニングソフトウェアであり、おもに PDF2plus の機能に加え、DDViewer+ ではおもに 04MPDS に入っている結晶構造データを表示できます。**SIeve** および **SIeve+** は純物質を想定して ID を行うツールですが、一般的なパターンマッチングではありません。(DDViewer と SIeve は PDF-2 用ソフトウェアであり、DDViewer+ と SIeve+ は PDF-4 用のソフトウェアです。しかし、区別のために+が付けられているだけで、機能はそれぞれ全く同じです。) PDF-2 用の SIeve は Release 2018 から無料で標準装備されます。

PDF-2 フルファイルコレクション(Inorganics & Organics)

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: ¥1,350,000.- (一般) ¥1,150,000.- (教育)		
商品構成	* Release 2021 DVD または USB スティック(PDF-2)	
	* PDF2plusX for Windows 検索ソフトウェア(DVD)	
	* DDViewer/SIeve ソフトウェア	
	* システムサポート	
アップデート/一般(教育)		
	Release 2020 から	¥380,000.- (¥285,000.-)
	Release 2019 から	¥690,000.- (¥520,000.-)
	Release 2018 から	¥980,000.- (¥740,000.-)
	Release 2017 から	¥1,250,000.- (¥980,000.-)
必要なシステム構成: Windows 7/8/8.1/10 以上/DVDドライブまたは USB ポート		

PDF-4 Full File コレクション(Inorganics & Organics)

PDF4 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+ + X-Search + Full File 2021 RDB システム(1年間ライセンス)		
新規購入一式: ¥1,350,000.- (一般) ¥1,150,000.- (教育)		
商品構成	* Full File 2021 RDB (PDF-4) (DDViewer+ソフトウェア内臓)	
	* X-Search ソフトウェア(DVD)	
	* X-Viewer データ処理ソフトウェア(DVD)	
	* システムサポート	
SIeve+(オプションソフトウェア) (新規/更新)		¥130,000.- / ¥60,000 (一般) ¥90,000.- / ¥35,000 (教育)
アップデート/一般(教育)		
	SIeve+の更新を伴う場合、上記の更新価格を加算して下さい。	
	Full File 2020 から	¥380,000.- (¥285,000.-)
	Full File 2019 から	¥690,000.- (¥520,000.-)
	Full File 2018 から	¥980,000.- (¥740,000.-)
	Full File 2017 から	¥1,250,000.- (¥980,000.-)
3年分(FI 2020/2021/2022)までを自動的にアップデート		¥1,050,000.- (¥770,000.-)
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、PDF4 から PDF2 への逆移行はできません。		
必要なシステム構成: Windows 7/8/8.1/10、4GB 以上の空きスペースを持つハードディスク(1ドライブで)/DVD 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

【販売代理店】株式会社テクノサイエンス

〒264-0034 千葉市若葉区原町929-8

TEL: 043-206-0155 FAX: 043-206-0188

URL: <https://www.techno-lab.co.jp>

PDF-2/4 商品の形態についての注記：

* DVD または USB での納品です。ご注文の際には納品媒体を指定して下さい。

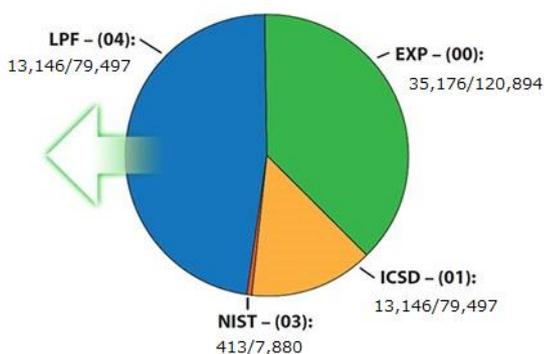
* ご指定が無ければ、デフォルトとして DVD での納品として扱います。

* (2020 年 9 月発売のデータベースは 2021 になります。)

Axiom (New for 2019)

無機物質(Inorganics)を中心に、Ambient Temperature/Pressure(常温/常圧)の PDF-4 データベース商品で、3 年間限定(タイムロック)のものです。X 線回折装置メーカーの APD(Automated Powder Diffraction) 向けの商品として企画されたものです。他の PDF-4 とは違い、DDViewer+が付いていません。このデータベースには更新(アップデート)はなく、引き続き使用するには 3 年後に再度新規に購入しなければなりません。(新規購入の価格を 3 年間でならせば、これまでのデータブックの価格とほぼ変わりません。弊社で PDF2plusX ソフトウェアを搭載して、データブックのような利用法の 1 つの手段を提供します。

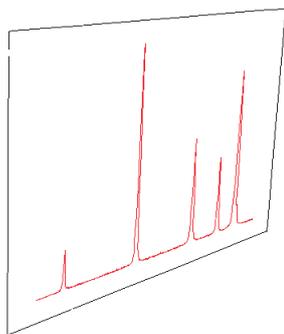
* 現在の PDF2/4plusX ソフトウェアは結晶データを表示する機能を持っていません。(今後の対応)



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 の特徴

1. XRD パターンマッチングができること
2. ICDD の DDViewer ソフトウェアではサポートしていないが、従来の見慣れた PDF Card 形式の印刷出力が可能
3. SIeve で計算される GOM(Good of Matching)値も作成
4. 物質材料研究機構(NIMS)の AtomWorks (Pauling File の NIMS バージョン)にリンク
5. 複数の任意の d 値での任意の強度(とその誤差範囲)による絞り込み (Any Line 機能)、類似度によるランキング



インターネットアクセス(Web)

Web PDF4 データベース検索システム	
DDViewer+ Full File 2021 RDB システム	
新規購入一式: ¥1,350,000.- (一般) ¥1,150,000.- (教育)	
商品構成	<ul style="list-style-type: none"> * Full File 2021 RDB in ICDD Via Web (No physical) (DDViewer+ダウンロード) * USB ポート用プロテクトキー * システムサポート
アップデート	PDF-4 Full File と同じ ¥380,000.- (¥285,000.-)

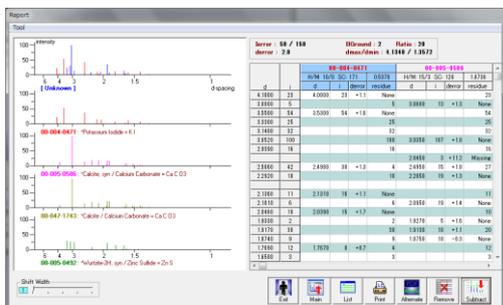
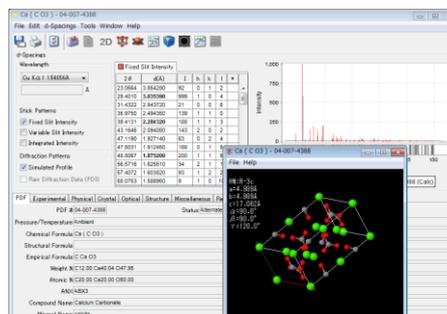
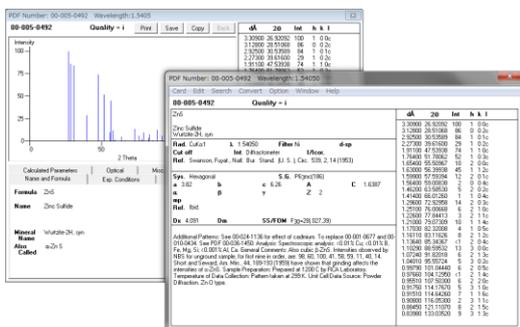
*DVD 供給のローカルバージョンと Web アクセスバージョンの違いはデータベースがローカルに設置されているか、ICDD のサーバーに位置するかだけの違いであり、スクリーン上のイメージは全く同じです。正規のライセンスユーザーであることを示すプラグ(dongleとも言う、Page 6 にイメージ有り)を USB ポートに差し込むと認証されます。

Web バージョンの利点

- ☆ Dongle(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。**Web バージョンの欠点**
- ☆ Dongle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るが、Win 8.1 マシンで 1 分半ほど要します。)

スタンドアロン(3 年間固定の PDF-4)

Axiom PDF4 データベース検索システム	
Axiom 2021 RDB + PDF4plus for X システム	
新規購入一式: ¥930,000.- (一般) ¥780,000.- (教育)	
商品構成	<ul style="list-style-type: none"> * Axiom 2021 RDB * PDF4plusX ソフトウェア * DVD または USB スティック * システムサポート
アップデート	なし



(DDViewer+で PDF4 の Pauling File コレクションからのカード表示と結晶構造)

(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)

その他の PDF-4 商品

PDF-4 Organics 有機物／有機金属コレクション

PDF4 Organics データベース検索システム		
Organics 2021 RDB システム (1年間ライセンス)	新規購入一式:	¥1,350,000.- (一般) ¥1,150,000.- (教育)
商品構成	* Organics 2021 RDB DVD(PDF-4) (DDViewer+ソフトウェア内臓) * システムサポート	
Organics 2020 からの更新	¥600,000.- (一般) ¥350,000.- (教育)	
必要なシステム構成: Windows 7/8/8.1/10, 4GB 以上の空きスペースを持つハードディスク(1ドライブで) / DVD または USB ポート		

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 2021 RDB システム(1年間ライセンス)	新規購入一式:	¥350,000.- (一般) ¥250,000.- (教育)
商品構成	* Minerals 2021(PDF-4) (DDViewer+ソフトウェア内臓) * システムサポート	
Minerals 2020 からの更新	¥210,000.- (一般) ¥190,000.- (教育)	
必要なシステム構成: Windows 7/8/8.1/10 以上 / DVD または USB ポート		

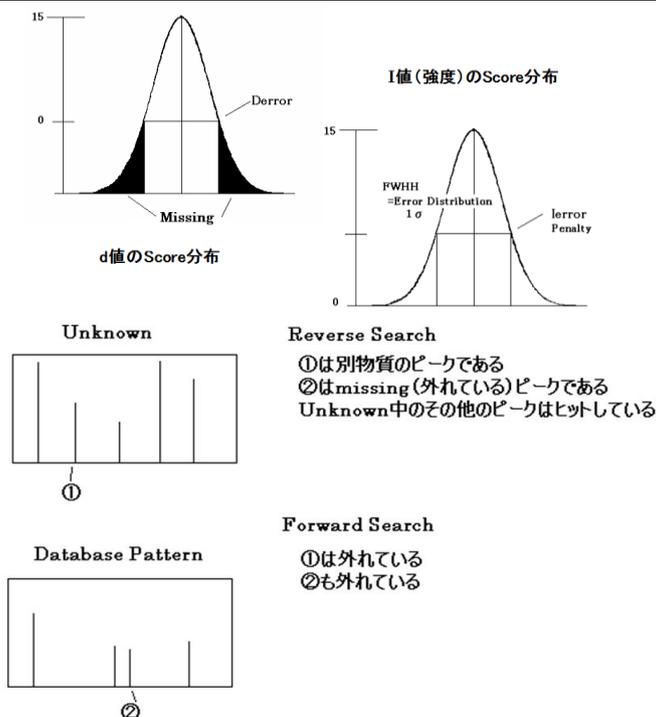
サーチマッチソフトウェア(X-Search)

PDF2、PDF-4、PDF-4 Organics、PDF-2(Back file)データベース検索プログラム		
X-Search 検索ソフトウェア		
PDF2plusX for Windows(Professional)に付いて X-Search ソフトウェアは PDF-2 のバックファイル、PDF-4 のフルファイル、Minerals または Organics にも対応できます。ご注文の際には PDF データベースのライセンス状況をお知らせいただきます。		
	新規購入一式:	¥300,000.- (一般) ¥300,000.- (教育)
商品構成	* X-Search(DVD) * システムサポート	
必要なシステム構成: Windows 7/8/8.1/10 以上		

PDF Statistics (2021)

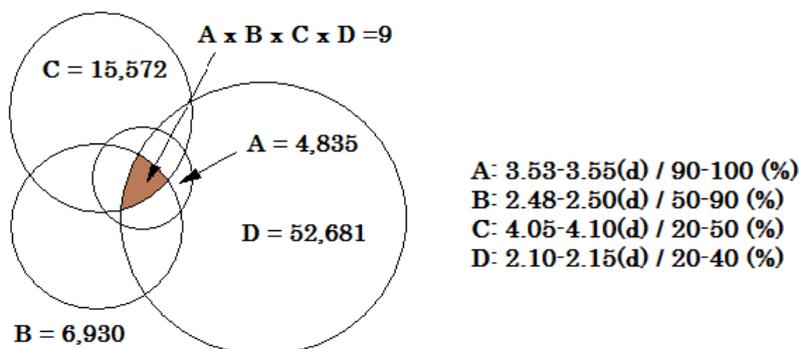
Data Entry Source	PDF-2 Full	PDF-4 Full	PDF-4 Axiom	PDF-4 Minerals	PDF-4 Organics
00-ICDD Experimental	120,894	120,894	35,176	12,584	42,284
01-FIZ	184,990	79,497	13,146	14,090	13,824
02-CCDC	0	0	0	0	436,837
03-NIST	10,067	2,880	413	225	283
04-MPDS	0	239,993	49,054	21,972	0
05-ICDD Crystal Data	869	869	0	75	54,067
Total No. of Data Sets	316,820	444,133	97,789	48,946	547,295
New Entries	5,259	17,944	5,184	1,777	8,791
Rietvelt-No. with atomic coordinates	0	336,582	69,715	40,373	125,998
Reference Intensity Ratio (RIR)- I/I ₀	216,127	343,409	70,318	37,578	513,642
Experimental Digital Patterns (PD3)	0	15,769	6,791	160	8,473
Inorganics	295,333	422,539	88,872	48,895	64,044
Organics	45,548	47,129	11,583	733	536,317

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き、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、質量分析)に強力な手段です。1%以上のすべての線が検索の対象になります。



Any Peaks

Narrow down

d: from to Intensity: from to Add

d	Intensity	Hits	Candidates			
3.53000	3.55000	90	100	4835	4835	AND
2.48000	2.50000	50	90	6930	160	AND
4.05000	4.10000	20	50	15572	18	AND
2.10000	2.15000	20	40	52681	9	

Delete All
Delete Row
Current
Final
Compare Unknown (1000 > Candidates)

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 K O18 · 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 2.56	A	*	
8	010881572	Lead Phosphate	Pb2 P2 O7	4.55 3.36 3.20	M	O	D
9	010897757	Zirconium Cobalt Aluminum Hydride	Zr6 Co Al2 H10	2.67 2.65 2.50	H	*	

Close

PDF-2、PDF-4 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。PDF-4 商品として、Full File、Organics、Minerals、Axiom の 4 種類が発売されています。

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、Axiom には更新がなく、追加ライセンスも 2 つ(合計 3 つ)までです。

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。

ICDD 商品全体に関する注記:

- + PDF-2/PDF-4 のインストーラおよび DDViewer/SIViewer は 2020 年の商品(昨年発売の商品)まで、事実上 Windows Vista/XP で動作しておりましたが、2021 年の商品(今年 9 月発売)から、これらの OS では動作しません。Windows 7/8/10 が動作可能な環境になります。
- + Release 2021 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テンポラリーライセンスが無くなりました。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 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。ただし遠隔地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 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。
- + 上記の価格はいずれも消費税を含んでいません。

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 RDB Database: International Centre for Diffraction Data

