

# ICDD (JCPDS)関連

## X線回折データベース/ソフトウェア

Release 2022、Full File 2022、Organics 2022、Axiom 2022

(一般価格/教育価格—2021年9月から2022年7月末まで有効/消費税込み)

**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: ¥1,760,000.- (一般) ¥1,485,000.- (教育)		
商品構成	* Release 2022 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 2021 から	¥429,000.- (¥324,500.-)
	Release 2020 から	¥781,000.- (¥594,000.-)
	Release 2019 から	¥1,100,000.- (¥836,000.-)
	Release 2018 から	¥1,430,000.- (¥1,100,000.-)
必要なシステム構成: Windows 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 2022 RDB システム(1年間ライセンス)		
新規購入一式: ¥1,760,000.- (一般) ¥1,485,000.- (教育)		
商品構成	* Full File 2022 RDB (PDF-4) (DDViewer+ソフトウェア標準装備)	
	* 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 2021 から	¥429,000.- (¥324,500.-)
	Full File 2020 から	¥781,000.- (¥594,000.-)
	Full File 2019 から	¥1,100,000.- (¥836,000.-)
	Full File 2018 から	¥1,430,000.- (¥1,100,000.-)
3年分(FI 2020/2021/2022)までを自動的にアップデート		¥1,155,000.- (¥847,000.-)
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 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 千葉県若葉区原町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。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。

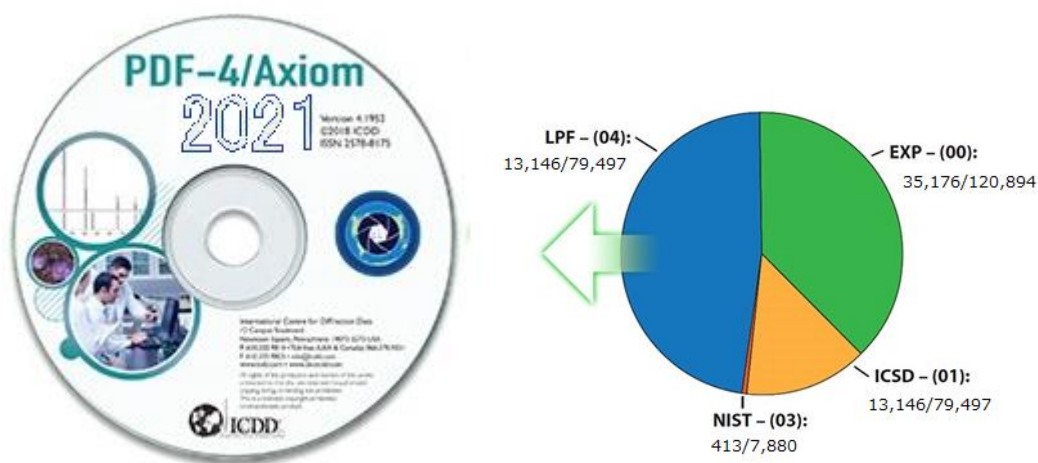
\*USB メモリーは不安定な媒体であり、読めなくなることがしばしばあります。そのため媒体のご指定が無ければ、DVD での納品として扱います。

\* (2021 年 9 月発売のデータベースは 2022 になります。)

### Axiom (New for 2022)

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かわりません。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。

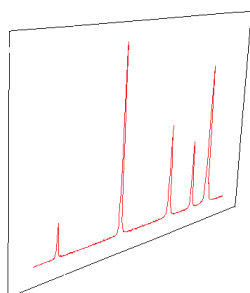
\*現在の PDF2/4plusX ソフトウェアは結晶データを表示する機能を持っていません。(今後の対応)



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  $2\theta$  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、従来に見慣れた 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. 複数個の任意の 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 2022 RDB システム	
新規購入一式: ¥1,760,000.- (一般) ¥1,485,000.- (教育)	
商品構成	<ul style="list-style-type: none"> <li>* Full File 2022 RDB in ICDD Via Web (No physical) (DDViewer+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 ¥429,000.- (¥324,500.-)

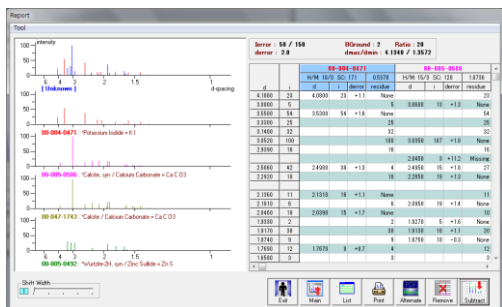
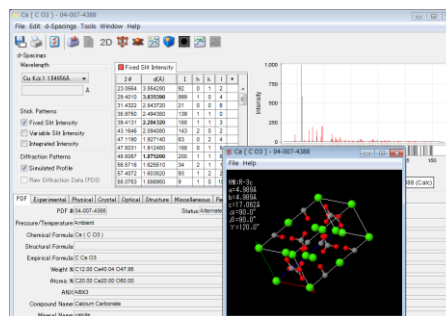
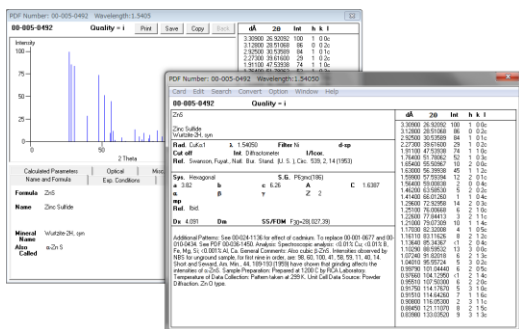
\*DVD 供給のローカルバージョンと Web アクセスバージョンの違いはデータベースがローカルに設置されているか、ICDD のサーバーに位置するかだけの違いであり、スクリーン上のイメージは全く同じです。正規のライセンスユーザーであることを示すプラグ( dongleとも言う、Page 6 にイメージ有り)を USB ポートに差し込むと認証されます。

### 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 年間限定の PDF-4)

Axiom PDF4 データベース検索システム	
Axiom 2022 RDB + PDF4plus for X システム	
新規購入一式: ¥1,023,000.- (一般) ¥858,000.- (教育)	
商品構成	<ul style="list-style-type: none"> <li>* Axiom 2022 RDB</li> <li>* PDF4plusX ソフトウェア</li> <li>* DVD または USB スティック</li> <li>* システムサポート</li> </ul>
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 2022 RDB システム (1 年間ライセンス)	新規購入一式:	¥1,760,000.- (一般) ¥1,485,000.- (教育)
商品構成	* Organics 2022 RDB DVD(PDF-4) (DDViewer+ソフトウェア内臓) * システムサポート	
Organics 2021 からの更新	¥429,000.- (一般) ¥324,500.- (教育)	
必要なシステム構成: Windows 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 2022 RDB システム(1 年間ライセンス)	新規購入一式:	¥385,000.- (一般) ¥275,000.- (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	¥231,000.- (一般) ¥209,000.- (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		

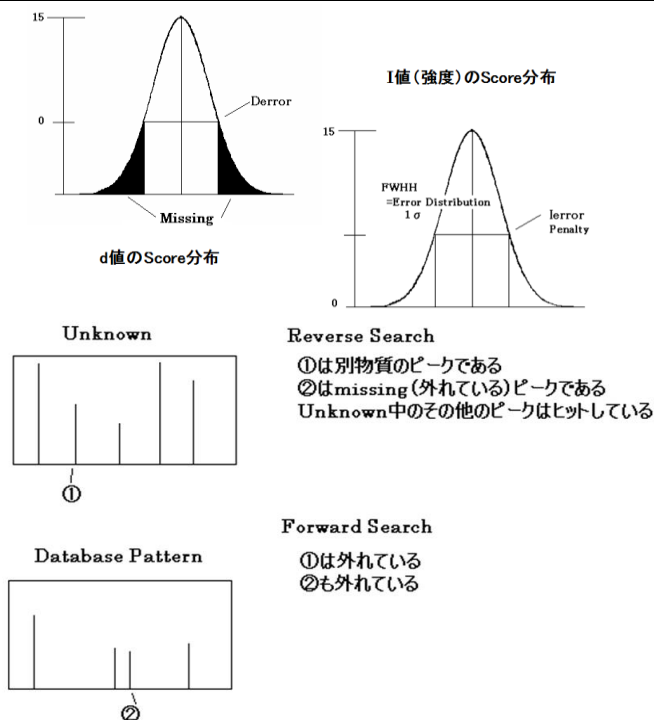
### サーチマッチソフトウェア(X-Search)

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:	¥330,000.- (一般) ¥330,000.- (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 (2022)

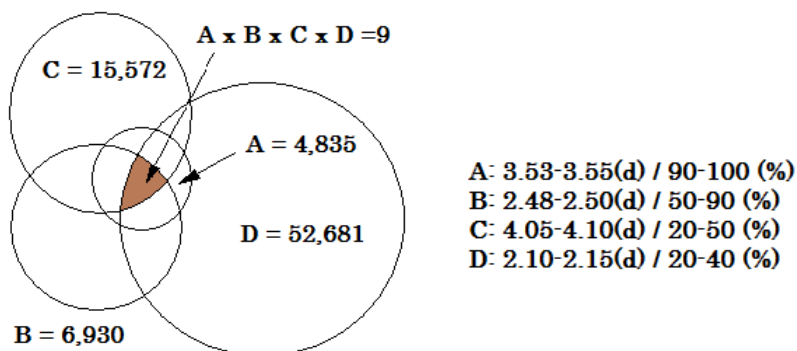
Data Entry Source	PDF-2 Full	PDF-4 Full	PDF-4 Axiom	PDF-4 Minerals	PDF-4 Organics
00-ICDD Experimental	122,611	122,611	36,257	12,805	43,162
01-FIZ	194,077	84,354	13,448	13,987	17,378
02-CCDC	0	0	0	0	444,125
03-NIST	10,067	2,862	412	229	283
04-MPDS	0	250,258	51,856	22,819	0
05-ICDD Crystal Data	869	869	0	75	55,247
<b>Total No. of Data Sets</b>	<b>327,624</b>	<b>460,954</b>	<b>101,973</b>	<b>49,915</b>	<b>560,195</b>
New Entries	10,804	16,187	4,184	969	12,900
Rietveld-No. with atomic coordinates	0	353,330	71,560	41,376	156,107
Reference Intensity Ratio (RIR)- I/I <sub>0</sub>	224,922	358,223	73,144	38,387	525,705
Experimental Digital Patterns (PD3)	0	17,053	7,535	169	9,167
Inorganics	305,502	438,726	92,727	49,861	324,259
Organics	49,726	51,414	11,978	732	548,959

## 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	Delete All
2.48000	2.50000	50	90	6930	160	AND	Delete Row
4.05000	4.10000	20	50	15572	18	AND	Current
2.10000	2.15000	20	40	52681	9		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:

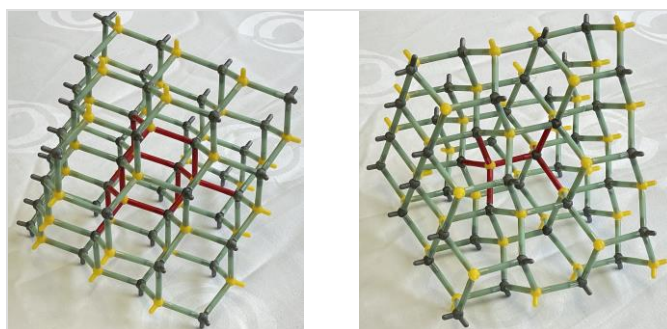
- + PDF-2/PDF-4 のインストーラおよび DDViewer/SIViewer は 2020 年の商品(昨年発売の商品)まで、事実上 Windows Vista/Xp で動作しておりましたが、2021 年の商品(今年 9 月発売)から、これらの OS では動作しません。Windows 7/8/10 が動作可能な環境になります。
- + Release 2021 には従来通りの追加を含めた Set 1~67 に加え、ICSD の結晶データベースから計算で作成された回折パターンと NIST から提供された回折パターンが Set 70~89 に入れられています。
- + 2019 のデータベースから、従来インストール時に与えられていた 30 日間の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込みの価格です。

## 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



(閃亜鉛鉱とウルツの単位格子とその周囲)